UNIVERSITÉ DE RENNES 1

Habilitation à Diriger des Recherches

Mémoire présenté par

Édouard CANOT

Transferts de chaleur et de masse en milieu granulaire : expériences, modèles et simulations

soutenue le 29 mai 2019 devant le jury composé de :

M.	Rachid BENNACER	PR, ENS et Université Paris-Saclay	Rapporteur
Mme	Rachida BOUHLILA	PR, Université de Tunis	Examinateur
M.	Renaud DELANNAY	PR, Université de Rennes 1	Examinateur
M.	Michel LOUGE	PR, Université de Cornell	Rapporteur
M.	Fabrice MAHÉ	MC, Université de Rennes 1	Invité
M.	Yves MÉHEUST	MC, Université de Rennes 1	Examinateur
Mme	Carole ROSIER	PR, Université du Littoral	Rapporteur

À Jean-Luc Achard, mon directeur de thèse, qui m’a tant appris.

Νομίζω τὸν βίον, εἰ πάντες οἱ ἄνθρωποι μάθοιεν τὰ τὴς φύσεως μαθήματα, καλλίω ἂν γενέσθαι.

Mme Carole Rosier, MM. Michel Louge et Rachid Bennacer ont accepté avec gentillesse, d’une part d’expertiser ce travail en tant que rapporteurs, d’autre part de se déplacer jusqu’à Rennes. Par leurs nombreuses questions, commentaires et conseils lors de la soutenance, ils ont montré leur intérêt certain pour mon travail ; qu’ils en soient vivement remerciés.

Sommaire général

Curriculum Vitae.....7

Liste de Publications.....11

Liste des thèses encadrées.....25

Document de Synthèse et Annexes.....27

Table des matières détaillée.....29

CANOT Édouard, Curriculum Vitae

Chargé de Recherche, CNRS
né en 1960 à Poitiers (86)

Adresse professionnelle : Institut de Physique de Rennes,
Campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex
E-mail : Edouard.Canot@univ-rennes1.fr

Site web : http://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot

Cursus Universitaire

Oct 1989 : admission au CNRS
1985-1989 : **Thèse de doctorat, spécialité Mécanique (INP-Grenoble)**
1983 : DEA de Mécanique – INP-Grenoble
1980-1983 : École Nationale Supérieure d'Hydraulique de Grenoble, filière « Mécanique des Fluides Industriels »
1978-1980 : DEUG « Math et Physique », Université de Poitiers

Expériences professionnelles

depuis juin 2016 : IPR – Institut de Physique de Rennes (UMR 6251 – CNRS, Univ. Rennes)
Département MILIEUX DIVISÉS : https://ipr.univ-rennes1.fr/d5?mtop=dpt5

sept. 2000 – juin 2016 : IRISA – Institut de Recherche en Informatique et Systèmes Aléatoires (UMR 6074 – CNRS, INRIA, Univ. Rennes, INSA), Équipe SAGE : http://www.irisa.fr/sage

oct. 1989 – sept. 2000 : LEGI – Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels (UMR 5519 – CNRS, INPG, Univ. Grenoble), Équipe DIPHASIQUE : http://www.legi.grenoble-inp.fr/web/spip.php?rubrique102&lang=fr

Thèmes de Recherche actuels

- Modélisation des transferts et de la capillarité dans les milieux granulaires (à l'échelle du pore)
- Transfert de chaleur et de masse avec changement de phase dans les milieux poreux
- Problèmes inverses (transferts thermiques)
- Méthodes numériques pour les phénomènes couplés : approche globale par solveur DAE

Compétences

- Développement logiciel (Fortran, Matlab)
- Contrôle des erreurs d'arrondis liées à l'arithmétique flottante IEEE-754 (méthode CESTAC)
- Calcul symbolique (MAPLE) : programmation d'algorithme ; utilisation du calcul formel dans le calcul numérique exacte de matrices jacobiennes
- Calcul haute-performance : Parallélisme (MPI et Fortran Co-Array)
- Algèbre linéaire creuse
- Simulation numérique du suivi des interfaces fluides (BEM Boundary Element Method)
- Modélisation physique en mécanique / mécanique des fluides / transferts thermiques
- Couplage de modèles, de codes

Participation à des contrats (les plus récents)

- 1999 (18 mois), Air Liquide / Labeille : *Dissolution des bulles de gaz dans les liquides*
- 2002 (3 ans), IFREMER/CPER : *Développement de nouveaux moyens d'exploration géophysique*
- 2004 (12 mois), ECONET : *Drop-on-Demand :Simulations de la formation des gouttelettes d'encre*
- 2007 (36 mois), ANR-RNTL LIBRAERO : *Large Information Base for the Research in AEROdynamics*
- 2008 (48 mois), ANR-CIS MICAS : *Modelling and Intensive Computation for Aquifer Simulations*
- 2012 (48 mois), ANR-H2MNO4 : *Original Optimized Object Oriented Numerical Model for Heterogeneous Hydrogeology*

Participation à des collaborations avec l'étranger

- 2006-2008 : Programme INRIA, EuroMéditerrannée 3+3, HYDROMED (simulations numériques en hydrogéologie)
- 2012-2014 : Programme INRIA, EuroMéditerrannée 3+3, HYDRINV (problèmes inverses en hydrogéologie)
- 2012-2014 : ECOSud Argentine, COFECUB, Université de Buenos Aires, Processus de formation et transformation de structures de combustion archéologique
- 2014-2016 : ECOSud Chili, CONICYT, Université de Tarapaca, Processus de formation et transformation de structures de combustion archéologique : un regard interdisciplinaire

Participation à des jurys de thèse

- en tant que rapporteur (rapport co-signé par une autre personne HDR) : 3
- en tant qu'examinateur : 5

Encadrements d'étudiants et de chercheurs

- Magistère, Master 1, DESS, DEA (Master 2), Post-Doc : 33
- Thèses : 10 (9 soutenues, 1 devant être soutenue en 2019)

Enseignements

1989-1990 :	Mécanique (INP-Grenoble, Formation continue, 60 h)
1992-1999 :	Mécanique des Fluides (Univ. Grenoble, 2ème cycle, cours+TD, 24 h / an)
1995-2000 :	Calcul formel avec MAPLE (Univ. Grenoble, 2ème cycle, TD, 48 h /an)
1996-1998 :	Modélisation et Simulation en Mécanique (Univ. Grenoble, 16 h / an)
2001-2009 :	Algèbre linéaire avec MATLAB (Univ. Rennes, 2ème cycle, TP, 12 h / an)
2002 :	Contrôle des erreurs d'arrondis (Université de Fès, Maroc, Master 2, 16 h)
2002-2003 :	Mathématique et Calcul Formel (Lycée Châteaubriand, Rennes, Math Sup, 20 h)
2009 :	Calcul scientifique (Université d'Annaba, Algérie, Master 2, 12 h)
2011-2016 :	Calcul scientifique (INSA Rennes, 2ème cycle, TP, 12 h / an)
2014 :	Calcul parallèle et applications (ENIT Tunis, Tunisie, Master 2, 21 h)
2015-2017 :	Méthode Numérique pour l'Archéologie (Univ. Rennes, Master 2 PREFALC, cours/TD, 18 h / an)

Logiciels

[1987-2002] Code CANARD : Méthode des intégrales de frontières pour l'écoulement incompressible d'un fluide faiblement visqueux, en géométrie 2D ou 3D-axisymétrique.

[2003-…] Bibliothèque MUESLI : Calcul numérique et visualisation en Fortran 95
http://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/muesli

[2008-2015] f90cache : Cache pour les compilateurs de type Fortran 90
http://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/f90cache

[2014-…] Zohour : Node-Based Adaptive 2D mesh algorithm
http://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/zohour

Thèse

Canot É., "*Généralisation de la méthode intégrale aux frontières pour les systèmes fluide-fluide*".
Thèse de Doctorat de Mécanique. INP-Grenoble, 17 mars 1989.

Publications récentes les plus significatives

Ben Refifa M., Guellouz L., **Canot É.**, Laabidi E., Bouhlila R., 2019, "*Revisiting the salt dome problem: new insights with the salt dissolution and pollutant release induced processes*", Arabian Journal of Geosciences, vol. 12, p. 294, doi:10.1007/s12517-019-4471-4

Mansour S., **Canot É.**, Muhieddine M., 2016 : "*Identification of the Thermophysical Properties of the Soil by Inverse Problem*", ASME J. Heat Transfer, 138, 9, doi:10.1115/1.4032947.

Canot É., Delannay R., Mansour S., Muhieddine M., March R., 2016 : "*Effective thermal conductivity of a wet porous medium – Presence of hysteresis when modeling the spatial water distribution for the pendular regime*", ASME J. Heat Transfer, 138, 9, doi:10.1115/1.4032950.

Tankeo M., Richard P., **Canot É.**, 2013 : "*Analytical solution of the mu(I)-rheology for fully developed flows in simple configurations*", Granular Matter, vol. 15, n. 6, pp 881-891.

Muhieddine M., **Canot É.**, March R., 2012 : "*Heat transfer modeling in saturated porous media and identification of the thermophysical properties of the soil by inverse problem*". Int. J. for Applied Numer. Math, vol. 62, pp 1026-1040.

Muhieddine M., **Canot É.**, March R., Delannay R., 2011 : "*Coupling heat conduction and water-steam flow in a saturated porous medium*", Int. J. for Num. Methods in Engng, vol. 85, pp 1390-1414.

Muhieddine M., **Canot É.**, March R., 2009 : "*Various approaches for solving problems in heat conduction with phase change*", Int. J. on Finite Volumes, vol. 6, n. 1.

Zein S., **Canot É.**, Erhel J., Nassif N., 2008 : "*Determination and Sensitivity Analysis of the Seismic Velocity of a Shallow Layer from Refraction Traveltimes Measures*", Int. Journal of Multiphysics, vol. 2, n. 4, pp 437-456.

Publications dans des revues internationales : 20
Actes de congrès avec comité de lecture : 36

Liste complète des publications disponible à :
http://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/publis/canot_liste.pdf

List of publications

Édouard Canot

updated: June 5, 2019

1 International Journals

Canot É., Delannay R., March R., Santoro C., 2019,
"*Data processing using physical modeling applied to prehistorical fire replications on soils of the Atacama desert, Northern Chile*",
Archaeometry, (en cours de révision)
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02078646

Ben Refifa M., Guellouz L., Canot É., Laabidi E., Bouhlila R., 2019,
"*Revisiting the salt dome problem: new insights with the salt dissolution and pollutant release induced processes*",
Arabian Journal of Geosciences, vol. 12, p. 294, doi:10.1007/s12517-019-4471-4
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02084582

Mansour S., Canot É., Muhieddine M., 2016,
"*Identification of the Thermophysical Properties of the Soil by Inverse Problem*",
ASME Journal of Heat Transfer, vol. 138, n. 9, doi:10.1115/1.4032947
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01096787v1

Canot É., Delannay R., Mansour S., Muhieddine M., March R., 2016,
"*Effective thermal conductivity of a wet porous medium — Presence of hysteresis when modeling the spatial water distribution for the pendular regime*",
ASME Journal of Heat Transfer, vol. 138, n. 9, doi:10.1115/1.4032950
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245690v1

Tankeo M., Richard P., Canot É., 2013,
"*Analytical solution of the $\mu(I)$-rheology for fully developed flows in simple configurations*",
Granular Matter, vol. 15, Issue 6, Dec. 2013, pp 881-891.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00859926v1

Muhieddine M., Canot É., March R., 2012,
"*Heat transfer modeling in saturated porous media and identification of the thermophysical properties of the soil by inverse problem*",
Int. J. for Applied Numer. Math., vol. 62, pp 1026-1040.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00757211v1

Muhieddine M., Canot É., March R., Delannay R., 2011,
"*Coupling heat conduction and water-steam flow in a saturated porous medium*",
Int. J. for Num. Methods in Engng, vol. 85, pp 1390-1414.
https://hal.archives-ouvertes.fr/inria-00540366v1

Muhieddine M., Canot É., March R., 2009,
"*Various Approaches for Solving Problems in Heat Conduction with Phase Change*",
International Journal on Finite Volumes, vol. 6, n. 1.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01120384v1

Zein S., Canot É., Erhel J., Nassif N., 2008,
"*Determination and sensitivity analysis of the seismic velocity of a shallow layer from refraction traveltimes measures*",
International Journal of Multiphysics, vol. 2, n. 4, pp 437-456.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245787v1

Zein S., Canot É., Erhel J., Nassif N., 2008,
"*Determination of the Mechanical Properties of a Solid Elastic Medium from a Seismic Wave Propagation using two Statistical Estimators*",
Mathematics and Mechanics of Solid, vol. 13, n. 5, pp 388-407.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245797v1

Lubin P., Canot É., 2004,
"*Test-case No. 3: Propagation of pure capillary standing waves*",
Multiphase Science and Techn., special issue "*Numerical interface tracking test-cases*", vol. 16, pp 17-21.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245815v1

Canot É., Lubin P., 2004,
"*Test-case No. 4: Rayleigh-Taylor instability for isothermal, incompressible and non-viscous fluids*",
Multiphase Science and Techn., special issue "*Numerical interface tracking test-cases*", vol. 16, pp 23-29.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245828v1

Canot É., Georgescu S. C., Vincent S., 2004,
"*Test-case No. 21: Gas bubble bursting at a free surface, with jet formation*",
Multiphase Science and Techn., special issue "*Numerical interface tracking test-cases*", vol. 16, pp 121-127.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245835v1

Canot É., Cartellier A., Hervieu É., 2004,
"*Test-case No. 22: Axisymmetric body emerging through a free surface*",
Multiphase Science and Techn., special issue "*Numerical interface tracking test-cases*", vol. 16, pp 129-133.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00202261v1

The four previous publications can be found in the following book:
"*Validation of Advanced Computational Methods for Multiphase Flows*",
H. Lemonnier, D. Jamet, O. Lebaigue Eds, Begell House, New-York, 260 p., 2005

Canot É., Davoust L., El Hammoumi M., Lachkar D., 2003,
"*Numerical simulation of the buoyancy-driven bouncing of a 2-D bubble at an horizontal wall*",
Theor. Comp. Fluid Dyn., vol. 17, n.1, pp 51-72.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00203813v1

Georgescu S. C., Achard J.-L., Canot É., 2002,
"*Jet drops ejection in bursting gas bubble processes*",
Eur. J. Mech., B/Fluids vol. 21, pp 265-280.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00182311v1

Machane R., Achard J.-L., Canot É., 2000,
"*A new velocity-vorticity boundary integral formulation for Navier-Stokes equations.*",
Int. J. for Numerical Methods in Fluids, vol. 34, pp 47-63.
https://hal.inria.fr/hal-01245939

Machane R., Canot É., 1997,
"*High-order schemes in Boundary Element Methods for transient non-linear free-surface problems.*",
Int. J. for Numerical Methods in Fluids vol. 24, pp 1049-1072.
https://hal.inria.fr/hal-01245941

Achard J.-L., Machane R., Canot É., 1996,
"*Formulation entièrement intégrale des équations de Navier-Stokes.*",
C.R. Acad. Sci., t. 323, Série II b, pp 653-660.
https://hal.inria.fr/hal-01245944

Canot É., Achard J.-L., 1991,
"*An overview of boundary integral formulations for potential flows in fluid-fluid systems.*",
Archives of Mechanics, vol. 43, pp 453-498.
https://hal.inria.fr/hal-01245948

Achard J.-L., Canot É., 1988,
"*Formulation intégro-différentielle pour les écoulements transitoires d'un fluide isovolume et visqueux.*",
Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, vol. 7, n° 5, pp 654-682
https://hal.inria.fr/hal-01245949

2 Proceedings of International Conferences

Mansour S., Muhieddine M., Canot É., March R., 2014,
"*Identification of Thermophysical Properties of the Soil in 3D-axisymmetric Coordinate System Using Inverse Problem*",
Proc. of Seventh Int. Conf. on Thermal Engineering (ICTEA), Marrakesh, Morocco, May 6-8; Hasnaoui M. and Saghir M. Z. Eds, ISBN 1-926769-19-6 (CD-ROM edition)
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01095496v1

Canot É., Delannay R., Mansour S., Muhieddine M., March R., 2014,
"*Effective thermal conductivity of a wet porous medium — presence of hysteresis when modeling the spatial water distribution for the pendular regime*",
Proc. of Seventh Int. Conf. on Thermal Engineering (ICTEA), Marrakesh, Morocco, May 6-8; Hasnaoui M. and Saghir M. Z. Eds, ISBN 1-926769-19-6 (CD-ROM edition)
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01095522v1

Nuentsa Wakam D., Erhel J., Canot É., 2011,
"*Robustness in hybrid algebraic solvers for large linear systems*",
Proc. of 23rd Int. Conf. on Parallel Computational Fluid Dynamics (ParCFD 2011), 5 pages, online at: http://parcfd2011.bsc.es
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00647912v1

Nuentsa Wakam D., Erhel J., Canot É., 2010,
"*Parallélisme à deux niveaux dans GMRES avec un préconditionneur Schwarz multiplicatif*",
Proc. of CARI'2010, É. Badouel, A. Sbihi, I. Lopko (Editors), INRIA, 2010, pp 189-196
https://hal.archives-ouvertes.fr/inria-00541771v1

March R., Muhieddine M., Canot É., 2010,
"*Simulation 3D des structures de combustion préhistoriques*",
Actes du colloque Virtual Retrospect 2009, Archéovision 4, Bordeaux, R. Vergnieux et C. Delevoie, Ed. Ausonius, n°4, pp 19-29
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00197477v1

Muhieddine M., Canot É., March R., 2010,
"*Numerical modeling of coupled heat and water steam flow in spatially variable permeability of saturated porous media*",
Proc. of Fifth Int. Conf. on Thermal Engineering (ICTEA), Marrakesh, Morocco, May 10-14; Hasnaoui M. and Saghir M. Z. Eds, ISBN 1-894503-93-7, pp 7-11 (CD-ROM edition)
https://hal.archives-ouvertes.fr/inria-00540430v1

Nuentsa Wakam D., Erhel J., Canot É., Atenekeng Kahou G., 2010,
"*A comparative study of some distributed linear solvers on systems arising from fluid dynamics simulations*",
Proc. of Int. Conf. on Parallel Computing (ParCo'09), Lyon, France, Sept 1-4; published in: "Parallel Computing: from Multicores and GPU's to Petascale", B. Chapman et al. (Eds), IOS Press, 2010, pp 51-58
https://hal.archives-ouvertes.fr/inria-00540443v1

Muhieddine M., Canot É., March R., 2009,
"*Simulation of Heat Transfer with Phase Change in 3D Saturated Porous Media*",
Proc. of the MAMERN'09 Conference, Pau, France, June 8-11; Amaziane et al. Eds, Universidad de Granada, pp 701-706
http://lma.univ-pau.fr/meet/mamern09/en/index.php

Muhieddine M., Canot É., March R., 2008,
"*Numerical solution of a 1-D time-dependent phase change problem*",
Proc. of the WCCM8 and Fifth ECCOMAS, Venice, Italy, June 30-July 4, (CD-ROM, CIMNE, B. A. Schrefler and U. Perego Eds, document a1317.pdf)

Muhieddine M., Canot É., 2008,
"*Recursive mesh refinement for vertex centered FVM applied to a 1-D phase-change problem*",
Proc. of the FVCA5 Conference, Aussois, France, June 9-13, Wiley, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds, pp 601-608
https://www.latp.univ-mrs.fr/fvca5/

Zein S., Canot É., Erhel J., Nassif N., 2007,
"*A Seismic tomography using genetic algorithm*",
Proc. of the Sixth Int. Conf. Aplimat, Bratislava - Slovakia, 6-9 feb. 2007 (CD-ROM), Slovak University of Technology in Bratislava.

Georgescu S. C., Canot É., Achard J.-L., Soucemarianadin A., 2006,
"*Drops ejection from a capillary nozzle by Drop-On-Demand technology*",
Proc. Conference on Modelling Fluid Flow CMFF'06, Budapest, Sept. 6-9,
Lajos and Vad Eds, vol. II, pp 684-691
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00202261v1

Zein S., Canot É., Erhel J., Nassif N., 2006,
"*Recovery of the Velocity and the Shape of the Interface of a Geological Layer*",
Proc. of the Fifth Int. Conf. on Engng Comput. Technology, Las Palmas de Gran Canaria - Spain, 12-15 sept. 2006 Topping, Montero, Montenegro Eds.

Zein S., Nassif N., Erhel J., Canot É., 2006,
"*Recovery of the coefficients of the elastodynamics equation using two statistical estimators*",
Proc. of COMPSTAT 2006, 17th Symposium of IASC-ERS, Roma, Italia, August 28 - Sept 1 Rizzi and Vichi Eds, Physica Verlag, CD-ROM part, pp 1421-1429

Canot É., de Dieuleveult C., Erhel J., 2006,
"*A parallel software for a saltwater intrusion problem*",
"Parallel Computing: Current and Future Issues of High-End Computing",
Proc. of the Int. Conf. ParCo 2005, Joubert, Nagel, Peters, Plata, Tirado and Zapata Eds. vol. 33, NIC series, pp 399-406

Georgescu S. C., Canot É., Achard J.-L., 2006,
"*Oil in water injection from a submerged nozzle*",
Transactions on Mechanics, Scientific Bulletin of the Politechnica Unversity of Timisoara, vol. 51 (65), Special issue: Proc. of the 2nd Workshop on Vortex Dominated Flows. Achievements and Open Problems, Timisoara, Romania, June 30 - July 1, 2006, Bernad, Munteam and Susan-Resiga Eds, pp 67-74
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00182349v1

Georgescu S. C., Canot É., Broboana D., Soucemarianadin A., 2005,
"*Numerical simulation of Drop-On-Demand jetting applications in microfluidics.*",
In: book of abstracts, Euromech Colloquium 472 "Microfluidics and Transfer",
Session 7 "Isothermal two-phase flows. Interface phenomena", Grenoble, Sept. 6-8

Georgescu S. C., Canot É., Achard J.-L., 2005,
"*Local vortex formation in bursting air bubble collapsing process*",
Transactions on Mechanics, Scientific Bulletin of the Politechnica Unversity of Timisoara, vol. 50 (64), Special issue: Proc. of the Workshop on Vortex Dominated Flows. Achievements and Open Problems, Timisoara, Romania, June 10-11, 2005, Bernad, Munteam and Susan-Resiga Eds, pp 177-184
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00182341v1

Benselama A. M., Pham P., Glière A., Canot É., 2004,
"*Modeling of the dielectrophoretic behavior of biological cells: A numerical comparison between Finite Element/Boundary Element Maxwell stress tensor methods and point-dipole approach*",
7th International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, 7-11 March, Boston MA, USA.
Nanotech 2004, Technical Proceedings of the 2004 NSTI Conference, vol 1, pp 188-191
http://www.nsti.org/publications/Nanotech/2004/pdf/B1-49.pdf

Vadillo D., Canot É., Lopez B., Soucemarianadin A., 2003,
"*Collisions of single and multiple drops onto solid walls*",
9th ICLASS'2003 Conference, Sorrento, Italy, 13-18 July.
http://ilasseurope.org/events/9th-iclass-conference/

Canot É., Georgescu S. C., Achard J.-L., 2001,
"*Bursting air bubble at a free surface: Regridding influence on the interface evolution*",
in: Proc. of the Workshop on "Numerical Simulations for Fluid Mechanics and Magnetic Liquids", 23-24 May 2001,
Eds. Anton I., Ancusa V., Resiga R., pp.121-132, Editura Orizonturi Universitare, Timisoara, Romania.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00197477v1

El Hammoumi M., Canot É., Davoust L., 2001,
"*Rebond d'une bulle sur un plan rigide horizontal*",
5e Congrès de Mécanique, Meknès, Maroc, 17-20 avril, pp 41-42.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00203855v1

Canot É., 1999,
"*Stability criteria for capillary/gravity free-surface waves in BEM simulations of viscous potential flows*",
First Int. Conf. on Boundary Element Techniques, London, 6-8 July; published in: *Advances in Boundary Element Techniques I*, edited by M. H. Aliabadi, Queen Mary and Westfield College, Univ. of London 1999 (ISBN 0 904 188 531) pp 321-330.
https://hal.inria.fr/hal-01245955

Machane R., Achard J.-L., Canot É., 1999,
"*A new integral formulation of Navier-Stokes equations*",
Proc. of the Int. Conf. on Boundary Element Techniques, Queen Mary & Westfield College, London, 6-8 July, (M. H. Aliabadi, Ed.) pp 395-404.

Georgescu S. C., Achard J.-L., Canot É., 1998,
"*Bubble cavity collapse and liquid jet formation simulation in bursting gas bubble process*",
Euromech 376 Waves in two-phase flows, 27-30 April, Istanbul, Turquie, pp 25-27.

Machane R., Canot É., Achard J.-L., 1997,
"*Solving the full Navier-Stokes equations by a new Boundary Integral Method.*",
4th US National Congress on Computational Mechanics, IV, Aug. 1997, San Francisco, USA.

Machane R., Canot É., Achard J.-L., 1997,
"*Résolution des équations de Navier-Stokes par une méthode intégrale*",
Actes du 13e Congrès Français de Mécanique, 1-5 Sept., Poitiers, France, vol. 3, pp 71-74.

Canot É., Georgescu S. C., 1997,
"*Bilan d'énergie mécanique pour le suivi d'interface: Modèle potentiel avec prise en compte des contraintes visqueuses normales*",
Actes du 13e Congrès Français de Mécanique, 1-5 Sept., Poitiers, France, vol. 3, pp 23-26.

Machane R., Canot É., 1995,
"*Résultante des forces exercées sur une particule s'approchant perpendiculairement à une surface libre en écoulement potentiel*",
Proc. 2e Rencontre Maghrébine sur la Mécanique, 4-6 Déc., Constantine, Algérie, pp 239-244.

Machane R., Canot É., 1995,
"*Émergence de corps à la surface libre d'un fluide non-visqueux*",
Actes du 12e Congrès Français de Mécanique, 4-8 Sept., Strasbourg, France, vol. 2, pp 165-169.

Dominguez-Cortazar M., Canot É., 1995,
"*Axial collapse of a cavitating vortex: numerical simulation by an integral method*",
Proc. of the Int. Symp. on Cavitation CAV'95, May 2-5, Deauville, France, pp 459-464.

Achard J.-L. , Canot É., 1992,
"*Bubble evolution in liquid-gas solutions, viewed as an elementary catastrophe.*",
Int. Symp. "Instabilities in Multiphase Flows", May 11-14th, 1992, Rouen, France,
published in: "Instabilities in Multiphase Flows", Eds Gouesbet G. and Berlemont A., Plenum Press, pp 37-51.

Franc J.-P. , Canot É., 1990,
"*Analysis of erosion by cavitating vortices: experimental study and numerical simulation of the CAVERMOD.*",
Colloque Euromech 265: "Transient effects in Cavitation and high speed liquid impact" Cambridge (U.K.), 3-5 Sept. 1990.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01134525v1

Canot É. , Achard J.-L., 1988,
"*A boundary integral method to describe non-linear dynamics of fluid-fluid systems. Application to axisymmetric Rayleigh-Taylor instability.*",
Colloque Euromech 234, Toulouse, Mai 1988.

Canot É. , Achard J.-L., 1985,
"*Régimes de bullage à partir d'un orifice immergé, sous des conditions de pression de gaz constante.*",
7e Congrès Français de Mécanique. Bordeaux, Sept. 1985.

Canot É. , Achard J.-L., 1983,
"*Gas bubble formation at a submerged orifice under constant pressure conditions.*",
Colloque Euromech 176, Villard de Lans (Grenoble), Sept. 1983

3 International Conferences (invitation or contribution)

March R., Canot É., Delannay R., 2017,
"*Determination of the fire duration of a prehistorical hearth from the knowledge of a thermo-alterated layer: methods and issues.*",
21e Colloque du GMPCA (Groupe des Méthodes Pluridisciplinaires Contribuant à l'Archéologie), Rennes, France, 18-21 avril,
https://gmpca2017.sciencesconf.org/

Ben Refifa M., Canot É., Guellouz L., Bouhlila R., 2016,
"*Modélisation des processus couplés : écoulement, transport multi-espèces et géochimie dans les milieux poreux. Application à la dissolution d'un dôme de sel*",
13e Colloque Africain sur la Recherche en Informatique et Mathématiques Appliquées (CARI'16), Tunis, Tunisie, 11-14 oct,
http://cari2016.enit-lr.tn/

Canot É., Delannay R., Mansour S., 2015,
"*Reorganization of liquid menisci between solid grains during evaporation/condensation of water in a wet porous medium*",
InterPore 7th Conference on Porous Media, Padua, Italy, May 18-21. Contributed talk.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245726v1

Mansour S., Canot É., Muhieddine M., March R., Cordero J. A., 2015,
"*Estimation of the Thermophysical Properties of the Soil by Inverse Problem, using Experimental Data during Liquid/Vapour Phase Change*",
InterPore 7th Conference on Porous Media, Padua, Italy, May 18-21. Contributed talk.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245719v1

Canot É., Delannay R., Muhieddine M., March R., 2013,
"*Strong non-linear behavior of the effective thermal conductivity of a wet porous medium*",
NASCA 13 Conference, Calais, France, June 24-26. Contributed talk.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00907559v1

Sabit S., Erhel J., Canot É., 2012,
"*Méthodes numériques de transport réactif : l'approche globale DAE*",
3e Conférence Internationale de la Société Marocaine de Mathématiques Appliquées (SM2A), Marrakesh, Maroc, September 2012. Invited contribution.

Djouwe Tankeo M., Richard P., Canot É., 2011,
"*Simulation of granular flow in channel*",
ICMM2, 2nd Int. Conf. on Material Modelling, Paris, France, Aug 31–Sep 2. Contributed talk.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00647914v1

Nuentsa-Wakam D., Canot É., Erhel J., 2011,
"*Deflated GMRES with Multiplicative Schwarz Preconditioner: A Challenge of Robustness and Parallelism*",
DD20: Twentieth Int. Conf. on Domain Decomposition Methods, La Jolla, California USA, February 7-11. Contributed talk.

Muhieddine M., Canot É., March R., 2009,
"*Recovering thermophysical parameters of a heated saturated porous medium*",
NASCA 09 Conference, Agadir, Marocco, May 18-22. Contributed talk.

Canot É., Muhieddine M., 2009,
"*Recovering thermophysical properties of the soil*",
Numerical methods and North-South Cooperation - NumCoop'09 Colloquium, Yaoundé, Cameroon, March 2-4. Invited contribution.

Nuentsa-Wakam D., Canot É., Erhel J., 2009,
"*Comparison of some linear solvers on systems arising from fluid dynamics*",
Numerical methods and North-South Cooperation - NumCoop'09 Colloquium, Yaoundé, Cameroon, March 2-4. Invited contribution.

Canot É., 2006,
"*GEOLOG: a SALOME-based platform for hydrogeological simulations*",
Workshop 3+3 Méditerranée "Numerical computing for groundwater flows", LERMA, Rabat, Maroc, Sept 20-22. Invited contribution.

Zein S., Erhel J., Nassif N., Canot É., 2005,
"*Recovery of the coefficients of the elastodynamics equation using two Statistical Estimators*",
Workshop on Inverse Problems (WIP 2005), Marseille, France, Déc. 2005. Contributed talk.

Canot É., Erhel J., Nassif N., Zein S., 2005,
"*Estimation of the mechanical properties of a solid elastic medium in contact with a fluid medium*",
CSDA Conference, ERCIM working group "Matrix Computations and Statistics", oct. 27 - nov. 1, 2005, Limassol, Cyprus. Contributed talk.

de Dieuleveult C., Canot É., Erhel J. 2005,
"*High performance computing applied to a saltwater intrusion numerical model*",
SIAM Computational Geosciences'05, June 7-10, 2005, Avignon, France. Contributed talk.

Guyomarc'h F., Canot É., 2004,
"*SCILIN: a SCILAB toolbox for large matrices*",
SCILAB-2004 International Conference, Dec., Rocquencourt, France. Contributed talk.

Erhel J., Canot É., 2003,
"*The Inverse Electrocardiography problem viewed as a General Linear Model*",
July 2003, ICIAM, Sydney, Australie. Contributed talk.

Canot É., Erhel J., 2002,
"*Some inverse problems in electrocardiography*",
Fév. 2002: 2nd Workshop, ERCIM working group on "Matrix Computations and Statistics", INRIA-Rennes. Invited contribution.

Georgescu S. C., Achard J.-L., Canot É., 1997,
"*Large bubble entrapped beneath a free liquid surface*",
Proc. 6th Symp. "Technologies, installations and Equipments for the Environment Quality Improvement", 11-14 nov., University Politehnica of Bucharest, Romania, vol. 1, pp 268-275. Contributed talk.

4 National Conferences

Canot É., 2012,
"*DAE solver and symbolic computation*",
RAIM (5e Rencontres Arithmétique de l'Informatique Mathématique), 20-22 June 2012, Dijon, France.

Canot É., Erhel J., 2003,
"*Simulation de problèmes couplés d'hydro-géologie : utilisation d'une grille de calcul et d'un modèle de composants logiciels*",
RenPar'15 (Rencontres du Parallélisme), La Colle-sur-Loup (France), Octobre. Invited conference.

Canot É., Dominguez-Cortazar M., Franc J.-P., Michel J.-M., 1992,
"*Le CAVERMOD : une approche de l'érosion de cavitation par tourbillon cavitant.*",
2e Journées Cavitation. Colloque S.H.F. 18-20 Mars 1992, Paris (France). Contributed talk.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01134523v1

5 Seminars and Workshops

Canot É., 2018,
"*Calcul automatique d'une jacobienne — quelques outils pour un code numérique robuste et performant*",
Journée Simulation de l'IPR, 16 janvier 2018, Campus de Beaulieu, Rennes, France.

Canot É., 2016,
"*Modèles de forces capillaires entre grains*",
LMHE, École Doctorale Sciences et Techniques de l'Ingénieur,
Décembre 2016, ENIT, Tunis, Tunisie.
http://www.edsti.enit.rnu.tn/

Canot É., Delannay R., 2016,
"*Modèles de forces capillaires entre grains*",
GDR TransNat, 7-10 Nov., Roscoff
http://transnat.univ-rennes1.fr/themes/Programme/Roscoff+2016/

Canot É., Delannay R., Mansour S., 2016,
"*EWGM: Evaporation in a Wet Granular Medium*",
LMHE, École Doctorale Sciences et Techniques de l'Ingénieur,
7 Mars 2016, ENIT, Tunis, Tunisie.
http://www.edsti.enit.rnu.tn/

Canot É., 2016,
"*Zohour : un mailleur adaptatif pour les méthodes de Volumes Finis*",
LAMSIN, École Doctorale Sciences et Techniques de l'Ingénieur,
4 Mars 2016, ENIT, Tunis, Tunisie.
http://www.edsti.enit.rnu.tn/

Canot É., 2016,
"*EWGM: Evaporation in a Wet Granular Medium*",
Séminaire de laboratoire, Institut de Physique de Rennes,
24 Fév. 2016, Rennes,
https://ipr.univ-rennes1.fr/

Delannay R., March R., Canot É., 2013,
"*A burning question: how transfer processes in soils can enlighten archæological fires?*",
Workshop MODNUM (projet CÈDRE), Beirut, Lebanon, 22 may
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00908618v1

Canot É., Delannay R., Cordero J. A., March R., 2013,
"*The Laloy and Massard model: improvements and limitations – How numerics help us in making better and useful experiments*",
Workshop MODNUM (projet CÈDRE), Beirut, Lebanon, 22 may
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00908629v1

Mansour S., Canot É., Muhieddine M.,, 2013,
"*New boundary conditions for a reduced domain having a point symmetry*",
Workshop MODNUM (projet CÈDRE), Beirut, Lebanon, 22 may
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00908641v1

Canot É., 2013,
"*DAE solver and symbolic computation*",
Journée Défis Applicatifs de l'ANDRA, AE-HPC, 24 Avril 2013, Châtenay-Malabry, France.
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00908593v1

Canot É., Delannay R., 2013,
"*Transfert de chaleur dans un milieu poreux : cas où la conductivité thermique dépend de manière fortement non-linéaire du taux d'humidité présent*",
Workshop HYDRINV (projet Euro-méditerranéen 3+3), Tunis, Tunisie, 7-8 février
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00908611v1

Sabit S., Erhel J., Canot É., 2012,
"*Numerical methods of reactive transport: global approach DAE*",
First Brazil-France workshop on High Performance Computing, Nice, France, 27-29 juillet
http://www-sop.inria.fr/hoscar/pmwiki-2.2.40/pmwiki.php/Site/1stWorkshop

Nuentsa Wakam D., Canot É., Erhel J., 2009,
"*Two-level parallelism in GMRES with multiplicative Schwarz preconditioner*",
Second Workshop of the Joint Laboratory INRIA/NCSA for Petascale Computing, Urbana-Champaign, USA, 1-4 december
http://jointlab-pc.ncsa.illinois.edu/events/0610workshop.html

Nuentsa Wakam D., Canot É., Erhel J., 2009,
"*Mixing direct and iterative methods for the solution of large linear systems*",
Cerfacs Sparse Days, Toulouse, 18-19 juin

Canot É., Zein S., 2008,
"*Application des méthodes d'optimisation stochastiques à deux problèmes d'inversion sismique*",
Journée CPER "Acoustique et Sismique sous-marine", SeaTech Week 08, Brest, 13 octobre

Canot É., 2008,
La plateforme HYDROLAB, Workshop de clôture des projets Euro-Méditerranéen : HYDRO 3+3 et E2M
15-16 Mai 2008, Université de Tlemcen, Algérie.

Canot É., 2007,
"*Modélisation et calcul des phénomènes physiques*",
séminaire du Centre Archéologique de Pincevent, Montereau, 11 juillet

Canot É., 2006,
"*Interfaces graphiques sous MATLAB*",
Oct. 2006 : séminaire "Codes et Travaux", IRISA-Rennes

Canot É., 2005,
"*Dynamique des interfaces : le code CANARD et les nouvelles avancées*",
25 Nov. 2005 : séminaire Équipe PIM CEA-LEGI, Grenoble

Canot É., 2001,
"*Suivi d'interface par la B.E.M.*",
Nov. 2001 : séminaire du LAMSIN, E.N.I.-Tunis

Canot É., Achard J.-L., 1989,
"*Résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles par une méthode intégro-différentielle*",
Déc. 1989 : séminaire de l'IRMA (Grenoble) équipe EDP (resp. Witomski)

Canot É., 1989,
"*Généralisations des méthodes intégrales aux frontières*",
Mai 1989 : séminaire - École de Printemps de Mécanique des Fluides Numérique à Aussois. (S. Candel)

6 Reports, Technical documents, Posters

Canot É., Delannay R., 2016,
"*Liquid menisci equilibrium in a wet granular medium in pendular regime — Cohesive strength estimation for random smooth spheres packings*",
Poster, CMD26 Condensed Matter Division, Groningen, The Netherlands, 4-9 sept. 2016,
http://cmd26.eu/

Canot É., 2015,
"Le modèle EWGM : Implémentation numérique 1-D des variantes A et B",
Technical report,
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245769v1

Canot É., Mansour S., Delannay R., 2015,
"Evaporation/condensation of water in a granular medium, restricted to the pendular regime: the EWGM model",
Research report,
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01245758v1

Canot É., 2003-2018,
"*MUESLI Reference Manual — Fortran 95 implementation*",
https://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/muesli/muesli_ref_manual.pdf

Canot É., 2003-2018,
"*MUESLI User's Guide — Fortran 95 implementation*",
https://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/muesli/muesli_user_guide.pdf

Canot É., Mansour S., Delannay R., 2015,
"Estimation of the Thermophysical Properties of the Soil together with Sensors' Position by Inverse Problem",
Research report,
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01147992v3

Mansour S., Canot É., Delannay R., March R., Cordero A., Ferreri J. C., 2015,
"*Estimation of the Thermophysical Properties of the Soil together with Sensors' Position by Inverse Problem*",
ECOS-Sud (Argentina) Report, May 29, 56 pages.

Canot É., Delannay R., Mansour S., Muhieddine M., March R., 2014,
"Effective thermal conductivity of a wet porous medium — Presence of hysteresis when modeling the spatial water distribution for the pendular regime",
Research report,
https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01096806v1

Djouwe Tankeo M., Richard P., Canot É., 2011,
"*Simulation d'écoulements granulaires chenalisés*",
Poster, École Doctorale SDLM, Rennes, 12 janv. 2011.

Canot É., Muhieddine M., Delannay R., March R., 2010,
"*Strong heating of the soil: simulation of thermal convection-diffusion with phase-change in a saturated porous medium*",
Poster, 2nd Summer School on Flow and Transport in Porous and Fractured Media, Cargèse, Corsica, 16-29 aug. 2010.

March R., Muhieddine M., Canot É., Delannay R., Dong Q., 2008,
"*Experimental approach to solve heat transfer in humid conditions in prehistoric fires in different kinds of soils for Pincevent Magdalenian Site*",
Rapport d'activité concernant les fouilles de Pincevent, Ministère de la Culture, 40 pages.

7 Miscellaneous

Canot É., 2019,
"*Transferts de chaleur et de masse en milieu granulaire : expériences, modèles et simulations*",
Habilitation à Diriger les Recherches, Université de Rennes 1, 29 mai 2019.

Canot É., 1989,
"*Généralisation de la méthode intégrale aux frontières pour les systèmes fluide-fluide*",
Thèse de Mécanique, INP-Grenoble, 17 mars 1989.

Thèses encadrées

[avec le taux d'encadrement par É. Canot]

- BEN REFIFA Marwen (depuis janv. 2013), ([30 %], co-encadrée avec R. Bouhlila) « Modélisation des écoulements densitaires et des transferts réactifs multi-espèces dans les milieux poreux », Thèse d'Hydraulique, ENIT-Tunis

- MANSOUR Salwa, [100 %], « Contribution to certain Physical and Numerical Aspects of the Study of the Heat Transfer in a Granular Medium », Thèse d'Informatique, Université de Rennes I, déc. 2015

- SABIT Souhila, ([30 %], co-encadrée avec J. Erhel) « Méthodes numériques pour le Transport Réactif », Thèse de Mathématiques Appliquées, Université de Rennes I, mai 2014

- DJOUWE MEFFEJA Merline Flore, ([30 %], co-encadrée avec P. Richard) « Simulation et modélisation de milieux granulaires confinés », Thèse de Physique, Université de Rennes I, janv. 2012

- NUENTSA-WAKAM Désiré, ([20 %], co-encadrée avec J. Erhel) « Construction d'une base de données pour la conception en aérodynamique », Thèse d'Informatique, Université de Rennes I, déc. 2011

- MUHIEDDINE Mohamad, ([80 %], co-encadrée avec J. Erhel) « Simulation numérique des structures de combustion préhistoriques », Thèse d'Informatique, Université de Rennes I, oct. 2009

- MACHANE Rabha, [100 %], « Contribution de la méthode intégrale aux frontières au suivi d'interface », Thèse de Mécanique, Université Joseph Fourier, Grenoble, sept. 1997

- WU Dan, ([40 %], co-encadrée avec J.-L. Achard) « Dynamique des poches de gaz : Application aux suspensions oléopneumatiques », Thèse de Mécanique, INP, Grenoble, juin 1995

- DOMINGUEZ-CORTAZAR Miguel, ([40 %], co-encadrée avec J.-M. Michel) « Le CAVERMOD : modèle physique de l'érosion de cavitation. Qualification expérimentale et numérique », Thèse de Mécanique, Université Joseph Fourier, Grenoble, juillet 1994

Document de Synthèse

Table des matières

Introduction générale....31

Partie 1 : Modèle à un seul composant fluide (air ou eau)....33
1-A : Traitement du changement de phase....34
1-B : Détermination des propriétés thermiques par problème inverse....35
1-C : Maillages adaptatifs....36
1 – Le Rolling-Mesh en 1D....36
2 – Le mailleur Zohour en 2D....37

Partie 2 : Modèle à deux composants fluides (air et eau)....43
2-A : Descriptions diverses à l'échelle du grain....44
1 – Conductivité thermique effective d'un milieu granulaire humide....44
2 – Caractérisation des empilements granulaires....46
3 – Équilibre isotherme des ménisques liquides en régime pendulaire....47
2-B : Le modèle EWGM....48
2-C : Résultats numériques....49
1 – Étude de Min & Emmons (1972)....50
2 – Séchage d'un milieu humide par injection d'air sec....54

Outils et méthodes numériques....59
Performances....62

Conclusion et perspectives....69

Références bibliographie....71

Annexe 1 : L'analyse des foyers préhistoriques....75

Annexe 2 : Muesli, bibliothèque de calcul numérique....85

Annexe 3 : Génération automatique de la jacobienne par Calcul Formel....101

Annexe 4 : Zohour....107

Annexe 5 : Le modèle EWGM (en anglais – document non publié)....119

Annexe 6 : article "Muhieddine et al., IJFV, 2009"....137

Annexe 7 : article "Muhieddine et al., IJNME, 2011"....157

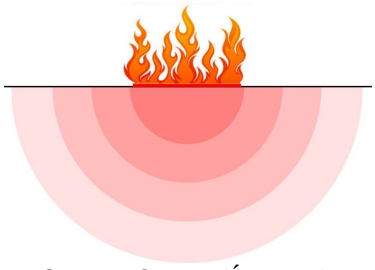
Annexe 8 : article "Canot et al., JHT, 2016"....183

Annexe 9 : article "Mansour et al., JHT, 2016"....191

Les références bibliographiques sont citées de cette manière : *nom(s)* et *année* ; quand il y a risque de confusion, l'abréviation du journal est insérée entre parenthèse, par ex. : Canot *et al.* (JHT), 2016.

Introduction générale

Mon document préparatoire, présenté à la commission HDR de l'Université en Rennes 1 en septembre 2017, contenait l'intégralité de mes sujets de recherche depuis mon entrée au CNRS en 1989. Dans ce document final, j'ai préféré me restreindre aux derniers travaux effectués, se déroulant approximativement sur une période allant de 2006 à aujourd'hui. C'est sur cette période en effet que le projet ArPhyMat (**Ar**chéologie, **Phy**sique et **Mat**hématiques), auquel j'ai souscrit dès le début, m'a donné l'occasion de découvrir, puis d'approfondir, un domaine nouveau pour moi : les transferts de chaleur et de masse en milieux poreux.



logo ArPhyMat (É. Canot)

Le projet ArPhyMat a été lancé en 2005 à l'initiative de Ramiro March, chercheur en archéométrie (CReAAH) ; c'est un projet interdisciplinaire pour l'étude des foyers préhistoriques, qui vise à l'étude archéologique des foyers préhistoriques, par le biais d'analyses de leurs traces, d'expériences de réplications, de modèles physiques et de simulations numériques. Comme le mentionne le site http://arphymat.univ-rennes1.fr/, des collaborations avec des chercheurs étrangers ont été mises en place.

Le projet ArPhyMat a permis d'initier des sujets de recherche concernant de près ou de loin le chauffage des sols. À ce propos, l'annexe 1 : « L'analyse des foyers préhistoriques » constitue une bonne introduction au contexte archéologique et à la problématique sous-jacente. Même si elle a été rédigée dans un but pédagogique (et à l'usage du grand public) ce texte permet de comprendre pourquoi on s'est intéressé aux sols chauffés par dessus, et en particulier pourquoi l'humidité joue un rôle important. Au fil des ans, le thème initial, concernant le chauffage d'un sol, s'est révélé d'une grande richesse, tant par les phénomènes physiques mis en jeu que par les outils numériques à sélectionner et à développer pour la mise en œuvre des simulations numériques associées.

Au sein de mon département « Milieux Divisés » de l'IPR, le facteur « humidité » joue désormais un rôle majeur ; historiquement, les études étaient surtout centrées sur les empilements de grains secs, et les problématiques de compaction ou de tassement suite à des vibrations. L'aspect dynamique est également étudié depuis plusieurs années : il s'agit du transport éolien, lorsque le vent arrive à arracher des grains d'un empilement pour le transporter plus loin, ou même en situation complètement immergée. Le déclenchement des avalanches a aussi été étudié. Depuis peu, le rôle de l'humidité est apparu déterminant à cause de la cohésion présente due aux phénomènes capillaires.

Le titre que j'ai choisi de donner à ce mémoire, « *Transfert de chaleur et de masse en milieux granulaires : expériences, modèles et simulations* » reflète ainsi parfaitement la plupart des axes issus du projet ArPhyMat décrit plus haut. Bien entendu, dans le terme « *transfert de masse* » il faut entendre l'écoulement d'un fluide, ce dernier pouvant être de l'air, sec ou humide, ou de l'eau. Sauf exception, intervient toujours un changement de phase : l'eau liquide passe à l'état de vapeur, cette transformation pouvant s'effectuer lentement lorsqu'il s'agit d'une évaporation à température ambiante ou sous l'effet d'un chauffage modéré, ou bien brutalement lorsque la température dépasse localement celle de l'ébullition de l'eau.

Les sujets que j'ai choisi de sélectionner dans ce document concernent donc pratiquement tous le changement de phase. J'ai subdivisé le document en deux grandes parties :

1. le cas où un seul composant fluide est présent dans le milieu poreux (cela peut être soit de l'air sec, soit de l'eau, sous forme liquide ou[1] vapeur) ;
2. le cas où deux composants fluides sont présents (air et eau).

Chaque partie est découpée en trois sections indépendantes. Au lecteur qui souhaite se restreindre à telle ou telle sous-partie, le tableau suivant donne les numéros des sections correspondantes :

	A	B	C
Partie 1 : modèle à un seul composant fluide (air ou eau)	Traitement du changement de phase : LHA vs AHC (p. 34)	Détermination des propriétés thermiques par méthode inverse (p. 35)	Les maillages adaptatifs : Rolling-mesh (1D) et Zohour (2D) (p. 36)
Partie 2 : modèle à deux composants fluides (air et eau)	Descriptions diverses à l'échelle du grain (p. 44)	Modèle EWGM (transferts en régime pendulaire exclusivement) (p. 48)	Simulations numériques : confrontation des résultats avec ceux de la littérature et avec des expériences (p. 49)

Nous présenterons également les outils numériques mis en œuvre dans nos simulations ainsi que différentes considérations ayant trait aux méthodes numériques utilisées : les solveurs utilisés pour les équations différentielles, la formulation de type Volumes Finis avec schéma conservatif, le traitement des conditions limites, la génération de code pour calculer la jacobienne de manière exacte, les bibliothèques d'algèbre linéaire dense ou creuse, et enfin notre bibliothèque Muesli.

Enfin, une courte conclusion et des perspectives seront exposées. Les perspectives concernent principalement la migration du sel en milieu poreux faiblement humide, phénomène que nous avons observé au cours d'une récente pré-étude.

1 Au contraire de l'anglais, le français est rarement exclusif. J'écris donc « liquide ou vapeur » là où certains écriraient « liquide et/ou vapeur ».

Partie 1 : Modèles à un seul composant fluide (air ou eau)

Dans cette première partie, on traite de modèles simples : le milieu poreux ne peut contenir que de l'air ou de l'eau ; nous sommes donc en présence d'un modèle à un seul composant fluide. L'air est évidemment incondensable aux conditions habituelles de température et de pression, mais l'eau change facilement d'état (et pas seulement à 100 °C, nous le verrons de manière approfondie dans la seconde partie). En langage système, nous aurons donc de la thermique couplée à un écoulement du fluide.

Pour être plus précis, ce modèle comporte :

- la conservation de la masse du fluide ;
- la conservation de l'énergie (thermique uniquement – il n'y a pas d'énergie mécanique, la vitesse du fluide étant beaucoup trop faible) ;
- la conservation de la quantité de mouvement qui, la plupart du temps, se réduit à l'équation de Darcy, c'est-à-dire une relation linéaire entre la vitesse du fluide et le gradient de pression ;
- enfin, une équation d'état pour le fluide.

Si notre fluide est de l'air ou de la vapeur d'eau, alors son équation d'état sera l'équation des gaz parfait ; en revanche, s'il s'agit de l'eau liquide, son équation d'état se réduira à dire que sa masse volumique est constante.

On fait souvent l'hypothèse de l'équilibre thermique entre les grains solides et le fluide qui l'entoure, ce qui implique que leurs températures respectives ont la même valeur. Est-ce une hypothèse raisonnable ? Oui, si l'instationnarité est faible et qu'il n'y a pas de forts gradients thermiques au sein du milieu. Nous ferons toujours cette approximation.

Nous négligerons ensuite la gravité… Cela est évidemment pleinement justifié pour les situations 1D horizontale — avec un chauffage par dessus, il ne peut pas y avoir de convection à l'intérieur, à cause de la configuration stable. La question pourrait se poser pour les simulations 2D-axisymétriques, pour lesquelles les isothermes ne sont plus du tout horizontales. Cette situation est décrite dans la première thèse du projet ArPhyMat (Muhieddine, 2009) aux pages 23-24 : il ressort que le nombre de Rayleigh estimé dans notre cas est très en deçà de la valeur critique au-delà de laquelle des mouvements convectifs apparaissent. Tout au plus pourrait-il y avoir une modification du front de séchage lorsqu'il est très incliné.

Le couplage entre la thermique et l'écoulement est fort. En d'autres termes, on ne peut pas calculer l'un sans l'autre ; d'ailleurs l'écoulement provient de la dilatation du gaz sous l'effet de la chaleur et cet écoulement, en retour, transporte de la chaleur et donc interagie avec l'équation de la chaleur.

Le modèle comportant de l'air est appelé aussi « modèle sec ». Nous l'avons souvent utilisé afin de comparer des résultats d'expériences. Si on considère maintenant le modèle comportant de l'eau (liquide ou vapeur), on peut comprendre facilement qu'il soit dédié au cas d'un milieu poreux saturé en eau.

Une limitation importante de l'approche employant le seul composant « eau » est qu'il n'est pas possible de traiter un refroidissement après une période de chauffage. En effet, lors du chauffage, une partie de l'eau se transforme en vapeur dès que la température dépasse celle du changement de phase (100 °C à pression atmosphérique) ; si un refroidissement intervient et que la température redescend en dessous de 100 °C, alors la vapeur condense et l'eau liquide remplit le milieu poreux. Ce n'est pas du tout ce qui se passe dans la réalité où la vapeur échappée du sol est complètement diluée dans l'air et c'est de l'air qui va prendre la place de la vapeur d'eau lors du refroidissement. Cette forte limitation,

inhérente au modèle qui n'a qu'un seul composant fluide, est levée par l'introduction d'un second composant fluide (l'air) ; ce modèle EWGM sera présenté en deuxième partie.

Les trois sections présentées ci-après abordent dans l'ordre : le traitement du changement de phase, le problème inverse et une méthode de maillage adaptatif originale.

1-A : Traitement du changement de phase

Cette section s'appuie sur deux articles (qu'on trouvera dans les annexes 6 et 7) qui traitent, pour le premier, du changement de phase et, pour le second, de l'utilisation d'un modèle couplé thermique/écoulement avec application aux foyers préhistoriques :

1. Muhieddine M., Canot É., March R., 2009, Various approaches for solving problems in heat conduction with phase change, *Int. J. on Finite Volumes*, vol. 6, n. 1
2. Muhieddine M., Canot É., March R., Delannay R., 2011, Coupling heat conduction and water-steam flow in a saturated porous medium, *Int. J. for Numerical Methods in Engng*, vol. 85, pp 1390-1414.

D'une manière générale, les problèmes à changement de phase sont difficiles parce que ce sont des problèmes à frontière libre ; en effet, la position du front de changement de phase fait partie des inconnues du problème et on ne peut pas leur appliquer directement les méthodes traditionnelles de discrétisation.

Dans Muhieddine *et al.* (2009), deux méthodes différentes sont présentées et comparées : LHA (Latent Heat Accumulation) et AHC (Apparent Heat Capacity). Toutes deux ont des fondements physiques bien établis et elles se rattachent aux méthodes enthalpiques. La première est toutefois plus facile à implémenter (aussi bien en 1D qu'en multi-dimensionnel), mais nous avons trouvé qu'en pratique seul un schéma explicite est utilisable, ce qui limite ses performances. La seconde (AHC) a beaucoup d'atouts, mais elle introduit un paramètre supplémentaire (ΔT, petit intervalle de température) qui demande à être bien optimisé ; c'est cette deuxième méthode que nous avons utilisé systématiquement dans les simulations de ces modèles simples à un seul composant fluide, notamment dans Muhieddine *et al.* (2011) où l'on a comparé les simulations utilisant la méthode AHC avec des résultats d'expériences de terrain.

Il faut souligner que, dans Muhieddine *et al.* (2011), ϕ n'est pas la vraie porosité ; c'est une porosité ajustable qui permet de faire comme si le milieu était saturé afin d'utiliser notre modèle à un seul composant fluide. En effet, quand on chauffe un milieu contenant de l'eau, le changement de phase requiert beaucoup d'énergie (environ autant que de chauffer l'eau de 20 °C jusqu'à sa température d'ébullition) ; il est donc important de tenir compte de la manière la plus juste possible de la quantité d'eau liquide présente. Ce faisant, on augmente artificiellement la quantité de solide ; il faut alors corriger la capacité thermique du solide pour conserver la bonne valeur (sinon, on aura trop d'inertie thermique dû au solide). Cette correction n'est pas présente dans les équations présentées dans l'article. Il pourra être intéressant de faire des essais numériques supplémentaires afin de voir l'importance de cette erreur.

Le fait d'aborder les transferts de chaleur en milieu poreux conduit inévitablement à considérer ce qui se passe à l'échelle des grains. Cette description locale, à l'échelle la plus petite donc, ne peut pas être ignorée, sans quoi les lois utilisées à grande échelle seraient complètement fausses. Dans cette première grande partie, seule la conductivité thermique pose problème ; il y en aura d'autres dans la deuxième partie. Le meilleur modèle que nous avons trouvé pour le cas de notre milieu granulaire, constitué de grains à peu près sphériques, est celui de Kunii & Smith (1970). C'est celui qu'on utilise désormais depuis quelques années ; celui utilisé dans Muhieddine *et al.* (2009) est faux, car il utilise la moyenne

harmonique, valide uniquement pour des couches de propriétés différentes perpendiculaires au flux de chaleur (c'est le cas pour le double vitrage, par exemple).
En résumé, la conductivité moyenne résultant d'une hétérogénéité à petite échelle, parfois appelée conductivité effective, dépend de l'organisation interne des deux milieux en présence ; elle peut être approchée par des modèles, voire calculée par simulation mais dans ce cas les calculs sont coûteux car le domaine doit être suffisamment grand pour englober un grand nombre de grains. L'estimation est plus compliquée encore lorsqu'il y aura des ménisques d'eau (cf. partie 2, B).

1-B : Détermination des propriétés thermiques d'un milieu par problème inverse

La connaissance des propriétés thermiques du sol est indispensable à toute simulation de transfert de chaleur. Comme déjà mentionné au paragraphe 3 de l'annexe 1 (« L'analyse des foyers préhistoriques »), Laloy & Massard ont proposé en 1984 une méthode simple et astucieuse pour déterminer ces propriétés ; cette méthode est facile à mettre en œuvre, malgré ses limites (sommairement listées dans Canot *et al.*, 2019). Pour cette raison, je me suis intéressé assez tôt au sein du projet ArPhyMat à trouver une méthode plus fiable, plus robuste.

Une méthode inverse pour déterminer les propriétés thermiques du sol a été mise au point, généralisant une méthode utilisée dans l'industrie pour les pièces métalliques moulées. L'application au cas 1D a donné de bons résultats (thèse de M. Muhieddine, 2009) mais il a fallu définir une procédure appropriée pour que la convergence puisse être assurée dans le cas 2D-axi. Comme on utilise la méthode AHC pour traiter le changement de phase, le choix de l'intervalle de température ΔT sur lequel s'effectue le changement de phase est primordial. Une valeur trop large conduit à une solution lisse mais peu précise ; en revanche, diminuer cet intervalle améliore la précision mais conduit à une solution comportant des oscillations (voir la thèse de S. Mansour, 2015). C'est la présence de ces oscillations qui empêche la convergence de la méthode inverse. La solution consiste à démarrer le problème inverse avec une valeur assez grande de ΔT, puis à enchaîner plusieurs minimisations en diminuant progressivement cette valeur (thèse de S. Mansour).

Cette méthode a été testée et validée à partir de données synthétiques (Mansour *et al.*, 2016, annexe 9). Les expériences de laboratoire concernant les sols saturés n'ont malheureusement jamais été traitées, bien que nous disposons d'un grand nombre d'expériences, réalisées par A. Lucquin en 2011-2012 et par A. Cordero en 2012-2013, aussi bien en sec qu'en saturé. La méthode inverse a cependant été utilisée dans sa version « sol sec » avec les expériences de laboratoire mentionnées ci-dessus. La grande majorité de ces expériences ont utilisé du sable de Fontainebleau dont nous connaissons les propriétés thermiques, grâce à internet mais aussi par la fiche technique fournie par le fournisseur (Sibelco). Il a donc été aisé de vérifier si les résultats de la méthode inverse était conformes ou pas. Cependant la méthode de positionnement des thermocouples (tiges placées horizontalement dans le sable) donne une grande incertitude sur la valeur de leur profondeur (jusqu'à 5 mm), et la précision de la méthode inverse dépend fortement de la qualité de cette mesure. La méthode inverse, dans Mansour *et al.* (2016), a donc été élargie à la recherche de la position des thermocouples, en supposant qu'il sont nombreux d'une part, et que l'erreur affectant leur positionnement est de type gaussien d'autre part.

Le programme ArPhyMat nous a enfin donné l'opportunité de pouvoir utiliser notre méthode inverse avec des données réelles, provenant d'une campagne de mesures de température sur des sols chauffés du Chili, campagne effectuée par R. March pendant l'été 2015. En collaboration avec C. Santoro de l'Université de Tarapaca (Chili) et R. Delannay (IPR), les données de terrain ont été traitées. Les photos associées aux mesures, après fouille de la zone chauffée ont révélé une grande hétérogénéité du sol ainsi que la présence de sels à certains endroits (voir la figure 1 ci-dessous). Cette hétérogénéité a conduit à de grandes difficulté pour la mise en œuvre de la méthode inverse, surtout à cause du faible nombre de mesures. Néanmoins un article a pu être écrit et soumis à la revue *Archeometry* (Canot *et al.*, 2019).



Fig. 1 : Coupe partielle du sol du désert d'Atacama (Chili) sur lequel ont été menées des réplications de foyers préhistoriques en 2015. La photo montre une grande hétérogénéité et de nombreuses traces de sels (zones blanches). (photo R. March)

1-C : Maillages adaptatifs

1 - Le Rolling-Mesh en 1D

C'est l'application de la méthode LHA (Latent Heat Accumulation, décrite dans Muhieddine *et al.*, 2009, annexe 6) au problème de changement de phase qui m'a conduit à m'intéresser aux maillages adaptatifs. Cette méthode est facile à implémenter, surtout avec un schéma explicite. La méthode obtenue n'est alors pas très performante car handicapée par le critère de stabilité de Von Neumann ! Gagner en précision ne peut se faire qu'en augmentant le nombre de nœuds, et le pas de temps, requis pour obtenir un calcul stable, diminue alors de la même façon. Des essais montrent qu'il est préférable de diminuer la taille des mailles localement, au voisinage immédiat du front de changement de phase.

Dans la figure 2 (reprise de Muhieddine *et al.*, 2009), on voit trois étapes successives illustrant le raffinement du maillage que l'on a choisit : suivant le besoin on ajoute ou on supprime des nœuds. Soulignons d'emblée que ce n'est pas un maillage glissant (tous les nœuds sont fixes) : pour cette raison, il a été appelé *Rolling-Mesh*. Le raffinement est adaptatif, puisqu'il n'est pas calculable à l'avance mais qu'il dépend de la solution du problème. La mise en œuvre d'un tel maillage conduit à des performances remarquables : voir les courbes concernant le ratio performance/coût, notamment sur la figure 6b de la même publication.

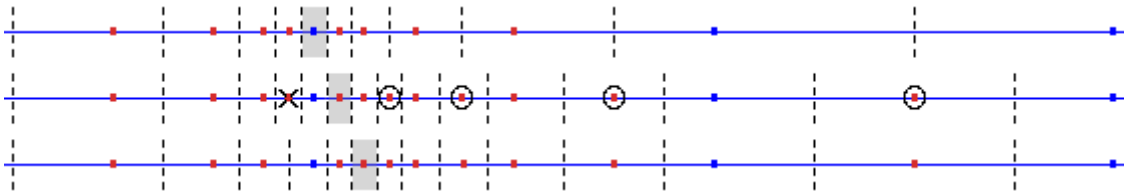


Fig. 2 : *Rolling-mesh* utilisé dans la publication Muhieddine *et al.*, 2009 (annexe 6) pour la méthode LHA. De haut en bas, trois étapes successives sont montrées. Les nœuds bleus constitue le maillage de base, uniforme. Les nœuds rouges sont ceux qui sont ajoutés/enlevés au gré du raffinement. La cellule grise est celle en cours de changement de phase (ni complètement liquide, ni complètement solide) ; c'est par rapport à elle que les autres mailles sont resserrées.

2 - Le mailleur Zohour en 2D

Le mailleur *Zohour* est l'extension 2D du *Rolling-Mesh*. Bâti sur le même principe (ajout/suppression de nœuds), il est décrit en détail dans l'annexe 4. Nous présentons ci-après sa mise en œuvre pour un problème de changement de phase en 2D. Ce qui suit est un extrait du chapitre 3 de la thèse de Salwa Mansour (2015) qui a effectué ses travaux sous ma direction.

Le problème considéré consiste à fondre un barreau de glace, initialement à une température négative, en le chauffant sur une partie seulement de sa face supérieure. On tient compte uniquement de la conduction et les équations sont les mêmes que dans l'article Muhieddine *et al.* (2009). La résolution numérique est faite au moyen de la méthode AHC (Apparente Heat Capacity), avec un schéma explicite du 1er ordre. Les conditions initiales et aux limites sont reportées sur le schéma de la figure 3.

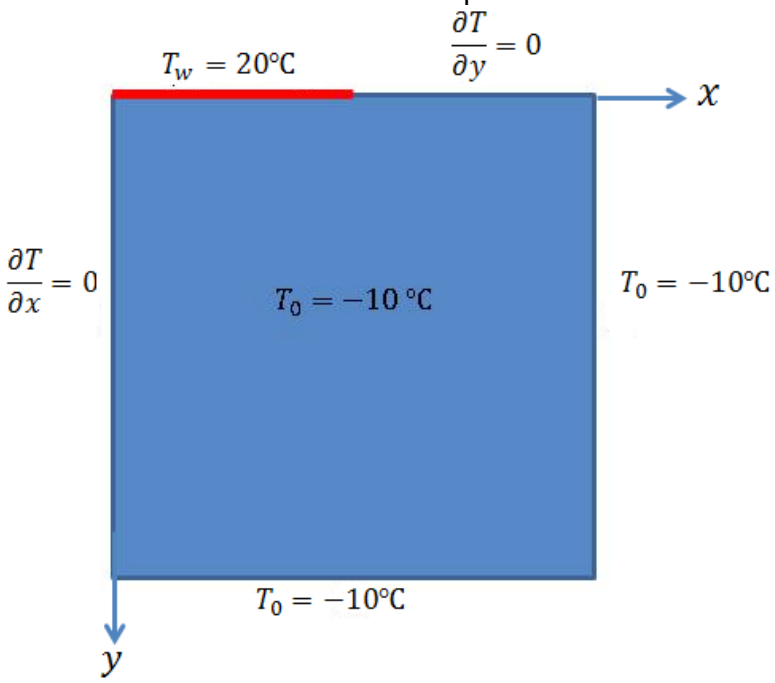


Fig. 3 : Domaine de calcul 2D pour le problème test de *Zohour* – Changement de phase calculé numériquement par la méthode AHC explicite , avec raffinement adaptatif. (schéma S. Mansour)

Ce problème n'ayant pas de solution analytique, nous estimons la solution exacte en calculant une solution numérique très précise (maillage 750 x 750) : cette solution numérique est ensuite prise comme référence. Le champ de température au bout de 20 heures est reporté sur la figure 4, tandis que les thermogrammes en trois positions à l'intérieur du milieu sont reportés sur la figure 5.

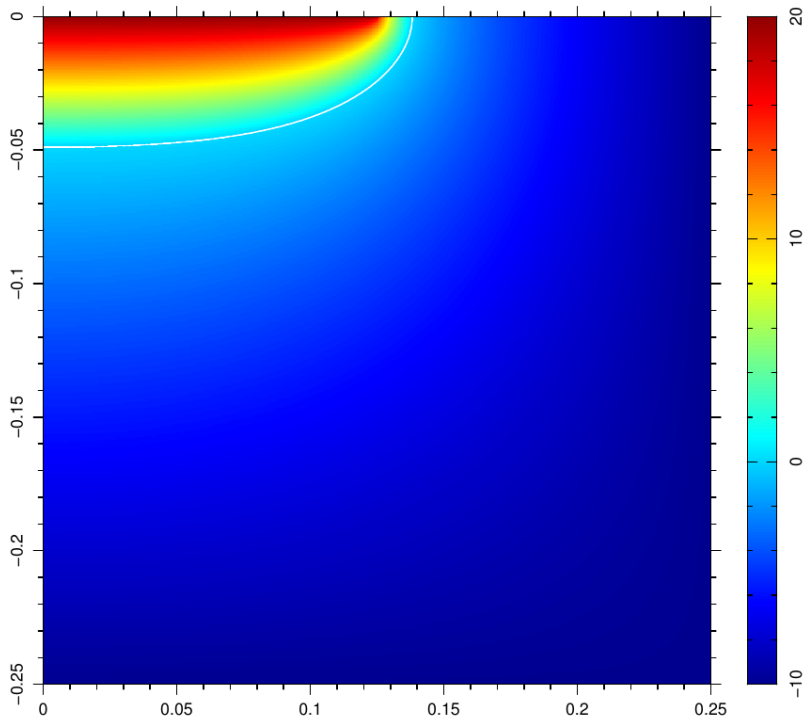


Fig. 4 : Solution de référence – Champ de température au bout de 20 heures, calculée avec un maillage 750x750. La ligne blanche représente l'isotherme 0 °C, c'est-à-dire la température de changement de phase.

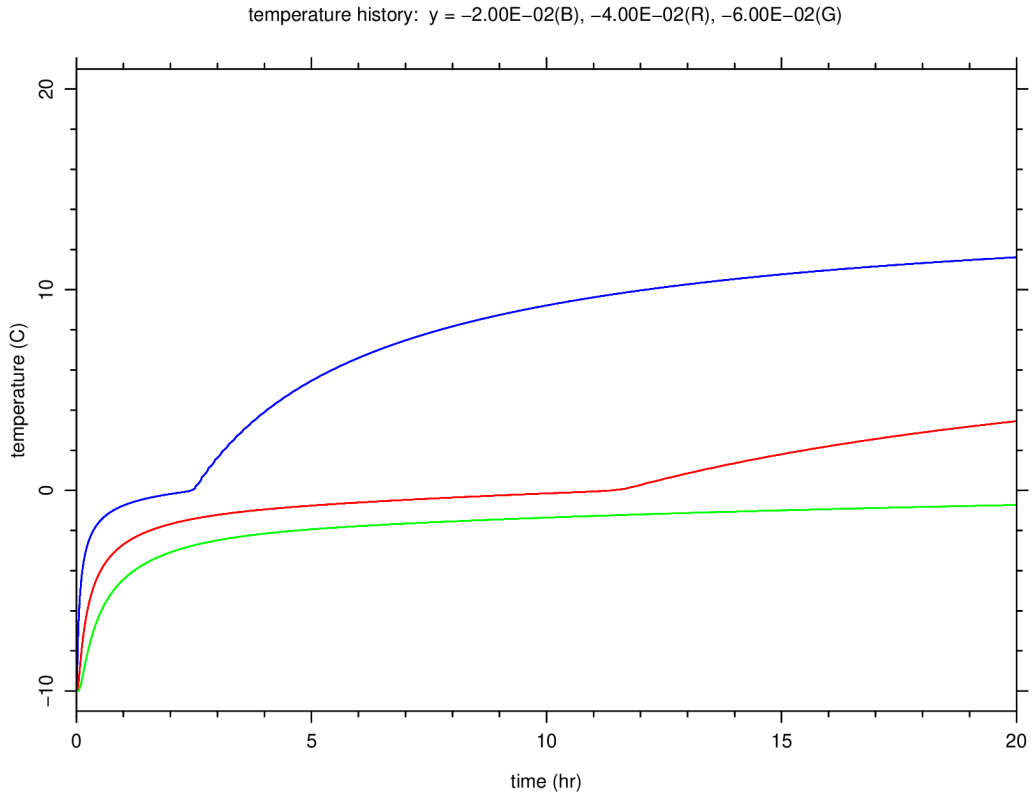


Fig. 5 : Thermogrammes en trois points intérieurs (respectivement à 2, 4 et 6 cm de profondeur). La discontinuité de la dérivée au point où les courbes traversent la température de fusion est liée au rapport des conductivités thermiques de l'eau liquide et de la glace.

Lors de la mise en œuvre de *Zohour*, le raffinement est fondé sur deux critères :

1. le hessien du champ de température (plus celui-ci est élevé, plus les mailles seront petites) ;
2. la proximité avec la ligne de changement de phase, où on a vu qu'il était nécessaire de raffiner (cette dernière condition est exprimée en terme de température).

Pour un problème transitoire comme le nôtre, l'évolution est relativement lente ; il est alors inutile d'effectuer le raffinement à chaque pas de temps. On choisit alors de mettre à jour le maillage par *Zohour* uniquement tous les 20 pas de temps (ce compromis a été trouvé après plusieurs essais – les résultats sont dans la thèse de S. Mansour (2015) au chapitre 3).

La figure 6 ci-dessous représentent un maillage typique, quand on choisit un maillage de base (fixe) de 70x70 et qu'on autorise 3 niveaux maximum de subdivisions. On remarque que les mailles sont effectivement beaucoup plus resserrées au voisinage immédiat de la ligne de changement de phase, mais aussi à proximité du point (0.125, 0) au milieu du bord supérieur : ce point marque en effet la discontinuité de type de condition limite (Dirichlet à gauche, Neumann à droite), qui donne à la solution une singularité faible (voir figure 3).

Les erreurs L^2 ont été calculées, et intégrées aussi bien sur le temps (aux trois points mentionnés ci-dessus, qui jouent le rôle de capteurs virtuels) qu'à la fin de la simulation sur l'espace (champ de température). Les définitions exactes sont données dans la thèse de S. Mansour (2015). Outre les figures montrées dans cette thèse, on préfère ici présenter l'erreur L^2 en fonction du coût CPU des simulations (voir figure 7) ; cette représentation est en quelque sorte un rapport qualité/prix, et il est toujours intéressant de l'examiner pour voir si, en pratique, telle approche est plus intéressante que telle autre.

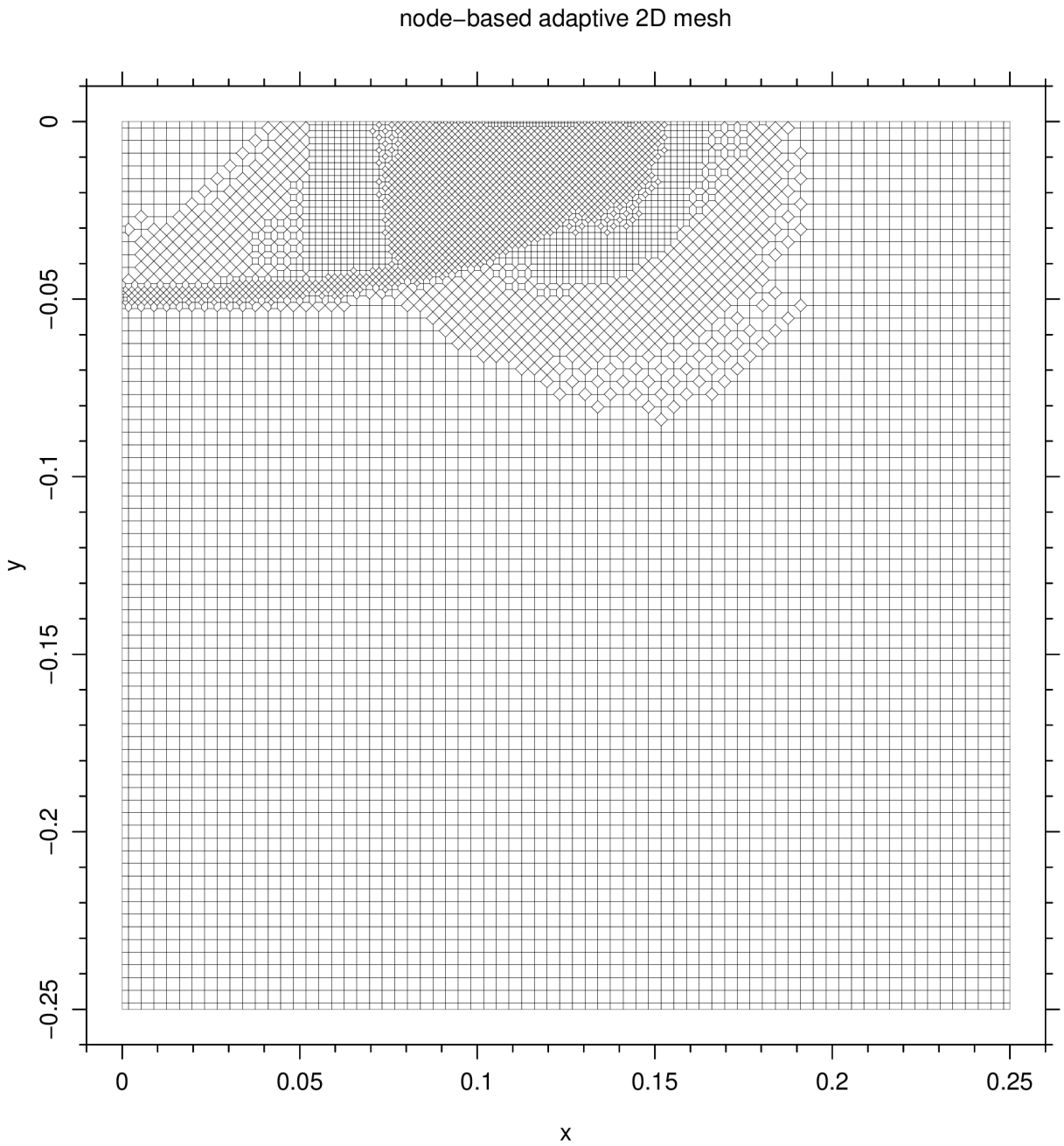


Fig. 6 : Maillage créé par Zohour pour notre problème-test de changement de phase 2D. La grille de base est de 70x70 et le niveau de subdivision est égale à 3. Le nombre total de mailles est 8564, soit un peu moins du double de celui du maillage de base.

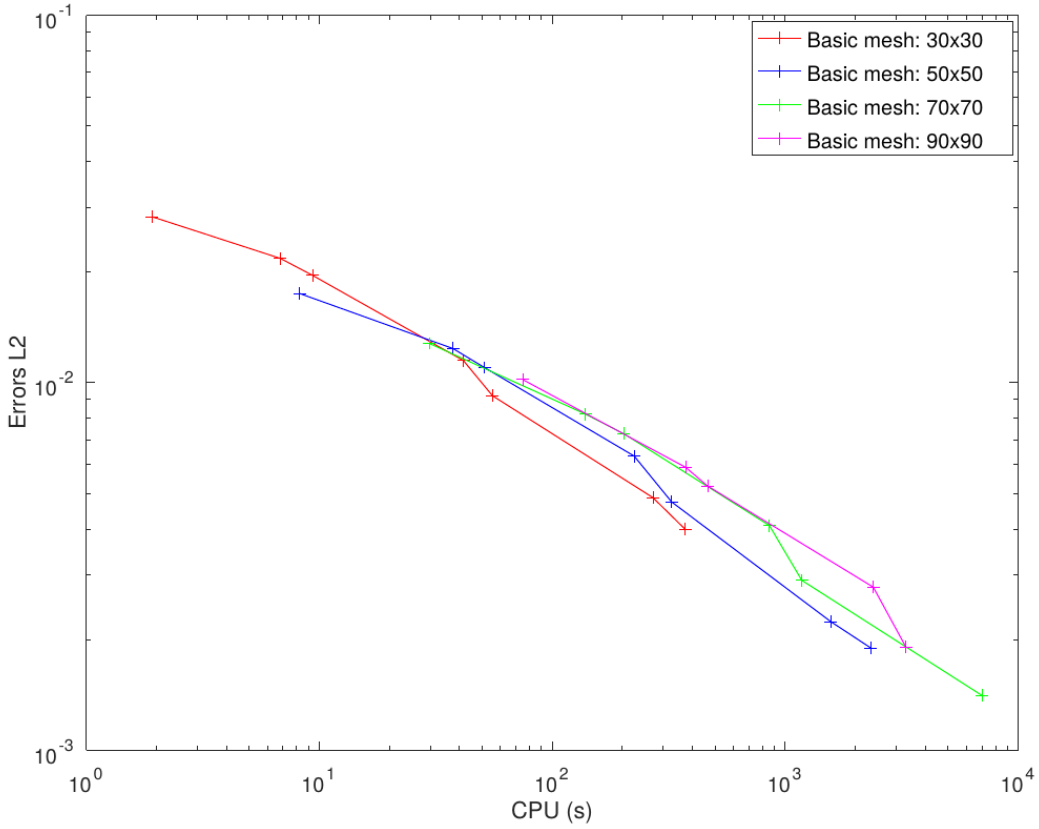


Fig. 7 : Variation de l'erreur L^2 pour le champ de température à la fin de la simulation, pour différents maillages de base et niveaux de subdivisions (0, 2, 3, 4, …). L'abscisse représentant le coût total CPU, on cherche habituellement à minimiser à la fois l'erreur et le coût, donc à se placer dans le coin inférieur gauche des axes.

La mise en œuvre du raffinement coûte cependant cher, et les résultats ne sont pas aussi spectaculaires que dans le cas de l'exemple en 1D présenté dans Muhieddine *et al.* (2009). En particulier, un examen de la figure 7 ci-dessus montre que ce qui est gagné par l'économie du nombre de mailles est perdu par un défaut de précision ou par le surcoût de la mise en œuvre de l'algorithme ! À ce défaut, on peut avancer les explications suivantes :

- Le schéma utilisé pour calculer les flux aux facettes des mailles est de type TPFA (Two-Point Flux Approximation[2]). La forme de nos mailles et la position des nœuds centraux vérifient automatiquement la condition d'orthogonalité (parce que notre maillage est construit comme un diagramme de Voronoi permanent, voir annexe 4), mais le flux n'est pas toujours estimé au milieu des faces (voir l'explication détaillée en légende de la figure 8) ; pour cette raison, il faudra, dans le futur, mettre en œuvre un schéma de type MPFA (Multi-Point Flux Approximation).
- *Zohour* est encore à l'état de prototype. Bien que fonctionnel et efficace, il n'est pas encore optimisé, notamment en ce qui concerne les structures de données. Le calcul du hessien (présenté en annexe) a été nettement amélioré lors d'un stage de Master 1[3], mais certaines procédures internes du mailleur n'ont jamais été revues depuis leur première écriture.
- Le critère pour définir le raffinement s'appuie sur deux éléments : le hessien d'une part, la proximité avec la ligne de changement de phase d'autre part. Mais le poids du premier élément par rapport au deuxième n'a pas encore été bien évalué… peut-être est-ce pour cette raison que les performances de notre essai en 2D a été un peu décevant.

2 Droniou J., 2013
3 Beaucé C., 2015.

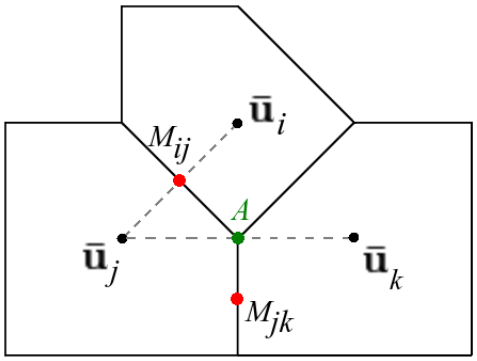


Fig. 8 : Calcul du flux aux faces en Volume Fini. L'utilisation d'une formule simple à deux point (TPFA) conduit à un schéma d'ordre 2 pour la face *i-j*, car l'estimation du flux est effectuée au milieu de la face. Dans le cas de la face *j-k*, une estimation similaire est effectuée au point *A* qui n'est pas au milieu de la face : cela conduit à un schéma d'ordre 1 seulement.

Toutefois, rappelons les avantages du mailleur *Zohour* :

- peu d'interpolations interviennent à chaque remaillage ;
- presque tous les calculs se font uniquement sur des entiers – la seule exception concerne le calcul du hessien qui est relativement modeste ;
- l'algorithme ne nécessite que très peu de mémoire ;
- de larges zones sont constituées de carrés, forme optimum pour la précision numérique ;
- les maillages résultants présentent une très bonne progressivité de la taille des mailles.

Note importante : les tests de *Zohour* présentés ci-dessus ont été effectués avec un schéma explicite en temps du 1er ordre. Si on devait, par la suite, utiliser un solveur ODE/DAE automatique, il serait alors nécessaire de redémarrer le solveur ODE/DAE à zéro à chaque fois que le remaillage change le nombre de mailles. Le solveur étant automatique, il repart avec un pas de temps très petit, et avec l'ordre 1, ce qui peut être handicapant. De plus on ne bénéficie plus du caractère *multi-steps* du schéma BDF ! Une modification des solveurs ODE/DAE (de SLATEC) sera alors nécessaire pour implémenter un point de reprise avec conservation du maximum d'information.

Partie 2 : modèle à 2 composants fluides (air et eau)

Nous avons vu, à la fin de l'introduction de la partie 1, qu'un modèle à un seul composant fluide (l'eau) ne pouvait pas prendre en compte le refroidissement d'un sol après séchage, car sinon le sol se remplirait à nouveau d'eau liquide. De plus, même les modèles saturés à porosité corrigée pour simuler le cas insaturé ne sont pas corrects. Il est alors nécessaire de tenir compte de la présence de l'air au sein des milieux poreux, et d'introduire le phénomène de diffusion moléculaire qui est fondamental pour la plupart des processus dynamiques, et pas seulement pour ceux qui sont les plus lents et qui concernent la mise à l'équilibre.

Beaucoup de modèles sont, encore aujourd'hui, linéaires, à la suite d'un modèle simple proposé par Philip & De Vries en 1957. Pourtant, même s'ils ont été utiles pour comprendre les mécanismes à l'œuvre dans certaines configurations, ils sont incapables, par nature, de faire apparaître les fronts brusques que nous verrons dans la section C ci-dessous.

Nous nous plaçons d'emblée dans les cas de faible humidité, pour des raisons de simplicité. Plus précisément, nous considérerons le régime pendulaire[4], pour lequel la présence d'eau liquide au sein du milieu granulaire se réduit à des ménisques séparés, localisés en général autour des points de contacts entre grains (voir figure 9).

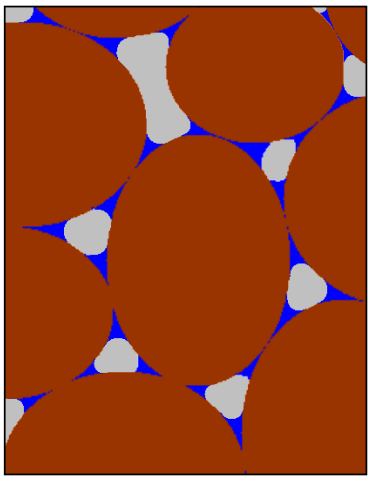


Fig. 9 : Milieu granulaire saturé partiellement, en régime pendulaire : l'air (en gris) constitue la phase continue alors que l'eau (en bleu) constitue une phase dispersée, localisée aux points de contact entre les grains. (dessin É. Canot)

La phase gazeuse est donc continue et il peut y avoir un écoulement de gaz s'il y a un gradient de pression (la loi de Darcy s'applique alors). En revanche, la phase liquide est dispersée, non continue, et à cause des forces de capillarité les ménisques sont en position stable (en supposant que l'eau « mouille » le solide). Par conséquent l'eau liquide ne se déplace pas ; mais elle peut s'évaporer et condenser à un autre endroit, donnant des phénomènes très intéressants, à l'origine des « heat pipes » (caloducs) que sont les échangeurs de chaleur diphasiques, apparus dans les années 1960 et que nous trouvons encore aujourd'hui dans nos ordinateurs. Nous reverrons ce phénomène de « heat pipe » dans la section C dédiée à des résultats de simulation.

Une conséquence du régime pendulaire est de pouvoir négliger complètement la gravité, parce que les forces capillaires l'emportent sur celles liées à la pesanteur[5]. Par ailleurs, et parce que la taille des

4 Pour la description des différents régimes de saturation en eau, voir par exemple Mitarai & Nori, 2006.

5 Le nombre de Bond, rapport adimensionnel permettant de caractériser les forces de gravité par rapport à celles dues à la tension superficielle, s'écrit $Bo = \rho\, g\, L\, /\, \sigma$. Une valeur typique dans notre cas est de l'ordre du millième, en prenant comme échelle de longueur L le rayon des grains du sable de Fontainebleau, voisin de 100 µm.

ménisques liquides est de l'ordre de celle des grains, le système étudié devient multi-échelles : les équations que nous voulons établir à grande échelle (celle de l'expérience) doivent obligatoirement tenir compte des phénomènes qui se déroulent à micro-échelle[6]. Dans cette deuxième partie, nous allons donc nous intéresser tout d'abord à différentes descriptions à l'échelle du grain, puis nous présenterons le modèle à deux composants et deux phases (nommé EWGM – Evaporation in Wet Granular Media) ; enfin nous présenterons quelques résultats numériques qui démontreront les potentialités de notre approche.

2-A : Descriptions diverses à l'échelle du grain

1 – Conductivité thermique effective d'un milieu granulaire humide

Quand on considère un matériau hétérogène, formé de plusieurs constituants dont on connaît les proportions volumiques, il est facile de déterminer sa capacité thermique volumique (produit ρC) ; en effet, cette dernière propriété est extensive et ne dépend que des valeurs correspondantes à chaque constituant et du volume de chacun. Il n'en est pas de même pour la conductivité thermique qui est une grandeur intensive : la manière dont sont répartis les constituants dans l'espace joue un rôle primordial. Des expressions théoriques ne sont connues que pour un petit nombre de cas (Bories & Prat, 2000) ; dans le cas général, il faut utiliser des modèles approchés, ou se tourner vers la simulation (Luikov *et al.*, 1968 ; Usowicz *et al.*, 2006 ; Dong *et al.*, 2015).

Même dans le cas sec (milieu granulaire sans eau liquide), les choses ne sont pas simples. Parmi plusieurs modèles testés, c'est celui de Kunii & Smith (1960) qui nous est apparu le plus réaliste, et nous l'avons utilisé avec succès dans nos simulations de chauffage de sable secs, bien que ce modèle soit établi pour des grains sphériques. Quelques autres références, parmi les très nombreuses qui existent, peuvent être trouvées dans notre article Canot *et al.* (JHT) 2016.

Les choses se compliquent encore plus quand des ménisques liquides sont présents entre les grains. Bien que leur volume soit petit comparé à celui des grains, le rôle qu'ils jouent dans la transmission du flux de chaleur est primordial, essentiellement parce que la conductivité thermique de l'eau est environ cent fois plus grande que celle de l'air ; les ménisques se comportent comme des ponts thermiques entre les grains. On se réfère ici à notre article Canot *et al.* (JHT) 2016, qui fait apparaître :

1. la très grande variation de la conductivité thermique équivalente pour les très faibles fractions liquides dans le cas où deux grains sont en contact ; voir la figure 10 qui montre des courbes ayant une pente quasi-verticale à l'origine.
2. un phénomène d'hystérésis notable pour les grains séparés par un faible écartement, qui provient du fait que, pour un même volume, le ménisque liquide n'a pas la même forme lors de sa croissance et lors de sa décroissance (des séquences de formes sont montrées sur les figures 6 et 7 de la publication sus-citée).

Bien entendu, ces résultats sont théoriques et ne concernent qu'un système élémentaire à deux grains. On peut cependant supposer que les mêmes tendances se reproduisent à l'échelle d'une assemblée importante de grains, même si l'effet d'hystérésis sera atténué parce qu'une grande partie des grains sont en contact au lieu d'être séparés ; c'est d'ailleurs ce que montrent clairement les résultats expérimentaux de Chen (2008) ainsi que Smits *et al.* (2010), reproduits dans les figures 11a et 11b.

6 Prendre en compte les mécanismes se déroulant à une micro-échelle pour les incorporer dans les équations à une échelle plus grande est justement l'objet de l'homogénéisation dont les bases mathématiques sont désormais bien établies. Pour une approche rigoureuse, voir par exemple l'ouvrage de Auriault *et al.*, 2010.

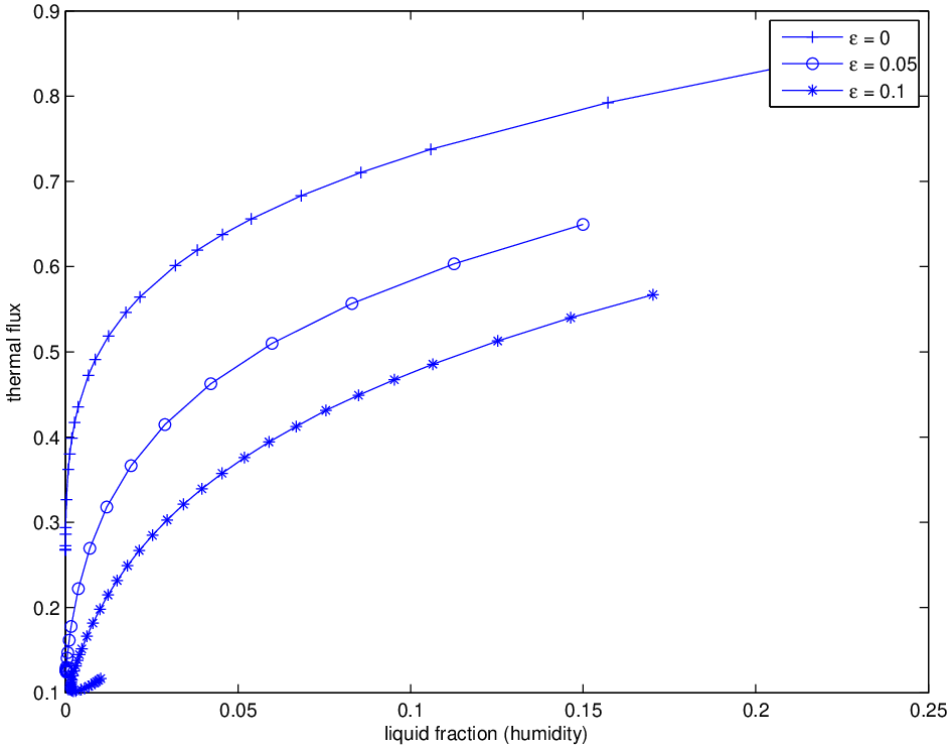


Fig 10 : Présence d'un ménisque liquide entre deux grains espacés par un écart ε.
Le calcul du flux thermique en fonction du volume liquide présente une variation très rapide à l'origine, montrant le rôle prépondérant d'une faible quantité d'eau liquide.
(reproduction de la fig. 12 de Canot et al. (JHT) 2016)

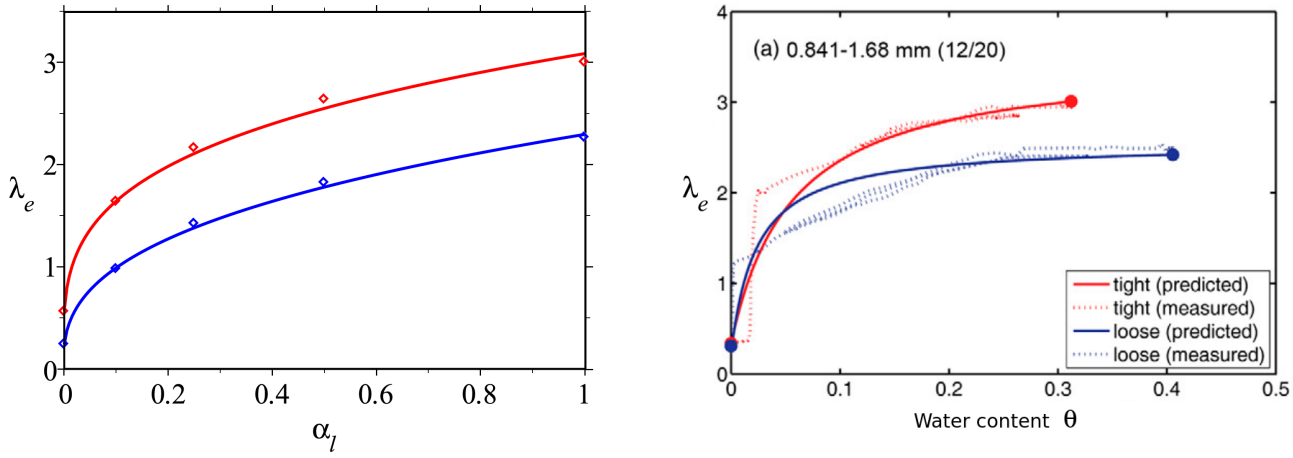


Fig 11 : À gauche, reproduction de la fig. 9 de Chen, 2008 ; à droite, reproduction de la fig. 7a de Smits *et al.*, 2010. Les deux figures illustrent la forte variation de la conductivité thermique pour une faible quantité d'eau liquide présente dans un milieu poreux. Ces résultats expérimentaux confirment donc le comportement montré sur notre figure 10 ci-dessus.

Dans le futur, on peut envisager une manière plus réaliste de simuler des systèmes élémentaires par bloc, de manière à reconstruire par des moyennes arithmétiques et harmoniques une valeur pour un espace 3D ; c'est la démarche proposée par Luikov *et al.* en 1968, reprise par Usowicz *et al.* (2006) et Dong *et al.* (2015). Ajoutons aussi que les propriétés équivalentes sont parfois calculées à l'aide de gros logiciels, pour des topologies de milieux réalistes, par simulation numérique directe : citons une étude récente concernant les nids de termites (Singh *et al.*, 2019) dans laquelle les auteurs estiment de cette manière la perméabilité d'une paroi poreuse, sa conductivité thermique et la diffusivité moléculaire

effective du CO_2 à travers cette paroi. Il est aussi envisageable de calculer la diffusivité moléculaire par random-walk, une abondante littérature existant à ce sujet (Trinh *et al.*, 2000 ; Qiu *et al.*, 2018).

2 - Caractérisation des empilements granulaires

Comme expliqué ci-dessus, la connaissance des caractéristiques statistiques des empilements de grains sphériques est nécessaire afin de pouvoir obtenir des estimations réalistes de la conductivité thermique effective. Deux types d'histogrammes sont requis : un correspondant aux écarts entre les grains ; un autre correspondant à l'inclinaison de l'angle entre deux grains proches par rapport à la verticale. Des statistiques ont été obtenues par des simulations de type DEM (Discrete Element Method) dans laquelle on calcule la dynamique de mise en équilibre de tous les grains, suivis individuellement. Ces simulations, concernant environ 50000 grains sphériques de même diamètre (ou à peu près) et répartis dans une boîte cubique, ont été fournies par Luc Oger de mon équipe. Ces simulations sont de deux sortes :

1. répartition isotrope des grains : en partant d'un répartition aléatoire de points, puis en faisant grossir ces points jusqu'à leur taille finale, tout en les déplaçant pour éviter les chevauchements.
2. répartition anisotrope des grains : on obtient cet empilement par pluviation, c'est-à-dire en faisant tomber les grains un par un par gravité dans la boîte.

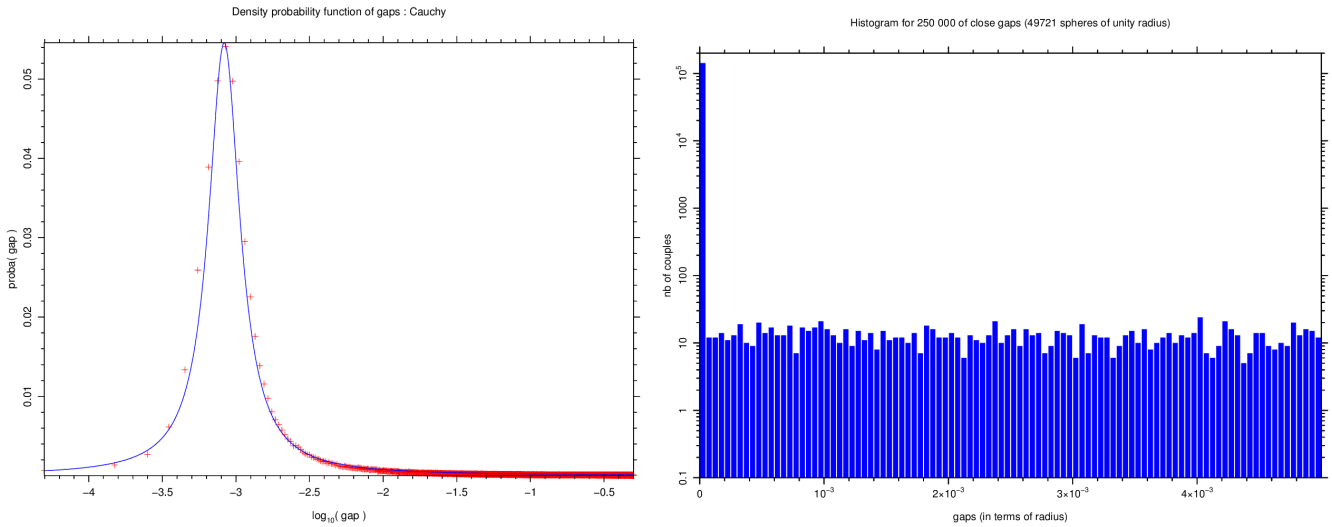


Fig. 12 : Histogrammes des écarts entre les grains proches dans deux types d'empilements.
À gauche : empilement isotrope, dont l'histogramme est modélisé par une loi log-Cauchy.
À droite : empilement anisotrope (gravitaire), dont l'histogramme peut être représenté par un Dirac superposé à une répartition uniforme.

En m'intéressant à l'histogramme des écarts entre deux grains proches, j'ai mis en valeur un résultat remarquable (voir la figure 12), à savoir que les histogrammes de ces deux types d'empilements peuvent se modéliser par des lois simples :

1. l'empilement isotrope des grains conduit à un histogramme des écarts correspondant à une loi de type log-Cauchy ;
2. l'empilement anisotrope des grains conduit à un histogramme des écarts correspondant à la superposition d'un Dirac à l'origine (une grande partie des grains est réellement en contact) et d'une répartition uniforme.

Chacun de ces empilements ne dépend que de deux paramètres ; l'utilisation de ces lois dans nos futurs modèles (EWGM, par ex.) simplifiera grandement les calculs, en évitant de recourir à des méthodes de type Monte-Carlo.

Ces modèles d'histogrammes ont été utilisés dans une étude de la cohésion d'un milieu granulaire humide, présentée par un poster à la conférence CMD26 à Gröningen (Canot & Delannay, 2016).

3 - Équilibre isotherme des ménisques liquides en régime pendulaire

Dans de nombreuses situations, il est utile de connaître la fraction d'eau liquide qui a condensé entre les grains, pour une humidité ambiante donnée. Par exemple lorsque Huang (1979) modélise le transfert d'humidité dans un matériau poreux soumis à un gradient de température, il utilise les équations de conservation de masse et d'énergie, la loi d'état pour le gaz, mais il ne prend pas en compte l'équilibre des ménisques : il lui manque une relation entre l'humidité de l'air et le degré de saturation – nous l'appellerons ici « loi de condensation capillaire ». Cette loi de condensation capillaire (appelée aussi condensation de Kelvin, cf. Bories, 1991) n'est qu'une partie de la courbe de rétention du milieu poreux, et en plus, exprimée avec une variable autre que le potentiel hydrique. D'ailleurs, elle est parfois exprimé en « succion » comme dans Mitarai & Nori (2006).

Cette loi dépend fortement de la manière dont les ménisques s'accrochent aux parois solides du matériaux poreux ; elle est généralement déterminée de manière expérimentale. Ici, nous faisons l'hypothèse que nous avons affaire à des grains sphériques, dont l'empilement aléatoire est donné par une des deux lois décrites dans la section précédente. En supposant le régime pendulaire, c'est-à-dire des ménisques liquides indépendants, on peut calculer leur forme exacte, comme dans Canot *et al.* (JHT) 2016. En écrivant l'équilibre à l'interface de chaque ménisque au moyen de l'équation de Kelvin (qui est une correction à la pression de saturation pour une surface liquide non plane), et en intégrant pour tenir compte de la répartition statistique des écarts entre les grains, on obtient les courbes de la figure 13.

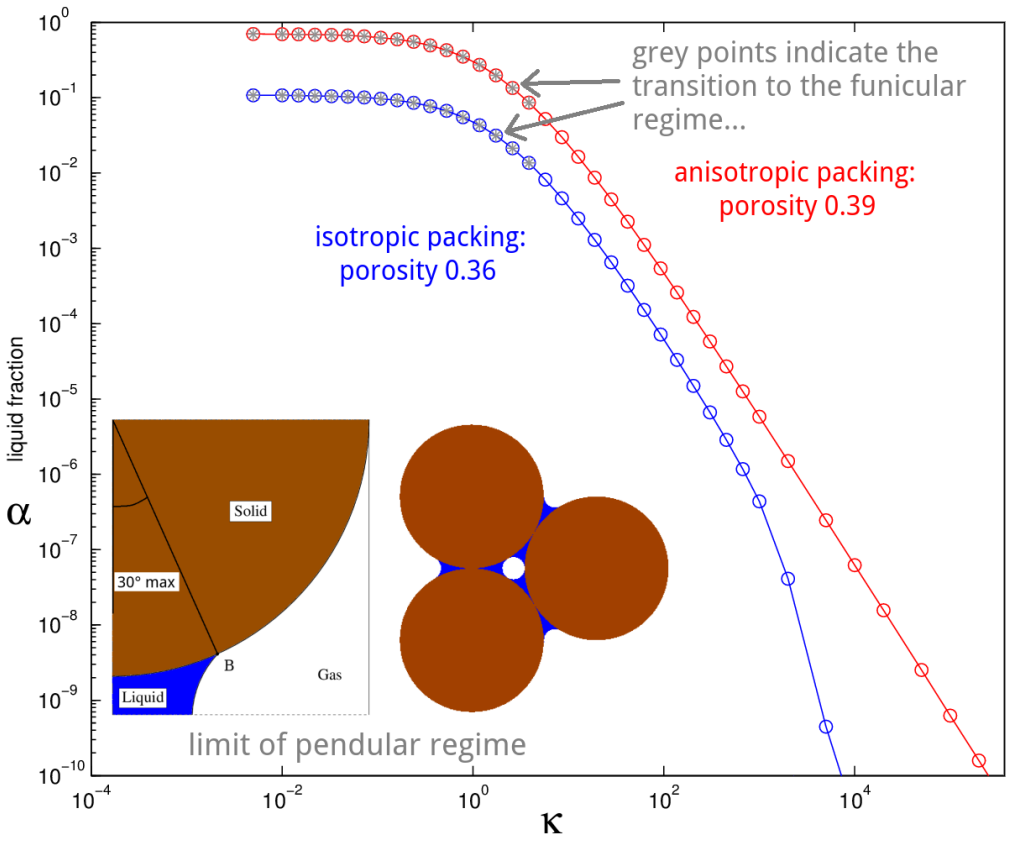


Fig. 13 : Lois de condensation capillaire dans un milieu granulaire idéal (grain sphérique), dont l'empilement aléatoire est caractérisé par un histogramme d'écarts (deux empilements différents : courbe bleue et courbe rouge). On notera que la limite haute du régime pendulaire procède ici d'un critère purement géométrique, et diffère sans doute pour un empilement réaliste.

La figure 13 est graduée en terme de courbure parce que l'équation de Kelvin associe une courbure κ à une valeur d'humidité relative (RH) :

$$RH = \frac{p_w}{p_{w,sat}(T)} = \exp\left(\frac{Vm_l \kappa \sigma(T)}{R T}\right)$$

où p_w est la pression partielle de la vapeur d'eau, T la température, $p_{w,sat}(T)$ la courbe de saturation pour l'eau, Vm_l son volume molaire, $\sigma(T)$ la tension superficielle de l'eau en présence d'air et R la constante des gaz parfait.

On a montré que les ménisques calculés sont de deux sortes (deux formes d'équilibre possible pour un même volume liquide), et d'autre part que certains sont stables alors que les autres sont instables. Le rôle du type d'empilement se voit nettement entre la courbe bleue et la courbe rouge. Même si ce diagramme est théorique, son utilité est de démontrer qu'on n'est pas obligé de recourir à des diagrammes empiriques issus d'expériences. En particulier, le modèle EWGM, présenté ci-après, utilise la partie droite de ces courbes qu'on peut assimiler asymptotiquement à des droites, donc à des lois de puissance entre la courbure κ et la fraction liquide α_l.

2-B : Le modèle EWGM

Le modèle EWGM (Evaporation in Wet Granular Media) traite du transfert de chaleur et de masse en milieu granulaire faiblement humide (régime pendulaire). Le modèle correspond à un modèle couplé pour deux composants (air et eau) et deux phases (vapeur d'eau et eau liquide). Aux trois mécanismes impliqués, transfert de chaleur, écoulement gazeux et diffusion moléculaire, correspondent les échelles de temps caractéristiques suivantes (on a pris une longueur de référence L = 10 cm, typique de l'épaisseur de nos échantillons) :

- pour le transfert de chaleur : $\tau_1 = \frac{L^2}{\alpha} \simeq 10^3 \ \ s.$
- pour l'écoulement gazeux : $\tau_2 = \frac{L^2}{\frac{K p}{\mu_g \phi}} \simeq 10^{-2} \ \ s.$
- pour la diffusion moléculaire : $\tau_3 = \frac{L^2}{D_{w,a}} \simeq 10 \ \ s.$

où α est la diffusivité thermique, K la perméabilité, p la pression, μ_g la viscosité du gaz, ϕ la porosité et $D_{w,a}$ la diffusivité moléculaire de la vapeur d'eau dans l'air. L'échelle de temps τ_2 est obtenue en combinant l'équation de conservation de la masse avec l'équation de Darcy et en linéarisant le résultat.

Le modèle EWGM est décrit en détail dans l'annexe 5. Après réduction, il reste cinq variables principales : température, pression et masse volumique du mélange gazeux, fraction liquide, masse volumique de la vapeur d'eau. Ces variables sont toutes fonctions de l'espace et du temps. Les équations retenues sont la conservation de la masse pour les deux composants, la conservation de l'énergie, les lois d'état, la loi de Darcy (qui remplace la conservation de QdM pour un écoulement dans un milieu poreux), l'équation de Kelvin (correction de la pression de saturation de l'eau quand l'interface n'est pas plane) et une loi de condensation capillaire, dont la définition a été donnée dans la section précédente. On suppose enfin que l'eau mouille les grains, donc possède un angle de contact liquide-solide faible ; la courbure des ménisques est négative et l'eau liquide reste présente longtemps autour des contacts entre les grains pendant la phase de séchage. Un des avantages de ce modèle est de pouvoir éviter ainsi le découpage de notre domaine d'étude en deux zones : zone sèche dans laquelle il n'existe que du gaz (air et vapeur d'eau) et une zone humide dans laquelle des ménisques liquides

existent entre les grains. Cet aspect est mentionné dans l'annexe 5, ce qui correspond ainsi à un modèle de type A (section 3, « Numerical strategy »).

Numériquement, après avoir appliqué la méthode des lignes au système PDAE, on obtient un système différentiel algébrique semi-discret. La discrétisation est effectuée en Volumes Finis. Dans les premiers résultats présentés dans la section suivante, la loi de condensation capillaire provient d'un modèle de ménisque « asymptotique toroïdal » – par la suite, on pourra prendre des formes exactes de ménisques, comme celles calculées dans Canot *et al.* (JHT), 2016, et utilisées plus haut dans la figure 10. Cette loi de condensation capillaire s'écrit (elle n'est pas mentionnée dans l'annexe 5) :

$$\kappa = \frac{-C_m}{R_0 \sqrt{\alpha_l}}$$

Le coefficient C_m dépend du type d'empilement des grains et provient, plus précisément, du nombre de contacts ou pseudo-contacts[7] entre les grains par unité de volume : on a par exemple $C_m = 3{,}32$ pour l'empilement hexagonal compact, $C_m = 2{,}72$ pour l'empilement anisotrope (figure 12, droite), $C_m = 0{,}86$ pour l'empilement isotrope (figure 12, gauche).

Notre modèle EWGM est suffisamment riche pour pouvoir traiter de nombreux problèmes : cas quasi-isotherme (par ex. mise à l'équilibre des ménisques au sein d'un milieu granulaire), chauffage et séchage de domaine avec des conditions limites variées, soufflage d'air sec ou humide à travers un échantillon, etc. Par ailleurs, les simulations effectuées à l'aide de ce modèle nous ont montré lors de nos nombreux essais que les conditions limites jouent un rôle important, ainsi que le couplage avec l'atmosphère qui est souvent ignoré (sauf par quelques auteurs, comme Bittelli *et al.*, 2008 ; Davarzani *et al.*, 2013).

2-C : Résultats numériques

Les résultats numériques présentés dans cette section ne sont pas encore publiés. Le modèle EWGM étant récent, il a subit quelques corrections. Pour l'instant, seule la configuration 1D est implémentée ; cela empêche malheureusement une confrontation avec nos propres expériences de chauffage/séchage réalisées dans le cadre du projet ArPhyMat et qui sont presque toutes en 2D-axisymétrique. La validation peut se faire à partir de solutions analytiques, de données expérimentales, ou enfin par comparaison avec les résultats d'autres codes similaires. Ces trois aspects sont abordés maintenant.

Concernant les solutions analytiques, il faut signaler d'emblée que celles traitant des problèmes de transfert de chaleur et de masse sont très rares. Mikhailov (1975), par exemple, propose une solution (compliquée, et je ne me suis pas aventuré à la tester), mais avec des conditions limites modifiées pour pouvoir aboutir à des calculs réalisables à l'époque de sa publication. D'une manière générale, il est difficile de se fier à ces solutions car elles sont fondées sur des systèmes d'équations approchées de type « Luikov, 1975 », qui linéarise complètement les différents termes des équations de conservation de masse et d'énergie. Les nombreux coefficients[8] qui apparaissent sont des termes normalement variables mais estimés constants ; l'introduction de cette approximation rend obligatoirement ces modèles moins prédictifs.

Concernant les données expérimentales, il n'est pas aisé de trouver des cas suffisamment bien documentés pour pouvoir effectuer une comparaison par simulation : il faut en effet connaître non seulement toutes les propriétés thermophysique du milieu poreux, mais aussi les conditions initiales et les conditions limites. Nous présentons tout d'abord une simulation qui essaye de se placer, de manière

7 au sens des voisins d'une tesselation de Voronoi.

8 voir par exemple les équations (25-26-27) de Luikov (1975) qui introduisent 9 coefficients.

plausible, dans des conditions les plus proches possibles de celles des expériences de Min & Emmons (1972), puis nous présenterons une comparaison avec une de nos propres expériences de séchage par infiltration d'air sec.

1 - Étude de Min & Emmons (1972)

Cette étude est à la fois expérimentale et numérique. L'expérience a consisté à chauffer de la poudre d'alumine (Al_2O_3, de référence Fisher A-591), préalablement humidifiée dans un état qui nous semble correspondre au régime pendulaire. La simulation numérique est fondée sur un modèle qui est proche du nôtre, sauf que la capillarité n'est pas prise en compte : l'eau liquide est présente dans les pores sans s'inquiéter de sa courbure d'interface qui, pourtant, conditionne l'humidité relative locale. Le diamètre moyen des grains n'est pas connu. Le site de Fisher présente aujourd'hui une poudre d'Alumine de même référence A-591 : https://www.fishersci.com/shop/products/aluminum-oxide-anhydrous-powder-certified-fisher-chemical-2/A591500) mais ne donne que la surface spécifique du produit : 0.4 m²/g. En supposant une compacité de 0.6, on arrive à un diamètre moyen de 36 µm. Par ailleurs, Gascoin *et al.* (2009) décrivent une poudre d'alumine ayant un diamètre moyen de 35 µm, mais avec un pic dans la distribution autour de 7 µm, ce qui signifierait que la population est bidisperse. Nous avons donc retenu la valeur de 36 µm pour le diamètre moyen des grains.

L'humidité initiale est de 15 % en poids, donc correspondant à une fraction liquide de 0.2, ce qui confirme le régime pendulaire. Le milieu humide d'épaisseur 5.4 cm est compacté, puis chauffé par le dessus par des éléments radiants (rayonnement infra-rouge) permettant d'atteindre une température de surface de 162 °C en une heure. De nombreux autres paramètres sont fournis dans la publication, mais certains manquent, comme la température initiale et ambiante, que nous avons prise égale à 20 °C. Nous avons enfin un doute sur la conductivité hydraulique (0.63 cm/s) qui a été choisie dans leur simulation, car en inversant la loi d'Hazen, on trouve des grains millimétriques !

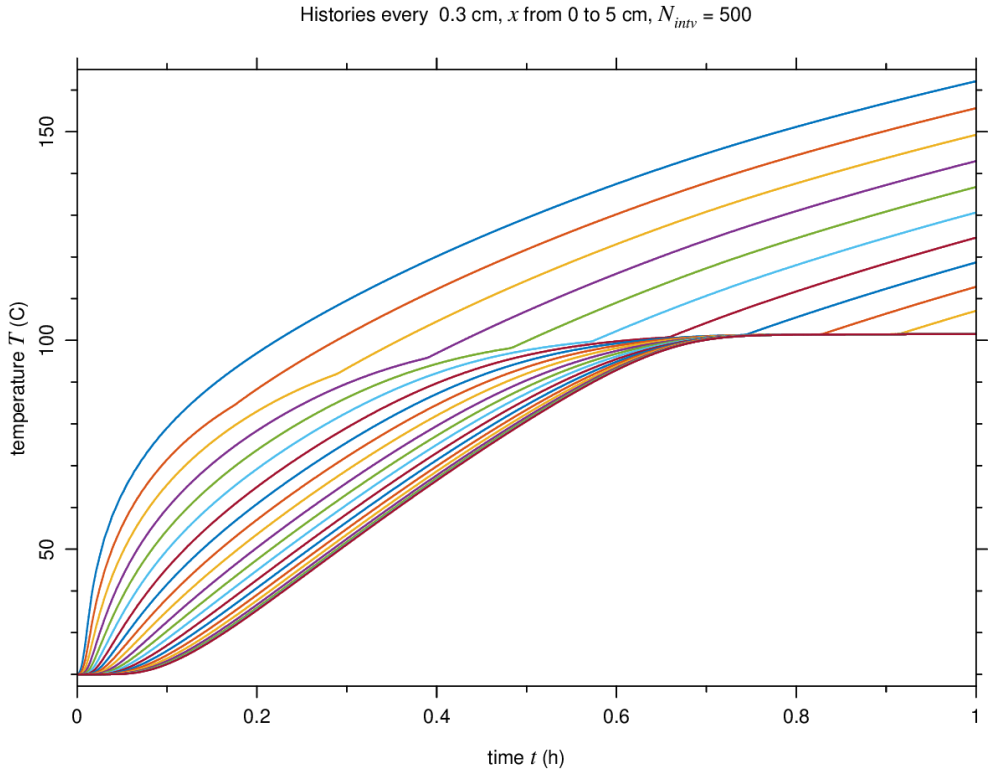


Fig. 14 : Thermogrammes du problème de Min & Emmons (1972) par le modèle EWGM. On note le palier de température à 100 °C ; ce palier est d'autant plus long que le point considéré est profond. Les premières courbes qui n'ont pas de palier présentent une cassure de pente à une température nettement en dessous de 100 °C, ce qui est typique d'une faible humidité.

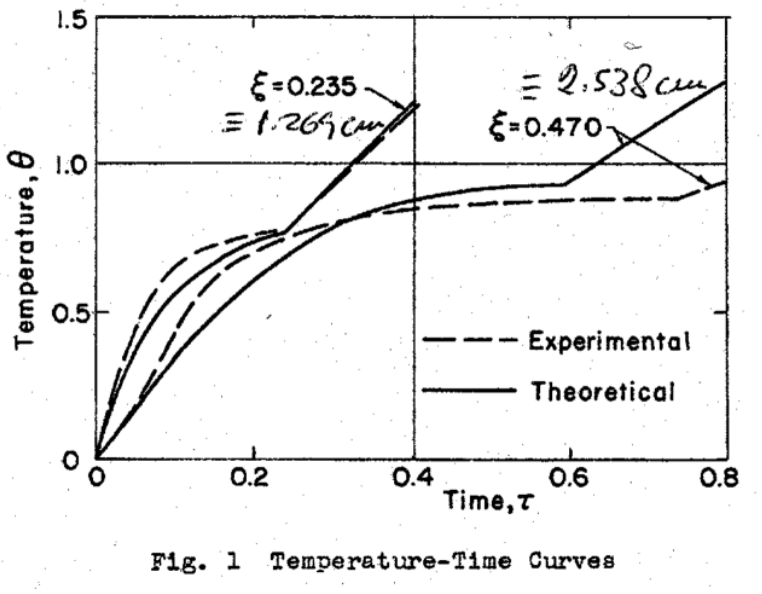


Fig. 1 Temperature-Time Curves

Fig. 15 : Figure extraite de Min & Emmons (1972) : équivalent de la figure 14 ci-dessus.
L'adimensionnalisation est telle que θ = 0 correspond à la température initiale,
et θ = 1 correspond à la température d'ébullition de l'eau.

Néanmoins, l'étude est suffisamment intéressante pour tenter de la reproduire avec le modèle EWGM. Les thermogrammes sont montrés dans les figures 14 et 15. La profondeur de notre domaine est de 5 cm, valeur légèrement différente de celle de la publication. Malgré la différence entre les deux figures, le comportement est similaire. On note cependant une curiosité dans les résultats numériques de Min & Emmons (1972) : il n'est pas possible qu'à une profondeur de z = 2.538 cm, la courbe de température monte linéairement dès le début du chauffage ! On pense qu'il s'agit d'une mauvaise interpolation pour les faibles temps…

La pression et la fraction liquide sont représentées toutes les deux sur la figure 16 ; la superposition de ces deux variables (pression en haut, saturation en bas) montre clairement l'origine de la condensation de la vapeur dans la zone plus froide : la vapeur créée au front d'humidité provoque une surpression interne qui pousse la vapeur de chaque côté du front ; une partie de la vapeur s'écoule à l'extérieur du milieu, tandis que l'autre partie condense dans la zone froide, enrichissant ainsi la fraction liquide au fur et à mesure. Sur les courbes d'humidité, on remarque ainsi une augmentation de la fraction liquide de 20 % ! Cet effet est connu et a été reporté dans nombre de publications, dont celle d'Udell en 1985. On en tire aussi la conclusion générale (qu'on peut trouver par un raisonnement simple) : sous l'influence d'un gradient de température, l'humidité se réfugie dans les zones froides (Huang, 1979). Les conséquences pratiques sont importantes : si on veut sécher complètement un échantillon de manière efficace, il vaut mieux le chauffer depuis l'intérieur. Un chauffage par l'extérieur conduit à conserver plus longtemps l'humidité à l'intérieur, ce qui est d'ailleurs souhaitable dans certains cas (cuisson des aliments dans un four, par ex. Ousegui *et al.*, 2010).

Les courbes correspondantes de Min & Emmons (1972) sont montrées sur la figure 17. Celle concernant l'humidité (exprimée dans des variables différentes) montre clairement l'augmentation de l'humidité dans la zone froide, provenant d'une condensation de la vapeur libérée au front d'évaporation. Cette augmentation est de 15 % dans la simulation de Min & Emmons (1972), alors qu'elle monte à 20 % dans la nôtre, comme mentionné plus haut.

Le front d'humidité qui devient raide très vite ne peut être expliqué que par les non linéarités du système d'équations. On se rappellera par exemple comment une équation différentielle très simple

comme celle de Burger (https://fr.wikipedia.org/wiki/Équation_de_Burgers) doit le raidissement rapide d'un de ses fronts au cours de l'évolution à la présence d'un seul terme non linéaire ! Pour cette raison, tous les modèles de transfert d'humidité qui utilisent les équations linéaires du modèle de Luikov (1975) seront ainsi incapables de faire apparaître de tels fronts : la plupart des termes conservés sont diffusifs, et nous savons que la diffusion à tendance à adoucir les irrégularités au lieu de les amplifier.

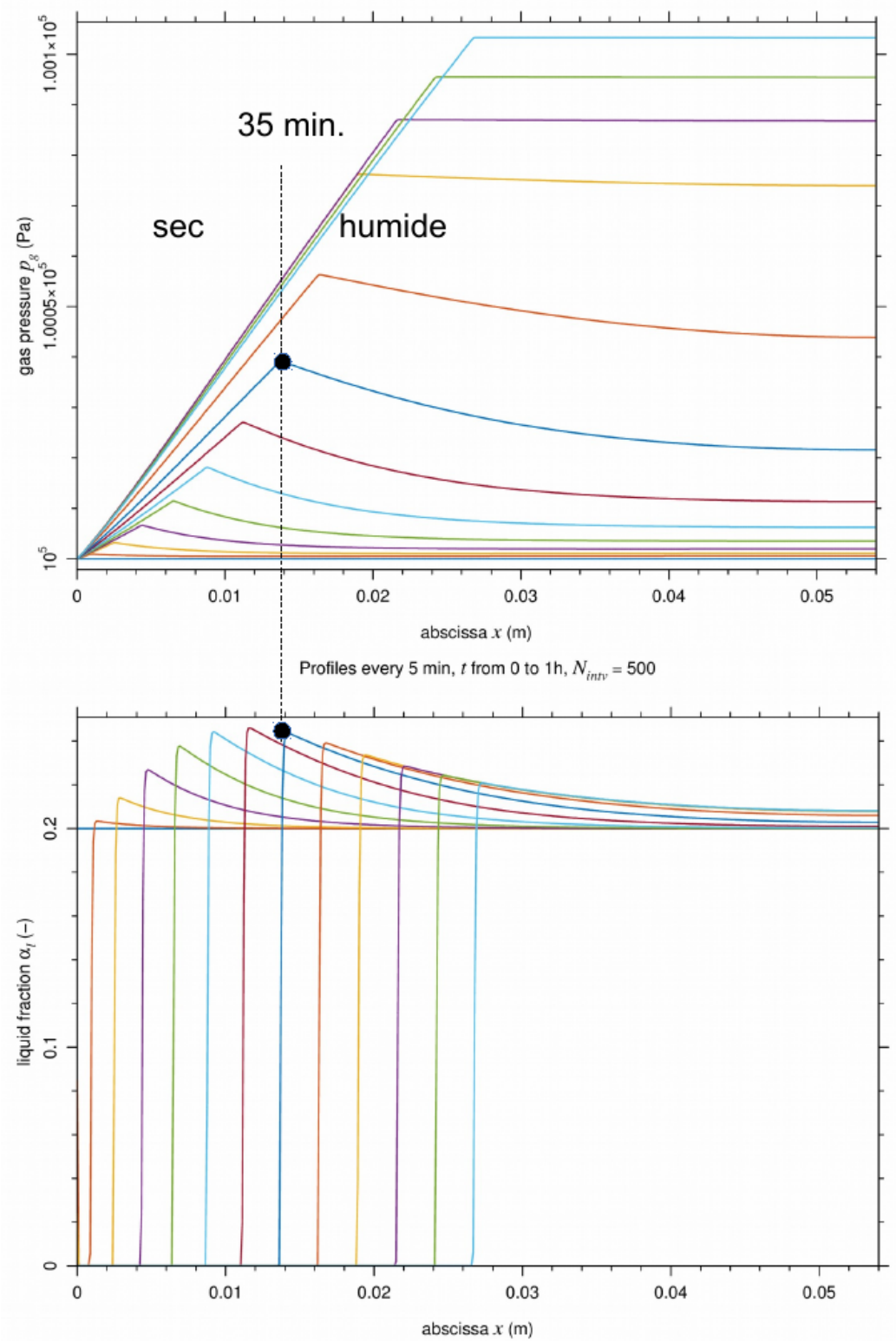


Fig. 16 : Pression (haut) et fraction liquide (bas) calculées par le modèle EWGM. Chaque profil est tracé toutes les 5 minutes, jusqu'à 1 heure. Le trait tracé à 35 min montre le partage entre la zone sèche (à gauche) et la zone humide (à droite). On notera les très faibles surpressions à l'intérieur de l'échantillon.

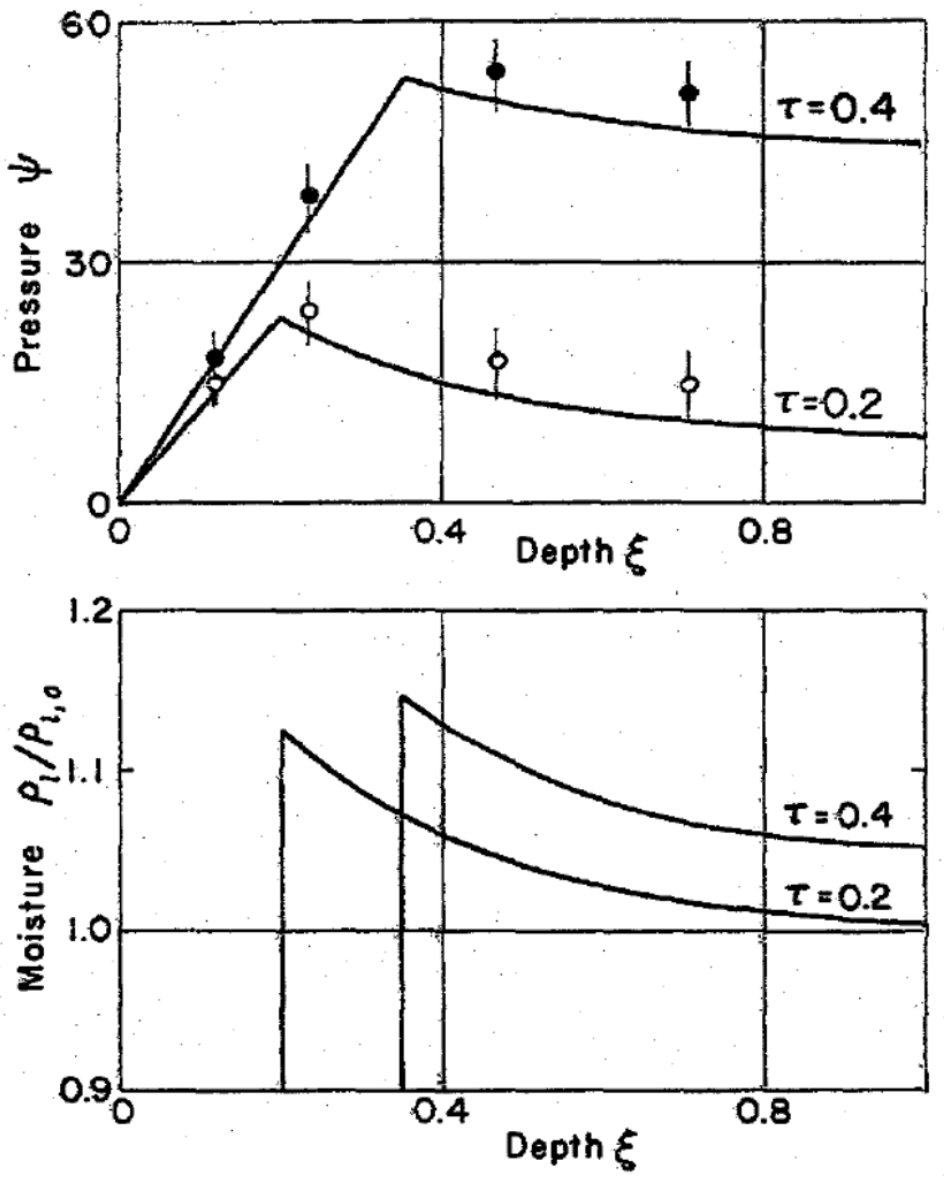


Fig. 17 : Figure extraite de Min & Emmons (1972) : équivalent de la figure 16 ci-dessus. La figure du bas (humidité) ne présente que les résultats numériques, aucune mesure n'ayant été faite.

2 - Séchage d'un milieu humide par injection d'air sec

On considère ici une expérience qui a été menée l'an dernier par un de mes stagiaires de Master 2 (N. Chapuis, 2018). Dans une cellule à parois de verre parallèles, on introduit du sable de Fontainebleau (à peu près monodisperse, ayant des grains de diamètre moyen 180 µm) rendu humide par mélange préalable avec de l'eau, et en quantité adéquate pour atteindre des saturations de 15 et 30 %. Une aiguille placée à la base de la cellule permet d'injecter de l'air sec à une pression pas trop grande pour éviter de soulever le sable. On a donc un écoulement de Darcy du gaz à travers un milieu poreux humide, en régime pendulaire. Le débit du gaz, supposé constant car contrôlé par un détendeur, a été déterminé en mesurant le volume d'air libéré dans une cuve d'eau pendant une minute. Au cours du séchage, le front d'humidité est bien visible car le sable change nettement de couleur quand il passe d'humide à sec (voir figure 18 ci-dessous).

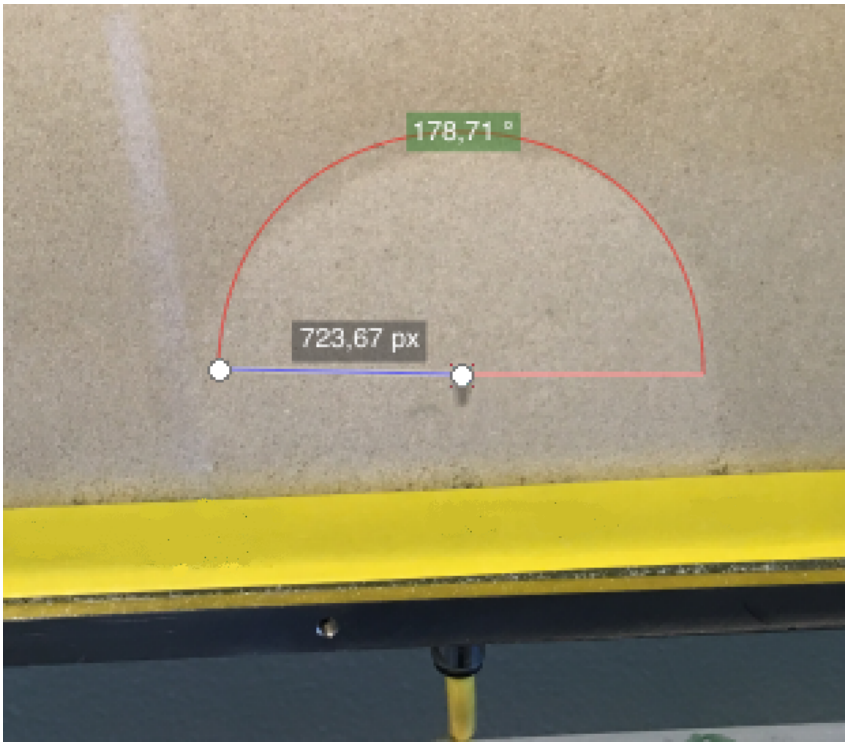


Fig. 18 : Cellule 2D contenant du sable humide, séché par injection d'air sec grâce à une aiguille placée à sa base. Le sable sec apparaît comme étant plus clair que le sable humide. La forme de cette zone séchée est à peu près circulaire, centrée autour du point d'injection. On peut donc estimer son rayon au cours du temps. (photo N. Chapuis)

On peut supposer qu'au bout d'un laps de temps assez court, le phénomène devienne stationnaire en ce qui concerne l'écoulement et que le rayon de la zone sèche s'accroisse d'une manière telle que l'air qui traverse le milieux poreux humide est complètement saturé (RH légèrement inférieur 100 %, à cause de l'effet des ménisque et de l'équation de Kelvin).

Si on avait un écoulement incompressible en 1D-radial, la vitesse de recul du front devrait être en inverse du rayon (par conservation du débit), donc avec une pente égale à –1 dans un diagramme log-log (voir figure 19 et 20). En fait, ce n'est pas le cas : on remarque que le front évolue avec une pente voisine de –0.5 (figure 20) ; c'est sans doute dû à l'écoulement du gaz qui est compressible. Il y a peut-être également un défaut d'homogénéité du sable, pouvant concerner aussi bien son humidité (il est très difficile de mélanger du sable avec une faible quantité d'eau) que le tassement pour chasser la présence éventuelle de poche d'air. De toute façon, les simulations montrent que le transitoire avant stationnarité est très long, car lié à des phénomènes thermiques lent à se mettre en place.

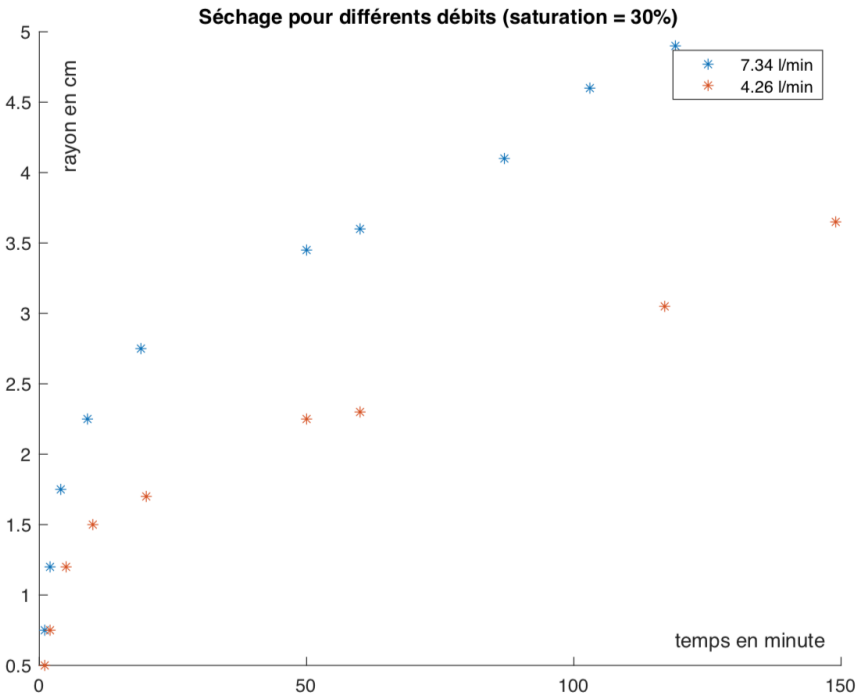


Fig. 19 : Évolution du rayon de la zone séchée en fonction du temps, pour deux expériences à débits différents, correspondant à des débits d'air sec différents.

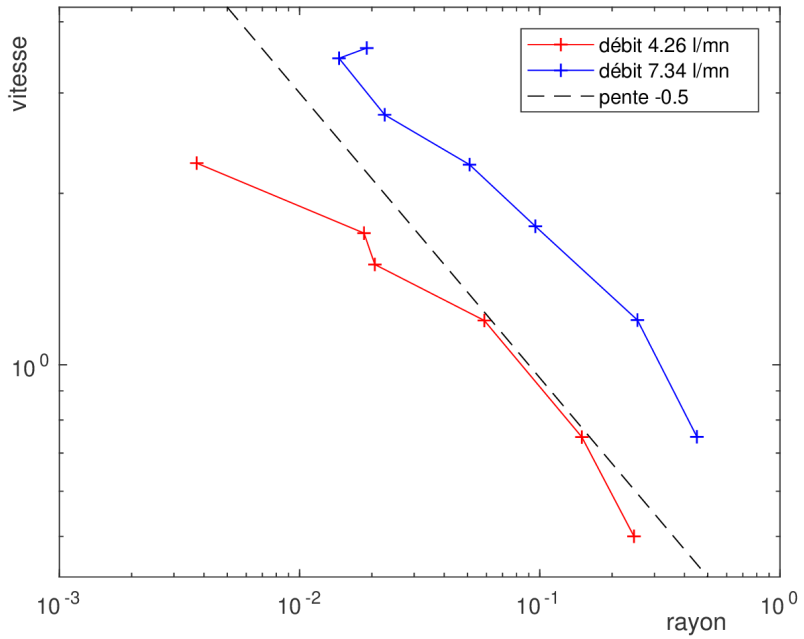


Fig. 20 : Vitesse d'expansion de la zone séchée en fonction du rayon. La droite en pointillés montre le comportement d'un phénomène en inverse de la racine carrée du rayon.

Le phénomène étant 1D-radial (puisqu'on considère le point d'injection de l'air comme ponctuel), j'ai utilisé le modèle EWGM, adapté cependant pour la circonstance à la même configuration géométrique, afin de simuler numériquement ces expériences. On fait commencer le domaine radial à r = 1 cm, pour éviter la singularité à l'origine. On a enfin choisi des conditions limites en pression : une pression

ajustable au voisinage de l'orifice d'entrée, et la pression atmosphérique imposée en sortie. N'ayant pas de mesure précise de la pression d'injection, plusieurs simulations ont été nécessaires pour estimer cette dernière par approximations successives. Le meilleur résultat est reporté sur la figure 21.

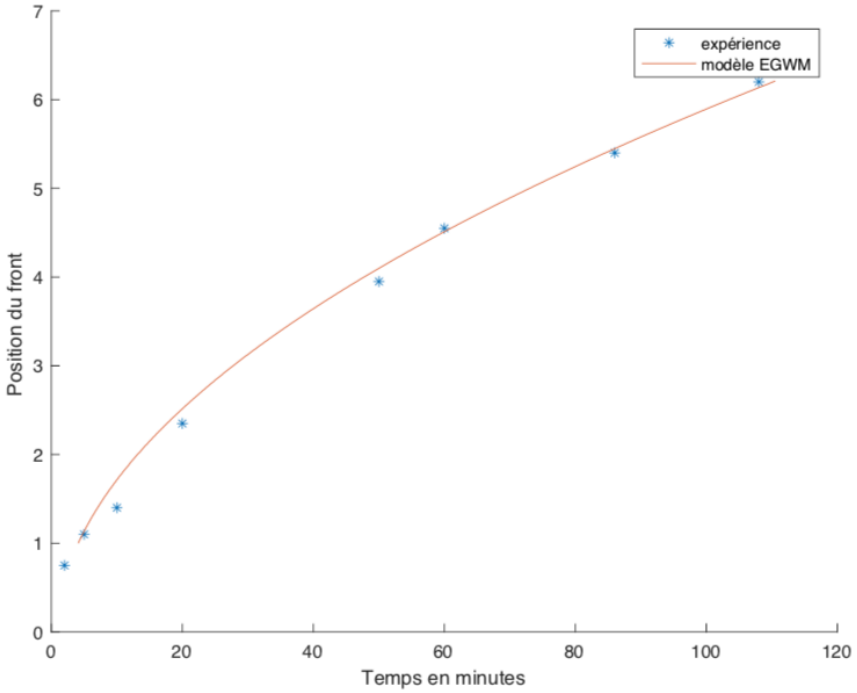


Fig. 21 : Comparaison entre une expérience de séchage par soufflage d'air sec, et le modèle EWGM On s'est limité à représenter la position du front d'humidité.

Les vitesses simulées du gaz sont de l'ordre de 7 mm/s au maximum, cette valeur étant atteinte évidemment proche du point d'injection, là où le rayon est le plus faible. Les courbes de températures (figures 22 et 23) montrent par ailleurs que le phénomène ne reste pas strictement isotherme. Il y a une élévation de la température jusqu'au front d'évaporation, cette élévation reste faible et de l'ordre de 1 °C. Nous ne nous expliquons pas cette élévation de température au front d'évaporation : cette dernière étant endothermique, il devrait y avoir au contraire une baisse de température… Après le front, la température diminue progressivement jusqu'à la sortie du domaine, ce qui est compatible avec un phénomène de détente du gaz qui s'accompagne toujours d'un refroidissement.

En fait, la comparaison a été effectuée avec le modèle EWGM surtout pour montrer son adaptabilité à des problèmes variés : ici, la thermique n'est pas dominante, et c'est l'écoulement du gaz à l'intérieur du milieu poreux qui est important.

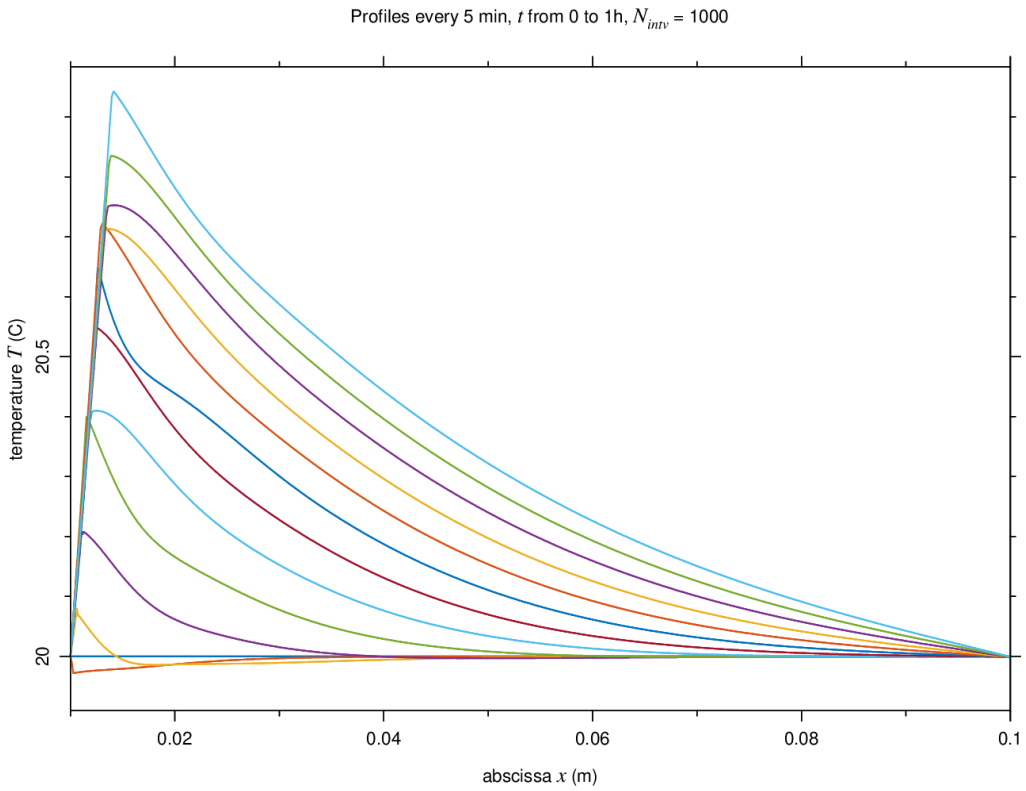


Fig. 22 : Simulation par le modèle EWGM du séchage d'un milieu granulaire humide par injection d'air sec. On montre ici la première heure du phénomène (les courbes sont tracées toutes les 5 minutes).

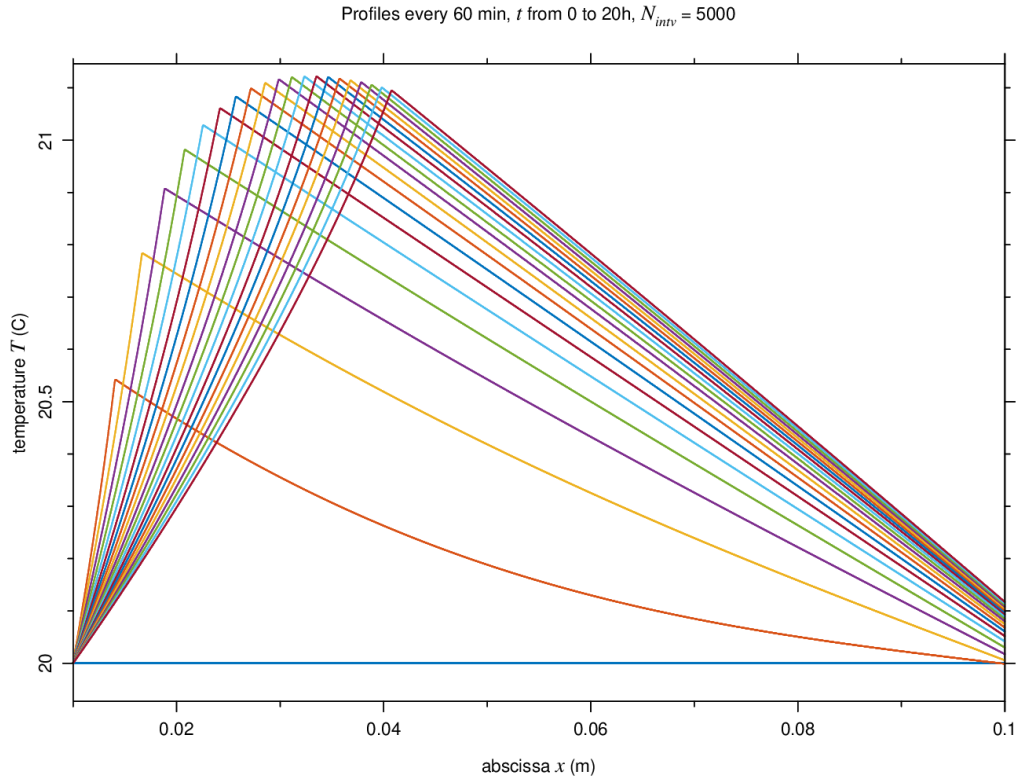


Fig. 23 : Même cas que la figure 22, mais le calcul a été prolongé pendant 20 h (intervalle entre les courbes : 60 min). La stationnarité du phénomène est longue à se mettre en place.

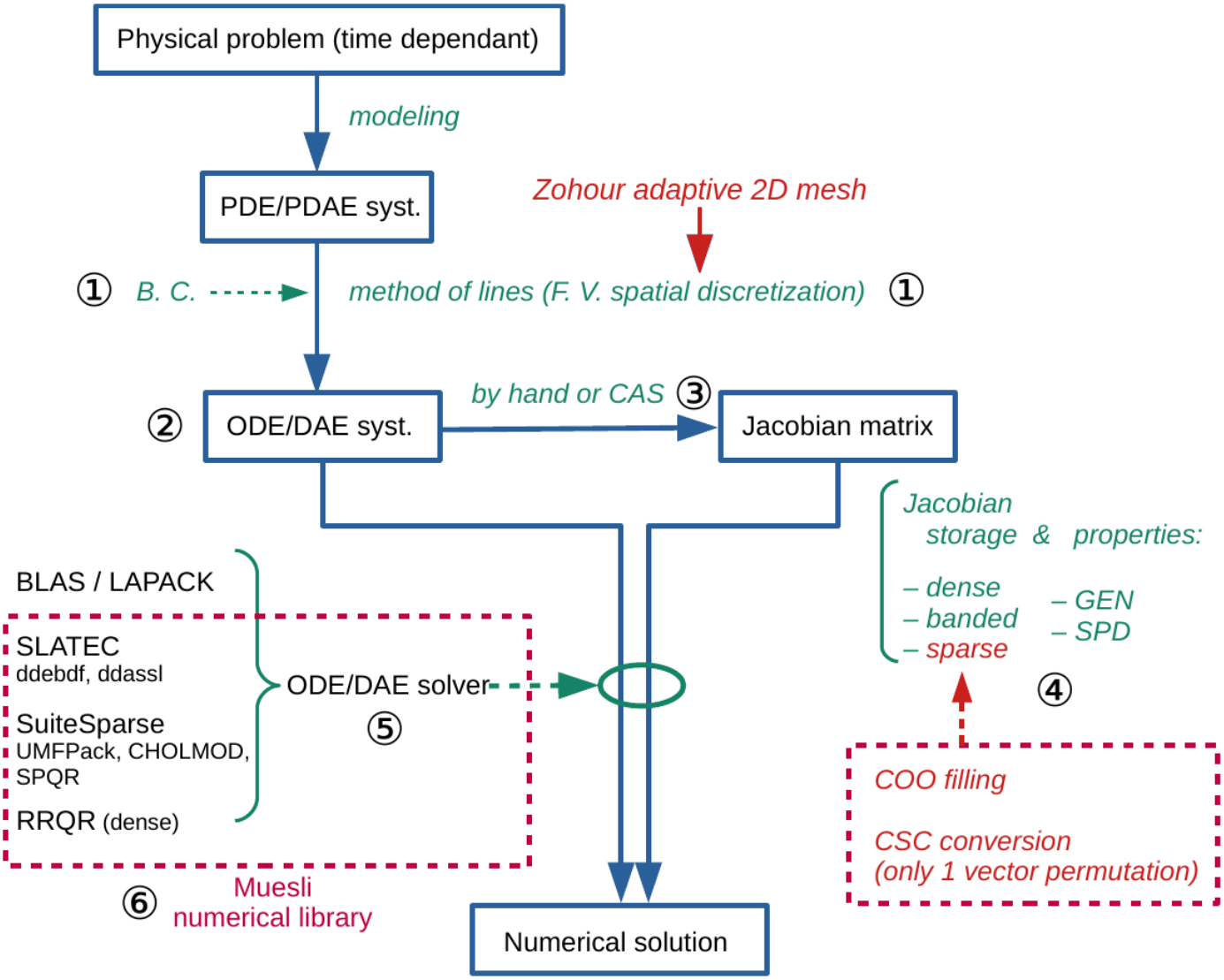


Fig. 24 – Séquence typique de traitement numérique d'un problème physique. Ce diagramme met en valeur les différences méthodes et outils dont la plupart sont décrits dans ce chapitre aux numéros correspondants.

Pour tous les systèmes physiques étudiés dans le projet ArPhyMat, nous avons fait le choix de suivre la même procédure. Cette dernière est présentée sous forme simplifiée dans le diagramme de la figure 24 ; ses principales étapes sont détaillées ci-après, en reprenant les mêmes numéros de paragraphe que ceux utilisés dans la figure. L'avantage de se restreindre à la même procédure est la maîtrise approfondie des différents outils et méthodes numériques requis. Au fil des ans et des expériences (heureuses ou malheureuses), j'ai été amené à faire des choix, et désormais je bénéficie d'un environnement numérique performant qui me permet d'étudier par la simulation un nouveau modèle physique, de le mettre au point rapidement puis de l'exploiter sur un simple portable de puissance moyenne (je parle des années 2010-2015, typiquement). Bien sûr, on trouve aujourd'hui d'autres environnements de prototypage — pensons à Matlab, concernant les méta-langages, mais aussi à Sundials (https://computation.llnl.gov/projects/sundials) qui est devenu au fil des ans de plus en plus puissant et polyvalent ; ou encore les grosses plateformes comme COMSOL multiphysique ou SALOMÉ (https://www.salome-platform.org/) — mais parfois la prise en main et la maîtrise de ces outils est longue et difficile.

1. La méthode des lignes consiste à discrétiser le système PDE (ou PDAE) uniquement selon l'espace. Il reste donc après cette opération un système différentiel (ou algébro-différentiel) dépendant du temps.
   On utilise systématiquement une discrétisation de type Volumes Finis. La discrétisation spatiale par Volumes Finis permet une conservation exacte des quantités en jeu, surtout si on a écrit l'équation PDE de départ tout en divergence. Pour un terme de divergence, le schéma est conservatif de manière exacte si on évalue les propriétés aux interfaces des mailles par la moyenne harmonique (et non la moyenne arithmétique usuelle).

2. Les systèmes ODE/DAE obtenus à cette étape sont appelés systèmes différentiels semi-discrets puisqu'il résultent d'une discrétisation.
   Système ODE : c'est un système explicite. Il suffit de coder la routine donnant les dérivées de chaque variable. Des essais sur l'équation de la chaleur ont montré qu'il fallait prendre l'option 'schéma BDF' car on a un système raide. Comme il s'agit d'un schéma implicite, la connaissance de la jacobienne du système est nécessaire.
   Système DAE : c'est un système différentiel algébrique ; certaines équations peuvent être purement algébrique, c'est à dire ne pas comporter de dérivée par rapport au temps. On code alors le résidu (qui doit être nul). En fait, c'est la même chose pour un système ODE implicite : s'il est trop compliqué d'extraire une dérivée, alors on cherche à annuler un résidu. Dans ce cas là, le schéma est BDF donc implicite, et il faut aussi fournir la jacobienne. Un système DAE doit avoir des conditions initiales consistantes (CIC), c'est-à-dire qui vérifient l'ensemble des équations. On peut relâcher certaines composantes et faire calculer cet état initial par l'intégrateur DAE, s'il en est capable. Dans Muesli (Annexe 2), les CIC sont résolues de manière exacte par QR (dense, bande ou creux). Cependant, cette manière de faire peut être coûteuse ; on peut aussi parfois choisir des conditions limites telles que les dérivées temporelles sont toutes nulles au démarrage.

3. La matrice jacobienne (généralisée dans le cas d'un système DAE : cf. Annexe 2, haut de la page 401) peut être obtenue de trois façon différentes :

   a) par différences finies : c'est le solveur DAE qui l'effectue en interne. C'est un calcul coûteux et peu précis ; pour ces raisons on préfère les méthodes suivantes. On réserve donc cette possibilité lorsque la taille du système est faible (typiquement, quelques centaines d'inconnues). Cela permet d'observer le comportement du système avant de coder explicitement la jacobienne.

   b) à la main, en dérivant les différentes fonctions F_i par rapport à chacune des variables inconnues du système. Les termes calculés sont exacts mais le procédé n'est pas exempt d'erreurs, lors de la différentiation elle-même, ou lors de la retranscription dans le code source.

   c) de manière automatique par le calcul formel (CAS = Computer Algebra System, logiciels comme Maple ou Maxima). L'avantage est un calcul exact, retranscrit sans erreur (grâce à l'inclusion d'un code généré par le logiciel) ; de plus, le code est très compact car on peut générer du code optimisé. Pour plus de détails, voir l'annexe 3.

4. En général, la matrice jacobienne est très peu dense. Suivant la dimension du problème traité, elle peut être tridiagonale compacte (cas 1D) ou pentadiagonale élargie (2D-axi) ; si on souhaite la plus grande performance, il faut alors utiliser le format creux.
   Également, savoir si la matrice jacobienne est de structure générale ou SPD (symétrique et définie positive) permet d'accroître encore la performance, en utilisant un algorithme de

factorisation adapté à la structure : LU ou Cholesky. Dans le cas d'une discrétisation par Volumes Finis, la jacobienne est SPD si les deux conditions suivantes sont réalisées :

a) schéma exactement conservatif, et l'écriture qui en résulte doit être symétrique par rapport aux interfaces entre deux mailles et les nœuds impliqués ;
b) conditions limites (généralement de type Dirichlet ou Neumann) insérées dans l'équation de conservation des mailles d'extrémité, et non pas traitées à part.

Jacobienne creuse : la routine est appelée un grand nombre de fois par le solveur. Il faut alors optimiser les initialisations. Il est facile à l'utilisateur de définir une fois pour toute la structure de la matrice creuse (qui reste constante) au format COO (coordinates, c-à-d *i-j-val*), de convertir une seule fois la structure COO en structure CSC (Compact Sparse Column), et sauvegarder le vecteur permutation qui permet de passer du vecteur des valeurs COO au vecteur des valeurs CSC. Ainsi, à chaque appel, le surcoût n'est que celui résultant de l'application d'une permutation à un vecteur, cette permutation étant calculée une fois pour toute.
De même, le solveur n'effectue qu'une seule fois sa factorisation symbolique, et plusieurs fois sa factorisation numérique (uniquement quand la jacobienne est mise à jour).

5. Les solveurs ODE/DAE de SLATEC (respectivement le solveur `ddebdf` du sous-package DEPAC, et le solveur `ddassl` du sous-package DASSL) sont anciens mais robustes et éprouvés. Ce sont les mêmes algorithmes qui sont encore utilisés aujourd'hui dans des solveurs modernes comme SunDials. Ce sont des solveurs adaptatifs, en ce sens où ils sont à pas de temps et ordre variables : l'utilisateur est certain qu'au cours de l'intégration du système différentiel, l'erreur sur la solution ne dépasse pas une tolérance donnée à l'avance.
   `ddebdf` et `ddassl` ont toutes deux été modifiées pour améliorer la résolution des systèmes linéaires utilisant la jacobienne :
   a) la jacobienne peut être stockée dans des formats autres que dense (utilisation d'un tableau de taille N^2) : soit bande (format Lapack), soit creux (format CSC, Compact Sparse Column). Le solveur linéaire appelé dépend alors du format de la jacobienne (dense et bande : utilisation des routines de Lapack ; creux : utilisation des routines de SuiteSparse).
   b) l'utilisateur peut spécifier la propriété de la matrice jacobienne : générale ou SPD (symétrique et définie positive) ; dans ce dernier cas, la méthode de Cholesky employée, sûre et robuste, permet un gain de l'ordre d'un facteur 2, quel que soit le format.

6. La bibliothèque Muesli englobe en fait de nombreuses routines de SLATEC (une ancienne bibliothèque de calcul numérique), SuiteSparse (algèbre linéaire pour des matrices creuses, mettant en œuvre des méthodes directes) et RRQR (Rank Revealing QR, ACM 782).
   Muesli fonctionne en deux modes : DEBUG ou OPTIM. Dans le premier cas, des vérifications systématiques sont effectuées sur la consistance du système physique à résoudre :
   a) non présence de *NaN*s retournés par 'deriv', 'resid' ou' jac'.
   b) le conditionnement de la jacobienne permet de détecter des équations redondantes, ou des conditions limites non adaptées (donner un exemple de système DAE) ;
   c) la jacobienne fournie par l'utilisateur est vérifiée par comparaison avec une estimation par différences finies.

   En complément de la présentation de ma bibliothèque dans l'annexe 2, on peut ajouter que les équations et les variables peuvent être nommées. En cas d'erreur sur la jacobienne, Muesli précise à l'utilisateur quelle équation est fausse ou non initialisée, ou encore quel terme de la jacobienne est faux, en précisant le nom de l'équation et de la variable.
   Muesli peut être installée sous Linux (préférentiellement), mais aussi sous Windows ou sous MacOS. Récemment des paquets sont fournis pour que l'installation soit plus facile (cela évite d'avoir à compiler toute la bibliothèque après une phase de configuration dépendant du système d'exploitation utilisé).

A priori l'intégrateur DDASSL ne traite que les DAE d'index inférieur ou égal à 2, et c'est le cas pour toutes mes équations dérivant des équations de conservation de la masse ou de l'énergie.

Performances

Les performances de l'approche utilisée sont montrées dans les tableaux suivants pour trois applications différentes. Dans tous les cas, la tolérance relative prescrite pour le solveur ODE/DAE est de 10^{-6}. Les temps CPU présentés dans les tables qui suivent ont été mesurés en utilisant le même ordinateur (processeur Intel Core i5-6300U @ 2.40 GHz), le même compilateur (GNU GCC family, version 8.3.0) avec les mêmes options de compilations, et enfin la même version de Muesli (donc les mêmes solveurs numériques).

1e application – Changement de phase sans dilatation

La première application concerne le changement de phase seul : on chauffe de manière intense l'eau présente dans un milieu saturé (méthode AHC), en configuration 2D-axisymétrique. Le modèle est celui présenté dans la publication (Muhieddine *et al.*, 2011, annexe 7). Comme les équations sont relativement simples, on peut envisager de calculer la jacobienne du système à la main, en simplifiant certains termes… Le domaine de calcul correspond à une zone cylindrique circulaire de 30 cm de rayon et autant en profondeur. Le chauffage s'effectue à température constante égale à 600 °C, et elle s'applique sur un disque de 15 cm de rayon, centré dans le domaine. La durée du chauffage est de 12 heures ; le chauffage est suffisamment intense pour vaporiser rapidement une partie de l'eau juste en dessous de la surface chauffée. Les résultats de simulation sont reportés dans la figure 25.

a) Matrice jacobienne calculée par Différences Finies – stockage dense					
nr (nb de nœuds suivant *r*)	**nz** (nb de nœuds suivant *z*)	**N** (nb total de nœuds ≃ nb d'inconnues)	**Nb eval. jac.**	**Nb solve** (≃ nb de pas de temps)	**temps CPU (s)**
25	25	625	22	256	1,16
50	50	2 500	25	647	47,8
75	75	5 625	43	921	920
b) Matrice jacobienne calculée à la main (approximation) – stockage creux					
nr	**nz**	**N**	**Nb eval. jac.**	**Nb solve**	**temps CPU (s)**
100	100	10 000	59	1 335	3,61
200	200	40 000	165	2 769	45,9
400	400	160 000	452	6 020	727
600	600	360 000	856	9 707	3 650
c) Matrice jacobienne calculée par Maple (exact) – stockage creux					
nr	**nz**	**N**	**Nb eval. jac.**	**Nb solve**	**temps CPU (s)**
100	100	10 000	56	1 223	3,84
200	200	40 000	157	2 402	45,5
400	400	160 000	443	4 994	726
600	600	360 000	801	7 846	3 420

Table 1 : Coûts de simulation d'un problème thermique 2D-axi sans couplage. La résolution du système ODE nécessite une matrice jacobienne dont l'estimation par différences finies est non seulement très coûteuse, mais ne permet pas d'obtenir facilement sa structure creuse.

La table 1 présente les coûts de différentes variantes. La plus simple à mettre en œuvre est celle où on laisse le solveur calculer la jacobienne par différences finies (a). Ce cas est le moins performant car le coût est élevé, en O(N^3) où N est le nombre total d'inconnues. En revanche, quand la jacobienne est calculée à la main de manière approximative (b), la structure creuse peut être détectée et un solveur linéaire approprié donne un coût de l'intégration en O(N^2), nettement plus avantageux. Dans le dernier cas (c), la jacobienne est déterminée de manière exacte par un logiciel de calcul formel (CAS, ici Maple) : le calcul est un peu plus stable car le nombre d'évaluation de la jacobienne est plus faible ; le gain global est minime, au mieux de 5 ou 6 %, mais l'approche est plus robuste (pour certaines applications l'emploi d'une jacobienne approximée peut conduire à un arrêt total de l'intégration, suite à une instabilité interne). L'intégration est plus difficile au début, comme le montre l'évolution du pas de temps utilisé par le solveur sur la figure 25-d : il s'agit en effet d'un choc thermique initial pour lequel les gradients sont beaucoup plus importants aux temps courts qu'aux temps longs.

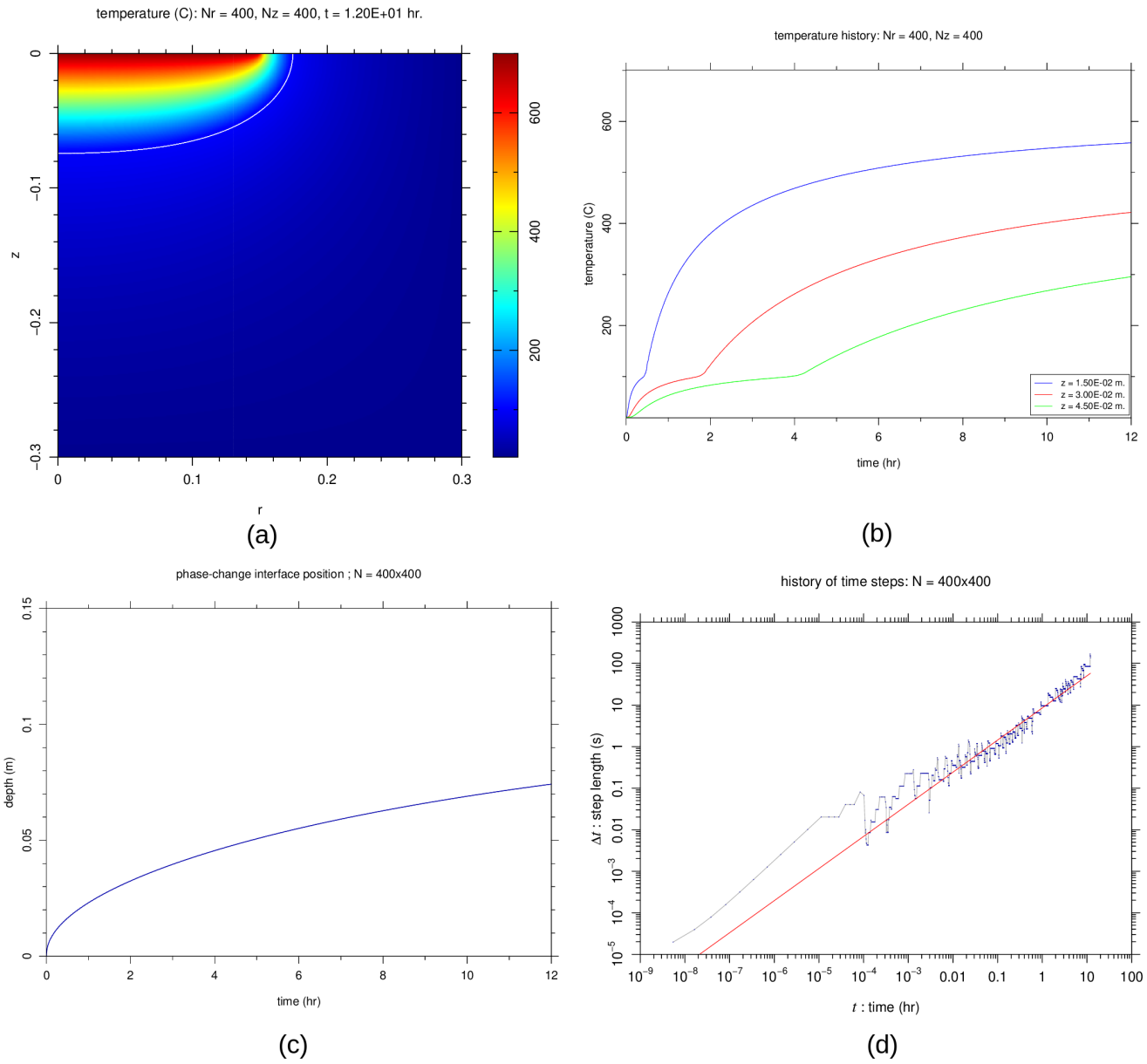


Fig. 25 : Vaporisation de l'eau présente dans un milieu saturé lors du chauffage intense par le dessus : (a) champ de température à la fin de la simulation ; (b) thermogrammes en trois profondeurs distinctes ; (c) position de l'interface liquide-vapeur au cours du temps ; (d) historique des pas de temps utilisés par le solveur automatique ODE.

2e application – Couplage entre thermique et écoulement fluide

La deuxième application concerne le couplage entre la thermique et l'écoulement, toujours en configuration 2D-axisymétrique. La vaporisation rapide de l'eau contenue dans le milieu conduit à une surpression interne créant à son tour l'écoulement de la vapeur hors du milieu poreux. Le modèle est celui présenté dans la publication (Muhieddine *et al.*, 2011).

Le domaine de calcul correspond à une zone cylindrique circulaire de 30 cm de rayon et 50 cm de profondeur. Le chauffage s'effectue à température constante égale à 600 °C, et elle s'applique sur un disque de 15 cm de rayon, centré dans le domaine. La durée du chauffage est de 24 heures ; le chauffage est suffisamment intense pour vaporiser rapidement une partie de l'eau juste en dessous de la surface chauffée. Les résultats de simulation sont reportés dans la figure 26.

a) Matrice jacobienne calculée par Différences Finies – CIC approchée – stockage dense				
nr (nb de nœuds suivant *r*)	**nz** (nb de nœuds suivant *z*)	**N** (nb total de nœuds ≃ nb d'inconnues)	**Initialisation (s)** (calcul de conditions initiales consistantes)	**temps CPU (s)** (total)
20	40	800	0,18	1,83
30	60	1 800	1,50	14,5
40	80	3 200	7,49	76,4
b) Matrice jacobienne calculée par Maple (exact) – CIC exactes – stockage dense				
nr	**nz**	**N**	**Initialisation (s)**	**temps CPU (s)**
20	40	800	0,89	1,75
30	60	1 800	11,4	20,8
40	80	3 200	66,1	140
c) Matrice jacobienne calculée par Maple (exact) – CIC exactes – stockage creux				
nr	**nz**	**N**	**Initialisation (s)**	**temps CPU (s)**
30	60	1 800	0,027	0,21
40	80	3 200	0,038	0,44
80	160	12 800	0,063	3,15
150	300	45 000	0,12	29,2
300	600	180 000	0,43	395

Table 2 : Coûts de simulation d'un problème thermique 2D-axi avec couplage de l'écoulement. La particularité de la résolution d'un système différentiel-algébrique (DAE) est qu'il nécessite le calcul de conditions initiales consistantes. Un calcul approché des CIC (a) est économique mais pas toujours réalisable ; l'algorithme de Matlab (utilisé en b et c) utilise une factorisation QR qui peut alourdir considérablement le coût total de l'intégration si on reste en algèbre linéaire dense.

La table 2 présente les coûts de différentes variantes. Tout d'abord, on retrouve certaines caractéristiques de la table 1, à savoir que le coût de l'intégration est à peu près en $O(N^3)$ pour le cas où on emploie une matrice jacobienne dense et en $O(N^2)$ si on utilise le stockage creux. La nouveauté essentielle ici est la nécessité d'employer un solveur différentiel-algébrique (DAE) parce que la structure des deux équations (thermique et écoulement) ne permet pas facilement d'écrire le système

sous une forme explicite ; le système différentiel implicite est habituellement résolu par un solveur DAE. Une telle approche requiert toutefois des conditions initiales consistantes, c'est-à-dire vérifiant le système implicite à $t = 0$; elle est donc plus contraignante que la résolution d'un système ODE ordinaire qui accepte des conditions initiales quelconques. Nous avons implémenté l'algorithme CIC de Matlab, permettant de calculer ces conditions initiales consistantes de manière souple (on peut relâcher certaines composantes) mais qui nécessite une factorisation QR. Cette dernière est coûteuse dans le cas des matrices denses.

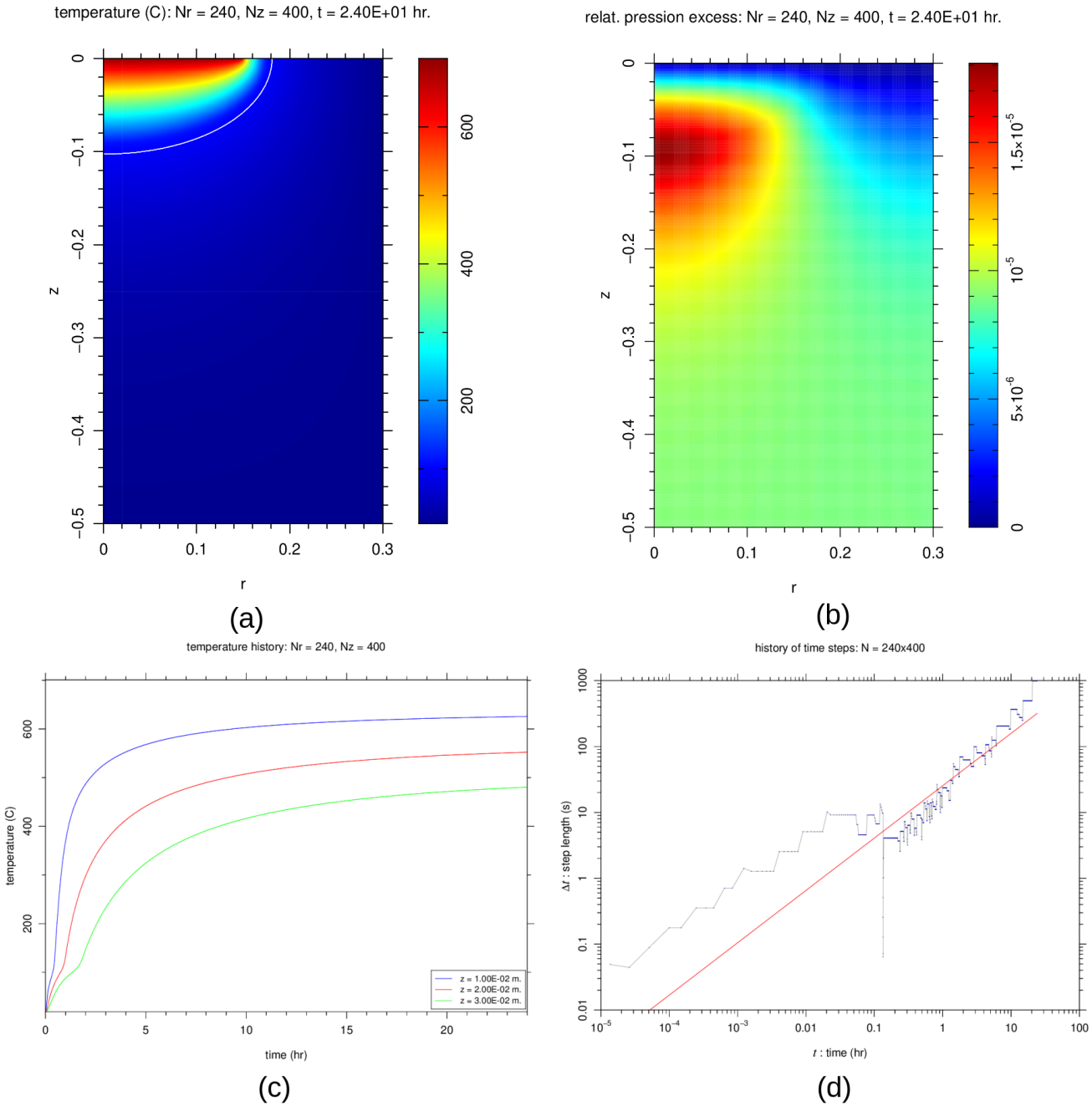


Fig. 26 : Vaporisation de l'eau présente dans un milieu saturé lors du chauffage intense par le dessus, avec calcul couplé de l'écoulement de la vapeur d'eau :
(a) champ de température à la fin de la simulation ; (b) champ de pression ;
(c) thermogrammes en trois profondeurs distinctes ; (d) historique des pas de temps utilisés par le solveur automatique DAE.

3e application – le modèle EWGM

La troisième application concerne le modèle EWGM de transfert de chaleur et de masse dans un milieu faiblement humide (présenté en section 2-B). Le modèle est uni-dimensionnel.

Il s'agit de sécher une couche de 10 cm d'épaisseur de sable fin (diamètre 180 µm) légèrement humide (régime pendulaire, avec une fraction liquide initiale de 20 %). Initialement à 20 °C, ce milieu est chauffé à l'une de ses extrémités à 120 °C de manière progressive pendant 30 minutes (loi en erf(t)) puis à température constante pour atteindre une durée totale de 8 heures. L'humidité relative initiale de l'air extérieur est calculée pour être à l'équilibre avec la fraction liquide initiale imposée à l'intérieur du milieu (modèle de ménisque toroïdal asymptotique), puis décroît pour s'assécher complètement au bout de 30 minutes, avec une loi similaire à celle de la température. Le fond du domaine est imperméable et isolé ; donc il n'y a ni flux de chaleur, ni écoulement de gaz. Les résultats de simulation sont reportés dans la figure 27.

a) Matrice jacobienne calculée par Différences Finies – stockage dense					
nx (nb de nœuds suivant x)	**N** (nb d'inconnues)	**Nb time-steps** (nb de pas de temps)	**Nb eval. jac.**	**Nb solve** (≃ nb de pas de temps)	**temps CPU (s)**
20	100	3 724	496	6 677	0,86
50	250	7 577	1 070	13 437	9,20
100	500	12 429	1 939	22 373	76,0
200	1 000	19 387	3 212	36 805	673
b) Matrice jacobienne calculée par Maple (exact) – stockage dense					
nx	**N**	**Nb time-steps**	**Nb eval. jac.**	**Nb solve**	**temps CPU (s)**
20	100	3 668	514	6 593	0,31
50	250	7 494	1 083	13 424	2,97
100	500	12 396	1 985	22 457	32,6
200	1 000	19 356	3 216	36 561	394
c) Matrice jacobienne calculée par Maple (exact) – stockage creux					
nx	**N**	**Nb time-steps**	**Nb eval. jac.**	**Nb solve**	**temps CPU (s)**
100	500	12 428	1 976	22 520	3,43
200	1 000	19 484	3 254	36 754	10,5
500	2 500	31 064	5 066	60 206	39,5
1 000	5 000	42 430	5 413	77 168	94,5
2 000	10 000	54 671	5 610	92 911	219
5 000	25 000	68 685	5 536	116 920	676

Table 3 : Coûts de simulation du transfert de chaleur et de masse en régime pendulaire (peu humide). Le modèle EWGM utilisé comprend 5 variables par nœud. Le système semi-discret à résoudre est de type DAE, avec 3 équations différentielles et 2 équations algébriques. Les conditions initiales choisies vérifient automatiquement le système d'équations, il n'y a donc pas de coût des CIC, contrairement aux cas précédent.

La table 3, comme précédemment, présente les coûts de différentes variantes. On a fait une distinction entre *nx*, le nombre de nœuds, et *N*, le nombre d'inconnues : ce dernier est environ 5 fois plus grand que *nx* car il y a 5 variables inconnues par nœud. Après estimation, on remarque que le coût du calcul du cas creux est en $O(N^{1,35})$ donc nettement plus faible que les cas précédents ; cela s'expliquent par le fait que le système DAE à résoudre comporte 3 équations différentielles et 2 relations algébriques (les lois d'état pour le gaz en tant que mélange et pour la vapeur d'eau), par conséquent la matrice jacobienne est beaucoup plus creuse, les relations algébriques donnant moins d'interdépendances avec les autres variables. Malgré cela, le calcul demeure toutefois beaucoup plus coûteux que dans les cas précédents pour le même nombre d'inconnues : ici le système physique à résoudre est très raide d'une part et le schéma manque semble-t-il de stabilité (voir les petites oscillations sur les courbes de vitesse du gaz sur la figure 27-c). La pas de temps atteint péniblement 1 seconde en fin de simulation alors qu'il dépasse souvent 100 secondes dans les cas précédents ; on a donc affaire à un système difficile à résoudre (d'ailleurs le rapport entre la plus grande échelle de temps et la plus petite – d'après les valeurs estimées au début du paragraphe 2-B – est de 10^5, signe d'une grande raideur).

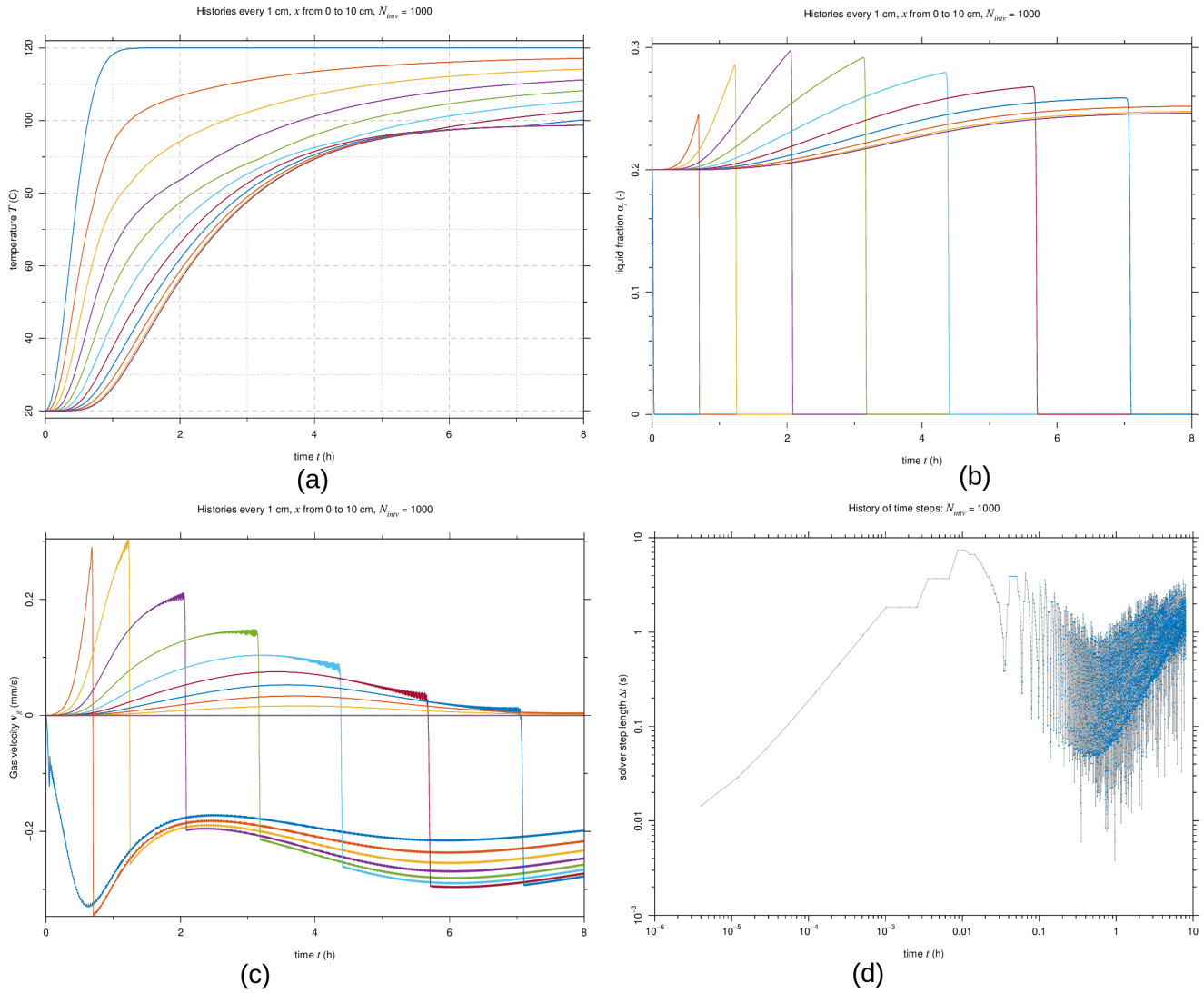


Fig. 27 : Séchage d'un milieu poreux humide par une montée en température progressive, jusqu'à 120 °C, par le modèle EWGM décrit à la section 2-B : (a) évolution de la température en divers points intérieurs espacés de 1 cm ; (b) évolution de la fraction liquide ; (c) évolution de la vitesse du gaz ; (d) historique des pas de temps utilisés par le solveur automatique DAE. Les courbes présentées correspondent à une discrétisation de 1000 nœuds, donc à 5000 variables inconnues.

Conclusion et perspectives

S'étonner, chercher à comprendre, tester, calculer, valider, mettre en œuvre de nouvelles instrumentations : voilà de nombreuses facettes du métier de chercheur, et on retrouve tous ces aspects dans mon travail au sein du projet ArPhyMat que j'ai décrit en introduction.

Tout n'a pu être abordé dans ce mémoire, essentiellement par manque de place. J'aurais pu mentionné l'aspect géochimique, qui donne lieu à des couplages complexes entre l'écoulement de l'eau, les minéraux en solution qui s'y trouvent et la matrice rocheuse qui héberge ces phénomènes. Ce thème, commencé avant 2016 lorsque j'étais encore à l'IRISA, s'est prolongé ces dernières années avec le co-encadrement en thèse[9] de M. Ben Refifa, dont la soutenance devrait avoir lieu avant fin 2019 à Tunis.

On rappelle que le modèle EWGM, qui commence à donner ses fruits, est limité au régime pendulaire, c'est-à-dire pour une faible saturation liquide et sans rôle de la gravité. Une extension est en cours de développement avec Lamia Guellouz, du LMHE de Tunis, afin de pouvoir l'appliquer au régime funiculaire, dans la zone où, de manière très hétérogène, l'eau monte par capillarité.

La collaboration avec Calogero Santoro, déjà mentionnée dans la section 1-B de ce mémoire, nous a conduit à nous intéresser à l'effet de l'ajout d'un solide soluble sur le séchage du sol. Le sel peut se dissoudre dans l'eau, être transporté et cristalliser. Ce constituant supplémentaire peut donc conduire à des comportements différents : nous avons effectivement observé que le séchage peut être beaucoup plus rapide en présence du sel. Certaines expériences ont également montré un transfert massif de sel vers la surface chauffée. Suivant les paramètres, cela se manifeste par deux phénomènes différents : (1) une efflorescence en surface, semblable à l'apparition du salpêtre à la surface d'une pierre calcaire ; (2) l'apparition d'une croûte très enrichie en sel[10] de quelques millimètres d'épaisseur, dont la différence d'aspect visuel avec la partie restante inférieure est bien contrastée (voir la figure 28 ci-dessous).

Les études menées jusqu'à présent (cf. Prat *et al.*, 2012 ; Hird & Bolton, 2016) expliquent le transfert du sel par une remontée capillaire provoquée par la réduction du passage dans les pores à cause de la croissance des cristaux de sels, eux-mêmes étant généralement poreux et très hydrophiles. C'est donc *a priori* par un effet de « mèche » que la solution saline remonte vers le haut. D'autres études publiées mentionnent l'importance de tenir compte d'une approche hors-équilibre pour la cinétique de cristallisation et que le taux de croissance des cristaux de sel dépend de la rapidité du processus.

Il paraît d'autant plus important de mieux comprendre cette migration du sel dans les milieux poreux que les applications sont nombreuses, aussi bien du point de vue économique que sociétal : génie civil (séchage des matériaux de construction), agriculture et environnement (salinisation des sols en zone aride ou semi-aride conduisant à les rendre moins fertiles), travaux publics (gonflement des soubassements salés sous les routes pouvant conduire à leur dégradation rapide).

9 Thèse co-encadrée avec R. Bouhlila du LMHE, Tunis. Le titre de la thèse est : « Optimisation numérique et parallélisation du code GEODENS pour le calcul des écoulements et de transport réactifs dans les milieux poreux : Applications au dôme de sel avec dissolution et à la lagune de domaine marin »

10 Nos premières mesures quantitatives indique une concentration en sel (sur résidu sec) cinq fois plus important dans la croûte que dans la couche immédiatement inférieure.

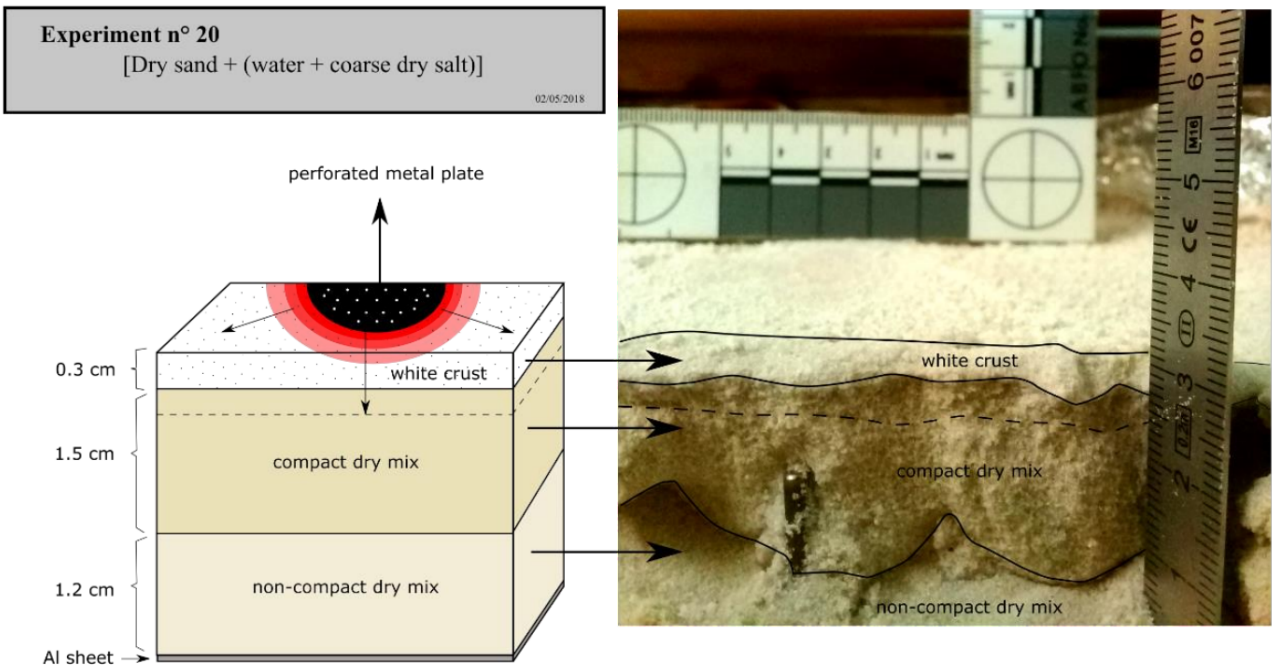


Figure 28 : Migration du sel lors du chauffage par-dessus d'un mélange de sable peu humide et de sel (stage de Master 2 de Brian Balarezo à l'IPR, printemps 2018). Après séchage (jusqu'à 120 °C pendant une heure), on remarque la formation d'une croûte blanche en surface, traduisant la migration du sel vers le haut.

Avec d'autres collègues de mon équipe, nous proposons d'étudier ce problème à deux échelles différentes :

1. Observer comment s'effectuent d'une part le phénomène d'évaporation de l'eau salée à l'échelle du pore, d'autre part la précipitation du sel en milieu confiné. Pour ce faire, on utilisera des milieux géométriquement bien contrôlés : couches de billes monodisperses régulièrement disposées entre deux plaques, réseau 2D de micro cylindres par PDMS.
2. Mener des expériences de chauffage d'un milieu granulaire modèle, réaliste, faiblement humide, en présence de sel qui pourra être initialement sous forme de grains mélangés au sable, ou au contraire dissous complètement dans l'eau. Le but est de comprendre, à la lumière des observations réalisées antérieurement à l'échelle du pore, comment, à partir d'un séchage rapide provoqué par un chauffage par-dessus, le sel migre vers le haut de manière quasi 1D à l'échelle de l'expérience.

Nous prévoyons également de développer un modèle numérique discret en collaboration avec Sean McNamara de l'IPR. Nos modèles respectifs actuels, continus ou discrets, de transport en milieu insaturé, devront être modifiés pour tenir compte de la présence du sel. Cela implique d'incorporer non seulement les lois de transfert par diffusion, mais aussi des lois phénoménologiques concernant le taux de croissance des cristaux solides. Nous pourrons utiliser comme point de départ les lois proposées par Espinosa Marzal & Scherer (2008). Nous pensons que l'utilisation de notre modèle discret permettra de rendre compte des phénomènes de localisation des dépôts et des « chenaux » de sel, observés dans les expériences. Cela constituera une originalité par rapport aux approches habituelles telles que celle de Koniorczyk & Gawin (2011) qui donnent des profils continus de concentration en sel.

Références bibliographiques

La bibliographie présentée ici n'est pas du tout exhaustive. Il s'agit du minimum, concernant des publications citées dans le présent document. D'autres références se trouvent dans mes propres articles et à la fin des annexes de ce document.

Auriault J.-L., Boutin C., et Geindreau C., 2009, *Homogenization of Coupled Phenomena in Heterogeneous Media*, ISTE, Wiley, 478 p.

Beaucé C., 2015, Amélioration d'une technique originale de maillage 2D adaptatif, Master 1 Informatique mention « Génie Logiciel », *ISTIC, Université de Rennes 1*, mi-juillet 2015

Bittelli M., Ventura F., Campbell G. S., Snyder R. L., Gallegati F., and Rossi Pisa P., 2008, Coupling of heat, water vapor, and liquid water fluxes to compute evaporation in bare soils, *J. of Hydrology*, vol. 362, pp 191-205

Bories S. A., 1991, Fundamentals of Drying of Capillary-Porous Bodies, in *Convective Heat and Mass Transfer in Porous Media Vol I*, Kakaç, Kilkiş, Kulacki and Arinç, Eds, NATO ASI Series – vol. 196, Springer-Science, 1991, pp 391-434

Bories S. A., and Prat M., 2000, Transferts de chaleur dans les milieux poreux, *Techniques de l'Ingénieur*, traité *Génie Énergétique*, B 8 250

Canot É., and Delannay R., 2016, Liquid menisci equilibrium in a wet granular medium in pendular regime – Cohesive strength estimation for random smooth spheres packing, *CMD26 Condensed Matter Division*, Groningen, The Netherlands, 4-9 sept. 2016 (Poster)

Canot É., Delannay R., March R. J., and Santoro C. M., 2019, Data processing using physical modeling applied to prehistorical fire replications on soils of the Atacama Desert, Northern Chile, *Archeometry* (en cours de révision)

Canot É., Delannay R., Mansour S., Muhieddine M., and March R. J., 2016, Effective thermal conductivity of a wet porous medium – Presence of hysteresis when modeling the spatial water distribution for the pendular regime, *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 138, n. 9, doi:10.1115/1.4032950

Chapuis N., 2018, Chenalisation dans un milieu granulaire humide, Master 2 Physique mention « Modélisation physique des Systèmes Environnemntaux », *Université de Rennes 1*, juillet 2018

Chen S. X., 2008, Thermal conductivity of sands, *Heat mass Transfer*, vol. 44, pp 1241-1246, doi:10.1007/s00231-007-0357-1

Davarzani H., Smits K., Tolene R., and Illangasekare T., 2013, Study of the effect of wind speed on evaporation from soil through integrated modeling of the atmospheric boundary layer and shallow subsurface, *Water Resources Research*, vol. 50, pp 661-680, doi:10.1002/2013WR013952

Droniou J., 2013, Finite Volume schemes for diffusion equations : Introduction to and review of modern methods, WSPC, m3as-review

Dong Y., McCartney J., and Lu N., 2015, Critical Review of Thermal Conductivity Models for Unsaturated Soils, *Geotech. Geol. Engng*, vol. 33, pp 207-221

Espinosa Marzal R. M., and G. W. Scherer, 2008, "*Crystallisation of sodium sulfate salts in limestone*", Environ. Geol., vol. 56, pp 605-621

Gascoin N., Gillard P., and Baudry G., 2009, Characterisation of oxidised aluminium powder: Validation of a new anodic oxidation bench, *J. of Hazardous Materials*, vol. 171 (1-3), pp 348-357

Hird R., and Bolton M. D., 2016, "*Migration of sodium chloride in dry porous materials*", Proc. R. Soc. 1., 472:20150710

Huang C. L. D., 1979, Multi-Phase Moisture Transfer in Porous Media Subject to Temperature Gradient, *Int. J. of Heat Mass Transfer*, vol. 22, pp 1295-1307

Koniorczyk M., and Gawin D., 2011, "*Numerical modeling of salt transport and precipitation in non-isothermal partially saturated porous media considering kinetics of salt phase changes*", Transp. Porous Med., vol. 87, pp 57-76

Kunii D., and Smith J. M., 1960, Heat Transfer Characteristics of Porous Rocks, *AIChE Journal*, vol. 6, n. 1, pp 71-78

Laloy J., and Massard P., 1984, Nouvelle méthode thermique des foyers préhistoriques, *Revue d'Archéométrie*, vol. 8, 33-40

Luikov A. V., Shashkov A. G., Vasiliev L. L., and Fraiman E., 1968, Thermal conductivity of porous systems, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 11, pp 117-140

Luikov A. V., 1975, Systems of differential equations of heat and mass transfer in capillary-porous bodies (review), *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 18, pp 1-14

Mansour S., 2015, Contribution to certain Physical and Numerical Aspects of the Study of the Heat Transfer in a Granular Medium, *Thèse de l'Université de Rennes 1*, Informatique, décembre 2015

Mansour S., Canot É., and Muhieddine M., 2016, Identification of the Thermophysical Properties of the Soil by Inversion Problem, *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 138, n. 9, doi:10.1115/1.4032947

Mikhailov M. D., 1975, Exact solution of temperature and moisture distributions in a porous half-space with moving evaporation front, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 18, pp 797-804

Min K., and Emmons H. W., 1972, The drying of porous media, *Proc. 1972 of Heat Transfer and Fluid Mech. Inst*, Stanford University Press, pp 1-18

Mitarai N., and Nori F., 2006, Wet granular materials, *Adv. Phys.*, vol. 55, pp 1-45

Muhieddine M., 2009, Simulation numérique des structures de combustion préhistoriques, *Thèse de l'Université de Rennes 1*, Informatique, octobre 2009

Muhieddine M., Canot É., and March R., 2009, Various approaches for solving problems in heat conduction with phase change, *Int. J. on Finite Volumes*, vol. 6, n. 1

Muhieddine M., Canot É., March R., and Delannay R., 2011, Coupling heat conduction and wter-steam flow in a saturated porous medium, *Int. J. for Numerical Methods in Engng*, vol. 85, pp 1390-1414

Ousegui A., Moresoli C., Dostie M., and Marcos B., 2010, Porous multiphase approach for baking process – Explicit formulation of evaporation rate, *J. of Food Engng*, vol. 100, pp 535-544

Philip J. R., and De Vries D. A., 1957, Moisture Movement in Porous Materials under Temperature Gradients, *Trans. Amer. Geophys. Union*, vol. 38, n. 2, pp 222-232

Prat M., Veran-Tissoires S., Vorhauer N., Metzger T., and Tsotsas E., 2012, "*Fractal phase distribution and drying: impact on two-phase zone scaling and drying time scale dependence*", Drying Technology, vol. 30, pp 1129-1135

Qiu J., and Yi Y.-B., 2018, Random walk simulation model of diffusion in circular and elliptical particulate composites, *Int. J. for Multiscale Comput. Engng*, vol. 16, n. 2, pp 131-142

Singh K., Muljadi B., Raeini A., Jost C., Vandeginste V., Blunt M., Theraulaz G., and Degond P., 2019, The architectural design of smart ventilation and drainage systems in termite nests, *Science Advances*, vol. 5, eaat8520

Smits K., Sakaki T., Limsuwat A., and Illangasekare T., 2010, Thermal Conductivity of Sands under Varying Moisture and Porosity in Drainage-Wetting Cycles, *Vadose Zone J.*, vol. 9, n. 1, pp 1-9, doi:10.2136/vzj2009.0095

Trinh S., Arce P., and Locke B. R., 2000, Effective Diffusivities of Point-Like Molecules in Isotropic Porous Media by Monte Carlo Simulation, *Transp. in Porous Media*, vol. 38, pp 241-259

Udell K. S., 1985, Heat Transfer in Porous Media considering Phase Change and Capillarity – the Heat Pipe effect, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 28, pp 485-495

Usowicz B., Lipiec J., Marczewski W., and Ferrero A., 2006, Thermal conductivity modelling of terrestrial soil media – A comparative study, *Planetary ans Space Science*, vol. 54, pp 1086-1095

L'analyse des foyers préhistoriques

Édouard Canot[1], Ramiro J. March[2]

[1] IRISA, CNRS, UMR 6074, Rennes

[2] CReAAH, CNRS, UMR 6566, Rennes

Introduction

« L'Homme a volé le feu à la nature et ensuite l'a utilisé et transmis et ainsi s'est différencié de la Nature ». Ceci résume aussi bien le contenu de nombreux mythes des peuples chasseurs-cueilleurs sur l'origine du feu, que les plus récents traités scientifiques concernant le sujet ([1], [2], [3]). Ce parallélisme paradoxal entre pensée scientifique et pensée mythique traduit bien le rôle essentiel du feu dans notre vie quotidienne comme dans notre univers symbolique. Domestique, technique ou sacrificiel, réchauffant, fulgurant ou purificateur, le feu occupe une place centrale dans les cultures humaines qui cherchent, encore aujourd'hui, à en comprendre la nature, à en déterminer l'origine, à en maîtriser l'utilisation et ses conséquences. On dit de lui qu'il est autant source de progrès – lorsqu'il nous permet de vaincre l'obscurité, de passer du cru au cuit, de transformer le métal – que de destruction, comme nous le montrent les images récentes des conflits qui « embrasent » certains points de la planète. Culturellement ce chemin se poursuit jusqu'à nos jours et le feu se prolonge depuis les foyers domestiques jusqu'aux fours nucléaires passant à travers son emploi dans nos cheminées ou dans nos allumettes de cuisine ([4], [5]). Le feu possède aussi un statut social ou symbolique étant présent par exemple dans de nombreux rites funéraires. On lui accorde aussi une place non négligeable dans l'accélération de l'évolution du langage. Par ailleurs le feu continue a être une source d'énergie non négligeable, appliquée à satisfaire différents types de besoins à partir des formes très simples par une très grande partie des populations actuelles ([6]). Le feu occupe donc une place essentielle dans la nature humaine, au point qu'on lui a assigné mythologiquement l'origine de notre propre humanité.



Fig. 1 : L'homme préhistorique utilisait le feu pour se chauffer, cuire sa nourriture, se protéger des prédateurs, etc.

Parvenir à comprendre et à reconstruire l'histoire de la maîtrise de l'énergie thermique et son application implique de pouvoir lire les vestiges que l'activité de combustion nous a laissé dans le passé. D'un point de vue archéologique, le foyer retrouvé aujourd'hui n'est pas le même qu'il a été autrefois. De la même manière que les astronomes d'aujourd'hui travaillent parfois sur des étoiles qui n'existent plus, nous sommes confrontés à des « images » du passé qu'il nous faut reconstruire et comprendre. De plus, si l'on considère que les objets étudiés dans leur conformation actuelle offrent des « indices » à interpréter,

l'organisation de ces indices laisse entrevoir une image résiduelle (entendu dans un sens très large) de l'objet originel. Néanmoins l'organisation actuelle de ces indices est le fruit des comportements humains et des facteurs taphonomiques[1] et chaque association de vestiges répond à une histoire particulière qui va de son élaboration à sa mise au jour dans les chantiers archéologiques. Pour arriver à la reconstruction du processus de l'évolution des comportements humains liés au feu, l'archéologue doit d'abord établir une méthode qui permette d'améliorer aussi bien la compréhension de l'objet actuel, très concret, la « structure de combustion » archéologique, que la compréhension de ce qu'elle a été, c'est-à-dire la source d'une énergie utilisée par l'homme [7]. Pour pouvoir atteindre cet objectif, il fallait comprendre la nature de chaque structure de combustion étudiée en essayant de répondre à cinq questions :

- quelle était la forme des foyers ?
- quel était leur mode de fonctionnement ?
- quelle était leur fonction ?
- quelle était leur durée d'utilisation ?
- quels sont les processus taphonomiques qui ont transformé la structure après son abandon ?

Nous avons donc développé une méthodologie basée sur une approche interdisciplinaire ([8], [9], [10]), liant des sciences diverses comme la physique de la combustion et de la transmission de la chaleur, la chimie organique et minérale ou l'ingénierie nucléaire. Cette méthodologie avait comme objectif, à partir d'une approche mêlant les techniques analytiques et les simulations expérimentales, d'isoler et de hiérarchiser les différents indices des activités humaines et leurs associations significatives dans une reconstruction de l'histoire de chaque structure de combustion étudiée.

Ainsi les techniques de modélisation numériques ont été appliquées pour la première fois par R. J. March à partir des années 80 ([11], [12]) et cette approche reste aujourd'hui unique et originale. Cette approche – fondée sur l'équation de Fourier de diffusion de la chaleur[2] et issue de la collaboration de plusieurs disciplines : l'archéologie, la physique expérimentale et les mathématiques appliquées – a permis de retrouver le fonctionnement des foyers et l'étude des conséquences sur le milieu support, à travers des méthodes numériques (s'appuyant sur des modèles physiques). On décrit ici comment des modèles physiques simples, représentant partiellement les phénomènes thermomécaniques se déroulant dans le sol, permettent d'obtenir, plusieurs milliers d'années plus tard, une estimation de la durée d'allumage de ces foyers et une idée de leur mode de fonctionnement. À leur tour, ces connaissances donnent de précieuses indications aux chercheurs en sciences humaines sur le comportement des groupes humains à l'origine de ces feux.

1. Déduire des traces du feu le comportement des groupes humains

Les fouilles archéologiques révèlent la trace de nombreux feux d'origine humaine dans le sous-sol (fig. 2) ; le plus souvent, on trouve des foyers isolés dans l'espace et dans le temps (par exemple de foyers reliés à des haltes de chasse ou à d'autres activités éphémères) mais fréquemment ces foyers sont organisés en couches superposées ou groupés dans une même couche, indiquant que le même emplacement était réutilisé longtemps ou de façon répétée. On y trouve classiquement des restes de nourriture (coquilles de mollusques, ossements d'animaux, et même des restes des lipides provenant de la cuisson de ces animaux), certaines traces des activités techniques (présence de colorants, colles utilisées pour l'emmanchement des outils, …), ainsi que des restes des combustibles employés.

1 La taphonomie concerne l'enfouissement des objets dans le sol, objets qui peuvent donc être dégradés par différents processus.

2 L'équation de la chaleur, introduite par le physicien Joseph Fourier en 1811, concerne la diffusion de la chaleur et s'écrit pour un milieu homogène à une dimension : $\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ où α est la diffusivité du milieu. Le même type d'équation régit d'autres phénomènes de diffusion, par exemple la diffusion d'un soluté au sein d'un liquide.

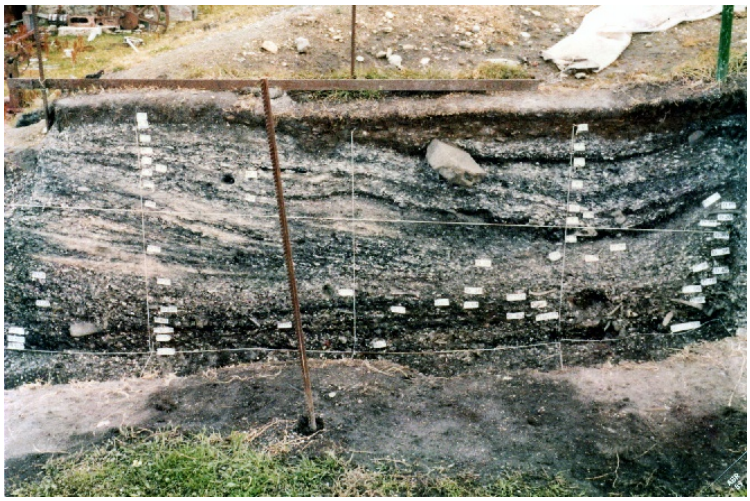
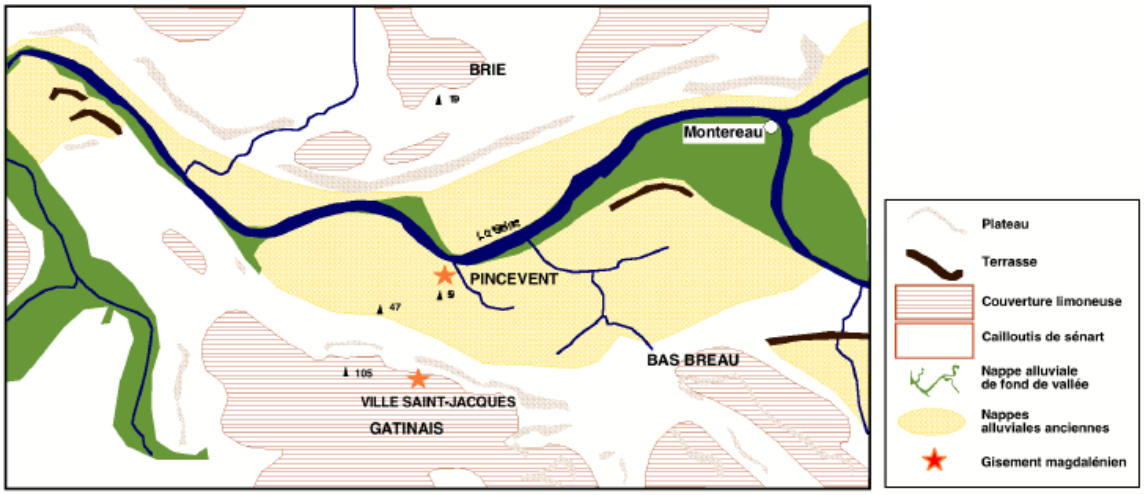


Fig. 2 : Coupe verticale du sol après excavation d'un amas coquiller : on y voit une multitude de couches de coquilles brûlées, trahissant l'usage répété du même site.

L'analyse de ces feux permet, entre autres[3], d'estimer leur mode de fonctionnement, leur durée minimale de fonctionnement (et donc leurs différentes fonctions : chauffage, préparations culinaires, cuisson de poteries, …) et, par là même, d'en déduire le comportement social des groupes humains. Par exemple, définir la durée et la fréquence d'utilisation des foyers nous permet de savoir si les chasseurs-cueilleurs utilisateurs de ce feu étaient plus au moins mobiles (ils allument un feu pour cuire un repas, puis s'en vont ailleurs) ou plutôt sédentaires (le même feu souvent réutilisé ou utilisé pendant des périodes prolongées) ; ou encore définir leur utilisation liée à certaines activités techniques qui apparaissent à partir d'un certain moment de notre histoire évolutive comme la cuisson des céramiques ou le travail des métaux.
Les méthodes appliquées ici nous donnent accès à une mesure de la durée minimale de fonctionnement, sachant qu'un même foyer pourra avoir été utilisé ultérieurement avec un chauffage moins fort ou une durée moins longue. De plus, pour les formes les plus simples et les plus fréquentes qui sont utilisées depuis 400 000 ans, on peut même observer le déplacement des centres de chaleurs nous permettant d'en déduire de possibles réutilisations.

Fig. 3 : Site



archéologique de Pincevent (rive gauche de la Seine, environ 100 km en amont de Paris). Les hommes du Magdalénien – il y a environ 10 000 ans – attendaient deux fois par an le passage des troupeaux de rennes près des gués de la Seine.

2. Faire parler ces traces

Un travail fondamental pour comprendre la signification de ces foyers réside dans la détermination des

3 D'autres éléments, comme la nature des matériaux constituants les couches du foyers (par ex. les détritus rejetés dans le foyer lui-même) ou la répartition des pierres autour du foyer, apportent également des informations supplémentaires concernant le comportement social de ces groupes ; ces éléments ne seront pas étudiés ici.

températures atteintes par ces structures. Certains sols peuvent nous faciliter la tâche : par exemple dans des limons argileux comme ceux qu'on peut trouver à Pincevent (fig. 3), site emblématique de l'étude des sociétés de chasseurs-cueilleurs magdaléniens, nous pouvons observer l'altération du sol (provoquée par l'élévation de la température) qui se traduit par un changement de couleur (fig. 4 et 5), dû à une transformation de certains oxydes présents, et qui intervient exactement à 290 °C.
L'épaisseur de la zone rougie (bien visible sur la figure 5, par exemple) est donc une indication précieuse car elle est en lien étroit avec la durée d'allumage du foyer la surmontant.



Fig. 4 : Limon argileux de Pincevent montrant une zone rougie : altération visible après le contact d'une plaque chauffante posée sur le sol (Cliché R. March).

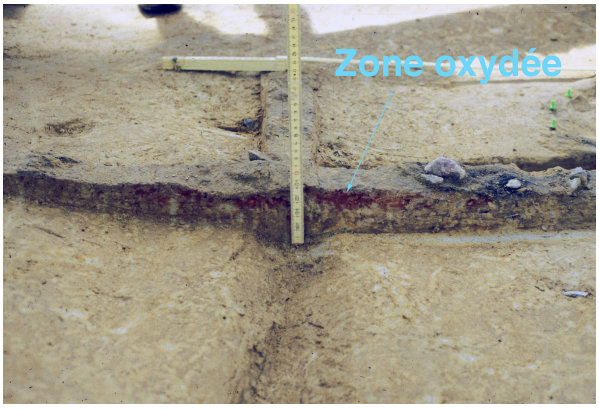


Fig. 5 : foyer à plat R126 du niveau magdalénien IV-20 de Pincevent montrant une zone rougie de limon argileux (Cliché R. March, Centre Archéologique de Pincevent).

Plus l'épaisseur colorée (donc oxydée) est importante, plus le temps d'allumage du foyer correspondant a été long, car la chaleur dégagée par le foyer met un certain temps pour pénétrer dans le sol.

Pour connaître quantitativement la durée de fonctionnement d'un foyer à partir de l'épaisseur d'altération, on utilise des reproductions de foyers réalisées expérimentalement. L'étude des reproductions nous permet de mettre au point un certain nombre de méthodes analytiques nous permettant d'obtenir des informations sur les transformation de ces sols qu'on désignera par la suite, une fois appliquées sur les foyers archéologiques, sous le nom de *paléo-thermomètres*. Ainsi, nous pouvons non seulement estimer les températures atteintes par les foyers dans le passé en surface et en profondeur mais aussi détecter la présence d'un ou plusieurs centres de chaleur. De même, nous pouvons fixer les conditions limites (valeurs approximatives des températures sous le feu). Cependant, il y a des valeurs que ne peuvent pas être fixées de façon précise comme la température initiale du sol de l'époque sans négliger le fait que, au cours des millénaires, il a pu y avoir d'autres altérations (biologique, mécanique, …) du sol, lesquelles sont actuellement étudiées par des méthodes complémentaires mais ne donnant que des informations relatives sur les phénomènes qui se sont produits.

3. Les modèles utilisés : analytiques ou numériques

Un modèle est toujours une simplification de la réalité, en se restreignant d'une part aux phénomènes qu'on maîtrise et qu'on sait traduire en équation, d'autre part en ne retenant parmi ces phénomènes compris que ceux qui paraissent les plus importants.

L'un des plus simples est celui de Laloy & Massard ([13]) : il s'agit d'un modèle analytique basé sur la propagation unidimensionnelle de la chaleur dans un milieu semi-infini homogène et isotrope. En se basant sur la série de courbes de températures représentées sur la figure 6, et en prenant par exemple une épaisseur d'altération de 1,5 cm, on voit qu'il faut attendre environ 10 h pour que l'épaisseur considérée atteigne 290 °C qui est la température requise pour obtenir la coloration. La seule chose à connaître est la diffusivité du sol α (sa capacité à laisser diffuser la chaleur) qui se calcule comme le rapport entre la conduction thermique k et le produit $\rho\ C_p$ de la masse volumique par la capacité thermique. Pour un limon argileux, la valeur de la diffusivité est de l'ordre de 10^{-6} m^2/s.

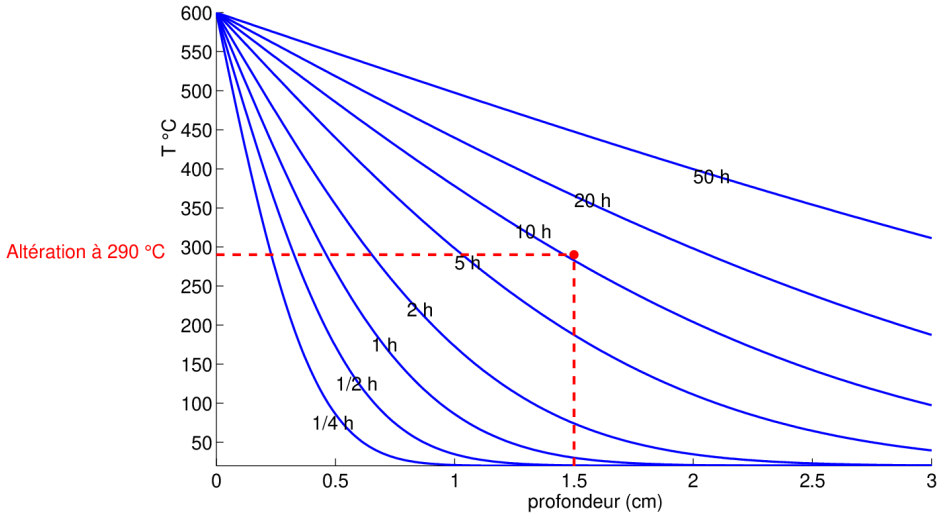


Fig. 6 : Modèle unidimensionnel : répartition de la température dans un milieu semi-infini, chauffé brusquement au temps initial, à différents instants ultérieurs. L'utilisation de ces courbes permet de savoir au bout de combien de temps tel point du sol a atteint telle température.

Cependant, pour être valide, l'utilisation de ce paléo-thermomètre simplifié ne peut être appliquée qu'à de faibles profondeurs par rapport au diamètre du feu (typiquement quelques centimètres pour un foyer d'une vingtaine de centimètres de diamètre).

D'autres modèles peuvent être élaborés, prenant en compte certains aspects négligés dans celui de Laloy & Massard (géométrie non unidimensionnelle, sol non homogène, présence d'humidité dans le sol, …), mais à partir du moment où le modèle est un tant soi peu complexe, on aboutit à un ensemble d'équations mathématiques qu'on ne peut résoudre qu'à l'aide de l'ordinateur, après avoir effectué une discrétisation de ces équations afin de répartir les inconnues sur un maillage. La simulation numérique est alors indispensable pour résoudre ces équations mathématiques.

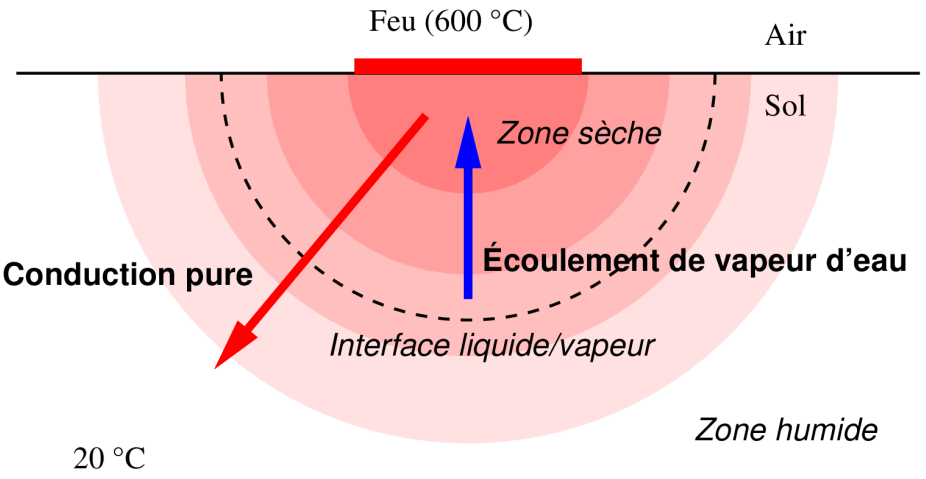


Fig. 7 : Exemple d'un modèle simplifié (3D axisymétrique) dans lequel on étudie le couplage de la diffusion de la chaleur et du flux de vapeur provenant de l'évaporation.

Le modèle actuel, présenté schématiquement sur la figure 7, prend en compte les phénomènes suivants :

1. la conduction de la chaleur dans un milieu poreux rempli d'un fluide (que ce soit de l'eau sous forme liquide ou sa vapeur) ; c'est une équation de diffusion généralisée à un milieu à deux constituants.
2. le changement de phase eau/vapeur qui s'effectue à une température dépendant de la pression locale (dans une cocotte minute sous pression, l'eau bout à une température supérieure à celle de l'eau dans une simple casserole) ;
3. l'écoulement dans le sol de la vapeur d'eau qui, possédant un volume très largement supérieur à l'eau liquide, cherche à s'échapper du milieu poreux. La porosité du sol (en gros, la taille des passages entre les grains de matière) va donc fortement influencer la surpression. On utilise la loi de Darcy[4].

Comme le montre la figure 8, le flux de vapeur s'échappant vers la surface du sol et emportant avec elle de la chaleur va contribuer à ralentir globalement le phénomène de chauffage du sol.

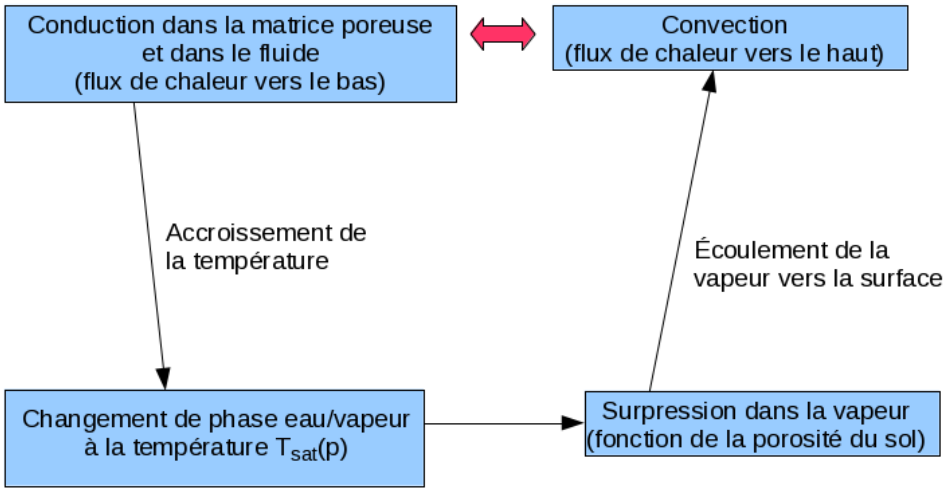


Fig. 8 : Dans le modèle amélioré, les phénomènes conduisent à deux flux de chaleur opposés ; le second (convectif) est évidemment bien plus faible que le premier (conductif).

4 La loi de Darcy, introduite par le physicien du même nom en 1856, exprime que la vitesse de l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux est proportionnelle à la différence de pression appliquée entre deux points : $V_x = -K \frac{\partial p}{\partial x}$; le signe moins doit être présent car le fluide s'écoule toujours des hautes pressions vers les basses pressions. Le facteur *K* est la perméabilité du milieu.

Un tel modèle est difficile à résoudre car le changement de phase s'applique à l'interface liquide-vapeur dont la position fait partie des inconnues du problème : c'est un problème à frontière libre. On utilise alors une formulation équivalente (méthode de capacité apparente[5]) permettant de considérer l'ensemble des deux zones, eau liquide et eau vapeur, comme un seul milieu sur lequel on applique l'équation classique de conduction de la chaleur.

4. Le modèle numérique confronté aux résultats expérimentaux

Nous avons réalisé plusieurs séries de foyers expérimentaux sur des sols limoneux humides (saturés et non saturés en eau) et sableux d'un gisement magdalénien à Pincevent. Une série a été réalisée avec du bois (fig. 9) et une deuxième en utilisant une plaque électrique chauffante (fig. 4) pour réduire les fluctuations de température observées sur des foyers à plat et pour mieux contrôler le flux thermique imposé. Nous avons reproduit les conditions d'altération du substrat et le palier de température observé au préalable sur des allumages simples et nous avons travaillé aussi sur la réutilisation des foyers, fréquente dans le contexte archéologique. Ces dernières expériences ont contribué à mieux comprendre le fonctionnement des sols qui étaient humides au début et qui sont devenus secs après une première utilisation.



Fig. 9 : Expérience de réplication du fonctionnement d'un foyer. L'expérience consiste à faire brûler du bois sur le même sol que celui des foyers archéologiques et à mesurer la température au cours du temps en différents endroits du sol par des sondes qui y ont été placées préalablement.

L'application de la méthode numérique développée aux mêmes types de foyers a permis d'effectuer des comparaisons avec les mesures expérimentales. Par exemple, la figure 10 présente, pour un foyer particulier, à la fois la mesure expérimentale de la température (symboles '+' sur les courbes de couleur) et la prédiction du modèle numérique utilisé, sachant que ce dernier utilise comme condition limite la température réelle (donc mesurée) du feu à la surface du sol.

S'agissant de l'apport du modèle couplé (qui introduit l'écoulement de la vapeur), nous pouvons observer tout d'abord que la surpression maximale (en jaune sur la figure 11) dans la vapeur d'eau est très faible (moins de 0,02 % par rapport à la pression atmosphérique), et elle génère également une vitesse de gaz très faible (estimée à quelques centièmes de mm/s). Malgré cela, la vapeur qui s'échappent emporte avec elle de l'énergie thermique et s'oppose donc au flux de conduction principal vers le bas ; cet effet retard est quand même nettement visible sur les résultats de la figure 12.

5 La capacité thermique, encore appelée chaleur massique, est liée à l'aptitude d'un corps à absorber une plus ou moins grande quantité de chaleur pour une élévation de température donnée. Comme le changement de phase absorbe une certaine quantité de chaleur (appelée chaleur latente), on définit une capacité « apparente » qui inclut la chaleur latente sous la forme d'un pic de Dirac localisé à la température de changement de phase.

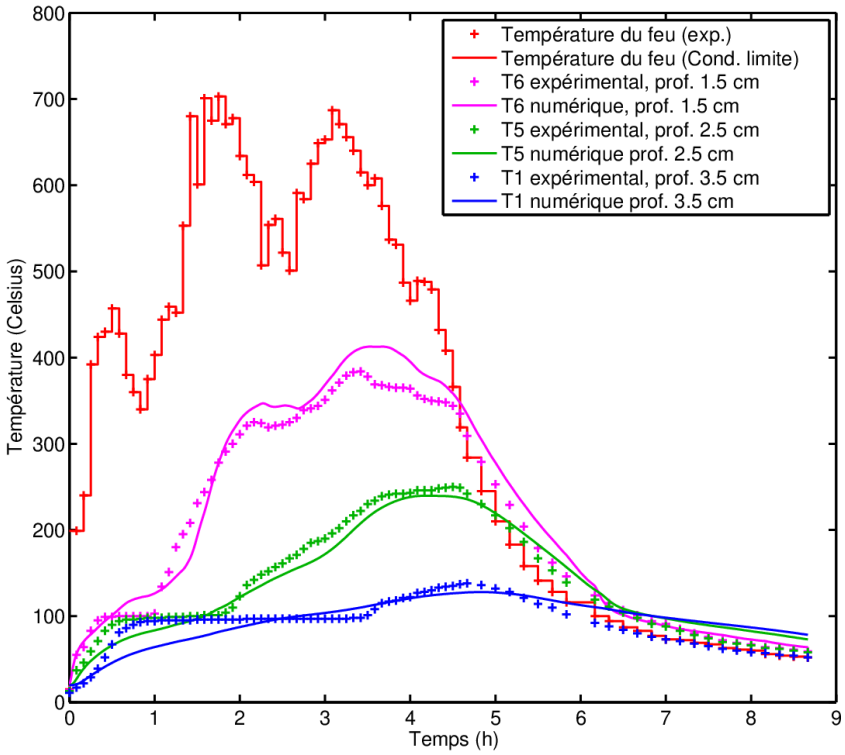


Fig. 10 : Comparaison entre les courbes de température provenant d'une expérience de réplication d'un foyer et celles provenant de la simulation numérique. Chaque couleur correspond à l'évolution de la température à une profondeur particulière sous le foyer.

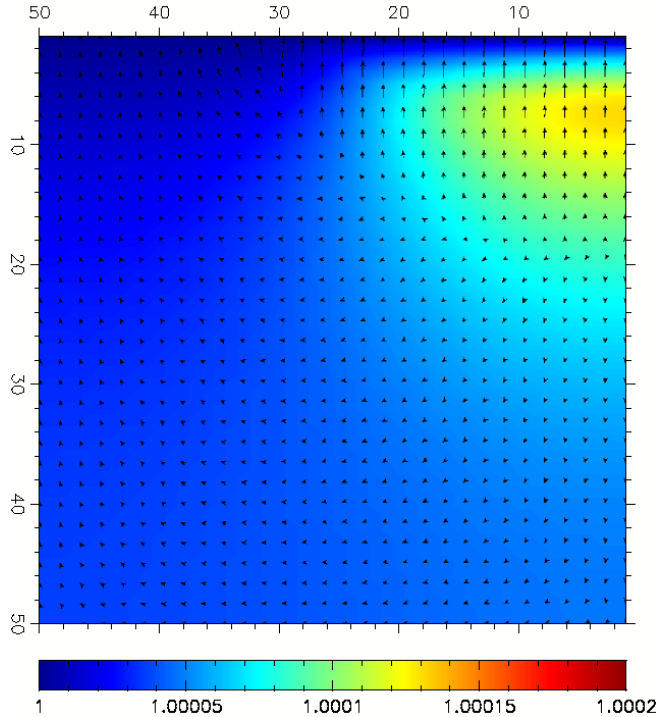


Fig. 11 : Résultat du calcul montrant l'orientation du flux de vapeur d'eau (qui cherche à sortir du sol) en lien avec la surpression du gaz dans le milieu poreux. Le domaine de calcul utilisé est de 30 cm par 30 cm, en supposant également une symétrie axiale autour du bord vertical droit du domaine.

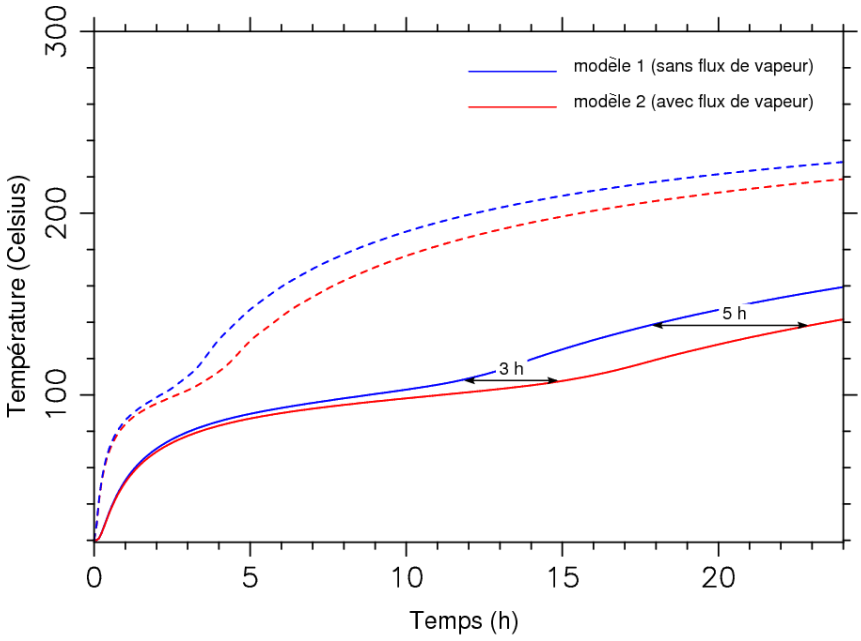


Fig. 12 : Écart entre le modèle simple (diffusion de la chaleur dans le sol) avec un autre qui prend en compte l'écoulement de vapeur d'eau s'échappant du sol. Les deux groupes de courbes correspondent à une mesure à 2,5 cm de profondeur (pointillés) et à 5 cm de profondeur (trait plein).

Les modèles élaborés fournissent des renseignements plus précis ; cependant, ils sont plus compliqués à mettre en œuvre (programmation et méthodes numériques à utiliser) et peuvent conduire à des temps d'exécution exorbitants ! Le savoir faire du modélisateur est de choisir le bon compromis afin d'avoir, à partir d'un modèle léger (donnant un code rapide), des renseignements utilisables, c'est-à-dire peu éloignés de la réalité.

Conclusion

Les outils numériques mis au point et utilisés dans le contexte de ce projet pluridisciplinaire ont permis d'avoir des premières estimations de durée d'allumage. Leur exploitation est encore en cours. De même le modèle présenté ci-dessus continue à être perfectionné ([14]).

Par ailleurs, les questions scientifiques disciplinaires liées à l'histoire de la maîtrise de l'énergie thermique dans le cadre de ce projet s'appliquent aussi à l'étude du contrôle et application de cette énergie et peuvent nous permettre d'en tirer des conclusions sur notre avenir et la gestion de ce type de ressources, tout en sachant qu'un tiers de la population mondiale utilise encore les ressources naturelles et les structures de combustion pour ses activités quotidiennes selon les rapports de l'UNESCO [15]. L'exploitation des ressources naturelles pour le chauffage domestique, tout en étant majoritaire pour l'exploitation des structures qui nous intéressent, joue encore un rôle fondamental pour les populations des pays en voie de développement. L'histoire de la maîtrise du feu et de l'énergie thermique trouve sa prolongation dans les manières symboliques et politiques de voir et concevoir la gestion de l'énergie dans l'actualité pour l'ensemble des populations : le feu (notre ami ou notre ennemi), notre dépendance énergétique et ses conséquences font partie de notre ascension prométhéenne qui a enchaîné nos sociétés au contrôle et à l'exploitation de ce type d'énergie nous conduisant aux problèmes liés au cycle du carbone et au réchauffement climatique actuel.
Enfin, notre projet a des liens avec d'autres domaines comme le séchage des matériaux organiques ou inorganiques hétérogènes (bois, papier, fruits, béton, …) ou avec les processus de transfert thermique dans les milieux granulaires, en débouchant sur des applications possibles dans les domaines industriels et naturels.

Bibliographie

[1] Frazer J. G., 1931, *Mythes of the origine of fire*, Ed. Mac Millan and Co Ltd., London, 246 p.

[2] Levi-Strauss C., 1958, *Anthropologie structurale*, Ed. Plon, Paris

[3] Levi-Strauss C., 1964, *Mythologiques I. Le cru et le cuit*, Ed. Plon, Paris

[4] Bachelard G., 1967, *La psychanalyse du feu*, Gallimard, Collection Idées, Paris

[5] Testart A., 1996, *À propos des mythes du vol du feu*, in XIIIth International Congress of prehistoric and protohistoric sciences, Forli Italia, 8/14 September 1996, Colloquia 5 The Lower and Middle Paleolithic Colloquium IX p. 11-15. Bar Yosef O., Cavalli-Sforza L., March R. J. and Piperno Editors.

[6] Goudsblom J., 1992, *Fire and Civilisation*, Ed. Allen Lane, The Penguin Press, London.

[7] March R. J., 2002, *Il controllo del fuoco*, in Il Mondo dell, Archeologia, vol. II., Enciclopedia Italiana Treccani, pp. 807-812.

[8] March R. J., Baldessari A., Gros E. G., Ferreri J. C., Morello O. et Rodano R., 1991, *L'étude des structures de combustion en Argentine*. Actes d'une journée-débat « Pour un meilleur dialogue en archéologie », Bulletin de la Société Préhistorique Française, tome n°86, Études et travaux, n°10-12, pp 384-392.

[9] March R. J., 1995, *L'étude des structures de combustion en archéologie : un détour vers l'histoire*. Annales de la revue Fyssen, n°10, déc. 1995, pp 53-68.

[10] March R. J., 1996, *L'étude des structures de combustion préhistoriques : une approche interdisciplinaire*. XIIIth Int. Congress of prehistoric and protohistoric sciences, Forli Italia, 8-14 sept. 1996, Colloquia 5 The lower andmiddle paleolithic colloquium IX, pp 251-275, Bar Yosef O., Cavalli-Sforza L., March R. J. & Piperno Eds.

[11] March R. J. et Ferreri J. C., 1989, *Sobre el estudio de estructuras de combustión arqueológicas mediante replicaciones y modelos numéricos*. Nature et fonction des foyers préhistoriques, Olive M. et Taborin Y., Eds. Actes du colloque international de Nemours (1987), Nemours, APRAIF Ed., pp 59-69.

[12] March R. J. et Ferreri J. C., 1991, *Aplicación de modelos numéricos para la inferencia del tiempo de quemado en estructuras de combustión arqueológicas : influencia de parámetros*. Actas del IX Congreso Nacional de Arqueologia Chilena. Ed. Museo Nacional de Historia Natural. Santiago de Chile, Chile, pp 157-168.

[13] Laloy J. et Massard P., 1984, *Nouvelle méthode thermique d'étude des foyers préhistoriques*. Revue d'Archéométrie, vol. 8, pp. 33-40

[14] Muhieddine M., Canot É., March R. and Delannay R., 2011, *Coupling heat conduction and water-steam flow in a saturated porous medium*, Int. J. for Numer. Methods in Engng, vol. 85, pp. 1390-1414.

[15] Lieberherr R., 2006, *Le feu domestiqué – usage et pratiques dans l'architecture mondiale*, Établissement Humain et environnement socioculturelle n°54, Secteur de sciences humaines et sociales de l'UNESCO, 2006.

Annexe 2 : Muesli, bibliothèque de calcul numérique

MUESLI (https://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/muesli/) est une bibliothèque de calcul scientifique et de visualisation qui facilite l'appel de routines spécialisées en algèbre linéaire et la manipulation des matrices creuses au sein d'un programme écrit en Fortran. Ce dernier langage est bien adapté à l'écriture vectorielle et matricielle dense, et le logiciel MUESLI apporte une nouvelle fonctionnalité en définissant un nouveau type dérivé, `mfArray`, qui gère les matrices de manière **dynamique** et **automatique** : dynamique par la taille (au gré des affectations ou des résultats de routines), par le type (*réel* ou *complexe*) et par la structure du stockage de la matrice (*dense* ou *creuse*); automatique car ces changements sont effectuées sans intervention explicite de l'utilisateur.

Même si cette bibliothèque est généraliste, elle incorpore tous les ingrédients pour résoudre facilement de gros systèmes algébro-différentiels (DAE) par un solveur numérique stable et performant (DASSL), avec la possibilité d'utiliser une matrice jacobienne au format creux (appel à un solveur linéaire direct); le calcul des conditions initiales consistantes (point crucial pour les systèmes DAE) est effectué de manière exacte (ou approchée, dans le cas où l'utilisateur propose plus de contraintes que de degré de liberté) par un algorithme avancé (celui de MATLAB : https://fr.mathworks.com/products/matlab.html), basé sur une décomposition QR avec estimation du rang. La bibliothèque LAPACK (http://www.netlib.org/lapack/) est utilisée pour les opérations invoquant des matrices denses ou bandes ; en revanche, c'est la bibliothèque SuiteSparse (http://faculty.cse.tamu.edu/davis/suitesparse.html) qui est utilisée pour les matrices creuses.

Sa conception comporte enfin des éléments innovants, se rattachant aux thèmes « langage de programmation » et « génie logiciel » des sciences de l'information. En particulier :

- En l'absence des sous-modules (conçus pour faciliter l'écriture de grosses bibliothèques et prévus dans la norme Fortran-2008, mais pas encore disponible aujourd'hui), le logiciel MUESLI est hiérarchisé en pseudo sous-modules qui sont en fait des modules standards (au sens Fortran 90). Une technique de double compilation de ces modules est utilisée pour cacher l'accès à l'implémentation interne mais permettre aux modules de partager entre eux toutes les données : les variables et routines internes sont déclarées *publiques* lors d'une première compilation des modules dans l'ordre logique, puis sont déclarées *privées* lors d'une seconde phase de compilation dans l'ordre inverse.
- Le type dérivé `mfArray`, structure automatique et dynamique qui est au cœur de la conception du logiciel MUESLI masque complètement, comme dans toute conception orientée-objet, les données internes et oblige l'utilisateur à faire des appels de routines pour accéder à ces données. On a choisi une semi-ouverture du type dérivé `mfArray`, permettant un accès direct aux données internes par pointeurs. Il y a deux avantages à cela : l'accès lui-même est plus rapide et l'utilisation est facilitée, permettant toute la puissance vectorielle du Fortran 90; en revanche, comme il y a le risque de corruption des propriétés internes de la matrice (SYMM, POSDEF, DIAG, TRIU, TRIL, …), une « somme de contrôle » (*checksum*) est effectuée sur les données internes avant et après cette *ouverture* (mécanisme de *lock/unlock*).

Les pages suivantes proviennent de la documentation de Muesli :

- les premières pages (numérotées page 4 à 6), est extraite du *Guide de l'Utilisateur de Muesli* ; elle montre en particulier la liste des personnes (étudiants qui ont travaillé avec moi, ou personnes extérieures) qui ont contribué, par leur remarques et propositions, à améliorer cette bibliothèque ;
- les autre pages (numérotées 399 à 410) sont extraites du *Manuel de Référence de Muesli* ; elles correspondent à la description détaillée des routines et options concernant la résolution des systèmes algébro-différentiels (DAE). En particulier, on notera toutes les options qui servent à contrôler les erreurs de programmation de l'utilisateur (codage du système différentiel dans la routine `resid`, ou encore le calcul de la jacobienne dans `jac`).

L’**annexe 3** vient compléter la présente annexe, en expliquant comment on peut générer automatiquement la matrice jacobienne au moyen d’outils logiciels.

1 Introduction

This document describes the MUESLI Fortran 95 library.

MUESLI is freely available at the following address: https://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/muesli

More information can be found in the following documents:

- *MUESLI Installation Guide*
- *MUESLI Reference Manual*
- *MUESLI Inside*

The source code of MUESLI comes with many examples which can also give some help.

Copyright © 2003-2019, Édouard Canot, IPR/CNRS, Rennes, France.

Bugs reports or comments: mailto:Edouard.Canot@univ-rennes1.fr

Thanks to the MUESLI users: Samih Zein, Rabé Badé, Mohamad Muhieddine, Eduardo Mendes, Flàvio Aquino, Saulo Benchimol Bastos, Mohamed Lamine Sahari, Merline Flore Djouwe, Salwa Mansour, Paweł Biernat, Jerzy Wróbel, Antti Kemppinen, Corentin Beaucé, Anthony Ruiz, Kamel Sadok, Saeid Bahrami, Robinson Outerovitch, Sidaty Cheikh Sidi Ely, Mateus da Silva Teixeira, Vikas Sharma, Nicolas Chapuis.

Typographic convention

In this guide, coloring is used to differentiate source code and execution output. Lines from source code will be always displayed in this color, whereas input/output in a terminal will be always displayed in this color.

MUESLI routine names displayed in this color are included in the final index.

For sake of clarity, array constructors use brackets '`[`' and '`]`' (Fortran 2003) instead of '`(/`' and '`/)`' (Fortran 95).

About the name

Muesli: loose mixture of mainly rolled oats and often also wheat flakes, together with various pieces of dried fruit, nuts, and seeds. There are many varieties, some of which also contain honey powder, spices, or chocolate. (from https://en.wikipedia.org/wiki/Muesli)

Credits

Cover photograph: the photo on the cover is copyrighted by Niderlander. It can be used under a Limited Royalty Free License (see http://www.dreamstime.com/muesli-and-candied-fruits-imagefree4006423).

2 What is MUESLI ?

The MUESLI library is split in two parts, which correspond to the following Fortran modules:

- FML (Fortran Muesli Library) contains all necessary materials to numerically work with a dynamic array (dynamic in size, type and structure), called `mfArray`.
  To work with FML, your Fortran 95 source code must include the statement:

  ```
  use fml
  ```

- FGL (Fortran Graphics Library) contains graphics routines which use the `mfArray` objects.
  To work with FGL, your Fortran 95 source code must include the statements:

  ```
  use fml
  use fgl
  ```

Nearly all of MUESLI routine names begin either by the two characters `"ms"` (for Muesli Subroutine), or by `"mf"` (for Muesli Function).

2.1 MUESLI and other products

Actually, MUESLI is trying to be a near-clone of MATFOR®, especially of its philosophy. Note that most of routine names are derived from the ones of MATLAB. It's approach is also close to the MATRAN's one but, in our humble opinion, MUESLI is easier to use.

MATLAB®

Matlab is an interactive software for algorithm development, data visualization, data analysis, and numeric computation. Add-on toolboxes extend the Matlab environment to solve particular classes of problems. Its syntax (vector- and matrix-oriented) makes it a powerfull high-level language.
Matlab is a commercial product: http://www.mathworks.com/products/matlab

OCTAVE

Octave is a high-level language, primarily intended for numerical computations. It provides a convenient command line interface for solving linear and nonlinear problems numerically, and for performing other numerical experiments using a language that is mostly compatible with Matlab.
Octave is a free software: http://www.octave.org

SCILAB

Scilab is a scientific software for numerical computations providing a powerful open computing environment for engineering and scientific applications. Scilab includes hundreds of mathematical functions with the possibility to add interactively programs from various languages. It has sophisticated data structures, an interpreter and a high-level programming language.
Scilab is a free software: http://www.scilab.org

MATRAN

Matran is a Fortran 95 wrapper that implements matrix operations and computes matrix decompositions using Lapack and the Blas. It provides the flavor and convenience of coding in matrix oriented systems like Matlab, Octave, etc. By using routines from Lapack and the Blas, Matran allows the user to obtain the computational benefits of these packages with minimal fuss and bother.
Matran is a free software: http://www.cs.umd.edu/~stewart/matran/Matran.html

MATFOR®

Matfor is a set of Fortran 95 libraries that enhances your program with dynamic visualization capabilities, shortens your numerical codes and speeds up your development process. By adding a few lines of Matfor codes to your Fortran program, you can easily visualize your computing results and perform real-time animations.
Matfor is a commercial product: http://www.ancad.com/overview.html

`mfDaeSolve` integrator of DAE (implicit) systems

Interface:

```
function mfDaeSolve( resid, t_span, y_0, yp_0, options, jac, sparse ) result( out )

   interface
      subroutine resid( t, y, yprime, delta, flag )
         real(kind=MF_DOUBLE), intent(in)     :: t, y(*), yprime(*)
         real(kind=MF_DOUBLE), intent(out)    :: delta(*)
         integer,              intent(in out) :: flag
      end subroutine
   end interface

   type(mfArray),       intent(in out)           :: t_span
   type(mfArray),       intent(in)               :: y_0, yp_0
   type(mf_DE_options), intent(in),     optional :: options
   external,                            optional :: jac
   logical,             intent(in),     optional :: sparse

   type(mfArray) :: out
```

Description:

Performs the numerical integration of a system of (fully implicit [2]) differential algebraic equations (DAEs) of first order (and differential index 1 only[3]), which can be written in the general form:

$$R(t, y, y') = 0$$

described via the user subroutine `resid`, which must define the components $R_i(t, y, y')$ and store the values in the `delta` array.

The integration is done between t_0 and t_{end}, the extremal values in `t_span`, which must be a column vector `mfArray` of at least two components.

The output of `mfDaeSolve` is the row vector `out` which represents the solution y at time t_{end}. If the vector `t_span` contains more than two values, the routine returns in `out` the intermediate values of y, as specified by all time values present in `t_span`; in this case, `out` is a rank-2 `mfArray` with as many rows as components in `t_span`.

The integration uses the prescribed initial conditions stored in the row vectors `y_0` and `yp_0`. By default, it is assumed that the data `y_0` and `yp_0` are consistent (note that a consistency test is performed; if it fails, an error is returned), *i. e.* verify the equation

$$R(t_0, y_0, y'_0) = 0,$$

otherwise, the user can set the `options%IC_known` argument to `.false.`, so that the initial conditions will be computed by the solver; `yp_0` may be empty but `y_0` must always be allocated and must have its size equal to the number of equations (see `mf_DE_Options` for more details).

. . . / . . .

[2] Not just linearly implicit, which would have a mass matrix. For explicit systems, the `mfOdeSolve` routine should be used instead.

[3] For higher-index problems, the current algorithm may or may not work!

The last argument `flag` of `resid` is always equal to zero on input, and should be altered only in some special situations:

- set `flag` to -1 for an *Illegal Condition*; the value of y' at this time may not be available. The routine will try to continue the integration (reducing the time step) as long as possible without getting the illegal condition. [You can put this assignment anywhere in the `resid` routine.]
- set `flag` to -2 for an *Emergency Exit*; the value of y' at this time may not be available. The routine will return control immediately to the calling program. [You can put this assignment anywhere in the `resid` routine.]
- set `flag` to 3 for an *End Condition*; the value of y' at this time must be always available. The routine will adapt its time step to finish exactly at the current time given by the argument `t` of `resid`. [WARNING: you **must put this assignment** at the end of the `resid` routine, to insure that all the residues `delta` have been computed.]

The previous three situations are called *stopping conditions*. Note that when a *stopping condition* is found in the user subroutine `resid`, then the vector `t_span` (which contains the value of t_{end}) is modified. Note also that the three *stopping conditions* doesn't have the same numerical cost; their cost is described in the following table:

Flag to used in `resid`	**Stopping condition**	**Numerical cost**
-1	*Illegal Condition*	expensive
-2	*Emergency Exit*	very cheap
3	*End Condition*	cheap

All following options are stored in the structure `options` (see `mf_DE_Options`).

The `mfArray options%tol` allows the user to give the precision of the result, and must contain non negative values. Default values are 10^{-3} for the relative tolerance and 10^{-6} for the absolute tolerance; this `mfArray` may be of rank 0, 1 or 2:

- if it is a scalar, it specifies the relative tolerance for all the component of the solution; the absolute tolerance is fixed to 10^{-6}.
- if it is a vector, it must have two elements which specifies the relative and the absolute tolerance, respectively.
- if it is a matrix, it must have two columns (corresponding to the relative and absolute tolerance) and a number of rows equal to the number of equations.

The `mfArray options%non_neg` allows the user to apply non-negativity constraints to a subset (or all the set) of the components of the solution `y`. It must be a vector describing the indexes of such constraints.

The `mfArray options%y_ind_out` allows the user to get only a subpart of the `mfArray out`; if present, it must contain integer indexes of the wanted components of the `out` vector.

The user may provide the `jac` routine to compute the jacobian matrix (otherwise, it will be numerically evaluated by finite differences). This matrix may be defined in dense, band or sparse format. For the first two formats, the interface of the `jac` routine is:

```
interface
   subroutine jac( t, y, yprime, jacobian, cj, ldjac )
      real(kind=MF_DOUBLE), intent(in)  :: t, y(*), yprime(*), cj
      integer,              intent(in)  :: ldjac
      real(kind=MF_DOUBLE), intent(out) :: jacobian(ldjac,*)
   end subroutine
end interface
```

· · · / . . .

The generalized jacobian[4] $\widetilde{J}$ must be defined as:

$$\widetilde{J} = \frac{\partial R}{\partial y} + c_J \frac{\partial R}{\partial y'}$$

where c_J is a scalar computed by the solver; therefore the numerical values of $\widetilde{J}$ must be stored in the `jacobian` rank-2 array as follows: `jacobian(i,j)` $= \widetilde{J}_{i,j} = \frac{\partial R_i}{\partial y_j} + c_J \frac{\partial R_i}{\partial y'_j}$.

Please note that, for the dense format, only non-zero values of $\widetilde{J}$ need to be defined.

If the jacobian is symmetric and positive definite (abbreviated as SPD), you should set the `jac_symm_pos_def` option (see `mf_DE_Options`) in order to economize storage and obtain a better performance for its factorization; in such a case, you must give only the upper part of the jacobian.

Furthermore, the jacobian $\widetilde{J}$ may be banded, in order to economize both memory and CPU time. In such a case, the `mfArray options%band` must be set; it must contain a vector of exactly two elements: ML and MU which are the widths of the lower and upper parts of the band, respectively, with the main diagonal being excluded (*e. g.* for a tridiagonal system, both elements are equal to 1). In this case, routine `jac` must store the elements $\widetilde{J}_{i,j}$ in the matrix `jacobian` as follows:

```
irow = i - j + ML + MU + 1
jacobian(irow,j) =  J̃_{i,j}
```

Internally `ldjac` is equal to `2*ML+MU+1`, but you shouldn't worry about that. For an SPD matrix, simply take `ML` equal to zero in the previous formulae.

For the sparse case, the optional argument `sparse` must be set to `.true.` and the `jac` routine must be defined as:

```
interface
   subroutine jac( t, y, yprime, cj, nrow, job, pd, ipd, jpd, nnz )
      real(kind=MF_DOUBLE), intent(in)     :: t, y(*), yprime(*), cj
      integer,              intent(in)     :: nrow, job
      real(kind=MF_DOUBLE), intent(out)    :: pd(*)
      integer,              intent(out)    :: ipd(*), jpd(*)
      integer,              intent(in out) :: nnz
   end subroutine
end interface
```

c_J having the same meaning as before.

The `pd,ipd,jpd` f90 arrays describe the CSC (Compact Sparse Column) representation of the sparse jacobian matrix, as follows:

- `pd(1:nnz)` contains the non-zero matrix entries;
- `ipd(1:nnz)` contains the row indexes;
- `jpd(1:ncol+1)` is the pointer to the beginning of the columns, in arrays `(pd,ipd)` (actually, a jacobian matrix is always square, hence `ncol`=`nrow`).

Row indexes must be sorted in ascending order. Moreover, this routine must include a mechanism such that only the value of `nnz` is computed when `job`=0; therefore the argument `nnz` has generally an `intent(out)` for the first call and an `intent(in)` for subsequent calls.

.../...

[4] It is so called because it is the linear combination of two jacobian. Actually, it is close to the iteration matrix of the non-linear solver. See also this remark.

Be aware that the sparse structure (that is to say, the indexes' vectors `ipd` and `jpd`) must remain the same during all the integration process. On the contrary, use the option `spjac_const_struct` of the `mf_DE_Options` derived type. Moreover, you can even force to reuse the same sparse structure if you make many calls to `mf/msOdeSolve` during, *e. g.* , an iterative procedure: see the option `reuse_spjac_struct` of the `mf_DE_Options` derived type.

Remarks:

- `out` may contain *NaN* values for some reasons. In such a case, use the `msDaeSolve` routine to further investigate the problem;
- `resid` and `jac` have imposed lists of arguments; the user may use module's data in order to exchange other information between his program and these routines (especially for checking the number of equations). Therefore, except for very simple cases, these two user's routines must be located inside a module, `USE`d also by the user's program.
- for debugging purposes, the user may inspect the values of y and y' during the integration process. See explanations about the fields `monitor_y_ind`, `monitor_yp_ind` and `monitor_pause` of the `mf_DE_Options` derived type.

See also: `mfOdeSolve`

`msDaeSolve` integrator of DAE (implicit) systems

Calling syntax:

```
call msDaeSolve( mfOut( y, status[, tolout, yp, solve_log, init_log, t_log] ),  &
                 resid, t_span, y_0, yp_0[, options, jac, sparse] )
```

Description:

The behavior of this routine is similar to those of `mfDaeSolve`, but it allows to get more information returned by the integrator (via `mfArrays` which must be enclosed by the `mfOut` function):

- `y` contains the numerical result
- `status` contains a returned error code:

  `status` > 0: normal and reliable termination of the routine. It is assumed that the requested accuracy has been achieved.
  (Exact meaning of the status can be found below)

  `status` < 0: abnormal termination of the routine. The estimates for `y` is less reliable. It is assumed that the requested accuracy has not been achieved. Moreover, in some circumstances, a message is printed; in such cases, the user cannot use numerical values in `y` and `yp` and therefore an appropriate decision must be taken.
  (Exact meaning of the error can be found below)
- `tolout` is different from `tol` in some few cases. First, if `status` $= -2$, it contains an appropriate value for continuing the integration. Second, if `status` $= -101$, it contains the absolute value of the residual vector $R(t_0, y_0, y'_0)$ (initial data consistency).
- `yp` contains an estimation of the derivative at time t_{end} (or at all intermediate values defined in `t_span`); moreover, the role of the optional argument `y_ind_out` applies to `yp`.
- `solve_log` contains additional information about the integration process. It is a vector of 6 elements, which are:

  `nb_step` is the total number of steps used;

  `dt_min` the smallest step used;

  `dt_max` the largest step used;

  `nb_resid` is the number of calls of the `resid` routine;

  `nb_jac` is the number of evaluation of the jacobian matrix;

  `nb_solve` is the number of solving the linear system using the jacobian matrix.
- `init_log` contains specific information about the computation of consistent initial conditions (when this has been required). It is a vector of 4 elements, which are:

  `nb_resid_0` is the number of calls of the `resid` routine;

  `nb_jac_0` is the number of evaluation of the jacobian matrix;

  `nb_solve_0` is the number of solving the linear system using the jacobian matrix;

  `cpu_time_0` is the CPU time spent in this initialization part.
- `t_log` contains the whole history of the times used during the integration. This can be useful to detect where a critical behavior is located.

Among these returned variables, only the first two are required, while the others are optional. Moreover, it is forbidden to use the same `mfArray` in place of two or more actual arguments, even empty.

. . . / . . .

Remark: The presence of the argument `status` allows the user to launch its program in a batch mode: indeed, errors in the current routine will not stop the program (it is the responsability of the programmer to test the value of the `status` variable before using the result). If the `mfDaeSolve` routine was used instead, an error would stop the program and, in debug mode, a traceback of this error would be displayed.

See also: `msOdeSolve`, `mf_DE_Options`

`status`	*explanation*
0	Normal termination of the solver.
4	Normal termination of the solver, but a large amount of work has been expended.
12	Normal termination of the solver, but an *End Condition* was found (`flag`, last argument in `resid`, was equal to 3 and the solver has been called to finish at the new current point).
−2	The error tolerances are too stringent.
−3	The local error test cannot be satisfied because you specified a zero value for the absolute error in `tol` and the corresponding computed solution component is zero. Thus, a pure relative error test is impossible for this component.
−6	The method used had repeated error test failures on the last attempted step.
−7	The corrector could not converge.
−8	The matrix of partial derivatives is singular.
−9	The corrector could not converge: there were repeated error test failures in this step.
−10	Abnormal termination of the solver, due to an *Illegal Condition* (`flag`, last argument in `resid`, was equal to −1 and the solver did its best to not obtain −1).
−11	Abnormal termination of the solver, due to an *Emergency Exit* (`flag`, last argument in `resid`, was equal to −2 and control has been returned to the calling program).
−13	Some indices for the non-negativity constraints stored in the `non_neg` array of the `mf_DE_Options` are not in the range `[1,Neq]` (where `Neq` is the number of equations).
−14	The user-supplied `resid` routine returned invalid entries (*NaN* value).
−15	The user-supplied `jac` routine (either dense or sparse) returned invalid entries (*NaN* value).
−20	Allocation error because the maximum of available memory has been reached. An explanation is printed.
−33	Invalid argument.
−34	Invalid implementation of the user-defined sparse jacobian.
−40	On calling, the number of output argument(s) is incorrect.
−100	The routine wasn't able to start, neither choose an initial timestep, nor check initial conditions for consistency (`flag`, last argument in `resid`, was different from 0).
−101	Initial conditions `y_0` and `yp_0` are not consistent.
−102	`msDaeSolve` failed to compute the initial vector `yp_0`.

`mf_DE_Options` options for differential solvers *(derived type)*

Description:

This derived type gathers options used by the two integrators `mfOdeSolve` and `mfDaeSolve`, and is defined as follows:

```
type, public :: mf_DE_Options

   character(len=3)     :: method = ""
   type(mfArray)        :: tol, y_ind_out, band
   type(mfArray)        :: non_neg, y0_ind, yp0_ind
   logical              :: IC_known            = .true.,                &
                           print_progress      = .false.,               &
                           disp_times          = .false.,               &
                           jac_symm_pos_def    = .false.,               &
                           spjac_const_struct  = .true.,                &
                           reuse_spjac_struct  = .false.,               &
                           jac_investig        = .false.,               &
                           rational_null_basis = .false.,               &
                           pseudo_inverse      = .false.
   real(kind=MF_DOUBLE) :: jac_rcond_min       = MF_EPS

   logical              :: save_sing_jac       = .false.
   type(mfArray)        :: monitor_y_ind,                               &
                           monitor_yp_ind
   logical              :: monitor_pause       = .false.
   integer              :: check_jac           = 0,                     &
                           print_check_jac     = 0

   type(mf_DE_Named_Group), allocatable :: named_eqn(:),                &
                                           named_var(:)

end type
```

The following fields may be used in both integrators:

- `tol` specifies the tolerance in many ways (relative or absolute, as a whole or by component).
- `y_ind_out` allows the user to get only a subpart of the result.
- `band` specifies that the jacobian is stored in a band format.
- `print_progress` specifies that the percentage of work already done is printed in the terminal. This options should not be used when using the main program in a batch mode, redirecting output in a file.
- `disp_times` specifies that time values will also be displayed – wall clock time is used, not CPU time.

  (See `msPrepProgress` and `msPrintProgress` for other information concerning the last two options.)

. . . / . . .

- `jac_symm_pos_def` must be set to `.true.` only when you are sure that the jacobian is symmetric and positive definite; in such a case, you must only provide the upper part of the jacobian: this will economize some storage. A Cholesky factorization will be used (instead a general LU one) and, especially for sparse, large matrices, this will be more efficient.
- `spjac_const_struct` must be set to `.false.` only when you are sure that the sparse structure of the jacobian is modified along all the time integration (this is not common!); note that this option is used only for the sparse case.
- `reuse_spjac_struct` must be set to `.true.` only when you are sure that the sparse structure of the jacobian is not modified during many different calls of the DAE or ODE solvers: this can occur during an iterative procedure using the same mesh. Be aware that this option can only set to `.true.` *after* the first call of the solver; on the contrary, an error will arise. Note that this option is used only for the sparse case.
- for debugging the DAE integration (but only if `jac_investig` is *TRUE*), the user may set a threshold value (not greater than unity) in `jac_rcond_min` in order to detect whether the jacobian is singular or not[5]. When (an estimation of) the reciprocal of condition number is less than or equal to the value of `jac_rcond_min`, then the jacobian is considered as singular: a warning message is then emitted. Moreover, for the dense case only:
  1. additional information is provided to the user, about the null space of the transpose of the jacobian matrix: this may help the user in understanding why the jacobian is singular.
  2. the jacobian and the nullspace of its transpose can be saved on disk according to the value of the boolean `save_sing_jac` (the filenames are respectively '*jacobian.dat*' and '*nullspace.dat*').

  The default value of `jac_rcond_min` is the machine epsilon and, if set by the user, it cannot be smaller than this default value.
  The nullspace basis may be returned in the form of a rational basis (set `rational_null_basis` to `.true.`) but this should be useful for small problem only (few number of equations) or for pedagogical reasons.
  The `pseudo_inverse` component is reserved for a future usage.
- for debugging purposes again, the user can tell the appropriate integrator to store all intermediate values (*note:* at the internal time steps!), by specifying a number of indexes in `monitor_y_ind`, and/or indexes in `monitor_yp_ind`. In such a case, the selected values of the vector y (resp. y') are copied in the file '*odesolve_y.out*' or '*daesolve_y.out*' (resp. '*odesolve_yp.out*' or '*daesolve_yp.out*'); each line contains the current time (independant variable) in the first column, then the selected values of the dependant variables. The boolean `monitor_pause` allows the user to pause after each successful internal step of the ODE/DAE solver (the default behavior is not to make such an interruption). Moreover, the data files are flushed continuously, so you can use an external graphic tool to plot the data which are monitored.
- recall that the use of `MF_NUMERICAL_CHECK` is recommended, because it allows internal routines to check the validity of the equations or of the jacobian elements, especially non finite values (Infinities, NaNs).

. . . / . . .

[5] For the ODE solver, the jacobian provided by the user may be singular, it doesn't matter for the integration process. See the remark at the end of this entry.

– for debugging purposes (but only when MF_NUMERICAL_CHECK is *TRUE*), `check_jac` can be used to make a check of the user jacobian (dense only):

1. when `check_jac` is set to 1, a global and quick check is done;
2. when `check_jac` is set to 2, a complete (but more expensive) check is done.

In both cases, a message is displayed according to the errors obtained concerning the accuracy of the jacobian. *Note that this is an estimation because (i) discrepancies found may be strongly affected by both floating-point roundoff errors and badly scaled variables or equations, and (ii) relative errors are based on a sort of norm of the jacobian; when this latter is large, some terms in the error matrix may remain small.*

`print_check_jac` can be used to print the results of the jacobian check:

1. when `print_check_jac` is set to 1, information is displayed on the screen;
2. when `print_check_jac` is set to 2, information is stored in an overwritten file (a unique file along all the integration process). The library makes as many pauses as needed to let the user to inspect this file.

In both cases, (i) the given information depends on the level of the check and (ii) the output is displayed at each call of the `jac` routine, regardless of the severity of the discrepancies.
See the *Muesli User's Guide* where a detailed example of use can be found.

– the `named_eqn` and `named_var` fields allow the user to name his equations and variables by grouping them under useful, physical names. The derived type `mf_DE_named_group` is defined as follows:

```
type, public :: mf_DE_Named_Group
   character(len=132) :: name
   integer            :: begin, last
end type
```

The user must allocate himself the arrays `named_eqn(:)` and `named_var(:)`, then correctly initializes the three internal fields: `name` (the name of the group), `begin` and `last` (the indices of equation in `deriv` or `resid` which define the beginning and the end of the each named group).
See the *Muesli User's Guide* where an example of use can be found.

The field `method` is specific to the `mfOdeSolve` integrator. It may contains `"RKF"` (*Runge-Kutta Fehlberg*, which is the default method), `"ABM"` (*Adams-Bashforth-Moulton*), or `"BDF"` (*Backward Differentiation Formula*).

The remaining are specific to the `mfDaeSolve` integrator:

– `non_neg` allows the user to constrain some components of the solution to remain non negative.

– `IC_known` indicates whether initial conditions are known (and then supposed to be consistent) or not (see also just below).

– in the case where initial conditions have to be computed (i.e. when `IC_known` is equal to `.false.`) and only when the jacobian matrix is provided, the user may indicate which components of the vectors `y_0` and `yp_0` are prescribed in, respectively, `y0_ind` and `yp0_ind` (at most N components may be prescribed, where N is the number of the system's equations).
If used, these two vectors must have a length equal to N; free components are selected by putting a zero at appropriate locations, whereas prescribed components may be selected by putting any non-zero value.
The user may also leave the fields empty, which is equivalent to specify that no component at all are prescribed. Values present in the two `mfArrays` `y_0` and `yp_0` are then considered as initial guesses.

· · · / · · ·

All fields of this derived type are `public`, so the user can access each component via the '`%`' Fortran 90 selector.

Lastly, the user can use the `msRelease` routine to free all fields of this structure (and to re-initialize the components between two different calls to any of these integrators).

Remark: The jacobian matrix of the ODE solver may be singular, because the iteration matrix M writes:

$$M = I + \Delta t\, J = I + \Delta t\, \frac{\partial F}{\partial y}$$

It can be seen easily that for a sufficiently small time-step Δt, M is not singular so there is no constraint over J: it could be even the null matrix! On the contrary, the iteration matrix M used by the DAE solver is close to the following generalized jacobian:

$$M \approx \widetilde{J} = \frac{\partial R}{\partial y} + c_J \frac{\partial R}{\partial y'}$$

where c_J is related to the inverse of the time step Δt. In this latter case, $\widetilde{J}$ cannot be singular. (The two functions $F(t, y)$ and $R(t, y, y')$ have been defined respectively at the `mfOdeSolve` and `mfDaeSolve` entries.)

See also: `mf_NL_Options`

Annexe 3 : Génération automatique de la matrice jacobienne par Calcul Formel

Actuellement, le solveur ODE/DAE de Muesli (`msOdeSolve` et `msDaeSolve`) sont capables de calculer une estimation de la jacobienne du système différentiel, par différences finies, mais pas de la stocker au format creux ; on est donc doublement pénalisé : d'une part parce que l'estimation faite par différences finies est coûteuse en temps de calcul, d'autre part parce que les opérations d'algèbre linéaire appliquées aux matrices denses sont également coûteuse.

Comme précisé dans l'annexe 2, l'utilisateur peut coder lui-même la jacobienne en dérivant le système différentiel ODE/DAE par rapport à toutes les variables inconnues. Pour les systèmes compliqués, le procédé est risqué : non seulement on peut faire une faute d'expression, mais aussi mal coder les différents termes de la jacobiennes. Une solution préconisée est d'utiliser le calcul formel (CAS = Computer Algebra System) pour :

1. calculer analytiquement les éléments de la matrice jacobienne (dérivées de toutes les équations par rapport à chacune des inconnues) ;
2. générer du code optimisé dans un langage donné (Fortran ou C) ;
3. inclure automatiquement ces fragments de code dans le programme source de l'utilisateur, par un simple mécanisme d'`include`.

J'ai utilisé cette manière de faire depuis une dizaine d'années, au moyen des logiciels Maple (https://www.maplesoft.com/products/Maple/) et Maxima (http://maxima.sourceforge.net/). Le premier est un logiciel de type commercial que j'ai beaucoup utilisé dans les années 1996-2000 pour générer des schémas de discrétisation d'ordre élevés s'appuyant sur la géométrie différentielle. Le second est gratuit et donc facilement accessible aux utilisateurs n'ayant pas accès au système Maple. Dans les deux cas, il est possible d'appeler le moteur de calcul formel par un script, sans ouvrir l'interface graphique. Bien entendu, les commandes et le langage sous-jacent sont différents, et je donnerai des exemples complets d'utilisation pour les deux systèmes.

Signalons qu'il existe des outils de différentiation automatique qui effectue directement de la transformation de code : le site suivant http://www.autodiff.org/?module=Tools est spécialement dédié à ce genre d'outils. Parmi les plus connus, on trouve ADIFOR (https://www.mcs.anl.gov/research/projects/adifor/), OpenAD (https://www.mcs.anl.gov/OpenAD/), Tapenade (https://www-sop.inria.fr/tropics/tapenade.html), …
À noter que certains, à l'origine gratuit ou libre d'accès, sont devenus commerciaux. J'ai testé certains des outils précités ; je pense qu'ils ont leur utilité pour de gros codes, à condition que la structuration d'origine du code s'y prête. Dans le cas des différents codes relevants du programme ArPhyMat et dont il est question dans ce mémoire, ces outils s'adaptent difficilement : ils demandent en général une structuration particulière. De plus, l'utilisation (intensive dans mon cas) des modules et des types dérivés de Fortran 90 conduit à de trop grandes difficultés, il aurait fallu modifier profondément la bibliothèque Muesli.

Les exemples qui suivent sont tirés de mes expériences personnelles ; ils ont été présentés lors d'un workshop[1] et séminaire de laboratoire[2].

Considérons tout d'abord la routine Fortran `resid()` qui défini le résidu à annuler, c'est-à-dire le système d'équation différentielle : un extrait est représenté sur la figure A3-1. Considérons pour l'instant l'utilisation du logiciel Maple. La première étape consiste à retranscrire en langage Maple : voir la figure A3-2. Les différentes expressions à calculer sont stockés dans autant de variables qu'ils y

1 Canot É., 2012, "DAE solver and symbolic computation", RAIM (5e Rencontres Arithmétique de l'Informatique Mathématique), 20-22 juin 2012, Dijon, France.
2 Canot É., 2018, « Calcul automatique d'une jacobienne – quelques outils pour un code numérique robuste et performant », Journée Simulation de l'IPR, 16 janv. 2018, PNRB, Campus de Beaulieu, Rennesn France.

a d'expressions différentes à dériver : `delta1`, `delta2`, … contiennent les expressions pour chaque sous-cas : `i==1`, `i==nx`, …

L'étape suivante est de dériver ces différentes expressions (commande `diff` de Maple) par rapport aux variables inconnues : voir la figure A3-3.

```
      ! diffusion ************************************************

         rhoc_e = alpha*rhot(num)*ct(num) + (1-alpha)*rho_s*cs
         f3 = f1*rhoc_e
         f4 = f2*rhoc_e
         prc_s_mr = 2.0d0*per(num)*rhot(num)*ct(num)/mut(num)
         prc_s_mr_x = prc_s_mr/f3
         prc_s_mr_y = prc_s_mr/f4

         ! avec la vitesse de Darcy (couplage)
         if( j == 1 ) then
! Dirichlet (dessus)
            delta(num) = yprime(num)
         else if( j == ny ) then
! Neumann (dessous)
!   indice 3 impossible -- vy = 0

            if( i == 1 ) then
! Coin inférieur droit  -- vy = 0
!   indice 2 impossible -- vx = 0

               delta(num) =                                  yprime(num) &
                          + 2.0d0*(kt(num)+kt(num1))/f3 * y(num)      &
                          - 2.0d0*(kt(num)+kt(num1))/f3 * y(num1)     &
                          - 2.0d0*(kt(num4)+kt(num))/f4 * y(num4)     &
                          + 2.0d0*(kt(num4)+kt(num))/f4 * y(num)

            else if( i == nx ) then
! Coin inférieur gauche -- vy = 0
!   indice 1 impossible -- vx = 0

               delta(num) =                                  yprime(num) &
                          - 2.0d0*(kt(num2)+kt(num))/f3 * y(num2)     &
                          + 2.0d0*(kt(num2)+kt(num))/f3 * y(num)      &
                          - 2.0d0*(kt(num4)+kt(num))/f4 * y(num4)     &
                          + 2.0d0*(kt(num4)+kt(num))/f4 * y(num)

            else ! 1 < i and i < nx
               vx = (y(nump1) - y(nump2))/2.0d0
               if( vx < 0.0d0 ) then
                  fac1 = 0.0d0
               else
                  fac1 = 1.0d0
               end if

               delta(num) =                                        yprime(num) &
                          + prc_s_mr_x*vx*(1.0d0-fac1) *           y(num2)     &
                          - prc_s_mr_x*vx*(1.0d0-2.0d0*fac1) *     y(num)      &
                          - prc_s_mr_x*vx*fac1 *                   y(num1)     &
```

Fig. A3-1 : fragment de code Fortran de la routine `resid()` qui défini l'équation différentielle à résoudre.

```
with(CodeGeneration):

x := eps*(y[num]-Tf):
phi := (1+erf(x))/2:
phi_prime := epssqrtpi*exp(-x**2):
kt[num] := kl + diffk*phi:
kt[num] := 1/(alpha/kt[num]+(1-alpha)/ks):
ct[num] := cl + diffc*phi + L*phi_prime:
rhot[num] := rhol + (y[nump]/idealgascte/y[num]-rhol)*phi:
rhoc_e := alpha*rhot[num]*ct[num] + (1-alpha)*rhos*cs:
mu_l := 0.4527*(y[num]-Tref+40.0)^(-1.492):
mu_v := 1.22e-5 + 4.0e-8*(y[num]-Tf):
mut[num] := mu_l+(mu_v-mu_l)*phi:
f3 := f1*rhoc_e:
f4 := f2*rhoc_e:
prc_s_mr := 2*per[num]*rhot[num]*ct[num]/mut[num]:
prc_s_mr_x := prc_s_mr/f3:
prc_s_mr_y := prc_s_mr/f4:
#  partie diffusion
# pr j=ny et i =1
kt[num1] := subs( y[num]=y[num1], kt[num] ):
kt[num2] := subs( y[num]=y[num2], kt[num] ):
kt[num3] := subs( y[num]=y[num3], kt[num] ):
kt[num4] := subs( y[num]=y[num4], kt[num] ):
delta1[num] := yprime[num]
             + 2*(kt[num]+kt[num1])/f3*y[num]
             - 2*(kt[num]+kt[num1])/f3*y[num1]
             - 2*(kt[num4]+kt[num])/f4*y[num4]
             + 2*(kt[num4]+kt[num])/f4*y[num]:
#
# pr j=ny et i=nx
delta2[num] := yprime[num]
             + 2*(kt[num]+kt[num2])/f3*y[num]
             - 2*(kt[num]+kt[num2])/f3*y[num2]
             - 2*(kt[num4]+kt[num])/f4*y[num4]
             + 2*(kt[num4]+kt[num])/f4*y[num]:
vx := (y[nump1]-y[nump2])/2:
vy := (y[nump3]-y[nump4])/2:
#
# 1<i and i<nx
delta3[num] := yprime[num]
```

Fig. A3-2 : Transcription du système différentiel dans Maple ; la différence la plus notable est l'utilisation des crochets à la place des parenthèses. D'autres contraintes existent, elles seront présentées plus loin.

```
# Jacobian
# partie diffusion
d[1] := cj*diff( delta1[num],yprime[num] ) +
        diff( delta1[num],y[num] ):
d[2] := diff( delta1[num],y[num1] ):
d[3] := diff( delta1[num],y[num4] ):
d[4] := diff( delta1[num],y[nump] ):
writeto("jacobian_1.f");
printf("C Contains the Fortran output of the jacobian\n");
printf("C (from the Maple script 'jacobian.mpl')\n");
printf("\n");
Fortran( d[1..4], optimize, coercetypes=false,
limitvariablelength=false, resultname=jacob ):
printf("      END\n");
writeto(terminal);

d[5] := cj*diff( delta2[num],yprime[num] ) +
        diff( delta2[num],y[num] ):
d[6] := diff( delta2[num],y[num2] ):
d[7] := diff( delta2[num],y[num4] ):
d[8] := diff( delta2[num],y[nump] ):
writeto("jacobian_2.f");
printf("C Contains the Fortran output of the jacobian\n");
```

Fig. A3-3 : Calcul des dérivées pour chaque élément de la matrice jacobienne. Les différents éléments de la jacobienne, provisoirement stockés dans les variables `d[1]`, `d[2]`, … sont ensuite convertis en code Fortran optimisé par la commande Maple du même nom, et écrits dans les fichiers sources `jacobian_1.f`, `jacobian_2.f`, …

Si on suppose que le script Maple se nomme `jacobian.mpl`, alors on l'exécute par la commande :

```
$ maple jacobian.mpl
```

La commande précédente exécute le script sans ouvrir l'interface graphique du logiciel.

L'étape de conversion (figure A3-3) et de l'écriture en code optimisé conduit à quelque chose qui ressemble au contenu de la figure A3-4 : chaque sous-expression (variables `t1`, `t2`, `t3`, …) n'est calculée qu'une seule fois.

Il reste néanmoins, avant de pouvoir utiliser le code Fortran produit à utiliser des filtres Perl de manière à :

- convertir le code de format fixe (vieille réminiscence du Fortran 77) en format libre (Fortran 90) ;
- changer certains noms de variables (car le langage interdit certains noms).

Enfin, on peut inclure directement le code optimisé dans le code source écrit par l'utilisateur. Un extrait est montré sur la figure A3-5.

```
! Contains the Fortran output of the jacobian
! (from the Maple script 'jacobian.mpl')

      t1 = y(num) - Tf
      t3 = erf(eps * t1)
      t4 = 1 + t3
      t6 = kl + diff_k * t4 / 2
      t9 = 1 - alpha
      t11 = t9 / ks
      t12 = alpha / t6 + t11
      t13 = t12 ** 2
      t16 = t6 ** 2
      t19 = sqrt(0.3141592653589793D1)
      t20 = 0.1D1 / t19
      t22 = 0.1D1 / t13 * alpha / t16 * diff_k * t20
      t23 = eps ** 2
      t24 = t1 ** 2
      t26 = exp(-t23 * t24)
      t27 = t26 * eps
      t28 = 0.1D1 / f1
      t29 = 0.1D1 / ideal_gas_cte
      t31 = 0.1D1 / y(num)
      t33 = y(nump) * t29 * t31 - rho_l
      t36 = alpha * (rho_l + t33 * t4 / 2)
      t38 = L * eps_sqrtpi
      t40 = cl + diff_c * t4 / 2 + t38 * t26
      t44 = t36 * t40 + t9 * rho_s * cs
      t45 = 0.1D1 / t44
      t46 = t28 * t45
      t47 = t46 * y(num)
      t51 = 0.1D1 / t12
      t52 = y(num1) - Tf
      t54 = erf(eps * t52)
      t57 = kl + diff_k * (1 + t54) / 2
```

Fig. A3-4 : résultat (extrait) du script Maple qui a servi à générer le code Fortran optimisé des éléments de la jacobienne.

```
      !-----------------------------------------------------------------
      ! pour l'équation d'énergie

      ! avec la vitesse de Darcy (couplage)
      if( j == 1 ) then
! Dirichlet (dessus)
         jacobian(num,num) = cj
      else if( j == ny ) then
! Neumann (dessous)
!   indice 3 impossible -- vy = 0

         if( i == 1 ) then
! Coin inférieur droit  -- vy = 0
!   indice 2 impossible -- vx = 0

#include "jacobian_1.inc"
            jacobian(num,num)  = jacob(1)
            jacobian(num,num1) = jacob(2)
            jacobian(num,num4) = jacob(3)
            jacobian(num,nump) = jacob(4)


         else if( i == nx ) then
! Coin inférieur gauche -- vy = 0
!   indice 1 impossible -- vx = 0

#include "jacobian_2.inc"
            jacobian(num,num)  = jacob(5)
            jacobian(num,num2) = jacob(6)
            jacobian(num,num4) = jacob(7)
            jacobian(num,nump) = jacob(8)

         else ! if( 1 < i .and. i < nx ) then
            vx = (y(nump1) - y(nump2))/2.0d0
            if( vx < 0.0d0 ) then
               fac1 = 0.0d0
            else
               fac1 = 1.0d0
            end if

#include "jacobian_3.inc"
            jacobian(num,num)   = jacob(9)
            jacobian(num,num1)  = jacob(10)
            jacobian(num,num2)  = jacob(11)
```

Fig. A3-5 : extrait de la routine `jac()` qui construit la matrice jacobienne `jacobian`, à partir d'expressions optimisées (générées par Maple) stockées dans les fichiers `jacobian_1.inc`, `jacobian_2.inc`, etc.

L'ensemble du processus (appel de Maple, application des filtres Perl) peut s'automatiser au besoin, en incluant les lignes d'appel dans un Makefile. Si l'utilisateur change un terme de son équation physique, il faut seulement qu'il s'assure de modifier le terme correspondant *à la fois* dans la routine `resid()` et dans le script `jacobian.mpl`. Toute la génération de la jacobienne se mettra à jour à l'appel suivant de la commande `make`.

Annexe 4 – Présentation de *Zohour* (version 2D, v0.8.6++)

1. Généralités sur les raffinements de maillages.

Zohour (https://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/zohour/) est un mailleur adaptatif 2D. Donnons tout de suite quelques définitions :

- *mailleur* : programme qui met en œuvre un algorithme de maillage, permettant de découper un domaine géométrique en un certain nombre de portions plus petites, appelées *mailles*. Ce découpage doit être une partition exacte : la réunion des mailles correspond exactement au domaine de départ.
- *adaptatif* : le maillage s'adapte au calcul d'un problème donné. La plupart du temps, l'adaptation est itérative. Un exemple classique concerne par exemple un maillage dont les mailles vont être d'autant plus petites que leur emplacement est proche d'un certain point, ou d'une certaine zone, du domaine initial.
- *2D* : le domaine de départ et toutes les mailles appartiennent à un espace de dimension 2.

Les maillages sont aujourd'hui utilisés dans quasiment toutes les résolutions de problèmes provenant de la discrétisation d'une ou plusieurs équations aux dérivées partielles (Différences Finies, Éléments Finis, Éléments frontières, Volumes Finis, etc. Seules les méthodes de type *meshless* – par ex. les méthodes de point vortex – n'ont pas besoin de maillage).

Parmi les formes de mailles 2D les plus utilisées, on trouve le rectangle (ou plus généralement le quadrilatère) et le triangle.

La représentation d'un maillage 2D peut être :

- *structurée* – les mailles sont repérées par deux indices *(i,j)* et sont par conséquent à 4 côtés ;
- *non structurée* – les mailles sont d'abord définies, via une *table de définition*, par les nœuds qu'elles utilisent, puis sont reliées aux autres mailles voisines par une *table de connectivité*. Les mailles ont un nombre arbitraire de côtés, mais souvent elles ont 3 côtés.

La précision de la méthode dépend de la taille des mailles, mais aussi de leur forme. Ainsi, il est connu qu'en Volumes Finis, où on doit calculer les flux sur les côtés de la mailles, un maillage rectangulaire donne une meilleure précision qu'un maillage triangulaire quelconque.

Un maillage adaptatif répond à la question suivante : « Comment modifier un maillage afin de raffiner les mailles – c'est-à-dire augmenter la finesse de représentation – en des endroits arbitraires ? ».

Remailler tout le domaine est une possibilité (cf. figure A4-1), mais outre le coût d'un remaillage global, il faut aussi interpoler toutes les quantités numériques concernées par le solveur ou l'algorithme à tous les nouveaux points du maillage (on perd aussi en précision).

Une méthode ancienne (et naïve) consistait à partir d'un maillage de carrés (ou de rectangles), puis à les subdiviser en quatre, comme le montre la figure A4-2. Mais le maillage résultant perd une propriété fondamentale requise pour appliquer la plupart des méthodes de discrétisation : il n'est plus conforme ; son seul avantage est de présenter des mailles qui sont toutes carrées.

On s'intéresse ici à la méthode de Volumes Finis de type « Node-based » : des nœuds contiennent la valeur d'une fonction *u(x,y)*. À partir de ces nœuds, on construits un maillage de type Voronoi (partition du plan 2D par l'ensemble des médiatrices de deux nœuds voisins). Si les nœuds sont répartis sur des lignes horizontales et verticales équidistantes, le diagramme de Voronoi est un maillage de carrés dont les côtés sont également horizontaux et verticaux. Un maillage de Voronoi possède une propriété très

intéressante : parce que chaque côté d'une maille appartient à la médiatrice de deux nœuds voisins, alors le calcul du *gradient de u(x,y) normal à ce côté* peut être calculé de manière directe (donc efficace) et précise.

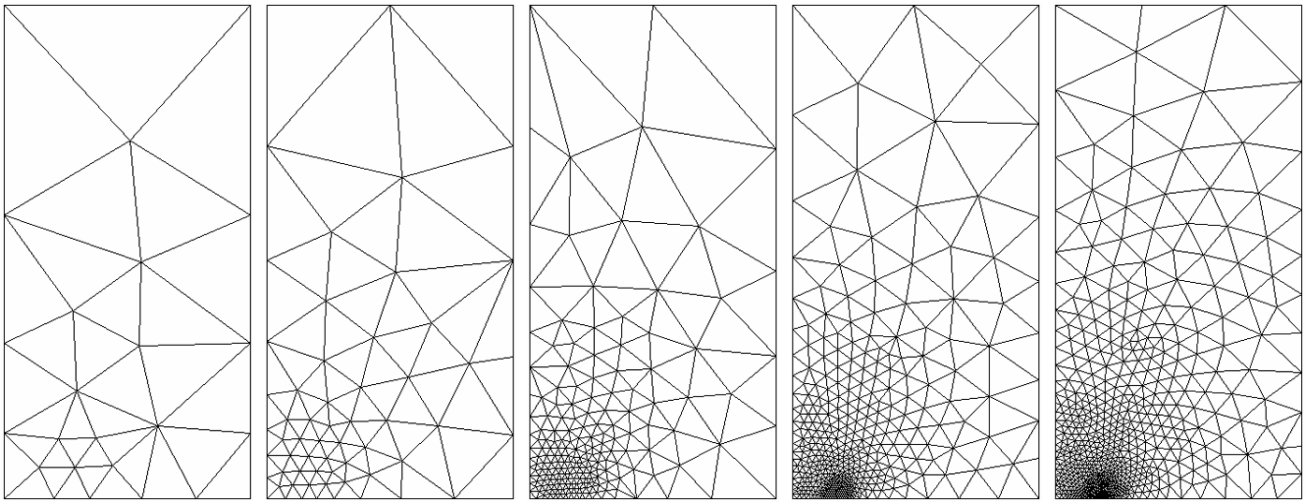


Fig. A4-1 : Maillages de plus en plus fins au voisinage d'une zone d'intérêt particulière. Ici, le raffinement est global, puisque l'ensemble du maillage est retouché.
(exemple tiré de Emerald Insight, internet)

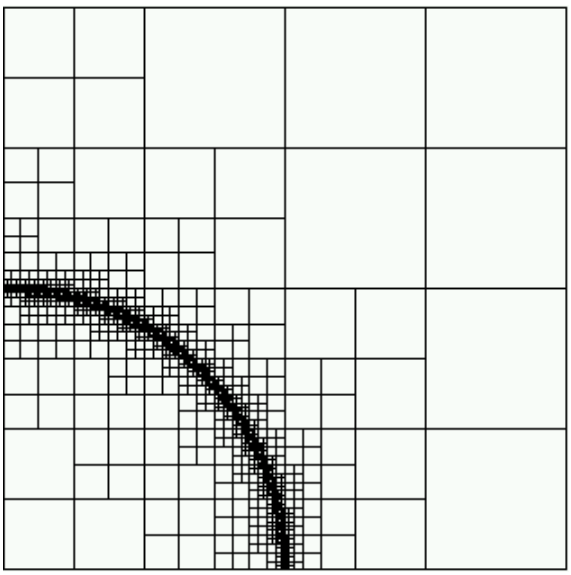


Fig. A4-2 : Méthode ancienne de raffinement d'un maillage de carrés
(http://www.dealii.org/developer/doxygen/deal.II/step_12.html).
Certains carrés sont découpés en quatre parties égales, de manière récursive.
On remarque que le maillage n'est plus conforme.

Zohour est inspiré de HOMARD (https://www.code-aster.org/V2/outils/homard/fr/intro.html), mais avec un principe différent. HOMARD (dans sa version 2D) raffine un maillage triangulaire, suivant le principe schématisé sur la figure A4-3. Le site mentionné ci-dessus montre de nombreux exemples.

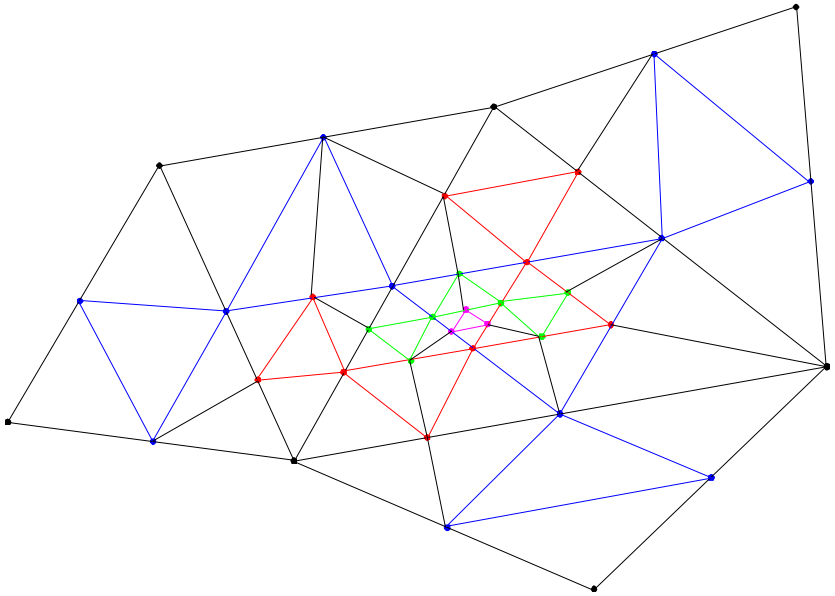


Fig. A4-3 : Principe de raffinement de HOMARD (EDF), dans sa version 2D triangulaire. Le maillage de base est ici dessiné en noir ; les triangles sont subdivisés en quatre (niveau bleu), en respectant la même qualité de forme. Puis, récursivement, on peut continuer d'autres niveaux de subdivisions : 2e niveau (rouge), 3e niveau (vert), 4e niveau (magenta), etc. On remarque que, pour garder le maillage conforme, il est nécessaire de couper certains triangles en deux.

Zohour partage aussi plusieurs caractéristiques avec le raffinement de Balmelli *et al.* (2002)[1], présenté sur la figure A4-4.

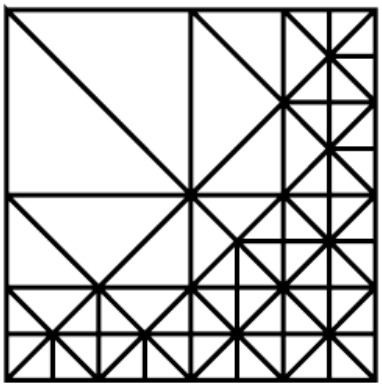


Fig. A4-4 : Raffinement triangulaire conforme (Balmelli *et al.*, 2002). Tous les triangles sont orientées suivant l'horizontale et la verticale, ce qui donne des avantages certains à l'implémentation informatique. Comme pour notre mailleur *Zohour*, le domaine ne peut être que rectangulaire.

La spécificité de *Zohour* est de retrouver si possible des cellules carrées, et avec une bonne *progressivité* dans la taille des cellules (la plupart des algorithmes adaptatifs ont un facteur 4 en terme de surface[2], celui de Balmelli *et al.* (2002) mentionné plus haut 2 ; *Zohour* quant à lui a un facteur égal à 1.5 (voir figure A4-9 en fin d'annexe : il est donc très progressif).

1 Balmelli L., Liebling T., Vetterli M., 2002, Computational analysis of mesh simplification using global error, *Comp. Geom.: Theory and Application*, Elsevier Sciences.

2 Nous mesurons ici la progressivité en nombre de mailles par unité de surface.

2. Principe du mailleur *Zohour*.

On choisit un domaine initial *carré*, puis on répartit des nœuds suivant des lignes horizontales et verticales équidistantes. En fait, le domaine initial peut ne pas être carré, à condition toutefois que les nœuds définissent des cellules carrées.

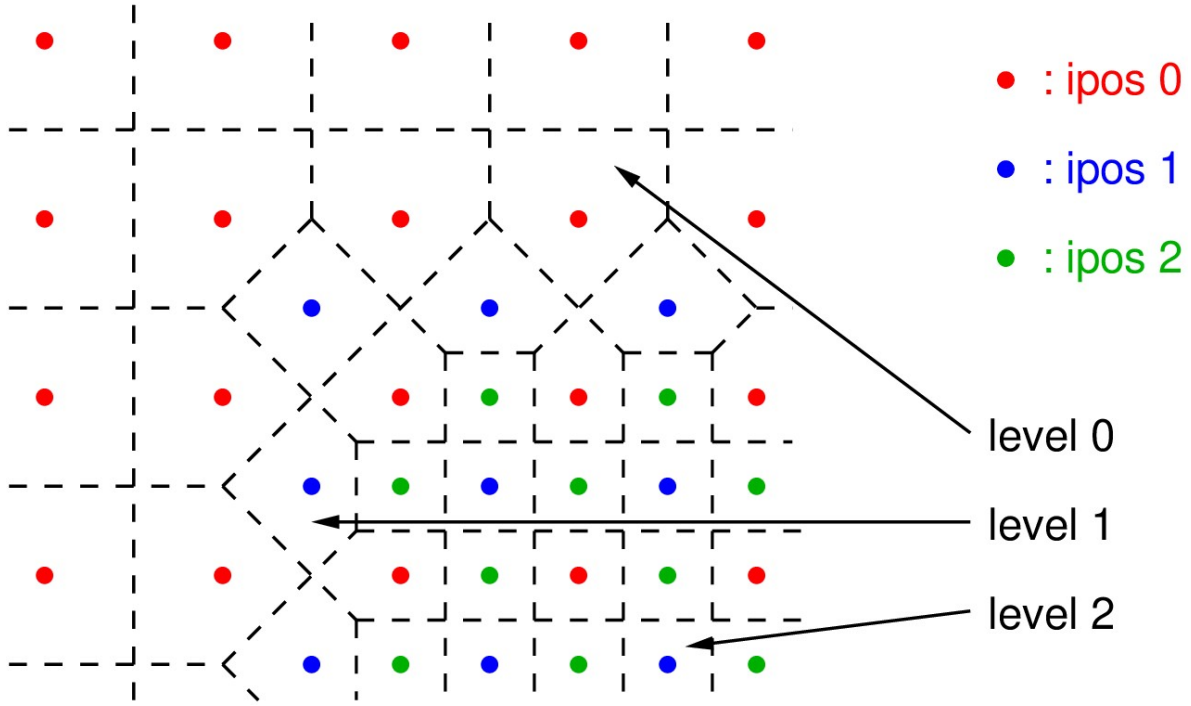


Fig. A4-5 : Les éléments de base de l'algorithme de *Zohour* sont les nœuds rouges (de *ipos* 0) qui sont inamovibles et répartis initialement sur des lignes équidistantes horizontales et verticales. Les nœuds de *ipos* 1 (en bleu) sont ajoutés à une intersection droite de médiatrices (en pointillées). Les nœuds de *ipos* 2 (en vert) sont ajoutés à une intersection inclinée de médiatrice, et ainsi de suite. Il faut distinguer la valeur de *ipos* de celle de *level* ; ces notions seront définies dans la section 3.

Ces nœuds de base sont appelés nœuds de *ipos* 0 (marqués en rouge sur la figure A4-5 ci-dessus). Ils ne peuvent en aucun cas être supprimés. Tous les autres nœuds (de *ipos* supérieur ou égal à 1) qui seront ajoutés par la suite peuvent en revanche être supprimés. Certains nœuds sont posés exactement sur la frontière (voir par exemple la figure A4-7).

Les nœuds ajoutés le sont par « couches successives » : d'abord les nœuds de *ipos* 1, puis ceux de *ipos* 2, etc.

Le principe de *Zohour* est d'ajouter un nouveau nœuds uniquement à l'intersection (lignes en pointillés) de quatre angles droits. Au fur et à mesure qu'on raffine les couches (c'est-à-dire ajout de nouveaux nœuds de couches supérieurs), on voit apparaître des mailles carrées alternativement *droites* (bords horizontaux et verticaux) et *inclinées* (bords à 45° et 135°).

Les mailles, créées par le diagramme de Voronoi, à la limite d'un nouveau *ipos* peuvent prendre des formes variées. On dénombre ainsi 10 formes différentes pour les mailles internes au domaine; elles sont répertoriées dans la figure A4-6. Les autres mailles (qui s'appuient sur des nœuds de frontière ou des nœuds de coin), peuvent avoir des formes encore différentes : on parlera de demi-cellule pour les premières et de quart-de-cellule pour les secondes.

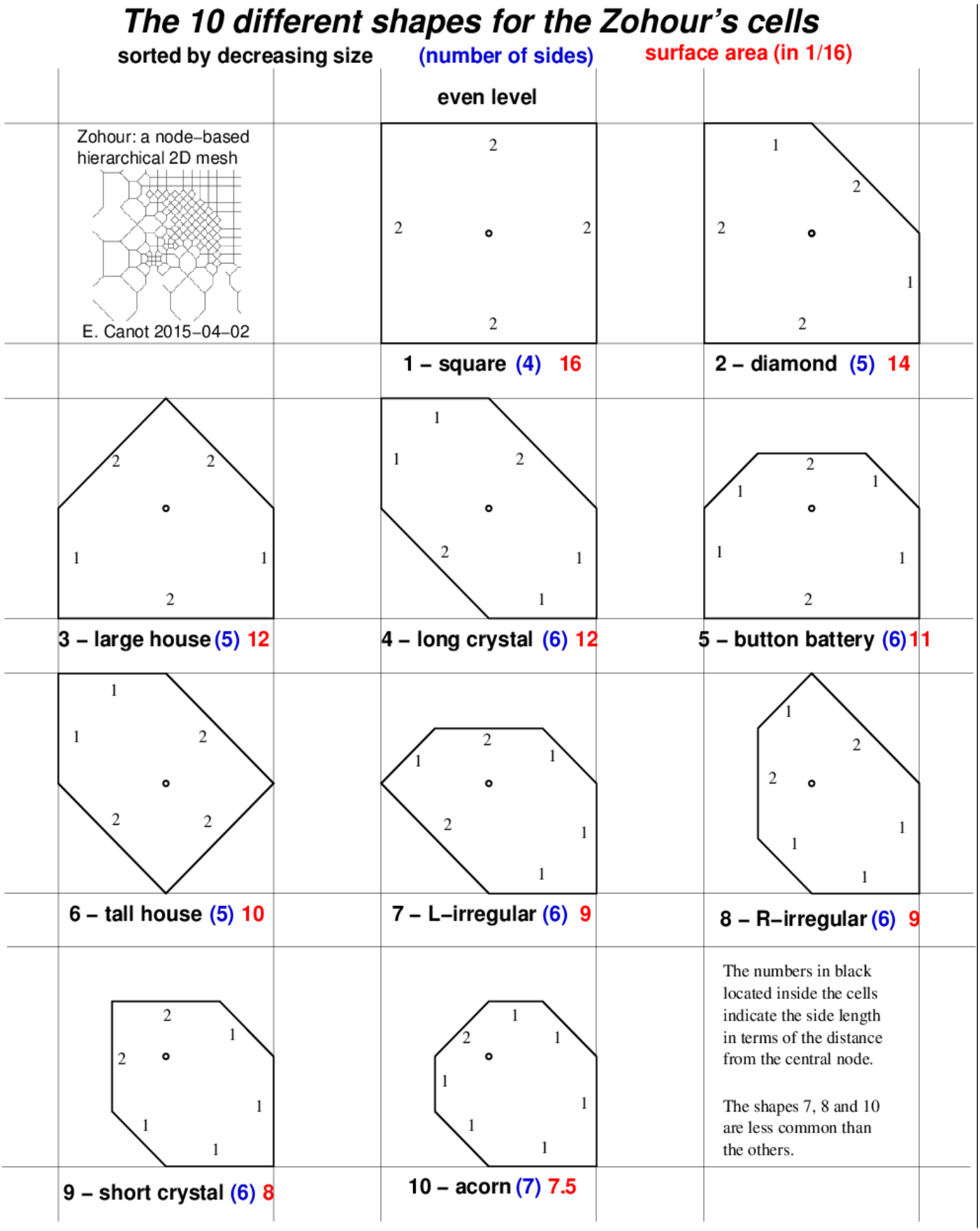


Fig. A4-6 : Différentes formes de mailles obtenues après des subdivisions (dues aux ajouts de nœuds supplémentaires). Le nom de chacune des formes a été choisie pour rappeler la forme du polygone. Toutes ces formes peuvent être tournées à 90°, 180° ou 270°.
La même série existe inclinée à 45°.

On trouvera dans les figures A4-7 et A4-8 des exemples de maillages raffinés dans le coin inférieur gauche.

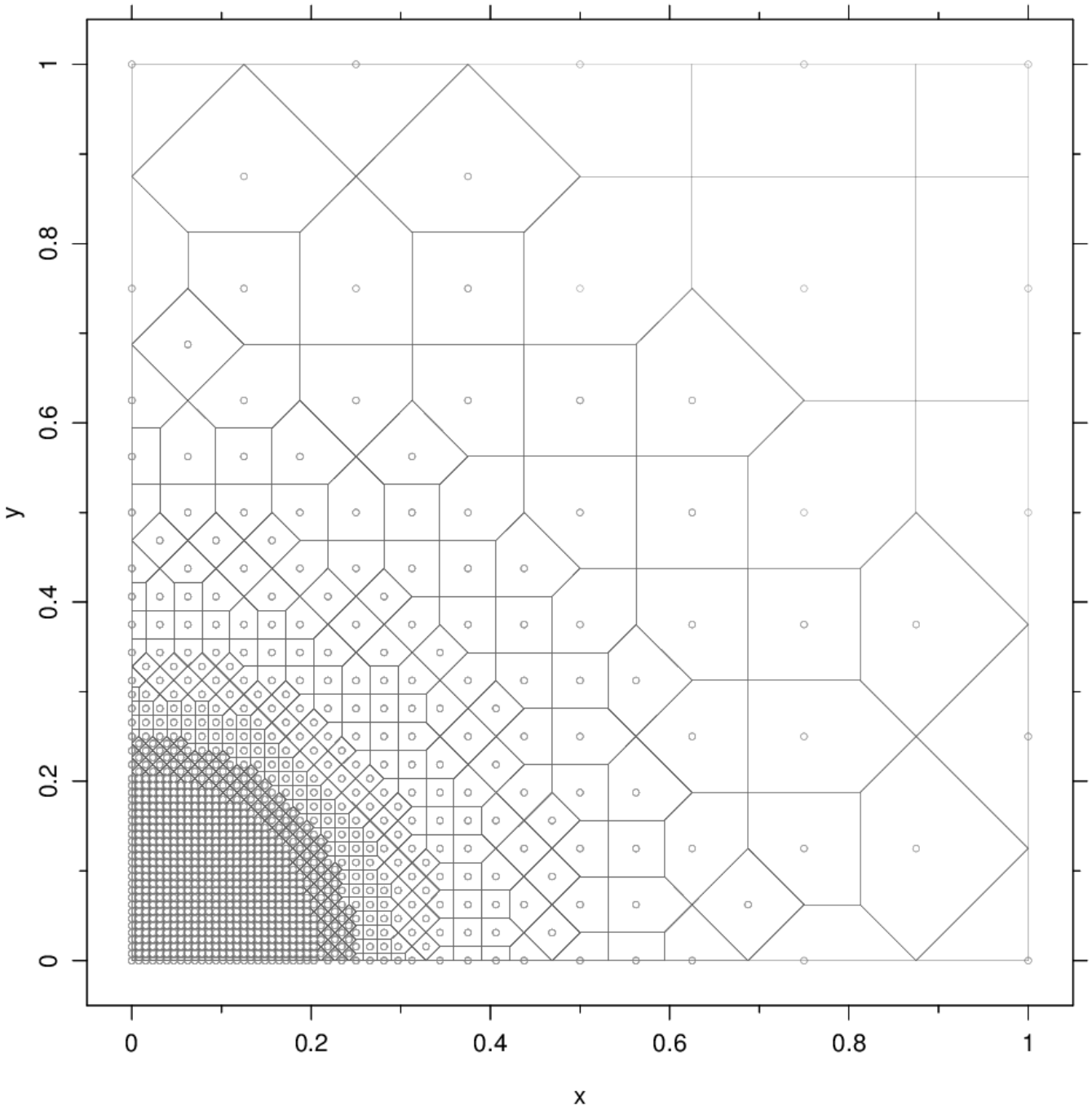


Fig. A4-7 : exemple de maillage raffiné par *Zohour* au coin inférieur gauche, qui correspond à un point singulier d'une fonction harmonique. La taille des mailles est d'autant plus petite qu'on se rapproche du point singulier. Les petits ronds représentent la position du nœud interne.

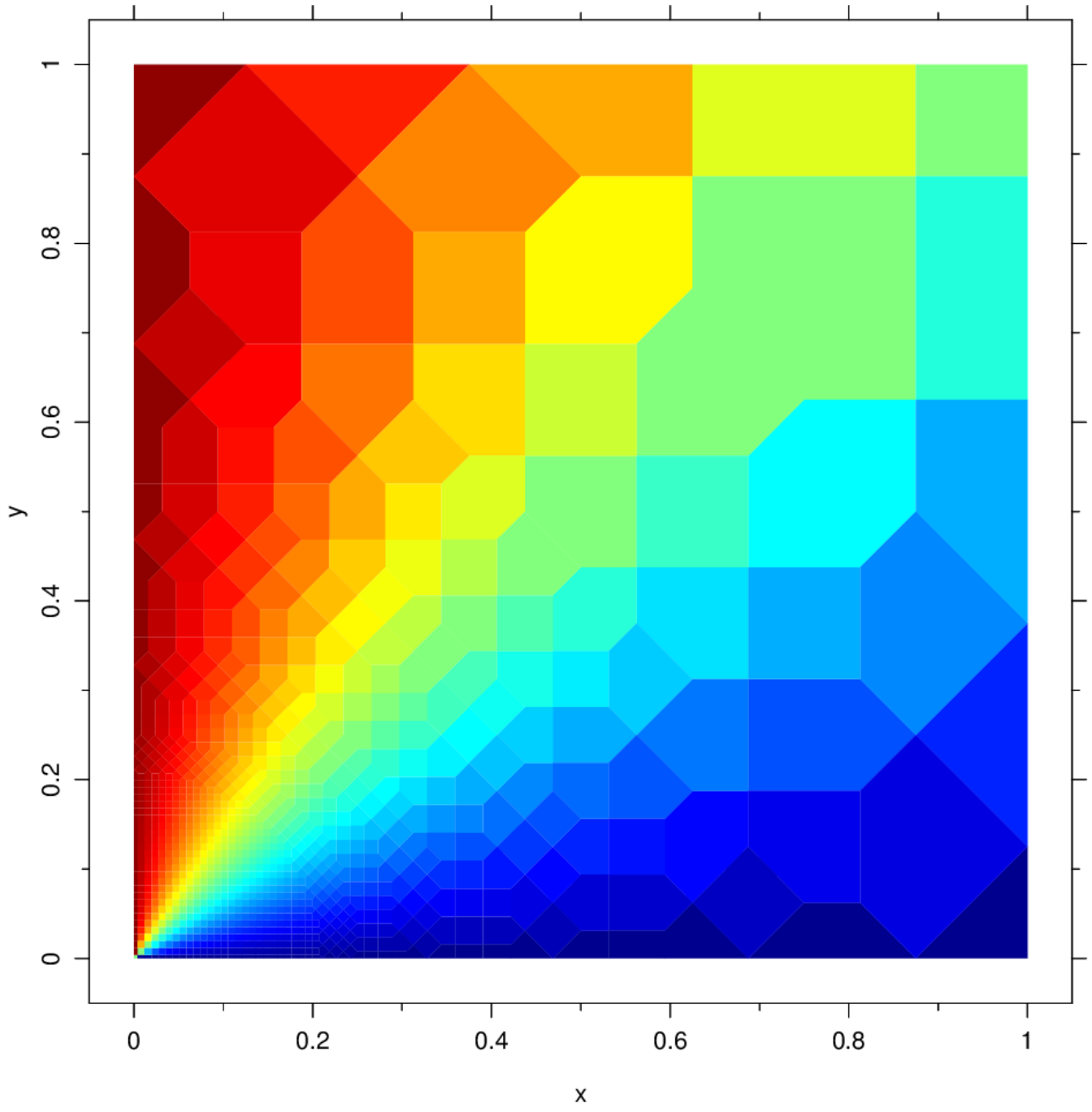


Fig. A4-8 : Même maillage que celui de la figure A4-7, utilisé ici pour représenter en couleurs la solution d'un problème de Laplace singulier au coin inférieur gauche. Conditions limites de type Dirichlet pour les côtés x=0 et y=0, mais avec une discontinuités à l'origine

3. Implémentation de *Zohour* en Fortran 2003.

L'algorithme de *Zohour* 2D est mis en œuvre par l'intermédiaire du langage Fortran 2003.

Seuls les nœuds sont réellement stockés ; pour cette raison, en pratique on confond la maille qui entoure chaque nœud avec ce dernier. On emploiera indifféremment « maille » et « cellule ».

```
  type, public :: cell

     integer :: id = 0 ! identifier

     double precision, public :: pressure

     double precision, public :: x, y ! coords of internal node

     integer :: ipos  = 0 ! initial level at creation -- useful to check
                          ! if, after many subdivisions or merges, the node
                          ! is aligned on the level grid

     integer :: level = 0 ! current level of subdivision -- also size of the
                          ! surrounding cell, based on the more distant node,
                          ! in terms of a divided factor

     integer :: reserve = 4

     integer :: on_boundary = 0 ! 0 (interior), 1 (boundary), 2 (corner)

     ! this pointer describes the chronological order
     type(cell), pointer         :: prev => null() ! previous cell
     type(cell), pointer, public :: next => null() ! next cell

     ! these pointers describe the spatial links
     class(*), pointer :: N   => null() ! elem at North
     ! edge length in terms of the distance to the cell boundary
     integer           :: Nl  = 2

     class(*), pointer :: NE  => null() ! elem at North-East
     integer           :: NEl = 2

     class(*), pointer :: E   => null() ! elem at East
     integer           :: El  = 2

     class(*), pointer :: SE  => null() ! elem at South-East
     integer           :: SEl = 2

     class(*), pointer :: S   => null() ! elem at South
     integer           :: Sl  = 2

     class(*), pointer :: SW  => null() ! elem at South-West
     integer           :: SWl = 2

     class(*), pointer :: W   => null() ! elem at West
     integer           :: Wl  = 2

     class(*), pointer :: NW  => null() ! elem at North-West
     integer           :: NWl = 2

     ! user data
     double precision, allocatable :: data(:)

  end type
```

Définition de la structure de base (type dérivé) : `type(cell)`

Le type dérivé `cell`, décrit dans le cadre de la page précédente, contient :

- l'identifiant `id`, qui est unique pour chaque nœud. Cet entier est strictement positif.
- les coordonnées `x`, `y` du nœud interne ; ce dernier n'est pas forcément au centre de masse de la cellule (voir la figure A4-6).
- le numéro de subdivision `ipos`, à la création du nœud. C'est une constante pour le nœud : sa valeur ne change pas au cours du raffinement/déraffinement. Un nœud ayant *ipos*=0 correspond à un nœud du maillage de base, et ne sera jamais enlevé. Cet entier est strictement positif.
- le niveau de subdivision `level`, quant à lui, est lié à la taille globale la cellule ; cet entier va changer de valeur au gré des différentes subdivisions. Cet entier est strictement positif.
- l'entier `reserve`, nombre de coins à 90° qui restent à « écorner » pour changer de forme. Cet entier est toujours compris entre 1 et 4. À chaque fois qu'on ajoute un nouveau nœud à l'un des coins de cette cellule, on décrémente la valeur de `reserve`. Au bout de 4 nœuds ajoutés, la cellule redevient carrée et doit changer de niveau de subdivision (`level`+1) tandis que le `reserve` est remis à la valeur 4. C'est la parité de `level` qui permet de reconnaître un carré droit ou incliné à 45°. La définition de `reserve` est légèrement différente pour les demi-cellules du bord et pour les quart de cellule des coins du domaine.
- les pointeurs sur `type(cell)`, `prev` et `next`, servent à construire des listes doublement chaînées constituées de certaines cellules.
- les huit pointeurs `N`, `NE`, `E`, `SE`, `S`, `SW`, `W` et `NW` correspondent à des voisins éventuels (pointeurs non nuls) aux directions correspondantes des huit points cardinaux. Ce sont des pointeurs sur `type(cell)`.
- les huit entiers `Nl`, `NEl`, `El`, `SEl`, `Sl`, `SWl`, `Wl` et `NWl` correspondent aux longueurs des côtés, exprimés en terme de la distance entre le nœud interne et le côté voisin. Ces entiers ne peuvent prendre que la valeur 1 ou 2.

Un pointeur sur `class(*)` permet de pointer sur n'importe quel type, au contraire des pointeurs ordinaires qui en Fortran sont typés. On parle alors de « unlimited polymorphism » et cette caractéristique n'est compatible qu'avec la norme Fortran 2003.
Dans le cas des pointeurs vers les huit points cardinaux (`N`, `NE`, `E`, `SE`, `S`, `SW`, `W` et `NW`), la cible peut être une autre cellule voisine (`type(cell)`) si elle existe, ou une frontière de `type(boundary)`, dans le cas contraire. Ce type dérivé `boundary` contient les coefficients de l'équation de la droite-frontière et spécifie également le type de condition limite (Dirichlet, Neumann, ...).

On remarquera que l'algorithme ne manipule que des entiers, ce qui évite les erreurs d'arrondis qui arrivent inévitablement quand on opère sur des flottants. Seules les coordonnées `x` et `y` sont stockées en réels flottants ; on pourrait toutefois ne pas stocker ces coordonnées et les calculer « à la demande » à partir de certaines informations entières (les nœuds d'un niveau de position *ipos* sont sur une grille calculable à l'avance).

4. Signature d'une forme pour la reconnaissance rapide des cellules.

Lors de la mise en œuvre de la méthode des Volumes Finis à partir d'un maillage de type *Zohour*, il faut connaître la *surface* de chaque cellule. Comme on connaît tous les voisins d'une cellule donnée, on pourrait construire le *polygone* qui définit exactement cette cellule, à partir des *médiatrices* entre les nœuds voisins (c'est le principe d'une partition de Voronoi), puis calculer la surface de ce polygone. Cette manière de faire a été employée dans les versions antérieures de *Zohour* mais conduit à un coût prohibitif.

La version actuelle s'appuie sur la *signature* des cellules, pour reconnaître rapidement la forme de celles-ci (il n'y a que 10 formes possible au total, cf. la section précédente).

La signature d'une cellule n'est pas stockée dans le `type(cell)` (on pourrait le faire, mais sa mise-à-jour lors des subdivisions va être complexe). On la calcule donc « à la demande ». Elle est constituée :

- de huit informations précisant si les voisins `N`, `NE`, `E`, `SE`, `S`, `SW`, `W` et `NW` existent (1) ou pas (0), soit 8 bits.
- de huit informations précisant la longueur des côtés `Nl`, `NEl`, `El`, `SEl`, `Sl`, `SWl`, `Wl` et `Nwl`. En soustrayant 1 à cette longueur (qui par définition vaut 1 ou 2), on obtient 8 bits.

En comparant la valeur calculée à des signatures de référence, on peut en déduire la surface normalisée (valeur en rouge pour chaque cellule de la figure A4-6). Le `level` de la cellule permet alors de calculer sa surface réelle. La modification d'un bit particulier en Fortran s'effectue avec la fonction `ibset`.

La comparaison entre la signature actuelle et les signatures de référence doit tenir compte du fait que la cellule n'est pas forcément dans la même orientation que celles dessinées en figure A4-6. On effectue successivement plusieurs shifts sur les bits de la signature pour « tourner » virtuellement la cellule dans les 8 orientations possibles. C'est la fonction Fortran `ishftc` qui permet d'appliquer une permutation circulaire aux bits d'un entier. L'implémentation est programmée dans la routine `quick_cell_area` (10 valeurs de référence).

Le même principe concerne les cellules de bord (routine `quick_cell_area_boundary`, 16 valeurs de référence) et celles de coin (routine `quick_cell_area_corner`, 3 valeurs de référence).

5. Le calcul du hessien

Le hessien *H* (composé des dérivées secondes d'une fonction *f* à deux variables *x* et *y*) est à la base du critère du raffinement :

$$H=\sqrt{\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)^2+2\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\right)^2}$$

C'est un invariant de la matrice hessienne, car il s'exprime en fonction de sa trace et de son déterminant, tous deux également invariants.

Pour une maille carrée, et en se limitant à l'opérateur laplacien, on montre que l'erreur de discrétisation pour un schéma de type Volume Fini est proportionnel à $H\,h^2$, où *h* est la longueur du côté de la cellule ; on peut donc déduire facilement un critère pour choisir la taille de la maille *h* en fonction d'une tolérance donnée à l'avance.

En général, l'estimation de *H* pour un maillage quelconque est coûteuse. La valeur du Hessien dépend d'une part des valeurs d'une fonction donnée que nous appellerons *f* ici, d'autre part de la position relative des nœuds voisins autour d'un nœud donné. On approche la fonction *f* (connue de manière discrète seulement) par la fonction quadratique suivante, à six degré de liberté :

$$f(x,y)=c_1+c_2x+c_3y+c_4x^2+c_5y^2+c_6xy$$

Il faut donc trouver au minimum 6 nœuds (en comprenant le nœud central pour lequel on veut calculer le hessien) afin d'établir un système d'équations linéaires à 6 inconnues. Parfois ces 6 nœuds sont mal disposés (leur alignement respectif est tel que le système est singulier) ; dans ce cas on choisit 8 nœuds et on calcule la solution par moindres carrés. Une fois les coefficients c_1 à c_6 calculés, alors on a, de manière triviale :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=2c_4;\qquad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=2c_5;\qquad \frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial y}=c_6$$

La plupart des mailles générées par *Zohour* sont carrées (voir par exemple fig A4-6). Comme ces mailles sont facilement détectables grâce à notre structure de données (type dérivé `cell`), on peut faire un précalcul et stocké à l'avance l'inverse de la matrice 6x6 mentionnée plus haut.
En choisissant les six nœuds suivants (cas d'un carré centré à l'origine et entouré de quatre autres carrés) :

n1 (0, 0) ; n2 (0, 1) ; n3 (1, 0) ; n4 (0, –1) ; n5 (–1, 0) ; n6 (1, 1)

Dans ce cas, la matrice hessienne est la suivante :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

C'est une matrice bien conditionnée (cond $\simeq 8$) et nous l'avons inversée avec le logiciel Maple. De plus, il suffit de conserver seulement sa partie inférieure :

$$\begin{pmatrix} - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - \\ -1 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ -1 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On remarquera que le calcul sera exempt d'erreur d'arrondi, les coefficients étant 1 ou 1/2, tous deux exactement représentable en base 2. Il faut simplement introduire le facteur d'échelle de la maille (lié au niveau de subdivisions) et le hessien se calcul directement par :

$$2c_4 = (-2f_1 + f_3 + f_5) * facteur$$
$$2c_5 = (-2f_1 + f_2 + f_4) * facteur$$
$$c_6 = (f_1 - f_2 - f_3 + f_6) * facteur$$

Pour certains maillages, comme celui montré sur la figure A4-7, le calcul global du hessien pour l'ensemble est extrêmement rapide et on gagne un facteur allant jusqu'à 1500 par rapport au cas ordinaire où on ne fait pas ces précalculs. Pour donner un ordre de grandeur du temps CPU, ce dernier vaut 0.14 secondes (sur un PC de performance moyenne de 2015) pour un maillage comportant environ 1 726 000 nœuds. Ce temps est négligeable devant le temps typique pour résoudre un problème de type Laplacien sur le même maillage (en utilisant des matrices creuses et un solveur creux direct) : 10 secondes environ.

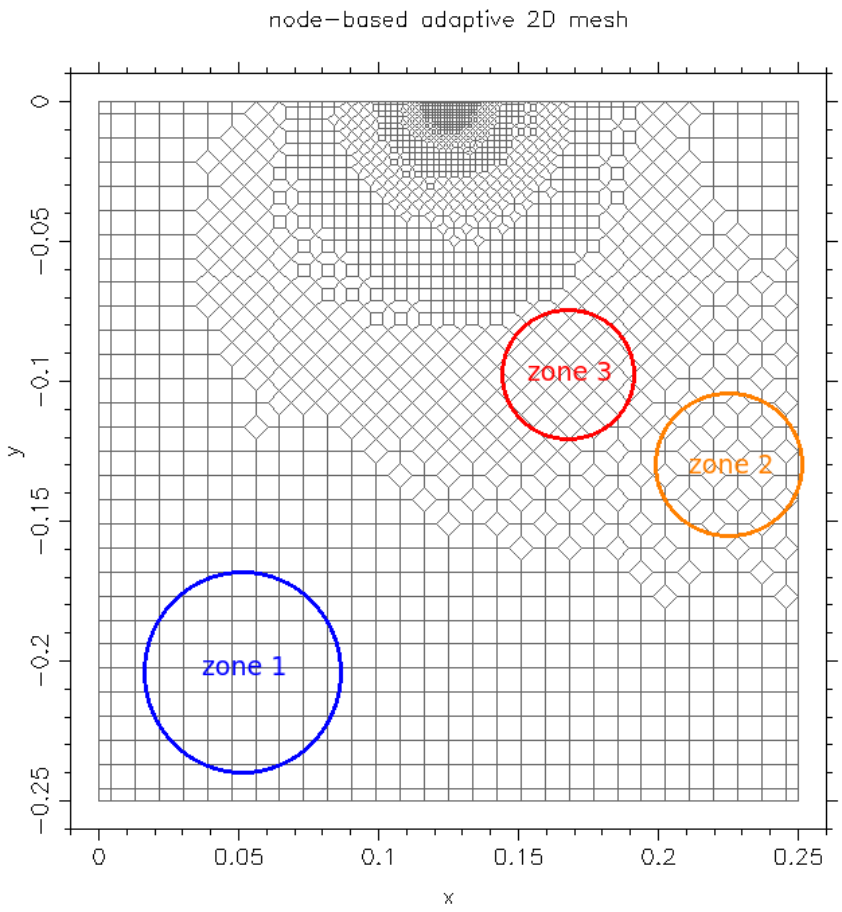


Fig. A4-9 : Exemple de maillage généré par *Zohour* et montrant la très bonne progressivité de la taille des mailles. Si dans la zone 1 on compte 4 mailles sur une certaine surface, alors on en compte 6 sur la même surface dans la zone 2, ce qui donne un facteur de progressivité de 3/2.

Document non publié (2015-2019)

Evaporation/condensation of water in a granular medium, restricted to the pendular regime: the EWGM model

Édouard CANOT Salwa MANSOUR Renaud DELANNAY

March 26, 2019

Preamble

A new model for evaporation/condensation in wet granular media has been sketched in the thesis of Salwa (MANSOUR, 2015) [Chapt. 6, sect. 2]. The ideas of this continuous model are taken up here and completed by detailed equations. In particular, the assumptions are listed in an exhaustive way and a discussion is conducted to identify the validity of the model, called EWGM, which stands for "Evaporation in Wet Granular Media".

There is a strong link also with the preliminary work of DELANNAY and MCNAMARA (2015).

1 Introduction

In the framework of ARPHYMAT project, many experiments were performed using dry sand. In fact, due to the humidity of the experiment room (where the humidity in Brittany is often important, even in summer days), we suspect that the sand didn't stay totally dry and that a small quantity of liquid water existed between the sand grains under the form of bridges, *i.e.* the wet porous medium was in pendular regime. To model the phase change phenomenon, which comes from the evaporation of liquid water (pendular regime) present in the granular porous medium, an appropriate physical model must be used.

In literature, a great number of different physical models have been presented to deal with heat and mass transfer in an unsaturated porous medium. Let's cite, *e. g.* , HADLEY (1985); MOYNE and DEGIOVANNI (1985); ZHANG and DATTA (2004); OUSEGUI et al. (2010)...

Among them, UDELL (1985) presented a study of heat and mass transfer in a porous medium saturated with liquid and vapor phases of a single component fluid. Gravity, capillarity, multiphase flow and phase change effects was included. In a more recent study, BRIDGE et al. (2003) have presented an extension of what was proposed by UDELL (1985) by adding the energy equation to the system. In these two studies the authors were interested in the steady state case.

Another interesting study is that presented by DAYAN and GLUEKLER (1982) where a model for transient heat and mass transfer has been developed for a porous medium containing water (funicular regime), vapor and air. Their physical model is divided into two zones: dry and wet. A similar study is that of MIN and EMMONS (1972) who studied the transient drying of a porous medium in pendular regime where two mechanisms of mass transfer were considered: the pressure driven convective flow governed by Darcy's law and the molecular diffusion of the gaseous components.

In all previous studies, the effective thermal conductivity λ_e was taken as a constant. However, many works (BRANDON and MITCHELL, 1989; TARNAWSKI and LEONG, 2000; GÉMINARD and GAYVALLET, 2001; LU et al., 2007; CHEN, 2008; SMITS et al., 2010; DONG et al., 2015) mentioned that the

presence of liquid water can increase substantially the value of thermal conductivity (liquid water has a thermal conductivity much higher than that of air). For this reason, we present here a physical model that describes heat and mass transfer in a wet porous medium with λ_e dependent on water content.

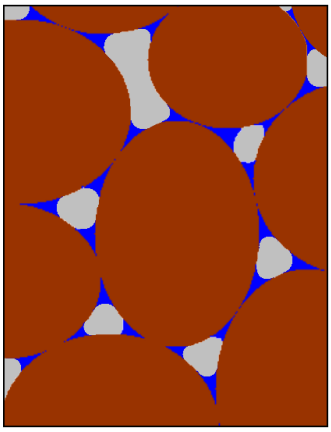


Figure 1: Pendular regime – when a small quantity of liquid water (blue) is contained inside a granular medium, it is located around the contacts between the grains (brown), as bridges which favor the heat flux. Gas is drawn in light gray.

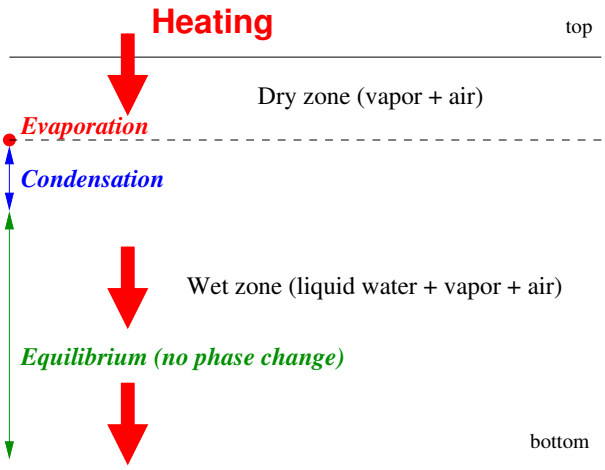


Figure 2: A diagram representing the expected results of the phase change problem showing the existence of an evaporation and condensation zones in the wet zone.

In our model, the quantity of liquid water is small and located around the contact points of the wet zone (see Figure 1): this is called the pendular regime. The liquid fraction is an unknown and may vary from place to place. Liquid water is assumed immobile at pore scale because it is blocked by the capillary forces at the grains' surface whereas water can move at domain scale only under its vapor phase, by diffusion through air. Other assumptions are listed in next section. The value of λ_e is calculated from a separated model at microscale, assuming the static mechanical equilibrium for a meniscus; as a result, λ_e, which theoretically depends only on the location of the liquid water, may experience a hysteretic behavior due to the complex appearance/disappearance of the liquid menisci.

Figure 2 describe a situation where a wet porous medium is heating at its top boundary, and shows the presence of both a thin zone of evaporation above a thin zone of condensation. These two simultaneous processes have been mentioned by MIN and EMMONS (1972), UDELL (1985), ROTH (2012) and other authors. During the evaporation, some quantity of liquid near the dry-wet limit is changed into gas, trying to increase its volume; this induces a local increase of pressure and the gas created flows towards low pressure regions, *i.e.* in both upward and downward directions. When reaching a colder region, this warm gas recondensate on the liquid menisci. We think that our model is rich enough to reproduce the above-mentionned simultaneous evaporation/condensation. Note also that figure 2 is just a sketch: in particular the equilibrium zone, displayed in green, may be possible only because the thermal gradient vanishes in the bottom region of the domain (in the case of an insulated boundary condition at bottom).

The phenomenon which combines evaporation and recondensation is consistent with the vapor migration towards cold regions — many studies have been devoted to this migration under the effect of a thermal gradient, using both models (PHILIP and DE VRIES, 1957; DE VRIES, 1958; HUANG, 1979; OUSEGUI et al., 2010) and experiments (THORVALDSSON and SKJÖLDEBRAND, 1998). Note however that some of these models discard non-linear terms: we could therefore expect a smoother behavior of all variables; curiously enough HUANG (1979) propose a set of equations very similar to ours, including

non-linear terms, but doesn't obtain a stiff front for the liquid fraction, perhaps because the temperature range is small (22 to 27 °C).

Lastly, other models based on multi-components multiphase system have been recently proposed MARCHAND et al. (2013); LIZAIK (2008); although they concern physical systems which are quite different from ours, it may be interesting to learn how the set of equations is then discretized.

2 Physical description of the EWGM model

2.1 Scales

The following scaled must be distinguished:

(i) The *microscale*, or pore scale, is the smaller one.

(ii) The *mesoscale* is bigger, since it covers many grains; however physical properties at this scale are still uniform in space; therefore useful properties are well defined at this scale.

(iii) The *macroscale* (problem scale, or domain scale) is the largest one: equations of the problem are written at this level.

2.2 Hypothesis

H_1. The porous medium is constituted by solid, impermeable spheres of same radius R_0, packing in a random way but with a known statistical gap distribution.

H_2. There is only a small quantity of liquid water in the porous medium (pendular regime).

H_3. The permeability of the porous medium is not affected by the presence of liquid water.

H_4. The liquid water doesn't move at the microscale.

H_5. Air and water vapor diffuse through each other due to the concentration gradients, and the gas (as a whole) moves under pressure gradients.

H_6. Gravity is neglected (gravity forces are small compared to the capillary ones).

H_7. Porosity is constant at mesoscale.

H_8. Thermodynamic equilibrium is assumed between the three phases (*i. e.* , at the same location, solid matrix, liquid water and its vapor are at the same temperature) at both microscale and mesoscale.

H_9. Diffusion equilibrium is assumed through the gas (*i. e.* , at the same location, water vapor doesn't diffuse through the air – it means that water vapor has the same value against an interface and away from it) at both microscale and mesoscale.

H_{10}. Diffusion equilibrium at the interface: the partial pressure of water vapor at the interface is always equal to the saturation pressure. In other words, the evaporative mass flux must not be too large; on the contrary, Hertz-Knudsen equation, coming from molecular dynamics, should be used (cf. (AJAEV, 2012), p. 149).

H_{11}. Gaseous components (water vapor, air) obey the ideal gas law.

2.3 Main unknowns

U_1. The temperature T (unique, due to H_8).

U_2. The pressure p_g of the gas.

U_3. The density ρ_g of the gas.

U_4. The velocity of the gas $\mathbf{v}_g$.

U_5. The liquid fraction α_l (ratio of the liquid volume to the void volume – also called degree of saturation).

U_6. The partial pressure of water vapor p_w.

U_7. The density of water vapor ρ_w.

U_8. The total curvature of the liquid menisci κ (constant over the whole surface of each meniscus).

Auxiliary unknowns, as the air density ρ_a, the partial pressure of air p_a, or the effective thermal conductivity λ_e, will be expressed in terms of the main unknowns.

All the unknown variables depend on both the space position $\mathbf{x}$ and the time t.

2.4 Equations

Most important equations consist of balance equations for the mass of each component (water and air), and that concerning the energy. Others are interface equations, state or phenomenological laws.

In order to close the problem and according to the number of unknowns previously listed, we need 8 equations. We choose:

E_1. Mass conservation of water.

E_2. Mass conservation of air.

E_3. Energy conservation.

E_4. The ideal gas law for the water vapor.

E_5. The ideal gas law for the binary mixture.

E_6. Darcy law.

E_7. Liquid/vapor equilibrium at interfaces (Kelvin law).

E_8. A relation between the liquid fraction and the curvature of the liquid menisci.

These equations, all valid at macroscale, are detailed below.

Mass conservation of water

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\alpha_l\,\phi\,\rho_l + (1-\alpha_l)\,\phi\,\rho_w\right] + \operatorname{div}\left(\rho_w\,\mathbf{v}_w\right) = 0 \tag{1}$$

The term $\alpha_l\,\phi\,\rho_l$ corresponds to the mass of the liquid water in a unit control volume, whereas $(1-\alpha_l)\,\phi\,\rho_w$ is the mass of the water vapor.

$\rho_w\,\mathbf{v}_w$ is the mass flux of the water (vapor only, because the liquid phase is immobile). Note that $\mathbf{v}_w$ is not the interstitial velocity (*i. e.* the real mean velocity in the pores) but the effective velocity (known

also as the Darcy velocity) that makes sense at mesoscale; this will be the case for all other velocities encountered in this document.

ϕ is the porosity of the medium, α_l is the fraction of the void occupied by the liquid water. Both quantities lie in the interval $[0,1]$.

The variables ρ_w and $\mathbf{v}_w$ depend on both $\mathbf{x}$ and t. ρ_l and ϕ are supposed to be constant.

Since one new variable is introduced here ($\mathbf{v}_w$), we have to specify one new relation, which is the Fick law (phenomenological law), written below.

Mass conservation of air

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[(1-\alpha_l)\,\phi\,\rho_a\right] + \operatorname{div}\left(\rho_a\,\mathbf{v}_a\right) = 0$$

The term $(1-\alpha_l)\,\phi\,\rho_a$ is the mass of the air in a unit control volume. $\rho_a\,\mathbf{v}_a$ is the mass flux of the air.

As for the first component (water), the variables ρ_a and $\mathbf{v}_a$ depend on both $\mathbf{x}$ and t.

The mass balance for the whole fluid can be obtained by summing the two previous equations; it writes:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\alpha_l\,\phi\,\rho_l + (1-\alpha_l)\,\phi\,\rho_g\right] + \operatorname{div}\left(\rho_g\,\mathbf{v}_g\right) = 0 \tag{2}$$

ρ_g is the density of the gas, and $\mathbf{v}_g$ is the velocity of the gas. This latter equation is more convenient to express the Darcy law (which corresponds to the momentum balance for the gas inside the porous medium), because it uses the barycentric average velocity of the two components:

$$\rho_g\,\mathbf{v}_g = \rho_a\,\mathbf{v}_a + \rho_w\,\mathbf{v}_w$$

Energy conservation

Internal energy E_e (there is no mechanical energy) can be decomposed as:

- the solid part, $(1-\phi)\,\rho_s\,C_s\,T$
- the liquid part, $\alpha_l\phi\,\rho_l\,C_l\,T$
- the gas binary mixture part, $(1-\alpha_l)\phi\,\rho_g\,C_{v,g}\,T$

Be aware that the transport term concerns only the gas part, because the liquid doesn't move. Therefore the energy conservation writes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(E_e) + \operatorname{div}\left[(1-\alpha_l)\phi\,\rho_g\,C_{p,g}\,T\,\mathbf{v}_g\right] = \operatorname{div}(\lambda_e\,\nabla T) + \rho_l\,\frac{\partial\,\alpha_l}{\partial t}\,\phi\,L \tag{3}$$

E_e is the effective internal energy for the whole medium, whereas $C_{p,g}$ and $C_{v,g}$ are the mass specific heats of the gas. Moreover, we have:

$$C_{v,g} = \omega_w\,C_{v,w} + (1-\omega_w)\,C_{v,a}$$

and

$$C_{p,g} = C_{v,g} + \frac{R}{M_g}$$

where $\omega_w = \rho_w/\rho_g$ is the mass fraction of vapor. C_l (resp. C_s, $C_{p,w}$, $C_{p,a}$) is the mass specific heat of liquid water (resp. of solid, water vapor and air). M_g is the molar mass of the gas, detailed below.

There is only one temperature T, because thermal equilibrium is assumed between the three phases (as specified by hypothesis H_7).

λ_e is the effective thermal conduction; it is define at the mesoscale, since it includes the effect of the liquid meniscus which act as thermal bridge between the grains (recall that the thermal conductivity of water is much larger than those of air).

The second term in the right-hand-side of the same equation, $\rho_l \dfrac{\partial \alpha_l}{\partial t} \phi L$, is the latent heat released (resp. absorbed) during the condensation (resp. evaporation) of water vapor when the liquid volume increases (resp. decreases).

Notice that the heat source coming from the dissipation of the viscous forces is neglected.

Ideal gas for the water vapor

$$\frac{p_w}{\rho_w} = \frac{R}{M_w} T \tag{4}$$

R is the ideal gas law constant and M_w is the molar mass of the water vapor.

Ideal gas law for the binary mixture

$$\frac{p_g}{\rho_g} = \frac{R}{M_g} T$$

The molar mass of the mixture M_g depends on the percentage of the components; it can be calculated in many ways (see *e. g.* BALMER (2011)) and one of them uses the mass fraction of each component:

$$\frac{1}{M_g} = \frac{\rho_w}{\rho_g}\frac{1}{M_w} + \frac{\rho_a}{\rho_g}\frac{1}{M_a} = \frac{\rho_w}{\rho_g}\left(\frac{1}{M_w} - \frac{1}{M_a}\right) + \frac{1}{M_a}$$

So, the new state equation for the gas mixture is:

$$\frac{p_g}{\rho_g} = RT\left[\frac{\rho_w}{\rho_g}\left(\frac{1}{M_w} - \frac{1}{M_a}\right) + \frac{1}{M_a}\right] \tag{5}$$

Darcy law

$$\mathbf{v}_g = -\frac{K_g}{\mu_g}\nabla p_g \tag{6}$$

The Darcy law corresponds to the momentum balance of the gas flowing through the porous medium (this balance is reduced to viscous dissipation: inertia terms are neglected because velocity of the gas is supposed to be very small). It requires of $\mathbf{v}_g$ to be the barycentric average velocity.

K_g is the permeability of the porous matrix (for the gas flow). It depends not only on the value of the porosity but also on the tortuosity of the medium. When liquid fraction is not small, the permeability cannot be supposed constant, because the porosity for the gas reduces. We take the following Kozeny-Carman law (COSTA, 2006):

$$K_g = C_{kc}\frac{\phi_0^3}{(1-\phi_0)^2}$$

where ϕ_0 is the porosity of the porous material. In our case, we have to replaced it by $(1-\alpha_l)\,\phi$, due to the presence of the liquid water. Therefore:

$$K_g = C_{kc}\,\frac{(1-\alpha_l)^3\,\phi^3}{[1-(1-\alpha_l)\,\phi]^2}$$

μ_g is the dynamic viscosity of the gas, taken as a constant.

Equilibrium or non-equilibrium at the pore scale?

First of all, the liquid/vapor equilibrium at interface obeys the Kelvin law:

$$\mathrm{RH} = \frac{p_{w,I}}{\mathrm{p_{w,sat}}(T)} = \exp\left(\frac{Vm_l\;\kappa\;\sigma(T)}{R\,T}\right) = \mathrm{F_1}(T,\kappa) \tag{7}$$

RH is the relative humidity close to the liquid/gas interface. κ is the total curvature of the interface (by convention here, $\kappa<0$ for a concave meniscus, and $\kappa>0$ for a convex one like a droplet), σ is the surface tension of water in presence of air, and Vm_l is the molar volume of liquid water. $p_{w,I}$ is the partial pressure of vapor against the liquid interface. It is equal to the vapor pressure at saturation only for flat interfaces ($\kappa=0$).

For **slow transfers**, we may suppose that both temperature and vapor concentration are uniform at the pore scale. In this case, the equilibrium condition writes:

$$p_w = p_{w,I} \tag{8}$$

everywhere around a given liquid meniscus. Therefore, the general condition for p_w leads to a twofold equation, according the presence of liquid water (*i. e.* , whether the porous medium is locally wet or dry):

$$\begin{cases} \text{if } \alpha_l>0 & \text{then} \quad p_w = \mathrm{F_1}(T,\kappa)\;\mathrm{p_{w,sat}}(T) \\ \text{otherwise, if } \alpha_l=0 & \text{then} \quad p_w < \mathrm{F_1}(T,\kappa)\;\mathrm{p_{w,sat}}(T) \end{cases} \tag{9}$$

In the case of **non-slow transfers**, a shift must be introduced between $p_{w,I}$ (always equal to the value at saturation) and the vapor pressure inside the pore; see for example Ousegui et al. (2010), eq. (29), where the authors apply a non-equilibrium vapor pressure model for bread baking.

$$p_w - p_{w,I} = \mathrm{F_2}\left(\alpha_l, \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}\right) \tag{10}$$

The exact meaning of function $\mathrm{F_2}$ is not given here; the detailed derivation of the previous equation will be explained in an other document. Let's just specify that it comes from the Fick law applied to a 1-D small gas volume representing the pore, and that it includes both the surface area of the liquid meniscus and the number of menisci per unit volume.

The general condition writes therefore in a slightly different form than the previous one:

$$\begin{cases} \text{if } \alpha_l>0 & \text{then} \quad p_w = \mathrm{F_1}(T,\kappa)\;\mathrm{p_{w,sat}}(T) + \mathrm{F_2}\left(\alpha_l, \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}\right) \\ \text{otherwise, if } \alpha_l=0 & \text{then} \quad p_w < \mathrm{F_1}(T,\kappa)\;\mathrm{p_{w,sat}}(T) + \mathrm{F_2}\left(\alpha_l, \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}\right) \end{cases} \tag{11}$$

Another idea is to use, or try to use, the results of Shahraeeni and Or (2010) concerning the dynamics the evaporation/condensation at the pore scale. From their results, it is worth noting that the typical time scales involved in capillary condensation range in a very large interval (from microseconds

to hours, depending of the ambient relative humidity); this latter fact should rise some difficulties in modeling this phenomenon.

The curvature κ depends on both $\mathbf{x}$ and t. Vm_l is of course a physical constant but surface tension σ varies with temperature. For temperature not greater than 100 C, we can use the empirical law:

$$\sigma(T) \approx 76 \times 10^{-3} - 0.17 \times 10^{-3}\, T$$

where T must be expressed in Celsius. Other approximations covering the whole temperature interval (up to the critical temperature of water) are also possible (KAVIANY, 1999; VARGAFTIK et al., 1983); it will be described in another document, describing the numerical implementation. The surface tension doesn't depend the curvature of the liquid-gas interface (HAYE and BRUIN (1994) made some investigations using molecular dynamics but found that the curvature influence is negligible).

Note that for a flat interface ($\kappa = 0$), we find the classical interface condition:

$$p_w = \mathrm{p_{w,sat}}(T)$$

Note also that the use of the law $\mathrm{p_{w,sat}}$ implicitely defines the temperature of vaporization for the water (actually $T_{w,\mathrm{sat}}(p)$ is the inverse relation). For the water, many pratical approximations exist; for low temperatures, the Rankine formula, valid for temperature ranged from 5 C to 140 C, is:

$$\mathrm{p_{w,sat}}(T) = \exp\left(13.7 - \frac{5120}{T}\right)$$

(T in Kelvin, P in atmosphere).

For higher temperatures, the following Duperray relation is valid for temperature ranged from 90 C to 300 C:

$$\mathrm{p_{w,sat}}(T) = \left(\frac{T}{100}\right)^4$$

(T in Celsius, P in atmosphere).

Relation between the liquid fraction and the curvature of the liquid menisci

The 8th and last equation is not always easy to write under a compact, close form. It comes from a model describing (under some assumptions) the shape of the liquid menisci, thus allowing to derive a local relation between the volume of a liquid meniscus (which is closely related to the liquid fraction) and the total curvature of its interface. For the moment, we will write this last equation under a generic form:

$$\mathrm{F_3}(\alpha_l, \kappa) = 0 \tag{12}$$

Few models are outlined below:

– the simplest model is that used by MIN and EMMONS (1972); it assumes implicitely that the interface of the menisci is always flat (see figure 3), since the Clausius-Clapeyron equation for water is used in their work to specify the saturation vapor pressure. However, it doesn't make any assumption for the shape of the grains. Due to the flat interfaces, the total curvature κ is always zero, whatever the liquid fraction is, and this is represented in figure 4. Since we are in the pendular regime, only small values of α_l are valid; we arbitrarily impose $\alpha_l < 0.2$. In this case, equation 12 obviously becomes:

$$\kappa = 0$$

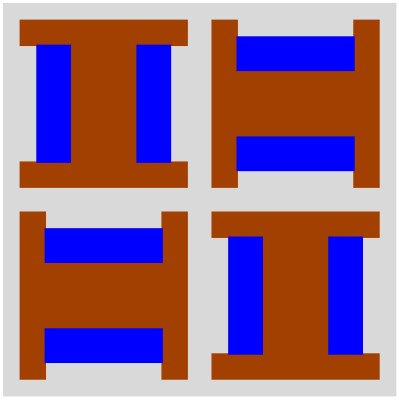


Figure 3: Simplest model for the liquid menisci (schematic view at pore scale – solid in brown, liquid in blue, gas in light gray): it doesn't make any assumption for the shape of the grains, but the liquid interfaces are all flat.

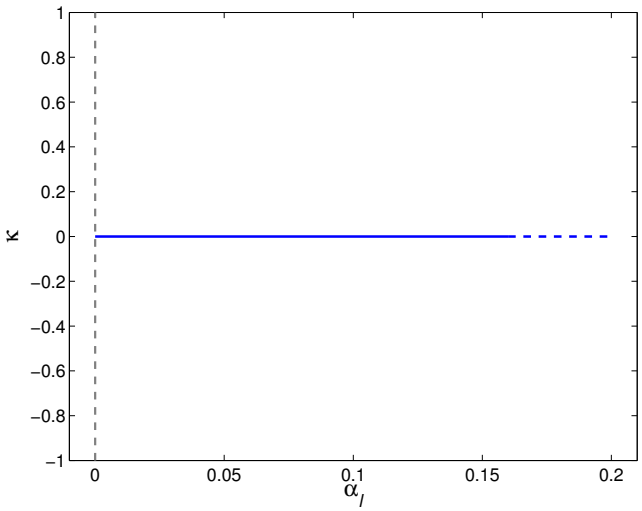


Figure 4: Liquid fraction / curvature relation, corresponding to figure 3: total curvature is always zero, whatever the liquid volume is. In the pendular regime, the liquid fraction α_l is supposed to remain small.

– the classical toroidal meniscus model. While many authors worked with the toroidal approximation ((KRALCHEVSKY and NAGAYAMA, 2001, Chapt. 11), MEGIAS-ALGUACIL and GAUCKLER (2009) and others), one of the most interesting papers seems the one of LECHMAN and LU (2008) for the two following reasons: (i) they considered two uneven-sized spheres and (ii) the approximation of the toroidal model is explored in terms of the accuracy of the liquid volume; this last point is important for our current work.
We assume here that all grains are spherical and that the interface shape is a tore. This is a good approximation if the two spheres touch each other, or if the spheres are close enough (thin meniscus) – see figure 5. Although total curvature is not constant on the interface, the geometric properties are easy to compute. This model can be parameterized by both a gap distribution between the spheres and the contact angle (to our knowledge, nobody has ever taken into account the adsorbed water film onto the spheres). A remarkable result is that when a gap exists between the spheres, then κ has no value for very small α_l (see figure 6) – in other words, liquid meniscus cannot be attached between two grains if the available liquid volume is too small. This latter fact can lead to difficulties during the numerical computation of the problem.

– an improved model which verify the mechanical equilibrium of the interface of the liquid menisci at the pore scale. The computation of the exact axisymmetric shape of a meniscus gives, after integration, the value of the volume. Knowing that this relation is stored in a finite set of discretized values of α_l and κ, the relation 12 can be reconstructed by interpolation. The relation between α_l and κ not only may be not defined for some range of α_l (for the same reason as explained previously about the toroidal model) but should reveal a hysteretic behavior due to the breaking of the menisci during the evaporation. Again, this could lead some challenges in the numerical implementation. Taking into account the statistical distribution of the gaps in the granular medium should remove the hysteretic behavior.
CANOT et al. (2015a) have been worked recently on this topic. This latter work is similar to the numerical/regression laws found first by MIKAMI et al. (1998) when the grain have all the same radius, and extended later on by SOULIÉ et al. (2006) for a polydisperse granular material. While these authors aimed at computing the mechanical forces between two grains linked by a liquid bridges, a part of their results could be reused here, because curvature and water volume was of primary importance.

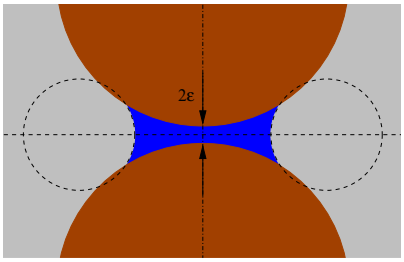


Figure 5: Toroidal model for a liquid meniscus between two spheres, with a prescribed contact angle at the solid boundary (schematic view at pore scale – liquid in blue, gas in light gray). The model can be parameterized by the gap 2ε between the grains.

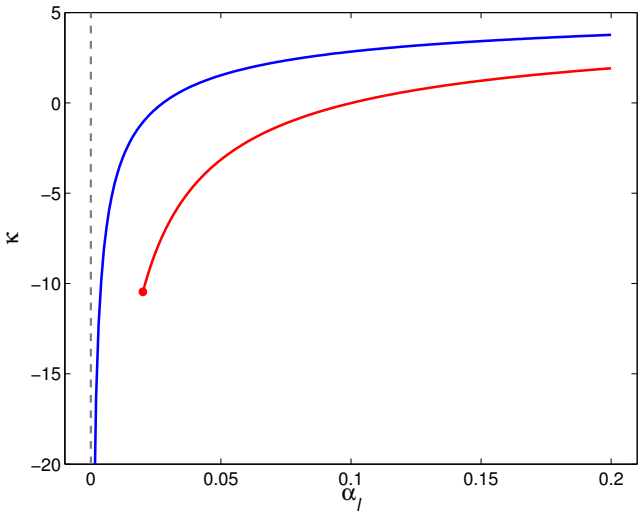


Figure 6: Liquid fraction / curvature relation, corresponding to figure 5: case $\varepsilon = 0$ (contact between the spheres – blue curve), and case $\varepsilon > 0$ (no contact between the spheres – red curve). The drawn curves just show the behavior, they don't come from realistic computation.

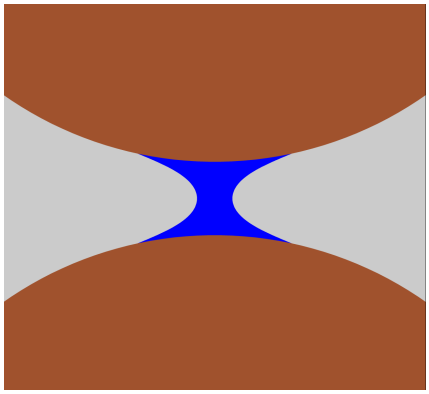


Figure 7: Contrary to figure 5, this is the exact shape of an axisymmetric meniscus. It can be easily seen that the meridian curve is far from a circle: it looks rather like a parabola.

Each of these models is able to provide the interfacial area (needed for a non-equilibrium condition at the interface). This interfacial area writes:

$$\mathrm{F}_4(\alpha_l, S_{w,I}) = 0$$

where $S_{w,I}$ is the interfacial area density, *i. e.* the interfacial area of the menisci per unit volume.

2.5 Additional equations

Diffusion of water vapor into air

We use the Fick law to describe how water vapor diffuses through air. Let's begin by the usual situation in free space, then lastly we shall adapt the equation for a porous medium. The Fick's law writes (BIRD et al., 2002):

$$\mathbf{j}_w = -\rho_g D_{w,a} \nabla \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} \right)$$

where $\mathbf{j}_w$ is the net mass flux of vapor through the stagnant gas mixture. $D_{w,a}$ is the diffusion coefficient between air and vapor. In our model, this latter coefficient is taken as a constant, while it may depend both on temperature and concentration values. Literature gives useful approximated relations for these dependances (BIRD et al. (2002), NELLIS and KLEIN (2009) and also many other books).

The Fick law is restricted here to the concentration diffusion. Theoretically, other terms should be added, as thermal diffusion (also known as Soret effect, while this latter name should rather be used for diffusion in liquids) or pressure gradient diffusion. These additional terms will be ignored here, because they are usually small; in our case, an estimation of the ratio of the thermodiffusion to the concentration diffusion leads to a numerical value of the order of 1/10.

The net mass flux $\mathbf{j}_w$ is related to the vapor velocity by the formula:

$$\mathbf{j}_w = \rho_w \, \mathbf{v}_w^*$$

where $\mathbf{v}_w^*$ is the diffusion velocity of the vapor component with respect to the mass average velocity of the gas mixture:

$$\mathbf{v}_w^* = \mathbf{v}_w - \mathbf{v}_g$$

In porous media, the diffusion mechanism is the same (assuming that the characteristic length of the pores is not too small), except that the diffusion coefficient must be changed. The final equation used will be therefore:

$$\frac{\rho_w}{\rho_g} \mathbf{v}_w^* = -\phi \, D_{w,e} \nabla \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} \right) \tag{13}$$

The $D_{w,e}$ coefficient (an *effective* value for the diffusion coefficient through the porous medium) plays a role similar to λ_e; theoretically, its determination may be hard, because it depends on the geometrical configuration, *i. e.* on the pores network's topology. The simplest approach consists in assuming that the effective value is derived from the physical one by multiplying it by a constant:

$$D_{w,e} = \tau_s \, D_{w,a}$$

τ_s is the tortuosity factor of the solid matrix (BIRD et al. (2002), LU and LIKOS (2004)); it is a positive dimensionless number less than unity because the diffusion in a porous medium is slower than that in free space. Some authors, like DAÏAN (1988), take this factor as a constant (however, it seems that there is a mistake in the approximation used by J.-F. Daïan : he chooses $\tau_s = 0.5$ whereras the studies of Currie (1960) show instead that $\tau_s = 0.5\,\phi$, which is quite different!), while ROSE (1963) explains that τ_s can be modelled as a function of the porosity ϕ, and gives few practical laws. By using the figure 1 of CURRIE (1960), we can estimate the following linear relationship for sands:

$$\tau_s \approx 0.884\,\phi - 0.098$$

This relationship violates the constraint proposed by ROSE (1963), that is to say $\tau_s|_{\phi=0} = 0$, but in our case it will be used only for a range of porosity such that the tortuosity coefficient is non negative. In the special situation where the pores network is constituted by parallel tubes, then $\tau_s = \phi$. Note: in our opinion, it should be more rational to introduce an effective value $D_{w,e}$ of the diffusion coefficient, in a similar way as our study the effective value of the thermal conductivty.

Spatial dispersion of one component due to the network structure of the porous matrix (geometrical effect) is not yet taken into account here (for sure, its relative effect with respect to the diffusion mecanism depends on the magnitude of the gas velocity, and so on the application).

Effective thermal conductivity

Many choices exist for the effective thermal conductivity λ_e:

– most of authors, as MIN and EMMONS (1972), take this variable as a constant. Although it is the simplest choice, it is evident that it is wrong.

– a different, reasonable choice is to take empirical relations found in literature. For example, equation (10) of CHEN (2008) (see also Figure 8):

$$\lambda_e(\phi,\alpha_l) = 7.5^{1-\phi}\,0.61^{\phi}\,[(1.0-0.0022)\alpha_l + 0.0022]^{0.78\phi}$$

or equation [1-5] of SMITS et al. (2010) (see also Figure 9):

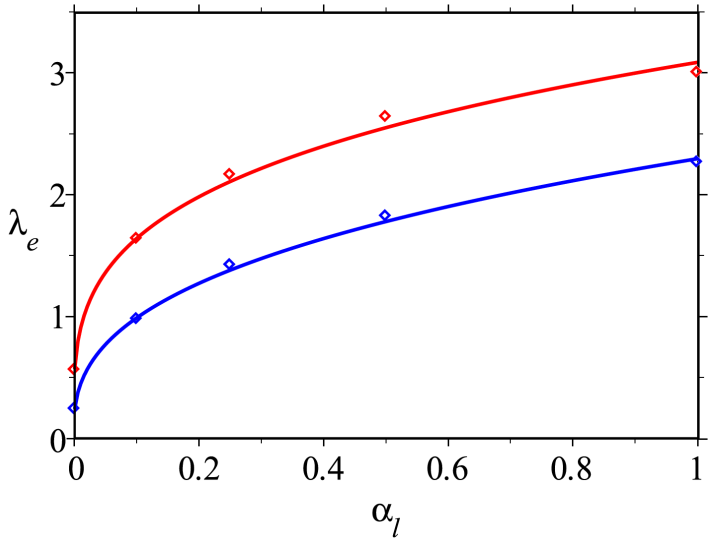


Figure 8: From Figure 9 of CHEN (2008). Red and blue data correspond respectively to $\phi = 0.354$ and 0.472. Individual markers represents experimental data whereas continuous lines is the approximated relation. (Curves have been redrawn because it seems that there is a mistake in the published figure 9)

$$\lambda_e(\phi,\alpha_l) = Ke\,(\lambda_{\text{sat}} - \lambda_{\text{dry}}) + \lambda_{\text{dry}}$$

where Ke is the normalized thermal conductivity, also called the Kersten number. This number lies in the interval $[0,1]$ and depends on the water content θ via the following formula:

$$Ke = \frac{\xi\,\theta}{1+(\xi-1)\,\theta}$$

where ξ is a dimensionless empirical fitting parameter, which is typically ranged from 5 to 30. The water content θ is the ratio of the liquid volume to the total volume so it is equal to $\phi\,\alpha_l$.

– another possibility is to choose semi-analytical models. For example, OKAZAKI (1985) derives the effective thermal conductivity considering grains as perfect spheres consolidated by liquid bridges. Note that this latter work is specially devoted to the apparent mass transfer coefficient in the adsorptive porous solid.

– it is worth noting that MOYNE et al. (1988) distinguish the true thermal conductivity of the medium (related to the Fourier law) and the apparent thermal conductivity which includes evaporation/condensation phenomena.

– while some authors present sophisticated models (CÔTÉ and KONRAD, 2005), we choose, in a last approach and for consistency with the liquid meniscus layout, a hysteretic relation already sketched by CANOT et al. (2015b); but this implies to add to our set of unknowns a boolean variable (both in $\mathbf{x}$ and t) which indicates whether the local meniscus is in the "contacting" state or in the "non-contacting" state (see also MAEDA et al. (2003)). Moreover, the results must be generalized to account for the statistical distribution of gaps between the grains.

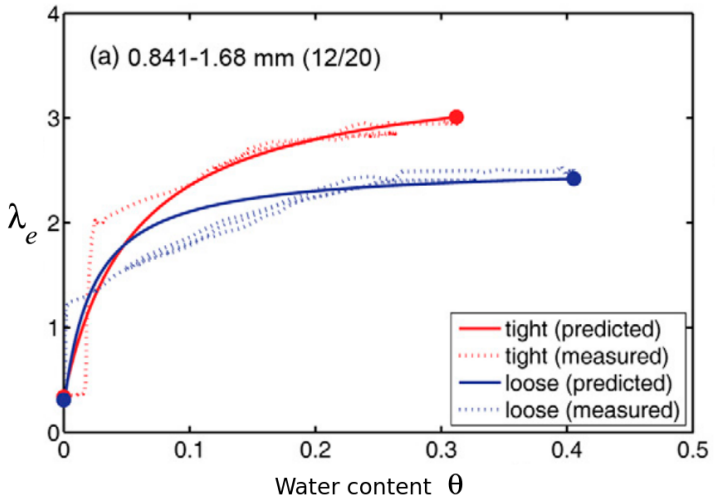


Figure 9: From Figure 7a of SMITS et al. (2010). Predicted and measured values of the thermal conductivity of a sand with grain sizes ranged in $0.841 - 1.68\,mm$. Red and blue curves correspond to different packing (porosity is resp. equal to 0.312 and 0.403). Notice that the prediction is good for great values of water content, but it is pretty poor for small values.

2.6 Limitations of the current model

L-a) thermodynamical equilibrium is supposed to be verified at the microscale (pore scale); this implies that both temperature and water vapor density are uniform. However, vapor is created at the liquid interface, and heat is locally absorbed in the vicinity of the interface (latent heat).
In case of rapid evaporation/condensation processes, this assumption is violated. This may affect the heat and mass transfer at the macroscale, due to some delay effects.

L-b) in a granular media containing water under the pendular regime, all liquid menisci have a concave total curvature, leading to an internal liquid pressure lower that the surrounding pressure (Young-Laplace equation). The smaller menisci have a high curvature, therefore the liquid pressure level can be very low, perhaps even negative; in such a case, the liquid may be vaporized because the vaporization temperature decreases with the pressure, thus we should get $\alpha_l = 0$ (i.e. absolutely dry medium) whereas in the current model, $\alpha_l > 0$. However, negative pressure in liquids is not impossible (MACHIN (2002), or CHARLAIX and CICCOTTI (2010), p. 12-3).

The consequences for the numerical application of this model to a pratical problem are the following:

C-a) when assuming the equilibrium at the pore scale, the temperature must vary slowly throughout the whole domain; in particular, this eliminates a thermal shock at a boundary.

3 Numerical strategy

The set of equations (1-13) are composed of both Partial Differential Equations and algebraic equations. We chose to discretize first with respect the spatial variables only (this is sometimes called "method of lines"). The new semi-discretized system is therefore a Differential Algebraic system of Equations (DAE), which can be solved using an automatic dedicated solver.

Difficulties come from the need of the Jacobian of the DAE system, because the BDF scheme used is an implicit scheme. Getting (or computing) the jacobian matrix may be difficult, especially when the equations are not continuous or not defined for all values of the variables' range.

A — A **first** numerical simulation *will consider*:

(i) equilibrium condition at menisci's interface. This implies, as previously mentionned, slow variations in time, therefore slow forcing at boundaries.

(ii) an asymptotic toroidal meniscus model (ATMM) with $\theta = 0$, in order to have both a simple relation for the equation 12 and liquid water present everywhere in the domain (so that α_l is never zero and equation 9 is easier to implement);

(iii) a constant value for the thermal conductivity λ_e, like MIN and EMMONS (1972);

(iv) an idealized packing where all spheres touch each other. All the gaps between two neighboring spheres are therefore zero (think, *e. g.* , the hexagonal compact arrangement of spheres).

B — Same configuration as case **A**, except that a non-equilibrium condition at interfaces is considered (equation 10).

C — A **third** numerical simulation *will be focused* on the numerical treatment of the twofold equation 9 whose form belongs to the complementarity problem:

$$\begin{cases} \text{if } a > 0 & \text{then} \quad b = 0 \\ \text{otherwise, if } a = 0 & \text{then} \quad b > 0 \end{cases}$$

which is equivalent to:

$$\min(a, b) = 0$$

This equivalence has been used by MARCHAND et al. (2013); BEN GHARBIA and JAFFRÉ (2014) and many other authors.

Moreover:

(i) the flat meniscus model is chosen, so that equation 12 reduces to the trivial equation

$$\kappa = 0$$

and function $\mathrm{F}_1(T, \kappa)$ in equation 9 is always equal to 1;

(ii) again, the thermal conductivity λ_e is a constant;

(iii) the sphere packing doesn't matter.

D — The **full** implementation (it combines both **B** and **C**) of the presented model *will account for*:

(i) according to the class of boundary conditions (the forcing terms may be slow or not), the menisci's interface is considered under equilibrium or not;

(ii) the full equation 9, treated as a complementarity problem;

(iii) the true meniscus model, which comes from the exact integration for the interface shape;

(iv) a reasonable law for the thermal conductivity λ_e;

(v) a reasonable sphere packing, obtained by DEM. We may envisage the two different packings used in CANOT et al. (2015a). One of them is parameterized by the mean gap and the width of its statistical distribution (Cauchy law).

Moreover, we should add the quick disappearance of the liquid meniscus by vaporization as soon as the liquid pressure drops below $\mathrm{p}_{\mathrm{w,sat}}$ (during evaporation, the meniscus curvature becomes more and more large – negatively – thus the liquid pressure decreases due to the Young-Laplace equation).

Most of thermodynamics properties for water and air are taken from tables which can be found in an appendix of CENGEL and BOLES (2007).

References

AJAEV, V. S. (2012), *Interfacial Fluid Mechanics – A Mathematical Modeling Approach*. Springer New-York.

BALMER, R. T. (2011), *Modern Engineering Thermodynamics*. Elsevier.

BEN GHARBIA, I. and J. JAFFRÉ (2014), "Gas phase appearance and disappearance as a problem with complementarity constraints." *Mathematics and Computers in Simulation*, 99, 28–36.

BIRD, R. B., W. E. STEWART, and E. N. LIGHTFOOT (2002), *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons.

BRANDON, T. L. and J. K. MITCHELL (1989), "Factors Influencing Thermal Resistivity of Sands." *J. Geotech. Engng.*, 115, 1683–1698.

BRIDGE, L., R. BRADEAN, M. J. WARD, and B. R. WETTON (2003), "The Analysis of a Two-Phase Zone with Condensation in a Porous Medium." *Journal of Engineering Mathematics*, 45, 247–268.

CANOT, É., R. DELANNAY, and S. MANSOUR (2015a), "Reorganization of Liquid Menisci between Solid Grains during Evaporation/Condensation of Water in a Wet Porous Medium." InterPore, 7th International Conference on Porous Media, May 18-21, Padova, Italy – Presentation ().

CANOT, É., R. DELANNAY, S. MANSOUR, M. MUHIEDDINE, and R. MARCH (2015b), "Effective Thermal Conductivity of a Wet Porous Medium – Presence of Hysteresis when Modeling the Spatial Distribution for the Pendular Regime." *J. of Heat Transfer*, (to appear).

CENGEL, Y. and M. BOLES (2007), *Thermodynamics: an Engineering Approach*. McGraw Hill, 5th Edition. Includes Property Tables and Charts as Appendix.

CHARLAIX, E. and M. CICCOTTI (2010), "Capillary Condensation in Confined Media." In *Handbook of Nanophysics – Vol. 1* (K. SATTLER, ed.), chapter 12, CRC Press.

CHEN, S. X. (2008), "Thermal Conductivity of Sands." *Heat and Mass Transfer*, 44, 1241–1246.

COSTA, A. (2006), "Permeability-Porosity Relationship: A Reexamination of the Kozeny-Carman Equation based on a Fractal Pores-Space Geometry Assumption." *Geophysical Research Letters*, 33, 1–5.

CURRIE, J. A. (1960), "Gaseous diffusion in porous media. Part 2. – Dry granular materials." *Brit. J. Appl. Phys.*, 11, 318–324.

CÔTÉ, J. and J.-M. KONRAD (2005), "A Generalized Thermal Conductivity Model for Soils and Conctruction Materials." *Can. Geotech. Journal*, 42, 443–458.

DAYAN, A. and E. GLUEKLER (1982), "Heat and Mass Transfer within an Intensely Heated Concrete Slab." *Int. J. Heat Mass Transfer*, 25, 1461–1467.

DAÏAN, J.-F. (1988), "Condensation and Isothermal Water Transfer in Cement Mortar. Part I – Pore Size Distribution, Equilibrium Water Condensation and Imbibition." *Transport in Porous Media*, 3, 563–589.

DE VRIES, D. A. (1958), "Simultaneous Transfer of Heat and Moisture in Porous Media." *Trans. Amer. Geoph. Union*, 39, 909–916.

DELANNAY, R. and S. C. MCNAMARA (2015), "Heat Transfer in Non-Saturated Porous Media." (Note: unpublished report concerning the discrete simulation of heat and mass transfer in a small reservoirs' network – dated: June 8, 2015).

DONG, Y., J. MCCARTNEY, and N. LU (2015), "Critical Review of Thermal Conductivity Models for Unsaturated Soils." *Geotechnical and Geological Engineering*, 33, 207–221.

GÉMINARD, J.-C. and H. GAYVALLET (2001), "Thermal Conductivity of a Partially Wet Granular Material." *Physical Review E*, 64, 041301.

HADLEY, G. R. (1985), "Numerical Modeling of the Drying of Porous Materials." In *Drying'85* (Toei R. and Mujumdar A. S., eds.), 135–142, Springer-Verlag.

HAYE, M. J. and C. BRUIN (1994), "Molecular Dynamics Study of the Curvature Correction to the Surface Tension." *J. Chem. Phys.*, 100, 556–559.

HUANG, C. L. D. (1979), "Multi-phase Moisture Transfer in Porous Media subjected to Temperature Gradient." *Int. J. Heat Mass Transfer*, 22, 1295–1307.

KAVIANY, M. (1999), *Principles of Heat Transfer in Porous Media*. Springer.

KRALCHEVSKY, P. A. and K. NAGAYAMA (2001), *Particles at Fluid Interfaces and Membranes*. Elsevier.

LECHMAN, J. and N. LU (2008), "Capillary Forces and Water Retention between Two Uneven-Sized Particles." *J. Engng Mech.*, 134, 374–384.

LIZAIK, L. (2008), *Modélisation et approximation numérique des écoulements multi-composants multiphasiques dans un milieu poreux – Partie II de "Modélisation numérique de modèles thermomécaniques polyphasiques : puits-milieux poreux"*. Thèse de mathématiques appliquées, Université de Pau et des Pays de l'Adour.

LU, N. and W. J. LIKOS (2004), *Unsaturated Soil Mechanics*. John Wiley & Sons.

LU, S., T. REN, Y. GONG, and R. HORTON (2007), "An Improved Model for Predicting Soil Water Conductivity from Water Content at Room Temperature." *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 71, 8–14.

MACHIN, W. D. (2002), "Limiting Tensile Strength of Capillary-Condensed Liquids." In *Liquids under Negative Pressure* (A. R. IMRE, H. J. MARIS, and P. R. WILLIAMS, eds.), 109–115, Springer.

MAEDA, N., J. N. ISRAELACHVILI, and M. M. KOHONEN (2003), "Evaporation and Instabilities of Microscopic Capillary Bridges." *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 100, 803–808.

MANSOUR, S. (2015), *Contribution to certain Physical and Numerical Aspects of the Study of the Heat Transfer in a Granular Medium*. Thèse d'Informatique, Université de Rennes 1.

MARCHAND, E., T. MÜLLER, and P. KNABNER (2013), "Fully Coupled Generalized Hybrid-Mixed Finite Element Approximation of Two-Phase Two-Component Flow in Porous Media. Part I: Formulation and Properties of the Mathematical Model." *Comput. Geosci.*, 17, 431–442.

MEGIAS-ALGUACIL, D. and L. J. GAUCKLER (2009), "Capillary Forces between Two Solid Spheres Linked by a Concave Liquid Bridge: Regions of Existence and Forces Mapping." *AIChE*, 55, 1103–1109.

MIKAMI, T., H. KAMIYA, and M. HORIO (1998), "Numerical Simulation of Cohesive Powder Behavior in a Fluidized Bed." *Chem. Engng Sc.*, 53, 1927–1940.

MIN, K. and H. W. EMMONS (1972), "The Drying of Porous Media." In *Proc. 1972 of Heat Transfer and Fluid Mech. Inst.*, 1–18, Stanford University Press.

MOYNE, C., J.-C. BATSALE, and A. DEGIOVANI (1988), "Approche expérimentale et théorique de la conductivité thermique des milieux poreux humides – ii. théorie." *Int. J. Heat Mass Transfer*, 31, 2319–2330.

MOYNE, C. and A. DEGIOVANNI (1985), "Importance of Gas Phase Momentum Equation in Drying above the Boiling Point of Water." In *Drying'85* (Toei R. and Mujumdar A. S., eds.), 109–115, Springer-Verlag.

NELLIS, G. and S. KLEIN (2009), *Heat Transfer*. Cambridge University Press.

OKAZAKI, M. (1985), "Heat and Mass Transport Properties of Heterogeneous Materials." In *Drying'85* (Toei R. and Mujumdar A. S., eds.), 84–96, Springer-Verlag.

OUSEGUI, A., C. MORESOLI, M. DOSTIE, and B. MARCOS (2010), "Porous Multiphase Approach for Baking Process – Explicit Formulation of Evaporation Rate." *J. of Food Engng*, 100, 535–544.

PHILIP, J. R. and D. A. DE VRIES (1957), "Moisture Movement in Porous Materials under Temperature Gradients." *Trans. Amer. Geoph. Union*, 38, 222–232.

ROSE, D. A. (1963), "Water Movement in Porous Materials: Part 1 – Isothermal Vapour Transfer." *Brit. J. Appl. Phys.*, 14, 256–262.

ROTH, K. (2012), *Soil Physics – Lecture Notes*. Institute of Environmental Physics, Heildelberg Univ.

SHAHRAEENI, E. and D. OR (2010), "Pore-Scale Analysis of Evaporation and Condensation Dynamics in Porous Media." *Langmuir*, 26, 13924–13936.

SMITS, K., A. CIHAN, T. SAKAKI, and T. ILLANGASEKARE (2011), "Evaporation from Soils under Thermal Boundary Conditions: Experimental and Modeling Investigation to Compare Equilibrium- and Nonequilibrium-Based Approches." *Water Resources Research*, 47, W05540 1–14.

SMITS, K., T. SAKAKI, A. LIMSUWAT, and T. ILLANGASEKARE (2010), "Thermal Conductivity of Sands under Varying Moisture and Porosity in Drainage-Wetting Cycles." *Vadose Zone Journal*, 9, 1–9.

SOULIÉ, F., F. CHERBLANC, M. S. EL YOUSSOUFI, and C. SAIX (2006), "Influence of Liquid Bridges on the Mechanical Behaviour of Polydisperse Granular Materials." *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 30, 213–228.

TARNAWSKI, V.-R. and W. H. LEONG (2000), "Thermal Conductivity of Soils at Very Low Moisture Content and Moderate Temperatures." *Transport in Porous Media*, 41, 137–147.

THORVALDSSON, K. and C. SKJÖLDEBRAND (1998), "Water Diffusion in Bread during Baking." *Food Science & Technology (Lebensm.-Wiss. u.-Technol.)*, 31, 658–663.

UDELL, K. S. (1985), "Heat Transfer in Porous Media considering Phase Change and Capillarity – the Heat Pipe effect." *Int. J. Heat Mass Transfer*, 28, 485–495.

VARGAFTIK, N. B., B. N. VOLKOV, and L. D. VOLJAK (1983), "International Tables of the Surface Tension of Water." *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 12, 817–820.

ZHANG, J. and A. K. DATTA (2004), "Some Considerations in Modeling of Moisture Transport in Heating of Hygroscopic Materials." *Drying Technology*, 22, 1983–2008.

International Journal on Finite Volumes, vol. 6, n. 1

Various Approaches for Solving Problems in Heat Conduction with Phase Change

Mohamad MUHIEDDINE[†⋆]
[†] *IRISA, Campus de Beaulieu*
[⋆] *Archéosciences, UMR 6566*
35042 Rennes, France
mohamad.muhieddine@irisa.fr

Édouard CANOT[†]
[†] *IRISA, Campus de Beaulieu*
35042 Rennes, France
edouard.canot@irisa.fr

Ramiro MARCH[⋆]
[⋆] *Archéosciences, UMR 6566*
35042 Rennes, France
ramiro.march@univ-rennes1.fr

Abstract

This paper treats a one dimensional phase-change problem, 'ice melting', by a vertex-centered finite volume method. Numerical solutions are obtained by using two approaches where the first one is based on the heat conduction equation with the basic grid (improved by introducing a new adaptive mesh technique), latent heat source approach (LHA), while the second uses the equivalent thermodynamic parameters defined by considering the apparent heat capacity method (AHC). A comparison between the two approaches is presented, furthermore the accuracy and flexibility of the numerical methods are verified by comparing the results with existing analytical solutions. Results indicate that phase-change problems can be handled easily with excellent accuracies by using the AHC method.

Key words : Phase-change, computational fluid dynamics, latent heat, finite volumes, rolling mesh, self-adaptive mesh, apparent capacity method, moving boundary problem.

Nomenclature

C_p	:	Specific heat,
E	:	Energy,
H	:	Total enthalpy,
T	:	Temperature,
k	:	Thermal conductivity,
L	:	Latent heat of fusion,
U	:	Step function,
V	:	Control volume,
Q	:	Accumulation latent heat,
Q^{total}	:	Total latent heat,
Δx	:	Control volume size,
$\Delta\phi$	:	Heat flux difference,
Δt	:	Time step,
ΔT	:	Temperature semi-interval,
α	:	Weighting factor,
θ	:	Solid fraction,
ρ	:	Density,
ϕ	:	Volumetric fraction,
ξ	:	Interface position,
δ	:	Dirac delta function.
Subscripts		
0	:	Initial phase,
f	:	Phase changing point,
i	:	node index,
l	:	Liquid phase,
s	:	Solid phase.

1 Introduction

Melting processes are classified as moving boundary problems which have been of special interest due to the inherent difficulties associated with the non-linearity of the interface conditions and the unknown locations of the moving boundaries. This paper is concerned with a numerical method for solving a one dimensional phase-change problem leading to further studies on energy-saving and quality improvements. Solving such problem of phase change, where analytical solution exists, enables us to choose the best approach to solve our problem of interest "the forced evaporation in saturated porous media" which has a direct application in the study of prehistoric fire.

Over the years, a number of related computational works have employed various techniques in the analysis of phase change problems. Several important theoretical results on the existence, the uniqueness and the properties of classical solutions are available in the literature [MUE 65], [CAN 67], [LUI 68], [BEJ 03]. Besides, most analytical solutions deal with for 1-D geometries with very particular boundary conditions hence, cannot be generalize to multidimensional problems. Thus, many

numerical schemes [VOL 87], [KIM 90], [WAN 00], [SAV 03], [JAV 06], have been proposed to study transient heat conduction problems with phase change in one, two and three dimensions, but two formulations are predominant in the numerical analysis. The first one is referred to as the 'front-tracking method' in which the position of the moving front is determined at each time step [ASK 87], and must always correspond to a node or edges mesh. The use of this numerical method can usually eliminate the oscillations obtained by using the fixed grid method, and allows for more precise solutions. However, it is poorly suited to multi-dimensional problems due to the algorithm's difficult implementation and the large computational cost.

The second formulation, based on the use of the heat enthalpy concept [BON 73], [PRA 04], recasts the problem in such a way that the conditions on the moving phase front are absorbed into new equations, and the problem is solved without explicit reference to the position of the internal boundary (interface position). Its position is determined a posteriori, when the solution is complete. The major problem with the latter method is that it is not very accurate. In addition, this formulation often requires the use of algorithms to correct the solution in order not to miss the absorption or the release of latent heat.

Other publications related to heat conduction problems with phase change, using either finite difference or finite element method or both, can be found in references [PAW 85], [GRA 89], [SAV 03]. All of them are of interest, but the most interesting numerical method in our case is based on the finite volume formulation which has the important feature that the resulting solution ensures that the conservation of quantities involved such as mass, momentum and energy is exactly satisfied not only over any group of control volumes but over the whole domain of computation, which is not the reality when dealing with finite difference methods. Finite element approach [GUI 74] takes advantage in the ability to divide the domain of interest in elementary subdomains, namely elements. It may therefore handle problems with steep gradients and may deal with irregular geometric configurations. Comparing finite element method with finite volume one, this last still more conservative and so more adequate to solve our problem.

This work chooses to use two approaches, the latent heat accumulation approach (LHA) [PRA 04] and the apparent heat capacity method (AHC) [BON 73]. The numerical methods based on enthalpy formulation of the problem have been studied in [BON 73], [CIV 87], [LAM 04], [PRA 04], [MUH 08]. However, the algorithm proposed for the LHA method is rather similar to that of Prapainop [PRA 04], where the enthalpy formulation has been used to construct an approximation scheme. The finite volume method is implemented over a special rolling mesh in the LHA composed of a basic regular grid which is recursively refined near the interface. In the AHC a fixed grid scheme has been used.

2 Mathematical model for simulating problem with phase change

Only conduction is considered as a heat transfer mode. The physical properties which characterize the solid and liquid phase, such as specific heat and conductivity,

are constant for a given phase, it is likely not to be the case in reality but our model is able to take into account non-constant parameters. This proposed approximation supposes that all radiative effects within ice melting are neglected. In the following, we shortly describe equations for a melting problem, with the further approximation that density is the same for the two phases.

2.1 Equations and boundary conditions

Our melting problem is characterized by solving the partial differential equation obtained by combining Fourier's law of heat conduction and the law of conservation of energy which states that the rate of energy accumulation within a control volume of size Δx equals the net heat transfer by conduction

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho C_p T \Delta x\right] = \Delta\phi \tag{1}$$

where $\Delta\phi$ is the heat flux difference at the boundaries of the control volume. The problem deals with a semi-infinite region of ice initially at $T_0 = -10°C$. At time $t > 0$, the boundary at $x = 0$ is suddenly kept at $T_w = 20°C$. The governing equations for the temperature $T(x,t)$ are formulated as follows :

$$\begin{cases} \rho C_l \dfrac{\partial T}{\partial t} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left[k_l \dfrac{\partial T}{\partial x}\right] & 0 < x < \xi\,(t)\,, \quad t > 0 \\ T_l(0,t) = T_w & t > 0 \end{cases} \tag{2}$$

$$\begin{cases} \rho C_s \dfrac{\partial T}{\partial t} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left[k_s \dfrac{\partial T}{\partial x}\right] & \xi(t) < x < +\infty, \quad t > 0 \\ T_s(\infty,t) = T_0 & t > 0 \end{cases} \tag{3}$$

and for $t = 0$

$$T(x,0) = T_0 \qquad \forall x \in [0,\infty[$$

where $\rho = \rho_s = \rho_l$ is the density, C is the specific heat, $\xi(t)$ is the interface position, and the subscripts s and l indicate the solid and liquid phases, respectively.

At the interface, the heat flux condition is written as [BON 73] :

$$k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = -\rho L \frac{d\xi}{dt} \qquad \text{at } x = \xi(t) \tag{4}$$

where L is the latent heat coefficient and $d\xi/dt$ is the velocity of this interface. During the melting process, the liquid/solid front, which absorbs massive latent heat, continuously progresses through the medium. Moreover, the temperature verifies :

$$T_l = T_s = T_f \qquad \text{at } x = \xi(t)$$

where T_f is the melting temperature.
At the initial time, the interface is assumed to be at position zero (*i.e.*, $\xi(0) = 0$).

3 Analytical solution

Exact solutions of 1D phase change of a semi-infinite slab were analyzed by Carslaw and Jaeger [CAR 59] and KU and Chan [KU 90] with the moving front approach. The exact temperature distributions in solid, T_s, and in liquid, T_l, are respectively :

$$\begin{cases} T_l = T_w + (T_f - T_w)\dfrac{\mathrm{erf}(x^*)}{\mathrm{erf}(x^*_{sl})} & \text{when } 0 < x^* < x^*_{sl} \\ Ts = T_0 + (T_f - T_0)\dfrac{\mathrm{erfc}(\sqrt{\mu_l/\mu_s x^*})}{\mathrm{erfc}(\sqrt{\mu_l/\mu_s x^*_{sl}})} & \text{when } x^*_{sl} < x^* < \infty \end{cases} \tag{5}$$

where $x^* = x/2\sqrt{\mu_l t}$ is the dimensionless position and $\mu = k/\rho C$ is the thermal diffusivity. The two values are calculated from corresponding mechanical properties for both solid μ_s and liquid μ_l values. The values of dimensionless position of solid-liquid interface x^*_{sl} are obtained via the nonlinear algebraic equation :

$$\frac{T_f - T_0}{T_f - T_w}\frac{k_s}{k_l}\sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_s}}\frac{\exp(-(\mu_l/\mu_s)(x^*_{sl})^2)}{\mathrm{erfc}(\sqrt{\mu_l/\mu_s}x^*_{sl})} + \frac{\exp(-(x^*_{sl})^2)}{\mathrm{erf}(x^*_{sl})} - \frac{\sqrt{\pi}x^*_{sl}L}{C_l(T_f - T_w)} = 0 \tag{6}$$

4 Numerical method

The set of equations presented above are cast in the usual finite volume form for a finite domain (actually of length 2 m), under a vertex centered formulation: each cell (or control volume) encloses exactly one data node at x_i and its boundaries are always computed as the center of two consecutive nodes, so that we obtain a good accuracy in the gradient estimation. We denote by T_i the whole approximate solution, the location of any variables being indicated by subscripts.

The time domain is divided into an arbitrary number of constant time steps of size Δt. Variables at time t are indicated by the superscript 0. In contrast, the variables at time level $t + \Delta t$ are not superscripted.

For instance, the temperature at face $i + \frac{1}{2}$ is $T_{i+\frac{1}{2}} = T_i f_{i+\frac{1}{2}} + T_{i+1}\left(1 - f_{i+\frac{1}{2}}\right)$ where $f_{i+\frac{1}{2}} = (2\delta x_{i+\frac{1}{2}} - \Delta x_i)/2\delta x_{i+\frac{1}{2}}$, $\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, $\delta x_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i$, and $\delta x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - x_{i-1}$ as schown in figure 1). The other variable that has to be approximated at cell faces is the interface conductivity; the harmonic mean is used for composite materials for its superior handling of abrupt property changes by recognizing that the primary interest is to obtain a good representation of heat flux across interfaces rather than that of the conductivity [PAT 80] :

$$\frac{1}{k} = \frac{1 - f_{i+\frac{1}{2}}}{k_i} + \frac{f_{i+\frac{1}{2}}}{k_{i+1}} \tag{7}$$

In this study, the temporal distributions of temperature is approximated by two-time level schemes [VER 95], such that :

$$\int_t^{t+\Delta t} T dt = \left[\alpha T - (1-\alpha)T^0\right]\Delta T \tag{8}$$

where α is a weighting factor with the value between 0 and 1.

Three main schemes are considered: explicit, Crank-Nicholson and fully implicit. The first-order accurate explicit method uses temperature gradients of the previous time step t to calculate the unknown T at $t + \Delta t$ such that $\alpha = 0$. Hence, the time step size Δt is limited to $\Delta t < \rho c(\Delta x)^2/2k$ for 1D. The second-order accurate Crank-Nicholson scheme uses the average of previous and present temperature gradients to compute the present temperature, by taking $\alpha = 0.5$ in the above, and hence, has less severe step size limitation than the explicit scheme. The fully implicit scheme , however is unconditionally stable with first-order accuracy at $\alpha = 1$.

Taking Figure 1 as reference, the heat equation may be discretized as follows :

$$\begin{aligned}\rho c \Delta x_i \left(T_i - T_i^0\right) = \Bigg[& k_{i+\frac{1}{2}} \frac{\alpha \left(T_{i+1} - T_i\right) + (1-\alpha)\left(T_{i+1}^0 - T_i^0\right)}{\delta x_{i+\frac{1}{2}}} \\ & - k_{i-\frac{1}{2}} \frac{\alpha \left(T_i - T_{i-1}\right) + (1-\alpha)\left(T_i^0 - T_{i-1}^0\right)}{\delta x_{i-\frac{1}{2}}} \Bigg] \Delta t.\end{aligned} \tag{9}$$

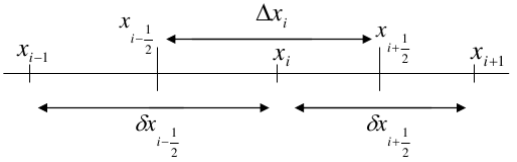


Figure 1: A typical 1D control volume

The convergence and stability of this kind of method could be proven according to the work of [MAG 93].

5 Problem reformulation and Latent heat accumulation method

In the basic enthalpy scheme, enthalpy is used as the primary variable and the temperature is calculated from a defined enthalpy-temperature relation :

$$H = \begin{cases} \rho C_s T, & T < T_f \\ \rho C_s T_f + \rho C_l \left(T - T_f\right) + \rho L, & T \geq T_f \end{cases} \tag{10}$$

where H is the enthalpy.

Anticipating the discrete description given in the next section, we suppose now that the physical domain (one dimensional in our case) is divided into a finite number of cells (from now on, the subscript i refers to a particular volume).

The latent heat accumulation method has been proposed by [PRA 04] and is resumed hereafter. Prior to the first time interval, the accumulated latent heat Q_i of a control volume V_i is initialized to zero. At the beginning of each time step, the phase status of each control volume is checked. If the nodal phase is solid

and the nodal temperature T_i rises higher than the melting temperature T_f, then control volume becomes saturated and its node is tagged (the cell is called "mushy"). Since an explicit scheme is used, the current temperature may be calculated directly from the previous values. The nodal temperature is then reassigned to the melting temperature and the latent heat increment (the energy used for phase change in the current time step) is calculated from the fictitious sensible heat such that $\Delta Q_i = \rho C\,(T_i - T_f)\,V_i$, where V_i is the volume of the cell and C is calculated as follows: $C = (1-\theta)C_l + \theta C_s$, where the solid fraction θ is the percentage of ice present in V_i.
The ΔQ_i quantity is added to the accumulated Q_i for subsequent time steps until the accumulated latent heat equals the total latent heat Q_i^{tot} available in the control volume, which is

$$Q_i^{tot} = \int_{V_i} \rho L dv \tag{11}$$

At this stage, the control volume becomes liquid, the tag on the cell is removed and the latent heat increment is no longer calculated.

5.1 Basic model with uniform mesh

As a first step, the discretized formula obtained has been applied under the explicit form where the time step must be chosen according to the Cauchy stability criterion:

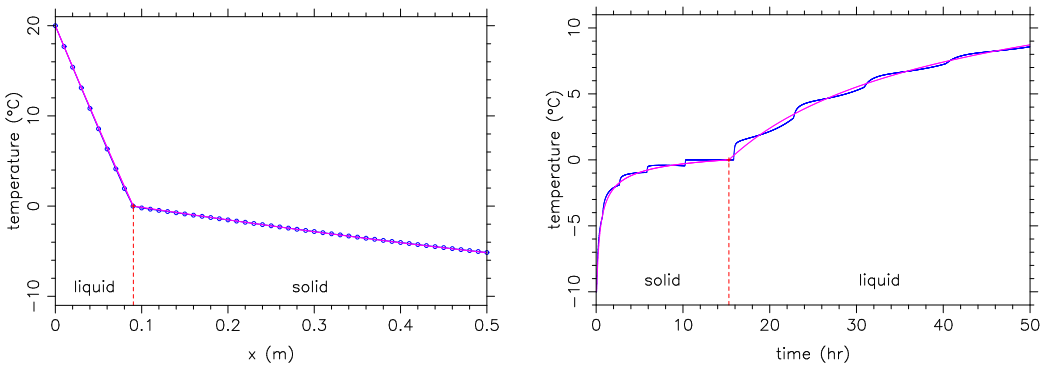
$$\Delta t < \Delta t_c = \frac{1}{2}\frac{\rho_s C_s \Delta x^2}{k_s}$$

Practically, Δt is always chosen to be equal to $0.99\Delta t_c$.

Thermophysical properties used in the calculation are those of the system water/ice. Spatial temperature profiles (Figure 2a; only a quarter of the whole domain is shown) match the analytical solution [PRA 04] very well, but time evolutions (Figure 2b) present some fluctuations, despite the large number of nodes used. These fluctuations are unavoidable: they are due to the finite width of the cell (In fact, the heat flux is blocked during the melting process inside the mushy cell). To overcome this unwanted behavior, the only way is to refine the grid near the interface, leading to the adaptive mesh technique presented below.

5.2 Improved model with recursive mesh refinement

It becomes obvious that in order to prevent any non-physical solution, it is advantageous to vary the mesh size according to the position of the interface. A global refinement would be the simplest technique in order to enhance the accuracy of the approximated solution; however, this technique will not be used here due to the high memory required. In general, two types of adaptive techniques are mostly used; the first one is the local refinement method whereby uniform fine grids are added in the regions where the approximated solution lacks adequate accuracy [ASK 87], and the second is the moving mesh technique where nodes are relocated at necessary time steps [MER 00].



(a) Temperature profile at $t_{max} = 50\ h$.

(b) Temperature history at $x = 5\ cm$.

Figure 2: Uniform mesh, $N_{basic} = 200$, $dt = 4.46E + 01\ s$. Analytical (red) and numerical (blue) solutions.

We have chosen a different technique, a classical 'insert/delete nodes' technique for the primal mesh (like Homard [HOM 95], used in FEM but adapted for the finite volume schemes) which has been used with recursive subdivisions, to produce excellent results for the one-dimensional melting problem. The previously described fixed basic uniform mesh is our starting point; then we refine the primal mesh by a number of subdivisions near the phase-change front — at each level of subdivion we add a node at the middle of the two successive nodes (see Figure 3). The melting front is initially located in the first cell and can move anywhere along the discretized domain. When the phase-change front transfers to a new cell, the node added in a previous step is removed and a new node will be added to the new element.

This rolling mesh has the following characteristics:

- the mesh rolls because some nodes are added whereas others are deleted, but only when the mushy cell changes; most of the time the whole mesh remains unchanged;
- only the primal mesh is locally refined; then the dual mesh (*i.e.*, the cell boundary) is updated;
- it is not a moving mesh: during the time evolution all nodes are fixed in position. This fact guarantees a good accuracy due to the small number of needed interpolations (they are needed only when a new node is inserted).

This technique was implemented as a double linked list in Fortran 95. Each item of this list contains information about geometry (cell size) and physical variables (temperature, latent heat accumulation and a tag for the phase state). A number of fixed recursive subdivisions is used depending on the precision needs.

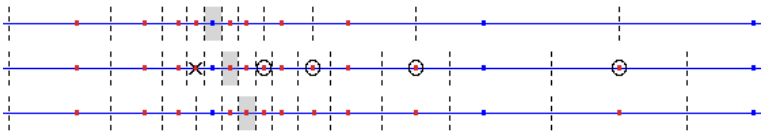


Figure 3: Recursive mesh refinement used to track the phase change front (dot points are nodes whereas dashed lines delimit cells; the mushy cell is colored in grey). Blue points are the basic uniform mesh. Circled points are the new nodes which have been inserted (between steps 1 and 2) to satisfy some constraints on the mesh progressiveness. The crossed point disappears between steps 2 and 3.

5.3 Energy conservation during the 'insert/delet nodes' technique

It is well known that the finite volume scheme conserves some extensive quantities. In our case, it is namely the energy used in equation 1, that can be written as follows

$$E = \int \rho C T dx \tag{12}$$

As in our physical model ρ and C are constants (in each phase), the integral of temperature must be conserved over the whole mesh during any 'insert/delete' nodes event.

Suppose we must insert a new node or delete an existing one: other temperature values at other nodes should be then modified for E to be remain unchanged. However, in our refinement technique (described in the previous subsection), we add/delete a node only for the 'mushy' cell (corresponding to a slope discontinuity of the temperature) without any modification. This is because a node is always inserted (or deleted) in a linear temperature behavior as we can see in Figures 4a or 5a.

5.4 Results and comments

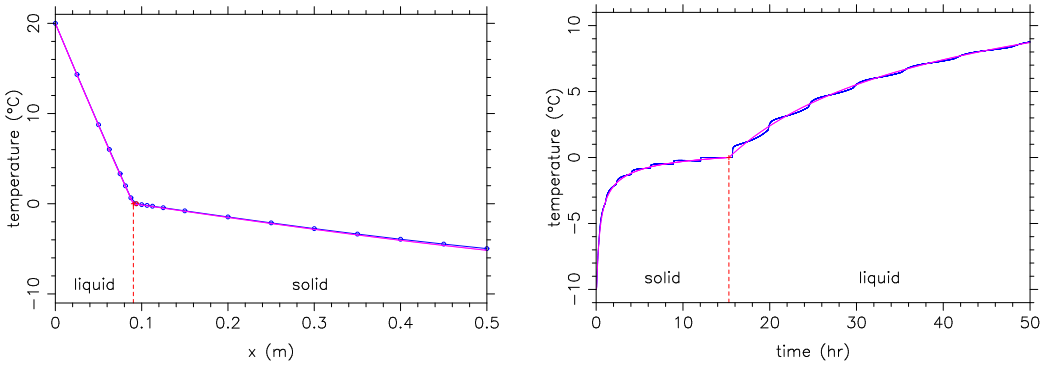
We have found that the adaptive technique do ameliorates the smoothness (hence the correctness) of the solution. Figures 4 and 5 show numerical results for two different values of the subdivision number. The more we refine the phase-change area, the more we obtain a good accuracy and fewer fluctuations; actually these fluctuations are not eliminated but their amplitude decreases drastically that they seem to vanish (see Figure 7). A good agreement with the analytical solution is shown.

Figure 6a clearly indicates that the local mesh refinement allows the use of a less total number of nodes leading to an economy of memory usage. It also shows errors between the numerical and the analytical solutions, and gives a comparison between the two models used. The relative error is calculated only from the time evolution curve (at $x = 5\ cm$) via the following Root-Mean-Square formula:

$$Error_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left(T(t_j) - T(t_j)_{exact}\right)^2}.$$

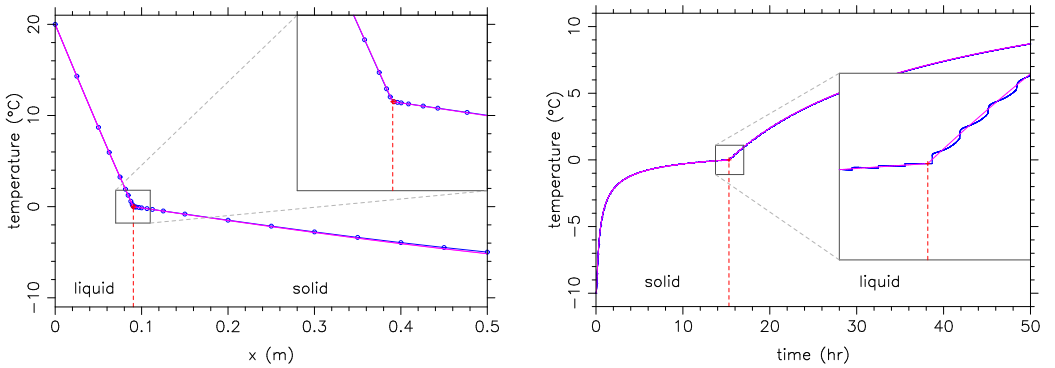
N being the total number of time steps.

Globally, taking into account both precision and computational cost, the proposed scheme is slightly better than the basic one, as shown in Figure 6b. Actually, the performance limitation of our method is due to the use of an explicit scheme which requires us to use a small time step; this should be numerically expensive in the case of large problems. Therefore, this method is poorly suited to multidimensional problem.



(a) Temperature profile at $t_{max} = 50\ h$. (b) Temperature history at $x = 5\ cm$.

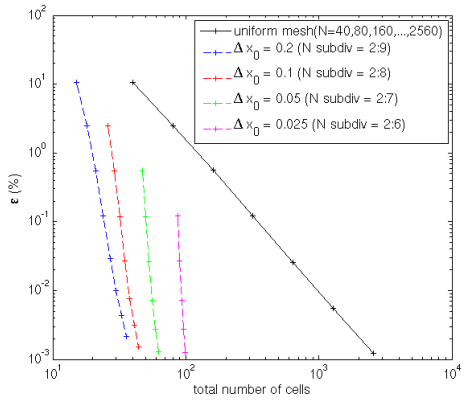
Figure 4: Rolling mesh, $N_{basic} = 40$, $dt = 1.74E + 01\ s$, number of subdivisions: 3. Analytical (red) and numerical (blue) solutions.



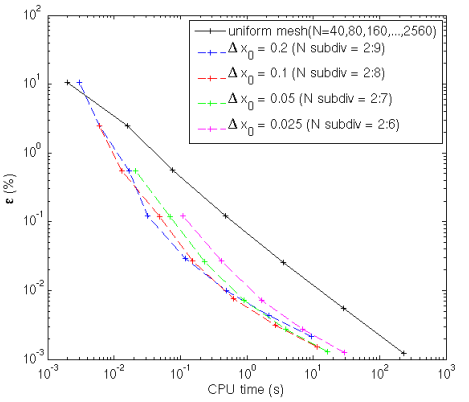
(a) Temperature profile at $t_{max} = 50\ h$. (b) Temperature history at $x = 5\ cm$.

Figure 5: Rolling mesh, $N_{basic} = 40$, $dt = 2.72E - 01\ s$, number of subdivisions: 6. Analytical (red) and numerical (blue) solutions.

Due to the limitation of the explicit scheme, several implicit ones have been tried (Crank-Nicholson and a fully implicit scheme) to achieve the expected efficiency and computational cost. As previously described, the explicit scheme has a restriction on time step size. Moreover, large time intervals cause the solution to diverge. Crank-Nicholson and fully implicit schemes may employ somewhat larger time steps but because of the structural model accuracy still depends on time step sizes. In addition,



(a) RMS Errors versus the total number of cells.



(b) RMS Errors versus the computational time.

Figure 6: explicit scheme.

implicit schemes require more CPU time than the explicit scheme due to the iterative procedures of the solver. Figure 8 shows the limitation of the used approach with the implicit schemes, thus a need of a different approach. However, by using this approach it is difficult to determine the interface position in multidimensional case.

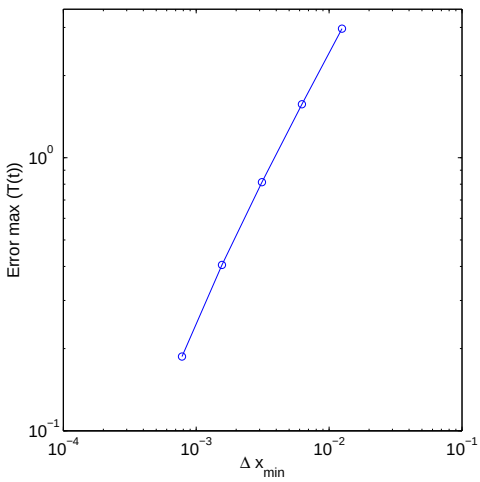


Figure 7: Oscillations amplitude on temperature history.

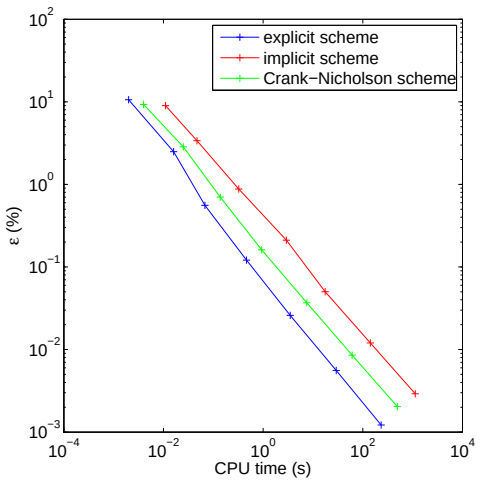


Figure 8: RMS Errors on the temperature history versus the CPU time.

6 Apparent heat capacity method

To avoid the tracking of the interface, the apparent heat capacity method will be used. In this method, the latent heat is calculated by integrating the heat capacity over the temperature [BON 73], and the computational domain is considered as one region. As the relationship between heat capacity and temperature in isothermal

problems involves sudden changes, the zero-width phase change interval must be approximated by a narrow range of phase change temperatures. Thus, the size of time steps must be small enough so that this temperature range is not overlooked in the calculation. The equivalent thermodynamic parameters are defined considering the apparent capacity method of [BON 73]. According to this reference, if these properties do not depend on temperature, the equivalent parameters may be obtained taking into consideration that the phase change takes place in a small temperature interval (see Figure 9).

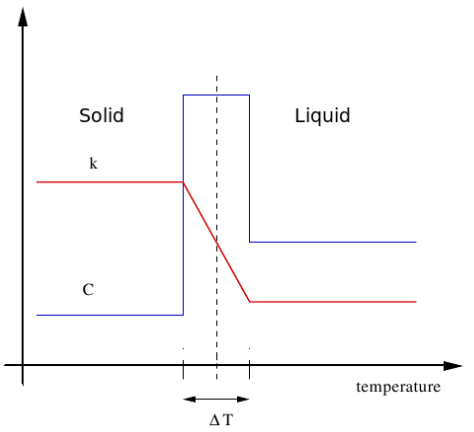


Figure 9: Physical properties given by Bonacina.

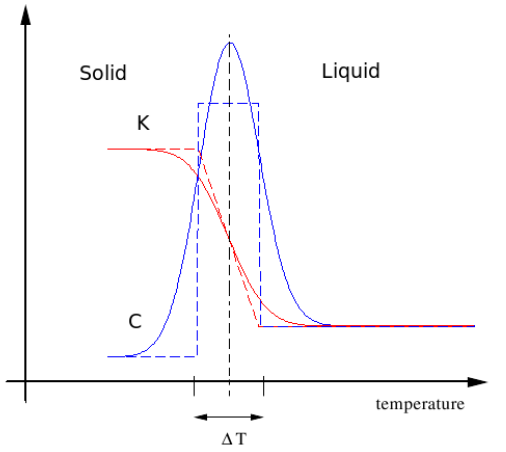


Figure 10: Smoothed physical properties used in this paper.

Then, if this interval is ΔT:

$$C = \begin{cases} C_s, & T < T_f - \Delta T \\ \frac{C_l + C_s}{2} + \frac{L}{2\Delta T}, & Tf - \Delta T \leq T \leq T_f + \Delta T \\ C_l, & T > T_f + \Delta T \end{cases} \tag{13}$$

Where L is the heat of phase change per unit volume $[J/kg]$, T_f is the phase change temperature, and ΔT is the temperature semi-interval across T_f. Similarly a global new thermal conductivity has to be introduced:

$$k = \begin{cases} k_s, & T < T_f - \Delta T \\ k_s + \frac{k_l - k_s}{2\Delta T} \left[T - (T_f - \Delta T) \right], & Tf - \Delta T \leq T \leq T_f + \Delta T \\ k_l, & T > T_f + \Delta T \end{cases} \tag{14}$$

Numerical solutions are obtained by using an approach based on a fixed grid and a vertex-centered finite volume discretization. The accuracy and flexibility of the present numerical method are verified by comparing the results with existing analytical solutions. The principal advantages of this approach are that (i) temperature T is the primary dependent variable which derives directly from the solution, and (ii) the use of this method usually eliminates the fluctuations found by using the LHA approach (see figure 2b). However, the AHC formulation leads to approximated solutions and suffers from a singularity problem for the physical properties

C (specific heat capacity) and k (conductivity) (see Figure 9). While the explicit form of discretization used in the previous approach is computationally convenient, it has a possible limitation due to the presence of time fluctuations in the solution. Results show the limitation of the LHA method due to the limiting small time step.

The implicit calculation is often worthwhile because the implicit Euler method has no stability limit. However, there is a price to pay for the improved stability of the implicit method, which is solving a system of nonlinear ordinary differential equations. We are going to solve PDEs by using the method of lines, where space and time discretizations are considered separately, leading to semi-discrete systems of ODEs. Fortunately, there is a considerable amount of high quality ODE software available, much of it recently developed. These softwares are used for the integration in t to achieve stability (or a more sophisticated explicit integrator in t is used that automatically adjusts Δt to achieve a prescribed accuracy).

The numerical solution can be obtained as the limit of a uniformly convergent sequence of classical solutions to approximating problems, deduced by smoothing the coefficients (13, 14), following few general rules [CIV 87]: The apparent heat capacity formulation allows for a continuous treatment of a system involving phase transfer. If the phase transition takes place instantaneously at a fixed temperature, then a mathematical function such as

$$\phi = U(T - T_f) \tag{15}$$

is representative of the volumetric fraction of the initial phase (ice phase). U is a step function whose value is zero when $T < T_f$ and one otherwise. Its derivative, i.e., the variation of the initial phase fraction with temperature, is

$$\frac{d\phi}{dT} = \delta(T - T_f) \tag{16}$$

in which $\delta(T-T_f)$ is the Dirac delta function whose value is infinity at the transition temperature, T_f, but zero at all other temperatures.To alleviate this singularity the Dirac delta function can be approximated by the normal distribution function sketched in Figure 11

$$\frac{d\phi}{dT} = (\epsilon\pi^{-1/2})exp[-\epsilon^2(T - T_f)^2] \tag{17}$$

in which ϵ is chosen to be $\epsilon = 1/\sqrt{2}\Delta T$ and where ΔT is one-half of the assumed phase change interval. Consequently, the integral of equation 17 yields the error functions approximations for the initial phase fraction as sketched in Figure 12. With conventional finite volume method, the initial phase fraction derived from equation 17 by integration should be used to avoid the numerical instabilities arising from the jump in the values of the volumetric fraction of initial phase from zero to one. In our approach we assume for simplicity that the phases are isotropic and homogeneous, and the densities of the phases are equal. Accordingly, the smoothed coefficients (see Figure 10) of equations 13 and 14 could be written as:

$$c = c_s + (c_l - c_s)\phi + L\frac{d\phi}{dT} \tag{18}$$

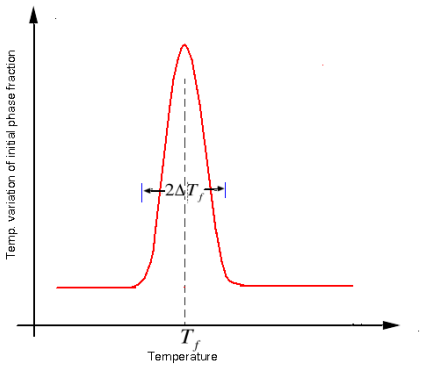


Figure 11: Approximation of the initial phase fraction over a small temperature interval according to the linear functions.

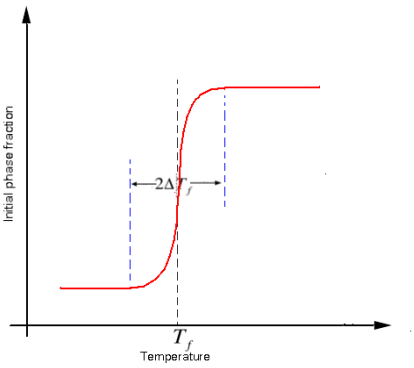


Figure 12: Approximation of the initial phase fraction over a small temperature interval according to the error functions.

and

$$k = k_s + (k_l - k_s)\phi \tag{19}$$

6.1 Global resolution using the Method of lines

The problem to be solved may be written in vectorial form with adequate initial and boundary conditions:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = f(t, x, T) \tag{20}$$

The user is typically required to write a simple routine which evaluates the function f when the arguments $t,\ x,\ T,\ \partial T/\partial x, ...$ are provided. Other equally simple subprograms would be required to specify appropriate boundary and/or initial conditions.

With generalization in mind, a numerical strategy inspired by the treatment of ordinary differential equations (ODE) associated to space discretization using the method of lines is applied [HUN 03]. It allows:
- a global treatment of the system without discrimination between the variables.
- a treatment of the physical model in its original form, as it was written, without preliminary manipulations.
- the use of sophisticated methods which have been developed for initial value differential equations.
- the possibility, for further works, to use the developments involved in ODE systems (parameter estimation, sensitivity analysis...)

The main failures of the method are the large size of the resulting ODE system obtained after discretization (this problem can be reduced by using an adequate numerical conditioning of the system) and the rigidity of the fixed grid discretization

scheme which is not really a problem in our case and could be solved by using an adaptive mesh.

The numerical method of lines consists in discretizing the spatial variable into N discretization points. Each state variable T is transformed into N variables corresponding to its value at each discretization point. The spatial derivatives are approximated by using a finite volume formula on 3 points where the best results for accuracy and computation time efficiency were obtained. We are solving PDEs, where space and time discretizations are considered separately this lead to a semi-discrete system of ODEs, which can be written as:

$$T^{'} = A(T)T \tag{21}$$

The Jacobian matrix $A(T)$ is computed explicitly (its tridiagonal structure is due to the 1-D laplacian discretization). The ODE solver has been modified in such a way that the Jacobian matrix $A(T)$ could be coded by hand in sparse format. The numerical calculation is performed with `ddebdf` routine of the SLATEC Fortran library [BRE 89]. This is designed to simulate systems of coupled non-linear and time dependent partial differential equations. It is used for the time integration to achieve stability and a prescribed accuracy by adjusting automatically the time step in the Backward Differentiation Formula (BDF). The BDF method is well adapted to our problem which becomes more and more stiff as ΔT decreases (see Figure 16).

6.2 Results and comments

The accuracy and flexibility of the present numerical method are verified by comparing the results with existing analytical solutions [BEJ 03]. Figures 13a and 14a present the temperature profile for different values of ΔT, with spatial discretization $N = 320$. Figures 13b and 14b show the related histories of temperature at $x = 5\ cm$. It is evident that the accuracy of the AHC method is sensitive to the magnitude of ΔT that is arbitrarily selected to approximate the Dirac delta function or to distribute the latent heat.

We introduce a quality factor for each solution which combines accuracy and smoothness according to the relation:

$$\text{Quality factor } = \ Error_{\text{RMS}}(T) + 0.025\ Error_{\text{RMS}}(T^{'}) \tag{22}$$

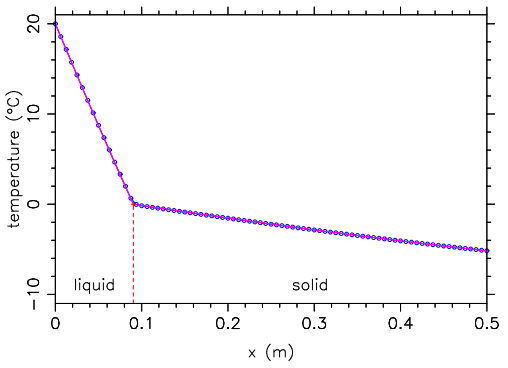
Since the apparent heat capacity method approaches the exact analytical solution as the assumed temperature interval approaches zero, it is shown that the apparent heat capacity method can produce both smooth and accurate solutions.

It appears from these numerical solutions that the results obtained by approximating the phase change at a fixed temperature by a gradual change over a small temperature interval should be acceptable if

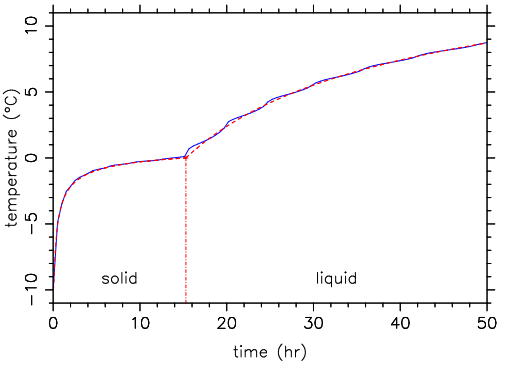
$$\frac{2\Delta T}{|T_i - T_f|} < 0.1 \tag{23}$$

where T_i is the temperature of the control volume V_i.

In Figure 15, we can see that there is a minimum for the quality factor corresponding to an assumed value of ΔT. This minimum has been drawn as Δx in Figure 17.

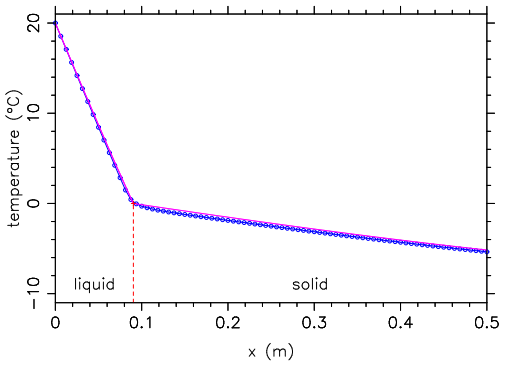


(a) Temperature profile at $t_{max} = 50\ h$.

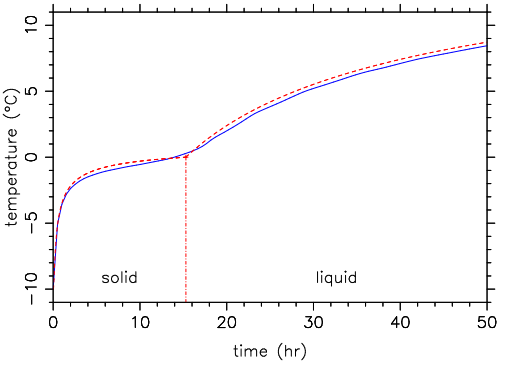


(b) Temperature history at $x = 5\ cm$.

Figure 13: $N_{basic} = 300$. $\Delta T = 0.1°C$. Analytical (red) and numerical (blue) solutions.



(a) Temperature profile at $t_{max} = 50\ h$.



(b) Temperature history at $x = 5\ cm$.

Figure 14: $N_{basic} = 300$. $\Delta T = 0.5°C$. Analytical (red) and numerical (blue) solutions.

7 Comparison between the two methods

Practically in phase change situations, more than one phase change interface may occur or the interfaces may disappear entirely. Furthermore, the phase change usually happens in a non-isothermal temperature range. In such cases, tracking the solid-liquid interface may be difficult or even impossible. Calculation-wise, it is advantageous that the problem is reformulated in such a way that the Stefan condition is implicitly bounded up in a new form of the equations and that the equations are applied over the whole fixed domain. This can be done by determining what is known as the enthalpy function $H(T)$ and by using the AHC approach. The LHA method has the great advantage which is the accuracy of the solution, but this method suffers from fluctuations which are covered by a local refinement of the discretization near the interface. The major problem of this method is that in numerical terms, we are using an explicit parabolic scheme, and this is very penalizing when used with adaptive refinement. For the moment, the problem is solved in 1-D.

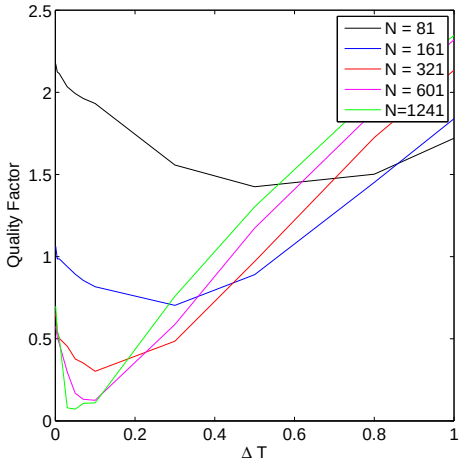


Figure 15: Quality factor versus the magnitude of the assumed temperature interval for different number of nodes.

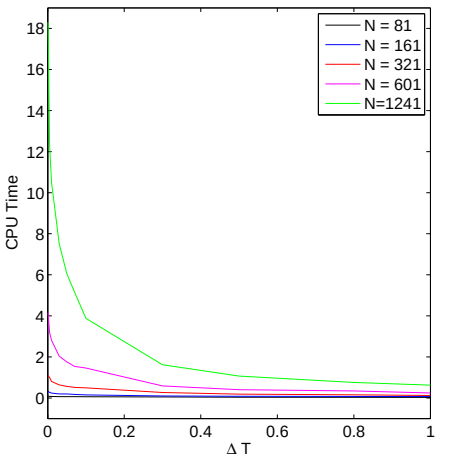


Figure 16: CPU-Time versus the magnitude of the assumed temperature interval for different number of nodes.

In 2 and 3 dimensions we can expect major difficulties in terms of implementation (in particular, the determination of the interface position) and cost (due to the use of an explicit scheme).

With the AHC approach, it is also possible to describe the non-isothermal phase change. This proposed model is solved by using the method of lines with which the fluctuations found in the LHA approach can be avoided by choosing an appropriate value of ΔT. Otherwise, it is evident that the error and the order of precision is more pronounced due to approximating the singularity (Dirac delta function) by a gradual change over a small temperature interval. Another observation is that the effect of distributing the latent heat over a temperature interval diminishes as the ratio of temperature interval to the overall temperature variation of the system becomes smaller. It is evident that the AHC method can produce accurate and smooth solutions. Perhaps the biggest criticism to be lodged against this method is that in its standard implementation it requires too much storage for each of the unknown quantities being computed. This would be quite excessive to the person interested in solving a 3-D time dependent problem who is required to use only several locations per point in the problem. However, the presented approach for solving non-linear heat conduction problems is very relevant and we can say that we are presenting one of the most efficient algorithms which takes into account the simplicity of implementation and the desired accuracy. Examples have demonstrated the accuracy reached. Figure 18, illustrates the temperature histories at $x = 5\ cm$ obtained by using the two presented approaches.

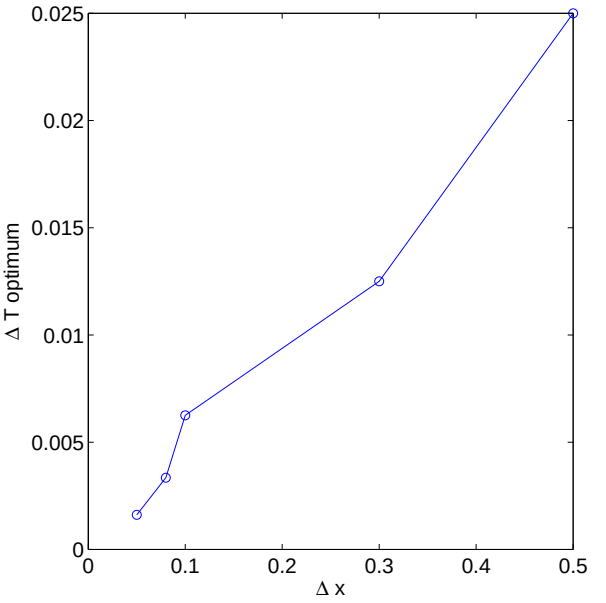


Figure 17: ΔT optimum versus the Δx

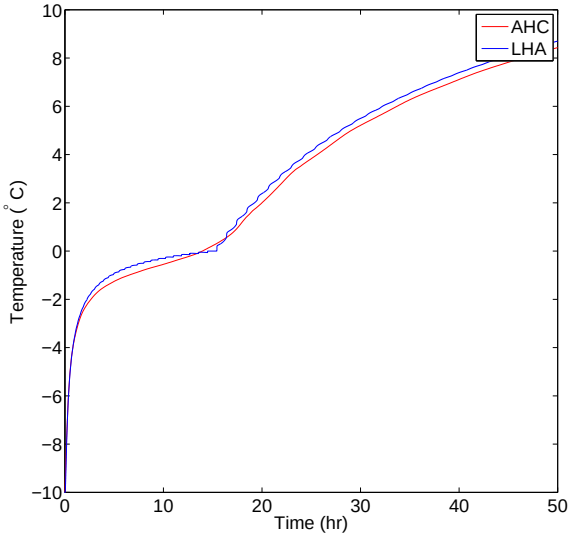


Figure 18: Comparison between the temperature history at $x = 5\ cm$ obtained by the LHA (Number of subdivision= 5 and $N_{basic} = 80$) and the one obtained by the AHC ($\Delta T = 0.5°C$ and $N_{basic} = 320$)

8 Acknowledgement

This work has been done in the frame of ARPHYMAT[1] collaboration, with a financial support from the "Ministère de l'Éducation Nationale et de la Recherche, France".

9 Bibliography

[ASK 87] Askar H. G., (1987), "The front-tracking scheme for the one-dimensional freezing problem", *Int. J. of Num. Methods in Engng*, Vol. 24, N. 5, pp 859-869.

[BEJ 03] Bejan A. and Kraus A. D.,(2003), *Heat Transfer Handbook*, Wiley.

[BON 73] Bonacina C., Comini G., Fasano A. and Primicerio M., (1973), "Numerical solution of phase-change problems", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 16, N. 10, pp 1825-1832.

[BRE 89] Brenan K. E., Campbell S. L. and Petzold L. R., (1989), *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*, Elsevier.
http://www.netlib.org/slatec/index.html

[CAN 67] Cannon J. R. and Hill C. D., (1967), "Existence, uniqueness, stability and monotone dependence in a Stefan problem for the heat equation", *J. Math. Mech.*, Vol. 17, N. 1, pp 1-19.

[CAR 59] Carslaw H. S. and Jaeger J. C., (1959), *Conduction of Heat in Solids*, Oxford Clarendon Press.

[CIV 87] Civan F. and Sliepcevich C. M., (1987), "Limitation in the Apparent heat capacity formulation for heat transfer with phase change", *Proc. Okla. Acad. Sci.*, Vol. 67, 1987, pp 83-88.

[GRA 89] Grandi G. M. and Ferreri J. C., (1989), "On the solution of heat conduction problems involving heat sources via boundary-fitted grids", *Comm. in Appl. Num. Methods*, Vol. 5, N. 1, pp 1-6.

[GUI 74] Comini G., Del Guidice S., Lewis R. W. and Zienkiewicz O. C., (1974), "Finite Element Solution of Non-linear Heat Conduction Problems with Special Reference to Phase Change", *Int. J. Num. Methods in Engng*, Vol. 8, N. 3, pp 613-624.

[HOM 95] Nicolas N., Arnoux-Guisse F. and Bonnin O., (1995), "Adaptive meshing for 3D Finite Element Software", in *IX Int. Conf. on Finite Elements in Fluids*, Venice, Italy.
https://www.code-aster.org/V2/outils/homard/index.en.html

[HUN 03] Hundsdorfer W. and Verwer J., (2003), *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, Springer.

[1] ARPHYMAT (ARchæology, PHYsics and MAThematics) is an interdisciplinary project involving three laboratories (the two laboratories mentionned in the first page and the Institute of Physics of Rennes, UMR 6251).

[JAV 06] Javierre E., Vuik C., Vermolen F. J. and van der Zwaag S., (2006), "A comparison of numerical models for one-dimensional Stefan problems", *J. of Comput. and Applied Math.*, Vol. 192, N. 2, pp 445-459.

[KIM 90] Kim C.-J. and Kaviany M., (1990), "A numerical method for phase-change problems", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, N. 12, pp 2721-2734.

[KU 90] Ku J. Y. and Chan S. H., (1990), "A generalized Laplace transform technique for phase-change problems", *J. Heat Transfer*, Vol. 112, N. 2, pp 495-497.

[LAM 04] Lamberg P., Lehliniemi R. and Henell A. M., (2004), "Numerical and experimental investigation of melting and freezing processes in phase change material storage", *Int. J. of Thermal Sciences*, Vol. 43, N. 3, pp 277-287.

[LUI 68] Luikov A. V., (1968), *Analytical heat Diffusion Theory*, Academic Press.

[MAG 93] Magenes E. and Verdi C., (1993), "Time discretization schemes for the Stefan problem in a concentrated capacity", *Meccanica*, Vol. 28, N. 2, pp 121-128.

[MéR 00] Mériaux M. and Piperno S., (2000),"Méthodes de Volumes Finis en maillages variables pour des équations hyperboliques en une dimension", Rapport de recherche N. 4042, Inria.

[MUE 65] Muehlbauer J. C. and Sunderland J. E., (1965), "Heat conduction with freezing or melting", *Appl. Mech. Rev.*, Vol. 18, pp 951-959.

[MUH 08] Muhieddine M. and Canot É., (2008), "Recursive mesh refinement for vertex centered FVM applied to a 1-D phase-change problem", in *Proceedings of the FVCA5 Conference*, Aussois, France, Hermès-Penton, pp 601-608.
https://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/zohour/

[PAT 80] Patankar S., (1980), *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corp.

[PAW 85] Pawlow I., (1985), "Numerical solution of a multidimensional two-phase Stefan problem", *Num. Funct. Anal. and Optimiz.*, Vol. 8, pp 55-82.

[PRA 04] Prapainop R. and Maneeratana K., (2004), "Simulation of ice formation by the Finite Volume method", *Songklanakarin J. Sci. Technol*, Vol. 26, N. 1, pp 55-70.

[SAV 03] Savovic S. and Caldwell J., (2003), "Finite difference solution of one-dimensional Stefan problem with periodic boundary conditions", *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, N. 15, pp 2911-2916.

[VER 95] Versteeg H. K. and Malalasekera W., (1995), *An introduction to CFD: the Finite Volume Method*, Longman Scientific & Technical.

[VOL 87] Voller V. R., Cross M. and Markaios N. C., (1987), "An enthalpy method for Convection/Diffusion phase change", *Int. J. Num. Methods in Engng*, Vol. 24, pp 271-284.

[WAN 00] Wang X. F., Liang H. S., Li Q. and Deng Y. L., (2000), "Tracking of a moving interface during a 2D melting or solidification process from measurements on the solid part only", in *Proceedings of the* 3rd *World Congress on Intelligent Control and Automation*, Hefei, P. R. China, pp 2240-2243.

INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING
Int. J. Numer. Meth. Engng 2011; **85**:1390–1414
Published online 1 September 2010 in Wiley Online Library (wileyonlinelibrary.com). DOI: 10.1002/nme.3022

Coupling heat conduction and water–steam flow in a saturated porous medium

M. Muhieddine[1,2,*,†], É. Canot[1], R. March[2] and R. Delannay[3]

[1]*IRISA, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes, France*
[2]*Archéosciences, UMR 6566, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes, France*
[3]*IPR, UMR 6251, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes, France*

SUMMARY

This paper is devoted to the simulation of water forced evaporation in a porous saturated medium in a 3D-axisymmetric domain by resolution of partial differential algebraic equations (PDAE) that are encountered in different engineering applications. The goal of this paper is an attempt to present effective realizations, in order to determine the minimal duration of burning for prehistoric occupations. This multidisciplinary work includes scientists in Mathematics, Physics and Archaeology. The model proposed here couples the heat conduction in a water saturated soil with the water steam flow in the medium. We propose an efficient and robust global numerical method, based on a method of lines and differential algebraic equations (DAE) solvers, combined with a Newton method using a powerful sparse linear solver. After a brief overview of classes for numerical techniques applied for moving boundary problems, the Apparent Heat Capacity method (AHC) is used, and in order to validate our codes, a comparison with experiments is done. Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

Received 25 November 2008; Revised 2 July 2010; Accepted 21 July 2010

KEY WORDS: phase change problem; gas flow in porous media; high performance computing; finite volume method; implicit ODE system; heat conduction

1. INTRODUCTION

Heat flow accompanied by a phase change occurs in many important practical problems. In particular, the heat diffusion in the ground saturated by water have pressed upon the attention to develop new methods for more precise representative simulations. Actually, the aim of this work is to present the applied mathematics used to study prehistoric fires. The goal is to determine the minimal duration of burning for the archaeological hearths in order to understand the ancient human behaviors related to the use of fire. In fact, the minimal duration of burning gives us an idea if the fire was used for cooking, to drive away the animals, etc. The idea is to apply a numerical model to calculate the heat conduction in porous soils subjected to intense heat from above in order to determine their minimal duration of burning. This particular geometry involves that the heat prevents the usual behavior of fluid in the ground, because the vapor ascends to the heated surfaces.

Subsequently, the mathematical model delineating our problems is described by a coupled system of moving boundary problems with phase changes and the convection phenomenon under a downward facing heated surface [1]. This work is of importance due to the inherent difficulties associated with the non-linearity of the interface conditions, the unknown locations of the moving boundaries (liquid/vapor interface) and the coupling with the non-linear convection problem.

*Correspondence to: M. Muhieddine, IRISA, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes, France.
†E-mail: mohamad.muhieddine@irisa.fr

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

Annexe 7

It should be mentioned that this problem has a wide application in many engineering fields, like the liquid–vapor phase change in an enclosed cavity. Indeed, water substance plays a very important role in science and industry. Reliable information for equilibrium thermodynamic and transport properties of water and steam (water substance) are mostly needed for engineering applications where heat transfer analysis is involved. In view of these facts, this paper presents a review of progress made in the past few decades on the formulation and the resolution of thermal conduction with phase-change phenomenon coupled with water steam flow.

Over the years, a number of related computational works have employed various techniques in the analysis of phase-change problems. Several important theoretical results on the existence, the uniqueness and the properties of classical solutions can be found [2, 3], but most of analytical solutions are for 1-D geometries with very particular boundary conditions [4, 5], and cannot be extended to multidimensional problems [6, 7]. Thus, many numerical schemes have been proposed to study transient heat conduction problems with phase change in one, two and three dimensions, but two schemes are predominant in the numerical analysis; the first one is referred to as the 'front-tracking method', in which the position of the moving front is determined at each time step [8], and must always correspond to a node or edges mesh. The use of this numerical method can usually eliminate the oscillations found by using the fixed grid method [9, 10], and allows for more precise solutions. These methods are poorly suited to multi-dimensional problems due to the implementation difficulties and the large computational cost.

The second scheme formulates the problem in such a way that the conditions on the moving phase front may be absorbed into new equations, and the problem is solved without explicit reference to the position of the internal boundary. This position is determined *a posteriori* when the solution is complete, using the isotherms at 100°C. Such a reformulation is based on the use of the heat enthalpy concept [9, 11–13]. The major problem with these schemes is the presence of oscillations in the solution. In addition, these schemes often require the use of algorithms to adjust the solution in order not to miss the absorption or the release of latent heat. The major advantage of these methods is that they are easily applicable to the phase-change problems.

Other publications related to the natural convection for better understanding of transport phenomena in geothermal energy systems can be found in [4, 14]. This problem is a real challenge from both modeling and computational standpoints. It has received much attention in the recent past and is still the subject of intensive ongoing research.

In fact, simulations of liquid–vapor flows coupled with heat flow accompanied by a phase change with realistic physical properties and large density ratio between the phases (≈ 1000) are still few in the literature. This is due to various modeling and numerical difficulties. Also, the numerical method for such problems needs to deal with incompressible (liquid) and compressible (vapor) flows in the same computational domain. This difficulty can be overcome using different computational sub-domains for the two-phases, but this approach is limited to small deformations of the interface.

The model developed in the present paper uses the AHC method to describe the phase-change phenomenon of the fluid (water) in the ground. The physical properties of the fluid (water/vapor) used in the calculation are temperature dependent; therefore, the problem is highly non-linear. Also, the compressibility of the created vapor coupled with the phase-change effects is significant too, yielding much more complex dynamics, that is why it is interesting to develop a numerical methodology to handle and solve this problem. Otherwise, a systematic study of the evaporation in the soil will be based on an experimental methodology definitely more general that allows the settling of innovative designs to facilitate the approach modeling and its validation.

We present here a unified framework for many numerical methods and we introduce a new formulation of a global approach using the power of differential algebraic equations (DAE) solvers. In the diffusion model, we assume that the porous medium is saturated by water. By adding the flow model, we get a coupled set of PDAE. There are various ways to discretize the diffusion operator, but we restrict this study to Eulerian approaches, for example by finite differences, finite-volume or finite element methods. Moreover, we consider a method of lines where space is first discretized, and the resulting semi-discrete system is then solved by an ordinary differential equation (ODE)

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

(or DAE) solver depending on if we are dealing with coupled system or just the diffusion part. This excludes methods combining time and space discretizations. We also assume that the same discrete space is used for advection and diffusion, so that we get a discrete advection–diffusion equation. With these assumptions, the model is transformed into a set of DAE of finite dimension, where unknowns are in the discrete space.

Most of the used approaches in the literature differ by the numerical scheme used to discretize in time and by the numerical method used to solve the non-linear equations. Our approach uses an implicit scheme and a Newton method embedded in a DAE solver; the objective is to rely on the solver for controlling the time step, the order of the scheme, the updates of the Jacobian and the convergence of Newton iterations. In order to improve efficiency, we use sparse Jacobian matrix and sparse linear solver.

2. MATHEMATICAL FORMULATION

Consider a horizontal surface embedded in a water saturated porous medium as shown in Figure 1. The temperature of the surface facing downward is T_C, which is greater than the temperature of the medium T_∞ at an infinite depth.

To describe the evaporation of water in a soil, whether natural or forced, which involves very complex mechanisms we consider basic phenomena and to simplify the model, we adopt the following assumptions:

1. The solid phase (porous matrix) is composed of a single constituent that does not react with other constituents and does not dissolve. Its properties may vary in space.
2. Deformations of the solid phase are neglected.
3. The moisture is present mainly in the form of free water and does not react chemically with other constituents.
4. The dry front appears immediately at the open surface when the heating begins.
5. The phase-change temperature $T_v = 100°C$ (this is justified a posteriori because pressure variations are very small).

Also, there is thermal equilibrium between the liquid and vapor phases on the interface of phase change, which leads to an identical temperature for both phases on this interface.

Combarnous and Bories have derived a two-energy equation model for heat transfer within a unit volume of a porous medium [15]. For the fluid phase, they gave

$$\operatorname{div}(\lambda_f \operatorname{grad} T_f) - \operatorname{div}[(\rho C)_f V_f T_f] = \frac{\partial}{\partial t}[\phi(\rho C)_f T_f] + h(T_f - T_s) \tag{1}$$

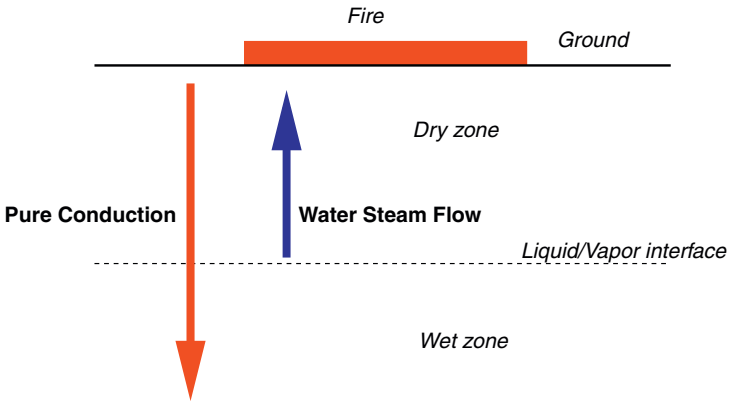


Figure 1. Physical description.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

where T_f and T_s are, respectively, the average of fluid and solid phase temperatures within a unit volume. V_f is the filtration velocity of Darcy for the fluid phase. The porosity ϕ, defined as the ratio of the volume of voids to the total volume, is assumed to be constant in both time and space. Additionally, λ_f is the effective thermal conductivity tensor for the fluid phase and h is the interfacial heat transfer coefficient per unit volume (Combarnous and Bories [15] describe h as the 'coefficient de transfert par unité de volume de milieu' and give units of $W/(cm^3{}^\circ C)$).

Likewise, the differential equation for the solid phase is given by

$$\operatorname{div}(\lambda_s \operatorname{grad} T_s) = \frac{\partial}{\partial t}[(1-\phi)(\rho C)_s T_s] + h(T_s - T_f) \tag{2}$$

In addition, λ_s is the effective thermal conductivity tensor for the solid phases. The overall effective thermal conductivity of the medium is given by

$$k_e = \lambda_f + \lambda_s \tag{3}$$

The effective thermal conductivity tensors λ_f and λ_s are used to incorporate the effects of hydrodynamic dispersion within the fluid phase and the dispersed structure of the porous medium. Neither the relationship between λ_f and k_f (thermal conductivity of the fluid phase) or λ_s and k_s (thermal conductivity of the porous matrix medium) is known *a priori*.

Subsequently, they assumed that the two phases are in local equilibrium, so that the energy conservation equation is expressed as

$$(\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho C)_f V_f \cdot \vec{\operatorname{grad}}\, T = \operatorname{div}(k_e \vec{\operatorname{grad}}\, T) \tag{4}$$

The effective calorific capacity being additive, the effective value $(\rho C)_e$ is then defined by the following equation:

$$\begin{aligned}(\rho C)_e &= \phi(\rho C)_f + (1-\phi)(\rho C)_s \\ &= \phi \rho_f C_f + (1-\phi)\rho_s C_s\end{aligned} \tag{5}$$

where ρ_s, C_s are constants, whereas ρ_f and C_f are temperature dependents.

On the other hand, when a heated region in the soil reaches T_v, the water presented in the soil turns into vapor flowing in the ground. To solve analytically or numerically the water steam flow problem (see Figure 1), we must first derive the differential equations. The obtention of differential equations requires the integration of conservation equations. First, in order to model the fluid motion through the porous medium, we use the Darcy flow model formulation presented by Wooding (1957)

$$V_f = -\frac{K}{\mu_f} \vec{\operatorname{grad}}\, P_f \tag{6}$$

where V_f is the filtration velocity of the fluid, K is the permeability (constant in time), μ_f is the viscosity of the fluid phase and P_f is the fluid pressure. Furthermore, the continuity equation is given by

$$\frac{\partial(\phi \rho_f)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_f V_f) = 0 \tag{7}$$

The storage term can be clarified as follows if it is supposed that the porous environment is incompressible, i.e. if the porosity remains constant:

$$\frac{\partial(\phi \rho_f)}{\partial t} = \phi \frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \rho_f \frac{\partial \phi}{\partial t} = \phi \frac{\partial \rho_f}{\partial t} \tag{8}$$

The resulting equation obtained by coupling (6), (8), which models the gas flowing in an isotropic medium, is thus given by

$$\operatorname{div}\left(\vec{\operatorname{grad}}\, P_f\right) = \frac{\phi \mu_f}{K \rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \frac{1}{\mu_f} \vec{\operatorname{grad}}\, \mu_f \cdot \vec{\operatorname{grad}}\, P_f - \frac{1}{\rho_f} \vec{\operatorname{grad}}\, \rho_f \cdot \vec{\operatorname{grad}}\, P_f \tag{9}$$

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

We assume that the water vapor obeys the ideal gas law

$$\frac{P_{\mathrm{f}}}{\rho_{\mathrm{f}} T_{\mathrm{f}}} = \beta = \text{ideal gas constant} \tag{10}$$

where T_{f} must be given in Kelvin.

Observing the phase transition problem for the fluid phase in which the evaporation takes place at a certain temperature T_{v}, two boundary conditions have to be specified, the first one for the edges of the computational domain which prescribes the geometrical form of the problem and the other one for the boundary between the dry and the wet zone. Let us define the two following regions: the first region with subscript 1 is saturated (porous matrix+liquid water); initially this humid region covers the entire domain of study, its temperature is constant and equals $T_1 = T_\infty$ and $\partial P_{\mathrm{f}}/\partial x = 0$. The second region, subscripted by 2, is a porous medium filled with water steam (we neglect the presence of air in the soil). For this dry region the boundary conditions at the surface $x = 0$ are: $T_C = T_{\mathrm{fire}}$ (temperature at the center of the fire) and $P_{\mathrm{f}} = P_{\mathrm{atm}}$ (atmospheric pressure).

Moreover, at the interface between the two regions, we have the continuity of the temperature

$$T_1 = T_2 = T_{\mathrm{v}} \quad \text{(temperature of evaporation)} \tag{11}$$

On the other hand, we have the discontinuity of the heat flux due to the phase change which writes

$$\left[\frac{1}{(\phi/k_{\mathrm{l}} + (1-\phi)/k_{\mathrm{s}})}\right]\frac{\partial T_1}{\partial x} - \left[\frac{1}{(\phi/k_{\mathrm{v}} + (1-\phi)/k_{\mathrm{s}})}\right]\frac{\partial T_2}{\partial x} = \phi L \frac{\partial \xi}{\partial t} \tag{12}$$

where L is the latent heat of the phase change per unit volume and ξ is the phase-change interface position. It should be noted that the combination achieved above uses a vertical configuration of components, which gives an harmonic average.

The mass flow of water steam created by the evaporation is proportional to the displacement of the interface $\partial\xi/\partial t$ of Equation (12). By the relation (6), we can transform this mass flow into pressure gradient, which becomes a Neumann boundary condition for P at the interface

$$\frac{\partial P_{\mathrm{f}}}{\partial x} = \frac{\mu_{\mathrm{f}}}{K}\frac{\rho_{\mathrm{l}}}{\rho_{\mathrm{v}}}\frac{\partial \xi}{\partial t} \tag{13}$$

3. AHC METHOD

To avoid the follow of the interface, the AHC method will be used. In this method, the latent heat is taken into account by integrating the heat capacity over the temperature [11], and the computational domain is considered as one region. As the relationship between heat capacity and temperature in isothermal problems involves sudden changes, the zero-width phase-change interval must be approximated by a narrow range of phase-change temperatures. The thermodynamic parameters of the fluid are defined considering the apparent capacity method of [11]. According to this reference, these parameters may be obtained taking into consideration that the phase change takes place in a small temperature interval (see Figure 2).

Then, if this interval is ΔT:

$$C_{\mathrm{f}} = \begin{cases} C_{\mathrm{l}}, & T < T_{\mathrm{v}} - \dfrac{\Delta T}{2} \\ \dfrac{C_{\mathrm{v}} + C_{\mathrm{l}}}{2} + \dfrac{\lambda}{\Delta T}, & T_{\mathrm{v}} - \dfrac{\Delta T}{2} \leqslant T \leqslant T_{\mathrm{v}} + \dfrac{\Delta T}{2} \\ C_{\mathrm{v}}, & T > T_{\mathrm{v}} + \dfrac{\Delta T}{2} \end{cases} \tag{14}$$

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

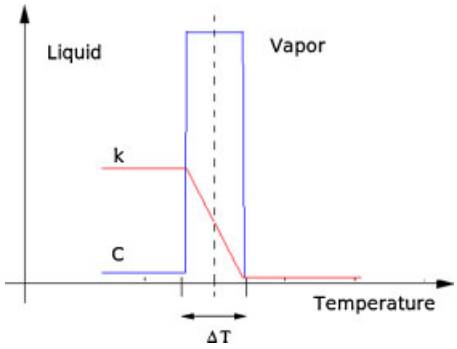


Figure 2. Physical properties given by Bonacina.

where $\lambda = L/\rho$. Similarly, a global new thermal conductivity has to be introduced:

$$k_{\mathrm{f}} = \begin{cases} k_l, & T < T_{\mathrm{v}} - \dfrac{\Delta T}{2} \\ k_{\mathrm{l}} + \dfrac{k_{\mathrm{v}} - k_{\mathrm{l}}}{\Delta T}\left[T - \left(T_{\mathrm{v}} - \dfrac{\Delta T}{2}\right)\right], & T v - \dfrac{\Delta T}{2} \leqslant T \leqslant T_{\mathrm{v}} + \dfrac{\Delta T}{2} \\ k_{\mathrm{v}}, & T > T_{\mathrm{v}} + \dfrac{\Delta T}{2} \end{cases} \tag{15}$$

The principal advantages of this approach are that (i) temperature T is the primary dependent variable that derives directly from the solution, and (ii) the use of this method usually reduces the fluctuations found by using the LHA approach [9]. As we mentioned above, the domain is considered as one region. A direct evaluation, in fact, can be expected to lead to satisfactory numerical integrations only if the thermophysical properties versus temperature curves do not present sharp peaks in the range of interest.

When the temperature approaches the phase-change temperature T_{v}, the equivalent heat capacity tends to the shape of Dirac δ function and, therefore, cannot be satisfactorily represented across the peak, by any smooth function. Such extreme problems can be successfully tackled by the technique proposed here, where a more appropriate averaging process is employed.

To overcome the abrupt change present in the formulations of thermophysical parameters defined by (14) and (15) (see Figure 2), we proposed to smooth these functions. The numerical solution can be obtained as the limit of a uniformly convergent sequence of classical solutions to approximating problems, deduced by smoothing the coefficients (14, 15), following a few general rules: the AHC formulation allows for a continuous treatment of a system involving phase transfer. If the phase transition takes place instantaneously at a fixed temperature, then a mathematical function such as

$$\sigma(T) = \chi(T - T_{\mathrm{v}}) \tag{16}$$

is representative of the volumetric fraction of the initial phase (liquid phase). χ is a step function whose value is zero when $T < T_{\mathrm{v}}$ and one otherwise. The variation of the initial phase fraction with temperature is

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} = \delta(T - T_{\mathrm{v}}) \tag{17}$$

in which $\delta(T - T_{\mathrm{v}})$ is the Dirac delta function whose value is infinity at the transition temperature, T_{v}, but zero at all other temperatures. To alleviate this singularity, the Dirac delta function can be approximated by the normal distribution function

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} = (\varepsilon\pi^{-1/2})\exp[-\varepsilon^2(T - T_{\mathrm{v}})^2] \tag{18}$$

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

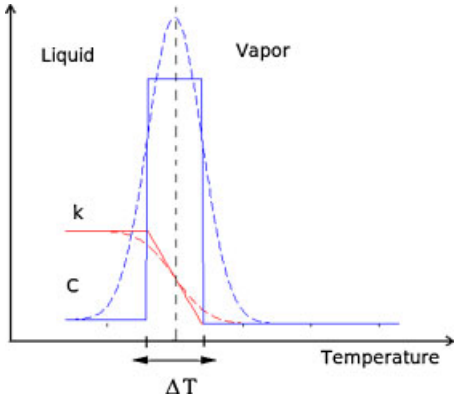


Figure 3. Smoothed physical properties.

in which ε is chosen to be $\varepsilon = 1/\sqrt{2}\Delta T$ and where ΔT is one-half of the assumed phase-change interval. Consequently, the integral of Equation (18) yields the error functions approximations for the initial phase fraction which is water in our case. With the conventional finite volume method, the initial phase fraction obtained from Equation (18) by integration should be used to avoid the numerical instabilities arising from the jump in the values of the volumetric fraction of initial phase from zero to one. The function σ is obtained by integrating $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}T$ over temperature

$$\sigma(T) = \tfrac{1}{2}(1 + \ \mathrm{erf}(\varepsilon(T - T_\mathrm{v}))) \tag{19}$$

In our approach we assume for simplicity that the phases are isotropic and homogeneous. Accordingly, the smoothed coefficients (see Figure 3) of Equations (14) and (15) could be written as

$$C_\mathrm{f} = C_\mathrm{l} + (C_\mathrm{v} - C_\mathrm{l})\sigma(T) + L\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} \tag{20}$$

and

$$k_\mathrm{f} = k_\mathrm{l} + (k_\mathrm{v} - k_\mathrm{l})\sigma(T) \tag{21}$$

To avoid the resolution of the problem in two different regions, the same approximations are used for all physical parameters: this is the key-point of our formulation. Indeed, a new formulation for the density is given by

$$\rho_\mathrm{f} = \rho_\mathrm{l} + (\rho_\mathrm{v} - \rho_\mathrm{l})\sigma(T) \tag{22}$$

where ρ_l remains constant and ρ_v is calculated using the ideal gas law (10), and Equation (22) could be written as follows:

$$\rho_\mathrm{f} = \rho_\mathrm{l} + \left(\frac{P}{\beta T} - \rho_\mathrm{l}\right)\sigma(T) \tag{23}$$

Also, a new formulation for the viscosity is given by

$$\mu_\mathrm{f} = \mu_\mathrm{l} + (\mu_\mathrm{v} - \mu_\mathrm{l})\sigma(T) \tag{24}$$

where

$$\mu_\mathrm{l} = 0.4527(T + 40)^{-1.492}$$

and

$$\mu_\mathrm{v} = 122.10^{-7} + 4.10^{-8}(T - T_\mathrm{v})$$

T is given in Celsius degree. These linear approximations of the liquid water and vapor viscosities are obtained from the Fortran 90 library NBS steam tables (`http://people.scs.fsu.edu/~burkardt/f_src/steam/steam.html`) that computes various physical properties of water, related to temperature and pressure.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

4. SET OF EQUATIONS

Using the new formulations of physical parameters as given in the previous section, the system of coupled equations to be solved is written as follows:

$$(\rho C)_{\mathrm{e}}(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}-\frac{K(\rho C)_{\mathrm{f}}(T)}{\mu_{\mathrm{f}}(T)}\vec{\mathrm{grad}}\,P(x,t)\cdot\vec{\mathrm{grad}}\,T(x,t)$$

$$-\mathrm{div}[k_{\mathrm{e}}\vec{\mathrm{grad}}\,T(x,t)]=0 \quad \text{in } \Omega\times(0,t_{\mathrm{end}}]$$

$$\frac{\sigma(T)}{T(x,t)\beta}\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}+\left[\left(\frac{P(x,t)}{T(x,t)\beta}-\rho_{\mathrm{l}}\right)\frac{\mathrm{d}\sigma(T)}{\mathrm{d}T}-\frac{P(x,t)}{T^2(x,t)\beta}\sigma(T)\right]\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}$$

$$+\frac{K\rho_{\mathrm{f}}(T)}{\phi\mu_{\mathrm{f}}(T)}\left(\frac{1}{\mu_{\mathrm{f}}(T)}\vec{\mathrm{grad}}\,\mu_{\mathrm{f}}(T)-\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}(T)}\vec{\mathrm{grad}}\,\rho_{\mathrm{f}}(T)\right)\vec{\mathrm{grad}}\,P(x,t)$$

$$-\frac{K\rho_{\mathrm{f}}(T)}{\phi\mu_{\mathrm{f}}(T)}\mathrm{div}(\vec{\mathrm{grad}}\,P(x,t))=0 \quad \text{in } \Omega\times(0,t_{\mathrm{end}}]$$

$$\begin{aligned}
T(x,0)&=T_0(x) && \text{in } \Omega\\
T(x,t)&=T^{\mathrm{D}}(x,t) && \text{on } \Gamma^{\mathrm{D}}\times(0,t_{\mathrm{end}}]\\
\nabla T(x,t).v&=q^{\mathrm{N}}(x,t) && \text{on } \Gamma^{\mathrm{N}}\times(0,t_{\mathrm{end}}]\\
P(x,0)&=P_0(x) && \text{in } \Omega\\
P(x,t)&=P^{\mathrm{D}}(x,t) && \text{on } \Gamma^{\mathrm{D}}\times(0,t_{\mathrm{end}}]\\
\nabla P(x,t).v&=s^{\mathrm{N}}(x,t) && \text{on } \Gamma^{\mathrm{N}}\times(0,t_{\mathrm{end}}]
\end{aligned} \tag{25}$$

where Ω is a bounded domain in $\mathbb{R}^d$ $(d=1,\ldots,3)$ with boundary $\partial\Omega=\Gamma^{\mathrm{D}}\cup\Gamma^{\mathrm{N}}$; T represents the temperature, P is the pressure variable; ρ is the density, C is the AHC, μ is the viscosity, ϕ is the porosity, the subscripts e, f and s indicate, respectively, the equivalent parameters of the medium, the properties of the fluid and the porous matrix properties; k_{e} is the conductivity, it is assumed to be a diagonal tensor with components in $L^{\infty}(\Omega)$ (k_{e} is calculated using the harmonic mean between k_{f} and k_{s}); K is the permeability; v indicates the outward unit normal vector along $\partial\Omega$; T^{D} and q^{N} are, respectively, the Dirichlet and Neumann boundary conditions for the temperature; P^{D} and s^{N} are, respectively, the Dirichlet and Neumann boundary conditions for the pressure. It should be emphasized that the thermophysical properties of the fluid are temperature dependent and the problem is non-linear.

However, with adequate initial and boundary conditions, the problem to be solved (25) may be written in the vectorial form

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial t}&=f(t,x,T,P)\\
\gamma\frac{\partial T}{\partial t}+\theta\frac{\partial P}{\partial t}&=g(t,x,T,P)
\end{aligned} \tag{26}$$

where γ and θ are two variables dependent on $\sigma(T)$ (19) and $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}T$ (18).

5. NUMERICAL METHODS

The first equation of the system (26) is an ordinary differential one. On the other hand, the second equation is a differential algebraic one because $\sigma(T)=0$ and/or $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}T=0$ for $T<T_{\mathrm{v}}$; hence, we

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

have a DAE. The numerical resolution of non-linear systems with partial differential algebraic equations (PDAE) is very complicated. Concerning the heat diffusion and the water steam flow in saturated porous media, systems could have very large size and present high non-linearity. These systems are difficult to solve in spite of the great diversity of existing possible approaches, because extension to DAE systems stresses the numerical method. For this reason, there is a lack of methods that could deal with all types of systems of PDAE.

Among the large variety of existing approaches used to solve PDAE systems, we choose the following methodology:

1. The use of the method of lines, where space and time discretizations are considered separately.
2. Spatial discretization: finite volume method because it conserves mass locally and preserves the continuity of fluxes.
3. Time discretization: The Euler implicit scheme.
4. The use of a modified Newton method to deal with the present non-linearity.

However, various criteria are concerned by defining the reliable method:

- the precision of the results,
- the stability of the method,
- the computational cost,
- the facility of implementation.

In addition, a combination between all these criteria must take into account all the presented difficulties (advection–diffusion heat transfer, phase change, interface tracking, coupling with water steam flow, stiff system, high non-linearity, etc.)

Using the method of lines, the system of equations is discretized (25) basing on the finite volume method. The diffusion–dispersion terms are discretized implicitly in time with a vertex-centered finite volume discretization in space; hence, the size of time step is limited only by the desired precision. Otherwise, with an implicit scheme, each time step leads to a global non-linear system of equations, where heat diffusion with phase change and water steam flow are coupled. Therefore, it is necessary to solve non-linear coupled equations.

On the other hand, for the convection–advection term in the energy equation of the system (25), an upwind finite volume scheme in space and an explicit scheme in time [16] are used. The upstream choice allows us to deal with all sizes of velocities. The explicit time discretization choice requires the respect of CFL condition, but it has the advantage that it conserves the symmetry of the linear system to be solved at each time step. However, the criterion on the choice of the time step due to the explicit scheme for the advection term obliges us to use a small time step in comparison with the required one for the diffusion–dispersion terms.

In our case, the proposed scheme as described above is computationally expensive; hence, we use an implicit backward differentiation formula (BDF) method (as in [17]) that adapts the time step in such a way so as to find the desired precision and to avoid instabilities.

6. SPATIAL DISCRETIZATION USING FINITE-VOLUME METHOD

The set of equations presented above are cast in the usual finite volume form for a finite domain: each cell (or control volume) encloses exactly one data node at x_i and its boundaries are always computed as the middle of two consecutive nodes; hence, we obtain a good accuracy in the gradient estimation. We denote by T_i the whole approximate solution of temperature and by P_i the approximate solution of pressure, the location of any variables being indicated by subscripts.

To apply the finite-volume method, we first divide the problem domain into a finite-volume grid or mesh (i.e. series of cells or blocks), in this case of equal width, Δx, as shown in Figure 4.

For instance, the temperature at face $i+\frac{1}{2}$ is $T_{i+1/2}=T_i f_{i+1/2}+T_{i+1}(1-f_{i+1/2})$ where $f_{i+1/2}=(2\delta x_{i+1/2}-\Delta x_i)/2\delta x_{i+1/2}$, $\Delta x_i=x_{i+1/2}-x_{i-1/2}$, $\delta x_{i+1/2}=x_{i+1}-x_i$, and $\delta x_{i-1/2}=x_i-x_{i-1}$. A uniform mesh is used; hence $\Delta x_i=\Delta x \forall i$. The other variable that has to be approximated at

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

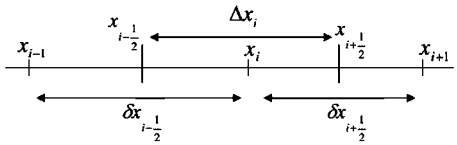


Figure 4. Block-centered finite-volume discretization of a one-dimensional problem domain.

cell faces is the interface conductivity; the harmonic mean is used for composite materials for its superior handling of abrupt property changes by recognizing that the primary interest is to obtain a good representation of heat flux across interfaces rather than that of the conductivity [9] (Patankar, 1980):

$$\frac{1}{k_{\mathrm{e}}}=\frac{1-f_{i+1/2}}{k_i}+\frac{f_{i+1/2}}{k_{i+1}} \tag{27}$$

6.1. Spatial discretization of (25) *for the 1D case*

At each time step, the 1D energy equation is numerically integrated over the control volume by taking Figure 4 as reference:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}(\rho C)_{\mathrm{e}}\frac{\partial T}{\partial t}\,\mathrm{d}x+\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}(\rho C)_{\mathrm{f}}V_{\mathrm{f}}\frac{\partial T}{\partial x}\,\mathrm{d}x=\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}\frac{\partial}{\partial x}\left(k_{\mathrm{e}}\frac{\partial T}{\partial x}\right)\mathrm{d}x,\quad 2\leqslant i\leqslant N-1 \tag{28}$$

For the transient term, it is assumed that the temperature of the control volume is represented by that of the node:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}(\rho C)_{\mathrm{e}}\frac{\partial T}{\partial t}\,\mathrm{d}x=(\rho C)_{\mathrm{e},i}\,\frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t}\Delta x=(\rho C)_{\mathrm{e}}(T_i)\,\frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t}\Delta x,\quad 2\leqslant i\leqslant N-1 \tag{29}$$

The diffusion term is approximated by using the piecewise-linear temperature profile. For instance:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}k_{\mathrm{e}}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\,\mathrm{d}x=\left[k_{\mathrm{e}}|_{i+1/2}\frac{T_{i+1}-T_i}{\Delta x}-k_{\mathrm{e}}|_{i-1/2}\frac{T_i-T_{i-1}}{\Delta x}\right],\quad 2\leqslant i\leqslant N-1 \tag{30}$$

For the convection term, the central weighting scheme tends to create artificial oscillation. Specifically, the numerical solution oscillates around the true solution. Because of these problems, alternative spatial weighting schemes have been developed. A frequently used scheme is the upstream (also called upwind) scheme ([18, 19]), which can be expressed as follows:

$$T_{i+1/2}=(1-\alpha)T_i+\alpha T_{i+1},\quad 2\leqslant i\leqslant N-1$$

where

$$\alpha=\begin{cases}0 & \text{if } V>0\\ 1 & \text{if } V<0\end{cases}$$

We replace V_{f} by its value by using (6); hence, we obtain

$$\begin{aligned}\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}(\rho C)_f V_{\mathrm{f}}\frac{\partial T}{\partial x}\,\mathrm{d}x&=-\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}\frac{K(\rho C)_{\mathrm{f}}}{\mu_{\mathrm{f}}}\frac{\partial P}{\partial x}\frac{\partial T}{\partial x}\,\mathrm{d}x\\&=-\frac{K(\rho C)_{f,i}}{\mu_{f,i}\Delta x}(T_{i+1/2}-T_{i-1/2})(P_{i+1}-P_{i-1}),\quad 2\leqslant i\leqslant N-1\end{aligned} \tag{31}$$

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

By substituting the approximated terms in (29), (30), (31) into (28) for a uniform mesh, the discretized equation for a control volume is obtained as

$$\frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t}-\frac{K(\rho C)_{f,i}}{2\mu_{f,i}(\rho C)_{\mathrm{e},i}\Delta x^2}[(1-\alpha)(T_i-T_{i-1})+\alpha(T_{i+1}-T_i)](P_{i+1}-P_{i-1})$$
$$-\frac{k_{i+1}+k_i}{2(\rho C)_{\mathrm{e},i}\Delta x^2}(T_{i+1}-T_i)-\frac{k_i+k_{i-1}}{2(\rho C)_{\mathrm{e},i}\Delta x^2}(T_i-T_{i-1})=0, 2\leqslant i\leqslant N-1 \tag{32}$$

To discretize the equation of water steam flow in the system (25), we use the integration by parts; the discretization is given by the following formulation:

$$\frac{\sigma(T_i)}{T_i\beta}\frac{\mathrm{d}P_i}{\mathrm{d}t}+\left[\left(\frac{P_i}{T_i\beta}-\rho_{\mathrm{l}}\right)\frac{\mathrm{d}\sigma(T_i)}{\mathrm{d}T_i}-\frac{P_i}{T_i^2\beta}\sigma(T_i)\right]\frac{\mathrm{d}T_i}{\mathrm{d}t}$$
$$+\frac{K\rho_{f,i}}{\phi\mu_{f,i}\Delta x^2}\left[\log\left(\frac{\mu_{f,i+1}+\mu_{f,i}}{\rho_{f,i+1}+\rho_{f,i}}\right)-\log\left(\frac{\mu_{f,i}}{\rho_{f,i}}\right)-1\right]P_{i+1}$$
$$-\frac{K\rho_{f,i}}{\phi\mu_{f,i}\Delta x^2}\left[\log\left(\frac{\mu_{f,i+1}+\mu_{f,i}}{\rho_{f,i+1}+\rho_{f,i}}\right)+\log\left(\frac{\mu_{f,i}+\mu_{f,i-1}}{\rho_{f,i}+\rho_{f,i-1}}\right)-2\log\left(\frac{\mu_{f,i}}{\rho_{f,i}}\right)-2\right]P_i$$
$$+\frac{K\rho_{f,i}}{\phi\mu_{f,i}\Delta x^2}\left[\log\left(\frac{\mu_{f,i}+\mu_{f,i-1}}{\rho_{f,i}+\rho_{f,i-1}}\right)-\log\left(\frac{\mu_{f,i}}{\rho_{f,i}}\right)-1\right]P_{i-1}=0,\quad 2\leqslant i\leqslant N-1 \tag{33}$$

The initial and boundary conditions are written as follows:

$$\begin{aligned}
&T(x_i,0)=T_0(x_i)=T_{0,i}, && 1\leqslant i\leqslant N\\
&T(x_i,t)=T^{\mathrm{D}}(x_i,t)=T_i^{\mathrm{D}}(t), && i=1 \quad \text{or} \quad i=N\\
&\nabla T(x_i,t).v=q^{\mathrm{N}}(x_i,t)=q_i^{\mathrm{N}}(t), && i=1 \quad \text{or} \quad i=N\\
&P(x_i,0)=P_0(x_i)=P_{0,i}, && 1\leqslant i\leqslant N\\
&P(x_i,t)=P^{\mathrm{D}}(x_i,t)=P_i^{\mathrm{D}}(t), && i=1 \quad \text{or} \quad i=N\\
&\nabla P(x_i,t).v=s^{\mathrm{N}}(x_i,t)=s_i^{\mathrm{N}}(t), && i=1 \quad \text{or} \quad i=N
\end{aligned} \tag{34}$$

6.2. Spatial discretization for 3D axisymmetric problem

The 3D axisymmetric solution is based on the 3D Fourier's equation expressed in cylindrical coordinates in which it is assumed to be no dependence on the azimuthal coordinate. Then, the axisymmetric energy equation can be written as follows:

$$(\rho C)_{\mathrm{e}}\frac{\partial T}{\partial t}+(\rho C)_{\mathrm{f}}\left[V_r\frac{\partial T}{\partial r}+V_z\frac{\partial T}{\partial z}\right]=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(kr\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial T}{\partial z}\right) \tag{35}$$

The water steam flow equation is written with the cylindrical coordinates as follows:

$$\frac{\sigma(T)}{\beta T}\frac{\partial P}{\partial t}+\left[\left(\frac{P}{T\beta}-\rho_{\mathrm{l}}\right)\frac{\mathrm{d}\sigma(T)}{\mathrm{d}T}-\frac{P}{T^2\beta}\sigma(T)\right]\frac{\partial T}{\partial t}$$
$$+\frac{K\rho_{\mathrm{f}}}{\phi\mu_{\mathrm{f}}}\left(\frac{1}{\mu_{\mathrm{f}}}\frac{\partial\mu_{\mathrm{f}}}{\partial r}-\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}}\frac{\partial\rho_{\mathrm{f}}}{\partial r}\right)\frac{\partial P}{\partial r}+\frac{K\rho_{\mathrm{f}}}{\phi\mu_{\mathrm{f}}}\left(\frac{1}{\mu_{\mathrm{f}}}\frac{\partial\mu_{\mathrm{f}}}{\partial z}-\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}}\frac{\partial\rho_{\mathrm{f}}}{\partial z}\right)\frac{\partial P}{\partial z}$$
$$-\frac{K\rho_{\mathrm{f}}}{\phi\mu_{\mathrm{f}}r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial P}{\partial r}\right)-\frac{K\rho_{\mathrm{f}}}{\phi\mu_{\mathrm{f}}}\frac{\partial^2 P}{\partial z^2}=0 \tag{36}$$

where all terms are as previously defined.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

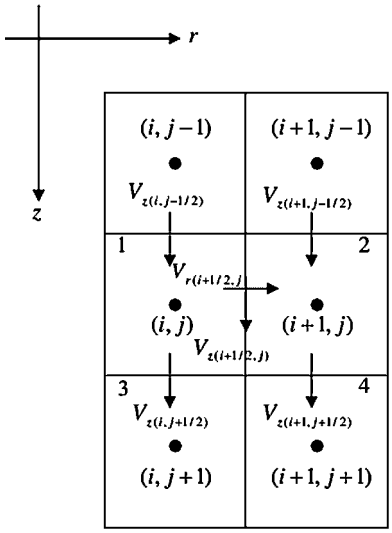


Figure 5. Evaluation of the interface velocity components. At the interface between nodes (i, j) and $(i, j+1)$, $V_{r(i,j+1/2)}$ is directly known from the flow model. In contrast, $V_{z(i,j+1/2)}$ must be interpolated from values at interfaces labeled 1, 2, 3 and 4.

The spatial discretization is performed by integrating the system of equations over the cells. In fact, in this section we present the discretization of the convection–advection terms using an upwind scheme (see Figure 5). The net advective flux into cell (i, j) in the r direction can be approximated by the finite-volume method as

$$\int_{i-1/2}^{i+1/2}\int_{j-1/2}^{j+1/2} V_r \frac{\partial T}{\partial r} r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}z = r_i[V_{r(i+1/2,j)}((1-\alpha_1)T_{i,j}+\alpha_1 T_{i+1,j}) - V_{r(i-1/2,j)}((1-\alpha_1)T_{i-1,j}+\alpha_1 T_{i,j})]\Delta z \tag{37}$$

where $2\leqslant i\leqslant N-1$ and $2\leqslant j\leqslant M-1$.

The net advective flux into cell (i, j) in the z direction can be approximated by the finite-volume method as

$$\int_{i-1/2}^{i+1/2}\int_{j-1/2}^{j+1/2} V_z \frac{\partial T}{\partial z} r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}z = \frac{r_{i+1}^2+2r_i(r_{i+1}-r_{i-1})-r_{i-1}^2}{8} \times[V_{z(i,j+1/2)}((1-\alpha_2)T_{i,j}+\alpha_2 T_{i,j+1}) - V_{z(i,j-1/2)}((1-\alpha_2)T_{i,j-1}+\alpha_2 T_{i,j})] \tag{38}$$

where $2\leqslant i\leqslant N-1$ and $2\leqslant j\leqslant M-1$.

The spatial weighting factors, α_1 and α_2, are equal to 0.5 for the central scheme, and 0 or 1 for the upstream scheme depending on the direction of the flow vectors at the cell interfaces [18, 19].

The energy equation is discretized by using the upwind scheme for the convection–advection terms and the vertex-centered scheme for the diffusion–dispersion terms:

$$\frac{\mathrm{d}T_{i,j}}{\mathrm{d}t} - \frac{2(k_{i+1,j}+k_{i,j})(r_{i+1}+r_i)}{(\rho C)_{\mathrm{e},i,j}[r_{i+1}^2+2r_i(r_{i+1}-r_{i-1})-r_{i-1}^2]\Delta r}(T_{i+1,j}-T_{i,j}) + \frac{2(k_{i,j}+k_{i-1,j})(r_i+r_{i-1})}{(\rho C)_{\mathrm{e},i,j}[r_{i+1}^2+2r_i(r_{i+1}-r_{i-1})-r_{i-1}^2]\Delta r}(T_{i,j}-T_{i-1,j})$$

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

$$
\begin{aligned}
&-\frac{k_{i,j+1}+k_{i,j}}{2(\rho C)_{\mathrm{e},i,j}\Delta z^2}(T_{i,j+1}-T_{i,j})+\frac{k_{i,j}+k_{i,j-1}}{2(\rho C)_{\mathrm{e},i,j}\Delta z^2}(T_{i,j}-T_{i,j-1})\\
&+\frac{8(\rho C)_{f,i,j}r_i}{(\rho C)_{\mathrm{e},i,j}[r_{i+1}^2+2r_i(r_{i+1}-r_{i-1})-r_{i-1}^2]}[V_{r(i+1/2,j)}((1-\alpha_1)T_{i,j}+\alpha_1 T_{i+1,j})\\
&-V_{r(i-1/2,j)}((1-\alpha_1)T_{i-1,j}+\alpha_1 T_{i,j})]\\
&+\frac{(\rho C)_{f,i,j}}{(\rho C)_{\mathrm{e},i,j}\Delta z}[V_{z(j+1/2,j)}((1-\alpha_2)T_{i,j}+\alpha_2 T_{i,j+1})-V_{z(j-1/2,j)}((1-\alpha_2)T_{i,j-1}+\alpha_2 T_{i,j})]=0
\end{aligned}
\tag{39}
$$

where $2\leqslant i\leqslant N-1$ and $2\leqslant j\leqslant M-1$.

The water steam flow equation is also discretized and it could be written as follows:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\sigma(T_{i,j})}{\beta T_{i,j}}\frac{\mathrm{d}P_{i,j}}{\mathrm{d}t}+\left[\left(\frac{P_{i,j}}{T_{i,j}\beta}-\rho_{\mathrm{l}}\right)\frac{\mathrm{d}\sigma(T_{i,j})}{\mathrm{d}T}-\frac{P_{i,j}}{T_{i,j}^2\beta}\sigma(T_{i,j})\right]\frac{\mathrm{d}T_{i,j}}{\mathrm{d}t}\\
&+\frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}}\frac{8}{(r_{i+1}^2+2r_ir_{i+1}-3r_i^2)\Delta r}\left[r_i\log\left(\frac{\mu_{f_{i+1,j}}+\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i+1,j}}+\rho_{f_{i,j}}}\right)-r_i\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}}\right)-\frac{r_{i+1}-r_i}{2}\right]P_{i+1,j}\\
&+\frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}\Delta z^2}\left[\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j+1}}+\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j+1}}+\rho_{f_{i,j}}}\right)-\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}}\right)-1\right]P_{i,j+1}\\
&+\frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}\Delta z^2}\left[\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j-1}}+\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j-1}}+\rho_{f_{i,j}}}\right)-\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}}\right)-1\right]P_{i,j-1}\\
&-\frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}}\frac{8}{(r_{i+1}^2+2r_ir_{i+1}-3r_i^2)\Delta r}\left[r_i\log\left(\frac{\mu_{f_{i+1,j}}+\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i+1,j}}+\rho_{f_{i,j}}}\right)-r_i\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}}\right)-\frac{r_{i+1}-r_i}{2}\right]P_{i,j}\\
&-\frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}\Delta z^2}\left[\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j+1}}+\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j+1}}++\rho_{f_{i,j}}}\right)\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j-1}}+\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j-1}}+\rho_{f_{i,j}}}\right)-2\log\left(\frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}}\right)-2\right]P_{i,j}=0
\end{aligned}
\tag{40}
$$

where $2\leqslant i\leqslant N-1$ and $2\leqslant j\leqslant M-1$.

The discretized initial and boundary conditions are given by:

$$
\begin{aligned}
T(r_i,z_j,0)&=T_0(r_i,z_j)=T_{0,i,j},\quad 1\leqslant i\leqslant N,\ \ 1\leqslant j\leqslant M\\
T(r_i,z_j,t)&=T^{\mathrm{D}}(r_i,z_j,t)=T_{i,j}^{\mathrm{D}}(t),\quad i\in\{1,N\}\text{ and }j\in\{1,M\}\\
\nabla T(r_i,z_j,t).v&=q^{\mathrm{N}}(r_i,z_j,t)=q_{i,j}^{\mathrm{N}}(t),\quad i\in\{1,N\}\text{ and }j\in\{1,M\}\\
P(r_i,z_j,0)&=P_0(r_i,z_j)=P_{0,i,j},\quad 1\leqslant i\leqslant N,\ \ 1\leqslant j\leqslant M\\
P(r_i,z_j,t)&=P^{\mathrm{D}}(r_i,z_j,t)=P_{i,j}^{\mathrm{D}}(t),\quad i\in\{1,N\}\text{ and }j\in\{1,M\},\\
\nabla P(r_i,z_j,t)\cdot v&=s^{\mathrm{N}}(r_i,z_j,t)=s_{i,j}^{\mathrm{N}}(t),\quad i\in\{1,N\}\text{ and }j\in\{1,M\},
\end{aligned}
\tag{41}
$$

6.3. The derived algebraic system

By using the method of lines, functions T and P are transformed into $2N$ vectors corresponding to their values at each discretization point. The spatial derivatives are approximated using finite-volume formula on three points where the best results for accuracy and computation time efficiency were obtained.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

The spatial discretization of the energy equation presented above (39) is written under the form

$$S(T)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}+A(T)T+B(T,P)T=b \tag{42}$$

where $S(T)$ is a non-singular diagonal matrix such as $S(T)_i=(\rho C)_e(T_i)\neq 0\forall i\in[1,N]$. The coefficients of the matrices $A(T)$ and $B(T,P)$ are obtained by the spatial discretization of the energy equation (39). b is the second member vector. Equation (42) is an ordinary differential equation that writes:

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}+S(T)^{-1}A(T)T+S(T)^{-1}B(T,P)T=S(T)^{-1}b \tag{43}$$

Also, the water steam flow equation writes after the spatial discretization:

$$D(T,P)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}+C(T)\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t}+E(T)P=c \tag{44}$$

where $D(T,P)$ and $C(T)$ are two diagonal matrices and $C(T)$ is singular because $C(T)_i=0$ when $\sigma(T_i)=0$, for V_i control volume; the equation is then an algebraic one. The coefficients of the matrix $E(T)$ are obtained by the discretization of the flow problem (40) and c is the second member vector.

Combining (43) and (44), we obtain the following algebraic system:

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ D(T,P) & C(T) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \dfrac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} \\ \dfrac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} S(T)^{-1}(A(T)+B(T,P)) & 0 \\ 0 & E(T) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} T \\ P \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} S(T)^{-1}b \\ c \end{pmatrix} \tag{45}$$

Let $Y=[T,P]^T$. By classical transformations, the system can be written in the general form

$$M\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}t}+f(Y)=0 \tag{46}$$

where

$$M=\begin{pmatrix} I & 0 \\ D(T,P) & C(T) \end{pmatrix},\quad f(Y)=\begin{pmatrix} S(T)^{-1}(A(T)+B(T,P))T-S(T)^{-1}b \\ E(T)P-c \end{pmatrix}$$

We denote by J the jacobian matrix of f.

7. RESOLUTION OF THE DAE SYSTEM USING AN APPROPRIATE SOLVER

We start by considering the semi-discrete diffusion–convection model as a system of DAE of index one and then we use the framework of DAE solvers. Indeed, it is sufficient to differentiate the algebraic flow equations in order to get a system of ODE. Thus, the differentiation index of the system is equal to one here.

In classical global approaches, an implicit Euler scheme is used to solve (46). This leads, at each time step, to the non-linear system $MY+\Delta t f(Y)-MY_n=0$ and the Jacobian of this system is the matrix $M+\Delta t J$. This system can be solved by a Newton method. Newton iterations are written as follows:

$$(M+\Delta t J)(Y^{k+1}-Y^k)=-(MY^k+\Delta t f(Y^k)-MY_n) \tag{47}$$

7.1. Our global approach

We claim that an efficient way to solve our problem is to use a specific DAE solver with an implicit time discretization. Our approach is a generalization of the classical global approach, which is a

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

particular case with an implicit Euler scheme and a fixed time step. Thus, we keep the advantage of the robustness of the method and compared with the fixed implicit scheme as Euler used in the classical global approach; a big advantage of DAE solvers is their control of accuracy with a variable order scheme. Moreover, these solvers provide a control of time step and the associated control of Jacobian updates (ensuring convergence of Newton iterations for example). It is in principle possible to implement these controls, but they are rather sophisticated in DAE solvers and not so easy to reproduce.

In order to solve the DAE system (46), we adopt the following strategy. We use software libraries and write modules clearly identified as diffusion and flow. We apply a DAE solver (in our experiments, the `DASSL` DAE solver of `SLATEC`, to which we provide the temperature-dependent mass matrix M, the function f, the Jacobian J and consistent initial conditions). We start by calculating $Y_0^{'}$ from Y_0 using a routine that we implemented in the DAE solver following the algorithm used by `MATLAB` [20] to calculate the initial conditions at the time $t = t_0$. Then the DAE solver applies a time discretization scheme using the BDF method and solves at each time step a system of non-linear equations using a modified Newton method [21, 22].

A drawback of our approach is the large size of the linear system; however, the matrix is sparse. Thus, to improve efficiency we use a sparse linear solver (`UMFPACK` library) in the algorithm of Newton-LU in `DASSL`.

The whole software uses the Fortran 90 `MUESLI` library (`http://www.irisa.fr/sage/edouard/canot/muesli/`), which provides linear algebra facilities using a `Matlab`-like syntax.

8. DEVELOPED SOFTWARE

Two programs have been developed using the numerical strategy presented above, both are developed in one, two and 3D-axisymmetric cases: the first one `DIFFUSE-WC` allows to simulate the heat transfer in saturated porous media by neglecting the convective effect (phase change `W`ithout `C`oupling with vapor flow); the second one is `DIFFUSE-C` that simulates the heat transfer in saturated porous media taking into account the `C`oupling effect between the heat transfer with phase change and the vapor flow in the ground.

9. NUMERICAL EXPERIMENTS

9.1. Performance and cost

In order to obtain good performances in our global approach, the Jacobian matrix is calculated explicitly and coded by hand. Actually, we modified the DAE solver `DASSL` in such a way that it could support sparse jacobian matrix using the compact sparse column format (CSC) respecting the `UMFPACK` library requirement. The advantages of sparse matrices are both size and speed. For example, a 100×100 matrix needs about 110 MB for dense storage and leads to 38 h for its resolutions using a 2.1 GHz Dual Core-2 machine. On the other hand, the storage size falls to 15 MB (38 342 non-zero elements) and the CPU time falls to 87 s on the same machine. The speed advantage of sparse matrix is illustrated in Figure 6.

9.2. Effect of the coupling with water steam flow

In order to show the effect of coupling between the heat transfer with phase change and the water steam flow in the ground, we simulate the heat diffusion in a water saturated soil and we compare the results in both cases (with and without coupling). We consider a water saturated clay soil initially at 20°C, the temperature of the supposed fire at the surface of the soil is 300°C. The curves illustrated in Figure 7 represent the temperature histories at 5 and 2.5 cm depths in the soil for both cases (with and without coupling with water steam flow). Indeed, this figure shows the retarding effect of steam convection; this is due to the fact that the vapor flowing in the ground

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

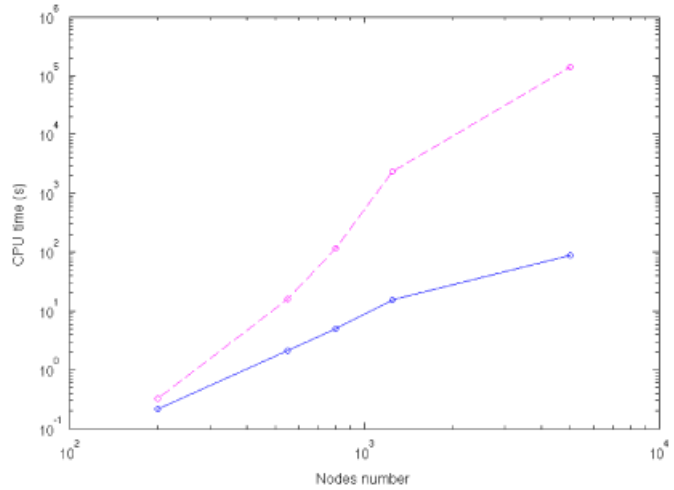


Figure 6. CPU time versus the nodes number used in the simulation with sparse matrix (solid curve) and dense matrix (dashed curve) structures. Used grids are: 10×10, 15×15, 20×20, 25×25 and 50×50.

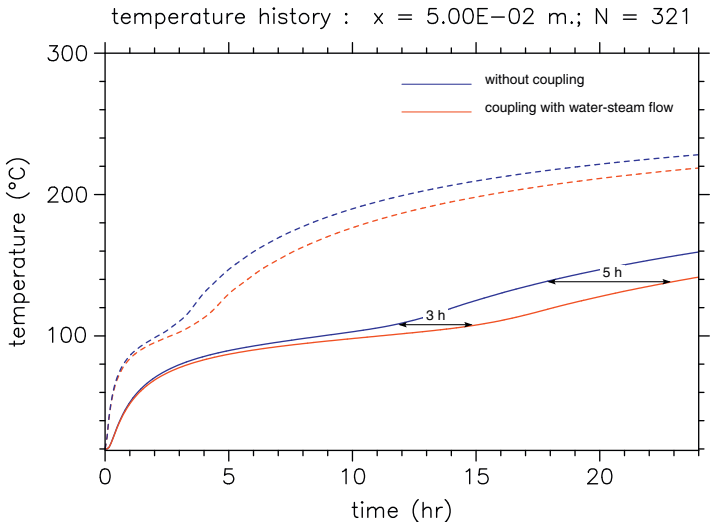


Figure 7. Effects of coupling between heat diffusion with phase change and the water steam flow. Plain curves (resp. dashed curves) represent the temperature histories at the depth 5 cm (resp. 2.5 cm). Taking into account the steam convection introduces a delay in the heating that can reach few hours.

transports energy toward surface. Obviously, the delay is proportional to the heating duration but appears only after the phase-change front. Similarly, the delay is negligible in the wet zone.

9.3. Numerical validations

After focusing on a theoretical and numerical point of view on different ways to solve our system of PDAEs, the validation stage leads us to compare the code results with the experimental ones. Actually, the model has been applied to the famous Stefan problem (melting problem) and has been validated by comparing the numerical results with an existing analytical solution [23]. The experiments deal with non-saturated porous media; hence, we are going to use ϕ as the humidity rate instead of viewing it as the ratio of void as represented in the model described in Section 2. Hence, this will allow us to simulate heat transfer in non-saturated porous media.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Fluid phase	Capacity $(J/Kg.K)$	Conductivity $(W/m.K)$	Density (Kg/m^3)
Liquid	4.10^3	6.10^{-1}	10^3
Vapor	2.10^3	25.10^{-3}	8.10^{-1}
Porous matrix (clay soil)	13.10^2	756.10^{-3}	15.10^2

Figure 8. Physical properties used for simulations.

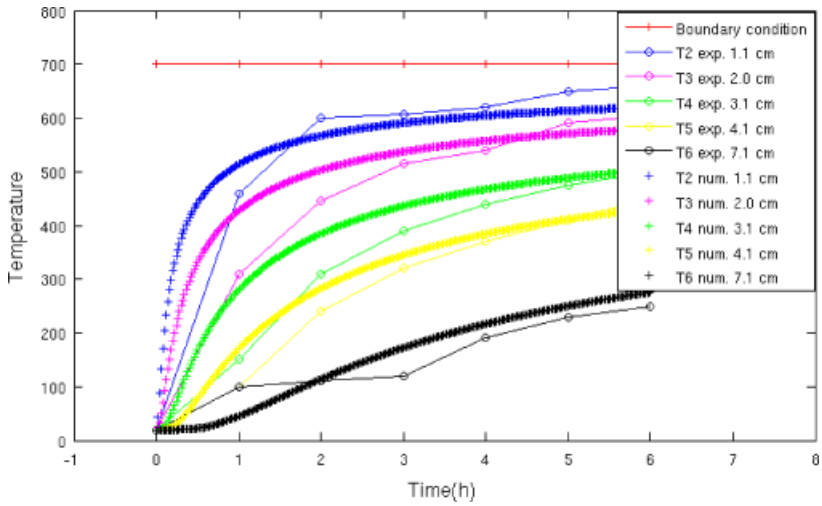


Figure 9. Simulation of the experiment of Laloy and Massard [24] using `DIFFUSE-WC`. The curves show a comparison between numerical results and experimental data.

The physical properties for the fluid phase and the porous matrix used in the simulations are shown in Figure 8. For all cases, we take $L = 2400 \cdot 10^3\,\mathrm{J/kg}$.

As a first validation example, the experiment of Laloy and Massard [24] may be used. This experiment was done on a clay dry soil ($\phi = 0$) from the archaeological site of Etiolles; the temperature at the top of the soil was 700°C. The simulation implied a 2D grid, with 50 points along x and 50 points along depth, temperature interval $\Delta T = 5°\mathrm{C}$ which is the optimal choice to attempt the good accuracy and to avoid the fluctuations [25]. Figure 9 shows the comparison between the simulation and the experiment. The variation of temperature at the depth 7.1 cm is obviously due to some humidity in the soil, as has been also pointed out by Laloy and Massard [24]. As may be observed results compare reasonably well, it may be concluded that, despite the uncertainties coming from the experimental data, the simulations show similar trends and this is an indication that reasonable agreement between replication experiments and simulations may be expected.

The second example of validation is provided considering the water content in the soil. As the aim of this work is to present an application of replication experiments and numerical modeling in the archaeological research, specially the study of archaeological hearths used for cooking and heating, the experiments have been done in Pincevent, near Paris, which was occupied by the ancient hunther-gatherer groups 12.000 BP. The Magdalenian site of Pincevent is located in the valley of the Seine river, approximately 72 km to the south of Paris near Montereau France. The experiments must provide data to validate computational models developed to simulate the heat transfer from the fire to the underlying soil. That is why we choose to realize a controlled experiment using an electrical plate to heat the soil. Thus, the replication consists of heating the surface of the soil using an electrical plate, taking continuous care of its intensity. Also, we put many sensors in the soil at different depths and different positions under the plate (see Figure 10), to measure the temperature distribution in the soil, and we place one sensor at the surface in contact with the plate to measure the plate temperature (see Figure 11). Hence, we determine the

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7



Figure 10. Sensors are inserted in the soil.



Figure 11. Electrical plate is put on the soil.



Figure 12. Alteration at the surface.

different zones of alterations at the soil surface once the plate is driven away (see Figure 12), and we excavate the hearth to determine the approximate temperature levels reached in the experiments, to mark the changes in coloration due to the thermal alteration and to determine the sensors positions (see Figure 13).

The comparison between numerical results and experimental ones is shown in Figure 14 where the rate of humidity in the soil $\phi = 15\%$ (an estimation that gives a reasonable concordance between numerical and experimental curves) is used in the simulation with a grid of 50×50 nodes. The results show a good agreement between numerical results and measured temperatures. However, the differences between numerical results and experimental ones are due to the incertitude of the thermocouples positions, also due to the approximated properties of the soil. Furthermore, the plateaus shown in this figure are due to the water evaporation in the soil (phase-change problem).

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

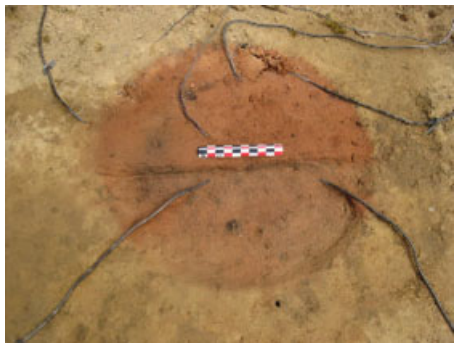


Figure 13. Excavation of the soil.

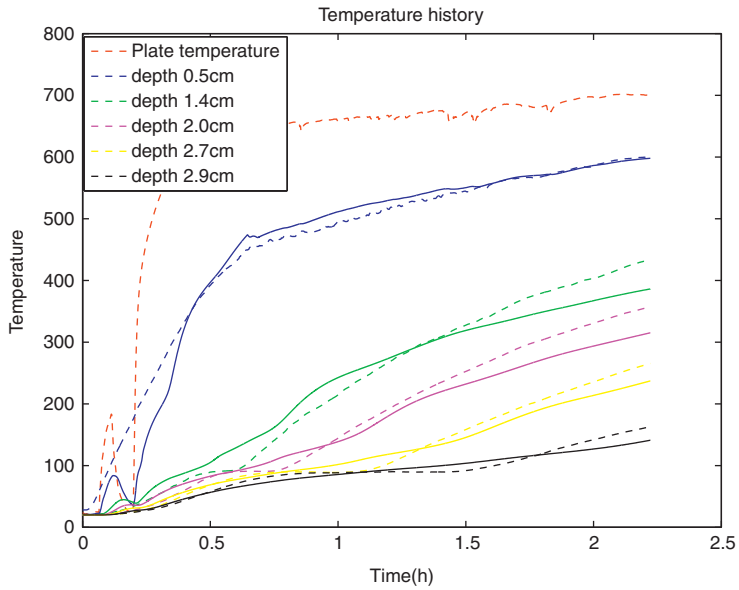


Figure 14. Comparison between numerical results and experimental ones realized on the archaeological hearths at the Pincevent site using an electrical plate. Dashed lines represent experimental data, whereas others are the numerical results obtained by `DIFFUSE-WC`.

The fall in temperature in the dashed magenta curve is due to an error in measures or probably because we moved the sensor during the experiment. The fact that the plateaus obtained by the simulations are not so marked as in the experiments is due to the inherent choice of our model. Figure 15 illustrates the temperature profile in the ground at the end of the experiment.

Other experiments have been done using a real fire as illustrated in Figures 16 and 17. After several hours of continuous burning and keeping a nearly constant mass of fuel, fire was left to extinguish. All along the experiment, temperatures of the fire, ambient conditions, temperature of the soil and wind velocity were recorded. The sampling time was approximately 5 min. A schematic view of one of the experiments that shows the different positions of thermocouples is illustrated in Figure 18 where the used humidity rate was $\phi = 10\%$ (an estimation that gives a reasonable concordance between numerical and experimental curves), and the grid node was 50×50. The comparison between the numerical results and the experimental ones is illustrated in Figure 19, which shows the time evolution of the results as obtained from the code and the experimental measurements. Hence, a reasonable concordance between the replication experiments and the computer results is observed. However, the discrepancies shown between the numerical results and the measured ones specially for thermocouple $T6$ may be caused by the failure of the

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

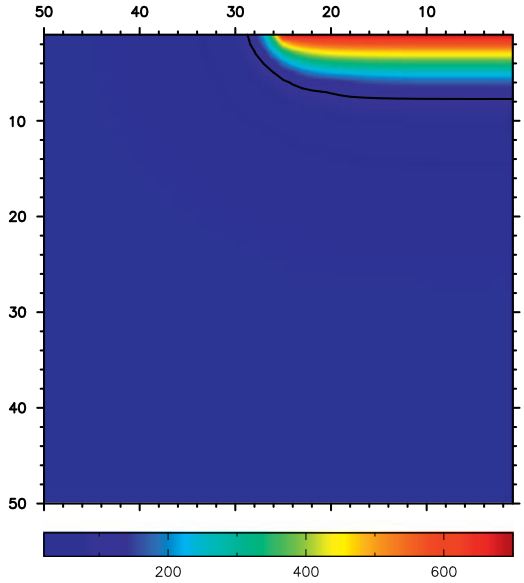


Figure 15. Temperature profile in the 3D axisymmetric case for the experiment with the electrical plate. The black curve represents the phase-change interface position after 2 h of lighting (isotherm at 100°C). Domain size: 50×50 cm.



Figure 16. Real fire used to heat the soil.

initialization for the boundary condition (we are taking the temperature at the center of the fire as a uniform temperature for the uncontrolled bed, which is not the case in reality), or may be due to the uncertainty properties of the porous medium. Moreover, there is the question of weather (fire is sensitive to the wind) that may remain unanswered since the various properties of the experimental conditions are not fully known. It should be pointed out that the temperature history curves presented herein appear quite similar to those reported elsewhere in the literature.

The plateaus at the phase-change temperature observed in Figure 19 are due to the phase-change phenomenon. The water vapor produced at the discontinuous moisture front migrates from the front toward the dry side. Figure 20 shows the temperature profile in the ground. The convective flow is shown by the measured and computed pressure distribution, illustrated in Figure 21, with the velocity in the direction of the negative pressure gradient (see Figure 22). We can see that the highest pressure reached is at the interface level where the evaporation process happens. In this experiment, we are dealing with a medium of small permeability ($K = 10^{-12}\,\mathrm{m}^2$), and so the vapor finds more difficulties to escape from the ground; thus, there is significant variation of the pressure in the soil.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme



Figure 17. Alteration of the soil after the experiment.

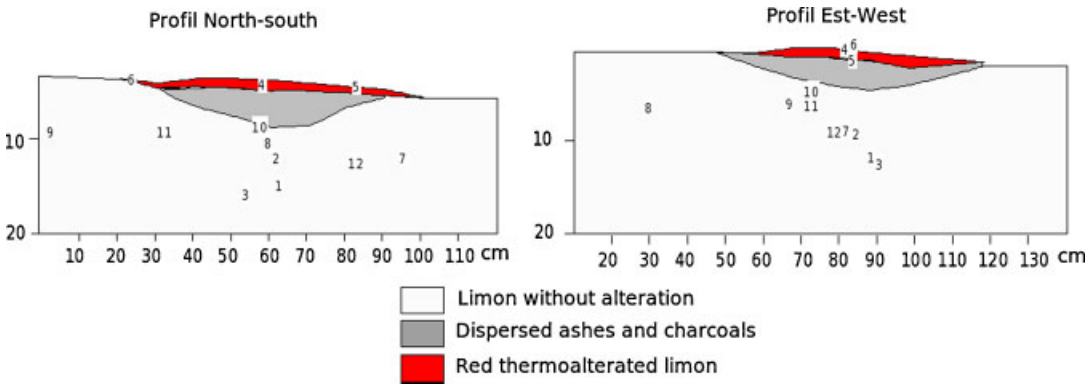


Figure 18. Schematic view of the experiment with the different positions of thermocouples.

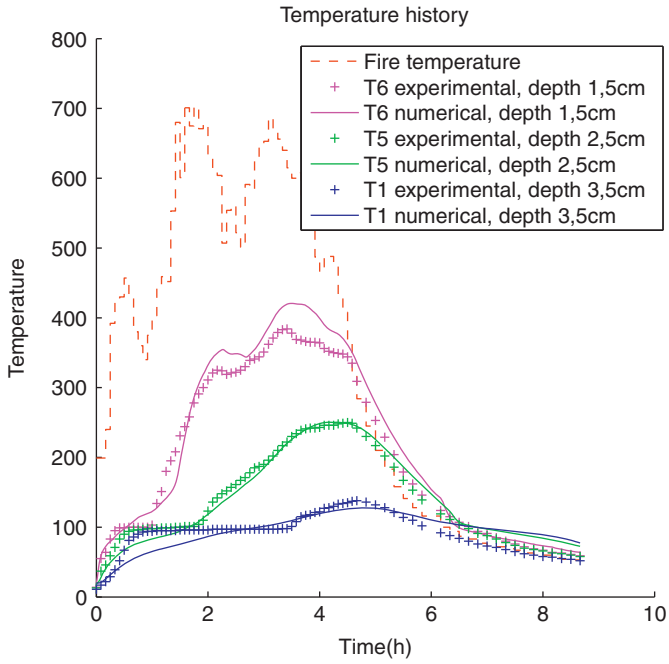


Figure 19. Comparison between numerical results obtained by DIFFUSE-C and experimental ones realized on the archaeological hearths at the Pincevent site. Real fire has been used.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

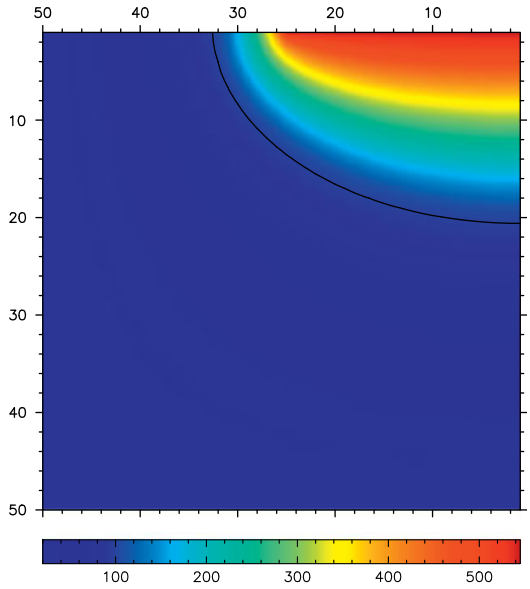


Figure 20. Temperature profile in the ground for the real fire Pincevent experiment. The black curve represents the phase-change interface position (isotherm 100°C) at the end of the lighting. Domain size: 50×50 cm.

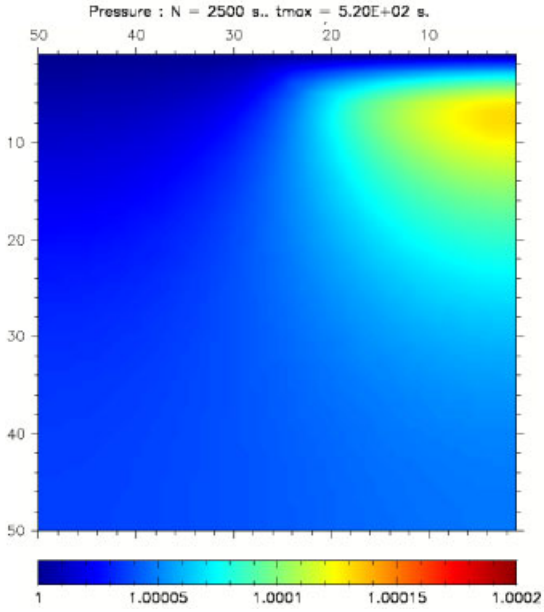


Figure 21. Pressure distributions in the ground. It is due to the gas created at the interface of phase change. Domain size: 50×50 cm.

9.4. Radiation effect

Ferreri and March [26–29] have developed a numerical model in 3D-axisymmetric case called `Pince-eu`, which simulates the heat transfer in saturated porous media. Their code takes into account the phase-change phenomenon and the radiation effect at the surface of the soil, but it neglects the convection effects due to the coupling with the water steam flow. Therefore, in order to study the radiation effect, it seems necessary to compare our model `DIFFUSE-WC` with `Pince-eu`.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

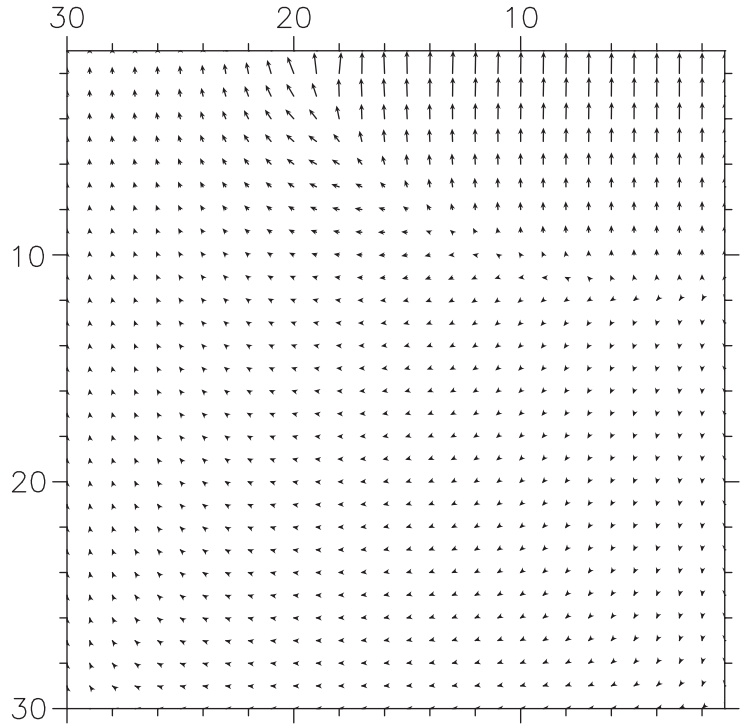


Figure 22. Water steam flow pattern. Domain size: 50×50 cm. Max. velocity: 2.6×10^{-6} m/s.

In fact, `Pince-eu` solves the same physical problem as `DIFFUSE-WC` and in addition it includes the radiation phenomenon that allows to simulate the heat transfer in a bowl occupation, which is not the case in our model.

In fact, the numerical method used in `Pince-eu` is based on the discretization of the Fourier equation using the finite difference method, the coordinate transformations and the apparent capacity method given by Bonacina and Comini [11]. This software is coded in Fortran 77.

To compare the two models (`DIFFUSE-WC` and `Pince-eu`), we simulate the same experience realized at the archaeological site of Pincevent; it is an experience of real fire lighted at the surface of the soil. We used a finite domain of $1\,\text{m} \times 1\,\text{m}$ with a circular fire at the surface with diameter $d = 30\,\text{cm}$. The variable measured temperature at the center of the fire is used as a boundary condition at the surface (we suppose that the temperature at the surface is uniform). The comparison is illustrated in Figure 23 and it shows that the two models reproduce the same behavior. On the other hand, we can see the difference between the results of the two models when cooling starts; this is due to the radiation effect and this is one of the limitations of our model. Otherwise, the big advantage of our code is that it couples the heat diffusion with the water steam flow that has a pronounced effect on the heating curves when dealing with long time fires. Also, the numerical method proposed to solve our model is adapted to the use of unstructured meshes, which is not the case with the method of orthogonal boundary fitted used in `Pince-eu`; this limits the modelization of hearths with complex geometries. For the bowl occupations, the interior boundaries are heated by radiation; hence, it seems interesting to include the radiation effect into our model to modelize such occupations.

10. CONCLUSION

In this paper, we have developed a numerical model that simulates heat diffusion in saturated porous media coupled with the water steam flow problem (due to the creation of vapor when it

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

Annexe 7

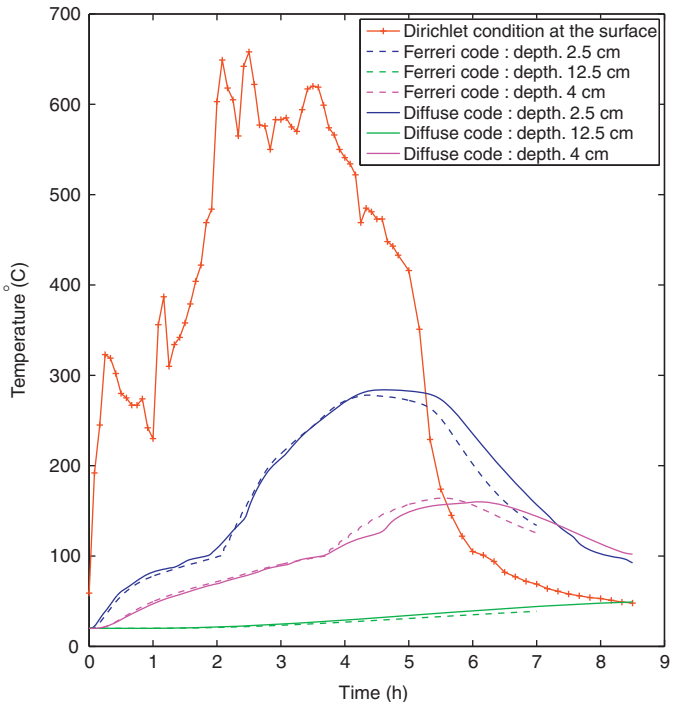


Figure 23. Comparison between our model of heat diffusion with phase change without coupling and `Pince-eu` code.

occurs). We propose a global method based on the AHC method, in order to avoid the tracking of the phase-change interface, and on the use of a DAE solver devoted to handle the coupling between the energy and the water steam flow equations. We use a method of lines to discretize separately in space and time. Actually, due to the strong coupling, this requires to control the time step and the convergence of the Newton iterations. We advocate the use of DAE solvers, which are very efficient in this control, at the price of a larger non-linear system but with the benefit of a better stability.

Numerical results show interesting features concerning the retarding effect of the coupling between heat diffusion and water steam flow; this is due to the convection phenomenon. Obviously, the retarding effect of the water–steam convection depends on the position of the considered point. It occurs mainly in the dry zone, but it is not pronounced in the wet zone. Moreover, this retarding effect occurs more and more later as the position is more and more deeper in the soil. Therefore, as we are looking for the minimal duration of burning based on the alterations of the soil (colors change in the soil corresponding to the temperature $T = 300°C$ when dealing with clay–limon soil), the effect of the convection term is really important and could change fundamentally the interpretation of the results.

Finally, we plan to extend the proposed algorithm to the real 3D case and wish to take into account the radiation effect that is essential to simulate bowl occupations where the edges are heated by radiation also and not only by conduction.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work has been done in the frame of ARPHYMAT,[‡] collaboration, with a financial support from the MENR, France. The authors thank Q. Qiong for her participation in the experiments of Pincevent. Also,

[‡]ARchaeology, PHYsics and MAThematics (ARPHYMAT) is an interdisciplinary project involving the three laboratories mentioned in the first page.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

they thank all the archaeologists working at Pincevent, specially the persons in charge of the site for having placed the site of excavation into our disposal.

REFERENCES

1. Muhieddine M. Simulation numérique des structures de combustion préhistoriques. *Ph.D. Report*, Rennes, France, 2009.
2. Cannon J, Hill C. Existence, uniqueness, stability and monotone dependence in a Stefan problem for the heat equation. *Journal of Mathematics and Mechanics* 1967; **17**:1–20.
3. Cannon J, Primicerio M. A two phase Stefan problem with temperature boundary conditions. *Annali di Matematica Pura ed Applicata* 1971; **4**(88):177–192.
4. Bejan A, Kraus AD. *Heat Transfer Hand Book*. Wiley: New York, 2003.
5. Luikov AV. *Analytical Heat Diffusion Theory*. Academic Press: New York, 1968.
6. Pawlow I. Numerical solution of a multidimensional two-phase Stefan problem. *Numerical Functional Analysis and Optimization* 1985; **8**:55–82.
7. Kim CJ, Kaviany M. A numerical method for phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1990; **33**(12):2721–2734.
8. Askar HG. The front-tracking scheme for the one-dimensional freezing problem. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 1987; **24**:859–869.
9. Prapainop R, Maneeratana K. Simulation of ice formation by the finite volume method. *Songklanakarin Journal of Science and Technology* 2004; **26**(1):55–70.
10. Muhieddine M, Canot E. Recursive mesh refinement for vertex centered FVM applied to a 1-d phase-change problem. *FVCA5*. Hermes: Aussois-France, 2008; 601–608.
11. Bonacina C, Comini G. Numerical solution of phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1973; **16**:1825–1832.
12. Comini G, Delgiudice S, Lewis RW, Zeinkiewicz OC. Finite element solution of nonlinear heat conduction problems with special reference to phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 1974; **8**:613–624.
13. Majchrzak E, Mochnaki B, Suchy JS. Identification of substitute thermal capacity of solidifying alloy. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics* 2008; **46**(2):257–268.
14. Angirasa A, Peterson GP. Natural convection below a downward facing heated horizontal surface in a fluid-saturated porous medium. *Numerical Heat Transfer* 1998; **34**(3):301–311.
15. Combarnous M, Bories S. Modélisation de la convection d'une couche poreuse horizontale à l'aide d'un coefficient de transfert solide–fluide. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1974; **17**:505–514.
16. Zheng C, Bennett G. *Applied Contaminant Transport Modeling* (2nd edn). Wiley: New York, 2002.
17. Feulvarch E, Bergheau JM, Leblond JB. An implicit finite element algorithm for the simulation of diffusion with phase changes in solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2009; **78**(12):1492–1512.
18. Zheng C, Bennet GD. *Applied Contaminant Transport Modeling* (2nd edn). Wiley-Interscience: New York, 2002.
19. Sboui A, Jaffere J. Discrétisation en temps par sous-domaines pour un problème d'advection en milieux poreux. *ARIMA* (*Revue Africaine de la recherche en informatique et mathématiques appliquées*) 2006; **5**:333–349. Available from: http://www-direction.inria.fr/international/arima/005/pdf/arima00523.pdf.
20. Reichelt M, Shampine L, Kierzenka J. Solving index-1 daes in matlab and simulink. *SIAM* 1999; **41**(3):538–552.
21. Ortega JM, Rheinboldt WC. *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Academic Press: New York, 1970.
22. Dennis JE, Schnabel RB. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations.* Prentice-Hall: NJ, 1983.
23. Muhieddine M, Canot E, March R. Various approaches for solving problems with heat conduction with phase change. *International Journal of Finite Volume Method* 2008; **6**(1).
24. Laloy J, Massard P. Nouvelle méthode thermique d'étude des foyers préhistoriques. *Révue d'Archéométrie* 1984; **8**:33–40.
25. Muhieddine M, Canot E, March R. Numerical solution of a 1-d time dependent phase change problem. *Fifth European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, Venise, Italy, 2008.
26. March RJ, Ferreri JC. Sobre el estudio de estructuras de combustion arquelogicas mediante replicationes y modelos numéricos. *Nature et Fonction des foyers préhistoriques*. APRAIF: Nemours, 1987; 59–69.
27. March RJ, Ferreri JC. De modelos numéricos para la inferencia del tiempo de quemado en estructruas de combustion arqueologicas: influencia de parametros. *Actas del TextrmIX Congreso Nacional de Arqueologia Chilena*. Museo National de Historia Natural: Santiago de Chile, Chile, 157–168.
28. March RJ. L'étude des structures de combustion en archéologie : un détour vers l'histoire. *Annales de la Revue Fyssen* 1995; **10**:53–68.
29. Ferreri JC, March RJ. Using numerical models to analyze archaeological simple fires structures. *XIII International Congress of Prehistoric and Protohistoric Sciences*, Colloquia 5, The lower and Middle paleolithic Colloquium, Forli-Italia, 8/14 September 1996; 57–63.

Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

DOI: 10.1002/nme

ASME Journal of Heat Transfer, vol. 138, n. 9, doi:10.1115/1.4032947

Effective thermal conductivity of a wet porous medium – Presence of hysteresis when modeling the spatial water distribution for the pendular regime

Édouard Canot
CNRS researcher, IRISA
Campus de Beaulieu, Rennes (Fr)
edouard.canot@irisa.fr

Renaud Delannay
Professor, IPR
Campus de Beaulieu, Rennes (Fr)
renaud.delannay@univ-rennes1.fr

Salwa Mansour
PhD student, INRIA
Campus de Beaulieu, Rennes (Fr)
salwa.mansour@inria.fr

Mohammad Muhieddine
Associate professor, LIU
146404 Mazraa, Beirut (Lb)
mohamad.muhieddine@liu.edu.lb

Ramiro March
CNRS researcher, CreAAH
Campus de Beaulieu, Rennes (Fr)
ramiro.march@univ-rennes1.fr

This paper deals with the heat transfer between two spherical grains separated by a small gap; dry air is located around the grains and a liquid water meniscus is supposed to be present between them. This problem can be seen as a micro-scale cell of an assembly of solid grains, for which we are looking for the effective thermal conductivity. For a fixed contact angle and according to the volume of the liquid meniscus, two different shapes are possible for the meniscus, giving a "contacting" state (when the liquid makes a true bridge between the two spheres) and a "non-contacting" one (when the liquid is split in two different drops, separated by a thin air layer); the transition between these two states occurs at different times when increasing or decreasing the liquid volume, thus leading to a hysteresis behavior when computing the thermal flux across the domain.

1 Introduction

Transport phenomena in porous media have been investigated for over 100 years for applications in materials, agriculture, archeology and engineering. Recently, more interest has been focused on heat and mass transfer processes in micro-porous media due mainly to their increasing importance in functional material design, fuel cell optimization and even biomedical engineering [1, 2].

The effective thermal conductivity is one of the most important parameters characterizing the energy transport properties of porous media and has been studied extensively by using both theoretical and experimental approaches. As is well known, the effective thermal conductivity of porous media depends not only on the thermal property and the volume fraction of each constitute component, but on the microstructure (*i. e.* the spatial distribution of all components) of the media as well. On the other hand, it is known that the presence of water affects a lot the thermal properties because the thermal conductivity of water is about 25 times that of dry air. This has been mentioned by Chen [3] who emphasized that a small increment in water contents around the contact points will lead to rapid increment in the effective thermal conductivity. Some papers [4, 5] deal with the prediction of thermal conductivity in terrestrial soil media in the presence of liquid water as a component but without specifying its spatial localization. The paper [6] of Mitarai and Nakanishi concerns the pendular regime (see figure 1) in which the liquid content is small and where the water menisci form bridges at each contact point (between the grains) thus inducing two-body cohesive force so the study was restricted to the mechanical properties and not the thermal ones.

In this work, we consider a granular media constituted by solid grains which are more or less spherical in shape. Four regimes of liquid content have been distinguished by [7]: Pendular, Funicular, Capillary and Slurry regimes. We are concerned with the pendular regime where we have a small liquid content and where the liquid bridges are formed

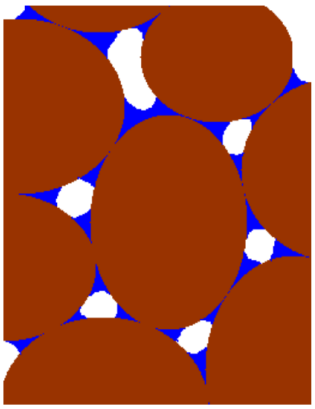


Fig. 1. Real granular medium in the “pendular regime”: dry air is located around the grains (in white) whereas liquid water menisci (in blue) are present as liquid bridges between them.

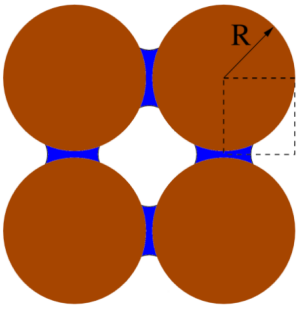


Fig. 2. Simplification of the grains’ assembly. The dashed rectangle is the computational domain used in this paper.

at the contact points of grains due to the surface tension responsible for tendency of liquids to minimize their surface area, giving rise to a membrane-like surface [8].

Figure 1 represents a real granular medium in pendular regime. This three component medium has no theoretical model to calculate the effective thermal conductivity and it is difficult to be discovered by experimental results. However, a numerical value of this effective property can be found in two stages, that is to say first finding the equilibrium shape of the liquid meniscus for a given liquid volume, second solving the steady-state heat equation over a small domain (supposed to be representative enough of the whole domain) and deduce the effective thermal conductivity, via the Fourier law, by using the thermal flux through the domain.

In this paper, we focus on the heat transfer between two spherical solid grains of same radius in presence of dry air and where liquid water is attached to the solid grains, without gravity. Our model takes into account the role of the contact angle between the liquid-gas interface in addition to the surface tension (energy required to increase the surface area of a liquid by a unit area) which enable the calculation of the exact shape of the liquid meniscus. A simplification of the grains’ assembly is represented in figure 2.

The present model implies many assumptions; there is no doubt that some important characteristics of a real granular medium (especially the randomness of both shape and position of the grains, and the roughness of their surface) should affect the results obtained in this paper. On the other hand, we can state that gravity doesn’t affect a lot the shape of the liquid menisci (the Bond number, based on a reference length chosen as the height of the meniscus, is of the order of one thousandth). Nevertheless, we think that our simple model has the worthiness to reveal a very interesting behavior, that is the hysteresis during the change in the liquid volume.

2 Micro-scale Model

We want to solve the steady-state heat transfer in an elementary cell containing only two spherical solid grains, a few quantity of liquid water, and dry air. In a real situation, the liquid water should be in thermodynamic equilibrium with its vapor, so the surrounding gas should be a binary mixture of dry air and water vapor. In the present study, the water vapor is neglected and we assume that there is no adsorbed water on the grain surface. The computational domain (see figure 3) can be found using the symmetry planes of the problem knowing the main direction of the heat flux – for example, the bottom symmetry plane comes from the fact that the gravity is neglected. Top and bottom sides are kept at constant temperature whereas the vertical ones are supposed to be isolated (this is related to the model used by [3] in their study of thermal conduction in dry soils).

As stated in the introduction, the liquid meniscus is centered along the axis between the two spheres leading to an axi-symmetric problem, so we can reduce the geometrical independent variables to the (r, z) cylindrical coordinates. Each component (solid, liquid water and dry air) has a constant thermal conductivity and the thermal contact between the components is supposed to be perfect.

Because it is in mechanical equilibrium (actually, in a quasi-static state because in a real situation a change of volume can be expected due to many reasons), the shape of the liquid meniscus must have both a constant total curvature (it is a minimum surface) and a prescribed contact angle with the solid. The percentage of liquid water, *i. e.* the ratio of its volume to that of the available space between the spheres is called humidity.

The input parameters are:

R : the radius of the two solid spheres
ε : the gap between the spheres
V : the volume of liquid water
γ : the surface tension between liquid water and air
θ : the contact angle between the liquid interface and the solid

In this study, the radius R is taken as the reference length. The output variable of the problem is the (vertical) flux q across the domain which is related to the effective thermal conductivity of our composite medium (by Fourier law).

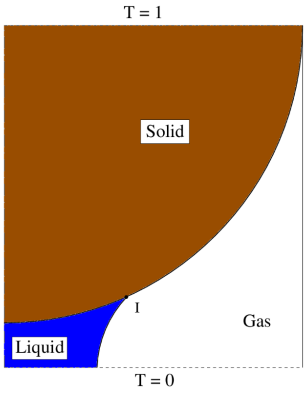


Fig. 3. Sketch of the cylindrical computational domain (taking into account all the symmetries). Boundary conditions are of homogeneous Dirichlet type on top and bottom sides, and of zero Neumann type on the external vertical sides.

Note that in a complete model, the liquid volume V should be related to the gas pressure (in a real situation, the total mass of the water is fixed and then the repartition between gas and liquid depends on the local pressure) but this is out of the scope of this study.

Surface tension γ and contact angle θ are usually temperature dependent and this dependence (which can be found elsewhere in literature) is not so negligible. However, at the scale of our elementary cell, we can state that the temperature difference is small so that these two parameters can be treated as constants.

3 Equilibrium shape of the liquid meniscus

In physics, the Young-Laplace equation relates the pressure difference to the shape of the interface [9]:

$$\Delta P = \gamma \kappa \tag{1}$$

where ΔP is the pressure difference across the fluid interface, γ is the surface tension and κ is the total curvature. At micro-scale, ΔP has a constant value and this could be easily demonstrated using the hydrostatic equation. Moreover, γ is supposed to remain constant so according to equation (1), κ is constant as well.

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = \text{constant} \tag{2}$$

where κ is the total curvature of the liquid meniscus curve (C) and κ_1 and κ_2 are respectively its plane and axi-symmetric curvatures.

Let $\{r(s), z(s)\}$ be any parameterization of the curve (C) in the axi-symmetric cylindrical coordinates then the total curvature is given by:

$$\kappa = \frac{r'z'' - z'r''}{(r'^2 + z'^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{z'}{r} \tag{3}$$

where $z' = dz/ds$, $r' = dz/ds$, $z'' = d^2z/ds^2$ and $r'' = d^2r/ds^2$. If we choose s such that it corresponds to the arc length parameterization of curve (C) then:

$$r'^2 + z'^2 = 1 \tag{4}$$

and thus equation (3) becomes:

$$r'z'' - z'r'' + \frac{z'}{r} = \kappa \tag{5}$$

The geometrical shape of the liquid meniscus is obtained by integrating the differential algebraic system formed of equations (4) and (5) (indeed, after transforming the system in a first order type, the former equation appears under an algebraic form).

Regarding the initial conditions for this integration, the following explanation should be emphasized: we already mentionned in section 2 that both the volume V and the contact angle θ was chosen as an input parameters; actually, it is difficult to integrate the meniscus shape (equations (4-5)) under these two constraints. We have prefered instead to define a point in the (r,z) plane (point A in figure 4) which is the beginning of the integration; the integration is then stopped when the meniscus curve crosses the solid boundary, (point B in figure 4). Please note that the point A is located on the r-axis only for the "contacting" case; for the "non-contacting" case, the point A must be located on the z-axis. The constraint concerning the prescribed contact angle at B, on the contrary, is kept and the integration process is repeated by trial and error until obtaining the good contact angle.

To summarize, the initial conditions for the integration of (4-5) are as follows:

$$\text{"contacting" case: } \begin{cases} r = r_0 \\ z = 0 \\ z' = 0 \end{cases}$$

$$\text{"non-contacting" case: } \begin{cases} r = 0 \\ z = z_0 \\ r' = 0 \end{cases}$$

It is worth noting that since the contact angle is prescribed, the total curvature κ and the meniscus volume V are conjugates in the sense where the knowledge of one of them leads to that of the other. If we choose a value of V, the differential system (4-5) will be difficult to be integrated, because of the presence of two constraints: the contact angle θ and the liquid volume V. To simplify the integration, we prefer to choose a value of the total curvature κ and deduce the volume V (the computation is detailed afterwards). Anyway, the final curves of the thermal fluxes will be plotted with respect to the volume V, as a control parameter.

3.1 The volume of the liquid water V

Figure 4 is a sketch used to demonstrate the calculation of the volume of liquid water V. The volume of the hashed slice of height dz is $\pi r(z)^2 dz$ so the volume of both the blue and the brown parts is $V_b = \int_{z_A}^{z_B} \pi r(z)^2 dz$. Earlier, we have found the values of $r(s)$ and $z(s)$ so by a simple change of variable we can say that the volume of these two parts can be written in the form $V_b = \int_{s_A}^{s_B} \pi r(s)^2 \frac{dz}{ds} ds$ and hence:

$$\frac{dV_b}{ds} = \pi r(s)^2 \frac{dz}{ds} \tag{6}$$

Equation (6) is actually added to the system of equations (4-5) and therefore V_b is a result of the integration process. To find the volume of liquid water V we must subtract the volume of the spherical cap V_c (in brown) which is given by: $V_c = \frac{\pi h^2}{3}(3R - h)$ where $h = z_B - \varepsilon$ and $R = 1$ (radius of the grain). Finally, $V = V_b - Vc$.

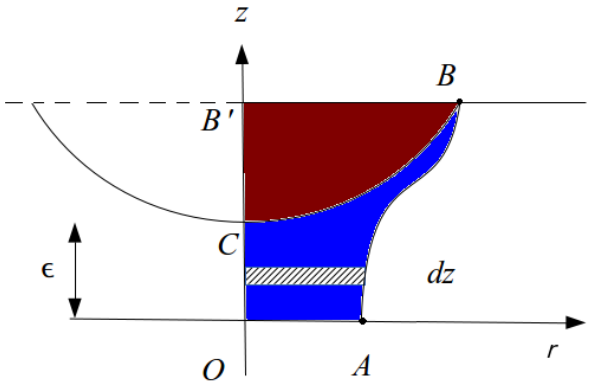


Fig. 4. A scheme of the liquid meniscus (solid grain in brown and liquid water in blue). A is an arbitrary point defined as the beginning of the integration process.

3.2 The contact angle θ between liquid and solid interface

Figure 5 is a sketch to demonstrate the calculation of the liquid and solid interface contact angle θ. Based on the knowledge of the position (r_B and z_B) of point B and the intersection point between the liquid water and the solid grain, we can easily calculate θ. Let ψ be the angle formed by the tangent to the liquid meniscus at B then $\psi = arctan(z'_B/r'_B)$ (the prime denotes the derivative w.r.t. the curvilinear abscissa s) and assume that φ is the angle formed by the tangent to the solid grain at B then $\varphi = arcsin(r_B/R)$. Simply $\theta = \psi - \varphi$.

The solution of our system of equations (4-5) is obtained numerically by a shooting method over the starting position of the integration (r_0 in the "contacting" state or z_0 in the "non-contacting" state); this starting position is varied until the prescribed contact angle θ is found. The family of the curves obtained when we vary the total curvature κ, is drawn in figures 6 and 7 for the two states.

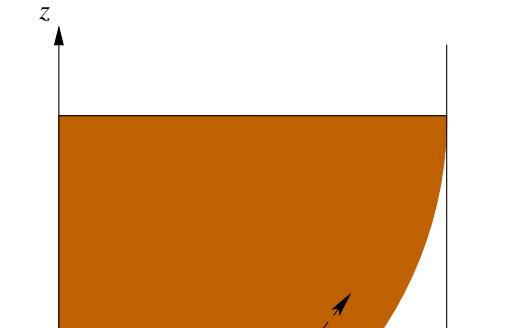


Fig. 5. A zoom of the liquid-solid interface (solid grain in brown and liquid water in blue).

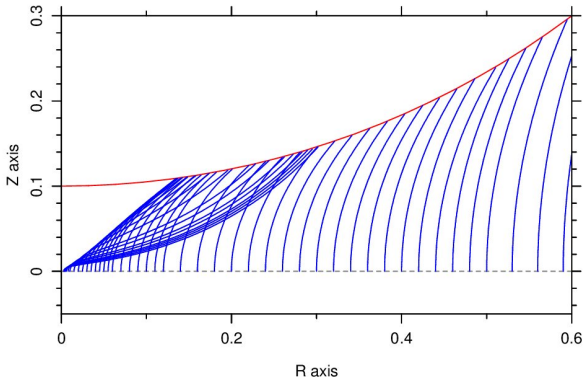


Fig. 6. This represents the family of the liquid meniscus when the volume varies, in the "contacting" state. Each curve is the boundary of the half of a bridge linking the two grains.

4 Numerical Computation of the heat flux

Solving our problem numerically appears unavoidable: some authors (resp. [10, 11]) have used analytical solutions but they are respectively restricted to an asymptotic behavior (so, adapted to a local geometrical zone) or to too crude approximations.

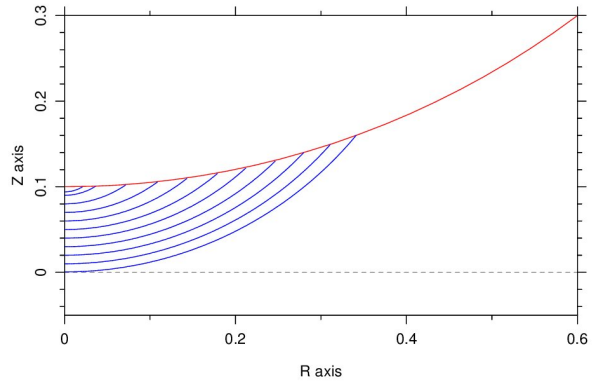


Fig. 7. This represents the family of the liquid meniscus when the volume varies, in the "non-contacting" state. Each curve is the boundary of a sessile drop, and the same symmetric drop is on the top of the other grain (not represented).

Consider the steady state heat equation in 3D axisymmetric cylindrical coordinates:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(k(r,z)\,r\,\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(k(r,z)\,\frac{\partial T}{\partial z}\right)=0 \qquad (7)$$

with homogeneous Dirichlet boundary conditions on top and bottom sides and zero Neumann boundary conditions (*i. e.* isolated conditions) on the external vertical sides. This steady state equation is solved using a Finite Volume scheme applied on a regular structure mesh of rectangular cells. The detailed discretization over an interior cell with node (i,j) is explained below:

$$\int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}}\int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(k(r,z)\,r\,\frac{\partial T}{\partial r}\right)r\,dr\,dz$$

$$=\left(\frac{k_{i,j}+k_{i+1,j}}{2}\,\frac{r_i+r_{i+1}}{2}\,\frac{T_{i+1,j}-T_{i,j}}{\Delta r}\right.$$

$$\left.-\frac{k_{i,j}+k_{i-1,j}}{2}\,\frac{r_i+r_{i-1}}{2}\,\frac{T_{i,j}-T_{i-1,j}}{\Delta r}\right)\Delta z$$

and

$$\int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}}\int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial z}\left(k(r,z)\,\frac{\partial T}{\partial z}\right)r\,dr\,dz$$

$$=\left(\frac{k_{i,j}+k_{i,j+1}}{2}\,\frac{T_{i,j+1}-T_{i,j}}{\Delta z}\right.$$

$$\left.-\frac{k_{i,j}+k_{i,j-1}}{2}\,\frac{T_{i,j}-T_{i,j-1}}{\Delta z}\right)r_i\,\Delta r$$

where Δr and Δz represents the distance between two consecutive nodes in the r and z directions respectively. $k_{i,j}$ is the value of the conductivity at the node of the specified cell – a geometric test is done to specify the nature of the cell (solid, water or air) to specify the value of the conductivity at the requested cell.

After writing the discretization on the other boundary cells, the equations will be written as a linear system and the matrix of this linear system is stored in a sparse way and the UMFPack linear sparse solver is used. Some tries have shown that a 500 by 500 mesh is required to obtain a good accuracy (see figure 9). Each numerical computation takes about few seconds on a laptop (Intel Core i7 @ 2.7 GHz).

Now we have obtained by numerical simulations the value of the temperature at the node of each cell. To calculate the heat flux that flows through our domain, we need to sum up the flux that flows through each cell on the top boundary (for example). Let (i,j) be the node of a non-corner top boundary cell (see figure 8).

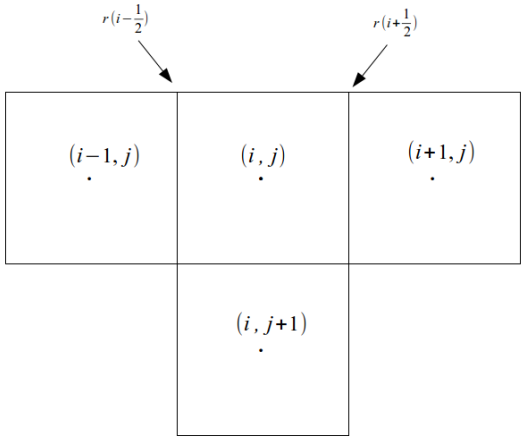


Fig. 8. A representation of a top (non-corner) cell with its neighbor cells.

The temperature gradient at cell $(i,1)$ (top boundary cell for which $j=1$) is given by:

$$\Delta T_i=\frac{T_{i,1}-T_{i,2}}{z_2-z_1}$$

Recall that $r_{i+\frac{1}{2}}=\frac{r_i+r_{i+1}}{2}$ and $r_{i-\frac{1}{2}}=\frac{r_i+r_{i-1}}{2}$ so the flux that flows through the cell with node (i,1) is:

$$q_i = \pi \frac{k_{i,1} + k_{i,2}}{2} \Delta T \left(r_{i+\frac{1}{2}}^2 - r_{i-\frac{1}{2}}^2 \right) \quad (8)$$

Finally, to calculate the total flux which flows through our computational domain we add up the flux at each top-border cell.

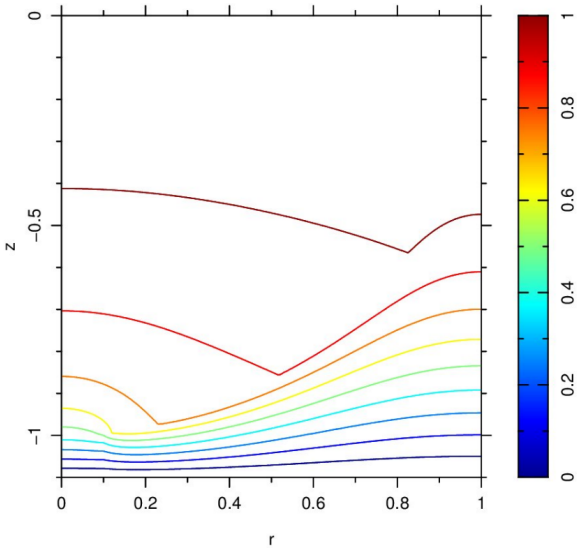


Fig. 9. Example of contour curves of the temperature obtained after a numerical computation on a 500x500 mesh, in the case $\varepsilon/R = 0.1$, $\theta = 30$ deg.

5 Heat flux with respect to water liquid volume

During the evaporation/condensation of water in a wet granular medium, the liquid volume in each elementary cell changes with time. It is interesting to know the variation of the effective thermal conductivity with respect to the liquid volume. By using the Fourier law on our computational domain, the effective thermal conductivity is proportional to the heat flux. This heat flux depends of course on the water liquid volume because, as stated in the introduction, the thermal conductivity of the water is much more important than that of the dry air. Further, we expect a jump in the heat flux curve because there are two possible geometrical configurations for the liquid meniscus (the "contacting" state and the "non-contacting" one, as described in figures 6 and 7).

The numerical values are the following:

thermal conduct. of water $k_w = 0.61\, W\, m^{-1}\, K^{-1}$
thermal conduct. of dry air $k_a = 0.024\, W\, m^{-1}\, K^{-1}$
thermal conduct. of solid $k_s = 1.52\, W\, m^{-1}\, K^{-1}$
radius of the grains $R = 1 \times 10^{-3} m$
surface tension of water $\gamma = 72 \times 10^{-3} N\, m^{-1}$

The computed heat flux is presented in figure 10, for humidity (or liquid volume) ranged from 0 to 20%. As expected, a hysteresis behavior is highlighted by our numerical computations and is more visible in figure 11 which presents an enlarged view of the previous one.

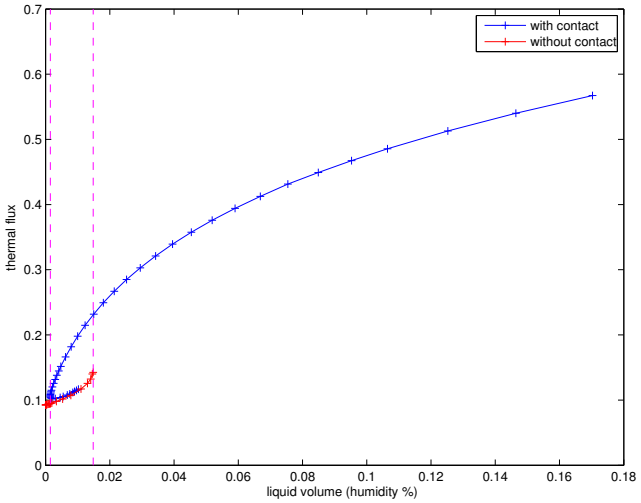


Fig. 10. Thermal heat flux w.r.t. the liquid volume, for the "contacting" state (blue) and the "non-contacting" state (red). $\varepsilon/R = 0.1$, $\theta = 30$ deg. Note the great increase in the heat flux due to the presence of water: about a factor 5 when humidity is only 20%.

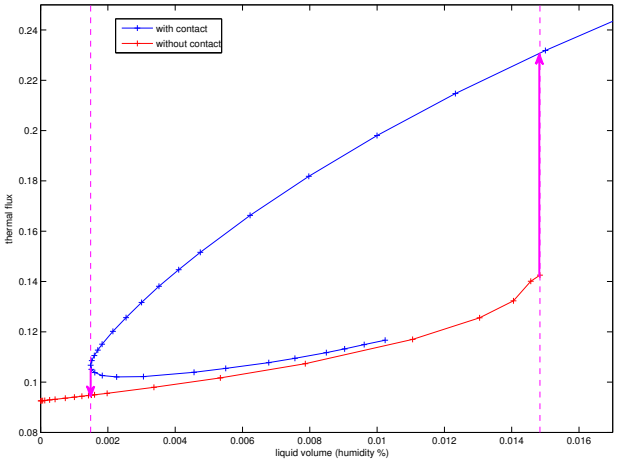


Fig. 11. This zoom of figure 10 shows with more evidence the hysteresis behavior when liquid volume is increasing or decreasing. The jump in the heat flux occurs at the magenta dashed line; this jump is more pronounced in the increasing case, *i. e.* when liquid water increases. The arrows show the direction in the hysteresis cycle.

Once the heat flux through the computational domain has been obtained, it could be very easy to deduce the effective thermal conductivity k_e by using the Fourier law applied

Table 1. Role of sphere distance ε and contact angle θ on the hysteresis

ε/R	θ (degree)	Hysteresis Length	Flux jump
0.05	10	0.0192	0.165
0.05	30	0.002027	0.041026
0.05	45	0.0008265	0.021695
0.1	10	0.10684	0.285
0.1	30	0.013434	0.0881
0.1	45	0.005633	0.048

in a global manner to our domain. Actually k_e is proportional to the heat flux so it is not necessary to present the numerical results for k_e, as the main objective of this paper is to focus on the hysteresis behavior.

The role of the parameters ε and θ is summarized in table 1. Refering to figure 11, we characterize the hysteresis by defining the two following quantities:

- the *Hysteresis Length* which is the dimension of the hysteresis cycle along the x-axis;
- the *Flux jump* which is the other dimension along the y-axis.

Table 1 shows that the hysteresis is more and more pronounced as the distance ε increases. Moreover, it is more pronounced for small contact angles. In the extreme geometrical situation where the distance ε is zero (the solid spheres are contacted themselves) the hysteresis disappears because we obtain always the "contacting" state.

Figure 12 (resp. 13) shows the variations of the heat flux curves with respect to the distance ε (resp. wrt θ). They show clearly that the influence of the distance ε is more important than that of the contact angle θ.

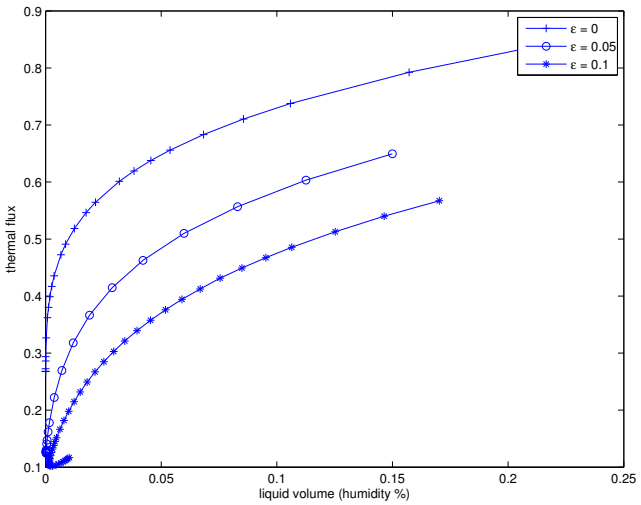


Fig. 12. Thermal heat flux w.r.t. the liquid volume, for the "contacting" state only, when $\theta = 30$ deg. The curves show the influence of the distance ε.

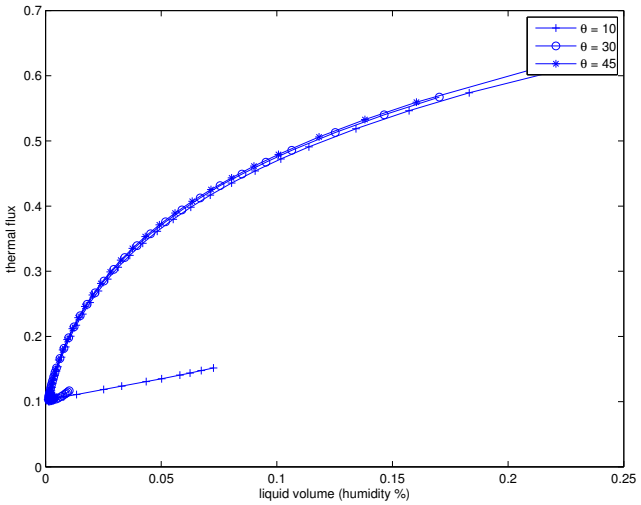


Fig. 13. Thermal heat flux w.r.t. the liquid volume, for the "contacting" state only, when $\varepsilon/R = 0.1$. The curves show the influence of the contact angle θ.

6 Conclusion

A strong hysteresis behavior for the effective thermal conductivity has been revealed when changing the humidity of a granular medium. It is due to a switch between two different geometrical configurations of the liquid meniscus attached to the two solid spheres as a bridge. The presented results are preliminary and work is in progress to obtain more advanced ones especially when other parameters are varying (contact angle θ and the gap between the grains ε). In real situations, this hysteresis behavior should remain present, despite its attenuation due the randomness characteristics of both the shape and position of the grains.

In this study, the heat transfer has been restricted to the conduction phenomenon. It is evident that, according to the problem treated, other types of transfer should be taken into account, such as *e. g.* latent heat due to evaporation/condensation at the gas-liquid interface, or radiation. This may be included in a future work.

References

[1] Ingham, D. B., and Pop, I., 2005. *Transport Phenomena in Porous Media III*. Elsevier, Oxford, UK.

[2] Bejan, A., 2004. "Design porous media". In Emerging Technologies and Techniques in Porous Media, D. B. Ingham, A. Bejan, E. Mamut, and I. Pop, eds., Kluwer, London, pp. 337–349.

[3] Chen, S. X., 2012. "Heat transfer modeling in saturated porous media and identification of the thermophysical properties of the soil by inverse problem". *J. Applied Numerical Mathematics,* **62**, pp. 1026–1040.

[4] Usowicz, B., Lipiec, J., Marczewski, W., and Ferrero, A., 2006. "Thermal conductivity modelling of terrestrial soil media – a comparative study". *Planetary and*

Space Science, **54**, pp. 1086–1095.

[5] Yun, T. S., and Santamarina, J. C., 2008. "Fundamental study of thermal conduction in dry soils". *Granular Matter,* **10**, pp. 197–207.

[6] Mitarai, N., and Nakanishi, H., 2009. "Simple model for wet granular materials with liquid clusters". *Europhysics Letters,* **88**, pp. 1–6.

[7] Mitarai, N., and Nori, F., 2006. "Wet granular materials". *Adv. Phys.,* **55**, pp. 1–45.

[8] Tro, N. J., 2011. *Chemistry: A Molecular Approach*. Prentice Hall.

[9] Guyon, É., Hulin, J.-P., Petit, L., and Mitescu, C., 2001. *Physical Hydrodynamics*. Oxford University Press.

[10] Batchelor, G. K., and O'Brien, R. W., 1977. "Thermal or electrical conduction through a granular material". *Proc. of Royal Society of London A,* **355**, pp. 313–333.

[11] Garrett, D., and Ban, H., 2011. "Compressive pressure dependent anisotropic effective thermal conductivity of granular beds". *Granular Matter,* **13**, pp. 685–696.

ASME Journal of Heat Transfer, vol. 138, n. 9, doi:10.11.15/1.4032947

Identification of the Thermophysical Properties of the Soil by Inverse Problem

Salwa Mansour
PhD student, INRIA
Campus de Beaulieu, Rennes(FR)
Email: salwa.mansour@inria.fr

Édouard Canot
CNRS researcher, IRISA
Campus de Beaulieu, Rennes(FR)
Email: edouard.canot@irisa.fr

Mohamad Muhieddine
Assistant professor, Mathematics Department
LIU, Beirut(LB)
Email: mohamad.muhieddine@liu.edu.lb

This paper is motivated by the studies of agricultural and archaeological soils. We introduce a numerical strategy to estimate the thermophysical properties of a saturated porous medium (volumetric heat capacity $(\rho C)_s$, thermal conductivity λ_s and porosity ϕ) where a phase change problem (liquid/vapor) appears due strong heating. The estimation of these properties is done by inverse problem knowing the heating curves at selected points of the medium. To solve the inverse problem, we use both the Damped Gauss Newton and the Levenberg Marquardt methods to deal with high nonlinearity of the system and to tackle the problem with large residuals. We use the method of lines, where time and space discretizations are considered separately. The space discretization is done using a vertex-centered finite volume method; the discretization in time is done via an ODE solver which uses a Backward Differentiation Formula to deal with the high nonlinearity of the system of coupled equations.

1 Introduction

The work presented in this paper is motivated by the studies of agricultural and archaeological soils. A systematic application of numerical modeling in a particular field of agriculture and archaeology which is the study of seed germination and archaeological hearths is presented. The authors introduce a numerical strategy in 1D to estimate the thermophysical properties of the soil (volumetric heat capacity $(\rho C)_s$, thermal conductivity λ_s and porosity ϕ) of a saturated porous medium where a phase change problem (liquid/vapor) appears due to intense heating from above. Usually ϕ is the true porosity, however when the soil is not saturated (which should concern most cases), ϕ may be taken equal to the part of water in the pores. This is of course an approximation which is correct for the energy balance but which neglects the capillary forces and the migration flow of the liquid inside the porous media; a complete model of such an unsaturated model is out of the scope of this paper.

The investigation of the thermal properties of the soil can have significant practical consequences such as evaluation of optimum conditions for plant growth and development and can be utilized for the control of thermal-moisture regime of soil in the field [1]. These properties influence how energy is partitioned in the soil profile so the ability to monitor them is a tool to manage the soil temperature regime that affects seed germination and growth. It can also provide information about the use of fire by ancient civilizations whether for cooking or heating... [2]. The inverse problem, presented in this paper, consists of the estimation of thermophysical properties of the soil knowing the heating history curves at selected points of the altered soil [3]. In general, the mathematical formulation of inverse problems leads to models that are typically ill-posed [4]. In such problems, we usually minimize a discrepancy between some experimental data and some model data [5]. In our problem, we use the least square criterion in which the sensitivity coefficients appear and where we try to minimize the discrepancy function which is expressed as the norm of the difference between the experimental temperature and the numerical data obtained by our approximated model [6]. The system composed of the energy equation together with three boundary initial problems resulting from differentiating the basic energy equation with respect to the three unknown parameters must be solved [7].

At the stage of numerical computations, the Damped Gauss Newton method is used to minimize the least square criterion; that requires the solution of a system of four highly nonlinear ordinary differential equations. We propose a global approach similar to that presented by [3] using also the apparent heat capacity method to deal with the phase change problem. It is important to note that in our new configuration, the solution is reached after taking into consideration the temperature history at selected points of the domain and at different time steps which was not the case in [3] where

the authors reached the solution by taking the temperature history at the final time only and at all the points in the computational domain. This approach is based on the method of lines, where time and space discretizations are considered separately. The space discretization is done using a vertex-centered finite volume method; the discretization in time is done via an ODE solver that uses a BDF scheme and a modified Newton method to deal with the high nonlinearity. The code validation stage is based on the comparison between the numerical results and the synthetic data. The advantage of our configuration to that presented by [3] is that we propose a model which is more realistic and closer to the experimental setup i.e. our synthetic data consists of the calculation of the temperature at few sensors (around 5) during the whole heating duration.

2 Forward problem

The physical problem consists of heating the soil by a fire. To model this problem, we replace the soil by a perfect porous medium with constant and uniform properties heated from above by a constant temperature T_c (temperature of the fire between 300°C and 700°C). T_c must be greater than T_v (the evaporation or phase change temperature which is normally 100°C). In order to model the heat conduction transfer in the soil, we use the energy equation and we neglect the convection term so that the energy conservation equation for the unknown temperature T is expressed as:

$$(\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}\left(\lambda_e \vec{\text{grad}} T\right) \tag{1}$$

with the following initial and boundary conditions:

$$T(x,0) = T_0(x) \text{ in } \Omega$$

$$T(x,t) = T^D(x,t) \text{ on } \Gamma^D \times (0,t_{end}] \text{ (Dirichlet)}$$

$$\nabla T(x,t).\nu = 0 \text{ on } \Gamma^N \times (0,t_{end}] \text{ (Neumann)}$$

where T represents the temperature, T_0 is the initial temperature at $t_0 = 0$, T^D is T_c at the fire and T_0 elsewhere; ρ is the density, C is the specific heat capacity, λ is the conductivity, ϕ is the porosity, the subscripts e, f and s indicate the equivalent parameters of the medium, the properties of the fluid and the porous matrix properties respectively. ν indicates the outward unit normal vector along the boundary of Ω. Note that the thermophysical properties of the fluid are temperature dependent and that is why the problem is highly nonlinear.

The effective volumetric heat capacity and the effective conductivity are defined by the equations (2) and (3):

$$(\rho C)_e = \phi(\rho C)_f + (1-\phi)(\rho C)_s \tag{2}$$

$$\frac{1}{\lambda_e} = \frac{\phi}{\lambda_f} + \frac{1-\phi}{\lambda_s} \tag{3}$$

The effective conductivity in equation (3) is calculated using the harmonic mean to test the algorithm. In real situations, the harmonic mean should be replaced by some other models.

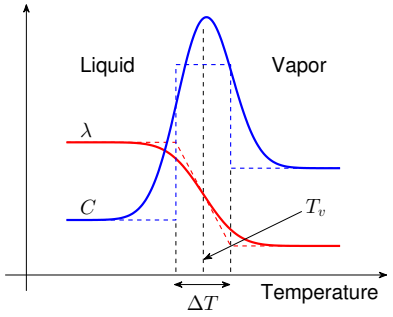


Fig. 1. Smoothed physical properties used in our model (AHC method) are in continuous lines and non-smoothed properties are in dashed lines. Smoothing is required to alleviate the singularity while differentiating the physical parameters.

To avoid the tracking of the interface of the phase change problem (liquid/vapor) which appears when the water existing in the soil turns into gas, the Apparent Heat Capacity (AHC) method is used because it allows a continuous treatment of a system involving phase transfer. In this method [8, 9], the latent heat is taken into account by integrating the heat capacity over the temperature and the computational domain is considered as one region. As the relationship between heat capacity and temperature in isothermal problems involves sudden changes, the phase change temperature interval ΔT must be given a small value with respect to the range of temperature presented in the problem (difference between initial and fire temperatures). On the other hand, the choice of ΔT has a strong effect on the accuracy of the AHC method. The singularity in the AHC method which is presented in the formulation of the thermo-physical properties defined by [8] can be treated as mentioned in [10]. The Dirac delta function, representing the equivalent heat capacity, can be approximated by the normal distribution:

$$\frac{d\sigma}{dT} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\pi}} exp\left[-\varepsilon^2 (T - T_v)^2\right] \tag{4}$$

where $\varepsilon = \frac{\sqrt{2}}{\Delta T}$ and T_v is the phase change temperature. The integration of equation (4) yields the error function approximations for the initial phase fraction.

$$\sigma(T) = \frac{1}{2}\left[1 + erf(\varepsilon(T - T_v))\right] \tag{5}$$

The functions defined by equations (4) and (5) are used in the smoothing of the thermo-physical properties as shown in equations (6), (7) and (8) (see figure 1).

$$C_f = C_l + (C_v - C_l)\sigma + L\frac{d\sigma}{dT} \tag{6}$$

$$\lambda_f = \lambda_l + (\lambda_v - \lambda_l)\sigma \tag{7}$$

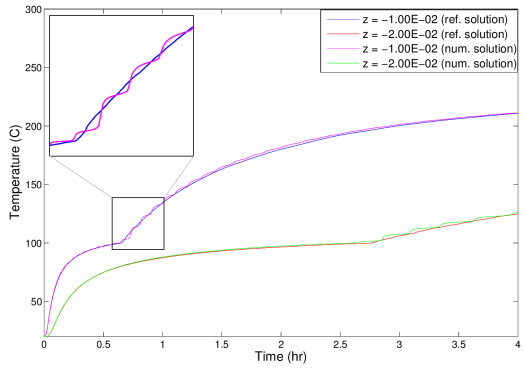


Fig. 2. Temperature history for $\frac{\Delta T}{\Delta T_{optimum}} = \frac{1}{4}$ and for 160 mesh cells. Comparison between numerical and reference solutions.

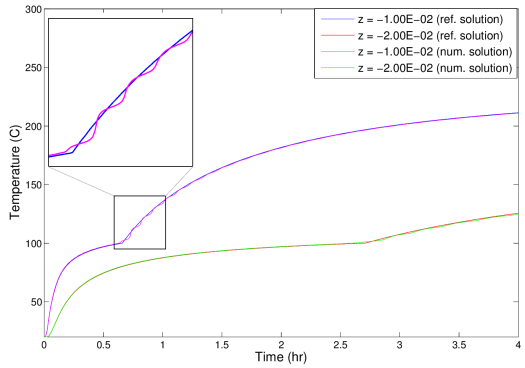


Fig. 3. Temperature history for $\Delta T = \Delta T_{optimum}$ and for 160 mesh cells. Comparison between numerical and reference solutions.

$$\rho_f = \rho_l + (\rho_v - \rho_l)\sigma \tag{8}$$

where L is the latent heat of phase change (liquid/vapor) and the subscripts l and v indicate respectively the properties of the liquid phase (water) and that of the vapor.

2.1 Choice of ΔT

As previously mentioned, the choice of the value of the phase change temperature interval ΔT has a big influence on the accuracy of the solution of the heat equation. The temperature history over two sensors and for 3 different values of ΔT is shown in figures 2, 3 and 4. The reference solution is obtained by running the forward problem with 6000 mesh cells. It seems reasonable to state that ΔT is proportional to h [9] ($\Delta T = kh$) where h is the mesh size and k is a constant chosen in a way to obtain good accuracy with fewer fluctuations in the temperature profile. The value of ΔT that insure accuracy of the solution with few fluctuations is called $\Delta T_{optimum}$. Figure 2 shows that a smaller value of ΔT ($\frac{\Delta T}{\Delta T_{optimum}} = \frac{1}{4}$) leads to significant fluctuations while an average value ($\frac{\Delta T}{\Delta T_{optimum}} = 1$) like that in figure 3 will lead to moderate fluctuations whereas for a relatively large value of ΔT ($\frac{\Delta T}{\Delta T_{optimum}} = 4$), the fluctuations disappear but the numerical solution obtained is far from the reference solution (see figure 4 and [9]).

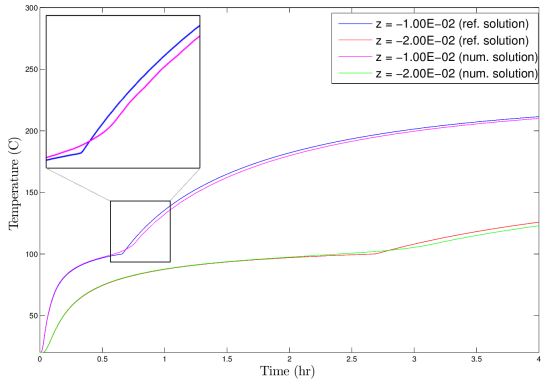


Fig. 4. Temperature history for $\frac{\Delta T}{\Delta T_{optimum}} = 4$ and for 160 mesh cells. Comparison between numerical and reference solutions.

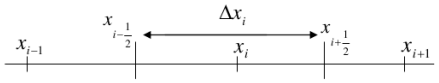


Fig. 5. 1 D control volume

2.2 Numerical strategy

We need to solve the heat diffusion equation (PDE) so we choose the method of lines which is a way of approximating PDEs by ODEs where space and time discretizations are considered separately. The spatial discretization is performed using the vertex-centered finite volume method which conserves the mass locally and preserves continuity of fluxes. To apply the spatial discretization, the computational domain is divided into a finite volume grid or mesh with equal length $h = \Delta x$ as shown in figure 5. In fact, the spatial variable is discretized into N discretization points and each state variable T is transformed into N variables corresponding to its value at each discretization point. It is important to mention that the end points of each interval ($x_{i-\frac{1}{2}}$ and $x_{i+\frac{1}{2}}$) are computed as exactly the middle of two consecutive nodes, i.e. $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})$ The spatial derivatives are approximated by using a finite volume formula on three points so we end up with a semi-discrete system of ODEs which can be written in the form:

$$\frac{dT}{dt} = B(T)T \tag{9}$$

The ODE coefficient matrix $B(T)$ has a tridiagonal structure due to the 1-D Laplacian discretization. Some tries showed that our ODE system becomes more and more stiff as h becomes smaller. The difficulty with stiff problems is the prohibitive amount of computer time required for their solution by classical ODE solution methods, such as the popular explicit Runge-Kutta and Adams methods. The reason is the excessively small step sizes that these methods must use to satisfy stability requirements due to the high non-linearity

of the apparent capacity of the fluid C_f (equation (6)). For this reason, we use an implicit ODE solver (Backward Differentiation Formula) which possesses the property of stability and therefore does not suffer from the stability step size constraint [11]. The BDF implicit scheme requires the calculation of a Jacobian matrix which is calculated and generated by a Computer Algebra System (CAS, Maple or Maxima) and then stored in a sparse format. Note that the numerical calculation is performed with `ddebdf` routine of the SLATEC Fortran library which was modified to use the UMFPACK sparse linear solver [12]. The ODE solver performs time integration by adjusting automatically the time step in the BDF scheme and all these primary libraries are grouped in the easy-to-use MUESLI library [13].

3 Inverse problem

In order to solve the parametric inverse problem consisting of finding the volumetric heat capacity $(\rho C)_s$, the conductivity λ_s and the porosity ϕ of the saturated soil, it is necessary to know the values of temperature T_{gi}^f at selected points (sensors) of the porous medium domain for times t^f: $T_{gi}^f = T_g(x_i, t^f)$ where $i = 1,2,...,M$ and $f = 1,2,...,F$. M and F are the total number of sensors and time steps respectively. We use the least squares criterion to solve this inverse problem so we try to find the soil parameters that minimize the error function which is defined by:

$$S((\rho C)_s, \phi, \lambda_s) = \frac{1}{2}\|T_i^f - T_{gi}^f\|_2^2 \tag{10}$$

where $T_i^f = T(x_i, t^f)$ are the temperatures being the solution of the direct problem for the assumed set of parameters at the point x_i, $i = 1,2,...,M$ for the time t^f, $f = 1,2,...,F$ and T_{gi}^f is the measured temperature at the same point x_i for time t^f. It is important to mention that the authors in [3] calculated the temperature at the final time only and at all the points of the domain.

3.1 Parameter scaling

In [3], the authors mentioned that the heat equation is not sensitive to the heat capacity in comparison to the other parameters and that it stagnate at its initial guess. In reality, it is due to the fact that the parameters we are investigating are of very different magnitudes so it is necessary to perform parameter scaling or otherwise many searches would not converge. Gradient search techniques generally require parameter scaling to obtain efficient search convergence [5].

The first basic rule of scaling is that the variables of the scaled problem should be of similar magnitude and of order unity in the region of interest. If typical values of the variables are known, a problem can be transformed so that the variables are all of the same order of magnitude. The most commonly used transformation is of the form :

$$p = D\tilde{p} \tag{11}$$

where p is the vector of original variables p_j, $\tilde{p}$ is the vector of scaled variables $\tilde{p_j}$ and D is a constant diagonal matrix whose diagonal elements are set to be equal to the order of magnitude of its corresponding variable. We have to keep in mind that when the variables are scaled then the derivatives of the objective function are also scaled [5].

3.2 Method of resolution

To illustrate the method of resolution, we define the following vectors:

$$T_g = \begin{pmatrix} T_{g1}^1 \\ \dots \\ T_{g1}^F \\ T_{g2}^1 \\ \dots \\ T_{g2}^F \\ \dots \\ T_{gM}^1 \\ \dots \\ T_{gM}^F \end{pmatrix} \quad g(p^{(k)}) = \begin{pmatrix} T_1^{1,(k)} \\ \dots \\ T_1^{F,(k)} \\ T_2^{1,(k)} \\ \dots \\ T_2^{F,(k)} \\ \dots \\ T_M^{1,(k)} \\ \dots \\ T_M^{F,(k)} \end{pmatrix} \quad p^{(k)} = \begin{pmatrix} (\rho C)_s^{(k)} \\ \lambda_s^{(k)} \\ \phi^{(k)} \end{pmatrix}$$

and

$$r(p^{(k)}) = g(p^{(k)}) - T_g$$

where $r(p^{(k)})$ is the residual vector at the iteration k and $N = M \times F$. In [3], the authors used the Gauss-Newton method to solve the nonlinear least square problem which fails to converge in our case when the temperature is calculated at few sensors only but for the whole simulation time due to some lack of information. Moreover, Gauss-Newton method is not locally convergent on problems that are very non-linear or have very large residuals which is the case in our problem. Since the performance of the Gauss-Newton method is strongly dependent on the residual size, we adopted the use of the Damped Gauss Newton method which is an improved version of the Gauss-Newton algorithm [5]. Damped Gauss-Newton method is known to be locally convergent on almost all nonlinear least squares problems including large residual or very nonlinear problems [6].

The cost function $S((\rho C)_s, \phi, \lambda_s)$ defined by equation (10) can be re-written as:

$$\mathrm{S}(p^{(k)}) = \frac{1}{2} r(p^{(k)})^t r(p^{(k)}) \tag{12}$$

Such necessary condition for the minimization of $S(p^{(k)})$ can be represented in equation (13):

$$\nabla S(p^k) = J(p^k) r(p^k) = 0 \tag{13}$$

where $J(p^k)_{i,j} = \dfrac{\partial r_i(p^k)}{\partial p_j^k}$, $i = 1,2,...,N$ and $j = 1,2,3$.

The sensitivity matrix, $J(p^k)$ is defined by:

$$J(p^{(k)}) = \begin{pmatrix} W_1^{1,(k)} & R_1^{1,(k)} & Z_1^{1,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_1^{F,(k)} & R_1^{F,(k)} & Z_1^{F,(k)} \\ W_2^{1,(k)} & R_2^{1,(k)} & Z_2^{1,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_2^{F,(k)} & R_2^{F,(k)} & Z_2^{F,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_M^{1,(k)} & R_M^{1,(k)} & Z_M^{1,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_M^{F,(k)} & R_M^{F,(k)} & Z_M^{F,(k)} \end{pmatrix} \tag{14}$$

The elements of the sensitivity matrix are called the Sensitivity Coefficients. The sensitivity coefficient $J_{i,j}^f$ is thus defined as the first derivative of the estimated temperature at position i and time f with respect to the unknown parameter p_j [14], that is,

$$J_{i,j}^f = \frac{\partial T_i^f}{\partial p_j} \tag{15}$$

where $W_i^{f,(k)} = \frac{\partial T_i^f}{\partial (\rho C)_s}|_{(\rho C)_s=(\rho C)_s^{(k)}}$, $R_i^{f,(k)} = \frac{\partial T_i^f}{\partial \phi}|_{\phi=\phi^{(k)}}$ and $Z_i^{f,(k)} = \frac{\partial T_i^f}{\partial \lambda_s}|_{\lambda_s=\lambda_s^{(k)}}$. The Damped Gauss Newton algorithm iteratively finds the minimum of S. Starting with an initial guess $p^{(0)}$ for the minimum, the method proceeds by the iterations:

$$p^{(k+1)} = p^{(k)} + m^{(k)} \tag{16}$$

$m^{(k)}$ is called the increment vector and is defined by:

$$m^{(k)} = -\alpha_k \left[J(p^{(k)})^t J(p^{(k)}) \right]^{-1} J(p^{(k)})^t r(p^k) \tag{17}$$

α_k is the damping parameter ($0 < \alpha_k \leq 1$). An optimal value of α_k could be obtained using a line search algorithm [5]; in our case, we used trial and error to find a suitable constant damping parameter.

3.3 Governed Equations

In the following, we present the heat equation together with the three sensitivity equations resulting from the differentiation of the heat diffusion equation (1) with respect to the soil parameters p_j.

$$\frac{\partial}{\partial p_j}\left[(\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t}\right] = \text{div}\left(\frac{\partial}{\partial p_j}\left[\lambda_e \vec{\text{grad}} T\right]\right) \tag{18}$$

which leads to the general sensitivity equation below:

$$(\rho C)_e(T)\frac{\partial U_j(x,t)}{\partial t} + \frac{d(\rho C)_e(T)}{dp_j}\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \text{div}\left(\lambda_e(T)\vec{\text{grad}} U_j(x,t)\right) + \text{div}\left(\frac{d\lambda_e(T)}{dp_j}\vec{\text{grad}} T(x,t)\right) \tag{19}$$

where $U_j = \partial T/\partial p_j$. The general sensitivity equation is accompanied with the following boundary and initial conditions:

$$\begin{aligned} t = 0: \quad & U_j(x,0) = U_{j0} = 0 \quad \text{in } \Omega \\ & U_j(x,t) = U_j^D(x,t) \quad \text{on } \Gamma^D \times (0, t_{end}] \text{ (Dirichlet)} \\ & U_j(x,t).\nu = U_j^N(x,t) \quad \text{on } \Gamma^N \times (0, t_{end}] \text{ (Neumann)} \end{aligned}$$

3.3.1 Elimination of the approximation used by [3]

In order to determine the sensitivity coefficients (W, R and Z) appearing in the sensitivity matrix, we must solve the three sensitivity equations without using the approximation:

$$\text{div}\left(\lambda_e \vec{\text{grad}} T\right) \approx \lambda_e \,\text{div}\left(\vec{\text{grad}} T\right) \tag{20}$$

used by [3] and which allowed the authors to write:

$$\frac{(\rho C)_e}{\lambda_e}\frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}\left(\vec{\text{grad}} T\right) \tag{21}$$

This approximation leads to an approximated sensitivity matrix (Jacobian) and thus the problem needs more iterations to reach the required solution. Differentiating with respect to $(\rho C)_s$, ϕ and λ_s respectively:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{(\rho C)_e}\Bigg[& \phi\rho_f\left[(C_v - C_l)\frac{d\sigma}{dT} + L\frac{d^2\sigma}{dT^2}\right]W \\ & + \phi C_f(\rho_v - \rho_l)\frac{d\sigma}{dT}W + (1-\phi)\Bigg]\frac{dT}{dt} - \frac{1}{(\rho C)_e}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_e\frac{\partial W}{\partial x}\right) \\ & - \frac{1}{(\rho C)_e}\frac{\partial}{\partial x}\Bigg[\Bigg(\frac{\lambda_s\frac{d\lambda_f}{dT}(\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_f) - (1-\phi)\frac{d\lambda_f}{dT}\lambda_f\lambda_s}{(\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_f)^2} \\ & W\Bigg)\frac{\partial T}{\partial x}\Bigg] \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial t} + \frac{1}{(\rho C)_e}\Bigg[& (\rho C)_f - (\rho C)_s \\ & + \phi\rho_f\left[(C_v - C_l)\frac{d\sigma}{dT} + L\frac{d^2\sigma}{dT^2}\right]R \\ & + \phi C_f(\rho_v - \rho_l)\frac{d\sigma}{dT}R\Bigg]\frac{dT}{dt} - \frac{1}{(\rho C)_e}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_e\frac{\partial R}{\partial x}\right) \\ & - \frac{1}{(\rho C)_e}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{E}{(\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_f)^2}\frac{\partial T}{\partial x}\right] \end{aligned} \tag{23}$$

where

$$\begin{aligned} E = & \left(\lambda_s\frac{d\lambda_f}{dT}\frac{dT}{d\phi}\right)(\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_f) \\ & - \left(\lambda_s - \lambda_f + (1-\phi)\frac{d\lambda_f}{dT}\frac{dT}{d\phi}\right)\lambda_f\lambda_s \end{aligned}$$

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{1}{(\rho C)_e}\left[\phi\rho_f\left[(C_v - C_l)\frac{d\sigma}{dT} + L\frac{d^2\sigma}{dT^2}\right]Z + \phi C_f(\rho_v - \rho_l)\frac{d\sigma}{dT}Z\right]\frac{dT}{dt} - \frac{1}{(\rho C)_e}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_e\frac{\partial Z}{\partial x}\right) - \frac{1}{(\rho C)_e}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{F}{[\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_f]^2}\frac{\partial T}{\partial x}\right) \quad (24)$$

where $F = \left[\lambda_s\frac{d\lambda_f}{dT}\frac{dT}{d\lambda_s} + \lambda_f\right][\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_f] - \left[\phi + (1-\phi)\frac{d\lambda_f}{dT}\frac{dT}{d\lambda_s}\right]\lambda_f\lambda_s$

These three sensitivity equations (22), (23) and (24) are completed with adequate initial and boundary conditions. W, R and Z are the unknowns of the sensitivity equations and T is the temperature.

3.4 Numerical strategy

The obtained system of coupled equations (heat diffusion equation + 3 sensitivity equations) is a nonlinear system of partial differential equations. To solve this system, we use the same numerical strategy used in the forward problem (method of lines + finite volume method). After spatial discretization, the system of coupled equations can be written in the form:

$$F(t, Y, Y') = 0 \text{ with } Y(t_0) = Y_0 \quad (25)$$

where $Y = (T\ W\ R\ Z)^t$. The system in equation (25) can be solved by an ODE solver as in the forward problem.

3.5 Algorithm

The aim of the inverse problem is the calculation of the vector parameters p that minimizes the cost function S presented in equation (10). The Damped Gauss Newton (DGN) algorithm that we chose to apply to our nonlinear least square problem is as follows:

1- Choose a constant damping parameter α ($0 < \alpha \leq 1$).
2- Choose an initial value $p^{(0)}$; initialize the iteration $k = 0$
3- Perform the parameters' scaling to obtain $\tilde{p}$;
4- Solve the system (heat equation with phase change + sensitivity equations) using $\tilde{p}^{(k)}$ to define the parameters of the soil. The equivalent parameters of the system are calculated by the apparent heat capacity method (AHC);
• deduce $T_i^{f,(k)}$, $\tilde{W}_i^{f,(k)}$, $\tilde{R}_i^{f,(k)}$ and $\tilde{Z}_i^{f,(k)}$ for $i = 1, ..., M$ and $f = 1, ..., F$
5- Calculate $r^{(k)}$ and the Sensitivity matrix $\tilde{J}$ knowing that $\tilde{J} = J.D$
6- Solve the linear system $\tilde{J}(\tilde{p}^{(k)})^t\tilde{J}(\tilde{p}^{(k)})\tilde{p}^{(k+1)} = \tilde{J}(\tilde{p}^{(k)})^t\tilde{J}(\tilde{p}^{(k)})\tilde{p}^{(k)} - \alpha.\tilde{J}(\tilde{p}^{(k)})^t r^{(k)}$ for $\tilde{p}^{(k+1)}$.
7- If the criteria of convergence are reached, end.
Calculate the original parameters' vector $p^{(k+1)} = D.\tilde{p}^{(k+1)}$.
If not, iterate:
$\tilde{p}^{(k)} \leftarrow \tilde{p}^{(k+1)}$ and go to 4.

3.6 Stopping criteria

Classically, there are three convergence tests used in the algorithms for nonlinear least square problems (e.g [15]). We chose to apply only two of them. The first test is the X-convergence which is based on an estimate of the distance between the current approximation x and the previous solution x* of the problem. If D is the current scaling matrix, then this convergence test attempts to guarantee that:

$$\|D(x - x^*)\| \leq XTOL.\|Dx^*\| \quad (26)$$

where XTOL is a user supplied tolerance (we used XTOL = 10^{-6}). The second test, the main convergence test, is based on an estimate of the distance between the Euclidean norm $\|F(x)\|$ of the residuals at the current approximation x and the previous value $\|F(x^*)\|$ at the previous solution x* of the problem. This convergence test (F-convergence) attempts to guarantee that:

$$\|F(x)\| \leq (1 + FTOL).\|F(x^*)\| \quad (27)$$

where FTOL is another user-supplied tolerance (we used FTOL = 10^{-6}).

3.7 Code validation

The code validation is based on choosing a plausible example where the soil parameters $\{(\rho C)_s, \phi, \lambda_s\}$ are given constant values. These values are used by the forward problem to calculate the temperature at 5 different positions of the domain (5 sensors). These temperatures are recorded every 24 seconds for 4 hours. In tables 1 and 2, we used the same number of mesh cells in the forward problem (to create the synthetic data) and in the inverse problem. In both tables, we removed the approximation (see equation (20)). In table 1, we did not use the scaling technique while we used it in table 2. The results presented in the two tables prove that scaling is an important factor to obtain the desirable results. On the other hand, if we use scaling together with the approximation (20) then we will obtain approximately the same results as those in table 2 but the number of iterations is very large (see figure 6). The figures that represent the remaining parameters are similar to figure 6. The target of our work is to perform a numerical simulation that is the closest possible to the real experimental case. For this reason, we generate

Table 1. Physical properties of the soil obtained by inverse problem **without** scaling (19 iterations).

	$(\rho C)_s$ $(J/kg.K)$	λ_s (W/m.K)	ϕ
exact	1.95×10^6	0.756	0.20
initial guess	2×10^6	0.8	0.18
calculated	2×10^6	0.7696	0.1979

Table 2. Physical properties of the soil obtained by inverse problem **with** scaling (31 iterations).

	ρC_s $(J/kg.K)$	λ_s (W/m.K)	ϕ
exact	1.95×10^6	0.756	0.20
initial guess	2×10^6	0.8	0.18
calculated	1.9497×10^6	0.7559	0.2000

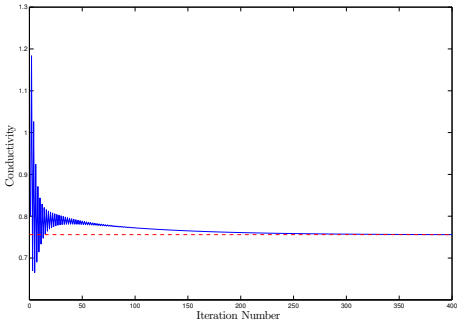


Fig. 6. Variation of λ_s as function of iteration number (using scaling and approximation 20). The red line represents the exact value of λ_s.

the synthetic data using a very large number of mesh cells (around 6000) to obtain accurate results. Thereafter, these data play the role of the experimental data in the inverse problem which is run using small number of mesh cells (40, 80, 120, 160 ...). Figure 7 represents the variation of the final residue as function of the number of mesh cells. We can easily notice that the residue decrease as number of mesh cells increase which assures the consistency of our method. Figure 8 represents the convergence of the conductivity for 120 mesh cells in the inverse problem (the figures representing the convergence of the volumetric heat capacity and porosity are similar). We notice that convergence is achieved after few tens of iterations (37 in this case).

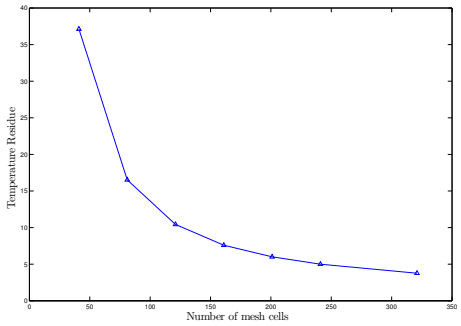


Fig. 7. Variation of residue as function of number of mesh cells. The method is consistent (the error decreases as number of mesh cells increase).

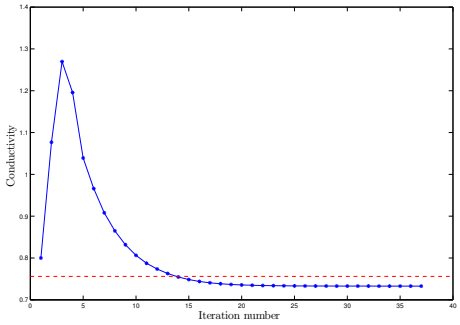


Fig. 8. Variation of the conductivity as function of iteration number. The red line represents the exact value of λ_s.

3.8 Role of ΔT

As we have seen earlier, the choice of the phase change temperature interval ΔT in the AHC method affects the temperature profile. Recall that ΔT is proportional to h [9] ($\Delta T = kh$) where h is the mesh size and k is a constant chosen in a way to obtain good accuracy with fewer fluctuations in the temperature profile. As a consequence, the value of ΔT plays an important role in the results of the inverse problem. If the initial values of parameters are far from the exact solution then the damped Gauss Newton method might not converge using the optimal value of ΔT (see subsection 2.1). To study the effect of this important parameter, we chose the example chosen earlier $\{(\rho C)_s = 1.95 \times 10^6$, $\phi = 0.2$, $\lambda_s = 0.756\}$ and we run the inverse problem using different values of ΔT with 120 as number of mesh cells. We notice that the inverse program fails to converge for $\frac{\Delta T}{kh} = 1$ or 2 and when $\frac{\Delta T}{kh} \geq 11$ whereas it converges for $3 \leq \frac{\Delta T}{kh} \leq 10$. We notice that the values of $(\rho C)_s$, ϕ and λ_s recede from the exact solution and the value of residue increases from 9.588 to 26.7198 as the value ΔT increases from $3 \times \Delta T_{optimum}$ to $10 \times \Delta T_{optimum}$ (see table 3). The results in

Table 3. Values of soil parameters and residue obtained by varying $\frac{\Delta T}{kh}$. Results become less accurate as $\frac{\Delta T}{kh}$ increases.

$\frac{\Delta T}{kh}$ \ Soil parameter	$(\rho C)_s$	λ_s	ϕ	residue
3	1.149×10^6	0.5362	0.2319	9.5889
4	8.654×10^5	0.4748	0.2436	11.5282
5	6.42×10^5	0.4306	0.2526	13.5174
7	3.351×10^5	0.3770	0.2640	18.0604
10	6.159×10^4	0.3400	0.2724	26.7198

table 3 are obtained by using $(\rho C)_s = 3 \times 10^6$, $\lambda_s = 0.4$ and $\phi = 0.12$ as initial guesses. If the results obtained in the first row ($\Delta T = 3 \times \Delta T_{optimum}$) are used as initial guesses then the inverse problem will converge to the exact values using $\Delta T_{optimum}$ if we use the same mesh size in both the forward and inverse problems and toward acceptable values if we use huge mesh size to generate the synthetic data and 120 mesh

cells in the inverse problem (check table 4).

Table 4. Physical properties of the soil obtained by inverse problem using $\Delta T = \Delta T_{optimum}$ using the calculated values in 3 as initial guesses (40 iterations).

	ρC_s $(J/kg.K)$	λ_s (W/m.K)	ϕ
exact	1.95×10^6	0.756	0.20
initial guess	1.1493×10^6	0.5362	0.2319
calculated	1.9387×10^6	0.7328	0.2001

4 Levenberg Marquardt Algorithm

In section 3, we explained that our inverse problem can be viewed as a nonlinear least square minimization problem which is solved by the Damped Gauss Newton Algorithm. In this section, we present a more robust algorithm to solve the nonlinear least square minimization problem known as Levenberg Marquardt Algorithm (LMA). LMA is the most widely used optimization algorithm for the solution of nonlinear least square problems. It outperforms simple gradient descent and other conjugate gradient methods in a wide variety of problems. It is a blend of original gradient descent and Damped Gauss Newton iteration.

4.1 Introduction to LMA

Levenberg [16] and Marquardt [17] proposed a very elegant algorithm for the numerical solution of equation (10). However, most implementations are either not robust, or do not have a solid theoretical justification. Moré [18] presented a robust and efficient implementation of a version of the Levenberg-Marquardt and show that it has strong convergence properties. In addition to robustness, the main features of this implementation are the proper use of implicitly scaled variables and the choice of the Levenberg-Marquardt parameter via a scheme due to Hebden [19]. The implementation of LMA by Moré that is contained in Minpack [15] has proven to be very successful in practice. Several factors make LMA preferable to DGN: first is that LMA possesses an embedded scaling technique, second it is well defined even when J doesn't have full column rank and finally is that when the Gauss-Newton step is too long, the Levenberg Marquardt step is close to being in the steepest-descent direction $-J^t r$ and is often superior to the DGN step. We use the LMDER1 Minpack subroutine for numerical solution of nonlinear least square problems. LMDER1 is based on Moré's LMA version where the user must provide a subroutine to calculate the functions r_1, r_2, ... r_m and the Jacobian matrix $\frac{\partial r_i(p)}{\partial p_j}$. LMDER1 follows the convergence criteria mentioned in section 3.6.

4.2 Applying LMA on our Inverse Problem: Results

Using the LMDER1 Minpack subroutine (which is embedded in the easy-to-use MUESLI library[13]) and providing the Jacobian matrix, we obtain the results summarized in table 5. The Jacobian matrix is calculated using Maple.

Table 5. Physical properties of the soil obtained by inverse problem using LMA. Scaling is used implicitly and approximation (20) is removed (11 iterations). Same number of mesh cells is used in both the forward and inverse problems.

	ρC_s $(J/kg.K)$	λ_s (W/m.K)	ϕ
exact	1.95×10^6	0.756	0.20
initial guess	2.0×10^6	0.8	0.18
calculated	1.957×10^6	0.758	0.1996

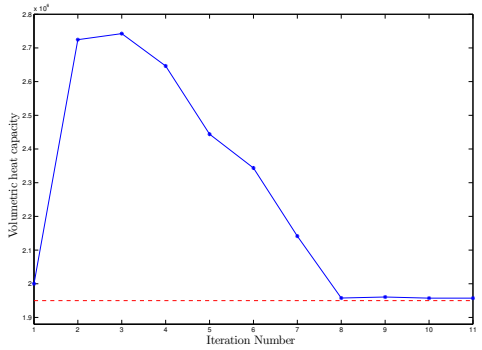


Fig. 9. Variation of the volumetric heat capacity as function of iteration number using LMA (Same number of mesh cells in both the forward and inverse problems). The red line represents the exact value of $(\rho C)_s$.

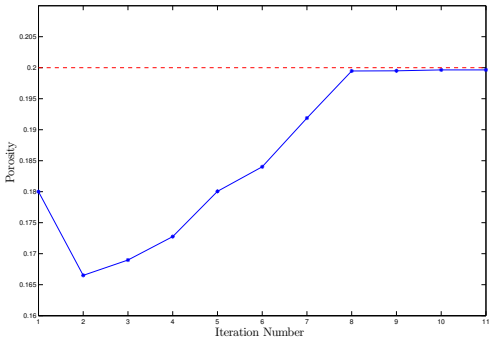


Fig. 10. Variation of the porosity as function of iteration number using LMA (Same number of mesh cells in both the forward and inverse problems). The red line represents the exact value of ϕ.

In figures 9, 10 and 11 we notice that the calculated values are very close to the exact ones due to the fact that we used same number of mesh cells in both direct and inverse problems. Moreover, we notice that convergence is obtained after about 10 iterations.

5 Conclusion

The idea of this paper was the enhancement of the inverse problem presented in [3] using a more realistic approach where we estimate the thermophysical properties of

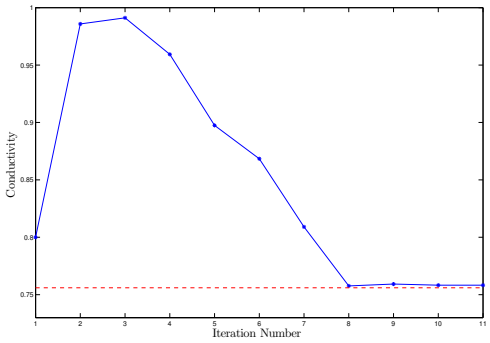


Fig. 11. Variation of the conductivity as function of iteration number using LMA (Same number of mesh cells in both the forward and inverse problems). The red line represents the exact value of λ_s.

the soil knowing the temperature history at selected points of the domain (few sensors). In order to solve this inverse problem, we used the least square criterion where we try to minimize the error function between synthetic measures and calculated ones. The coupled system composed of the energy equation together with the three sensitivity boundary initial value problems resulting from differentiating the basic energy equation with respect to the soil properties must be solved. To overcome the stiffness of our problem (due to the use of AHC method), the high nonlinearity of the coupled system and the problem of large residuals we used the Damped Gauss Newton and Levenberg-Marquardt methods. Our model is strongly similar to the experimental setup in laboratory so real experimental data could replace the synthetic data but to obtain accurate results a relatively small mesh size must be used which will lead to a high numerical cost. In addition, our configuration has the advantage that all soil parameters including the volumetric heat capacity converges to the required exact solution which was not the case in any previous work since we adopted a variable-scaling technique and we removed the approximation (see equation (20)) which leads to an exact sensitivity matrix (Jacobian) and thus reducing the number of iterations till convergence. Moreover, we emphasized on the importance of the choice of ΔT where for a certain initial guess the inverse problem fails to converge. We overcome this problem by chaining the inverse problems using different values of ΔT and parameters' set. The method presented in this paper can be easily applied to 2D and 3D configurations.

References

[1] Landunjoye, M. A., Sanuade, O. A., and Olaojo, A. A., 2013. "Variability of soil thermal properties of a seasonally cultivated agricultural teaching and research farm". *Global Journal of Science Frontier Research Agriculture and Veterinary,* **13**, pp. 40–64.

[2] Eckmeier, E., 2007. "Detecting prehistoric fire-based farming using biogeochemical markers". Doctoral thesis, University of Zurich, Faculty of Science.

[3] Muhieddine, M., Canot, É., and March, R., 2012. "Heat transfer modeling in saturated porous media and identification of the thermophysical properties of the soil by inverse problem". *J. Applied Numerical Mathematics,* **62**, pp. 1026–1040.

[4] Engl, H. W., and Kugler, P., 2005. "Nonlinear inverse problems: theoretical aspects and some industrial applications". *Multidisciplinary Methods for Analysis, Optimization and Control of Complex systems,* **6**, pp. 3–47.

[5] Dennis, J. E., and Schnabel, R. B., 1983. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. Prentice-Hall, INC. New Jersey.

[6] Björck, A., 1990. *Numerical methods for least squares problems*. Siam.

[7] Majchrzak, E., Mochnaki, B., and Suchy, J., 2008. "Identification of substitute thermal capacity of solidifying alloy". *Journal of Theoretical and Applied Mechanics,* **46**(2), pp. 257–268.

[8] Bonacina, C., and Comini, G., 1973. "Numerical solution of phase-change problems". *Int. J. Heat Mass Transfer,* **16**, pp. 1825–1832.

[9] Muhieddine, M., Canot, É., and March, R., 2009. "Various approaches for solving problems in heat conduction with phase change". *International Journal on Finite Volumes,* **6**(1), pp. 1–20.

[10] Civan, F., and Sliepcevich, C. M., 1987. "Limitation in the apparent heat capacity formulation for heat transfer with phase change". In proc. Okla. Acad. Sci. 67, pp. 83–88.

[11] Hindmarsh, A. C., 1993. Description and use of LSODE, the Livermore solver for ordinary differential equations. Report 113855, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA.

[12] Davis, T. A., 2004. "Algorithm 832: Umfpack, an unsymmetric-pattern multifrontal method". *ACM Transactions on Mathematical Software,* **30**(2), pp. 196–199.

[13] Canot, É. *Muesli Reference Manual - Fortran 95 implementation*. Available at https://perso.univ-rennes1.fr/edouard.canot/muesli, version of August 2014.

[14] Ozisik, M. N., and Orlande, H. R. B., 2000. *Inverse heat transfer*. Taylor and Francis.

[15] Moré, J. J., Garbow, B. S., and Hillstrom, K. E., 1980. User guide for MINPACK-1. Report ANL-80-74, Argonne National Laboratory.

[16] Levenberg, K., 1944. "A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares". *Quarterly of Applied Mathematics,* **2**, pp. 164–168.

[17] Marquardt, D. W., 1963. "An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters". *SIAM Journal of Applied Mathematics,* **11**, pp. 431–441.

[18] Moré, J. J., 1978. "The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory". *Numerical Analysis, Lecture Notes in Mathematics, Springer, Berlin,* **630**.

[19] Hebden, M., 1973. An algorithm for minimization using exact second derivatives. Report TP515, Atomic Energy Research Establishment, Harwell, England.