

N° d'ordre: 3928

# THÈSE

présentée

devant l'Université de Rennes 1

pour obtenir

le grade de : DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE RENNES 1  
Mention INFORMATIQUE

par

Mohamad MUHIEDDINE

Équipe d'accueil : Sage - IRISA  
École Doctorale : Matisse  
Composante universitaire : IFSIC

Titre de la thèse :

*Simulation numérique des structures de combustion préhistoriques*

À soutenir le 16 octobre 2009 devant la commission d'examen

M. :		Président	
MM. :	Fayssal	BENKHALDOUN	Rapporteurs
	Christian	MOYNE	
MM. :	Édouard	CANOT	Examineurs
	Ramiro	MARCH	
	Jocelyne	ERHEL	
	Rémi	ABGRALL	
	Juan Carlos	FERRERI	



*-La flamme peut détruire. - Maîtrisée, elle illumine.*  
par Christian JACQ  
Extrait de *Le juge d'Egypte*





# Remerciements

Je tiens tout d'abord à exprimer ma profonde reconnaissance à mes directeurs de thèse, Madame Jocelyne Erhel directrice de recherche INRIA, M. Édouard Canot chercheur CNRS à l'IRISA et M. Ramiro March chercheur CNRS à l'Université de Rennes 1, de m'avoir proposé un sujet aussi passionnant.

Je remercie Édouard Canot pour m'avoir encadré durant cette thèse, pour tous ses conseils, ses encouragements et sa disponibilité. Sa passion et son dynamisme ont été contagieux. Ces quelques lignes restent insuffisantes pour témoigner toute ma gratitude et mon amitié.

Je remercie Jocelyne Erhel de m'avoir accueilli au sein de l'équipe SAGE. Je suis reconnaissant de toute l'aide précieuse qu'elle a pu m'apporter notamment au moment de la rédaction. Elle m'a fait profiter au mieux de ses remarquables qualités scientifiques.

Je remercie Ramiro MARCH, qui est à l'origine de cette thèse, pour ses suggestions et ses remarques pertinentes et constructives. En outre, j'ai vivement apprécié l'opportunité qu'il m'a donné pour participer aux fouilles archéologiques à Pincevent. Ses suggestions et sa confiance ont beaucoup contribué à la réalisation de ce travail.

L'ensemble de ces intervenants m'a permis d'être initié et formé à la recherche, de plus par leur intermédiaire, j'ai pu avoir de nombreux contacts dans la communauté scientifique.

En effet, grâce à leurs encouragements et soutiens permanents, j'ai pu concrétiser et valoriser mes travaux par plusieurs publications et par la participation à des manifestations scientifiques. De ce fait, je leur témoigne de ma sincère gratitude. Leur enthousiasme est pour moi un exemple dont je m'inspirerai dans mes projets futurs.

Je tiens aussi à remercier M. Fayssal Benkhaldoun Professeur à l'Université de Paris 13 et M. Christian Moyne directeur de recherche CNRS au LEMTA à Nancy d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse; cela a été pour moi un plaisir et un honneur.

Je remercie également M. Rémi Abgrall Professeur à l'Université de Bordeaux 1 et M. Juan Carlos Ferreri directeur du centre nucléaire en Argentine d'avoir accepté d'être membres du Jury de la soutenance de thèse.

Je remercie M. Renaud Delannay pour son aide et pour les discussions très enrichissantes que nous avons eues sur le sujet de la thèse.

Je remercie l'équipe SAGE que j'ai côtoyée pendant ces trois ans; je cite particulièrement Bernard, Nadir, Caroline, Désiré, Julia, Amine, Guy, Noha, Mohamed.

Je n'oublie pas de remercier chaleureusement mes collègues de bureau que j'ai

côtoyés pendant cette période : Samih et Baptiste.

Je tiens à remercier également tout le personnel administratif de l'IRISA et spécialement Cécile et Fabienne.

Un grand merci à mes amis qui étaient et restent ma grande famille à Rennes. Ils étaient toujours à côté de moi, grâce à eux je n'ai pas senti à un moment que j'étais dépaycé. Lorsque j'avais besoin d'un proche et d'un frère il y avait Ayman à côté de moi, d'une soeur il y avait Hanan, pour râler et discuter il y avait Bilal, pour oublier le stress il y avait Maher, pour passer des moments inoubliables entre amis il y avait Ghighi et Elise. Comment pourrais-je oublier tous les beaux moments avec Majd et Abdullah, mon partenaire à la musculation Zein, le Coca avec mon voisin Alaadine, les grands repas avec Ayad, ...Ma première année en France ne pouvait être sans Kansou la personne avec qui je suis arrivé en France et avec qui j'ai étudié tout au long de mon cursus universitaire. Je ne pourrai jamais citer tout le monde mais j'aimerais les remercier tous du fond du cœur pour leur soutien moral dans les moments difficiles.

Enfin, j'adresse mes plus profonds remerciements à mes parents. Tout au long de mon cursus, ils m'ont toujours soutenu, encouragé et aidé. Ils ont su me donner toutes les chances pour réussir.



# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>1</b>
<b>Table des matières</b>	<b>3</b>
<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>1 Équations physiques</b>	<b>13</b>
1.1 Caractérisation d'un milieu poreux . . . . .	13
1.1.1 Définition du milieu poreux . . . . .	13
1.1.2 paramètres . . . . .	14
1.2 Modélisation . . . . .	16
1.2.1 Équation de conservation de la masse . . . . .	16
1.2.2 Équation de conservation de l'énergie . . . . .	17
1.2.3 Écoulement du fluide . . . . .	18
1.3 Autres phénomènes non pris en compte . . . . .	19
1.3.1 Phénomène de radiation . . . . .	19
1.3.2 Phénomène de capillarité . . . . .	20
1.3.3 Convection naturelle . . . . .	22
<b>2 Le problème de Stefan</b>	<b>25</b>
2.1 Revue bibliographique . . . . .	26
2.2 Modélisation mathématiques en 1D . . . . .	28
2.2.1 Équations et conditions aux bords . . . . .	29
2.3 Solutions analytiques . . . . .	30
2.4 Méthodes numériques . . . . .	30
2.5 Résolution avec la méthode d'accumulation de chaleur latente . . . . .	32
2.5.1 Modèle basique et maillage uniforme . . . . .	34
2.5.2 Amélioration du modèle avec raffinement récursive de maillage . . . . .	35
2.5.3 Conservation de l'énergie par la technique "insertion/suppression" des nœuds. . . . .	36
2.5.4 Résultats et conséquences . . . . .	37
2.6 Méthode de capacité apparente . . . . .	38
2.6.1 Résolution globale par la méthode des lignes . . . . .	42
2.6.2 Solveur ODE . . . . .	43

2.6.3	Résultats et commentaires . . . . .	46
2.7	Comparaison entre les deux méthodes . . . . .	46
<b>3</b>	<b>Transfert de chaleur avec changement de phase</b>	<b>51</b>
3.1	Évaporation dans le milieu poreux . . . . .	53
3.2	Méthodes numériques . . . . .	56
3.3	Résolution globale par un solveur ODE . . . . .	56
3.3.1	Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie (3.1) en 1D . . . . .	57
3.3.2	Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie (3.1) en 3D-axisymétrique . . . . .	58
3.3.3	Résolution globale par la méthode des lignes . . . . .	59
3.3.4	Logiciel implémenté . . . . .	59
3.4	Résolution avec les éléments finis mixtes hybrides . . . . .	59
3.4.1	La formulation mixte hybride . . . . .	61
3.4.2	Discrétisation spatiale de la loi de Fourier . . . . .	62
3.4.3	Discrétisation spatiale de l'équation de continuité . . . . .	64
3.4.4	Méthode numérique . . . . .	64
3.4.5	Algorithme de résolution . . . . .	66
3.4.6	Logiciel . . . . .	66
3.5	Essais numériques . . . . .	67
3.5.1	Diffusion de la chaleur dans un milieu poreux non saturé . . . . .	68
3.5.2	Fusion de la glace dans un domaine carré par DIFFUSE-3D dans sa version 2D . . . . .	69
3.5.3	Effet de la radiation . . . . .	72
3.6	Conclusion . . . . .	73
<b>4</b>	<b>Transferts couplés de chaleur et de fluide dans les milieux poreux : Modélisation et étude numérique</b>	<b>75</b>
4.1	Le problème physique . . . . .	76
4.2	Méthodes numériques . . . . .	79
4.3	Discrétisation spatiale en volumes finis . . . . .	80
4.3.1	Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie dans le système (4.9) en 1D . . . . .	81
4.3.2	Discrétisation spatiale de l'équation d'écoulement dans le système (4.9) en 1D . . . . .	82
4.3.3	Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie dans le système (4.9) en 3D-axisymétrique . . . . .	83
4.3.4	Discrétisation spatiale de l'équation d'écoulement dans le système (4.9) en 3D-axisymétrique . . . . .	85
4.4	Système algébrique à résoudre . . . . .	86
4.5	Index des systèmes différentiels algébriques (DAE) . . . . .	87
4.6	Résolution de systèmes DAE . . . . .	88
4.6.1	Calcul de condition initiale d'un système DAE . . . . .	88
4.6.2	Algorithmes et stratégies utilisés dans DASSL . . . . .	88
4.6.3	Fonction et Jacobien . . . . .	89

4.7	Logiciel implémenté . . . . .	90
4.8	Expériences numériques . . . . .	91
4.8.1	Performances et coûts . . . . .	91
4.8.2	Effet de couplage avec l'écoulement de gaz . . . . .	91
4.9	Conclusion . . . . .	93
<b>5</b>	<b>Simulation du feu préhistorique : Cas tests et exploitation</b>	<b>95</b>
5.1	Études expérimentales . . . . .	95
5.1.1	Le site de Pincevent . . . . .	96
5.1.2	Approche méthodologique . . . . .	96
5.2	Confrontations des résultats numériques avec les expériences . . . . .	99
5.2.1	Code DIFFUSE-SC . . . . .	99
5.2.2	Code DIFFUSE-C . . . . .	103
5.2.3	Code DIFFUSE-3D . . . . .	105
5.3	Foyer expérimental de l'âge du bronze . . . . .	108
5.4	Détermination du temps minimal de fonctionnement des structures de combustion . . . . .	111
5.5	Conclusion . . . . .	115
<b>6</b>	<b>Détermination des paramètres physiques du sol par problème inverse</b>	<b>117</b>
6.1	Revue bibliographique . . . . .	119
6.2	Formulation du problème inverse par moindres carrés . . . . .	120
6.2.1	Difficultés des problèmes inverses . . . . .	121
6.3	Algorithmes locaux et globaux . . . . .	121
6.4	Résolution du problème à moindres carrés . . . . .	122
6.4.1	Méthodes de type Newton . . . . .	123
6.4.2	Méthode de Gauss-Newton . . . . .	125
6.5	Méthodes de calcul du gradient et du Jacobien . . . . .	126
6.5.1	Les différences finies . . . . .	126
6.5.2	Les fonctions de sensibilité . . . . .	126
6.5.3	La méthode de l'état adjoint . . . . .	127
6.6	Choix de la méthode et résolution du problème . . . . .	128
6.6.1	Résolution numérique du système (6.47) . . . . .	132
6.6.2	Algorithme de résolution général . . . . .	132
6.7	Organisation générale du logiciel implémenté . . . . .	133
6.8	Validation numérique . . . . .	133
6.9	Conclusion . . . . .	138
	<b>Bibliographie</b>	<b>151</b>
	<b>Table des figures</b>	<b>153</b>



# Introduction

“Le feu a été volé à la nature par l’homme qui l’a utilisé et transmis ; parce qu’il a domestiqué le feu, l’homme 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” [MAR95b]. Globalement, le feu a été perçu par l’homme de diverses façons en fonction des conditionnements historiques et culturels de chaque époque. Divers auteurs ont envisagé d’étudier les différents aspects de l’histoire de cet objet (le feu) et sa représentation par des approches variées, de l’anthropologie à la psychologie et à l’épistémologie. Des ouvrages comme celui de Hough “Fire as an agent in human culture” (1928) ou de Frazer, sur les mythes sur l’origine du feu (1931), “La Psychanalyse du Feu” de Bachelard (1967), “Le Cru et le Cuit” de Lévi-Strauss (1964), “La préhistoire du Feu” de Catherine Perlès (1977), “Fire and civilisation” de Johan Goudsblom (1992) sont autant d’exemples clairs des rapports existant entre l’histoire de ce phénomène et de sa représentation.

Dans le cadre de l’opposition homme-nature, le feu traduit la reconnaissance d’un saut hiérarchique dans l’évolution humaine (perspective évolutive) [MAR02]. En effet, le feu occupe une place essentielle 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 les conséquences.

D’un point de vue archéologique, un problème se greffe immédiatement : les objets étudiés dans leur conformation actuelle offrent des “indices” à interpréter, l’organisation de ces indices est le fruit des comportements humains et des facteurs taphonomiques, et chaque association de vestiges répond à une histoire particulière qui va dans 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, il faut enlever les indices qui ne sont que des “bruits de fond” brouillant notre vision du passé [MAR96]. Il importe, pour cela, d’établir une méthode qui permette d’améliorer la compréhension des comportements humains liés à l’utilisation du feu, et de leur évolution au sein des stratégies adaptatives et modes de production tels que mis en œuvre par différents groupes, ce à partir de l’étude des “structures de combustion” archéologiques, et la compréhension de la source d’énergie utilisée par l’homme.

Pour pouvoir atteindre cet objectif, il fallait comprendre la nature de chaque structure de combustion étudiée en essayant de répondre à ces questions [MAR95b] :

- *Quelle était la forme des foyers ?*
- *Quel était leur mode de fonctionnement ?*
- *Quelle était leur fonction ?*
- *Quelle était leur durée d'utilisation ?*

Les informations obtenues viennent alors nourrir une vision plus complexe des comportements humains liés au feu. Puis, à terme, l'interprétation de chaque épisode particulier est intégrée à la problématique générale des sites étudiés participant ainsi à l'enrichissement de notre connaissance des comportements culturels des hommes du passé. Ainsi, en entrecroisant les études de la forme originale des foyers, de leur mode de fonctionnement et des éventuelles fonctions, nous pouvons mieux comprendre la nature évolutive des structures archéologiques. Il devient alors possible de reconstruire les utilisations successives de certains foyers et les modifications qu'ils ont subit : cuisson, chauffage, éclairage, etc...

Nous présentons dans cette thèse quelques-unes des directions de recherche effectuées sur ce programme : la détermination du temps minimal de fonctionnement de foyers ainsi que l'histoire thermique de chaque structure de combustion et la détermination des propriétés physiques des divers types de foyers. Le temps minimal d'utilisation des foyers contribue de façon indirecte à évaluer le temps d'occupation de chaque unité d'habitation et à établir une logique interne dans la chronologie d'utilisation de chaque zone d'habitat lorsque d'autres moyens d'analyse (liaisons spatiales et époques de chasse) ont mis en évidence l'existence d'un véritable campement regroupant plusieurs installations. Cette évaluation du temps minimal de fonctionnement, permet aussi de déceler des réaménagements des structures de combustion et, par conséquent, de montrer l'évolution des activités au cours de l'occupation. L'étude des foyers apporte donc de nouvelles interprétations des habitats et des comparaisons synchroniques, diachroniques et régionales. En revanche, la détermination des propriétés physiques est hors de la préoccupation des archéologues mais elle nous sert à valider les méthodes de problème inverse.

Le calcul de la durée minimale de combustion des foyers préhistoriques permet de déterminer en premier lieu les différents modes de fonctionnement : combustions courtes ou prolongées sont évaluées de façon précise grâce au développement d'un modèle numérique qui simule l'état de fonctionnement des foyers sur des milieux très divers (sols sableux, limoneux, argilo-limoneux...). Il permet ainsi de simuler les phénomènes d'évaporation d'eau observés dans les sédiments.

Les recherches présentées ici ont été orientées dans deux directions principales. La première s'appuie sur le développement et l'application de modèles mathématiques numériques en utilisant des données expérimentales obtenues par une analyse de foyers expérimentaux et des structures de combustion archéologiques. À partir des données expérimentales, nous essayons de reconstituer l'histoire thermique de chaque foyer, non seulement pour l'étude des foyers en eux-mêmes, mais surtout pour mieux approcher la durée approximative de chaque occupation préhistorique. Dans ce sens, le modèle donne une approximation de chaque durée de fonctionnement des caractéristiques de chaque foyer. La connaissance des températures atteintes par les foyers préhistoriques est une donnée fondamentale pour l'application des modèles qui calculent à partir de

ces températures le temps nécessaire pour obtenir les volumes des thermoaltérations reconnues (volumes de matière altérés par l'action du feu). Les foyers étudiés sont des foyers à plat et des foyers en cuvettes avec des géométries relativement simples.

La deuxième est celle de la vérification expérimentale des codes développés. Il s'ouvre aujourd'hui la possibilité d'envisager des simulations virtuelles des structures de combustion à partir des comportements déjà connus et des vestiges archéologiques. Ainsi, il fallait établir des protocoles d'expérimentation similaires à ceux déjà mis en place pour les études des comportements thermiques. Cela permettait d'objectiver les résultats atteints aujourd'hui afin de pouvoir constituer une base de données large nous permettant de tirer parti des processus taphonomiques sous différents climats et dans différentes régions, dans une perspective écologique.

Notre projet est donc mené dans le cadre de recherches liées "L'homme et le feu, vers une compréhension de l'évolution dans la maîtrise de l'énergie thermique et ses conséquences, techniques, culturelles et paléo-environnementales". Dans ce contexte nous nous intéressons au développement d'approches physiques et de simulations numériques pour comprendre le mode de fonctionnement des structures de combustion préhistoriques. Ce domaine de recherche a pour objectif de comprendre les comportements humains des chasseurs-cueilleurs liés à l'utilisation du feu et de rechercher une première méthode de détermination de la durée d'occupation de leurs campements par une voie alternative : celle de la physique des milieux poreux.

### Un peu d'histoire...

Pour connaître la durée minimale des foyers archéologiques étudiés, Laloy et Massard [LM84] avaient déjà travaillé sur une méthode analytique unidimensionnelle, qu'ils proposaient d'utiliser comme "chronomètre paléothermique" à partir de l'altération des sols du gisement magdalénien d'Étiolles. Cependant, du fait leur mode d'analyse du phénomène, son application se voit limitée à déterminer la durée de fonctionnement des foyers à plat et parce que leur modèle n'est applicable qu'à des profondeurs très faibles par rapport au diamètre du feu.

Min et Emmons [ME72] ont obtenu des résultats intéressants dans une expérience de séchage contrôlée. L'expérience consiste à étudier le transfert de la chaleur en 1D, avec un flux thermique imposé sur la surface, alors que les autres faces étaient maintenues thermiquement isolées. Les auteurs déclarent que l'apparition d'un plateau dans les courbes d'histoire de la température est une indication de la présence d'un mécanisme autre que le simple transfert de chaleur (possibilité de convection naturelle et phénomène de capillarité). Cependant, comme leur système était chauffé uniformément sur la surface, les auteurs ne s'attendaient pas à une forte convection de fluide.

Parallèlement, sans connaître leurs travaux, March et Ferreri ont orienté leurs recherches vers la reconstruction de différentes formes de foyers sur différents types de substrat, de façon à déterminer la régularité du phénomène. Ils ont travaillé sur des substrats très divers allant des amas coquilliers jusqu'aux sols sableux en passant par des sols argileux limoneux [OYP96, MF87, MF, MAR95b, FM96, MAR96]. Ces auteurs ont élaboré un modèle numérique à deux dimensions par la méthode des différences finies

[GF89, FF78, FM96], qui reproduit le comportement thermique expérimental de façon assez satisfaisante pour des sols sédimentaires secs, et à partir duquel ils ont pu obtenir les premières estimations de la durée de fonctionnement des foyers préhistoriques simples ou en cuvettes. Ce modèle, qui nécessite de connaître l'altération du sol sous-jacent, a été vérifié par des confrontations avec les expériences. À partir des données d'altération observées, le modèle nous indique quel est le temps minimal nécessaire pour que cette altération se produise. Il est absolument indispensable de connaître aussi les températures nécessaires pour les transformations thermophysiques de certains sédiments ainsi que les caractéristiques du milieu où s'est passé le phénomène d'altération. Dans les premières applications, il semblerait qu'il ne soit pas nécessaire de considérer les effets d'humidité parce que les sols ont été composés des coquilles de moules suffisamment aérées. Dans ce cas il était seulement nécessaire de simuler les propriétés équivalentes du sol sec, sous l'hypothèse restrictive qu'il n'y a pas de mouvement d'air. En revanche, quand on s'intéresse aux sols argileux de Pincevent et Etiolles (sites archéologiques au sud de Paris), il faut considérer l'effet de l'eau.

Dans le but de développer leur code de simulation, ils ont décidé d'employer la technique des différences finies basée sur la transformation des coordonnées qui permet de considérer des grilles variables adaptées automatiquement aux bords de formes arbitraires. Cette approche facilite l'application des conditions aux bords (BCs) et possède plusieurs applications technologiques. La technique est documentée dans plusieurs articles par Ferreri et autres collaborateurs par exemple [FF78, GF89]. On peut dire que, en général, il est recommandé de considérer les grilles possédant des lignes normales sur les faces de domaine, juste pour faciliter la considération des conditions aux bords du flux de chaleur.

La prise en compte de l'humidité dans le sol exige un choix d'une méthode appropriée pour simuler le processus de changement de phase. Les paramètres déterminant les propriétés thermodynamiques du sol sont la capacité thermique, la densité, la conductivité, la porosité et la teneur du sol en eau. Bien que leur code comporte de grands avantages, il comporte aussi certains inconvénients ; en particulier, la méthode numérique utilisée est très difficile à généraliser au cas 3D.

Les substrats étudiés (amas coquilliers, sols sableux, sols argileux limoneux) sont généralement assimilables à des milieux poreux de composition et de géométrie plus ou moins complexes. Ils contiennent naturellement une certaine quantité d'eau liquide, celle-ci pouvant être absorbée par les surfaces solides ou être "libre" [ACB03], en équilibre avec la phase vapeur. Lors d'une élévation de température, le milieu est le siège de phénomènes de transferts de chaleur et de masse qui demandent à être minutieusement examinés. Ces phénomènes requièrent les propriétés d'équilibre de nombreux corps, l'analyse du transport par capillarité, la diffusion en phase gazeuse, la conductivité thermique équivalente des corps poreux humides, ainsi que l'analyse de nombreuses situations physiques.

## Le plan

Dans cette thèse nous nous sommes intéressés au problème de la propagation de chaleur dans les milieux poreux saturés de l'eau avec suivi d'un front de zone sèche/humide.

En particulier, la manière choisie pour traduire le changement de phase liquide/gaz sera confrontée avec celle résultante d'autres modèles similaires dans la littérature. Une bonne prise en compte de ce changement de phase permet l'introduction de l'écoulement de la vapeur d'eau (gaz) dans la matrice poreuse du sol. Cela conduira alors à un couplage écoulement/diffusion. Un second objectif sera de déterminer les propriétés physiques du sol par problème inverse en se basant sur les altérations produites par le feu ainsi que la durée de fonctionnement des feux préhistoriques.

Nous rappelons dans le chapitre 1 quelques modèles physiques et mathématiques qui régissent la diffusion de la chaleur ainsi que l'écoulement des fluides dans les milieux poreux saturés.

Le travail du second chapitre porte sur la résolution de problèmes de changement de phase en 1D lorsque le seul mode de transfert de chaleur est la conduction. On ne considère que les changements de phase solide-liquide (fusion) à une température donnée. Le schéma numérique qu'on utilise est la méthode des volumes finis et en incorporant deux approches de résolutions différentes pour le changement de phase : "l'accumulation de chaleur latente" et "la méthode de capacité apparente". Des résultats numériques en 1D sont présentés et confrontés à des solutions analytiques. Ensuite, une comparaison entre les deux approches est effectuée. Les résultats obtenus dans ce chapitre ont été publiés dans [MC08], [MMM09a].

Dans le chapitre suivant, consacré à la thermique des milieux poreux, nous discutons d'abord les processus de transfert de chaleur dans les milieux saturés et les propriétés qui y sont reliées. Nous ferons ensuite la description du système où le processus qui domine le transfert de chaleur est la conduction thermique (l'advection des fluides est supposée négligeable). Une description précise du phénomène d'évaporation dans les sols nécessite de prendre en compte la complexité géométrique des structures étudiées. Dans ce chapitre, on développe et compare deux approches numériques différentes pour discrétiser le système d'équations décrivant la diffusion de la chaleur avec changement de phase sur des maillages structurés et non structurés à une, deux et trois dimensions. Les deux approches sont basées sur la méthode de capacité apparente. Nous rappelons les deux approches numériques principales concernant la discrétisation spatiale, la première approche étudiée est une approche par volumes finis ; nous avons développé le code en dimension un, deux et 3D-axisymétrique sur des maillages structurés uniformes. La seconde approche consiste à utiliser les fonctions de base de l'espace de Raviart-Thomas de plus bas degré pour évaluer les termes diffusifs du système d'équations aux dérivées partielles. On utilise différents types de maillages non structurés, pleinement 3D, permettant de modéliser des structures géologiques de géométrie quelconque. Enfin, on présente une comparaison entre les deux approches numériques proposées. Les résultats obtenus dans ce chapitre ont été publiés dans [MMM08] et [MMM09b].

Dans le chapitre 4, on étudie le problème de couplage entre le transfert de chaleur et l'écoulement de la vapeur d'eau dans les milieux poreux saturés. On propose une approche de résolution globale basée sur la méthode de capacité apparente pour prendre en compte le phénomène de changement de phase et une discrétisation spatiale avec la méthode des volumes finis sur des maillages structurés (1D et 3D-axisymétrique) conduisant à la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles algébriques.

L'intégration en temps est effectuée par un solveur d'équations algébriques (DAE) via une méthode BDF (Backward Differentiation Formula). De plus, le traitement de la forte non linéarité présente dans le système d'équations est effectué par l'utilisation d'une variante de la méthode de Newton implémentée dans le solveur DAE. L'effet du couplage est montré à la fin de ce chapitre.

Le chapitre suivant porte sur la validation des différents codes développés. Une approche expérimentale est proposée pour reproduire le comportement thermique du foyer sur le site archéologique de Pincevent. Ensuite, des comparaisons entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux sont présentées.

Le dernier chapitre concerne la résolution du problème inverse qui consiste à rechercher les valeurs inconnues des propriétés du modèle (appelées paramètres) en utilisant les variables d'état du système (température) connues aux points de mesure. L'équation générale de diffusion est donc résolue de manière à identifier les paramètres qui permettent de simuler les températures observées. On parle alors de procédure d'identification des paramètres. Les résultats de ce chapitre ont été publiés dans [\[MMM09c\]](#).

# Chapitre 1

## Équations physiques

Dans ce chapitre, nous définissons les caractéristiques rhéologiques des milieux poreux ainsi qu'une modélisation physique de notre problème.

### 1.1 Caractérisation d'un milieu poreux

On rappelle succinctement, les différentes grandeurs caractéristiques du milieu poreux.

#### 1.1.1 Définition du milieu poreux

Le milieu poreux est composé d'une matrice solide, à l'intérieur de laquelle se trouve des pores (ces pores sont normalement reliés entre eux ; ceux éventuellement isolés ne participent pas à l'écoulement du fluide). On peut distinguer :

- les matrices solides non consolidées où la phase solide est formée de grains (par exemple le sable, le gravier, billes de verre, d'acier, les lits de particules pas encore fluidisés...);
- les matrices solides consolidées (par exemple les roches calcaires, le grès, l'argile, le bois, tissu biologique...).

Les pores permettent l'écoulement d'un ou plusieurs fluides. On peut alors classer les problèmes rencontrés, suivant les phases en présence à l'intérieur des pores :

1. le milieu est saturé d'un seul fluide ou encore un ensemble de fluides miscibles (par exemple un sol imbibé d'eau).
2. le milieu est composé de plusieurs fluides non miscibles. Un ensemble de ménisques sépare alors les différentes phases (par exemple un mélange eau-huile-gaz dans les roches pétrolifères, ou un sol partiellement saturé d'eau, le deuxième composant étant l'air).
3. le milieu est le siège d'un transport de fluide et de particules solides. Il agit en général comme un filtre, mais ses propriétés hydrodynamiques se modifient au cours du temps (dépollution des eaux contenant de grosses particules par percolation à travers le sol).

Dans le cadre de cette étude nous nous limiterons au cas 1.

### 1.1.2 paramètres

**Volume Élémentaire Représentatif (V.E.R) :** L'échelle du pore  $d$  varie généralement de  $0.05 \mu m$  pour les nanopores, à  $0.5 mm$  pour les macropores. Par ailleurs, la distribution des pores et des grains est généralement très irrégulière. À cette échelle, la pression, la vitesse et la température varient donc très irrégulièrement d'un point à l'autre du domaine. On est donc amené à effectuer une moyenne spatiale de ces grandeurs. Elles ont pour but d'éliminer les fluctuations à l'échelle du pore, mais pas les fluctuations à l'échelle macroscopique du milieu poreux  $L$ . Cette moyenne s'effectue donc sur des nombreux pores par l'intermédiaire d'un *Volume Élémentaire Représentatif* V.E.R du milieu (voir figure 1.1). De plus, l'échelle  $l$  du V.E.R doit vérifier :

$$d \ll l \ll L$$

On obtient donc les grandeurs caractéristiques de la vitesse, la pression et la température,

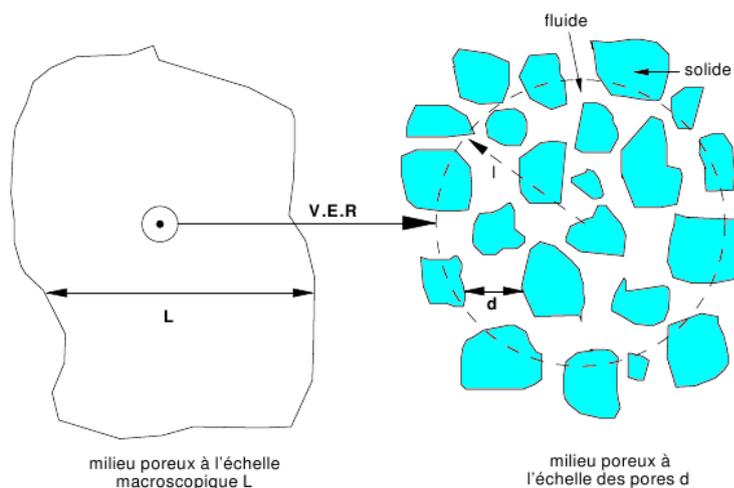


FIG. 1.1 – La figure illustre la taille intermédiaire  $l$  du Volume Élémentaire Représentatif (V.E.R) entre la taille du milieu poreux à l'échelle macroscopique  $L$  et à l'échelle des pores  $d$ .

en les moyennant sur le V.E.R. Cela permet de représenter un point dans un nouveau milieu continu fictif par changement d'échelle. Il est équivalent au domaine poreux étudié mais à l'échelle macroscopique. Lorsque les propriétés locales, définies sur le V.E.R, sont indépendantes de la position de celui-ci, le milieu est dit homogène, à l'échelle macroscopique. Dans la suite, sauf cas particulier, toutes les grandeurs (pression, vitesse, température) apparaissant dans les différents modèles seront définies sur le V.E.R.

Grains de silice	0.65
Poudre d'ardoise noire	0.57-0.66
Argile	0.10-0.15
Granulats de pierres	0.44 - 0.45
Terre	0.43-0.54
Sable	0.37-0.50
Poudre de silice	0.37-0.49
Sphères bien empilées	0.36-0.43
Filtre de cigarettes	0.17-0.49
Briques	0.12-0.34
Poudre de cuivre	0.09-0.34
Pierre à chaud, Dolomite	0.4-0.1
Houille	0.02-0.07

TAB. 1.1 – Porosité de quelques matériaux.

**Porosité :** La *porosité*  $\phi$  est définie comme le rapport du volume de vide occupé par les pores, sur le volume total soit :

$$\phi = \frac{\text{volume des pores}}{\text{volume total}}$$

La proportion occupée par la matrice solide est donc donnée par  $1 - \phi$ . En fait  $\phi$  est plus exactement appelé *porosité totale*. En effet, cette définition prend en compte les pores fermés.

Des mesures expérimentales faites par Kaviany [KAV95] donnent dans le tableau (1.1) ci dessous quelques valeurs de la porosité pour différents matériaux.

**Conductivité thermique :** La conductivité thermique  $k$  d'un sol humide peut être déterminée par la méthode de la sonde cylindrique [B77], [DEL82]. Cette méthode consiste à dissiper un échelon de puissance dans un cylindre placé dans le sol et à relever l'évolution de la température.

La conductivité thermique des sols varie avec le contenu d'humidité dans une proportion de 1 à 5 entre un sol sec et un sol saturé. La conductivité fluctue donc selon la saison en fonction des précipitations et des conditions locales.

**Perméabilité :** La perméabilité  $K$  se réfère à la capacité du milieu poreux à laisser passer le ou les fluides à l'intérieur des pores. Elle ne dépend que de la géométrie de la matrice solide (sa topologie), en particulier de la porosité. Ainsi, le milieu est d'autant plus perméable que les pores sont fortement connectés entre eux. Généralement,  $K$  est déterminé par des mesures expérimentales, par le biais de la loi de Darcy (établie plus bas en (1.6)) régissant le mouvement du fluide dans le milieu poreux. Il existe de nombreux travaux répertoriant la perméabilité pour différents milieux. On pourra

consulter le livre [NB99], pour trouver quelques valeurs de  $K$ , elles se situent entre  $10^{-7} - 10^{-9}$  pour le gravier et  $10^{-13} - 10^{-16} m^2$  pour l'argile stratifiée.

## 1.2 Modélisation

On considère une couche poreuse horizontale infinie, isotrope et homogène d'épaisseur  $H$ . Cette couche est saturée d'eau, en état stationnaire. La paroi supérieure est chauffée sur une largeur  $L$  à la température  $T_w$  alors que la paroi inférieure est maintenue à une température  $T_0 < T_w$ .

Le fluide a une viscosité dynamique  $\mu_f$ , une masse volumique  $\rho_f$ , et une conductivité thermique  $k_f$ .

On introduit alors la vitesse de filtration  $V_f$ , moyenne de la vitesse du fluide sur tout le V.E.R c'est à dire pores remplis + solides. On peut également définir la vitesse interstitielle  $V_i$  qui représente la vitesse moyenne du fluide mais à l'intérieur de pores. La relation de Dupuit-Forchheimer permet de relier les 2 grandeurs :

$$V_f = \phi V_i$$

où  $\phi$  est la porosité.

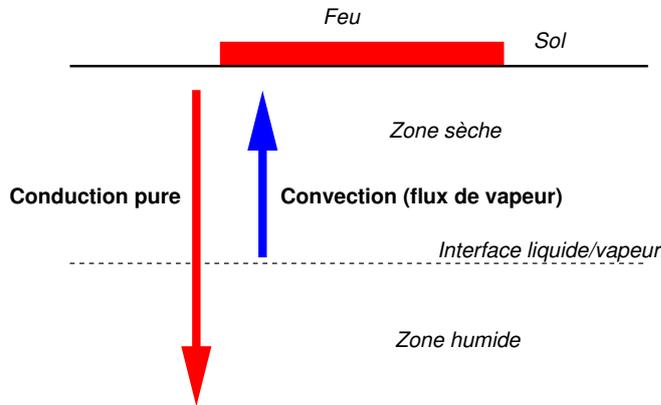


FIG. 1.2 – Description schématique du problème.

### 1.2.1 Équation de conservation de la masse

L'équation de conservation de la masse implique que la divergence du flux de masse est égale au changement d'emménagement avec le temps, s'il n'y a pas de source de gaz dans le système :

$$\frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} + \text{div}(\rho_f V_f) = 0 \quad (1.1)$$

Le terme d'emmagasinement peut être explicité comme suit si on suppose que le milieu poreux est incompressible, c'est-à-dire si la porosité demeure constante :

$$\frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} = \phi\frac{\partial\rho_f}{\partial t} + \rho_f\frac{\partial\phi}{\partial t} \simeq \phi\frac{\partial\rho_f}{\partial t} \quad (1.2)$$

$\rho_f$  reste variable car il peut s'agir de la vapeur d'eau.

### 1.2.2 Équation de conservation de l'énergie

Le transfert de chaleur est assuré à la fois par la phase fluide et la phase solide. Or ces deux phases ne possèdent ni la même capacité thermique (respectivement  $(\rho C)_f$  pour la phase fluide et  $(\rho C)_s$  pour la matrice solide), ni la même conductivité thermique (respectivement  $k_f, k_s$ ). Pour cette raison et dans le but de tenir compte du transfert de chaleur lié à la présence des 2 phases, Combarnous et Bories [MC74] avaient proposé un modèle à deux équations d'énergie décrivant l'évolution de la température des deux phases :

$$\phi(\rho C)_f\frac{\partial T_f}{\partial t} + (\rho C)_f\phi\vec{V}_i\cdot\nabla T_f = \text{div}[k_f^*\nabla T_f] - h(T_f - T_s) \quad (1.3)$$

$$(1 - \phi)(\rho C)_s\frac{\partial T_s}{\partial t} = \text{div}[k_s^*\nabla T_s] - h(T_s - T_f) \quad (1.4)$$

avec  $T_{f,s}$  désignant la température, moyennée sur un V.E.R, les indices  $f$  et  $s$  désignant la partie fluide et la matrice solide respectivement. Au regard de (1.3) et (1.4), on constate que si  $T_s > T_f$ , soit  $T_s - T_f > 0$ , le transfert de chaleur est compté positivement de la matrice solide vers la phase fluide.

Les scalaires  $k_s^*$  et  $k_f^*$  sont des coefficients de conductivité thermique équivalente et dépendent<sup>1</sup> des coefficients de conductivité thermique propre  $k_f$  et  $k_s$  et de la porosité  $\phi$ . Ils dépendent aussi d'autres paramètres :

- pour  $k_f^*$ , de la dispersion hydrodynamique due à la présence du squelette solide,
- pour  $k_s^*$ , de l'état de division de la phase solide.

Le coefficient de transfert entre les 2 phases,  $h$ , dépend, par analyse dimensionnelle :

- des caractéristiques thermiques de la phase fluide et de la matrice solide (conductivité et chaleur volumique),
- de la porosité  $\phi$ ,
- d'une dimension caractéristique du milieu poreux par exemple  $\sqrt{K}$  avec  $K$  la perméabilité ou alors la taille d'un pore, d'un grain ou d'une fibre.

$h$  peut-être déterminé expérimentalement de manière indirecte [NB99].

Lorsque l'on suppose l'équilibre thermique entre la phase fluide et la matrice solide on a alors  $T_f = T_s$  (le coefficient de transfert  $h$  tend vers l'infini). Sa justification repose sur la comparaison des temps caractéristiques de mise à l'équilibre thermique du milieu poreux. Pour les modèles tels que  $10^{-2} < k_s/k_f < 10^{-3}$ , on observe qu'au cours d'un processus transitoire, l'écart maximal entre les températures moyennes adimensionnées de chaque phase est de l'ordre de 10%.

<sup>1</sup>si le milieu est isotrope ce sont des scalaires ; si le milieu est anisotrope, ce sont des tenseurs, par hypothèse ils sont sphériques.

On en déduit par sommation terme à terme des équations (1.3) et (1.4), le modèle de transfert de chaleur le plus couramment utilisé pour les milieux poreux (équation de transport-diffusion) :

$$(\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho C)_f \vec{V}_f \cdot \vec{\nabla} T = \text{div} \left[ k^* \vec{\nabla} T \right] \quad (1.5)$$

avec  $T$  la température équivalente du milieu poreux,  $(\rho C)_e = \phi(\rho C)_f + (1 - \phi)(\rho C)_s$  la chaleur spécifique volumique équivalente (car il y a additivité des enthalpies donc des chaleurs spécifiques volumiques) et  $k^* = k_f^* + k_s^*$ . Généralement,  $k^*$  est mesuré expérimentalement mais il dépend de la température. On peut quand même en donner une approximation assez simple. Parmi les modèles les plus usuels [PM04], on distingue :

- les modèles séries  $k^\perp$ , définis par un milieu constitué de strates de solide et de fluide perpendiculaire au transfert de chaleur, on obtient :

$$k^\perp = \phi k_f + (1 - \phi) k_s$$

- les modèles parallèles  $k^\parallel$ , définis par un milieu constitué de strates de solide et de fluide parallèles au transfert de chaleur, on obtient :

$$\frac{1}{k^\parallel} = \frac{\phi}{k_f} + \frac{1 - \phi}{k_s}$$

Ces approximations permettent d'encadrer  $k$  :

$$k^\perp < k^* < k^\parallel$$

On choisit le second modèle  $k^\parallel$  qui supporte mieux les changements brusques de valeurs de conductivité [PM04].

### 1.2.3 Écoulement du fluide

Quand une région chauffée du sol atteint  $100^\circ\text{C}$ , l'eau qui se trouve dans le sol se transforme en vapeur. Pour résoudre analytiquement ou numériquement les problèmes d'écoulement des gaz, il faut d'abord déterminer les équations différentielles qui représentent ce processus (voir figure 1.2). La détermination des équations différentielles implique la prise en compte des équations représentant la conservation de la masse avec une loi de comportement. Tout d'abord, pour modéliser le mouvement de fluide en milieu poreux, on utilise la loi de Darcy.

**Loi de Darcy :** La dynamique des fluides homogènes dans les milieux poreux, est décrite par la loi de Darcy [DAR56], établie en 1856 sur des fondements expérimentaux. Cette loi, établie à partir d'écoulements unidirectionnels sur des colonnes de sables, a mis en évidence la proportionnalité du gradient de pression appliqué et le débit d'eau traversant le milieu poreux considéré. Depuis, la loi de Darcy a été étendue aux écoulements multidirectionnels. Elle s'écrit :

$$\vec{\nabla} P = -\frac{\mu_f}{K} \vec{V}_f \quad (1.6)$$

où  $\vec{V}_f$  est la vitesse de filtration,  $\mu_f$  est la viscosité dynamique du fluide,  $K$  est la perméabilité du milieu poreux et  $\vec{\nabla}P$  est le gradient de pression appliqué.

Mais la loi de Darcy, encore largement utilisée, s'est avérée insuffisante. Parmi ses insuffisances le fait qu'elle ne peut pas traduire l'influence de la nature du fluide sur l'écoulement notamment près des parois. En effet, avec ce modèle, la condition de non glissement aux parois est retenue quel que soit le fluide considéré. Cette équation ne tient pas en compte d'éventuels effets inertiels. En revanche, dans le cadre de notre étude l'effet inertiel n'est pas important et donc la loi de Darcy (1.6) suffit pour décrire l'écoulement.

**Équation de l'écoulement des gaz en milieu poreux :** Le terme de divergence des flux peut être également explicité en y introduisant la loi de Darcy (1.6). La perméabilité  $K$  peut être sortie de l'expression de la divergence si c'est un scalaire, c'est-à-dire lorsque le milieu est isotrope. Sinon, dans un milieu anisotrope,  $K$  est un tenseur qui ne peut être sorti de l'opérateur de divergence. Alors dans le cas général de l'écoulement en trois dimensions dans une formation isotrope où  $K$  est un scalaire, on a la forme générale suivante :

$$\frac{\phi\mu_f}{K\rho_f} \frac{\partial\rho_f}{\partial t} = \text{div} \left( \vec{\text{grad}}P \right) - \frac{1}{\mu_f} \vec{\text{grad}}\mu_f \cdot \vec{\text{grad}}P + \frac{1}{\rho_f} \vec{\text{grad}}\rho_f \cdot \vec{\text{grad}}P \quad (1.7)$$

## 1.3 Autres phénomènes non pris en compte

### 1.3.1 Phénomène de radiation

La radiation est un phénomène de transfert de chaleur par des ondes électromagnétiques dans l'espace. En fait, la radiation peut être prise en compte en introduisant un terme source dans l'équation d'énergie de la façon suivante [MSP05] :

$$(\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho C)_f \vec{V}_f \cdot \vec{\nabla}T - \text{div} \left[ k_e \vec{\nabla}T \right] = - \int_{\nu_0}^{\infty} \int_{\mathbb{S}^2} \eta(B(T, \nu) - I) d\omega d\nu \quad (1.8)$$

où  $I(\nu, x, w)$  représente l'intensité spectrale de la fréquence  $\nu$  au point  $x$  dans la direction  $w \in \mathbb{S}^2$ , et où  $\mathbb{S}$  est la sphère unité.

L'intensité spectrale est donnée par l'équation du transfert radiatif isotropique :

$$\forall \nu > \nu_0 : w \cdot \nabla I + (\zeta + \eta)I = \frac{\zeta}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} I d\omega + \eta B(T, \nu) \quad (1.9)$$

où  $\eta(\nu)$  est le coefficient d'absorption,  $\zeta(\nu)$  est le coefficient de diffusion et  $B(T, \nu)$  est l'intensité spectrale de la radiation du corps noir donnée par la relation de Planck

$$B(T, \nu) = \frac{2h\nu^3}{c_0^2} (e^{h\nu/cT} - 1)^{-1} \quad (1.10)$$

où  $h$ ,  $c$  et  $c_0$  sont respectivement la constante de Planck, la constante de Boltzmann et la vitesse de propagation des ondes dans le vide.

### 1.3.2 Phénomène de capillarité

**Tension de surface :** L'interface liquide-vapeur possède une propriété appelée tension de surface. Ce phénomène résulte des forces intermoléculaires qui agissent sur les molécules de la pellicule contractile, et qui sont les forces qui agissent à l'intérieur de l'eau où la somme des forces est nulle en moyenne.

Une molécule placée dans l'eau est soumise à des forces égales dans toutes les directions : il n'y a donc pas déséquilibre des forces (voir figure 1.3). Au niveau de la pellicule contractile en revanche, une molécule d'eau subit l'action d'une force vers l'intérieur du liquide ; afin d'être en équilibre, l'interface génère une tension élastique tout le long de la pellicule. La propriété de l'interface qui lui permet d'exercer cette tension est appelée la tension de surface  $F_s$  ; c'est la tension par unité de longueur de la pellicule ( $N/m$ ). Elle est tangente à l'interface et sa valeur décroît quand la température augmente.

La tension de surface permet d'assimiler le comportement de la pellicule à celui d'une membrane élastique. Celle-ci présente une courbure concave vers les plus grandes pressions et doit exercer une tension pour rétablir son équilibre. Les pressions agissant sur la membrane sont  $P$  à l'extérieur et  $P + \Delta P$  à l'intérieur ( $\Delta P$  est la surpression côté concave). La membrane a donc un rayon de courbure  $R_s$  et une tension de surface  $F_s$  ; les forces horizontales s'équilibrent entre elles (voir figure 1.4).

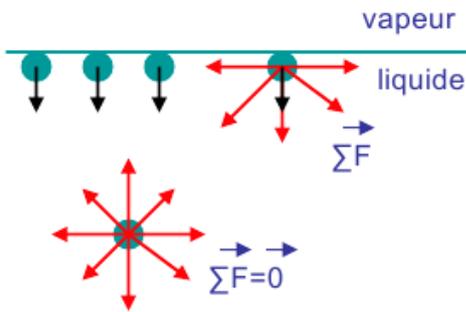


FIG. 1.3 – Tension de surface. Forces intermoléculaires sur la pellicule contractile et dans l'eau.

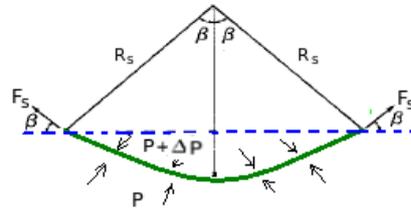


FIG. 1.4 – Pressions et tension de surface agissant sur la pellicule en deux dimensions.

L'écriture de l'équilibre des forces verticales donne l'équation

$$2F_s \sin\beta = 2\Delta P R_s \sin\beta \quad (1.11)$$

où  $2R_s \sin\beta$  est la longueur de la membrane projetée sur un plan horizontal et  $\beta$  est l'angle entre  $F_s$  et le plan horizontal.

Soit encore l'équation en 2D :

$$\Delta P = \frac{F_s}{R_s} \quad (1.12)$$

et pour une analyse 3D d'une membrane où le rayon de courbure est le même dans

toutes les directions du plan, on a l'équation :

$$\Delta P = \frac{2F_s}{R_s} \quad (1.13)$$

Dans notre cas où l'eau et le vapeur coexistent dans le sol, la pellicule contractile est sujette à la pression de vapeur  $P_v$ , qui est plus grande que la pression des pores de l'eau  $P_l$ . La différence de pressions,  $P_v - P_l$  est appelée la succion matricielle et est définie par l'équation du modèle capillaire de Laplace :

$$P_v - P_l = \frac{2F_s}{R_s} \quad (1.14)$$

Ainsi, la succion matricielle est définie comme la différence entre les pressions de vapeur et d'eau des pores.

Plus la succion matricielle du sol augmente, plus le rayon de courbure diminue. La pellicule contractile courbée est aussi appelée ménisque. Lorsque la différence de pression tend vers zéro, le rayon de courbure tend vers l'infini : ainsi une interface vapeur-eau plate existe même pour une succion proche de zéro. Dans la pratique,  $R_s$  est associé au diamètre des pores d'un sol ; ainsi plus le diamètre effectif est petit, plus les forces capillaires (par conséquent la succion) développées seront élevées. Ce sont les forces capillaires qui font que l'eau dans les pores devient sous tension.

**Capillarité :** Le phénomène de capillarité est associé à la succion matricielle. L'augmentation de la hauteur d'eau et le rayon de courbure influencent directement l'allure de la courbe de rétention d'eau du sol appelée aussi courbe caractéristique sol-eau.

Considérons un petit tube de verre plongé dans l'eau sous condition atmosphérique (voir figure (1.5)). L'eau monte dans le tube par l'action de la tension de surface sur la pellicule contractile et par la tendance de l'eau à vouloir mouiller la surface de verre. Ce comportement capillaire s'explique par la tension de surface,  $F_s$  agissant sur la conférence du ménisque, sous un angle  $\theta$  qui mesure le contact liquide-solide du mouillage, à partir de la verticale. Cet angle est appelé angle de contact et son amplitude dépend de l'adhésion entre les molécules de la pellicule contractile et le verre.

On considère maintenant l'équilibre des forces verticales de l'eau dans le tube capillaire. La résultante verticale de la tension de surface avec le poids de la colonne d'eau, de hauteur  $h$

$$2\pi F_s \cos\theta = \pi r^2 h \rho_l g \quad (1.15)$$

où  $r$  est le rayon du tube capillaire,  $\theta$  est l'angle de contact,  $g$  est l'accélération gravitationnelle,  $F_s$  est la tension de surface de l'eau,  $h$  est la hauteur capillaire et  $\rho_l$  est la masse volumique de l'eau.

L'équation suivante peut alors donner la hauteur maximum dans le tube capillaire (on a considéré le fluide mouillant parfaitement le solide, donnant un angle  $\theta$  nul) :

$$h = \frac{2F_s}{\rho_l g R_s} \quad (1.16)$$

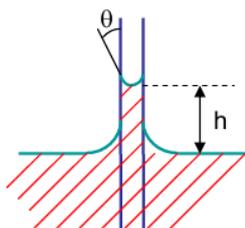


FIG. 1.5 – Phénomène de capillarité dans un tube plongé dans l'eau.

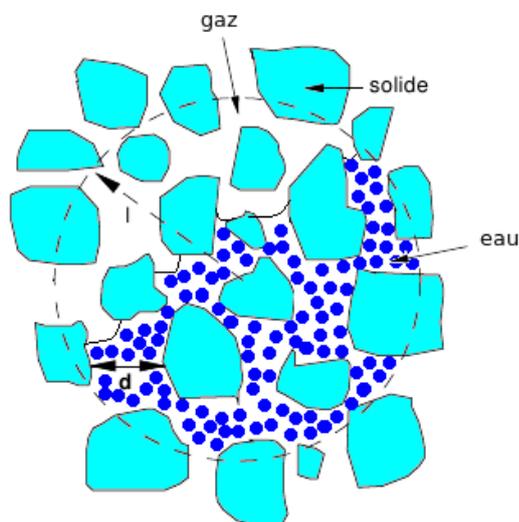


FIG. 1.6 – Milieu poreux à l'échelle des pores  $d$ .

où  $R_s$  est le rayon de courbure de ménisque. C'est la loi de Jurin.

Le rayon du tube peut être assimilé au rayon des pores du sol. Ainsi, plus le rayon des pores est petit plus la hauteur capillaire est grande.

Dans notre problème, la capillarité pourrait avoir un rôle important, en empêchant l'isotherme  $100^\circ\text{C}$  de se propager en profondeur. En effet, au fur et à mesure que le flux de chaleur assèche le sol, l'eau pourrait remonter par capillarité. Cependant, la capillarité ne sera pas pris en compte dans ce travail.

### 1.3.3 Convection naturelle

La convection naturelle, au sens classique, implique toujours la prise en compte de la gravité. En fait, les mouvements convectifs sont créés par des forces de poussée d'Archimède lorsque des zones fluides deviennent plus légères que d'autres ; les zones légères montent, les zones lourdes descendent à cause de la différence de densité qui peut être due :

- à la chaleur (la plupart des fluides augmentent légèrement leur volume lorsqu'ils sont chauffés) ;
- à une concentration de soluté hétérogène. Par exemple, l'eau salée est plus lourde que l'eau douce (voir par exemple l'intrusion d'eau salée dans une nappe phréatique d'eau douce [DIE08]).

En général, la situation d'un fluide chauffé par le bas est sujette au développement de la convection naturelle (instabilité de Rayleigh-Bénard) ; ce cas là a été abondamment étudié.

Dans notre situation, le fluide est chauffé par le haut, donnant ainsi une configuration stable empêchant (ou limitant fortement) les mouvements de convection naturelle (voir figure (1.7)).

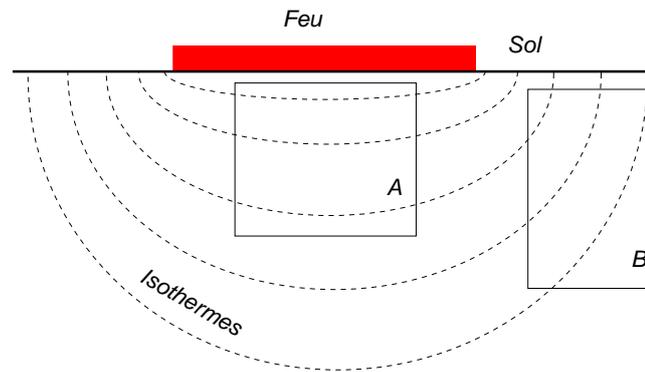


FIG. 1.7 – Zone A : pas de convection naturelle possible. Zone B : convection naturelle possible.

Le paramètre adimensionnel clé est le nombre de Rayleigh :

$$Ra = \frac{g\beta\Delta T K L}{\nu\alpha} \quad (1.17)$$

où  $g$  est la gravité,  $\beta$  est le coefficient d'expansion thermique,  $K$  est la perméabilité,  $L$  est une longueur caractéristique,  $\nu$  est la viscosité cinématique,  $\alpha$  est la diffusivité thermique du milieu et  $\Delta T$  une différence de température. Ce nombre peut s'interpréter comme le rapport des forces de poussée d'Archimède sur les forces de frottement (par dissipation visqueuse). Ainsi, pour un nombre  $Ra$  très faible, il n'y aura pas de convection naturelle, le frottement l'emportant sur la poussée d'Archimède.

Angirasa & Peterson [AP98], ont étudié numériquement une telle configuration (sans changement de phase, toutefois). Leurs résultats numériques révèlent, comme on pouvait s'y attendre, une inhibition totale de la convection naturelle dans la zone A. En revanche, elle est la plus forte près de la zone B.

Différentes simulations, produites pour des Rayleigh allant de 50 à 1000, montrent que les isothermes sont repoussées vers le haut ; de plus, l'intensité des mouvements convectifs croît dans le même sens que  $Ra$ .

En prenant les valeurs numériques des différentes propriétés de notre problème, on calcule :

$$Ra_{\text{liquide}} \approx 0,25 \quad (\text{à } 20^\circ C)$$

$$Ra_{\text{vapeur}} \approx 0,30 \quad (\text{à } 100^\circ C)$$

Pour ces valeurs, très en deçà d'une borne inférieure critique  $Ra = 30$  trouvée par ces mêmes auteurs, il n'y a donc pas de mouvements de convection naturelle. Cela vient du fait que notre perméabilité du sol est très faible ; c'est celle d'une argile peu dense.

En conclusion, la gravité ne sera pas introduite dans nos équations.

## Chapitre 2

# Le problème de Stefan

Avant de résoudre le problème de diffusion de chaleur dans un milieu poreux saturé d'eau, il paraît indispensable de simplifier le problème en étudiant d'abord le problème de changement de phase seul sans prendre en compte l'effet du terme convectif. Un exemple typique d'un problème de changement de phase simplifié est le problème de Stefan, ce problème est indépendant du problème présenté dans le chapitre 1 et il va nous servir à comparer deux approches utilisées pour traiter les problèmes de changement de phase. Le problème de Stefan présente l'avantage de posséder une solution analytique dans le cas 1D ce qui est intéressant pour valider les deux approches et comparer leurs efficacités. Ainsi, ce chapitre porte sur la résolution de problèmes de changement de phase en 1D lorsque le seul mode de transfert de chaleur est la conduction. On ne considère que les changements de phase liquide-solide (solidification) et solide-liquide (fusion) à une température donnée. On ne considèrera que les substances pures et on supposera également qu'il n'y a pas de rayonnement thermique, ni de génération d'énergie interne (effet joule), ni de convection.

Lors de la solidification ou la fusion, la substance est présentée sous forme des phases liquide et solide et son comportement dans chacune des phases est différent. D'une phase à l'autre, il y a un changement brusque des caractéristiques physiques de la substance. Pour prendre en compte correctement la transmission de la chaleur lorsqu'une substance est présente sous forme des phases liquide et solide, il est essentiel de bien connaître la position de la frontière séparant les deux phases, également appelée interface diphasique.

Lorsque la substance (l'eau) est pure, la température de fusion (ou solidification)  $T_f$  est généralement connue. Cette condition est exprimée par :

$$T_s(X(\mathbf{x}, t)) = T_f = T_l(X(\mathbf{x}, t)) \quad (2.1)$$

où  $X(\mathbf{x}, t)$  est un paramétrage espace-temps  $(x, y, z, t)$  de l'interface diphasique. Les fonctions  $T_s$  et  $T_l$  désignent la température du solide et du liquide respectivement.

Dans un procédé de fusion ou de solidification, la température évolue dans chacune des phases et les interfaces diphasiques se déplacent. On parle ici de plusieurs interfaces diphasiques, car on peut imaginer qu'il y a plusieurs fronts de solidification et/ou de

fusion. Par la suite, on ne fera référence qu'à la présence d'un seul front, bien que plusieurs fronts puissent être présents.

## 2.1 Revue bibliographique

De nombreuses applications cherchent à déterminer la solution de l'équation modélisant la conduction de la chaleur avec changement de phase, or plusieurs résultats théoriques importants sur l'existence, l'unicité et les propriétés classiques des solutions sont valables [CH67], [CP71], mais la plupart des solutions analytiques [RUB03], [BAN64], [BOL], [MS65], sont pour les géométries 1D avec des conditions aux bords très particulières, et on ne peut pas les généraliser aux problèmes multidimensionnels.

Des méthodes numériques sont alors proposées par plusieurs auteurs [FP73], [RUB03], surtout dans les cas multidimensionnels, leurs applications sont limitées par leurs grandes complexités.

Par le passé, les schémas numériques ont utilisé différentes techniques pour l'analyse des problèmes de changement de phase. On peut regrouper ces schémas numériques en deux catégories principales [GM93], [LC95], [RC91] :

- les schémas numériques avec maillage fixe,
- les schémas numériques avec maillage mobile ("front tracking methods").

En ce qui concerne les schémas avec maillage fixe, la position de l'interface ne correspond pas nécessairement à un nœud en 1D ou à un ensemble d'arêtes en 2D. Dans ces schémas, on tient compte de la chaleur latente :

- en définissant une variable d'enthalpie totale  $H$  (enthalpie volumique [ $J.m^{-3}$ ]) ou une variable d'enthalpie  $h$  (enthalpie massique [ $J.Kg^{-1}$ ]) pour déterminer ensuite la température à partir de celle-ci,
- ou bien en remplaçant le coefficient de chaleur massique constant par un coefficient de chaleur massique qui est fonction de la température (méthode de capacité thermique) et qui prend une valeur très élevée à la frontière liquide/solide,
- ou bien en introduisant un terme source.

Une description exhaustive de ces schémas numériques est faite par Voller [VRVM87]. L'inconvénient majeur de ces schémas est la limitation de la précision lorsque l'interface est présente sous la forme d'une discontinuité [BEL82], [VG81].

Prapainop et Maneeratana [PM04], [MAN05] ont développé une méthode numérique pour la résolution du problème de solidification en utilisant une discrétisation en volumes finis. Leur méthode est basée sur le suivi explicite de l'interface par la méthode d'accumulation de chaleur latente. Ces schémas numériques peuvent cependant être facilement utilisés lorsque le changement de phase se produit sur un intervalle de température (région pâteuse) plutôt qu'à une température donnée. Les schémas avec maillage fixe ont été utilisés efficacement pour des problèmes 1D, 2D et 3D incluant la convection, la gestion de régions pâteuses et l'évolution de micro-structures. L'inconvénient principal est la difficulté de calcul des mouvements d'interface dans le cas multidimensionnel.

Dans les schémas avec maillage mobile, la position de l'interface doit toujours correspondre à un nœud ou à des arêtes du maillage. Pour obtenir ces résultats on utilise :

1. des coordonnées curvilignes,
2. l'adaptation du maillage (le remaillage à chaque pas de temps),
3. ou le déplacement automatique du maillage.

Lacroix et Garon [LG92] ont utilisé un changement de coordonnées qui immobilise la position de l'interface dans l'espace des nouvelles variables. Ils ont pu ainsi résoudre des problèmes de changement de phase où la convection est le mode dominant de transfert de chaleur.

Pour des problèmes de solidification, Ghosh et Moorthy [GM93] ont utilisé un maillage fixe dans le liquide et un maillage se déplaçant dans une direction imposée dans le solide. Afin d'éviter de remailler lors de l'introduction de nouveaux nœuds dans le domaine solide, ils ont utilisé un pseudo-domaine comme banque des nœuds. Ces nœuds pénètrent au besoin dans le domaine du solide sans avoir à changer la connectivité. Dans cet article, les auteurs se sont limités à des problèmes où la température initiale du liquide est la température de solidification (Problèmes à une phase). Ils n'ont donc pas eu à discrétiser la phase liquide.

Yoo et Rubinsky [YR86] ont développé une nouvelle technique numérique pour résoudre le problème de solidification transitoire en 2D. Ils ont utilisé une nouvelle formulation de Galerkin pour le bilan énergétique sur l'interface de solide-liquide qui rapporte le déplacement de différents nœuds sur l'interface solide-liquide à la fin de chacun des pas de temps. Tout le domaine est ensuite remaillé en fonction du déplacement de l'interface.

Lynch, O'Neil et Albert [AO86], [LO81] ont beaucoup contribué à l'analyse par éléments finis déformables des problèmes à frontière libre. Dans l'article de Lynch et O'Neil [LO81], qui traite le problème de changement de phase en 1D, les auteurs ont introduit un maillage pouvant se déformer au cours d'un pas de temps en fonction du déplacement de l'interface traité comme une variable inconnue. En permettant la déformation continue des mailles, la position de l'interface correspond toujours à une arête d'un élément. Dans l'article portant sur des problèmes 2D, Albert et O'Neil [AO86] ont utilisé une technique de génération de coordonnées curvilignes appelée "transfinite mapping". Cette technique permet de modifier le maillage en fonction des frontières des sous-domaines discrétisés, un sous-domaine par phase. Le problème de changement de phase est alors traité comme un problème de frontière libre délimitant les sous-domaines solide et liquide. En ce qui concerne le déplacement des nœuds formant l'interface, la variable qui détermine ce déplacement est la vitesse des nœuds dans des directions imposées.

Bonnerot et Jamet [BJ77] ont probablement été les premiers à utiliser une méthode d'éléments finis permettant le déplacement des nœuds d'un maillage espace-temps (2D en espace). Ils considèrent l'interface comme une ligne polygonale dont les segments correspondent aux arêtes de leur maillage. À chaque pas de temps, les nœuds se déplacent en fonction d'une vitesse locale et dans les directions imposées. Leur formulation espace-temps permet le déplacement de tous les nœuds du maillage à chaque pas de temps. En ce qui concerne les problèmes résolus dans cet article, les seuls nœuds mobiles sont ceux

de l'interface. Les autres nœuds peuvent être déplacés après la résolution du système d'équations en fonction du déplacement de l'interface, ou bien on peut effectuer un remaillage complet périodique à l'extérieur de l'interface. Dans cet article, ils ont abordé des problèmes à une phase et n'ont pas résolu des problèmes où la température est inconnue dans les phases liquide et solide (problèmes à deux phases).

Perron [PER98] dans sa thèse a utilisé un schéma numérique avec une méthode de volumes finis espace-temps appelée méthode des volumes finis dirigés (MVFD) pour résoudre le problème de Stefan. Dans le cadre de cette thèse, la MVFD est mise en œuvre pour des problèmes de changement de phase en 1D et 2D. La formulation de cette méthode permet de l'appliquer aux problèmes de changement de phase où la convection est présente ainsi qu'aux problèmes où le changement de phase a lieu dans un intervalle de température. La forme de base du schéma numérique a été imaginée par Joyal et col. et elle est détaillée dans [FRI95], [FJ95]. Cette méthode permet la liberté de déplacement aux nœuds du maillage. La position des nœuds n'est pas déterminée avant ou après la résolution des équations qui décrivent le phénomène étudié, mais simultanément. En plus de permettre le déplacement des nœuds, le schéma permet également :

- la rencontre des nœuds avec d'autres nœuds (ou des arêtes du maillage en 2D),
- l'éclatement d'un nœud en plusieurs nœuds afin de raffiner automatiquement le maillage,
- la coexistence de plus d'un nœud en une même position, mais ne portant pas tous la même valeur nodale.

E. Javierre et col. [EJdZ06] ont utilisé la méthode de lignes de niveaux pour résoudre le problème de changement de phase. Cette méthode permet de travailler avec des topologies variables. La position de l'interface est définie comme étant la ligne de niveau zéro de la fonction de niveaux.

Mazhukin et Chuiko [MC02] ont utilisé une méthode d'adaptation dynamique pour résoudre les problèmes de Stefan multidimensionnels avec suivi explicite de l'interface. La méthode est basée sur la transition à n'importe quel système des coordonnées non stationnaire. Ils ont utilisé un système arbitraire des coordonnées curvilignes non stationnaire. L'une des caractéristiques de cette méthode est la déformation initiale du domaine initial.

Les schémas numériques avec maillage mobile jusqu'à maintenant développés sont habituellement plus complexes à mettre en œuvre que ceux avec maillage fixe. De plus ils sont mal adaptés aux problèmes où plus d'un front de solidification ou de fusion sont présents et à ceux où le changement de phase se produit sur un intervalle de température.

## 2.2 Modélisation mathématiques en 1D

Dans notre cas, on considère la conduction comme étant le seul mode de transfert de chaleur. Les propriétés physiques qui caractérisent les phases liquide et solide, comme la capacité thermique et la conductivité, sont supposées constantes pour une phase

donnée. Dans la suite, on présente les équations pour le problème de Stefan (cas de fusion) tout en supposant que les densités de deux phases sont égales.

### 2.2.1 Équations et conditions aux bords

Notre problème de fusion consiste à résoudre l'équation aux dérivées partielles obtenue en combinant la loi de Fourier et la loi de conservation de l'énergie qui repose sur le fait que le taux d'accumulation d'énergie dans un volume de contrôle de taille  $\Delta x$  est égale à la quantité de chaleur transférée par conduction

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho C_p T \Delta x] = \Delta Q \quad (2.2)$$

où  $\Delta Q$  est la différence de flux de chaleur sur les bords du volume de contrôle. On travaille avec un demi-espace de longueur infinie. La température initiale  $T_0$  sur tout le demi-espace est constante et est différente de la température de fusion  $T_f$  (problèmes à une phase ou deux phases). L'eau est présente sous forme solide. La température à la frontière  $x = 0$  est soudainement élevée à une température  $T_w > T_f$  et la fusion a lieu à partir de  $x = 0$ . La formulation mathématique pour un problème de fusion est la suivante

$$\begin{cases} \rho C_l \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k_l \frac{\partial T}{\partial x} \right] & 0 < x < \xi(t), \quad t > 0 \\ T_l(0, t) = T_w; & t > 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

$$\begin{cases} \rho C_s \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k_s \frac{\partial T}{\partial x} \right] & \xi(t) < x < \infty, \quad t > 0 \\ T_s(\infty, t) = T_0; & t > 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad \forall x$$

$\rho$  est la densité de masse,  $C$  est la chaleur spécifique,  $\xi$  est la position de l'interface, et les sous indices  $s$  et  $l$  représentent les phases solide et liquide, respectivement.

Sur l'interface, quand la densité de liquide égale à celle du solide, la formulation du problème de Stefan sur l'interface s'écrit [BC73] :

$$k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = -\rho L \frac{d\xi}{dt} \quad (\rho = \rho_s = \rho_l) \quad (2.5)$$

où  $L$  est la chaleur latente et  $\frac{d\xi}{dt}$  la vitesse de déplacement du front. La continuité de la température s'écrit sous la forme d'une double condition :

$$T_f = T_l = T_s$$

Au temps initial, l'interface est supposée au position  $x = 0$ .

## 2.3 Solutions analytiques

L'existence de solutions analytiques se limite à quelques problèmes simples. Les solutions analytiques pour des problèmes de fusion et de solidification sur un demi-espace de longueur infinie sont ici présentées. Ces solutions vont servir à valider des résultats numériques obtenus avec les méthodes mises en oeuvre dans le cadre de ce travail. Ces solutions pour le cas 1D semi-infinie sont analysées par Carslaw and Jaeger [CJ59], Bejan et Kraus [BK03] et Ku et Chan [KC90] avec l'approche d'interface mobile.

**Fusion sur un demi-espace, condition de type Dirichlet :** Les profils de température pour la phase liquide,  $T_l$ , et la phase solide  $T_s$ , sont respectivement :

$$T_l = T_w + (T_f - T_w) \frac{\operatorname{erf}(x^*)}{\operatorname{erf}(x_{sl}^*)} \quad \text{où } 0 < x^* < x_{sl}^*. \quad (2.6)$$

$$T_s = T_0 + (T_f - T_0) \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\alpha_l/\alpha_s} x^*)}{\operatorname{erfc}(\sqrt{\alpha_l/\alpha_s} x_{sl}^*)} \quad \text{où } x_{sl}^* < x^* < \infty. \quad (2.7)$$

où  $T_w$  est la condition au bord, et  $T_0$  est la distribution initiale de la température.

$x^* = x/2\sqrt{\alpha_l t}$  est la position adimensionnelle et  $\alpha = k/\rho C$  est la diffusivité thermique, calculée à partir des propriétés mécaniques pour le solide et le liquide. La position adimensionnelle de l'interface solide-liquide  $x_{sl}^*$  est obtenue à partir de l'équation algébrique non linéaire :

$$\frac{T_f - T_i}{T_f - T_w} \frac{k_s}{k_l} \sqrt{\frac{\alpha_l}{\alpha_s}} \frac{\exp(-(\alpha_l/\alpha_s)(x_{sl}^*)^2)}{\operatorname{erfc}(\sqrt{\alpha_l/\alpha_s} x_{sl}^*)} + \frac{\exp(-(x_{sl}^*)^2)}{\operatorname{erf}(x_{sl}^*)} - \frac{\sqrt{\pi} x_{sl}^* L}{C_l(T_f - T_w)} = 0. \quad (2.8)$$

## 2.4 Méthodes numériques

La méthode des volumes finis consiste à intégrer les équations sur des volumes élémentaires. C'est une méthode particulièrement bien adaptée à la discrétisation spatiale des lois de conservation, contrairement aux éléments finis, et est ainsi sera utilisée pour résoudre notre problème. Sa mise en oeuvre est simple si les volumes élémentaires ou "volume de contrôle" sont des rectangles en 2D ou des parallélépipèdes en 3D. Cependant, la méthode des volumes finis permet d'utiliser des volumes de forme quelconque et donc de traiter des géométries complexes, contrairement aux différences finies.

L'ensemble des équations présentées est calculé par la méthode des volumes finis pour un domaine fini (actuellement de longueur  $2m$ ), avec la formulation "vertex centered" : chaque cellule (ou volume de contrôle) contient exactement une seule information du nœud au point  $x_i$  et ses bords sont calculés comme les milieux de deux nœuds consécutifs, et donc on obtient une bonne approximation pour estimer le gradient. On note par  $T_i$  une approximation de la solution, la position de tous les variables est indiquée par les sous indices  $s$  et  $l$ .

Le temps est divisé en un nombre arbitraire des pas de temps  $\Delta t$ . Pour un allègement de l'écriture, les variables au temps  $t$  sont représentées par l'indice supérieur 0 ; au

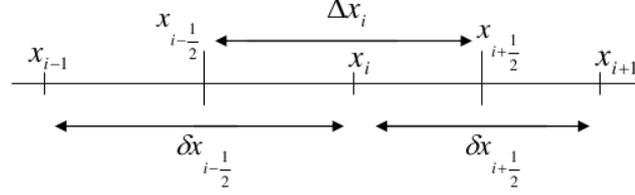


FIG. 2.1 – un volume de contrôle typique, cas 1-D.

contraire, la représentation des variables au temps  $t + \Delta t$  ne contient pas d'indice supérieur.

Pour l'instant, la température à la face  $i + \frac{1}{2}$  est donnée par  $T_{i+\frac{1}{2}} = T_i f_{i+\frac{1}{2}} + T_{i+1} (1 - f_{i+\frac{1}{2}})$  où  $f_{i+\frac{1}{2}} = (2\delta x_{i+\frac{1}{2}} - \Delta x_i) / 2\delta x_{i+\frac{1}{2}}$ . L'autre variable approximée sur les faces de la cellule est la conductivité de l'interface.

Dans cette étude, la distribution temporelle de la température est estimée par un schéma à deux niveaux de temps [VM95] tel que :

$$\int_t^{t+\Delta t} T dt = [\alpha T - (1 - \alpha)T^0] \Delta T \quad (2.9)$$

où  $\alpha$  est facteur dont la valeur est comprise entre 0 et 1.

Trois principaux schémas sont considérés : explicite, Crank-Nickolson et l'implicite.

La méthode explicite utilise le gradient de température au temps  $t$  pour calculer l'inconnu  $T$  au temps  $t + \Delta t$  tel que  $\alpha = 0$ . Par conséquent, le pas de temps  $\Delta t$  est limité par  $\Delta t < \rho C (\Delta x)^2 / 2k$  pour le 1-D et  $\Delta t < \rho C (\Delta x)^2 (\Delta y)^2 / 2k ((\Delta x)^2 (\Delta y)^2)$  pour le 2-D. Le schéma de Crank-Nickolson utilise la moyenne du gradient de température au temps précédant et au temps courant pour calculer la valeur de la température au temps présent, soit  $\alpha = 0.5$ , et par conséquent il a moins de limitation au niveau de pas de temps que le schéma explicite. Le schéma implicite ( $\alpha = 1$ ) est du premier ordre et inconditionnellement stable.

Prenant la figure (2.1) comme référence, l'équation de la chaleur peut être discrétisée comme suit :

$$\rho c \Delta x_i (T_i - T_i^0) = \left[ k_{i+\frac{1}{2}} \frac{\alpha (T_{i+1} - T_i) + (1 - \alpha) (T_{i+1}^0 - T_i^0)}{\delta x_{i+\frac{1}{2}}} - k_{i-\frac{1}{2}} \frac{\alpha (T_i - T_{i-1}) + (1 - \alpha) (T_i^0 - T_{i-1}^0)}{\delta x_{i-\frac{1}{2}}} \right] \Delta t. \quad (2.10)$$

où  $\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$ ,  $\delta x_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i$ , et  $\delta x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - x_{i-1}$ .

La convergence et la stabilité de ce genre des méthodes sont présentées dans [MS04].

## 2.5 Résolution avec la méthode d'accumulation de chaleur latente

Dans le schéma d'enthalpie basique, l'enthalpie est utilisée comme une variable primaire et la température est calculée à partir de la relation température-enthalpie définie par [PM04] :

$$H = \begin{cases} \rho C_s T, & T < T_f \\ \rho C_s T_f + \rho c_l (T - T_f) + \rho L, & T \geq T_f \end{cases} \quad (2.11)$$

où  $H$  et  $T$  sont l'enthalpie et la température, respectivement.

La loi de conservation de l'énergie et la loi de Fourier pour la conduction de la chaleur sont employées. La combinaison entre ces deux lois en 1D s'écrit :

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.12)$$

Notons que ce modèle néglige l'effet de radiation ainsi que tout mode de convection.

Comme le pas de temps est restreint par le fait qu'on ne peut pas avoir plus d'une seule cellule en cours de fusion (cellule en phase mixte), le schéma explicite est recommandé (le schéma implicite et celui de Cranck-Nicolson conduisent à des difficultés d'implémentation).

La méthode d'accumulation de chaleur latente a été proposée par Prapainop [PM04]. Voici une description de l'algorithme utilisé (voir figure 2.2) : avant le premier intervalle de temps, la chaleur latente accumulée  $Q_i$  de volume de contrôle  $V_i$  est initialisée à zéro. À chaque pas de temps, la phase de chaque volume de contrôle est examinée. Si la phase nodale est solide et la température nodale  $T_i$  est plus grande que la température de fusion  $T_f$ , le volume de contrôle devient saturé et son nœud sera marqué (la cellule est mixte, figure 2.3).

Comme le schéma utilisé est explicite, la température au temps courant est calculée directement à partir de la valeur de température au pas de temps précédent. La température nodale est réinitialisée à la température de fusion et la chaleur latente s'accumule, l'énergie utilisée pour le changement de phase au pas du temps courant, est calculée par  $\Delta Q_i = \rho C (T_i - T_f) V_i$ , où  $V_i$  est le volume de la cellule, et  $C$  est calculé par :

$$C = (1 - \theta)C_l + \theta C_s \quad (2.13)$$

où  $\theta$  est le pourcentage de glace dans la cellule mixte de volume  $V_i$ . Le  $\Delta Q_i$  sera rajouté au  $Q_i$  accumulé pour une séquence des pas de temps jusqu'à ce que la chaleur latente accumulée sera égale à la chaleur latente totale  $Q_i^{tot}$  pour le volume de contrôle  $V_i$ , tel que :

$$Q_i^{tot} = \int_{V_i} \rho L dV_i \quad (2.14)$$

où  $V_i$  est le volume de la cellule.

À cette étape, le volume de contrôle devient liquide, la marque sur la cellule sera enlevée et la chaleur latente ne sera plus calculée.

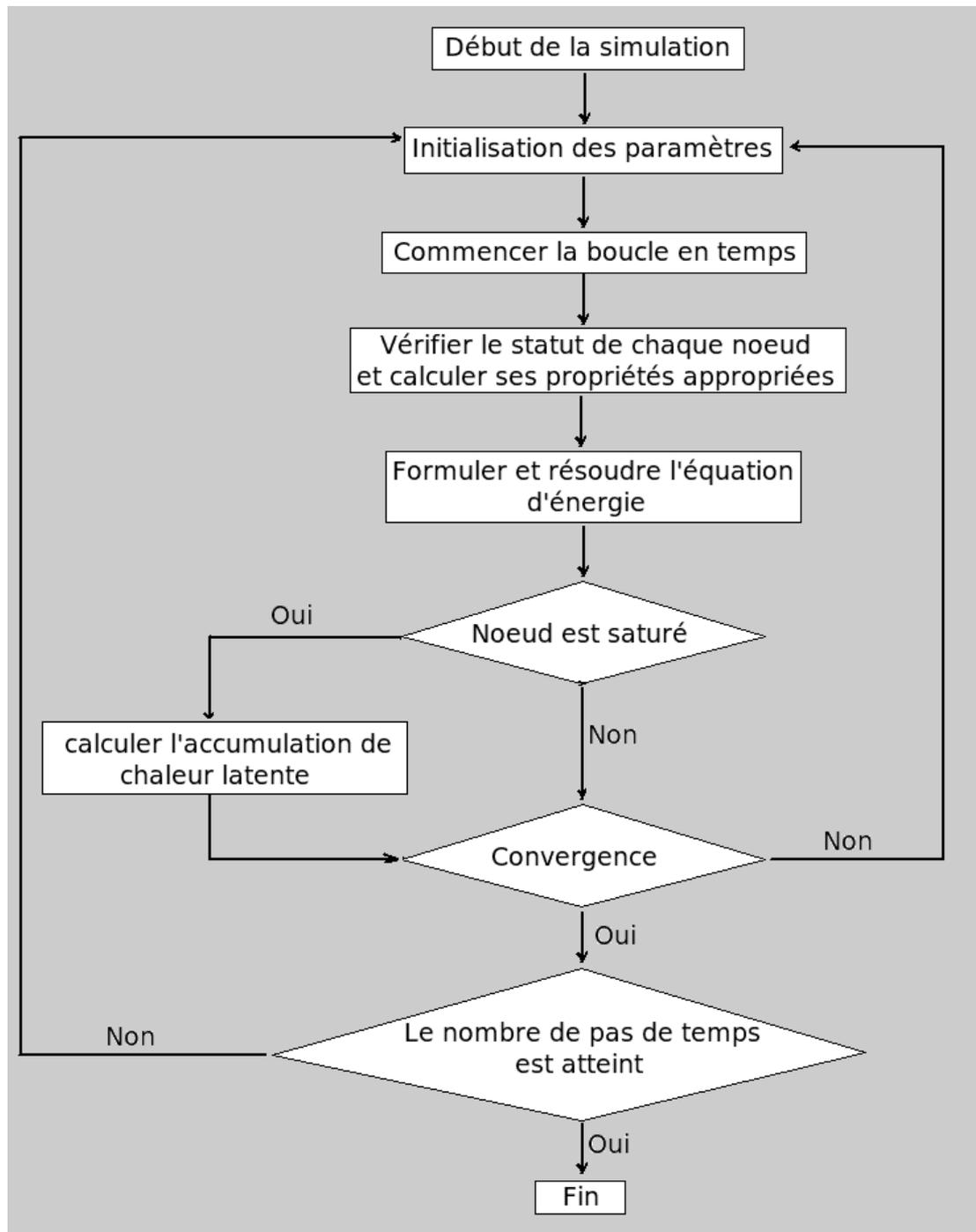


FIG. 2.2 – Description de l'algorithme de l'accumulation de chaleur latente.

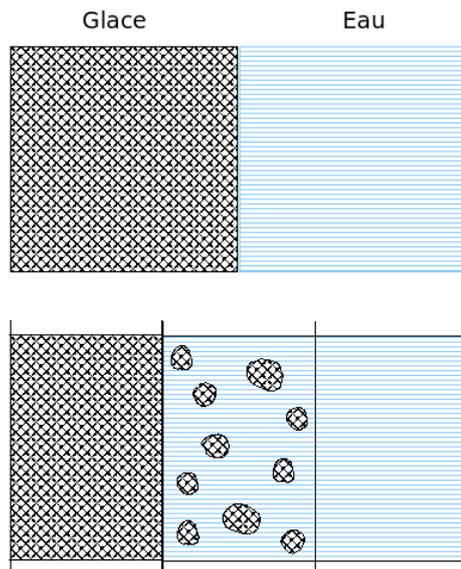


FIG. 2.3 – La première figure montre le milieu physique réel composé de deux phases solide et liquide. La deuxième figure montre, dans l’approximation discrète, la présence d’une cellule mixte au moment du changement de phase.

### 2.5.1 Modèle basique et maillage uniforme

Si les équations discrétisées sont écrites sous la forme explicite, alors le pas de temps doit respecter le critère de Cauchy :

$$\Delta t < \Delta t_c = \frac{1}{2} \frac{\rho_s C_s \Delta x^2}{k_s}$$

En pratique,  $\Delta t$  est toujours choisit égal à  $0.99\Delta t_c$ .

Les propriétés thermophysiques utilisées dans le calcul sont celles du système eau/glace. Le profil de température spatial (figure 2.4 ; seulement le quart du domaine est montré) correspond très bien avec la solution analytique, mais l’évolution de la température (figure 2.5) par rapport au temps présente quelques fluctuations qui sont inévitables : ceci est dû à la taille finie des cellules (cela vient de la réalité physique, où le flux de chaleur reste bloqué pendant le processus de fusion dans la cellule mixte). Pour éviter ce comportement non désirable, le seul moyen est de raffiner le maillage de part et d’autre de l’interface, ce qui nous mène à utiliser une nouvelle technique d’adaptation de maillage (“rolling mesh”) présentée ci-dessous.

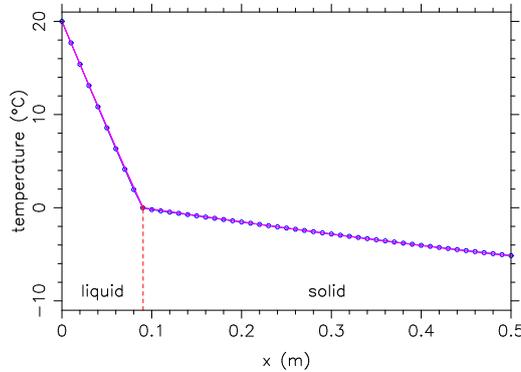


FIG. 2.4 – Profil de température en  $t_{max} = 50 h$ . Solution analytique (rouge) et solution numérique (bleu).

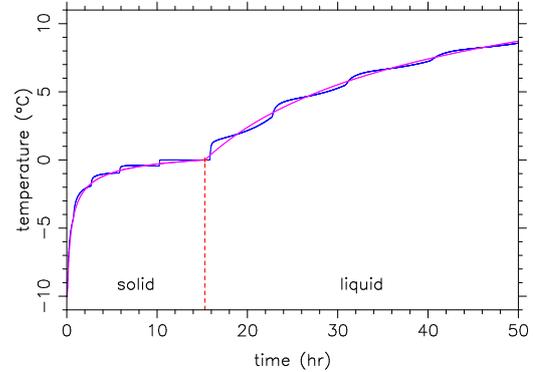


FIG. 2.5 – Histoire de la température en  $x = 5 cm$ . Un schéma explicite à été utilisé.

## 2.5.2 Amélioration du modèle avec raffinement récursive de maillage

Il est clair que pour éviter les fluctuations non physiques, il est avantageux de faire varier les tailles des mailles selon la position de l'interface. Le raffinement global peut être la technique la plus simple pour augmenter la précision de la solution approchée. Cependant cette technique ne sera pas utilisée parce qu'elle est numériquement coûteuse. En général, deux techniques de maillage adaptatif sont les plus utilisées ; la première est la méthode de raffinement local où des mailles uniformes fines sont rajoutées dans les régions où la solution approximée manque de précision [ASK87], la deuxième est la technique de maillage mobile où les nœuds sont déplacés, quand c'est nécessaire, à chaque pas de temps [MP00].

On a choisit une technique différente, la technique classique d'“insertion/ prélèvement” des nœuds dans le maillage primaire (comme Homard<sup>1</sup>, utilisée pour la méthode des éléments finis et adaptée afin de pouvoir l'utiliser avec la méthode des volumes finis) utilisée avec des subdivisions récursives ; cela produit d'excellents résultats pour le problème de fusion. Le maillage uniforme fixe décrit ci-dessus est notre point de départ ; après on raffine le maillage primaire par un nombre des subdivisions - à chaque niveau de subdivision on ajoute un nœud au milieu de deux nœuds successifs (voir figure 2.6). Le front de fusion est placé dans la première cellule et il peut bouger tout au long du domaine de discrétisation. Quand le front de changement de phase passe dans une nouvelle cellule, le nœud ajouté pour l'ancienne cellule est enlevé et un autre nœud sera ajouté pour le nouveau élément.

La technique de “rolling mesh” possède les caractéristiques suivantes :

- le maillage roule parce que certains nœuds sont ajoutés alors que d'autres sont supprimés, mais seulement lorsque la cellule mixte change ; la plupart de temps le maillage ne subit pas de changement.
- seul le maillage primaire est raffiné ; puis le maillage dual (i.e. les bords des cellules)

<sup>1</sup>[http://www.code-aster.org/outils/homard/menu\\_homard.en.htm](http://www.code-aster.org/outils/homard/menu_homard.en.htm)

est mis à jour.

- ce n'est pas un maillage mobile : pendant l'évolution en temps tous les nœuds ont une position fixe. Cette dernière caractéristique garantit la précision parce qu'il n'y a que très peu d'interpolations.

Cette technique a été implémentée par une liste chaînée. Chaque élément de cette liste contient une information à propos de la géométrie (position et taille d'une cellule) et les variables physiques (température, accumulation de chaleur latente et la phase de cellule). Un nombre fixé de subdivisions récursives sera utilisé selon la précision attendue.

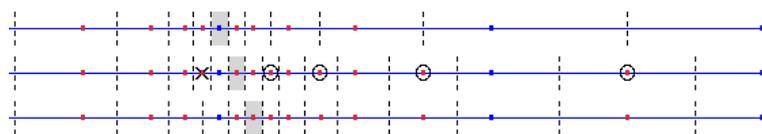


FIG. 2.6 – Raffinement de maillage récursive employé pour suivre le front de changement de phase (les points représentent les nœuds tandis que les lignes pointillées déterminent les bords des cellules; la cellule mixte est colorée en gris). Les points cerclés sont les nouveaux nœuds qui ont été insérés (entre étape 1 et 2) pour respecter quelques contraintes à propos de la progressivité du maillage. Le point marqué par  $\times$  disparaît entre l'étape 2 et 3.

### 2.5.3 Conservation de l'énergie par la technique “insertion/suppression” des nœuds.

Il est évident que le schéma de volumes finis conserve quelques quantités extensives. Dans notre cas, l'énergie utilisée dans l'équation (2.2), s'écrit

$$E = \int \rho C T dx \quad (2.15)$$

Puisque dans notre cas  $\rho$  et  $C$  sont constants (dans les deux phases), l'intégrale de la température doit être conservée dans la maille pendant l'“insertion/suppression” des nœuds.

Supposons qu'on va insérer un nouveau nœud ou supprimer un autre qui existe déjà : les valeurs de la température pour les autres nœuds devraient être modifiées pour que  $E$  reste constant. Dans notre technique de raffinement (décrite dans la section précédente), on insère/supprime des nœuds seulement pour les cellules mixtes (qui correspondent à une discontinuité dans la température) sans faire aucune modification. Par conséquent, un nœud est inséré/supprimé dans un comportement linéaire de la température comme on peut voir dans (figure 2.7) et (figure 2.9).

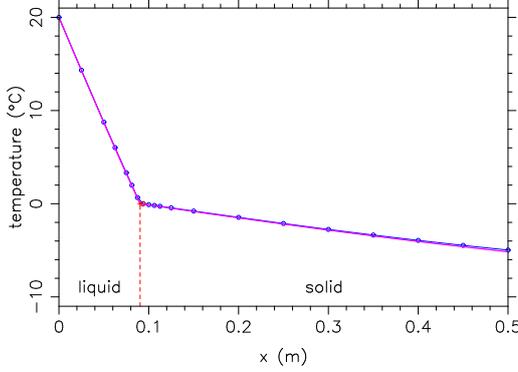


FIG. 2.7 – Profil de la température en  $t_{max} = 50$  h. Solution analytique (rouge) solution et numérique (bleu).

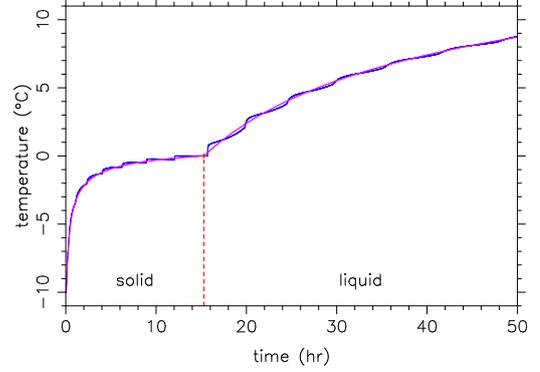


FIG. 2.8 – Histoire de la température en  $x = 5$  cm. Nombre des subdivisions : 3.  $N_{basic} = 40$ ,  $dt = 1.74E + 01$  s.

#### 2.5.4 Résultats et conséquences

On a trouvé que la technique de maillages adaptatifs améliore la régularité (ainsi que la précision) de la solution. Les figures (2.9 et 2.10) présentent des résultats numériques pour deux différentes valeurs du nombre des subdivisions. Plus on raffine la zone de changement de phase plus on obtient une bonne précision et moins de fluctuations ; en faite ces fluctuations ne sont pas éliminées mais leurs amplitudes seront diminuées jusqu'à ce qu'elles tendent vers zéro. Une bonne concordance avec la solution analytique est montrée.

La figure (2.11) indique clairement que le raffinement de maillage permet l'utilisation d'un nombre plus petit des nœuds, ce qui nous amène à économiser de la mémoire. La figure (2.12) montre les erreurs entre la solution numérique et la solution analytique, et donne une comparaison entre les deux modèles utilisés. L'erreur relative est calculée seulement à partir de la courbe d'évolution par rapport au temps (au point  $x = 5$  cm), par la formule (Root-Mean-Square) :

$$Error_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (T_j - T_{j,exact})^2} \quad (2.16)$$

En général, si on prend en compte à la fois la précision et le coût du calcul, le schéma proposé est légèrement meilleur que le schéma basique, comme il est montré dans la figure (2.13). Actuellement, la limitation de performance de notre méthode est due à l'utilisation d'un schéma explicite. Pour cela la méthode n'est pas généralisable aux cas multidimensionnels.

Vue la limitation du schéma explicite, plusieurs schémas implicites ont été proposés (Crank-Nicholson et schéma implicite) pour atteindre la précision et le coût de calcul attendus. Le schéma explicite à une restriction sur la taille du pas de temps, or l'utilisation des grands pas de temps est à l'origine de la divergence de la solution. Les schémas implicites et Crank-Nicholson permettent l'utilisation des pas de temps de tailles plus

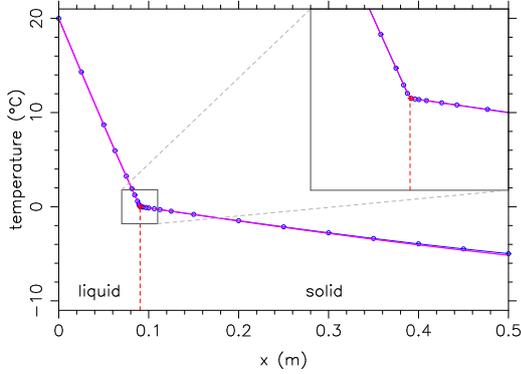


FIG. 2.9 – Profil de la température en  $t_{max} = 50 h$ . Solution analytique (rouge) et solution numérique (bleu).

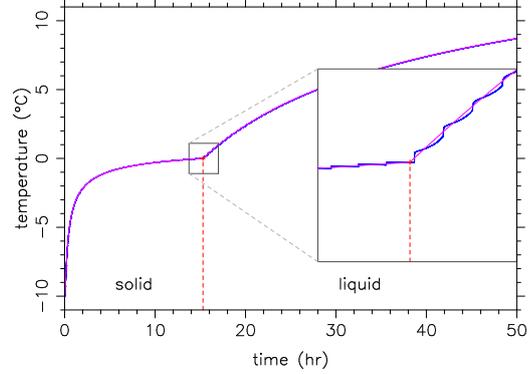


FIG. 2.10 – Histoire de la température en  $x = 5 cm$ . Nombre des subdivisions : 6.  $N_{basic} = 40$ ,  $dt = 2.72E - 01 s$ .

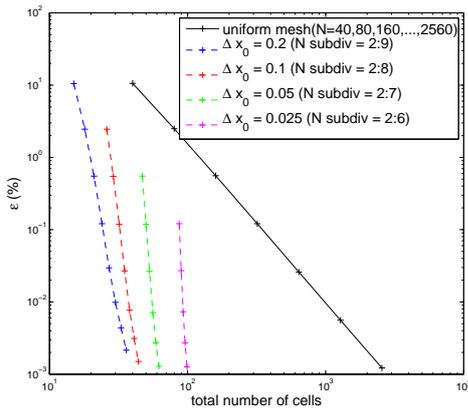


FIG. 2.11 – Erreurs RMS par rapport au nombre total des cellules.

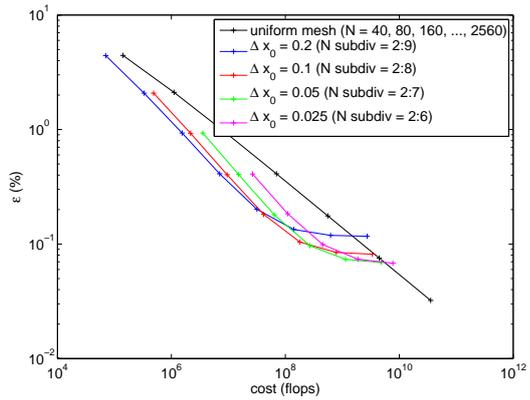


FIG. 2.12 – Erreurs RMS par rapport au temps de calcul. Schéma explicite.

grandes mais vu la structure de notre modèle, la précision dépend essentiellement de la grandeur du pas de temps. En plus les schémas implicites exigent un temps CPU plus grand, ceci est dû aux processus itératives du solveur. La figure (2.14) montre la limitation de l'approche utilisée avec les schémas implicites, d'où l'utilisation d'une autre approche.

## 2.6 Méthode de capacité apparente

Pour éviter le suivi de l'interface, la méthode de capacité apparente a été utilisée. Dans cette méthode, la chaleur latente est calculée en intégrant la capacité apparente par rapport à la température [BC73], et le domaine de calcul est considéré comme

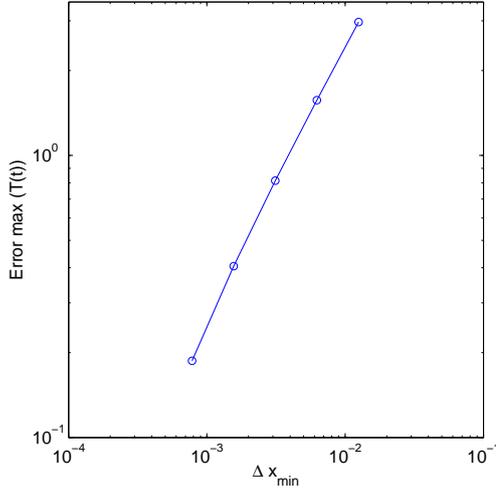


FIG. 2.13 – Amplitude des oscillations sur l’histoire de la température.

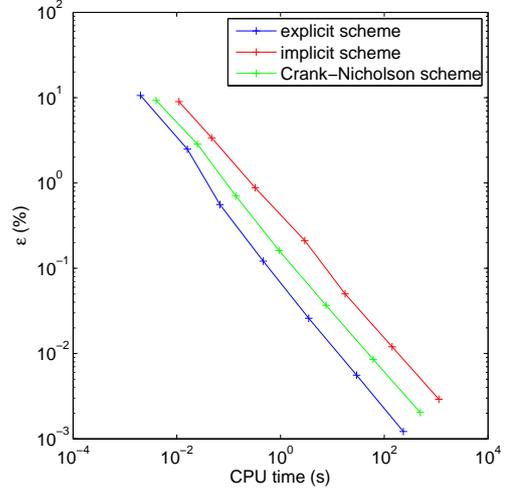


FIG. 2.14 – Erreurs RMS sur l’histoire de la température par rapport au temps CPU.

une seule région. Comme la relation entre la capacité thermique et la température dans des problèmes isothermiques implique des changements brusques, l’intervalle de changement de phase de largeur zéro doit être remplacé par un intervalle de largeur finie. Ainsi, la taille des pas de temps doit être assez petite de sorte que cet intervalle de température ne soit pas sauté (c’est-à-dire ignoré) pendant le calcul. Les paramètres thermodynamiques équivalents sont définis par la méthode de capacité apparente [BC73]. Selon cette référence, les paramètres équivalents peuvent être obtenus en considérant que le changement de phase a lieu dans un petit intervalle de température (voir figure 2.15).

En notant cet intervalle par  $\Delta T$  :

$$C = \begin{cases} C_s, & T < T_f - \Delta T \\ \frac{C_l + C_s}{2} + \frac{L}{2\Delta T}, & T_f - \Delta T \leq T \leq T_f + \Delta T \\ C_l, & T > T_f + \Delta T \end{cases} \quad (2.17)$$

où  $L$  est la chaleur de changement de phase par unité de volume [ $J/Kg$ ],  $T_f$  est la température de changement de phase, et  $\Delta T$  est le demi-intervalle de la température de changement de phase  $T_f$ . De même, une nouvelle conductivité thermique globale doit être présentée :

$$k = \begin{cases} k_s, & T < T_f - \Delta T \\ k_s + \frac{k_l - k_s}{2\Delta T} [T - (T_f - \Delta T)], & T_f - \Delta T \leq T \leq T_f + \Delta T \\ k_l, & T > T_f + \Delta T \end{cases} \quad (2.18)$$

Les solutions numériques sont obtenues en employant une approche basée sur une discrétisation en volumes finis centrée sur une grille fixe. L’exactitude et la flexibilité de

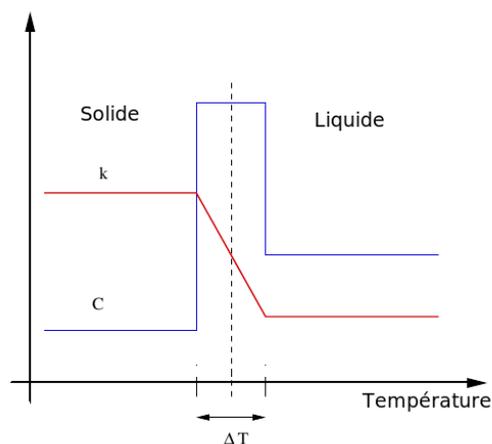


FIG. 2.15 – Propriétés physiques données par Bonacina.

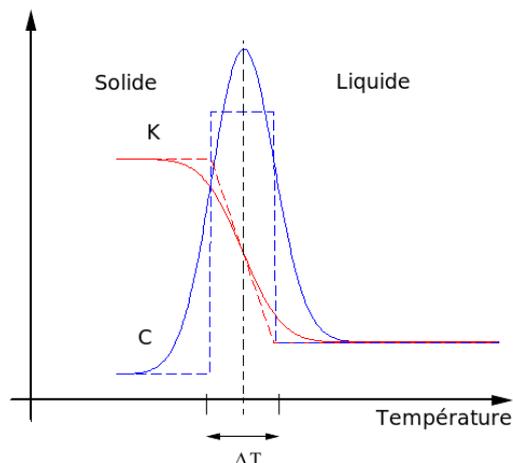


FIG. 2.16 – Propriétés physiques régularisées utilisées dans ce mémoire.

la méthode numérique employée sont vérifiées en comparant les résultats numériques avec les solutions analytiques existantes. Les principaux avantages de cette approche sont que (1) la température  $T$  est la variable primaire qui dérive directement de la solution, et (2) l'utilisation de cette méthode élimine les fluctuations trouvées en employant l'approche de LHA (voir figure 2.5). Cependant, la formulation avec la méthode AHC donne des solutions approchées et souffre d'un problème de singularité pour les propriétés physiques  $C$  (capacité de chaleur spécifique) et  $k$  (conductivité) (voir figure 2.15).

Tandis que la forme explicite de discrétisation utilisée dans l'approche précédente est numériquement convenable, elle possède certaine limitation due à la présence des fluctuations en temps dans la solution. Les résultats ont montré que la limitation de la méthode LHA est due à la petite taille du pas de temps qui doit être utilisé.

Le calcul implicite est souvent plus convenable parce que le schéma est nonconditionnellement stable. Cependant, il y a un prix à payer pour l'amélioration de la stabilité, qui est la résolution d'un système d'équations ordinaires non linéaires. Nous allons résoudre des équations aux dérivées partielles EDP en utilisant la méthode des lignes, où les discrétisations en espace et en temps sont considérées séparément, menant à des systèmes semi-discrets d'équations différentielles ordinaires ODE. Heureusement, il y a pas mal des logiciels d'ODE disponibles de très bonne qualité, une grande partie développés récemment. Ces logiciels, pour la plupart, contiennent des algorithmes sophistiqués qui ajustent automatiquement le pas de temps  $\Delta t$  et l'ordre de la méthode pour obtenir la précision souhaitée).

La solution numérique peut être obtenue comme la limite d'une série des solutions classiques uniformément convergente, déduite en lissant les coefficients (2.17, 2.18), en suivant certaines règles générales [CS87] : La formulation par la méthode de capacité apparente permet un traitement continu du système impliquant le changement de phase.

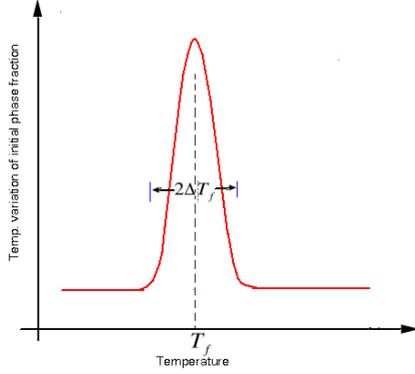


FIG. 2.17 – Approximation de la fraction de la phase initiale sur un petit intervalle de température selon les fonctions linéaires.

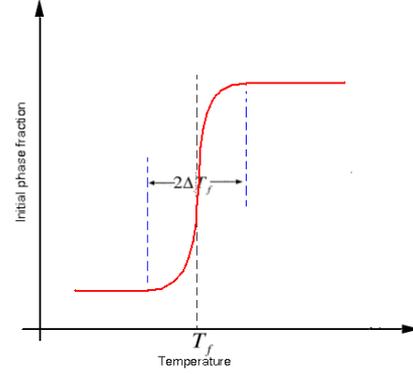


FIG. 2.18 – Approximation de la fraction de la phase initiale sur un petit intervalle de température selon les fonctions d'erreurs.

Si le changement de phase a lieu instantanément à une température fixe, alors une fonction mathématique comme

$$\sigma = \chi(T - T_f) \quad (2.19)$$

représente la fraction volumétrique de la phase initiale (phase de glace).  $\chi$  est une fonction par morceaux dont la valeur est zéro quand  $T < T_f$  et 1 ailleurs. Sa dérivée, c-à-d, la variation de la fraction de phase initiale avec la température est

$$\frac{d\sigma}{dT} = \delta(T - T_f) \quad (2.20)$$

où  $\delta(T - T_f)$  est la distribution de Dirac dont la valeur est infinie à la température de changement de phase,  $T_f$ , et zéro aux toutes autres températures. Pour éviter cette singularité la distribution de Dirac peut être approchée par la fonction de distribution normale illustrée dans la figure (2.17)

$$\frac{d\sigma}{dT} = (\epsilon\pi^{-1/2})\exp[-\epsilon^2(T - T_f)^2] \quad (2.21)$$

où  $\epsilon$  est choisi pour être  $\epsilon = 1/\sqrt{2}\Delta T$  et où  $\Delta T$  est la moitié de l'intervalle de changement de phase. En conséquence, l'intégrale de l'équation (2.21) donne les approximations de fonctions d'erreurs pour la fraction de la phase initiale comme montre la figure (2.18). Avec la méthode de volumes finis, la fraction de la phase initiale dérivée de l'équation (2.21) par intégration devrait être employée pour éviter les instabilités numériques résultantes du saut des valeurs de la fraction volumétrique pour la phase initiale de zéro à un, dans ce cas  $\sigma$  est donné par :

$$\sigma = \frac{1}{2}(1 + \operatorname{erf}(\epsilon(T - T_f))) \quad (2.22)$$

Dans notre approche, nous supposons pour simplifier que les deux phases sont isotropes et homogènes, et que les densités de deux phases sont égales. En conséquence, les coefficients régularisés (voir figure (2.16)) des équations (2.17) et (2.18) s'écrivent ainsi :

$$C = C_s + (C_l - C_s)\sigma + L \frac{d\sigma}{dT} \quad (2.23)$$

et

$$k = k_s + (k_l - k_s)\sigma \quad (2.24)$$

### 2.6.1 Résolution globale par la méthode des lignes

Le problème à résoudre, une fois discrétisé spatialement, peut être écrit sous forme vectorielle avec des conditions initiales et des frontières convenables :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = f(t, x, T) \quad (2.25)$$

Il est demandé à l'utilisateur d'écrire une routine pour évaluer la fonction  $f$  quand les arguments  $t$ ,  $x$ ,  $T$ ,  $\partial T/\partial x$ , ... sont fournis. D'autres sous-programmes sont destinés à spécifier les conditions aux bords et/ou les conditions initiales.

Après généralisation, une stratégie numérique inspirée par le traitement des équations différentielles ordinaires (ODE) associée à la discrétisation en espace par la méthode des lignes sera utilisée [HV03]. elle permet :

- un traitement global du système sans discrimination entre les variables,
- un traitement du modèle physique sous sa forme d'origine, comme on l'a écrit, sans manipulations préliminaires,
- l'utilisation des méthodes sophistiquées qui ont été développées pour des problèmes de valeur initiale,
- la possibilité d'employer les développements impliqués dans des systèmes d'ODE (évaluation des paramètres, analyse de sensibilité,...).

Les principaux inconvénients de cette méthode sont : la grande taille du système ODE obtenu après discrétisation et la rigidité du schéma de discrétisation sur un maillage fixe, ce qui n'est pas vraiment un problème dans notre cas et qui pourrait être résolu en utilisant un maillage adaptatif.

La méthode des lignes consiste à discrétiser la variable spatiale sur  $N$  points de discrétisation. Chaque variable  $T$  est transformée en  $N$  variables correspondantes à ses valeurs en chaque point de discrétisation. Les dérivés spatiales sont estimées en employant une discrétisation en volumes finis sur 3 points, ce qui donne de meilleurs résultats pour l'efficacité, l'exactitude et le temps de calcul. Nous résolvons un système d'EDP, où les discrétisations en espace et en temps sont considérées séparément, on obtient alors un système semi-discret des ODE qui s'écrit sous la forme :

$$T' = A(T)T \quad (2.26)$$

La matrice  $A(T)$  est calculée explicitement (sa structure tridiagonale est due à la discrétisation laplacienne en 1-D).

### 2.6.2 Solveur ODE

Soit  $y = T^T$ , par une transformation classique notre système ODE se transforme en un problème de Cauchy qui consiste à trouver la solution d'une ODE, dans le cas où  $Y$  est un vecteur, étant donnée les conditions initiales appropriées. Considérons le système ODE du premier ordre

$$y' = f(t, y) \quad (2.27)$$

où  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  est un vecteur donné et  $y \in \mathbb{R}^n$  est le vecteur solution qui dépend d'un ensemble de  $n$  constantes arbitraires et de  $n$  conditions initiales

$$y(t_0) = y_0 \quad (2.28)$$

Pour résoudre ce problème, on utilise un solveur ODE qui effectue l'intégration numérique d'un système d'équations ordinaires du premier ordre. Ce solveur nous donne le choix de trois méthodes numériques différentes : "ABM" (Adams-Bashforth-Moulton), "BDF" (Backward Differentiation Formula) et "RKF" (Runge Kutta Fehlberg). Une description rapide de ces trois méthodes sera présentée par la suite, mais avant rappelons nous la définition des méthodes multi-pas.

**Définition 2.1 (méthodes  $q$ -pas)** une méthode est dite  $q$ -pas ( $q \geq 1$ ) si  $\forall n \geq q - 1$ ,  $y_{n+1}$  dépend de  $y_{n+1-q}$ , et ne dépend pas des valeurs de  $y_k$  tel que  $k < n + 1 - q$ .

Soit le temps  $t$  tel que  $0 < t < +\infty$  et soit  $I = (t_0, t_0+t) \in \mathbb{R}$  l'intervalle d'intégration en temps. Pour  $h > 0$ , soit  $t_n = t_0 + nh$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots, N_h$ , une série des nœuds de discrétisation de  $I$  en sous-intervalles  $I_n = [t_n, t_{n+1}]$ . La taille des sous-intervalles  $h$  est le pas de temps. Notons par  $N_h$  le plus grand entier tel que  $t_{N_h} \leq t_0 + t$ . Soit  $y_j$  une approximation de la solution exacte  $y(t_j)$  au temps  $t_j$ . Par ailleurs,  $f_j$  représente la valeur  $f(t_j, y_j)$ .

**Méthodes d'Adam [AQS00] :** Pour dériver les méthodes d'Adam nous transformons l'ODE (2.27) sous la forme intégrale

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(\tau, Y(\tau)) d\tau \quad (2.29)$$

Subdivisons l'intervalle du temps  $I$  en sous intervalle  $I_n$ , ainsi

$$y_{n+1} = y(t_{n+1}) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tau, Y(\tau)) d\tau \quad (2.30)$$

Soit  $y_{n+1-i}$ ,  $i = 1, \dots, k$  des valeurs déjà calculées et soit  $\pi_k^p$  l'unique polynôme d'interpolation de  $f(t_{n+1-i}, y_{n+1-i})$ ,  $i = 1, \dots, k$ .

Définissons la méthode par

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \pi_k^p(\tau) d\tau \quad (2.31)$$

Les schémas explicites s'appellent méthodes d'*Adams-Bashforth*. Donnons un exemple de 2-pas,  $k = 2$  :

Utilisons le concept de polynômes de Lagrange

$$\pi_k^p(t) = f(t_n, y_n) \frac{t - t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} + f(t_{n-1}, y_{n-1}) \frac{t - t_n}{t_{n-1} - t_n} \quad (2.32)$$

Après intégration selon (2.31), on obtient

$$y_{n+1} = y_n + h \left( \frac{3}{2} f(t_n, y_n) - \frac{1}{2} f(t_{n-1}, y_{n-1}) \right) \quad (2.33)$$

C'est la méthode *Adams-Bashforth-2*. La forme générale des méthodes *Adams-Bashforth* est donnée par

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^k \beta_{k-i} f(t_{n+1-i}, y_{n+1-i}) \quad (2.34)$$

Les méthodes de *Adams-Moulton* sont construites de la même manière. Dans ce cas la valeur inconnue  $f(t_{n+1}, y_{n+1})$  est considérée comme un point d'interpolation et donc ces méthodes sont implicites. Nous présentons ainsi quelques exemples des méthodes *Adams-Moulton*

$k = 0$  :  $y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$  méthode d'Euler implicite

$k = 1$  :  $y_{n+1} = y_n + h \left( \frac{1}{2} f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{1}{2} f(t_n, y_n) \right)$  règle trapezoïdale

$k = 2$  :  $y_{n+1} = y_n + h \left( \frac{5}{12} f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{8}{12} f(t_n, y_n) - \frac{1}{12} f(t_{n-1}, y_{n-1}) \right)$  La forme générale est donnée par

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^k \bar{\beta}_{k-i} f(t_{n+1-i}, y_{n+1-i}) \quad (2.35)$$

**Méthodes BDF [AQS00]** : Les méthodes BDF sont directement construites à partir de l'équation différentielle (2.27). Nous cherchons un polynôme qui satisfait l'ODE en un point  $t_{n+1}$  et qui interpole les  $k$  précédents. Définissons le polynôme  $\pi_{k+1}$  de degré  $k$  par

$$\pi_{k+1}(t_{n+1-i}) = y_{n+1-i}, \quad i = 0, \dots, k \quad (2.36)$$

$$\dot{\pi}_{k+1}(t_{n+1}) = f(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad (2.37)$$

L'élaboration de ces conditions par l'utilisation de polynôme de Lagrange donne la formule suivante

$$\sum_{i=0}^k \alpha_{k-i} y_{n+1-i} = hf(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad (2.38)$$

**Exemples :**

$k = 1$  :  $y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$  méthode d'Euler implicite

$$k = 2 : y_{n+1} = \frac{4}{3}y_n - \frac{1}{3}y_{n-1} + h\frac{2}{3}f(t_{n+1}, y_{n+1}) \text{ BDF-2}$$

$$k = 3 : y_{n+1} = \frac{18}{11}y_n - \frac{9}{11}y_{n-1} + \frac{2}{11}y_{n-2} + h\frac{6}{11}f(t_{n+1}, y_{n+1})$$

Ainsi, autant il peut être intéressant de monter en ordre lorsque l'on est dans la zone de stabilité, autant il est nécessaire de réduire l'ordre lorsque l'on sort de cette zone de stabilité

**Méthodes de Runge-Kutta [AUB97] :** Nous représenterons généralement la méthode de Runge-Kutta par un triplet  $(A, b, c)$ , où  $A$  est la matrice carrée  $(a_{ij})_{i,j=1,\dots,s}$  de dimension  $s \times s$ ,  $b$  et  $c$  sont respectivement les vecteurs de dimension  $s$ ,  $(b_1, \dots, b_s)^T$  et  $(c_1, \dots, c_s)^T$ . Nous utiliserons aussi la représentation de la méthode par son tableau de Butcher [BUT64] :

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

$s$  est appelé le nombre d'étapes internes de la méthode. Dans la suite, nous noterons  $e$  le vecteur dont toutes les composantes valent 1 et pour tout entier  $k$ ,  $c^k$  sera le vecteur obtenu en élevant chacune des composantes du vecteur  $c$  à la puissance  $k$  :

$$e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s \text{ et } c^k = (c_1^k, \dots, c_s^k)^T.$$

Le produit de vecteurs considérés, noté par un point, est le produit de composante par composante. Nous noterons  $I_k$  la matrice identité de rang  $k$ .

Le schéma numérique associé à la méthode Runge-Kutta pour la résolution de (2.27) est défini par  $s + 1$  formules quadratiques [CM89]. On peut écrire le schéma sous la forme générale :

$$y_{n+1} = y_n + h_n F(t_n, y_n, h_n; f) \quad (2.39)$$

où  $F$  est une fonction définie par

$$F(t_n, y_n, h_n; f) = \sum_{i=1}^s b_i K_i, \quad (2.40)$$

$$\text{où } K_i = f(t_n + c_i h_n, y_n + h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j), \quad i = 1, 2, \dots, s.$$

Lorsque  $a_{ij} = 0$  pour  $j \geq i$ , la méthode est dite explicite sinon elle est dite implicite.

**Résolution avec le solveur ODE** Le calcul numérique est réalisé par la bibliothèque MUESLI (<http://www.irisa.fr/sage/edouard/canot/muesli/>) qui inclue entre autre la routine `ddebf` de la bibliothèque SLATEC. Ce solveur est conçu pour résoudre des systèmes d'équations différentielles non linéaires et dépendantes du temps. Il est employé pour réaliser l'intégration en temps et atteindre la stabilité et la précision envisagées en ajustant automatiquement à la fois le pas de temps et l'ordre de la

méthode ; c'est la méthode BDF qui est retenue. La méthode BDF est en effet la mieux adaptée à notre problème qui devient de plus en plus raide quand  $\Delta T$  tends vers zéro (voir figure 2.25).

L'utilisateur fournit au solveur deux fonctions calculant respectivement la valeur de  $F$  et la matrice jacobienne  $\frac{\partial F}{\partial Y}$  de cette fonction  $F$ . Par ailleurs, la routine `ddebdf` a été modifiée de telle manière que la matrice jacobienne  $A(T)$  peut être codée à la main sous un format creux.

### 2.6.3 Résultats et commentaires

La précision et la flexibilité de la méthode numérique utilisée sont obtenues en comparant les résultats numériques aux solutions analytiques existantes [CJ59], [BK03] et [KC90]. Les figures (2.19) et (2.21) représentent les profils de température pour différentes valeurs de  $\Delta T$ , pour une discrétisation spatiale sur  $N = 320$  points. Les figures (2.20) et (2.22) montrent les histoires de température correspondantes à  $x = 5$  cm. Il est évident que la précision de la méthode d'AHC est sensible à la valeur de  $\Delta T$  arbitrairement choisie pour approximer la distribution de Dirac.

Nous présentons un facteur de qualité pour chaque solution qui combine la précision et la régularité selon la relation :

$$\text{Facteur de qualité} = \text{Erreur}_{\text{RMS}}(T) + 0.025 \text{Erreur}_{\text{RMS}}(T') \quad (2.41)$$

Puisque la méthode de capacité apparente converge vers la solution analytique lorsque l'intervalle de changement de phase s'approche de zéro, il est évident que la méthode de capacité apparente produit des solutions régulières et précises.

Il s'avère de ces solutions numériques que les résultats obtenus en rapprochant le changement de phase à une température fixe par un changement progressif sur un petit intervalle de température devraient être acceptable si

$$\frac{2\Delta T}{|T_i - T_f|} < 0.1 \quad (2.42)$$

Dans la figure (2.23), nous pouvons voir qu'il y a un minimum pour le facteur de qualité correspondant à une certaine valeur de  $\Delta T$ . La valeur optimale de  $\Delta T$  correspondante à ce minimum a été tracée par rapport à  $\Delta x$  (voir figure 2.25).

## 2.7 Comparaison entre les deux méthodes

En pratique, dans les problèmes de changement de phase, plus d'une interface de changement de phase peut apparaître ou les interfaces peuvent disparaître entièrement. En outre, le changement de phase se produit dans un intervalle de température non-isotherme. Dans ces cas, le suivi de l'interface solide-liquide peut être difficile ou même impossible. Du point de vue numérique, il est avantageux que le problème soit reformulé de telle manière que la condition de Stefan (2.5) soit implicitement écrite sous une

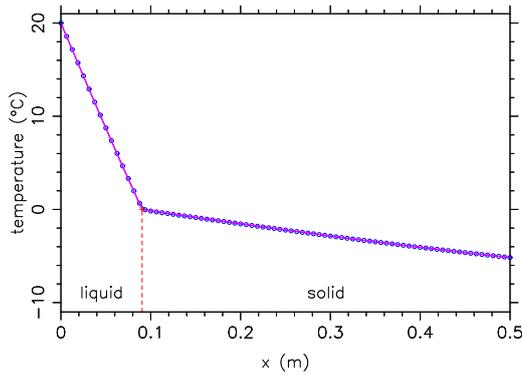


FIG. 2.19 – Profil de température à  $t_{max} = 50 h$ .  $N_{basic} = 300$ .  $\Delta T = 0.1^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).

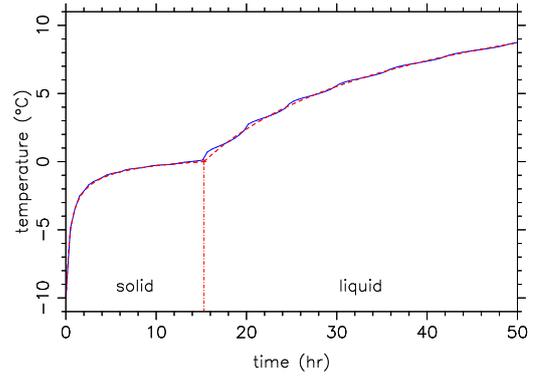


FIG. 2.20 – Histoire de la température à  $x = 5 cm$ .  $N_{basic} = 300$ .  $\Delta T = 0.1^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).

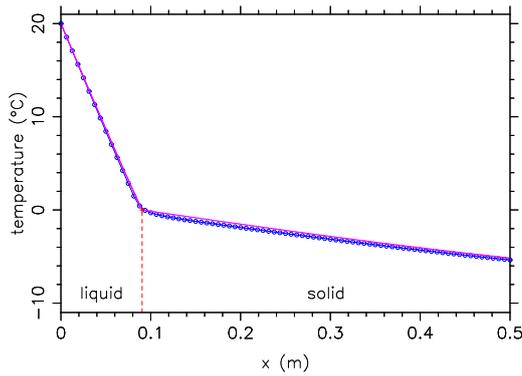


FIG. 2.21 – Profil de température à  $t_{max} = 50 h$ .  $N_{basic} = 300$ .  $\Delta T = 0.5^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).

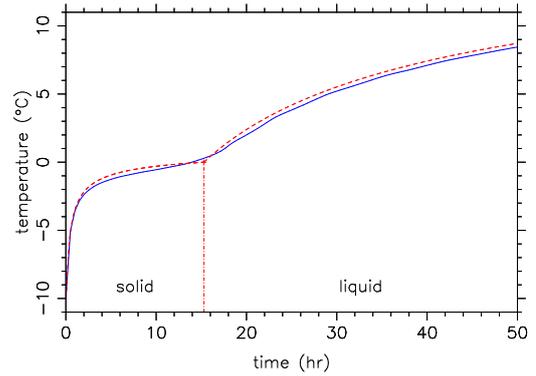


FIG. 2.22 – Histoire de la température à  $x = 5 cm$ .  $N_{basic} = 300$ .  $\Delta T = 0.5^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).

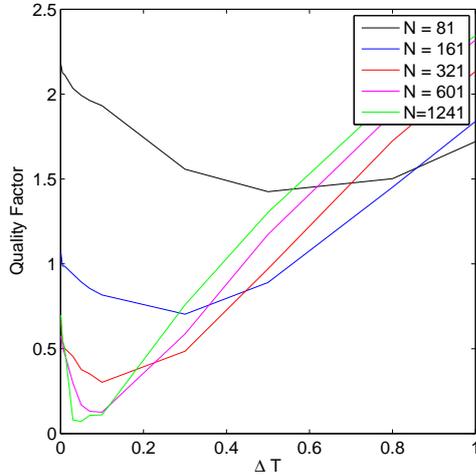


FIG. 2.23 – Facteur de qualité par rapport à la taille de l'intervalle de température de changement de phase pour différent nombre des nœuds.

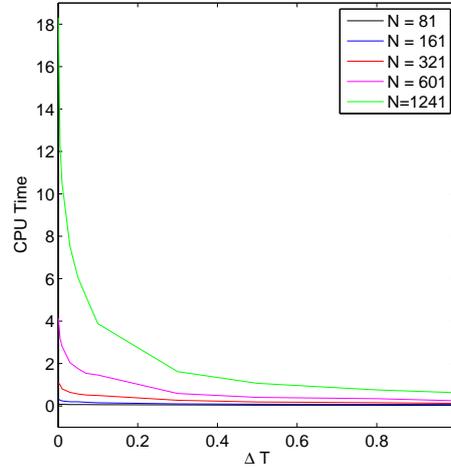


FIG. 2.24 – Temps CPU par rapport à la taille de l'intervalle de température de changement de phase pour différent nombre des nœuds.

nouvelle forme des équations et que les équations soient appliquées sur tout le domaine de calcul. Cela peut être fait en déterminant ce qui est connu sous le nom de la fonction d'enthalpie  $H(T)$  et en employant la méthode AHC. La méthode de LHA a le grand avantage de donner une solution exacte avec une haute précision, mais cette méthode souffre des fluctuations qui ne sont éliminées que par l'utilisation d'un maillage adaptatif au niveau de l'interface. Numériquement, le problème majeur de cette méthode est que nous utilisons un schéma explicite, et ceci est très pénalisant lors de l'utilisation d'un maillage adaptatif. Pour le moment, le problème est résolu en 1-D. En 2-D et 3-D nous pouvons nous attendre à des difficultés majeures en termes d'implémentation et de coût de calcul.

Avec la méthode AHC, il est également possible de décrire le changement de phase non-isotherme. Ce modèle proposé est résolu en utilisant la méthode des lignes avec laquelle les fluctuations trouvées en employant l'approche LHA peuvent être évitées en choisissant une valeur appropriée de  $\Delta T$ . Autrement, il est évident que l'erreur et l'ordre de précision sont plus prononcés dû au fait que la singularité de la fonction de Dirac est approximée par un changement continu sur un petit intervalle de changement de phase. Une autre observation est que l'effet de distribuer la chaleur latente sur l'intervalle de changement de phase diminue quand le rapport de la taille de cet intervalle sur la variation totale de la température diminue. Il est évident que la méthode AHC permet de produire des solutions précises et régulières. Peut-être la plus grande critique qu'on peut émettre contre cette méthode est qu'elle nécessite beaucoup de stockage pour chacune des paramètres inconnus à calculer. Ce serait tout à fait excessif pour l'utilisateur intéressé à résoudre un problème dépendant du temps en trois dimensions.

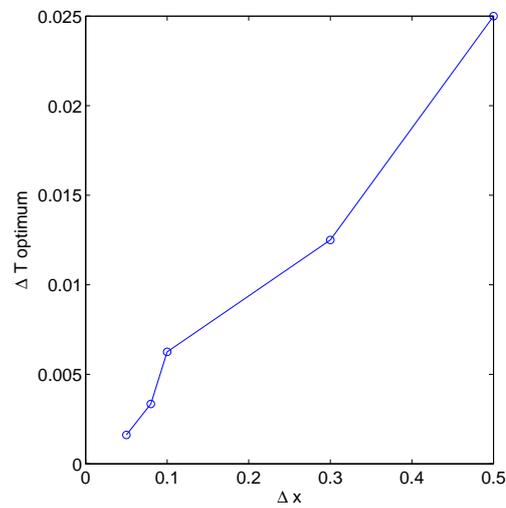


FIG. 2.25 –  $\Delta T$  optimale par rapport à  $\Delta x$ .

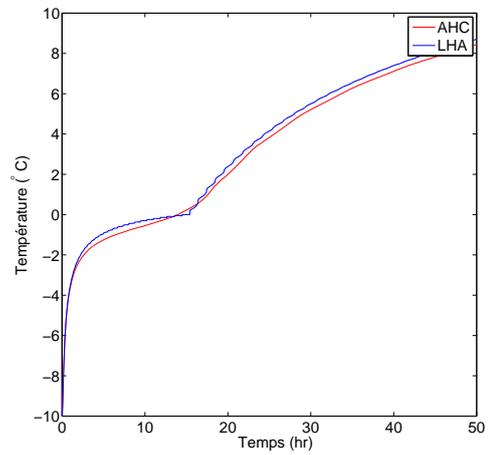


FIG. 2.26 – Comparaison entre les histoires de température à 5 cm obtenues par LHA ( $N_{basic} = 80$  et  $N_{subdivision} = 5$ ) et par AHC ( $N_{basic} = 320$  et  $\Delta T = 0.5^\circ C$ ).

La figure (2.26) montre une comparaison entre les histoires de température à 5 cm obtenues par les deux algorithmes décrits ci-dessus.



## Chapitre 3

# Transfert de chaleur avec changement de phase

La simulation numérique des écoulements liquide-vapeur dans des conditions réalistes est un véritable défi vu les multiples difficultés rencontrées, relatives aussi bien à la modélisation physique qu'aux méthodes numériques. En effet, il s'agit de représenter un écoulement comportant une interface liquide-vapeur de dynamique rapide avec changement de phase. Dans ce travail, nous nous intéressons aux milieux poreux dans lesquels l'espace rempli de fluide est connecté de manière à ce qu'un écoulement de fluide puisse s'y établir.

L'évaporation en elle-même se déroule au niveau de l'interface gaz-liquide. Il s'agit d'un changement de phase qui entraîne un transfert net de matière de la phase liquide vers la phase gazeuse. Il s'accompagne d'une consommation d'énergie correspondante à la chaleur latente d'évaporation du liquide évaporé. L'évaporation est donc accompagnée d'un écoulement de gaz et de transport d'énergie dans les milieux poreux (Voir figure 3.1) :

- un écoulement de fluide dans la phase gazeuse lié à la présence d'un gradient de pression ;
- un transport de chaleur dans les fluides et dans le solide, pouvant combiner des transports conductifs et convectifs.

La prise en compte de tous ces phénomènes physiques peut s'avérer indispensable pour expliquer l'évaporation d'un liquide dans un milieu poreux. Du point de vue numérique, le problème du suivi d'une interface à travers laquelle les propriétés du fluide sont discontinues a fait l'objet d'un grand nombre de travaux. Dans la suite nous présentons une recherche bibliographique sur l'évaporation en milieux poreux saturés par des fluides.

Le changement de phase en milieux poreux n'a pas fait l'objet, à notre connaissance, de nombreuses études (pour les cas où la différence entre les masses volumiques de deux phases est  $\approx 1000$ ). Les études de Min et Emmons [ME72] donnent une investigation théorique et expérimentale pour le problème de séchage dans les milieux poreux. Ils ont considérés deux mécanismes de transfert de masse : la convection gouvernée par la loi

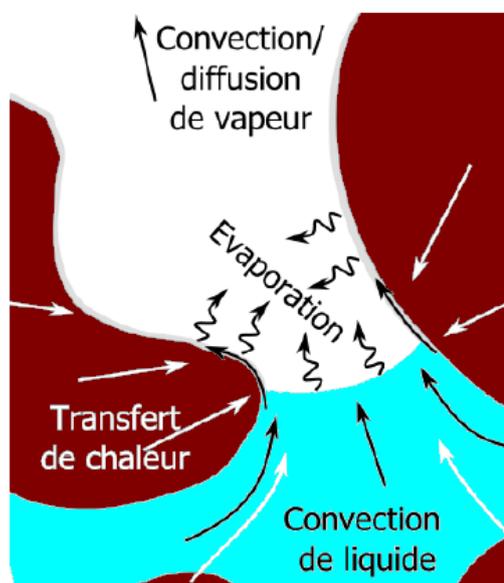


FIG. 3.1 – Schématisation des flux intervenant lors de l'évaporation en milieux poreux.

de Darcy et la diffusion moléculaire des composants gazeux. Ils ont pris en compte le processus de condensation-évaporation qui se produit pendant le séchage au niveau du front d'humidité.

J.C. Ferreri et R. March [FM96] ont travaillé aussi sur le problème d'évaporation dans le sol, ils ont utilisé la méthode de Bonacina [BC73] pour résoudre le problème de changement de phase. Ils ont utilisé la méthode des différences finies en 2D basée sur la transformation des coordonnées ce qui permet de travailler avec des formes de domaine arbitraires. Leurs codes sont validés en comparant les résultats numériques avec les résultats expérimentaux.

Bénet et Jouanna [BJ82] ont établi, à partir de l'expression de la source d'entropie des milieux poreux hétérogènes, la relation phénoménologique de changement de phase de l'eau dans un milieu poreux lorsque la pression partielle de la vapeur d'eau est différente de la pression d'équilibre.

Chammari et al. [ACB03] ont modélisé le transfert d'eau dans un sol à faible teneur en eau (domaine pendulaire et hygroscopique). Leur modélisation s'appuie sur l'idée d'un changement de phase liquide-gaz accompagné d'un transfert en phase gazeuse. Le modèle de changement de phase développé introduit un coefficient phénoménologique déterminé lors d'une étude expérimentale de volatilisation sur des échantillons centimétriques. Ils ont fait des simulations numériques basées sur le modèle de transfert et ont comparé leurs résultats aux cinétiques expérimentales de séchage d'un échantillon macroscopique. Le bon accord qu'ils ont obtenu conforte, d'après les auteurs, l'hypothèse d'un transport en phase gazeuse associé à un changement de phase avec non-

équilibre thermodynamique liquide-gaz.

Debaste et al. [DEB08], [FD07] ont développé des modèles fondamentaux d'évaporation en milieu poreux qu'ils ont appliqué ensuite au séchage en lit fluidisé de deux matériaux granulaires. Les modèles mis au point sont réalisés suivant une démarche multiechelle en explorant des échelles allant de celle du pore à celle du réacteur en passant par celle du grain. Pour chacune de ces échelles, ils ont visé des objectifs différents et ils ont obtenu trois modèles d'évaporation en milieu poreux permettant la mise au point des simulateurs plus ou moins simplifiés, applicables à une large gamme de systèmes pour aider à la conception, au dimensionnement et à l'optimisation de nombreux procédés industriels de séchage.

Nous avons signalé au chapitre 1 qu'il y a une dépendance entre le transfert des fluides et de chaleur et les propriétés qui régissent ces processus. Nous allons discuter par la suite la diffusion de chaleur dans le milieu poreux avec changement de phase liquide/vapeur. Cependant, pour une première approximation on va supposer que la convection est négligeable et donc le couplage avec l'écoulement de vapeur dans le sol ne sera pas étudié dans ce chapitre.

### 3.1 Évaporation dans le milieu poreux

Le transfert de chaleur dans les milieux poreux s'effectue essentiellement selon deux processus :

- 1) la **conduction** à travers l'ensemble du milieu poreux sous l'effet de gradients de température,
- 2) l'**advection** (écoulement) des fluides qui permet le transfert de l'énergie thermique qu'ils contiennent. Dans la suite on va supposer que le terme d'advection est nul.

Rappelons les équations gouvernant la conduction de la chaleur dans les milieux poreux saturés sont données par :

$$\begin{aligned}
 (\rho C)_e(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} &= f(x, t) & \text{dans } & \Omega \times (0, t_{end}], \\
 \mathbf{q} &= -k_e(T) \nabla T(x, t) & \text{dans } & \Omega \times (0, t_{end}], \\
 T(x, 0) &= T_0(x) & \text{dans } & \Omega, \\
 T(x, t) &= T^D(x, t) & \text{sur } & \Gamma^D \times (0, t_{end}], \\
 \nabla T(x, t) \cdot \nu &= q^N(x, t) & \text{sur } & \Gamma^N \times (0, t_{end}].
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

où la capacité apparente équivalente est donnée par l'équation

$$\begin{aligned}
 (\rho C)_e &= \phi(\rho C)_f + (1 - \phi)(\rho C)_s \\
 &= \phi \rho_f C_f + (1 - \phi) \rho_s C_s
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

et la conductivité équivalente est donnée par la moyenne harmonique pour sa supériorité à supporter les changements brusques dans les valeurs de la conductivité [PM04] :

$$\frac{1}{k_e} = \frac{\phi}{k_f} + \frac{1 - \phi}{k_s} \tag{3.3}$$

où  $\Omega$  est un domaine borné dans  $\mathbb{R}^d$  ( $d = 1, \dots, 3$ ) avec le bord  $\partial\Omega = \Gamma^D \cup \Gamma^N$ ;  $T$  représente la température;  $\rho$ ,  $C$  et  $\phi$  représentent respectivement la masse volumique, la capacité apparente et la porosité du milieu poreux (les indices  $e$ ,  $f$  et  $s$  indiquent respectivement les paramètres équivalents du milieu, les propriétés du fluide et celles de la matrice poreuse);  $k$  est la conductivité, elle est supposée un tenseur des composants diagonaux dans  $L^\infty(\Omega)$ ;  $\nu$  représente le vecteur normal extérieur sur la frontière  $\partial\Omega$ ;  $f \in L^2(\Omega)$  représente la fonction source;  $T^D$  et  $q^N$  sont respectivement les conditions aux bords Dirichlet et Neuman pour la température. Les propriétés du fluide sont dépendantes de la température alors que par simplicité les propriétés physiques du sol sont supposées constantes.

Parmi les quelques modèles mathématiques qui décrivent l'évaporation en milieux poreux, nous avons retenu le modèle AHC présenté dans le chapitre 2 après comparaison avec la méthode LHA. Le formalisme AHC est basé sur la modification des paramètres physiques, relative à l'état microscopique de chaque phase présente dans le milieu poreux, selon la température [BC73]. Il applique les équations de continuité et d'énergie aux trois phases, liquide, solide et gazeuse dans un volume élémentaire représentatif. Il effectue, ensuite, une opération de macroscopisation de ces équations en utilisant la technique de prise de moyenne. Cette méthode nous permet de traiter le problème dans une seule region sans avoir besoin de suivre l'interface explicitement, ce qui rend le problème plus facile à généraliser aux cas multidimensionnels. Selon [BC73], les paramètres physiques sont donnés par (voir figure 3.2) :

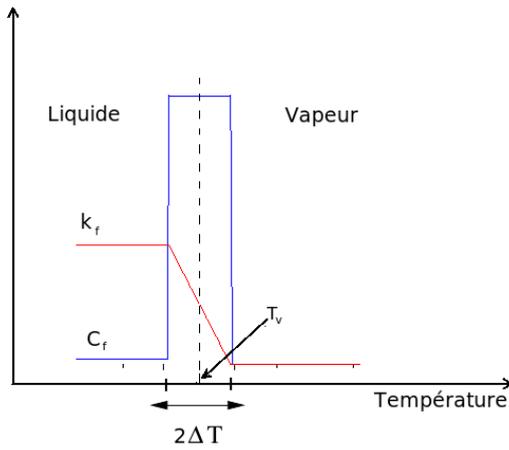


FIG. 3.2 – Propriétés physiques données par Bonacina.

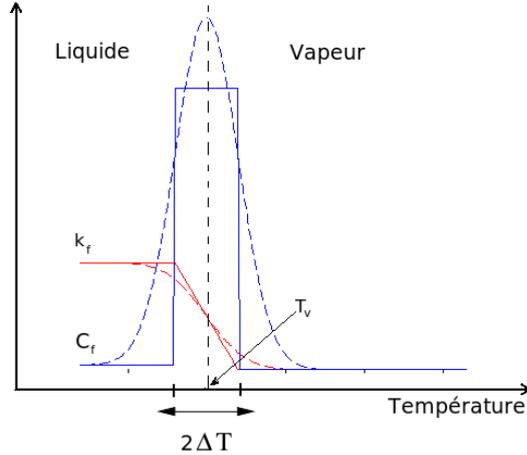


FIG. 3.3 – Propriétés physiques régularisées.

La capacité thermique du fluide

$$C_f = \begin{cases} C_l, & T < T_v - \Delta T \\ \frac{C_v + C_l}{2} + \frac{\lambda}{2\Delta T}, & T_v - \Delta T \leq T \leq T_v + \Delta T \\ C_v, & T > T_v + \Delta T \end{cases} \quad (3.4)$$

où  $\lambda = L/\rho$ ,  $\rho$  est la masse volumique et  $L$  est la chaleur latente de changement de

phase,  $C$  est la capacité thermique,  $T_v$  est la température d'évaporation (température de changement de phase) et  $\Delta T$  est le semi-intervalle de changement de phase. Les indices  $l$  et  $v$  représentent respectivement les phases liquide et vapeur. De même, la conductivité thermique équivalente est donnée par :

$$k_f = \begin{cases} k_l, & T < T_v - \Delta T \\ k_l + \frac{k_v - k_l}{2\Delta T} [T - (T_v - \Delta T)], & T_v - \Delta T \leq T \leq T_v + \Delta T \\ k_v, & T > T_v + \Delta T \end{cases} \quad (3.5)$$

Comme on a vu dans le chapitre 2, ces propriétés souffrent d'un problème de continuité. En utilisant la même approche que dans la section (2.6), les coefficients (3.4) et (3.5) peuvent être écrits sous la forme :

$$C_f = C_l + (C_v - C_l)\sigma + L \frac{d\sigma}{dT} \quad (3.6)$$

et

$$k_f = k_l + (k_v - k_l)\sigma \quad (3.7)$$

où

$$\sigma = \chi(T - T_v) \quad (3.8)$$

avec  $\chi$  est la fonction Heaviside par morceaux dont la valeur est zéro si  $T < T_v$  et un ailleurs. Sa dérivée, qui représente la variation de la phase initiale avec la température, est définie par :

$$\frac{d\sigma}{dT} = \delta(T - T_v) \quad (3.9)$$

où  $\delta(T - T_v)$  est la distribution de Dirac dont la valeur est infinie à la température d'évaporation,  $T_v$ , et zéro à toutes les autres températures. Pour éviter la singularité, la distribution de Dirac peut être approchée par la fonction de distribution normale montrée dans la figure (2.17)

$$\frac{d\sigma}{dT} = (\epsilon\pi^{-1/2}) \exp[-\epsilon^2(T - T_v)^2] \quad (3.10)$$

où  $\epsilon$  est choisi pour être  $\epsilon = 1/\sqrt{2}\Delta T$  et où  $\Delta T$  est la moitié de l'intervalle de changement de phase.

La fonction  $\sigma$  est obtenue en intégrant  $d\sigma/dT$

$$\sigma(T) = \frac{1}{2} (1 + \operatorname{erf}(\epsilon(T - T_v))) \quad (3.11)$$

Pour éviter de résoudre le problème dans deux régions différentes (zone sèche et zone humide), on utilise la même approximation pour tous les paramètres physiques. La masse volumique de fluide sera définie par :

$$\rho_f = \rho_l + (\rho_v - \rho_l)\sigma \quad (3.12)$$

où  $\rho_l$  et  $\rho_v$  sont supposés constants.

### 3.2 Méthodes numériques

Différentes méthodes numériques, comme la méthode des différences finies (DF), des volumes finis (VF), et des éléments finis de Galerkin (EF) et des éléments finis mixtes (EFM), peuvent être utilisées pour résoudre les équations de diffusion en milieux poreux. La méthode des VF permet le calcul de la température moyenne par maille. Elle donne un bilan de masse exact au niveau de chaque élément. Les deux méthodes (DF) et (VF) sont monotones. Cette propriété évite les oscillations non physiques et préserve la positivité de la solution approchée. Mais ces deux méthodes présentent des contraintes sur la discrétisation spatiale. La méthode des DF ne se prête pas à des domaines à géométrie complexe et nécessite un maillage régulier du domaine. La méthode des VF est plus flexible que celle des DF. Cependant, cette approche nécessite le respect des conditions de Delaunay sur la discrétisation spatiale des maillages triangulaires. La vérification de ces conditions peut même présenter une réelle difficulté pour les maillages tétraèdres dans le cas des problèmes tridimensionnels. Par ailleurs, les deux méthodes (DF et VF) ne sont pas adaptées à la résolution des problèmes avec des tenseurs de conductivité non diagonaux (dans le cas d'un milieu anisotrope).

Dans la méthode des EF, les équations sont discrétisées par des polynômes de degré  $k \geq 1$  sur le domaine maillé. En pratique, on prend des triangles ou des quadrilatères dans des problèmes à deux dimensions et des tétraèdres ou des parallélépipèdes quelconques pour des problèmes tridimensionnels. Ceci permet de décrire d'une manière souple les limites du domaine à géométrie complexe ainsi que les limites des hétérogénéités. De plus, cette méthode est capable de traiter toutes les directions d'anisotropie (tenseur de conductivité plein).

Dans la suite on va résoudre le problème d'évaporation dans le milieu poreux par deux approches, la première est basée sur une discrétisation spatiale avec la méthode des volumes finis sur un maillage régulier dans les cas 1D et 3D-axisymétrique. La discrétisation temporelle utilise la méthode BDF (Backward Differentiation Formula) et une variante de la méthode de Newton pour traiter la non-linéarité. La deuxième approche utilise une discrétisation spatiale basée sur la méthode des éléments finis mixtes hybrides 2D et 3D et un schéma temporel semi-implicite. Le phénomène de changement de phase est pris en compte en utilisant l'approche (AHC) décrite ci-dessus (3.1).

### 3.3 Résolution globale par un solveur ODE

Dans cette partie, on propose une méthode numérique globale robuste et précise pour résoudre le système non linéaire du problème de diffusion de la chaleur dans le milieu poreux saturé. On va utiliser la méthode des lignes pour discrétiser séparément en temps et en espace. En fait, la méthode proposée est différente de celles qu'on trouve dans la littérature par le schéma numérique utilisé pour discrétiser en temps et dans la méthode numérique utilisée pour traiter la non linéarité présente dans le système des équations. Notre approche utilise un schéma implicite d'ordre 1 (BDF) et une variante de la méthode de Newton implémentés dans un solveur ODE; le but est d'utiliser ce

solveur pour contrôler le pas de temps, l'ordre du schéma, la mise à jour du Jacobien et la convergence des itérations de Newton.

Le problème (3.1) est discrétisé en utilisant la méthode des lignes (2.6.1) où les discrétisations en temps et en espace sont considérées séparément. Le schéma de discrétisation spatiale est basé sur la méthode des volumes finis, due au Patankar [RYK03], qui consiste à diviser le domaine de calcul en un certain nombre de volumes de contrôle. La variable dépendante considérée est calculée en ces points. Les équations définies en ces noeuds, sont obtenues par intégration des équations de conservation sur les volumes de contrôle, pour chaque noeud. On utilise la même méthode de résolution que dans la section (2.6.1).

On note par  $T_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  les solutions approchées de  $T$  aux volumes  $V_i$ . Les notations  $x_{i+\frac{1}{2}}$ ,  $x_{i-\frac{1}{2}}$  et  $\Delta x_i$  sont définis dans la section (2.4). Dans la suite, comme le maillage utilisé est uniforme on a :

$$\Delta x_i = \Delta x \quad \forall \quad 1 \leq i \leq N$$

### 3.3.1 Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie (3.1) en 1D

Considérons le problème comportant la diffusion de la chaleur dans un champ d'écoulement continu unidimensionnel. L'équation (3.1), est discrétisée en prenant (figure 2.1) comme référence, on suppose qu'il n'y a pas un terme source. À chaque pas de temps l'équation est intégrée sur les volumes de contrôle :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} dx = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left( k_e \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx \quad 2 \leq i \leq N - 1 \quad (3.13)$$

Pour le terme transitoire, on suppose que la température de chaque volume de contrôle est représentée par celle du noeud :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} dx = (\rho C)_{e,i} \frac{dT_i}{dt} \Delta x = (\rho C)_e (T_i) \frac{dT_i}{dt} \Delta x, \quad 2 \leq i \leq N - 1 \quad (3.14)$$

Le terme de diffusion est approximé en utilisant un profil de température linéaire :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} k_e \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx = \left[ k_e \Big|_{i+\frac{1}{2}} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} - k_e \Big|_{i-\frac{1}{2}} \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x} \right], \quad 2 \leq i \leq N - 1 \quad (3.15)$$

En substituant les termes (3.14) et (3.15) dans (3.13) pour un maillage uniforme, les équations discrétisées pour un volume de contrôle sont données par

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{dt} - \frac{k_{i+1} + k_i}{2(\rho C)_{e,i} \Delta x^2} (T_{i+1} - T_i) - \frac{k_i + k_{i-1}}{2(\rho C)_{e,i} \Delta x^2} (T_i - T_{i-1}) &= 0, \quad 2 \leq i \leq N - 1, \\ T(x_i, 0) = T_0(x_i) &= T_{0,i} \quad 1 \leq i \leq N, \\ T(x_i, t) = T^D(x_i, t) &= T_i^D(t) \quad i = 1 \text{ ou } i = N, \\ \nabla T(x_i, t) \cdot \nu &= q_i^N(x_i, t) = q_i^N(t) \quad i = 1 \text{ ou } i = N, \end{aligned} \quad (3.16)$$

### 3.3.2 Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie (3.1) en 3D-axisymétrique

Dans le cas d'un domaine à symétrie axiale, l'équation d'énergie est écrite avec des coordonnées cylindriques (voir figure 3.4) et nous supposons qu'il n'y a pas de dépendance avec  $\theta$ . L'équation (3.1) est écrite sous la forme :

$$(\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.17)$$

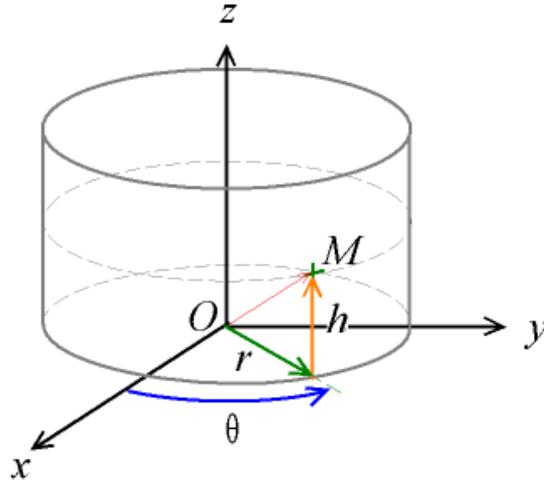


FIG. 3.4 – Système des coordonnées cylindriques.

La discrétisation spatiale de l'équation est effectuée par la méthode des volumes finis, l'équation est intégrée sur tous les volumes de contrôle. On utilise  $N$  points de discrétisation dans la direction  $r$  et  $M$  points dans la direction  $z$ , ainsi après discrétisation l'équation d'énergie (3.1) est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{dT_{i,j}}{dt} - \frac{2(k_{i+1,j} + k_{i,j})(r_{i+1} + r_i)}{(\rho C)_e [r_{i+1}^2 + 2r_i(r_{i+1} - r_{i-1}) - r_{i-1}^2] \Delta r} (T_{i+1,j} - T_{i,j}) \\ + \frac{2(k_{i,j} + k_{i-1,j})(r_i + r_{i-1})}{(\rho C)_e [r_{i+1}^2 + 2r_i(r_{i+1} - r_{i-1}) - r_{i-1}^2] \Delta r} (T_{i,j} - T_{i-1,j}) \\ - \frac{k_{i,j+1} + k_{i,j}}{2(\rho C)_e \Delta z^2} (T_{i,j+1} - T_{i,j}) + \frac{k_{i,j} + k_{i,j-1}}{2(\rho C)_e \Delta z^2} (T_{i,j} - T_{i,j-1}) = 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

avec  $2 \leq i \leq N-1$  et  $2 \leq j \leq M-1$ . Les conditions initiales et aux limites sont données par

$$\begin{aligned} T(r_i, z_j, 0) = T_0(r_i, z_j) = T_{0,i,j} \quad 1 \leq i \leq N, \quad 1 \leq j \leq M \\ T(r_i, z_j, t) = T^D(r_i, z_j, t) = T_{i,j}^D(t) \quad i \in \{1, N\} \text{ et } j \in \{1, M\}, \\ \nabla T(r_i, z_j, t) \cdot \nu = q^N(r_i, z_j, t) = q_{i,j}^N(t) \quad i \in \{1, N\} \text{ et } j \in \{1, M\}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

### 3.3.3 Résolution globale par la méthode des lignes

Après la discrétisation spatiale, le problème (3.1) s'écrit sous la forme d'un système ODE semi-discret

$$\frac{dT}{dt} + A(T)T = b, \quad T \in \mathbb{R}^N(1D) \text{ ou } \mathbb{R}^{N \times M}(3D\text{-axi}) \quad (3.20)$$

où les coefficients de la matrice  $A(T)$  et du vecteur second membre  $b$  sont obtenus à partir de la discrétisation spatiale du système (3.1).

Pour la discrétisation en temps on a choisit d'utiliser un schéma implicite BDF (Backward Differentiation Formula). En plus, la non linéarité est traitée par une variante de la méthode de Newton.

Le Jacobien est calculé par :

$$\frac{d}{dT}(A(T)T) = A(T) + \frac{dA}{dT}T \quad (3.21)$$

### 3.3.4 Logiciel implémenté

Après avoir présenté le système à résoudre et les différentes méthodes de résolution, on présente dans cette partie le logiciel qui a été implémenté avec la méthode de résolution globale présentée précédemment.

Pour effectuer l'intégration en temps on a utilisé un solveur ODE (2.6.2) comme une boîte noire. Ce solveur utilise la méthode BDF (Backward Differentiation Formula) qui adapte le pas de temps pour trouver la précision désirée avec un temps de calcul optimal.

Pour traiter la non linéarité existante dans le système (due au fait que les coefficients de  $A$  sont dépendants de la température) le solveur utilise une variante de la méthode de Newton [OR70]. Le calcul numérique est réalisé par la bibliothèque MUESLI du Fortran (<http://www.irisa.fr/sage/edouard/canot/muesli/>) avec la routine `ddebdf` (modifiée) de la bibliothèque SLATEC. De plus, pour que le solveur accepte une matrice jacobienne creuse, on a également modifié cette dernière routine pour interfacer un solveur linéaire creux (UMFPack).

Le logiciel est écrit en Fortran 90, il permet de simuler la diffusion de la chaleur dans le sol saturé d'eau avec changement de phase eau/vapeur en négligeant l'effet du terme convectif (sans couplage avec l'écoulement de gaz) dans les cas 1D et 3D axisymétrique, ce logiciel est appelé DIFFUSE-SC (voir figure (3.5)).

## 3.4 Résolution avec les éléments finis mixtes hybrides

L'approche proposée dans la section précédente utilise une discrétisation en volumes finis centrés basée sur un maillage carré uniforme. Pour résoudre le problème en 3D et pour pouvoir travailler avec des géométries complexes il vaut mieux utiliser un maillage tétraédrique et donc il faut respecter la condition de Delaunay avec la discrétisation volumes finis ce qui est difficile en 3D, l'autre choix est d'utiliser une discrétisation

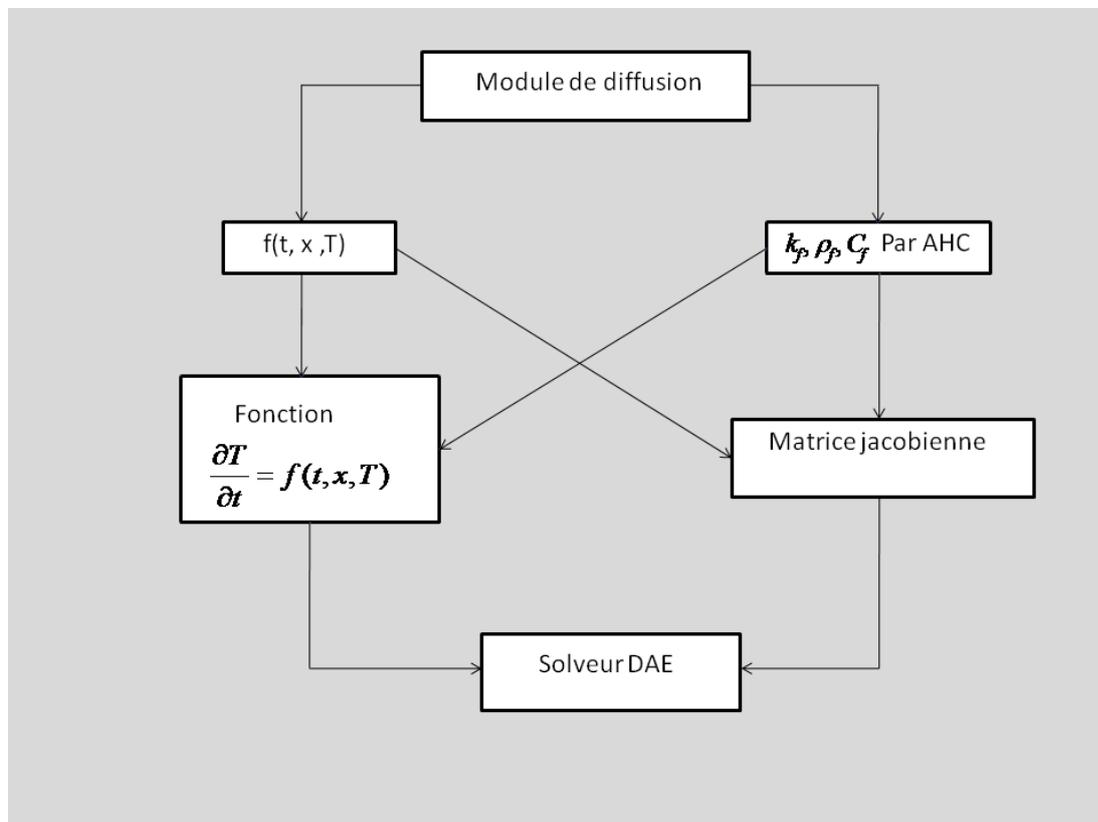


FIG. 3.5 – Fonctions utilisées par DIFFUSE-SC.

en éléments finis qui est en plus capable de traiter toutes les directions d'anisotropie (tenseur de conductivité plein).

Cette section porte sur la présentation d'une approche générale et la modification d'un code numérique en 2D et 3D pour simuler le phénomène de diffusion de la chaleur en milieu poreux qui présente un phénomène de changement de phase liquide/vapeur. Le code développé permet de manipuler des géométries assez complexes.

L'approche utilisée consiste à utiliser les fonctions de base de l'espace de Raviart-Thomas de plus bas degré pour évaluer les termes diffusifs du système d'équations aux dérivés partielles (3.1). Les maillages hybrides utilisés (c'est-à-dire les maillages dont les mailles sont de natures géométriques différentes) permettent un pavage de l'espace d'un milieu géométriquement complexe. Pour prendre en compte le phénomène d'évaporation (changement de phase) dans le milieu poreux, on a utilisé la méthode de capacité apparente (AHC) (3.1).

La résolution de ce problème est basée sur la modification du code TRACES [HA03] (Transport of RadioActive Elements in Subsurface). Il s'agit d'un programme de simulation de transport réactif dans un milieu poreux saturé.

### 3.4.1 La formulation mixte hybride

Les méthodes numériques utilisées par TRACES sont basées sur la discrétisation avec les éléments finis mixtes hybrides (EFMH). Ces méthodes assurent un bilan de masse exact, acceptent de fortes discontinuités entre les éléments adjacents, et traitent de tenseurs pleins sans faire des approximations.

Bien que la méthode des EFM (éléments finis mixtes) soit numériquement plus précise que celle des EFMH (éléments finis mixtes hybrides) dans l'approximation des flux, notamment avec la présence de mailles aplaties ou de forts contrastes de conductivité hydrauliques [HOT02], la méthode des EFM conduit à un système algébrique linéaire non défini positif et qu'on peut pas résoudre avec les algorithmes robustes comme Choleski et le gradient conjugué. Par contre, la méthode EFMH permet d'avoir un système linéaire symétrique défini positif.

L'hybridation consiste à écrire une équation par face (3D) ou par bord (2D) d'un élément. Les étapes suivantes sont utilisées :

- 1- l'équation de bilan de masse est écrite en utilisant les variables statiques seulement ;
- 2- la variable moyenne par élément est exprimée comme une fonction des valeurs moyennes aux faces/bords ;
- 3- l'équation de continuité de flux est écrite en utilisant les valeurs moyennes aux faces/bords seulement.

Dans la suite, nous présentons une mise en oeuvre simplifiée des EFMH. Les développements qui suivent sont inspirés de la thèse de Hussein Hoteit [HOT02].

Soit  $\tau_h$  une discrétisation du domaine en triangles ou quadrilatères (en 2D), en tétraèdres, prismes ou parallélépipèdes (en 3D), où  $h$  représente le diamètre du maillage ( $h = \max_{A \in \tau_h} \text{diam}(A)$ ). Soit  $\varepsilon_h$  l'ensemble des arêtes du maillage qui n'appartiennent pas à  $\Gamma^D$ . Par  $N_\varepsilon$  et  $N_\tau$ , nous représentons les cardinaux de  $\varepsilon_h$  et  $\tau_h$ , respectivement.

L'espace de Raviart-Thomas de plus bas degré  $RT_0(A)$  est défini sur chaque élément  $A \in \tau_h$  par :

$$RT_0(A) = \begin{cases} \chi_A | \chi_A = (a + bx_1, c + bx_2), a, b, c \in \mathbb{R}, & \text{si } A \text{ triangle,} \\ \chi_A | \chi_A = (a + bx_1, c + dx_2), a, b, c, d \in \mathbb{R}, & \text{si } A \text{ rectangle.} \end{cases}$$

Les fonctions de base  $w_{A,E}$  de l'espace  $RT_0$  sur l'élément de référence sont représentées sur la figure (3.6).

Sur cet espace, les flux élémentaires sur l'élément  $A$  sont définis par :

$$q^A = \sum_{E \subset \partial A} w_E^A Q_E^A, \quad A \in \tau_h \quad (3.22)$$

où  $Q_E^A$  sont les flux à travers les arêtes  $E$  de  $A$ .

Pour chaque élément  $A \in \tau_h$ , la fonction vectorielle  $w_E^A$  de l'élément  $A$  a les principales caractéristiques

$$\nu_{A,E} \cdot w_{A,E'} = \left( \frac{1}{|E|} \delta_{E,E'} \right), \quad E, E' \subset \partial A \quad (3.23)$$

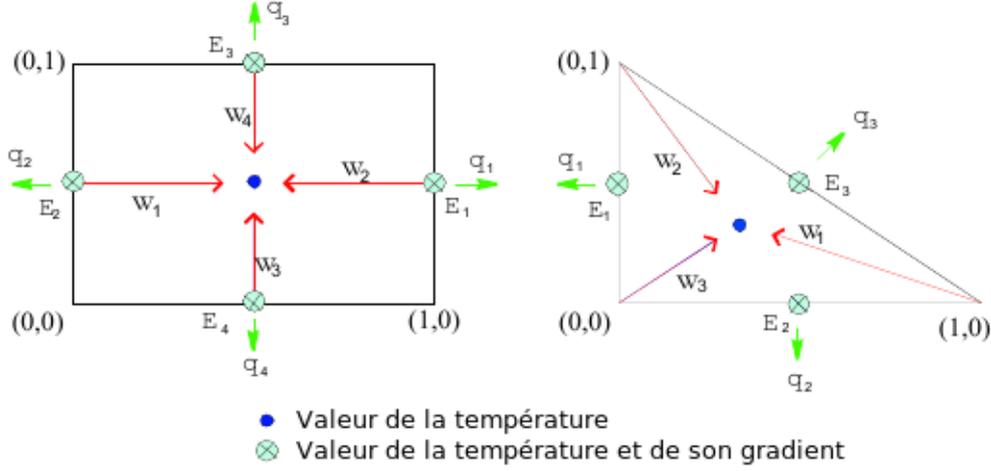


FIG. 3.6 – Les variables nodales sur l'élément de référence.

où  $n_{A_j}$  représente le vecteur normal unitaire à  $E$ , dirigé vers l'extérieur de l'élément  $A$ .  $|E|$  est la surface de la face  $E$  (3D), ou la longueur du bord  $E$  (2D).

$$\nabla \cdot w_E^A = \frac{1}{|A|}, \quad E \subset \partial A \quad (3.24)$$

où  $|A|$  est le volume (3D), ou la surface (2D), de l'élément  $A$ . En plus, sur la face (ou le bord (2D))  $A_j$ , nous avons :

### 3.4.2 Discrétisation spatiale de la loi de Fourier

Par la formulation mixte hybride, la loi de Fourier et l'équation de continuité sont discrétisées séparément. En inversant le tenseur de conductivité, la loi de Fourier s'écrit sous la forme équivalente :

$$k_e^{-1} q = -\nabla T \quad (3.25)$$

La forme variationnelle de la loi de Fourier dans le système (3.1), en utilisant le théorème de Green, est donnée en multipliant cette dernière par une fonction test  $w_E^A$  :

$$\int_A ((k_e^A)^{-1} q^A) w_E^A dA = - \int_A \nabla T \cdot w_E^A dA = \int_A T \cdot \nabla w_E^A dA - \sum_{E' \subset \partial A} \int_{E'} T w_E^A \cdot n_{E'}^A dE \quad (3.26)$$

où  $k^A$  est une approximation de  $k$ .

Utilisant les propriétés (3.23) et (3.24) des fonctions vectorielles  $w_E^A$ , on obtient :

$$\int_A ((k_e^A)^{-1} q^A) w_E^A dA = \frac{1}{|A|} \int_A T dA - \frac{1}{|E|} \int_E T dE = T^A - T_E^A, \quad E \subset \partial A \quad (3.27)$$

où  $T^A$  est la moyenne de la température  $T$  sur l'élément  $A$ , et  $T_E^A$  est sa moyenne sur la face (3D) ou le bord (2D)  $E$ .

L'équation (3.27) peut être écrite sous la forme :

$$\sum_{E' \subset \partial A} B_{E,E'}^A Q_{E'}^A = T^A - T_E^A, \quad E \subset \partial A \quad (3.28)$$

où

$$B_{E,E'}^A = \int_A w_E^{A,T} (k_e^A)^{-1} w_{E'}^A \quad (3.29)$$

Soit encore en posant les vecteurs locaux  $\hat{T}_A = \{T_E^A\}_{E \subset \partial A}$ ,  $Q^A = \{Q_E^A\}_{E \subset \partial A}$  et  $e^A = \{1\}_{E \subset \partial A}$  :

$$B^A Q^A = T^A e^A - \hat{T}^A, \quad A \in \tau_h \quad (3.30)$$

où la matrice élémentaire  $B^A = \left( (B^A)_{E,E'} \right)_{E,E' \subset \partial A}$  est symétrique, définie positive.

La matrice  $B^A$  étant inversible, l'équation (3.30) s'écrit sous la forme équivalente :

$$Q^A = (B^A)^{-1} (T^A e^A - \hat{T}^A), \quad A \in \tau_h \quad (3.31)$$

D'où le flux à travers chaque arête  $E$  s'exprime par l'expression :

$$Q_E^A = \alpha_E^A T^A - \sum_{E' \subset \partial A} (B^A)_{E,E'}^{-1} \hat{T}_{E'}^A \quad (3.32)$$

où  $\alpha_E^A = \sum_{E' \subset \partial A} (B^A)_{E,E'}^{-1}$ .

La continuité de la fonction d'état et de son gradient sur les arêtes du maillage se traduit par les relations suivantes :

Continuité de la température :

$$\hat{T}_E = \hat{T}_E^A = \begin{cases} \hat{T}_E^{A'} & \text{si } E = A \cap A' \\ T_E^D & \text{si } E \in \Gamma^D \end{cases} \quad (3.33)$$

Continuité du flux :

$$Q_E^A = \begin{cases} -Q_E^{A'} & \text{si } E = A \cap A' \\ Q_E^N & \text{si } E \in \Gamma^N \end{cases} \quad (3.34)$$

Compte tenu de la continuité de la température et des flux, et en utilisant la relation (3.32) il est possible d'éliminer l'inconnue  $q$  (flux). Alors le développement de la discrétisation de la loi de Darcy conduit à la représentation matricielle suivante :

$$R^T T - M \hat{T} = V \quad (3.35)$$

où

-  $\hat{T} = \{\hat{T}_E\}_{E \in \varepsilon_h}$  est le vecteur des températures moyennes par arête non imposée ;

- $T = \{T^A\}_{A \in \tau_h}$  est le vecteur des températures moyennes par maille ;
- $R^T$  est la matrice transposée de  $R$  qui est une matrice rectangulaire de taille  $(N_\tau \times N_\varepsilon)$

$$(R)_E^A = \alpha_E^A, \quad E \subset \partial A, \quad A \in \tau_h;$$

- $M$  est une matrice carrée symétrique définie positive d'ordre  $N_\varepsilon$

$$(M)_{E,E'} = \sum_{E,E' \subset \partial A} (B^A)_{E,E'}^{-1};$$

- $V$  est un vecteur correspondant aux conditions aux limites de type Neumann et Dirichlet.

### 3.4.3 Discrétisation spatiale de l'équation de continuité

On cherche maintenant à écrire une forme discrète de l'équation de conservation de la masse. En intégrant cette équation sur  $A$  et en utilisant les propriétés de l'espace d'approximation (3.22), (3.23) et (3.24), on obtient :

$$|A|(\rho C)^A \frac{dT^A}{dt} + \sum_{E \subset A} Q_E^A = f^A \quad A \in \tau_h \quad (3.36)$$

En utilisant l'équation (3.32), la discrétisation de l'équation de continuité conduit à un système différentiel donné par :

$$S \frac{dT}{dt} + DT - R\hat{T} = F \quad (3.37)$$

où  $S$ ,  $D$  et  $R$  dépendent de  $T$ .

- $S$  est une matrice diagonale d'ordre  $N_\tau$ ,

$$(S)_{A,A} = |A|(\rho C)^A(T);$$

$S$  est toujours inversible parce que  $(\rho C)^A(T) \neq 0 \forall T$ ,

- $D$  est aussi une matrice diagonale d'ordre  $N_\tau$ ,

$$(D)_{A,A} = \alpha^A = \sum_{E \subset \partial A} \alpha_E^A;$$

- $F$  est un vecteur de taille  $N_\tau$  dont les composantes sont les  $f^A = 0$  et les températures imposées sur  $\Gamma^D$ .

### 3.4.4 Méthode numérique

La discrétisation spatiale des équations décrivant la diffusion en régime transitoire en appliquant la formulation EFMH conduit à deux systèmes. Le premier (3.35) est

un système algébrique avec  $T$  et  $\hat{T}$  comme inconnus et le deuxième est un système différentiel ordinaire (3.37). Ces systèmes s'écrivent sous la forme :

$$\begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dT}{dt} \\ \frac{d\hat{T}}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} D & -R \\ -R^T & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ \hat{T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ V \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

En inversant les matrices  $S$  et  $M$ , on obtient le système ODE suivant

$$\begin{cases} \frac{dT}{dt} + A(T)T = b \\ T(0) = T_0 \end{cases} \quad (3.39)$$

où  $A = S^{-1}(D - R^T M^{-1}R)$  et  $b = (R^T M^{-1}V + F)$ . Il faut aussi noter que  $A$  dépend de  $T$  et une première approche de résolution peut être d'utiliser un solveur ODE comme dans la partie (3.3) ou un solveur DAE si on garde le système (3.38) tel qu'il est. L'inconvénient est que le système est fortement non linéaire et le coût des itérations de Newton est important. Ainsi, on a proposé une approche a priori moins précise mais plus rapide.

Pour prendre en compte le phénomène de changement de phase, on utilise l'algorithme (AHC) décrit dans la section (3.1). Les propriétés physiques dépendent de la température (masse volumique, capacité thermique et conductivité) et sont mises à jour selon (AHC). Donc les coefficients de la matrice  $A$  deviennent dépendants de la température et le problème devient fortement non linéaire. Ainsi, pour résoudre ce problème on a utilisé un autre schéma de discrétisation en temps, un schéma semi-implicite : à l'instant  $t + \Delta t$  les coefficients de la matrice  $A$  (les propriétés physiques) sont calculés en utilisant les valeurs de la température à l'instant  $t$ . Cette évaluation des quantités dépendantes de la température exige une attention particulière lorsqu'un maillage grossier est utilisé et lorsqu'il y a un changement brusque de ces quantités avec la variation spatiale.

Après discrétisation du système (3.39), au lieu de résoudre un système non linéaire, on doit résoudre ici un système linéaire

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + A(T^n)T^{n+1} = b \quad (3.40)$$

ce qui s'écrit par élimination de  $T$  sous la forme d'un système de deux équations résolues successivement

$$\begin{cases} (M^n - \Delta t N^n) \hat{T}^{n+1} = R^n G^{n,-1} (S^n T^n + \Delta t F) + V \\ G^n T^{n+1} = S^n T^n + \Delta t R^{n,T} \hat{T}^{n+1} + \Delta t F \end{cases} \quad (3.41)$$

où  $N^n = R^{n,T} G^{n,-1} R^n$  et  $G^n = S^n + \Delta t D^n$  une matrice diagonale.

L'utilisation de ce schéma temporel est une manière classique pour traiter la non linéarité et permet d'éviter les itérations de Newton. Autrement, la résolution du système (3.41) ne pose aucune difficulté majeure puisque la matrice  $M - \Delta t N$  est symétrique, définie positive. La résolution de ce système est très efficace avec la méthode du gradient conjugué préconditionné.

### 3.4.5 Algorithme de résolution

La discrétisation des équations décrivant la diffusion de chaleur en régime transitoire obtenue en appliquant la formulation EFMH conduit à résoudre un système linéaire  $Ax = b$ , où  $A$  est une matrice symétrique définie positive. Ce système est résolu en utilisant un préconditionnement du gradient conjugué. L'utilisation de la méthode EFMH nécessite l'inversion d'une matrice  $3 \times 3$  (2D) ou  $4 \times 4$  (3D) pour chaque élément. Après comparaison avec les autres méthodes d'inversion matricielle, la factorisation  $LDL^T$  est utilisée pour inverser ces matrices.

#### Algorithme EFMH

- 1- Initialiser la géométrie et les paramètres physiques du problème
- 2- Initialiser la matrice du système linéaire à résoudre
  - *Début des itérations en temps*
- 3- Mettre à jour les matrices des paramètres thermophysiques du milieu en utilisant la méthode (AHC)
- 4- Calculer  $T$  en résolvant le système linéaire (3.41)
  - *Boucle sur le nombre des cellules*
- 5- Calculer le flux de chaleur  $q$  pour chaque cellule
- 6- Stocker les sorties  $T$  et  $Q$ .

### 3.4.6 Logiciel

TRACES [HA03] est un code de simulation de transport radioactif dans les milieux poreux saturés. Ce code est écrit en Fortran 95 et il est indépendant des plateformes numériques.

Ce code permet de d'effectuer des calculs transitoires ou permanents dans les domaines hétérogènes en 2D ou 3D. Les schémas numériques utilisés dans TRACES (éléments finis mixtes hybrides) assurent la conservation de masse et une discrétisation flexible en espace. Cette discrétisation est basée sur des mailles triangulaires ou quadrangulaires (2D) ou sur des tétraèdres, prismes, ou hexaèdres (3D).

Dans la suite, on va utiliser ce code pour simuler le transfert de chaleur dans les milieux poreux saturés ; on l'a donc modifié pour intégrer le phénomène de changement de phase. Tout d'abord on a supprimé la partie transport et on a restreint le travail sur la partie qui simule les écoulements d'eau souterraine en milieu poreux. En effet, le système d'équation résolu dans ce code (équation de diffusion) est analogue à celui provenant du transfert de chaleur qu'on traite.

D'autre part, TRACES résout le système (3.39) dans le cas où les propriétés physiques ne dépendent pas de la température, c'est-à-dire dans le cas où toutes les matrices sont constantes. Autrement dit, TRACES traite le cas linéaire. Pour résoudre ce système différentiel TRACES utilise un schéma d'Euler implicite pour discrétiser le temps dans le système (3.37), ce qui permet d'éliminer l'inconnu  $T$  pour obtenir les traces des températures  $\hat{T}$  comme inconnues principales [HOT02].

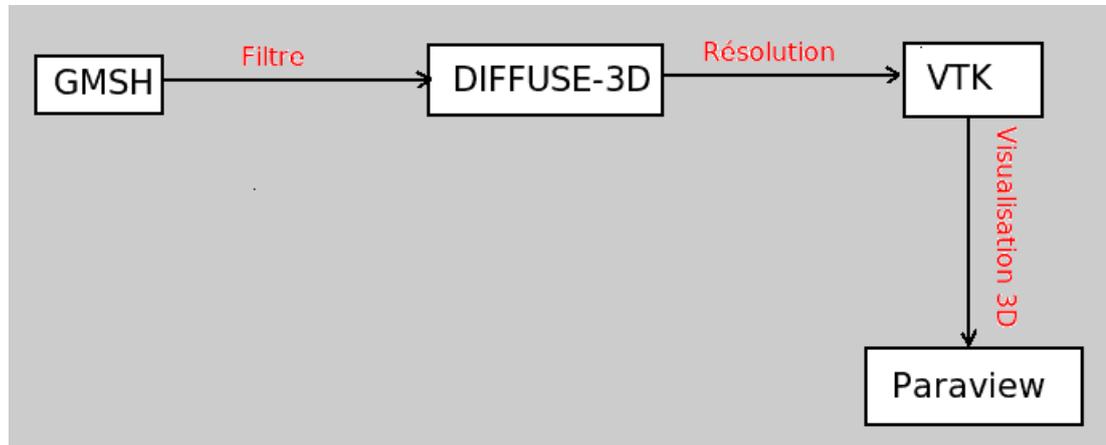


FIG. 3.7 – Méthodologie suivie pour faire des simulations avec DIFFUSE-3D.

On a fait plusieurs modifications dans ce code pour inclure le phénomène de changement de phase ; on a écrit une subroutine qui calcule les propriétés physiques (coefficients matriciels du système différentiel) à chaque pas de temps suivant la méthode AHC ; le schéma semi-implicite en temps (3.41) était déjà implémenté dans ce code. Pour l’instant un pas de temps fixe est utilisé mais un pas de temps variable pourrait être aussi implémenté.

D’autres modifications sont aussi apportées dans le code TRACES : on a amélioré la méthode de calcul de la température aux noeuds par résolution de matrices (3,3) (2D) ou (4,4) (3D) par moindres carrés ; via la bibliothèque Fortran 77 Lapack <sup>1</sup>, qui est une bibliothèque numérique d’algèbre linéaire de haute performance. Des modifications sont aussi apportées pour que le code puisse lire les fichiers de maillages gérés par GMSH<sup>2</sup>, qui est un outil de maillage libre qui intègre un modèleur (et des fonctionnalités de post-traitement), mais dans notre cas, seules l’aspect maillage est utilisé). Pour le 3D, les résultats sont écrits au format VTK, afin de pouvoir les visualiser facilement avec paraview<sup>3</sup>. Avec les modifications ainsi apportées le code est appelé DIFFUSE-3D.

La figure (3.7) montre la méthodologie suivie pour faire des simulations avec le logiciel DIFFUSE-3D. Une fois la géométrie définie, GMSH modélise cette géométrie et construit le maillage, on utilise un filtre pour écrire le maillage sous format accepté par DIFFUSE-3D qui se débrouille pour faire le calcul. Les résultats sont enregistrés sous format VTK pour qu’on puisse les visualiser avec Paraview.

### 3.5 Essais numériques

Le but de cette partie est de valider le code DIFFUSE-3D ainsi que de comparer les deux approches utilisées. L’approche (2.6) utilisée pour résoudre le problème de Stefan

<sup>1</sup>[http://netlib2.cs.utk.edu/lapack/lug/lapack\\_lug.html](http://netlib2.cs.utk.edu/lapack/lug/lapack_lug.html)

<sup>2</sup><http://www.geuz.org/gmsh/doc/texinfo/gmsh.html>

<sup>3</sup><http://www.paraview.org/>

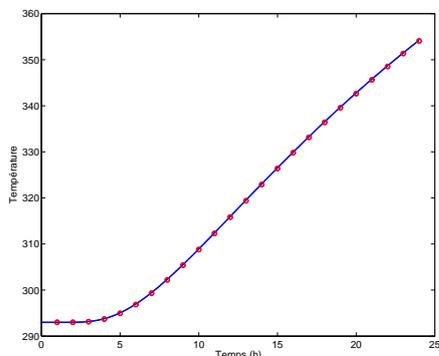


FIG. 3.8 – Histoire de la température à un profondeur de 5 cm dans le sol. Solution analytique (rouge), solution numérique (bleue).

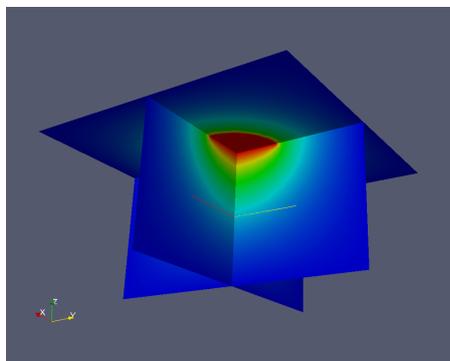


FIG. 3.9 – Solution numérique 3D. Diffusion de la chaleur dans un sol sec.

dans le chapitre 2 a permis de valider le code DIFFUSE-SC. Ici, on valide la deuxième approche utilisée pour développer le code DIFFUSE-3D.

Les exemples de validation présentés dans cette section sont de nature comparative et portent sur une configuration simple où la solution analytique existe (diffusion de la chaleur dans le sol sec et fusion d'un domaine carré de glace de grandeur finie).

### 3.5.1 Diffusion de la chaleur dans un milieu poreux non saturé

Cet exemple porte sur la simulation du phénomène de diffusion de la chaleur dans le sol sec. On suppose que le sol est argileux, et un feu circulaire de diamètre  $d = 30$  cm est allumé à la surface. Le domaine de calcul est de dimension finie  $1m \times 1m \times 1m$ , et la simulation est faite avec le code DIFFUSE-3D en utilisant un maillage tétraédrique (3D). Les propriétés du milieu utilisées pour la simulation sont :

- capacité thermique =  $1300$  J/kg.K
- conductivité thermique =  $0.756$  W/m.K
- Masse volumique =  $1500$  kg/m<sup>3</sup>

La figure (3.9) montre la solution numérique dans le cas 3D.

Pour valider le résultat numérique, on présente une comparaison avec la solution analytique existante. En effet, pour un profondeur de  $z = 5$  cm dans le sol, les valeurs de température répondent à la solution analytique en 1D parce que  $z \ll d$ . La figure (3.8) montre la comparaison entre la solution analytique de l'histoire de température à 5 cm de profondeur et les valeurs expérimentales obtenues par DIFFUSE-3D. une bonne concordance entre les deux courbes est obtenue.

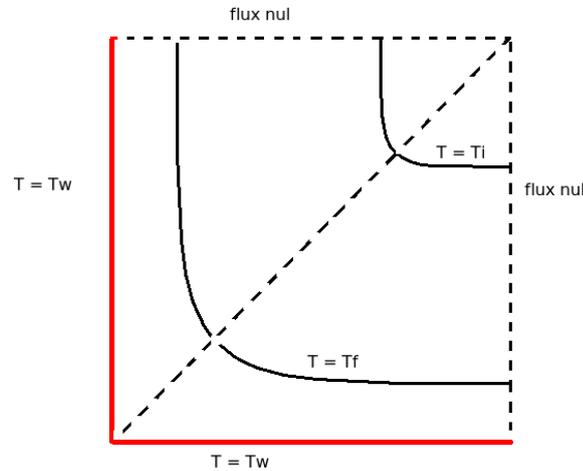


FIG. 3.10 – Fusion sur un domaine carré.

### 3.5.2 Fusion de la glace dans un domaine carré par DIFFUSE-3D dans sa version 2D

Considérons le sous-espace de  $\mathbb{R}^2$ ,  $\Omega = \{(x, y) | x, y \in \mathbb{R}^+\}$ . Ce sous-espace est supposé de grandeur finie pendant les simulations. La température du sous-espace est initialement à une température constante  $T_0 \leq T_f$  où  $T_f$  est la température de fusion. Au temps  $t > 0$ , la température des parois  $x = 0$ ,  $y = 0$  est élevée à une température  $T_w > T_f$  et le changement de phase commence à partir de ces parois. Le problème est illustré sur la figure (3.10).

Pour ce problème à une phase, la solution analytique approximative existe et elle est présentée dans [PER98]. Le développement analytique de la solution est ici omis.

Le milieu est initialement à  $-10^\circ\text{C}$ . Au temps  $t > 0$ , les parois à  $x = 0$ ,  $y = 0$  sont mises à  $20^\circ\text{C}$ . Un maillage triangulaire de 9878 éléments est utilisé pour discrétiser un domaine de  $1m \times 1m$ . Les propriétés physiques utilisées pour la simulation sont celles de l'eau et de la glace. La figure (3.11) montre la solution numérique dans le cas 2D au temps  $t = 50 h$ .

Pour comparer les deux approches utilisées pour développer les codes DIFFUSE-SC et DIFFUSE-3D, on va simuler le même problème de fusion de glace présenté ici avec le code DIFFUSE-SC.

On va utiliser un maillage de 19600 éléments pour le domaine de  $1m \times 1m$ . Le maillage utilisé avec le code DIFFUSE-SC est un maillage carré, alors que le maillage utilisé avec le code DIFFUSE-3D est un maillage triangulaire.

On sait que les valeurs de température sur les bords isolants obéissent la solution analytique 1D. Dans les figures (3.12) et (3.13) on présente une comparaison entre la solution analytique du problème et les résultats de simulation obtenus avec les deux codes DIFFUSE-SC et DIFFUSE-3D. La figure (3.12) montre le profil de température

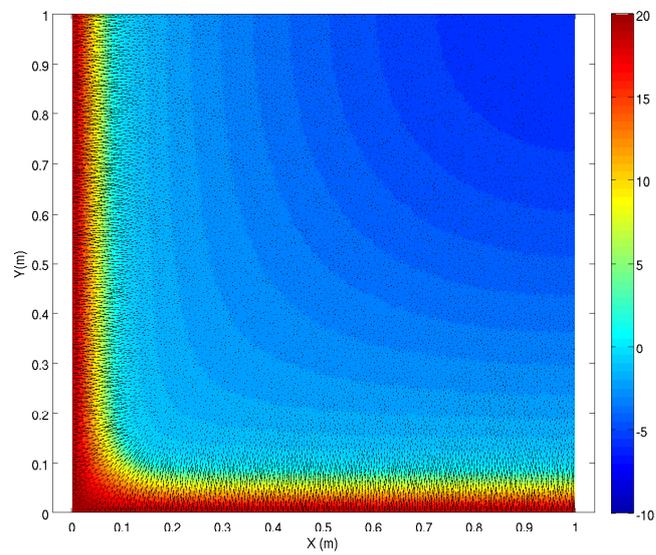


FIG. 3.11 – Fusion dans un domaine carré avec les parois conductrices sont mises à des températures égales. Les bords infinis sont remplacés par des bords finis supposés non conducteurs.

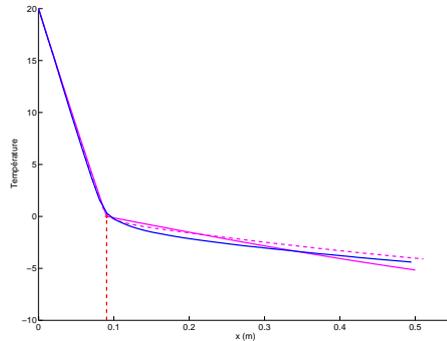


FIG. 3.12 – profil de température au temps  $t = 50$  h.  $\Delta T = 0.5^\circ C$ . Solution analytique (1D) (courbe rouge), solution numérique avec DIFFUSE-3D (courbe bleue), solution numérique avec DIFFUSE-SC (courbe magenta pointillée).

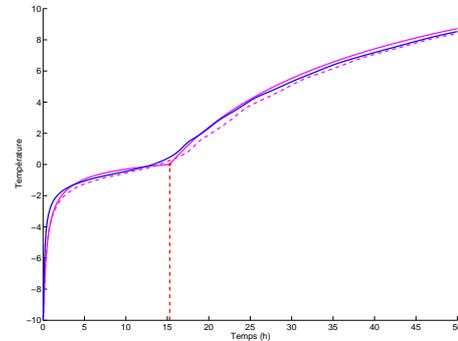


FIG. 3.13 – Histoire de température en  $(x, y) = (1 \text{ m}, 5 \text{ cm})$ . Solution analytique (1D) (courbe rouge), solution numérique avec DIFFUSE-3D (courbe bleue), solution numérique avec DIFFUSE-SC (courbe magenta pointillée).

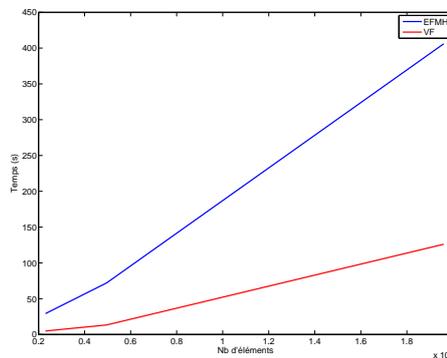


FIG. 3.14 – Temps CPU par rapport au nombre d'éléments de maillage pour les deux approches EFMH et VF.

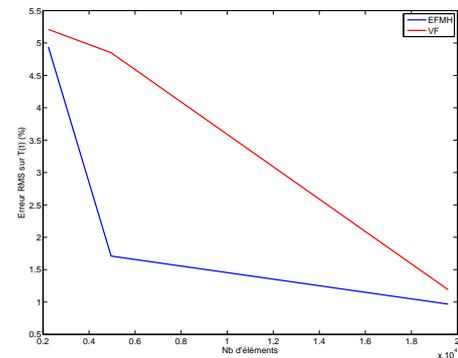


FIG. 3.15 – Erreur RMS sur  $T(t)$  pour les deux approches EFMH et VF.

sur un bord isolant et la figure (3.13) illustre l'histoire de la température sur le point  $(x, y) = (1 \text{ m}, 5 \text{ cm})$  de bord isolant. Les deux figures montrent que les deux approches reproduisent bien la solution analytique.

La figure (3.14) montre que le schéma numérique basé sur les volumes finis (VF) utilisé dans DIFFUSE-SC est plus rapide que les éléments finis mixtes hybrides (EFMH) utilisés dans DIFFUSE-3D. Ceci est dû au fait que dans DIFFUSE-SC on utilise une discrétisation temporelle implicite BDF qui adapte le pas de temps pour trouver la bonne précision alors que dans DIFFUSE-3D on utilise un schéma de discrétisation temporelle semi-implicite avec un pas de temps constant (il y aurait cependant moyen de

rajouter le pas de temps variable). De plus, avec la méthode volumes finis la seule inconnue est l'approximation de la température moyenne par élément alors qu'avec la méthode EFMH il y a trois inconnues à chercher ; la température moyenne par élément, la température moyenne sur les faces et les flux moyens sur les faces. On travaille avec le même nombre d'éléments de maillage mais les deux systèmes matriciels obtenus par les deux approches ont des tailles différentes.

Dans la figure (3.15), on montre l'erreur RMS donnée par (2.16) pour les courbes d'histoire de la température obtenues par DIFFUSE-SC et DIFFUSE-3D par rapport à la solution analytique. Les courbes montrent une meilleure précision pour le schéma EFMH par rapport au schéma VF. Pour les deux méthodes, les tests comparatifs ont montré la convergence numérique des schémas VF et EFMH (la convergence mathématique n'étant pas démontrée). La méthode VF a pour principale difficulté le respect de condition de Delaunay pour un maillage triangulaire (2D) ou tétraédrique (3D).

La méthode EFMH permet de traiter des milieux avec de géométrie complexe mais elle présente deux difficultés principales :

- la complexité des équations de discrétisation, car on travaille dans un espace de dimension supérieure ;
- la mise-en-oeuvre de bibliothèques spécialisées pour gérer les maillages (particulièrement en 3D).

Des problèmes plus généraux où on considère la convection et le couplage avec l'écoulement de gaz pourraient fort probablement être résolus avec cette méthode. Par ailleurs, les deux approches utilisées permettent une conservation locale de la masse et une continuité du flux à travers les faces.

### 3.5.3 Effet de la radiation

J.C. Ferreri et Ramiro March [MF87], [MF], [FM96], [FF78] ont développé le code numérique (3D-axisymétrique) `pince-eu` qui permet de simuler le transfert de chaleur en milieu poreux saturé. Afin de pouvoir analyser l'effet de la radiation il nous paraît indispensable de comparer notre code DIFFUSE-SC avec `pince-eu`. En effet, `pince-eu` résout le même problème physique que dans le modèle DIFFUSE-SC et en plus il prend en compte le phénomène de radiation ce qui permet de simuler le transfert de chaleur dans un foyer en cuvette et ce qui n'est pas le cas dans notre modèle.

La méthode numérique utilisée dans `pince-eu` est basée sur la discrétisation de l'équation de Fourier par la méthode des différences finies, la transformation des coordonnées et la méthode de capacité apparente donnée par [BC73]. Ce programme est codé en Fortran 77.

Pour comparer les deux codes (DIFFUSE-SC et `pince-eu`) on a utilisé les données d'une expérience simulée par `pince-eu` et réalisée sur le site archéologique de Pincevent au sud de Paris. Il s'agit d'une expérience de foyer à plat avec feu réel à la surface.

Le domaine de calcul utilisé s'agit d'un domaine fini de  $1\text{ m} \times 1\text{ m}$  avec un feu circulaire à la surface de diamètre égale à  $30\text{ cm}$ . La condition de bord variable est la température mesurée au centre du feu (on suppose que la température à la surface du sol est uniforme). La figure (3.16) montre que les deux codes reproduisent le même

comportement. Lorsque le feu s'éteint et que le sol commence à refroidir, on remarque une petite différence entre les résultats des deux codes due au fait que le modèle *pince-eu* prend en compte la radiation, ce qui n'est pas le cas du modèle *DIFFUSE-SC*

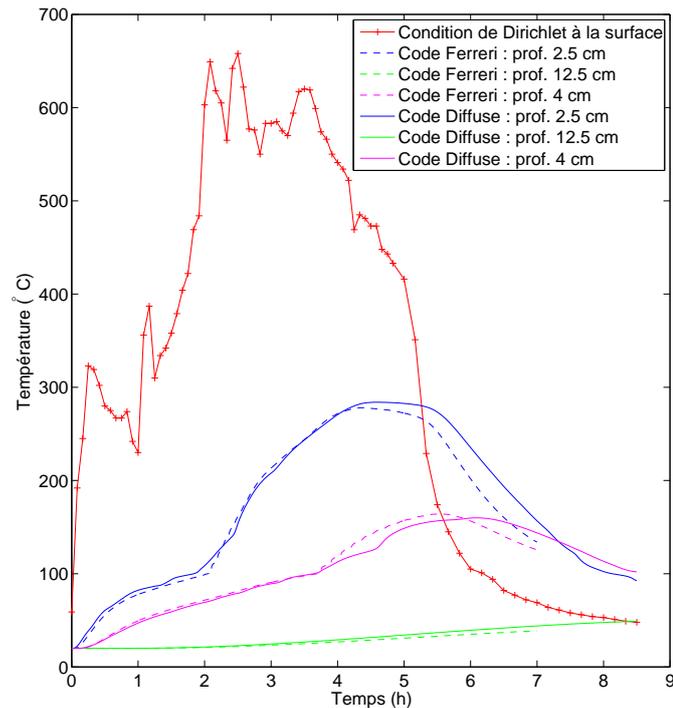


FIG. 3.16 – Comparaison entre le code *DIFFUSE-SC* et le code de Ferreri.

Un des inconvénients qu'on peut prédire à propos de notre code est qu'il ne prend pas en compte l'effet de la radiation. Par contre, le principal avantage de notre code est que les méthodes numériques et l'approche numérique utilisées sont facilement généralisables aux cas tridimensionnels ce qui n'est pas le cas avec le code *pince-eu*. En plus, l'approche utilisée dans le code *DIFFUSE-SC* permet le couplage avec le problème d'écoulement de vapeur d'eau dans le sol, c'est ce qu'on va voir dans le chapitre suivant.

Pour les foyers en cuvettes les bords intérieurs sont chauffés par radiation et donc pour modéliser tels foyers (qu'on trouve sur les sites archéologiques), il nous semble intéressant d'inclure le phénomène de radiation dans notre modèle. Une façon de le faire est sans doute de l'inclure comme une condition au bord.

### 3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, deux approches basées sur une discrétisation VF et EFMH ont été utilisées pour résoudre des problèmes de changement de phase (notamment de type

Stefan et la diffusion de la chaleur dans un milieu poreux saturé). Ces problèmes sont caractérisés par le déplacement d'une frontière qui sépare les deux milieux (le liquide et le solide dans le cas de Stefan et le liquide et le gaz dans le cas d'évaporation dans le sol). La méthode AHC utilisée permet d'éviter le suivi du front.

La première approche utilisée est une approche globale basée sur une discrétisation spatiale en volumes finis. La discrétisation temporelle est effectuée par un solveur DAE utilisant un schéma BDF implicite et une variante de la méthode de Newton pour traiter la non-linéarité présente dans le système.

La deuxième approche est basée sur une discrétisation spatiale avec les EFMH et une discrétisation temporelle semi-implicite. Le code développé permet de travailler avec un maillage non structuré (s'adaptant mieux à des formes géométriques complexes). Cette deuxième approche utilise un pas de temps fixe.

La comparaison entre les deux approches utilisées montre que l'approche VF est plus rapide. Cela est dû au fait que la taille du système différentiel obtenu par VF est plus petite que celle du système obtenu par EFMH sur le même nombre d'éléments et qu'on utilise un pas de temps adaptatif pour l'approche VF. D'un autre côté, l'approche EFMH permet de travailler avec des géométries complexes et grâce à l'introduction d'un pas de temps adaptatif on pourrait avoir un temps CPU compétitif par rapport à l'autre approche.

## Chapitre 4

# Transferts couplés de chaleur et de fluide dans les milieux poreux : Modélisation et étude numérique

Dans ce chapitre, nous décrivons et simulons les processus reliés à la diffusion de la chaleur couplée avec le transfert par advection ou diffusion des composants présents dans la phase fluide des milieux poreux saturés.

En effet, lorsque la température dépasse la température d'évaporation, l'eau qui se trouve dans le sol se transforme en vapeur d'eau qui s'écoule. On parle alors d'un problème de convection. En fait, la création de la vapeur d'eau au niveau de l'interface de changement de phase (humide/sèche) entraîne une variation dans la pression du milieu, ce qui est à l'origine de l'écoulement dans la phase gazeuse (phénomène de type "cocotte-minute"). Pour simplifier le problème, nous supposons dans ce chapitre que la phase liquide est à saturation résiduelle et immobile (à cause du blocage par le fond) ou au moins que son écoulement est faible et n'influence pas le transfert de vapeur par advection ou diffusion. Il faut aussi noter que dans notre problème il y a pas d'incondensable, c'est-à-dire il y a pas d'air présent dissous dans le liquide, ou présent dans la zone sèche du milieu poreux.

Le problème d'écoulement de fluide a fait l'objet de très nombreuses investigations, tant théoriques ou numériques qu'expérimentales. Par contre l'intérêt porté au problème couplé en milieu poreux a été moins important. Kelanemer [KEL94] dans sa thèse a présenté une étude des transferts couplés de masse et de chaleur dans le sol en dimension deux. Le modèle qui gouverne ces transferts est constitué par un système de deux équations à deux inconnues qui sont la pression de l'eau liquide et la température du milieu poreux. Pour résoudre ce problème, l'auteur présente deux algorithmes ; l'un utilise une méthode d'éléments finis standard appliquée aux équations du système, en rajoutant un couplage entre les deux équations pour la pression et pour la température, tandis que l'autre utilise la méthode des éléments finis mixtes pour le calcul du flux

de l'eau qui apparaît comme le coefficient essentiel dans le terme de convection de l'équation pour la température, et la méthode des caractéristiques modifiées pour le calcul de la température.

Par ailleurs, Delache [DEL05] a étudié l'évolution spatio-temporelle des structures thermo-convectives en milieu poreux chauffé par le bas et soumis à un écoulement horizontal. La simulation numérique de ce modèle réduit en présence du bruit permet d'expliquer certaines observations expérimentales. D'autre part l'auteur a montré par une résolution numérique directe bidimensionnelle du problème (méthode spectrale) que les caractéristiques des modes globaux non linéaires sont identiques à ceux obtenues par la théorie linéaire d'instabilité absolue. Par ailleurs le transfert de chaleur moyen est analysé et comparé à l'expérience.

Enfin, un article très intéressant sur la convection naturelle dans les milieux poreux chauffés a été publié [AP98]. Dans cet article, les auteurs ont développé un modèle numérique en deux dimensions qui simule le phénomène de diffusion de la chaleur dans le cas où le mode convectif est dominant.

Cependant, dans la revue bibliographique qu'on a présenté, le phénomène de changement de phase n'a jamais été couplé avec le problème de convection. Dans ce chapitre, on présente le problème de couplage entre le phénomène de changement de phase avec l'écoulement de fluide dans le sol. On va insister sur les difficultés numériques provenant du système d'équations différentielles algébriques obtenu.

Pour résoudre le système différentiel algébrique (PDAE), on introduit une approche globale utilisant un solveur d'équations différentielles algébriques (DAE). On utilise la méthode des lignes où l'espace et le temps sont discrétisés séparément. La discrétisation spatiale est basée sur la méthode des volumes finis. Ainsi notre approche utilise un schéma implicite et une méthode de Newton intégrée dans un solveur DAE pour traiter la forte non-linéarité présente dans le système. Le but est d'utiliser le solveur DAE pour contrôler le pas de temps, l'ordre du schéma, la mise à jour de la matrice jacobienne et la convergence des itérations de Newton.

## 4.1 Le problème physique

Avant d'aborder les différentes approches numériques utilisées pour résoudre notre problème couplé, on commence par rappeler le système des équations mathématiques à résoudre.

Le problème physique décrivant le phénomène de diffusion-convection couplé avec le phénomène d'écoulement dans les milieux poreux est décrit dans le chapitre 1 par les équations (1.5) et (1.7).

Le phénomène de changement de phase est pris en compte en utilisant la formulation AHC (décrite dans la section 3.1) pour calculer la capacité apparente et la conductivité de la phase fluide du milieu. Rappelons que la formule de la capacité apparente du fluide est donnée par :

$$C_f = C_l + (C_v - C_l)\sigma(T) + L \frac{d\sigma}{dT} \quad (4.1)$$

La conductivité est donnée par :

$$k_f = k_l + (k_v - k_l)\sigma(T) \quad (4.2)$$

où

$$\sigma(T) = \frac{1}{2} (1 + \operatorname{erf}(\epsilon(T - T_v))) \quad (4.3)$$

et

$$\frac{d\sigma}{dT} = (\epsilon\pi^{-1/2})\exp[-\epsilon^2(T - T_v)^2] \quad (4.4)$$

avec  $\epsilon = 1/\sqrt{2}\Delta T$  et où  $\Delta T$  est la moitié de l'intervalle de changement de phase. Nous avons généralisé cette formulation aux autres paramètres physiques qui apparaissent dans le système des équations. Ainsi, la masse volumique de fluide est définie par :

$$\rho_f = \rho_l + (\rho_v - \rho_l)\sigma(T) \quad (4.5)$$

où  $\rho_l$  est constant et  $\rho_v$  est calculé par la loi de gaz parfait

$$\frac{P}{\rho_v T} = \beta = \text{constant} \quad (4.6)$$

et donc l'équation (4.5) s'écrit :

$$\rho_f = \rho_l + \left(\frac{P}{\beta T} - \rho_l\right)\sigma(T) \quad (4.7)$$

où  $P$  est la pression de la vapeur d'eau.

De la même manière la viscosité est donnée par :

$$\mu_f = \mu_l + (\mu_v - \mu_l)\sigma(T) \quad (4.8)$$

où

$$\mu_l = 0.4527(T + 40)^{-1.492}$$

et

$$\mu_v = 1.2210^{-5} + 410^{-8}(T - T_v)$$

$T$  est donnée en degré Celsius entre  $[0^\circ, 300^\circ]$ . Ces approximations globales de  $\mu_l$  et  $\mu_v$  sont obtenues à partir de tables par la bibliothèque Fortran 90 "NBS steam tables" ([http://people.scs.fsu.edu/~burkardt/f\\_src/steam/steam.html](http://people.scs.fsu.edu/~burkardt/f_src/steam/steam.html)) qui calcule les différentes propriétés physiques de l'eau selon la température et la pression (ici la pression est presque constante et égale à la pression atmosphérique, la petite variation qui est la cause de l'écoulement de vapeur d'eau n'a pas une grande importance sur la variation des propriétés physiques).

Le système d'équations à résoudre s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
(\rho C)_e(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} - \frac{K(\rho C)_f(T)}{\mu_f(T)} \vec{\text{grad}} P(x, t) \cdot \vec{\text{grad}} T(x, t) - & \text{dans } \Omega \times (0, t_{end}], \\
\text{div} \left[ k_e \vec{\text{grad}} T(x, t) \right] = 0 & \\
\frac{\sigma(T)}{T(x, t)\beta} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + & \\
\left[ \left( \frac{P(x, t)}{T(x, t)\beta} - \rho_l \right) \frac{d\sigma(T)}{dT} - \frac{P(x, t)}{T^2(x, t)\beta} \sigma(T) \right] \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + & \text{dans } \Omega \times (0, t_{end}], \\
\frac{K\rho_f(T)}{\phi\mu_f(T)} \left( \frac{1}{\mu_f(T)} \vec{\text{grad}} \mu_f(T) - \frac{1}{\rho_f(T)} \vec{\text{grad}} \rho_f(T) \right) \vec{\text{grad}} P(x, t) - & \\
\frac{K\rho_f(T)}{\phi\mu_f(T)} \text{div}(\vec{\text{grad}} P(x, t)) = 0 & \\
T(x, 0) = T_0(x) & \text{dans } \Omega, \\
T(x, t) = T^D(x, t) & \text{sur } \Gamma^D \times (0, t_{end}], \\
\vec{\text{grad}} T(x, t) \cdot \nu = q^N(x, t) & \text{sur } \Gamma^N \times (0, t_{end}]. \\
P(x, 0) = P_0(x) & \text{dans } \Omega, \\
P(x, t) = P^D(x, t) & \text{sur } \Gamma^D \times (0, t_{end}], \\
\vec{\text{grad}} P(x, t) \cdot \nu = s^N(x, t) & \text{sur } \Gamma^N \times (0, t_{end}].
\end{aligned} \tag{4.9}$$

où  $\Omega$  est un domaine borné dans  $\mathbb{R}^d$  ( $d = 1, \dots, 3$ ) avec le bord  $\partial\Omega = \Gamma^D \cup \Gamma^N$ ;  $T$  représente la température et  $P$  représente la pression;  $\rho = \rho(T)$ ,  $C = C(T)$ ,  $\mu = \mu(T)$  et  $\phi$  représentent respectivement la masse volumique, la capacité apparente, la viscosité et la porosité du milieu poreux (les indices  $e$ ,  $f$  et  $s$  indiquent respectivement les paramètres équivalents du milieu, les propriétés du fluide et celles de la matrice poreuse);  $k = k(T)$  est la conductivité, elle est supposée un tenseur des composants diagonaux dans  $L^\infty(\Omega)$ ;  $K$  est la perméabilité du milieu;  $\nu$  représente le vecteur normal extérieur sur la frontière  $\partial\Omega$ ;  $T^D$  et  $q^N$  sont respectivement les conditions aux bords Dirichlet et Neuman pour la température;  $P^D$  et  $s^N$  sont respectivement les conditions aux bords Dirichlet et Neuman pour la pression.

La première de ces équations exprime l'équation de la chaleur et la seconde constitue l'équation d'écoulement de fluide après substitution de (4.7) et (4.8) dans l'équation (1.7) suivante

$$\frac{\phi\mu_f}{K\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial t} = \text{div} \left( \vec{\text{grad}} P \right) - \frac{1}{\mu_f} \vec{\text{grad}} \mu_f \cdot \vec{\text{grad}} P + \frac{1}{\rho_f} \vec{\text{grad}} \rho_f \cdot \vec{\text{grad}} P$$

Rappelons que les propriétés équivalentes du milieu sont données par :

$$(\rho C)_e = \phi\rho_f C_f + (1 - \phi)\rho_s C_s \tag{4.10}$$

et

$$\frac{1}{k_e} = \frac{\phi}{k_f} + \frac{1 - \phi}{k_s} \tag{4.11}$$

Le problème à résoudre (4.9) peut être écrit sous la forme vectorielle avec des conditions aux bords et des conditions initiales appropriées

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = f(t, x, T, P) \\ \gamma \frac{\partial T}{\partial t} + \theta \frac{\partial P}{\partial t} = g(t, x, T, P) \end{cases} \quad (4.12)$$

avec  $\gamma$  et  $\theta$  deux variables, dépendent de  $\sigma(T)$  (4.3) et  $\frac{d\sigma}{dT}$  (4.4).

## 4.2 Méthodes numériques

La première équation dans le système (4.12) est une équation différentielle ordinaire alors que la deuxième est une équation algébrique parce que  $\theta(T) = 0$  pour  $T \ll T_v$ ; le système est donc un système différentiel algébrique (DAE). Cependant, la résolution numérique de systèmes d'équations aux dérivées partielles et algébriques (PDAE) non linéaires est un processus complexe. Concernant la diffusion de chaleur et l'écoulement de fluide dans les milieux poreux saturés, les systèmes peuvent être de grande taille et contenir une très forte non linéarité.

Plusieurs choix sont possibles pour le traitement de l'advection présente dans le système d'équations, comme les méthodes de caractéristiques [DR82] et leurs descendantes, les méthodes ELLAM [WA95]. Cependant ces méthodes sont difficiles à rendre conservatives et rencontrent des difficultés dans les situations où il y a des vitesses très petites, ce qui est le cas pour notre problème.

Nous choisissons l'utilisation de la méthode des lignes (MOL) [HV03], [CAR81], [SCH91], où la discrétisation spatiale (une approche Eulerienne en espace) et la discrétisation temporelle sont considérées séparément. Plusieurs choix sont possibles à l'intérieur de chaque point :

1. Discrétisation spatiale :
  - méthode de différences finies [DAAP92],
  - méthode de volumes finis [PAN80],
  - méthodes d'éléments finis [SF73],
  - méthodes des résidus pondérés [VM78], [FIN71].
2. Discrétisation temporelle :
  - schéma implicite ou explicite [ERN07], [HV03],
  - schéma plus ou moins complexe : schéma de type Euler d'ordre un ou par exemple un schéma multi-pas [HV03].
3. L'utilisation ou non des méthodes de maillages adaptatifs [GVZ89], [AF90] ou des méthodes de grilles mobiles [MM81].
4. Traitement de la non linéarité :
  - la méthode de Newton ou une de ses variantes [AQS00], [DS], [KBP89], [KEL03], [KEL95],
  - une méthode de couplage plus simple comme la méthode de Gauss-Seidel-Newton [OR70].

Toutes ces méthodes ont un intérêt du point de vue numérique, mais le choix entre ces différentes méthodes (à l'intérieur de chaque point) n'est pas simple, car différents critères rentrent en jeu pour définir une bonne méthode fiable pour résoudre notre problème :

- la précision des résultats,
- la stabilité de la méthode,
- la rapidité d'exécution,
- la facilité d'implémentation.

De plus, une combinaison entre ces critères doit tenir compte de toutes les difficultés présentes (transfert de chaleur par diffusion et advection, suivi du front de changement de phase, couplage avec l'écoulement de gaz, système raide, forte non linéarité...).

Notre choix est le suivant : en se basant sur la méthode des lignes, on commence par discrétiser le système d'équations à l'aide d'une méthode de volumes finis, car ces méthodes sont bien adaptées pour traiter les équations de conservation. Les termes diffusifs-dispersifs sont traités de façon implicite en temps avec une discrétisation spatiale centrée sur les mailles, et la grandeur des pas de temps ne sera limitée que par la précision.

Pour le terme d'advection dans l'équation d'énergie du système (4.9), nous utilisons une discrétisation d'ordre un, décentrée amont en espace. Le choix du décentrage amont permet de traiter des vitesses de toutes grandeurs. Un schéma explicite en temps présente deux avantages. D'abord, le schéma d'Euler d'ordre un explicite en temps, bien que diffusif, l'est bien moins que le schéma d'Euler d'ordre un implicite en temps. Ensuite, un schéma explicite en temps permet de conserver la symétrie de la matrice du système linéaire à résoudre à chaque pas de temps.

Cependant, le schéma d'Euler explicite en temps nous impose un choix de pas de temps satisfaisant la condition CFL, ce qui peut conduire à utiliser des petits pas de temps en comparaison avec un schéma implicite. C'est pourquoi nous utilisons un schéma implicite (méthode BDF) et un pas de temps adaptatif.

### 4.3 Discrétisation spatiale en volumes finis

Le schéma de discrétisation spatiale est basé sur la méthode des volumes finis, due au Patankar [RYK03], qui consiste à diviser le domaine de calcul en un certain nombre de volumes de contrôle. La variable dépendante considérée est calculée en ces points. Les équations définies en ces noeuds, sont obtenues par intégration des équations de conservation sur les volumes de contrôle, pour chaque noeud.

On note par  $T_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  les solutions approchées de  $T$  aux volumes  $V_i$ . Les notations  $x_{i+\frac{1}{2}}$ ,  $x_{i-\frac{1}{2}}$  et  $\Delta x_i$  sont définies dans la section (2.4). Dans la suite, comme le maillage utilisé est uniforme on a :

$$\Delta x_i = \Delta x, \quad 1 \leq i \leq N$$

### 4.3.1 Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie dans le système (4.9) en 1D

Considérons le problème de la diffusion de la chaleur dans un champ d'écoulement continu unidimensionnel. L'équation d'énergie dans le système (4.9), est discrétisée en prenant la figure (2.1) comme référence. À chaque pas de temps l'équation est intégrée sur les volumes de contrôle :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} dx + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\rho C)_f V_f \frac{\partial T}{\partial x} dx = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left( k_e \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx, \quad 2 \leq i \leq N-1 \quad (4.13)$$

Le terme transitoire et le terme diffusif sont discrétisés dans la section (3.3.1). Pour le terme convectif, la discrétisation en schéma centré tend à créer des oscillations artificielles. En raison de ce problème, des schémas alternatifs de discrétisation spatiale ont été développés. Le schéma fréquemment utilisé est le schéma amont (upwind scheme) [ZB02], [SJ06], qui peut être exprimé comme suit :

$$T_{i+\frac{1}{2}} = (1 - \alpha)T_i + \alpha T_{i+1}, \quad 2 \leq i \leq N-1$$

où

$$\alpha = \begin{cases} 0 & \text{si } V_f > 0 \\ 1 & \text{si } V_f < 0 \end{cases}$$

On remplace  $V_f$  par sa valeur dans le terme de convection en utilisant la loi de Darcy (1.6), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (\rho C)_f V_f \frac{\partial T}{\partial x} dx &= - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{K(\rho C)_f}{\mu_f} \frac{\partial P}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} dx \\ &= - \frac{K(\rho C)_{f,i}}{\mu_{f,i} \Delta x} (T_{i+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}}) (P_{i+1} - P_{i-1}), \quad 2 \leq i \leq N-1 \end{aligned} \quad (4.14)$$

La convergence du schéma amont a été étudiée dans [DBP07].

En substituant les termes (3.14, 3.15, 4.14) dans (4.13) pour un maillage uniforme, l'équation discrétisée pour un volume de contrôle est donnée par

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{dt} - \frac{K(\rho C)_{f,i}}{2\mu_{f,i}(\rho C)_{e,i}\Delta x^2} [(1 - \alpha)(T_i - T_{i-1}) + \alpha(T_{i+1} - T_i)] (P_{i+1} - P_{i-1}) \\ - \frac{k_{i+1} + k_i}{2(\rho C)_{e,i}\Delta x^2} (T_{i+1} - T_i) - \frac{k_i + k_{i-1}}{2(\rho C)_{e,i}\Delta x^2} (T_i - T_{i-1}) = 0, \quad 2 \leq i \leq N-1 \end{aligned} \quad (4.15)$$

et les conditions aux limites et initiales s'écrivent

$$\begin{aligned} T(x_i, 0) = T_0(x_i) = T_{0,i} & \quad 1 \leq i \leq N, \\ T(x_i, t) = T^D(x_i, t) = T_i^D(t) & \quad i = 1 \text{ ou } i = N, \\ \nabla T(x_i, t) \cdot \nu = q^N(x_i, t) = q_i^N(t) & \quad i = 1 \text{ ou } i = N, \\ P(x_i, 0) = P_0(x_i) = P_{0,i} & \quad 1 \leq i \leq N, \\ P(x_i, t) = P^D(x_i, t) = P_i^D(t) & \quad i = 1 \text{ ou } i = N, \\ \nabla P(x_i, t) \cdot \nu = s^N(x_i, t) = s_i^N(t) & \quad i = 1 \text{ ou } i = N, \end{aligned} \quad (4.16)$$

### 4.3.2 Discrétisation spatiale de l'équation d'écoulement dans le système (4.9) en 1D

À chaque pas de temps la deuxième équation dans le système (4.9) est intégrée sur les volumes de contrôle :

$$\begin{aligned}
& \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\sigma(T)}{T\beta} \frac{\partial P}{\partial t} dx + \\
& \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left[ \left( \frac{P}{T\beta} - \rho_l \right) \frac{d\sigma(T)}{dT} - \frac{P}{T^2\beta} \sigma(T) \right] \frac{\partial T}{\partial t} dx + \\
& \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f} \left( \frac{1}{\mu_f} \frac{\partial \mu_f}{\partial x} - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial x} \right) \frac{\partial P}{\partial x} dx - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx = 0, \quad 2 \leq i \leq N-1
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Pour les termes transitoires, l'intégration est directe :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\sigma(T)}{T\beta} \frac{\partial P}{\partial t} dx = \frac{\sigma(T_i)}{T_i\beta} \frac{dP_i}{dt} \Delta x, \quad 2 \leq i \leq N-1 \tag{4.18}$$

et

$$\begin{aligned}
& \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left[ \left( \frac{P}{T\beta} - \rho_l \right) \frac{d\sigma(T)}{dT} - \frac{P}{T^2\beta} \sigma(T) \right] \frac{\partial T}{\partial t} dx = \\
& \left[ \left( \frac{P_i}{T_i\beta} - \rho_l \right) \frac{d\sigma(T_i)}{dT_i} - \frac{P_i}{T_i^2\beta} \sigma(T_i) \right] \frac{dT_i}{dt} \Delta x, \quad 2 \leq i \leq N-1
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Pour l'intégration du terme de diffusion, on utilise une interpolation linéaire par morceaux :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx = \frac{K\rho_{f,i}}{\phi\mu_{f,i}} \left[ \frac{P_{i+1} - P_i}{\Delta x} - \frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x} \right], \quad 2 \leq i \leq N-1 \tag{4.20}$$

Pour les autres termes on utilise une intégration par parties :

$$\begin{aligned}
& \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f} \left( \frac{1}{\mu_f} \frac{\partial \mu_f}{\partial x} - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial x} \right) \frac{\partial P}{\partial x} dx = \frac{K\rho_{f,i}}{\phi\mu_{f,i}} \log \left( \frac{\mu_{f,i+1} + \mu_{f,i}}{\rho_{f,i+1} + \rho_{f,i}} \right) \frac{P_{i+1} - P_i}{\Delta x} \\
& - \frac{K\rho_{f,i}}{\phi\mu_{f,i}} \log \left( \frac{\mu_{f,i} + \mu_{f,i-1}}{\rho_{f,i} + \rho_{f,i-1}} \right) \frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x} \\
& - \frac{K\rho_{f,i}}{\phi\mu_{f,i}} \log \left( \frac{\mu_{f,i}}{\rho_{f,i}} \right) \frac{P_{i+1} - 2P_i + P_{i-1}}{\Delta x}
\end{aligned} \tag{4.21}$$

où  $2 \leq i \leq N-1$ .

En substituant les termes (4.18, 4.19, 4.20 et 4.21) dans (4.17) pour un maillage uniforme, l'équation discrétisée pour un volume de contrôle est donnée par :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\sigma(T_i)}{T_i \beta} \frac{dP_i}{dt} + \\
 & \left[ \left( \frac{P_i}{T_i \beta} - \rho l \right) \frac{d\sigma(T_i)}{dT_i} - \frac{P_i}{T_i^2 \beta} \sigma(T_i) \right] \frac{dT_i}{dt} + \\
 & \frac{K \rho_{f,i}}{\phi \mu_{f,i} \Delta x^2} \left[ \log \left( \frac{\mu_{f,i+1} + \mu_{f,i}}{\rho_{f,i+1} + \rho_{f,i}} \right) - \log \left( \frac{\mu_{f,i}}{\rho_{f,i}} \right) - 1 \right] P_{i+1} - \\
 & \frac{K \rho_{f,i}}{\phi \mu_{f,i} \Delta x^2} \left[ \log \left( \frac{\mu_{f,i+1} + \mu_{f,i}}{\rho_{f,i+1} + \rho_{f,i}} \right) + \log \left( \frac{\mu_{f,i} + \mu_{f,i-1}}{\rho_{f,i} + \rho_{f,i-1}} \right) - 2 \log \left( \frac{\mu_{f,i}}{\rho_{f,i}} \right) - 2 \right] P_i + \\
 & \frac{K \rho_{f,i}}{\phi \mu_{f,i} \Delta x^2} \left[ \log \left( \frac{\mu_{f,i} + \mu_{f,i-1}}{\rho_{f,i} + \rho_{f,i-1}} \right) - \log \left( \frac{\mu_{f,i}}{\rho_{f,i}} \right) - 1 \right] P_{i-1} = 0, \quad 2 \leq i \leq N-1
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

et les conditions aux limites sont données encore une fois par (4.16).

### 4.3.3 Discrétisation spatiale de l'équation d'énergie dans le système (4.9) en 3D-axisymétrique

Dans le cas d'un domaine à symétrie axiale, l'équation d'énergie est écrite avec des coordonnées cylindriques (voir figure 3.4) et nous supposons qu'il n'y a pas de dépendance avec  $\theta$ . L'équation (4.9) est écrite sous la forme :

$$(\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho C)_f \left[ V_r \frac{\partial T}{\partial r} + V_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \tag{4.23}$$

La discrétisation spatiale de l'équation est effectuée par la méthode des volumes finis, l'équation est intégrée sur tous les volumes de contrôle (de volume  $2\pi r dr dz$  chacun) comme dans la section (3.3.2). On présente ci-dessous la discrétisation des termes convectifs avec un schéma décentré amont (voir figure 4.1) pour éviter les oscillations artificielles [ZB02], [SJ06].

Le flux advectif net dans la cellule  $(i, j)$  dans la direction de  $r$ , peut être approché avec la méthode de volumes finis par :

$$\begin{aligned}
 \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} V_r \frac{\partial T}{\partial r} r dr dz = r_i \left[ V_{r(i+\frac{1}{2},j)} \left( (1 - \alpha_1) T_{i,j} + \alpha_1 T_{i+1,j} \right) - \right. \\
 \left. V_{r(i-\frac{1}{2},j)} \left( (1 - \alpha_1) T_{i-1,j} + \alpha_1 T_{i,j} \right) \right] \Delta z
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

avec  $2 \leq i \leq N-1$  et  $2 \leq j \leq M-1$ .

Le flux advectif net dans la cellule  $(i, j)$  dans la direction de  $z$ , peut être rapproché

avec la méthode de volumes finis par :

$$\int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} V_z \frac{\partial T}{\partial z} r dr dz = \frac{r_{i+1}^2 + 2r_i(r_{i+1} - r_{i-1}) - r_{i-1}^2}{8} \left[ V_{z(i,j+\frac{1}{2})} ((1 - \alpha_2)T_{i,j} + \alpha_2 T_{i,j+1}) - V_{z(i,j-\frac{1}{2})} ((1 - \alpha_2)T_{i,j-1} + \alpha_2 T_{i,j}) \right] \quad (4.25)$$

avec  $2 \leq i \leq N - 1$  et  $2 \leq j \leq M - 1$ .

Les facteurs spatiaux  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont égaux à  $1/2$  pour un schéma centré, et 0 ou 1 pour un schéma amont selon la direction des vecteurs de flux au niveau des interfaces.

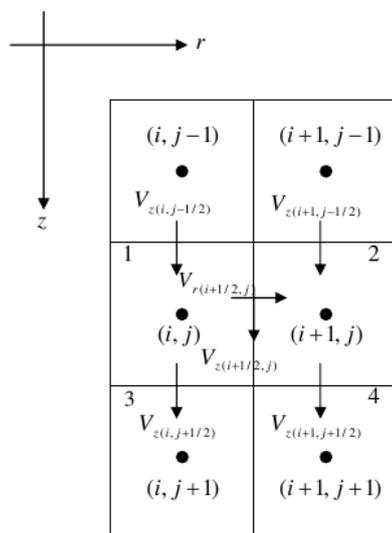


FIG. 4.1 – Évaluation des composantes de la vitesse au niveau de l'interface. À l'interface entre les noeuds  $(i,j)$  et  $(i,j+1)$ ,  $V_{r(i,j+1/2)}$  est directement fourni par le calcul. En revanche,  $V_{z(i,j+1/2)}$  doit être interpolé à partir des valeurs au niveau des interfaces 1, 2, 3, et 4.

L'équation d'énergie discrétisée avec un schéma décentré amont pour les termes

advection est donnée par :

$$\begin{aligned}
 \frac{dT_{i,j}}{dt} & - \frac{2(k_{i+1,j} + k_{i,j})(r_{i+1} + r_i)}{(\rho C)_{e,i,j} [r_{i+1}^2 + 2r_i(r_{i+1} - r_{i-1}) - r_{i-1}^2] \Delta r} (T_{i+1,j} - T_{i,j}) \\
 & + \frac{2(k_{i,j} + k_{i-1,j})(r_i + r_{i-1})}{(\rho C)_{e,i,j} [r_{i+1}^2 + 2r_i(r_{i+1} - r_{i-1}) - r_{i-1}^2] \Delta r} (T_{i,j} - T_{i-1,j}) \\
 & - \frac{k_{i,j+1} + k_{i,j}}{2(\rho C)_{e,i,j} \Delta z^2} (T_{i,j+1} - T_{i,j}) + \frac{k_{i,j} + k_{i,j-1}}{2(\rho C)_{e,i,j} \Delta z^2} (T_{i,j} - T_{i,j-1}) \\
 & + \frac{8(\rho C)_{f,i,j} r_i}{(\rho C)_{e,i,j} [r_{i+1}^2 + 2r_i(r_{i+1} - r_{i-1}) - r_{i-1}^2]} \left[ V_{r(i+\frac{1}{2},j)} ((1 - \alpha_1)T_{i,j} + \alpha_1 T_{i+1,j}) \right. \\
 & \quad \left. - V_{r(i-\frac{1}{2},j)} ((1 - \alpha_1)T_{i-1,j} + \alpha_1 T_{i,j}) \right] \\
 & + \frac{(\rho C)_{f,i,j}}{(\rho C)_{e,i,j} \Delta z} \left[ V_{z(j+\frac{1}{2},j)} ((1 - \alpha_2)T_{i,j} + \alpha_2 T_{i,j+1}) - V_{z(j-\frac{1}{2},j)} ((1 - \alpha_2)T_{i,j-1} + \alpha_2 T_{i,j}) \right] = 0
 \end{aligned} \tag{4.26}$$

avec  $2 \leq i \leq N-1$  et  $2 \leq j \leq M-1$ . Les conditions initiales et aux limites sont données par

$$\begin{aligned}
 T(r_i, z_j, 0) & = T_0(r_i, z_j) = T_{0,i,j} & 1 \leq i \leq N, \quad 1 \leq j \leq M \\
 T(r_i, z_j, t) & = T^D(r_i, z_j, t) = T_{i,j}^D(t) & i \in \{1, N\} \text{ et } j \in \{1, M\}, \\
 \nabla T(r_i, z_j, t) \cdot \nu & = q^N(r_i, z_j, t) = q_{i,j}^N(t) & i \in \{1, N\} \text{ et } j \in \{1, M\}, \\
 P(r_i, z_j, 0) & = P_0(r_i, z_j) = P_{0,i,j} & 1 \leq i \leq N, \quad 1 \leq j \leq M \\
 P(r_i, z_j, t) & = P^D(r_i, z_j, t) = P_{i,j}^D(t) & i \in \{1, N\} \text{ et } j \in \{1, M\}, \\
 \nabla P(r_i, z_j, t) \cdot \nu & = s^N(r_i, z_j, t) = s_{i,j}^N(t) & i \in \{1, N\} \text{ et } j \in \{1, M\},
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

#### 4.3.4 Discrétisation spatiale de l'équation d'écoulement dans le système (4.9) en 3D-axisymétrique

L'équation d'écoulement dans le système des équations couplées (4.9) est écrite avec les coordonnées cylindriques (voir figure 3.4) sous la forme :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\sigma(T)}{\beta T} \frac{\partial P}{\partial t} + \\
 & \left[ \left( \frac{P}{T\beta} - \rho_l \right) \frac{d\sigma(T)}{dT} - \frac{P}{T^2\beta} \sigma(T) \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \\
 & \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f} \left( \frac{1}{\mu_f} \frac{\partial \mu_f}{\partial r} - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial r} \right) \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f} \left( \frac{1}{\mu_f} \frac{\partial \mu_f}{\partial z} - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial z} \right) \frac{\partial P}{\partial z} \\
 & \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial P}{\partial r} \right) - \frac{K\rho_f}{\phi\mu_f} \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

Pour discrétiser l'équation (4.28) avec la méthode de volumes finis, on utilise une

intégration par parties. L'équation discrétisée s'écrit :

$$\begin{aligned}
& \frac{\sigma(T_{i,j})}{\beta T_{i,j}} \frac{dP_{i,j}}{dt} + \\
& \left[ \left( \frac{P_{i,j}}{T_{i,j}\beta} - \rho_l \right) \frac{d\sigma(T_{i,j})}{dT} - \frac{P_{i,j}}{T_{i,j}^2\beta} \sigma(T_{i,j}) \right] \frac{dT_{i,j}}{dt} + \\
& \frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}} \frac{8}{(r_{i+1}^2 + 2r_i r_{i+1} - 3r_i^2)\Delta r} \left[ r_i \log \left( \frac{\mu_{f_{i+1,j}} + \mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i+1,j}} + \rho_{f_{i,j}}} \right) - r_i \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}} \right) - \frac{r_{i+1} - r_i}{2} \right] P_{i+1,j} + \\
& \frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}} \Delta z^2 \left[ \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j+1}} + \mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j+1}} + \rho_{f_{i,j}}} \right) - \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}} \right) - 1 \right] P_{i,j+1} + \\
& \frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}} \Delta z^2 \left[ \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j-1}} + \mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j-1}} + \rho_{f_{i,j}}} \right) - \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}} \right) - 1 \right] P_{i,j-1} - \\
& \frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}} \frac{8}{(r_{i+1}^2 + 2r_i r_{i+1} - 3r_i^2)\Delta r} \left[ r_i \log \left( \frac{\mu_{f_{i+1,j}} + \mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i+1,j}} + \rho_{f_{i,j}}} \right) - r_i \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}} \right) - \frac{r_{i+1} - r_i}{2} \right] P_{i,j} - \\
& \frac{K\rho_{f_{i,j}}}{\phi\mu_{f_{i,j}}} \Delta z^2 \left[ \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j+1}} + \mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j+1}} + \rho_{f_{i,j}}} \right) \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j-1}} + \mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j-1}} + \rho_{f_{i,j}}} \right) - 2 \log \left( \frac{\mu_{f_{i,j}}}{\rho_{f_{i,j}}} \right) - 2 \right] P_{i,j} = 0
\end{aligned} \tag{4.29}$$

où  $2 \leq i \leq N-1$  et  $2 \leq j \leq M-1$ . Les conditions aux limites et initiales sont données par (4.27).

#### 4.4 Système algébrique à résoudre

La méthode numérique des lignes consiste à discrétiser séparément en temps et en espace. Les vecteurs  $T$  et  $P$  se transforment en  $2N$  variables après discrétisation en  $N$  points de maillage. Les dérivées spatiales sont approchées en utilisant la discrétisation en volumes finis (voir section 4.3).

Après avoir effectué la discrétisation spatiale, l'équation d'énergie peut s'écrire sous la forme matricielle :

$$S(T) \frac{dT}{dt} + A(T)T + B(T, P)T = b \tag{4.30}$$

où  $S(T)$  est une matrice diagonale inversible tel que  $S(T)_i = (\rho C)_e(T_i) \neq 0$ ,  $A(T)$  et  $B(T, P)$  sont deux matrices dont les coefficients sont obtenus à partir de la discrétisation spatiale du système (4.9),  $b$  est le vecteur second membre. L'équation (4.30) est une équation différentielle qui s'écrit donc sous la forme

$$\frac{dT}{dt} + S(T)^{-1}A(T)T + S(T)^{-1}B(T, P)T = S(T)^{-1}b \tag{4.31}$$

L'équation d'écoulement peut aussi s'écrire sous la forme matricielle :

$$D(T, P) \frac{dT}{dt} + C(T) \frac{dP}{dt} + E(T)P = c \tag{4.32}$$

où  $D(T, P)$  et  $C(T)$  sont deux matrices diagonales;  $C(T)$  est une matrice singulière parce que  $C(T)_i = 0$  lorsque  $\sigma(T_i) = 0$ , pour  $V_i$  volume de contrôle. L'équation différentielle est alors dégénérée. Les coefficients de la matrice  $E(T)$  sont obtenus par la discrétisation spatiale du problème d'écoulement et  $c$  est le vecteur second membre.

En combinant les deux équations (4.31) et (4.32), on obtient le système algébro-différentiel suivant :

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ D(T, P) & C(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dT}{dt} \\ \frac{dP}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S(T)^{-1}(A(T) + B(T, P)) & 0 \\ 0 & E(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S(T)^{-1}b \\ c \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

Soit  $y = [T \ P]^T$ . Par des transformations classiques, le système peut être écrit sous la forme générale

$$\begin{cases} F(t, y, y') = 0 \\ y(t_0) = y_0 \\ y'(t_0) = y'_0 \end{cases} \quad (4.34)$$

## 4.5 Index des systèmes différentiels algébriques (DAE)

L'index est une notion utilisée dans la théorie des systèmes DAE pour mesurer la distance d'un système DAE à son ODE relatif. L'index est un nombre entier non négatif qui fournit les informations utiles sur la structure mathématique et les complexités potentielles dans l'analyse et la résolution numérique d'un système DAE. Généralement plus l'index d'un système DAE est élevé, plus on peut s'attendre à des difficultés pour sa résolution numérique.

**Définition 4.1 (Systèmes DAE d'index 0) :** Le système  $F(t, y, y') = 0$  est d'index 0 si  $\partial F / \partial y'$  est non singulière.

Les systèmes ODE sont d'index 0.

**Définition 4.2 (Systèmes DAE d'index 1) :** soit  $F(t, y, y') = 0$ , le vecteur variable dépendant  $y$  peut être coupé en un vecteur  $u$  de taille  $N_d$ , appelé variable différentielle, et un vecteur  $v$  de taille  $N_a \neq 0$ , appelé variable algébrique, tel que :

$$F = \begin{pmatrix} f(t, u, v, u') \\ g(t, u, v) \end{pmatrix}$$

Le système DAE est dite d'index 1 si  $\partial f / \partial u'$  et  $\partial g / \partial v$  sont carrées et non singulières.

Remarque : dans ce cas, on peut dériver une fois l'équation  $g = 0$  par rapport au temps  $t$  et obtenir ainsi un système ODE.

Dans notre cas, il suffit de dériver les équations algébriques du système (4.33) pour avoir un système différentiel ordinaire (ODE). Ainsi, le système différentiel est d'index 1. Le système (4.34) peut se mettre sous la forme ci-dessus en choisissant comme variables algébriques les composantes  $P_i$  pour lesquelles  $C(T)_i = 0$ . Dans la suite le système est d'index 1.

## 4.6 Résolution de systèmes DAE

Nous utilisons le solveur (DASSL) pour effectuer l'intégration numérique du système algébrique différentiel d'index 1 (4.34).

Avant d'intégrer le problème de valeur initiale du système DAE, une condition importante est que les vecteurs  $y_0$  et  $y'_0$  soient consistants, c'est-à-dire vérifient  $F(t_0, y_0, y'_0) = 0$ .

### 4.6.1 Calcul de condition initiale d'un système DAE

Ce paragraphe concerne le calcul des conditions initiales pour les systèmes différentiels algébriques (DAE) (4.34). Le solveur DASSL permet de trouver  $y'_0$  à partir de  $y_0$  donné dans le cas où le système différentiel algébrique est d'index 1, en prenant un pas de temps artificiel par la méthode BDF [KBP89], [PBP95]. Cette technique produit des valeurs à  $t = t_0 + h$  ( $h =$  pas de temps) plutôt qu'à  $t = t_0$ . En revanche, DASSL nous donne la possibilité de vérifier si les conditions initiales fournies sont consistantes. Par une subroutine à part nous calculons les conditions initiales consistantes  $\tilde{y}$  à l'instant initial  $t_0$  pour  $y_0$  donné en résolvant le système des équations algébriques non linéaires

$$F(t_0, \tilde{y}, \frac{\tilde{y} - y_0}{h}) = 0 \quad (4.35)$$

Celle ci peut être interprétée comme une BDF1 avec un pas de temps allant de  $t_0 - h$  à  $t_0$ . Ceci est possible parce que la méthode BDF1 n'exige pas une évaluation de la fonction à l'instant  $t$  préalable à l'instant initial  $t_0$ . Le  $\tilde{y}$  calculé de cette façon est l'ensemble des conditions initiales consistantes tel que  $\tilde{y}'$  est défini par  $(\tilde{y} - y_0)/h$  [LSK99].

### 4.6.2 Algorithmes et stratégies utilisés dans DASSL

Pour résoudre le système DAE, en utilisant le solveur DASSL, l'idée de base est d'utiliser un schéma implicite multi-pas et puis de résoudre le système non linéaire au temps courant  $t_{n+1}$  par la méthode de Newton [KBP89]. L'intégration dans le solveur DASSL est effectuée par la méthode BDF d'ordre variable. La méthode BDF d'ordre  $q$  est donnée par la formule

$$\sum_{i=0}^q \alpha_{n,i} y_{n-i} = h_n y'_n, \quad (4.36)$$

où  $y_n$  et  $y'_n$  sont les valeurs approchées de  $y(t_n)$  et  $y'(t_n)$ , respectivement, et le pas de temps  $h_n = t_n - t_{n-1}$ . Les coefficients  $\alpha_{n,i}$  sont déterminés uniquement par l'ordre  $q$ , et l'histoire des pas de temps. L'application de la méthode BDF (4.36) au système (4.34) donne un système non linéaire à résoudre à chaque pas de temps :

$$G(y_n) = F(t_n, y_n, h_n^{-1} \sum_{i=0}^q \alpha_{n,i} y_{n-i}) = 0. \quad (4.37)$$

Pour résoudre ce système non linéaire, on peut utiliser la méthode de Newton [KBP89]. DASSL utilise une méthode de Newton modifiée [OR70], [DS]. Cela donne, à chaque itération de Newton  $k + 1$ , le système linéaire

$$J[y_{n+1}^{k+1} - y_{n+1}^k] = -G(y_{n+1}^k) \quad (4.38)$$

où  $J$  est une approximation de la jacobienne de la fonction  $G$

$$J \approx \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{\partial F}{\partial y} + \alpha \frac{\partial F}{\partial y'} \quad (4.39)$$

où  $\alpha = \alpha_{n,0}/h_n$ . Le scalaire  $\alpha$  change quand la taille du pas de temps ou l'ordre de la méthode change.

Afin de réduire le coût de la méthode, la matrice jacobienne n'est pas évaluée à chaque itération. En effet, généralement, la matrice jacobienne varie peu au cours de plusieurs pas de temps successifs. Une stratégie élaborée [KBP89], permet de déterminer si la matrice jacobienne doit être mise à jour. Or, les matrices  $\partial F/\partial y'$  et  $\partial F/\partial y$  varient lentement par rapport aux pas de temps. D'autre part, le paramètre  $\alpha$  varie chaque fois que la taille du pas de temps ou l'ordre de la méthode varie. Si la variation des matrices et de  $\alpha$  n'est pas très importante par rapport à celle de la dernière itération, alors on utilise les anciennes matrices  $\partial F/\partial y'$  et  $\partial F/\partial y$  au lieu de les réévaluer à chaque pas de temps.

La matrice jacobienne  $J$  est mise à jour quand

- on commence le calcul,
- la valeur de  $\bar{\alpha}$  (utilisée à la place de  $\alpha$ ) à la dernière mise à jour est tel que  $\alpha/\bar{\alpha} < 3/5$  ou  $\alpha/\bar{\alpha} > 5/3$ ,
- un échec non fatal de convergence s'est produit avec une jacobienne non mise à jour.

Si une réévaluation de  $J$  est faite pendant le pas de temps  $t_n$ , elle est faite en  $(t_n, y_n, y'_n)$  pour augmenter son efficacité. Dans le cas de non convergence, on réduit la taille de pas de temps.

L'utilisateur doit spécifier le type de solveur linéaire utilisé dans DASSL. En effet, DASSL propose différentes méthodes de résolution de système linéaire pour les itérations de Newton :

- une méthode directe dense,
- une méthode directe bande.

Afin de traiter les matrices creuses de la méthode globale, nous avons ajouté une interface pour une méthode directe creuse. Ainsi, le solveur DASSL a été modifié de façon à pouvoir introduire de nouveaux solveurs linéaires, ici UMFPACK.

### 4.6.3 Fonction et Jacobien

Pour résoudre le système DAE, l'utilisateur doit fournir une fonction permettant l'évaluation, connaissant  $t$ ,  $y$  et  $y'$  de la fonction  $F$ . Concernant la matrice jacobienne  $J$ , soit une fonction est fournie à DASSL qui (connaissant  $t$ ,  $y$ ,  $y'$  et  $\alpha$ ) évalue  $J$ , soit DASSL calcule une approximation numérique de  $J$  par la méthode de différences finies.

Dans DASSL la matrice  $J$  peut avoir une structure dense ou bande et maintenant elle peut avoir une structure creuse après l'interfaçage avec UMFPack. Ainsi, la factorisation de  $J$  et la résolution du système sont effectuées par le logiciel UMFPack [DAV04a], [DAV04b], [DD97] qui est à la fois robuste et performant. En effet, on a écrit une sous-routine qui calcule explicitement la matrice jacobienne sous format creux.

L'utilisateur fournit au solveur une fonction évaluant  $F$  connaissant  $y$  définie à partir des modules de diffusion-convection et écoulement de gaz (voir figure 4.2) et une fonction évaluant la matrice jacobienne de cette fonction  $\frac{\partial F}{\partial y}$  connaissant  $y$  à partir des modules de diffusion-convection et écoulement.

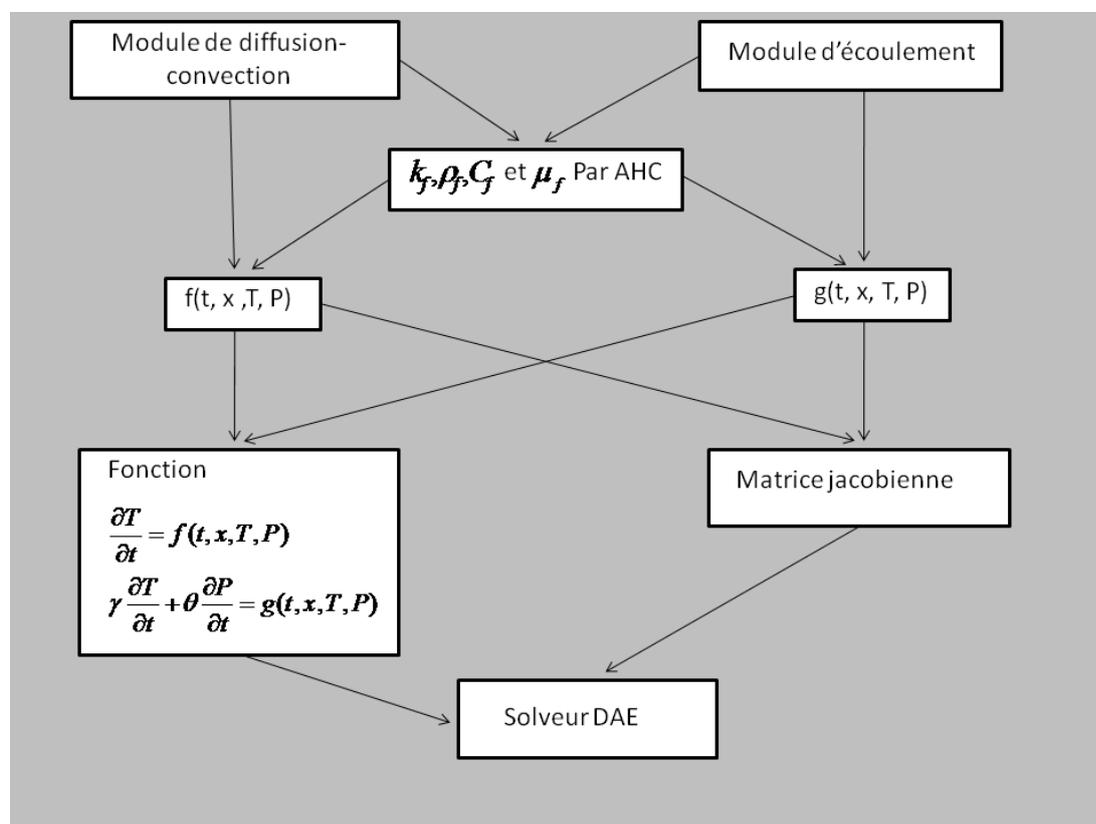


FIG. 4.2 – Couplage dans le code DIFFUSE-C avec le solveur DASSL. Les flèches symbolisent les interactions entre les différents modules

## 4.7 Logiciel implémenté

Après avoir présenté le système à résoudre et les différentes méthodes de résolution, on présente dans cette partie le logiciel implémenté avec la méthode de résolution globale présentée précédemment.

Le calcul numérique est effectué par la bibliothèque MUESLI (<http://www.irisa.fr/sage/edouard/canot/muesli/>) qui contient tous les matériaux nécessaires pour effectuer des calculs vectoriels et matriciels par des structures dynamiques et automatiques ; elle permet aussi de faire des graphiques simples. MUESLI offre, entre autres, une interface avec le solveur DASSL (DAE) de SLATEC, et également une interface avec la bibliothèque UMFPack (résolution des systèmes linéaires creux). Le solveur DASSL a été modifié de façon qu'il puisse traiter des matrices jacobiennes creuses (au format CSC : compact sparse columns) et en respectant la structure de la bibliothèque UMFPack.

Une fois que les paramètres du solveur DAE sont définis, le solveur gère complètement le calcul. On effectue juste une boucle externe de pas de temps afin d'effectuer les sauvegardes et la sortie des résultats.

Le code développé permet de faire le couplage entre l'équation de diffusion-convection et l'écoulement du vapeur dans le sol dans les cas 1D et 3D-axisymétrique. Le logiciel est écrit en Fortran 90, il est appelé DIFFUSE-C.

## 4.8 Expériences numériques

### 4.8.1 Performances et coûts

Afin d'obtenir de bonnes performances la matrice jacobienne est calculée explicitement (c'est-à-dire codée à la main dans une routine). Les avantages des matrices creuses sont le gain en coût de mémoire et en vitesse de calcul. Par exemple, dans notre cas, une matrice pleine de taille 100 par 100 nécessite 110 *MO* de mémoire et un temps CPU de 38 heures pour résoudre le système DAE (4.33), même si le nombre des éléments non nuls est seulement 38342 éléments. Le même calcul effectué en format creux, nécessite 15 *MO* de mémoire et un temps CPU de 87 s sur une machine 2.1 GHz Dual Core-2. Le gain en vitesse avec l'utilisation de la matrice creuse est illustré dans la figure (4.3).

### 4.8.2 Effet de couplage avec l'écoulement de gaz

Pour montrer l'effet du couplage du transfert de la chaleur par diffusion avec l'écoulement du vapeur dans le sol nous avons simulé le transfert de chaleur avec les codes DIFFUSE-SC et DIFFUSE-C tout en supposant que la température imposée à la surface du sol est de 300°C et que le sol est argileux. La figure (4.4) montre l'effet du couplage. On peut facilement remarquer que pour un feu de courte durée (moins de 5 h), le couplage avec l'écoulement de gaz n'a pas d'effet prononcé sur la diffusion de la chaleur, en revanche pour un feu de longue durée, on peut bien voir que le terme convectif (calculé à partir de l'équation de l'écoulement du vapeur d'eau) a un effet de retard sur la diffusion de la chaleur, cet effet devient de plus en plus prononcé lorsque la durée d'allumage est grande. Ce résultat est tout à fait logique parce que pour un feu de courte durée l'interface de changement de phase est peu profonde et la vapeur d'eau peut s'échapper facilement vers la surface alors que dans le cas où le feu est de longue durée l'interface devient plus profonde et la vapeur d'eau a un parcours plus

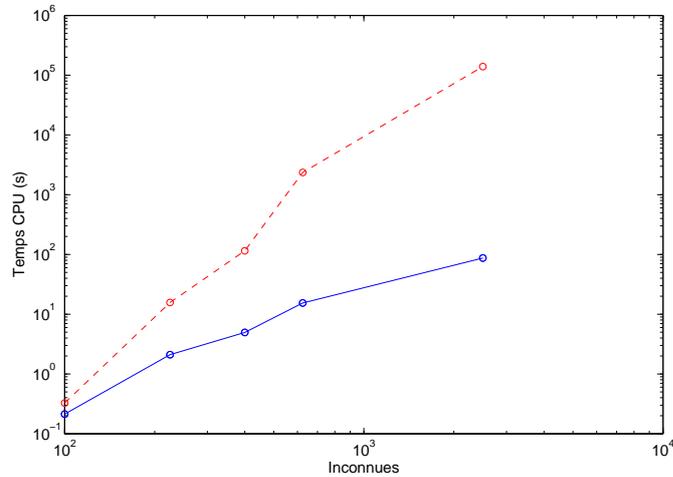


FIG. 4.3 – Temps CPU par rapport au nombre de noeuds utilisé dans la simulation avec la matrice creuse (courbe bleue) et la matrice dense (courbe pointillée rouge). Les noeuds utilisés sont :  $10 \times 10$ ,  $15 \times 15$ ,  $20 \times 20$ ,  $25 \times 25$  et  $50 \times 50$

long avant de pouvoir s'échapper par la surface ; l'accumulation de la vapeur dans le sol provoque une augmentation en pression et l'effet convectif devient plus prononcé.

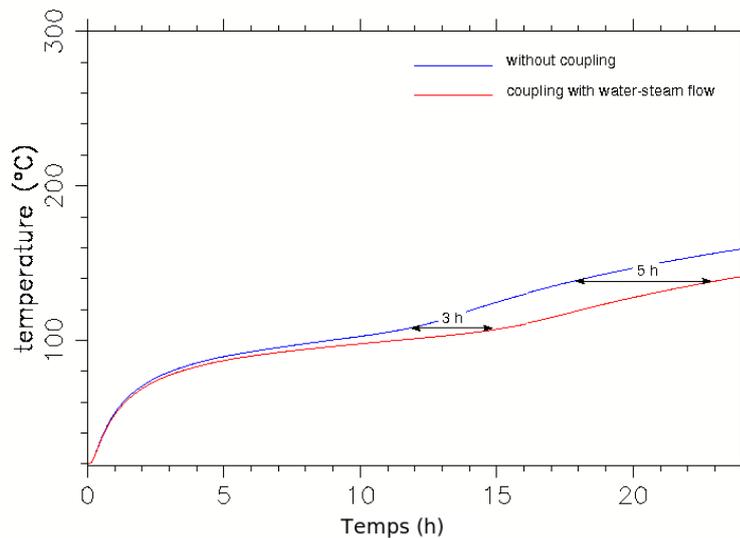


FIG. 4.4 – Effets de couplage de la diffusion de la chaleur avec l'écoulement du vapeur d'eau. Les courbes représentent l'histoire de la température à 5 cm.

## 4.9 Conclusion

Dans ce chapitre on a développé un code numérique qui permet de simuler le transfert de chaleur dans les milieux poreux saturés couplé avec l'écoulement de vapeur dans le sol (dû au changement de phase eau/vapeur). On propose une méthode de résolution globale basée sur une formulation DAE permettant de résoudre ce couplage. Par ailleurs, le couplage étant important, cela nécessite un contrôle du pas de temps et de la convergence des itérations de Newton. On recommande alors l'utilisation de solveurs DAE automatiques qui sont généralement efficaces pour faire ce genre de contrôle. Le prix à payer est la résolution de systèmes non-linéaires plus larges en gardant la distinction entre les opérateurs de diffusion-convection et d'écoulement. Pour l'instant on utilise une méthode Newton-LU avec un solveur linéaire creux mais on pourrait aussi utiliser un solveur itératif. De plus, on utilise une discrétisation spatiale classique mais il est tout à fait possible d'introduire un schéma numérique moins diffusif.

On montre dans ce chapitre l'effet retardant du couplage. Ce retard est d'autant plus important que le feu a une longue durée.



## Chapitre 5

# Simulation du feu préhistorique : Cas tests et exploitation

L'objectif de cette thèse vise à reproduire mathématiquement le comportement des foyers préhistoriques à partir des données expérimentales des structures de combustion qui s'inspirent de notre connaissance actuelle des foyers paléolithiques et protohistoriques.

Nous avons déjà présenté dans les chapitres précédents les différents codes numériques développés (ou à notre disposition) qui permettent de simuler le transfert de chaleur dans les milieux poreux saturés. En général, dans ces codes, la condition de bord consiste à l'imposition directe de la température à une partie choisie du domaine de calcul qui représente la surface du sol. Les applications de ces modèles sont multiples, citons, entre autres, le calcul de la durée minimale de fonctionnement des foyers et les études paramétriques des processus de combustion et de cuisson, ce qui ouvrirait la porte à une expérimentation virtuelle visant à mieux comprendre l'application de ces différentes techniques et leur impact sur le contexte systémique et archéologique.

Les codes développés s'appliquent tout d'abord à l'étude des phénomènes de conductivité thermique dans des conditions non stationnaires sur des sols sujets à une exposition intense à la chaleur comme celle subie par les foyers préhistoriques. Il faut signaler que pour simuler le comportement des foyers dans ce type des conditions, il est essentiel d'obtenir des valeurs adéquates des propriétés thermodynamiques des sols par rapport aux valeurs réelles. Ainsi la capacité calorifique, la densité, la conductivité thermique, la perméabilité, la porosité et le contenu du sol en eau sont des paramètres déterminants.

### 5.1 Études expérimentales

Des expériences sur des foyers réels ont été réalisées afin de pouvoir valider les codes numériques développés. Nous pouvons simuler ces expériences avec nos codes actuels pour apprécier ses concordances avec la réalité expérimentale. Les campagnes d'expérimentation ont été orientées d'une part vers la détermination des modes de fonctionnement et des aptitudes fonctionnelles des divers types de foyers (foyers à plat, en

cuvette...) tels qu'ils apparaissent à Pincevent (site archéologique à 72 km au sud de Paris, près de Montereau, France. Ce site était occupé par les Magdaléniens chasseurs-cueilleurs 12000 ans avant Jésus Christ) et d'autre part vers l'étude des traces qui vont nous permettre de reconnaître ses différents modes de fonctionnement. Ainsi, l'étude des processus taphonomiques de ces foyers contribue à une meilleure compréhension des comportements des Magdaléniens vis-à-vis de ces structures de combustion et donne par ailleurs des lignes directives à suivre pour les méthodes de fouille des foyers préhistoriques. Les expériences utilisées dans ce travail sont réalisées sur deux sites archéologiques Pincevent et Étiolles. On va présenter le site de Pincevent sur lequel on a travaillé pendant la première et deuxième campagne, alors que les expériences d'Étiolles sont faites par Ramiro March et ses collaborateurs [MAR95a].

### 5.1.1 Le site de Pincevent

Cette partie porte sur la présentation du site archéologique du Pincevent sur lequel on a travaillé et réalisé plusieurs expériences du foyer archéologique. Cette présentation est tirée de la thèse de Ramiro MARCH [MAR95a].

Le site magdalénien de Pincevent, situé dans la vallée de la Seine, un peu en avant du confluent avec l'Yonne, entre Montereau et Moret-sur-Loing (voir figure 5.1), a été, depuis sa découverte, le centre du développement de divers axes de recherche concernant l'étude des structures d'habitat des gisements paléolithiques de plein air, et, en ce qui concerne plus particulièrement, des foyers préhistoriques. En effet, depuis la publication de l'habitation n°1 en 1965 [eMB65] et de l'élaboration du modèle théorique sur l'organisation de l'espace des chasseurs cueilleurs habitant le site, Pincevent a joué un rôle important dans le développement d'une recherche sur les comportements des chasseurs cueilleurs, influençant au delà des frontières de l'hexagone, comme le montrent les innombrables publications dans lesquelles ce site est pris comme référence.

Les structures de combustion de Pincevent ont été l'objet de fouilles minutieuses qui ont permis la mise en valeur de certaines différences "formelle", comme par exemple la taille des cuvettes ou des dépressions, la distribution ou l'agencement des roches, la disposition des couches de remplissage des cuvettes ou encore la présence ou l'absence de sédiment oxydé, à partir desquelles a été élaborée la première typologie des structures de combustion pour les sites magdaléniens de plein air.

### 5.1.2 Approche méthodologique

On va présenter l'approche méthodologique suivie pour les expériences en faisant référence à un site archéologique spécifique, Pincevent en France. Deux types de campagnes expérimentales ont été réalisées, des expériences avec du feu réel et des expériences avec une plaque électrique.

La première campagne d'expérimentation a commencé le 15 juin 2007 pendant 1 mois. Pendant cette campagne on a pu reproduire les foyers préhistoriques sur le site de Pincevent avec du feu réel. Le sol archéologique du Pincevent est un sol argileux. Nous avons commencé par arracher les herbes et nettoyer le sol (voir figure 5.2), puis les ther-

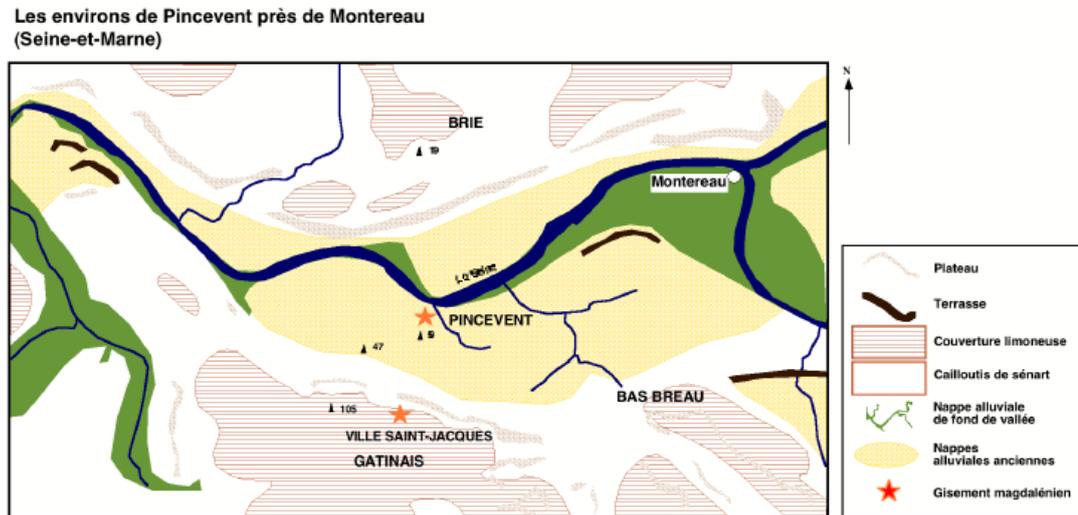


FIG. 5.1 – Emplacement du site de Pincevent (d'après Roublin-Jouve, 1994 avec modifications).

mocouples ont été mis dans le sol en différentes positions pour mesurer la température à l'intérieur du sol, un thermocouple a été placé à la surface du sol pour mesurer la température du feu (voir figure 5.3) ; ces thermocouples sont reliés à une boîte d'acquisition qui à son tour est reliée à un ordinateur pour enregistrer les valeurs de température au cours du temps (voir figure 5.9). Ensuite, nous avons ramassé du bois à côté de la Seine qui vont servir pour allumer le feu (voir figure 5.4) ; les morceaux de bois sont pesés avant d'être utilisés. Une fois le feu allumé, le logiciel est lancé pour mesurer les différentes températures. Lorsque le feu s'éteint, les cendres obtenues (voir figure 5.5) sont ramassées et la surface du sol est nettoyée afin de pouvoir voir les contrastes des couleurs (voir figure 5.6), puis, nous avons mesuré les différentes zones de couleur par un théodolite<sup>1</sup>. Après, nous avons fouillé le sol par des coupes verticales (voir figure 5.11) pour déterminer la position de l'interface sèche/humide, et les différentes positions des thermocouples. Le problème majeur qu'on a rencontré pendant cette campagne est que la température du feu est incontrôlable ; en plus il y a la question de la météo (présence du vent ou pas).

La deuxième campagne d'expérimentation a commencé en juillet 2008, toujours à Pincevent. Pendant cette campagne, nous avons utilisé une plaque électrique (voir figure 5.8) afin de pouvoir mieux contrôler la température imposée à la surface du sol. Les thermocouples, mis en différentes positions dans le sol, sont liés à l'ordinateur par une boîte d'acquisition des données (voir figure 5.9). Le même principe de fouille utilisé précédemment est utilisé ici, les positions de différentes zones de coloration sont déterminées (voir figure 5.10), puis le sol est fouillé pour déterminer la position de

<sup>1</sup>appareil servant dans les mesures d'angles horizontaux et verticaux pour déterminer des directions, mais mesurant en plus les distances.



FIG. 5.2 – Préparation du sol. On arrache les herbes et on nettoie le sol.



FIG. 5.3 – Les thermocouples sont mis dans le sol à différentes positions.



FIG. 5.4 – Le feu est allumé avec du bois trouvés à côté de la Seine.

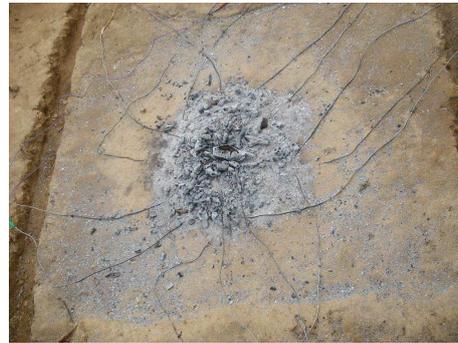


FIG. 5.5 – Les cendres obtenues après l'extinction du feu.



FIG. 5.6 – Changement de couleur dû aux altérations du sol.



FIG. 5.7 – Fouille à l'intérieur du sol. Détermination de la position de l'interface et des positions des différents thermocouples.

l'interface sèche/humide (voir figure 5.11).



FIG. 5.8 – Plaque électrique utilisée pour chauffer le sol.



FIG. 5.9 – Les thermocouples sont liés à l'ordinateur.



FIG. 5.10 – Altérations à la surface du sol produites par la plaque.



FIG. 5.11 – Fouille du sol pour déterminer la position de l'interface et les positions des thermocouples.

## 5.2 Confrontations des résultats numériques avec les expériences

Après avoir insisté sur le point de vue théorique et numérique pour résoudre notre système des équations, la validation des codes consiste à comparer les résultats numériques avec les résultats expérimentaux. En réalité, les milieux poreux ne sont pas saturés, et pour pouvoir valider les codes on utilise  $\phi$  comme étant le taux d'humidité dans le sol au lieu de le voir comme étant le taux du vide.

Les propriétés physiques de la phase fluide et de la matrice poreuse du sol (on travaille avec un sol argileux) sont données dans le tableau (5.1). Dans tous les cas, on utilise la chaleur latente  $L = 2400 \times 10^3 J/kg$ .

### 5.2.1 Code DIFFUSE-SC

Comme un premier exemple de validation, les expériences de Laloy et Massard [LM84] sont utilisées. Le milieu poreux est le sol argileux sec du site archéologique

Phase fluide	Capacité ( $J/kg.K$ )	Conductivité ( $W/m.K$ )	Densité ( $kg/m^3$ )
Liquide	$4 \times 10^3$	$6 \times 10^{-1}$	1000
Vapeur	$2 \times 10^3$	$2.5 \times 10^{-2}$	$8 \times 10^{-1}$
Argile	$1.3 \times 10^3$	$7.56 \times 10^{-1}$	1500

TAB. 5.1 – Propriétés physiques utilisées pour les simulations.

d'Étiolles<sup>2</sup>. La simulation réalisée avec le code DIFFUSE-SC utilise une grille de maillage carré 2D  $50 \times 50$ . Le diamètre du feu est supposé égale à 30 cm (on suppose que la température du feu est homogène égale à  $700^\circ C$ ). La figure (5.12) montre la comparaison entre les résultats numériques et les données expérimentales. La variation de la température à la profondeur 7,1 cm est certainement due à une certaine humidité dans le sol d'après Laloy et Massard [LM84]. Comme on peut remarquer, il y a une bonne concordance entre les courbes numériques et les courbes expérimentales, on peut alors dire que malgré les incertitudes qui viennent des données expérimentales, les simulations numériques montrent une allure comparable à celle des expériences et c'est un bon signe d'accord avec la solution numérique. La figure (5.13) représente le profil de température dans le sol dans le cas 3D axisymétrique.

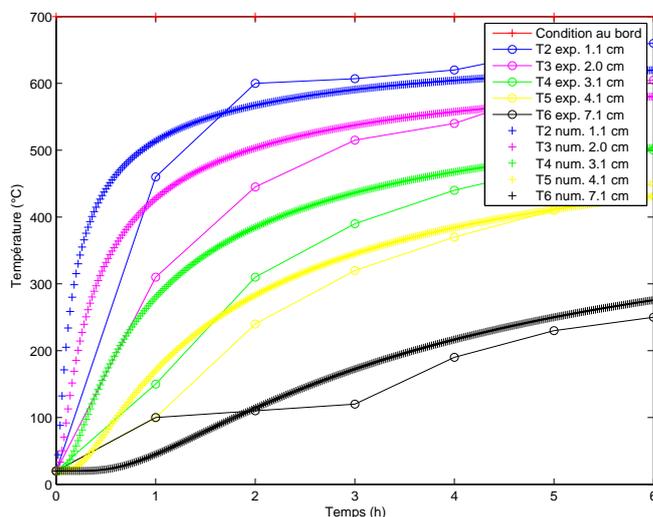


FIG. 5.12 – Simulation numérique de l'expérience de Laloy et Massard (1984). Comparaison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-SC et les données expérimentales.

<sup>2</sup>Site archéologique au sud de Paris, France.

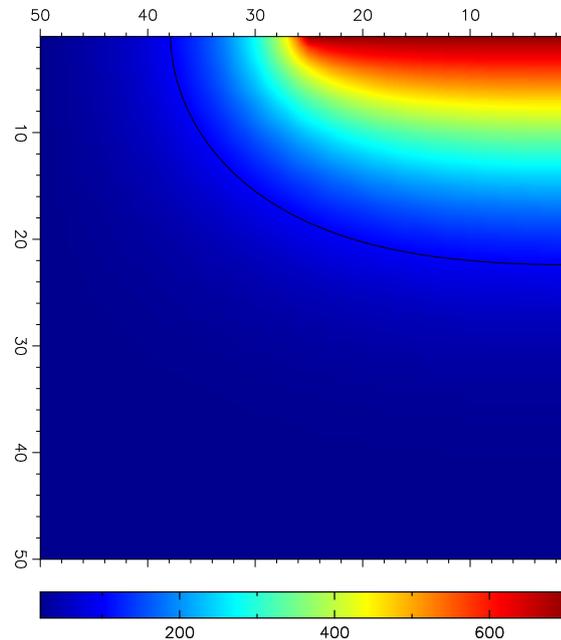


FIG. 5.13 – Profil de température pour l'expérience de Laloy et Massard dans le sol pour le cas 3D axisymétrique après 6 h d'allumage. La ligne noire précise la position des isothermes à  $100^{\circ}\text{C}$ . Les températures sont données en degrés centigrades.

Le deuxième exemple de validation est fourni en prenant en compte la présence d'eau dans le sol. Comme le but de ce travail est de présenter l'application du modèle numérique et des répliques expérimentales aux études des foyers archéologiques utilisés pour cuisiner et se chauffer, l'expérience est faite sur le site archéologique du Pincevent. La réplique expérimentale consiste à chauffer la surface du sol avec une plaque électrique après avoir imbibé le sol par de l'eau pour pouvoir travailler avec un milieu poreux saturé. L'approche méthodologique de l'expérience est expliquée dans la section (5.1.2).

L'avantage de l'utilisation de la plaque chauffante est que la température utilisée pour chauffer la surface du sol est homogène et presque constante, cette température sera utilisée comme condition au bord. Comme le temps de fonctionnement de cette expérience ne dépasse pas les 3 h, d'après la section (4.8.2) le couplage entre la diffusion de chaleur et le terme convectif n'a pas d'effet significatif sur le transfert de chaleur dans ce cas, d'où l'utilisation du code `DIFFUSE-SC`. Le maillage utilisé est un maillage carré  $50 \times 50$ . La simulation est faite dans le cas 3D-axisymétrique. La porosité du sol est supposée  $\phi = 15\%$ , et les propriétés physiques utilisées dans la simulation sont données par le tableau (5.1).

La figure (5.14) montre un bon accord entre les mesures expérimentales et les résultats numériques malgré les petites différences au niveau des courbes, celles-ci étant dues à l'incertitude des propriétés physiques utilisées pour la simulation ainsi qu'aux éventuelles fausses mesures expérimentales. En outre, les plateaux qui apparaissent

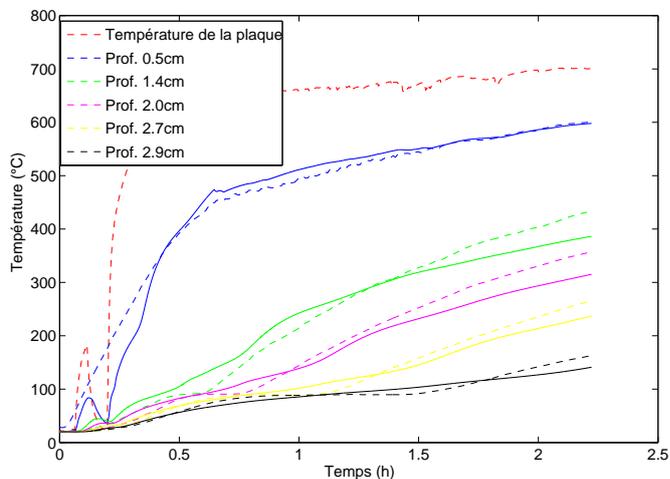


FIG. 5.14 – Comparaison entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux obtenus par l'expérience réalisée avec la plaque chauffante à Pincevent. Les courbes représentent les histoires de la température à différentes profondeurs. Les courbes pointillées représentent les valeurs expérimentales et les courbes continues représentent les valeurs numériques.

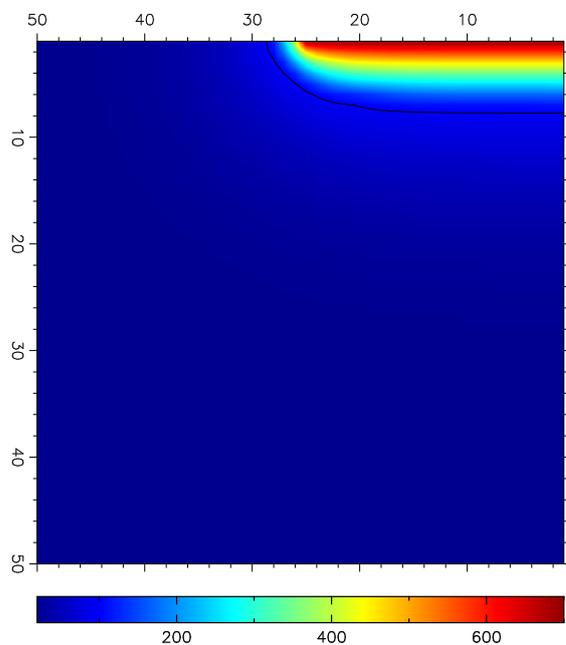


FIG. 5.15 – Profil de température pour l'expérience de la plaque dans le sol avec une coupe axisymétrique. La ligne noire représente la position de l'interface de changement de phase (isotherme  $100^{\circ}\text{C}$ ).

dans les courbes sont dûs au phénomène de changement de phase (évaporation dans le sol). Le fait que les plateaux obtenus par la simulation ne sont pas bien marqués est dû au choix inhérent de notre modèle. La figure (5.15) montre le profil de température pour une coupe symétrique dans le sol. La position de l'interface est déterminée par l'isotherme  $100^{\circ}\text{C}$ . Dans cet expérience, on arrive à chauffer à  $300^{\circ}\text{C}$  jusqu'à  $1,5\text{ cm}$  ce qui correspond aux altérations observées pendant la fouille.

### 5.2.2 Code DIFFUSE-C

D'autres expériences avec du feu réel sont utilisées pour valider notre modèle numérique. Le premier exemple de validation avec feu réel utilise une expérience réalisée sur le site archéologique d'Étiolles. Une vue schématique de l'expérience est illustrée dans la figure (5.16), elle montre les différentes positions des thermocouples ainsi que les différentes zones d'altérations. La simulation 3D-axisymétrique utilise une grille de maillage carré  $50 \times 50$  avec le code DIFFUSE-C. La porosité du sol est supposée  $\phi = 15\%$  et le sol est supposé argileux. La figure (5.17) montre la comparaison entre les résultats numériques et les mesures expérimentales. On remarque une bonne concordance entre les deux malgré l'incertitude des données physiques utilisées par la simulation. Ainsi, on a utilisé la température au centre du feu comme température uniforme imposée à la surface, ce qui peut être à l'origine des différences remarquées. Dans cet expérience on arrive à chauffer à  $300^{\circ}\text{C}$  jusqu'à  $2\text{ cm}$ , ce qui correspond encore une fois aux altérations observées.

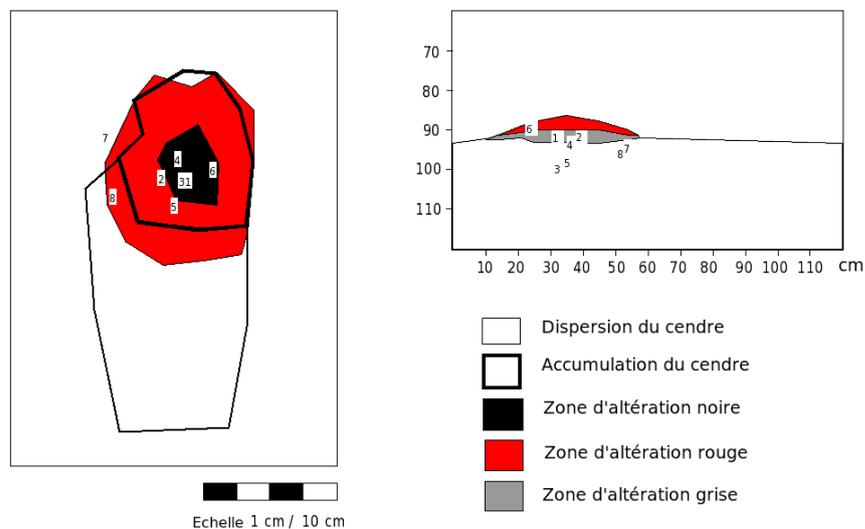


FIG. 5.16 – Vue schématique de l'expérience d'Étiolles. Les nombres représentent les différents thermocouples utilisés.

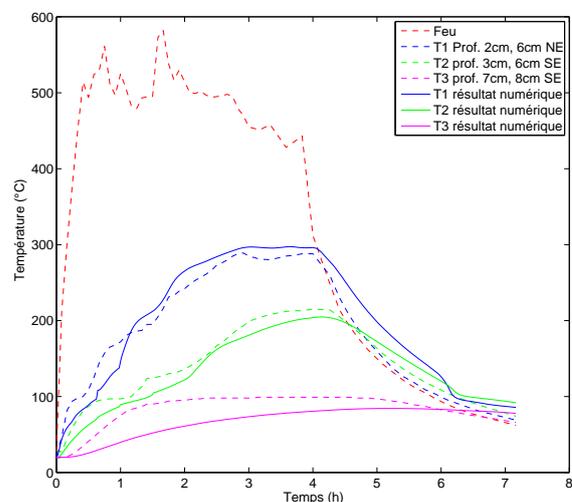


FIG. 5.17 – Comparaison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-C et les mesures expérimentales obtenues à Étioilles par R. March. Les courbes représentent l’histoire de la température à différentes profondeurs. La température au centre du feu est utilisée comme condition de Dirichlet pour la simulation à la surface du sol.

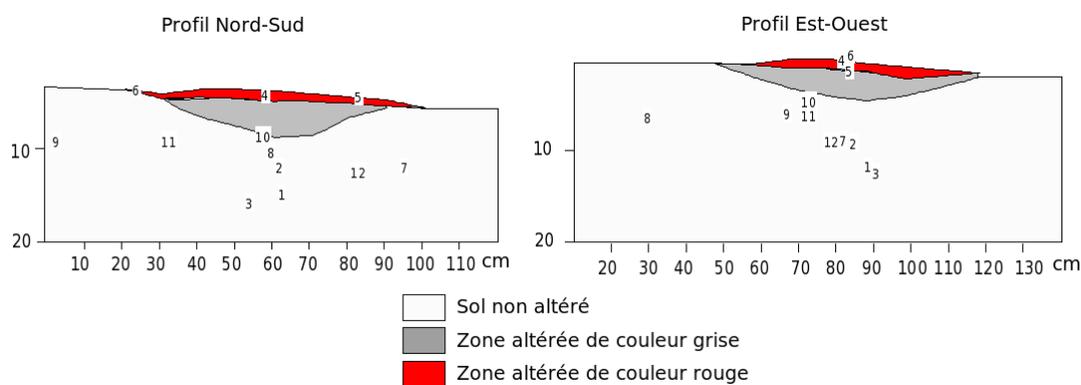


FIG. 5.18 – Vue schématique de l’expérience de Pincevent. Les nombres représentent les différents thermocouples utilisés.

Un autre exemple de validation présenté est basé sur une expérience réalisée sur le site archéologique du Pincevent avec feu réel. Cette expérience a été simulée par le code DIFFUSE-C en prenant le taux d’humidité  $\phi = 15\%$  et une grille de maillage carré 2D  $50 \times 50$ . La figure (5.18) montre une vue schématique de l’expérience avec les différents thermocouples utilisés. La comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux est illustrée dans la figure (5.19) qui montre une bonne précision du code. Les deux

figures (5.20) et (5.21) montrent respectivement le profil de température et la variation de pression à l'intérieur du sol. C'est cette variation de pression qui est à l'origine de l'écoulement du gaz dans le milieu.

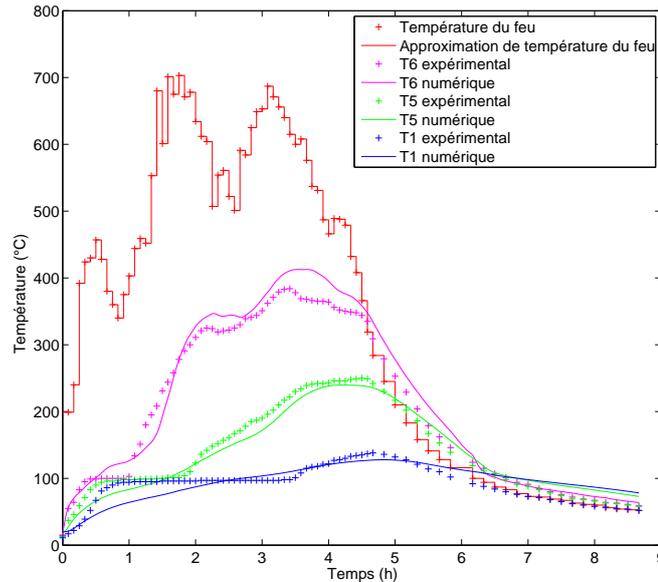


FIG. 5.19 – Comparaison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-C et les mesures expérimentales obtenues à Pincevent. Les courbes représentent l'histoire de la température à différentes profondeurs.. T1 est à 3,5 cm de profondeur, T5 est à 2,5 cm et T6 est à 1,5 cm à l'intérieur du sol.

### 5.2.3 Code DIFFUSE-3D

Le code DIFFUSE-3D est aussi testé pour simuler des foyers expérimentaux réels en vrai 3D. La présente simulation reproduit une expérience réalisée sur le site archéologique d'Étiolles. La discrétisation du domaine  $1m \times 1m \times 1m$  est effectuée par des mailles tétraédriques non structurés. Le feu est circulaire de diamètre 30 cm. La forme type des mailles est présentée sur la figure (5.22). C'est un maillage non uniforme très fin dans la zone du feu et au niveau de l'interface (427895 éléments). La figure (5.23) montre une comparaison entre les résultats de simulation obtenus par le code DIFFUSE-3D et les mesures expérimentales d'une expérience réalisée sur le site archéologique d'Étiolles. La comparaison montre une bonne concordance entre les deux résultats malgré les incertitudes dans les paramètres physiques utilisés et l'approximation du feu qu'on utilise comme condition au bord. La figure (5.24) montre le profil de température en faisant une coupe à l'intérieur du sol. La figure (5.25) montre une vue 3D du profil de température à la surface de sol.

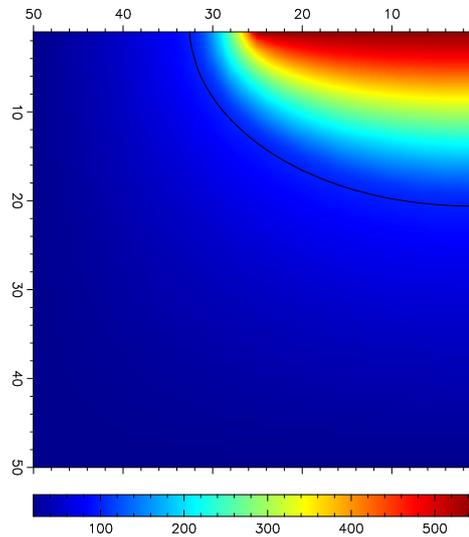


FIG. 5.20 – Profil de température pour l'expérience de Pincevent avec feu réel avec une coupe axisymétrique dans le sol. La ligne noire détermine la position de l'interface de changement de phase.

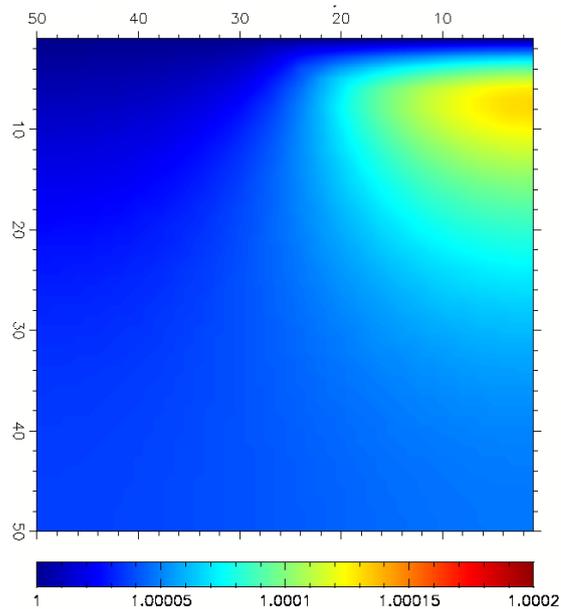


FIG. 5.21 – Variation de la pression dans le sol. Elle est due à la création du gaz lors du changement de phase.

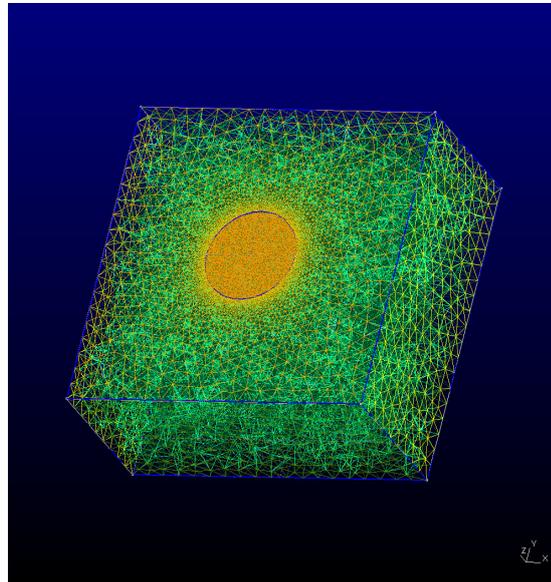


FIG. 5.22 – Le maillage utilisé pour la simulation avec le code DIFFUSE-3D.

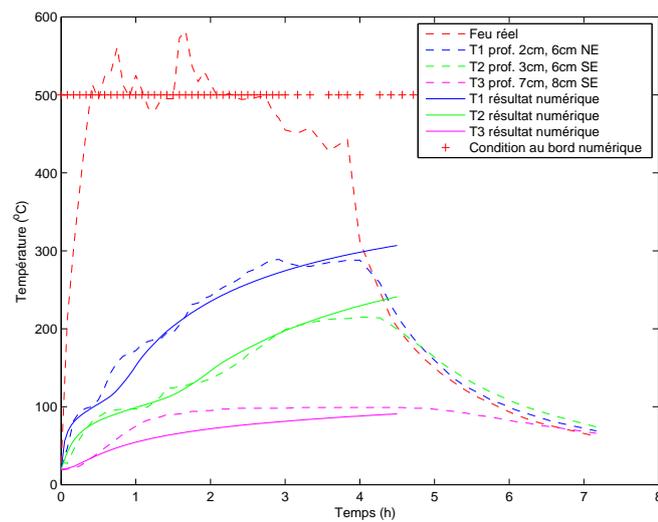


FIG. 5.23 – Une comparaison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-3D et les mesures expérimentales obtenues à Étioilles. Une approximation constante uniforme du feu est prise.

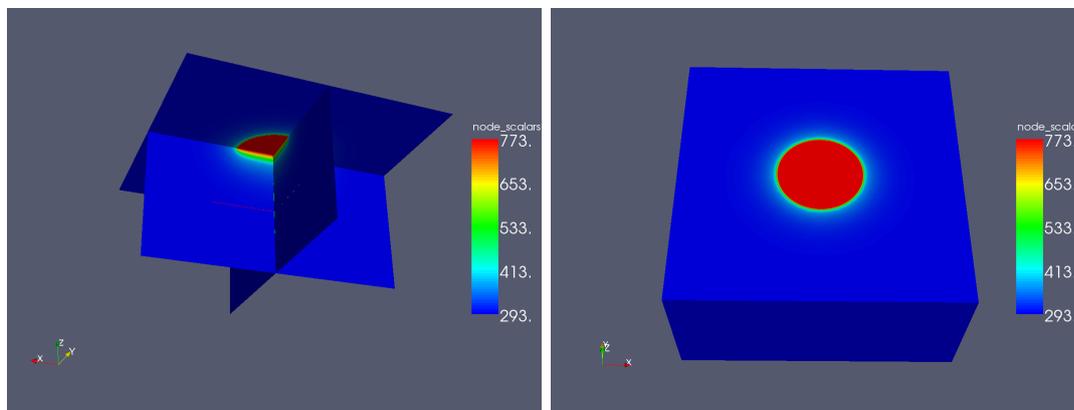


FIG. 5.24 – Profil de température à l'intérieur du sol.      FIG. 5.25 – Vue 3D du résultat numérique à la surface du sol.

### 5.3 Foyer expérimental de l'âge du bronze

Les découvertes de grandes fosses de combustion rectangulaires à pierres chauffantes, en association avec des sites d'habitats du Bronze final et la transition Bronze/Hallstatt, se sont multipliées ces dernières années. Par un certain nombre de caractères, comme leurs dimensions, leur fréquent agencement en batteries, et leur localisation à l'extérieur des zones d'habitat, il est évident que ces structures sont les manifestations d'événements communautaires ou extra-communautaires dépassant largement un simple cadre domestique.

La lecture de ces structures soulève un certain nombre de questions auxquelles le simple examen visuel, aussi minutieux et critique soit-il, ne peut apporter de réponses définitives. Ces questions portent notamment sur le mode de fonctionnement de ces fosses, leur destination, le nombre d'utilisations et leur durée. Afin de sortir de cette impasse, il est tout à fait utile d'adapter et d'appliquer notre modèle numérique à une série de structures de combustion protohistoriques.

Un exemple typique de cette application porte sur la modélisation d'un foyer expérimental de la période de l'âge du bronze utilisé pour le cuisson et réalisé pendant la fouille de Hauts-de-Feuilly (commune de Saint-Priest, Rhône) [PJ]. Il s'agit d'un foyer rectangulaire en cuvette de dimension  $1.60\text{ m} \times 1.10\text{ m} \times 0.45\text{ m}$ , rempli de bois rangés sous forme rectangulaire pour couvrir la surface du foyer (voir figure 5.26, 5.27, 5.28), puis une couche de cailloux est utilisée pour couvrir la couche en bois.



FIG. 5.26 – Disposition du bois à l'intérieur du foyer.



FIG. 5.27 – Disposition du bois à l'intérieur du foyer.



FIG. 5.28 – Disposition du bois à l'intérieur du foyer.



FIG. 5.29 – Galets utilisés pour l'échauffement.



FIG. 5.30 – Début du cuisson sur les galets chauffés.



FIG. 5.31 – Fin de la cuisson sur les galets chauffés.

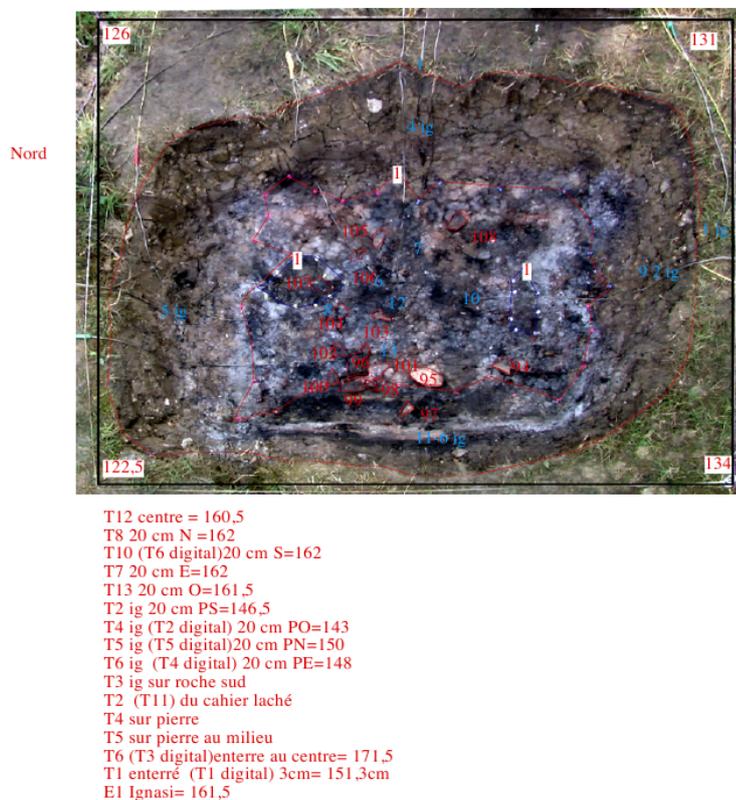


FIG. 5.32 – Diagramme montrant les positions des différents thermocouples dans le foyer.

Les cailloux sont utilisés pour faire la cuisson après avoir été chauffés par le feu qui est resté allumé pendant 210 *min*. Les cailloux en grès (88 galets) sont mis sur le foyer après 30 *min* d'allumage (voir figure 5.29). Les figures (5.30) et (5.31) montrent les cuissons sur les cailloux chauffés.

Pour mesurer les températures on a utilisé 6 thermocouples au fond de la structure, 5 sur le sol, 1 sous l'axe central à 11.5 *cm* de profondeur, puis 4 thermocouples sur les bords internes du foyer à 20 *cm* du fond du foyer. Finalement, 4 thermocouples sont introduits dans les galets pour mesurer leurs températures.

La mesure sous les braises montre une augmentation rapide de la température qui atteint au maximum 500°C. En revanche, les valeurs de température enregistrées par le thermocouple à 11.5 *cm* n'ont pas dépassé 50°C. Par ailleurs, les températures enregistrées sur les bords (à une hauteur de 20 *cm*) sont relativement faibles par rapport à celles du fond et sont très proches de 300°C.

Les températures atteintes par les pierres sont très importantes (jusqu'à 600°C),

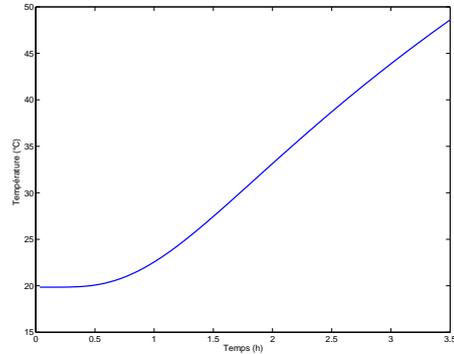
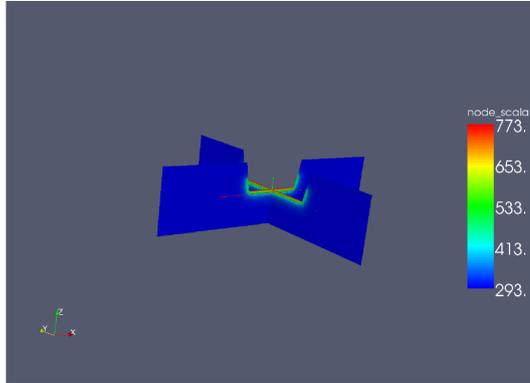


FIG. 5.33 – Profil de température à l'intérieur du sol. FIG. 5.34 – Histoire de la température à 11.5 cm.

autrement on n'est pas arrivé à chauffer de plus de  $300^{\circ}\text{C}$  pour plus de 3 cm de profondeur.

On a simulé ce foyer avec le code `DIFFUSE-3D` pour voir le profil de température dans le sol. On a utilisé un maillage de 148145 éléments pour un domaine de  $2\text{ m} \times 2\text{ m} \times 2\text{ m}$ , et un pas de temps de  $0.035\text{ h}$  pour un temps d'allumage de  $3.5\text{ h}$ .

Après avoir défini la géométrie du problème, on a défini les conditions au bords comme suit : une condition de Dirichlet au fond du foyer ( $500^{\circ}\text{C}$ ) ; ainsi on divise les bords du foyer en deux parties, la première allant du fond jusqu'à une hauteur de 20 cm sur laquelle on va imposer une condition de Dirichlet ( $300^{\circ}\text{C}$ ), la deuxième partie c'est la partie haute sur laquelle on va imposer une condition de Neumann. Par ailleurs, sur la surface du sol à l'extérieur de la cuvette on va imposer une condition de Neumann alors que sur les autres bords on va utiliser une condition de Dirichlet ( $20^{\circ}\text{C}$ ). La figure (5.33) montre le profil de température à l'intérieur du sol. En revanche, la figure (5.34) montre l'histoire de la température à 11.5 cm de profondeur, on peut bien remarquer que la température n'a pas dépassé le  $50^{\circ}\text{C}$  ce qui est conforme aux mesures enregistrées par le thermocouple mis à l'intérieur du sol. Enfin, sur les bords du foyer on a chauffé à  $300^{\circ}\text{C}$  jusqu'à 1.5 cm à l'intérieur du sol, ce qui correspond aux altérations observées pendant la fouille.

## 5.4 Détermination du temps minimal de fonctionnement des structures de combustion

La détermination de la durée minimale d'allumage des structures de combustion se fait par l'application de modèles numériques développés sur des données expérimentales et à partir de l'étude des archéothermomètres (indices des températures atteintes par les structures de combustion) et des surfaces d'altérations produites dans les sols par l'action du feu.

Un échantillon de sol thermoaltéré a été étudié. Il s'agit d'un foyer en cuvette

découpé en lames parallèles trouvé sur le site archéologique des Hauts-de-Feuilly (commune de Saint-Priest, Rhône). La figure (5.35) montre les différentes coupes réalisées sur le foyer. Celles-ci ont été étudiées cherchant à identifier les zones d'altérations et d'oxydations au fur et à mesure qu'on approfondi et qu'on s'éloigne du centre de chaleur. On sait expérimentalement que la température nécessaire pour que l'oxydation soit atteinte est de  $290^{\circ}\text{C}$ .

À partir des dimensions de l'aire oxydée, on pouvait déduire que la durée minimale d'allumage du foyer devait être courte en regard des épaisseurs vues dans nos coupes, mais pour préciser cette durée, il nous fallait connaître la température atteinte par le foyer. Les différentes zones d'oxydation correspondantes aux différentes coupes sont montrées dans (5.36), (5.37), (5.38) et (5.39). On sait que la température a dépassé les  $290^{\circ}\text{C}$  parce que il y a une zone oxydée dans l'échantillon. Les différentes profondeurs des zones d'altérations observées indiquent qu'il y avait plusieurs centres de chaleur dans le foyer et que la température du feu utilisée n'était pas uniforme. On a décidé d'utiliser pour la simulation numérique une température moyenne uniforme de  $700^{\circ}\text{C}$  laquelle est très fréquente dans nos expérimentations (il faut prendre en considération que le foyer en cuvette chauffe plus parce que le feu est mieux protégé que dans les foyers à plat).

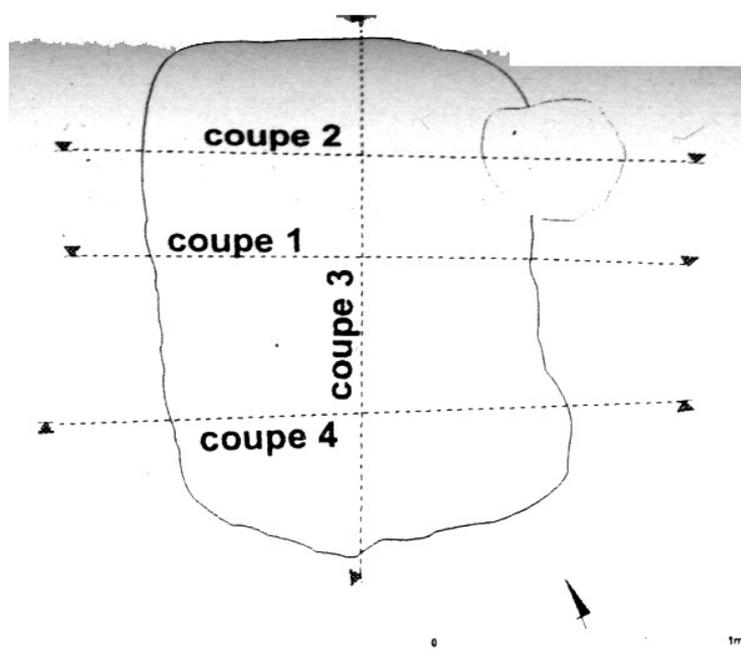


FIG. 5.35 – Les différentes coupes effectuées sur le foyer en cuvette.

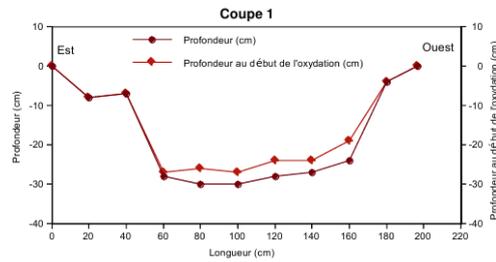


FIG. 5.36 – Zone d'oxydation pour la coupe 1.

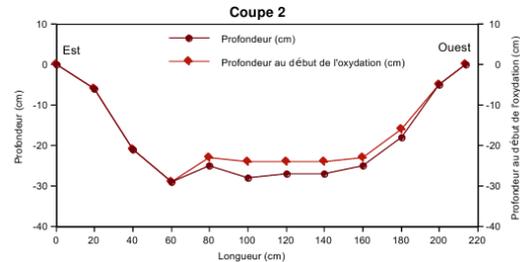


FIG. 5.37 – Zone d'oxydation pour la coupe 2.

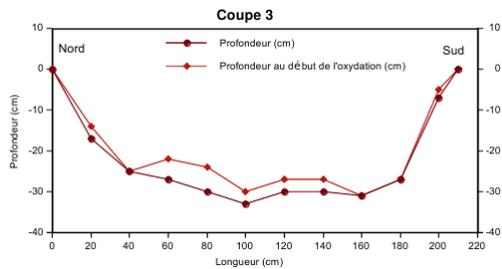


FIG. 5.38 – Zone d'oxydation pour la coupe 3.

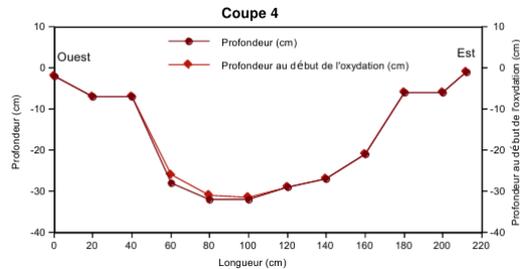


FIG. 5.39 – Zone d'oxydation pour la coupe 4.

Une approximation grossière a été réalisée, au moyen du code DIFFUSE-3D que nous avons modifié [MMM09b], du calcul de la durée minimale d'allumage du foyer en cuvette et à partir d'un feu maintenu à une température constante à  $700^{\circ}\text{C}$  pendant cinq heures. Une fois la géométrie du problème déterminée, le maillage est construit par Gmsh comme montre la figure (5.40). La cuvette est de dimension  $50\text{ cm} \times 90\text{ cm}$  avec une profondeur de  $25\text{ cm}$ . On a utilisé un maillage fin de 294514 éléments.

Une première simulation est effectuée en considérant la teneur du sol en eau  $\phi = 10\%$ , les propriétés physiques du sol utilisées pour la simulation sont celles indiquées dans (5.1). Après  $4.5\text{ h}$  d'allumage, la température à  $4\text{ cm}$  de profondeur atteint  $290^{\circ}\text{C}$  comme elle montre la figure (5.41), alors qu'il faut moins d'une heure pour arriver à  $290^{\circ}\text{C}$  à  $2\text{ cm}$  de profondeur. On remarque le plateau à  $100^{\circ}\text{C}$  dû au phénomène de changement de phase eau/vapeur. Tout nous conduit donc à penser qu'on se trouve face à un foyer de courte durée d'allumage. Cette durée ne peut pas être plus de  $4,5\text{ h}$  pour un allumage continu à  $700^{\circ}\text{C}$ . Les figures (5.42) et (5.43) montrent le profil de la température respectivement à la surface et à l'intérieur du sol.

Maintenant, on peut supposer que le sol était sec. Les résultats de la simulation montre que les altérations se produisent beaucoup plus rapidement par rapport au sol saturé d'eau. Après une heure d'allumage continue la température atteint  $290^{\circ}\text{C}$  à  $4\text{ cm}$  de profondeur (voir figure (5.44)). Cette fois c'est un foyer de très courte durée qui n'a pas fonctionné plus de deux heures si on considère que nos ancêtres utilisaient le brasier

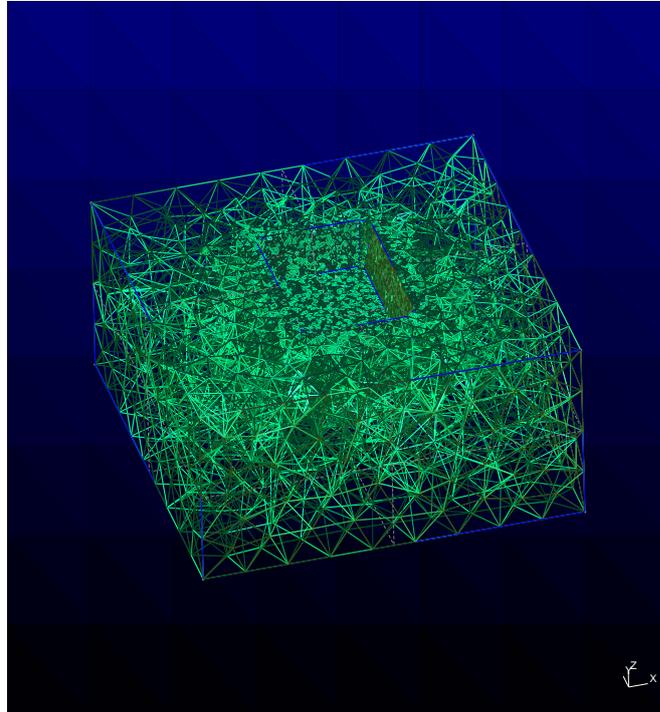


FIG. 5.40 – Le maillage utilisé est un maillage tétraédrique progressif.

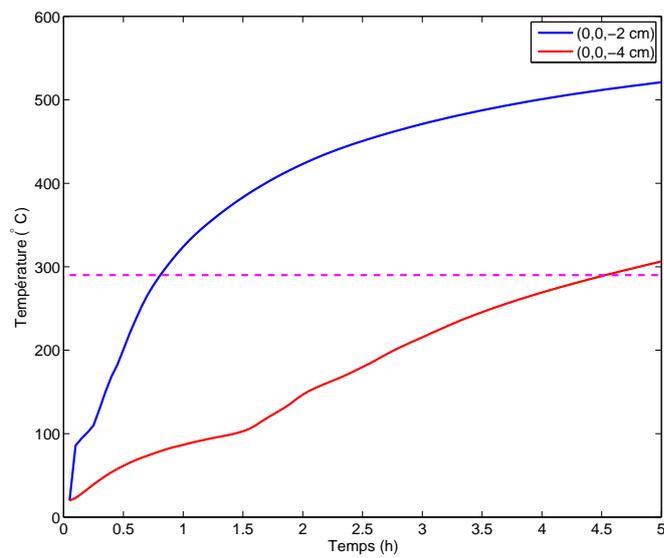


FIG. 5.41 – Histoire de la température à différentes profondeurs pour un sol saturé d'eau.

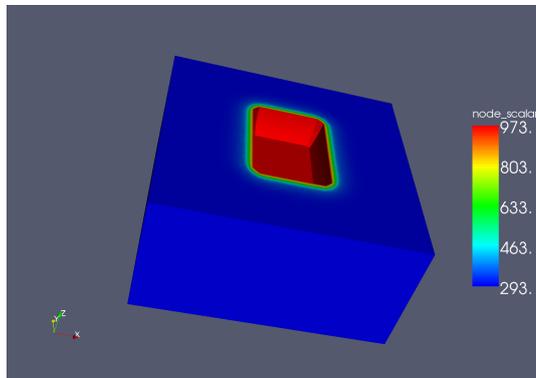


FIG. 5.42 – Profil de température sur la surface du sol.

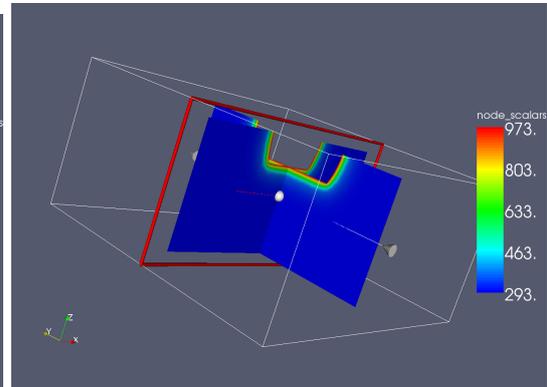


FIG. 5.43 – Profil de température à l'intérieur du sol.

avant l'extinction.

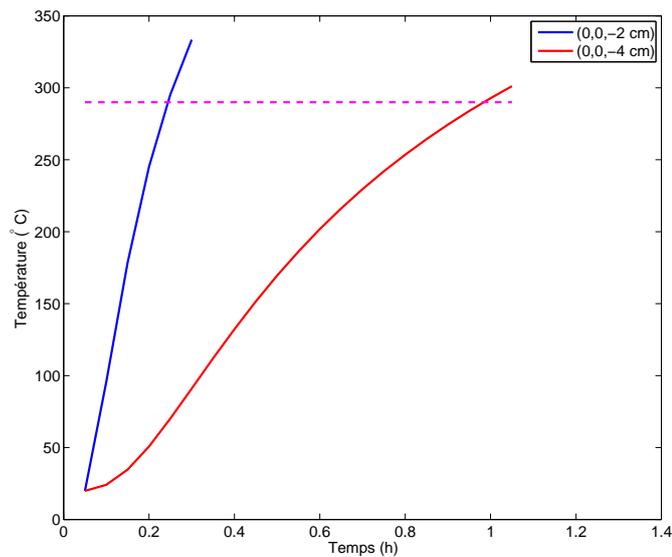


FIG. 5.44 – Histoire de la température à différentes profondeurs pour un sol sec.

## 5.5 Conclusion

L'objectif principal de ce travail consistait à construire un modèle numérique du transfert de chaleur dans les sols saturés d'eau. Afin de pouvoir valider les différentes versions du code développées on a choisi de confronter les simulations numériques avec les expériences réalisées sur des sites archéologiques et qui constituent un exemple réel des foyers préhistoriques. Les différentes comparaisons montrées précédemment montrent

une bonne concordance entre les résultats numériques et expérimentaux. On peut dire alors que les codes développés permettent de reproduire le phénomène de transfert de chaleur dans les foyers préhistoriques.

## Chapitre 6

# Détermination des paramètres physiques du sol par problème inverse

Nous présentons dans ce chapitre une méthode de détermination des propriétés physiques du sol étant donné une répartition (partielle) des mesures de la température dans le sol. On suppose que le milieu poreux est saturé d'eau et donc il y a un problème de changement de phase liquide/vapeur qui intervient lors de l'échauffement.

Le problème inverse consiste à déterminer les propriétés thermophysiques (la conductivité et la capacité apparente) ainsi que la porosité du sol. Pour pouvoir les spécifier, il est tout d'abord nécessaire de préciser de quelles observations l'on dispose. Cela dépend bien évidemment du dispositif expérimental utilisé, mais en tout état de cause, il ne sera généralement pas réaliste de supposer que l'on connaît la température en tout point. Dans notre cas, ces observations pourraient être, par exemple, des mesures de la température à l'intérieur du sol, ou bien des mesures du flux de chaleur  $-\lambda \frac{\partial T}{\partial n}$  sur le bord du domaine (on parle dans ce cas d'observation frontière). Le problème inverse est alors de chercher les (ou des) fonctions de conductivité, de capacité apparente et de porosité, telles qu'il existe une fonction  $T$  solution du système des équations d'état (6.1) qui coïncide avec les observations.

On voit immédiatement plusieurs difficultés possibles :

- tout d'abord celle d'obtenir les observations ! Une expérience n'est jamais facile à réaliser. Dans notre cas, il n'est pas réaliste de supposer que l'on puisse mesurer la température en tout point du domaine, et alors on risque de ne pas disposer de suffisamment d'observations par rapport au nombre de paramètres que l'on cherche.
- en particulier, on voit tout de suite que si la température est constante dans un sous-domaine du sol, la conductivité n'y est pas déterminée. Il faudrait donc disposer d'informations supplémentaires permettant de combler ce manque de mesure.
- par ailleurs, toute mesure est entachée d'erreur, et d'ailleurs le modèle mathématique

du problème direct (6.1) ne reflète pas exactement la réalité. Ainsi, il n’y a en fait aucune raison pour que le problème inverse possède une solution.

- enfin, en raison de la complexité de certains systèmes réels et du manque de données disponibles, le problème inverse est souvent “mal posé” au sens de Hadamard [HAD23], c’est-à-dire qu’il satisfait l’une des conditions d’inexistence, de non-unicité ou d’instabilité de la solution. Cela limite souvent l’utilisation de la modélisation inverse et peut rendre impossible la résolution du problème. On peut aussi parler d’insensibilité lorsque les observations ne contiennent pas assez d’information pour assurer l’estimation des paramètres.

Ce problème difficile a fait l’objet de nombreuses études, tant théoriques que numériques (voir [ISA98] pour introduction). Signalons qu’il intervient dans d’autres domaines d’application (médical, prospection géophysique par des méthodes électriques ou magnétiques, ...)

Une difficulté pratique de l’étude des problèmes inverses est qu’elle demande souvent une bonne connaissance du problème direct, ce qui se traduit par le recours à une grande variété de notions tant physiques que mathématiques. Les succès dans la résolution d’un problème inverse repose en général sur des éléments spécifiques à ce problème. Il existe toutefois quelques techniques qui possèdent un domaine d’applicabilité étendu dont les principales entre elles sont : la régularisation des problèmes mal posés, et la méthode des moindres carrés.

Le plus important est la reformulation d’un problème inverse sous la forme de la minimisation d’une fonctionnelle d’erreur entre les mesures réelles et les “mesures synthétiques” (c’est-à-dire la solution du problème direct). Il sera commode de distinguer entre les problèmes linéaires et non-linéaires. Précisons que la non-linéarité dont il s’agit ici fait référence au problème inverse lui-même, et non pas au problème direct (en considérant les paramètres comme connus).

Dans le cas des problèmes linéaires [KIT95], [KER03], le recours à l’algèbre linéaire et à l’analyse fonctionnelle permet d’obtenir des résultats précis, et des algorithmes efficaces. L’outil fondamental est ici la décomposition en valeur singulière de l’opérateur considéré.

Les problèmes non-linéaires sont plus difficiles [JLB], [KER03], et il existe moins des résultats généraux. Les méthodes non-linéaires utilisent une procédure itérative pour optimiser les paramètres : les étapes de résolution de l’équation de diffusion, de vérification de l’ajustement entre la température calculée et observée et de modification des paramètres pour améliorer l’ajustement sont répétées jusqu’à ce que la différence entre les températures mesurées et calculées atteigne un minimum (généralement de l’ordre de grandeur des erreurs de mesure dans les températures). Le critère à minimiser, souvent appelé fonction objectif, est typiquement exprimé soit par une fonction pondérée au sens des moindres carrés (*weighted least square function*), soit par une fonction de vraisemblance (*likelihood function*). Dans [HUZa94], les auteurs ont comparé les résultats obtenus par diverses méthodes de résolution du problème inverse sur des cas communs. Cet exercice a mis en évidence, entre autres choses, la supériorité des méthodes non-linéaires par rapport aux méthodes linéaires ce qui explique notre choix pour traiter notre problème.

Rappelons le système des équations qui régit la diffusion de la chaleur dans le milieu poreux saturé. Étant donné un ouvert  $\Omega$  borné dans  $\mathbb{R}^d$  ( $d = 1, \dots, 3$ ) dont nous notons  $\partial\Omega = \Gamma^D \cup \Gamma^N$  la frontière, nous considérons le problème :

$$\begin{aligned} (\rho C)_e(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (-k(T) \nabla T(x, t)) &= 0 & \text{dans } & \Omega \times (0, t_{end}], \\ T(x, 0) &= T^0(x) & \text{dans } & \Omega, \\ T(x, t) &= T^D(x, t) & \text{sur } & \Gamma^D \times (0, t_{end}], \\ \nabla T(x, t) \cdot \nu &= q^N(x, t) & \text{sur } & \Gamma^N \times (0, t_{end}]. \end{aligned} \quad (6.1)$$

$(\rho C)_e(T)$  représente la capacité apparente du milieu poreux (l'indice  $e$  indique les paramètres équivalents du milieu) ;  $k = k(T)$  est la conductivité ;  $\nu$  représente le vecteur normal extérieur à  $\partial\Omega$  ;  $T^D$  et  $q^N$  sont respectivement les conditions au bord de type Dirichlet et Neumann. Les propriétés thermiques équivalentes du milieu ( $(\rho C)_e(T)$  et  $K(T)$ ) sont données par la méthode de capacité apparente (voir section 3.1) où la porosité  $\phi$  de la matrice poreuse du sol intervient.

En plus, notons par  $T_{gi}$  les valeurs données de la température aux points  $x_i$  du domaine  $\Omega$  au temps  $t^f$

$$T_{gi}^f = T_g(x_i, t^f), \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad f = 1, 2, \dots, F \quad (6.2)$$

On cherche à déterminer les propriétés thermiques du sol  $(\rho C)_s$  et  $k_s$ , ainsi que la porosité du sol  $\phi$  (considérée ici comme étant le taux d'humidité dans le sol).

## 6.1 Revue bibliographique

En se basant sur la littérature, il existe deux types de problème inverse concernant les problèmes de conduction : le problème de reconstruction de flux de chaleur sur les bords et l'identification de la source de chaleur, le deuxième type est le problème d'estimation des propriétés thermiques. Plusieurs études ont été effectuées pour résoudre les problèmes inverses concernant le transfert de chaleur.

Pour déterminer la conductivité thermique, Mejias, Orlande [MO99] et Sawaf [SO95] ont utilisé la méthode Levenberg-Marquardt et la méthode du gradient conjugué. Les auteurs ont utilisé des mesures simulées pour la température générées en rajoutant des erreurs aux températures exactes. Des autres références comme [TIK77] utilisent la méthode de régularisation de Tikhonov.

Dans [XFWD00] les auteurs ont utilisé l'approche bayésienne pour trouver la solution du problème inverse de conduction de la chaleur. Ils ont adopté un modèle spécial de champs arbitraire de Markov pour modéliser la distribution de l'inconnue flux de la chaleur. Pour inverser le problème de conduction ils ont utilisé un algorithme basé sur la chaîne de Markov Monte Carlo.

Dans [YG07] les auteurs ont présenté une comparaison entre l'approche bayésienne, les algorithmes génétiques et l'algorithme Levenberg-Marquardt qui permettent d'estimer la conductivité thermique dans un milieu orthotrope par problème inverse.

Le problème cherchant à déterminer, par problème inverse, la forme de l'interface solide-liquide dans le cas de fusion est traité dans [ASD95]. Les conditions aux bords qui représentent la forme d'interface désirée sont trouvées en utilisant des commandes de rétroaction.

Pour déterminer les paramètres du sol dans les milieux poreux non saturés, les auteurs dans [CK01] ont proposé une méthode efficace basée sur la transformation de l'équation de Richard en un système d'équations différentielles ordinaires complété par l'équation modélisant le mouvement du front d'humidité. Le système obtenu à résoudre est un système ODE raide. Les paramètres inconnus sont déterminés par une approche d'optimisation de la fonctionnelle coût de minimisation entre les mesures expérimentales et les mesures numériques.

Une approche intégrale est développée dans [SKK02] pour estimer la conductivité thermique dépendante de la température sans mesures internes. Les auteurs supposent que la conductivité thermique est exprimée comme une fonction linéaire. L'approche proposée dans cet article peut être utile pour déterminer la conductivité ayant une forme arbitraire.

Enfin, E. Majchrzak et al. [EMK07], [EMB05], [EMS08] ont travaillé sur la détermination des paramètres thermodynamiques pour un problème de fusion connaissant les valeurs de température en certains points du domaine. La prise en compte du phénomène de changement de phase est effectuée par la formulation d'Alloy. L'algorithme utilisé est basé sur le critère de moindres carrés dans lequel les paramètres de sensibilité apparaissent.

## 6.2 Formulation du problème inverse par moindres carrés

Pour donner une formulation abstraite du problème que nous considérons par la suite, nous allons introduire trois espaces fondamentaux de dimension finie (on suppose qu'on a discrétisé le problème en temps et en espace) :

- l'espace des *paramètres*  $R$ , de dimension  $P$  ;
- l'espace d'*état*  $U$ , de dimension  $M$  ;
- l'espace des *données* (ou observations)  $D$ , de dimension  $N$  ;

Nous allons définir tout d'abord l'équation d'état qui relie de façon implicite le paramètre et la variable d'état (la température) (tous deux peuvent évidemment être des vecteurs). Nous l'écrivons

$$F(p, T) = 0, \quad p = (p_j)_{1 \leq j \leq P} \in R \text{ et } T = (T_i)_{1 \leq i \leq M} \in U \quad (6.3)$$

dont la solution est  $T_p$ , puis nous définissons l'équation d'observation qui extrait de l'état la partie correspondante aux mesures. Le problème inverse est alors, étant donnée une observation  $T_g$ , de résoudre l'équation :

$$g(p) = T_g \quad (6.4)$$

L'application  $g$  est non-linéaire, cela rend évidemment plus difficile la résolution du problème inverse. Nous allons donc introduire une formulation, a priori plus faible, qui

a fait la preuve de son utilité. Nous remplaçons l'équation (6.4) par le problème de minimisation suivant,

$$\text{minimiser } S(p) = \frac{1}{2} \|g(p) - T_g\|_2^2 \quad (6.5)$$

Cette formulation s'appelle un problème aux moindres carrés, et  $S$  est la fonction coût, ou fonctionnelle d'erreur. L'observation étant donnée une fois pour toute, pour évaluer la fonctionnelle  $S$  en un paramètre  $p$ , on commence par résoudre l'équation d'état (6.3), puis on calcule  $g(p)$ , et l'on compare l'observation simulée à celle mesurée. On suppose que résoudre (6.5) est une bonne approximation du problème continu.

*Remarque* (sur le choix de la norme) : En pratique, on définit des normes  $L^2$  ou de Sobolev dans les espaces de fonction. Ce choix est essentiellement fait par commodité. On peut également justifier le choix de normes  $L^2$  par des considérations statistiques dans lesquelles nous n'entrerons pas.

### 6.2.1 Difficultés des problèmes inverses

La difficulté des problèmes inverses provient d'une combinaison de facteurs.

- La fonction coût  $S$  est en général non convexe. Cela conduit à l'existence de minima locaux, et la méthode d'optimisation peut converger vers n'importe lequel de ces minima.

- Le problème inverse peut être sous-déterminé, du fait d'un manque de données (qui est intrinsèque au problème). Cela conduit à l'existence de plusieurs solutions, autrement dit de plusieurs paramètres produisant les mêmes observations.

- Le manque de continuité produit une instabilité. Même si l'on peut (en théorie) résoudre le problème pour des observations exactes, cela ne veut pas dire que l'on pourra le résoudre pour des données bruitées, même si le niveau de bruit est faible.

- Une difficulté de nature différente est liée au coût de la résolution. En effet, la simple évaluation de la fonction coût demande la résolution de l'équation d'état, c'est-à-dire en général d'une (ou de plusieurs) équation aux dérivées partielles.

## 6.3 Algorithmes locaux et globaux

Pour résoudre le problème (6.5) on peut distinguer deux grandes classes d'algorithmes [KER03].

Les algorithmes locaux qui exploitent l'information fournie par le gradient de la fonctionnelle à minimiser et cherchent à résoudre une équation fournie par une condition d'optimalité du premier ordre. Le principal défaut de ce type d'algorithme est qu'il peut converger vers un minimum local, ou même un point critique (point où le gradient s'annule). Il faut utiliser les dérivées secondes pour écarter les points critiques qui ne sont pas des minima. Avec une information uniquement locale du premier ordre, il n'est pas possible d'éviter cet inconvénient. Il est contrebalancé par le fait que ces méthodes sont bien comprises du point de vue mathématique, et qu'il existe des implémentations de qualité.

Les algorithmes locaux s'opposent aux méthodes dites globales qui explorent tout l'espace des paramètres de façon à converger vers le minimum global. Ces méthodes ont parfois un aspect plus heuristiques, et sont fondamentalement plus coûteuses et plus lentes. Elles présentent l'avantage d'éviter le calcul du gradient de la fonction coût, qui comme nous le verrons est un des points délicats dans la mise en oeuvre des méthodes locales. Parmi les méthodes globales citons la méthode du "recuit simulé" qui évite les minima locaux en laissant croître la fonction coût avec une certaine probabilité. Citons également les méthodes de "recherche directe" qui construisent une suite de simplexes se contractant vers le minimum global [KER03]. Dans les deux cas le nombre d'évaluation de la fonction coût est très important. Les méthodes globales sont en fait à réserver au cas où on l'on cherche à identifier un petit nombre de paramètres, et où le gradient de la fonctionnelle est difficile à calculer. Dans la suite, nous ne considérerons plus que les algorithmes locaux, et nous chercherons essentiellement à montrer comment calculer économiquement le gradient de la fonction coût.

## 6.4 Résolution du problème à moindres carrés

Pour résoudre le problème d'optimisation (6.5) il faut calculer le vecteur de résidu, défini par  $r(p) = g(p) - T_g$ . Dans notre problème et pour simplifier les écritures on va supposer qu'on possède des observations à un temps unique : la généralisation est évidente. Notons  $r_i(p) = T_i - T_{gi}$  où  $p$  est le vecteur de  $P$  paramètres à déterminer. La jacobienne du vecteur résidu  $r(p)$  est donnée par

$$J(p) \in \mathbb{R}^{N \times P}, \quad J(p)_{i,j} = \frac{\partial r_i(p)}{\partial p_j}, \quad (6.6)$$

$i = 1, \dots, N$ ,  $j = 1, \dots, P$ , et les matrices Hessiennes de  $r_i(p)$  sont données par :

$$G_i(p) = \nabla^2 r_i(p) \in \mathbb{R}^{P \times P}, \quad G_i(p)_{jk} = \frac{\partial^2 r_i(p)}{\partial p_j \partial p_k} \quad (6.7)$$

Les dérivées premières et secondes de  $S(p) = \frac{1}{2} r(p)^t r(p) = \frac{1}{2} \|r(p)\|^2$  sont données par :

$$\nabla S(p) = J(p)^t r(p), \quad (6.8)$$

et

$$\nabla^2 S(p) = J(p)^t J(p) + Q(p), \quad Q(p) = \sum_{i=1}^N r_i(p) G_i(p), \quad (6.9)$$

où  $G_i(p) = G_i(p)^t$ . Les formes spéciales de  $\nabla S(p)$  et  $\nabla^2 S(p)$  peuvent être exploitées pour résoudre les problèmes aux moindres carrés non linéaire.

**Proposition 1** (Condition nécessaire du premier ordre) : Soit  $p^*$  un point où  $S$  atteint son minimum. On a :

$$\nabla S(p^*) = J(p^*)^t r(p^*) = 0 \quad (6.10)$$

Cette condition n'est évidemment pas suffisante, sauf si  $S$  est convexe. Un point critique de  $S$  peut être un minimum, un maximum ou bien un point-selle. Inversement, on a :

**Proposition 2** (*Condition suffisante du second ordre*) : Supposons que  $\nabla S(p^*) = 0$  et que  $\nabla^2 S(p^*)$  soit défini positif. Alors  $S$  atteint un minimum local strict en  $p^*$ .

Une notion importante tant dans la définition des algorithmes que leur analyse est la suivante :

**Définition 6.1** Un vecteur  $m \in R$  (l'espace des paramètres) est une direction de descente pour  $S$  au point  $p$  si

$$\nabla S(p)^t m < 0 \quad (6.11)$$

Cette définition assure que la fonction décroît, au moins localement, le long d'une direction de descente.

#### 6.4.1 Méthodes de type Newton

On peut voir le problème (6.5) comme un cas particulier d'un problème d'optimisation. On va approcher  $S(p)$  au voisinage d'un point donné  $p_k$  par un modèle quadratique

$$\tilde{S}^{(k)}(p^{(k)} + p) = S(p^{(k)}) + \nabla S(p^{(k)})^t p + \frac{1}{2} p^t \nabla^2 S(p^{(k)}) p \quad (6.12)$$

Cette approche utilise la dérivée seconde de  $r(p)$ . Le minimiseur de  $\tilde{S}^{(k)}(p)$  est donné par

$$p^{(k+1)} = p^{(k)} + m^{(k)} \quad (6.13)$$

où la direction de descente  $m^{(k)}$  est déterminée par

$$(J(p^{(k)})^t J(p^{(k)}) + Q(p^{(k)})) m^{(k)} = -J(p^{(k)})^t r(p^{(k)}) \quad (6.14)$$

avec  $Q(p)$  est donné par (6.9). Cette équation peut s'écrire aussi sous la forme

$$\nabla^2 S(p^{(k)}) m^{(k)} = -\nabla S(p^{(k)}) \quad (6.15)$$

Notons que la matrice  $J(p^{(k)})^t J(p^{(k)}) + Q(p^{(k)})$  doit être définie positive pour assurer que  $m^{(k)}$  est toujours une direction de descente. L'équation (6.14) peut s'écrire aussi sous la forme

$$\nabla^2 S(p^{(k)}) m^{(k)} = -\nabla S(p^{(k)}) \quad (6.16)$$

Il est bien connu ([OR70], [DS]) que la méthode de Newton est localement convergente, avec convergence quadratique, pourvu que le point initial soit choisi assez proche de la solution (inconnue), et que le Hessien en la solution ne soit pas singulier. Elle possède toutefois des défauts assez graves :

- 1- la convergence n'est pas globale ;

- 2- l'algorithme n'est pas défini aux points où le Hessien est singulier, et  $J$  n'est pas de rang plein ;
- 3- l'algorithme ne génère pas nécessairement des directions de descente ;
- 4- il faut calculer le Hessien à chaque itération.

Tous ces défauts sont corrigés par les méthodes de quasi-Newton ; Nous nous contenterons d'exposer brièvement l'algorithme BFGS (du nom de ses auteurs Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno) avec recherche linéaire.

La première idée est de garder la direction de descente donnée par (6.14), mais de ne pas avancer de toute la longueur du pas [BJÖ90]. On remplace (6.13) par :

$$p^{(k+1)} = p^{(k)} + \alpha^{(k)} m^{(k)} \quad (6.17)$$

où  $\alpha^{(k)}$  est déterminé par une recherche linéaire. Il suffit pour assurer la convergence de l'algorithme vers  $p^*$  tel que  $J(p^*)^t r(p^*) = 0$ , de vérifier les conditions de Wolfe [KER03] :

$$S(p^{(k)} + \alpha^{(k)} m^{(k)}) - S(p^{(k)}) \leq w_1 \alpha^{(k)} (\nabla S(x^{(k)}), m^{(k)}) \quad (6.18)$$

$$(\nabla S(p^{(k)} + \alpha^{(k)} m^{(k)}), m^{(k)}) \geq w_2 (\nabla S(x^{(k)}), m^{(k)}) \quad (6.19)$$

où les constants  $w_1$  et  $w_2$  vérifient  $0 < w_1 < w_2 < 1$ .

La première inégalité assure que  $S$  aura diminué d'une fraction significative entre l'ancien point et le nouveau. La seconde empêche simplement le pas de devenir trop petit.

La seconde modification à apporter à la méthode de Newton est de remplacer le choix de la direction  $m^{(k)}$  de façon à assurer que celle-ci est toujours une direction de descente. La méthode de BFGS résout d'un seul coup les trois dernières difficultés signalées plus haut.

Cette méthode fonctionne en mettant à jour de façon itérative une approximation du Hessien qu'on va noter  $H$ . Il est standard de définir les quantités

$$d^{(k)} = p^{(k+1)} - p^{(k)} \text{ et } y^{(k)} = \nabla S(p^{(k+1)}) - \nabla S(p^{(k)}) \quad (6.20)$$

Avec ces notations, la mise à jour de BFGS s'écrit [KER03] :

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + \frac{y^{(k)}(y^{(k)})^t}{(y^{(k)})^t d^{(k)}} - \frac{(H^{(k)} d^{(k)})(H^{(k)} d^{(k)})^t}{(H^{(k)} d^{(k)})^t d^{(k)}} \quad (6.21)$$

Il est souvent recommandé d'utiliser  $H^{(0)} = J(p^{(0)})^t J(p^{(0)})$ , comme une approximation de départ [BJÖ90]. Il s'agit d'une mise à jour par ajout d'une matrice dont les principales propriétés sont résumées dans la

**Proposition 3** *Si  $H^{(k)}$  est symétrique et définie positive et si  $(y^{(k)})^t d^{(k)} > 0$ , alors  $H^{(k+1)}$  est symétrique et définie positive et  $m^{(k+1)} = -(H^{(k+1)})^{-1} J(p^{(k+1)})^t r(p^{(k+1)})$  est une direction de descente*

D'après [KER03] si l'on utilise la recherche linéaire de Wolfe, la condition précédente est vérifiée et on obtient une méthode globalement convergente.

En ce qui concerne l'implémentation, il reste une difficulté à résoudre : comment exploiter la formule (6.21) sans stocker de matrice pleine. En fait, il est possible de donner une formule analogue à (6.21), mais sur  $(H^{(k)})^{-1}$ , ce qui permet de mettre directement  $m^{(k)}$  à jour, sans inverser (explicitement) de système linéaire. Ceci conduit à un coût par itération faible (en dehors de  $S(p)$  et de son gradient).

## 6.4.2 Méthode de Gauss-Newton

La méthode de Gauss-Newton appliquée au problème aux moindres carrés (6.5) est basée sur une série des approximations linéaires de  $r(p)$ . En effet, on peut approcher  $r(p)$  par un modèle linéaire au voisinage d'un point donné  $p^{(k)}$

$$\tilde{r}(p^{(k)}) = r(p^{(k)}) + J(p^{(k)})(p - p^{(k)}) \quad (6.22)$$

On peut alors utiliser le problème aux moindres carrés linéarisé

$$\min_m \|r(p^{(k)}) + J(p^{(k)})m\|_2 \quad (6.23)$$

pour calculer une solution approchée du problème (6.5). Cette approche qui utilise seulement la dérivée première de  $r(p)$  conduit à utiliser les méthodes de Gauss-Newton et Levenberg-Marquardt [BJÖ90].

Avec la méthode de Gauss-Newton si  $p^{(k)}$  est la courante approximation, alors une correction  $m^{(k)}$  est calculée comme étant solution du problème aux moindres carrés linéaire (6.23) et la nouvelle approximation s'écrit

$$p^{(k+1)} = p^{(k)} + m^{(k)} \quad (6.24)$$

Cet problème aux moindres carrés linéaire peut être résolu en utilisant une décomposition  $QR$  du  $J(p^{(k)})$ .

La méthode de Gauss-Newton tel qu'elle est présentée a l'avantage de résoudre de problèmes linéaires par une seule itération et de converger rapidement vers une solution locale  $p^*$  tel que  $J(p^*)^t r(p^*) = 0$ . Si on suppose que  $J(p^{(k)})$  est de rang plein, alors le problème (6.23) admet une solution unique [DS] qui s'écrit sous la forme

$$m^{(k)} = -(J(p^{(k)})^t J(p^{(k)}))^{-1} J(p^{(k)})^t r(p^{(k)}) \quad (6.25)$$

En revanche, cette simplification du problème présente l'avantage qu'elle évite d'avoir à calculer la dérivée seconde de  $r$ , ce qui peut être difficile en pratique.

La méthode de Gauss-Newton souffre des mêmes défauts que la méthode de Newton, en particulier le manque de convergence globale. Une idée naturelle est alors de régulariser les problèmes linéarisés, par plusieurs algorithmes qui existent comme :

**Gauss-Newton amorti (damped) [BJÖ90]** : Si la valeur initiale se trouve loin de la solution, la méthode de Gauss Newton converge très mal. En fait, la direction et la longueur du pas sont peu fiables. Afin de définir un pas plus prudent on peut calculer  $p^{(k+1)}$  comme

$$p^{(k+1)} = p^{(k)} + \alpha^{(k)} m^{(k)} \quad (6.26)$$

où  $\alpha^{(k)}$  est un scalaire à déterminer. Ainsi, on choisira  $0 < \alpha^{(k)} < 1$  lorsqu'on est loin de la solution et  $\alpha^{(k)} = 1$  lorsque  $p^{(k)}$  est proche de la solution.

**Régularisation de Tikhonov** : La méthode la plus utilisée pour régulariser les problèmes mal-posés. Elle est reliée à l'algorithme de Levenberg-Marquardt pour résoudre les problèmes aux moindres carrés non linéaires. Ce dernier algorithme interpole l'algorithme de Gauss-Newton et la méthode de descente de gradient. Plus stable que celui de Gauss-Newton, il trouve une solution même s'il est démarré très loin d'un minimum. Cependant, pour certaines fonctions très régulières, il peut converger légèrement moins vite.

## 6.5 Méthodes de calcul du gradient et du Jacobien

Dans ce paragraphe, nous allons passer en revue plusieurs méthodes pour calculer le gradient de (6.5). Il s'agit tout d'abord de la méthode des différences finies (qui n'est pas recommandée, mais qui présente tout de même une utilité pour fournir des valeurs de références), de la méthode des sensibilités, et enfin de la méthode de l'état adjoint. Laquelle des deux dernières est la plus adaptée à notre situation.

### 6.5.1 Les différences finies

Cette méthode est, en apparence, très simple à mettre en oeuvre, ce qui peut expliquer sa popularité, mais elle n'est pas recommandable, puisque non seulement son coût est proportionnel aux paramètres à identifier, mais elle donne un résultat approché, avec une précision qu'il est difficile d'évaluer. Dans certaines circonstances, elle peut servir à valider un calcul de gradient par l'une des autres méthodes (sensibilités ou état adjoint).

On remplace le calcul d'une dérivée partielle par le quotient aux différences :

$$\frac{\partial S}{\partial p} \approx \frac{S(p+h) - S(p)}{h} \quad (6.27)$$

On constate immédiatement que le nombre d'évaluations de gradient est égal au nombre de paramètres à identifier et on n'obtient que le gradient mais pas le jacobien. De plus, le résultat n'est pas exact [KER03].

### 6.5.2 Les fonctions de sensibilité

Il s'agit de la méthode la plus naturelle pour calculer le gradient de  $S$ . Elle consiste à dériver l'équation d'état explicitement par rapport au paramètre  $p$ , puis à utiliser

la règle de dérivation d'une fonction composée. En particulier, ce qu'on appelle coefficients sensitifs doivent être déterminés. La sensibilité de la température par rapport au paramètre  $p_j$  est définie de la façon suivante [MM]

$$U_j(x, t, p) = \frac{\partial T}{\partial p_j}(x, t, p) \quad (6.28)$$

et elle correspond à la dérivée partielle de la température par rapport à  $p_j$ , ce qui permet de déterminer les valeurs  $\partial r / \partial p_j$ . Alors, la fonction de sensibilité fournit des informations à propos du changement de la température dû au changement de  $p_j$ . La définition (6.28) est souvent utilisée dans les différentes applications parce que la connaissance de deux solutions correspondantes à un petit changement de  $p_j$  permet (en utilisant le quotient différentiel) de déterminer les valeurs locales approchées de la sensibilité. Cette définition peut être approximée par l'équation suivante

$$\frac{\partial T}{\partial p_j}(x, t, p) \cong \frac{T(x, t, p_1, \dots, p_j + \Delta p_j, \dots, p_P) - T(x, t, p_1, \dots, p_j, \dots, p_P)}{\Delta p_j} \quad (6.29)$$

pour  $\Delta p_j \cong 0$ .

Une approche plus générale pour calculer la fonction de sensibilité consiste à différencier l'équation de base par rapport aux paramètres analysés (approche directe).

Insistons sur le fait que cette dernière approche donne un résultat exact. Le principal désavantage de cette méthode réside dans le fait que le calcul de chaque dérivée  $\partial S / \partial p_j$  demande la résolution d'une équation comme (6.28) par approximation ou par approche directe. Le coût du calcul du gradient est donc proportionnel au nombre de paramètres.

En contrepartie, cette méthode fournit plus que le gradient, puisqu'elle calcule le jacobien  $J(p)$ . Une fois ce jacobien disponible, il est possible de l'exploiter en calculant, par exemple, ses valeurs singulières. De plus la méthode de Gauss-Newton nécessite la connaissance de ce jacobien. Si le nombre de paramètres n'est pas trop élevé, la méthode de Gauss-Newton en calculant le gradient par les fonctions de sensibilité peut être plus économique qu'une méthode de quasi-Newton avec calcul du gradient par l'état adjoint.

### 6.5.3 La méthode de l'état adjoint

Dans une grande partie des situations d'intérêt, le nombre de paramètres peut être très grand : plusieurs centaines, voire plusieurs milliers. Le principal avantage de la méthode de l'état adjoint est qu'il est possible de réaliser le calcul du gradient à un coût proportionnel à celui d'une seule équation linéarisée, et en particulier, indépendant du nombre de paramètres.

Nous avons déjà vu que la méthode des fonctions de sensibilité fournissait plus que le gradient de  $S$ . Si nous n'avons besoin que du gradient, la méthode de l'état adjoint permet de réarranger le calcul du gradient pour éviter le calcul du jacobien complet (voir [KER03] pour plus de détails).

En fait, c'est une méthode très efficace en pratique mais elle présente quelques inconvénients, en particulier, si on utilise un solveur numérique pour  $T$  en boîte noire, il peut être très compliqué de le modifier pour obtenir la solution de l'état adjoint.

## 6.6 Choix de la méthode et résolution du problème

Nous allons maintenant revenir à notre problème d'intérêt où on cherche à identifier la capacité apparente  $(\rho C)_s$ , la conductivité  $k_s$  et la porosité  $\phi$  du sol. Alors, l'espace des paramètres  $R$  est de dimension  $P = 3$ . On suppose que les paramètres à identifier sont constants dans le domaine de calcul et on note  $p = ((\rho C)_s, k_s, \phi)^t$ . On commence par proposer une formulation en terme de minimisation de fonctionnelle :

$$S((\rho C)_s, k_s, \phi) = \frac{1}{MF} \sum_{f=1}^F \sum_{i=1}^M (T_i^f - T_{gi}^f)^2 \quad (6.30)$$

où  $T_i^f = T(x_i, t^f)$  sont les solutions du problème direct (6.1) pour les paramètres physiques aux points  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, M$  au temps  $t^f$ ,  $f = 1, 2, \dots, F$ . On a donc  $N = MF$  la dimension de l'espace des données  $D$ .  $S$  est la fonction coût à minimiser.

Dans la suite nous développerons la méthode de résolution pour le problème auquel nous nous intéressons. Comme le nombre de paramètres n'est pas trop élevé ( $P = 3$ ), la méthode de Gauss-Newton en calculant le Jacobien par les fonctions de sensibilité peut être plus économique qu'une méthode de quasi-Newton avec calcul du gradient par l'état adjoint. La méthode de calcul sera basée alors sur la méthode de Gauss-Newton décrite précédemment et elle consiste à dériver l'équation d'état explicitement par rapport aux paramètres à identifier. Ici  $J(p)$  est donné par :

$$J(p^{(k)}) = \frac{2}{MF} \begin{pmatrix} W_1^{1,(k)} & R_1^{1,(k)} & Z_1^{1,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_1^{F,(k)} & R_1^{F,(k)} & Z_1^{F,(k)} \\ W_2^{1,(k)} & R_2^{1,(k)} & Z_2^{1,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_2^{F,(k)} & R_2^{F,(k)} & Z_2^{F,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_M^{1,(k)} & R_M^{1,(k)} & Z_M^{1,(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ W_M^{F,(k)} & R_M^{F,(k)} & Z_M^{F,(k)} \end{pmatrix}$$

où  $W_i^{f,(k)} = \frac{\partial T_i^f}{\partial (\rho C)_s} \Big|_{(\rho C)_s = (\rho C)_s^{(k)}}$ ,  $R_i^{f,(k)} = \frac{\partial T_i^f}{\partial k_s} \Big|_{k_s = k_s^{(k)}}$  et  $Z_i^{f,(k)} = \frac{\partial T_i^f}{\partial \phi} \Big|_{\phi = \phi^{(k)}}$  sont les coefficients sensitifs et  $k$  est le nombre d'itérations.

Dans la mise en oeuvre de l'algorithme de Gauss-Newton, il est nécessaire de définir :

$$T_g = \begin{pmatrix} T_{g1}^1 \\ \dots \\ T_{g1}^F \\ T_{g2}^1 \\ \dots \\ T_{g2}^F \\ \dots \\ T_{gM}^1 \\ \dots \\ T_{gM}^F \end{pmatrix} \quad g(p^{(k)}) = \begin{pmatrix} T_1^{1,(k)} \\ \dots \\ T_1^{F,(k)} \\ T_2^{1,(k)} \\ \dots \\ T_2^{F,(k)} \\ \dots \\ T_M^{1,(k)} \\ \dots \\ T_M^{F,(k)} \end{pmatrix} \quad p^{(k)} = \begin{pmatrix} (\rho C)_s^{(k)} \\ K_s^{(k)} \\ \phi_s^{(k)} \end{pmatrix}$$

et

$$r(p^{(k)}) = g(p^{(k)}) - T_g$$

Le principe de cette méthode consiste à calculer le nouvel itéré  $p^{(k+1)}$  par l'application de la relation (6.24). Le processus d'itération est arrêté quand le nombre d'itérations maximal est atteint ou quand on arrive à atteindre la précision désirée.

**Algorithme :** L'optimisation de la fonctionnelle (6.30) par la méthode de Gauss-Newton est faite suivant cet algorithme :

1- Choisir une valeur initiale  $p^{(0)}$  par exemple  $p^{(0)} = p_{\text{estimé}}$

*Boucle sur k jusqu'à convergence*

2- Calculer  $g(p^{(k)})$  en résolvant l'équation d'état (6.1), puis déterminer  $r(p^{(k)})$ ,

3- Calculer le jacobien  $J(p^{(k)})$ ,

4- Résoudre le système linéaire  $J(p^{(k)})^t J(p^{(k)}) m^{(k)} = -J(p^{(k)})^t r(p^{(k)})$ ,

5-  $p^{(k+1)} = p^{(k)} + m^{(k)}$ .

*Fin boucle*

Nous pouvons constater que le gradient est un ingrédient essentiel pour la méthode de Gauss-Newton. Nous présentons maintenant la méthode de calcul du gradient par les fonctions de sensibilité. À partir de maintenant on suppose que  $J$  est de rang plein.

Nous étudions donc la sensibilité du champ de température dans le système de diffusion de chaleur par rapport aux paramètres inconnus  $(\rho C)_s$ ,  $k_s$  et  $\phi$ . Tout d'abord, l'équation d'énergie (6.1) est dérivée par rapport à  $p_j$

$$\frac{\partial}{\partial p_j} \left[ (\rho C)_e \frac{\partial T}{\partial t} \right] = \text{div} \left( \frac{\partial}{\partial p_j} \left[ k_e \vec{\text{grad}} T \right] \right) \quad (6.31)$$

Après quelques manipulations mathématiques, on obtient dans  $\Omega \times (0, t_{\text{end}}]$

$$\begin{aligned} (\rho C)_e(T) \frac{\partial U_j(x, t)}{\partial t} + \frac{d(\rho C)_e(T)}{dT} U_j(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} &= \text{div} \left( k_e(T) \vec{\text{grad}} U_j(x, t) \right) \\ + \text{div} \left( \frac{dk_e(T)}{dT} U_j(x, t) \vec{\text{grad}} T(x, t) \right) & \end{aligned} \quad (6.32)$$

où  $U_j = \partial T / \partial p_j$

Le modèle de sensibilité est complété par la condition initiale

$$t = 0 : \quad U_j(x, 0) = U_{j0} \quad \text{dans } \Omega \quad (6.33)$$

Si l'analyse de sensibilité ne concerne pas les températures initiales alors la condition (6.33) est uniforme (zéro).

Les conditions aux bords sont données par la condition de Dirichlet

$$U_j(x, t) = U_j^D(x, t) \quad \text{sur } \Gamma^D \times (0, t_{end}] \quad (6.34)$$

et la condition de Neumann

$$U_j(x, t) \cdot \nu = U_j^N(x, t) \quad \text{sur } \Gamma^N \times (0, t_{end}] \quad (6.35)$$

Pour déterminer les coefficients sensitifs qui apparaissent dans le jacobien  $J$ , on applique la définition (6.28) à l'équation (6.1) tout en dérivant par rapport aux paramètres  $(\rho C)_s, k_s$  et  $\phi$ . Avant, rappelons les définitions de la capacité apparente équivalente et de la conductivité du milieu données par la méthode (AHC) :

$$(\rho C)_e = \phi(\rho C)_f + (1 - \phi)(\rho C)_s \quad (6.36)$$

avec

$$\rho_f = \rho_l + (\rho_v - \rho_l)\sigma \quad (6.37)$$

et

$$C_f = C_l + (C_v - C_l)\sigma + L \frac{d\sigma}{dT} \quad (6.38)$$

où  $\sigma = \chi(T - T_v)$  avec  $\chi$  est une fonction par morceaux dont la valeur est zéro si  $T < T_v$  et un ailleurs. D'autre part,  $d\sigma/dT = (\epsilon\pi^{-1/2})\exp[-\epsilon^2(T - T_f)^2]$  où  $\epsilon$  est choisi pour être  $\epsilon = 1/\sqrt{2}\Delta T$  et où  $\Delta T$  est la moitié de l'intervalle de changement de phase.

La conductivité équivalente est définie par

$$\frac{1}{k_e} = \frac{\phi}{k_f} + \frac{1 - \phi}{k_s} \quad (6.39)$$

où

$$k_f = k_l + (k_v - k_l)\sigma \quad (6.40)$$

Pour l'instant on est en dimension 1 ( $d = 1$  dans (6.1)), on commence par calculer les dérivées suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho C)_e}{dT} &= \phi \rho_f \frac{dC_f}{dT} + \phi C_f \frac{d\rho_f}{dT} + (1 - \phi) \\ &= \phi \rho_f \left[ (C_v - C_l) \frac{d\sigma}{dT} + L \frac{d^2\sigma}{dT^2} \right] + \phi C_f (\rho_v - \rho_l) \frac{d\sigma}{dT} + (1 - \phi) \end{aligned} \quad (6.41)$$

et

$$\frac{dk_e}{dT} = \frac{k_s dk_f / dT (\phi k_s + (1 - \phi) k_f) - (1 - \phi) dk_f / dT k_f k_s}{(\phi k_s + (1 - \phi) k_f)^2} \quad (6.42)$$

avec

$$\frac{dk_f}{dT} = (k_v - k_l) \frac{d\sigma}{dT}$$

Alors pour avoir les équations sensibles en 1D on utilise (6.41) et (6.42), ainsi on utilise l'approximation :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right) \approx \frac{(\rho C)_e}{k_e} \frac{\partial T}{\partial t}$$

Dérivons par rapport à  $(\rho C)_s$ , on obtient l'équation sensitive suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} + \phi \frac{\rho_f}{(\rho C)_e} \left[ (C_v - C_l) \frac{d\sigma}{dT} + L \frac{d^2\sigma}{dT^2} \right] W \frac{\partial T}{\partial t} + \phi \frac{C_f}{(\rho C)_e} (\rho_v - \rho_l) \frac{d\sigma}{dT} W \frac{\partial T}{\partial t} \\ + (1 - \phi) \frac{1}{(\rho C)_e} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{(\rho C)_e} \frac{dk_e}{dT} W \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{k_e} \frac{\partial}{\partial x} \left( k_e \frac{\partial W}{\partial x} \right) = 0 \end{aligned} \quad (6.43)$$

Dérivons par rapport à  $k_s$ , on obtient l'équation sensitive suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial t} + \phi \frac{\rho_f}{(\rho C)_e} \left[ (C_v - C_l) \frac{d\sigma}{dT} + L \frac{d^2\sigma}{dT^2} \right] R \frac{\partial T}{\partial t} + \phi \frac{C_f}{(\rho C)_e} (\rho_v - \rho_l) \frac{d\sigma}{dT} R \frac{\partial T}{\partial t} \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left( k_e \frac{\partial R}{\partial x} \right) - \frac{k_s(k_v - k_l) \frac{d\sigma}{dT} R + k_f \frac{\partial T}{\partial t}}{(\phi k_s + (1 - \phi) k_f)^2 k_e} \\ + \frac{k_f k_s [\phi + (1 - \phi)(k_v - k_l) \frac{d\sigma}{dT} R] \frac{\partial T}{\partial t}}{(\phi k_s + (1 - \phi) k_f)^2 k_e} = 0 \end{aligned} \quad (6.44)$$

Et finalement, dérivons par rapport à  $\phi$ , on obtient l'équation sensitive suivante :

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{\rho_f C_f - \rho_s C_s}{(\rho C)_e} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{k_f - k_s}{\phi k_s + (1 - \phi) k_f} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( k_e \frac{\partial Z}{\partial x} \right) = 0 \quad (6.45)$$

Les équations des coefficients sensitifs sont complétées par les conditions initiales et les conditions aux bords obtenues en dérivant la condition initiale et les conditions aux bords de l'équation (6.1) par rapport aux paramètres recherchés. Les inconnues de ces équations de sensibilité sont  $W$ ,  $R$  et  $Z$ .  $(\rho C)(T)$  et  $k(T)$  sont des paramètres qui dépendent de la solution du problème direct  $T$  et non pas des coefficients sensitifs, par conséquent les équations de sensibilité sont des équations semi-implicites couplées aux équations du problème direct (6.1).

Pour discrétiser notre système des équations (équation d'état + équations de sensibilité) on a utilisé la méthode des lignes où les discrétisations temporelle et spatiale sont considérées séparément. La discrétisation spatiale est effectuée par un schéma volumes finis centré dans le cas 1D.

Après la discrétisation spatiale, le système des équations couplées (équation d'état (6.1) + équations de sensibilité (6.43), (6.44) et (6.45)) peut être écrit sous la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} M(T) & 0 & 0 & 0 \\ A_W(T) & I & 0 & 0 \\ A_R(T) & 0 & I & 0 \\ A_Z(T) & 0 & 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dT}{dt} \\ \frac{dW}{dt} \\ \frac{dR}{dt} \\ \frac{dZ}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} N(T) \\ B_W(T) \\ B_R(T) \\ B_Z(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ W \\ R \\ Z \end{pmatrix} = b \quad (6.46)$$

C'est un système ODE avec une matrice de masse inversible.

On va supposer que  $Y = (TWRZ)^T$ . Par des transformations classiques notre système global (équation d'état (6.1) + équations de sensibilité) est défini par le problème de type IVP (Initial value problem) de forme :

$$\begin{cases} F(t, Y, Y') = 0 \\ Y(t_0) = Y_0 \\ Y'(t_0) = Y'_0 \end{cases} \quad (6.47)$$

### 6.6.1 Résolution numérique du système (6.47)

Le système (6.47) est un système d'équations différentielles ordinaires qu'on va résoudre avec le solveur **DASSL**.

Afin de résoudre (6.47), il est nécessaire d'avoir les conditions initiales consistantes, c'est-à-dire qui vérifient  $F(t, Y_0, Y'_0)$ . Or, connaissant la valeur initiale de  $Y$  on peut déterminer la valeur initiale de  $Y'$  avec une fonction de **DASSL** qu'on a modifié (voir section (4.6.1)). Une fois la phase d'initialisation effectuée, on peut passer à la phase de résolution du système DAE.

Le solveur **DASSL** utilise une méthode BDF (section 2.6.2). Le système est ainsi transformé, à chaque pas de temps, en

$$G(Y_{n+1}) = 0 \quad \text{avec} \quad G(Y_{n+1}) = F \left( t_{n+1}, Y_{n+1}, \frac{1}{t_{n+1} - t_n} \sum_{i=0}^q \alpha_{n+1,i} Y_{n+1-i} \right) \quad (6.48)$$

où les coefficients  $\alpha_{n,i}$  sont uniquement déterminés par l'ordre  $q$  de la méthode BDF, et l'histoire des pas de temps.

Le système (6.48) algébrique non linéaire est résolu par une méthode de Newton modifiée [OR70], où chaque itération consiste à résoudre :

$$\bar{J}[Y^{n+1,k+1} - Y^{n+1,k}] = -G(Y^{n+1,k}) \quad (6.49)$$

$\bar{J}$  est une approximation de la matrice jacobienne  $J(p^{(k)})$  définie en format sparse par :

$$J(p^{(k)}) = \frac{\partial G}{\partial Y} = \frac{\partial F}{\partial Y} + \alpha \frac{\partial F}{\partial Y'} \quad (6.50)$$

Actuellement, on utilise le solveur creux **UMFPACK** pour résoudre chaque itéré de Newton. La matrice jacobienne est stockée sous un format "compressed sparse column". Une fois que les paramètres du solveur **DASSL** sont définis, le solveur gère complètement le calcul. On effectue juste une boucle externe de pas de temps afin d'effectuer les sauvegardes et la sortie des résultats.

### 6.6.2 Algorithme de résolution général

Le principe de résolution de ce problème inverse consiste à estimer le paramètre  $p$  qui fait confondre les températures  $T(t)$ , calculées par une méthode directe, avec les températures  $T_g(t)$ , mesurées expérimentalement.

Pour remédier à des problèmes de stabilité et d'unicité de la solution nous avons formulé ce problème sous forme d'optimisation d'une fonctionnelle  $S(p)$  définie par l'équation (6.30). La résolution de ce problème d'optimisation repose sur l'algorithme expliqué dans la section (6.6). Dans la mise en oeuvre de l'algorithme décrit précédemment il est nécessaire de déterminer les coefficients de sensibilité qui représentent la sensibilité du champ de température à la variation de  $p$ .

L'algorithme est le suivant :

- 1- Choisir une valeur initiale  $p^{(0)}$   
Mettre l'itération  $k = 0$
- 2- Résoudre le système (6.47) (équation d'état + équations de sensibilité) en utilisant  $p^{(k)}$  pour définir les paramètres du sol. Les paramètres équivalents du système sont calculés par la méthode de capacité apparente (AHC).
  - Déduire  $T_i^{f,(k)}$ ,  $W_i^{f,(k)}$ ,  $R_i^{f,(k)}$  et  $Z_i^{f,(k)}$  pour  $i = 1, \dots, M$  et  $f = 1, \dots, F$
  - Calculer le critère  $S(p^{(k)})$
- 3- Calculer  $r(p^k)$  et le jacobien  $J(p^{(k)})$   
Résoudre le système linéaire  $J(p^{(k)})^t J(p^{(k)}) m^{(k)} = -J(p^{(k)})^t r(p^{(k)})$  par la méthode des équations normales.
- 4- Si  $S(p^{(k)}) < \epsilon$  fin (critère de convergence à déterminer)  
Sinon itérer :  $p^{(k+1)} = p^{(k)} + m^{(k)}$   
 $p^{(k)} \leftarrow p^{(k+1)}$  et aller à 2.

## 6.7 Organisation générale du logiciel implémenté

Nous avons maintenant tous les éléments pour décrire l'organisation générale d'un programme cherchant à résoudre le problème inverse vu ci-dessus en 1D. Nous insistons sur une organisation modulaire pour assurer l'indépendance du calcul de gradient. Nous avons implémenté un sous-programme résolvant le problème d'optimisation. Ce sous-programme appelle le simulateur qui résout le problème direct et les fonctions de sensibilités en utilisant le solveur DASSL comme décrit dans la section précédente. La séquence d'appel du simulateur est fixée par le sous-programme d'optimisation. En fait, ce sous-programme est nécessairement une interface entre l'optimiseur et toute routine de simulation dont la séquence d'appel est complexe. Un point important est que le simulateur requiert des données comme la géométrie du problème, les pas de temps, les sources, etc...

## 6.8 Validation numérique

Pour valider numériquement ce modèle thermique en 1D nous avons choisi un cas fictif simple où les propriétés thermiques du milieu (capacité apparente et conductivité) ainsi que la porosité sont constantes et uniformes. Ces paramètres ont été appliqués au modèle direct pour calculer les températures aux différents points qui simulent les mesures de température dans le modèle inverse.

Dans une première approche, nous avons considéré le cas idéal où les mesures de températures sont exactes. À partir du problème direct résolu dans les chapitres précédents on récupère les valeurs de température en un certain nombre des points du domaine et qui seront considérées par la suite comme les mesures expérimentales pour valider le code du problème inverse. Les propriétés physiques du sol utilisées pour faire la simulation avec le problème direct sont  $(\rho C)_s = 1.95 \cdot 10^6 J/Kg.K$ ,  $K_s = 0.756 W/m.K$  et  $\phi = 0.2\%$  (rappelons que  $\phi$  est considéré comme étant la teneur du sol en eau plutôt que la porosité du milieu parce qu'en fait on suppose que le milieu est saturé et donc tous les pores sont remplis d'eau), les propriétés du fluide utilisées sont celles de l'eau et de la vapeur. Dans les figures (6.1), (6.3) et (6.5) nous avons reporté les résultats finaux de la capacité apparente, la conductivité et la porosité, respectivement estimées par la méthode inverse après avoir perturbé les données synthétiques avec un certain coefficient d'erreur comme c'est montré dans le tableau suivant :

	$\rho C_s$ (J/kg.K)	$k_s$ (W/m.K)	$\phi$
valeur exacte	$1.95 \cdot 10^6$	0.756	0.20
valeur de départ	$2 \cdot 10^6$	0.8	0.15
valeur calculée	$2 \cdot 10^6$	0.754	0.198

Comparons ces propriétés à celles imposées dans le modèle direct, nous remarquons qu'il y a une bonne correspondance entre les résultats estimés et les valeurs choisies pour le test.

Les figures (6.2), (6.4) et (6.6) montrent que le gradient de  $S$  tend vers 0 quand la solution tend vers la convergence. Autrement, bien que les résultats numériques obtenus par problème inverse sont proches des données synthétiques on peut remarquer quand même qu'il y a une petite différence due à une erreur d'approximation. On voit une bonne convergence dans les courbes (6.1), (6.3) et (6.5) qui semble indiquer que Gauss-Newton est une méthode adaptée. On voit aussi que le gradient est de rang plein ce qui indique que le problème à une solution unique.

**Influence du bruit de mesure** Dans une deuxième approche, pour ne pas rester loin de la réalité et parce que toute mesure de température est inévitablement entachée d'erreurs et étant donné que le problème inverse est un problème mal-posé, ces erreurs sont amplifiés si on ne régularise pas. Pour simuler ces phénomènes physiques nous avons ajouté aux mesures exactes, un bruit gaussien de moyennes nulle et d'écart type  $= 5^\circ C$ .

Nous avons tracé sur les figures (6.7), (6.9) et (6.11) l'évolution de la capacité apparente, la conductivité et la porosité du sol, estimées en tenant compte du bruit de mesure. On remarque que les courbes ont des allures semblables à celles de la première approche mais la conductivité thermique du sol converge vers une valeur un peu différente de celle de la première approche. Les gradients de la fonctionnelle coût  $S$  par rapport aux paramètres inconnus sont représentés sur les figures (6.8), (6.10) et (6.12).

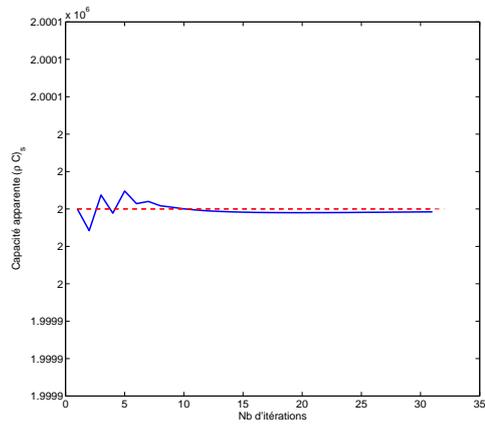


FIG. 6.1 – Évolution de la capacité apparente du sol en fonction du nombre d'itérations.

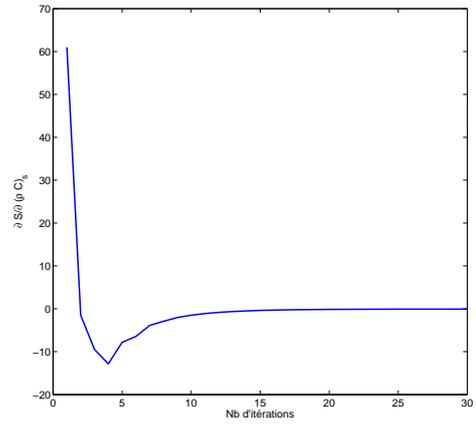


FIG. 6.2 – Évolution du gradient de  $S$  par rapport à  $(\rho C)_s$  en fonction du nombre d'itérations.

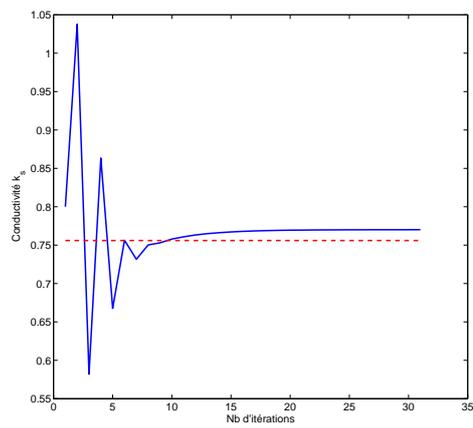


FIG. 6.3 – Évolution de la conductivité thermique du sol en fonction du nombre d'itérations.

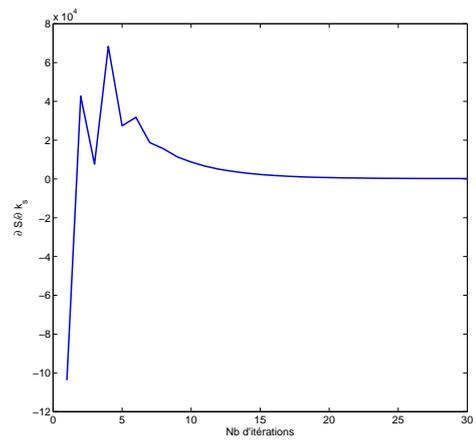


FIG. 6.4 – Évolution du gradient de  $S$  par rapport à  $k_s$  en fonction du nombre d'itérations.

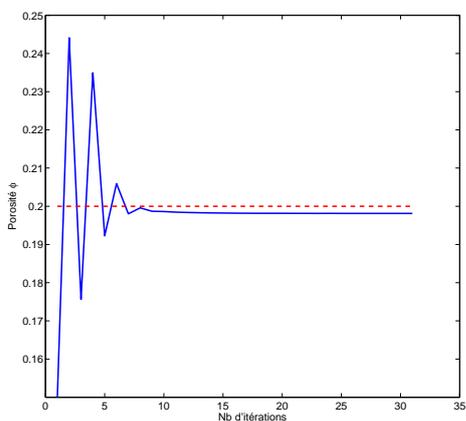


FIG. 6.5 – Évolution de la porosité du sol en fonction du nombre d'itérations.

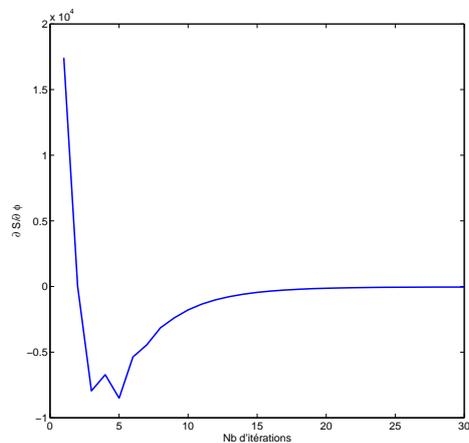


FIG. 6.6 – Évolution du gradient de  $S$  par rapport à  $\phi$  en fonction du nombre d'itérations.

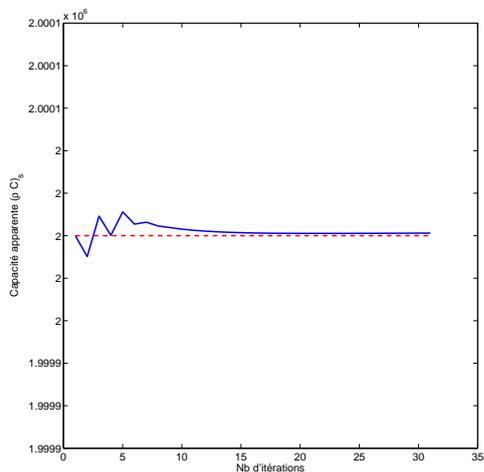


FIG. 6.7 – Évolution de la capacité apparente du sol en fonction du nombre d'itérations. Résultat estimé dans la deuxième approche en tenant compte du bruit de mesure.

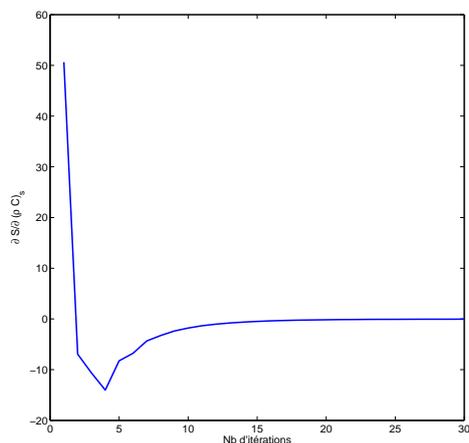


FIG. 6.8 – Évolution du gradient de  $S$  par rapport à  $(\rho C)_s$  en fonction du nombre d'itérations.

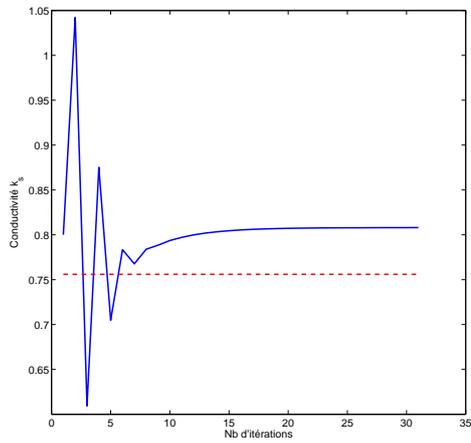


FIG. 6.9 – Évolution de la conductivité thermique du sol en fonction du nombre d'itérations. Résultat estimé dans la deuxième approche en tenant compte du bruit de mesure.

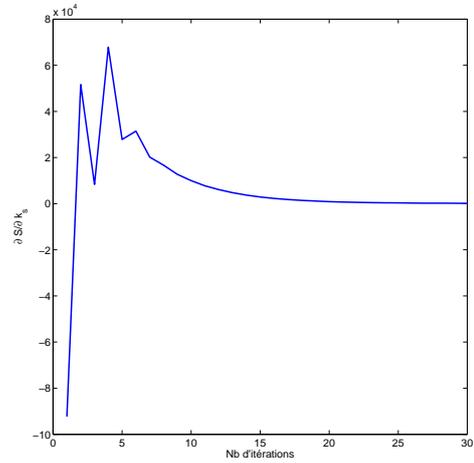


FIG. 6.10 – Évolution du gradient de  $S$  par rapport à  $k_s$  en fonction du nombre d'itérations.

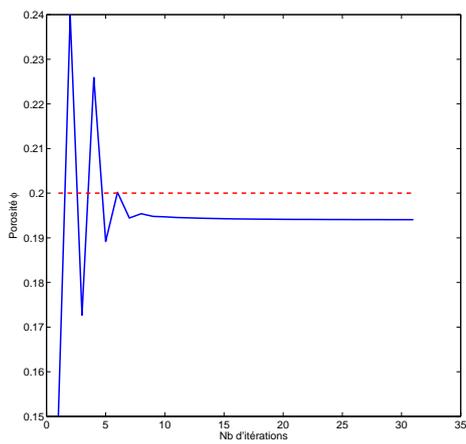


FIG. 6.11 – Évolution de la porosité du sol en fonction du nombre d'itérations. Résultat estimé dans la deuxième approche en tenant compte du bruit de mesure.

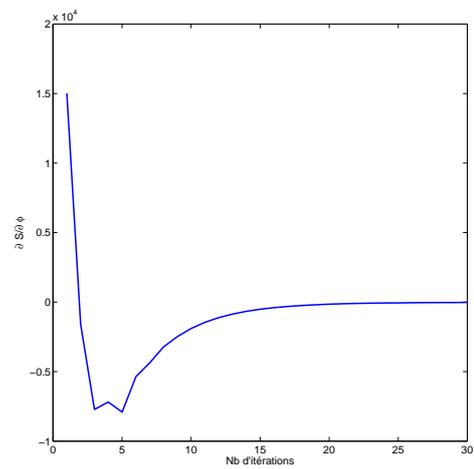


FIG. 6.12 – Évolution du gradient de  $S$  par rapport à  $\phi$  en fonction du nombre d'itérations.

## 6.9 Conclusion

L'application de la méthode inverse à la résolution du problème de transfert thermique dans le milieu poreux saturé de l'eau, nous a permis de déterminer la répartition spatio-temporelle des propriétés thermiques du milieu (densité, capacité et conductivité) ainsi que la porosité du sol. L'utilisation de la formulation par moindres carrés et de la méthode de Gauss-Newton nous a permis d'obtenir une solution stable et régulière d'un problème dit "mal posé". Le modèle présenté ci-dessus est codé en 1D, mais il peut être généraliser aux cas 2D et 3D. C'est seulement une question d'une construction adéquate du programme.

# Conclusion générale et perspectives

L'objectif de cette thèse vise à reproduire mathématiquement le comportement des foyers préhistoriques à partir des données expérimentales des structures de combustion qui s'inspirent de notre connaissance actuelle des foyers paléolithiques et protohistoriques. Les deux approches physiques et numériques sont abordées pour comprendre le mode de fonctionnement et l'histoire thermique des structures étudiées. En terme numérique, le travail de cette thèse vise à simuler l'évaporation forcée dans les milieux poreux saturés afin de pouvoir déterminer la durée minimale d'allumage de foyers préhistoriques. Ensuite on a cherché à estimer les propriétés de sols archéologiques par problème inverse.

Un premier modèle numérique développé utilise la méthode des volumes finis et prend en compte le phénomène de changement de phase via la méthode d'accumulation de chaleur latente. Ce modèle est basé sur la discrétisation de l'équation de Fourier en négligeant l'effet du terme convectif. Les solutions numériques sont obtenues en utilisant un schéma en temps explicite. Pour réduire les fluctuations physiques dans les courbes de température, une méthode classique est de raffiner localement au niveau du front de changement de phase. On a développé un algorithme pour suivre le front de changement de phase, basé sur le raffinement récursif du maillage basique uniforme, via une procédure insertion/suppression des noeuds.

Pour réaliser des simulations dans des configurations multidimensionnelles, un autre modèle numérique a été développé. Ce modèle, basé sur la méthode de capacité apparente, permet de traiter la conduction de la chaleur avec changement de phase et d'éviter le suivi du front. En négligeant tout d'abord l'effet convectif du fluide (eau/vapeur), deux méthodes sont développées : la première méthode, basée sur une discrétisation spatiale par la méthode des volumes finis dans des configurations 1D, 2D et 3D-axisymétrique conduit à un système non linéaire d'équations différentielles ordinaires ODE, résolu via un solveur automatique ODE qui utilise un schéma en temps implicite BDF et une méthode de Newton. La deuxième méthode, basée sur une discrétisation spatiale par les éléments finis mixtes hybrides, dans des configurations complexes 2D ou 3D conduit aussi à un système non linéaire ODE, un schéma en temps semi-implicite implique de résoudre un système linéaire à chaque pas de temps. Deux logiciels, `DIFFUSE-SC` et `DIFFUSE-3D` ont été mis au point et validés par des tests numériques. Une comparaison entre ces deux méthodes a été effectuée.

Ensuite, nous avons considéré un problème de conduction de la chaleur dans des milieux poreux saturés en tenant compte de l'effet advectif. Nous avons ainsi défini un modèle couplé entre la diffusion de la chaleur avec changement de phase sèche/humide et l'écoulement de vapeur d'eau dans le sol. Nous utilisons l'approche par volumes finis et la méthode des lignes comme précédemment. Nous obtenons un système algébro-différentiel DAE, résolu via un solveur automatique performant qui utilise la méthode BDF implicite pour la discrétisation en temps ainsi qu'une variante de la méthode de Newton pour traiter la non linéarité. La matrice jacobienne est stockée en format sparse et les itérations de Newton (à l'intérieur de la méthode BDF) sont résolues par la bibliothèque numérique **UMFPACK** du package **SuiteSparse**. Nous avons développé un logiciel **DIFFUSE-C** en utilisant la bibliothèque **MUESLI**, qui offre une interface de programmation facile à utiliser. Nous avons validé ce logiciel avec plusieurs essais numériques, notamment, en comparant les résultats avec les solutions analytiques pour certains tests.

Les applications à l'archéologie sont présentées dans le cadre du feu préhistorique. La comparaison entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux a montré l'intérêt des simulations numériques.

Une approche expérimentale a été développée dans l'objectif d'une analyse de la logique thermique inhérente à tout processus de combustion. Cette méthode nous a permis d'identifier les variables qui conditionnent la distribution des altérations thermiques observables dans le registre archéologique, de cerner les processus taphonomiques qui altèrent les foyers et les modifient après leur abandon. Nous avons ainsi vérifié que l'effet convectif est important pour des durées de combustion assez longues.

Un autre but de ce travail était l'estimation des paramètres thermophysiques du sol archéologique par problème inverse. En se basant sur la connaissance des courbes d'échauffement en des points sélectionnés dans le sol altéré, la conductivité thermique, la capacité apparente et la porosité du sol sont simultanément identifiées. Pour résoudre ce problème, une formulation de type moindres carrés est utilisée. Nous choisissons une méthode de Gauss-Newton et calculons le Jacobien par une approche directe. Chaque fonction de sensibilité requiert ainsi de résoudre un système différentiel algébrique. Nous appliquons de nouveau un solveur DAE. Nous avons développé un logiciel pour des configurations 1D. La validation du code développé est basée sur la comparaison entre les résultats numériques et les données synthétiques obtenues par le problème direct.

En ce qui concerne les perspectives de ce travail, plusieurs thèmes de recherche peuvent être envisagés :

1. Approfondissement du modèle physique
  - prise en compte de la radiation ;
  - introduction de la capillarité ;
  - introduction de la gravité (pour la convection naturelle).
2. Aspects numériques
  - étude de la sensibilité des paramètres utilisés, aussi de la stabilité des codes de calculs ;

- utilisation d'un solveur BDF pour l'intégration en temps dans le code DIFFUSE-3D.
- parallélisation du code DIFFUSE-3D ;
- analyse plus approfondie et insertion de modèle du couplage entre l'écoulement de vapeur et la conduction de chaleur dans le code DIFFUSE-3D ;
- étude des incertitudes des paramètres physiques dans le modèle du problème inverse par calcul du SVD de la matrice jacobienne ;
- généralisation du problème inverse aux cas multidimensionnels.

3. Aspects archéologiques

- répondre aux questions des archéologues pour chaque structure de combustion :  
"Qu'est ce que c'était ?" et "Qu'est ce que ça signifie ?" ;
- accentuer les études liées aux processus taphonomiques.



# Bibliographie

- [ACB03] F. CHERBLANC A. CHAMMARI, B. NAON and J.C. BÉNET. Transfert d'eau en sol aride avec changement de phase. *Comptes Rendus Mecanique*, 331 :759–765, 2003.
- [AF90] D. C. ARNEY and J. E. FLAHERTY. An adaptive mesh-moving and local refinement method for time-dependent partial differential equations. *ACM trans. Math. Soft.*, 16 :48–71, 1990.
- [AO86] M. R. ALBERT and K. O'NEIL. Moving boundary-moving mesh analysis of phase change using finite elements with transfinite mappings. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 23 :591–607, 1986.
- [AP98] D. ANGIRASA and G. P. PETERSON. Natural convection below a downward facing heated horizontal surface in a fluid-saturated porous medium. *Numerical Heat Transfer. Part A, Applications*, 34 :301–311, 1998.
- [AQS00] A. SACCO A. QUARTERONI and F. SALERI. *Numerical Mathematics*. Springer, Second edition, 2000.
- [ASD95] B. N. ROSENTHAL A. SRINIVASAN, C. BATUR and W. M.B. DUVAL. Solid-liquid interface shape control during crystal growth. In *Proceedings of the american control conference*, pages 1270–1274, Seattle, Washington, June 1995.
- [ASK87] H. G. ASKAR. Simulation of ice formation by the unstructured finite volume method. *Int. J. of Num. methods in engineering*, 24 :859–869, 1987.
- [AUB97] A. AUBRY. *Méthodes de Runge-Kutta pour les équations différentielles algébriques d'indice deux et les systèmes Hamiltoniens*. PhD thesis, IRISA, 1997.
- [B77] J. C. BÉNET. Mesure de la conductivité thermique des sols par sonde cylindrique en régime transitoire : étude de l'influence de la mise en place de la sonde. *Bulletin RILEM*, 10(60) :385–392, 1977.
- [BAN64] S.G. BANKOFF. *Advances by chemical engineering*, volume 5. Academic Press, New York, edited by t. b. drew, j. w. hoops and t. vermeulen edition, 1964.
- [BC73] C. BONACINA and G. COMINI. Numerical solution of phase-change problems. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 :1825–1832, 1973.

- [BEL82] G. BELL. On the performance of the enthalpy method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 25 :587–589, 1982.
- [BJ77] R. BONNEROT and P. JAMET. Numerical computation of the free boundary for the two-dimensional stefan problem by space-time finite elements. *Journal of Computational Physics*, 25 :163–181, 1977.
- [BJ82] J.C. BÉNET and P. JOUANNA. Phenomenological relation of phase change of water in a porous media : experimental verification and measurement of the phenomenological coefficient. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 31 :1747–1754, 1982.
- [BJÖ90] A. BJÖRCK. *Numerical methods for least squares problems*. Siam, 1990.
- [BK03] A. BEJAN and A. D. KRAUS. *Heat transfer hand book*. Wiley, 2003.
- [BOL] B.A. BOLEY. High temperature structures and materials. In *Proc. 3rd. Sump. on Naval Structural Mech.*, pages 260–315, Pergamon, Oxford.
- [BUT64] J.C. BUTCHER. On runge-kutta process of high order. *Journal of Australian Mathematical Society*, 4 :179–194, 1964.
- [CAR81] M. B. CARVER. *Method of lines solution of differential equations - fundamental principles and recent extensions*. R.S.H. Mah and W.D. Seider, editors, Foundations of Computer-Aided Process Design, 1981.
- [CH67] J.R. CANNON and C.D. HILL. Existence, uniqueness, stability and monotone dependence in a stefan problem for the heat equation. *J. Math. Mech.*, 17 :1–20, 1967.
- [CJ59] H.S. CARSLAW and J.C. JAEGER. *Conduction of Heat in solids*. Clarendon press, London, 1959.
- [CK01] D. CONSTALES and J. KACUR. Determination of soil parameters via the solution of inverse problems in infiltration. *Computational Geosciences*, 5 :25–46, 2001.
- [CM89] M. CROUZEIX and A.L. MIGNOT. *Analyse numérique des équations différentielles*. Masson, 1989.
- [CP71] J.R. CANNON and M. PRIMICERIO. A two phase stefan problem with temperature boundary conditions. *Ann. Mat. Pura Appl.*, 88 :177–192, 1971.
- [CS87] F. CIVAN and C.M. SLIEPCEVICH. Limitation in the apparent heat capacity formulation for heat transfer with phase change. In *proc. Okla. Acad. Sci.* 67, pages 83–88, 1987.
- [DAAP92] J.C. TANNEHILL D. A. ANDERSON and R. H. PLETCHER. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. McGraw-Hill, New York, 1992.
- [DAR56] H. DARCY. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Paris, Victor Dalmont, 1856.
- [DAV04a] T. A. DAVIS. Algorithm 832 : Umfpack, an unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 30 :165–195, 2004.

- [DAV04b] T. A. DAVIS. A column pre-ordering strategy for the unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 30 :196–199, 2004.
- [DBP07] J.M. CHIDAGLIA D. BOUCHE and F. PASCAL. étude de convergence du schéma upwind en volumes finis pour l'équation d'advection linéaire sur le contre-exemple de peterson. rapport cea, CEA-ENS Cachan, 2007.
- [DD97] T. A. DAVIS and I. S. DUFF. An unsymmetric-pattern multifrontal method for sparse lu factorization. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 18(1) :140–158, 1997.
- [DEB08] F. DEBASTE. *Modélisation de l'évaporation en milieux poreux : développement de modèles fondamentaux et appliqués*. PhD thesis, Université Libre de Bruxelles (ULB), 2008.
- [DEL82] G. DELLAVALLE. *Stockage de chaleur dans les sols, réalisation d'une aire d'essai*. Thèse de doctorat, INSA, Toulouse, 1982.
- [DEL05] A. DELACHE. *Étude analytique et numérique des instabilités spatio-temporelles des écoulements de convection mixte en milieux poreux : comparaison avec l'expérience*. PhD thesis, Université de Lille 1, 2005.
- [DIE08] C. De DIEULEVEULT. *Un modèle numérique global et performant pour le couplage géochimie-transport*. Thèse de doctorat, Université de Rennes1, décembre 2008.
- [DR82] J. DOUGLAS and J-E. ROBERTS. Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with the finite element or finite difference procedures. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19 :871–885, 1982.
- [DS] J. E. DENNIS and R. B. SCHNABEL. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. Prentice-Hall, INC. New Jersey.
- [EJdZ06] F. J. VERMOLEN E. JAVIERRE, C. VUIK and S. Van der ZWAAG. A comparison of numerical models for one-dimensional stefan problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 192 :445–459, 2006.
- [eMB65] A. Leroi-Gourhan et M. Brézillon. L'habitation n°1 de pincevent. *Gallia préhistoire*, 9 (2) :263–385, 1965.
- [EMB05] J. MENDAKIEWICZ E. MAJCHRZAK and A. PIASECKA BEL-KHAYAT. Algorithm of the mould thermal parameters identification in the system casting-mould-environment. *Journal of Materials Processing Technology*, 164-165 :1544–1549, 2005.
- [EMK07] M. DZIEWONSKI E. MAJCHRZAK and G. KATUZA. Identification of cast steel latent heat by means of gradient method. *Int. J. Computational Materials Science and Surface Engineering*, 1(5) :555–570, 2007.
- [EMS08] B. MOCHNAKI E. MAJCHRZAK and J. S. SUCHY. Identification of substitute thermal capacity of solidifying alloy. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 46(2) :257–268, 2008.

- [ERN07] A. ERN. *Calcul Scientifique*. Janvier 2007.
- [FD07] V. HALLOIN et B. HAUT F. DEBASTE, L. BOSSART. A new modelling approach for the prediction of yeast drying time in fluidized beds. *Journal of Food Engineering*, 84(2) :335–347, 2007.
- [FF78] J. A. FIORA and J. C. FERRERI. Computation of steady nonlinear heat conduction in domains of arbitrary shape by means of discrete coordinate transformations. *Lat. am. J. Heat mass. transfer*, 2 :29–44, 1978.
- [FIN71] B. A. FINLAYSON. Packed bed reactor analysis by orthogonal collocation. *Chemical Engng. Sci*, 26 :1081–1091, 1971.
- [FJ95] S. FRIGON and P. JOYAL. *A directional finite volume method for advection-dominated problems*. PhD thesis, Université de Québec à Chicoutimi, 1995.
- [FM96] J. C. FERRERI and R. J. MARCH. Using numerical models to analyze archaeological simple fires structures. In *XIII International congress of prehistoric and protohistoric sciences*, pages 57–63, Forli-Italia, 8/14 September 1996. Colloquia 5 The lower and Middle paleolithic colloquium.
- [FP73] A. FASSANO and M. PRIMICERIO. Convergence of huber’s method for heat conduction problems with change of phase. *Z. Angew. Math. Mech.*, 53 :341–348, 1973.
- [FRI95] S. FRIGON. *Une méthode de volumes finis dirigés pour les problèmes hyperboliques en une dimension*. Mémoire de maîtrise, Université Laval, 1995.
- [GF89] G. M. GRANDI and J. C. FERRERI. On the solution of heat conduction problems involving heat sources via boundary-fitted grids. *Comm. in Appl. Num. Methods*, 5 :1–6, 1989.
- [GM93] S. GHOSH and S. MOORTHY. An arbitrary lagrangian-eulerian finite-element model for heat transfer analysis of solidification processes. *Numerical Heat Transfer, part B*, 23 :327–350, 1993.
- [GVZ89] J. G. BLOM G. VERWER and P. A. ZEGELING. *A moving grid method for one-dimensional PDEs based on the method of lines*. Clarendon Press, Oxford, 1989.
- [HA03] H. HOTEIT and P. ACKERER. Transport réactif de contaminant dans les eaux souterraines transport of radioactive elements in subsurface. Technical report, IMFS laboratory, 2003.
- [HAD23] J. HADAMARD. *Lectures on Cauchy’s problem in Linear partial differential equations*. Yale University Press, 1923.
- [HOT02] H. HOTEIT. *Simulation d’écoulements et de transports de polluants en milieux poreux : Application à la modélisation de la sûreté des dépôts de déchets radioactifs*. PhD thesis, Université Rennes1, 2002.
- [HUZa94] T. BELLONI H. U. ZIMMERMAN, W. BECKER and al. Mpe report 257, 1994.

- [HV03] W. HUNSDORFER and J. VERWER. *Numerical solution of Time-Dependent advection-diffusion-reaction equations*. Springer, Amsterdam, 2003.
- [ISA98] V. ISAKOV. *Inverse problems for partial differential equations*. Springer, New-York, number 127 in applied mathematical sciences edition, 1998.
- [JLB] P. MATIASOVSKY J. LUKOVICOVA and M. BALZOVJECH. Nonlinear problem of inverse determination of heat coefficient. Technical report, Faculty of Civil Engineering, STU, Bratislava, Slovakia.
- [KAV95] M. KAVIANY. *Principles of heat transfer in porous media*. Springer, 1995.
- [KBP89] S.L. CAMPBELL K.E. BRENNAN and L.R. PETZOLD. *Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations*. Elsevier Science Publishing Co., 1989.
- [KC90] J.Y. KU and S.H. CHAN. A generalized laplace transform technique for phase-change problems. *J. Heat transfer*, 112 :495–497, 1990.
- [KEL94] Y. KELANEMER. *Transferts couplés de masse et de chaleur dans les milieux poreux : Modélisation et étude numérique*. Thèse de doctorat, Université de Paris XI Orsay, 1994.
- [KEL95] C. T. KELLEY. *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*. SIAM, 1995.
- [KEL03] C. T. KELLEY. *Solving Nonlinear Equations with Newton's Method*. SIAM, 2003.
- [KER03] M. KERN. Problèmes inverses. Notes de cours, École Supérieure D'Ingénieurs Léonard De Vinci, 2002-2003.
- [KIT95] P. K. KITANIDIS. *Quasi-linear Geostatistical theory for inversing*. Water Resources Research, 31(10) edition, 1995.
- [LC95] R. LEE and W. CHIOU. Finite-element analysis of phase-change problems using multilevel techniques. *Numerical Heat Transfer, part B*, 27 :277–290, 1995.
- [LG92] M. LACROIX and A. GARON. Numerical solution of phase change problems : an eulerian-lagrangian approach. *Numerical Heat Transfer*, 19 :57–78, 1992.
- [LM84] J. LALOY and P. MASSARD. Nouvelle méthode thermique d'étude des foyers préhistoriques. *Révue d'Archéométrie*, 8 :33–40, 1984.
- [LO81] D. R. LYNCH and K. O'NEIL. Continuously deforming finite elements for the solution of parabolic problems, with and without phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 17 :81–96, 1981.
- [LSK99] M.W. REICHLET L.F. SHAMPINE and J.A. KIERZENKA. Solving index-1 daes in matlab and simulink. *SIAM*, 41 No. 3 :538–552, 1999.

- [MAN05] K. MANEERATANA. Simulation of ice formation by the unstructured finite volume method. In *Proceedings of the 1st conference on Energy Network of Thailand (E-NTT)*, pages 211–216, Ambassador city Jamtien-Chanburi, 11-13 May 2005.
- [MAR95a] R. J. MARCH. *Méthodes physiques et chimiques appliquées à l'étude des structures de combustion préhistoriques, l'approche par la chimie organique*. Thèse de doctorat, Université de Paris I, 1995.
- [MAR95b] R. J. MARCH. Un détour vers l'histoire : L'étude des structures de combustion en archéologie. *Annales de la fondation Fyssen*, 10 :53–68, 1995.
- [MAR96] R. J. MARCH. L'étude des structures de combustion préhistoriques une approche interdisciplinaire. *XIII International Congress of prehistoric and protohistoric sciences*, Colloquia 5 :251–75, Forli-Italia-8/14 September 1996.
- [MAR02] R. J. MARCH. Le contrôle et l'emploi du feu, un regard théorico-interpretatif. *Historia Degli Studi e prospettive : Il mondo dell'archéologia : istituto della enciclopedia italiana de Giovanni treccani Roma*, pages 807–812, Roma 2002.
- [MC74] S.A. BORIES M.A. COMBARNOUS. Modélisation de la convection naturelle au sein d'une couche poreuse horizontale à l'aide d'un coefficient de transfert solide-fluide. *Int. Journ. Heat Mass Transfer*, 17(4) :505–515, 1974.
- [MC02] V. MAZHUKIN and M. CHUIKO. Solution of the multi-interface stefan problem by the method of dynamic adaptation. *Computational Methods in Applied Mathematics*, 2 :283–294, 2002.
- [MC08] M. MUHIEDDINE and É. CANOT. Recursive mesh refinement for vertex-centered fvm applied to a 1-d phase-change problem. In *Proceedings of the Fifth Int. Symp. on Finite Volume for Complex Applications (FVCA5)*, pages 601–608, Aussoie, France, June 2008. Wiley.
- [ME72] K. MIN and H.W. EMMONS. The drying of porous media. *Procs. of Heat Transfer and Fluid Mechanics Institute*, 1972.
- [MF] R. J. MARCH and J. C. FERRERI. de modelos numéricos para la inferencia del tiempo de quemado en estructuras de combustion arqueológicas : Influencia de parametros. In *Actas del textrmIX congreso Nacional de Arqueologia Chilena*, pages 157–168, Santiago de chile, chile. Museo National de Historia Natural.
- [MF87] R. J. MARCH and J. C. FERRERI. Sobre el estudio de estructuras de combustion arqueológicas mediante replications y modelos numéricos. In *Nature et Fonction des foyers préhistoriques*, pages 59–69, Nemours, 1987. APRAIF.
- [MM] B. MOVHNAKI and E. MAJCHRZAK. The methods of inverse problems solution in the thermal theory of foundary processes. *Research in polish*

metallurgy at the beginning of xxi centurycommittee of metallurgy of the polish academy of sciences, committee of metallurgy of the polish academy of sciences.

- [MM81] K MILLER and R. N. MILLER. Moving finite elements. *SIAM J. Numer. Anal.*, 18 :1019–1032, 1981.
- [MMM08] É. CANOT M. MUHIEDDINE and R. MARCH. Numerical solution of a 1-d time-dependent phase-change problem. In *Proceedings of the WCCM8 and Fifth ECCOMAS*, Venise, Italy, July 2008. CD-ROM, CIMNE, B. A. Schrefler and U. Perego Eds, document a1317.pdf.
- [MMM09a] É. CANOT M. MUHIEDDINE and R. MARCH. Various approaches for solving problems in heat conduction with phase change. *International Journal on Finite Volumes*, 6(1), 2009.
- [MMM09b] É. CANOT M. MUHIEDDINE and R. MARCH. Simulation of heat transfer with phase change in 3d saturated porous media. In *Proceeding of the 3rd International Conference on Approximation Methods and Numerical Modeling in Environment and Natural Resources, Mamern09*, pages 701–706, Pau, France, June 2009. volume 2.
- [MMM09c] É. CANOT M. MUHIEDDINE and R. MARCH. Recovering thermophysical parameters of a heated saturated porous medium. In *International Conference of Numerical Analysis and Scientific Computing with Applications*, Agadir, Marocco, May 2009.
- [MO99] M. M. MEJIAS and H. R. B. ORLANDE. A comparaison of different parameter estimation techniques for the identification of thermal conductivity components of orthotropic solids. In *3rd International Conference on Inverse Problems in Engineering*, Port Ludlow, WA, USA, 1999.
- [MP00] M. MÉRIAUX and S. PIPERNO. Méthodes de volumes finis en maillages variables pour des équations hyperboliques en une dimension. rapport de recherche 4042, INRIA, 2000.
- [MS65] J.C. MUELBAUER and J.E. SUNDERLAND. Heat conduction with freezing or melting. *Appl. Mech. Rev.*, 18 :951–959, 1965.
- [MS04] E. MAGENES and C. SLIEPCEVICH. Numerical and experimental investigation of melting and freezing processes in phase change material storage. *Int. J. of Thermal Sciences*, 43 :277–287, 2004.
- [MSP05] A. KLAR M. SEAÏD and R. PINNAU. Numerical solvers for radiation and conduction in high temperature gas flows. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75 :173–190, 2005.
- [NB99] D.A. NIELD and A. BEJAN. *Convection in porous media*. Springer, second edition edition, 1999.
- [OR70] J. M. ORTEGA and W. C. RHEINBOLDT. *Iterative solution of nonlinear equations in several variables*. Academic Press INC. New york, 1970.

- [OYP96] R. J. MARCH O. YOSEF, L. CAVALLI-SFORZA and E. PIPERNO. L'étude des structures de combustion préhistoriques : Une approche interdisciplinaire. In *Int. Congress of prehistoric sciences*, Forli-Italia, 8/4 September 1996. Colloquia 5 The lower and Middle paleolithic Colloquium IX.
- [PAN80] V. PANTAKAR. *Numerical heat transfer and fluid flow*. McGraw-Hill, New York, 1980.
- [PBP95] A.C. HINDMARSH P.N. BROWN and L.R. PETZOLD. Consistent initial condition calculation for differential-algebraic systems. Lnl report ucrl-jc-122175, 1995.
- [PER98] S. PERRON. *Résolution de la méthode des volumes finis dirigés de l'équation de la chaleur pour des problèmes diphasiques en 1D et 2D*. Mémoire de maîtrise, Université de Québec à Chicoutimi, Mai 1998.
- [PJ] L. KUNTZ et R. SIRVEN P. JACQUET, T. BOUQUIN. Fouille de fosses de combustion protohistoriques à saint-priest (rhône, france). Technical report, AFAN Rhône-Alpes.
- [PM04] R. PRAPAINOP and K. MANEERATANA. Simulation of ice formation by the finite volume method. *Songklanakarín J. Sci. Technol*, 26(1) :55–70, 2004.
- [RC91] S.R. RUNNELS and G.F. CAREY. Finite element simulation of phase change using capacitance methods. *Numerical Heat Transfer, part B*, 19 :13–30, 1991.
- [RUB03] L. I. RUBINSTEIN. The stefan problem. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 46 :2911–2916, 2003.
- [RYK03] A. HARKATI R. YOUNSI and D. KALACHE. Numerical simulation of heat and mass transfer in composite fluid-porous layer. *Comp. Ass. Mech. And Eng. Sc. J.*, 10(1), 2003.
- [SCH91] W.E. SCHIESSER. *The numerical method of lines*. Academic Press, New York, 1991.
- [SF73] G. STRANG and G. J. FOX. *An analysis of the finite element method*. Prentice-Hall, 1973.
- [SJ06] A. SBOUI and J. JAFFRÉ. Discrétisation en temps par sous-domaine pour un problème d'advection en milieux poreux. *ARIMA*, 5 :333–349, 2006.
- [SKK02] M. CHAN KIM S. KIM and K. YOUNG KIM. An integral approach to the inverse estimation of temperature-dependent thermal conductivity without internal measurements. *Computational Geosciences*, 29(1) :107–113, 2002.
- [SO95] B. SAWAF and M. N. OZISIK. Determining the constant thermal conductivities of orthotropic materials by inverse analysis. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 22(2) :201–211, 1995.
- [TIK77] A. N. TIKHONOV. *Solution of ill-posed problems*. Halsted Press, Washington, 1977.

- [VG81] V. VOLLER and M. GROSS. Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method. *Int. J Heat Mass Transfer*, 24 :545–556, 1981.
- [VM78] J. VILLADSEN and M. L. MICHELSEN. *Solution of differential equation models by polynomial approximation*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1978.
- [VM95] H.K. VERSTEEG and W. MALALASEKERA. An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method. In *Longman Scientific and Technical*, England, 1995.
- [VRVM87] M. CROSS V. R. VOLLER and N. C. MARKAIOS. An enthalpy method for convection/diffusion phase change. *Int. J. Numerical Methods in engeneering*, 24 :271–284, 1987.
- [WA95] M.F. WHEELER and T. ARBOGAST. A characteristics-mixed finite element method for advection dominated transport problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32 :404–424, 1995.
- [XFWD00] Q. LI X. F. WANG, H. S. LIANG and Y. L. DENG. Tracking of a moving interface during a 2d melting or solidification process from measurements on the solid part only. In *Proceedings of the 3<sup>rd</sup> World Congress on Intelligent Control and Automation*, pages 2240–2243, Hefei, P. R. China, 2000.
- [YG07] C. YANG and S. GAO. An inverse analysis to estimate thermal conductivity components of an orthotropic medium. *3rd International Conference on Natural Computation*, 2007.
- [YR86] J. YOO and B. RUBINSKY. A finite element method for the study of solidification processes in the presences of natural convection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 23 :1785–1805, 1986.
- [ZB02] C. ZHENG and G.D. BÉNET. *Applied Contaminant Transport Modeling*. Wiley Interscience, second edition, 2002.



# Table des figures

1.1	La figure illustre la taille intermédiaire $l$ du Volume Élémentaire Représentatif (V.E.R) entre la taille du milieux poreux à l'échelle macroscopique $L$ et à l'échelle des pores $d$ . . . . .	14
1.2	Description schématique du problème. . . . .	16
1.3	Tension de surface. Forces intermoléculaires sur la pellicule contractile et dans l'eau. . . . .	20
1.4	Pressions et tension de surface agissant sur la pellicule en deux dimensions. . . . .	20
1.5	Phénomène de capillarité dans un tube plongé dans l'eau. . . . .	22
1.6	Milieu poreux à l'échelle des pores $d$ . . . . .	22
1.7	Zone A : pas de convection naturelle possible. Zone B : convection naturelle possible. . . . .	23
2.1	un volume de contrôle typique, cas 1-D. . . . .	31
2.2	Description de l'algorithme de l'accumulation de chaleur latente. . . . .	33
2.3	La première figure montre le milieu physique réel composé de deux phases solide et liquide. La deuxième figure montre, dans l'approximation discrète, la présence d'une cellule mixte au moment du changement de phase. . . . .	34
2.4	Profil de température en $t_{max} = 50 h$ . Solution analytique (rouge) et solution numérique (bleu). . . . .	35
2.5	Histoire de la température en $x = 5 cm$ . Un schéma explicite à été utilisé. . . . .	35
2.6	Raffinement de maillage récursive employé pour suivre le front de changement de phase (les points représentent les nœuds tandis que les lignes pointillées déterminent les bords des cellules; la cellule mixte est colorée en gris). Les points cerclés sont les nouveaux nœuds qui ont été insérés (entre étape 1 et 2) pour respecter quelques contraintes à propos de la progressivité du maillage. Le point marqué par $\times$ disparaît entre l'étape 2 et 3. . . . .	36
2.7	Profil de la température en $t_{max} = 50 h$ . Solution analytique (rouge) solution et numérique (bleu). . . . .	37
2.8	Histoire de la température en $x = 5 cm$ . Nombre des subdivisions : 3. $N_{basic} = 40$ , $dt = 1.74E + 01 s$ . . . . .	37

2.9	Profil de la température en $t_{max} = 50$ h. Solution analytique (rouge) et solution numérique (bleu).	38
2.10	Histoire de la température en $x = 5$ cm. Nombre des subdivisions : 6. $N_{basic} = 40$ , $dt = 2.72E - 01$ s.	38
2.11	Erreurs RMS par rapport au nombre total des cellules.	38
2.12	Erreurs RMS par rapport au temps de calcul. Schéma explicite.	38
2.13	Amplitude des oscillations sur l'histoire de la température.	39
2.14	Erreurs RMS sur l'histoire de la température par rapport au temps CPU.	39
2.15	Propriétés physiques données par Bonacina.	40
2.16	Propriétés physiques régularisées utilisées dans ce mémoire.	40
2.17	Approximation de la fraction de la phase initiale sur un petit intervalle de température selon les fonctions linéaires.	41
2.18	Approximation de la fraction de la phase initiale sur un petit intervalle de température selon les fonctions d'erreurs.	41
2.19	Profil de température à $t_{max} = 50$ h. $N_{basic} = 300$ . $\Delta T = 0.1^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).	47
2.20	Histoire de la température à $x = 5$ cm. $N_{basic} = 300$ . $\Delta T = 0.1^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).	47
2.21	Profil de température à $t_{max} = 50$ h. $N_{basic} = 300$ . $\Delta T = 0.5^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).	47
2.22	Histoire de la température à $x = 5$ cm. $N_{basic} = 300$ . $\Delta T = 0.5^\circ C$ . Solution analytique (rouge) et solution analytique (bleu).	47
2.23	Facteur de qualité par rapport à la taille de l'intervalle de température de changement de phase pour différent nombre des nœuds.	48
2.24	Temps CPU par rapport à la taille de l'intervalle de température de changement de phase pour différent nombre des nœuds.	48
2.25	$\Delta T$ optimale par rapport à $\Delta x$ .	49
2.26	Comparaison entre les histoires de température à 5 cm obtenues par LHA ( $N_{basic} = 80$ et $N_{subdivision} = 5$ ) et par AHC ( $N_{basic} = 320$ et $\Delta T = 0.5^\circ C$ ).	49
3.1	Schématization des flux intervenant lors de l'évaporation en milieux poreux.	52
3.2	Propriétés physiques données par Bonacina.	54
3.3	Propriétés physiques régularisées.	54
3.4	Système des coordonnées cylindriques.	58
3.5	Fonctions utilisées par DIFFUSE-SC.	60
3.6	Les variables nodales sur l'élément de référence.	62
3.7	Méthodologie suivie pour faire des simulations avec DIFFUSE-3D.	67
3.8	Histoire de la température à un profondeur de 5 cm dans le sol. Solution analytique (rouge), solution numérique (bleu).	68

3.9	Solution numérique 3D. Diffusion de la chaleur dans un sol sec. .....	68
3.10	Fusion sur un domaine carré. ....	69
3.11	Fusion dans un domaine carré avec les parois conductrices sont mises à des températures égales. Les bords infinis sont remplacés par des bords finis supposés non conducteurs. ....	70
3.12	profil de température au temps $t = 50 h$ . $\Delta T = 0.5^\circ C$ . Solution analytique (1D) (courbe rouge), solution numérique avec DIFFUSE-3D (courbe bleue), solution numérique avec DIFFUSE-SC (courbe magenta pointillée). ....	71
3.13	Histoire de température en $(x, y) = (1 m, 5 cm)$ . Solution analytique (1D) (courbe rouge), solution numérique avec DIFFUSE-3D (courbe bleue), solution numérique avec DIFFUSE-SC (courbe magenta pointillée). ....	71
3.14	Temps CPU par rapport au nombre d'éléments de maillage pour les deux approches EFMH et VF. ....	71
3.15	Erreur RMS sur $T(t)$ pour les deux approches EFMH et VF. .....	71
3.16	Comparaison entre le code DIFFUSE-SC et le code de Ferreri. ....	73
4.1	Évaluation des composantes de la vitesse au niveau de l'interface. À l'interface entre les noeuds $(i,j)$ et $(i,j+1)$ , $V_{r(i,j+1/2)}$ est directement fourni par le calcul. En revanche, $V_{z(i,j+1/2)}$ doit être interpolé à partir des valeurs au niveau des interfaces 1, 2, 3, et 4. ....	84
4.2	Couplage dans le code DIFFUSE-C avec le solveur DASSL. Les flèches symbolisent les interactions entre les différents modules ....	90
4.3	Temps CPU par rapport au nombre de noeuds utilisé dans la simulation avec la matrice creuse (courbe bleue) et la matrice dense (courbe pointillée rouge). Les noeuds utilisés sont : $10 \times 10$ , $15 \times 15$ , $20 \times 20$ , $25 \times 25$ et $50 \times 50$ ....	92
4.4	Effets de couplage de la diffusion de la chaleur avec l'écoulement du vapeur d'eau. Les courbes représentent l'histoire de la température à $5 cm$ . ....	92
5.1	Emplacement du site de Pincevent (d'après Roublin-Jouve, 1994 avec modifications). ....	97
5.2	Préparation du sol. On arrache les herbes et on nettoie le sol. ....	98
5.3	Les thermocouples sont mis dans le sol à différentes positions. ....	98
5.4	Le feu est allumé avec du bois trouvés à côté de la Seine. ....	98
5.5	Les cendres obtenues après l'extinction du feu. ....	98
5.6	Changement du couleur dû aux altérations du sol. .....	98
5.7	Fouille à l'intérieur du sol. Détermination de la position de l'interface et des positions des différentes thermocouples. ....	98
5.8	Plaque électrique utilisée pour chauffer le sol. ....	99

5.9	Les thermocouples sont liés à l'ordinateur. . . . .	99
5.10	Altérations à la surface du sol produites par la plaque. . . . . .	99
5.11	Fouille du sol pour déterminer la position de l'interface et les positions des thermocouples. . . . .	99
5.12	Simulation numérique de l'expérience de Laloy et Massard (1984). Com- paraison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-SC et les données expérimentales. . . . .	100
5.13	Profil de température pour l'expérience de Laloy et Massard dans le sol pour le cas 3D axisymétrique après 6 h d'allumage. La ligne noire précise la position des isothermes à 100°C. Les températures sont données en degrés centigrades. . . . .	101
5.14	Comparaison entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux obtenus par l'expérience réalisée avec la plaque chauffante à Pincevent. Les courbes représentent les histoires de la température à différentes pro- fondeurs. Les courbes pointillées représentent les valeurs expérimentales et les courbes continues représentent les valeurs numériques. . . . .	102
5.15	Profil de température pour l'expérience de la plaque dans le sol avec une coupe axisymétrique. La ligne noire représente la position de l'interface de changement de phase (isotherme 100°C). . . . .	102
5.16	Vue schématique de l'expérience d'Étiolles. Les nombres représentent les différents thermocouples utilisés. . . . .	103
5.17	Comparaison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-C et les mesures expérimentales obtenues à Étiolles par R. March. Les courbes représentent l'histoire de la température à différentes profondeurs. La température au centre du feu est utilisée comme condition de Dirichlet pour la simulation à la surface du sol. . . . .	104
5.18	Vue schématique de l'expérience de Pincevent. Les nombres représentent les différents thermocouples utilisés. . . . .	104
5.19	Comparaison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-C et les mesures expérimentales obtenues à Pincevent. Les courbes représentent l'histoire de la température à différentes profondeurs.. T1 est à 3,5 cm de profondeur, T5 est à 2,5 cm et T6 est à 1,5 cm à l'intérieur du sol. . . . .	105
5.20	Profil de température pour l'expérience de Pincevent avec feu réel avec une coupe axisymétrique dans le sol. La ligne noire détermine la position de l'interface de changement de phase. . . . .	106
5.21	Variation de la pression dans le sol. Elle est due à la création du gaz lors du changement de phase. . . . . .	106
5.22	Le maillage utilisé pour la simulation avec le code DIFFUSE-3D. . . . .	107
5.23	Une comparaison entre les résultats numériques obtenus par DIFFUSE-3D et les mesures expérimentales obtenues à Étiolles. Une approximation constante uniforme du feu est prise. . . . .	107

5.24	Profil de température à l'intérieur du sol. . . . .	108
5.25	Vue 3D du résultat numérique à la surface du sol. . . . .	108
5.26	Disposition du bois à l'intérieur du foyer. . . . .	109
5.27	Disposition du bois à l'intérieur du foyer. . . . .	109
5.28	Disposition du bois à l'intérieur du foyer. . . . .	109
5.29	Galets utilisés pour l'échauffement. . . . .	109
5.30	Début du cuisson sur les galets chauffés. . . . .	109
5.31	Fin de la cuisson sur les galets chauffés. . . . .	109
5.32	Diagramme montrant les positions des différents thermocouples dans le foyer. . . . .	110
5.33	Profil de température à l'intérieur du sol. . . . .	111
5.34	Histoire de la température à 11.5 cm. . . . .	111
5.35	Les différentes coupes effectuées sur le foyer en cuvette. . . . .	112
5.36	Zone d'oxydation pour la coupe 1. . . . .	113
5.37	Zone d'oxydation pour la coupe 2. . . . .	113
5.38	Zone d'oxydation pour la coupe 3. . . . .	113
5.39	Zone d'oxydation pour la coupe 4. . . . .	113
5.40	Le maillage utilisé est un maillage tétraédrique progressif. . . . .	114
5.41	Histoire de la température à différentes profondeurs pour un sol saturé d'eau. . . . .	114
5.42	Profil de température sur la surface du sol. . . . .	115
5.43	Profil de température à l'intérieur du sol. . . . .	115
5.44	Histoire de la température à différentes profondeurs pour un sol sec. . . . .	115
6.1	Évolution de la capacité apparente du sol en fonction du nombre d'itérations. . . . . .	135
6.2	Évolution du gradient de $S$ par rapport à $(\rho C)_s$ en fonction du nombre d'itérations.	135
6.3	Évolution de la conductivité thermique du sol en fonction du nombre d'itérations.	135
6.4	Évolution du gradient de $S$ par rapport à $k_s$ en fonction du nombre d'itérations. . . . . .	135
6.5	Évolution de la porosité du sol en fonction du nombre d'itérations. . . . .	136
6.6	Évolution du gradient de $S$ par rapport à $\phi$ en fonction du nombre d'itérations.	136
6.7	Évolution de la capacité apparente du sol en fonction du nombre d'itérations. Résultat estimé dans la deuxième approche en tenant compte du bruit de mesure.	136
6.8	Évolution du gradient de $S$ par rapport à $(\rho C)_s$ en fonction du nombre d'itérations. . . . . .	136
6.9	Évolution de la conductivité thermique du sol en fonction du nombre d'itérations. Résultat estimé dans la deuxième approche en tenant compte du bruit de mesure.	137
6.10	Évolution du gradient de $S$ par rapport à $k_s$ en fonction du nombre d'itérations. . . . . .	137
6.11	Évolution de la porosité du sol en fonction du nombre d'itérations. Résultat estimé dans la deuxième approche en tenant compte du bruit de mesure. . . . .	137

6.12 Évolution du gradient de $S$ par rapport à $\phi$ en fonction du nombre d'itérations.	
.....	137



## Résumé

La compréhension des comportements des hommes préhistoriques nécessite la mise au point de méthodologies appropriées étudiant la nature et le fonctionnement des structures de combustion préhistoriques. Ce travail présente alors des outils numériques pour résoudre le problème de diffusion de la chaleur dans un milieu poreux saturé d'eau et pour déterminer les propriétés physiques du milieu par problème inverse. La première partie est consacrée à la résolution de problèmes de changement de phase utilisant deux approches, LHA (accumulation de chaleur latente) et AHC (capacité apparente), cette dernière étant retenue pour la suite. On utilise systématiquement la méthode des lignes qui consiste à discrétiser d'abord spatialement, soit par volumes finis avec un schéma en temps implicite et une variante de la méthode de Newton pour traiter la non linéarité, soit par une méthode d'éléments finis mixtes hybrides avec un schéma en temps semi-implicite. De plus, on étudie aussi le couplage diffusion-convection qui conduit à un système d'équations différentielles algébriques qu'on résout par un solveur approprié. Lors de comparaisons avec les expériences réalisées sur le site archéologique de Pincevent, les méthodes utilisées se sont montrées intéressantes et les résultats sont concluants. La deuxième partie de la thèse porte sur la détermination des propriétés physiques du sol archéologique par une méthode inverse. La méthode de Gauss-Newton est utilisée pour résoudre ce problème. Les résultats obtenus montrent une bonne convergence vers la solution désirée.

## Abstract

In order to understand the ancient human behavior, it was necessary to find an appropriate methodology to study the nature and the mechanism of the prehistoric fires. This work presents numerical methods to solve the problem of heat diffusion in water saturated porous media and to determine the physical properties of the medium by inverse method. However, the first part of this work concerns the resolution of phase change problems using two approaches LHA (latent heat accumulation) and AHC (apparent heat capacity); this last one is used in what follows. We use systematically the method of lines which consists first on discretizing in space, by finite volume method with an implicit scheme and a modified Newton method to deal with the non linearity, or by hybrid mixed finite element with a semi-implicit scheme in time. In addition, the coupling diffusion-convection model has been studied leading to a system of differential algebraic equations solved by an appropriate solver. After the comparisons with the results of the real experiments realized at the archaeological site of Pincevent, the shown methods look interesting and the results are promising. The second part of my Ph.D work is about the estimation of thermophysical properties of the archaeological soil by inverse problem. The Gauss-Newton method is used to solve the problem. The obtained results show a good convergence to the desired solution.