



HAL
open science

Modélisation des phénomènes physiques se produisant lors de la montée en température d'un déchet radioactif d'enrobés de boues bituminées

Iman Tallas

► **To cite this version:**

Iman Tallas. Modélisation des phénomènes physiques se produisant lors de la montée en température d'un déchet radioactif d'enrobés de boues bituminées. Sciences de l'ingénieur [physics]. 2021. dumas-03619540

HAL Id: dumas-03619540

<https://dumas.ccsd.cnrs.fr/dumas-03619540v1>

Submitted on 25 Mar 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Copyright

Travail de fin d'études

Mention cours d'eau, littoral et voies navigables
Master en mécanique des fluides et énergétique

Modélisation des phénomènes physiques
se produisant lors de la montée en
température d'un déchet radioactif
d'enrobés de boues bituminées

Commission d'examen :
Responsable de VA : M. CLEMENT Bernard
Maître de TFE : M. JOURDA Paul
Président du jury : M. ANGULO-JARAMILLO Rafael
Experte : Mme. RAYNAL Florence
Responsable de Master : M. LEPENVEN Lionel

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



ENTPE
L'école de l'aménagement durable des territoires

Année 2020-2021

Par Iman TALLAS
Soutenu le 14 septembre 2021

Remerciements

En premier lieu, je tenais à remercier M. Jourda pour son accompagnement et ses précieux conseils. Merci de m'avoir donné l'opportunité de travailler sur un sujet à la fois très intéressant et complexe. Je vous suis reconnaissante de m'avoir initiée au travail de recherche ainsi que de m'avoir apprise une nouvelle méthode d'appréhension des problèmes scientifiques, et surtout une rigueur dans l'organisation du travail. Merci également de m'avoir donné les clés pour mieux comprendre les relations entre les différents acteurs du nucléaire en France. Pour finir, je vous remercie de m'avoir accueilli en présentiel le plus possible et dès le début du stage malgré la situation sanitaire.

Je tenais également à remercier MM. Champenois, Dussault, Leclerc, Poulesquen et Vigneron d'avoir pris le temps de m'écouter et d'avoir participé à ma compréhension du sujet et de ses enjeux.

Pour finir, je voulais remercier Mme. Raynal pour avoir accepté de participer au jury de soutenance en qualité d'experte.

Notice Analytique

AUTEUR			
Nom	TALLAS		
Prénom	Iman		
ORGANISME D'ACCUEIL			
Nom de l'organisme et Localité	CEA Paris Saclay		
Nom du Tuteur	Paul Jourda		
ANALYSE DU TFE			
Titre (français)	Modélisation des phénomènes physiques se produisant lors de la montée en température d'un déchets radioactif d'enrobés de boues bituminées.		
Titre (anglais)	Numerical modeling of the physical phenomena that occur when a nuclear bituminized waste products is heated.		
Résumé (français)	<p>Les déchets radioactifs d'enrobés de boues bituminées sont issus d'un processus de traitement des effluents liquides issus de l'activité des installations nucléaires. Ce sont des déchets de moyenne activité à vie longue. Lors de la montée en température de ces fûts nous pouvons distinguer 4 phénomènes : l'agression thermique des parois, l'agression thermique du bitume, le mouvement des inclusions sphériques (gaz et solides) dans le bitume et les réactions exothermiques se produisant entre les sels. Nous avons lié les deux premiers phénomènes à travers des conductions aux limites des flux thermiques. Le troisième dépend du champ des vitesses de l'enrobé bitumineux. Nous avons de ce fait pu créer un modèle reliant les 3 premiers phénomènes. Cela nous a permis de voir se mettre en place des structures convectives au sein de la matrice bitume.</p>		
Résumé (anglais)	<p>Nuclear bituminized waste products are produced by a treatment process of the liquid effluents coming from the operations of nuclear power plant. They are classified as long-lived intermediate-level waste. During the temperature increase we can identify 4 phenomena: the thermal stress of the walls, the thermal stress of the bitumen, the motion of the spherical inclusions (gas and liquid) and the exothermic reactions between salts. We linked the two first phenomena by considering the boundary conditions. The third one depends on the bitumen velocity field. We succeed to create a model connecting the 3 firsts phenomena. It allowed us to witness the implementation of convective structures among the bitumen.</p>		
Mots-clés (français, 5 maxi)	Convection, transferts thermiques, inclusions sphériques, réactions exothermiques		
Mots-clés (anglais, 5 maxi)	Convection, Heat tranfer, spherical inclusions, exothermic reactions		
COLLATION			
	Nb de pages	Nb d'annexes (nb de pages)	Nb de réf. biblio.
	93	6	39

Table des matières

Introduction.....	7
Théorie associée aux phénomènes à modéliser	8
A. Transferts thermiques.....	8
I. Agressions thermiques extérieurs des parois et conduction au sein des parois	8
1. Mise en équation.....	8
2. Modélisation.....	9
a. Conditions initiales	9
b. Conditions aux limites	9
II. Transferts conducto-convectifs au sein de la matrice bitume	11
1. Mise en équation.....	12
a. Mécanique des fluides.....	12
b. Convection thermique.....	12
c. Système d'équations final.....	14
2. Nombres caractéristiques	14
a. Nombre de Grashof	14
b. Nombre de Prandtl.....	14
c. Nombre de Rayleigh	15
3. Modélisation de la convection naturelle.....	15
a. Méthode numérique	15
b. Développement sans terme de création, viscosité dynamique constante	16
c. Développement sans terme de création, viscosité dynamique dépendant de la température	18
d. Variations des caractéristiques thermiques du fluide.....	21
B. Théorie des bulles de radiolyse et des sels issus du retraitement.....	22
I. Description du phénomène de radiolyse et simplifications.....	23
II. Mise en équation.....	23
1. Fluide au repos	23
2. Fluide en mouvement	24
C. Réactions exothermiques.....	25
Partie Pratique	27

A. Décomposition et identification des niveaux de modélisation.....	27
I. Agression thermique des parois et transferts thermiques interne par conduction	27
II. Mise en place du phénomène conducto-convectif au sein de la matrice bitume	28
III. Comportement des bulles et des sels	29
IV. Réactions exothermiques.....	30
B. Modélisations réalisées et résultats.....	31
I. Agressions thermiques des parois et transferts thermiques internes par conduction.....	31
1. Contributions des différents flux.....	32
2. La condition limite en température est commandé par un step.	33
a. La paroi inférieure est isolée du sol.....	33
b. Echanges conductifs entre la paroi supérieure et le sol.....	40
3. Comparaison avec la condition limite en température commandée par la courbe ISO 834.	48
4. Conclusion sur le rôle des parois et des conditions aux limites	50
II. Mise en place du phénomène conducto-convectif au sein de la matrice bitume	50
1. Transferts internes seulement conductifs.....	50
2. Etudes des nombres caractéristiques	53
3. Transferts internes conducto-convectifs à viscosité dynamique constante	56
a. Phénomène en 2D	Erreur ! Signet non défini.
b. Généralisation 3D.....	Erreur ! Signet non défini.
4. Transferts internes conducto-convectifs à viscosité dynamique variable	68
III. Comportement des bulles et des sels	69
1. Focus sur les bulles.....	69
a. Génération d'une population de bulles de H ₂ : loi statistique	69
b. Mouvement des bulles.....	74
2. Mouvement des sels	79
IV. Réactions exothermiques.....	Erreur ! Signet non défini.
Comparaison avec expériences.....	Erreur ! Signet non défini.
Conclusion	80
Annexes	85
A. Annexe 1 : Simplifications des calculs.....	85
B. Annexe 2 : Schéma des parois du fût	88

Tables des illustrations

Figure 1 : Photographies des fûts issus des essais de l'ANDRA [32].....	8
Figure 2 : Allure de la courbe de température iso 834.	10
Figure 3 : Evolution de la viscosité dynamique entre 20°C et 160°C.	21
Figure 4 : Schéma des forces s'exerçant sur une bulle.....	23
Figure 5 : Evolution du coefficient de traîné en fonction du nombre de Reynolds.	24
Figure 6 Schéma avec notation représentant le fût vu du dessus.	26
Figure 7 : Fût en acier noir laminé à froid de 15kg.....	31
Figure 8 : Fût en inox de 37,4kg.	31
Figure 9 : Schéma de la situation simplifiée permettant visualiser les transferts thermiques par convection et rayonnement.....	32
Figure 10 : Evolution des flux surfaciques radiatifs et convectifs en fonction de la température de chauffe et à température de paroi fixée.	33
Figure 11 : Schéma des agressions thermique que les parois du fût subissent lorsque le fût est isolé du sol.	34
Figure 12 : Température des parois supérieures au bout de 1h de chauffe.	34
Figure 13 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.	35
Figure 14 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.	35
Figure 15 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.....	36
Figure 16 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi latérale droite du fût à mi-hauteur.	36
Figure 17 : Température des parois supérieures au bout de 1h de chauffe.	37
Figure 18 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.	38
Figure 19 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.	38
Figure 20 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.....	39
Figure 21 : Evolution des températures aux positions P2.....	39
Figure 22 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi latérale droite du fût à mi-hauteur.	39
Figure 23 : Schéma indiquant les différentes natures des flux thermiques entre les objets considérés.....	40
Figure 24 : Evolution des températures à mi longueur au bout de 24h de chauffe de la parois inférieure en fonction de la hauteur.....	41

Figure 25 : Profil de température du béton au bout de 24h de chauffe à 695K par la limite inférieure (en $x=0$ et $z=0$).....	42
Figure 26 : Profil de température de l'acier composant les parois au bout de 24 de chauffe à 685K par la limite inférieure (en $x=0$ et $z=0$).....	42
Figure 27 : Evolution des température à mi-longueur et à mi-hauteur en fonction du temps.	43
Figure 28 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.	44
Figure 29 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.	Erreur ! Signet non défini.
Figure 30 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.....	44
Figure 31 : Evolution des températures aux positions P2.....	45
Figure 32 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi inférieure.	45
Figure 33 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.	46
Figure 34 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.	46
Figure 35 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.....	47
Figure 36 : Evolution des températures aux positions P2.....	47
Figure 37 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi inférieure.	47
Figure 38 : Evolution de la température des parois à la position 1.....	48
Figure 39 : Evolution de la température des parois à la position 2.....	49
Figure 40 : Evolution de la température des parois à la position 3.....	49
Figure 41 : Evolution de la température au sein de la matrice bitume pendant 24h.	52
Figure 42 : Evolution de la température de la matrice bitume au bout de 24h à $r=0$ en fonction de la hauteur.....	52
Figure 43 : Evolution de la température de la matrice bitume au bout de 24h à $z=0$ en fonction du rayon...	53
Figure 44 : Evolution du nombre de Prandtl avec la température.....	54
Figure 45 : Evolution du nombre de Grashof avec la température.....	55
Figure 46 : Evolution du nombre de Rayleigh avec la température.....	55
Figure 47 : Schéma exposant la configuration du mécanisme de convection de Rayleigh-Bénard [30].	56
Figure 48 : Image obtenue par micro-tomographie aux rayon X d'un échantillon d'enrobé STE3 ayant intégré une dose de 1 MGy.	70
Figure 49 : Pourcentage d'apparition des rayons des bulles (mm) pour un enrobé de type STEL avec une irradiation de 100 kGy.....	70
Figure 50 : Pourcentage d'apparition des rayons des bulles (mm) pour un enrobé de type STEL avec une irradiation de 150 kGy.....	71
Figure 51 : Pourcentage d'apparition des rayons des bulles (mm) pour un enrobé de type STEL avec une irradiation de 200 kGy.....	71

Figure 52 : Comparatif loi normal, probabilité d'apparition pour la STEL WB 100 kGy.	72
Figure 53 : Comparatif loi normal, probabilité d'apparition pour la STEL WB 150 kGy.	73
Figure 54 : Comparatif loi normal, probabilité d'apparition pour la STEL WB 200 kGy.	73
Figure 55 : Génération d'une population initiale de bulle dans l'enrobé bitumineux.	74
Figure 56 : Hauteur de la bulle en fonction du temps pour une matrice bitume à 22°C.	75
Figure 57 : Hauteur de la bulle en fonction du temps pour une matrice bitume à 22°C.	75
Figure 58 : Répartition de la population de bulle à t=368 ans viscosité à 22°C.	76
Figure 59 : Répartition de la population de bulle à t=0 viscosité à 22°C.	76
Figure 60 : Répartition de la population de bulle à t=184 ans viscosité à 22°C.	76
Figure 61 : Répartition de la population de bulle à t=737 ans viscosité à 22°C.	76
Figure 62 : Répartition de la population de bulle à t=0 ans viscosité à 100°C.	77
Figure 63 : Répartition de la population de bulle à t=737 ans viscosité à 100°C.	77
Figure 64 : Répartition de la population de bulle à t=737 ans viscosité à 22°C.	78
Figure 65 : Répartition de la population de bulle à t=737 ans viscosité à 22°C.	78

Introduction

Cigéo (Centre industriel de stockage géologique) est un projet de stockage de déchets radioactifs dans la couche géologique profonde, soit à environ 500m de profondeur. Il est prévu que ce site soit installé dans l'Est de la France, à la frontière entre la Meuse et la Haute-Marne. Ce choix de localisation est dû aux propriétés de confinement sur le long terme de la roche argileuse, qui est imperméable. Le principe est d'accueillir, de façon réversible pendant au moins 100 ans, puis de fournir un hébergement définitif aux déchets hautement radioactifs (HA) et à durée de vie longue (VL). L'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (Andra) est le maître d'ouvrage de ce projet, pour le compte de l'Etat.

Ce travail s'intéressera à un type de déchets en particulier qui sera stocké dans Cigéo : les déchets radioactifs d'enrobés de boues bituminées. Ce sont des déchets de moyenne activité à vie longue. Il existe au total 72 000 colis de déchets nucléaires de ce type. Ils sont issus du processus de traitement des effluents liquides issus de l'activité des installations nucléaires. Les radionucléides, présents dans les effluents liquides, sont précipités en présence de sels, comme le nitrate de sodium ou le magnésium. Cela conduit à l'obtention de boues de retraitement. Ces dernières sont ensuite séchées, puis les radionucléides et les sels sont immobilisés dans une matrice de bitume lors d'une opération d'enrobage. Ce processus a pour but de sécuriser le confinement de ces déchets sur une longue période. Ce mélange va ensuite être versé dans des fûts qui seront par la suite entreposés dans des installations dédiées. Pour finir, ces colis seront déposés à Cigéo, par quatre dans des colis en béton, dans des alvéoles.

La sûreté des colis bitumés repose notamment sur le maintien des caractéristiques de confinement de la matrice de bitume. Ce maintien doit être assuré dans le cas d'un incendie situé à proximité du fût d'enrobé et conduisant à son échauffement. Les possibilités de déclenchement de réaction exothermiques, pouvant conduire à des échauffements localisés doivent être étudiées. En effet, certains sels, comme les nitrates sont des oxydants susceptibles de réagir avec d'autres sels lors d'un échauffement important du bitume. Un risque de combustion se doit donc d'être envisagé dans le cas où l'augmentation de la température, due à l'apport simultané de chaleur par l'extérieur et localement par les réactions exothermiques, conduit à des valeurs dépassant 300°C en présence d'oxygène sous forme de gaz.

Afin d'évaluer cette question de sûreté, le Ministère de la Transition Ecologique et Solidaire et l'ASN (Autorité de Sûreté Nucléaire) ont organisé une revue internationale sur la gestion des déchets bituminés : la revue Fournier. Une de ses conclusions conduisait à la demande de travaux supplémentaires au CEA (Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies nouvelles) [1], en vue d'une meilleure caractérisation du comportement des déchets bituminés, notamment la réalisation d'un essai à l'échelle réelle, des essais à petites échelles ayant été préalablement réalisés. Mon travail s'inscrit dans cette commande. En amont de l'essai réelle à l'échelle 1, nous devons réaliser une modélisation englobant tous les phénomènes physiques se déroulant lors de l'échauffement d'un fût d'enrobé de boues bituminées.

Le processus peut ainsi être décrit. Lors d'une agression thermique des parois du fût due à un incendie, ces dernières s'échauffent et de la chaleur est transférée au contenu. L'enrobé, qui est un fluide très visqueux et très isolant, se réchauffe lentement comme un solide. Par la suite, un régime de convection va alors se mettre en place au sein de l'enrobé du fait de la baisse de la viscosité avec la température et de la présence de gradient de température interne au fût. Par ailleurs, la baisse de viscosité va permettre aux bulles de dihydrogène, créées par radiolyse du bitume et piégées dans la matrice de bitume, de s'échapper par la surface supérieure. Les sels, inclusions solides présentes dans l'enrobé, seront également concernés par les

transferts de masse. Pour finir, toujours à cause de l'échauffement, des réactions exothermiques peuvent avoir lieu au sein du de l'enrobé. Ces réactions peuvent modifier localement la température.



Figure 1 : Photographies des fûts issus des essais de l'ANDRA [39].

Ma mission va donc répondre aux problématiques suivantes : Comment traduire l'interdépendance de tous ces phénomènes au travers d'une modélisation numérique afin d'avoir une meilleure compréhension de comportement du fût lors d'un incendie ? Et plus particulièrement, sous quelles conditions le régime de convection se met-il en place ?

Pour ce faire, nous allons être amenée à décomposer le système afin de réaliser une modélisation pour chacun des phénomènes physiques séparément. Ensuite, il s'agira de déterminer comment chacun des phénomènes agit sur les autres et cela se fera par une étude des conditions limites ou un couplage des équations régissant les phénomènes physiques.

L'application de ce modèle sera donc finalement de fournir un modèle simplifié, mais complet, liant tous les phénomènes physiques se produisant au sein du fût.

Nous commencerons donc par une étude théorique de la physique régissant nos phénomènes et des conditions aux limites. Ensuite nous commenterons les résultats obtenus lors de nos modélisations. Enfin nous conclurons sur les faiblesses et les points d'améliorations de notre modèle.

Théorie associée aux phénomènes à modéliser

Cette partie s'intéresse à la théorie qui nous sera utile afin de construire un modèle numérique satisfaisant. Nous allons donc discuter dans un premier temps, sur les deux transferts thermiques intervenants dans notre modèle : la conduction ainsi que la convection naturelle. Nous évoquerons ensuite la théorie concernant le mouvement des bulles ainsi que celui des sels présents dans la matrice bitume. Pour finir, nous verrons comment les réactions exothermiques entre les sels jouent un rôle dans la montée en température.

A. Transferts thermiques

I. Agressions thermiques extérieurs des parois et conduction au sein des parois

Commençons par nous intéresser aux transferts thermiques ayant lieu au sein des parois du fût. Nous sommes donc en présence d'un matériau immobile et indéformable. De fait, les parois vont donc subir un échauffement se réalisant seulement par un phénomène de conduction.

1. Mise en équation

Les transferts par conduction s'effectuent sans déplacement global de matière à l'échelle macroscopique [2]. Ils sont motivés par les gradients de température, ce qui se traduit par la loi expérimentale de Fourier (1). Les transferts thermiques se font donc spontanément des régions de températures élevées vers celles de températures plus faibles.

$$\vec{\varphi} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}}(T) \quad (1)$$

Où $\vec{\varphi}$ est le vecteur densité de flux de chaleur (W.m^{-2}), λ la conductivité thermique ($\text{W} \cdot (\text{m.K})^{-1}$) et T la température (K). De plus, nous considérons tous nos matériaux comme isotropes, de fait la conductivité thermique ne dépend que de la température et non de l'espace.

Nous pouvons ensuite réaliser un bilan d'énergie afin d'obtenir l'équation suivante [3] :

$$\rho * C_p * \frac{\partial T}{\partial t} = -\text{div}(\vec{\varphi}) + q \quad (2)$$

Avec ρ la masse volumique (kg.m^{-3}), C_p la capacité thermique à pression constante ($\text{J} \cdot (\text{kg.K})^{-1}$) et q l'énergie produite au sein du fluide (W.m^{-3}). Notons que la température et le vecteur flux surfacique dépendent de

l'espace et du temps. A l'inverse, nous considérons que ρ et C_p sont des scalaires indépendants de la température car le milieu est isotrope. De plus, aucune création d'énergie n'intervient dans les parois en métal. L'énergie produite q est donc nulle.

La combinaison entre la loi de Fourier et un bilan d'énergie (2), nous permet d'obtenir l'équation de la chaleur suivante :

$$\rho * C_p * \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda * \Delta(T) \quad (3)$$

Nous pouvons alors introduire la diffusivité thermique a ($m^2.s^{-1}$).

$$a = \frac{\lambda}{\rho * C_p} \quad (4)$$

Nous avons alors, à partir de (3) et (4) :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a * \Delta(T) \quad (5)$$

2. Modélisation

Lors de la modélisation de la conduction thermique à travers les parois, nous avons choisi d'utiliser la fonction NDSolve de Mathematica afin de résoudre les équations différentielles. Nous n'aurons donc pas besoin d'utiliser de méthodes numériques explicitement.

Nous allons maintenant pouvoir nous attarder sur les conditions initiales ainsi que les conditions aux limites choisies pour implémenter notre code.

a. Conditions initiales

Nous considérons que notre fût est initialement à l'équilibre thermique. Les parois du fût sont donc à la même température que l'air ambiant, soit 22°C. De plus, le sol en béton est également considéré à 22°C.

b. Conditions aux limites

Dans notre scénario incendie, le fût n'est pas directement en contact du feu. C'est l'air ambiant qui est chauffé et qui chauffe à son tour le fût. Nous considérons que la montée en température de l'air est commandée par la courbe ISO 834 [4]. Cette courbe est utilisée pour décrire un scénario incendie où peu d'informations sont disponibles sur le feu. Nous considérons alors que le feu ne dépend pas des conditions de ventilation et qu'il n'a pas de déclin tant que les matériaux combustibles ne manquent pas. Nous adoptons donc une approche conservatrice. L'équation de la courbe ISO 834 est la suivante, avec θ la température en °C et t le temps en minute.

$$\theta = 20 + 345 * \log_{10}(8t + 1) \quad (6)$$

L'évolution de la température de l'air ambiant lors du scénario incendie sera donc décrite par la courbe suivante :



Figure 2 : Allure de la courbe de température ISO 834.

Pour décrire l'agression thermique extérieure des parois du fût, plusieurs phénomènes sont alors à prendre en compte.

Le premier constitue le rayonnement produit par l'air ambiant. Le second phénomène est lié aux échanges convectifs entre l'air ambiant et les parois. Pour finir, des échanges conductifs entre les parois et le sol en béton, sont à envisager.

i. Les échanges par rayonnement thermique

Le rayonnement est un mode de transfert thermique correspondant à un flux d'ondes électromagnétiques émises par un corps. Les échanges radiatifs s'expriment à travers le flux surfacique $\varphi_{radiatifs}$ ($W.m^{-2}$) [5].

$$\varphi_{radiatifs} = \sigma * \varepsilon * (T_p^4 - T_f^4) \quad (7)$$

Avec σ la constante de Stefan-Boltzmann ($W.m^{-2}.K^{-4}$), T_p (K) la température au niveau de la paroi et T_f (K) la température du fluide et ε l'émissivité.

Or le flux peut également s'exprimer ainsi au niveau de l'interface, la chaleur se propageant par conduction au sein de la paroi :

$$\varphi_{radiatifs} = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{paroi} \quad (8)$$

Nous avons donc finalement la relation :

$$\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{paroi} = \sigma * \varepsilon * (T_f^4 - T_p^4) \quad (9)$$

ii. Les échanges par convection thermique

Les échanges par convection entre le gaz et les parois, sont modélisés par la relation de Newton [6]. Cette dernière permet d'obtenir la densité de flux de chaleur $\varphi_{convection}$ ($W.m^{-2}$) échangée par convection :

$$\varphi_{convection} = h (T_p - T_f) \quad (10)$$

Où h est le coefficient d'échange ($W.m^{-2}.K^{-1}$).

De même que précédemment, nous avons donc :

$$\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{paroi} = h (T_f - T_p) \quad (11)$$

iii. Interactions des échanges aux parois

Dans notre situation, les parois latérales et supérieure du fût subissent une double agression. Une par convection et l'autre par rayonnement. Lorsque nous considérons un problème en deux dimensions alors le flux est donné par la loi suivante :

$$\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{paroi} = h (T_f - T_p) + \sigma * \varepsilon * (T_f^4 - T_p^4)$$

iv. Les échanges par conduction thermique entre deux solides

Pour finir, arrêtons-nous sur les échanges thermiques entre le sol en béton et les parois du fût. Ce sont des échanges par conduction entre deux solides [5]. La condition de passage entre ces deux solides, est donnée par la loi de conservation de la chaleur de part et d'autre de la frontière. Nous avons donc :

$$\lambda_1 \left(\frac{\partial T_1}{\partial n} \right)_{paroi} = \lambda_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial n} \right)_{paroi} \quad (12)$$

Avec λ_1, λ_2 les conductivités thermiques des solides 1 et 2 et T_1, T_2 les distributions de température des deux solides.

II. Transferts conducto-convectifs au sein de la matrice bitume

Nous considérons la matrice bitume comme un fluide visqueux, de viscosité dynamique η (Pa.s). De ce fait, les équations de la mécanique des fluides vont régir son mouvement. Les mouvements sont limités par les parois métalliques du fût. Notre système est initialement à une température T_i de 22°C. Dans cette configuration, l'enrobé est initialement très visqueux, sa viscosité dynamique η_0 est de $1,59.10^7$ Pa.s [7]. Cet enrobé va être chauffé lors de notre modélisation. C'est pourquoi nous évoquerons les phénomènes thermodynamiques qui vont alors se produire et qui sont à l'origine du transfert de masse. Pour finir, nous allons décrire dans cette partie, certains nombres adimensionnels nous permettant de caractériser l'écoulement ainsi que de simplifier les schémas numériques retenus.

1. Mise en équation

a. Mécanique des fluides

La mécanique des fluides est une branche de la mécanique des milieux continus. Elle consiste en l'étude du mouvement ou de la statique des gaz et des liquides et se base sur deux lois de conservation [8]. La première est la loi de conservation de la masse et la seconde est la loi de conservation du mouvement. Elles nous permettent d'obtenir, respectivement, les relations suivantes :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div}(\vec{U}) = 0 \quad (13)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot \vec{U} \right) = -\overrightarrow{\operatorname{grad}} P + \operatorname{div}(\eta \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\vec{U})) + \vec{f} \quad (14)$$

Avec ρ la densité volumique ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), \vec{U} le vecteur vitesse du fluide, P la pression et \vec{f} les autres forces volumiques éventuelles.

Dans notre cas, nous estimons que l'enrobé est un fluide incompressible. Cela se traduit par le une densité volumique ρ constante par rapport au temps. En reprenant (1) avec cette hypothèse, nous obtenons alors :

$$\operatorname{div}(\vec{U}) = 0 \quad (15)$$

b. Convection thermique

Nous nous intéresserons ici à la convection thermique sans changement d'état [9]. A l'inverse de la conduction, le transfert thermique convectif nécessite un mouvement des particules. Il existe deux types de convection, la convection naturelle ainsi que la convection forcée. Nous évoquerons la première au paragraphe suivant. La seconde consiste en la mise en mouvement d'un fluide, indépendamment des gradients de température.

Afin d'obtenir l'équation de la chaleur régissant le phénomène de convection, il suffit de rajouter un terme de transfert de masse $(\vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot T$ à l'équation de la conduction thermique (5).

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot T = a \Delta T + \frac{q}{\rho * C_p} \quad (16)$$

Précisons également que dans le cas où vitesse est nulle ou que le terme $(\vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot T$ est négligeable devant $a \Delta T$, le phénomène est régi par la conduction thermique. Nous retrouvons donc l'équation de la chaleur dans ce cas-là.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \Delta T + \frac{q}{\rho * C_p} \quad (17)$$

i. Couplage des équations de Navier Stokes et de la chaleur

Lors de ce travail de fin d'étude, l'un de nos objectifs va être d'étudier la mise en place du régime de transport de masse au sein de la matrice bitume. Ce phénomène, connu sous le nom de *convection naturelle*, est induit par un gradient de température [10].

Pourtant, en première approche, les équations de Navier Stokes (14) et de la thermique (17) **Erreur ! Source du renvoi introuvable.** semblent découplées. Cela est dû au fait que nous n'avons pas pris en compte, jusqu'à présent, la dilatibilité du fluide. En effet, la densité volumique va être fonction de la température et de la pression. Les variations de température vont donc provoquer des variations de densité volumique. Ces dernières vont alors créer une force d'Archimède, origine principale du mouvement.

ii. Variation de la masse volumique

La masse volumique peut donc être linéarisée en fonction de la température et de la pression au voisinage de T_0 et P_0 , respectivement les température et pression de références. Nous effectuons donc le développement de Taylor au premier ordre de la masse volumique autour de $\rho_0 = \rho[T_0, P_0]$ avec T_0 et P_0 [11].

$$\rho[T, P] = \rho_0(1 - \alpha * (T - T_0) + \beta * (P - P_0)) \quad (18)$$

Avec α coefficient de dilatation à pression constante (K^{-1}) et β le coefficient de compressibilité à température constante (atm^{-1}).

$$\alpha = -\frac{1}{P} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P \text{ et } \beta = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T \quad (19)$$

Revenons maintenant à notre modèle. Dans le cas de l'enrobé bitumineux, nous pouvons réécrire (16), en estimant que la seule force volumique agissant sur le fluide est la force de gravité par unité de volume. Nous obtenons alors l'équation (20).

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{grad}) \cdot \vec{U} \right) = -\overrightarrow{grad}P + div \left(\eta \overrightarrow{grad}(\vec{U}) \right) + \rho \vec{g} \quad (20)$$

iii. Approximation de Boussinesq

Afin de simplifier notre modèle, nous avons choisi d'adopter l'approximation de Boussinesq. Toutes les constantes thermiques, à l'exception de la masse volumique, sont considérées indépendantes de la température. De plus, selon Boussinesq, la masse volumique ne dépend que de la température et ses variations sont négligées, mise à part pour le terme de gravité [12]. Nous avons alors la simplification suivante de l'expression de la masse volumique :

$$\rho[T] = \rho_0(1 - \alpha * (T - T_0)) \quad (21)$$

Cela nous permet d'écrire la pression hydrostatique de la manière suivante :

$$P^* = \frac{P}{\rho_0} - gz \quad (22)$$

Enfin, nous obtenons l'équation finale du champ des vitesses :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{grad}) \cdot \vec{U} = -\overrightarrow{grad}(P^*) + div \left(\nu \overrightarrow{grad}(\vec{U}) \right) - \alpha * (T - T_0) \vec{g} \quad (23)$$

Avec $\nu = \frac{\eta}{\rho_0}$, ν étant la viscosité dynamique ($m^2.s^{-1}$).

La force à l'origine du mouvement est donc de la forme $\alpha * (T - T_0) \vec{g}$.

c. Système d'équations final

Nous avons donc finalement le système d'équations suivant modélisant la convection naturelle.

$$\begin{cases} \text{div}(\vec{U}) = 0 \\ \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot \vec{U} = -\overrightarrow{\text{grad}} \left(\frac{P}{\rho_0} - gz \right) + \text{div} \left(\frac{\eta}{\rho_0} \overrightarrow{\text{grad}}(\vec{U}) \right) - \alpha * (T - T_0) \vec{g} \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot T = a \Delta T + \varphi_s \end{cases} \quad (24)$$

2. Nombres caractéristiques

Afin de mieux caractériser l'écoulement dans notre situation, nous allons nous appuyer sur des nombres adimensionnés. Ces nombres vont nous permettre de mieux comprendre les phénomènes physiques prédominants. A terme, ils pourront nous être utiles dans la simplification des équations. Nous évoquerons ici les nombres de Rayleigh, de Grashof et de Prandtl. Les valeurs de ces nombres vont nous permettre de faire des choix dans notre modélisation. En effet, ils nous donnent des indications sur les phénomènes physiques prédominants et peuvent conduire à des simplifications dans nos équations.

a. Nombre de Grashof

Le nombre de Grashof est l'analogie du nombre de Reynolds en convection naturelle. Il donne le rapport entre le terme induisant le mouvement sur celui de dissipation mécanique [13]. Il s'exprime donc de la manière suivante, avec L_c une longueur caractéristique globale, T_p la température de paroi et T_0 la température du fluide au repos :

$$Gr = \frac{\alpha * g * (T - T_0) * L_c^3}{\nu^2} \quad (25)$$

Tout comme le nombre de Reynolds, le nombre de Grashof va donc permettre de décrire la transition du régime laminaire au régime turbulent.

b. Nombre de Prandtl

La comparaison entre la viscosité cinématique et la diffusivité thermique est donnée par le nombre de Prandtl [3].

$$Pr = \frac{\nu}{a} \quad (26)$$

Il peut également être appréhendé comme le rapport entre le temps caractéristique de diffusion thermique sur celui de la diffusion de la quantité de mouvement. Il traduit donc l'importance relative de l'advection et de la diffusion thermique qui sont les deux mécanismes par lesquels la convection s'effectue. Le champ des vitesses a donc une influence d'autant plus faible que le nombre de Prandtl décroît.

De plus, le nombre de Prandtl dépend uniquement des propriétés physiques du fluide. Il est très faible pour les métaux liquides très conducteurs, environ de l'ordre de 10^{-2} . Les huiles très lourdes ont un nombre de

Prandtl dépassant 10^3 . Pour finir, il est voisin de 0.7 pour les gaz et de l'ordre de l'unité pour les liquides usuels, comme l'eau par exemple.

c. Nombre de Rayleigh

Ce nombre quantifie, tout comme le nombre de Grashof la compétition entre la force de flottabilité, source du mouvement, et les effets dissipatifs. Néanmoins, quand le nombre de Grashof ne tient compte que de la dissipation due aux forces de viscosité, le nombre de Rayleigh fait également apparaître celle due à la diffusion thermique [13].

$$Ra = \frac{\alpha * g * (T - T_0) * L_c^3}{\nu * a} \quad (27)$$

Lorsque ce nombre est faible, le transfert de chaleur est assuré par la conduction seule.

3. Modélisation de la convection naturelle

Pour le phénomène de convection naturelle, les équations sont trop complexes pour pouvoir uniquement s'appuyer sur le solveur de Mathematica pour la résolution. Nous avons donc choisi de nous appuyer sur des méthodes de résolutions numériques pour la discrétisation temporelle. Pour ce faire, nous avons utilisé deux méthodes de discrétisation temporelle. Dans un premier temps, afin d'obtenir la première itération temporelle, nous utiliserons le schéma d'Euler semi-implicite. Puis, pour les itérations suivantes ce sera le schéma d'Adam Bashforth Crank Nicholson d'ordre 2.

a. Méthode numérique

Nous allons maintenant décrire les méthodes numériques utilisées afin de discrétiser temporellement notre problème.

i. Méthode d'Euler semi-implicite

Considérons une fonction f . Elle est donnée par l'équation suivante, L et NL étant respectivement des opérateurs linéaire et non linéaire :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = L(f) + NL(f) \quad (28)$$

Les conditions initiales sont renseignées à travers l'itération 0, f^0 . Ensuite, l'obtention de la première itération est réalisée par la méthode d'Euler semi-implicite. Ce schéma a été choisi car il nécessite seulement de connaître l'itération à l'ordre précédent, c'est-à-dire à l'ordre 0.

Cette méthode nous donne la discrétisation suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = L(f) + NL(f) \Rightarrow \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = L^{n+1}(f^{n+1}) + NL^n(f^n) \quad (29)$$

ii. Méthode d'Adam Bashforth, Crank Nicholson d'ordre 2

Pour les itérations temporelles d'ordres supérieurs, nous avons choisi un schéma d'Adams Bashforth d'ordre 2 (AB2) pour les termes non linéaires et de Crank Nicholson (CN2), d'ordre 2 également, pour les termes linéaires. Le but de cette méthode est de mélanger schéma explicite AB2 et explicite CN2 afin d'avoir une méthode de résolution stable. Cette méthode, bien que très efficace, nécessite de connaître l'itération n-1 et n afin de déterminer l'itération n+1. Elle ne pouvait donc pas être utilisée pour déterminer l'itération n°1.

Le schéma d'AB2CN2 nous donne la discrétisation suivante :

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = \frac{L^{n+1} + L^n}{2} + \frac{3NL^n - NL^{n-1}}{2} \quad (30)$$

Une fois cette discrétisation spatiale effectuée, nous utilisons le solveur NDSolve de Mathematica afin de résoudre à chaque itération les équations devenues stationnaires.

b. Développement sans terme de création, viscosité dynamique constante

Nous commencerons par modéliser la convection libre dans le cas où le terme source est nul et la viscosité dynamique est constante. Nous partons alors des équations suivantes :

$$\text{div}(\vec{U}) = 0 \quad (31)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot \vec{U} = -\overrightarrow{\text{grad}}P^* + \alpha * g * (T - T_0) \vec{e}_z + \nu \Delta \vec{U} \quad (32)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot T = a * \Delta T \quad (33)$$

i. Initialisation et premier pas

Nous pouvons fixer U^0 , V^0 , W^0 , P^0 et T^0 , respectivement les vitesses horizontales et verticale initiales, la pression initiale et la température initiale. Ensuite, nous utilisons le schéma d'Euler semi-implicite. Cela nous permet d'obtenir le système d'équations suivant :

$$T^1 - T^0 + dt * (\overrightarrow{U^0} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot T^0 = dt * a * \Delta T^1 \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \vec{U}^1 - \vec{U}^0 + dt * (\overrightarrow{U^0} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot \vec{U}^0 \\ = -dt * \overrightarrow{\text{grad}}P + dt * \alpha * g * (T^1 - T_0) \vec{e}_z + dt * \nu \Delta \vec{U}^1 \end{aligned} \quad (35)$$

$$\text{div}(\vec{U}^1) = 0 \quad (36)$$

Or, nous avons choisi de considérer un fût initialement immobile à l'équilibre thermique. Nous avons donc U^0, V^0, W^0 les vitesses initiales nulles ainsi que $T^0 = 20^\circ\text{C}$. Cela va nous permettre de simplifier les équations (34) et (35) de la façon suivante :

$$T^1 - T^0 = dt * a * \Delta T^1 \quad (37)$$

$$\overline{U}^1 = -dt * \overline{grad}P + dt * \alpha * g * (T^1 - T_0) \overline{e_z} + dt * \nu \Delta \overline{U}^1 \quad (38)$$

Nous constatons de plus, que cette décomposition n'est pas suffisante pour avoir une discrétisation temporelle satisfaisante. En effet, nous n'avons pas d'équation pour la pression et l'équation (36) complexifie le problème. Afin de palier à ce problème, nous avons choisi de considérer la divergence de l'équation (38), c'est la méthode de « séparation » [14]. Cela nous permet d'obtenir l'équation suivante :

$$div(\overline{U}^1) = -dt * \Delta P + dt * \alpha * g * \frac{\delta T^1}{\delta z} + dt * \nu * div(\Delta \overline{U}^1) \quad (39)$$

Or, comme les opérateurs divergence et Laplacien commutent et en appliquant la condition d'incompressibilité, nous obtenons :

$$\Delta P = \alpha * g * \frac{\delta T^1}{\delta z} \quad (40)$$

ii. Itérations d'ordres supérieurs

Repartons des équations (15), (32) et (33). Cette fois-ci, nous allons utiliser le schéma AB2CN2 afin de discrétiser notre problème. Nous obtenons alors les équations suivantes :

$$div(\overline{U}^{n+1}) = 0 \quad (41)$$

$$\begin{aligned} T^{n+1} - T^n + dt * 0.5 * [3 * (\overline{U}^n \cdot \overline{grad}) \cdot T^n - (\overline{U}^{n-1} \cdot \overline{grad}) \cdot T^{n-1}] \\ = 0.5 * dt * a * (\Delta T^{n+1} + \Delta T^n) \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \overline{U}^{n+1} - \overline{U}^n + dt * 0.5 * [3 * (\overline{U}^n \cdot \overline{grad}) \cdot \overline{U}^n - (\overline{U}^{n-1} \cdot \overline{grad}) \cdot \overline{U}^{n-1}] \\ = -dt * \overline{grad}P + dt * \alpha * g * 0.5 * (T^{n+1} + T^n) \overline{e_z} - dt * \alpha * g \\ * T_0 \overline{e_z} + dt * 0.5 * \nu * (\Delta \overline{U}^{n+1} + \Delta \overline{U}^n) \end{aligned} \quad (43)$$

Cette discrétisation présente le même problème que précédemment, les valeurs de la pression ne sont pas connues. Nous allons donc suivre la même démarche. Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned}
 & \text{div}(\overline{U^{n+1}}) - \text{div}(\overline{U^n}) + dt * 0.5 \\
 & * \text{div} \left[3 * (\overline{U^n} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U^n} - (\overline{U^{n-1}} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U^{n-1}} \right] \\
 & = -dt * \Delta P + dt * \alpha * g * 0.5 * \frac{\delta}{\delta z} (T^{n+1} + T^n) + dt * 0.5 * \nu \\
 & * \text{div}(\Delta \overline{U^{n+1}} + \Delta \overline{U^n})
 \end{aligned} \tag{44}$$

Comme précédemment la divergence et le Laplacien commute et $\text{div}(\overline{U^{n+1}}) = 0$. Cela va nous permettre de supprimer les termes en rouge. Cependant, nous avons choisi de laisser le terme en vert. En effet, inclure ce terme permet de diminuer les erreurs d'arrondis, de minimiser celles découlant des conditions initiales mais aussi de gérer les éventuels problèmes causés par les conditions aux limites [15]. De plus, toujours pour prendre en compte l'incompressibilité du fluide, nous devons retrancher $\overline{U^i} \cdot \overline{\text{grad}}[\text{div}(\overline{U^i})]$ au terme $\text{div}[(\overline{U^i} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U^i}]$ (Voir Annexe 1).

Nous obtenons finalement le système d'équations suivant :

$$\begin{aligned}
 & T^{n+1} - T^n + dt * 0.5 * \left[3 * (\overline{U^n} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot T^n - (\overline{U^{n-1}} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot T^{n-1} \right] \\
 & = 0.5 * dt * a * (\Delta T^{n+1} + \Delta T^n)
 \end{aligned} \tag{45}$$

$$\begin{aligned}
 & \Delta P - \frac{\text{div}(\overline{U^n})}{dt} + 0.5 \\
 & * \left[3 * \left[\text{div}(\overline{U^n} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U^n} - \overline{U^n} \cdot \overline{\text{grad}}[\text{div}(\overline{U^n})] \right] \right. \\
 & \left. - \left[\text{div}(\overline{U^{n-1}} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U^{n-1}} - \overline{U^{n-1}} \cdot \overline{\text{grad}}[\text{div}(\overline{U^{n-1}})] \right] \right] \\
 & = \alpha * g * 0.5 * \frac{\delta}{\delta z} (T^{n+1} + T^n)
 \end{aligned} \tag{46}$$

$$\begin{aligned}
 & \overline{U^{n+1}} - \overline{U^n} + dt * 0.5 * \left[3 * (\overline{U^n} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U^n} - (\overline{U^{n-1}} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U^{n-1}} \right] \\
 & = -dt * \overline{\text{grad}}P + dt * \alpha * g * 0.5 * (T^{n+1} + T^n) \overline{e_z} - dt * \alpha * g \\
 & * T_0 \overline{e_z} + dt * 0.5 * \nu * (\Delta \overline{U^{n+1}} + \Delta \overline{U^n})
 \end{aligned} \tag{47}$$

c. Développement sans terme de création, viscosité dynamique dépendant de la température

Nous allons cette fois considérer que la viscosité dynamique est variable et qu'elle dépend de la température. L'équation de la chaleur ainsi que ses discrétisations temporelles restent inchangées. A l'inverse l'équation de Navier Stokes, s'écrit ainsi :

$$\frac{\partial \overline{U}}{\partial t} + (\overline{U} \cdot \overline{\text{grad}}) \cdot \overline{U} = -\overline{\text{grad}}(P^*) + \text{div}(\nu \overline{\text{grad}}(\overline{U})) - \alpha * (T - T_0) \overline{g} \tag{48}$$

i. Initialisation et première itération

Cela nous donne donc la discrétisation temporelle suivante pour le premier pas :

$$\begin{aligned} \overline{U^1} - \overline{U^0} + dt * (\overline{U^0} \cdot \overline{grad}) \cdot \overline{U^0} \\ = -dt * \overline{grad}(P^*) + dt * div(v^0 \overline{grad}(\overline{U^0})) - dt * \alpha \\ * (T^1 - T_0) \overline{g} \end{aligned} \quad (49)$$

Après prise en compte des conditions initiales, nous avons donc :

$$\overline{U^1} = -dt * \overline{grad}(P^*) - dt * \alpha * (T^1 - T_0) \overline{g} \quad (50)$$

De même que précédemment, nous écrivons $div(50)$ en considérant la condition d'incompressibilité. Nous obtenons :

$$\Delta P^* = -\alpha * \frac{\delta T^1}{\delta z} \overline{g} \quad (51)$$

ii. Itérations d'ordres supérieurs

Pour ce qui est de la discrétisation temporelle pour les itérations d'ordres supérieurs, le schéma d'AB2CN2 donne :

$$\begin{aligned} \overline{U^{n+1}} - \overline{U^n} + dt * 0.5 * [3 * (\overline{U^n} \cdot \overline{grad}) \cdot \overline{U^n} - (\overline{U^{n-1}} \cdot \overline{grad}) \cdot \overline{U^{n-1}}] \\ = -dt * \overline{grad}(P^*) + dt * 0.5 \\ * [3 * div(v^n \overline{grad}(\overline{U^n})) - div(v^{n-1} \overline{grad}(\overline{U^{n-1}}))] - dt * \alpha \\ * 0.5 * (T^{n+1} + T^{n+1}) \overline{g} + dt * \alpha * T_0 * \overline{g} \end{aligned} \quad (52)$$

En prenant la divergence de cette équation, nous obtenons alors l'équation suivante pour la pression :

$$\begin{aligned} -div(\overline{U^n}) + dt * 0.5 \\ * [3 * [div(\overline{U^n} \cdot \overline{grad}) \cdot \overline{U^n} - \overline{U^n} \cdot \overline{grad}[div(\overline{U^n})]] \\ - [div(\overline{U^{n-1}} \cdot \overline{grad}) \cdot \overline{U^{n-1}} - \overline{U^{n-1}} \cdot \overline{grad}[div(\overline{U^{n-1}})]]] \\ = -dt * \Delta P^* + dt * 0.5 \\ * div[3 * div(v^n \overline{grad}(\overline{U^n})) - div(v^{n-1} \overline{grad}(\overline{U^{n-1}}))] - dt \\ * \alpha * 0.5 * \frac{\delta}{\delta z} (T^{n+1} + T^{n+1}) \overline{g} \end{aligned} \quad (53)$$

Or nous pouvons considérer le développement suivant (Voir Annexe 1) :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \left[\operatorname{div} \left(v^i \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^i}) \right) \right] \\ = v^i \operatorname{div}(\Delta \overline{U^i}) + \Delta \overline{U^i} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^i) + \operatorname{div} \left[\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^i}) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^i) \right] \end{aligned} \quad (54)$$

De plus, d'après la condition d'incompressibilité $\operatorname{div}(\Delta \overline{U^i}) = \Delta(\operatorname{div} \overline{U^i}) = 0$. D'où :

$$\operatorname{div} \left[\operatorname{div} \left(v^i \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^i}) \right) \right] = \Delta \overline{U^i} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^i) + \operatorname{div} \left[\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^i}) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^i) \right] \quad (55)$$

Nous avons finalement l'équation suivante :

$$\begin{aligned} dt * \Delta P^* - \operatorname{div}(\overline{U^n}) + dt * 0.5 \\ * \left[3 * \left[\operatorname{div}(\overline{U^n} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot \overline{U^n} - \overline{U^i} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}[\operatorname{div}(\overline{U^i})] \right] \right. \\ \left. - \left[\operatorname{div}(\overline{U^{n-1}} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot \overline{U^{n-1}} - \overline{U^{n-1}} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}[\operatorname{div}(\overline{U^{n-1}})] \right] \right] \\ = dt * 0.5 \\ * \left[3 * (\Delta \overline{U^n} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^n) + \operatorname{div}[\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^n}) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^n)]) \right. \\ \left. - (\Delta \overline{U^{n-1}} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^{n-1}) + \operatorname{div}[\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^{n-1}}) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^{n-1})]) \right] \\ - dt * \alpha * 0.5 * \frac{\delta}{\delta z} (T^{n+1} + T^{n+1}) \vec{g} \end{aligned} \quad (56)$$

Notre système de décompositions temporelles est donc le suivant :

$$\begin{aligned} T^{n+1} - T^n + dt * 0.5 * \left[3 * (\overline{U^n} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot T^n - (\overline{U^{n-1}} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot T^{n-1} \right] \\ = 0.5 * dt * a * (\Delta T^{n+1} + \Delta T^n) \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} dt * \Delta P^* - \operatorname{div}(\overline{U^n}) + dt * 0.5 \\ * \left[3 * \left[\operatorname{div}(\overline{U^n} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot \overline{U^n} - \overline{U^i} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}[\operatorname{div}(\overline{U^i})] \right] \right. \\ \left. - \left[\operatorname{div}(\overline{U^{n-1}} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot \overline{U^{n-1}} - \overline{U^{n-1}} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}[\operatorname{div}(\overline{U^{n-1}})] \right] \right] \\ = dt * 0.5 \\ * \left[3 * (\Delta \overline{U^n} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^n) + \operatorname{div}[\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^n}) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^n)]) \right. \\ \left. - (\Delta \overline{U^{n-1}} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^{n-1}) + \operatorname{div}[\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\overline{U^{n-1}}) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^{n-1})]) \right] \\ - dt * \alpha * 0.5 * \frac{\delta}{\delta z} (T^{n+1} + T^{n+1}) \vec{g} \end{aligned} \quad (58)$$

$$\begin{aligned}
 \overline{U}^{n+1} - \overline{U}^n + dt * 0.5 * [3 * (\overline{U}^n, \overline{grad}) \cdot \overline{U}^n - (\overline{U}^{n-1}, \overline{grad}) \cdot \overline{U}^{n-1}] \\
 = -dt * \overline{grad}(P^*) + dt * 0.5 \\
 * [3 * \text{div}(\nu^n \overline{grad}(\overline{U}^n)) - \text{div}(\nu^{n-1} \overline{grad}(\overline{U}^{n-1}))] - dt * \alpha \\
 * 0.5 * (T^{n+1} + T^{n-1}) \vec{g} + dt * \alpha * T_0 * \vec{g}
 \end{aligned} \tag{59}$$

d. Variations des caractéristiques thermiques du fluide.

A travers ce paragraphe, nous allons justifier notre choix de considérer seulement les variations de viscosité dynamique avec la température. Pour ce faire, nous allons étudier les variations des différents paramètres sur une plage de température variant de 20°C à 160°C.

i. Variation de viscosité dynamique

Commençons par la viscosité dynamique. L'évolution de cette dernière est donnée par la loi suivante [16] :

$$\eta[T] = \eta_0 * \exp\left[\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \tag{60}$$

Avec η_0 la viscosité dynamique de référence, égale à $1,59 \cdot 10^7$ Pa.s à la température de référence T_0 de 22°C, R la constante des gaz parfait ($8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) et E_a l'énergie d'activation de $155 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

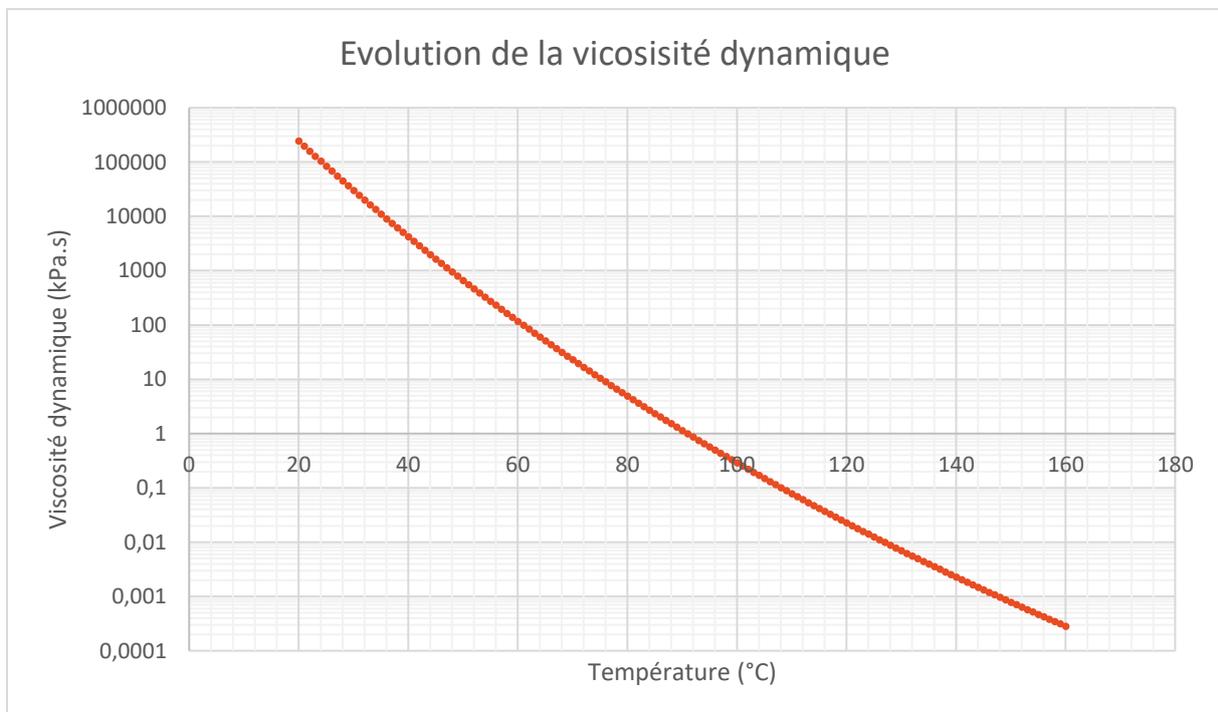


Figure 3 : Evolution de la viscosité dynamique entre 20°C et 160°C.

Nous observons au maximum, sur cette plage de température, un écart à la moyenne de 2573%.

Nous pouvons également noter, à titre de référence, que la viscosité dynamique de l'eau, à 20°C, est de 10⁻³ Pa.s et celle du miel est de 10 Pa.s à 20°C.

ii. Variation de conductivité thermique

Passons maintenant à la conductivité thermique. C'est la constante thermophysique caractérisant le transfert de chaleur par conduction dans un matériau. Elle permet de quantifier la quantité de chaleur transférée par unité de surface et de temps, sous l'effet de la température.

Il a été observé [17], que la conductivité des enrobés bitumineux, commence par augmenter entre 20°C et 120°C, puis diminue entre 120°C et 160°C. Cela peut s'expliquer de deux manières. La première est le passage de l'état solide à l'état liquide de l'enrobé. En effet, pour un solide, la conductivité augmente avec la température, tandis que, pour un liquide, elle diminue. La production de gaz à fortes températures est la seconde hypothèse. Les gaz sont de mauvais conducteurs, mais leurs conductivités augmentent avec la température.

Pour finir, nous observons des conductivités variant entre 0,21 W.m⁻¹.C⁻¹ et 0,32 W.m⁻¹.C⁻¹ et l'écart à la moyenne est, au maximum, de 15,3%. Nous avons retenu une conductivité de 0.25 W.m⁻¹.°C⁻¹ pour notre modèle.

iii. Variation de capacité thermique

La capacité thermique est la quantité d'énergie nécessaire pour augmenter d'un degré la température d'une unité massique d'un corps.

$$C_p = T \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \quad (61)$$

Avec H l'enthalpie (J).

Cette grandeur augmente de façon quasi linéaire avec la température [17]. La variation maximum à la capacité thermique moyenne est de 10,3%. Pour notre échantillon, nous avons choisi une capacité thermique de l'ordre de 1500 J.kg⁻¹.K⁻¹.

iv. Conclusion

D'après les observations précédentes, nous voyons clairement que la viscosité dynamique est le paramètre ayant l'évolution la plus importante sur la plage de température qui nous intéresse. En effet, là où les variations à la moyenne sont de l'ordre de la dizaine de pourcentage pour la conductivité et la capacité thermique, elle est de 2573% pour la viscosité dynamique. C'est donc le paramètre dont les variations doivent être prises en compte.

B. Théorie des bulles de radiolyse et des sels issus du retraitement

Notre but, dans cette partie, va être de comprendre le comportement d'une population de bulle de dihydrogène et de sel dans un fluide visqueux. Pour ce faire, nous allons procéder en 2 temps. Nous allons d'abord étudier le cas des bulles puis nous généraliserons au cas des solides.

I. Description du phénomène de radiolyse et simplifications

Lors de leur entreposage temporaire, les enrobés bitumineux sont soumis à un rayonnement dû aux radionucléides. Ce phénomène, en plus de modifier la viscosité de la matrice bitume, provoque la radiolyse du bitume. Ce qui conduit à la formation de bulle d'hydrogène [18]. Nous négligerons l'effet des bulles et des sels sur les transferts thermiques. Nous estimerons également que les bulles et les sels n'ont pas d'impact sur la trajectoire du fluide.

II. Mise en équation

Afin d'obtenir l'équation régissant le mouvement d'une population de bulle, nous allons étudier le bilan des forces s'exerçant sur une unique bulle.

Considérons donc une sphère solide, de masse volumique ρ_b (kg.m⁻³), de volume V_b (m³), et de rayon R (m), dans un fluide au repos de masse volumique ρ_f (kg.m⁻³). Cette bulle subit les forces suivantes, avec g la constante de gravitation terrestre (m.s⁻²):

- La force de gravité qui s'exprime sous la forme suivante :

$$\vec{P} = \rho_b * V_b * \vec{g} \tag{62}$$

- La poussée d'Archimède

$$\vec{F}_a = -V_b * \rho_f * \vec{g} \tag{63}$$

- La force de traînée exercée par le fluide sur la sphère \vec{F}_D

1. Fluide au repos

Pour cette première situation, nous considérons que le fluide entourant la sphère est au repos. L'écoulement est donc stationnaire et uniforme. Dans ce cas, nous pouvons facilement exprimer la force de traînée \vec{F}_D . Son expression est la suivante [19] :

$$\vec{F}_D = -\frac{1}{2} \rho_f * C_x(Re) * \pi * R^2 * v^2 * \vec{U}_z \tag{64}$$

Avec v la vitesse de la bulle (en m².s⁻¹) et $C_D(Re)$ le coefficient de traînée, fonction du nombre de Reynolds.

Dans cette configuration, nous sommes à très faible nombre de Reynolds. L'écoulement est donc gouverné par les équations de Stokes. Nous pouvons ainsi utiliser la formule de Stokes afin de déterminer le coefficient de traînée.

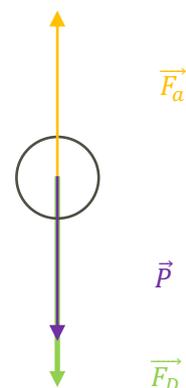


Figure 4 : Schéma des forces s'exerçant sur une bulle.

$$C_D(Re) = \frac{24}{Re} \quad (65)$$

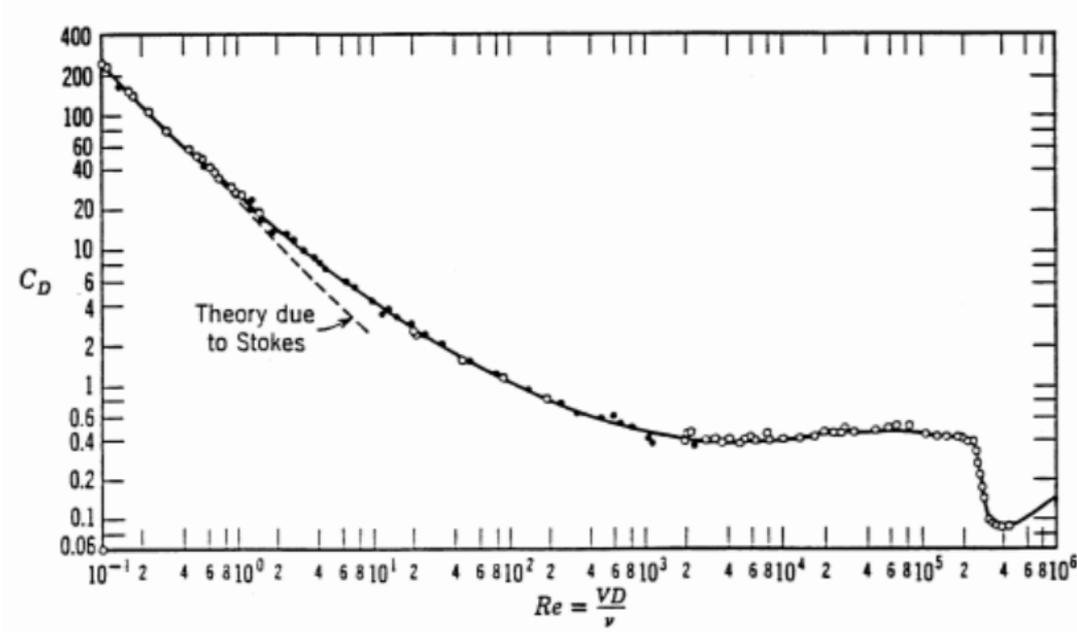


Figure 5 : Evolution du coefficient de traîné en fonction du nombre de Reynolds.

D'où :

$$\vec{F}_D = -6\pi * \mu_f * R * \vec{v} \quad (66)$$

2. Fluide en mouvement

Plaçons-nous maintenant dans le cas où le fluide est en mouvement. Afin d'avoir une solution la plus générale possible, nous allons étudier le cas d'un fluide instationnaire et non uniforme. Nous nous intéressons toujours à une inclusion sphérique, de rayon R , de masse volumique ρ_b et de volume V_b . Comme précédemment, la sphère est soumise à son poids \vec{P} , à la force d'Archimède \vec{F}_a ainsi qu'à l'action du fluide à travers la force de traînée \vec{F}_D .

Afin de déterminer la force de traînée dans le cas de notre écoulement, nous nous baserons sur la théorie de Maxey et Riley (1982) [2] [19]. Sous les hypothèses d'un nombre de Reynolds $\ll 1$ ainsi que d'un rayon R très petit devant la largeur de l'écoulement perturbé, ils proposent la formule :

$$\begin{aligned} \vec{F}_D = & \rho_f * V_b * \left(\frac{D\vec{v}}{Dt} \right)_0 - 6\pi * \mu_f * R * \left(\vec{U} - \vec{v}_0 - \frac{R^2}{6} \nabla^2 \vec{v}_0 \right) - \frac{1}{2} \rho_f * V_b \\ & * \frac{d}{dt} \left(\vec{U} - \vec{v}_0 - \frac{R^2}{10} \nabla^2 \vec{v}_0 \right) - 6R^2 \\ & * \sqrt{\pi \rho_f \mu_f} \int_0^t \frac{d}{d\tau} \left(\vec{U} - \vec{v}_0 - \frac{R^2}{6} \nabla^2 \vec{v}_0 \right) \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \end{aligned} \quad (67)$$

C. Réactions exothermiques

Les sels présents dans la matrice bitume sont susceptibles de réagir entre eux lors de l'échauffement de la matrice bitume. En effet, si la température de l'enrobé, qui est majoré par la température d'échauffement extérieure, est supérieure à la température de déclenchement des réactions exothermique alors il est possible d'avoir un auto-échauffement de la matrice bitume [20]. Or même dans ce cas, les sels étant des solides, il faut encore qu'ils soient mis en contact afin de réagir. Si toutes les conditions sont réunies des réactions exothermiques surfaciques, dites hétérogènes d'oxydo-réduction, se produisent.

L'énergie dégagée par ce type de réaction est donnée par l'équation suivante [21] :

$$S = M_0 \cdot \Delta H \left[Air_{LS}(x) \cdot N_{LS}(k_D, k_R, \delta, t) \cdot ds \cdot A_{LS}^* \cdot \exp\left(-\frac{E_{LS}}{RT}\right) + (1 - x) \cdot A_{LL} \cdot \exp\left(-\frac{E_{LL}}{RT}\right) \right] \quad (68)$$

$$A_{LS}^* = \frac{\frac{A_{LS}}{Air_0}}{\frac{N_0}{ds}} \quad (69)$$

Avec :

- LL réactions entre les phases liquide/liquide
- LS réactions entre les phases liquide/solide
- ΔH l'enthalpie de la réaction ($J \cdot mol^{-1}$)
- x le taux de consommation des sels (%)
- $Air_{LS}(x)$ l'air de contact entre la partie solide et liquide (m^2)
- k_D le coefficient de diffusion
- k_R le coefficient de réaction
- δ l'épaisseur dans laquelle les sels diffusent (m)
- t le temps (s)
- $N_{LS}(k_D, k_R, \delta, t)$ la concentration des en sels ($mol \cdot L^{-1}$) et N_0
- ds l'épaisseur dans laquelle les réactions se produisent (m)
- A_{LS}^* le facteur de fréquence (s^{-1})
- E_i^{-1} l'énergie d'activation de la réaction ($J \cdot mol^{-1}$)

¹ i correspond à LL ou LS

- R la constante des gaz parfait ($J.K^{-1}.mol^{-1}$)
- T la température (K)

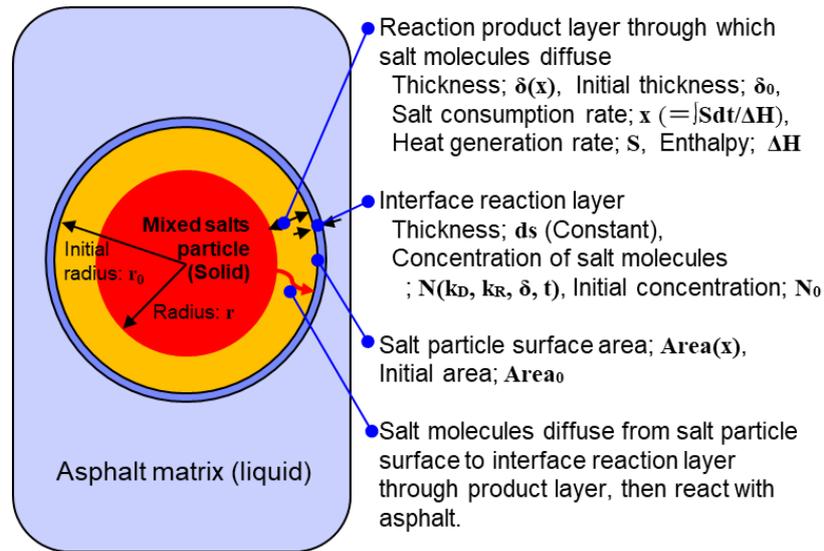


Figure 6 Schéma avec notations, représentant une vue en coupe d'une particule de sel sphérique.

A noter également qu'après des études spécifiques sur les STEL [20], il a été déterminé, entre autres, que :

- Si la température extérieure est inférieure à $150^\circ C$, aucune réaction exothermique n'est observée au sein de l'enrobé
- Lorsque le bitume est chauffé, de manière homogène, entre $50^\circ C$ et $200^\circ C$, la puissance fournie par les réactions exothermiques n'excède pas $5mW.g^{-1}$.

Partie Pratique

A. Décomposition et identification des niveaux de modélisation

Le phénomène physique de montée en température d'un fût d'enrobé bitumineux est complexe à modéliser. Comme expliqué précédemment, nous avons donc, dans un premier temps, séparé les différents problèmes physiques lorsque cela était possible. Nous avons donc commencé par considérer l'agression thermique des parois du fût, ainsi que les transferts conductifs ayant lieu au sein de ces mêmes parois. Puis, nous avons étudié les transferts thermiques au sein de la matrice bitume et donc la mise en place du régime de convection. Ensuite, nous nous sommes intéressés au comportement des bulles d'hydrogène et des sels présents dans la matrice bitume. Pour finir, nous avons commencé une étude des réactions exothermiques se produisant lors de la montée en température de l'enrobé bitumineux.

Par la suite, notre démarche a consisté à définir, pour chacun des phénomènes, plusieurs niveaux de complexité de modélisation. En effet, bien conscient de la contrainte de temps pesant sur nous ainsi que des possibilités d'acquisition de nouvelles connaissances, nous avons pensé le modèle comme une base destinée à être améliorée. Notre but a donc été de nous fixer des objectifs de complexités croissantes et un chemin pour les atteindre. Le niveau 0 correspond à une réalité physique très simplifiée permettant une première compréhension du phénomène et fixant les ordres de grandeurs. Le niveau 1, quant à lui, se base sur des hypothèses simplificatrices assez fortes. Il doit être atteignable facilement tout en approchant le phénomène de façon satisfaisante pour permettre une modélisation globale de tous les phénomènes séparément. Le niveau 2 est l'objectif que nous souhaitons atteindre. Il est représentatif de la réalité physique et commence à tenir compte des interactions entre phénomènes. Pour finir, le niveau 3 propose un approfondissement du modèle. Il doit indiquer des pistes d'amélioration, sans avoir forcément pour vocation de les atteindre. Une description de notre raisonnement et de nos choix va être exposée par la suite.

I. Agression thermique des parois et transferts thermiques interne par conduction

Commençons par évoquer l'élévation en température des parois métalliques du fût. Lors de notre scénario, l'air de la pièce est chauffé par l'incendie. Il va ensuite provoquer une élévation de la température du sol et des parois du fût par des transferts convectifs et radiatifs. L'élévation température au sein des parois et du sol, va alors se propager par conduction. Pour finir, des échanges conductifs vont se produire entre le sol et la paroi inférieure du fût.

Nous avons cherché à décomposer ce problème à partir des conditions limites de transferts de chaleur des milieux extérieurs aux parois. Notre but était de savoir si nous pouvions négliger la barrière métallique, constituée des parois du fût, dans notre modélisation finale. En effet, nous voulions savoir si les transferts de chaleur allaient être quasi-instantanés. Nous nous demandions également si les parois permettaient une uniformisation de la répartition de la chaleur. En effet, nous voulions savoir si au bout d'un certain temps les parois allaient être à l'équilibre thermique.

Nous avons donc distingué deux cas majeurs : celui où la température de l'air est pilotée par un step (Niveau 1) et celui où l'élévation de la température de l'air est commandée par la courbe ISO 834 (Niveau 2). Ensuite, pour chacun de ces cas nous avons considéré que le fût était isolé ou non du sol. Dans le second cas, des échanges par conduction sont donc à prendre en compte entre le sol en béton et la paroi inférieure. Finalement, pour les 4 sous cas, nous avons commencé par prendre en compte seulement les transferts par convection puis ceux par radiation.

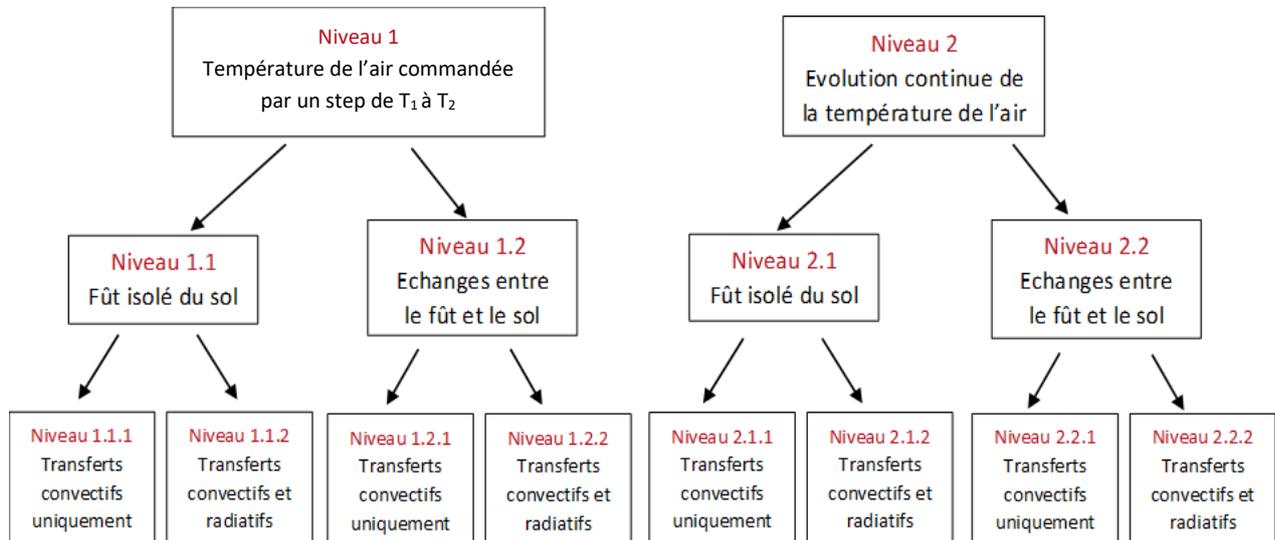


Schéma 1 : Démarche de décomposition du problème d'agression thermique des parois.

II. Mise en place du phénomène conducto-convectif au sein de la matrice bitume

Passons maintenant à la mise en place du régime de convection au sein de la matrice bitume. Ici notre but était de mieux appréhender l'influence du phénomène de montée en température de la matrice bitume sur les transferts de masse.

Nous avons considéré le cas où les parois métalliques avaient pu être négligées. Cela implique que les conditions aux limites identifiées précédemment vont s'appliquer directement à l'enrobé bitumineux. Dans le deuxième cas, celui où les parois ne peuvent être négligées, nous obtiendrons le champ de température des parois en fonction des différents niveaux de complexités précédents. Ensuite, les transferts de chaleur entre les parois et la matrices bitumes s'effectueront par transferts conducto-convectif.

Par ailleurs, deux niveaux de complexités des conditions aux limites portant sur la variation de la température extérieure ont été identifiés (stable ou variable en fonction du temps).

Intéressons-nous maintenant aux transferts de chaleur internes à la matrice bitume. Le cas le plus simple est de considérer seulement des transferts internes par conduction. Ensuite, nous étudierons les transferts thermiques internes par un phénomène conducto-convectif à viscosité constante. Nous réaliserons cette étude premièrement en 2D puis en 3D. Pour finir, nous souhaitons réaliser en 2D la modélisation des transferts conducto-convectifs à viscosité dynamique variable en 2D car cette variable a été identifiée comme celle possédant la plus grande variation sur la gamme de température de notre étude.

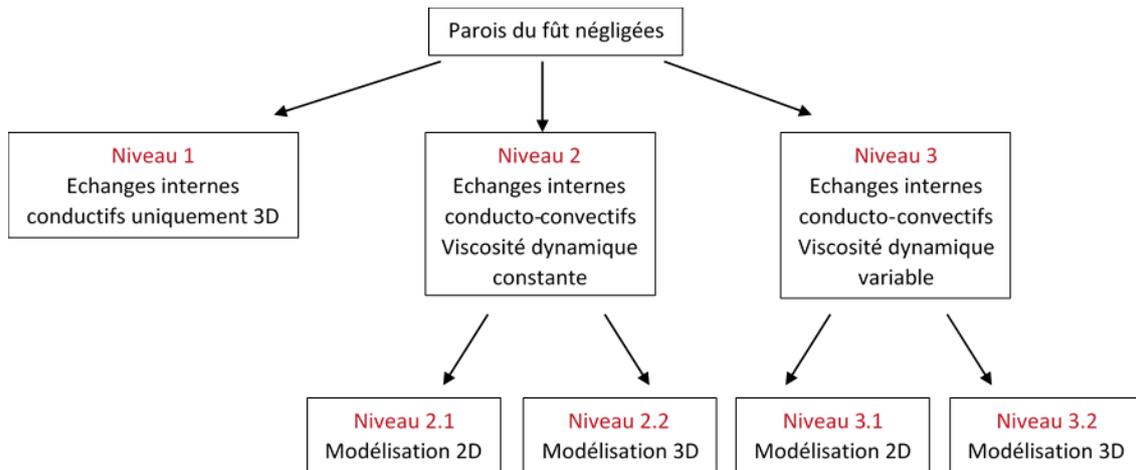


Schéma 2 : Démarche de décomposition du problème de montée en température de la matrice bitume dans le cas où les parois sont négligées.

III. Comportement des bulles et des sels

Nous pouvons maintenant passer à l'étude de complexité du problème des bulles et des sels. Comme expliqué lors de la partie théorique, nous considérons le rayon des bulles fixe. Nous pouvons donc étudier conjointement les comportements des bulles et des sels qui obéiront aux mêmes lois. De plus, toujours comme indiqué à la partie théorie, l'impact des bulles et des sels sur le champ de vitesse du fluide et les transferts thermiques ne sont pas pris en compte.

Nous avons donc décomposé la complexité du problème en plusieurs étapes. Le niveau le plus simple a été d'étudier le comportement d'une seule inclusion dans un fluide au repos, puis d'une population d'inclusions. Ensuite nous avons considéré un fluide en mouvement instationnaire et non uniforme. Comme précédemment, nous voulions analyser le mouvement d'une inclusion puis d'une population de bulle. A noter que dans ce dernier cas, pour les bulles nous avons distingué les sous cas où les bulles peuvent ou non coalescer. Toutes les étapes s'effectuent en 3D.

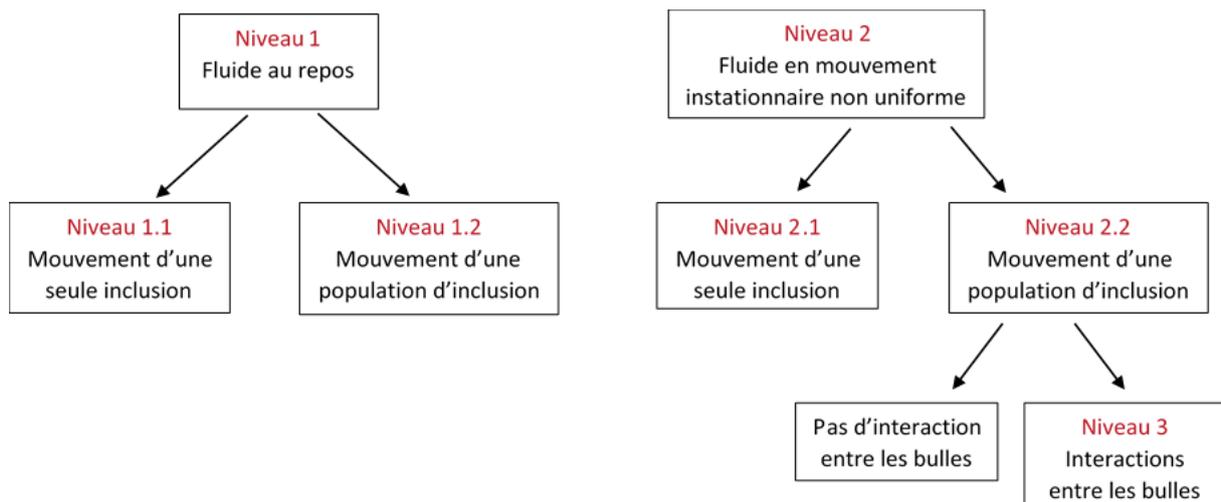


Schéma 3 : Démarche de décomposition du problème du comportement des inclusions.

IV. Réactions exothermiques

Nous n'avons pas eu le temps d'aborder la problématique des réactions exothermiques dans notre modélisation. Néanmoins, nous exposerons ici les difficultés pouvant être rencontrées.

La formule (68) est assez complexe, nous avons donc eu l'idée de la simplifier par la formule suivante :

$$q_i = C_i(t) \cdot A \cdot \exp\left(\frac{-E_{ai}}{R \cdot T}\right) \quad (70)$$

Avec q_i le flux d'énergie émis ($J \cdot m^{-2}$), $C_i(t)$ la concentration du composant i ($mol \cdot m^{-3}$), A le coefficient de vitesse ou facteur pré-exponentiel, E_{ai} l'énergie d'activation de la réaction ($J \cdot mol^{-1}$), R la constante des gaz parfait ($J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$) et T la température (K).

Pour avoir accès à l'énergie dégagée par les réactions exothermiques, nous devons donc connaître la concentration de chaque sel à chaque instant. Cela implique donc de connaître leurs concentrations initiales. Or cela pose un problème car chacun des fûts à une composition différente et que cette dernière n'est pas toujours connue.

Supposons que nous avons accès à la concentration initiale, pour obtenir la concentration à l'instant t d'une espèce, il faut connaître la réaction par laquelle elle est consommée ainsi que l'ordre de cette réaction. Cela a été discuté dans la thèse de Mme. Mouffe [22].

Pour finir, se pose le problème de savoir « où » se déroule les réactions et donc « où » l'énergie va être libérée. Pour cela, il faudrait savoir quelles particules réagissent et identifier chaque type de particule. Cette opération semble assez difficile à réaliser. Néanmoins, nous pourrions nous servir du programme modélisant le mouvement des sels, différencier chacune des espèces et identifier lorsque celles susceptibles de réagir se rencontrent. Cependant, chaque rencontre ne donnerait pas forcément lieu à une réaction exothermique, il faudrait donc déterminer un coefficient de pondération statistique décrivant la probabilité que deux particules se rencontrant réagissent entre elles.

B. Modélisations réalisées et résultats

I. Agressions thermiques des parois et transferts thermiques internes par conduction

Commençons par les résultats obtenus et les pistes envisagées en ce qui concerne l'agression thermique des parois du fût, ainsi que la propagation de la chaleur par conduction au sein des parois.

Il existe deux géométries pour les fûts qui nous intéressent. En voici les schémas [23]:

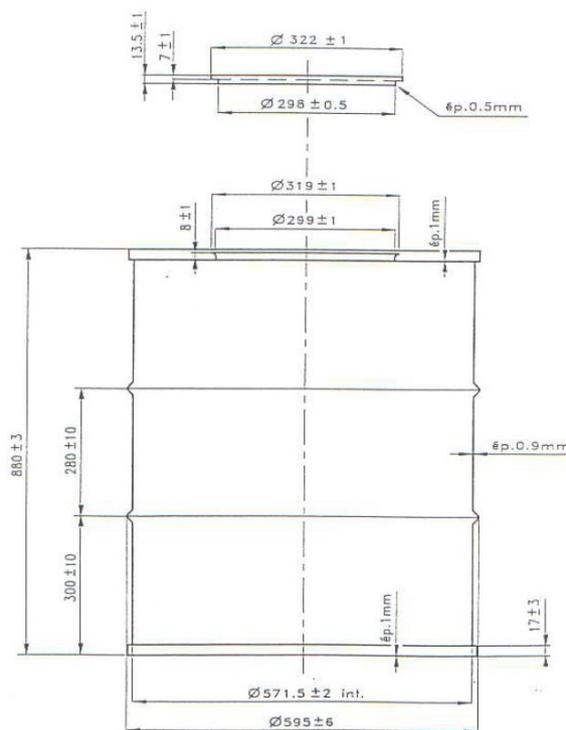


Figure 7 : Fût en acier noir laminé à froid de 15kg.

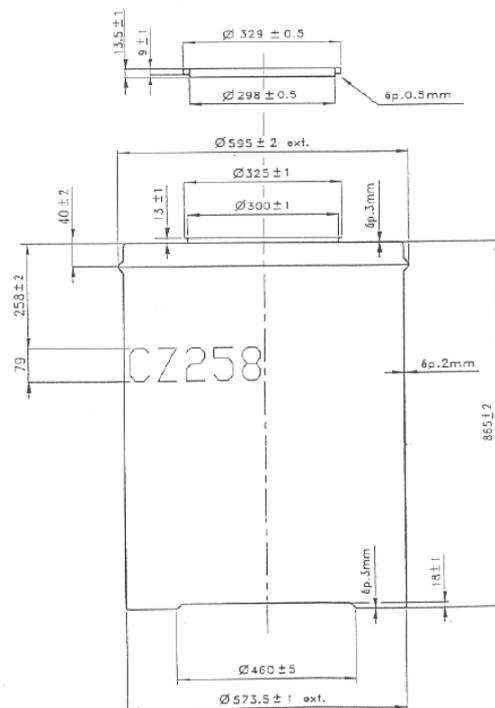


Figure 8 : Fût en inox de 37,4kg.

Nous avons choisi de modéliser seulement le fût en acier noir. Ce dernier pèse 15kg. De plus, en le modélisant, nous avons pu estimer son volume à $1,9 \cdot 10^{-3} \text{m}^3$. Cela nous amène donc à considérer que les parois en acier du fût possèdent une densité de $7804 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Or, dans la bibliographie [24], la valeur de référence pour de l'acier laminé à froid est de $7850 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Nous sommes donc satisfaits de l'approximation faite.

Passons maintenant aux caractéristiques thermiques de l'acier noir laminé à froid. Nous ne possédons pas de valeurs spécifiques à notre fût, néanmoins nous avons trouvé les valeurs suivantes dans la littérature [25] :

- Conductivité thermique $\lambda = 45 \text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
- Capacité thermique $C_p = 500 \text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$

Pour finir, nous choisirons de remplir le fût de bitume jusqu'à 75% de sa hauteur.

1. Contributions des différents flux

Dans un premier temps, nous allons comparer les contributions des différents flux grâce auxquels la chaleur est transmise aux parois par l'air ambiant chaud.

Nous allons commencer par comparer uniquement les flux convectif et radiatif.

Notre scénario est le suivant : une plaque en acier laminé à froid, rectangulaire, est chauffée par l'air ambiant au niveau de sa limite droite, ses autres parois sont considérées comme isolées thermiquement. L'air est lui-même chauffé par un step de température. Nous voulons comparer les contributions des flux radiatifs et convectifs au niveau de la paroi droite. Pour ce faire, nous avons tracé, pour une température de paroi fixe et égale à 22°C, les flux convectif et radiatif sur une plage de température de chauffe.

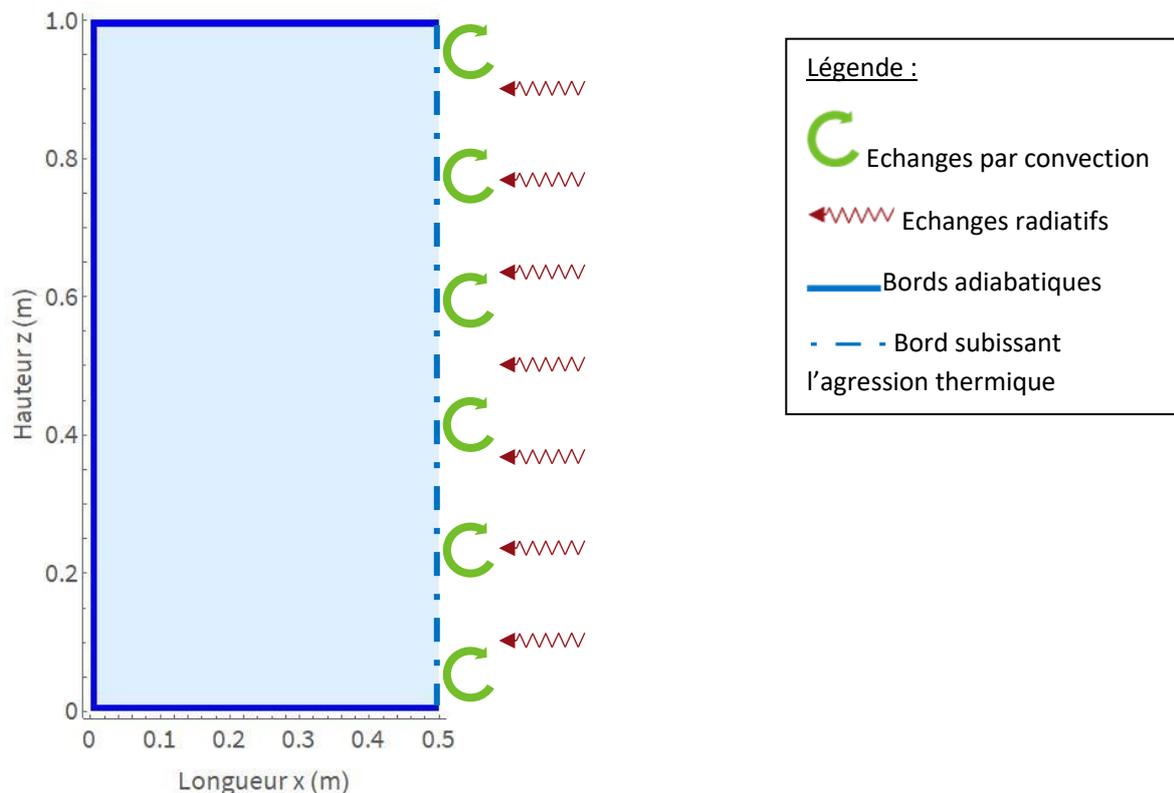


Figure 9 : Schéma de la situation simplifiée permettant visualiser les transferts thermiques par convection et rayonnement.

Les formules de ces deux flux sont données par les équations (8) et (10). Nous avons donc besoin du coefficient d'échange thermique de l'air et de l'émissivité de l'acier. Nous avons trouvé ces valeurs dans la littérature :

- Emissivité de l'acier laminé à froid 0,8 [26]
- Coefficient d'échange thermique de l'air entre 5 et 25 $W.m^{-2}K^{-1}$ en convection libre [10], nous avons choisi de prendre une valeur de 15 $W.m^{-2}K^{-1}$

Nous obtenons alors la figure ci-dessous.

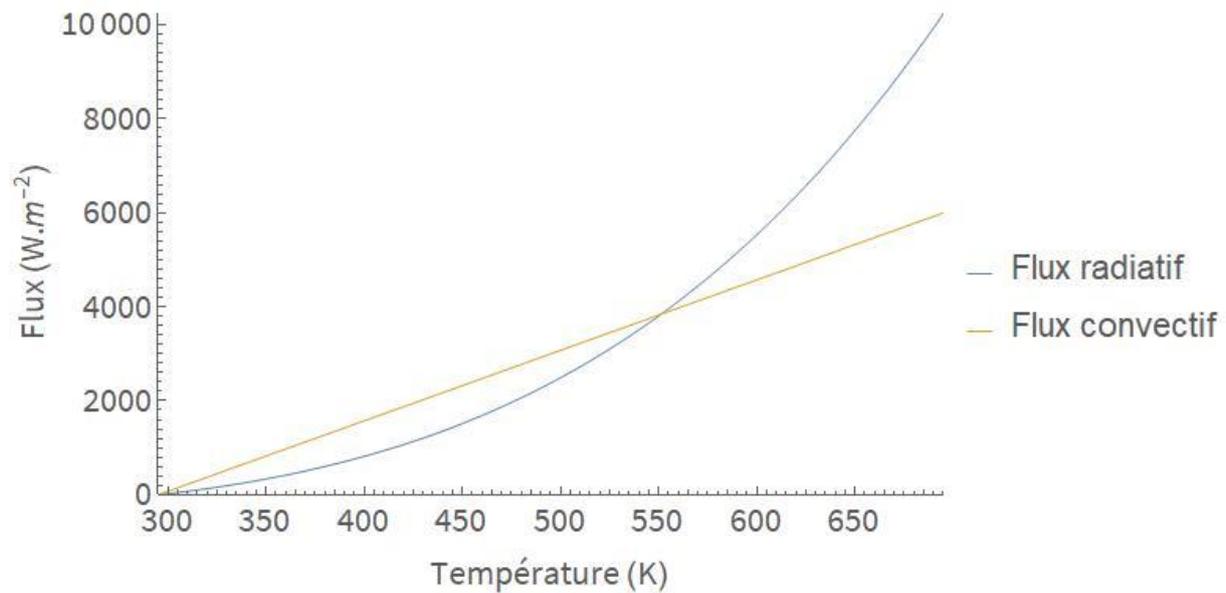


Figure 10 : Evolution des flux surfaciques radiatifs et convectifs en fonction de la température de chauffe et à température de paroi fixée.

Nous remarquons donc grâce à ce graphique, que le flux convectif contribue majoritairement à la montée en température de l'enrobé bitumineux pour des températures de chauffe inférieure à 551K. Au-dessus de cette limite, ce sont les transferts radiatifs qui sont prédominants dans l'apport de chaleur.

2. La condition limite en température est commandée par un step.

Notre scénario est le suivant. Le fût d'enrobé bitumineux (les parois et la matrice bitume) et le sol en béton, sont à la température initiale de 22°C (295K). Ils vont ensuite être chauffés par l'air chaud maintenu à 922°C soit 1195K.

Nous considérons donc que les parois extérieures, autre que celle inférieure, subissent une agression thermique de l'air s'effectuant par convection et rayonnement thermique (Figure 11 et Figure 23). Nous choisissons de distinguer deux cas pour les échanges thermiques entre les parois et l'enrobé bitumineux. En effet, comme nous ne connaissons pas exactement le comportement de la matrice bitume, nous allons dans un premier temps considérer seulement des échanges par conduction entre elle et les parois. Dans un deuxième temps, nous verrons le cas où les transferts entre les deux s'effectuent par convection uniquement, tout en maintenant l'enrobé à la température initiale. Nous avons donc, le cas où le transfert de chaleur vers le bitume est le moins efficace, et celui où il l'est le plus et donc qui refroidit le plus les parois. De plus, nous allons considérer des échanges convectifs entre l'air et l'enrobé.

Pour finir, nous avons choisi l'émissivité de l'acier laminé à froid tel que $\epsilon = 0.8$ et celle du béton égale à 0.82 [27].

a. La paroi inférieure est isolée du sol

Au travers de cette partie, nous verrons le comportement thermique des parois du fût lorsque la paroi inférieure extérieure est isolée du sol. Nous considérons donc que cette paroi n'échange pas de chaleur avec l'extérieur. Nous allons donc traiter cette limite par une condition d'adiabaticité.

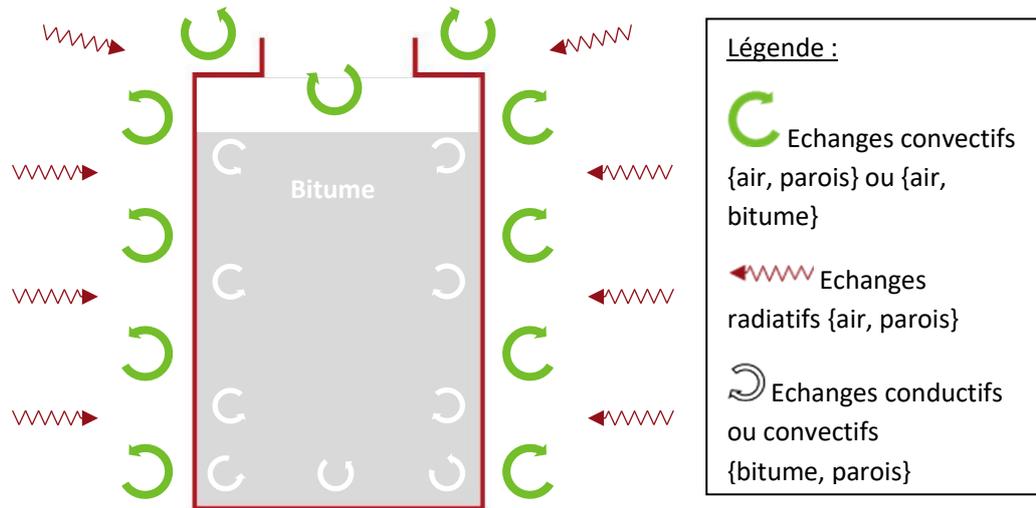


Figure 11 : Schéma des agressions thermiques que les parois du fût subissent lorsque le fût est isolé du sol.

La température du fût est obtenue en combinant l'équation (5) et en sommant les différents flux surfaciques. Nous obtenons donc :

$$\rho * C_p * \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + \varphi_{conv\{air,parois\}} + \varphi_{rad\{air,parois\}} - \varphi_{\{parois,bitume\}} \quad (71)$$

i. Transferts conductifs entre les parois et la matrice

Commençons par le cas où les transferts thermiques entre parois et matrice s'effectuent par conduction.

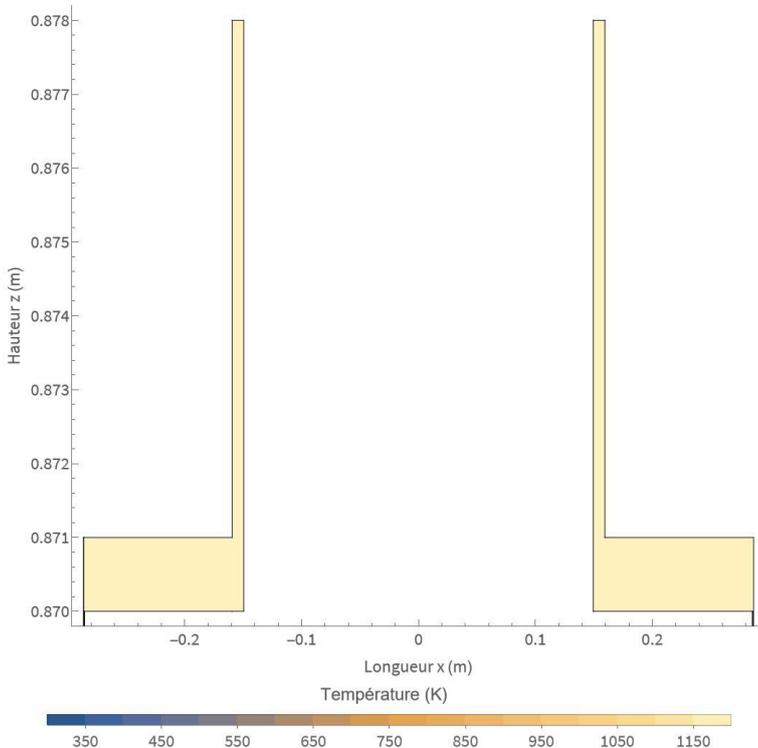


Figure 12 : Température des parois supérieures au bout de 1h de chauffe.

Au bout d'une heure de chauffe à 1195K, nous observons une température homogène au niveau des parois supérieure et latérales, Figure 12 et Figure 13. De plus, nous pouvons voir que les températures atteintes au niveau des parois supérieures sont légèrement plus élevées que celles des parois latérales. Cela se confirme également avec la Figure 15. Nous remarquons que la température à la position P3² est plus élevée et atteint un régime permanent rapidement. Pour la température au niveau de la position P1³, le régime permanent n'est pas atteint et elle évolue lentement à partir de 1100K. Cette différence est due au fait que pour la position P3 les conditions aux limites sont homogènes et ne varient pas dans le temps. A l'inverse au niveau de la position

² Voir annexe 2 pour définition de la notation

³ Voir annexe 2 pour définition de la notation

P1, la condition limite gauche est un flux conductif avec la matrice bitume dont la température évolue.

Au niveau de la paroi inférieure, isolée thermiquement en sa limite inférieure, nous pouvons observer un phénomène de conduction intrinsèque aux parois. Il conduit la chaleur des parois latérales vers la paroi inférieure (Figure 14).

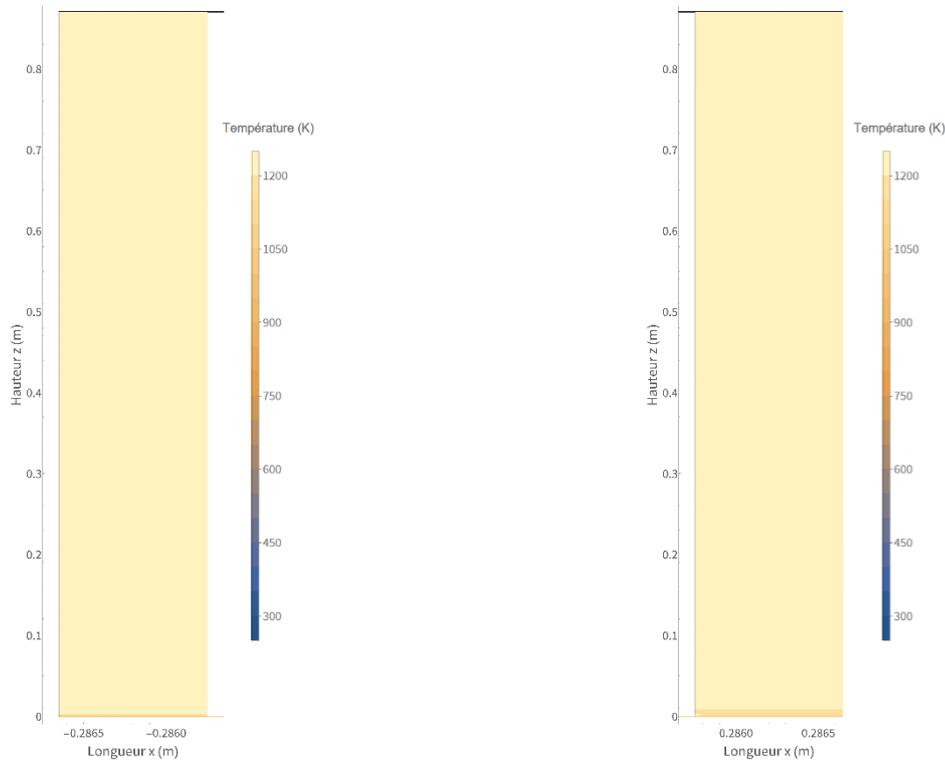


Figure 13 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.

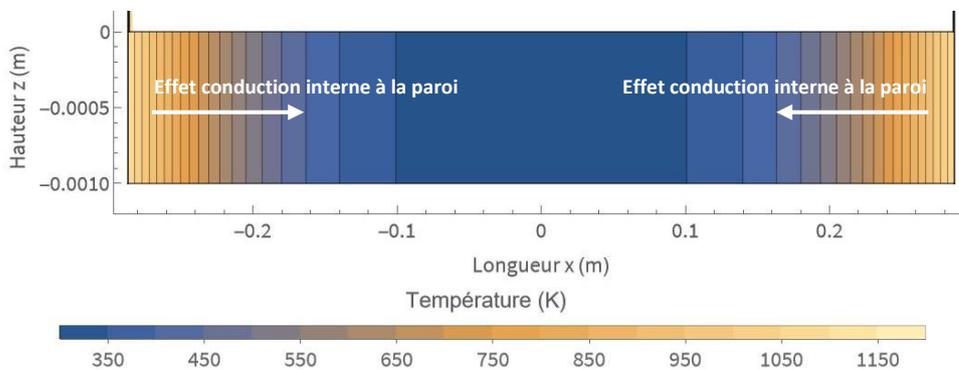


Figure 14 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.

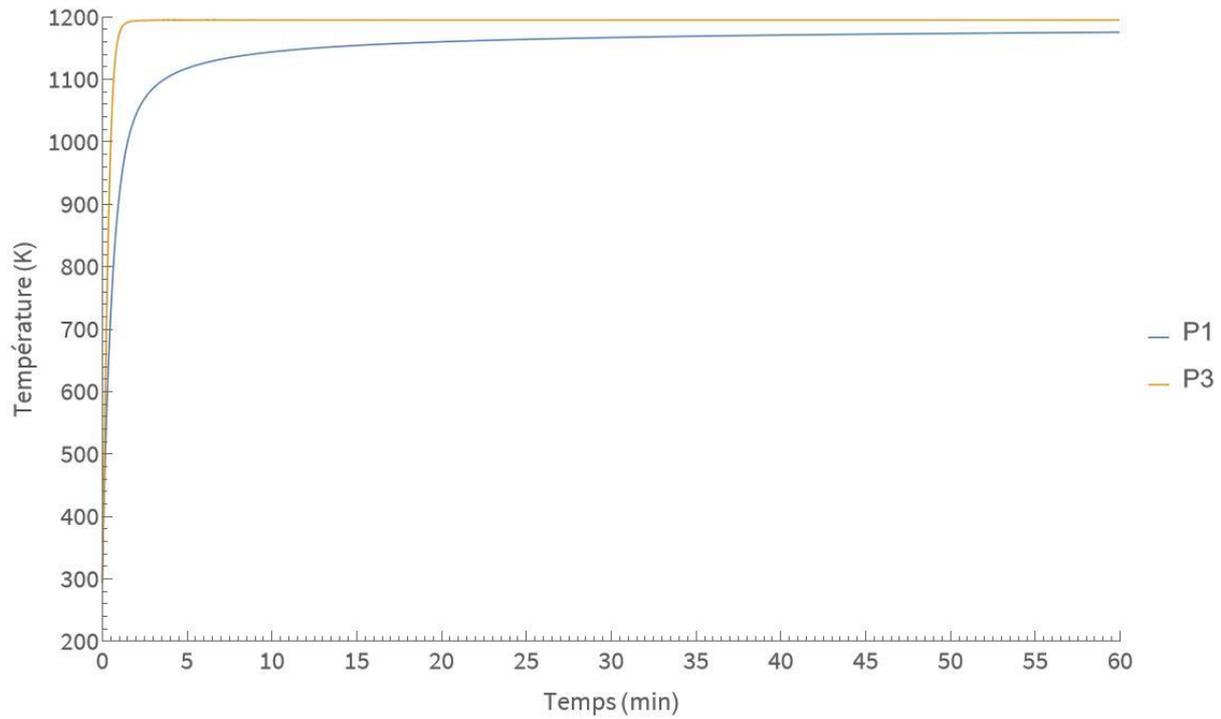


Figure 15 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.

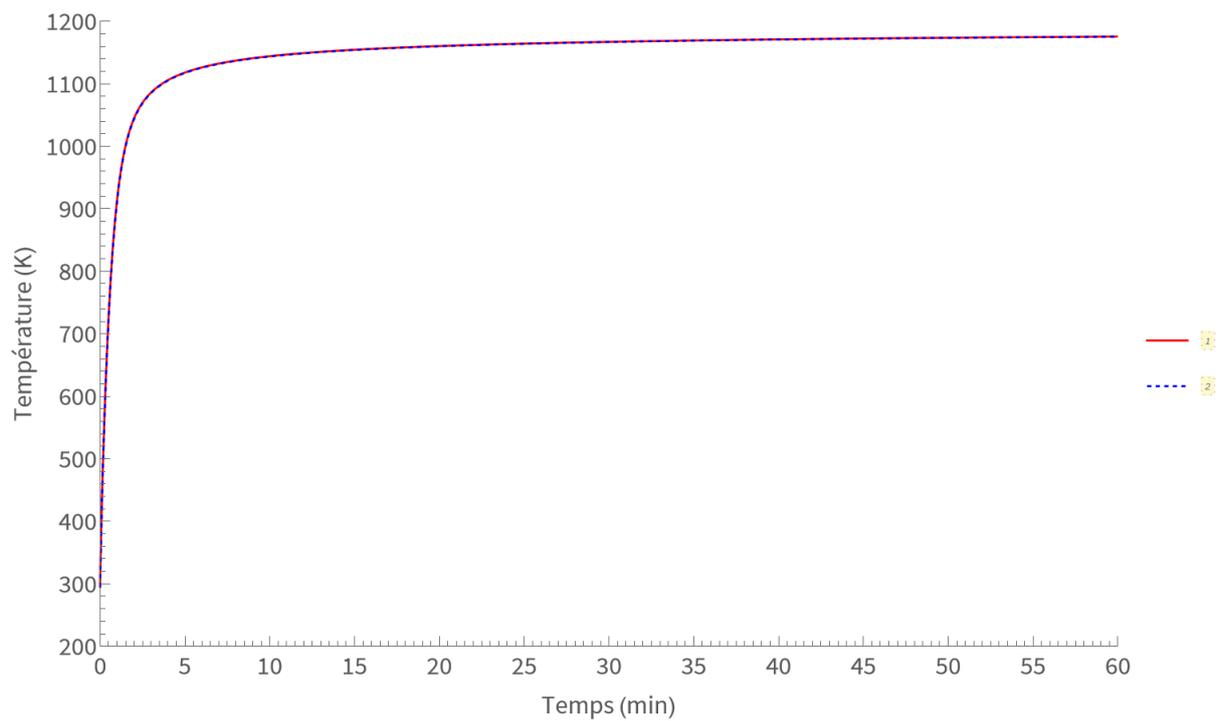


Figure 16 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi latérale droite du fût à mi-hauteur.

Pour finir, nous observons sur la Figure 16, l'évolution des températures à l'intérieur et à l'extérieur de la paroi latérale droite à mi-hauteur. Nous voyons que les deux courbes se chevauchent. Les transferts de chaleurs s'effectuent donc instantanément dans les parois latérales.

ii. Transferts convectifs entre les parois et la matrice

Passons maintenant au cas où les échanges entre parois et matrice bitume sont des échanges convectifs. Nous rappelons que dans cette configuration, la température du bitume est maintenue, pour les besoins de la modélisation, à la température initiale de 22°C.

Cette fois-ci, nous observons clairement que la température n'est pas homogène dans les parois latérales, Figure 18.

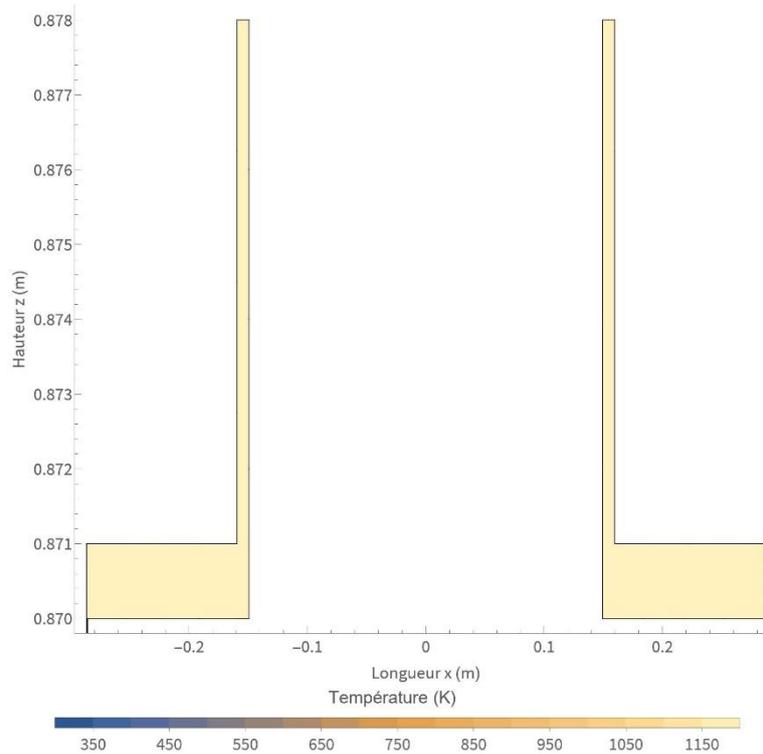


Figure 17 : Température des parois supérieures au bout de 1h de chauffe.

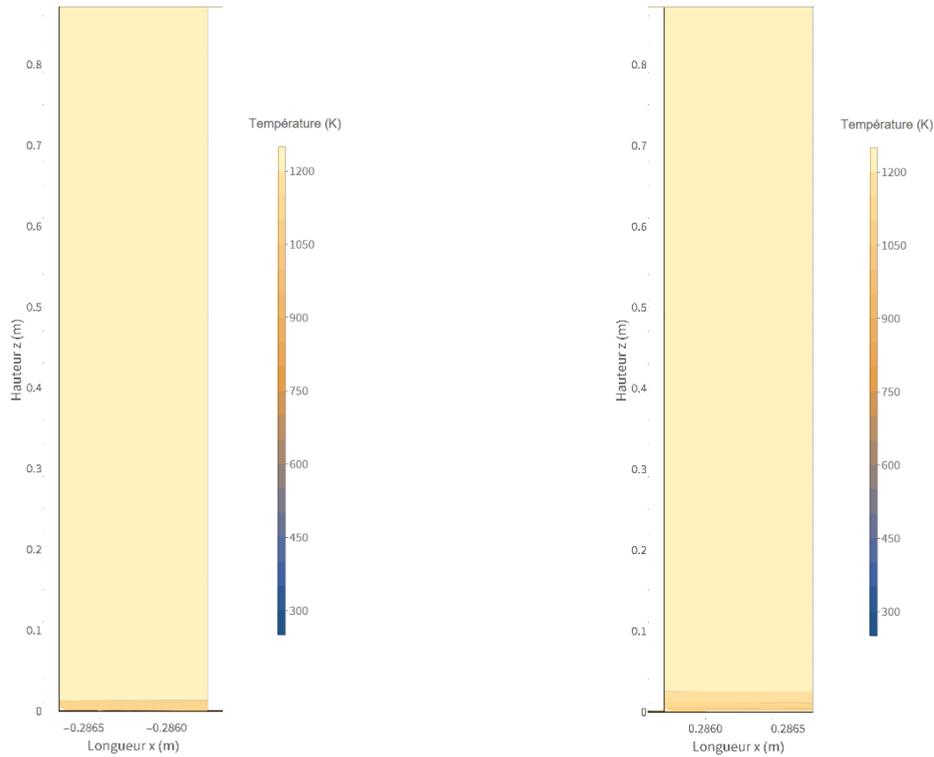


Figure 18 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.

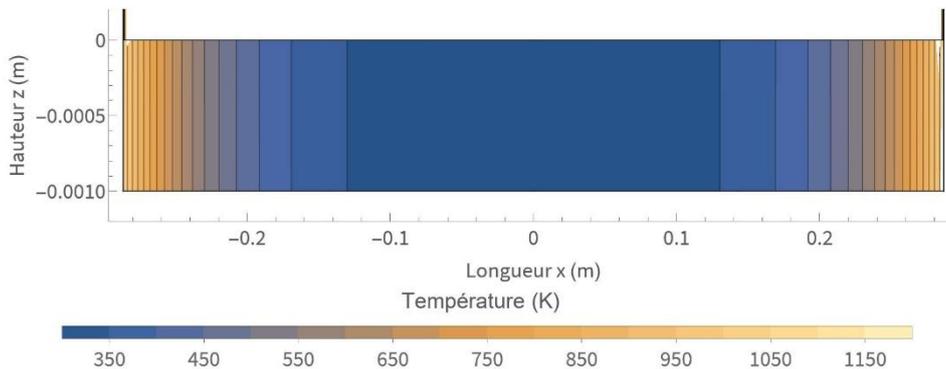


Figure 19 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.

A travers les Figure 20 et Figure 21, nous voyons qu'un régime stationnaire est atteint quelle que soit la paroi. Cela s'explique par le fait que nous appliquons deux conditions aux limites (avec l'air et le bitume) où la température est fixée.

Pour finir, nous observons, comme précédemment, que dans cette configuration la température au niveau des limites extérieure et intérieure des parois latérales est identique, Figure 22.

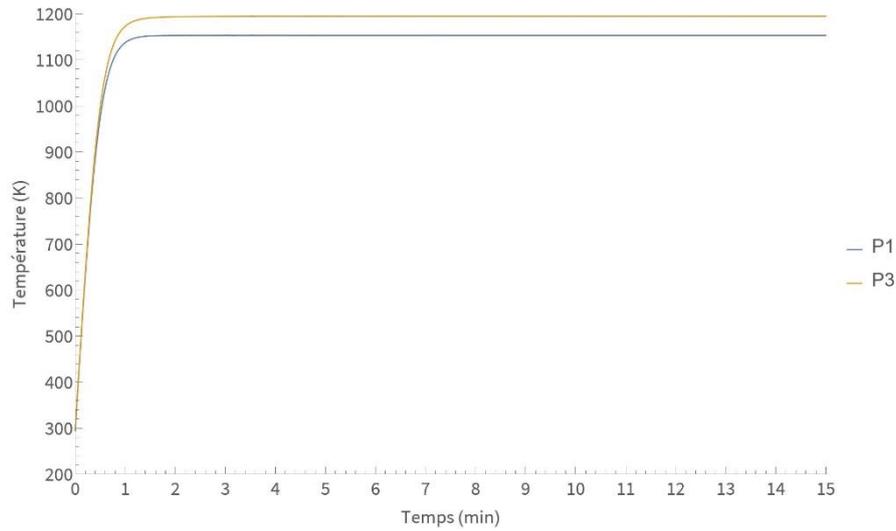


Figure 20 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.

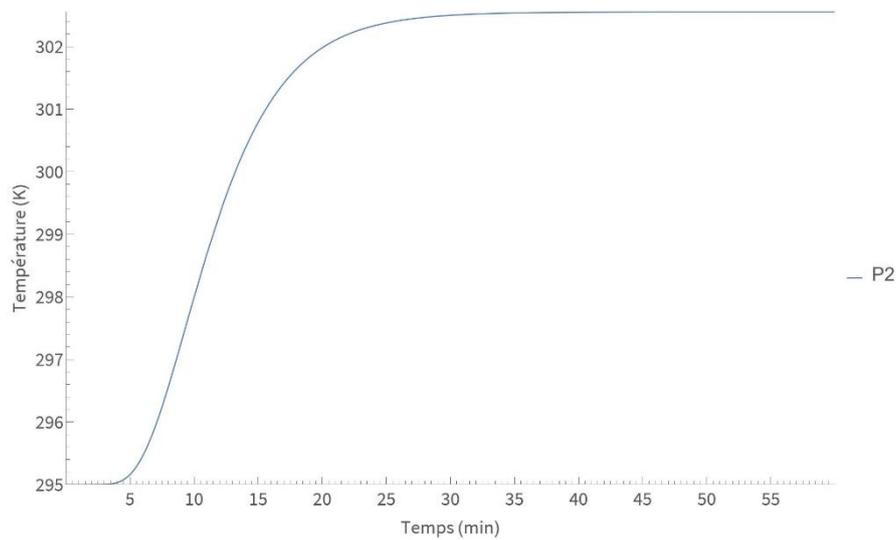


Figure 21 : Evolution des températures aux positions P2.

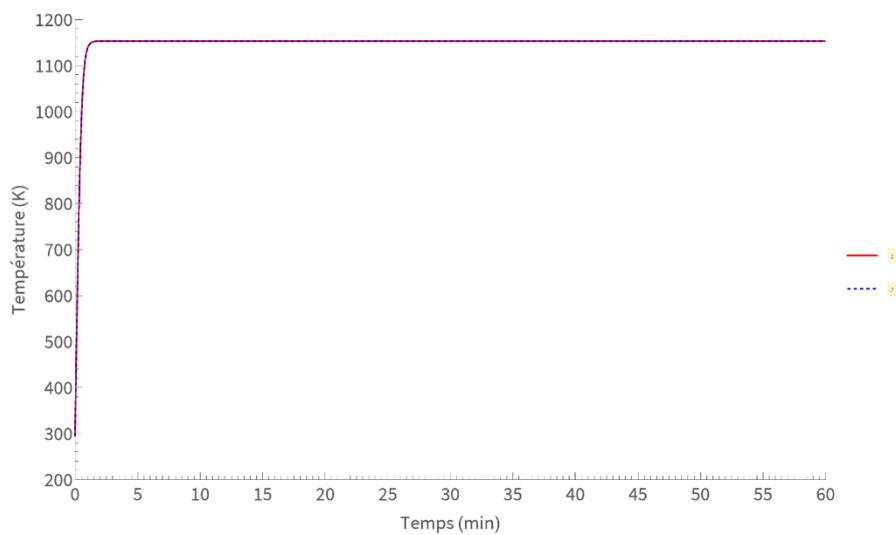


Figure 22 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi latérale droite du fût à mi-hauteur.

b. Echanges conductifs entre la paroi supérieure et le sol

Cette fois-ci, nous avons choisi de prendre en compte les transferts thermiques entre le sol et le fût. Ils s'effectuent par un phénomène de conduction. Nous n'avons pas d'information sur la pièce où se trouvera le fût. Nous avons donc choisi de considérer un sol en béton classique de 60 cm d'épaisseur et ayant une surface de 20m². Le centre du fût coïncidera avec le centre de la pièce.

Nous devons donc être capable de déterminer la courbe de montée en température du béton composant le sol.

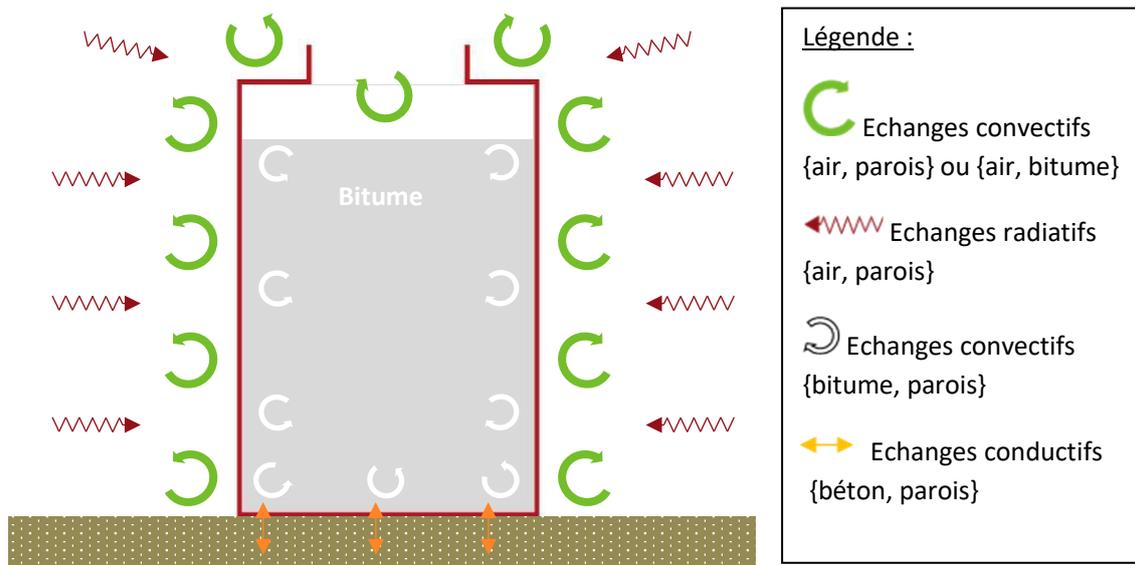


Figure 23 : Schéma indiquant les différentes natures des flux thermiques entre les objets considérés.

De même que précédemment (équations (71) et **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**), nous obtenons l'équation régissant la température des parois.

$$\rho * C_p * \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + \varphi_{conv\{air,parois\}} + \varphi_{rad\{air,parois\}} - \varphi_{\{parois,bitume\}} + \varphi_{cond\{béton,parois\}} + \varphi_{conv\{air,béton\}} + \varphi_{rad\{air,béton\}} \quad (72)$$

i. Comparaison des temps de diffusion thermique des parois métalliques et du béton.

Commençons par comparer les temps de diffusion thermique des parois et du béton. Notre scénario est le suivant. Nous avons choisi de considérer un rectangle de 50 cm de longueur et 1 m de hauteur. Ce rectangle est initialement à la température de 22°C. Nous décidons de le chauffer en maintenant sa limite inférieure (en $z = 0$ m), à 422°C.

La formule donnant le temps caractéristique de diffusion thermique est la suivante [28]:

$$\tau_c = \frac{L_c^2}{a} \quad (73)$$

Avec τ_c le temps de diffusion thermique (s), L_c la longueur caractéristique (m) et a le coefficient de diffusion thermique (m².s⁻¹).

Ici, notre longueur caractéristique L_c correspond à la hauteur de notre rectangle.

Pour le béton, nous avons trouvé dans la littérature les caractéristiques suivantes :

- Une conductivité thermique de $0,952 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ [29]
- Une masse volumique de 2200 kg.m^{-3} pour du béton traditionnel [30]
- Une capacité thermique de $1000 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ [31]

Nous avons donc les valeurs suivantes de diffusivité thermique pour les parois en métal et le béton :

$$a_{\text{parois}} = \frac{\lambda_{\text{parois}}}{\rho_{\text{parois}} * C_{p_{\text{parois}}}} = \frac{45}{7804 * 500} = 1,15. 10^{-5} \text{ m}^2. \text{s}^{-1}$$

$$a_{\text{béton}} = \frac{\lambda_{\text{béton}}}{\rho_{\text{béton}} * C_{p_{\text{béton}}}} = 4,33. 10^{-7} \text{ m}^2. \text{s}^{-1}$$

Finalement, nous obtenons donc les temps caractéristiques de diffusion suivant :

$$\tau_{c_{\text{parois}}} = \frac{L_{c_{\text{parois}}}^2}{a_{\text{parois}}} = 86713 \text{ s} \approx 24 \text{ h}$$

$$\tau_{c_{\text{béton}}} = \frac{L_{c_{\text{béton}}}^2}{a_{\text{béton}}} = 2,31. 10^6 \text{ s} \approx 27 \text{ j}$$

Voici les résultats de la simulation du scénario précédent. Les résultats obtenus correspondent à un temps de modélisation de 24 h.

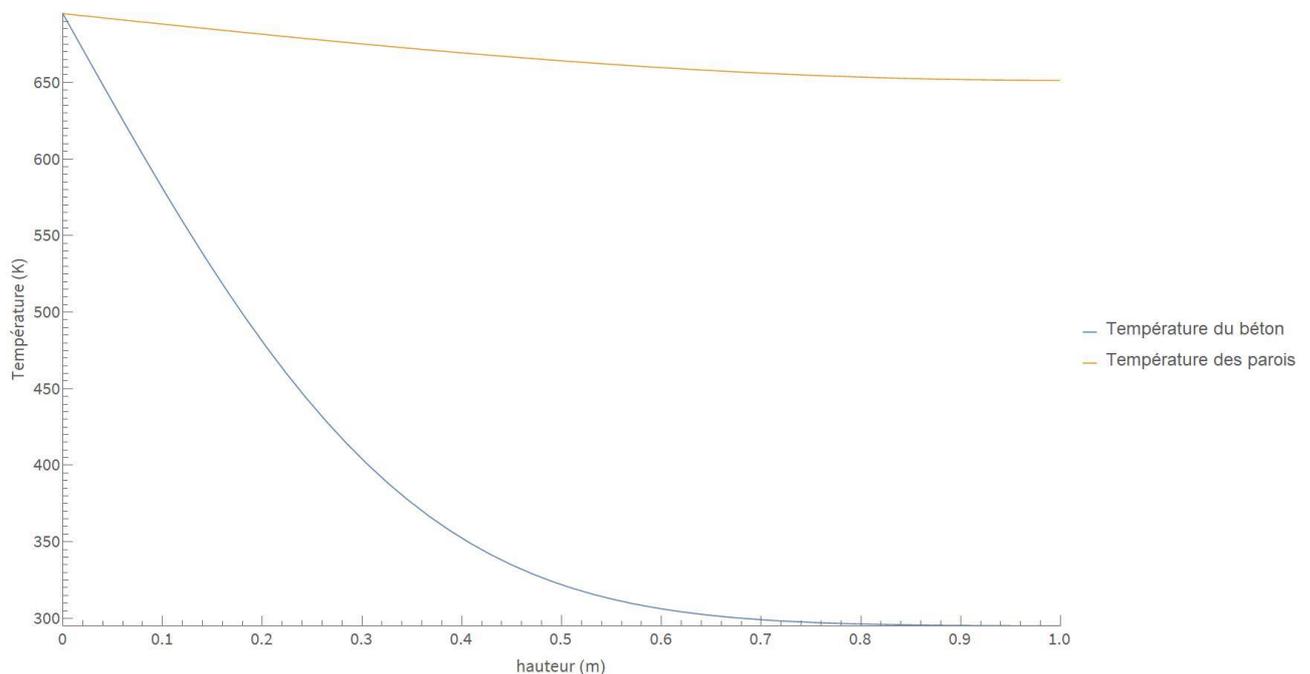


Figure 24 : Evolution des températures à mi longueur au bout de 24h de chauffe de la paroi inférieure en fonction de la hauteur.

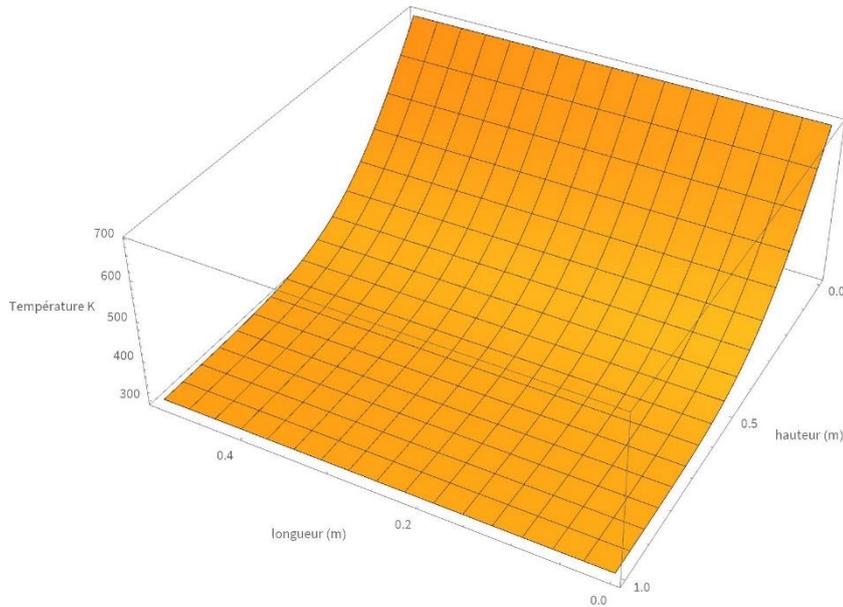


Figure 25 : Profil de température du béton au bout de 24h de chauffe à 695K par la limite inférieure (en $x=0$ et $z=0$).

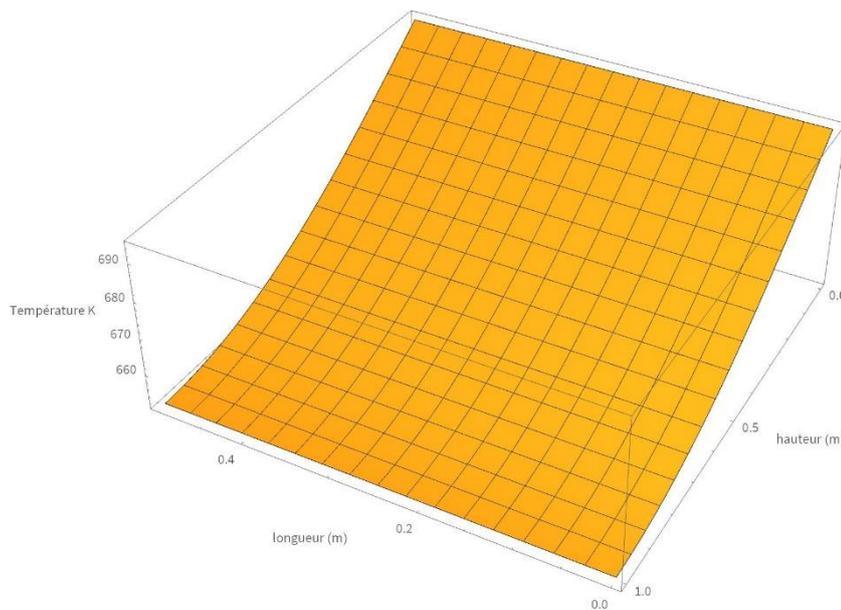


Figure 26 : Profil de température de l'acier composant les parois au bout de 24 de chauffe à 685K par la limite inférieure (en $x=0$ et $z=0$).

100 h. Pour l'acier, nous observons que la température atteint une limite asymptotique de 695 K à partir de 40 h environ. A l'inverse, nous constatons que la température du béton ne se stabilise pas. Ces résultats sont toujours cohérents avec les temps caractéristiques de diffusion thermique. En effet, le temps de simulation de 100 h est faible devant $\tau_{c\text{béton}}$, le régime permanent n'est donc pas atteint.

Nous observons une forte disparité dans les comportements des deux matériaux.

Au bout de 24 h, nous pouvons voir que le métal a quasiment atteint la température de chauffe de 695 K sur toute sa surface, Figure 24.

A l'inverse, nous remarquons que la plaque de béton est encore marquée par un fort gradient de température. En 24 h, la chaleur ne s'est pas propagée sur toute la plaque. En effet, en $z = 1$ m, à l'opposé de la limite chauffée, la température du matériau est toujours égale à la température initiale de 295 K.

Nous observons qu'aucun des matériaux n'atteint de régime permanent. Les températures des deux plaques continuent d'évoluer dans le temps. Cela est cohérent, les temps de modélisation sont inférieurs ou égaux aux temps caractéristiques de diffusion, et le régime permanent n'est atteint que pour un temps T_p très grand devant τ_c [32].

Pour finir, nous avons donc représenté avec la Figure 27, l'évolution de la température en fonction du temps en un point donné de nos plaques. Nous avons choisi de nous placer à mi-longueur et en haut de la plaque. Nous avons considéré cette fois, un temps de chauffe de

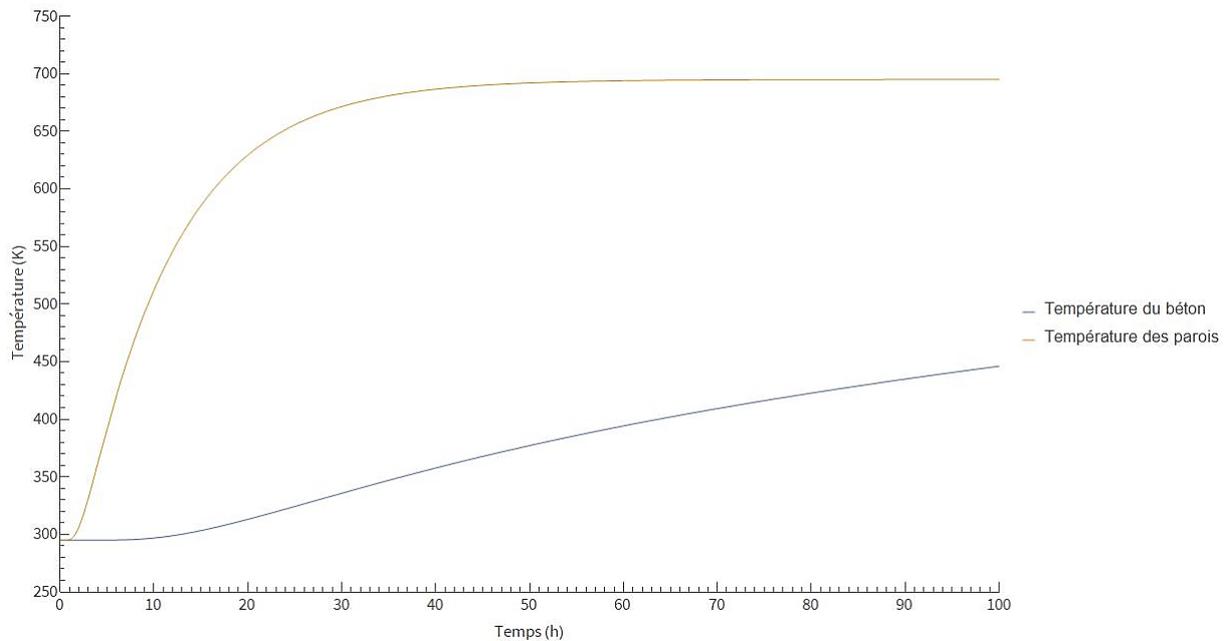


Figure 27 : Evolution des températures à mi-longueur et à mi-hauteur en fonction du temps.

Aux vues de ces résultats, nous pouvons donc conclure que sur une surface égale, l'acier laminé à froid conduit 27 fois plus vite la chaleur que le béton. Les échanges thermiques entre le béton et les parois ne sont donc pas à négliger car le sol va potentiellement agir comme un puit de chaleur pour la partie inférieure du fût. C'est pourquoi, nous allons voir, plus spécifiquement, dans la partie suivante, l'influence du béton sur la propagation de la chaleur dans le fût.

ii. Résultats de la modélisation

(a) Conduction avec le bitume

Nous observons à travers la Figure 28, que la plage de température froide est plus étalée que dans la situation précédente.

Le phénomène de conduction thermique ayant lieu entre les parois latérales, chauffées par l'air, et la paroi inférieure, est contre balancé par les échanges conductifs avec le béton composant le sol qui est plus froid.

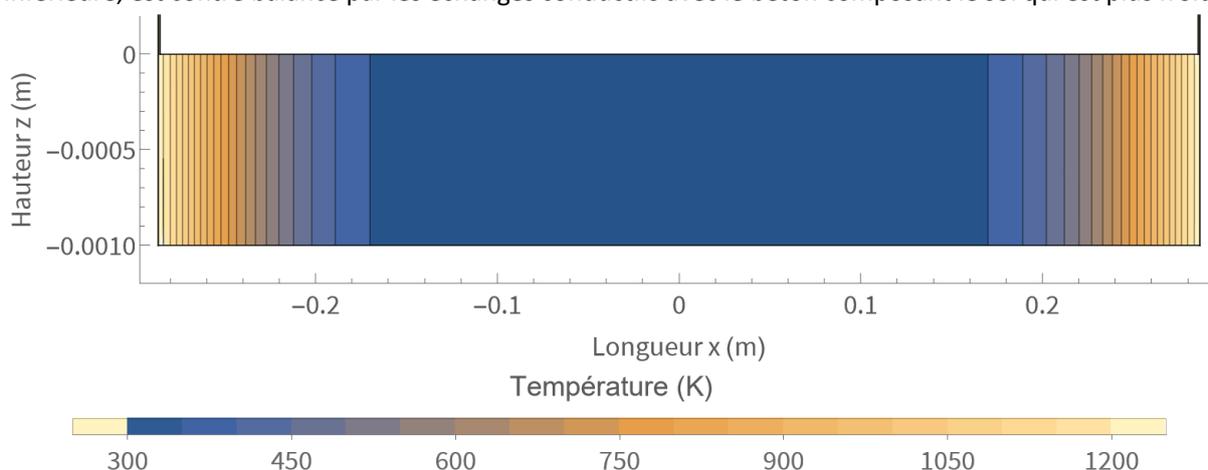


Figure 28 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.

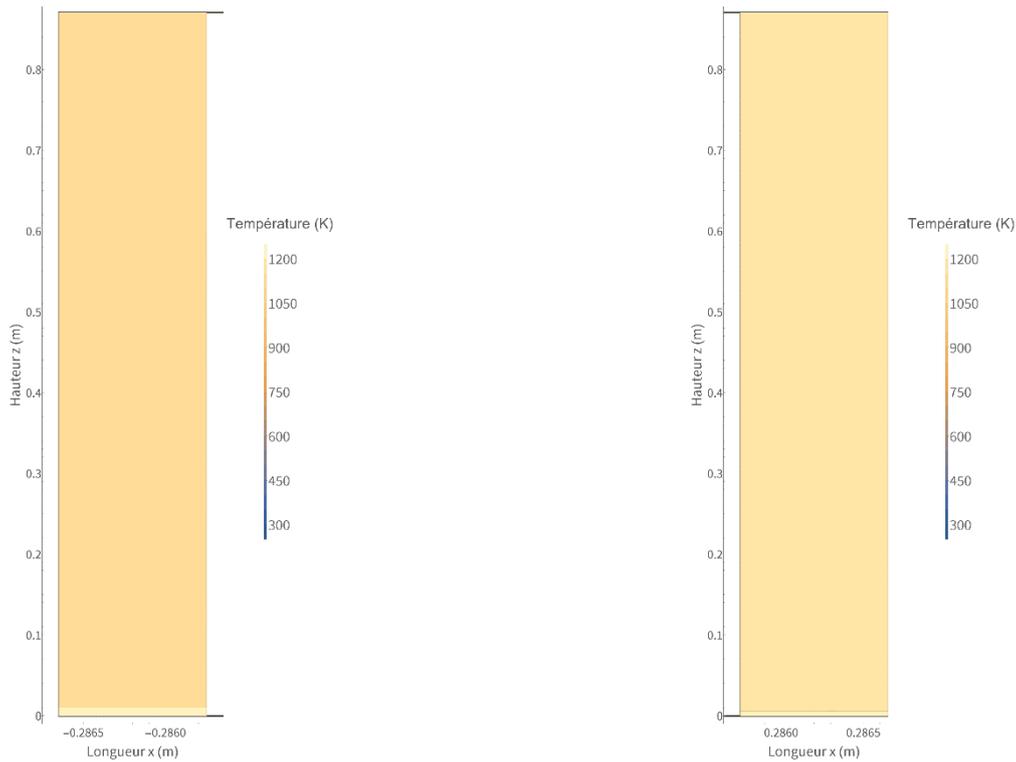


Figure 29 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.

Pour ce qui est des parois latérales (Figure 29) ainsi que des parois supérieures (Figure 89, en annexe), comme précédemment les températures sont homogènes et les régimes permanents sont atteints (Figure 30).

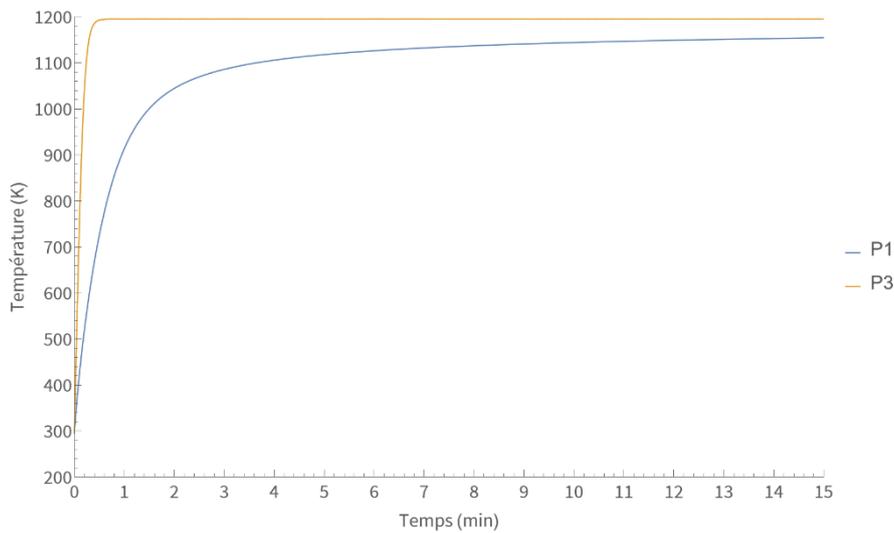


Figure 30 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.

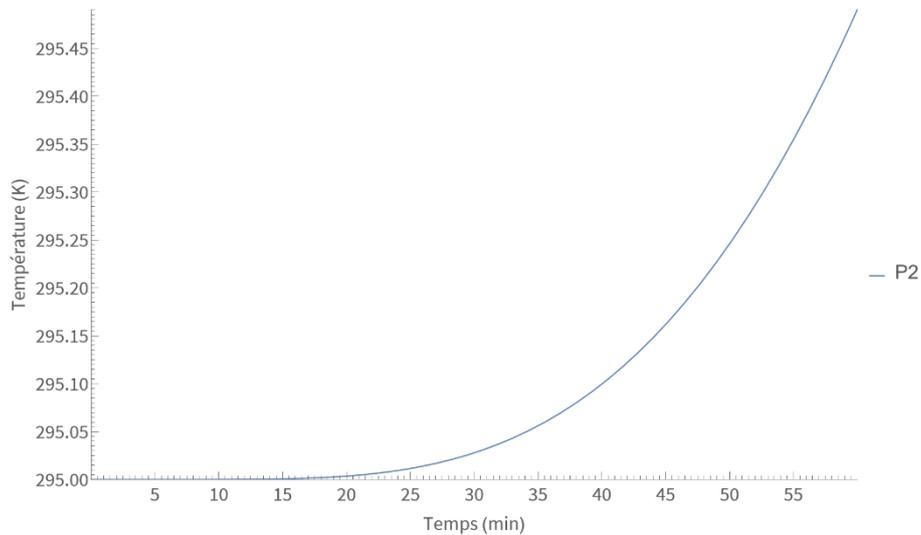


Figure 31 : Evolution des températures aux positions P2.

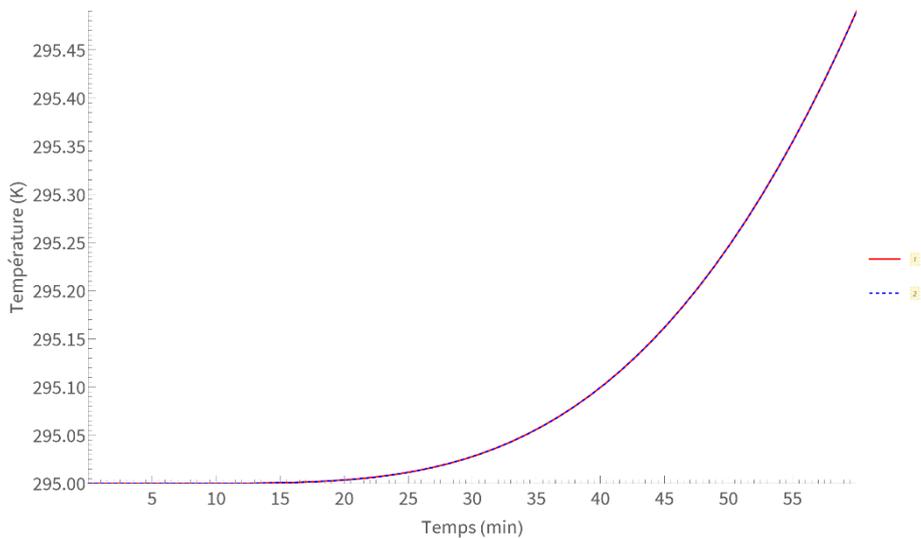


Figure 32 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi inférieure.

Finalement, nous voyons que la température de la paroi inférieure est identique en sa limite extérieure et intérieure (Figure 32). Nous avons donc également des échanges instantanés à travers la paroi inférieure dans cette configuration.

(b) Convection avec le bitume

Pour finir cette étude du comportement des parois, nous étudierons le cas où les échanges entre bitume et parois sont uniquement convectifs et que le bitume est maintenu à 22°C.

Encore une fois, les parois supérieures atteignent une température homogène au bout d'une heure (Figure 90, en annexe). Tout comme précédemment, ce régime permanent rapidement atteint (Figure 35) est justifié par des conditions aux limites indépendantes du temps.

Pour la partie haute des parois latérales, la situation est également identique (Figure 35). Néanmoins, nous observons une différence de température bien identifiable, entre la partie haute n'étant pas en contact avec le bitume et la partie basse étant en contact (Figure 33). Cela semble logique que cette partie basse soit plus faible en température car elle est en contact avec le bitume et non avec l'air chaud. Cependant dans la situation où le fût était isolé du sol nous n'avions pas aperçu une telle différence.

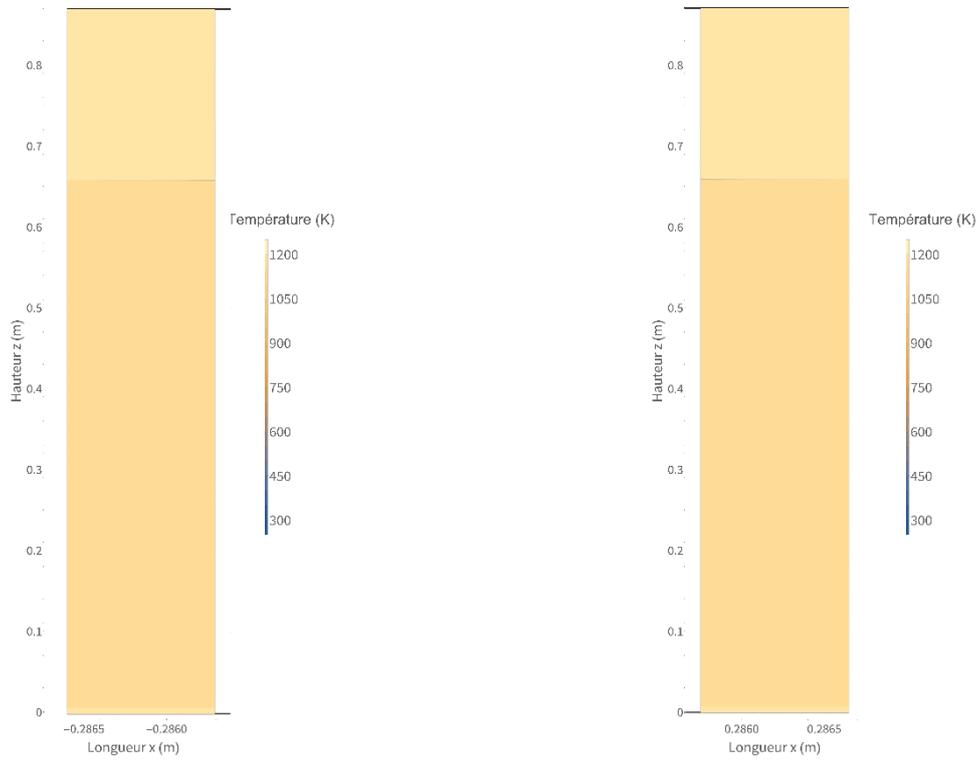


Figure 33 : Température des parois latérales au bout de 1h de chauffe.

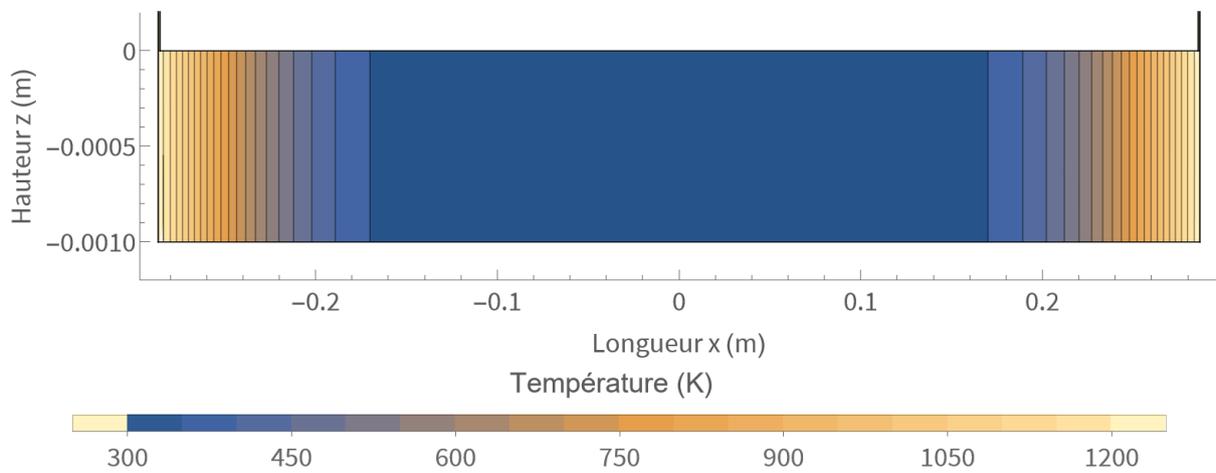


Figure 34 : Température de la paroi inférieure au bout de 1h de chauffe.

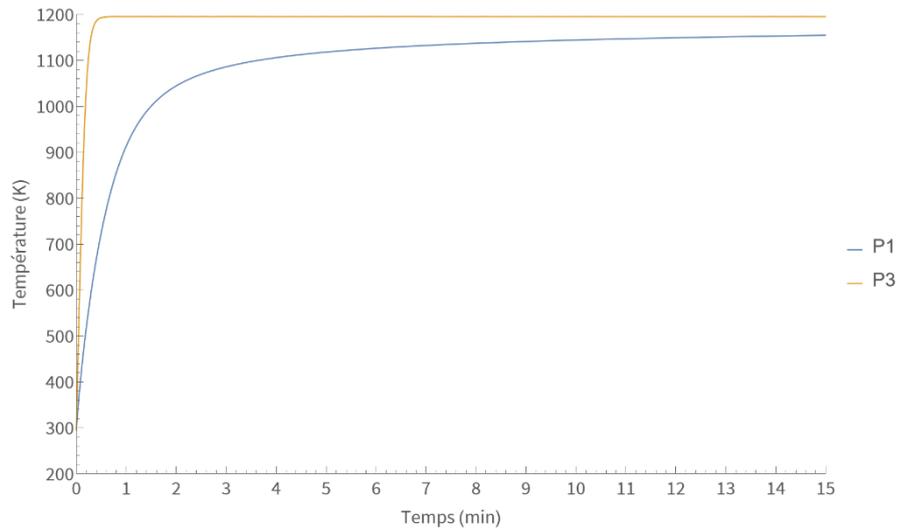


Figure 35 : Evolution des températures aux positions P1 et P3.

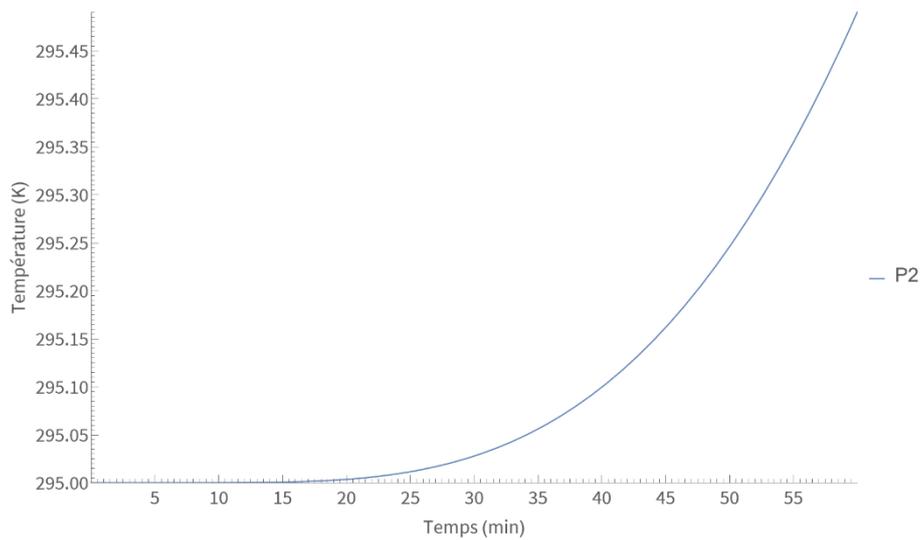


Figure 36 : Evolution des températures aux positions P2.

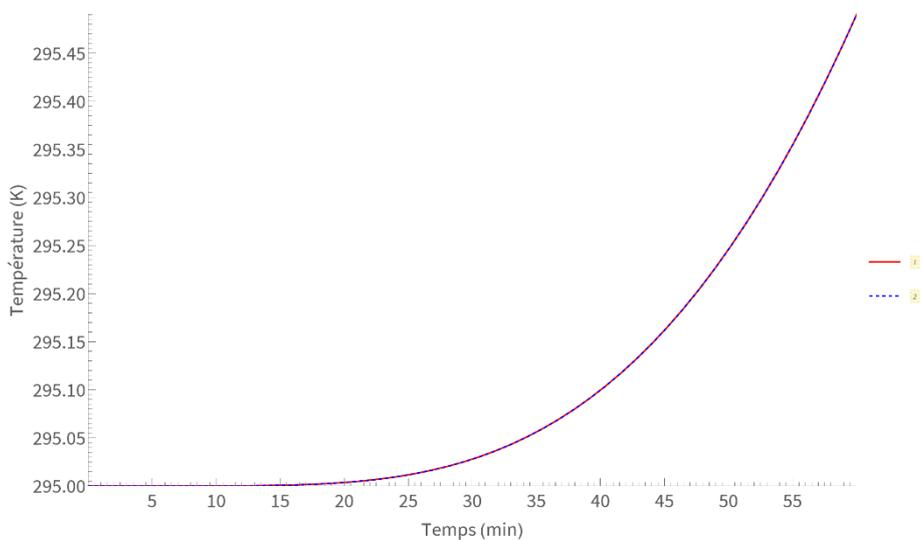


Figure 37 : Températures des limites extérieure et intérieure de la paroi inférieure.

Pour finir, la Figure 37 nous permet de constater que les échanges sont toujours instantanés dans la paroi inférieure.

3. Comparaison avec la condition limite en température commandée par la courbe ISO 834.

Pour cette partie, nous allons comparer la montée en température des parois dans deux situations distinctes.

La situation 1 est la suivante. L'air ambiant a été chauffé instantanément de 295K à 1560,5K. Pour la situation 2, l'air ambiant est chauffé de 295K à 1560,5K en suivant la courbe ISO 834. L'air atteint donc la température de 1560,5K au bout d'une heure dans cette situation.

Pour les deux situations, nous nous sommes placés dans le cas où les parois sont en contact avec le sol et nous sommes limités à des échanges conductifs entre les parois et l'enrobé bitumineux. Nous arrêtons la modélisation au bout d'une heure.

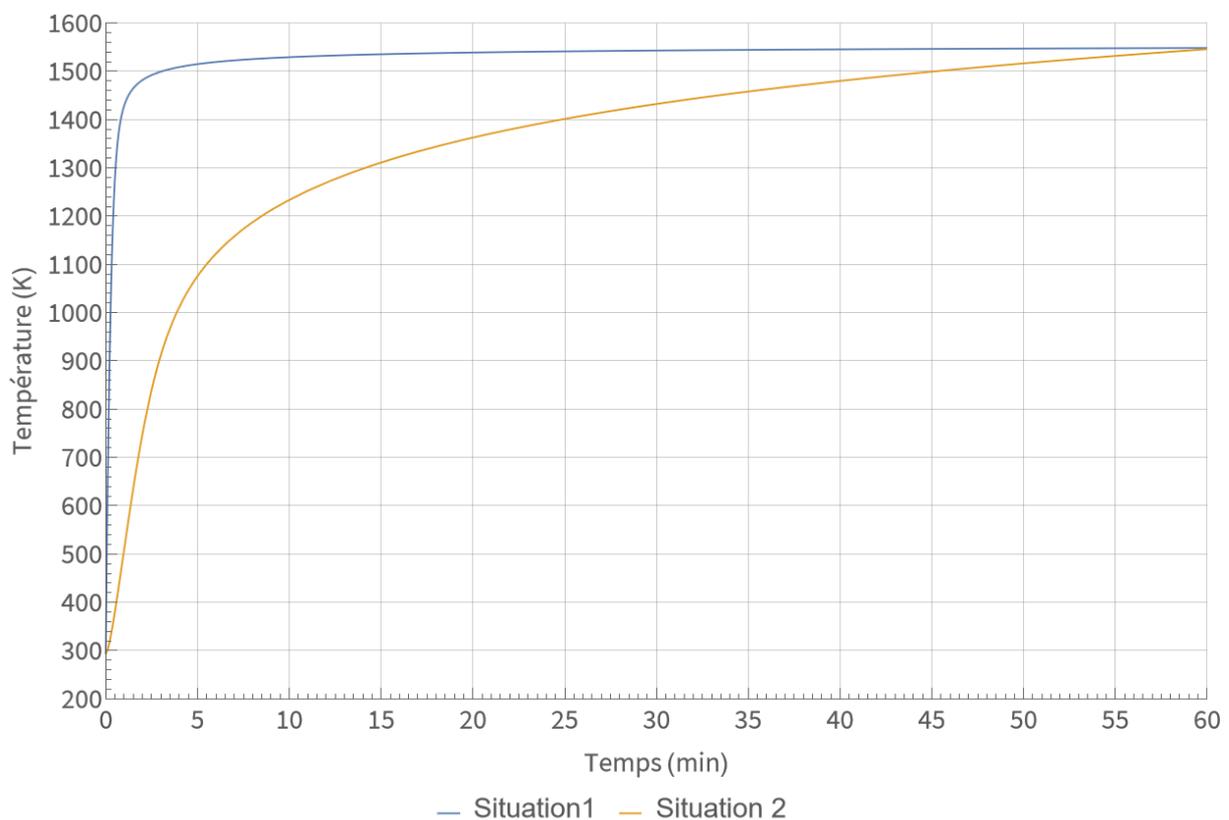


Figure 38 : Evolution de la température des parois à la position 1.

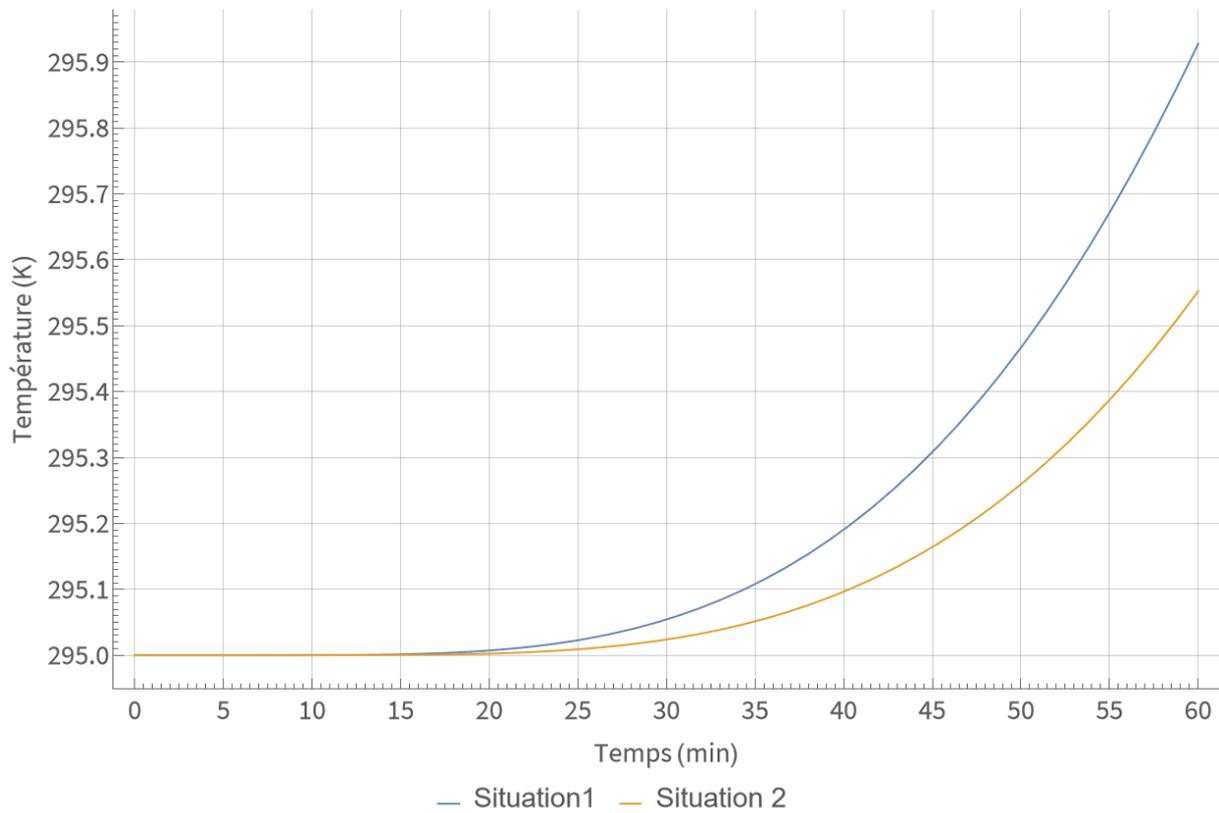


Figure 39 : Evolution de la température des parois à la position 2.

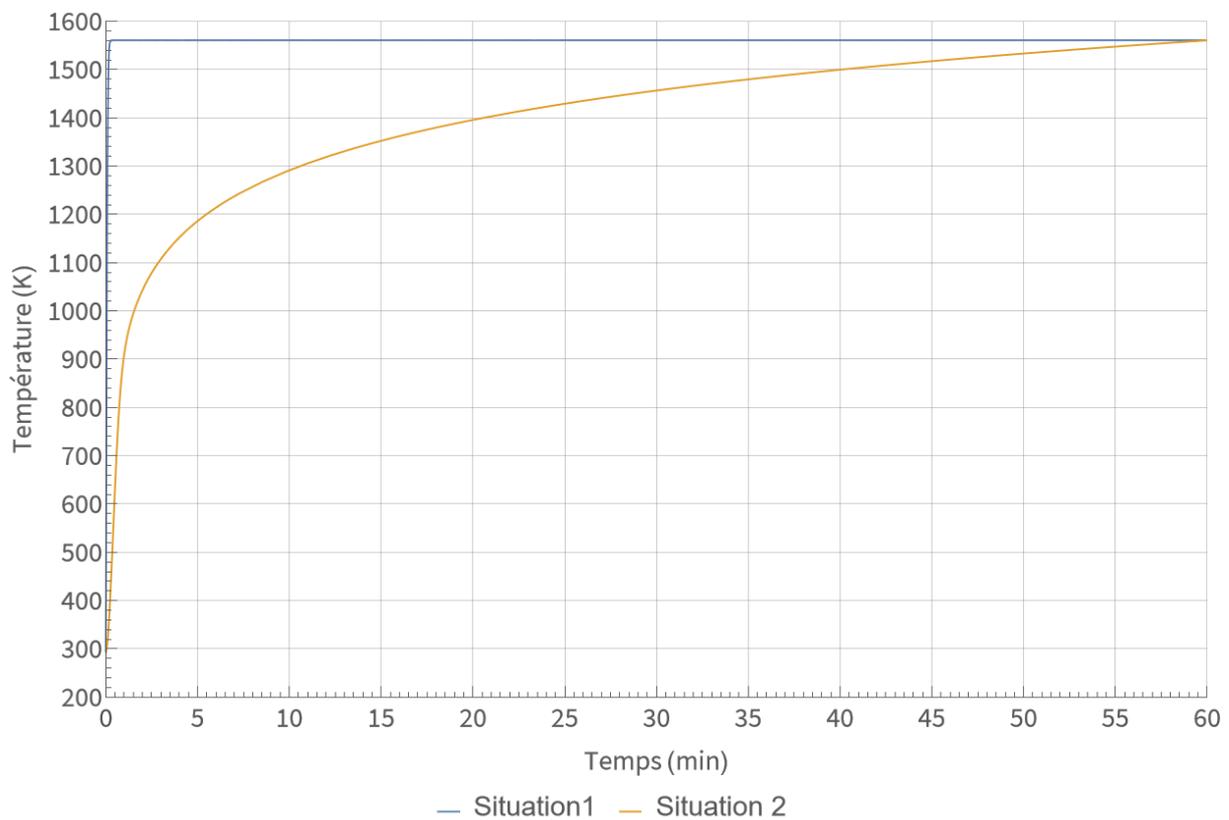


Figure 40 : Evolution de la température des parois à la position 3.

Nous pouvons voir, à travers les Figure 38 et Figure 40, que les températures finales des parois en position P1 et P3, sont égales à 1560,5 K quelle que soit la situation. Néanmoins, la montée en température est beaucoup plus rapide dans la situation 1 et le régime permanent est atteint rapidement, comme expliqué précédemment. A l'inverse, la température de 1560,5 K est atteinte seulement au bout d'une heure dans la situation 2 au niveau des positions P1 et P3.

Pour ce qui est de la température de parois au niveau de la position 2, nous pouvons observer un décalage entre les températures des situations 1 et 2 (Figure 39). Cela confirme ce que nous avons vu précédemment : la montée en température est plus longue dans la situation 2.

En conclusion, si nous nous plaçons dans la situation la plus réaliste, c'est-à-dire la situation 2, la montée en température des parois se fait sur un temps plus important. Cependant, dans les régions où un régime permanent est atteint (celles qui ne sont ni en contact avec le bitume ni avec le béton), les températures au bout d'une heure sont identiques à celle où la température de l'air est commandée par un step.

4. Conclusion sur le rôle des parois et des conditions aux limites

Aux vues des modélisations précédentes, nous pouvons conclure que les échanges au sein des parois se réalisent de manière instantanée. En effet, peu importe les conditions d'expérience, à chaque fois la température des limites extérieure et intérieure des parois sont identiques.

De plus, les parois sont une première barrière limitant la valeur du flux de chaleur atteignant l'enrobé bitumineux. En effet, lors des simulations où seuls les échanges conductifs sont considérés entre les parois et le bitume, nous constatons que les parois en contact avec le bitume n'atteignent pas la température extérieure (Figure 30 et Figure 31 par exemple). Elles permettent donc, de par leurs capacités calorifiques, de freiner la propagation de la chaleur.

Pour finir, il faut reconnaître l'influence forte du sol qui, dans la situation que nous nous sommes donnés, va refroidir le bitume au niveau de sa paroi inférieure.

II. Mise en place du phénomène conducto-convectif au sein de la matrice bitume

Rappelons ici les caractéristiques choisies pour décrire notre matrice bitume [33] :

- Une densité volumique de 1400 kg.m^3
- Une capacité thermique de $1500 \text{ J.K}^{-1}.\text{m}^{-3}$
- Une conductivité thermique $0.25 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$

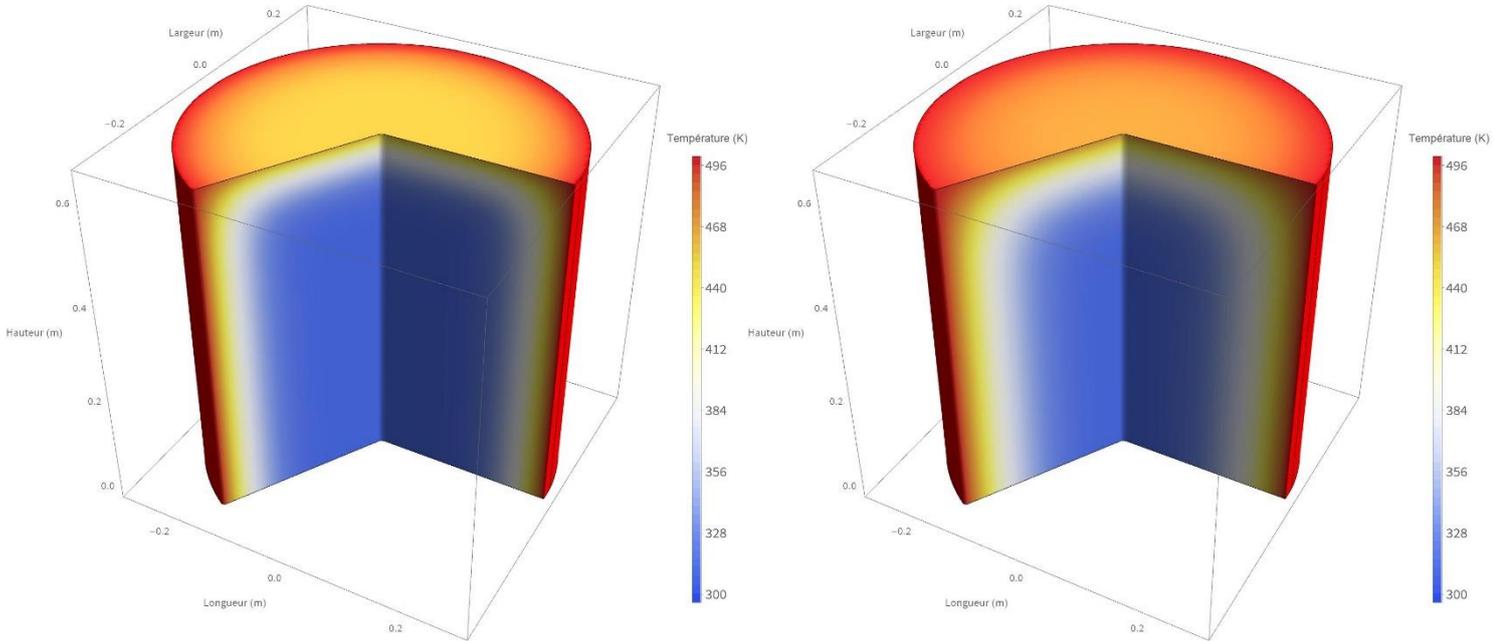
Nous allons donc maintenant préciser le comportement de l'enrobé de boues bitumées lors de sa montée en température.

1. Transferts internes seulement conductifs

Commençons par le cas où les transferts de chaleur internes à la matrice bitume s'effectuent par conduction. La conduction étant moins « efficace » (temps caractéristique de diffusion inférieur à celui de convection) pour les transferts de chaleurs que le phénomène conducto-convectif se produisant réellement, nous allons à travers ce cas avoir une minoration de l'élévation globale en température de l'enrobé bituminé. En effet, la conduction pure entraîne des températures élevées en périphérie et faible à

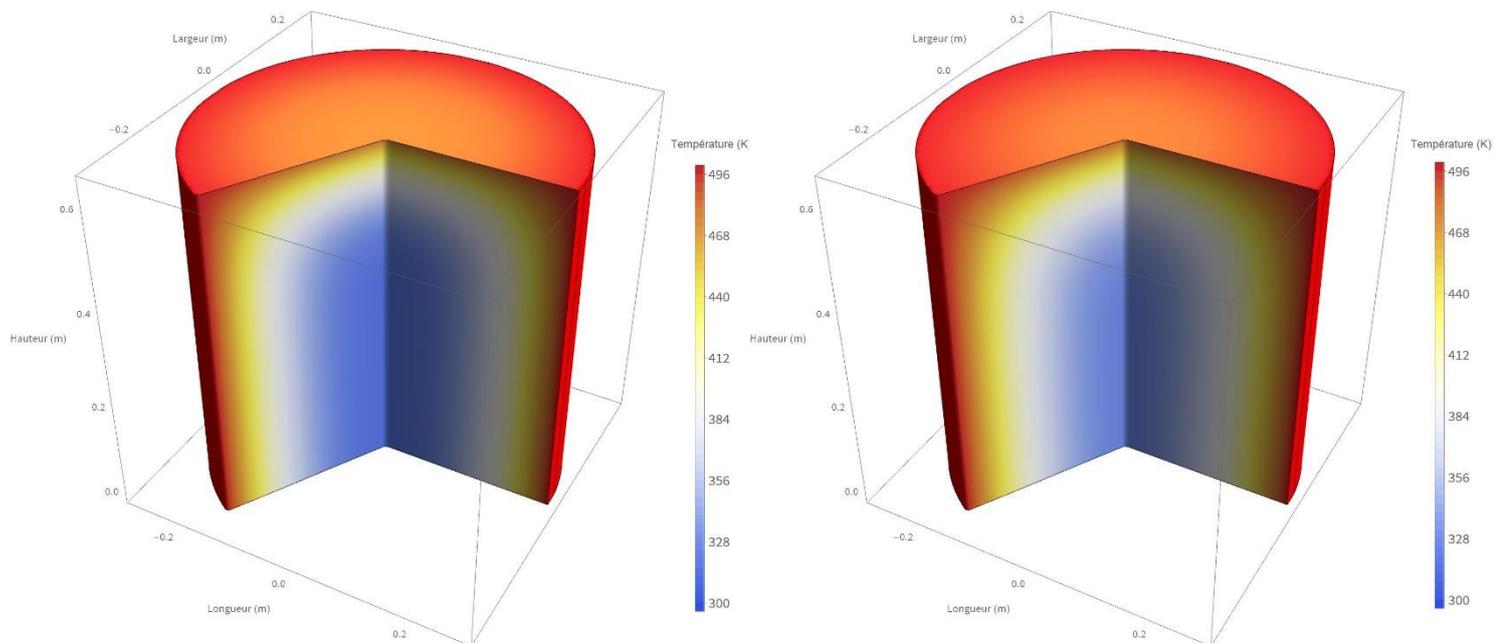
cœur. La convection va limiter les températures hautes en périphérie et accélérer par contre, la hausse de température centre. Cela va néanmoins nous permettre une première compréhension du problème.

Notre scénario est le suivant : nous considérons que la paroi inférieure est isolée thermiquement, que la paroi supérieure est chauffée par des transferts convectifs avec l'air, lui-même chauffé à 495 K, et que les parois latérales sont maintenues à 495 K. L'enrobé est initialement à 295 K et va être chauffé pendant 24h.



Temps 4 h

Temps 8 h



Temps 12 h

Temps 16 h

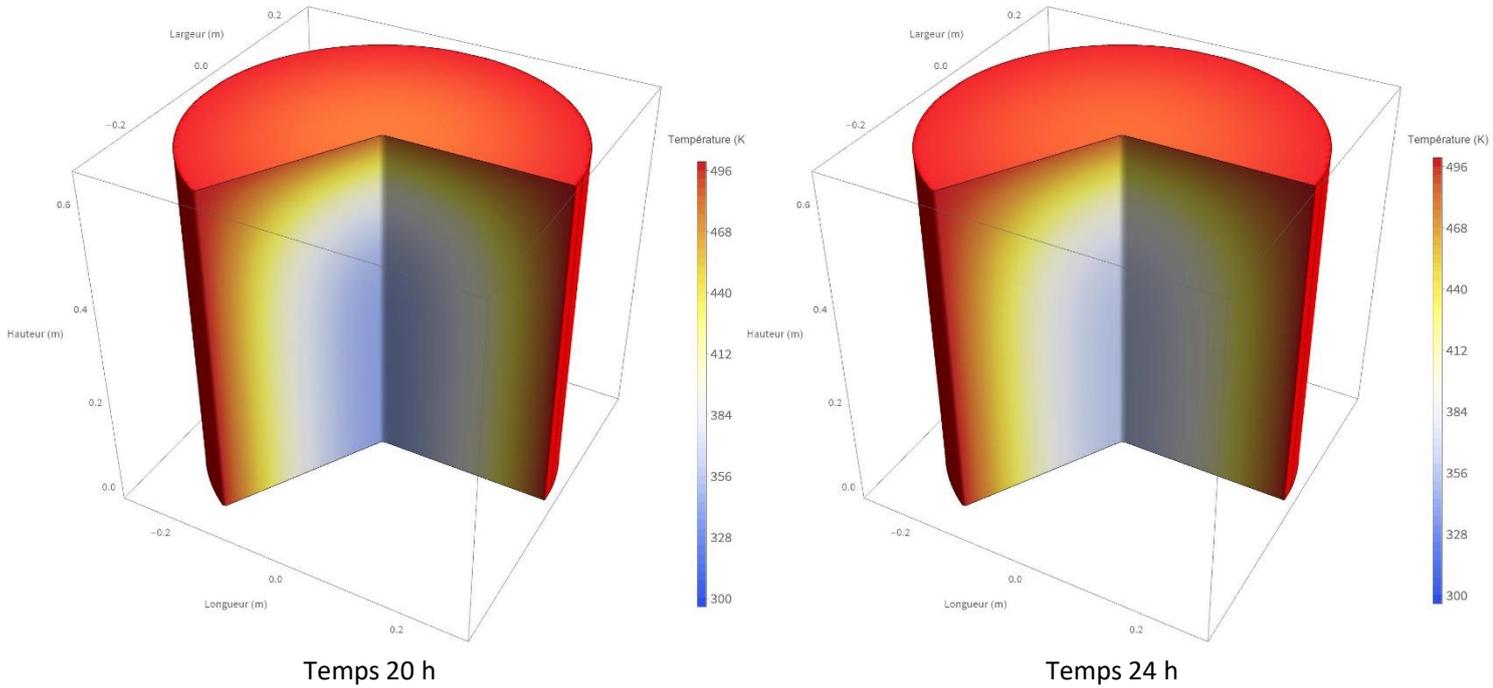


Figure 41 : Evolution de la température au sein de la matrice bitume pendant 24 h.

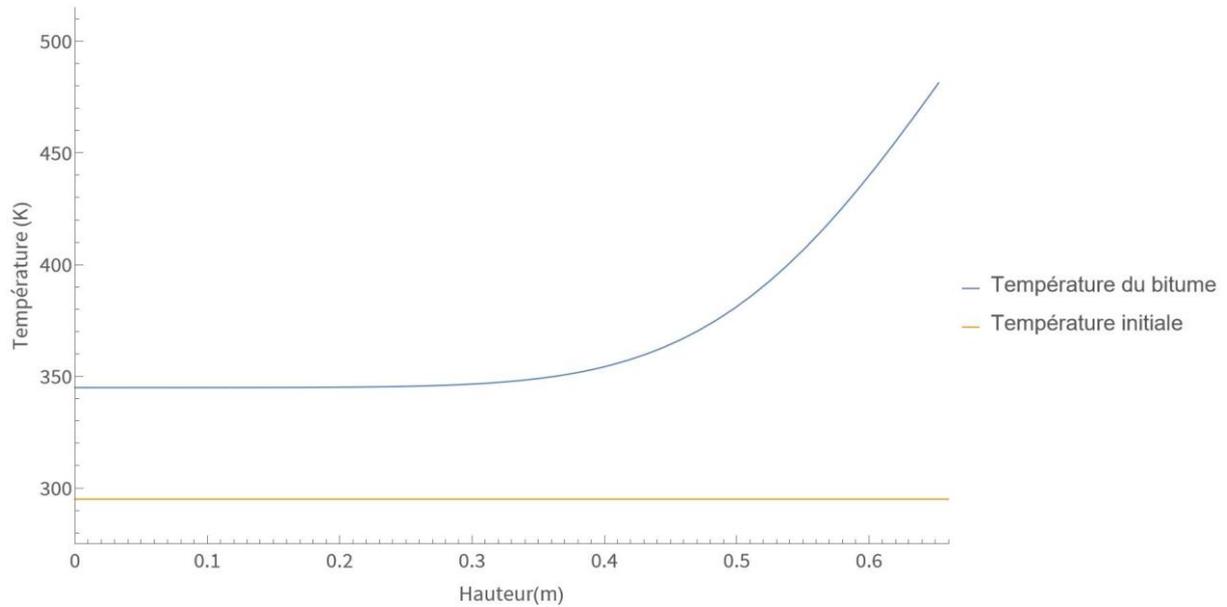


Figure 42 : Evolution de la température de la matrice bitume au bout de 24 h à $r = 0$ en fonction de la hauteur.

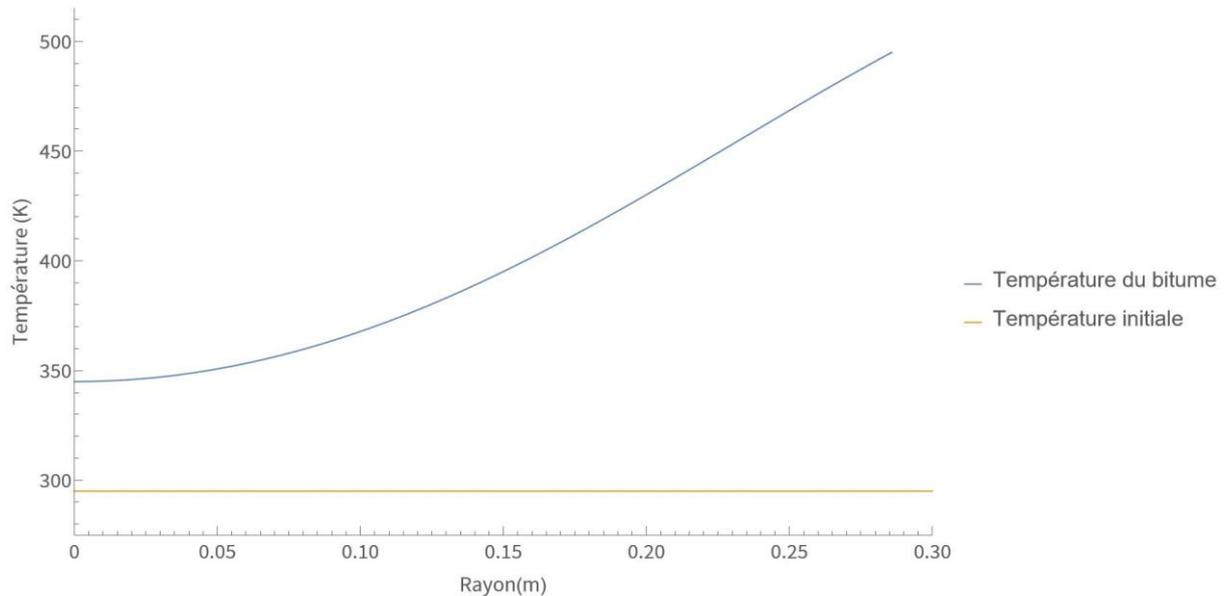


Figure 43 : Evolution de la température de la matrice bitume au bout de 24 h à $z = 0$ en fonction du rayon.

A travers les Figure 41, Figure 42 et Figure 43, nous observons que les transferts de chaleur ont pu atteindre le centre au bout de 24 h. En effet, la température de l'enrobé bitumineux est en tout point supérieure à la température initiale de 22°C après 24 h de simulation.

De plus, nous remarquons que la partie centrale inférieure de l'enrobé est celle qui a la température la plus faible. Cette partie est plus haute que large, ce qui confirme ce qui est énoncé au paragraphe suivant. Notre paramètre limitant, et donc longueur caractéristique, est bien la hauteur.

Nous pouvons également nous intéresser à l'épaisseur de la couche de matrice bitume dans laquelle la température est supérieure à 350 K au bout de 24 h. En nous positionnant à $r = 0$, Figure 42, elle est de 0.36 m pour la hauteur, ce qui représente 42% de cette dernière. Pour le rayon, elle est de 0.04 m à hauteur nulle, Figure 43. Cela correspond à 16% de la grandeur. Nous pouvons donc voir que le flux convectif de l'air chauffant la paroi supérieure, est plus efficace que la température latérale des parois fixe, pour transmettre la chaleur.

2. Etudes des nombres caractéristiques

Avant de passer à la modélisation des transferts thermiques conducto-convectifs ayant lieu au sein de l'enrobé bitumineux, nous allons nous attarder sur les grandeurs caractéristiques définissant notre fluide.

Pour certaines de ces grandeurs, nous avons besoin de définir une longueur caractéristique, or, aux vues de la géométrie cylindrique de notre problème, deux choix s'offrent à nous. Nous pouvons choisir la hauteur de l'enrobé bitumineux ou le rayon. La hauteur étant supérieure au rayon, nous allons présupposer que les valeurs limitantes seront pilotées par la hauteur. Par exemple, la chaleur mettra plus de temps à se propager par conduction selon la hauteur que selon le rayon. Nous établissons donc que la hauteur est la longueur caractéristique. Cela nous est confirmé par la modélisation précédente des transferts uniquement conductifs.

Commençons par le nombre de Prandtl. Comme évoqué précédemment, il correspond au quotient du temps de diffusion thermique et de celui de la diffusion de la quantité de mouvement. Plus il est élevé, plus la conduction est prédominante sur l'advection. Il est intrinsèque des caractéristiques du fût.

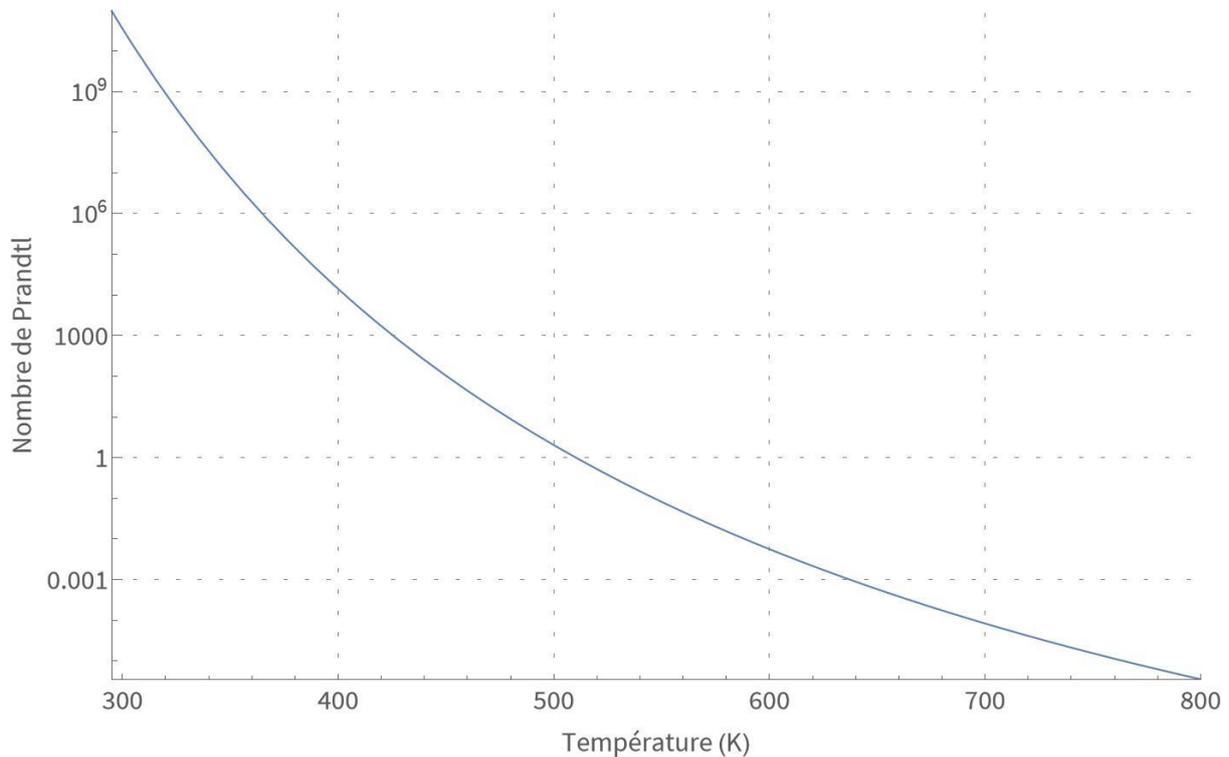


Figure 44 : Evolution du nombre de Prandtl avec la température.

Le nombre de Prandtl est inférieur à 1 pour des températures supérieures à 505K. La convection pure est donc prédominante pour les transferts de chaleur pour des hautes températures où $Pr \ll 1$. Au-dessous de 505K, la conduction est le phénomène prépondérant. Nous nous attendons donc à voir un régime convectif bien installé pour des températures supérieures à 505K. De plus, nous pouvons rappeler que le nombre de Prandtl de l'eau à 295K est de 7. La matrice bitume aura donc un comportement analogue à celui de l'eau lorsque que son nombre de Prandtl sera de l'ordre de l'unité.

Passons maintenant au nombre de Grashof. Il donne le rapport entre la poussée d'Archimède et les forces visqueuses. Une augmentation témoigne d'une augmentation de l'intensité de la convection naturelle. Comme son homologue le nombre de Reynolds, le nombre de Grashof donne la frontière séparant les phénomènes de convection laminaire et turbulente. Ce nombre critique dépend de la géométrie et des paramètres du problème. Pour notre cas, aucune valeur de référence n'existe. Néanmoins, nous trouvons dans la littérature [34] que la convection naturelle turbulente ne commence jamais avant un nombre de Grashof supérieur à 10^9 . Nous en sommes donc loin dans notre cas (Figure 45). Cela confirme notre choix de ne pas considérer les équations statistiques de la turbulence.

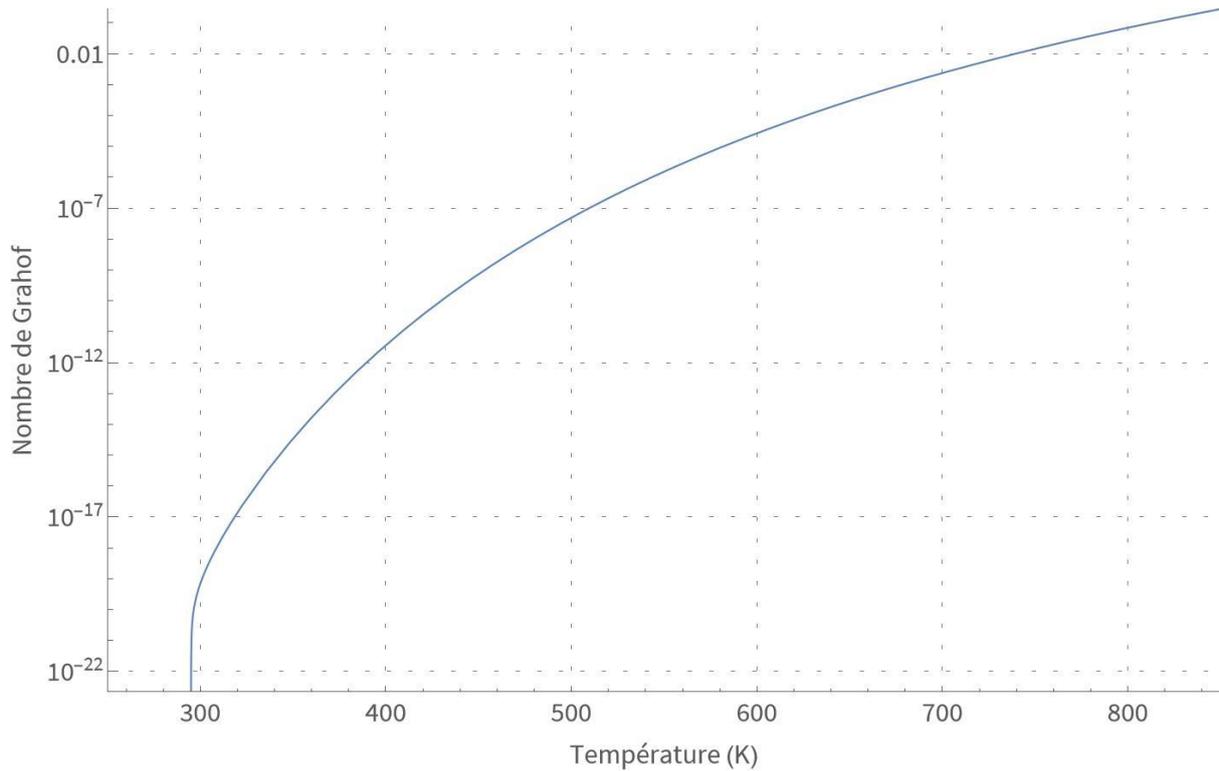


Figure 45 : Evolution du nombre de Grashof avec la température.

Finissons avec le nombre de Rayleigh. Il correspond au rapport entre le phénomène moteur du mouvement, c'est-à-dire la poussée d'Archimède sur les deux phénomènes dissipatifs. Il s'agit du frottement visqueux et de la conduction réduisant le gradient des températures.

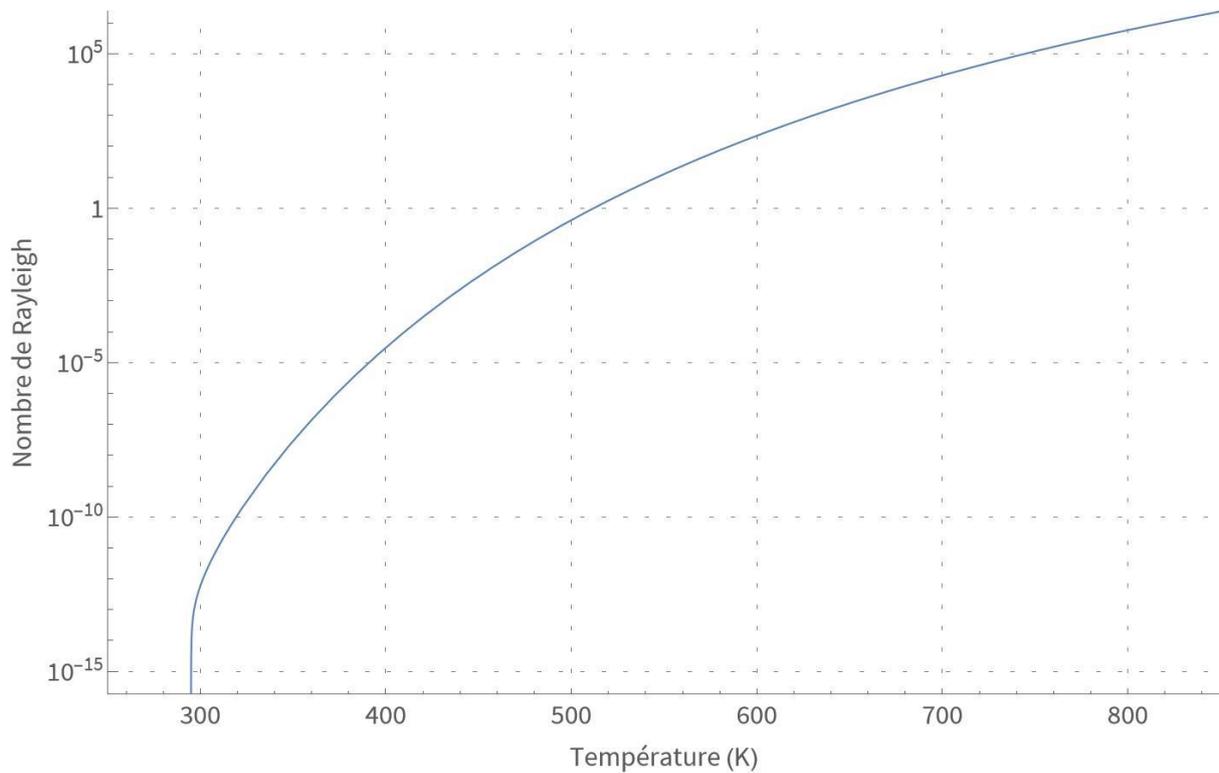


Figure 46 : Evolution du nombre de Rayleigh avec la température.

Nous allons maintenant évoquer une configuration particulière celle de Rayleigh-Bénard. Elle correspond à deux plaques horizontales emprisonnant un liquide. Seule la plaque inférieure est chauffée lors de cette expérience. Dans cette situation particulière, des études ont été faites pour déterminer un nombre de Rayleigh critique, à partir duquel apparaissent les structures convectives.

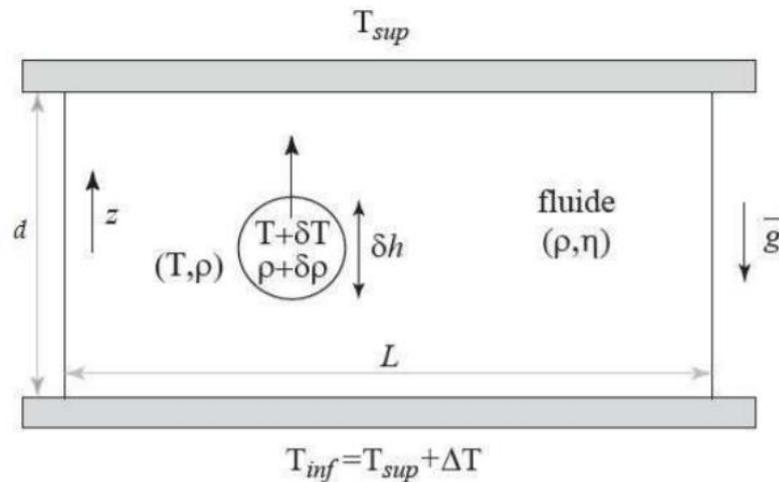


Figure 47 : Schéma exposant la configuration du mécanisme de convection de Rayleigh-Bénard [35].

Le nombre de critique retenu est de 1707 [36]. Néanmoins, nous ne pouvons utiliser ce nombre pour notre simulation car notre situation ne correspond pas à celle de référence.

3. Transferts internes conducto-convectifs à viscosité dynamique constante

Nous allons maintenant évoquer les transports conducto-convectifs se produisant au sein de la matrice bitume.

Afin de simplifier notre modélisation, nous allons nous positionner dans le cas suivant. Nous allons seulement considérer des échanges convectifs entre la limite supérieure du bitume et l'air chaud. Nous allons également fixer la température des limites latérales à la même température que celle de l'air ambiant. Nous négligerons donc les parois du fût et les interactions avec le sol. D'après ce qui a été vu précédemment, nous aurons donc une majoration de l'élévation de la température par rapport à un véritable scénario incendie.

Pour finir, à l'instant $t=0$, nous considérerons que l'air est à une température T_i et qu'il passe instantanément à la température T_c pour tout $t>0$.

Considérons la situation où la viscosité de l'enrobé est fixée et le problème est considéré en 2D. Voici nos paramètres :

- Capacité thermique 1500 J.K^{-1}
- Masse volumique 1400 kg.m^{-3}
- Conductivité thermique
- Viscosité dynamique $16,6 \text{ Pa.s}$ (soit la viscosité dynamique à 383 K de l'enrobé bitumineux) ou $1,7 \text{ Pa.s}$
- $T_i = 383 \text{ K}$
- $T_c = 403 \text{ K}$

- Coefficient d'échange de l'air $15 \text{ W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$

Nous privilégions ici un faible palier de chauffe. Dans le but de voir les structures convectives se former dans un temps de modélisation correct, nous avons choisi de considérer un enrobé déjà chauffé homogènement à la température de 383 K.

a. Rôle des maillages temporel et spatial

Lors de l'écriture de notre programme, nous avons pu noter la sensibilité des résultats au choix des maillages spatial et temporel. Nous détaillerons maintenant cette dépendance avec l'exemple de la température.

Commençons par l'influence du maillage spatial. Dans les conditions énoncées précédemment (et avec une viscosité de $16,6 \text{ Pa} \cdot \text{s}$), nous avons comparé les résultats concernant l'évolution de la température en fonction d'un nombre de points du maillage spatial. La modélisation étant en deux dimensions, et de forme rectangulaire, nos éléments de mailles sont des carrés. Nous avons alors considéré 6 maillages, formés respectivement 600, 3 000, 5 800, 29 000, 49 000 et 58 000 points.

Nous avons alors déterminé les champs de vitesse suivants lors du premier pas temporel, c'est-à-dire au bout de 20s de chauffe.

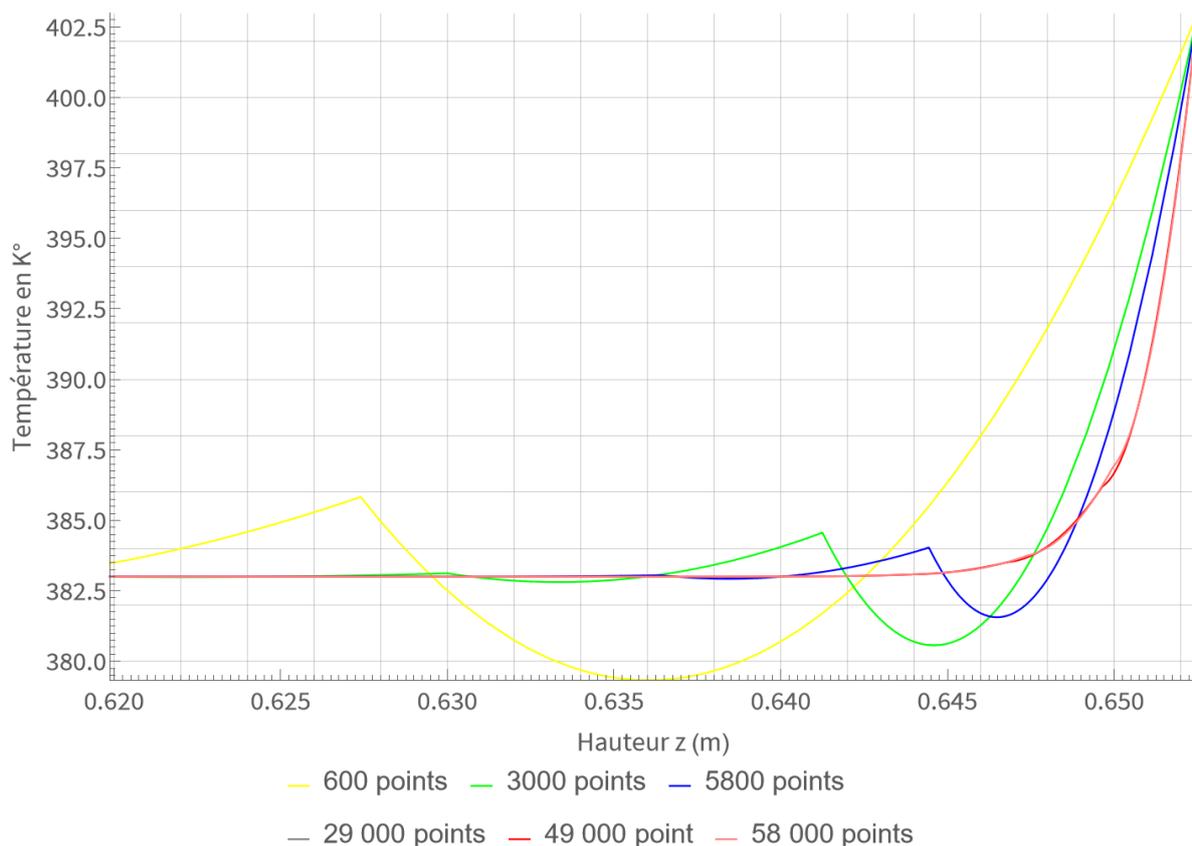


Figure 48 : Evolution de la température en fonction de la hauteur au bout de 20s.

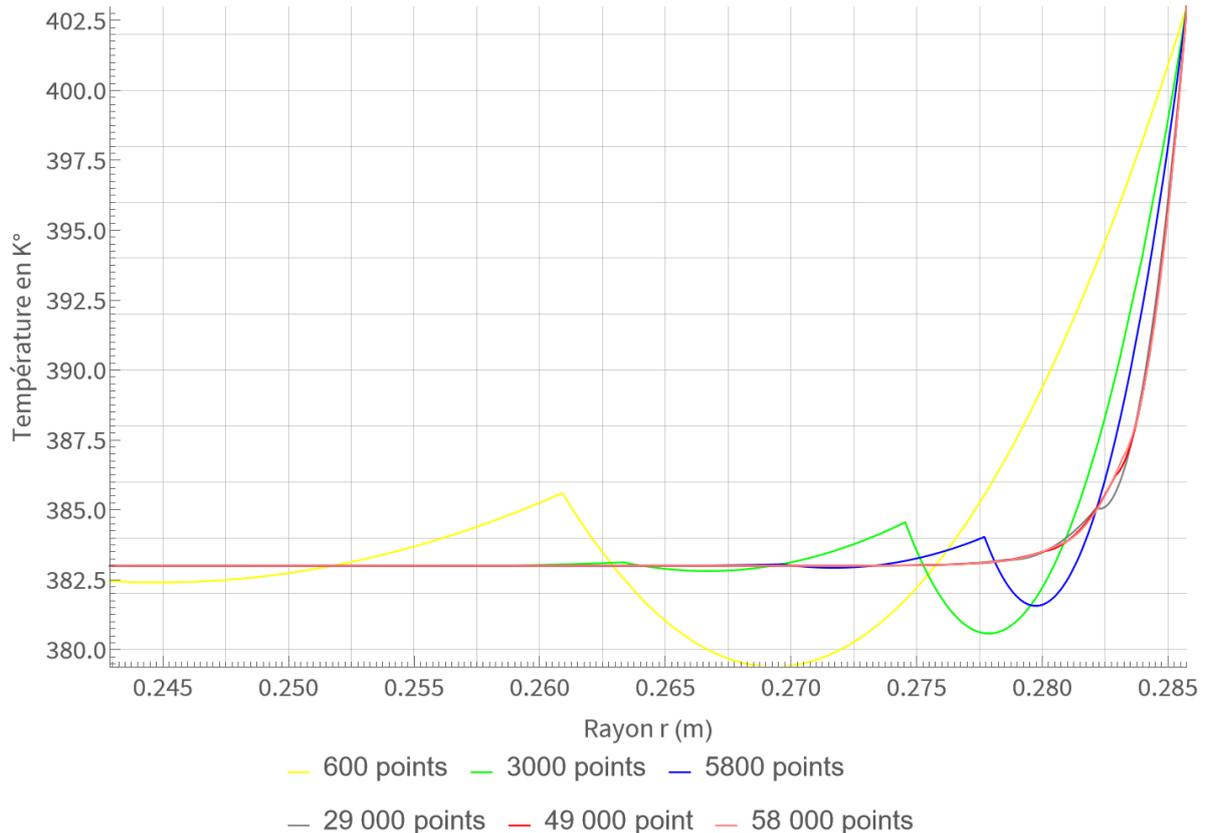


Figure 49 : Evolution de la température en fonction du rayon au bout de 20s (pour $z=0,9h$).

Les figures ci-dessus nous permettent clairement d'observer l'apparition d'oscillations de la température pour tous les maillages inférieurs à 58 000 points. De plus, nous pouvons remarquer que pour les maillages ayant un nombre de points égal à 600, 3000 et 5800, ces oscillations conduisent à des valeurs inférieures à la température initiale de l'enrobé bitumineux. Cela est impossible car il n'existe aucune consommation d'énergie interne à la matrice et aucun flux sortant positif.

Ces oscillations sont probablement dues à de l'aliasage causé par la non-linéarité des équations physiques de notre modèle.

Passons maintenant à l'influence du maillage temporel. Pour cela, fixons le nombre de point de maillage spatial à 600. Nous allons considérer deux discrétisations temporelles, la première avec un dt de 20 s et l'autre de 1000 s. La Figure 50, nous permet de constater qu'un pas temporel plus élevé « lisse » les oscillations du maillage spatial. Cependant, augmenter le maillage temporel n'est pas une solution pour éviter les oscillations. En effet, plus le pas de temps est élevé, plus l'erreur sur les valeurs du pas suivant seront élevés. Néanmoins il est possible que les erreurs soient faibles si le temps d'observation est très grand devant le pas de temps. Nous préférons quand même ne pas considérer cette option.

La solution pour éviter ces oscillations est de raffiner le pas du maillage spatial, néanmoins cela implique un plus long temps de calculs.

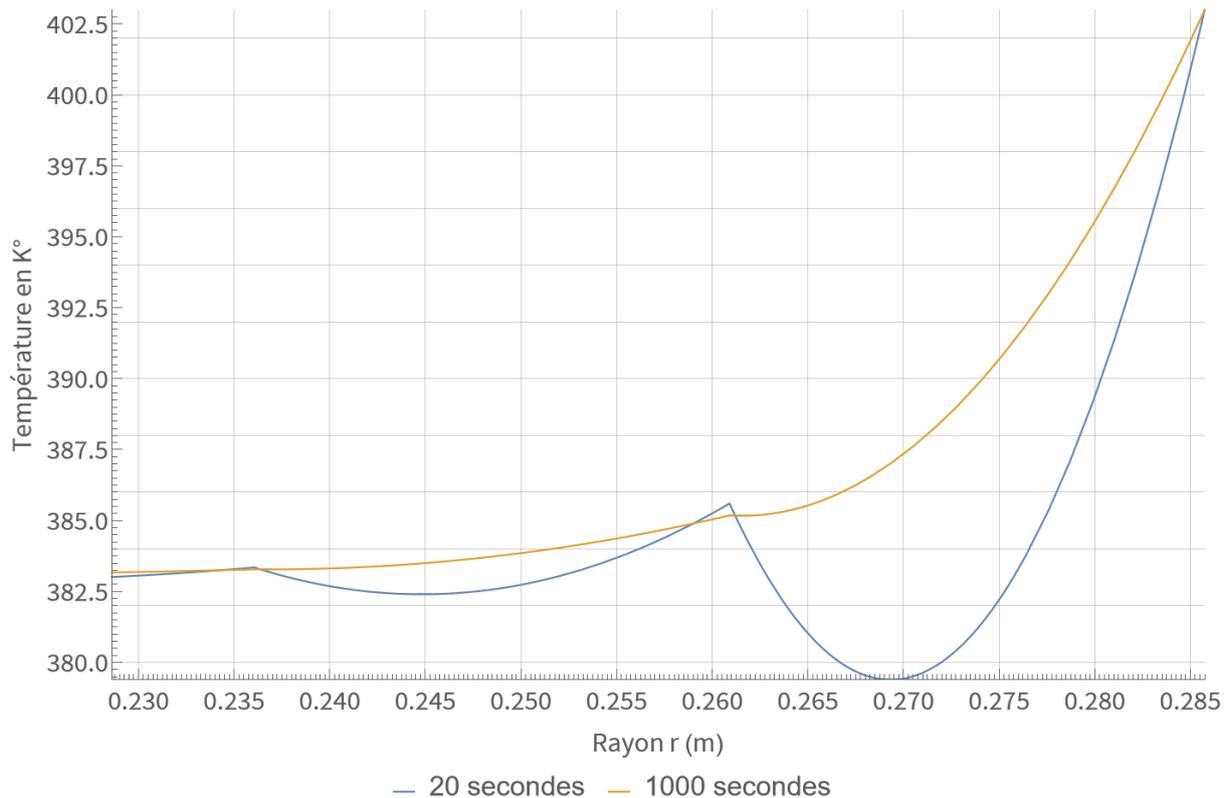


Figure 50 : Evolution de la température avec le maillage temporel, en fonction du rayon.

b. Influence de la viscosité dynamique choisie

Passons maintenant aux résultats de notre modélisation. Les conditions aux limites pour les vitesses sont les suivantes :

- Les vitesses verticale et horizontale sont nulles au niveau des parois latérales et inférieures
- Seule la vitesse verticale au niveau de la paroi supérieure est nulle.

Nous avons modélisé 5 secondes d'échauffement dans les conditions énoncées précédemment. Dans un cas, la viscosité dynamique du bitume valait 16.6 Pa.s, dans l'autre elle était de 1,7 Pa.s.

i. La température

Nous observons grâce à la Figure 51 : Température en fonction du rayon à $z=0,9h$. à la Figure 54, que les températures sont plus ou moins identiques dans les deux situations lorsque nous nous plaçons à une abscisse donnée et que nous parcourons le rayon. En revanche, nous voyons avec la Figure 52, que l'échauffement est à peine plus élevé pour le bitume de viscosité plus faible dans le cas où le rayon est fixe et la hauteur varie. Cela s'explique par le fait que les transferts convectifs sont d'autant plus efficaces que la viscosité décroît.

Pour finir, la profondeur de pénétration de la chaleur semblent être la même au vu des figures ci-dessous.

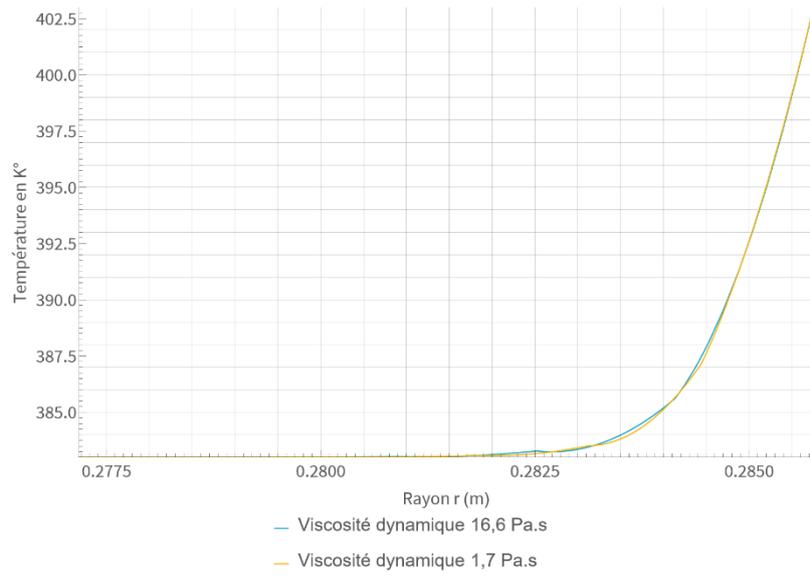


Figure 51 : Température en fonction du rayon à z=0,9h.

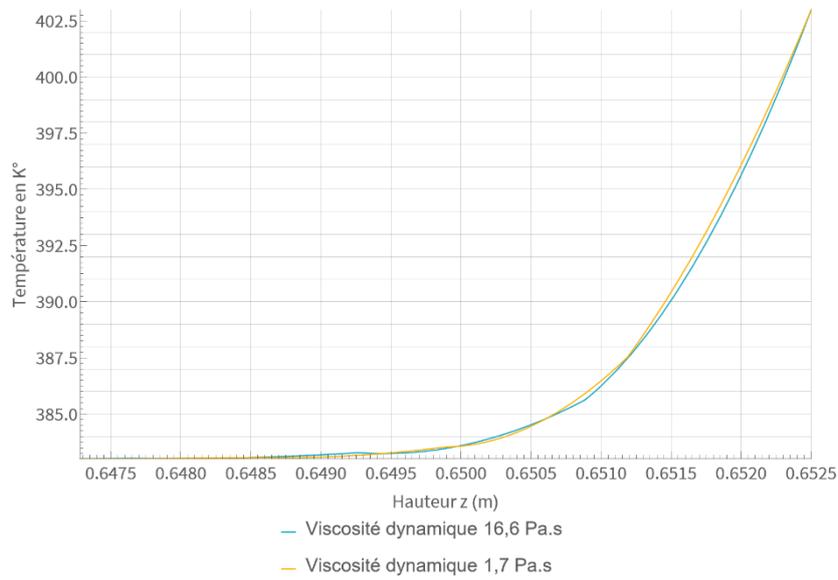


Figure 52 : Température en fonction de la hauteur à r=0.95d.

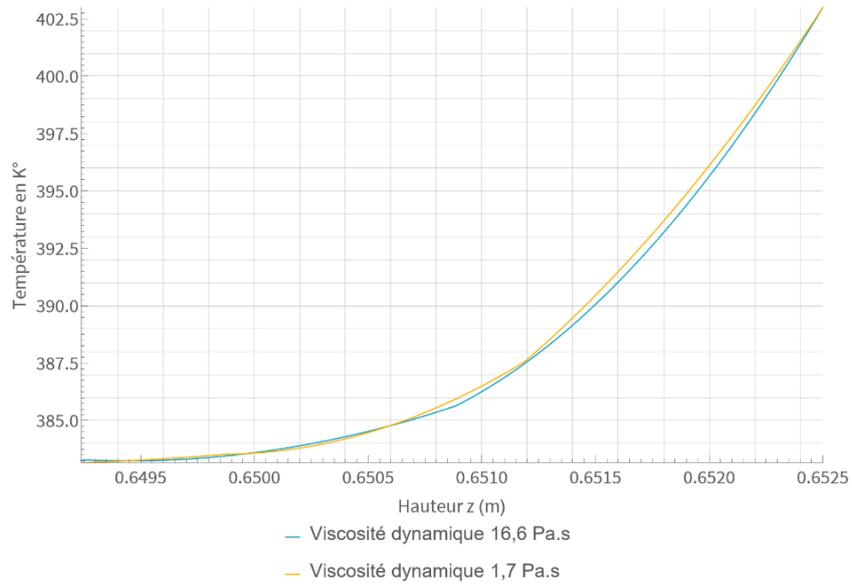


Figure 53 : Température en fonction de la hauteur à $r=0$.

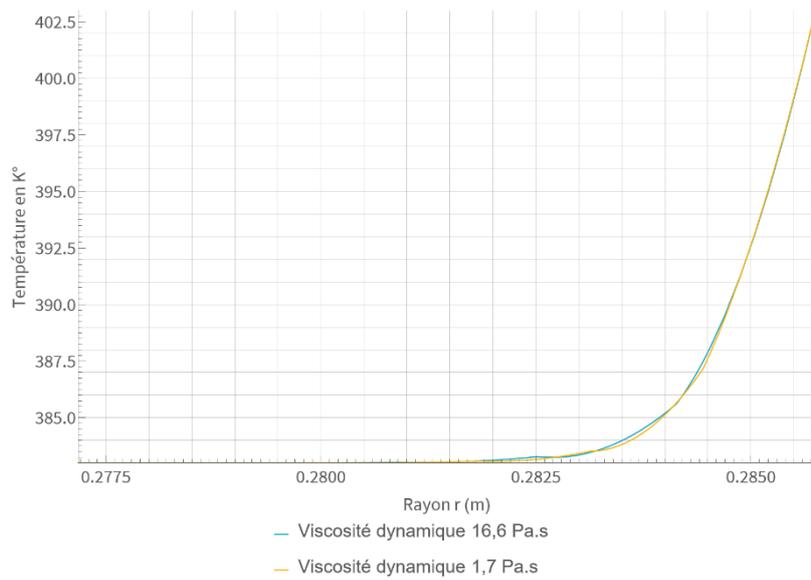


Figure 54 : Température en fonction du rayon à $z=h/2$.

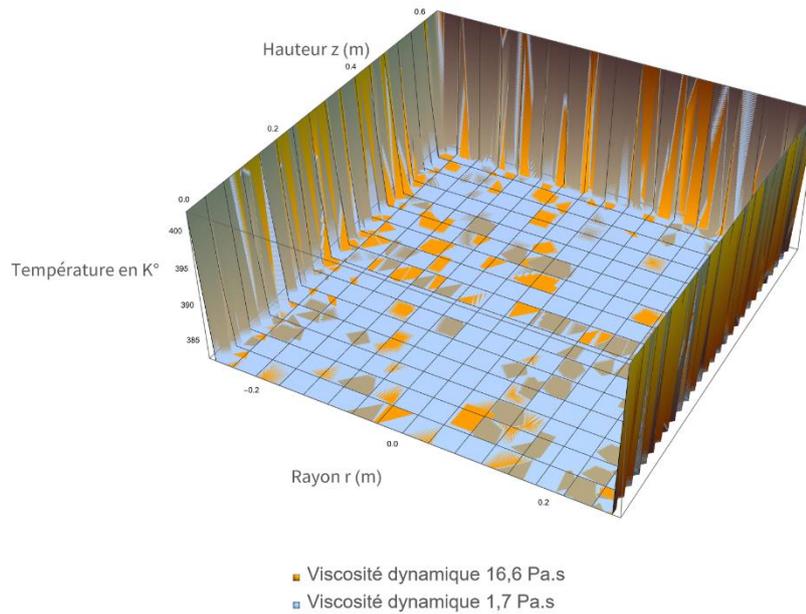


Figure 55 : Température en 3D.

ii. La vitesse horizontale

Passons maintenant à la comparaison des vitesses horizontales. A l'aide de la Figure 59, nous pouvons voir que dans les deux situations, il existe un plan d'antisymétrie dû à la géométrie de notre problème. Ce point pourrait être intéressant à exploiter pour simplifier les équations lors de la modélisation 3D.

Nous observons également que la vitesse verticale est la plus élevée lorsque z est élevé (Figure 57). En effet, elle est la plus faible en $z = h/2$ (Figure 59) et augmente aux extrémités de la cote z . Néanmoins, nous pouvons remarquer (Figure 56 et Figure 57), que la vitesse horizontale gagne un ordre de grandeur entre un $z = 0,1h$ et un $z = 0,99h$. Cette différence s'observe également Figure 58, où le rayon est fixé et la cote varie.

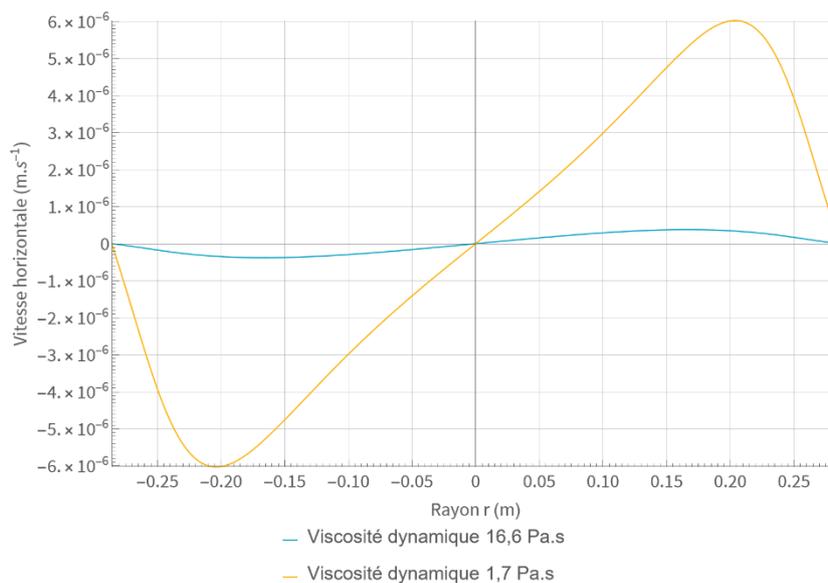


Figure 56 : Vitesse horizontale en fonction du rayon à $z = 0.1h$.

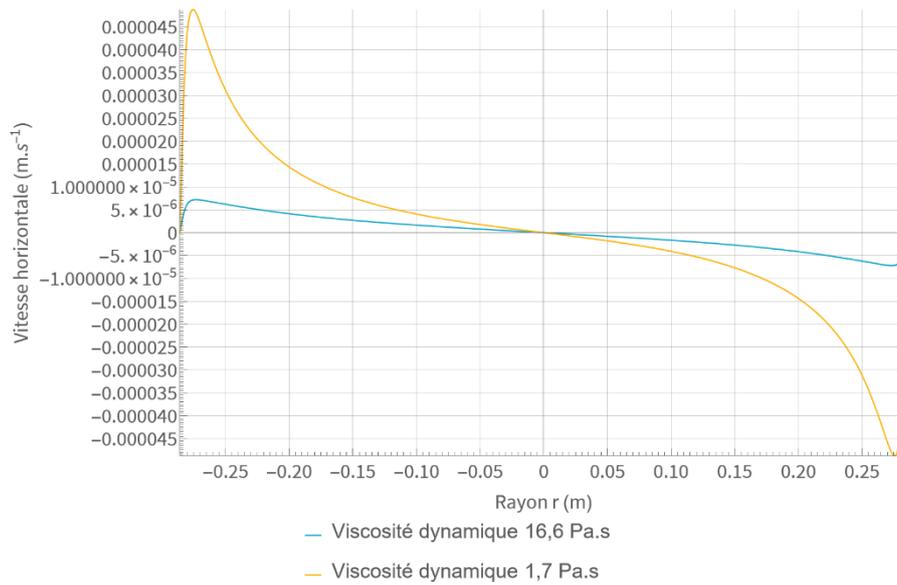


Figure 57 : Vitesse horizontale en fonction du rayon à $z = 0.99h$.

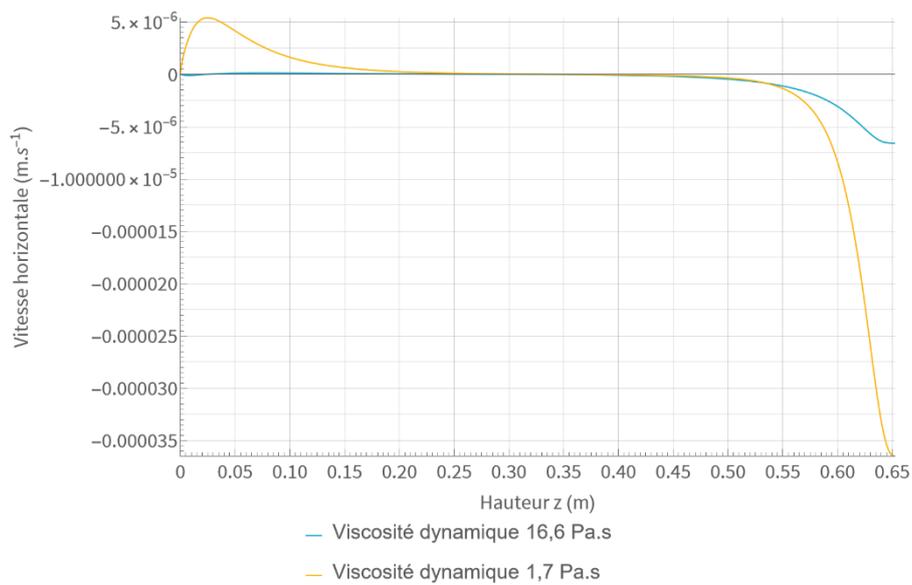


Figure 58 : Vitesse verticale en fonction de la hauteur z à $r = 0.9d$.

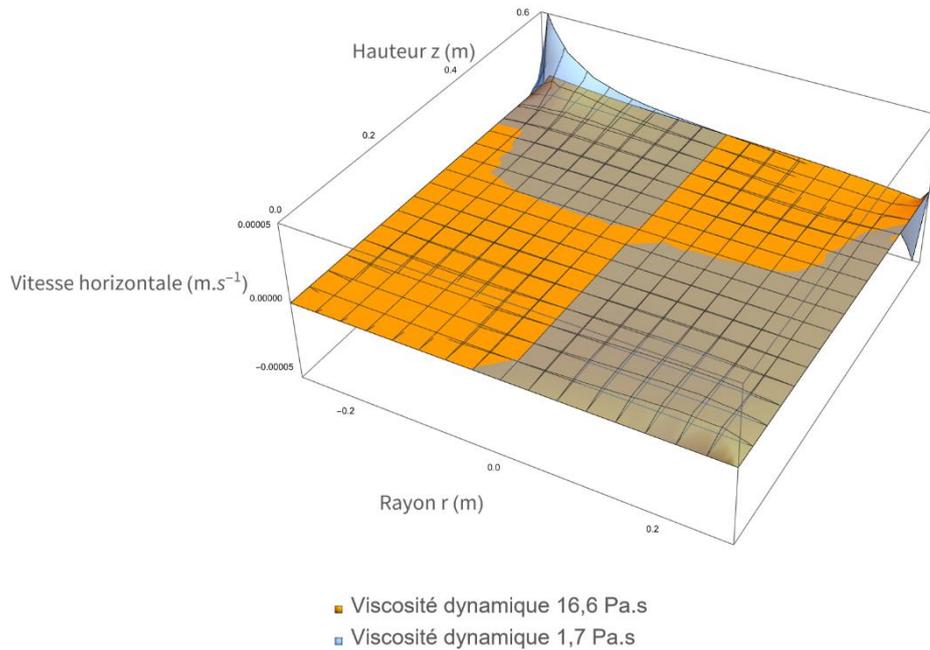


Figure 59 : Vitesse horizontale en 3D.

Pour finir, nous remarquons que la vitesse horizontale d'un bitume de viscosité 1,7 Pa.s est, en valeur absolue, supérieure à la vitesse d'un bitume à 16,6 Pa.s.

iii. La vitesse verticale

Attardons-nous maintenant sur la vitesse verticale. Cette fois-ci c'est un plan de symétrie en $r=0$ que nous pouvons observer Figure 63.

Nous remarquons également à travers les figures ci-dessous, que la vitesse verticale est supérieure en valeurs absolues dans le cas d'une viscosité faible. De plus, nous observons que la vitesse verticale est positive pour au niveau des rayons extremum et négative sur la partie centrale (Figure 60 et Figure 61).

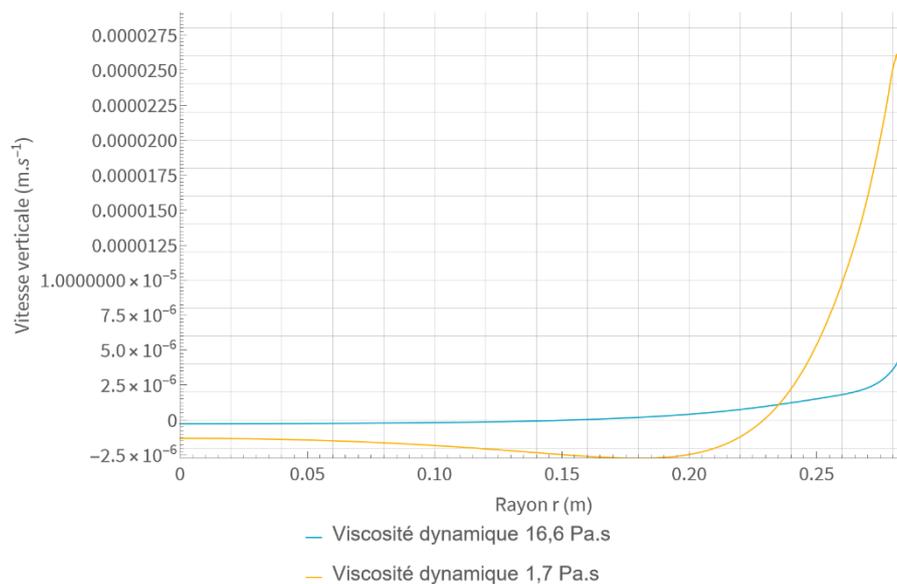


Figure 60 : Vitesse verticale en fonction du rayon à $z=0.1h$.

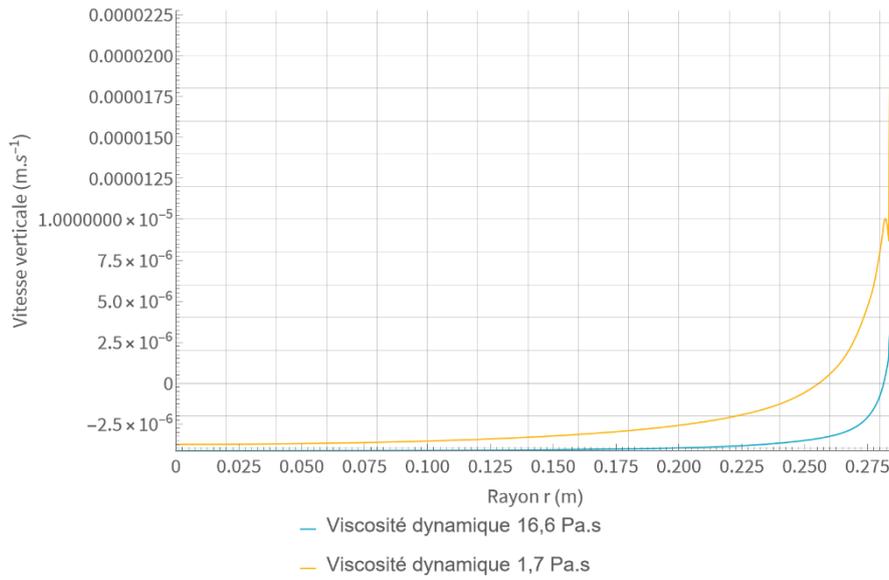


Figure 61 : Vitesse verticale en fonction du rayon à z=0.9h.

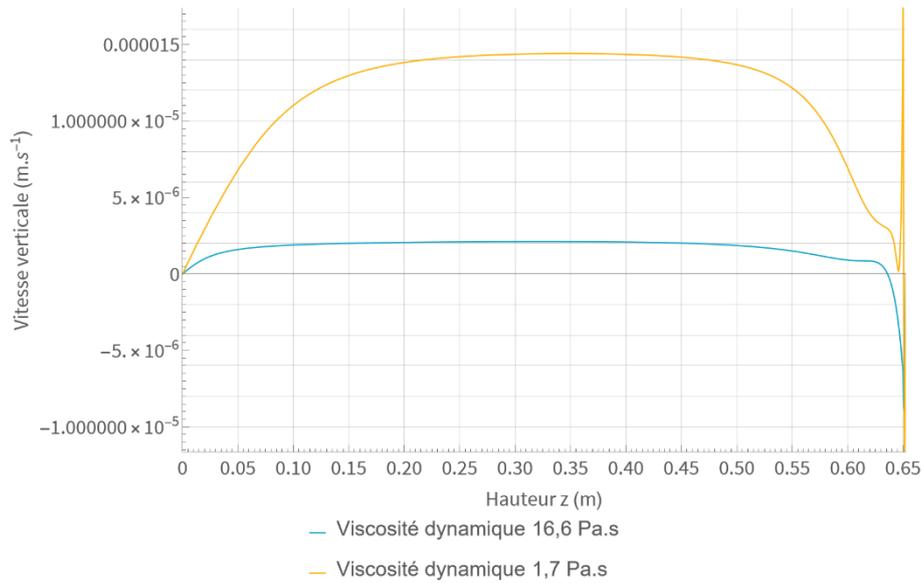


Figure 62 : Vitesse verticale en fonction de la hauteur à r=0.

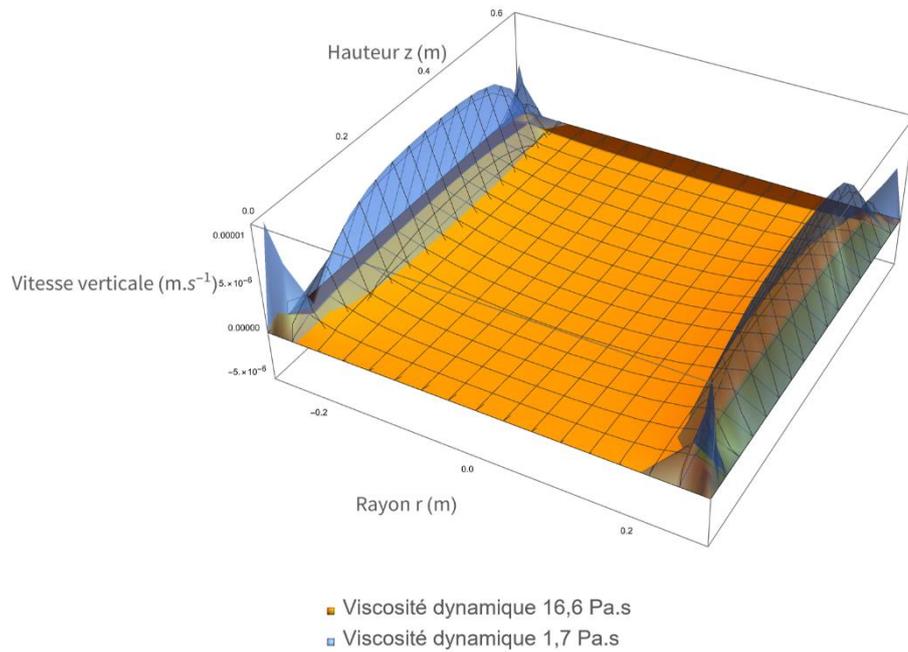


Figure 63 : Champs de vitesse verticale en 3D.

Pour ce qui est des pics dans les « coins » (Figure 63), ce sont probablement des erreurs dans la résolution.

iv. Vecteurs vitesse et lignes de courant

Finissons avec les vecteurs vitesse et les lignes de courant.

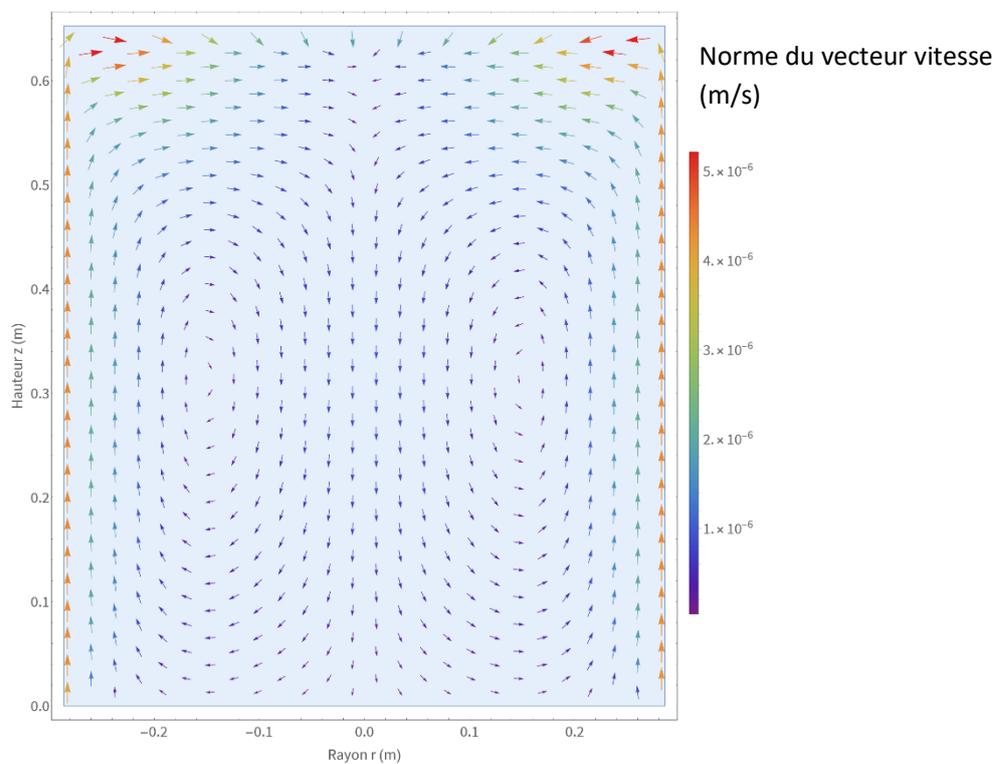


Figure 64 : Vecteurs vitesse pour une viscosité de 16,6 Pa.s.

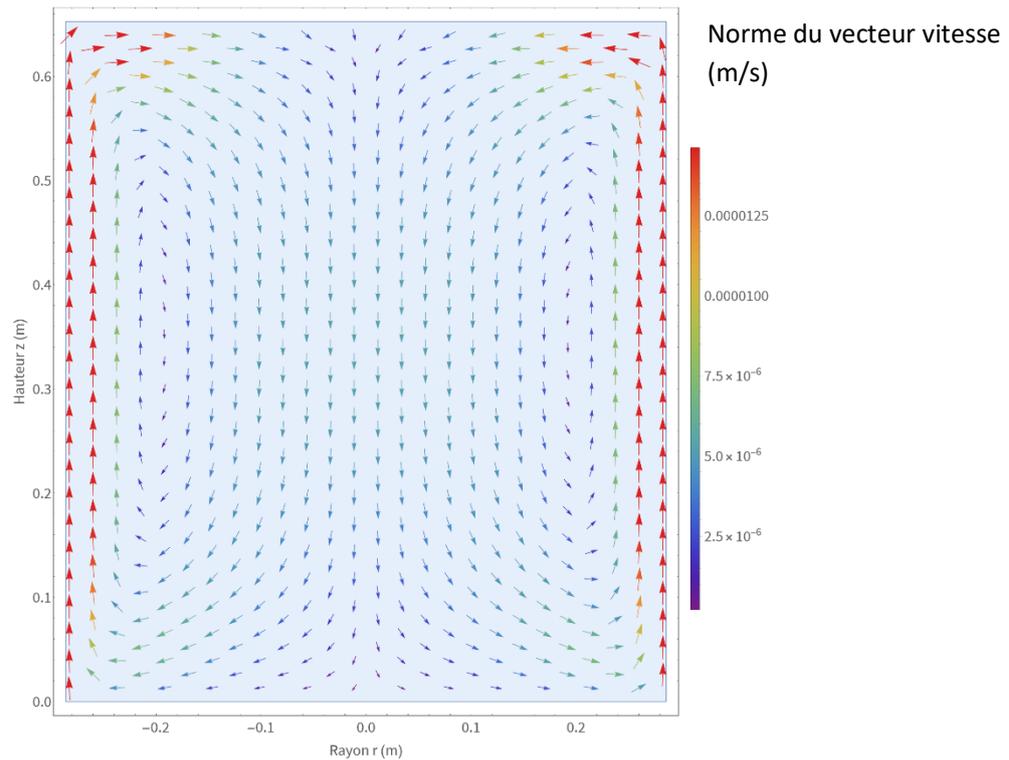


Figure 65 : Vecteurs vitesse pour une viscosité de 1,7 Pa.s.

Sans surprise, dans le cas où la viscosité de l'enrobé est la plus forte, la norme du vecteur vitesse est la plus faible. Cela confirme ce qui a été vu précédemment. Nous observons néanmoins, dans les deux cas, un schéma classique de régime convectif. Cela est confirmé par la visualisation des lignes de courant Figure 66 et Figure 67. En somme, même si le fluide se déplace plus lentement à la viscosité de 16,6 Pa.s, il se déplace selon le même schéma. Le même mouvement se produit.

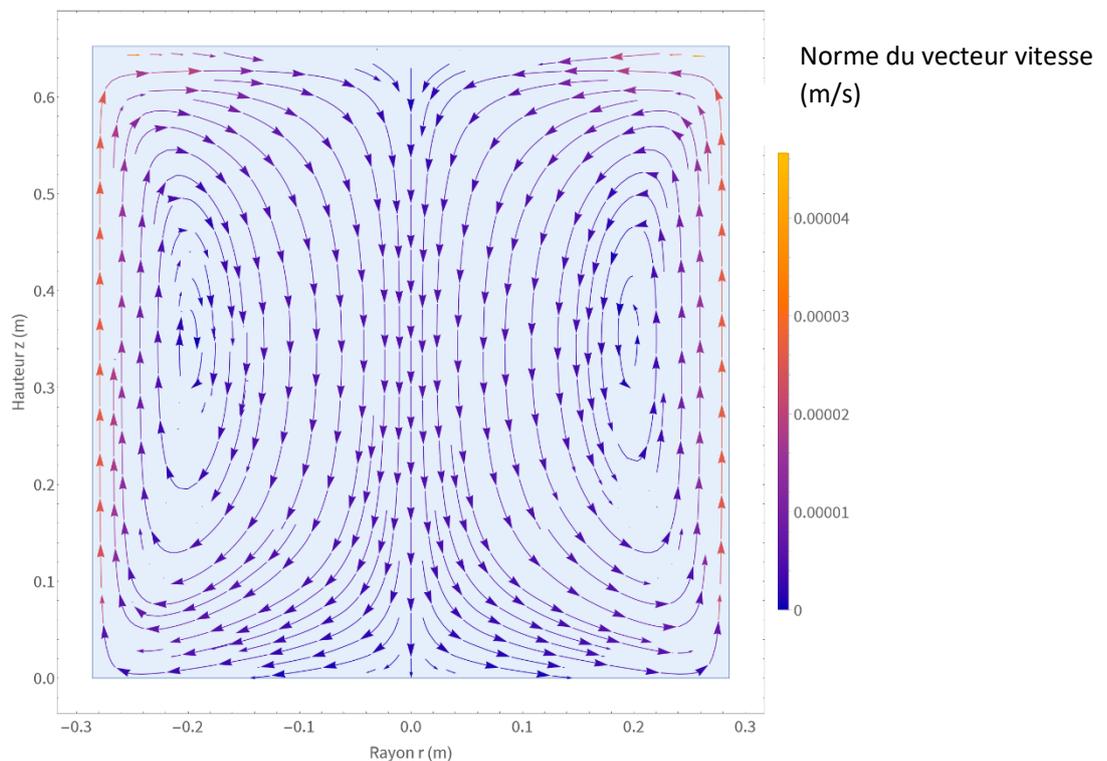


Figure 66 : Ligne de courant pour une viscosité de 1,7 Pa.s.

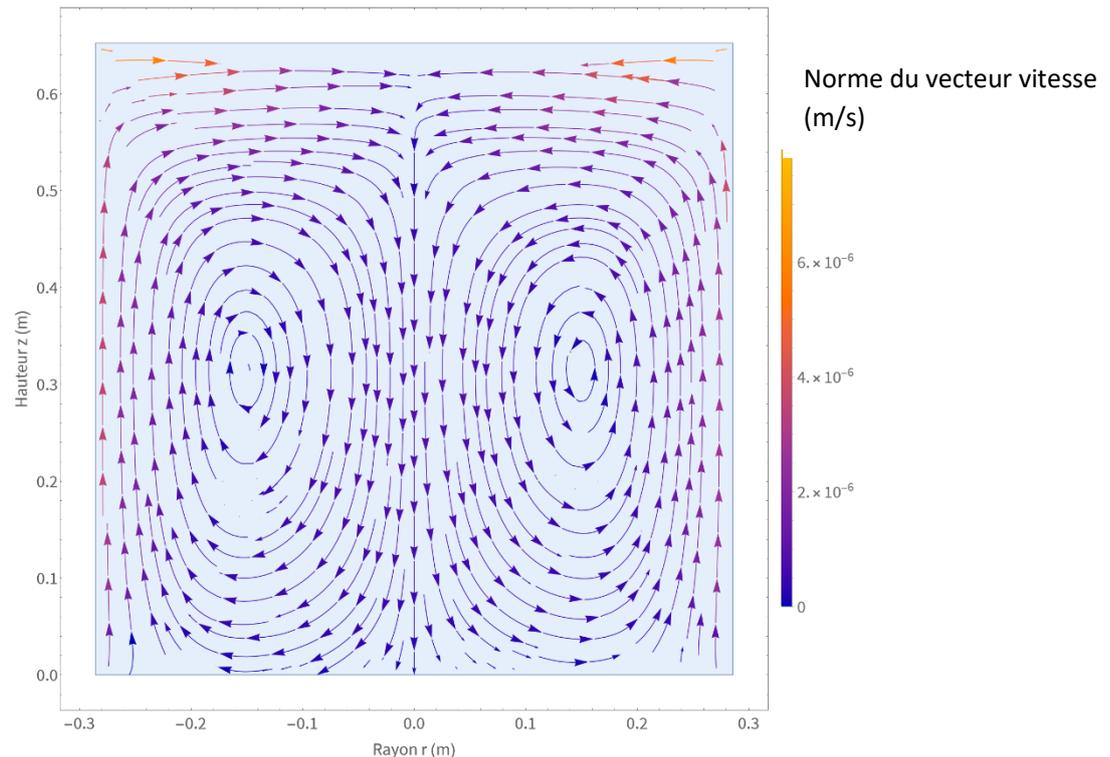


Figure 67 : Lignes de courant pour une viscosité de 16,6 Pa.s.

4. Transferts internes conducto-convectifs à viscosité dynamique variable

Cette fois-ci, nous avons voulu faire varier la viscosité avec la température. En dehors de ce changement, aucuns des paramètres précédents n'a été modifiés. Nous n'avons malheureusement pas obtenu de résultats concluants. En effet, nous observons Figure 68, une vitesse verticale bien trop élevée. Nous pouvons voir deux manières d'expliquer ce résultat.

Potentiellement des erreurs de résolution dues à notre choix de discrétisation temporelle ont pu se répéter et être amplifiées. Il faudrait donc envisager soit un maillage temporel plus fin, soit un autre schéma temporel. La piste du maillage plus fin à été explorée mais sans succès.

L'autre explication réside dans la variabilité de la loi exponentielle en $1/T$ déterminant la viscosité. Nous pouvons supposer que notre maillage spatial n'est pas assez fin pour rendre compte du champ de viscosité. En effet, ce dernier varie énormément sur une épaisseur très fine correspondant à la profondeur de pénétration du flux de chaleur. Ces pistes sont à enquêter si le modèle veut être amélioré.

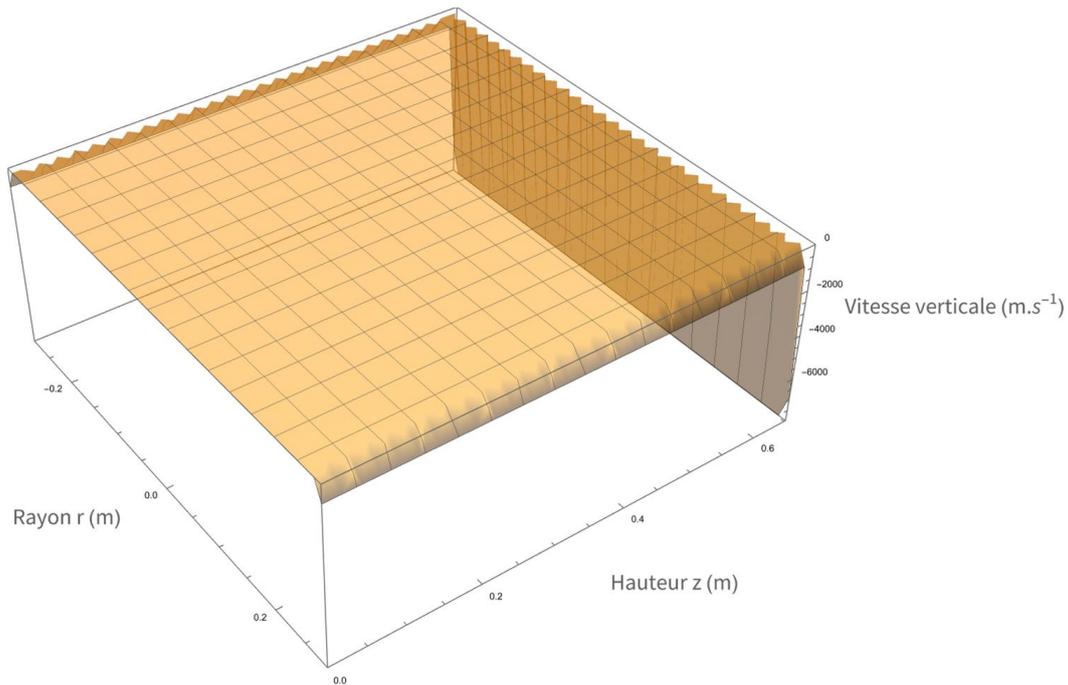


Figure 68 : Vitesse verticale.

III. Comportement des bulles et des sels

1. Focus sur les bulles

a. Génération d'une population de bulles de H_2 : loi statistique

Afin de pouvoir générer une population aléatoire de bulles de dihydrogène, nous nous basons sur les données d'une étude menée par le CEA [18]. Ce document nous permet d'obtenir, pour différents niveaux d'irradiation, une image de tomographie ainsi que des données sur la position, le rayon des bulles et d'autres caractéristiques.



Figure 69 : Image obtenue par micro-tomographie aux rayons X d'un échantillon d'enrobé STE3 ayant intégré une dose de 1 MGy.

Nous allons particulièrement nous appuyer sur les résultats de 3 expériences afin de construire notre population. Trois enrobés de type STEL ont été irradiés respectivement par des doses valant 100 kGby, 150 kGby et 200 kGby. A partir des données sur les rayons, nous avons pu obtenir les figures ci-dessous :

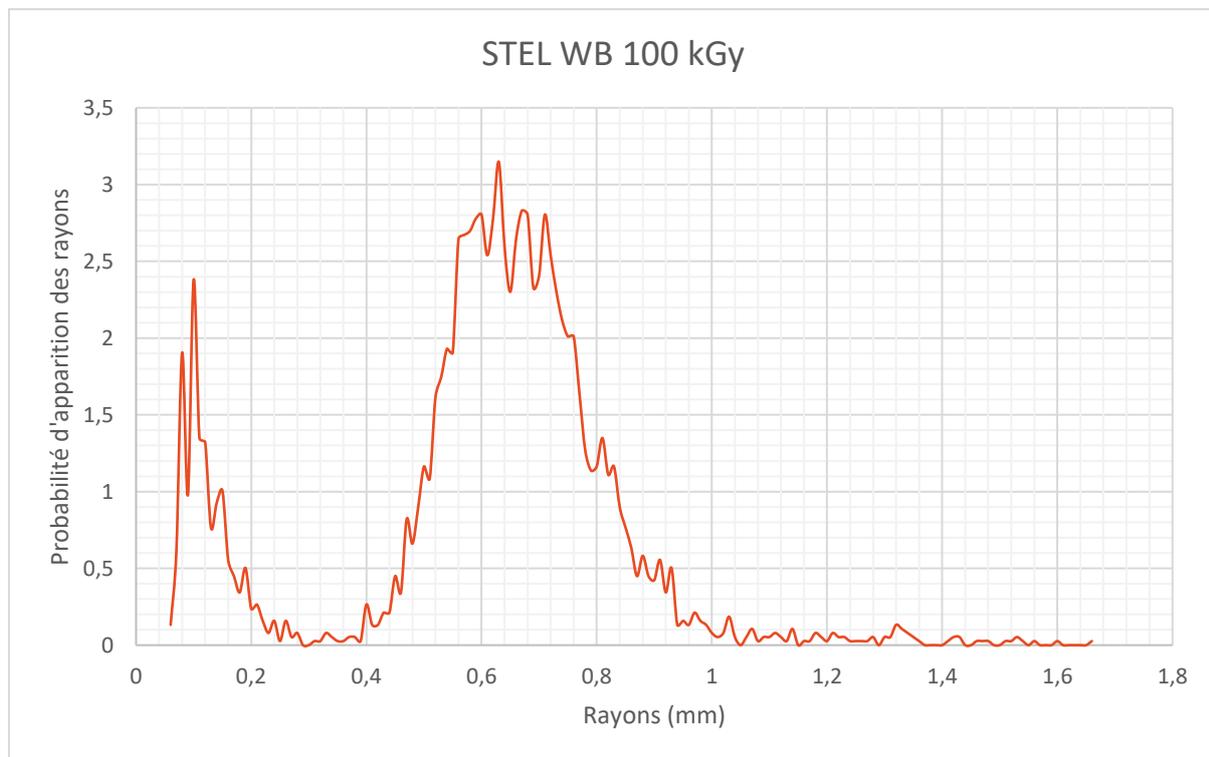


Figure 70 : Pourcentage d'apparition des rayons des bulles (mm) pour un enrobé de type STEL avec une irradiation de 100 kGy.

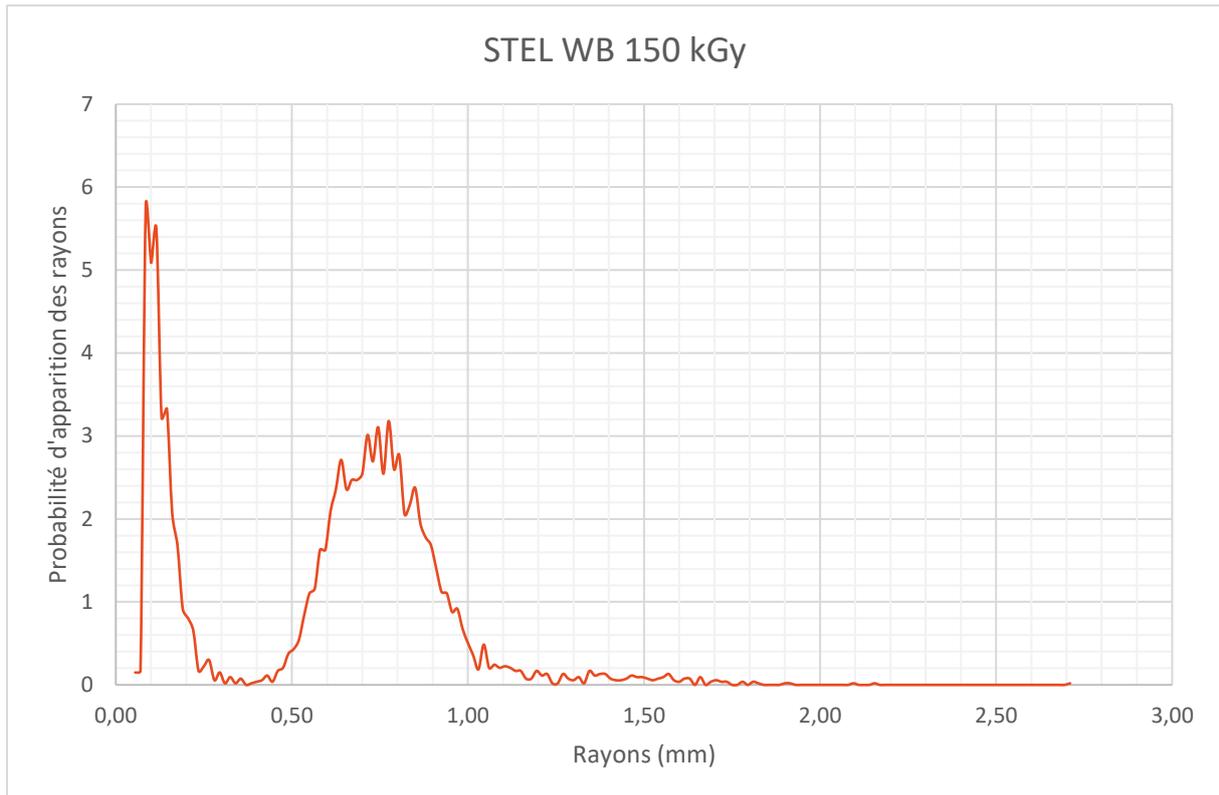


Figure 71 : Pourcentage d'apparition des rayons des bulles (mm) pour un enrobé de type STEL avec une irradiation de 150 kGy.

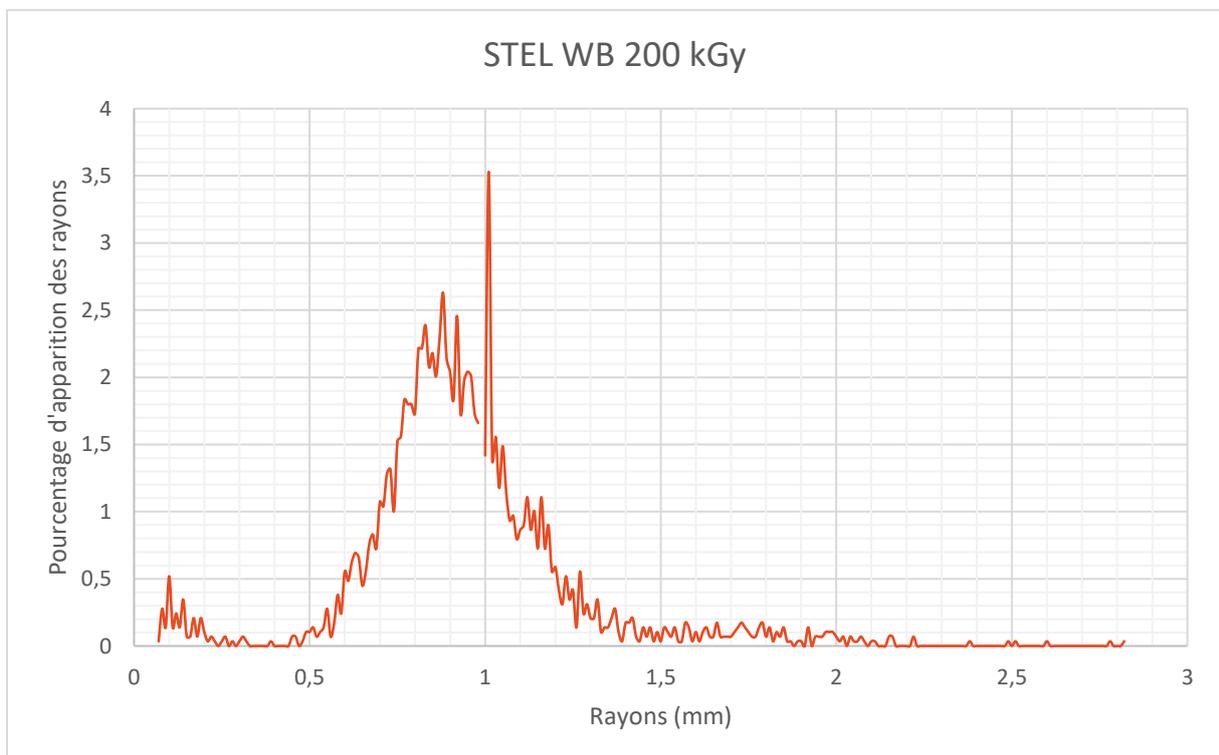


Figure 72 : Pourcentage d'apparition des rayons des bulles (mm) pour un enrobé de type STEL avec une irradiation de 200 kGy.

A l'aide des figures précédentes, nous observons que la répartition des rayons s'organise selon deux courbes en cloche. Or, nous avons choisi de ne pas considérer les valeurs de rayons trop petits qui sont issus d'erreur de calcul de restitution de l'image 3D. Nous excluons également les valeurs de rayons très élevés qui correspondent à un scénario où les bulles ont coalescées de manière répétée. Ce qui n'est pas

forcément représentatif de la réalité. Nous avons donc conservé les valeurs comprises entre 0.5 mm et 1.5 mm pour l'enrobé irradié à 100 kGy, celles entre 0.35 mm et 1.1 mm pour celui à 150kGy et 0.45mm et 1.5 mm pour la dernière STEL.

Après ces éliminations, nous ne pouvons que constater une répartition similaire à celle d'une loi normale. Une variable X suit une loi normale $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ d'espérance μ et d'écart type σ si la densité de probabilité f s'écrit sous la forme [37] :

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (74)$$

Nous allons donc maintenant approximer chacune des populations par une loi normale. Pour ce faire, nous avons besoin des caractéristiques des trois répartitions. Ces dernières sont regroupées dans le tableau ci-dessous :

	STEL WB 100 kGy	STEL WB 150 kGy	STEL WB 200 kGy
Moyenne (mm)	0,669912116	0,744978602	0,921357278
Ecart Type (mm)	0,124469834	0,130240298	0,179164969

Tableau 1 : Moyennes et écarts types de chaque population.

Nous obtenons alors 3 lois normales que nous mettons en parallèles des courbes de probabilité précédentes.

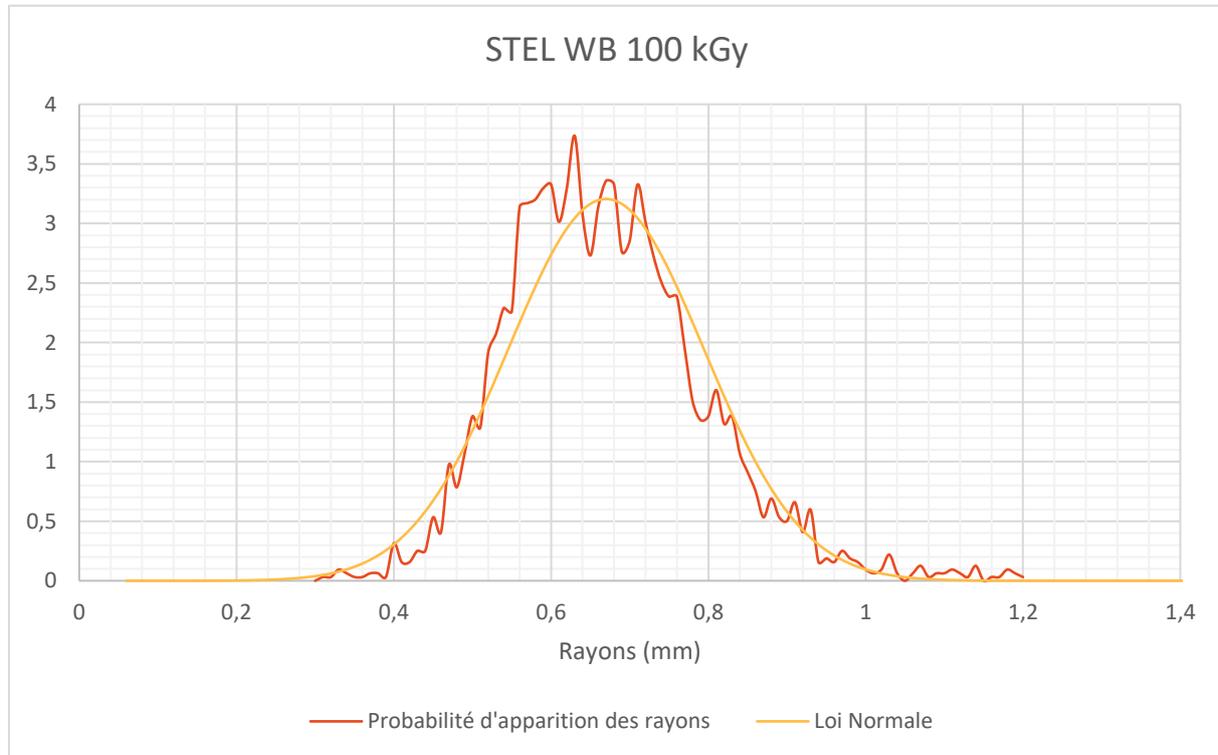


Figure 73 : Comparatif loi normal, probabilité d'apparition pour la STEL WB 100 kGy.

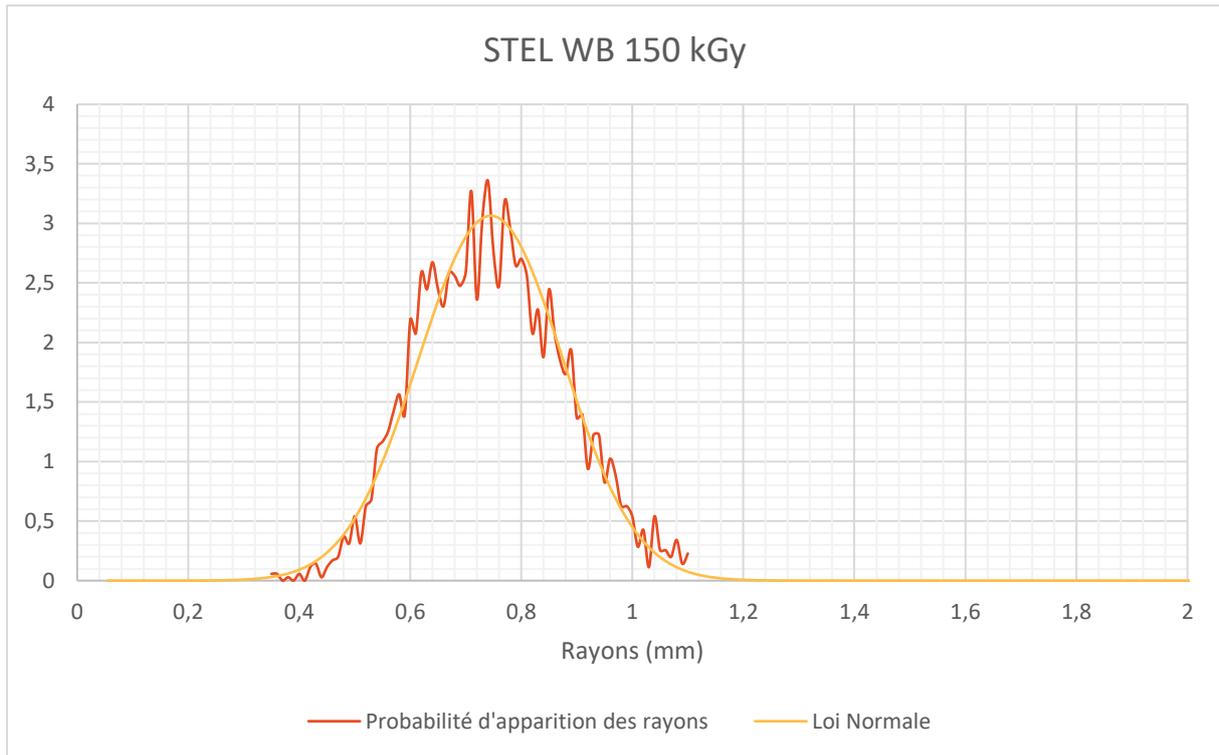


Figure 74 : Comparatif loi normal, probabilité d'apparition pour la STEL WB 150 kGy.

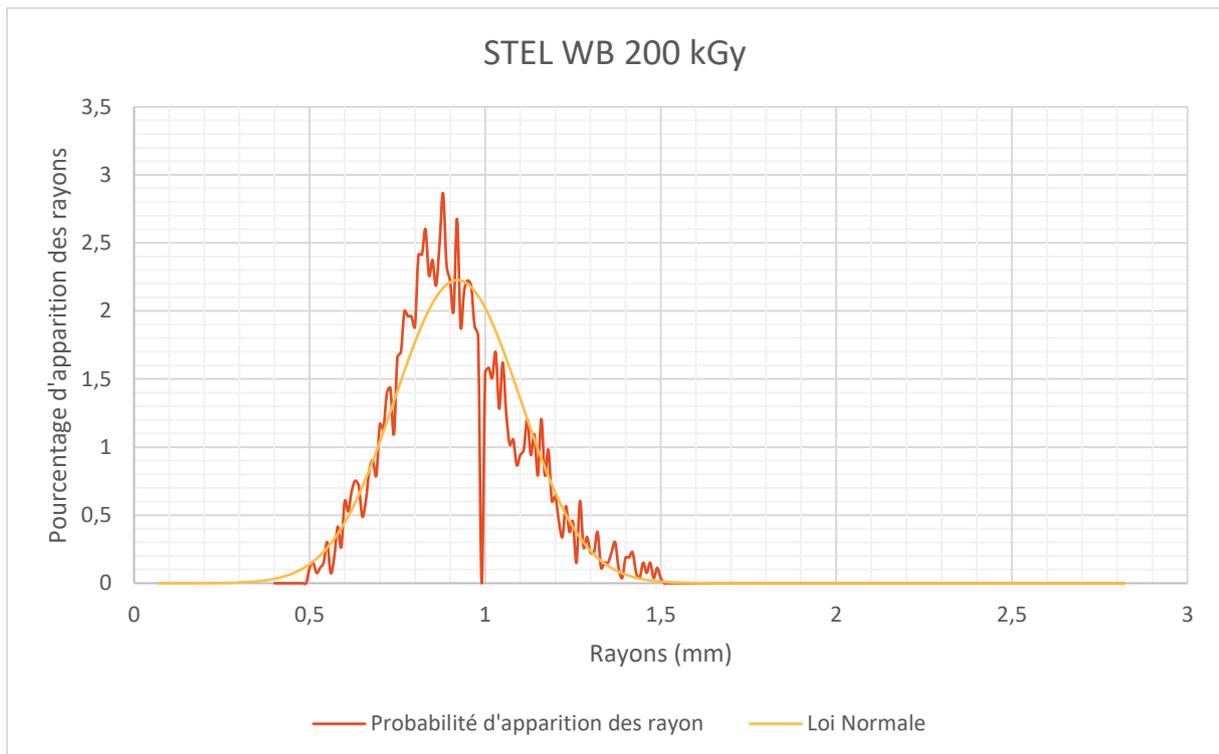


Figure 75 : Comparatif loi normal, probabilité d'apparition pour la STEL WB 200 kGy.

Nous observons une corrélation assez forte entre les différentes lois normales et les statistiques issues des trois populations de rayons. De fait, nous allons utiliser une répartition basée sur une loi normale pour notre modélisation.

Une fois ces informations obtenues, nous avons pu écrire le code permettant de générer la population. Comme expliqué précédemment, les rayons ont été obtenus grâce à une loi normale. La position du centre de la bulle a, quant à elle, été déterminé à l'aide d'une loi uniforme. En effet, nous n'avons pas considéré qu'il existait des emplacements plus favorables au développement des bulles. Le centre a donc été choisi aléatoirement dans la totalité du volume de la matrice bitume. Pour finir, des tests ont été mis en place pour éviter que les bulles se chevauchent ou ne sortent de la matrice.

Vous trouverez Figure 76, une représentation d'une population initiale de 1000 de bulle. Nous avons, pour une meilleure visualisation, augmenté artificiellement d'un facteur 10^3 le rayon des bulles.

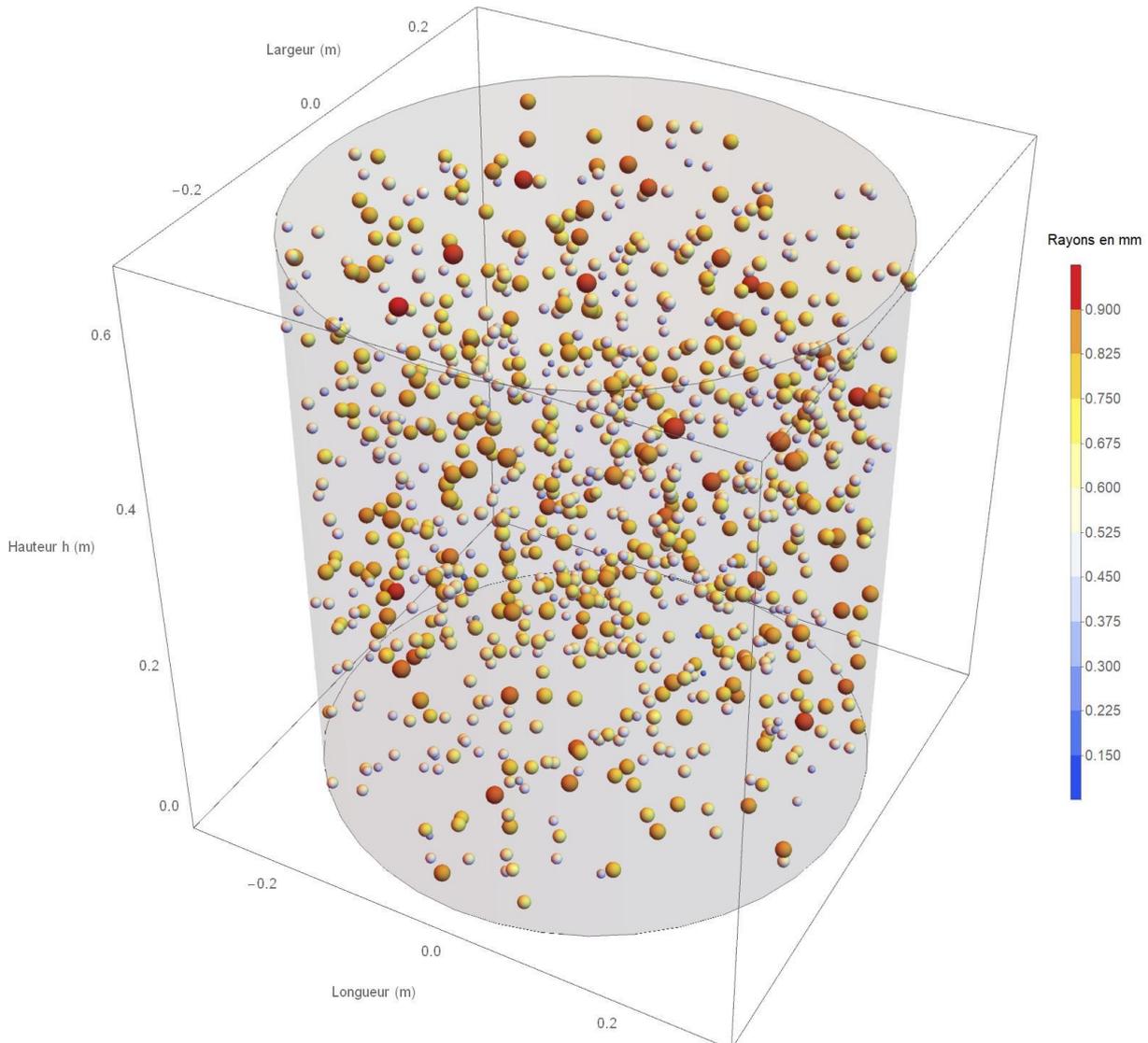


Figure 76 : Génération d'une population initiale de bulle dans l'enrobé bitumineux.

b. Mouvement des bulles

Nous allons maintenant aborder les résultats obtenus lors de la modélisation des mouvements des bulles.

i. Fluide au repos

Commençons par le cas où le fluide est au repos. C'est l'état de référence de notre enrobé, il est immobile. Nous voulons illustrer, dans cette sous partie, la différence de comportement de l'enrobé en fonction de la valeur de sa viscosité dynamique.

(a) Mouvement d'une unique bulle

Dans un premier temps, nous sommes concentrés sur le mouvement d'une seule bulle. Nous avons comparé les temps de remontée de cette bulle de 0,7 mm de rayon dans le cas où la viscosité de l'enrobé est de $1,59 \cdot 10^7$ Pa.s et celui où elle est de 57,3 Pa.s (viscosité à 100°C). Nous voulons rappeler ici que la viscosité dynamique limite pour pouvoir pomper un fluide est de 20 Pa.s. La matrice bitume n'est donc pas un fluide « liquide » à proprement parlé à 100°C. Néanmoins, nous observons déjà une grande différence de comportement de l'enrobé.

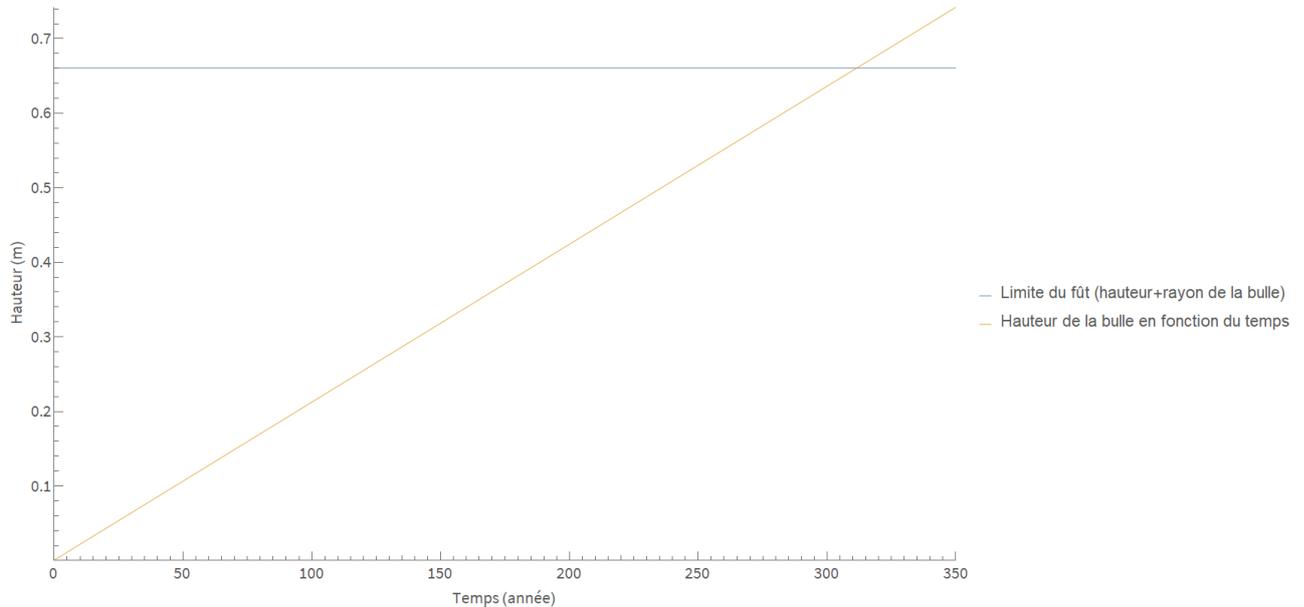


Figure 77 : Hauteur de la bulle en fonction du temps pour une matrice bitume à 22°C.

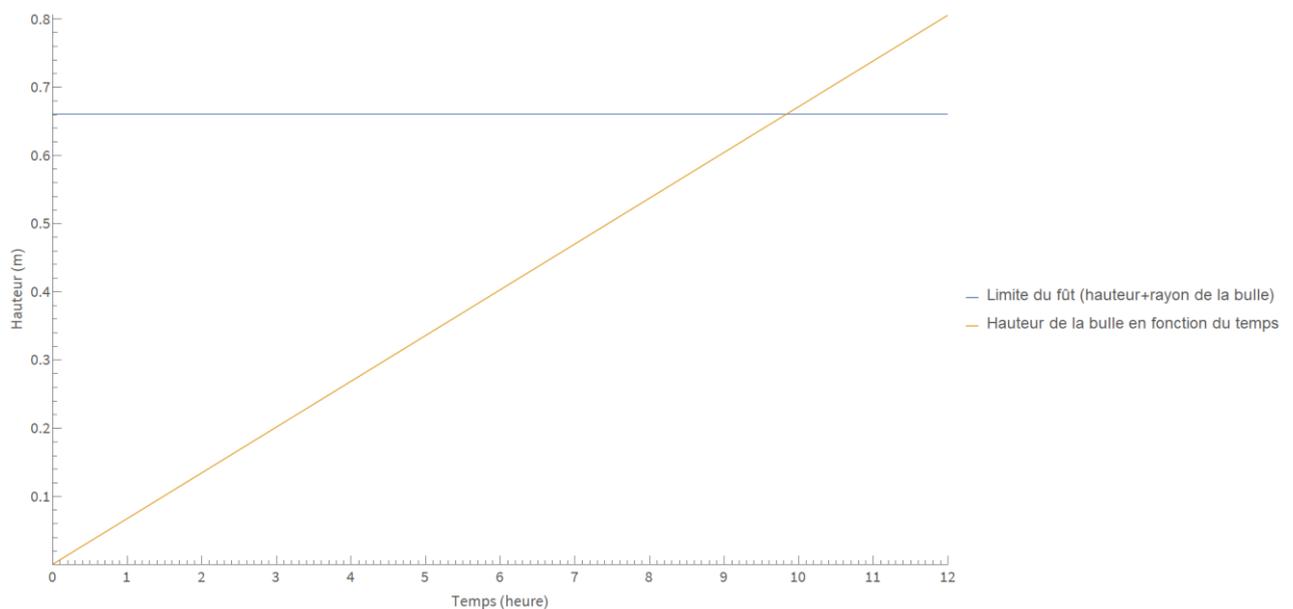


Figure 78 : Hauteur de la bulle en fonction du temps pour une matrice bitume à 22°C.

A travers les figures ci-dessus, nous observons une forte différence de temps d'échappement de la bulle. Dans les deux cas, nous avons considéré une bulle ayant pour position initiale le fond du fût. Nous avons donc obtenu les temps maximums de remontée de la bulle.

Dans le cas où l'enrobé bitumineux est à 22°C, nous obtenons un temps de 311 ans et 6 mois environ. En parallèle le temps de remontée pour une bulle dans un enrobé de viscosité dynamique égale à 57,3 Pa.s est de 9 heures 43 minutes et 16 secondes.

(b) Mouvement d'une population de bulle

Passons maintenant à l'étude d'une population de 2500 bulles. Nous avons généré une population aléatoirement, puis nous avons comparé son évolution en fonction de la viscosité dynamique de l'enrobé bitumineux.

Pour une viscosité à 22°C de $1,59 \cdot 10^7$ Pa.s, nous avons obtenu les visuels suivants. Ils correspondent à une photographie prise à l'instant t de la population de bulle. Pour mieux observer la population, nous avons augmenté d'un facteur 10 le rayon des bulles sur la visualisation. De plus, dans le même but, la création

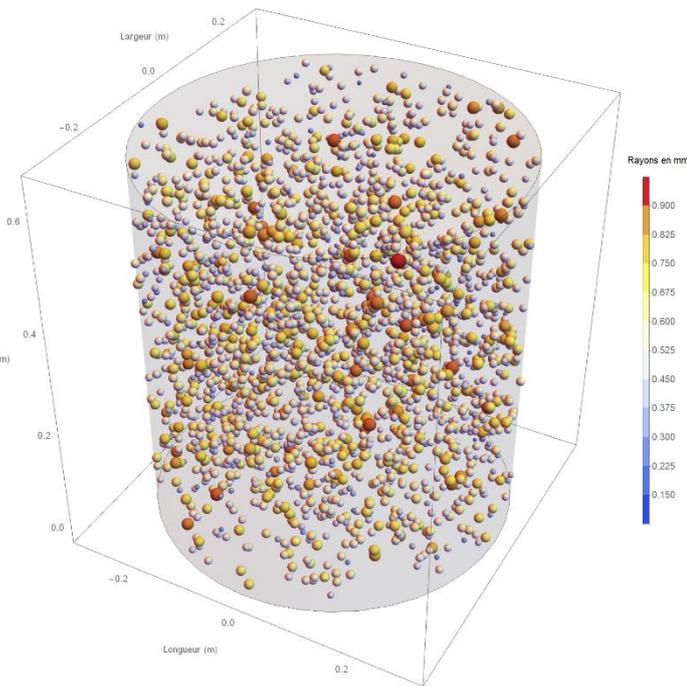


Figure 81 : Répartition de la population de bulle à $t = 0$ viscosité à 22°C.

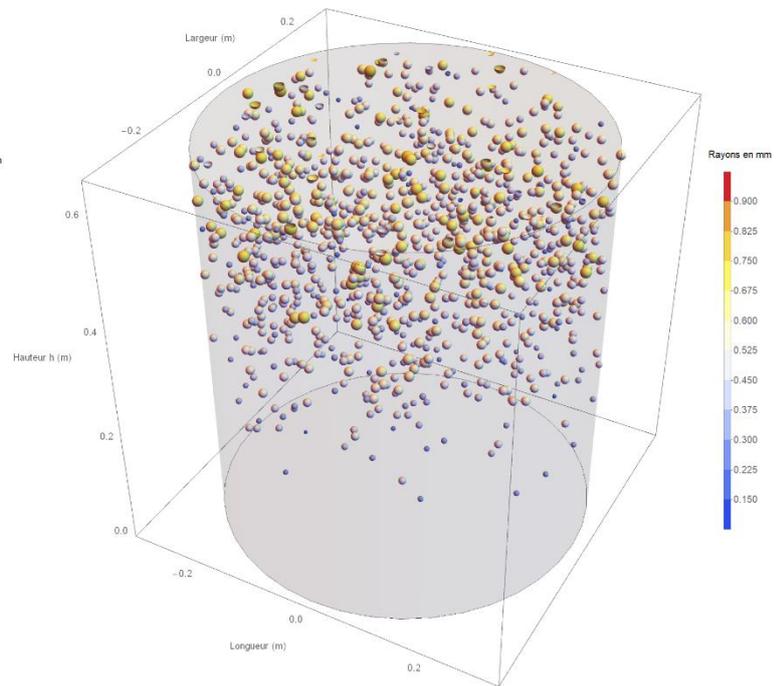


Figure 82 : Répartition de la population de bulle à $t = 184$ ans viscosité à 22°C.

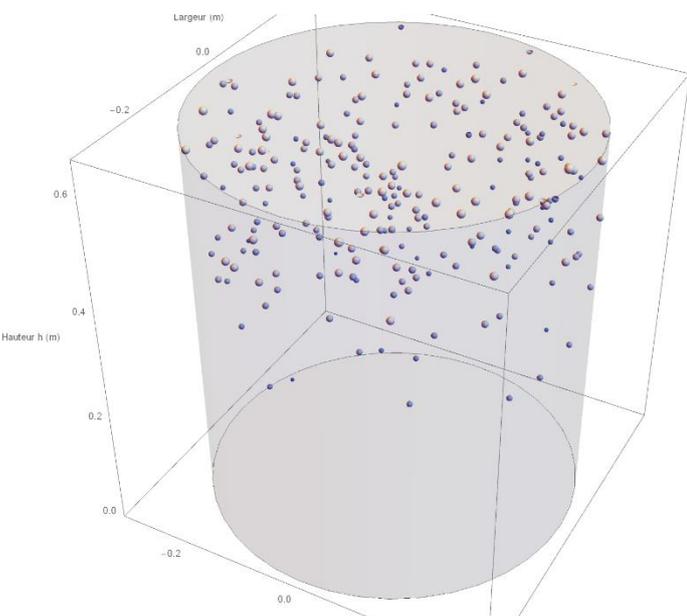


Figure 80 : Répartition de la population de bulle à $t = 368$ ans viscosité à 22°C.

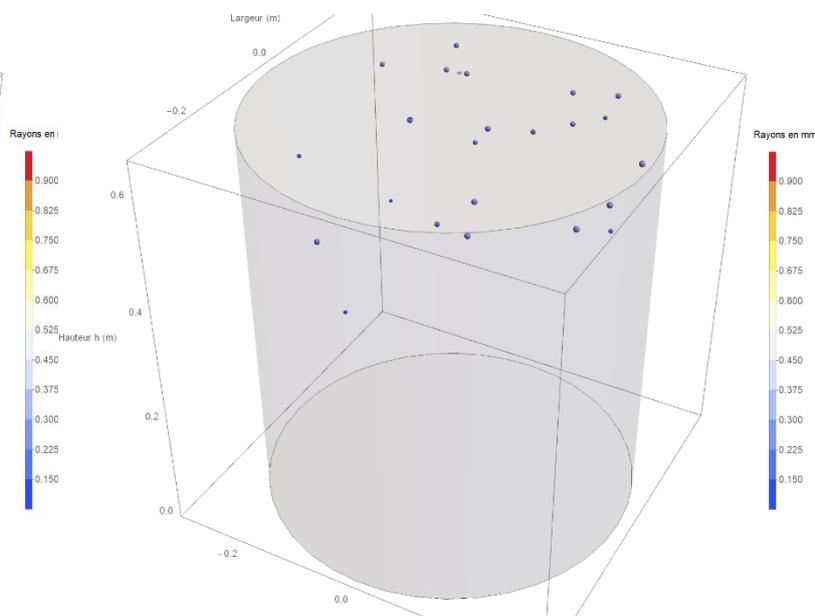


Figure 79 : Répartition de la population de bulle à $t = 737$ ans viscosité à 22°C.

permanente de bulles de dihydrogène n'a pas été représenté dans les figures suivantes. Dans le cas réel, cette production permanente conduit au gonflement de l'enrobé est fonction de l'équilibre en cette production et le débit d'échappement des bulles.

Pour cette population donnée, nous avons calculé pour chaque bulle le temps où la limite supérieure de la bulle atteint la hauteur h limite de l'enrobé. Nous avons également déterminé le temps où la limite inférieure de la bulle atteint la hauteur h. Nous avons ensuite déterminé le minimum de la première liste et le maximum de la seconde. Cela nous a permis d'obtenir l'intervalle de temps dans lequel toutes les bulles s'échappent. Pour le fluide à 22°C, cet intervalle est de 1475 ans et 2mois. Nous obtenons alors un débit d'échappement des bulles de $7,5 \cdot 10^{-17} \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ soit $2,3 \text{mm}^3 \cdot \text{an}^{-1}$.

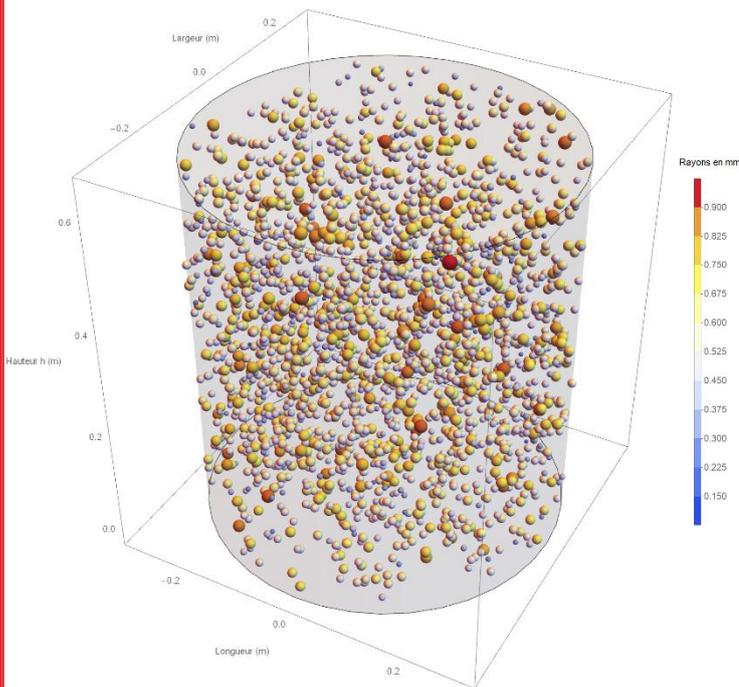


Figure 83 : Répartition de la population de bulle à t = 0 ans viscosité à 100°C.

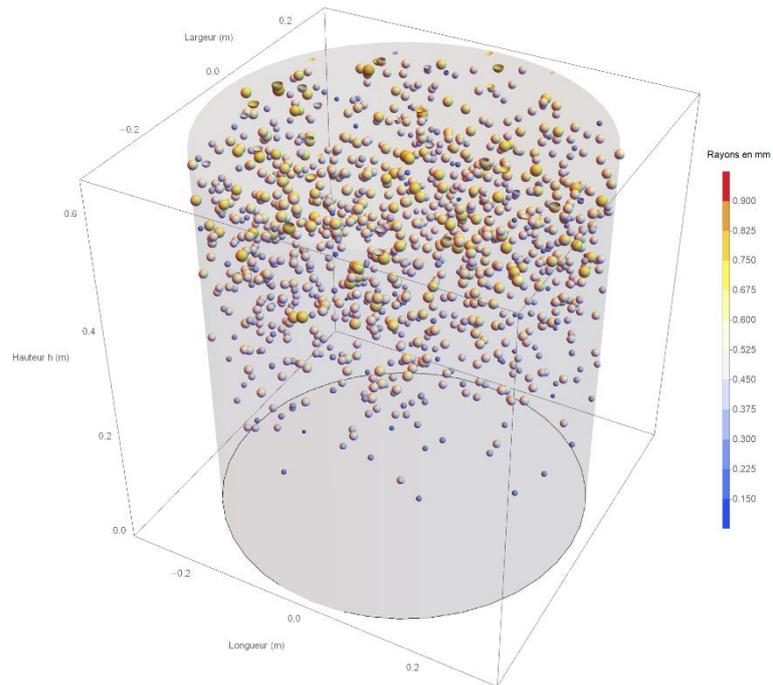


Figure 84 : Répartition de la population de bulle à t = 737 ans viscosité à 100°C.

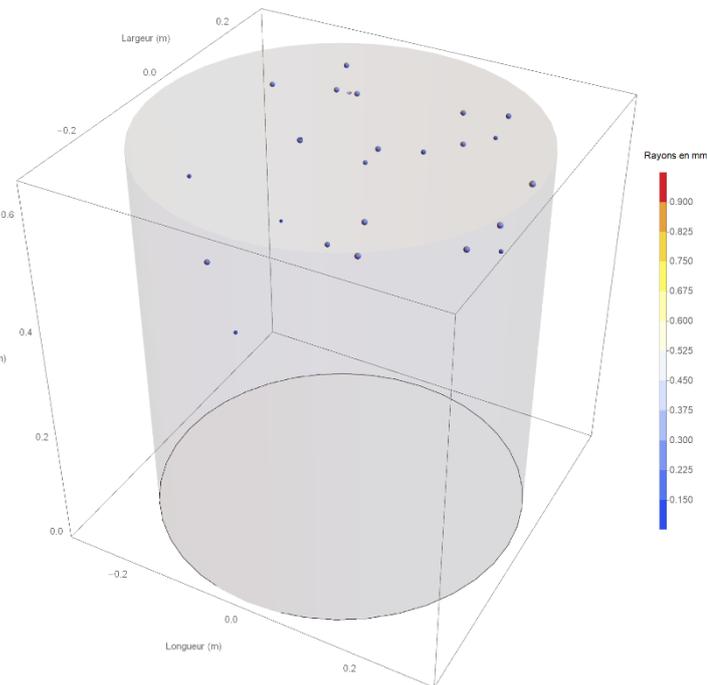
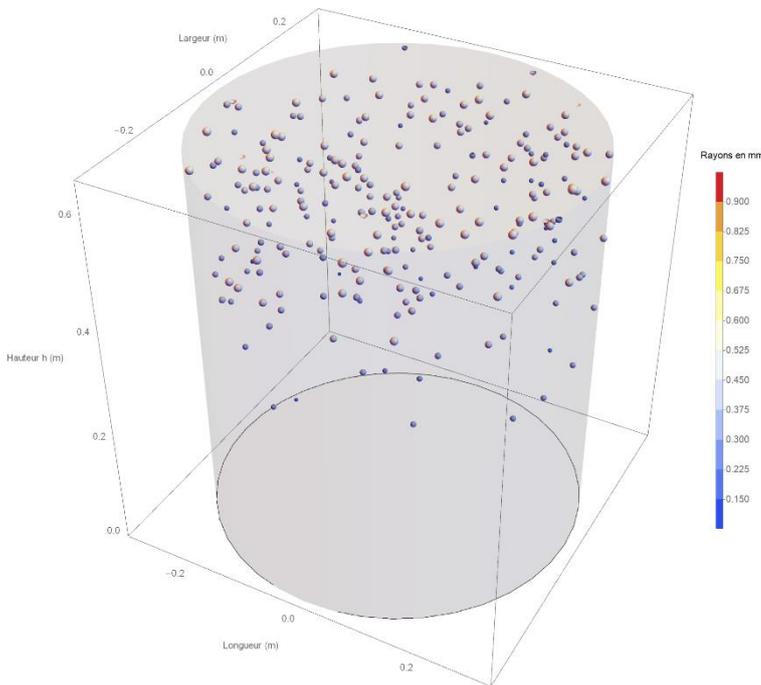


Figure 85 : Répartition de la population de bulle à $t = 737$ ans viscosité à 22°C . Figure 86 : Répartition de la population de bulle à $t = 737$ ans viscosité à 22°C .

Pour la même population de bulle dans un fluide de viscosité dynamique $57,3 \text{ Pa}\cdot\text{s}$, nous avons les valeurs suivantes :

- Borne supérieure des temps où la partie inférieure de la bulle atteint la hauteur h : 1 jour 22 heures 31 minutes 57 secondes.
- Borne inférieure des temps où la partie supérieure de la bulle atteint la hauteur h : 40 secondes.

Nous avons donc un intervalle de temps d'échappée des bulles de 1 jour 22 heures 31 minutes et 17 secondes. Cela nous donne donc un débit d'échappement de $2,1 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ soit $0,66 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{an}^{-1}$.

(c) Conclusion Niveau 1

En conclusion, nous pouvons affirmer que la viscosité dynamique joue un rôle important sur le comportement des bulles. Encore une fois, cela nous conforte dans le choix de la considérer comme variable avec la température au cours de notre simulation.

ii. Niveau 2 : Fluide instationnaire et non uniforme

Nous avons écrit un programme donnant, selon un certain pas temporel, la position de la bulle en fonction de l'espace et selon un certain champ de vitesse connu. En voici une illustration.

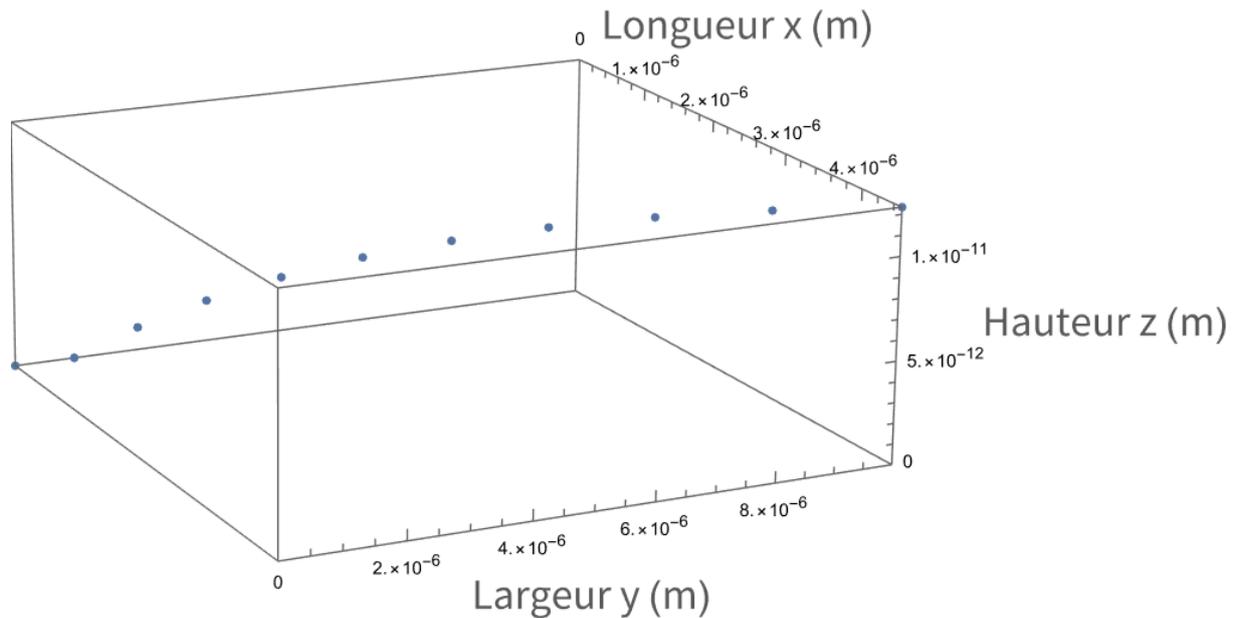


Figure 87 : Position d'une bulle toute les 5s.

2. Mouvement des sels

La démarche avec les sels est en tout point similaire à celle que nous venons de réaliser pour les bulles. Néanmoins, la population de sels n'est pas uniforme. En effet, de nombreux sels différents sont en suspension dans l'enrobé bitumineux. Pour une boue STE3, les pourcentages massiques des produits solubles et insolubles et leurs masses volumiques sont donnés par le tableau suivant [16] :

		Pourcentage massique	Masse volumique (g/L)
<i>Produits insolubles</i>	BaSO ₄	54,1	99,5
	PPFeNi	6,1	11,1
	Co(OH) ₂	2,8	5,17
	CoS	3,7	6,85
	Ca ₃ (PO ₄) ₂	0,34	0,62
<i>Produits solubles</i>	NaNO ₃	28,51	52,4
	Na ₂ SO ₄	4,52	8,30

Tableau 2 : Composition en sels d'un enrobé bitumineux classique STE3.

De plus, il a été observé que la distribution granulométrique des sels s'étalait entre 0,01 et 75µm, avec une taille moyenne de 19 µm [16].

Néanmoins ils nous manquent des paramètres pour pouvoir créer une loi de distribution comme pour les bulles, notamment la variance.

Conclusion

Un enrobé de boues bitumées issues du retraitement des effluents liquides issus de l'activité des installations nucléaires, est un matériau complexe qui associe au sein d'une matrice bitume visqueuse des radionucléides et des sels solides pouvant réagir entre eux sous l'effet de la température. La stabilité dans le temps en conditions normales de ce matériau est utilisée pour garantir le confinement des radionucléides sur des périodes très longues de plusieurs centaines d'années. Ces enrobés, mis en fût, doivent être stockés dans la future installation Cigeo de l'Andra dans un site géologique profond. Avec le temps, le matériau évolue néanmoins avec la formation d'hydrogène de radiolyse dans les premières dizaines d'années alors que l'activité des radionucléides est encore importante. Cela conduit notamment à la formation de bulles d'hydrogène au sein de ce matériau et à augmenter la viscosité du bitume formant la matrice. Enfin, le maintien des caractéristiques de confinement doit être garanti dans les conditions averses d'une agression du fût par un incendie à proximité. La chaleur a deux conséquences importantes : la baisse de la viscosité du bitume qui va permettre l'établissement de transfert de masse dans le volume et l'augmentation de la réactivité des sels pouvant conduire à des réactions exothermiques.

Dans le cadre du stage, dans un premier temps, nous avons cherché à identifier et à comprendre ces différents phénomènes physiques se produisant lors de la montée en température d'un fût d'enrobé de boues bitumées en faisant une recherche bibliographique la plus exhaustive possible. Les champs d'études principaux ont été les transferts de chaleur par conduction ou transferts conducto-convectif, les mouvements au sein d'un matériau diphasique et la réactivité chimique avec la température. Pendant cette période, nous avons également recherché les méthodes de résolution adaptées à notre modélisation.

Dans un deuxième temps, notre démarche a consisté à définir, pour chacun des phénomènes, plusieurs niveaux de complexité de modélisation. En effet, bien conscient de la contrainte de temps pesant sur nous ainsi que des possibilités d'acquisition de nouvelles connaissances, nous avons pensé le modèle comme une base formant un tout simplifié dès le départ et destinée à être améliorée par étapes de complexité pour se rapprocher le plus possible de la réalité. Notre but a donc été de nous fixer des objectifs de complexités croissantes et un chemin pour les atteindre. Nous avons fait une analyse des variations ayant le plus effet sur les résultats afin de définir les phénomènes à modéliser en priorité. Ainsi, la variation de la viscosité avec la température a été identifiée comme un paramètre essentiel du modèle.

En pratique, plusieurs champs de modélisation ont été réalisés. Nous avons notamment identifié l'importance de prendre en compte les parois métalliques du fût ainsi que son environnement pour définir les conditions aux limites de notre système. En effet, les parois agissent comme des résistances thermiques et permettent de ralentir le chauffage de l'enrobé. De plus, le sol en béton, du fait de ces caractéristiques thermiques, a un temps caractéristique de diffusion thermique beaucoup moins élevé que celui du métal composant les parois. Il agit donc comme un puit thermique et ralentit la montée en température de la paroi inférieure.

Nous avons également pu démontrer la mise en place d'un régime convectif au sein de l'enrobé bitumineux. En effet, lorsque l'enrobé a une viscosité suffisamment faible, nous observons un champ de vitesse symétrique. Dans la couche limite, où le régime convectif opère, la température est homogénéisée plus efficacement que lors de simples transferts thermiques par conduction. Gardons néanmoins à l'esprit que ce phénomène de chauffe est très long, peu importe les paramètres de modélisation choisis, nous n'avons pu observer une élévation de la température au cœur de la matrice bitume.

Notons pour finir, que l'étude du mouvement des bulles a bien été réalisée et qu'elle met en évidence la forte dépendance à la viscosité.

Notre modélisation permet d'avoir une bonne compréhension des conditions de mise en place des phénomènes qui se produisent lors du chauffage de la matrice bitume.

Ce modèle actuel peut être amélioré pour mieux représenter la réalité. Ainsi, la prise en compte des conditions aux limites pourrait être améliorée en ne négligeant pas les parois métalliques ainsi que le sol en béton lors de l'étude des mouvements convectifs du bitume comme cela a été démontré. De plus, nous proposons d'étudier l'impact du mouvement des bulles sur les transferts thermiques ou la réaction sur le champ des vitesses.

Dans le temps imparti pour le stage, nous n'avons également pas réussi à modéliser une viscosité dynamique variable. Un travail sur le schéma numérique temporel choisi pourrait être envisagé pour changer cela. Nous proposons également penser à une simplification de la loi en $\exp(1/T)$ déterminant la viscosité. En effet, pour des hautes températures, un développement limité de ce terme pourra simplifier le problème.

Un autre point sur les schémas numériques, le choix du schéma spatial est entièrement laissé à Mathematica, à travers la fonction NDSolve. Une idée d'amélioration serait donc de reprendre la main sur cette discrétisation spatiale afin de pouvoir stabiliser au mieux le programme.

Pour finir, nous avons étudié théoriquement les réactions exothermiques, sans avoir pu les intégrer à notre programme informatique. C'est donc un point crucial pour l'amélioration de notre modèle.

En conclusion, en l'état actuel, le modèle est une base pour la définition des futurs essais de l'échauffement d'un fût qui seront réalisés ces prochaines années. Ces essais permettront, en retour, de valider les modèles mis en place dans le cadre de ce stage.

Travaux cités

- [1] C. Fournier, «Revue externe sur la gestion des déchets bitumés,» 2019.
- [2] M. ABBAD, «Contribution sur les forces d'histoire exercées sur des inclusions solides ou fluides à faibles nombres de Reynolds,» 2003.
- [3] J. J.Taine, *Transferts thermiques : Mécanique des fluides anisothermes*, Dunod, 1995.
- [4] CTICM : Service de recherche incendie, *Réglementation en sécurité incendie, résistance au feu.*, 2008.
- [5] P. Marty, «Cours de transferts thermiques : conduction et rayonnement,» 2012.
- [6] O.Granier, *Transferts thermiques*, 2012.
- [7] P. Jourda, «Présentation des enjeux de sûreté liés aux colis d'enrobés de boues bituminées.,» CEA, 2012.
- [8] C. Navier, *Mémoire sur les lois du Mouvement des Fluides*, Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France, 1823.
- [9] P.Marty, «Transferts thermiques convectifs,» 2012.
- [10] P.-Y. Lagrée, *Tranferts thermiques dans les fluides*, 2018-2019.
]
- [11] R. Aldbaissy, «Discrétisation du problème de couplage instationnaire,» 2019.
]
- [12] R. K. Zeytounian, «Joseph Boussinesq and his approximation: a contemporary view,» *C. R. Mécanique*, n° %1331, 2003.
]
- [13] J.Taine, F.Enguehard et E.lacona, «Transferts thermiques, Introduction aux transferts d'énergie,» Dunod, 2014.
]
- [14] J. Bell, P.Colella et L.H.Howell, «An efficient second-order projection method for viscous incompressible flow,» chez *Proceesing of the 10th AIAA computational fluid dynamics conference*, 1991.
]
- [15] C. Subich, «Simulation of the Navier-Stokes equations in three dimensions with a spectral collocation method,» 2011.
]
- [16] M. Mouazen, «Evolution des propriétés rhéologiques des enrobés bitume, vers une loi vieillissement/viscosité,» 2011.
]
- [17] Areva, «Propriétés et caractéristiques thermiques des enrobés de boues de synthèse STE 2,» 2004.
]
- [18] A. Marchal, A. Poulesquen et P. Jourda, «Prise en compte des effets de l'irradiation interne sur le comportement en situation d'incendie d'un enroé de boue bituminées,» 2016.
]

- [19 A. Naciri, «Contribution à l'étude des forces exercées par un liquide sur une bulle de gaz : portance, masse ajoutée et interactions hydrodynamiques.,» 1992.
- [20 P. Jourda et A. Dannoux-Papin, «Evaluation de la réactivité des fûts d'enrobés de bues bituminées de la STEL de Marcoule sous sollicitation thermique extérieure».
- [21 Nuclear Safety Research Association, *Heat measurement of simulated bituminized waste and modeling of heat generation rate*, 2002.
- [22 S. Mouffe, «Maitrise de la réactivité thermique lors de l'élaboration d'un conditionnement par le bitume.,» 2004.
- [23 CEA, «Dossier de connaissances des colis MAVL».
- [24 J. Gambelin et D. Gay, *Dimensionnement des structures*, Hermès, 1999.
- [25 Y. Couasnet, *Propriétés et caractéristiques des matériaux de construction*, 2019.
- [26 H. Crepin, «Librairie Thermographique,» 2015. [En ligne]. Available: http://www.thethermographiclibrary.org/index.php?title=Tableau_%C3%A9missivit%C3%A9s_en_thermographie. [Accès le 22 Juillet 2021].
- [27 Newport Omega, *Manuel d'utilisation Serie OS65*, 2002.
- [28 M. Rigaut, *Phénomènes de diffusion*, 2013.
- [29 H. Chaabane, *Phénomène de Transport*, 2010.
- [30 A. Mioulet, «Masse volumique du béton,» [En ligne]. Available: <http://www.guidebeton.com/masse-volumique-beton>. [Accès le 20 07 2021].
- [31 C. Pompeo et C. Gueret, *Conductivité thermique des matériaux*, 2000.
- [32 T. Ouksel, *Tranfert thermique*, 2016.
- [33 P. Jourda, «Modélisation des effets d'un chauffage interne au sein des cavité d'un colis béton de stockage contenant 4 fûts d'enrobés de boues bitumées.,» 2019.
- [34 J. Padet, *Convection thermique et massique*, Technique de l'ingénieur.

- [35 V. Vidal, «Intéraction des différentes échelles de convection dans le manteau terrestre.,» Paris,
] 2024.
- [36 A. Pellew et R. Southwell, «On maintained convective motion in a fluid heated from below.,» The
] Royal Society Publishing.
- [37 C. Rau, «Variables aléatoires continues, loi normale,» 2020.
]
- [38 A. Bejan, Heat transfer handbook, John Wiley & Sons, Inc, 2003.
]
- [39 ANDRA, «Programme bitume - Synthèse des essai d'incendi réel sur un colis de stockage MAVL dans
] sa configuration de stockage.».

Annexes

A. Annexe 1 : Simplifications des calculs

Nous avons retranché $\vec{U}^i \cdot \overrightarrow{\text{grad}}[\text{div}(\vec{U}^i)]$ au terme $\text{div}[(\vec{U}^i \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot \vec{U}^i]$ afin de prendre en compte l'incompressibilité du fluide. Nous allons à présent détailler ce calcul en cartésiennes. La vitesse \vec{U} se décompose alors ainsi :

$$\vec{U} = u \cdot \vec{e}_x + v \cdot \vec{e}_y + w \cdot \vec{e}_z$$

Nous avons alors en coordonnées cartésiennes :

$$(\vec{U} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot \vec{U} = \begin{pmatrix} u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \\ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \\ u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Ce qui nous donne ensuite :

$$\begin{aligned} & \text{div}[(\vec{U} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \cdot \vec{U}] \\ &= \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + v \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial z} + w \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + u \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 \\ &+ v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z} + w \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial x} + u \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial y} + v \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial y} + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + w \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \\ &= \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) + v \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) \\ &+ w \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z}\right) \end{aligned}$$

Nous avons donc :

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div}[(\vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot \vec{U}] &= \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z}\right) \\
 &+ \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}\right) \end{pmatrix} \\
 &= \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z}\right) + \vec{U} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} (\operatorname{div} \vec{U}) \\ \frac{\partial}{\partial y} (\operatorname{div} \vec{U}) \\ \frac{\partial}{\partial z} (\operatorname{div} \vec{U}) \end{pmatrix} \\
 &= \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z}\right) + \vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}[\operatorname{div}(\vec{U})]
 \end{aligned}$$

Or, comme le fluide est incompressible $\operatorname{div}(\vec{U}) = 0$. Nous avons donc finalement, pour faire tenir compte de la condition d'incompressibilité à Mathematica :

$$\operatorname{div}[(\vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}) \cdot \vec{U}] - \vec{U} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}[\operatorname{div}(\vec{U})] = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial z}\right)$$

Passons maintenant à la deuxième simplification faite pour prendre en compte l'incompressibilité du fluide : $\operatorname{div}[\operatorname{div}(v^i \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\vec{U}^i))] = v^i \operatorname{div}(\Delta \vec{U}^i) + \Delta \vec{U}^i \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^i) + \operatorname{div}[\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\vec{U}^i) \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(v^i)]$.

$$\operatorname{div}[v \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot \vec{U}] = \vec{\nabla} \cdot \begin{pmatrix} u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \\ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \\ u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Avec $\vec{\nabla}$ l'opérateur nabla et :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \cdot \vec{U} = \operatorname{div} \vec{U}$$

Nous avons donc :

$$\operatorname{div}[v \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot \vec{U}] = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v \frac{\partial u}{\partial x} & v \frac{\partial u}{\partial y} & v \frac{\partial u}{\partial z} \\ v \frac{\partial v}{\partial x} & v \frac{\partial v}{\partial y} & v \frac{\partial v}{\partial z} \\ v \frac{\partial w}{\partial x} & v \frac{\partial w}{\partial y} & v \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \frac{\partial u}{\partial x} & v \frac{\partial u}{\partial y} & v \frac{\partial u}{\partial z} \\ v \frac{\partial v}{\partial x} & v \frac{\partial v}{\partial y} & v \frac{\partial v}{\partial z} \\ v \frac{\partial w}{\partial x} & v \frac{\partial w}{\partial y} & v \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

D'où :

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div}[\overrightarrow{v \cdot \operatorname{grad}} \cdot \vec{U}] &= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} + v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial z} + v \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial z} + v \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} + v \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} + v \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \end{pmatrix} \\
 \operatorname{div}[\overrightarrow{v \cdot \operatorname{grad}} \cdot \vec{U}] &= \begin{pmatrix} v \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial z} \\ v \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial z} \\ v \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \\
 &= v \Delta \vec{U} + \begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Or :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial z} \end{pmatrix} = \overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot \vec{U} \overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot \vec{v}$$

Nous avons donc l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div} \left[\operatorname{div} (\overrightarrow{v \operatorname{grad}} (\vec{U})) \right] &= \operatorname{div} (v \Delta \vec{U}) + \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \\
 &= \operatorname{div} (v \Delta \vec{U}) + \operatorname{div} (\overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot \vec{U} \overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot \vec{v})
 \end{aligned}$$

Pour finir, nous avons :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(v\Delta\vec{U}) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ v \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ v \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\partial v}{\partial x} \Delta u + \frac{\partial v}{\partial y} \Delta v + \frac{\partial v}{\partial z} \Delta w + v \left(\frac{\partial}{\partial x} (\Delta u) + \frac{\partial}{\partial y} (\Delta v) + \frac{\partial}{\partial z} (\Delta w) \right) \\ &= \overrightarrow{\operatorname{grad}}v \cdot \Delta\vec{U} + v \operatorname{div}(\Delta\vec{U}) \end{aligned}$$

Finalement :

$$\operatorname{div} \left[\operatorname{div} (v\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\vec{U})) \right] = \overrightarrow{\operatorname{grad}}v \cdot \Delta\vec{U} + v \operatorname{div}(\Delta\vec{U}) + \operatorname{div}(\overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot \vec{U} \overrightarrow{\operatorname{grad}} \cdot v)$$

B. Annexe 2 : Schéma des parois du fût

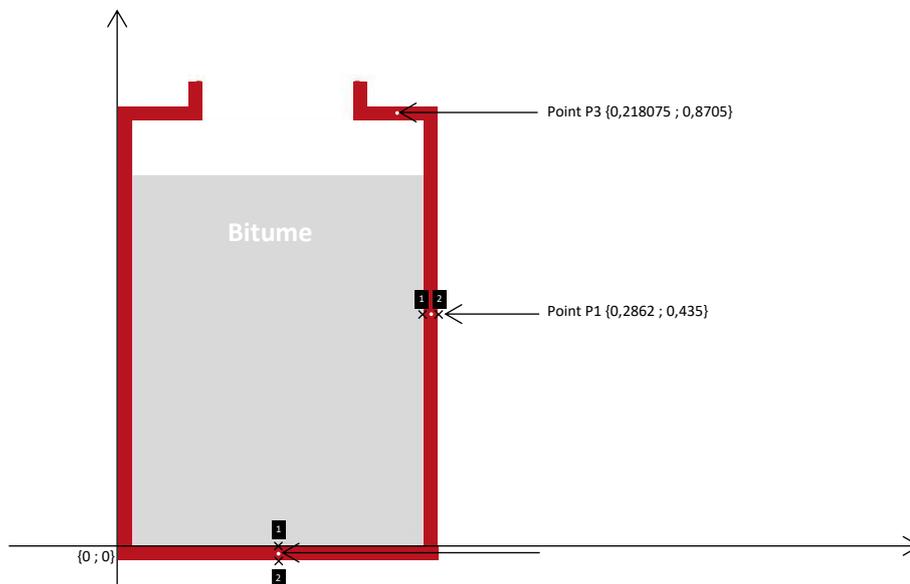


Figure 88 : Schéma des notations fixes pour le fût.

A noter que dans la partie où la partie B.I.2.a, ce sont les points 1 et 2 latéraux auxquels il fait référence. Tandis que dans la partie B.I.2.b, il s'agit des points 1 et 2 inférieurs.

C. Annexe 3 : Autres visuels de la partie B.1.2

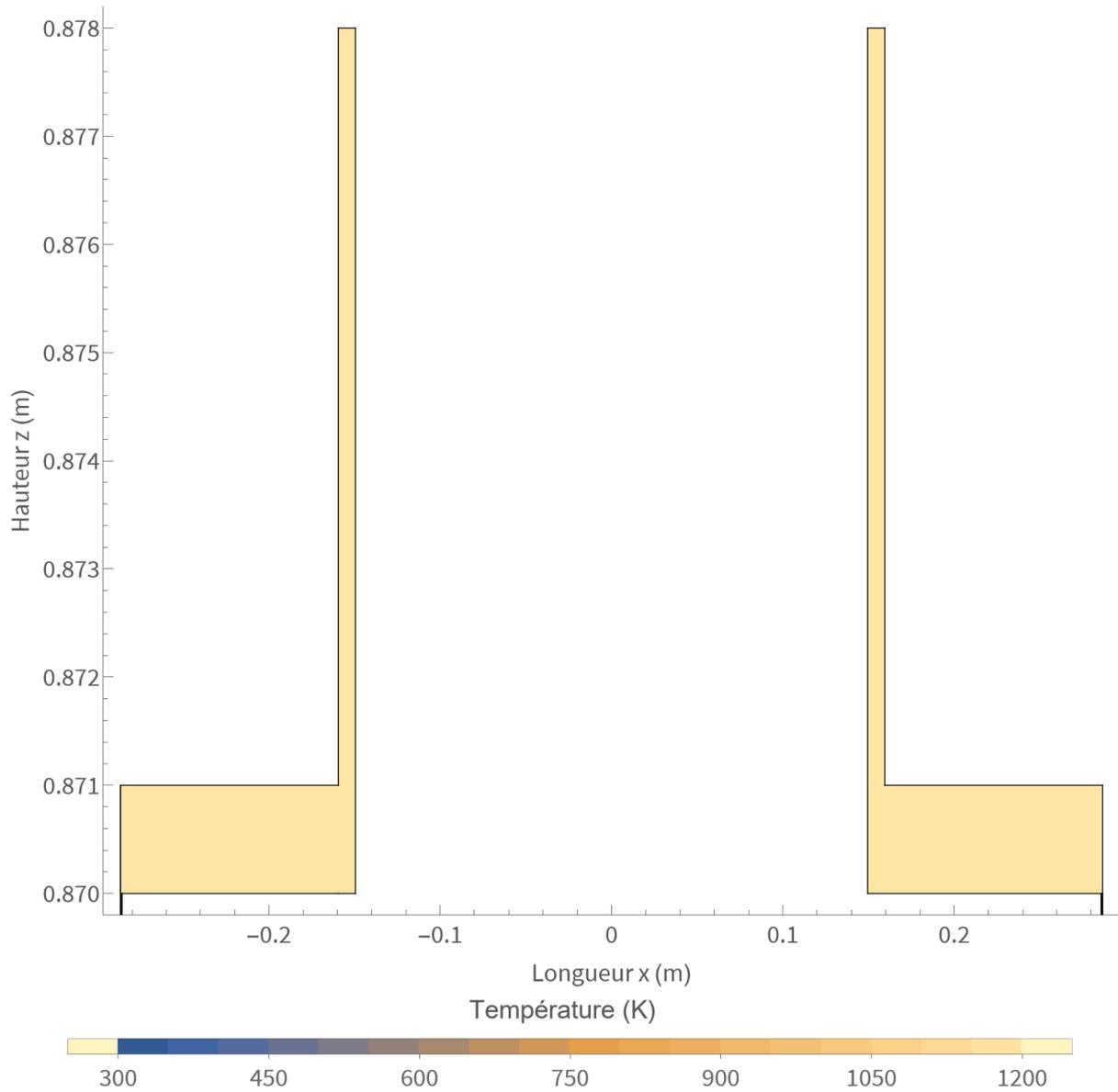


Figure 89 : Température de la paroi supérieure au bout d'une heure de chauffe en considérant uniquement les échanges conductifs entre les parois et le bitume.

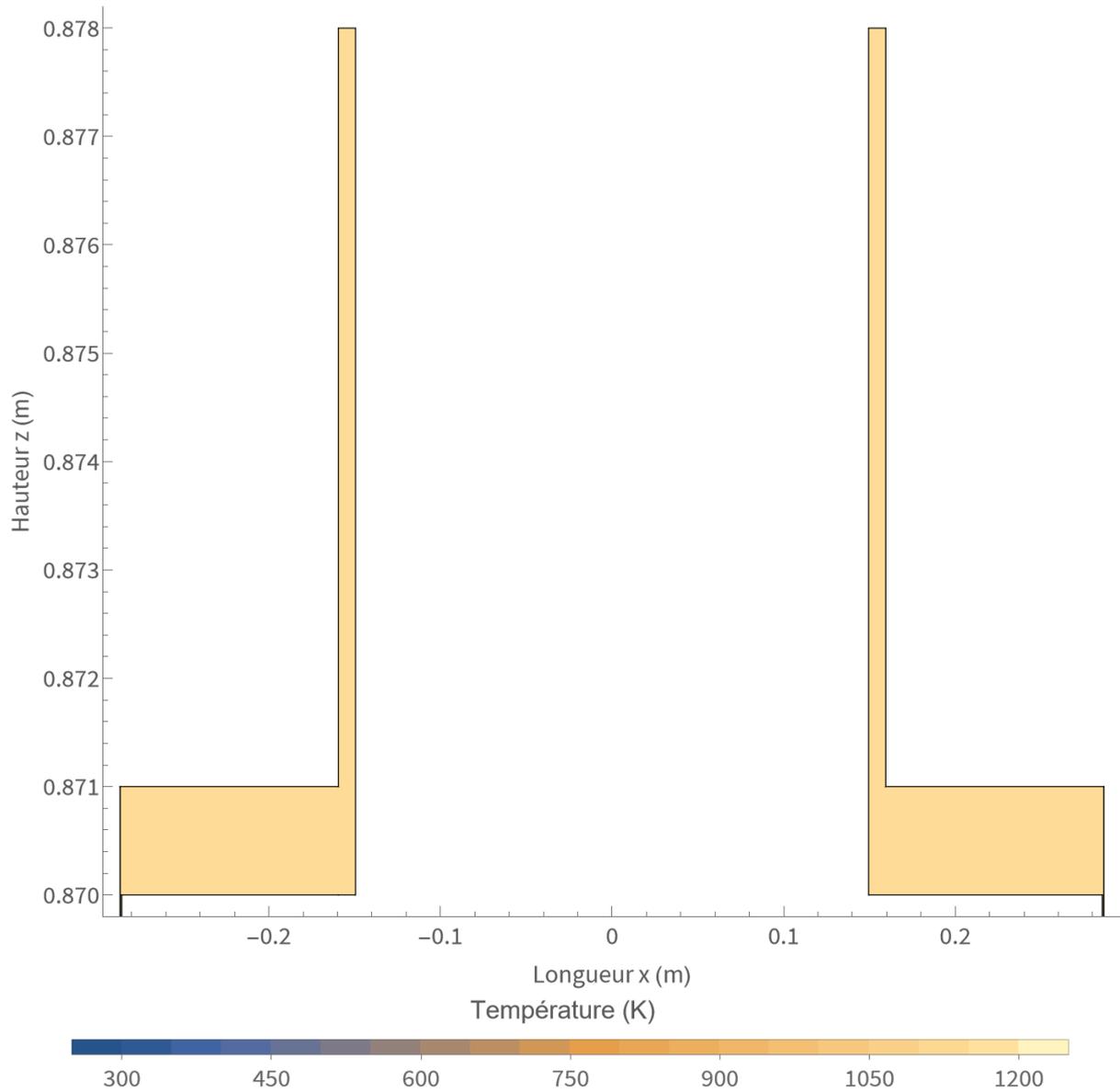


Figure 90 : Température de la paroi supérieure au bout d'une heure de chauffe en considérant uniquement les échanges convectifs entre les parois et le bitume.