



HAL
open science

Modélisation mathématique et numérique de la cristallisation fractionnée avec couplage des échanges chimiques et du transport différentiel magma-solide dans les réservoirs magmatiques

Morad Lakhssassi

► **To cite this version:**

Morad Lakhssassi. Modélisation mathématique et numérique de la cristallisation fractionnée avec couplage des échanges chimiques et du transport différentiel magma-solide dans les réservoirs magmatiques. Planète et Univers [physics]. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 2009. Français. NNT: . tel-00438843

HAL Id: tel-00438843

<https://theses.hal.science/tel-00438843>

Submitted on 4 Dec 2009

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.

THESE

présentée par

Morad LAKHSSASSI

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne

Spécialité : Sciences de la Terre

Modélisation mathématique et numérique de la
cristallisation fractionnée avec couplage des échanges
chimiques et du transport différentiel magma-solide dans
les réservoirs magmatiques

Soutenue à Saint-Etienne, le 28 avril 2009

Membres du jury

Rapporteurs :	Michel RABINOWICZ	Professeur/UPS Toulouse III
	Jean de BREMOND d'ARS	Chargé de recherche CNRS/Géosciences Rennes
Examineur(s) :	Ariel PROVOST	Professeur/UBP Clermont-Ferrand
	Marguerite GODARD	Chargée de recherche/Géosciences Montpellier
	Emmanuel LERICHE	Professeur/UJM Saint-Etienne
Directeur de thèse :	Bernard GUY	Maître de recherche/ENSM Saint-Etienne
Co-directeurs :	Jean-Yves COTTIN	Professeur/UJM Saint-Etienne
	Eric TOUBOUL	Ingénieur de recherche/ENSM Saint-Etienne
Invité :	Jacques MOUTTE	Chargé de recherche/ENSM Saint-Etienne



Avant propos

Cette thèse vient à la suite de nombreuses thèses en modélisation de phénomènes géologiques, en particulier de phénomènes de transport + réaction, menées au Département Géochimie du centre SPIN (Sciences des Processus Industriels et Naturels) de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne. Cette thèse a été menée en collaboration avec l'université Jean Monnet de Saint-Etienne. Elle s'inscrit, de plus, dans les travaux de l'équipe des Transferts Lithosphériques de l'UMR CNRS n° 6524 Magmas et Volcans de Clermont Ferrand et Saint-Etienne.

J'aimerais remercier tout d'abord Bernard Guy pour ce sujet qu'il m'a proposé, qui m'a apporté beaucoup de nouvelles connaissances en pétrologie et en géochimie. Je le remercie de m'avoir accordé sa confiance et de m'avoir soutenu dans mes idées et mes initiatives ainsi que pour tous ses conseils et encouragements.

Je remercie également mes deux co-encadrants, Jean-Yves Cottin pour son encadrement et pour les discussions en matière de géologie et géochimie, et Eric Touboul pour les discussions d'ordre mathématique et numérique. Ce qui m'a permis de progresser dans ce travail.

Je tiens à remercier Jacques Moutte pour sa disponibilité et les nombreuses discussions précieuses en thermodynamique, en géochimie et en informatique, ce qui a contribué à l'avancement de mes recherches.

Un grand merci à toutes les autres personnes de l'ENSM-SE qui ont contribué de près ou de loin à l'avancement de mon travail.

Mes remerciements vont également vers Michel Rabinowicz, Jean de Bremond d'Ars, Ariel Provost, Marguerite Godard et Emmanuel Leriche qui ont bien voulu examiner ce travail et faire partie du jury.

Je pense bien sûr à mes parents et mes frères, à mon oncle Khalid, à Samia et à mes amis qui m'ont encouragé et soutenu pour réussir ce travail de thèse, je pense notamment à Hedi, Adil, Jérôme et tous mes amis de St-Etienne et d'ailleurs.

Sommaire

Sommaire	5
Table des matières	8
Liste des figures	14
Liste des tableaux	23
Introduction	25
I Etude bibliographique et contexte géochimique général de l'étude	29
1 De la chambre magmatique aux roches magmatiques	31
2 Cadre et simplifications retenues pour le modèle	43
II Modélisation physique et mathématique de la cristallisation avec sédimentation et transport réactif en chambre magmatique	47
3 Modèle de cristallisation/sédimentation	51
4 Modèle du transport réactif magmas/roches	66
5 Recherche d'une isotherme magmatique $c_l = g(c_s, T, P)$	77
6 Adimensionnement et formulation du système d'équations aux dérivées partielles complet à résoudre	91
III Résolutions mathématique et numérique : Schémas numériques - Méthodes de résolution - Validation	97
7 Résolution numérique du problème de cristallisation/sédimentation	103
8 Tests de validation du modèle de cristallisation/sédimentation	122
9 Résolution numérique du problème du transport réactif	154

10 Tests de validation du modèle de transport réactif	165
IV Expériences numériques et analyse des résultats	193
11 Expériences numériques (étude de quelques situations géologiques modèles)	195
Conclusion générale	263
Annexes	274
A Dérivation de la fonction flux numérique $g(p, q)$ pour les schémas à trois points	275
B Comparaison des schémas à trois points	277
Glossaire	287
Bibliographie	291

Table des matières

Sommaire	5
Table des matières	8
Liste des figures	14
Liste des tableaux	23
Introduction	25
I Etude bibliographique et contexte géochimique général de l'étude	29
1 De la chambre magmatique aux roches magmatiques	31
1.1 Les roches magmatiques	32
1.1.1 Origine	32
1.1.2 Classification	32
1.2 Les chambres magmatiques	34
1.2.1 Description	34
1.2.2 Origine des magmas	36
1.3 Evolution d'une chambre magmatique : Différenciation des magmas	36
1.3.1 Cristallisation fractionnée	36
1.3.2 Séparation des phases cristallines	39
1.3.3 Assimilation et contamination	40
1.4 Remarques sur quelques modèles et codes de calcul existants	41
1.4.1 Logiciel MELTS ou pMELTS	41
1.4.2 Méthode CALPHAD	41
1.4.3 Programme TWEEQU	41
1.4.4 Programme IRIDIUM	42
2 Cadre et simplifications retenues pour le modèle	43
2.1 Cadre général	43
2.2 Considérations physiques	43
2.3 Modèle physico-chimique	44

TABLE DES MATIÈRES

II	Modélisation physique et mathématique de la cristallisation avec sédimentation et transport réactif en chambre magmatique	47
3	Modèle de cristallisation/sédimentation	51
3.1	Etablissement d'une équation de conservation	52
3.2	Etablissement des équations d'évolution des proportions de solide et de liquide p_s et p_l	54
3.3	Expression de la vitesse du solide v_s	56
3.3.1	Loi de Stokes	56
3.3.2	Loi de Richardson et Zaki	57
3.3.3	Ordres de grandeur de la vitesse de Stokes U_s :	58
3.4	Expression de la vitesse du liquide magmatique v_l	60
3.5	La fonction vitesse de solidification q_s	61
3.5.1	Quelques exemples de la littérature	61
3.5.2	Profils $q_s(x)$	62
3.5.3	Ordres de grandeur	63
4	Modèle du transport réactif magmas/roches	66
4.1	Etablissement des équations d'évolution des concentrations dans le solide et dans le liquide c_s et c_l	66
4.1.1	Contribution des interactions chimiques entre le liquide et le solide	67
4.1.2	Contribution de la solidification du magma	69
4.1.3	Bilan des quantités de constituant chimique	70
4.2	Expression de la surface réactive S_r	71
4.3	Ordres de grandeur de la constante cinétique k_c	74
5	Recherche d'une isotherme magmatique $c_l = g(c_s, T, P)$	77
5.1	Expressions des potentiels chimiques	78
5.1.1	Solution idéale dans le solide	78
5.1.2	Solution idéale dans le liquide	79
5.1.3	Cas non idéal	79
5.2	Existence de solutions	79
5.3	Relation entre les fractions molaires X_{Fo}^l et X_{Fo}^s	81
5.4	Passage aux concentrations volumiques	82
5.4.1	Calcul de c_{Fo}^l en fonction de X_{Fo}^s	82
5.4.2	Calcul de X_{Fo}^s en fonction de c_{Fo}^s	83
5.5	Fonction isotherme	84
5.5.1	Expression de la fonction isotherme : $c_{Fo}^l = g(c_{Fo}^s)$	84
5.5.2	Tracé des courbes isothermes	84
5.6	Passage aux fractions molaires normalisées	86
5.7	Application aux systèmes ouvert et fermé	87
5.7.1	Système ouvert	87
5.7.2	Système fermé	87
5.8	Conclusion	89
6	Adimensionnement et formulation du système d'équations aux dérivées partielles complet à résoudre	91
6.1	Adimensionnement des équations de cristallisation avec sédimentation	91
6.2	Adimensionnement des équations du transport réactif	93

6.3	Synthèse du système d'EDPs à résoudre	94
6.4	Ordres de grandeur pour les nombres adimensionnels A et D_a	95
III Résolutions mathématique et numérique : Schémas numériques - Méthodes de résolution - Validation		97
7	Résolution numérique du problème de cristallisation/sédimentation	103
7.1	Domaine spatial et conditions initiales et aux limites	103
7.2	Discretisation par Volumes Finis	104
7.3	Schéma numérique Volumes Finis Décentré Amont	107
7.4	Schémas à trois points	109
7.4.1	Schéma de Lax-Friedrichs	111
7.4.2	Autres schémas à trois points	112
7.5	Méthodes itératives pour le traitement de la non linéarité des équations discrètes . .	113
7.5.1	Méthode du point fixe	114
7.5.2	Méthode de Newton-Raphson	117
8	Tests de validation du modèle de cristallisation/sédimentation	122
8.1	Cas d'un flux imposé nul : $f(p_s) = 0$	122
8.2	Prise en compte d'un flux non nul : $f(p_s) \neq 0$ - Méthode des caractéristiques	124
8.2.1	Présentation de la méthode des caractéristiques	124
8.2.2	Etude de la fonction flux $f(p_s)$	126
8.2.3	Insuffisance du schéma VFDAm	128
8.3	Validation d'un schéma à 3 points, le schéma LxF1	130
8.3.1	Exemple d'un choc à $p_{s0} < 0.17$	130
8.3.2	Exemple d'un choc à p_{s0} dépassant 0.17	135
8.3.3	Exemple d'une détente à $p_{s0} < 0.33$	139
8.3.4	Exemple d'un choc à p_{s0} dépassant 0.33	141
8.3.5	Exemple d'une détente à p_{s0} dépassant 0.33	143
8.3.6	Exemple avec solidification	145
8.4	Modification des schémas numériques dans des cas limites	147
8.4.1	Problème de frontière mobile	147
8.4.2	Correction des flux au voisinage de mailles remplies de solide	150
8.5	Conclusion	152
9	Résolution numérique du problème du transport réactif	154
9.1	Conditions initiales et aux limites	155
9.2	Discretisation par Volumes Finis	155
9.3	Schéma numérique décentré	156
9.4	Méthodes itératives pour la résolution des équations discrètes	159
9.4.1	Résolution par la méthode du point fixe	159
9.4.2	Résolution par la méthode de Newton-Raphson	161
10	Tests de validation du modèle de transport réactif	165
10.1	Cas de flux imposés nuls : $f_s(p_s.c_s) = 0$ et $f_l(p_l.c_l) = 0$	165
10.1.1	Evolution par réaction chimique uniquement	166
10.1.2	Evolution par solidification uniquement	170

TABLE DES MATIÈRES

10.1.3	Combinaison des deux phénomènes : réaction chimique et solidification	174
10.2	Prise en compte des termes de flux : $f_s(p_s.c_s) \neq 0$ et $f_l(p_l.c_l) \neq 0$	176
10.2.1	Evolution par transport uniquement	177
10.2.2	Evolution par réaction et transport	179
10.2.3	Evolution par solidification et transport	184
10.3	Combinaison des trois phénomènes : solidification, transport et réaction	187
10.4	Modification des schémas numériques dans les cas limites	187
10.4.1	Problème de frontière mobile	187
10.4.2	Correction des flux au voisinage de mailles remplies de solide	190
10.5	Conclusion	191
IV	Expériences numériques et analyse des résultats	193
11	Expériences numériques (étude de quelques situations géologiques modèles)	195
11.1	Etude détaillée d'un premier exemple prenant en compte les 3 phénomènes moteurs en même temps - Effets des nombres sans dimension A et D_a	196
11.1.1	$A=0.01$	197
11.1.2	$A=0.1$	203
11.1.3	$A=1$	206
11.1.4	$A=10$	208
11.1.5	Conservation	210
11.1.6	Récapitulation	210
11.2	Effet de la fonction vitesse de solidification $q_s(x)$	211
11.2.1	$q_s(x)$ linéaire décroissante	211
11.2.2	$q_s(x)$ non linéaire décroissante	218
11.2.3	$q_s(x)$ convexe	223
11.2.4	Récapitulation	227
11.3	Effet de la fonction isotherme g	229
11.3.1	Isotherme convexe	229
11.3.2	Isotherme concave	237
11.3.3	Isotherme avec changement de concavité	240
11.3.4	Exemple avec une condition initiale différente	243
11.3.5	Cas de $D_a < 100$	244
11.3.6	Récapitulation	245
11.4	Cartes de bimodalité	247
11.4.1	Définition d'un critère de bimodalité	247
11.4.2	Visualisation des cartes de bimodalité	247
11.5	Influence des situations géologiques (profondeur de la chambre dans la croûte et nature basique, acide ou intermédiaire des magmas) sur les paramètres A et D_a	257
11.6	Conclusion	260

Conclusion générale	263
Annexes	274
A Dérivation de la fonction flux numérique $g(p, q)$ pour les schémas à trois points	275
A.1 Dérivée de $g(p, q)$ pour le schéma VFDAm	275
A.2 Dérivée de $g(p, q)$ pour le schéma LxF	275
B Comparaison des schémas à trois points	277
B.1 Pourquoi le schéma de Lax-Friedrichs avec viscosité numérique $c = 1$	277
B.2 Schéma de Lax-Friedrichs modifié	281
B.3 Schéma de Lax-Wendroff	282
B.4 Schéma de Murman Roe	283
B.5 Discussion	286
Glossaire	287
Bibliographie	291

Liste des figures

1.1	Lac de lave du volcan Erta Ale, Ethiopie. — [Jacques-Marie Bardintzeff - http://www.lave-volcans.com].	31
1.2	Les trois principaux sites géotectoniques favorisant le magmatisme — Des courants de convection font remonter le manteau plus chaud et partiellement fondu vers la surface de la Terre. Image à partir de [http://www.journaldunet.com/science], modifiée.	33
1.3	Coupe schématique d'un édifice volcanique montrant la chambre magmatique — [Claude Jaupart, IPGP - http://www.ipgp.jussieu.fr/pictures_lib/166.jpg], image modifiée.	35
1.4	Suite réactionnelle de Bowen. — Au milieu, les minéraux cristallisant au fur et à mesure de la baisse de température, 4 principaux assemblages minéralogiques en découlent. A droite, les températures correspondantes, à gauche, les noms des roches ignées correspondant à l'assemblage minéralogique et au mode de mise en place. [http://svt.ac-dijon.fr/schemassvt/article.php3?id_article=1368].	37
1.5	Composition des roches ignées et des assemblages minéralogiques. — De droite à gauche, assemblages ultramafique, mafique, intermédiaire et felsique et la composition minéralogique correspondante. Par exemple, l'assemblage ultramafique qui correspond à la péridotite est composé presque uniquement d'olivine. [http://www.ggl.ulaval.ca/personnel/bourque/s2/r.ign.html].	39
2.1	Représentation d'une chambre magmatique. — Le magma est composé d'un mélange de liquide et de solide. En bas, la roche ignée formée par solidification et/ou par sédimentation des cristaux. Sur ce schéma, la chambre magmatique ne respecte pas les échelles de taille par rapport à celle du volcan.	44
2.2	Colonne magmatique modélisant une chambre magmatique fermée. — Trois phénomènes sont pris en compte : <i>solidification</i> , <i>sédimentation</i> et <i>échanges chimiques</i> . Tout au long de sa descente vers le fond, le cristal en déséquilibre chimique avec le liquide qui l'entoure, réagit avec celui-ci en s'appauvrissant ou en s'enrichissant en constituants chimiques (Fe et Mg par exemple).	45
3.1	Représentation d'un VER.	52
3.2	Représentation du VER dans le cas de notre colonne verticale. — Le VER est une maille de longueur Δx assez petite.	54
3.3	Vitesse de sédimentation selon la loi de Richardson et Zaki adimensionnée, pour différentes valeurs de e	58

LISTE DES FIGURES

3.4	Prédiction des vitesses de Stokes dans les chambres magmatiques, variations avec l'acidité du magma (caractérisée par sa viscosité cinématique). La partie hachurée correspond à la gamme des vitesses de Stokes pour des cristaux sphériques, limitée du côté inférieur par les vitesses prédites pour des cristaux de 1 mm de diamètre et dont la densité est supérieure à celle du magma de 0.05 g/cm^3 (approprié aux petits cristaux de plagioclase) et limitée du côté supérieur par les vitesses prédites pour des cristaux de 5 mm de diamètre et dont la densité est supérieure à celle du magma de 0.6 g/cm^3 (approprié aux grands cristaux d'olivine)— figure d'après Martin and Nokes [1989] , modifiée.	60
3.5	Quelques profils types pour la vitesse de solidification adimensionnée $q_s^*(x^*)$ ($x^* = x/L$). — (a) Production de solide décroissante avec la profondeur de la chambre magmatique. (b) Croissante avec la profondeur. (c) Production de solide sur toute la profondeur, moyenne au fond, faible au milieu, importante au sommet. (d) Importante au sommet et au fond, faible au milieu. (e) Moyenne au sommet, faible au milieu, importante au fond. (f) Importante au sommet, moyenne au milieu, faible au fond. (g) Importante au fond, moyenne au milieu, faible au sommet.	63
3.6	Schéma pour bilan thermique.	64
4.1	Quelques profils pour la surface réactive adimensionnée S_r^* et le rapport S_r/S_g pour différentes valeurs de α	74
4.2	Représentation de l'échange d'un élément Mg par diffusion dans un cristal sphérique de rayon a	75
5.1	Diagramme binaire (X,T) à pression P donnée. — Pour $T > T_{Fo}^{fus}$, seule la phase liquide peut exister et pour $T < T_{Fa}^{fus}$, seule la phase solide existera.	81
5.2	Tracé des différentes fractions molaires dans le liquide en fonction de la fraction molaire X_{Fo}^s sur l'intervalle $[0.42, 1]$ pour $T=1500 \text{ }^\circ\text{C}$ et $P=1 \text{ kbar}$. — $[0.42, 1]$ représente l'intervalle de X_{Fo}^s qui permet de vérifier la condition (5.10)	85
5.3	Tracé de la courbe isotherme $c_{Fo}^l = g(c_{Fo}^s)$ pour X_{Fo}^s variant sur l'intervalle de validité $[0.42, 1]$ pour $T=1500 \text{ }^\circ\text{C}$ et $P=1 \text{ kbar}$	86
5.4	Tracé de la courbe isotherme $Z = h(Y)$ pour X_{Fo}^s variant sur l'intervalle $[0.42, 1]$ pour $T=1500 \text{ }^\circ\text{C}$ et $P=1 \text{ kbar}$	87
5.5	Profils tirés de la littérature pour la fonction isotherme $c_l - g(c_s)$. — (a) Korzhinskii [1970] , (b) Fonteilles [1978]	88
5.6	Quelques profils types pour la fonction isotherme $c_l - g(c_s)$ (après adimensionnement). — (a) Isotherme convexe, (b) Linéaire, (c) Concave; (d),(e) et (f) : Isothermes avec changement de concavité.	89
6.1	Organigramme simplifié des étapes de calcul pour la résolution des systèmes (6.16) et (6.17). — Remarque : le calcul de $p_s(x, t + \Delta t)$ ne nécessite pas la connaissance de $c_s(x, t)$ ou de $c_l(x, t)$ alors que le calcul de $c_s(x, t + \Delta t)$ et $c_l(x, t + \Delta t)$ nécessite la connaissance de $p_s(x, t)$ et $p_s(x, t + \Delta t)$	100
7.1	Représentation du maillage par volumes finis. — (a) Colonne magmatique discrétisée, (b) Représentation horizontale.	105
7.2	Représentation du volume de contrôle V_c	106
7.3	Méthode du point fixe.	114
7.4	La méthode de Newton.	117

8.1	Evolution au cours du temps de la proportion de solide dans le cas d'un flux nul, et d'une vitesse de solidification linéaire décroissante. — $p_s(x, 0) = 0$, $A = 0.1$, $q_s(x) = 1 - 0.9x$, $\Delta t = 0.1$	123
8.2	Evolution au cours du temps de la proportion de solide dans le cas d'un flux nul, et d'une vitesse de solidification convexe. — $p_s(x, 0) = 0$, $A = 0.1$, $q_s(x) = a(x - 0.5)^4 + b$, $\Delta t = 0.1$	124
8.3	Courbes du flux $f(p_s)$ et de la dérivée du flux $f'(p_s)$. — Inversement du sens de variation à $p_s = 0.17$ et changement de concavité à $p_s = 0.33$	127
8.4	(a) Simulation de l'évolution de p_s au cours du temps avec le schéma VFDAm pour $p_{s0} < 0.17$. — $t_{max} = 1.6$, $p_{s0} = 0.1$, $A = 0$, $\Delta t = 0.001$. (b) Simulation de l'évolution de p_s au cours du temps avec le schéma VFDAm pour $p_{s0} > 0.17$. — Apparition d'oscillations - $p_{s0} = 0.25$, $A = 0$, $\Delta t = 0.001$	129
8.5	Condition initiale discontinue, $p_{s0} < 0.17$. — La fonction $f'(p_s)$ représente la vitesse du flux du solide.	131
8.6	(a) Représentation des droites caractéristiques avant correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — p_s est constante le long des droites caractéristiques.	131
8.7	Principe de correction des pentes des caractéristiques lorsqu'elles se croisent (choc). — la vitesse de <i>Rankine-Hugoniot</i> , v_{RH} , est donnée par la relation (8.13).	132
8.8	(a) Représentation des courbes caractéristiques après correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Propagation du choc.	133
8.9	(a) Courbes caractéristiques après correction des pentes représentées jusqu'au temps $t = 1.4$. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1 dans le cas de la sédimentation seule (pas de solidification : $A = 0$). — Deux fronts se créent : l'un se déplaçant vers le fond de la colonne magmatique fermée, l'autre vers le sommet.	134
8.10	Condition initiale croissante, p_{s0} dépassant 0.17. — Représentation des valeurs $f'(p_{s0})$ le long de la courbe $p_{s0}(x)$	136
8.11	(a) Droites caractéristiques avant correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Apparition de chocs.	136
8.12	(a) Courbes caractéristiques après correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Propagation d'un choc.	138
8.13	Condition initiale décroissante, $p_{s0} < 0.33$	139
8.14	(a) Courbes caractéristiques. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Phénomène de détente.	140
8.15	Condition initiale croissante, p_{s0} dépassant 0.33.	141
8.16	(a) Courbes caractéristiques après correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Formation d'un choc.	142
8.17	Condition initiale décroissante, p_{s0} dépassant 0.33.	143
8.18	(a) Courbes caractéristiques. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Présence d'une zone de compression et d'une zone de détente.	144

LISTE DES FIGURES

8.19	(a) Courbes caractéristiques après correction des pentes. — Changement de la direction du choc à $t = 1.25$ et à $x = 0.33$. (b) Résultat obtenu par la simulation numérique utilisant le schéma LxF1. — Changement de la direction du choc à $t \approx 2$ et à $x \approx 0.45$	146
8.20	Résultats de simulation avant modification des termes de flux au niveau du front de sédimentation pour deux exemples de condition initiale p_{s0} . — La dernière maille où se trouve le front de sédimentation ne se remplit pas de solide ($p_s(1)$ n'atteint pas la valeur 1).	148
8.21	Représentation du front de sédimentation. — Le front de sédimentation d'abscisse x_f , sépare la maille en deux parties : une partie inférieure sédimentée pour laquelle $p_s = 1$ et une partie supérieure "mobile" pour laquelle $p_s < 1$	148
8.22	Résultats de simulation après modification des termes de flux. — Les mailles du fond se remplissent normalement par le solide et le front de sédimentation remonte.	150
8.23	Exemple de présence de mailles remplies de solide ($p_s = 1$) au milieu de mailles où existe encore du liquide ($p_s < 1$). — La courbe en tirets pointillés représente un cas, au voisinage de $x = 0.2$, où les flux entrant et sortant des mailles où $p_s = 1$ doivent être annulés.	151
8.24	Illustration des différents cas où les flux entrant ou sortant sont annulés.	152
10.1	Conditions initiales et fonctions sources $c_l = g(c_s)$ et $q_s(x)$. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a \neq 0$	167
10.2	Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l (a) à $t = 0.54$ et (b) à $t = 1.2$. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a = 1$	169
10.3	(a) Concentrations à l'état final $t = 10.84$, (b) évolution de c_s au cours du temps. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a = 1$	169
10.4	Concentrations à l'état final $t = 1.09$. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a = 10$, $\Delta t = 10^{-4}$	170
10.5	Conditions initiales et fonction $q_s(x)$. — Flux nuls, $A \neq 0$, $D_a = 0$	171
10.6	Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l (a) à $t = 0.5$ et (b) à $t = 1.5$. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$	171
10.7	Conditions initiales et fonction $q_s(x)$. — Flux nuls, $A \neq 0$, $D_a = 0$	172
10.8	Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l (a) à $t = 0.4$ et (b) à $t = 1$. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$	173
10.9	(a) Concentrations à l'état final $t = 7.02$, (b) évolution de c_s au cours du temps. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$	173
10.10	Concentrations à l'état final $t = 0.701$. — Flux nuls, $A = 10$, $D_a = 0$, $\Delta t = 10^{-5}$	174
10.11	Conditions initiales et fonctions sources g et q_s . — Flux nuls, $A \neq 0$, $D_a \neq 0$	175
10.12	Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l à $t = 0.5$ et $t = 1.5$. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$	176
10.13	Représentation des résultats de simulation avec les résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l à $t = 0.5$ et $t = 1.5$. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$	176
10.14	Conditions initiales. — Flux non nuls, $A = 0$, $D_a = 0$	177
10.15	Résultats de simulation pour p_s , c_s et c_l (a) à $t = 2$ et (b) à l'état final $t = 4.32$. — Flux non nuls, $A = 0$, $D_a = 0$	177
10.16	Conditions initiales et fonctions $c_l = g(c_s)$ — Flux non nuls, $A = 0$, $D_a \neq 0$	179
10.17	Résultats de simulation pour p_s , c_s , et c_l (a) à $t = 2$ et (b) à $t = 3.5$. — $A = 0$, $D_a = 0.1$	180
10.18	Résultats de simulation à l'état final $t = 4.54$. — $A = 0$, $D_a = 0.1$	180
10.19	Résultats de simulation (a) à $t = 0.2$ et (b) à $t = 3$. — $A = 0$, $D_a = 1$	181
10.20	Résultats de simulation à l'état final $t = 4.58$. — $A = 0$, $D_a = 1$	182
10.21	Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à $t = 0.3$. — $A = 0$, $D_a = 10$	182
10.22	Résultats de simulation (a) à $t = 2.5$ et (b) à l'état final $t = 4.58$. — $A = 0$, $D_a = 10$	183
10.23	Conditions initiales et fonction $q_s(x)$. — Flux nuls, $A \neq 0$, $D_a = 0$	184
10.24	Résultats de simulation (a) à $t = 1.5$ et (b) à $t = 3$. — $A = 0.01$, $D_a = 0$	185

10.25	Résultats de simulation (a) à $t = 1$ et (b) à $t = 7.5$. — $A = 0.1, D_a = 0$.	186
10.26	Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à l'état final $t = 0.08$. — $A = 10, D_a = 0$.	186
10.27(a)	Conditions initiales, (b) Résultats de simulation à l'état final $t = 0.2$. — $A = 10,$ $D_a = 0, \Delta t = 10^{-4}$.	187
10.28	Représentation du front de sédimentation. — Le front de sédimentation d'abscisse x_f , sépare la maille en deux parties : une partie inférieure sédimentée pour laquelle $p_s = 1$ et une partie supérieure "mobile" pour laquelle $p_s < 1$.	189
10.29	Illustration des différents cas où les flux des éléments chimiques se trouvant dans le liquide sont annulés.	191
11.1	Conditions initiales considérées tout le long du chapitre 11. — La chambre magma- tique est initialement entièrement liquide.	195
11.2	Conditions initiales et fonctions sources $c_l = g(c_s)$ et $q_s(x)$. — $A \neq 0, D_a \neq 0$.	197
11.3	Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à $t = 20$. — $A = 0.01, D_a = 0.01$.	198
11.4	Résultats de simulation à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01, D_a = 0.01$.	198
11.5	Résultats de simulation (a) à $t = 2$ et (b) à $t = 50$. — $A = 0.01, D_a = 1$.	200
11.6	Résultats (a) à $t = 100$ et (b) à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01, D_a = 1$.	200
11.7	Résultats (a) à $t = 20$ et (b) à $t = 20$. — $A = 0.01, D_a = 100$.	201
11.8	Résultats (a) $t = 100$ et (b) à $t = 250$. — $A = 0.01, D_a = 100$.	201
11.9	Résultats de simulation à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01, D_a = 100$.	202
11.10	Résultats de simulation à l'état final $t = 518.234$. — $A = 0.01, D_a = 1000, \Delta t = 10^{-4}$.	202
11.11	Effet de la forme de l'isotherme. (a) Représentation de la courbe isotherme, (b) résultat sur c_s à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01, D_a = 100$.	203
11.12	Résultats de la simulation (a) à $t = 3.7$ et (b) à $t = 13$. — $A = 0.1, D_a = 0.01$.	204
11.13	Résultats à l'état final $t = 16.76$. — $A = 0.1, D_a = 0.01$.	204
11.14	Résultats (a) à $t = 6.5$ et (b) à $t = 13.8$. — $A = 0.1, D_a = 100$.	205
11.15	Résultats à l'état final $t = 16.76$. — $A = 0.1, D_a = 100$.	206
11.16	Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à $t = 0.9$. — $A = 1, D_a = 0.01$.	207
11.17	Résultats à l'état final $t = 1.24$. — $A = 1, D_a = 0.01$.	207
11.18	Résultats (a) à $t = 0.5$ et (b) à $t = 0.94$. — $A = 1, D_a = 100$.	208
11.19	Résultats à l'état final $t = 1.24$. — $A = 1, D_a = 100$.	208
11.20	Résultats (a) à $t = 0.09$ et (b) à l'état final $t = 0.108$. — $A = 10, D_a = 0.01, \Delta t = 10^{-4}$.	209
11.21	Résultats (a) à $t = 0.09$ et (b) à l'état final $t = 0.108$. — $A = 10, D_a = 100, \Delta t = 10^{-4}$.	209
11.22	Isotherme choisie pour toute la section 11.2. — $c_l = g(c_s) = c_s^2$.	211
11.23	Représentation de la vitesse de solidification linéaire décroissante.	212
11.24	Résultats de simulation (a) à $t = 150$ et (b) à l'état final $t = 577$. — $A = 0.01, D_a = 0.01$.	213
11.25	Résultats à l'état final $t = 577$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 0.01$.	213
11.26	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.01$.	213
11.27	Résultats (a) à $t = 15$ et (b) à l'état final $t = 57.24$. — $A = 0.1, D_a = 0.01$.	214
11.28	Résultats à l'état final $t = 57.24$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 0.1$.	214
11.29	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.1$.	215
11.30	Résultats (a) à $t = 1$ et (b) à $t = 2$. — $A = 1, D_a = 0.01$.	215
11.31	Résultats à l'état final $t = 3.88$. — $A = 1, D_a = 0.01$.	216
11.32	Résultats à l'état final $t = 57.24$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 1$.	216
11.33	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 1$.	216
11.34	Résultats (a) à $t = 0.2$ et (b) à l'état final $t = 0.68$. — $A = 10, D_a = 0.01$.	217
11.35	Résultats à l'état final $t = 0.68$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 10$.	217
11.36	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 10$.	218

LISTE DES FIGURES

11.37	Représentation de la vitesse de solidification non linéaire décroissante.	218
11.38	Résultats de simulation (a) à $t = 300$ et (b) à l'état final $t = 813.2$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$	219
11.39	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.01$	220
11.40	Résultats de simulation (a) à $t = 30$ et (b) à l'état final 81.12 . — $A = 0.1$, $D_a = 100$	220
11.41	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.1$	221
11.42	Résultats (a) à $t = 5$ et (b) à l'état final $t = 11.04$. — $A = 1$, $D_a = 100$	221
11.43	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 1$	222
11.44	Résultats (a) à $t = 1$ et (b) à l'état final $t = 2.02$. — $A = 10$, $D_a = 100$	222
11.45	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 10$	223
11.46	Représentation de la vitesse de solidification convexe.	223
11.47	Résultats de simulation (a) à $t = 500$ et (b) à l'état final $t = 1000$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$	224
11.48	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.01$	224
11.49	Résultats (a) à $t = 50$ et (b) à l'état final $t = 100$. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	225
11.50	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.1$	225
11.51	Résultats (a) à $t = 6$ et (b) à l'état final $t = 10.18$. — $A = 1$, $D_a = 100$	226
11.52	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 1$	226
11.53	Résultats (a) à $t = 1$ et (b) à l'état final $t = 1.82$. — $A = 10$, $D_a = 100$	227
11.54	Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 10$	227
11.55	Vitesse de solidification choisie pour toute la section 11.3.	229
11.56	Concentrations finales pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^2$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$	230
11.57	Histogrammes de répartition des concentrations pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^2$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$	230
11.58	Représentation de l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^3$	231
11.59	Concentrations finales pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^3$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$	232
11.60	Histogrammes de répartition des concentrations pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^3$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$	232
11.61	Représentation de l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^5$	233
11.62	Concentrations finales pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^5$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$	233
11.63	Histogrammes de répartition des concentrations pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^5$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$	234
11.64	(a) Isotherme $c_l = g(c_s) = c_s^2$ et schéma d'évolution des concentrations dans les cristaux produits dans la partie supérieure de la chambre magmatique à partir d'un liquide initial dans lequel $c_l = 0.8$. (b) Concentrations à $t = 40$. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	235
11.65	(a) Isotherme $c_l = g(c_s) = c_s^5$ et schéma d'évolution des concentrations dans les cristaux produits dans la partie supérieure de la chambre magmatique à partir d'un liquide initial dans lequel $c_l = 0.8$. (b) Concentrations à $t = 40$. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	236
11.66	Comparaison des concentrations à $t = 6$ pour les deux isothermes convexes : (a) $g(c_s) = c_s^2$ et (b) $g(c_s) = c_s^5$. — $A = 1$, $D_a = 100$	237
11.67	Représentation d'une isotherme concave - Premier exemple.	238
11.68	(a) Concentrations finales pour la première isotherme concave, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	238
11.69	Représentation d'une isotherme concave - Deuxième exemple.	239
11.70	(a) Concentrations finales pour la troisième isotherme concave, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	239
11.71	Représentation d'une isotherme avec inflexion centrée.	240
11.72	(a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	240

11.73	Représentation d'une isotherme avec inflexion décalée vers le bas.	241
11.74(a)	Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	241
11.75	Représentation d'une isotherme avec inflexion décalée vers le haut.	242
11.76(a)	Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le haut, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	242
11.77	Représentation d'une isotherme avec inflexion centrée.	243
11.78(a)	Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le haut, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$	243
11.79(a)	Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas et $c_l^0 =$ 0.8, (b) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée. — $A = 0.1$ et D_a prenant les valeurs 100, 10 et 1.	244
11.80	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^2$	248
11.81	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ convexe, $g(c_s) = c_s^2$	249
11.82	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^2$	249
11.83	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^3$	250
11.84	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^5$	250
11.85	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^7$	251
11.86	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, première $g(c_s)$ concave.	251
11.87	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, deuxième $g(c_s)$ concave.	252
11.88	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, troisième $g(c_s)$ concave.	252
11.89	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion centrée.	253
11.90	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion en bas.	253
11.91	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion en haut.	254
11.92	Carte de bimodalité. — $q_s(x) = 1$, $g(c_s) = c_s^2$	254
11.93	Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion en haut, $c_l^0 = 0.2$	255
11.94	Variations des paramètres a , q_{s0} et U_s avec les conditions géologiques : nature du magma et profondeur de la chambre dans la croûte terrestre. Les valeurs de A et D_a en sont déduites pour deux cas extrêmes. — Les valeurs de L et k_c sont fixées ici et prises égales à : $L = 1000$ m et $k_c = 10^{-13}$ m.s ⁻¹	258
11.95	Diagramme de corrélation entre silice et somme des alcalins (TAS) (classification de Le Maitre [1989]). Cercles : série sous-saturée en SiO ₂ ; cercles vides : roches mafiques et cercles pleins : phonolites feldspathoïdiques. Carrés : série sur-saturée en SiO ₂ ; carrés vides : roches mafiques et carrés pleins : phonolite. — Figure d'après Thompson et al. [2001] , modifiée.	266
11.96(a)	Concentrations en Al, Fe et Cr au sein de spinelles chromifères : lacune de cris- tallisation. — Figure d'après Henderson and Wood [1981] , modifiée. (b) Bimodalité de com- position dans une petite chambre (ophiolites d'Oman). — Figure d'après Leblanc and Ceuleneer [1992] , modifiée.	268
B.1	(a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas et $c_l^0 =$ 0.8, (b) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée. — $A = 0.1$ et D_a prenant les valeurs 100, 10 et 1.	278
B.2	(a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas et $c_l^0 =$ 0.8, (b) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée. — $A = 0.1$ et D_a prenant les valeurs 100, 10 et 1.	278
B.3	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs avec $c = 1$; $A = 0$ et $D_a = 0$	279

LISTE DES FIGURES

B.4	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs avec $c = 0.1$; $A = 0$ et $D_a = 0$	280
B.5	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs avec $c = 0.5$; $A = 0$ et $D_a = 0$	280
B.6	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs modifié; $A = 0$ et $D_a = 0$	281
B.7	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs modifié; $A = 1$ et $D_a = 10$	281
B.8	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Wendroff; $A = 0$ et $D_a = 0$	282
B.9	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Murman-Roe; $A = 0$ et $D_a = 0$	283
B.10	(a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Murman-Roe; $A = 1$ et $D_a = 10$	284
B.11	Conditions initiales et fonctions sources pour les tests de comparaison entre les schémas LxF1 et Murman-Roe.	284
B.12	Comparaison entre les résultats des schémas LxF1 (traits pleins) et Murman-Roe (tirets) pour $A = 0.1$ et $A = 1$ et pour différentes valeurs de D_a	285
B.13	Comparaison entre les résultats des schémas LxF1 (traits pleins) et Murman-Roe (tirets) pour $A = 10$ et différentes valeurs de D_a	285

Liste des tableaux

6.1	Ordres de grandeurs des paramètres physiques utiles pour la résolution du problème. — Les valeurs typiques de ρ_s et ρ_l ont été prises pour la forstérite (Mg_2SiO_4) à $T=1300$ °C et $P=1$ kbar. La valeur typique du rayon d'un cristal sphérique est la valeur moyenne donnée par Schwindinger [1999] pour un cristal d'olivine.	96
6.2	Tableau récapitulatif des modèles mathématiques à résoudre, les méthodes choisies pour la résolution numérique, les méthodes de validation des résultats obtenus et les conclusions retenues.	102
11.1	Valeurs de A et D_a calculées en fonction de la profondeur de la chambre magmatique dans la croûte terrestre et de la nature du magma.	259

Introduction

La connaissance de l'évolution chimique des magmas représente une des préoccupations majeures en géochimie et en pétrologie. Les développements de la pétrologie expérimentale et de la modélisation numérique ont permis de faire avancer la compréhension des divers phénomènes qui interviennent dans l'histoire des magmas et dans la mise en place des roches qui en dérivent. Ces travaux ont aussi permis de faire avancer certaines questions en dehors de la géologie, en particulier dans les domaines de l'industrie du verre et de la métallurgie.

Les roches magmatiques proviennent fréquemment de chambres ou réservoirs magmatiques plus ou moins profonds (1 à 35 km de profondeur), où le magma issu de la fusion des roches primaires mantelliques ou crustales vient s'accumuler, puis subir une série de processus de cristallisation/contamination/assimilation avant de migrer pour atteindre la surface de la terre (roches dites volcaniques) ou de se solidifier en profondeur puis atteindre la surface de la terre (roches dites plutoniques) par d'autres phénomènes géologiques (érosion et/ou tectonique).

Plusieurs modèles ont été présentés par les géochimistes pour expliquer l'origine et la composition des laves émises par les volcans, en se basant sur les observations de terrain, sur les associations minéralogiques et sur les résultats d'analyses chimiques faites sur les éléments majeurs, les éléments en traces ainsi que sur les isotopes. Les modèles les plus rencontrés dans la littérature sont les modèles de fusion partielle et de cristallisation fractionnée, cette dernière pouvant être combinée parfois à des phénomènes de contamination. Le modèle le plus retenu est celui de la différenciation magmatique par cristallisation fractionnée.

Le modèle de cristallisation fractionnée souffre cependant de limitations importantes qui sont en particulier :

- la non prise en compte de partages chimiques non linéaires entre le solide et le liquide (les coefficients de partage constants étant adaptés aux éléments en trace et non aux éléments majeurs).
- la non prise en compte du déplacement relatif à tout instant entre les solides et les liquides et des échanges chimiques possibles au cours de ce déplacement : il n'y a pas de variable d'espace.

Les sauts (ou discontinuités) de composition chimique observés dans les roches volcaniques issues d'une même province font aussi l'objet de beaucoup d'études. En particulier le phénomène de "Daly gap" (Daly [1910]; Daly [1925]), nom donné au saut de composition chimique entre les roches mafiques (basalte) et roches felsiques (trachyte, rhyolite, phonolite), correspondant à l'absence ou la rareté des roches de composition intermédiaire (andésites), aussi bien dans les séries océaniques que dans les séries continentales.

Certains auteurs expliquent ces sauts compositionnels par l'intervention de phénomènes géologiques différents qui se succèdent dans le temps. Par exemple, lorsqu'une chambre magmatique passe d'un système fermé à un système ouvert, des laves d'une composition bien déterminée sont éjectées en surface. La composition de ces laves, originaires d'une chambre magmatique différenciée par cristallisation fractionnée, est elle expliquée par les différentes étapes de recharge et vidange de cette chambre, en privilégiant la remontée des magmas les plus légers, les plus riches en volatils et les moins visqueux vers la surface de la terre (voir par exemple Geist et al. [1995]; Thompson et al. [2001]). Il existe aussi d'autres explications pour ces sauts de composition (par exemple Peccerillo et al. [2003]; Bonnefoi et al. [1995]; Baker [1968]; Chayes [1977]; Marsh [2002]).

Les diverses explications ainsi proposées, bien qu'elles s'accordent de façon satisfaisante aux données naturelles, nous éloignent le plus souvent des phénomènes élémentaires de fusion/solidification, déplacement relatif et équilibre chimique entre solide et liquide et font intervenir divers phénomènes additionnels.

Dans mon étude, je distingue trois grandes classes de processus intervenant de façon simultanée :

- les processus de transferts thermiques et de solidification.
- les processus de migration relative entre le solide et le liquide notamment en relation avec les différences de densité entre solide et liquide.
- et les processus d'échanges chimiques entre liquide et solide.

Chacune de ces classes mérite à elle seule des développements poussés compte tenu des différents domaines pouvant être abordés tels que la géochimie, la thermodynamique, les théories de la cristallisation et la mécanique des fluides (voir par exemple Brandeis and Jaupart [1986]; Brandeis and Jaupart [1987]; Simakin et al. [1997]; Schwindinger [1999]; Spiegelman [2000]; Hoink et al. [2005]). Vu la multitude et la complexité des phénomènes qui interviennent, le couplage entre les différents problèmes et leur dépendance par rapport aux échelles de temps et d'espace, le recours à la modélisation s'impose.

Des modèles mathématiques couplés existent, surtout en ce qui concerne les phénomènes de percolation-réaction appliqués aux éléments en traces (Baker and Spiegelman [1995]; Hauri [1997]; Korenaga and Kelemen [1998]; Godard et al. [1995]), il en existe cependant beaucoup moins qui concernent les éléments majeurs (Boudreau [2003]; Kuritani [2004]). Toutefois, ces modèles ne traitent que des aspects partiels des trois classes de processus citées plus haut, et ne peuvent en général pas prendre en compte tous les phénomènes, tant la variété de ces derniers est grande.

Dans le présent travail, je propose un modèle mathématique couplant *ensemble* les trois processus cités plus haut. Je m'intéresse à l'évolution d'une *chambre magmatique fermée* modélisée sous la forme d'une colonne verticale contenant initialement un magma (avec ou sans solides), en particulier, je veux suivre les variations des concentrations des **éléments majeurs**, toujours dosés sous forme d'oxydes (SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MnO , MgO , CaO , Na_2O , K_2O ...).

La présence du magma chaud à l'intérieur de la chambre produit un gradient de température entre son centre et ses parois rocheuses plus froides, ce qui provoque la solidification du magma sous forme de cristaux qui, par contraste de densité avec les liquides, sédimentent vers le fond de la chambre. Au cours de ce mouvement, les solides rencontrent des liquides généralement en déséquilibre chimique avec eux, des échanges chimiques se produisent alors entre les deux phases solide et liquide. Trois phénomènes doivent donc être pris en compte et modélisés :

Introduction

- la *solidification* : le long de la colonne verticale, je considérerai que l'on peut définir une loi de solidification q_s comme une fonction de la profondeur au sein de la chambre modèle et éventuellement du temps.
- le *mouvement* : relatif entre le liquide et le solide, en particulier la *sédimentation* des cristaux formés. La vitesse de sédimentation v_s sera prise en se basant sur une loi semi-empirique qui fait dépendre v_s de la proportion du solide présent dans le magma à chaque valeur de la variable d'espace.
- l'*équilibrage chimique* : je considérerai une loi cinétique régie par l'écart à l'équilibre entre le solide et le liquide. Cette loi sera considérée connue sous forme analytique sans forcément être linéaire, contrairement à la loi de partage pour les éléments en traces, ce qui présente nous le verrons, un point important.

Ce faisant, je me suis inspiré du modèle chromatographique utilisé pour la compréhension des roches métasomatiques, et qui fait appel à des simplifications analogues en ce qui concerne les phénomènes de mouvement relatif et d'échange chimique (Guy [1984]; [1989]; [1993]; Godard et al. [1995]; Korenaga and Kelemen [1998]; Hauri [1997]; Baker and Spiegelman [1995]).

Dans sa première version, mon modèle prend en compte une seule variable d'espace (la verticale), de plus les phénomènes de convection sont totalement négligés, seuls les mouvements verticaux de sédimentation des solides et de remontée des liquides sont ici considérés. Du point de vue des constituants chimiques, je m'intéresse à un *système binaire*, c'est-à-dire contenant deux constituants chimiques (un seul constituant indépendant). Outre les différentes simplifications, le modèle que je propose permet d'avoir une vue d'ensemble féconde, en particulier, les trois phénomènes considérés donneront lieu, après adimensionnement, à deux paramètres indépendants qui me permettront de distinguer les grands types d'évolution des concentrations. Nous verrons que les concentrations dépendront également fortement de l'expression de la loi cinétique d'échange entre le solide et le liquide.

L'objectif de cette thèse est d'écrire les **équations mathématiques** qui modélisent les phénomènes couplés de solidification/transport/réaction dans les réservoirs ou chambres magmatiques fermées, puis d'implémenter ce modèle afin de **simuler numériquement** les variations des concentrations. Les spécificités de mon modèle sont : de considérer le **système** comme **fermé** où les deux phases liquide et solide peuvent être en mouvement et leurs proportions peuvent varier au cours du temps par solidification du magma, de s'intéresser à l'évolution des **éléments majeurs**, et de prendre en compte un équilibrage chimique exprimé par un **écart à l'équilibre** ; la concentration du liquide à l'équilibre avec le solide est une fonction **non linéaire** de la concentration de celui-ci : $c_l = g(c_s)$.

Je tenterai grâce à ce modèle, et sous des hypothèses physiques simples, d'expliquer les distributions de compositions chimiques dans une chambre magmatique, et montrer que les produits de la cristallisation peuvent présenter une distribution des concentrations *non homogène*, à partir d'une situation initiale d'un liquide homogène.

N'étant pas issu d'une formation de géologue, j'ai effectué un grand travail de découverte et de familiarisation avec les domaines géochimique et pétrologique. Dans la première partie de ce manuscrit, un résumé de l'étude bibliographique sera présentée, en particulier une description des processus naturels liés à la formation des roches magmatiques se déroulant dans les différentes

couches de la terre, notamment dans le manteau et la croûte terrestre. Je définis ensuite le cadre géologique retenu pour mon étude et les différentes hypothèses et simplifications prises pour le modèle choisi.

Dans la deuxième partie, le modèle physique ainsi que les équations mathématiques seront présentés et discutés, en l'occurrence les *équations aux dérivées partielles (EDPs)* qui modélisent les phénomènes de solidification/transport/réaction dans une chambre magmatique fermée. Pour ce faire, je distinguerai deux sous-modèles, celui de solidification/sédimentation et celui de transport/réaction. Pour compléter ce dernier, je rechercherai une fonction de partage à l'équilibre entre solide et liquide à l'équilibre thermodynamique, me basant sur des raisonnements thermochimiques et sur des modèles de solutions idéales dans le solide et dans le liquide pour l'exemple de l'olivine. La fonction de partage $c_l = g(c_s)$ est appelée "*isotherme magmatique*" par analogie avec les solutions aqueuses pour des problème d'hydrogéochemie.

Ceci étant fait, je couple les deux sous-modèles et j'adimensionne les équations obtenues.

Ensuite, dans la partie III, j'expose les méthodes numériques de discrétisation des EDPs établies dans la partie II, en particulier les différents schémas de type volumes finis que j'ai testés et comparés. J'expose également les travaux effectués pour la validation des modèles établis, soit par des méthodes analytiques tels que la méthode des caractéristiques, souvent utilisée pour les problèmes d'EDPs hyperboliques, soit par des calculs simples de conservation, par comparaison à d'autres programmes simplifiés pour certains cas particuliers, ou par comparaison à des considérations purement qualitatives.

En dernière partie (IV), j'expose les différents résultats de simulation sous la forme d'expériences numériques (chapitre 11), en faisant varier les différents paramètres de mon problème, à savoir les conditions initiales (proportion de solide et concentrations dans le liquide et dans le solide : c_l et c_s), les deux constantes d'adimensionnement exprimant le rapport de force entre les vitesses des trois phénomènes de solidification, de sédimentation et de réaction chimique, les fonctions sources qui sont la vitesse de solidification $q_s(x)$ et la fonction isotherme $c_l = g(c_s)$. Je montrerai que les résultats dépendent de façon importante des conditions initiales, des deux nombres adimensionnels et de la forme de la courbe isotherme.

En conclusion, je dégage les grands apports de ce nouveau modèle avant de présenter quelques pistes d'application à des systèmes géologiques, en particulier pour tenter de comprendre les bimodalités observées à grande échelle, dans les séries continentales ou océaniques, ou les discontinuités de compositions diverses observées dans les chambres plus petites. Je discuterai enfin des limitations de mon modèle et suggérerai des perspectives de son amélioration afin de fournir un outil numérique supplémentaire susceptible de servir de germe à des développements plus complets, permettant de s'approcher le plus possible de la réalité complexe des processus naturels en milieu magmatique.

Première partie

Etude bibliographique et contexte géochimique général de l'étude



Chapitre 1

De la chambre magmatique aux roches magmatiques

Ce travail est orienté vers une modélisation des circulations de magmas de la croûte terrestre ou du manteau dans les chambres ou conduits magmatiques, conduisant à la formation des *roches dites magmatiques*.

Ce premier chapitre présente les différents phénomènes à l'origine de la formation de ces roches, en partant du magma primaire se formant par *fusion partielle* du manteau, son ascension et accumulation sous forme de réservoirs appelés *chambres magmatiques*, jusqu'à la formation, à partir de ce magma accumulé et sous l'effet des gradients de pression et de température, de roches magmatiques par *cristallisation fractionnée*. Nous allons voir que ces roches, issues d'un magma de composition uniforme, ont des natures et compositions variées selon les conditions spatio-temporelles dans lesquelles elles se sont formées.



FIGURE 1.1 – Lac de lave du volcan Erta Ale, Ethiopie. — [Jacques-Marie Bardintzeff - <http://www.lave-volcans.com>].

CHAPITRE 1. DE LA CHAMBRE MAGMATIQUE AUX ROCHES MAGMATIQUES

Sur la figure 1.1, nous pouvons observer un *lac de lave* formé sur le volcan Erta (Ethiopie). Les magmas issus des chambres magmatiques arrivent en surface et donnent lieu, après leur refroidissement, à des roches magmatiques dites *volcaniques*. Nous voyons plus en détail la classification des roches magmatiques dans la suite de ce chapitre.

1.1 Les roches magmatiques

1.1.1 Origine

Les roches magmatiques (ou *ignées*) résultent de la cristallisation plus ou moins rapide de magmas. On appelle *magma* un bain silicaté de haute température constitué d'un mélange de roche en fusion contenant des cristaux, des liquides et des gaz. Ces magmas proviennent de réservoirs plus ou moins profonds (de 2 à 70 km de profondeur) et leur température varie entre 650 et 1200 °C (Dars [1992]). Au cours de leur refroidissement et de leur décompression, ces magmas peuvent subir une différenciation. Une présentation des réservoirs magmatiques et des phénomènes de différenciation sera abordée dans les sections 1.2 et 1.3.

Formant l'essentiel des croûtes continentales et océaniques, les roches magmatiques sont endogènes, c'est-à-dire qu'elles sont formées au moins en partie à l'intérieur du globe, à des températures et pressions supérieures à celles régnant en surface. Trois principaux sites géotectoniques favorisent le magmatisme (fusion d'une roche mère, cristallisation du liquide et déplacement des magmas dans la lithosphère) : les dorsales océaniques, les zones de subduction, qui sont des marges actives entre continents et océans, et les points chauds caractérisant aussi bien le contexte océanique que continental (cf. figure 1.2).

Les roches magmatiques représentent l'une des trois grandes catégories de roches. Les deux autres catégories sont les roches sédimentaires et les roches métamorphiques : contrairement aux roches magmatiques, celles-ci résultent de la dégradation, de l'altération ou de la précipitation de solutions aqueuses saturées pour les roches sédimentaires et de transformations à l'état solide de roches préexistantes sous l'action de la modification des paramètres physico-chimiques pour les roches métamorphiques (Dars [1992]).

1.1.2 Classification

Les roches magmatiques sont représentées fondamentalement par les *granites* d'une part (roches intrusives issues de magmas différenciés riches en silice et caractéristiques d'un environnement lithosphérique préférentiellement continental), les *basaltes* de l'autre (roches extrusives issues de magmas primaires et caractéristiques du manteau), auxquelles s'ajoutent des roches très variées mais moins fréquentes.

1.1. LES ROCHES MAGMATIQUES

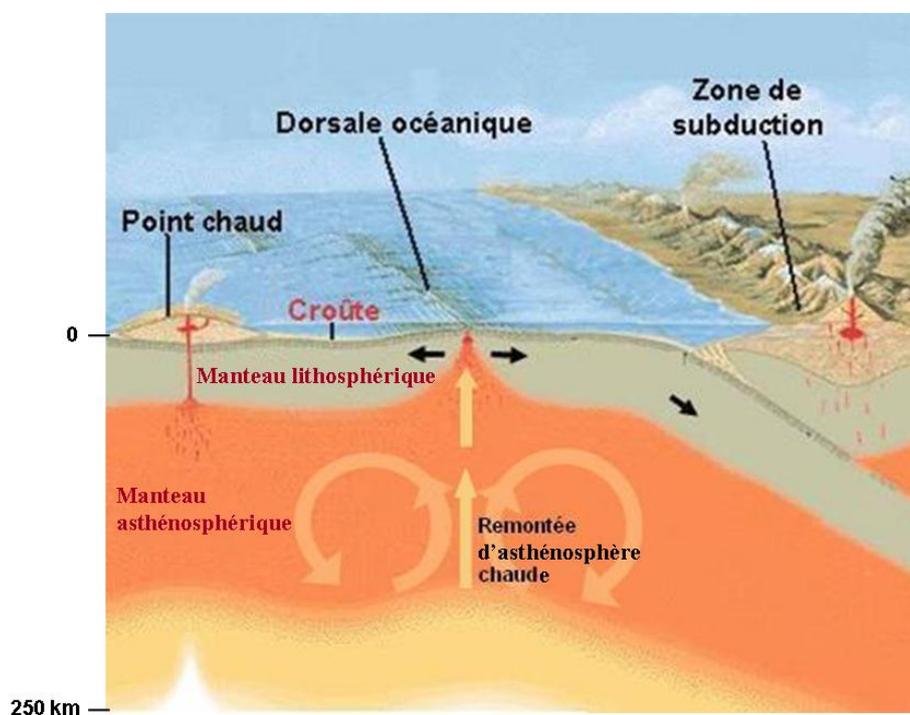


FIGURE 1.2 – Les trois principaux sites géotectoniques favorisant le magmatisme — Des courants de convection font remonter le manteau plus chaud et partiellement fondu vers la surface de la Terre. Image à partir de [<http://www.journaldunet.com/science>], modifiée.

La classification des roches magmatiques peut se faire suivant trois critères (Dars [1992] ; Jobert [1996]) :

1. Suivant leur mode de mise en place :

- Roches *plutoniques* (ou intrusives) : elles se forment à partir de magmas refroidissant lentement et cristallisant en profondeur (2 à 50 km), elles ont de ce fait une structure grenue ou microgrenue. Les plus abondantes des roches plutoniques appartiennent à la famille des granites.
- Roches *subvolcaniques* : la cristallisation a lieu à faible profondeur dans des dykes ou des sills, véritables conduits de magmas reliant les chambres magmatiques à la surface.
- Roches *volcaniques* (ou extrusives) : proviennent d'éruptions en surface, les magmas arrivés en surface refroidissent très rapidement et donnent des roches de structure microlitique voire vitreuse telles que les basaltes.

2. Suivant les minéraux qu'elles contiennent :

- Roches *felsiques* riches en minéraux blancs (feldspaths et quartz).
- Roches *mafiques* riches en minéraux sombres ferromagnésiens (magnésium et fer).
- Roches *ultramafiques* ne contenant presque exclusivement des minéraux sombres ferroma-

gnésiens (olivine, pyroxène, amphibole) (cf. section 1.3.1).

3. Suivant la composition chimique :

Une roche est considérée comme acide ou basique en fonction de la quantité de silice qu'elle contient :

- Roches *acides* riches en silice : plus de 65% de SiO_2 (ex. : granite ou rhyolite).
- Roches *intermédiaires* moins riches en silice : 52 à 65% de SiO_2 (ex. : diorite ou andésite).
- Roches *basiques* : de 45 à 52% de SiO_2 (ex. : gabbros ou basalte).
- Roches *ultrabasiques* avec moins de 45% de SiO_2 (ex. : péridotite ou picrite).

Remarque :

L'oxygène et le silicium sont les éléments les plus abondants de la croûte et du manteau. Ils s'associent pour former des silicates structurés sous forme de tétraèdres SiO_4 , puis à partir de l'association de plusieurs tétraèdres, se forment des assemblages plus ou moins complexes constituant les charpentes des différents minéraux silicatés (contenant de la silice). L'écorce terrestre, qui constitue notre principale source d'information directe des roches terrestres, est formée à plus de 90% de minéraux silicatés.

Une présentation plus détaillée des assemblages minéralogiques et des types de roches magmatiques est apportée dans la section 1.3.1. Dans la section qui suit, nous décrivons ces réservoirs appelés chambres magmatiques, ainsi que l'origine des magmas qui les emplissent.

1.2 Les chambres magmatiques

1.2.1 Description

Lors des éruptions volcaniques, des magmas sont émis à la surface de la Terre en grandes quantités et parfois en un temps très court. Les géologues expliquent ce phénomène par l'existence d'une zone d'accumulation de magma appelée chambre magmatique et se situant sous la surface du volcan (cf. figure 1.3).

D'après des études sismiques, les chambres magmatiques se situent entre 10 et 70 kilomètres de profondeur. Les deux lieux privilégiés pour la formation de ces chambres magmatiques sont la base de la lithosphère (-70 km) et la base de la croûte terrestre qui sépare la croûte du manteau, sous le Moho (-30 à -40 km). Il s'agit en fait des interfaces où la percolation vers le haut est freinée et où le liquide s'accumule (à cause de l'absence de fractures qui le remonteraient à la surface, à une baisse de production de magma ou à une différence de densité trop faible entre le magma et les roches qui le surmontent).

1.2. LES CHAMBRES MAGMATIQUES

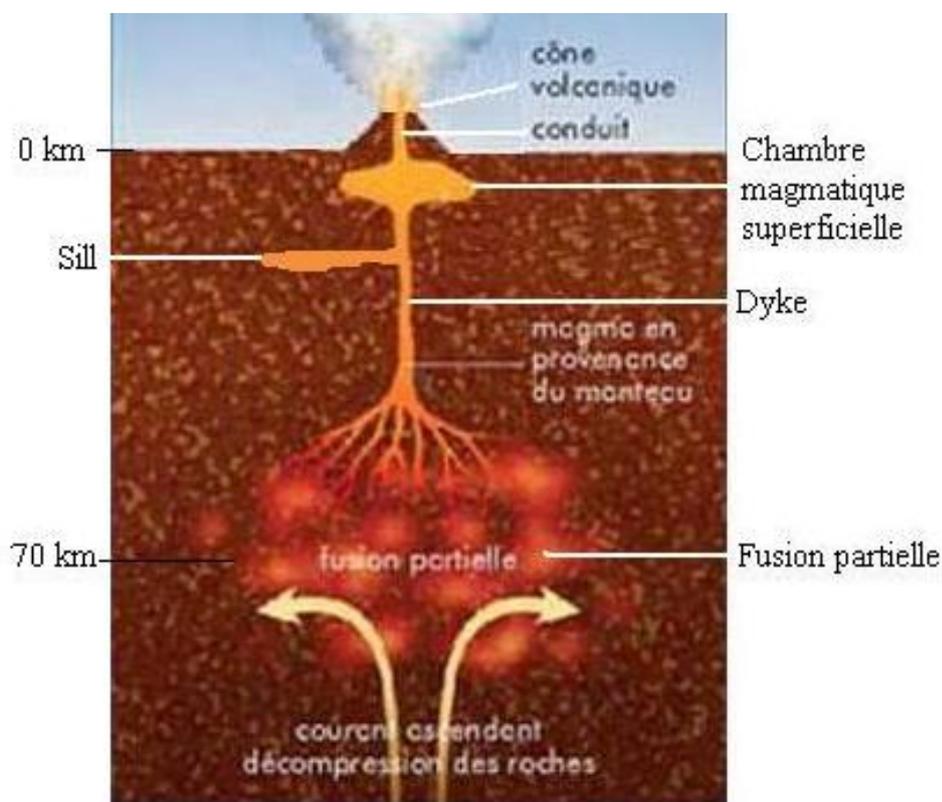


FIGURE 1.3 – Coupe schématique d'un édifice volcanique montrant la chambre magmatique — [Claude Jaupart, IPGP - http://www.ipgp.jussieu.fr/pictures_lib/166.jpg], image modifiée.

Les conditions de température dans les chambres magmatiques sont d'environ 800°C à 1300°C (Bardintzeff [1986]), et les pressions peuvent varier selon la profondeur de la chambre, environ 2.7 kbar pour une profondeur de 10 km et 22 kbar pour une profondeur de 70 km (Caron et al. [1989]).

La hauteur moyenne des chambres formées dans la croûte n'excèdent pas 1 à 3 km Wager and Brown [1968]. Dans la nature l'une des plus grandes chambres magmatiques basaltiques connues correspond à l'intrusion stratifiée de Bushveld en Afrique du Sud, dont la hauteur totale dépasse 9000 m Gruenewaldt et al. [1985]. Mais cette hauteur finale de la chambre correspond à des injections magmatiques successives et ne peut donc pas correspondre à un réservoir terrestre d'une telle dimension.

Une chambre magmatique peut être représentée sous forme d'une énorme éponge rocheuse dont les pores sont remplies de magma, elle est reliée à la surface par un conduit volcanique (ou cheminée) en général très étroit. Mais ce magma présent dans la chambre magmatique peut aussi monter pour remplir un réservoir secondaire plus petit et peu profond (≈ 2 km, cf. figure 1.3) avant son éruption.

Mais d'où proviennent ces liquides magmatiques ?

1.2.2 Origine des magmas

Les magmas qui se rassemblent et s'accumulent pour former ces chambres magmatiques résultent de la fusion partielle directe du manteau supérieur (cf. figure 1.3), à une profondeur comprise entre 70 et 250 km (zone LVZ, *low velocity zone*) (Bonin [1995]). Cette fusion se produirait à des températures allant de 1100°C à 1800°C et à des pressions variant entre 25 et 30 kbar (Juteau and Maury [1997]; Caron et al. [1989]). Le manteau étant constitué principalement de **péridotite**, ces magmas ont ainsi le plus souvent une **composition basaltique**.

Le taux de fusion de la roche constituant le manteau supérieur, appelée *pyrolite*, peut atteindre localement 30% au niveau de la LVZ, il varie donc pour prendre des valeurs intermédiaires entre 0 et 30% (Bardintzeff [1986]).

Cette fusion est partielle. Au cours de celle-ci, les premiers constituants du magma sont les constituants les plus fusibles comme les alcalins (sodium Na et potassium K), puis le magma s'enrichit, lorsque la température s'élève, en constituants plus réfractaires (constituants qui fondent à haute température) comme le fer et le magnésium (Fe et Mg).

Les magmas primaires chauds, donc peu denses, quittent leur zone de genèse et migrent en direction de la surface où ils rencontrent des roches moins denses, ils se concentrent donc pour former les chambres ou réservoirs magmatiques.

Le magma présent dans une chambre magmatique peut y séjourner pendant une très longue durée (plusieurs centaines de milliers d'années selon les géologues) et y subir d'importantes transformations physico-chimiques. Ces transformations sont dues aux gradients de pression et de température qui peuvent induire des courants de convection et des interactions magma - roches compliquant ainsi les lois physiques de la cristallisation régies par les diagrammes de phases simples.

1.3 Evolution d'une chambre magmatique : Différenciation des magmas

1.3.1 Cristallisation fractionnée

a) Description du phénomène

Il s'agit du processus inverse de la fusion partielle. Un magma n'est pas un corps pur comme l'or ou le fer, mais un mélange de plusieurs composants chimiques. Au cours du refroidissement de la chambre magmatique, des minéraux commencent à cristalliser dès que la température devient inférieure à une température spécifique, le *liquidus*, et finissent leur croissance à la température du *solidus*. Tous les minéraux ne cristallisent donc pas en même temps mais apparaissent dans un ordre déterminé par la composition du magma initial et pas les conditions physico-chimiques de la cristallisation (Bardintzeff [1986]; Jaeger [1957]). Les cristaux qui se forment ont des compositions souvent plus simples et différentes du magma. Par conséquent, le magma résiduel aura une composition différente du magma originel.

En effet, au fur et à mesure que le magma se solidifie, le liquide résiduel s'enrichit en éléments n'entrant pas dans la structure des cristaux, les éléments incompatibles (ou magmatophiles), comme le sodium, le potassium et silicium (Na, K et Si) et s'appauvrit en éléments inclus préférentielle-

1.3. EVOLUTION D'UNE CHAMBRE MAGMATIQUE : DIFFÉRENCIATION DES MAGMAS

ment dans le solide, les éléments compatibles, par exemple le magnésium, le chrome ou le cobalt (Bonin [1995]), on dit alors que le magma est différencié, la *différenciation* se définissant comme tout processus permettant à un magma de tendre vers un autre liquide plus évolué (plus riche en éléments magmatophiles).

Lorsque les cristaux se séparent du liquide avant cristallisation complète, on dit que le magma subit une *cristallisation fractionnée* ; on appelle *fractionnement* le phénomène de séparation des phases solides et liquides entraînant des séparations d'ordre chimique.

Remarque :

La cristallisation *fractionnée* peut être parfaite, si le liquide résiduel est complètement séparé des cristaux qui fractionnent. Elle peut être *partielle*, si le liquide résiduel reste en partie piégé entre les cristaux (Bonin [1995]). La cristallisation à *l'équilibre* suppose au contraire qu'il n'y aura aucune séparation et que le solide obtenu aura exactement la même composition chimique que le magma primaire.

b) Ordre de cristallisation des minéraux

La cristallisation des silicates dans un magma ne se fait pas en un seul temps, l'ordre de cristallisation est déterminé par les conditions de pression et de température qui règnent dans la chambre.

En supposant la chambre comme un *système fermé*, c'est-à-dire en l'absence d'échange de matière venant de l'encaissant de la chambre, l'ordre de cristallisation d'un magma basaltique est défini selon une *suite réactionnelle* schématisée par Bowen (Bowen [1922] ; Bowen [1928]), (cf. figure 1.4).

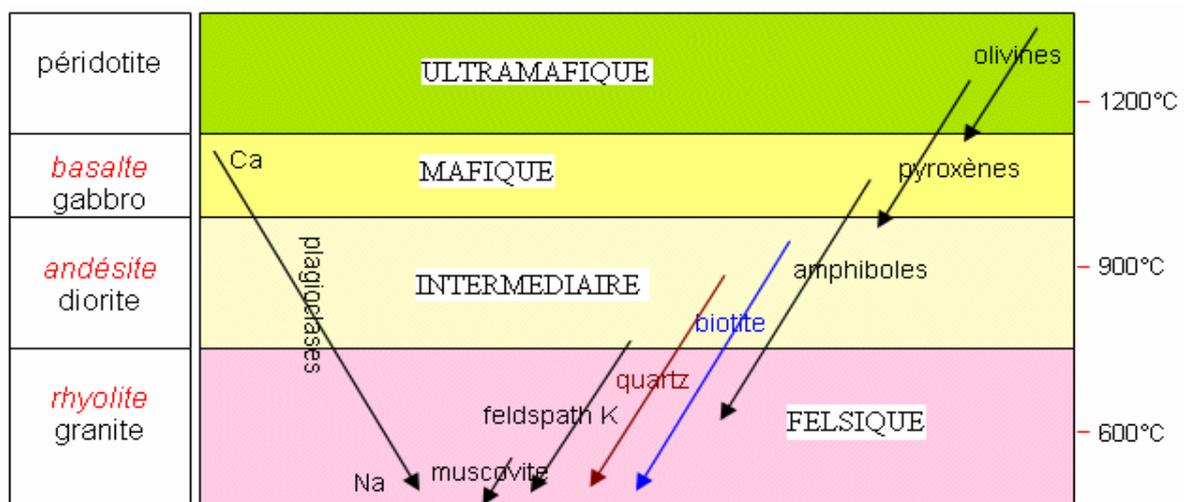


FIGURE 1.4 – Suite réactionnelle de Bowen. — Au milieu, les minéraux cristallisant au fur et à mesure de la baisse de température, 4 principaux assemblages minéralogiques en découlent. A droite, les températures correspondantes, à gauche, les noms des roches ignées correspondant à l'assemblage minéralogique et au mode de mise en place. [http://svt.ac-dijon.fr/schemassvt/article.php?id_article=1368].

CHAPITRE 1. DE LA CHAMBRE MAGMATIQUE AUX ROCHES MAGMATIQUES

Les premiers minéraux à cristalliser seront évidemment les minéraux de haute température, *olivine* d'abord pour les magmas riches en magnésium, et feldspath plagioclase calcique pour des magmas plus alumineux, *pyroxènes* et *amphiboles* ensuite. Si ce magma est introduit dans une chambre secondaire et qu'il poursuit son refroidissement, les premiers minéraux à cristalliser seront les amphiboles, les *biotites*, le *quartz* et certains *feldspaths plagioclases sodiques* (Jaeger [1957]; Cox et al. [1979]; Bardintzeff [1986]; Caron et al. [1989]; Bonin [1995]).

Cet ordre de cristallisation produit ainsi des assemblages minéralogiques différents : *ultramafiques*, *mafiques*, *intermédiaires* et *felsiques*. Ces quatre assemblages définissent quatre grands types de roches ignées qu'il est possible de rencontrer de bas en haut dans les très grands réservoirs magmatiques que constituent les intrusions stratifiées telles Bushveld en Afrique du sud ou Skaergaard au Groenland.

c) Les noms des roches magmatiques

L'assemblage *ultramafique* donne lieu à une roche particulière, composée presque exclusivement d'olivine, avec un peu de pyroxènes, une roche très peu abondante à la surface même de la terre, la *péridotite*. Cette dernière constitue principalement le manteau.

L'assemblage *mafique* donne des *basaltes* ou des *gabbros*, des roches qui sont riches en pyroxènes et en feldspaths plagioclases calciques, avec parfois une petite quantité d'olivine ou d'amphiboles.

L'assemblage *intermédiaire* constitue les *andésites* et les *diorites*. Ce sont des roches composées d'amphiboles et de feldspaths plagioclases dont le contenu en calcium et sodium est intermédiaire entre les deux pôles, avec possiblement un peu de quartz et de biotite.

Enfin, l'assemblage *felsique* fournit des *rhyolites* et des *granites* dont la composition principale est le quartz, le feldspath potassique et le feldspath sodique, avec un peu de micas comme la biotite et la muscovite.

La figure 1.5 présente de façon un peu plus précise que la figure 1.4 la composition des roches magmatiques.

La différence entre basalte et gabbro, andésite et diorite, rhyolite et granite, ne se situe pas au niveau de la composition qui est la même pour chacune des paires, mais au niveau de la taille des cristaux : un même magma peut donner des cristaux de tailles différentes selon la profondeur à laquelle il s'est solidifié (cf. section 1.1.2) et il peut être holocristallin (100% cristallin) ou hémicristallin (partie cristalline associée à une partie vitreuse).

1.3. EVOLUTION D'UNE CHAMBRE MAGMATIQUE : DIFFÉRENCIATION DES MAGMAS

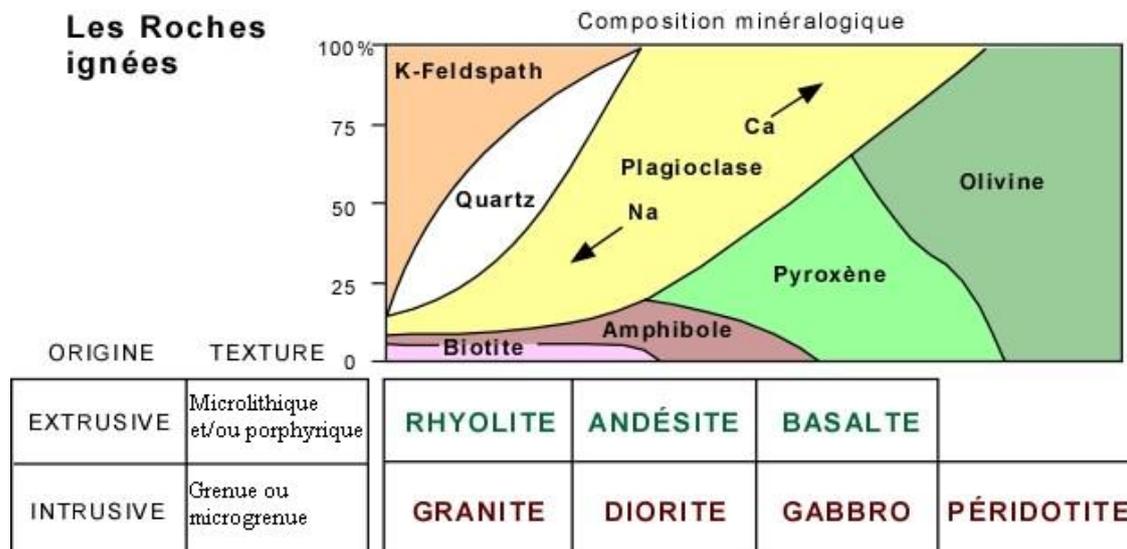


FIGURE 1.5 – Composition des roches ignées et des assemblages minéralogiques. — De droite à gauche, assemblages ultramafique, mafique, intermédiaire et felsique et la composition minéralogique correspondante. Par exemple, l'assemblage ultramafique qui correspond à la péridotite est composé presque uniquement d'olivine. [<http://www.ggl.ulaval.ca/personnel/bourque/s2/r.ign.html>].

1.3.2 Séparation des phases cristallines

Les mécanismes de séparation des cristaux et du liquide sont dépendants de la viscosité du magma et des densités des phases. Le comportement du magma silicaté varie en fonction du degré de solidification (Bonin [1995]) :

- Entre 0 et 30% de cristaux, le magma a un comportement *newtonien* (fluide *plastique* ou *visco-élastique*, peu compressible et dont la viscosité ne varie pas sauf si la température varie ; le magma relativement pauvre en cristaux peut s'écouler librement quelle que soit la contrainte de cisaillement). A l'intérieur de celui-ci, les phénomènes gravitaires comme la sédimentation de cristaux selon la *loi de Stokes* peuvent se produire.
- Entre 30 et 70% de cristaux, le magma a un comportement de *Bingham*, les cristaux restent en suspension à moins d'atteindre une taille telle que la pression exercée par ceux-ci dépasse la résistance du liquide.
- **Au dessus de 70%** de cristaux, le magma se comporte comme un solide et présente une forte viscosité, variable en fonction de la contrainte de cisaillement, on dit qu'il a un comportement *magmato-rigide* ou *submagmatique* et **le liquide résiduel ne peut pas s'extraire facilement**.

Il en résulte que le processus de fusion partielle nécessite un taux minimal pour que le liquide produit puisse se déplacer, et que le processus de cristallisation fractionnée ne peut s'effectuer que dans des magmas encore relativement pauvres en cristaux.

Selon Bonin [1995], la séparation des cristaux peut se produire de différentes façons (séparation solide/liquide) :

CHAPITRE 1. DE LA CHAMBRE MAGMATIQUE AUX ROCHES MAGMATIQUES

- Filtre-presse : processus analogue à une éponge gorgée d'eau que l'on presse. La compaction des cristaux chasse le liquide interstitiel qui se propage par des fractures ouvertes vers des zones de pression inférieure.
- Cristallisation aux parois : dans une chambre magmatique, il existe un fort gradient de température entre le cœur constamment réhomogénéisé par convection et les bords où s'effectue l'essentiel de la dissipation de la chaleur (couche limite thermique), ce qui produit une forte nucléation cristalline sur les parois et au toit de la chambre.
- **Sédimentation gravitaire** : il s'agit d'un processus qui aboutit à une zonation de la chambre magmatique. Une chambre magmatique est d'abord remplie d'un magma originel, puis opère le phénomène de cristallisation fractionnée. La densité des minéraux qui cristallisent est en général différente de celle du magma qui est d'environ 2,7. Les minéraux les plus lourds ont une densité de 2,8 à 3 et tombent au fond de la chambre magmatique. Ainsi les minéraux ferromagnésiens, tels les olivines, les pyroxènes et les amphiboles ou les feldspaths plagioclases calciques (premiers minéraux à cristalliser (cf 1.3.1)) s'accumulent dans la partie inférieure de la chambre (Wager and Brown [1968]). Ces minéraux, pourront être parfois ultérieurement retrouvés agglomérés en masses cristallines appelées cumulats dans les laves et éjecta volcaniques. Les minéraux blancs, tels les feldspaths et plagioclases, moins denses, se rassemblent plus tardivement par flottation dans la partie supérieure de la chambre.

La zonation des chambres magmatiques se fait également par séparation liquide/liquide, dans le cas où il existe des liquides immiscibles. En effet, les minéraux qui cristallisent le font aux dépens d'un magma qui change sans cesse de composition, les liquides emplissant la chambre magmatique en cours de cristallisation ont, par conséquent, eux aussi des densités différentes. Les liquides pourront donc se ségréger en plusieurs fractions sous l'effet de la gravité et aussi des différences de température. Les liquides les plus lourds migrent vers le fond, les plus légers vers le sommet. Il peut en résulter une *stratification magmatique* : des couches de magma se superposent par densités décroissantes de la base vers le sommet (Bardintzeff [1986]; Bonin [1995]).

Remarque :

Le zonage peut se présenter aussi à l'intérieur d'un même cristal. Par exemple, le cœur des olivines contient proportionnellement plus de magnésium que leur périphérie, cette dernière incorporant du fer à la place. De même le calcium se retrouvera préférentiellement au cœur d'un plagioclase, le sodium au bord et il peut exister également des zonages inverses témoignant d'une cristallisation en déséquilibre dans un système ouvert.

1.3.3 Assimilation et contamination

Dans la nature, des échanges de matière peuvent exister avec les roches encaissant les magmas et conduisent à la formation de magmas contaminés. La chambre magmatique peut être donc considérée comme un système ouvert réagissant avec l'extérieur. Certaines enclaves montrent des phénomènes d'assimilation par transformation minéralogique et chimique, les liquides qui les contiennent subissent le processus de contamination (Cox et al. [1979]).

L'assimilation - contamination correspond à une réponse au gradient chimique parfois important

1.4. REMARQUES SUR QUELQUES MODÈLES ET CODES DE CALCUL EXISTANTS

existant entre le magma plus chaud et son encaissant cristallisé plus froid et tend à l'homogénéisation des compositions (Cox et al. [1979] ; Bonin [1995]). Le magma peut ainsi incorporer une partie de la roche encaissante ou des fluides provenant de l'encaissant (H₂O, CO₂, F, Cl). Cette incorporation se fait par fusion, lorsque par exemple une partie du toit du réservoir s'effondre. Si la quantité de roche ainsi assimilée est importante par rapport à la quantité de magma présent, la composition chimique de ce dernier peut être modifiée.

1.4 Remarques sur quelques modèles et codes de calcul existants

Nous présentons dans cette section, quelques logiciels existant aujourd'hui pour modéliser les interactions chimiques minéraux-liquides magmatiques ou pour le calcul des diagrammes de phase pour des systèmes à deux ou plus de constituants.

1.4.1 Logiciel MELTS ou pMELTS

MELTS est un logiciel basé sur les travaux de Ghiorso and Sack [1995] et Asimow and Ghiorso [1998], il permet de modéliser l'équilibre thermodynamique entre des phases solide et liquide dans des systèmes magmatiques naturels. Par exemple, connaissant la composition d'une roche, on peut calculer la composition du liquide qui a été en équilibre avec celle-ci. L'état d'équilibre est défini par exemple par un $\Delta G = 0$ où G est l'énergie libre de Gibbs.

Dans le modèle de Ghiorso, l'écriture des potentiels chimiques μ fait intervenir des termes d'interaction entre les constituants chimiques $W_{i,j}$, i et j pour deux constituants différents (cf. section 5.1.3). La calibration de ce modèle est faite à l'aide d'une multitude d'expériences faisant coexister, à des températures et pressions données, des liquides silicatés avec des minéraux mafiques.

Plus tard, MELTS a donné lieu à pMELTS qui est lui basé sur les travaux de Ghiorso et al. [2002] lors desquels les expériences ont été menées à des hautes pressions et étendues à une plus large gamme de minéraux.

1.4.2 Méthode CALPHAD

La méthode CALPHAD (*CAL*culat*ion of PH*ase *D*igrams) a été initiée dans les années 70, c'est une méthode de calcul de diagrammes de phases et d'état d'équilibre. Aujourd'hui, plusieurs produits en ont découlé dans le marché, par exemple FactSage, MTDATA, PANDAT et ThermoCalc. Ces logiciels sont utilisés aussi bien dans la recherche académique que dans le développement industriel, notamment en géochimie, métallurgie et céramique.

La force de la méthode CALPHAD c'est de pouvoir combiner les diagrammes de phase déterminés expérimentalement pour des systèmes binaires (exemple Co-Cr, Fe-C, Fe-Co, Fe-Cr, Fe-Mn, Fe-Mo, etc) ou ternaires (par exemple Fe-Cr-C, W-Co-C, W-Fe-C, W-Ni-C, etc) pour décrire des systèmes à plusieurs constituants pour lesquels les diagrammes de phase sont rarement déterminés expérimentalement, notamment lorsqu'il y a une phase liquide (magma) en équilibre avec des solides cristallisés (modèle de cristallisation fractionnée) ou résiduels (modèle de fusion partielle).

1.4.3 Programme TWEEQU

TWEEQU (*Thermobarometry With Estimation of Equilibration State*) est un programme interactif d'exécution du calcul de l'état d'équilibre entre minéraux et fluides. Il a été mis au point et géré par Rob Berman de la Commission géologique du Canada (cf. par exemple Berman et al. [1995] et Berman [2007]). Bien qu'il permette le calcul d'un grand nombre de types de diagrammes

d'équilibre de phases, sa principale application est la géothermobarométrie d'après des données thermodynamiques.

Remarque :

Parmi les modèles que nous venons de décrire, MELTS est celui qui est le plus utilisé en géochimie pour calculer les états d'équilibre dans les systèmes magmatiques naturels. Cependant, tous ces modèles n'intègrent pas de variable d'espace.

Pour étudier les phénomènes de transport avec réaction dans les roches poreuses, en incluant une variable d'espace, [Boudreau \[2003\]](#) a développé le programme IRIDIUM qui utilise le logiciel MELTS pour le calcul des équilibres liquide-minéral :

1.4.4 Programme IRIDIUM

Le programme IRIDIUM présente une modélisation 1D en espace des phénomènes d'infiltration-réaction de liquides silicatés dans les roches poreuses. Ce programme permet de calculer la précipitation/dissolution et les fronts de compositions chimiques qui se propagent dans la roche, appelés *fronts chromatographiques*. Il incorpore aussi bien des équations de transport que des équations de bilan thermique. Les équilibres chimiques liquide-minéral sont basés sur la minimisation de l'énergie libre de Gibbs effectuée par le logiciel MELTS de [Ghiorso and Sack \[1995\]](#). Le système considéré par [Boudreau \[2003\]](#) est un système ouvert.

A notre tour, dans le présent travail, nous proposons un modèle mathématique faisant intervenir une variable d'espace et modélisant les phénomènes de transport-réaction entre solides et liquides dans les chambres magmatiques, couplés aux phénomènes de solidification/sédimentation. Nous considérons que ces différents processus ne se passent pas forcément à l'état d'équilibre chimique, mais un écart à l'équilibre peut intervenir tout au long de l'évolution de la chambre magmatique.

Nous présentons dans le chapitre qui suit, le cadre géologique et les hypothèses simplificatrices considérés et définissons le modèle physico-chimique choisi pour notre étude.

Chapitre 2

Cadre et simplifications retenues pour le modèle

2.1 Cadre général

Nous nous intéressons dans notre étude à un modèle susceptible d'expliquer la variété des compositions chimiques dans les roches magmatiques. Les roches magmatiques sont supposées être passées à un moment de leur histoire par un état liquide ; ces liquides, comme nous l'avons dit dans le chapitre 1, se sont accumulés dans des chambres magmatiques avant d'atteindre la surface de la terre pour former des roches volcaniques, ou de cristalliser en profondeur dans la chambre magmatique pour former des roches plutoniques. Dans ce dernier cas, les roches ainsi formées, peuvent apparaître à la surface de la terre soit par la tectonique tangentielle de nappes de socle, soit par le double processus de surrection-érosion qui peut être lié au réajustement isostatique post-collision. Les magmas qui occupent la chambre magmatique ne sont pas composés uniquement de liquides car des phases solides et gazeuses coexistent avec le liquide. Nous ne considérerons dans notre travail que les phases liquide et solide.

2.2 Considérations physiques

Le système que nous voulons étudier est une *chambre magmatique fermée* (nous ne considérons pas d'échange de matière avec l'extérieur) dans laquelle se trouve initialement un magma entièrement liquide ou sous forme d'un mélange liquide/solide (cf. figure 2.1). Entre la chambre et les parois, règne un gradient de température variable du sommet à la base de la chambre. Le liquide magmatique *se solidifie* ainsi avec un degré de cristallisation plus élevé dans les régions les plus froides.

Le solide ainsi produit a une densité supérieure à celle du liquide, des mouvements relatifs se produisent et séparent le solide du liquide par *sédimentation des solides*.

Au cours de la sédimentation des solides, le liquide magmatique remonte (pour compenser la descente du solide dans la chambre fermée) et rencontre un solide en général en *déséquilibre chimique* avec lui, les deux phases réagissent alors suivant une loi cinétique que l'on considère régie par l'écart à l'équilibre thermodynamique.

La température dans la chambre magmatique pourra être prise entre 800 et 1300 °C, et on consi-

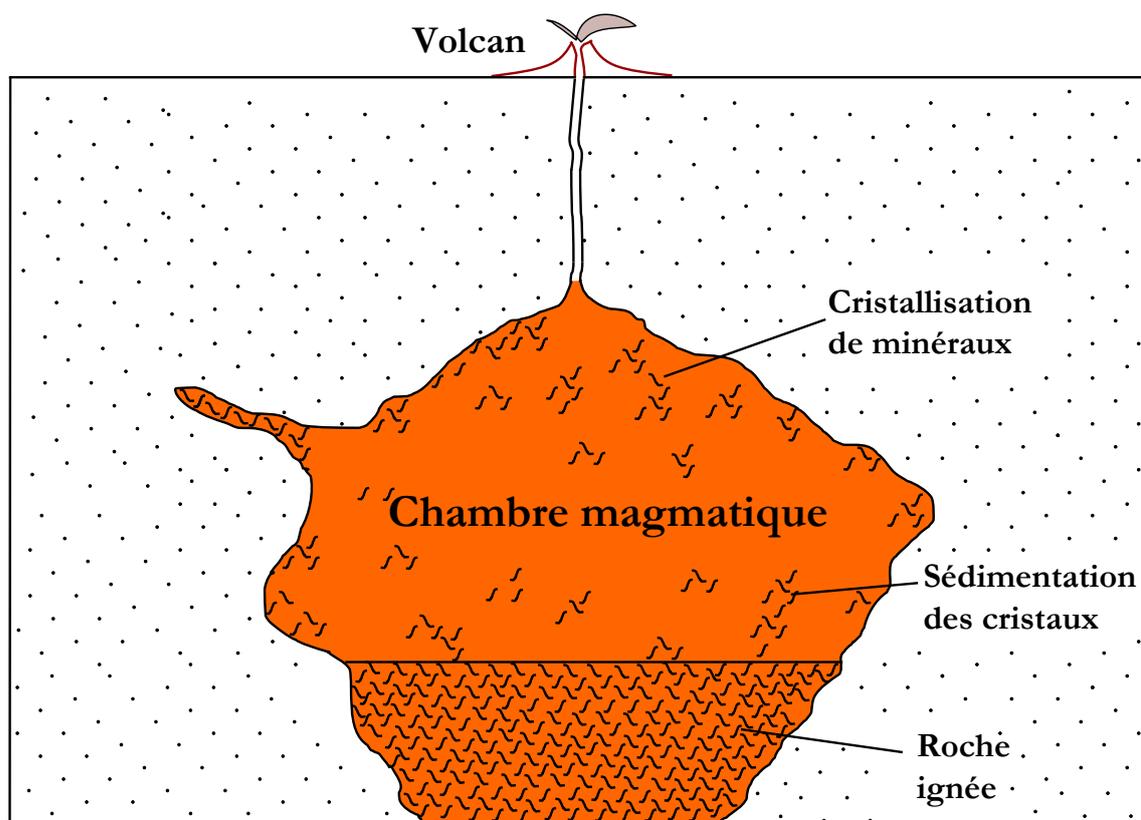


FIGURE 2.1 – Représentation d’une chambre magmatique. — Le magma est composé d’un mélange de liquide et de solide. En bas, la roche ignée formée par solidification et/ou par sédimentation des cristaux. Sur ce schéma, la chambre magmatique ne respecte pas les échelles de taille par rapport à celle du volcan.

dérera une pression comprise entre 1 et 5 kbar correspondant au domaine de stabilité des chambres magmatiques se développant dans une croûte tectoniquement peu active.

2.3 Modèle physico-chimique

La chambre magmatique est modélisée par une colonne verticale fermée, de hauteur L (cf. figure 2.2), remplie de magma dont les proportions initiales en volume de solide et en liquide peuvent être choisies. On suppose que la solidification produit des cristaux sous forme de sphères de même rayon. Une seule dimension d’espace est considérée.

Trois phénomènes sont pris en compte (cf. figure 2.2) :

- la *solidification*, due essentiellement aux gradients thermiques entre la chambre magmatique et ses parois. Sans modéliser tous les échanges de chaleur, nous allons imposer une loi définissant la *vitesse de solidification* ou vitesse de production de solide q_s comme fonction de la profondeur et éventuellement aussi du temps. On peut imaginer une solidification qui se limite au sommet de la chambre magmatique ou une solidification variable et décroissante en fonction de la profondeur par exemple.
- la *sédimentation*, due aux différences de densité entre le solide dense et le liquide plus léger. Le *solide déjà présent* initialement dans la chambre ou *produit par solidification* du magma

2.3. MODÈLE PHYSICO-CHEMIQUE

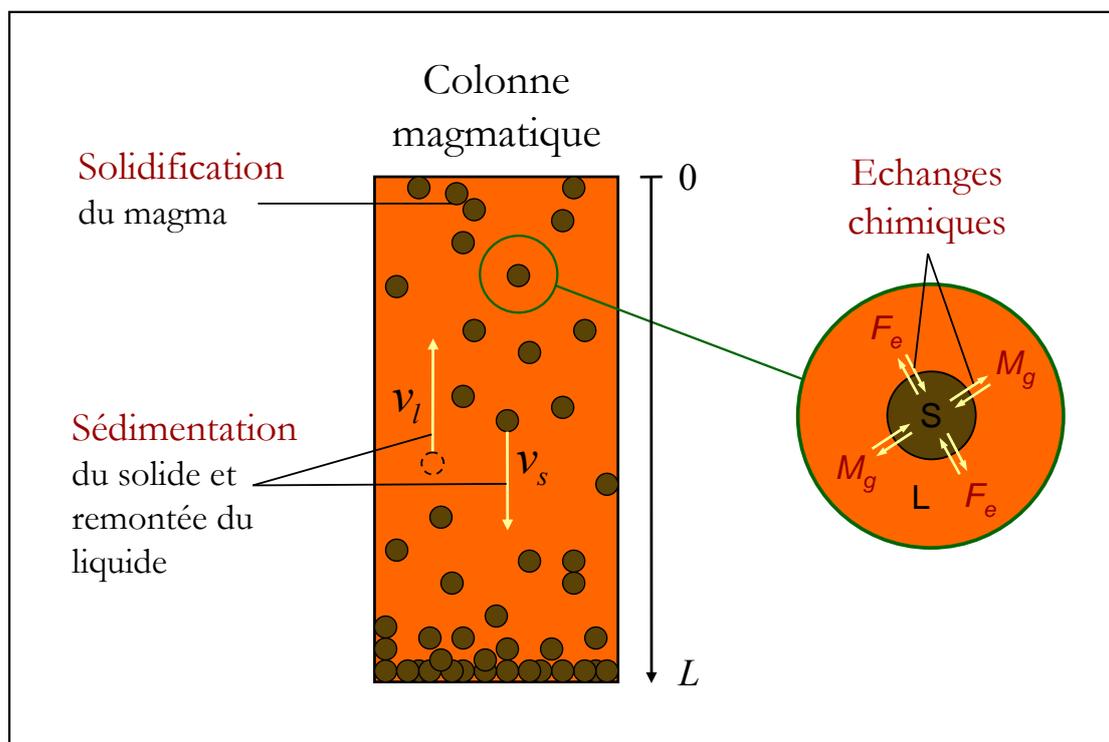


FIGURE 2.2 – Colonne magmatique modélisant une chambre magmatique fermée. — Trois phénomènes sont pris en compte : *solidification*, *sédimentation* et *échanges chimiques*. Tout au long de sa descente vers le fond, le cristal en déséquilibre chimique avec le liquide qui l’entoure, réagit avec celui-ci en s’appauvrissant ou en s’enrichissant en constituants chimiques (Fe et Mg par exemple).

se sépare du liquide et descend pour sédimenter au fond. La vitesse de descente du solide est fournie par une loi v_s , le liquide lui, remonte avec une vitesse v_l . Ces vitesses sont des fonctions de la proportion de solide présent comme nous l’avons mentionné dans la section 1.3.2.

- les *échanges chimiques* dûs aux gradients chimiques produits par la rencontre de liquides et solides en déséquilibre. Ces échanges qui tendent à rééquilibrer les deux phases sont régis par une loi d’équilibre thermodynamique entre le solide et le liquide qui, et cela est un point important, peut être non linéaire.

Ainsi, les compositions chimiques du liquide et du solide ne cessent d’évoluer à cause des variations de quantité de solide qui ont lieu sur toute la hauteur de la colonne magmatique -soit par production de solide (solidification) ou par déplacements relatifs liquide/solide- et à cause des échanges chimiques entre les deux phases solide et liquide, entraînant en fin de processus, lorsque toute la colonne sera solidifiée, à une *zonation* de la chambre magmatique.

Avec le modèle que nous proposons, nous voulons faire apparaître cette zonation (discontinuités spatiales des compositions chimiques), en partant d’un *magma initial homogène*.

Nous nous intéressons dans notre étude aux *éléments majeurs* et nous cherchons à suivre l’évolution, au cours du temps (du magma initial jusqu’à solidification totale) et sur toute la profondeur

CHAPITRE 2. CADRE ET SIMPLIFICATIONS RETENUES POUR LE MODÈLE

de la colonne, de trois inconnues :

- la proportion en volume de solide (ou compacité), notée $p_s(x, t)$; la proportion en volume de liquide (ou porosité) notée $p_l(x, t)$,
- et les concentrations des éléments chimiques dans les phases liquide et solide notées respectivement $c_l(x, t)$ et $c_s(x, t)$.

Nous considérons dans notre modèle un *magma binaire*, c'est-à-dire constitué de deux éléments chimiques seulement, et donc d'*un seul élément indépendant*.

Nous pouvons illustrer notre approche sur un système particulier, par exemple celui d'un magma basaltique issu de la fusion de péridotite, constitué de deux phases, le solide qui est l'*olivine*, de composition variable entre le pôle *forstérite* $\text{Mg}_2\text{SiO}_4(s)$ et le pôle *fayalite* $\text{Fe}_2\text{SiO}_4(s)$, et le liquide, supposé composé de leurs équivalents dans la phase liquide $\text{Mg}_2\text{SiO}_4(l)$ et $\text{Fe}_2\text{SiO}_4(l)$.

Notre étude menée sur un magma à un seul constituant indépendant, constitue un premier pas dans la simulation des distributions des concentrations dans une chambre magmatique où les trois phénomènes de base (solidification, sédimentation et réactions chimiques) sont considérés. Ce modèle pourra ensuite être enrichi en considérant des éléments chimiques supplémentaires. Les résultats que nous obtenons pour notre modèle simplifié et l'interprétation que nous en faisons pourront alors être généralisés à un magma à plusieurs constituants indépendants.

Deuxième partie

Modélisation physique et mathématique de la cristallisation avec sédimentation et transport réactif en chambre magmatique

Pour étudier la zonation d'une chambre magmatique fermée, nous avons identifié trois phénomènes moteurs, (1) la *solidification* du magma sous l'action des gradients thermiques, (2) la *sédimentation* du solide produit et la remontée du liquide moins dense, et (3) les *échanges chimiques* entre le solide et le liquide.

Afin de décrire mathématiquement ce qui se passe dans cette chambre, nous allons considérer deux systèmes d'équations aux dérivées partielles. Le premier système correspond à un bilan de masse sur un volume donné, il prend en compte le transport de matière par sédimentation du solide et montée du liquide, dans ce système nous incluons un terme de production de solide pour tenir compte de la solidification du magma.

Pour le deuxième système d'équations, nous faisons un bilan des constituants chimiques, les éléments chimiques se déplaçant grâce aux mouvements relatifs liquide/solide et s'échangeant entre le liquide et le solide à cause des déséquilibres chimiques. Nous prendrons en compte également dans ce système l'effet de la solidification du liquide magmatique.

L'écriture de ces deux systèmes se base sur le principe de conservation : conservation de la masse et de la quantité d'éléments chimiques.

Deux modèles en découlent, le modèle de cristallisation/sédimentation et le modèle de transport réactif que nous détaillons respectivement dans les chapitres 3 et 4. Ensuite, afin de faciliter la résolution numérique des équations obtenues, elles seront adimensionnées dans le chapitre 6. Nous ferons apparaître alors deux constantes adimensionnelles qui expriment les rapports de force entre trois grandeurs mesurant chacune le poids donné à l'un des trois phénomènes moteurs cités plus haut.

Chapitre 3

Modèle de cristallisation/sédimentation

Le but de ce chapitre est de modéliser la *solidification* du magma et la *sédimentation* des cristaux dans une chambre magmatique fermée. La sédimentation étant due aux différences de densité entre le liquide et le solide et la solidification est supposée due uniquement aux gradients de température entre le magma chaud présent dans la chambre et l'extérieur plus froid.

Pour simplifier le problème, la chambre magmatique est modélisée par une colonne verticale remplie de magma (cf. figure 2.2), ce magma peut être initialement totalement liquide ou partiellement cristallisé, c'est-à-dire contenant des cristaux.

Pour un volume élémentaire donné appartenant à cette colonne, nous nous intéressons à l'évolution de la proportion de solide présente dans ce volume $p_s(x, t)$ et à la porosité $p_l(x, t) = 1 - p_s(x, t)$. L'équation que nous voulons écrire ici pour décrire cette évolution est une *équation de conservation de la masse* (ou *équation de continuité*).

De nombreux travaux de modélisation des mouvements de solide dans une chambre magmatique se basent sur l'équation de continuité (Simakin et al. [1997]; Boudreau [2003]; Kuritani [2004]), sans y introduire le terme source de solidification, celui-ci étant souvent exprimé dans les équations de bilans énergétiques.

Pour notre part, nous introduirons le terme de production de solide dans l'équation de continuité, comme l'ont fait (Bonnetfoi et al. [1995]) et comme présenté dans (Lasaga [1998]), ce terme s'exprimant sous forme d'une *vitesse de solidification* dépendant de la profondeur, que l'on note $q_s(x)$. Ce qui est nouveau dans notre étude c'est que cette équation sera ensuite *couplée* aux équations de bilan des constituants chimiques (présentées en chapitre 4).

Nous allons tout d'abord présenter les démarches mathématiques qui permettent d'écrire une équation générale de conservation d'une quantité quelconque (section 3.1), puis nous l'adapterons à notre cas, à savoir la conservation de la masse (section 3.2). Ensuite nous exprimerons les lois de vitesse de sédimentation des solides et de remontée des liquides (sections 3.3 et 3.4) et les choix que nous faisons pour la vitesse de solidification. Seront présentées également les démarches suivies pour obtenir des ordres de grandeur pour les vitesses de sédimentation et de solidification.

3.1 Etablissement d'une équation de conservation

Soit Ω le domaine spatial total d'étude (pour notre cas ce sera l'ensemble de la colonne magmatique). On suppose que Ω est un milieu continu et on considère un *volume élémentaire représentatif (VER)* de Ω qu'on note \mathcal{V} , de surface extérieure $\partial\mathcal{V}$:

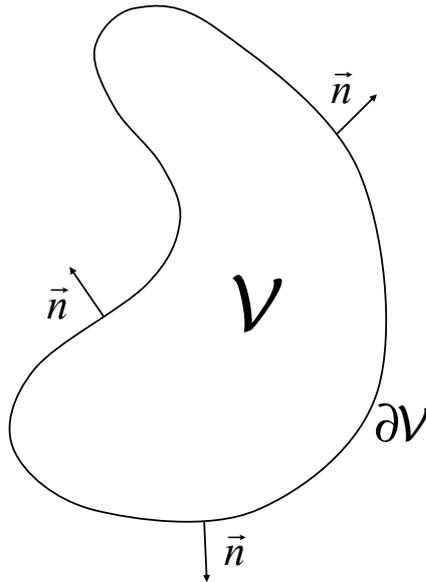


FIGURE 3.1 – Représentation d'un VER.

\vec{n} est le vecteur unitaire normal à la surface $\partial\mathcal{V}$ à un point donné de cette surface, \vec{n} est dirigé vers l'extérieur du VER \mathcal{V} .

Un VER \mathcal{V} est défini à une échelle déterminée par les propriétés suivantes (Spiegelman et al. [2001]) :

1. la quantité ρ étudiée est relativement constante à une échelle comparable au VER, c'est-à-dire la valeur moyenne de ρ définie pour le VER est une bonne approximation de ρ sur tout le VER,
2. la moyenne de ρ varie de façon continue du VER \mathcal{V} à tout autre VER qui lui est adjacent, c'est-à-dire que ρ est différentiable (i.e. $\nabla\rho$ a un sens à l'échelle du VER).

Nous voulons écrire l'équation de conservation d'une quantité quelconque ρ sur le volume \mathcal{V} . Pour faire le calcul, on prend par exemple ρ la *densité de masse* d'un fluide présent dans le volume \mathcal{V} , alors la *masse* totale de fluide présent dans \mathcal{V} est :

$$m = \int_{\mathcal{V}} \rho d\mathcal{V}$$

3.1. ETABLISSEMENT D'UNE ÉQUATION DE CONSERVATION

L'enveloppe $\partial\mathcal{V}$ du volume \mathcal{V} constitue la surface d'échange avec l'extérieur. Soit \vec{v} la vitesse de déplacement du fluide. Le *flux de matière* sortant du volume \mathcal{V} à travers la surface $\partial\mathcal{V}$ s'écrit alors $f(\rho) = \rho\vec{v}\cdot\vec{n}$ et la *masse sortant* du volume \mathcal{V} à travers $\partial\mathcal{V}$ s'écrit donc :

$$\oint_{\partial\mathcal{V}} \rho\vec{v}\cdot\vec{n} \, d\mathcal{S}$$

En présence d'un *terme source* de production de matière à l'intérieur de \mathcal{V} qu'on note $H(\rho)$ (terme homogène à ρ et intervenant sur tout le volume \mathcal{V}), nous écrivons la quantité de solide produite :

$$\int_{\mathcal{V}} H(\rho) \, d\mathcal{V}$$

La *loi de conservation de la masse* repose sur le fait que la variation de la masse contenue à l'intérieur du volume \mathcal{V} est égale à (-) la masse sortant du volume \mathcal{V} (+) ce qu'apporte le terme source (Spiegelman [2000]) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho \, d\mathcal{V} = - \oint_{\partial\mathcal{V}} \rho\vec{v}\cdot\vec{n} \, d\mathcal{S} + \int_{\mathcal{V}} H(\rho) \, d\mathcal{V} \quad (3.1)$$

Remarque : En présence de diffusion, on ajouterait le terme de diffusion $\oint_{\partial\mathcal{V}} K\cdot\vec{\nabla}\rho \, d\mathcal{S}$, avec K le tenseur de diffusion.

Si on suppose que ρ , \vec{v} et \mathcal{V} sont réguliers, on remplace l'intégrale sur la surface en utilisant le *théorème de Green-Ostrogradsky* : *Le flux d'un vecteur à travers une surface fermée est égal à l'intégrale de la divergence de ce vecteur sur le volume délimité par cette surface :*

$$\oint_{\partial\mathcal{V}} \rho\vec{v}\cdot\vec{n} \, d\mathcal{S} = \int_{\mathcal{V}} \text{div}(\rho\vec{v}) \, d\mathcal{V}$$

Le volume \mathcal{V} étant indépendant du temps, on obtient ainsi à partir de la relation (3.1) la loi de conservation de la masse sous *forme intégrale* :

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial\rho}{\partial t} \, d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \text{div}(\rho\vec{v}) \, d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} H(\rho) \, d\mathcal{V} \quad (3.2)$$

Cette relation étant vraie pour tout \mathcal{V} , on en déduit la loi de conservation de la quantité ρ sous *forme différentielle* :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{v}) = H(\rho) \quad (3.3)$$

Cette équation aux dérivées partielles (EDP) constitue une *équation hyperbolique*, EDP qui interviennent largement dans les problèmes de transfert, notamment en mécanique des fluides et plus généralement en mécanique des milieux continus (LeVeque [2004] ; Spiegelman et al. [2001] ; Herbin [2006] ; Goncalvès [2005]).

3.2 Etablissement des équations d'évolution des proportions de solide et de liquide p_s et p_l

Les grandeurs physiques dont on veut ici suivre l'évolution sont les proportions en volume de solide p_s et de liquide p_l .

Pour notre problème, le domaine spatial Ω est la colonne magmatique verticale de hauteur L et de section \mathcal{S} . Nous considérons un maillage de cette colonne magmatique en plusieurs mailles de tailles Δx assez petites pour pouvoir considérer chaque maille comme un VER. Ce même maillage sera utilisé par la suite (dans la partie III) pour la discrétisation spatiale de la colonne en vue de la résolution numérique des EDPs obtenues.

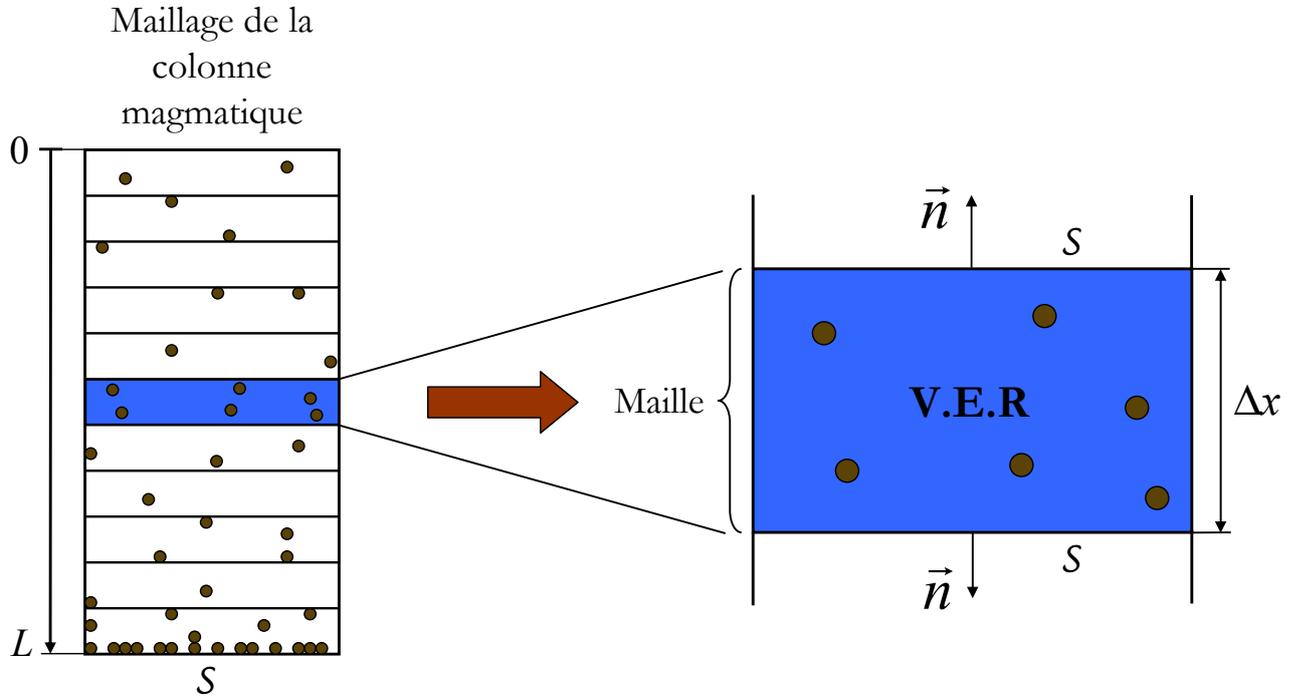


FIGURE 3.2 – Représentation du VER dans le cas de notre colonne verticale. — Le VER est une maille de longueur Δx assez petite.

Soit \mathcal{V} le volume du VER, on a :

$$p_s = \frac{\mathcal{V}_s}{\mathcal{V}} = \frac{\rho_s \cdot m_s}{\mathcal{V}},$$

\mathcal{V}_s , m_s et ρ_s étant respectivement, le volume, la masse et la masse volumique du solide présent dans le VER.

La masse m_s est une grandeur qui se conserve. On suppose la densité ρ_s constante, le volume \mathcal{V} étant constant, p_s est ainsi **une grandeur qui se conserve**.

3.2. ETABLISSEMENT DES ÉQUATIONS D'ÉVOLUTION DES PROPORTIONS DE SOLIDE ET DE LIQUIDE P_S ET P_L

Bilan de masse

La variation totale de la quantité du solide est due au **flux du solide** à travers la section \mathcal{S} (transport du solide) et à la **production de solide** par cristallisation du magma.

On note \vec{v}_s la *vitesse de chute du solide* (en $m.s^{-1}$) et q_s la *vitesse de solidification* du liquide (en s^{-1}), la relation (3.3) donne alors :

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} + \text{div}(p_s \cdot \vec{v}_s) = q_s \quad (3.4)$$

la production de solide résulte de la cristallisation du liquide magmatique à une vitesse de $-q_s$, ainsi, nous avons pour le liquide :

$$\frac{\partial p_l}{\partial t} + \text{div}(p_l \cdot \vec{v}_l) = -q_s \quad (3.5)$$

avec \vec{v}_l la *vitesse de remontée du liquide*.

Nous considérons un modèle unidimensionnel (une seule variable d'espace), les équations (3.4) et (3.5) se résument au système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{\partial(v_s \cdot p_s)}{\partial x} = +q_s \\ \frac{\partial p_l}{\partial t} + \frac{\partial(v_l \cdot p_l)}{\partial x} = -q_s \end{cases} \quad (3.6)$$

Les fonctions p_s , p_l , v_s , v_l et q_s sont toutes des fonctions de $x \in [0, L]$ et de $t \in \mathbb{R}^+$ ($x = 0$ correspond au sommet de la colonne magmatique et $x = L$ correspond au fond).

p_s et p_l sont les inconnues, les fonctions v_s , v_l et q_s elles, restent à définir.

Remarque :

Les bilans sur la proportion de solide dans le système sont écrits en négligeant les effets de volume. Cela revient à prendre $\rho_l = \rho_s$ dans la suite des équations (ce qui est une hypothèse raisonnable pour nos systèmes). Cela revient aussi à faire une hypothèse "à la Boussinesq" en négligeant la différence entre ρ_l et ρ_s partout sauf dans la vitesse de Stokes.

En réalité, les équations de bilan auraient dû être écrites de façon standard, c'est-à-dire appliquées aux densités $\rho_s p_s$ et $\rho_l p_l$, égales aux masses m_s et m_l (grandeurs extensives) par unité de volume total. On aurait donc le second membre de l'équation (3.5) égal à $-\frac{\rho_s}{\rho_l} q_s$ au lieu de $-q_s$, ce qui donne $\rho_l q_l = -\rho_s q_s$. En effet, le volume de solide formé n'est pas exactement égal au volume de liquide solidifié.

Cependant, les effets quantitatifs de cette différence d'écriture des équations sont négligeables, compte tenu du fait que pour nos systèmes, le rapport $\frac{\rho_s}{\rho_l}$ n'est pas très différent de 1.

3.3 Expression de la vitesse du solide v_s

La vitesse à laquelle les cristaux descendent dans un magma est couramment calculée en utilisant la *loi de Stokes* (Stokes [1851]). Soit utilisée telle quelle par certains auteurs, par exemple pour estimer la vitesse des cristaux sphériques d'olivine dans une chambre magmatique soumise à des courants de convection (Jellinek and Kerr [2001]), soit modifiée pour prendre en compte la variabilité du champ des vitesses dans le liquide lors de la sédimentation de cristaux dans un magma (Simakin et al. [1997]).

D'après les travaux de Schwindinger [1999], sur la modélisation expérimentale de la dynamique et l'agrégation des cristaux dans une chambre magmatique, cette loi de Stokes n'est valable qu'à faible taux de solide (moins de 0.01% en volume).

Ses travaux ont été basés sur des expériences effectuées sur des prismes argileux, en prenant les mêmes ordres de grandeur pour le nombre de Reynolds (rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses), le volume et la viscosité que les olivines de Kilauea Iki, ces prismes ont été introduits dans un bain froid.

Les résultats de ces expériences montrent, que lors de la sédimentation, les cristaux qui se rapprochent les uns des autres descendront à une vitesse supérieure à leurs vitesses de Stokes respectives à cause des interactions qui interviennent entre elles. Ainsi, la vitesse d'une paire de sphères proches l'une de l'autre de moins de 100 fois leur diamètre, sera de $1.55U_s$ si U_s est la vitesse de Stokes pour une sphère isolée. Les prismes argileux s'agrègent dans 30 à 80% des cas et leurs vitesses augmentent lorsqu'ils sont incorporés à un agrégat.

En l'absence d'agrégation (hypothèse très simplificatrice), et en supposant une suspension monodisperse (sphères isolées), la vitesse de sédimentation est inférieure à la vitesse de Stokes.

Les lois qui gouvernent la sédimentation sont assez simples lorsque les cristaux sont supposés sphériques, et augmentent en complexité lorsque les tailles, formes et densités des cristaux sont considérés. Plusieurs formulations empiriques ou théoriques ont été proposées. La plus simple formulation semi-empirique est celle de Richardson and Zaki [1954] que nous présenterons dans la section 3.3.2.

3.3.1 Loi de Stokes

La formule de Stokes (Stokes [1851]) a été étendue pour déterminer la vitesse de descente des minéraux dans les magmas. La *force de frottement visqueux*, exercée sur une sphère isolée en chute libre dans un liquide s'écrit :

$$F = 6\pi \cdot \mu \cdot a \cdot U$$

avec a le rayon de la sphère, μ le coefficient de viscosité dynamique et U la vitesse de descente.

De plus, la force de *poussée d'Archimède* exercée sur cette sphère est :

$$F_A = \frac{4}{3}\pi \cdot a^3 \cdot (\rho_s - \rho_l) \cdot g$$

3.3. EXPRESSION DE LA VITESSE DU SOLIDE V_S

avec g l'accélération de la pesanteur et ρ_s et ρ_l respectivement les densités du solide et du liquide.

En régime permanent, l'accélération est nulle, les deux forces s'équilibrent donc, et nous obtenons ainsi la *vitesse de Stokes pour une sphère isolée* :

$$U_s = \frac{2}{9} \cdot \frac{a^2 \cdot (\rho_s - \rho_l) \cdot g}{\mu} \quad (3.7)$$

Remarques :

- On considère $\rho_s - \rho_l$ comme étant une constante, ce qui n'est pas vrai en réalité puisque plus les cristaux apparaissent, plus le magma résiduel est léger et moins chaud (comportement non newtonien).
- Dans le cas de la prise en compte des interactions entre les sphères, des modèles ont été proposés par (Stimson and Jeffery [1926]) et par Oseen [1927] et d'autres auteurs, en multipliant la force de frottement visqueux par une variable corrective qui dépend de la prise en compte ou non de l'inertie du cristal. Ces modèles proposent toujours que pour deux cristaux en contact, la vitesse de sédimentation est supérieure à leur vitesse de Stokes.

3.3.2 Loi de Richardson et Zaki

Nous ne considérons pas les phénomènes d'agrégation. Cette hypothèse est justifiée dans le cadre de notre étude. En effet, les modèles empiriques proposés par divers auteurs et présentés dans (Schwindinger [1999]), montrent que l'augmentation de la vitesse des grains par rapport à la vitesse de Stokes (due aux interactions entre les grains) ne se produit que pour des valeurs de p_s inclus dans l'intervalle $[0.01, 0.03]$, intervalle très réduit pour des valeurs de p_s variant de 0 à 1 dans le cadre de notre travail.

Nous adoptons ainsi la *loi de Richardson et Zaki* qui s'écrit :

$$v_s = U_s \cdot (1 - p_s)^e \quad (3.8)$$

avec U_s la vitesse de Stokes exprimée par la relation (3.7) et e une constante déterminée expérimentalement, e varie entre 4.8 (Mirza and Richardson [1979]) et 6.55 (Al-Naafa and Selim [1992]).

Cette relation a été aussi reprise pour la modélisation numérique de mécanismes de sédimentation en convection vigoureuse dans les chambres magmatiques (Hoïnk et al. [2005]), en prenant pour e une valeur de 5.1, suggérée par (Garside and Al-Dibouni [1977]).

La figure (3.3) représente cette loi de vitesse après adimensionnement ($v_s^* = \frac{v_s}{U_s}$) pour les trois valeurs de e : 4.8, 5.1 et 6.55. La vitesse adimensionnée s'écrit alors :

$$v_s^* = (1 - p_s)^e \quad (3.9)$$

et vérifie $v_s^* \in [0, 1]$.

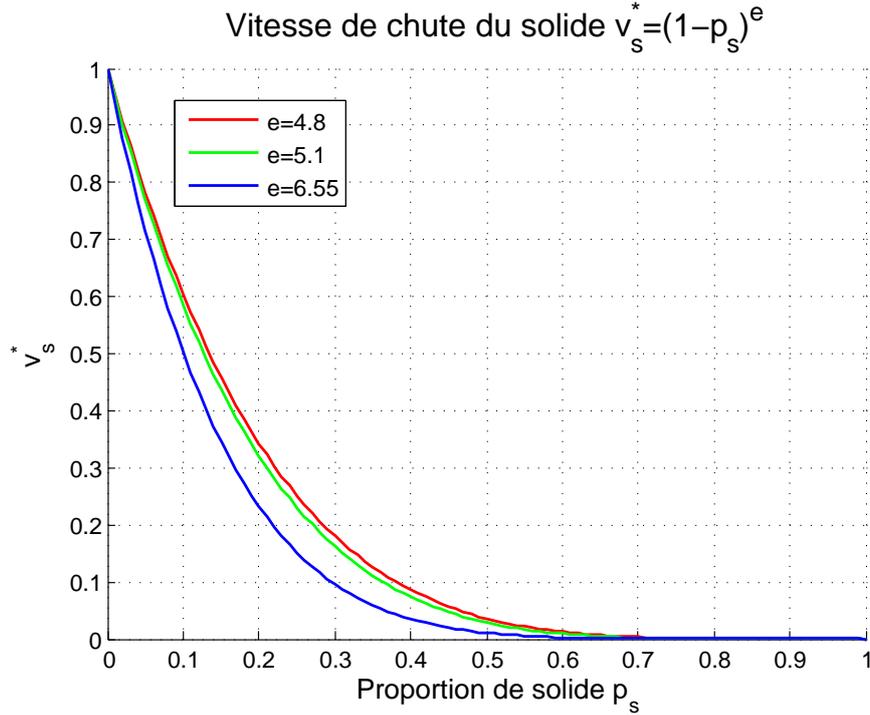


FIGURE 3.3 – Vitesse de sédimentation selon la loi de Richardson et Zaki adimensionnée, pour différentes valeurs de e .

Cette loi de vitesse (décroissante avec p_s), traduit le fait que moins on a de solide dans un volume donné de magma, plus la vitesse de sédimentation s'approche de la vitesse de Stokes qui est la vitesse de chute d'un cristal en suspension dans un magma, et plus il y a de solide, plus la vitesse diminue pour devenir quasiment nulle à des proportions de solide supérieures à 0.6 pour $e = 6.55$ et supérieures à 0.7 pour $e = 4.8$, dans ce cas le solide et le liquide ne se séparent pas (comportement magmato-rigide, cf. section 1.3.2).

Nous remarquons que pour les deux valeurs de $e=4.8$ et 5.1 , les courbes de v_s sont très proches. Nous choisirons dans notre modèle la valeur $e = 5$.

3.3.3 Ordres de grandeur de la vitesse de Stokes U_s :

On trouve dans la littérature des vitesses de sédimentation de Stokes U_s . Simakin et al. [1997] proposent pour la sédimentation de cristaux dans une chambre magmatique au cours de phénomènes de convection, des vitesses d'environ :

$$U_s = 2.10^{-7} \text{ à } 2.10^{-6} \text{ m.s}^{-1}$$

3.3. EXPRESSION DE LA VITESSE DU SOLIDE V_S

la viscosité dynamique étant de $\mu = 27000$ Po pour la première valeur et $\mu = 2700$ Po pour la deuxième. La masse volumique du liquide étant $\rho_l = 2.7 \text{ g.cm}^{-3}$ et $\frac{\Delta\rho}{\rho} = 0.2$ et les cristaux de rayon $a = 2 \text{ mm}$.

Pour la sédimentation des cristaux dans les laves du lac Kilauea Iki (magma de type basaltique) les expériences menées par [Schwindinger \[1999\]](#) ont permis de mesurer des vitesses de Stokes, pour des cristaux en suspension de tailles différentes (cristaux d'olivine de rayons $a = 0.05 \text{ mm}$ à 1.16 mm), variant de :

$$U_s = 6,5 \cdot 10^{-8} \text{ à } 4 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$$

ces vitesses dépendant de la taille du cristal, de la compacité p_s et de l'agrégation.

[Jellinek and Kerr \[2001\]](#) prennent eux, pour les cristaux d'olivine dans le lac Kilauea Iki, une vitesse d'environ :

$$U_s = 10^{-6} \text{ m.s}^{-1}.$$

[Wager and Brown \[1968\]](#) donnent des ordres de grandeur pour la vitesse de Stokes pour des cristaux dans un magma basique ($\rho_l = 2,58 \text{ g.cm}^{-3}$ et $\mu = 3000$ Po) : pour des cristaux de rayons allant de $a=0.5$ à 4 mm pour le plagioclase et de 0.5 à 2 mm pour l'olivine et l'augite, les valeurs de U_s varient alors de :

$$U_s = 2 \cdot 10^{-7} \text{ à } 1 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1} \text{ pour le plagioclase}$$

$$U_s = 2 \cdot 10^{-6} \text{ à } 3 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1} \text{ pour l'olivine}$$

$$U_s = 1 \cdot 10^{-6} \text{ à } 2 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1} \text{ pour l'augite}$$

[Martin and Nokes \[1989\]](#), proposent eux un intervalle plus large pour U_s (cf. figure 3.4), allant de :

$$U_s = 10^{-12} \text{ à } 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}.$$

Nous considérerons comme exemple de valeur typique la valeur centrale entre 10^{-12} et 10^{-2} m.s^{-1} :

$$U_s = 10^{-7} \text{ m.s}^{-1} \approx 3.15 \text{ m.an}^{-1}. \quad (3.10)$$

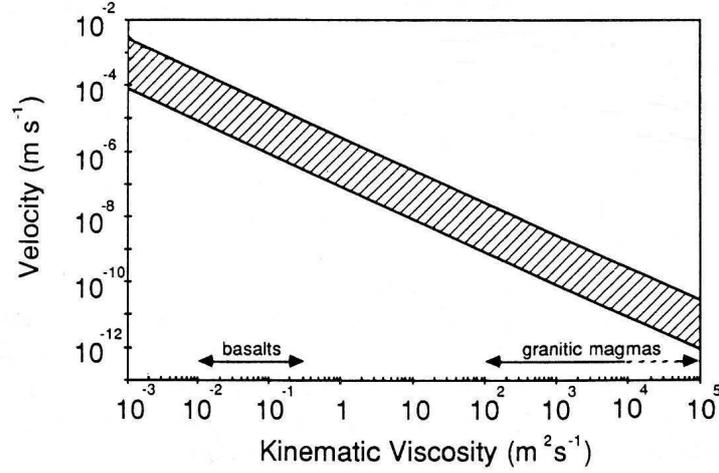


FIGURE 3.4 – Prédiction des vitesses de Stokes dans les chambres magmatiques, variations avec l’acidité du magma (caractérisée par sa viscosité cinématique). La partie hachurée correspond à la gamme des vitesses de Stokes pour des cristaux sphériques, limitée du côté inférieur par les vitesses prédites pour des cristaux de 1 mm de diamètre et dont la densité est supérieure à celle du magma de 0.05 g/cm^3 (approprié aux petits cristaux de plagioclase) et limitée du côté supérieur par les vitesses prédites pour des cristaux de 5 mm de diamètre et dont la densité est supérieure à celle du magma de 0.6 g/cm^3 (approprié aux grands cristaux d’olivine)— figure d’après [Martin and Nokes \[1989\]](#), modifiée.

3.4 Expression de la vitesse du liquide magmatique v_l

La somme des deux équations (3.6) donne :

$$\frac{\partial(p_s + p_l)}{\partial t} + \frac{\partial(v_s \cdot p_s + v_l \cdot p_l)}{\partial x} = 0$$

or :

$$p_s + p_l = 1 \tag{3.11}$$

on a donc :

$$\frac{\partial(v_s \cdot p_s + v_l \cdot p_l)}{\partial x} = 0$$

d’où $(v_s \cdot p_s + v_l \cdot p_l)$ est une grandeur indépendante de x :

$$(v_s \cdot p_s + v_l \cdot p_l) = f(t)$$

Le système étudié est un **système fermé**, en particulier en $x = 0$ et en $x = L$, le flux total de

3.5. LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION Q_S

matière est nul :

$$\forall t, (v_s \cdot p_s + v_l \cdot p_l)|_{x=0, x=L} = 0$$

d'où :

$$\forall(x, t), v_s \cdot p_s + v_l \cdot p_l = (v_s \cdot p_s + v_l \cdot p_l)|_{x=0, x=L} = 0$$

Nous en tirons l'expression de la vitesse du liquide :

$$\forall(x, t), v_l = -\frac{v_s \cdot p_s}{1 - p_s}$$

en utilisant (3.8), nous obtenons donc :

$$v_l = -U_s \cdot p_s (1 - p_s)^{e-1} \quad (3.12)$$

après adimensionnement, nous pouvons écrire :

$$v_l^* = \frac{v_l}{U_l} = -p_s (1 - p_s)^{e-1} \quad (3.13)$$

$|v_l^*|$ reste alors dans l'intervalle $[0, 1]$.

3.5 La fonction vitesse de solidification q_s

3.5.1 Quelques exemples de la littérature

La solidification est considérée comme étant due uniquement aux échanges thermiques dus eux-mêmes aux gradients thermiques existant entre le coeur de la chambre magmatique et ses parois. Pour bien tenir compte des effets thermiques, il faudrait écrire en plus de l'équation de bilan de masse, l'équation de conservation de l'énergie (bilan énergétique), ces deux équations devraient ensuite être couplées aux équations de bilan des constituants chimiques (cf. chapitre 4), ce qui compliquerait la résolution du système final.

Plusieurs auteurs ont incorporé à leurs modèles des équations de bilan thermique, tels que (Bonnefoi et al. [1995]), (Boudreau [2003]), (Kuritani [2004]) et (Hoïnk et al. [2005]).

Par ailleurs, nous avons constaté que dans la littérature, les courbes de distribution de la température sur la profondeur d'une chambre magmatique sont différents d'une étude à l'autre :

- Le modèle numérique 2D de Kuritani [2004], appliqué à une chambre magmatique modélisée sous la forme d'un cube ont montré des profils où la température baisse nettement au niveau du toit et du fond de la chambre magmatique et reste à peu près constante sur le reste de la profondeur.

- Les travaux de [Jellinek and Kerr \[2001\]](#) sur l'étude dynamique de la convection en chambre magmatique, appuyée sur des observations géologiques et géochimiques du lac de Kilauea Iki (Hawaii) montrent une forte solidification au toit et au fond du lac avec une plus forte nucléation cristalline au fond.
- Dans les travaux de [Hoïnk et al. \[2005\]](#), où la différenciation d'une chambre magmatique est considérée due à la compétition entre sédimentation et convection, les profils de température sont différents, avec des températures plus basses au toit de la chambre, hautes au fond et moyennes sur le reste de la chambre.
- Enfin, [Kaneko and Koyaguchi \[2004\]](#) considèrent que les processus d'assimilation avec cristallisation fractionnée sont particulièrement importants au niveau du fond de la chambre magmatique, la température est décroissante avec la profondeur, le solide est présent dans le bas de la chambre et le liquide en haut.

3.5.2 Profils $q_s(x)$

Dans le présent travail, nous n'allons pas modéliser les échanges de chaleur. Nous considérons dans notre approche simplifiée que l'on peut résumer les effets des gradients thermiques par une loi $q_s(x)$ qui dépend uniquement de la profondeur x et qui exprime la vitesse à laquelle le solide se produit (par cristallisation du magma) sur toute la colonne magmatique. Cette fonction est considérée comme **un paramètre que l'on peut faire varier** lors des tests numériques.

Nous considérerons alors pour nos tests numériques, des profils de $q_s(x)$ en s'inspirant des courbes de température trouvées dans la littérature dont nous avons présenté quelques exemples dans la section précédente, en supposant qu'une basse température T cause une forte solidification.

Nous pouvons aussi imaginer d'autres profils comme une fonction **linéaire ou pas, décroissante avec la profondeur** si on suppose par exemple un gradient de température progressif du fond au sommet de la chambre, le sommet étant plus proche de la surface de la terre.

Quelques profils types de la fonction vitesse de solidification sont représentés en figure 3.5 ; pour cela nous considérons la profondeur adimensionnée $x^* = x/L$ (L étant la hauteur de la chambre magmatique) et la vitesse de solidification adimensionnée q_s^* telle que $q_s^* \in [0, 1]$.

3.5. LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION Q_S

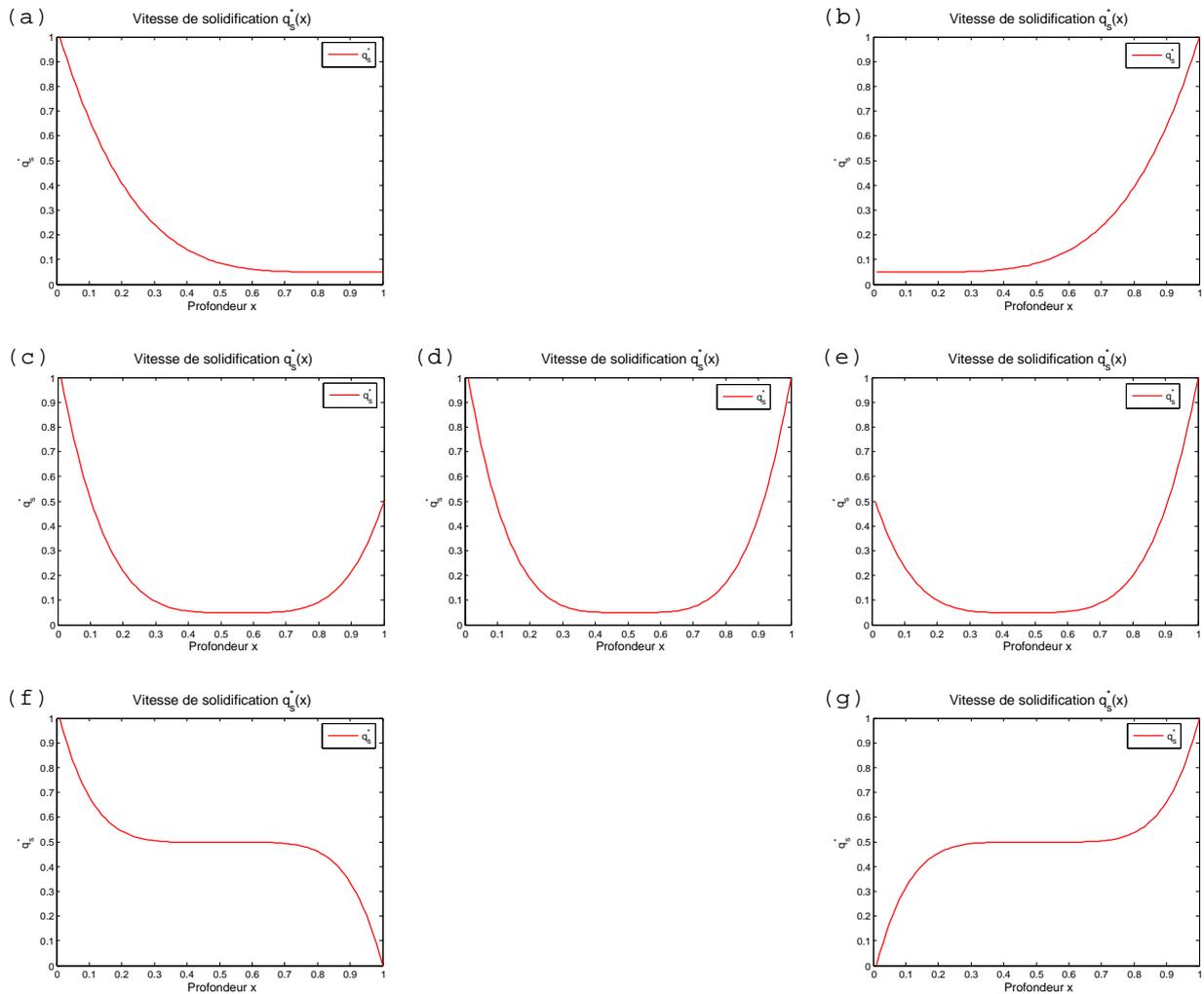


FIGURE 3.5 – Quelques profils types pour la vitesse de solidification adimensionnée $q_s^*(x^*)$ ($x^* = x/L$). — (a) Production de solide décroissante avec la profondeur de la chambre magmatique. (b) Croissante avec la profondeur. (c) Production de solide sur toute la profondeur, moyenne au fond, faible au milieu, importante au sommet. (d) Importante au sommet et au fond, faible au milieu. (e) Moyenne au sommet, faible au milieu, importante au fond. (f) Importante au sommet, moyenne au milieu, faible au fond. (g) Importante au fond, moyenne au milieu, faible au sommet.

3.5.3 Ordres de grandeur

Pour évaluer une valeur moyenne de q_s , nous allons effectuer un simple bilan thermique sur une colonne représentant la chambre magmatique que l'on suppose cylindrique, de rayon R de hauteur L , de surface de contact avec l'extérieur S et de volume V . La température moyenne de cette colonne et située au centre du cylindre est de 1300 °C et l'extérieur au contact avec le cylindre a une température moyenne située à 500 m du cylindre de 200 °C (cf. figure 3.6).

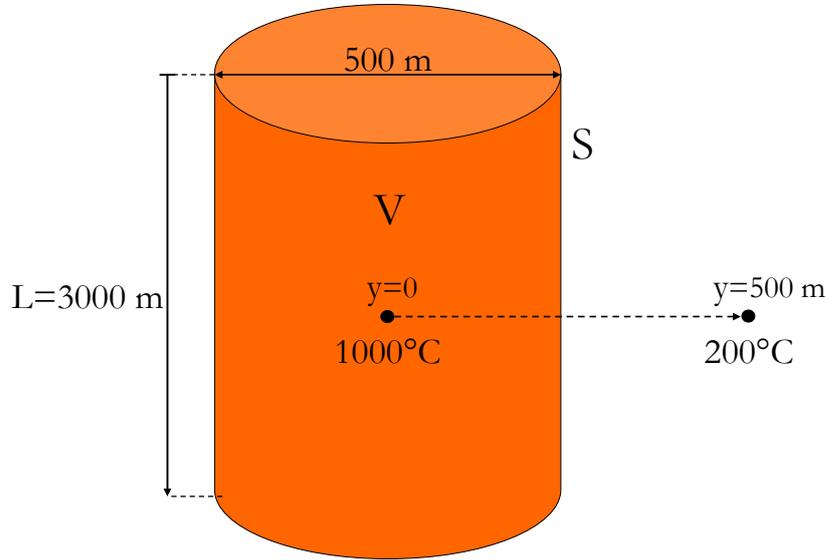


FIGURE 3.6 – Schéma pour bilan thermique.

Le flux thermique par unité de temps (en $J.s^{-1}.m^{-2}$) entre le cylindre et le milieu extérieur est donné par la *loi de Fourier* :

$$J_{th} = \lambda. \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{moyen}$$

avec λ la conductivité thermique ($J.K^{-1}.s^{-1}.m^{-1}$).

Soit l la chaleur latente de cristallisation ($J.mol^{-1}$), E l'énergie totale évacuée par unité de temps et n le nombre de moles de solide produit par unité de temps alors :

$$\frac{E}{l} = n$$

avec :

$$E = J_{th}.S$$

De plus, le volume de solide produit par unité de temps s'écrit :

$$V_s = n \times \frac{M_l}{\rho_l}$$

avec M_l la masse molaire du liquide qui solidifie (en kg/mol) et ρ_l la masse volumique de ce liquide.

D'où la proportion de solide produit par unité de temps :

$$\frac{\delta p_s}{\delta t} = \frac{V_s}{V}$$

or

$$q_s = \frac{\delta p_s}{\delta t}$$

3.5. LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION Q_S

et $V = \pi.R^2.L$, $S = 2\pi R.L + 2\pi R^2$ et $R = \frac{L}{12}$ ($R = 250$ m et $L = 3000$ m), alors :

$$V = \frac{\pi}{144}L^3$$

et

$$S = \frac{13}{72}\pi L^2$$

d'où, après calcul :

$$q_s = 26 \cdot \frac{M_l}{\rho_l} \cdot \frac{\lambda}{l} \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{moyen} \cdot \frac{1}{L} \quad (3.14)$$

Pour l'exemple que nous avons choisi, représenté par la figure 3.6, nous avons :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{moyen} = \frac{800}{500} \text{ K.m}^{-1} \text{ et } L=3000 \text{ m}$$

A $T=1490$ K ($\cong 1217$ °C), nous avons : $l_{Fa} = 89,3$ kJ.mol⁻¹, $\rho_{Fa} = 3917$ kg.m⁻³ et $M_{lFa} = 0,204$ kg.mol⁻¹ (calculs faits grâce au module de [Moutte \[2007\]](#)).

Pour la conductivité thermique λ , les valeurs se situent entre 1 et 10 J.K⁻¹.s⁻¹.m⁻¹ (cf. [Clark JR. \[1966\]](#); [Grolier et al. \[1989\]](#); [Grolier et al. \[1990\]](#)), nous prenons par exemple : $\lambda = 10$ J.K⁻¹.s⁻¹.m⁻¹, ce qui donne un ordre de grandeur pour la vitesse moyenne de solidification de

$$q_s = 8.10^{-8} \text{ s}^{-1} \approx 0.0025 \text{ an}^{-1},$$

il faudrait donc environ 400 ans pour que $p_s = 1$ (solidification totale de la colonne magmatique).

Nous trouvons aussi un bilan de conservation de la chaleur proposé par [Jellinek and Kerr \[2001\]](#), il permet d'obtenir une valeur en m.s⁻¹ d'environ 2.10^{-8} (environ 0,6 m.a⁻¹) pour le lac de Kilauea Iki. Le lac ayant une profondeur moyenne de 100 m, la vitesse de solidification par unité d'espace est donc d'environ :

$$q_s = 2.10^{-10} \text{ s}^{-1},$$

avec cette valeur, il faudrait 158 ans pour solidifier entièrement le lac.

Certains auteurs prédisent même que le refroidissement de certaines chambres magmatiques demande une durée d'environ 500.000 années, ce qui donnerait une vitesse de solidification d'environ :

$$q_s = 6.10^{-14} \text{ s}^{-1} \approx 2.10^{-6} \text{ an}^{-1}.$$

Chapitre 4

Modèle du transport réactif magmas/roches

Après avoir mis en équation les phénomènes de solidification et de sédimentation, nous allons dans ce chapitre modéliser les variations des quantités d'éléments chimiques dans le solide et dans le liquide, dues aux *mouvements relatifs* liquide/solide, aux *déséquilibres chimiques* entre les deux phases et à la *solidification* du magma dans la chambre magmatique fermée.

De nombreux travaux ont été menés pour simuler numériquement les évolutions chimiques en milieu poreux (magma qui infiltre des roches encaissantes) en utilisant des modèles de percolation-réaction (Korzhinskii [1970]; Guy [1984], [1989], [1993]; Sedqui [1998]; Sedqui and Guy [2001]; Godard [1993]; Godard et al. [1995]; Baker and Spiegelman [1995]; Hauri [1997]; Korenaga and Kelemen [1998]; Spiegelman et al. [2001]; Boudreau [2003]...), cependant, il existe beaucoup moins de travaux de simulation de la différenciation en milieu magmatique (chambre magmatique ou diapirs) (Hořnk et al. [2005]; Kuritani [2004]).

Dans notre étude, nous proposons deux nouvelles considérations qui nous différencient par rapport aux travaux précédents : la prise en compte, dans les équations de bilan chimique, des changements de proportions de solide et de liquide (par solidification du magma) et l'introduction d'une loi de partage à l'équilibre chimique, à température donnée, entre les deux phases solide et liquide, appelée "*fonction isotherme*", fonction non nécessairement linéaire et valable pour les *éléments majeurs*. Nous verrons dans le chapitre 11 l'importance de la forme de cette fonction sur les distributions finales des éléments chimiques dans la chambre magmatique. Notons que nous nous intéressons uniquement aux aspects chimiques, l'impact des évolutions thermiques étant exprimé intrinsèquement par un terme lié à la solidification du magma selon une vitesse $q_s(x)$ que nous avons déjà définie dans le chapitre 3 et qui intervient dans les équations de bilan chimique.

4.1 Etablissement des équations d'évolution des concentrations dans le solide et dans le liquide c_s et c_l

Nous considérons toujours la colonne magmatique verticale qui modélise une chambre magmatique fermée. Pour un constituant chimique donné, nous nous intéressons aux variations, dans le temps et l'espace, de ses concentrations volumiques (en kg/m^3) dans le solide et dans le liquide : $c_s(x, t)$ et $c_l(x, t)$ respectivement.

Pour ce faire, nous considérons le VER de longueur Δx , de section \mathcal{S} et de volume \mathcal{V} défini dans

4.1. ETABLISSEMENT DES ÉQUATIONS D'ÉVOLUTION DES CONCENTRATIONS DANS LE SOLIDE ET DANS LE LIQUIDE C_S ET C_L

la section 3.2 (cf. figure (3.2)). Dans ce VER coexistent un volume \mathcal{V}_s de solide et un volume \mathcal{V}_l de liquide.

Pour un constituant chimique X donné, nous définissons les concentrations en masse par volume dans le solide c_s et dans le liquide c_l :

$$\left\{ \begin{array}{l} c_s = \frac{m_s}{\mathcal{V}_s} \\ c_l = \frac{m_l}{\mathcal{V}_l} \end{array} \right. \quad (4.1)$$

où m_s et m_l sont les masses du constituant chimique X , respectivement dans le solide et dans le liquide.

Nous avons alors $p_s \cdot c_s = \frac{\mathcal{V}_s}{\mathcal{V}} \cdot \frac{m_s}{\mathcal{V}_s}$ et $p_l \cdot c_l = \frac{\mathcal{V}_l}{\mathcal{V}} \cdot \frac{m_l}{\mathcal{V}_l}$, d'où :

$$p_s \cdot c_s = \frac{m_s}{\mathcal{V}} \quad (4.2)$$

et :

$$p_l \cdot c_l = \frac{m_l}{\mathcal{V}} \quad (4.3)$$

Le volume \mathcal{V} du VER étant constant et les masses m_s et m_l des grandeurs qui se conservent, **les quantités** $(p_s \cdot c_s)$ et $(p_l \cdot c_l)$ sont alors **des grandeurs qui se conservent**. Elles correspondent en fait aux quantités du constituant chimique X dans le solide et dans le liquide, en masse par volume total du magma.

Lors de l'évolution des quantités de solide dans la colonne magmatique -par solidification du liquide ou par mouvement relatif liquide/solide (équations correspondantes à ces deux phénomènes écrites dans le chapitre 3)- les solides rencontrent des liquides en déséquilibre avec eux, des réactions chimiques se produisent alors entre les deux phases sous forme d'échange de constituants chimiques.

4.1.1 Contribution des interactions chimiques entre le liquide et le solide

Les échanges de constituants chimiques entre le liquide et le solide se font au niveau de la surface de contact entre ces deux phases, cette surface est souvent appelée *surface réactive* en hydrogéologie. Nous la noterons S_r .

Le gain ou la perte en constituants chimiques se fait à une vitesse proportionnelle à la constante cinétique que nous notons k_c .

a) Concentrations à l'équilibre et notion d'isotherme

Dans les équations de bilan des espèces chimiques, le terme d'échange en espèces chimiques entre le solide et le liquide, R_{chem} , dû au déséquilibre entre les deux phases, est souvent exprimé

CHAPITRE 4. MODÈLE DU TRANSPORT RÉACTIF MAGMAS/ROCHES

en géochimie en fonction de l'écart à l'équilibre ($c_s - c_s^{eq}$) (Lasaga [1998]), par la relation :

$$R_{chem} = k_c \cdot S_r \cdot (c_s - c_s^{eq})^n \quad (4.4)$$

avec c_s^{eq} la concentration dans le solide à l'équilibre avec le liquide et n un nombre entier, pris en général égal à 1 (Baker and Spiegelman [1995]; Hauri [1997]). Nous pouvons aussi écrire cet écart à l'équilibre en fonction des concentrations dans le liquide :

$$R_{chem} = k'_c \cdot S_r \cdot (c_l - c_l^{eq}) \quad (4.5)$$

avec c_l^{eq} la concentration dans le liquide à l'équilibre avec le solide.

Pour les *éléments en trace*, les concentrations à l'équilibre sont décrites par la *loi de distribution de Nernst* (Godard [1993]) :

$$c_l^{eq} = \frac{1}{K_i^j} \cdot c_s^{eq} \quad (4.6)$$

avec K_i^j le coefficient de partage pour l'élément j entre la phase liquide et le minéral i , il dépend de la pression et de la température mais est indépendant des valeurs de c_s et de c_l , la **loi (4.6)** est donc **linéaire**.

Pour notre part, nous définissons l'état d'équilibre chimique entre le solide et le liquide pour les **éléments majeurs** par l'égalité entre c_l et une fonction de c_s que nous appelons "*isotherme*" par extension des lois de partage à l'équilibre proposées pour le cas d'échanges chimiques entre roches et solutions aqueuses (Korzhinskii [1970]; Guy [1979]; [1984]; [1989]; [1993]) :

$$c_l^{eq} = g(c_s) \quad (4.7)$$

avec g la *fonction isotherme*.

Un point important est que cette isotherme n'est pas nécessairement linéaire.

Dans le chapitre 5, nous développons un exemple de calcul d'une *isotherme magmatique* dans un contexte magmatique bien précis. Nous proposerons aussi quelques profils types pour l'isotherme, déduits de la littérature.

b) Expression du terme de réaction liquide/solide

Pour exprimer la contribution du déséquilibre chimique entre le solide et le liquide dans les équations générales de bilan des constituants chimiques, nous supposons que celui-ci est l'unique phénomène à l'origine des variations des concentrations dans le temps (pas de variation de la compacité p_s ni par transport ni par solidification du magma). Nous écrivons alors :

$$\frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} = R_{chem} \quad (4.8)$$

4.1. ETABLISSEMENT DES ÉQUATIONS D'ÉVOLUTION DES CONCENTRATIONS DANS LE SOLIDE ET DANS LE LIQUIDE C_S ET C_L

Nous déduisons alors à partir des relations (4.5) et (4.7) la variation de la quantité d'un constituant chimique donné dans le liquide :

$$\frac{\partial(p_l.c_l)}{\partial t} = -k_c.S_r.(c_l - g(c_s)) \quad (4.9)$$

nous avons repris la notation k_c au lieu de k'_c dans (4.5).

Si $c_l > g(c_s)$, pour arriver à l'équilibre ($c_l = g(c_s)$), il faut diminuer la concentration dans le liquide c_l . Or $k_c.S_r > 0$, pour diminuer c_l , et donc diminuer la quantité $(p_l.c_l)$ (p_l étant considéré constant), il faut prendre une quantité négative dans la partie droite de l'équation (4.9), ce qui explique le signe (-) devant le terme $k_c.S_r.(c_l - g(c_s))$.

De même, nous aurons pour la phase solide :

$$\frac{\partial(p_s.c_s)}{\partial t} = +k_c.S_r.(c_l - g(c_s)) \quad (4.10)$$

c) Unités de S_r et k_c

D'après les relations (4.2) et (4.3), les quantités $(p_s.c_s)$ et $(p_l.c_l)$ représentent une masse par volume (volume du VER), leur unité est en kg.m^{-3} , on considère alors S_r comme la surface de réaction par volume du VER, d'où l'unité de S_r est en $\text{m}^2.\text{m}^{-3}$:

$$[S_r] = \text{m}^{-1}$$

Ainsi, d'après les relations (4.9) et (4.10), on peut exprimer l'unité de k_c : $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1} = [k_c].\text{m}^{-1}.\text{kg.m}^{-3}$, d'où :

$$[k_c] = \text{m.s}^{-1}$$

4.1.2 Contribution de la solidification du magma

Lorsque le liquide magmatique se solidifie, les constituants chimiques se trouvant initialement dans le liquide se retrouvent dans le solide. La fonction vitesse de solidification q_s représente, en valeur absolue, la variation de la compacité p_s et de la porosité p_l par unité de temps.

Prenons une quantité de liquide contenant le constituant X en quantité $p_l.c_l$. Par une unité de temps, la quantité de liquide solidifiée est q_s , quantité de solide produit ; la quantité du constituant chimique X gagnée par le solide par unité de temps est $(+q_s.c_l)$ et la variation de la quantité du constituant X dans le liquide est $(-q_s.c_l)$.

Ainsi, si l'on considère que la variation des concentrations n'est la conséquence que de la solidification du liquide (pas d'échange chimique ni de transport de matière), alors on peut écrire :

$$\frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} = +q_s \cdot c_l \quad (4.11)$$

et :

$$\frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} = -q_s \cdot c_l \quad (4.12)$$

4.1.3 Bilan des quantités de constituant chimique

Prenons l'exemple du solide. La variation totale de quantité du constituant chimique X dans le solide est due au **(1) flux des quantités du constituant X** à travers la section \mathcal{S} par transport du solide (qui contient ce constituant chimique), à **(2) l'équilibrage en constituants X** entre le solide et le liquide suivant la loi (4.10) et **(3) à l'apport en constituant X grâce à la production de solide** par cristallisation du magma, exprimé par l'équation (4.11). La relation de conservation d'une quantité donnée (3.3) donne alors pour le solide :

$$\frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} + \text{div}(p_s \cdot c_s \cdot \vec{v}_s) = +k_c \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + q_s \cdot c_l \quad (4.13)$$

de même, nous obtenons pour le liquide :

$$\frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} + \text{div}(p_l \cdot c_l \cdot \vec{v}_l) = -k_c \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) - q_s \cdot c_l \quad (4.14)$$

Pour notre modèle unidimensionnel, ces équations donnent alors l'écriture finale du bilan des constituants chimiques dans le solide et dans le liquide :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} + \frac{\partial(v_s \cdot p_s \cdot c_s)}{\partial x} = +k_c \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + q_s \cdot c_l \\ \frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} + \frac{\partial(v_l \cdot p_l \cdot c_l)}{\partial x} = -k_c \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) - q_s \cdot c_l \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Nous obtenons ainsi un *système d'équations hyperboliques*. Les inconnues de ce système sont les concentrations c_s et c_l , ce sont des fonctions de $x \in [0, L]$ et de $t \in \mathbb{R}^+$.

Les fonctions p_s et p_l sont définies par le système d'équations (3.6), v_s définie par la relation (3.8), v_l par la relation (3.12) et q_s une fonction à choisir (cf. section 3.5).

Les fonctions S_r et $g(c_s)$ et la constante k_c , restent elles à définir.

Remarque :

4.2. EXPRESSION DE LA SURFACE RÉACTIVE S_R

1. Nous avons considéré que le solide qui cristallise a la composition du liquide, nous avons ainsi séparé le processus de solidification de celui de l'équilibrage chimique, le solide produit s'équilibre ensuite avec le liquide qui l'entoure et le liquide qu'il rencontre tout au long de la sédimentation.

Cependant, cette hypothèse mérite discussion. En effet pour les silicates (au contraire des alliages métalliques), il y a pour une composition donnée une très grande différence entre la température du liquidus et la température de solidus, et il faudrait donc un gradient de température énorme pour que l'on fige ainsi dans le solide la composition du liquide (sinon cela pourrait correspondre à une augmentation de l'enthalpie libre, ce qui serait évidemment gênant).

Dans la nature, on peut penser que, suivant les gradients thermiques, la composition du solide qui se forme sera intermédiaire entre la composition du liquide et la composition du solide en équilibre avec le liquide initial (composition du solidus à la température initiale). Dans le présent modèle, nous avons considéré le cas extrême où le solide cristallisé a la composition du liquide, et réagit ensuite avec le liquide qu'il rencontre lors des mouvements relatifs liquide-solide.

Nous pourrions considérer le deuxième extrême pour la composition du solide cristallisé, correspondant à la concentration en équilibre avec le liquide initial, ce qui donnerait une concentration $c_s = g^{-1}(c_l)$ (g^{-1} étant la fonction réciproque de g). Nous aurions alors le second membre de l'équation (4.11) égal à $+q_s.g^{-1}(c_l)$ au lieu de $+q_s.c_l$. (Le second membre de l'équation (4.12), serait lui égal à $q_l.c_l$ avec $q_l = -\frac{\rho_s}{\rho_l}q_s$ comme vu dans la remarque de la section 3.2). Il serait intéressant de comparer ces deux choix de la composition du solide cristallisé sur les évolutions d'ensemble des chambres magmatiques. Nous pensons que le deuxième cas extrême de solidification à l'équilibre est déjà traité par notre modèle dans le cas où nous prenons une vitesse de réaction très élevée (k_c très grand).

2. Nous avons considéré que l'on pouvait écrire une loi $c_l = g(c_s)$ en gardant un seul degré de liberté possible du point de vue composition alors que dans un système binaire strict, la composition du solide et du liquide est fixée par la température. Cette écriture cache le fait que, dans le liquide, il y a un autre constituant chimique que nous pourrions appeler *solvant* (par comparaison à l'écriture des isothermes pour des solutions aqueuses) tel SiO_2 . Le fait que nous ne rajoutions pas dans les équations un deuxième constituant indépendant constitue une limite du modèle.

4.2 Expression de la surface réactive S_r

Nous cherchons à exprimer la surface de réaction entre le solide et le liquide dans un volume donné. Nous prendrons comme volume élémentaire le volume du VER (cf. figure 3.2).

Nous considérons dans notre étude, que le magma cristallise sous forme de **grains sphériques de même rayon**. C'est aussi le modèle très simplifié appelé *modèle de sphères flottantes* (Bildstein [1998]), considéré en hydrogéologie et selon lequel une phase minérale est un ensemble de grains de forme sphérique "flottant" les uns à côté des autres (sans se toucher).

CHAPITRE 4. MODÈLE DU TRANSPORT RÉACTIF MAGMAS/ROCHES

Il existe d'autres modèles de nucléation, croissance et mûrissement plus complets qui ont été développés pour le cas des solutions aqueuses, où la taille des grains peut varier et l'agrégation des grains est considérée (Kieffer et al. [1999]; Corvisier [2006]), mais aussi des théories plus avancées pour la cristallisation en milieu magmatique, voir par exemple (Hargraves [1980]), (Brandeis and Jaupart [1986]) et (Brandeis and Jaupart [1987]).

Soit a le rayon des grains produits, la *surface géométrique* d'un grain est donc :

$$S_{grain} = 4\pi a^2$$

et son volume est :

$$V_{grain} = \frac{4}{3}\pi a^3$$

Et pour n **grains** présents dans le volume \mathcal{V} du VER, la surface géométrique (par volume du VER) est :

$$S_g = \frac{n \cdot 4\pi a^2}{\mathcal{V}} \quad (4.16)$$

\mathcal{S} est la surface limite séparant deux mailles de notre colonne magmatique (deux VER), et Δx sa longueur (cf. figure 3.2), le volume \mathcal{V} s'écrit alors :

$$\mathcal{V} = \Delta x \cdot \mathcal{S}$$

Et le volume de ces n grains présents dans le VER (qui est aussi le volume de solide présent dans le VER) est :

$$\mathcal{V}_s = n \cdot \frac{4}{3}\pi a^3$$

Par ailleurs, pour le VER considéré, nous avons :

$$p_s = \frac{\mathcal{V}_s}{\mathcal{V}}$$

d'où :

$$p_s = \frac{a}{3} \cdot S_g$$

Ainsi la surface géométrique des grains présents dans un volume donné s'écrit en fonction de la compacité suivant la relation :

$$S_g = \frac{3}{a} \cdot p_s \quad (4.17)$$

où a est le rayon des grains solides.

4.2. EXPRESSION DE LA SURFACE RÉACTIVE S_R

Mais cette surface géométrique des cristaux ne constitue pas exactement la surface réactive S_r . En effet, plus la proportion de solide p_s est élevée, plus les cristaux sont nombreux par volume donné et proches les uns des autres et moins le liquide pourra atteindre l'ensemble de leurs surfaces. Dans les deux cas extrêmes où il n'y a que du solide ou bien que du liquide ($p_s = 1$ ou $p_s = 0$), la surface de contact entre le solide et le liquide est en réalité nulle.

Il existe des modèles adaptés pour les solutions aqueuses où la compacité est faible ($p_s \leq 0.2$) (Kieffer et al. [1999]). En particulier, Cassou [2000] et Corvisier [2006] suggèrent que la surface réactive est égale à la surface géométrique pondérée par un coefficient de réactivité c_r : $S_r = c_r \cdot S_g$. c_r est le plus souvent un coefficient modérateur (<1) et parfois amplificateur (>1).

Pour notre étude, les compacités peuvent varier entre les deux valeurs extrêmes 0 et 1, nous proposons alors une fonction de pondération entre la surface réactive S_r et la surface géométrique S_g , dépendante de la compacité p_s de sorte que S_r est quasiment égale à S_g lorsque la porosité est élevée (p_s faible) et que $S_r = 0$ lorsque qu'il n'y a plus de liquide ($p_s = 1$) :

$$S_r = S_g \cdot f(p_s) \text{ tel que } f(0) = 1, f(1) = 0 \quad (4.18)$$

On prend alors par exemple :

$$f(p_s) = (1 - p_s)^\alpha$$

avec α une constante à choisir.

D'où :

$$S_r = S_g \cdot (1 - p_s)^\alpha \quad (4.19)$$

ou encore :

$$S_r = \frac{3}{a} \cdot p_s \cdot (1 - p_s)^\alpha \quad (4.20)$$

Nous en déduisons la surface réactive adimensionnée S_r^* de sorte que $S_r^* \in [0, 1]$:

$$S_r^* = \frac{S_r}{\frac{3}{a}} = p_s \cdot (1 - p_s)^\alpha \quad (4.21)$$

La figure (4.1) représente quelques profils de la surface réactive adimensionnée S_r^* et du rapport S_r/S_g en fonction de p_s pour différentes valeurs de α .

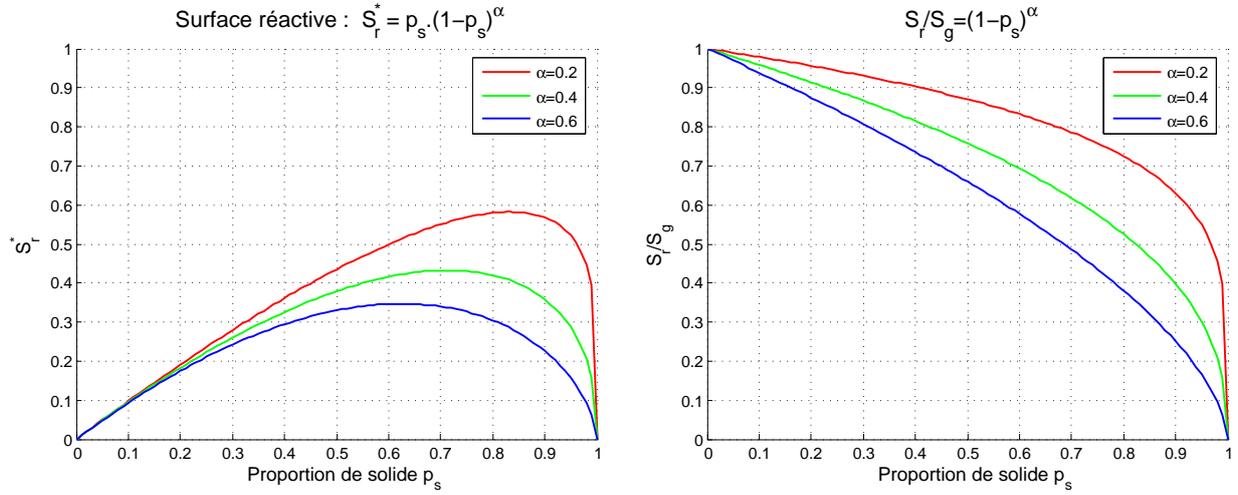


FIGURE 4.1 – Quelques profils pour la surface réactive adimensionnée S_r^* et le rapport S_r/S_g pour différentes valeurs de α .

Nous vérifions sur les courbes S_r/S_g que les contraintes (4.18) sont bien vérifiées. Nous remarquons aussi sur les courbes de S_r^* que pour $\alpha = 0.2$ la surface réactive est croissante jusqu'à environ la valeur $p_s = 0.8$ à partir de laquelle elle commence à diminuer, elle croît pour $\alpha = 0.4$ jusqu'à environ $p_s = 0.7$ et pour $\alpha = 0.6$ jusqu'à environ $p_s = 0.55$.

Rappelons que la vitesse de sédimentation du solide est quasiment nulle à partir de $p_s = 0.7$ (cf. figure (3.3)). Le mouvement des cristaux est freiné par les frottements entre les cristaux eux-mêmes et entre les cristaux et les parois de la chambre magmatique vu l'augmentation de leur nombre, les cristaux sont ainsi très proches les uns des autres et laissent moins de place au liquide en contact avec eux. Nous supposons alors que la surface de contact liquide/solide commence à diminuer à partir de la valeur $p_s = 0.7$. La valeur de α qui satisfait le mieux cette hypothèse est $\alpha = 0.4$, valeur qu'on adoptera par la suite dans notre modèle.

4.3 Ordres de grandeur de la constante cinétique k_c

Nous modélisons l'échange chimique en un élément X par la **diffusion** de cet élément **dans le solide** au niveau de la surface réactive. En effet, la diffusion dans le solide est le processus limitant la cinétique d'échange avec le liquide (la diffusion dans le liquide étant très rapide relativement à la diffusion dans le solide).

La surface réactive est égale pour un grain isolé à sa surface géométrique S_{grain} .

On considère par exemple le cas d'échange entre un cristal d'olivine, supposé sphérique de rayon a , et un liquide magmatique. On suppose que l'échange se fait en magnésium (Mg) et que cet élément se trouve à une distance de $2a$ du centre du cristal (cf. figure (4.2)).

4.3. ORDRES DE GRANDEUR DE LA CONSTANTE CINÉTIQUE K_C

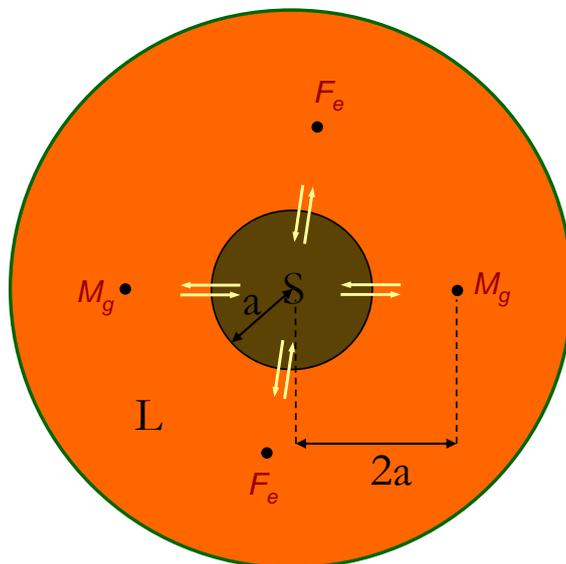


FIGURE 4.2 – Représentation de l'échange d'un élément Mg par diffusion dans un cristal sphérique de rayon a .

Supposons que la diffusion des éléments chimiques soit le seul phénomène à l'origine des variations des concentrations chimiques. Soit J_D le flux des éléments Mg à travers la surface S_{grain} du cristal, nous avons alors :

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = J_D \cdot S_{grain} \quad (4.22)$$

Par ailleurs, soit D_s le coefficient de diffusion de Mg dans le cristal, alors la première *loi de Fick* s'écrit :

$$J_D = -D_s \cdot \frac{\partial c_s}{\partial x} \quad (4.23)$$

Seuls les échanges chimiques sont considérés, la relation (4.10) donne pour un seul cristal :

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = k_c \cdot S_{grain} \cdot (c_l - g(c_s)) \quad (4.24)$$

à partir de (4.22), (4.23) et (4.24), nous obtenons :

$$k_c \cdot (c_l - g(c_s)) = -D_s \cdot \frac{\partial c_s}{\partial x} \quad (4.25)$$

d'où :

CHAPITRE 4. MODÈLE DU TRANSPORT RÉACTIF MAGMAS/ROCHES

$$k_c \cdot (\delta_1 c_s) \cong D_s \cdot \frac{\delta_2 c_s}{\delta x}$$

d'où k_c est homogène à $\frac{D_s}{\delta x}$:

$$k_c \cong \frac{D_s}{\delta x} \tag{4.26}$$

[Kelemen et al. \[1997\]](#) donnent un coefficient de diffusion de Fe-Mg dans l'olivine à environ 1250 °C de $D_s = 10^{-14} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ pour des cristaux d'olivine de $a = 0.2 \text{ cm}$. Si on prend une distance entre le solide et le liquide de $\delta x = 2a$ (cf. figure (4.2)), on aura alors une valeur de la constante cinétique :

$$k_c = 2,5 \cdot 10^{-12} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1},$$

pour $D_s = 10^{-15} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, valeur donnée par [Korenaga and Kelemen \[1998\]](#) pour la diffusion de Fe-Mg dans l'olivine à 1200 °C et pour une longueur caractéristique $\delta x = 0.2 \text{ cm}$, on obtient :

$$k_c = 5 \cdot 10^{-13} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1},$$

et pour $D_s = 10^{-16} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, pour la diffusion de Ni entre une olivine où la concentration en Ni est de 2000 ppm et un magma où la concentration en Ni est de 500 ppm à 1250 °C ([Morioka and Nagasawa \[1991\]](#); [White \[2007\]](#)), on a :

$$k_c = 2,5 \cdot 10^{-14} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}.$$

Chapitre 5

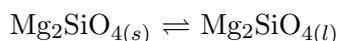
Recherche d'une isotherme magmatique $c_l = g(c_s, T, P)$

La notion d'*isotherme* (cf. section 4.1.1) a été proposée dans le cadre de la modélisation des échanges chimiques, en particulier des échanges d'ions, entre solutions aqueuses et substrats solides, afin de décrire les processus de métasomatisme, c'est-à-dire de l'évolution chimique d'une roche percolée. L'isotherme relie, à l'équilibre thermodynamique et à température donnée, les concentrations d'un élément chimique donné dans la solution aqueuse c_l et dans le substrat solide c_s par une loi analytique du type $c_l = g(c_s)$. Dans ce chapitre, nous cherchons à étendre cette notion dans le cas des échanges entre solides et liquides magmatiques, dans des conditions de validité que nous préciserons.

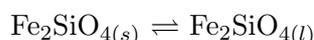
Pour les calculs thermodynamiques nécessaires à l'écriture de la loi isotherme (potentiels chimiques standards, masses molaires, volumes molaires, à température et pression données), nous avons adopté le modèle de solution de Ghiorso ([Ghiorso and Sack \[1995\]](#); [Ghiorso et al. \[2002\]](#)). Les calculs thermodynamiques sont basés sur les formules et données thermodynamiques fournies dans [Ghiorso et al. \[2002\]](#). Ces calculs ont été implémentés sous forme d'un module en Fortran 90 par [Moutte \[2007\]](#) dans le cadre du projet ARXIM qui fournit une librairie pour le calcul des équilibres multiphasiques appliqué aux interactions fluide-roche. Nous avons alors couplé une partie de ce module à notre programme pour en extraire les données nécessaires à l'écriture de la loi isotherme.

Nous nous intéressons ici à l'échange chimique entre le minéral contenu dans une roche et présentant une solution solide et un magma qui circule dans les pores de la roche. L'exemple choisi est une olivine de composition variable entre le pôle forstérite (Mg_2SiO_4 noté Fo) et le pôle fayalite (Fe_2SiO_4 noté Fa) et nous cherchons à exprimer l'équilibre chimique sous la forme d'une isotherme $c_l = g(c_s)$ où l désigne le liquide magmatique et s le solide.

Pour ce faire, nous écrivons d'abord l'équation d'échange d'un constituant chimique, par exemple Mg_2SiO_4 , entre le liquide magmatique et l'olivine :



Pour la fayalite nous avons :



A l'équilibre chimique entre le solide et le liquide, l'énergie libre de Gibbs est minimale et on a la *relation de Gibbs-Duhem* ([Smith and Missen \[1982\]](#)), qui s'écrit pour la forstérite par exemple :

$$dG = SdT - VdP + \mu_{Fo,s} \cdot dn_{Fo,s} + \mu_{Fo,l} \cdot dn_{Fo,l} = 0 \quad (5.1)$$

or ce qui est gagné par la phase solide est perdu par la phase liquide :

$$dn_{Fo,s} = -dn_{Fo,l} \quad (5.2)$$

nous pouvons de même écrire les relations (5.1) et (5.2) pour Fa, d'où, à T et P maintenues constantes, nous obtenons l'égalité des potentiels chimiques dans le liquide et le solide (White [2007]) :

$$\begin{cases} \mu_{Fo,s} = \mu_{Fo,l} \\ \mu_{Fa,s} = \mu_{Fa,l} \end{cases} \quad (5.3)$$

Ce sont ces égalités qui nous permettront, dans ce chapitre, d'écrire la loi $c_l = g(c_s)$; cette loi dépendra des expressions des potentiels chimiques et donc des modèles de solutions choisis pour les phases liquide et solide.

5.1 Expressions des potentiels chimiques

5.1.1 Solution idéale dans le solide

Pour un constituant chimique donné, le potentiel chimique s'écrit :

$$\mu = \mu^0 + RT \cdot \ln(a) \quad (5.4)$$

avec R la constante des gaz parfaits, a l'activité du constituant et μ^0 le potentiel chimique à l'état de référence (lorsque $a = 1$).

Par convention, nous considérons pour un minéral l'état de référence lorsqu'il est présent à l'état pur, c'est-à-dire pour une fraction molaire $X = 1$.

En première analyse, la solution solide olivine a un comportement proche d'un comportement idéal. La formule structurale de l'olivine s'écrivant $(\text{Fe,Mg})_2\text{SiO}_4$, ce qui donne les deux pôles forstérite Mg_2SiO_4 et fayalite Fe_2SiO_4 , Fe et Mg occupant des sites octaédriques. L'activité de la forstérite et de la fayalite dans l'olivine s'écrit donc :

$$a = X^2 \quad (5.5)$$

ainsi, la relation (5.4) nous donne bien $\mu = \mu^0$ lorsque $X = 1$. Et nous écrivons finalement les expressions des potentiels chimiques pour la phase solide pour Fo et Fa :

$$\begin{cases} \mu_{Fo,s} = \mu_{Fo,s}^0 + 2RT \cdot \ln(X_{Fo,s}) \\ \mu_{Fa,s} = \mu_{Fa,s}^0 + 2RT \cdot \ln(X_{Fa,s}) \end{cases} \quad (5.6)$$

5.2. EXISTENCE DE SOLUTIONS

5.1.2 Solution idéale dans le liquide

Pour la phase liquide, le potentiel chimique s'exprime également par la relation (5.4).

En solution aqueuse, le solvant qui est l'eau (H₂O) est l'espèce dominante : on ne pourrait pas dissoudre un élément chimique dans de l'eau jusqu'à arriver à 100% de cet élément, on arrive à saturation de l'eau bien avant. L'activité n'est donc pas prise égale à la fraction molaire de l'élément, par convention, l'état de référence pour un élément chimique donné dans une solution aqueuse est considéré lorsque sa concentration est égale à 1 mol/kg_{solvant}, l'activité est donc égale à la concentration en mol/kg_{H₂O}.

Pour un liquide magmatique en revanche, la concentration du solvant peut varier significativement, le passage d'un pôle pur à un autre est possible. Ainsi, l'activité est prise égale à la fraction molaire du constituant. Dans le cas idéal, pour les constituants Mg₂SiO₄ ou Fe₂SiO₄ dans le liquide, l'activité s'écrit :

$$a = X^2 \quad (5.7)$$

(pas de multiplicité de site car pas de structure cristalline dans le liquide).

Et nous avons alors pour la phase liquide :

$$\begin{cases} \mu_{Fo,l} &= \mu_{Fo,l}^0 + 2RT \cdot \ln(X_{Fo,l}) \\ \mu_{Fa,s} &= \mu_{Fa,s}^0 + 2RT \cdot \ln(X_{Fa,l}) \end{cases} \quad (5.8)$$

5.1.3 Cas non idéal

Ghiorso applique un *modèle de solution régulière* aux liquides magmatiques, des termes d'*interaction en excès* entre les espèces chimiques interviennent (Ghiorso and Carmichael [1980]; Ghiorso et al. [1983]; Ghiorso [1987]; Ghiorso and Sack [1995]) et les relations (5.8) deviennent :

$$\begin{aligned} \mu_{Fo,l} &= \mu_{Fo,l}^0 + RT \cdot \ln(X_{Fo,l}) && +W_{Fo,Fa} \cdot X_{Fa,l} && +W_{Fo,SiO_2} \cdot X_{SiO_2,l} \\ &&& -W_{Fo,Fa} \cdot X_{Fo,l} \cdot X_{Fa,l} && -W_{Fo,SiO_2} \cdot X_{Fo,l} \cdot X_{SiO_2,l} \\ &&& && -W_{Fa,SiO_2} \cdot X_{Fa,l} \cdot X_{SiO_2,l} \\ \mu_{Fa,l} &= \mu_{Fa,l}^0 + RT \cdot \ln(X_{Fa,l}) && +W_{Fa,Fo} \cdot X_{Fo,l} && +W_{Fa,SiO_2} \cdot X_{SiO_2,l} \\ &&& -W_{Fa,Fo} \cdot X_{Fa,l} \cdot X_{Fo,l} && -W_{Fa,SiO_2} \cdot X_{Fa,l} \cdot X_{SiO_2,l} \\ &&& && -W_{Fo,SiO_2} \cdot X_{Fo,l} \cdot X_{SiO_2,l} \end{aligned}$$

avec $W_{i,j}$ constantes d'interaction en excès entre le constituant i et le constituant j .

Pour une solution non idéale dans le solide, nous aurons des relations similaires avec des termes d'interaction en excès.

La résolution des équations (5.3) devient plus compliquée, on ne connaît pas de solution analytique et on a besoin donc de recourir à une **résolution numérique**, par exemple par la méthode de Newton-Raphson.

5.2 Existence de solutions

Les trois constituants chimiques présents dans la solution sont la fayalite (Fe₂SiO₄), la forstérite (Mg₂SiO₄) et la silice (SiO₂) qui est le solvant ici. A l'équilibre chimique, les équations à notre

disposition sont donc les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_{Fo,s} = \mu_{Fo,l} \\ \mu_{Fa,s} = \mu_{Fa,l} \\ X_{Fo,s} + X_{Fa,s} = 1 \\ X_{Fo,l} + X_{Fa,l} = 1 - X_{SiO_2,l} \end{array} \right. \quad (5.9)$$

ce qui nous fournit 4 équations à 5 inconnues qui sont les fractions molaires, d'où un degré de liberté en plus par rapport au magma binaire où il n'y aurait pas de solvant (SiO_2 ici). Plusieurs solutions deviennent possibles à T donnée (chaque valeur de SiO_2 nous donne une solution particulière pour $X_{Fo,s}$, $X_{Fa,s}$, $X_{Fo,l}$ et $X_{Fa,l}$), on obtient donc une courbe de solutions : $X_{Fa,l}$ en fonction de $X_{Fa,s}$ et $X_{Fo,l}$ en fonction de $X_{Fo,s}$.

Ainsi par analogie avec les solutions aqueuses, nous appellerons cette solution "isotherme".

Remarques :

- Nous devons garder $X_{SiO_2,l}$ comme degré de liberté. En effet, si l'on se fixe l'inconnue $X_{SiO_2,l}$, on obtient **un seul point d'équilibre, solution** du système (5.9). En pratique, la variation de $X_{SiO_2,l}$ se fait lors des échanges chimiques entre l'olivine et le magma silicaté.
- A tout moment, $X_{Fo,l}$ et $X_{Fa,l}$ doivent vérifier la condition :

$$X_{Fo,l} + X_{Fa,l} \leq 1 \quad (5.10)$$

dans ce cas : $X_{SiO_2,l} = 1 - (X_{Fo,l} + X_{Fa,l})$.

- La forstérite a une température de fusion (T_{Fo}^{fus}) plus élevée que celle de la fayalite (T_{Fa}^{fus}). Sur la figure 5.1, nous traçons un exemple de diagramme de phase pour le système binaire forstérite-fayalite en s'inspirant de la représentation faite par Taylor [1982]. D'après ce diagramme, la température T doit être choisie inférieure à T_{Fo}^{fus} , sinon tout le magma serait liquide et la phase solide n'existerait pas. De même T doit être supérieure à T_{Fa}^{fus} , sinon tout le magma serait solide. T doit donc vérifier :

$$T_{Fa}^{fus} < T < T_{Fo}^{fus} \quad (5.11)$$

5.3. RELATION ENTRE LES FRACTIONS MOLAIRES X_{Fo}^L ET X_{Fo}^S

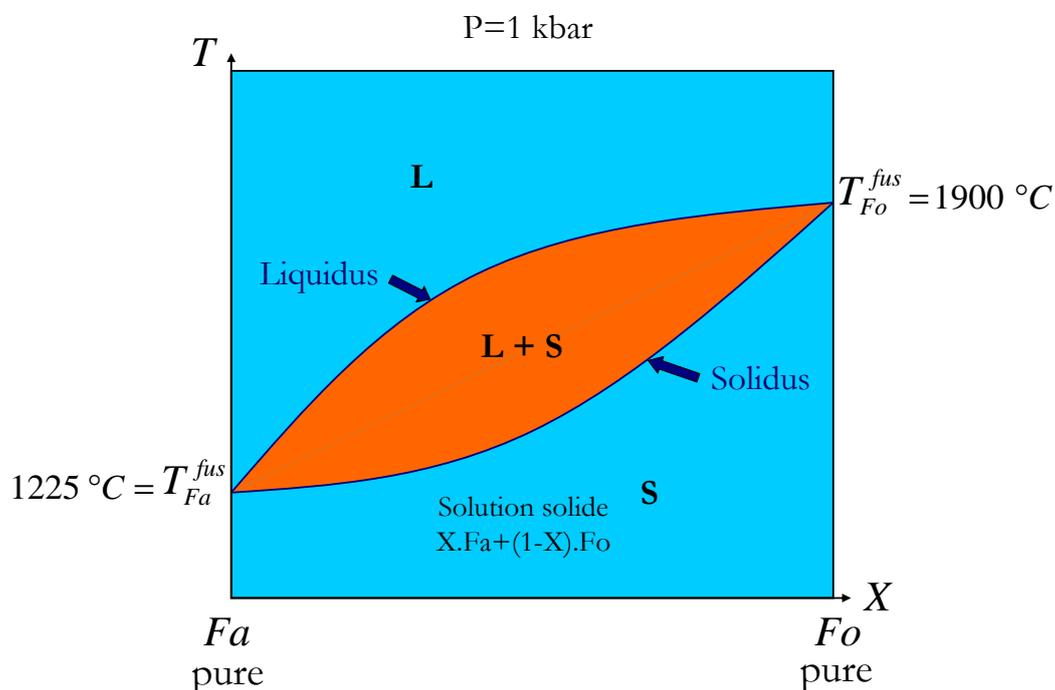


FIGURE 5.1 – Diagramme binaire (X,T) à pression P donnée. — Pour $T > T_{Fo}^{fus}$, seule la phase liquide peut exister et pour $T < T_{Fa}^{fus}$, seule la phase solide existera.

Nous cherchons dans les sections qui suivent une solution du système (5.9).
 Pour la suite de ce chapitre, nous noterons les indices différemment, par exemple X_{Fo}^l au lieu de $X_{Fo,l}$.

5.3 Relation entre les fractions molaires X_{Fo}^l et X_{Fo}^s

Nous injectons les expressions des potentiels chimiques (5.6) et (5.8) dans l'équation (5.3) pour Fo, qui exprime l'équilibre de Fo entre le fluide et le solide, ce qui donne :

$$X_{Fo}^l = \exp\left(\frac{\mu_{Fo,s}^0 - \mu_{Fo,l}^0}{2RT}\right) \cdot X_{Fo}^s$$

les potentiels chimiques à l'état de référence dépendent des conditions de pression et de température, posons :

$$K_{Fo} = K(Fo, P, T) = \exp\left(\frac{\mu_{Fo,s}^0 - \mu_{Fo,l}^0}{2RT}\right) \quad (5.12)$$

et en faisant de même pour Fa, on écrit alors :

$$\begin{cases} X_{Fo}^l = K_{Fo} \cdot X_{Fo}^s \\ X_{Fa}^l = K_{Fa} \cdot X_{Fa}^s \end{cases} \quad (5.13)$$

Nous obtenons ainsi des relations simples liant les fractions molaires dans le liquide et dans le solide.

Nous allons à présent chercher la fonction isotherme. Nous prenons l'exemple de la forstérite, le calcul étant le même pour la fayalite.

5.4 Passage aux concentrations volumiques

Comme nous l'avons énoncé plus haut, nous nous intéressons à l'échange chimique entre l'olivine (OL) -les deux pôles étant la forstérite et la fayalite- et le liquide magmatique. Nous cherchons à exprimer l'équilibre sous la forme d'une isotherme $c_{Fo}^l = g(c_{Fo}^s)$ où l désigne le liquide et s le solide, avec c_{Fo}^s la concentration volumique de Fo dans le solide et c_{Fo}^l la concentration volumique de Fo dans le liquide **en kg/m³**.

5.4.1 Calcul de c_{Fo}^l en fonction de X_{Fo}^s

Nous considérons une quantité de magma composé, comme présenté en introduction de ce chapitre, d'une phase solide de volume V_{OL} et d'une phase liquide qui occupe un volume V_l .

Nous supposons que ce liquide est une solution contenant de la forstérite, de la fayalite et de la silice, d'où :

$$V_l = V_{Fo}^l + V_{Fa}^l + V_{SiO_2}^l \quad (5.14)$$

où V_{Fo}^l , V_{Fa}^l et $V_{SiO_2}^l$ sont respectivement les volumes de Fo, Fa et SiO₂ présents dans le liquide.

Nous prenons l'exemple de la forstérite. La concentration de Fo présente dans ce liquide **en masse par unité de volume du liquide** s'écrit alors :

$$c_{Fo}^l = \frac{m_{Fo}^l}{V_l} \quad (5.15)$$

m_{Fo}^l étant la masse de Fo dans le liquide, c_{Fo}^l est en kg.m⁻³.

Par ailleurs, on peut écrire :

$$\begin{cases} V_{Fo}^l &= n_{Fo}^l \cdot V_{Fo}^l \\ V_{Fa}^l &= n_{Fa}^l \cdot V_{Fa}^l \\ V_{SiO_2}^l &= n_{SiO_2}^l \cdot V_{SiO_2}^l \end{cases}$$

avec V_{Fo}^l , V_{Fa}^l et $V_{SiO_2}^l$ respectivement les volumes molaires de Fo, Fa et SiO₂ dans le liquide et n_{Fo}^l , n_{Fa}^l et $n_{SiO_2}^l$ respectivement les nombres de moles de Fo, Fa et SiO₂ présents dans le liquide.

L'équation (5.14) devient alors :

$$V_l = n_{Fo}^l \cdot V_{Fo}^l + n_{Fa}^l \cdot V_{Fa}^l + n_{SiO_2}^l \cdot V_{SiO_2}^l \quad (5.16)$$

De plus, la masse de Fo dans le liquide peut s'écrire :

$$m_{Fo}^l = n_{Fo}^l \cdot M_{Fo} \quad (5.17)$$

5.4. PASSAGE AUX CONCENTRATIONS VOLUMIQUES

où M_{Fo} est la masse molaire de Fo,

et la fraction molaire dans le liquide s'écrit par exemple pour Fo :

$$X_{Fo}^l = \frac{n_{Fo}^l}{n_{Fo}^l + n_{Fa}^l + n_{SiO_2}^l} \quad (5.18)$$

En considérant les relations (5.16), (5.17) et (5.18), l'expression (5.15) peut s'écrire :

$$c_{Fo}^l = \frac{X_{Fo}^l \cdot M_{Fo}}{X_{Fo}^l \cdot V_{Fo}^l + X_{Fa}^l \cdot V_{Fa}^l + X_{SiO_2}^l \cdot V_{SiO_2}^l} \quad (5.19)$$

Nous écrivons X_{Fo}^l , X_{Fa}^l et $X_{SiO_2}^l$ en fonction de X_{Fo}^s en utilisant les relations (5.3) et (5.9) :

$$\begin{cases} X_{Fo}^l &= K_{Fo} \cdot X_{Fo}^s \\ X_{Fa}^l &= K_{Fa} \cdot (1 - X_{Fo}^s) \\ X_{SiO_2}^l &= 1 - K_{Fo} \cdot X_{Fo}^s - K_{Fa} \cdot (1 - X_{Fo}^s) \end{cases} \quad (5.20)$$

En injectant ces grandeurs dans (5.19), nous obtenons après calcul :

$$c_{Fo}^l = \frac{\alpha_1 \cdot X_{Fo}^s}{\alpha_2 \cdot X_{Fo}^s + \alpha_3} \quad (5.21)$$

$$\text{avec : } \begin{cases} \alpha_1 &= K_{Fo} \cdot M_{Fo} \\ \alpha_2 &= K_{Fa} \cdot (V_{SiO_2}^l - V_{Fa}^l) - K_{Fo} \cdot (V_{SiO_2}^l + V_{Fo}^l) \\ \alpha_3 &= K_{Fo} \cdot V_{Fo}^l + K_{Fa} \cdot V_{Fa}^l + (1 - K_{Fa}) \cdot V_{SiO_2}^l \end{cases} \quad (5.22)$$

5.4.2 Calcul de X_{Fo}^s en fonction de c_{Fo}^s

Pour la phase solide, solution comportant uniquement de la forstérite et de la fayalite, on définit comme pour la phase liquide, la concentration en Fo dans l'olivine :

$$c_{Fo}^s = \frac{m_{Fo}^s}{V_{OL}} \quad (5.23)$$

avec V_{OL} le volume d'olivine présente dans le magma,

$$V_{OL} = V_{Fo}^s + V_{Fa}^s \quad (5.24)$$

où V_{Fo}^s et V_{Fa}^s sont respectivement les volumes de Fo et Fa présents dans le solide.

Comme dans le liquide, la masse de Fo dans le solide s'écrit :

$$m_{Fo}^s = n_{Fo}^s \cdot M_{Fo} \quad (5.25)$$

avec n_{Fo}^s nombre de moles de Fo présente dans l'olivine et M_{Fo} la masse molaire de Fo.

En refaisant les mêmes calculs que pour la phase liquide, pour les volumes de Fo et Fa et leur fractions molaires dans le solide (cf. (5.16) et (5.18)), la relation (5.23) devient :

$$c_{Fo}^s = \frac{X_{Fo}^s \cdot M_{Fo}}{X_{Fo}^s \cdot V_{Fo}^s + (1 - X_{Fo}^s) \cdot V_{Fa}^s} \quad (5.26)$$

avec : V_{Fo}^s et V_{Fa}^s respectivement les volumes molaires de Fo et de Fa dans le l'olivine.

Nous obtenons ainsi X_{Fo}^s en fonction de c_{Fo}^s :

$$X_{Fo}^s = \frac{c_{Fo}^s \cdot V_{Fa}^s}{M_{Fo} - c_{Fo}^s \cdot (V_{Fo}^s - V_{Fa}^s)} \quad (5.27)$$

5.5 Fonction isotherme

5.5.1 Expression de la fonction isotherme : $c_{Fo}^l = g(c_{Fo}^s)$

En remplaçant dans (5.21) les termes X_{Fo}^s par leur expression dans (5.27), nous obtenons finalement la *fonction isotherme magmatique* :

$$c_{Fo}^l = \frac{\beta_1 \cdot c_{Fo}^s}{\beta_2 \cdot c_{Fo}^s + \beta_3} = g_1(c_{Fo}^s) \quad (5.28)$$

$$\text{avec : } \begin{cases} \beta_1 &= \alpha_1 \cdot V_{Fa}^s \\ \beta_2 &= \alpha_2 \cdot V_{Fa}^s - \alpha_3 \cdot (V_{Fo}^s - V_{Fa}^s) \\ \beta_3 &= \alpha_3 \cdot M_{Fo} \end{cases} \quad (5.29)$$

les coefficients β_i dépendant des paramètres K_{Fo} , K_{Fa} , M_{Fo} , V_{Fo}^l , V_{Fa}^l , $V_{SiO_2}^l$, V_{Fo}^s et V_{Fa}^s ; K_{Fo} dépendant de $\mu_{Fo,s}^0$ et $\mu_{Fo,l}^0$ et K_{Fa} dépendant de $\mu_{Fa,s}^0$ et $\mu_{Fa,l}^0$; en plus de la dépendance de toutes ces grandeurs de la pression P et de la température T .

L'unité des μ^0 est le $J \cdot mol^{-1}$; R en $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$; T en K ; M_i en $kg \cdot mol^{-1}$; V_i^l et V_i^s en $J \cdot Pa^{-1} \cdot mol^{-1} = 10^5 J \cdot bar^{-1} \cdot mol^{-1}$.

De même, nous obtenons pour la fayalite :

$$c_{Fa}^l = \frac{\gamma_1 \cdot c_{Fa}^s}{\gamma_2 \cdot c_{Fa}^s + \gamma_3} = g_2(c_{Fa}^s) \quad (5.30)$$

Les coefficients γ_i ayant des expressions pour Fa analogues à celles des β_i pour Fo.

Remarque :

Si on raisonne en mol/m^3 : $c_{Fo}^s = \frac{n_{Fo}^s}{V_{OL}}$, alors le terme M_{Fo} est supprimé des relations (5.19) et (5.26), et donc du reste des relations sans aucune difficulté supplémentaire.

5.5.2 Tracé des courbes isothermes

Les températures régnant dans une chambre magmatique sont de l'ordre de 800 à 1800 °C, et les pressions sont de l'ordre de quelques kilobars (cf. section 1.2.1). Nous allons prendre l'exemple de $P=1$ kbar.

5.5. FONCTION ISOTHERME

Sachant qu'à $P=1$ kbar, $T_{Fo}^{fus}=1900$ °C et $T_{Fa}^{fus}=1225$ °C, nous prenons par exemple la valeur $T=1500$ °C afin de vérifier la condition (5.11) : $T_{Fa}^{fus} < T < T_{Fo}^{fus}$.

Nous devons aussi vérifier la condition (5.10) : $X_{Fo}^l + X_{Fa}^l \leq 1$. Ceci correspond à vérifier (cf. relations 5.20) :

$$K_{Fo} \cdot X_{Fo}^s + K_{Fa} \cdot (1 - X_{Fo}^s) < 1$$

K_{Fa} étant supérieur à K_{Fo} , ceci nous donne :

$$X_{Fo}^s > \frac{K_{Fa} - 1}{K_{Fa} - K_{Fo}} \quad (5.31)$$

Pour les conditions de température et de pression choisies, nous obtenons la condition : $X_{Fo}^s > 0.32$. Nous traçons les courbes de X_{Fo}^l , de la somme $X_{Fo}^l + X_{Fa}^l$ et de $X_{SiO_2}^l$ en fonction de X_{Fo}^s en utilisant les relations (5.20) et nous faisons varier X_{Fo}^s sur l'intervalle $[0.42, 1]$ (figure 5.2).

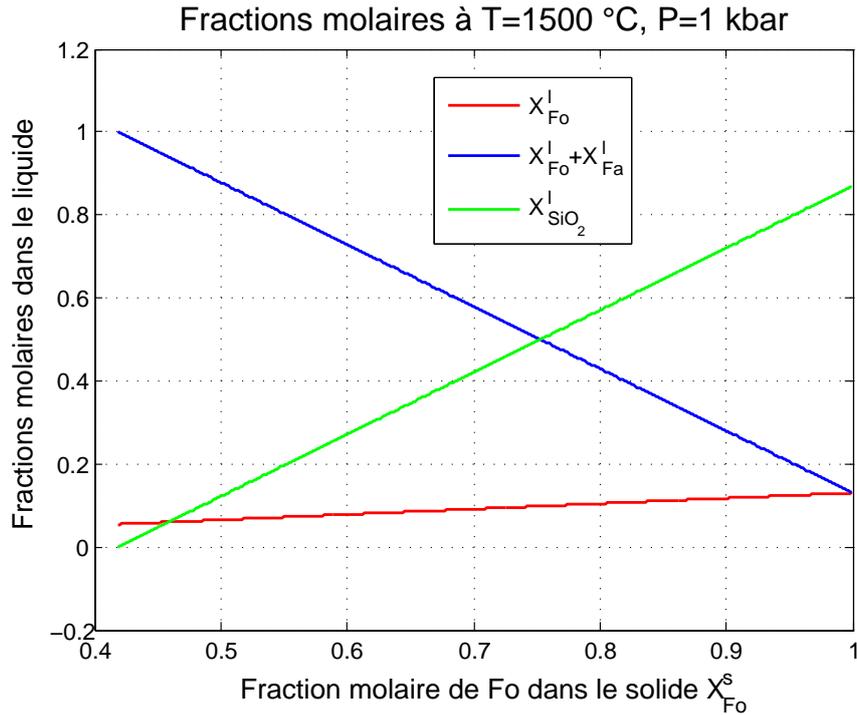


FIGURE 5.2 – Tracé des différentes fractions molaires dans le liquide en fonction de la fraction molaire X_{Fo}^s sur l'intervalle $[0.42, 1]$ pour $T=1500$ °C et $P=1$ kbar. — $[0.42, 1]$ représente l'intervalle de X_{Fo}^s qui permet de vérifier la condition (5.10)

Pour tracer la courbe isotherme, nous utilisons la relation (5.26) liant la concentration c_{Fo}^s à X_{Fo}^s puis celle liant c_{Fo}^l à c_{Fo}^s (l'isotherme (5.28)) en nous restreignant alors à l'intervalle $[0.42, 1]$ pour X_{Fo}^s .

Nous prenons aussi pour ce tracé, les valeurs adimensionnées des concentrations : $c^{s*} = \frac{c^s}{\rho_s}$ et

$$c^{l*} = \frac{c^l}{\rho^l} \text{ (figure 5.3).}$$

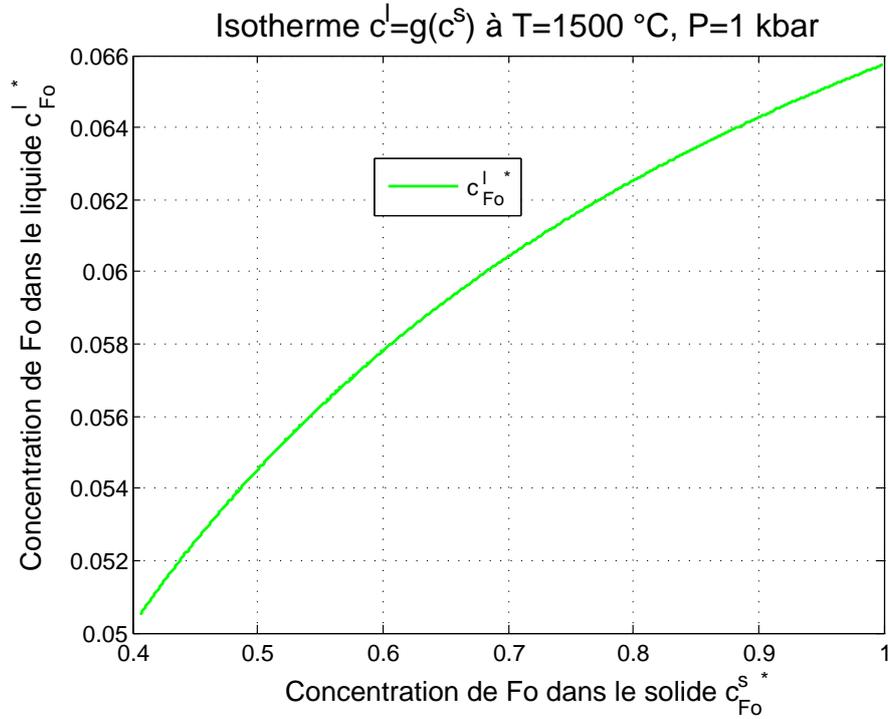


FIGURE 5.3 – Tracé de la courbe isotherme $c_{Fo}^l = g(c_{Fo}^s)$ pour X_{Fo}^s variant sur l'intervalle de validité [0.42, 1] pour $T=1500\text{ °C}$ et $P=1\text{ kbar}$.

Pour le système que nous avons choisi (Fo, Fa et $\text{SiO}_2(l)$), et avec les conditions de pression et de température choisis, nous obtenons donc une courbe isotherme légèrement concave avec des pentes de la tangente à cette courbe allant de 0.05 à 0.01.

5.6 Passage aux fractions molaires normalisées

La fonction isotherme peut aussi exprimer la relation entre les fractions molaires normalisées dans le liquide et dans le solide. Posons :

$$Y = \frac{X_{Fo}^s}{X_{Fo}^s + X_{Fa}^s} (= X_{Fo}^s) \quad \text{et} \quad Z = \frac{X_{Fo}^l}{X_{Fo}^l + X_{Fa}^l} \quad (5.32)$$

En considérant les relations (5.13), nous obtenons :

$$\frac{Y}{1-Y} = K(P, T) \cdot \frac{Z}{1-Z} \quad (5.33)$$

avec $K(P, T) = \frac{K_{Fa}}{K_{Fo}}$, d'où après calcul :

5.7. APPLICATION AUX SYSTÈMES OUVERT ET FERMÉ

$$Z = \frac{Y}{Y + K \cdot (1 - Y)} = h(Y) \quad (5.34)$$

En respectant la condition (5.10), nous obtenons la courbe suivante :

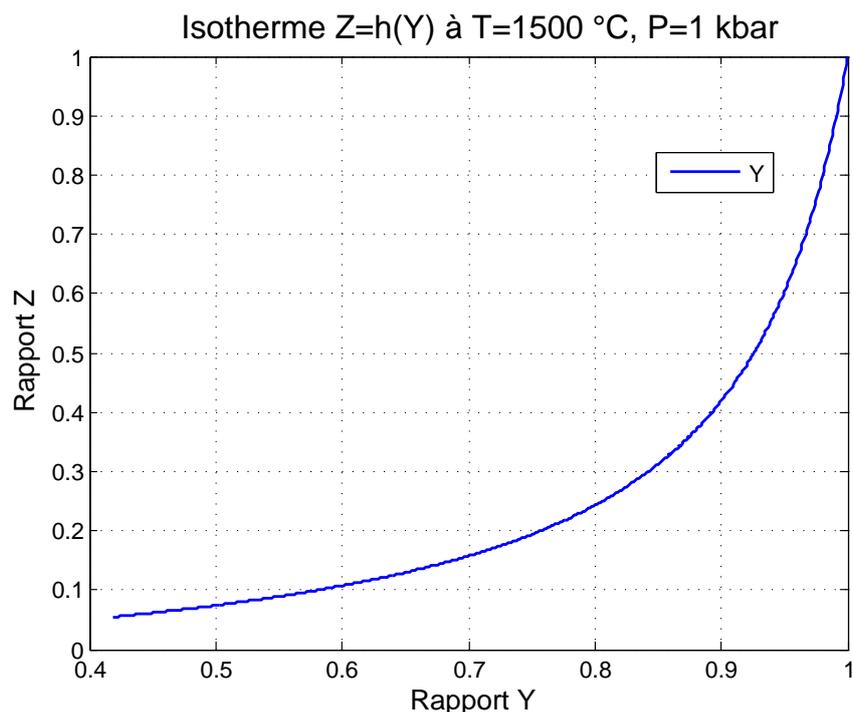


FIGURE 5.4 – Tracé de la courbe isotherme $Z = h(Y)$ pour $X_{F_o}^s$ variant sur l'intervalle $[0.42, 1]$ pour $T = 1500 \text{ °C}$ et $P = 1 \text{ kbar}$.

La courbe isotherme liant Z à Y est différente de la courbe liant c_l à c_s , elle est convexe, avec des pentes variant de 0.23 à 12.

5.7 Application aux systèmes ouvert et fermé

5.7.1 Système ouvert

Pour un système ouvert, la courbe isotherme établie dans ce chapitre peut être directement appliquée. On pourra considérer une colonne poreuse (roche poreuse) dans laquelle circule un magma. Le solide réagit avec le liquide et l'équilibre chimique s'exprime par la fonction isotherme. Mais ceci restera une perspective pour de futurs travaux.

5.7.2 Système fermé

En système fermé, l'ajout d'un solvant (SiO_2 ou autre), impliquerait l'ajout d'un nouveau constituant dans la phase solide, ce qui apporterait une difficulté supplémentaire à notre problème : il

faudrait en effet ajouter une autre équation à notre système d'EDPs (6.15) pour intégrer ce nouveau constituant qui occuperait une concentration non nulle dans le magma et dans le solide.

De plus, l'isotherme dépendra de plusieurs constituants chimiques, l'expression $c_l - g(c_s)$ dans les équations de bilan pourra être remplacée par une expression qui exprime le déséquilibre chimique, par exemple un $\Delta\mu$ (qui sera nul à l'équilibre).

Dans le présent travail, nous nous restreindrons à un constituant indépendant, la généralisation à plusieurs constituants en système ouvert ou fermé pourrait faire l'objet d'un travail futur. Nous garderons alors l'expression $c_l - g(c_s)$ afin d'évaluer le comportement qualitatif du système en supposant une telle formulation.

De nombreux travaux ont été effectués sur les lois de partage entre composition des solides et composition des fluides aqueux en équilibre dans différents systèmes faisant appel à diverses équations d'état, nous citons par exemple les travaux de [Rabinowicz et al. \[1995\]](#).

Sans rentrer dans le détail des écritures, nous ne retenons ici que le caractère très général de non linéarité de la fonction de partage à l'équilibre g . Nous pourrions ainsi prendre une isotherme de forme convexe ou concave, ou proposer d'autres profils déduits de la littérature. Nous citons par exemple les diagrammes de composition gaz/solide (en métallurgie) ([Rist and Bonnard \[1963\]](#)) ou les diagrammes de composition liquide/solide proposés par [Korzhinskii \[1970\]](#) ou [Fonteilles \[1978\]](#) pour décrire les mécanismes de métasomatisme. Ces diagrammes montrent des profils en escalier, dont nous présentons deux exemples en figure 5.5, où les paliers horizontaux représentent des domaines où deux phases solides sont en équilibre (pour la composition du plateau) et les variations de c_l à c_s constant représentent les phases à composition définie (paliers verticaux), cette dernière situation peut être rapprochée aux lacunes de miscibilité. Nous simplifierons ces profils en choisissant des profils linéaires, convexes, concaves ou avec un changement de concavité comme proposé dans [Guy \[1979\]](#); [1984]; [1989]; [1993] (cf. figure 5.6).

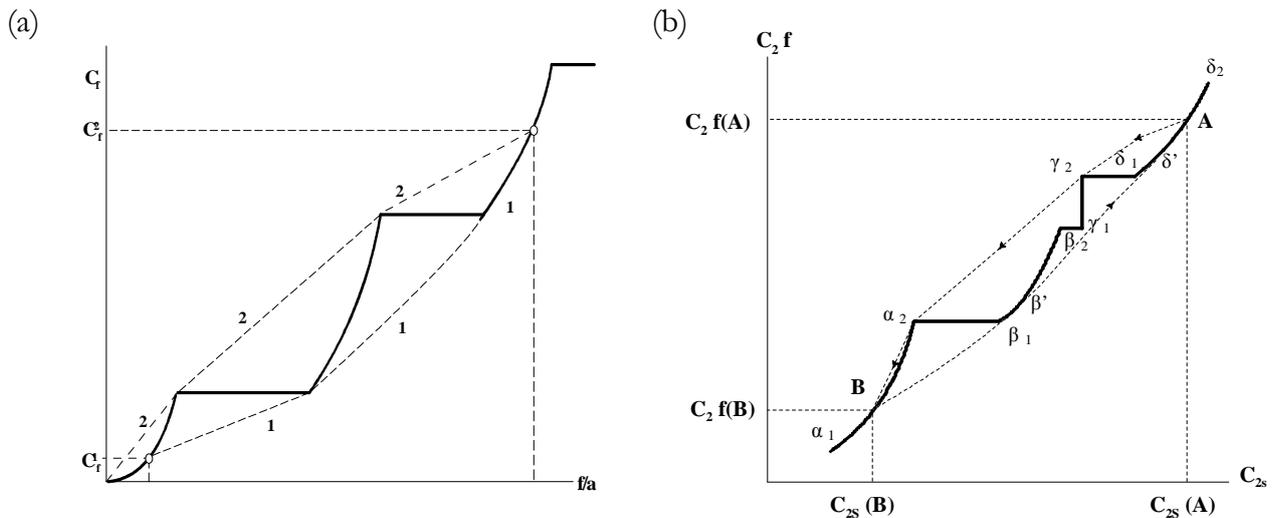


FIGURE 5.5 – Profils tirés de la littérature pour la fonction isotherme $c_l - g(c_s)$. — (a) [Korzhinskii \[1970\]](#), (b) [Fonteilles \[1978\]](#).

5.8. CONCLUSION

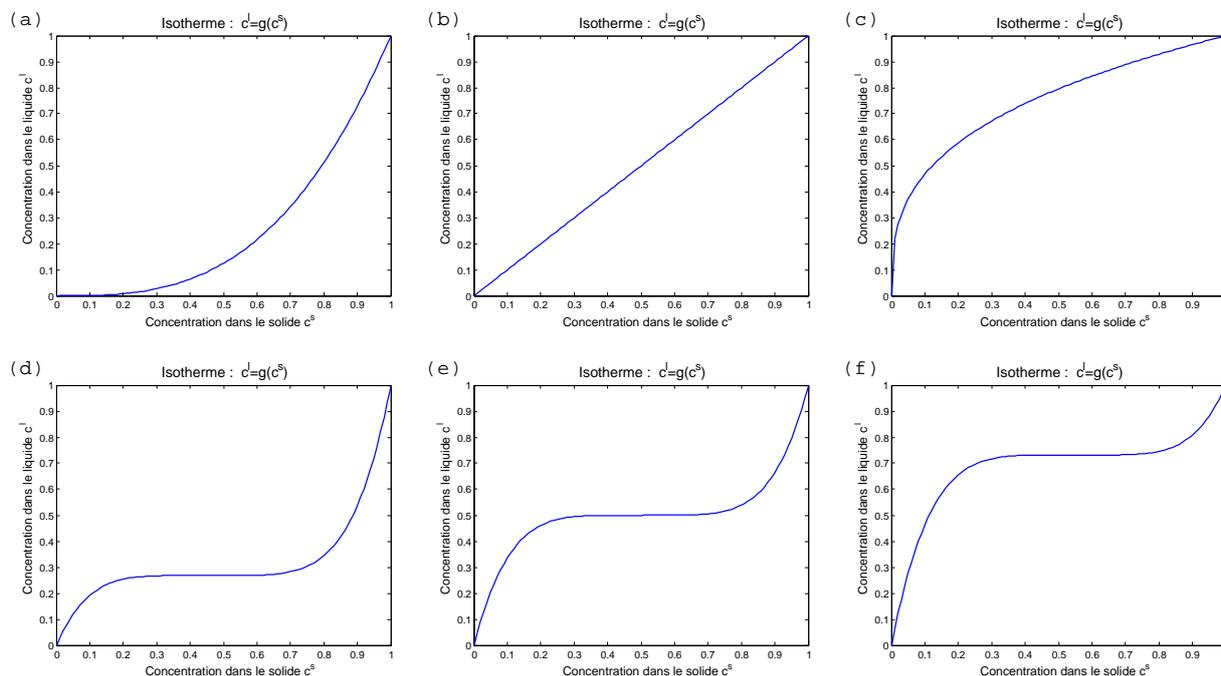


FIGURE 5.6 – Quelques profils types pour la fonction isotherme $c_l = g(c_s)$ (après adimensionnement). — (a) Isotherme convexe, (b) Linéaire, (c) Concave ; (d),(e) et (f) : Isothermes avec changement de concavité.

Remarque :

Nous nous permettons dans notre modèle de ne pas prendre la température T comme paramètre alors même que nous parlons de gradients thermiques responsables de la cristallisation. Dans notre effort de capturer l'essentiel du comportement qualitatif des systèmes physiques envisagés en un minimum d'équations, nous avons en effet décidé de ne pas écrire de bilan thermique et de ne pas rajouter la température comme variable. Cela a un certain nombre de conséquences sur le rôle de la température. En effet, au cours de l'évolution du système et de la cristallisation progressive du liquide marquée par l'augmentation du paramètre p_s , et la baisse de la température.

Ainsi la loi de partage à l'équilibre que nous avons écrite $c_l = g(c_s)$ est "oblique" sur la température, et ne mérite certainement pas la dénomination d'"isotherme" emprunté aux échanges entre solides et solutions aqueuses.

Une complication/amélioration du présent modèle serait ainsi de paramétrer la fonction $g(c_s)$ par la proportion de solide p_s , simulant une variation avec T . Pour une évolution particulière donnée, cela correspondra aussi à une corrélation entre les variations de p_s et de c_s , ce qui ne change pas *in fine* le nombre de degrés de liberté. Ce qui nous paraît important au niveau qualitatif est d'insister sur la non-linéarité de la fonction g .

5.8 Conclusion

Nous nous intéressons au cas d'un seul constituant chimique indépendant.

Le domaine d'étude que nous avons défini dans les chapitres précédents et qui constitue notre centre d'intérêt est un domaine fermé. Pour ce domaine, comme nous l'avons dit dans la section 5.7.2, **nous ne pourrions pas utiliser directement le raisonnement établi dans le présent chapitre** pour trouver la fonction isotherme. Nous choisirons alors des profils d'isothermes parmi celles déduites de la littérature et représentées sur la figure 5.6. On pourrait en perspectives envisager d'adapter notre modèle au cas d'un système ouvert en modifiant les conditions aux bords de la colonne magmatique et en reconsidérant les lois de vitesse relative liquide/solide.

Les profils d'isothermes représentés sur la figure 5.6 sont établis pour un constituant chimique donné, elles partent du point (0,0) pour arriver au point (1,1). Ces isothermes représentent les concentrations dans le liquide et dans le solide à l'état d'équilibre entre les deux phases; si la courbe se trouve au-dessus de la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$, alors on a $c_l > c_s$, ce qui signifie que le constituant chimique correspondant se retrouvera, à l'équilibre, préférentiellement dans le liquide plutôt que dans le solide, de même si la courbe est au-dessus de la première bissectrice, le constituant chimique se retrouvera, à l'équilibre, préférentiellement dans le solide.

Nous pouvons comparer ce raisonnement au cas des éléments en trace où à l'équilibre nous avons la loi de distribution de Nernst (relation (4.6)) : $c_l = \frac{1}{K_i^j} \cdot c_s$, on dit que l'élément chimique j est *compatible* (avec le minéral i) lorsque le coefficient de partage K_i^j est supérieur à 1 (on a alors $c_l < c_s$) et cet élément est *incompatible* lorsque $K_i^j < 1$ (on a alors $c_l > c_s$).

Nous montrerons dans le chapitre 11 qu'une analyse graphique sur la courbe isotherme permet de prévoir, sous certaines conditions, les concentrations existant dans une chambre magmatique après sa solidification totale.

Chapitre 6

Adimensionnement et formulation du système d'équations aux dérivées partielles complet à résoudre

Après avoir établi les systèmes d'équations (3.6) et (4.15), dépendent d'un nombre important de paramètres, l'adimensionnement est une technique de changement de variables qui permet de réduire le nombre de paramètres des EDPs à un nombre limité de constantes sans dimension. Ces constantes indiquent les rapports de force entre les différents phénomènes de base et rendent ainsi plus simple l'analyse des EDPs.

Nous verrons aussi pour notre cas qu'après discrétisation des EDPs, l'adimensionnement permet d'obtenir des pas de temps et d'espace indépendants des grandeurs physiques mais dépendant uniquement des schémas numériques choisis.

Nous allons dans ce chapitre adimensionner les deux systèmes d'équations, puis nous en déduirons le système final d'EDPs à résoudre. Nous ferons apparaître deux nombres adimensionnels indépendants qui mesurent le rapport entre les vitesses des trois phénomènes moteurs considérés : l'advection, la solidification et les réactions chimiques.

6.1 Adimensionnement des équations de cristallisation avec sédimentation

Nous considérons les équations de cristallisation sédimentation (3.6) et nous opérons les changements de variables suivants (cf. relations (3.9) et (3.13) pour v_s^* et v_l^*) :

$$t^* = \frac{U_s}{L}t, \quad x^* = \frac{x}{L}, \quad v_s^* = (1 - p_s)^e, \quad v_l^* = p_s(1 - p_s)^{e-1}, \quad q_s^* = \frac{q_s}{q_{s0}} \quad (6.1)$$

avec :

L : la hauteur de la chambre magmatique,

q_{s0} : la valeur maximale de la vitesse de solidification, de sorte que $q_s^* \in [0, 1]$,

CHAPITRE 6. ADIMENSIONNEMENT ET FORMULATION DU SYSTÈME D'ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES COMPLET À RÉSOUDRE

U_s : la vitesse de Stokes pour un cristal sphérique isolé (cf. relation (3.7)),

e : exposant dans la loi de v_s , **choisie égale à 5** (cf. section 3.3.2).

Nous avons alors : x^* , v_s^* , v_l^* et $q_s^* \in [0, 1]$ et lorsque $t^* = 1$, $t = \frac{L}{U_s}$.

Si nous prenons une valeur de $L = 1000$ m et la vitesse de Stokes typique $U_s = 10^{-7}$ m.s⁻¹ (cf. 3.10), alors nous obtenons :

$$t^* = 1 \text{ correspond à } t = 10^{10} \text{ s} \cong 317 \text{ ans} \quad (6.2)$$

Ce qui signifie que pour une chambre magmatique de hauteur $L = 1000$ m, il faudrait environ 317 ans à un cristal chutant à partir du sommet, à la vitesse $U_s = 10^{-7}$ m.s⁻¹, pour atteindre le fond de la chambre.

Le changement de variables ainsi opéré permet alors d'obtenir les équations normalisées :

$$\begin{cases} \frac{\partial p_s}{\partial t^*} + \frac{\partial(v_s^* \cdot p_s)}{\partial x^*} = A \cdot q_s^* \\ \frac{\partial p_l}{\partial t^*} + \frac{\partial(v_l^* \cdot p_l)}{\partial x^*} = -A \cdot q_s^* \end{cases} \quad (6.3)$$

avec A nombre adimensionnel :

$$A = \frac{L \cdot q_{s0}}{U_s} \quad (6.4)$$

En notant :

$$t_{advection} = \frac{L}{U_s} \quad \text{et} \quad t_{solidification} = \frac{1}{q_{s0}} \quad (6.5)$$

avec $t_{advection}$ le temps de parcours de la distance L et $t_{solidification}$ le temps caractéristique pour la solidification de la chambre magmatique, le nombre A s'écrit :

$$A = \frac{t_{advection}}{t_{solidification}} \quad (6.6)$$

On peut aussi le voir comme le rapport des vitesses :

$$A = \frac{v_{solidification}}{v_{advection}} \quad (6.7)$$

6.2. ADIMENSIONNEMENT DES ÉQUATIONS DU TRANSPORT RÉACTIF

avec $v_{solidification} = L \cdot q_{s0}$ la vitesse de sédimentation des solides et $v_{advection} = U_s$ la vitesse de solidification de la chambre magmatique de hauteur L .

A symbolise donc la rapidité relative des phénomènes advectif et de solidification dans la chambre magmatique de hauteur L . Par exemple si $A < 1$, alors l'advection se fait plus vite que la solidification et à une hauteur x donnée dans la chambre magmatique, les cristaux formés ont le temps de descendre avant solidification complète du magma présent à cette hauteur x .

6.2 Adimensionnement des équations du transport réactif

Nous considérons les équations de transport réactif (4.15) et nous opérons les changements de variables suivants (cf. les relations (cf. relation (4.21) pour S_r^*) :

$$\begin{cases} t^* = \frac{U_s}{L}t, & x^* = \frac{x}{L}, & v_s^* = (1 - p_s)^e, & v_l^* = -p_s(1 - p_s)^{e-1}, \\ S_r^* = p_s(1 - p_s)^\alpha, & q_s^* = \frac{q_s}{q_{s0}}, & c_s^* = \frac{c_s}{\rho_s}, & c_l^* = \frac{c_l}{\rho_l} \end{cases} \quad (6.8)$$

avec :

a : rayon d'un cristal produit,

ρ_s et ρ_l : les masses volumiques à l'état solide et à l'état liquide respectivement,

α : exposant dans l'expression de la surface réactive, **choisi égal à 0.4** (cf. section 4.2).

Nous avons alors : c_s^*, c_l^* et $S_r^* \in [0, 1]$.

Notons aussi :

$$g^*(c_s^*) = \frac{1}{\rho_l} \cdot g(\rho_s \cdot c_s^*) \quad (6.9)$$

nous obtenons ainsi les équations normalisées :

$$\begin{cases} \frac{\partial(p_s \cdot c_s^*)}{\partial t^*} + \frac{\partial(v_s^* \cdot p_s \cdot c_s^*)}{\partial x^*} = \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \left(+ D_a \cdot S_r^* \cdot (c_l^* - g^*(c_s^*)) + A \cdot q_s^* \cdot c_l^* \right) \\ \frac{\partial(p_l \cdot c_l^*)}{\partial t^*} + \frac{\partial(v_l^* \cdot p_l \cdot c_l^*)}{\partial x^*} = -D_a \cdot S_r^* \cdot (c_l^* - g^*(c_s^*)) - A \cdot q_s^* \cdot c_l^* \end{cases} \quad (6.10)$$

avec D_a nombre adimensionnel dit *nombre de Damköhler* :

CHAPITRE 6. ADIMENSIONNEMENT ET FORMULATION DU SYSTÈME D'ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES COMPLET À RÉSOUDRE

$$D_a = 3 \cdot \frac{L}{a} \cdot \frac{k_c}{U_s} \quad (6.11)$$

En notant :

$$t_{reaction} = \frac{a}{3 \cdot k_c} \quad (6.12)$$

avec $t_{reaction}$ le temps caractéristique d'équilibrage du système en l'absence de solidification du magma et de mouvement relatif liquide/solide, et en considérant $t_{advection}$ défini dans les relations (6.5), le nombre D_a s'écrit :

$$D_a = \frac{t_{advection}}{t_{reaction}} \quad (6.13)$$

D_a peut aussi être vu comme le rapport de la vitesse de réaction sur la vitesse d'advection :

$$D_a = \frac{v_{reaction}}{v_{advection}} \quad (6.14)$$

avec $v_{reaction} = 3 \cdot \frac{L}{a} \cdot k_c$ la vitesse caractéristique de réaction et $v_{advection} = U_s$.

D_a symbolise donc la rapidité relative des phénomènes advectif et réactif dans la chambre magmatique de hauteur L . Par exemple si $D_a < 1$, alors l'advection se fait plus vite que la réaction, les cristaux sédimentent sans avoir le temps de s'équilibrer avec les liquides qu'ils rencontrent lors de leur descente.

6.3 Synthèse du système d'EDPs à résoudre

Pour simplifier l'écriture des équations, nous supprimons les étoiles d'adimensionnement. Le système à résoudre est formé des 4 équations (6.3) et (6.10). Les fonctions $v_s^*(x, t)$, $p_l(x, t)$, $v_l^*(x, t)$ et S_r^* se déduisant directement de $p_s(x, t)$ (cf. relations (3.11), (6.1) et (6.8)), le système à résoudre peut se réduire aux 3 équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{\partial(v_s \cdot p_s)}{\partial x} = A \cdot q_s \\ \frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} + \frac{\partial(v_s \cdot p_s \cdot c_s)}{\partial x} = \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \left(+ D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + A \cdot q_s \cdot c_l \right) \\ \frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} + \frac{\partial(v_l \cdot p_l \cdot c_l)}{\partial x} = -D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) - A \cdot q_s \cdot c_l \end{array} \right. \quad (6.15)$$

Nous obtenons ainsi un système de 3 équations à 3 inconnues : $p_s(x, t)$, $c_s(x, t)$ et $c_l(x, t)$.

6.4. ORDRES DE GRANDEUR POUR LES NOMBRES ADIMENSIONNELS A ET D_a

Les fonctions q_s et g et les paramètres A et D_a sont des données du problème que l'utilisateur pourra modifier selon :

- le type de chambre magmatique et des gradients thermiques (q_s),
- la forme de l'isotherme magmatique (linéaire, concave, convexe ou avec point d'inflexion) (g),
- le rapport de force entre advection et cristallisation (A),
- et le rapport de force entre cristallisation et cinétique chimique (D_a).

Les paramètres ρ_s et ρ_l dépendent des conditions de température et de pression et sont calculés à partir de modèles et données thermodynamiques fournies par [Ghiorso et al. \[2002\]](#). Ces calculs ont été implémentés par [Moutte \[2007\]](#).

6.4 Ordres de grandeur pour les nombres adimensionnels A et D_a

Pour calculer A et D_a , nous faisons un récapitulatif des ordres de grandeur des différents paramètres de notre modèle (Tableau 6.4). Les valeurs de ρ_s et ρ_l sont calculées pour des valeurs de température variant de 1000 à 1600 °C et de pression de 1 à 5 kbar. Pour les autres paramètres, les ordres de grandeur sont donnés dans les sections 1.2.1 (L), 3.3.2 (U_s et e), 4.2 (α), 3.5.3 (q_{s0}) et 4.3 (k_c).

D'après le tableau 6.4, les paramètres A et D_a peuvent être choisis dans une large gamme de valeurs : d'environ 10^{-7} à 10^6 pour A et 10^{-5} à 10^5 pour D_a . Nous verrons dans le chapitre 11 que les intervalles de A et D_a peuvent être réduits à $[0.01, 10]$ pour A et $[0.01, 100]$ pour D_a comme nous l'avons mis dans le tableau en valeurs typiques, car en dehors de ces intervalles les résultats sur les concentrations c_s et c_l ne changent pas énormément.

**CHAPITRE 6. ADIMENSIONNEMENT ET FORMULATION DU SYSTÈME
D'ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES COMPLET À RÉSOUDRE**

Ordres de grandeurs de paramètres physiques utiles pour la résolution du problème					
Symbole	Sens	Unité	Formule	Fourchette de valeurs	Valeur typique
L	Hauteur de la chambre magmatique	m	—	300 - 3.10 ³	10 ³
a	Rayon d'un cristal sphérique	m	—	10 ⁻⁵ à 10 ⁻²	10 ⁻³
ρ_s	Masse volumique d'un constituant chimique à l'état solide	kg.m ⁻³	—	3000 à 3120	3000
ρ_l	Masse volumique d'un constituant chimique à l'état liquide	kg.m ⁻³	—	2780 à 3000	2900
U_s	Vitesse de Stokes pour un cristal sphérique isolé	m.s ⁻¹	$\frac{2}{9} \cdot \frac{a^2 \cdot (\rho_s - \rho_l) \cdot g}{\mu}$	10 ⁻¹² à 10 ⁻²	10 ⁻⁷
e	Exposant dans la loi de vitesse de Richardson & Zaki	sans	dans $v_s = U_s \cdot (1 - p_s)^e$	4.8 à 6.55	5
α	Paramètre de courbure de la surface réactive	sans	dans $S_r =$ $\frac{3}{a} \cdot p_s \cdot (1 - p_s)^\alpha$	—	0.4
q_{s0}	Vitesse de solidification maximale	s ⁻¹	—	10 ⁻¹³ à 10 ⁻⁷	10 ⁻¹⁰
k_c	Constante cinétique de réaction	m.s ⁻¹	$k_c \cong \frac{D_s}{\delta x}$	10 ⁻¹⁴ à 10 ⁻¹²	10 ⁻¹³
A	Nombre adimensionnel : $\frac{v_{solidification}}{v_{advection}}$	sans	$\frac{L \cdot q_{s0}}{U_s}$	10 ⁻⁷ à 10 ⁶	10 ⁻² à 10 ¹
Da	Nombre adimensionnel : $\frac{v_{reaction}}{v_{advection}}$	sans	$3 \cdot \frac{L}{a} \cdot \frac{k_c}{U_s}$	10 ⁻⁵ à 10 ⁵	10 ⁻² à 10 ²

TABLE 6.1 – Ordres de grandeurs des paramètres physiques utiles pour la résolution du problème.
— Les valeurs typiques de ρ_s et ρ_l ont été prises pour la forstérite (Mg₂SiO₄) à T=1300 °C et P=1 kbar. La valeur typique du rayon d'un cristal sphérique est la valeur moyenne donnée par [Schwindinger \[1999\]](#) pour un cristal d'olivine.

Troisième partie

Résolutions mathématique et numérique : Schémas numériques - Méthodes de résolution - Validation

Le but de cette partie est de décrire les méthodes mathématiques et numériques de résolution du système d'EDPs (6.15) dans le domaine fermé que nous avons défini précédemment. Nous vérifions aussi la consistance des résultats obtenus par la simulation numérique en confrontant ceux-ci à des résultats obtenus par des méthodes théoriques et analytiques telles que la méthode des caractéristiques (très utilisée pour la résolution des systèmes d'EDPs hyperboliques), ou à des raisonnements qualitatifs.

Avant de détailler le contenu de cette partie, nous commençons par reconsidérer le système d'EDPs (6.15) :

Nous faisons l'hypothèse que la vitesse de solidification q_s ne dépend pas des concentrations des éléments chimiques c_s et c_l mais uniquement des gradients thermiques présents dans la chambre magmatique. Nous en déduisons que l'équation de cristallisation/sédimentation (première équation du système (6.15)), dont l'inconnue est uniquement la proportion de solide p_s , peut être résolue séparément des deux équations de bilan des éléments chimiques (deuxième et troisième équations du système (6.15)).

Ces deux dernières équations dont les principales inconnues sont respectivement c_s et c_l , sont elles, couplées à cause du terme de déséquilibre chimique $D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s))$ présent dans chacune d'elles et qui fait intervenir les deux inconnues c_s et c_l . Elles ne peuvent, par conséquent, être résolues séparément.

Ainsi, le système (6.15) peut être découplé en deux sous-systèmes :

1. l'équation de cristallisation/sédimentation, dont l'inconnue est la proportion de solide p_s , est d'abord résolue (cf. chapitre 7) :

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{\partial(v_s \cdot p_s)}{\partial x} = A \cdot q_s \quad (6.16)$$

2. ensuite, la proportion de solide p_s ainsi connue au temps t et pour tout point x du domaine d'étude, est injectée dans les équations de transport réactif, d'inconnues c_s et c_l , qui sont à leur tour résolues (cf. chapitre 9) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} + \frac{\partial(v_s \cdot p_s \cdot c_s)}{\partial x} = \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \left(D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + A \cdot q_s \cdot c_l \right) \\ \frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} + \frac{\partial(v_l \cdot p_l \cdot c_l)}{\partial x} = -D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) - A \cdot q_s \cdot c_l \end{array} \right. \quad (6.17)$$

Théoriquement, la résolution du système (6.17) peut se faire une fois p_s calculée sur l'ensemble du domaine spatial et pour tout t appartenant au domaine temporel choisi. La résolution numérique fournit des valeurs de p_s à des points d'espace discrets et à des temps discrets, ces temps sont séparés par le pas de temps choisi pour la discrétisation temporelle (Δt).

Garder en mémoire les valeurs de $p_s(x, t)$ pour tout point x et pour t avant la résolution du système (6.17), nécessiterait le stockage d'une matrice $p_s(x_i, t_n)$ de taille trop grande (i allant de 1 jusqu'au

nombre de mailles de la discrétisation spatiale et n entier naturel, $t_n = n.\Delta t$). C'est pour cela qu'en pratique, nous choisissons d'injecter les valeurs calculées de $p_s(x, t)$ dans les équations du système (6.17) à chaque pas de temps Δt . La résolution des deux systèmes (6.16) et (6.17) se fait ainsi simultanément et nous obtenons à chaque pas de temps les valeurs de $p_s(x, t_n)$, de $c_s(x, t_n)$ et $c_l(x, t_n)$.

Sur la figure 6.1, nous présentons de façon simplifiée les étapes envisagées pour la résolution des systèmes d'EDPs (6.16) et (6.17). Au temps t_0 , les inconnues sont initialisées et les paramètres et fonctions sources fixés (deux cases en haut). La résolution numérique des EDPs (deux cases en bas) permettent l'obtention des valeurs des inconnues p_s puis c_s et c_l à l'instant $t + \Delta t$ à l'aide de leurs valeurs à l'instant t (cases du milieu sur fond clair).

Pour l'itération suivante ($t + 2.\Delta t$), t est identifié à l'ancien $t + \Delta t$ et ainsi de suite.

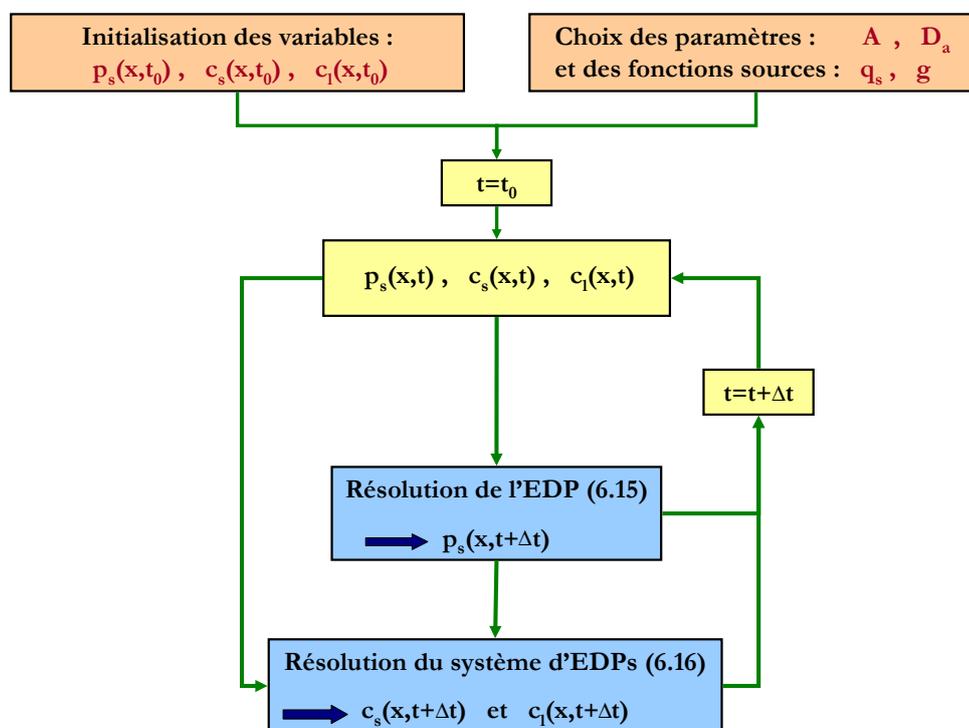


FIGURE 6.1 – Organigramme simplifié des étapes de calcul pour la résolution des systèmes (6.16) et (6.17). — Remarque : le calcul de $p_s(x, t + \Delta t)$ ne nécessite pas la connaissance de $c_s(x, t)$ ou de $c_l(x, t)$ alors que le calcul de $c_s(x, t + \Delta t)$ et $c_l(x, t + \Delta t)$ nécessite la connaissance de $p_s(x, t)$ et $p_s(x, t + \Delta t)$.

Cette partie est partagée en 4 chapitres. Dans le chapitre 7, nous détaillons les schémas numériques pour la résolution de l'équation de cristallisation/sédimentation (6.16) ainsi que les méthodes de résolution des systèmes discrétisés non linéaires qui en découlent, puis nous présentons la validation des résultats obtenus par cette résolution numérique dans le chapitre 8. Ensuite, nous suivons la même démarche pour la résolution des équations de transport réactif (6.17) et la validation des résultats de simulation respectivement dans les chapitres 9 et 10.

Dans ces chapitres, nous montrons aussi l'importance du choix des schémas numériques selon la nature des EDPs et nous exposons quelques cas limites pour lesquels il est nécessaire de modifier localement les schémas choisis, par exemple au voisinage du front de sédimentation.

Le tableau 6.2 récapitule les démarches de modélisation, c'est-à-dire les schémas numériques choisis pour la résolution des EDPs de notre modèle, les méthodes utilisées pour valider ces schémas et la conclusion concernant ces choix numériques.

Le langage de programmation que nous avons choisi est le **Fortran 90**, les résultats sont enregistrés dans des fichiers ".txt". Ces fichiers sont ensuite récupérés sous **Matlab** pour la représentation et le traitement graphiques des résultats.

Modèle mathématique	Méthode de résolution	Tests de validation	Technique utilisée	Conclusions
Cristallisation/Sédimentation $\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{\partial f(p_s)}{\partial x} = A \cdot q_s$	Schéma volumes finis de Lax-Friedrichs , avec viscosité numérique $c = 1$ (LxF1)	1- $f(p_s) = 0, A = 0, (\S 8.1)$ 2- $f(p_s) = 0, A \neq 0 (\S 8.1)$ 3- $f(p_s) \neq 0, A = 0 (\S 8.3)$ 4- $f(p_s) \neq 0, A \neq 0 (\S 8.3.6)$	1- Solution constante : $p_s(x, t) = cte$ 2- Comparaison à la solution analytique 3- Méthode des courbes caractéristiques 4- Méthode des courbes caractéristiques + raisonnement qualitatif	Le schéma LxF1 est stable. Très bonne conservation (0% d'erreur). Schéma diffusif mais résultats cohérents avec les résultats obtenus par la méthode des caractéristiques. La diffusion est plus marquée lorsque $A \neq 0$: proposition de schémas alternatifs.
Transport réactif $\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} + \frac{\partial f_s(p_s \cdot c_s)}{\partial x} = \frac{\rho_l \cdot H}{\rho_s} \\ \frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} + \frac{\partial f_l(p_l \cdot c_l)}{\partial x} = -H \end{array} \right.$ où : $H = D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + A \cdot q_s \cdot c_l$	Schémas volumes finis décentrés : - amont pour l'équation régissant c_s , - aval pour c_l	I- $f_s(p_s \cdot c_s) = 0, f_l(p_l \cdot c_l) = 0$ 1- $A = 0, D_a = 0 (\S 10.1)$ 2- $A = 0, D_a \neq 0 (\S 10.1.1)$ 3- $A \neq 0, D_a = 0 (\S 10.1.2)$ 4- $A \neq 0, D_a \neq 0 (\S 10.1.3)$ II- $f_s(p_s \cdot c_s) \neq 0, f_l(p_l \cdot c_l) \neq 0$ 5- $A = 0, D_a = 0 (\S 10.2.1)$ 6- $A = 0, D_a \neq 0 (\S 10.2.2)$ 7- $A \neq 0, D_a = 0 (\S 10.2.3)$ 8- $A \neq 0, D_a \neq 0 (\S 11.1)$	I- Comparaison de l'évolution de c_s et c_l avec un algorithme simplifié sur Matlab + calcul de l'état final : 1- Solution constante : $c_s(x, t) = c_l(x, t) = cte$ 2- Calcul analytique se basant sur la conservation et la loi d'équilibre chimique 3- et 4- Calcul analytique se basant sur la conservation II- Vérification de la conservation de la quantité totale de l'élément chimique + : 5- Contrôle de la vitesse de propagation des fronts 6- Raisonnements qualitatifs se basant sur les valeurs de D_a 7- Raisonnements qualitatifs se basant sur les valeurs de A 8- Raisonnements qualitatifs se basant sur les valeurs de A et D_a	Schéma stable et conservatif (0.15% d'erreur maximum). Les solutions obtenues sont cohérentes avec les calculs analytiques et les raisonnements qualitatifs.

TABLE 6.2 – Tableau récapitulatif des modèles mathématiques à résoudre, les méthodes choisies pour la résolution numérique, les méthodes de validation des résultats obtenus et les conclusions retenues.

Chapitre 7

Résolution numérique du problème de cristallisation/sédimentation

Nous voulons résoudre numériquement l'équation hyperbolique de conservation (6.16).

En introduisant la fonction f qui évalue le flux de matière :

$$f(p_s) = v_s \cdot p_s, \quad (7.1)$$

nous pouvons réécrire l'équation (6.16) sous la forme :

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{\partial f(p_s)}{\partial x} = A \cdot q_s(x) \quad (7.2)$$

Avant de chercher une solution de cette EDP, il faut définir le domaine spatial d'étude, le terme source $A \cdot q_s(x)$ et les conditions initiales et aux limites :

7.1 Domaine spatial et conditions initiales et aux limites

Le domaine étudié est une colonne magmatique verticale, considérée unidimensionnelle, de hauteur L . Cette hauteur est ramenée à 1 après adimensionnement des grandeurs d'espace. La variable d'espace est x , elle varie donc entre 0 et 1, x est croissant en se dirigeant vers le bas de la colonne magmatique.

Le paramètre adimensionnel A et la fonction $q_s(x)$ sont fixés par l'utilisateur.

La *condition initiale* $p_s(x, 0)$ est également donnée par l'utilisateur, son domaine de validité est l'intervalle $[0, 1]$:

$$\forall x, p_s(x, 0) \in [0, 1].$$

CHAPITRE 7. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

Les *conditions aux limites* elles, sont fixées une fois pour toute dans le schéma numérique implémenté, elles s'expriment en terme de flux. En effet, la colonne magmatique étant fermée, les flux de matière au sommet et au fond de la colonne sont nuls :

- en $x = 0 : \forall t, f(p_s)|_{x=0,t} = 0,$
- en $x = 1 : \forall t, f(p_s)|_{x=1,t} = 0.$

7.2 Discrétisation par Volumes Finis

L'EDP étudiée (3.6) est une équation de conservation. Pour ce genre de problème, la *méthode des volumes finis (VF)* est particulièrement bien adaptée (Goncalvès [2005]), c'est généralement la méthode la plus utilisée pour résoudre les problèmes de la dynamique des fluides. Nous utiliserons alors une discrétisation de l'espace par des *volumes finis*.

Le principe consiste à diviser le domaine spatial, en l'occurrence le segment $[0, 1]$, en M mailles de centres x_i pour i variant de 1 à M (LeVeque [2004]; Herbin [2006]) (cf. figure 7.1). Ces points sont espacés d'un pas régulier :

$$\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2} = \frac{1}{M} \quad (7.3)$$

On a donc :

$$x_{i+1/2} = i.\Delta x, \quad i = 0, 1, \dots, M,$$

en particulier :

$$x_{1/2} = 0 \quad \text{et} \quad x_{M+1/2} = 1. \quad (7.4)$$

De même, le temps est décomposé en intervalles élémentaires de pas constant :

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n \quad (7.5)$$

avec n entier naturel, n est d'autant plus grand que le temps pendant lequel on souhaiterait suivre l'évolution du système est grand.

et on a :

$$t_n = n.\Delta t, \quad n \in \mathbb{N} \quad (7.6)$$

7.2. DISCRÉTISATION PAR VOLUMES FINIS

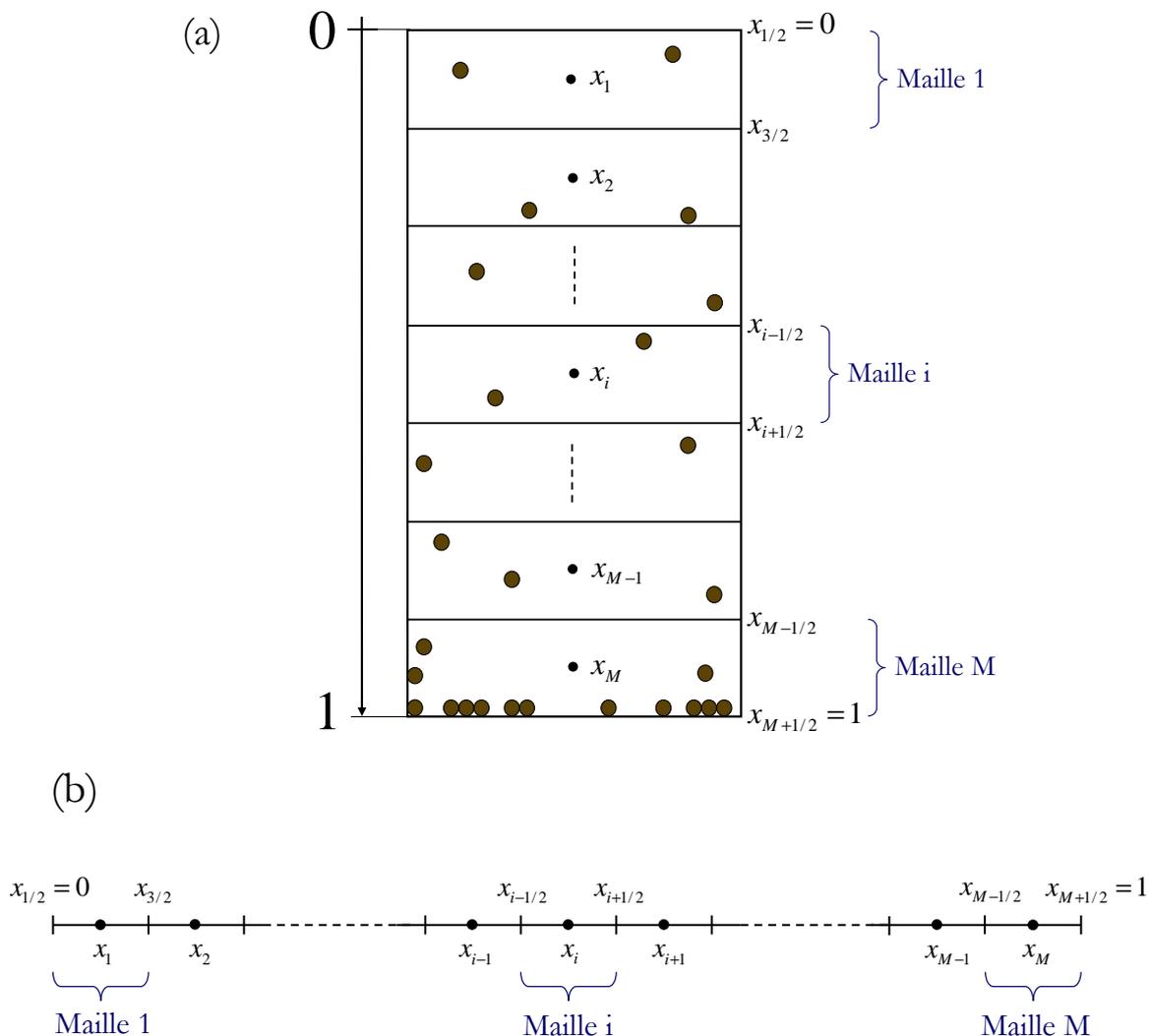


FIGURE 7.1 – Représentation du maillage par volumes finis. — (a) Colonne magmatique discrétisée, (b) Représentation horizontale.

L'équation de conservation (3.6) n'a pas de solution analytique explicite. Le problème continu est donc rendu *discret*, la solution est recherchée aux points discrets du domaine spatio-temporel ainsi défini.

La méthode des VF consiste à intégrer la loi de conservation sur un volume élémentaire ou "*volume de contrôle*". Cette méthode fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives.

**CHAPITRE 7. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE
CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION**

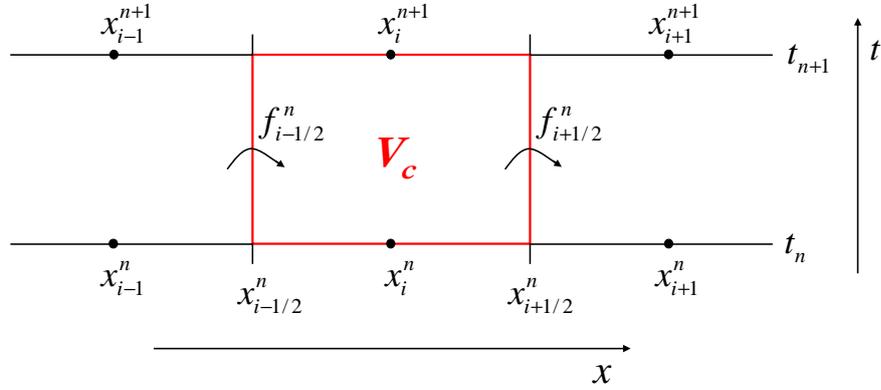


FIGURE 7.2 – Représentation du volume de contrôle V_c .

On considère le volume de contrôle $V_c = [t_n, t_{n+1}] \times [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ (figure (7.2)), la méthode des VF s'écrit pour notre problème (7.2) sous *forme intégrale* (LeVeque [2004] ; Herbin [2006]) :

$$\text{Méthode VF : } \begin{cases} \iint_{V_c} \left(\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{\partial f(p_s)}{\partial x} \right) dx dt = \iint_{V_c} A \cdot q_s dx dt \\ V_c = [t_n, t_{n+1}] \times [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \end{cases} \quad (7.7)$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (p_s(x, t_{n+1}) - p_s(x, t_n)) dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (f(p_s(x_{i+1/2}, t)) - f(p_s(x_{i-1/2}, t))) dt \\ = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} A \cdot q_s(x, t) dx dt \end{aligned}$$

Les fonctions p_s et q_s sont supposées **constantes sur chaque maille** $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ et **égales à leur valeur moyenne** sur cette maille (LeVeque [2004] ; Goncalvès [2005]) qu'on note respectivement p_{si} et q_{si} :

$$\forall x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] : \begin{cases} p_s(x, t) \cong p_{si} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} p_s(x, t) dx \\ q_s(x, t) \cong q_{si} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q_s(x, t) dx \end{cases} \quad (7.8)$$

7.3. SCHÉMA NUMÉRIQUE VOLUMES FINIS DÉCENTRÉ AMONT

Pour des raisons de stabilité numérique, nous choisissons un schéma *implicite en temps* (on assure ainsi la convergence sans qu'il y ait de *condition de type CFL* (condition Courant, Friedrichs et Lewy ([Courant et al. \[1928\]](#)) sur le pas de temps Δt , cependant, plus le pas de temps est grand plus l'on converge vers un résultat qui s'éloigne de la solution exacte. Le schéma implicite consiste à supposer que les fonctions p_s et q_s sont constantes sur l'intervalle $[t_n, t_{n+1}]$ et égales à leurs valeurs en t_{n+1} , d'où :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(f(p_s(x_{i+1/2}, t)) - f(p_s(x_{i-1/2}, t)) \right) dt = \Delta t \cdot (f(p_s(x_{i+1/2}, t_{n+1})) - f(p_s(x_{i-1/2}, t_{n+1}))) \\ \int_{t_n}^{t_{n+1}} q_s(x, t) dt = q_s(x, t_{n+1}) \text{ noté } q_s^{n+1} \end{array} \right.$$

Notons $f_{i-1/2}^{n+1}$ le flux $f(p_s)$ à l'interface $x_{i-1/2}$ et au temps t_{n+1} et $f_{i+1/2}^{n+1}$ le flux $f(p_s)$ à l'interface $x_{i+1/2}$ et au temps t_{n+1} :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{i-1/2}^{n+1} = f(p_s(x_{i-1/2}, t_{n+1})) \\ f_{i+1/2}^{n+1} = f(p_s(x_{i+1/2}, t_{n+1})) \end{array} \right. \quad (7.9)$$

$f_{i-1/2}^{n+1}$ et $f_{i+1/2}^{n+1}$ sont appelés les *flux numériques* à travers les surfaces $x_{i-1/2}$ et $x_{i+1/2}$ respectivement, et au temps t_{n+1} (cf. figure 7.2).

Nous obtenons ainsi la *formulation discrétisée* par VF en espace et *implicite en temps*, de l'équation de conservation (7.2), sous *forme conservative* :

$$\boxed{\text{Schéma VF : } p_{s_i}^{n+1} - p_{s_i}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^{n+1}) = \Delta t \cdot A \cdot q_{s_i}^{n+1} \quad (7.10)}$$

L'écriture (7.10) sera à la base des schémas numériques qui seront présentés dans les sections qui suivent. La manière dont on approche les flux numériques $f_{i-1/2}^{n+1}$ et $f_{i+1/2}^{n+1}$ en fonction de l'inconnue discrète déterminera la nature du schéma numérique.

Remarque : on peut obtenir le résultat (7.10) également en intégrant seulement sur l'espace :

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{\partial p_s}{\partial t} + \frac{\partial f(p_s)}{\partial x} \right) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} A \cdot q_s dx$$

puis en remplaçant la dérivée temporelle de p_s par un schéma d'*Euler implicite* ([Goncalvès \[2005\]](#); [Herbin \[2006\]](#)).

7.3 Schéma numérique Volumes Finis Décentré Amont

Dans un premier temps, pour le choix du schéma numérique, nous tenons compte du fait que le solide précipite vers le fond de la colonne, puisque la vitesse de Stokes est toujours positive pour

CHAPITRE 7. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

$\rho_s > \rho_l$ (cf. section 3.3.1). Nous supposons donc que numériquement l'information va du haut vers le bas et nous testons un schéma décentré amont en espace pour prendre en compte l'information provenant de l'amont, et implicite en temps.

Pour discrétiser l'équation de conservation de la masse du solide, nous utilisons alors le *schéma Volumes Finis Décentré Amont en espace (VFDA_m)* (Herbin [2006]), *Implicite en temps* avec la discrétisation spatio-temporelle décrite dans la section précédente.

Nous nous basons sur le schéma numérique (7.10) et, pour simplifier, nous remplaçons les temps n et $n + 1$ respectivement par $n - 1$ et n .

Le schéma VFDA_m consiste à approcher les flux $f_{i+1/2}^n$ et $f_{i-1/2}^n$ respectivement par les *valeurs en amont* $f(p_{s_i}^n)$ et $f(p_{s_{i-1}}^n)$, ainsi nous avons les *flux numériques* :

$$\begin{cases} f_{i-1/2}^n = v_{s_{i-1}}^n \cdot p_{s_{i-1}}^n \\ f_{i+1/2}^n = v_{s_i}^n \cdot p_{s_i}^n \end{cases} \quad (7.11)$$

A partir de l'expression de la vitesse de solide adimensionnée (3.9), il vient $f(p_s) = p_s \cdot (1 - p_s)^e$.

Les flux numériques sont alors toujours positifs, le solide se déplace toujours en direction du fond de la colonne magmatique ($x = 1$). $f_{i-1/2}^n$ représente alors le flux de matière entrant dans la maille i et provenant de la maille $i - 1$ et $f_{i+1/2}^n$ représente le flux de matière sortant de la maille i et entrant dans la maille $i + 1$.

Nous obtenons alors :

$$p_{s_i}^n - p_{s_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_{s_i}^n \cdot p_{s_i}^n - v_{s_{i-1}}^n \cdot p_{s_{i-1}}^n) = \Delta t \cdot A \cdot q_{s_i}^n, \quad 2 \leq i \leq M - 1, \quad (7.12)$$

Conditions aux limites :

Le système étant fermé, les flux de quantité de matière $f(p_s)$ au sommet et au fond de la colonne magmatique sont nuls (cf. section 7.1). Le sommet étant représenté par le noeud $x_{1/2} = 0$ et le fond par le noeud $x_{M+1/2} = 1$, les conditions aux limites s'écrivent :

– en $x = 0$, pas de flux entrant : $\forall n, f_{1/2}^n = (v_s^n \cdot p_s^n)|_{i=0} = 0$, d'où :

$$p_{s_1}^n - p_{s_1}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_{s_1}^n \cdot p_{s_1}^n - 0) = \Delta t \cdot A \cdot q_{s_1}^n$$

– en $x = 1$, pas de flux sortant : $\forall n, f_{M+1/2}^n = (v_s^n \cdot p_s^n)|_{i=M} = 0$, doù :

$$p_{s_M}^n - p_{s_M}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (0 - v_{s_{M-1}}^n \cdot p_{s_{M-1}}^n) = \Delta t \cdot A \cdot q_{s_M}^n$$

7.4. SCHÉMAS À TROIS POINTS

nous avons ainsi l'écriture du schéma numérique VFDA_m pour $1 \leq i \leq M$:

$$VFDA_m : \begin{cases} i = 1 : & p_{s1}^n - p_{s1}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_{s1}^n \cdot p_{s1}^n - 0) & = \Delta t \cdot A \cdot q_{s1}^n \\ 2 \leq i \leq M - 1 : & p_{si}^n - p_{si}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_{si}^n \cdot p_{si}^n - v_{si-1}^n \cdot p_{si-1}^n) & = \Delta t \cdot A \cdot q_{si}^n \\ i = M : & p_{sM}^n - p_{sM}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (0 - v_{sM-1}^n \cdot p_{sM-1}^n) & = \Delta t \cdot A \cdot q_{sM}^n \end{cases} \quad (7.13)$$

7.4 Schémas à trois points

En pratique les schémas décentrés sont convergents si l'information se déplace dans un seul sens, par exemple, le schéma VFDA_m est bien adapté pour une information qui provient toujours de l'amont. Pour une information dont la direction est variable, les schémas décentrés sont instables comme peut l'être dans certains cas le schéma VFDA_m (cf. section 8.2.3).

Nous avons besoin alors de schémas prenant en compte l'information provenant de l'aval et de l'amont, c'est pour cela que nous considérons les dits *schémas à trois points*.

Nous allons écrire ici la forme générale des schémas à trois points (*Schem3p*), c'est-à-dire que le schéma numérique associé à une inconnue u_i^n fait intervenir les trois inconnues discrètes u_i^n , u_{i-1}^n et u_{i+1}^n .

Considérons une équation de transport *linéaire* (vitesse v constante) du type :

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial (v \cdot p)}{\partial x} = 0$$

On écrit le schéma :

$$p_i^n - p_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (v^+ \cdot (p_i^n - p_{i-1}^n) + v^- \cdot (p_{i+1}^n - p_i^n)) = 0 \quad (7.14)$$

avec :

$$\begin{cases} v^+ = \max(v, 0) = \frac{v + |v|}{2} \\ v^- = \min(v, 0) = \frac{v - |v|}{2} \end{cases} \quad (7.15)$$

v^- est nul si $v \geq 0$ (schéma décentré amont) et v^+ nul si $v \leq 0$ (schéma décentré aval).

On réécrit le schéma (7.14) sous forme conservative :

$$p_i^n - p_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n) = 0 \quad (7.16)$$

CHAPITRE 7. RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

avec respectivement les *flux numériques amont et aval* :

$$\begin{cases} f_{i+1/2}^n &= v^+ \cdot p_i^n + v^- \cdot p_{i+1}^n &= \frac{1}{2} \left(v \cdot p_i^n + v \cdot p_{i+1}^n + |v| \cdot (p_i^n - p_{i+1}^n) \right) \\ f_{i-1/2}^n &= v^+ \cdot p_{i-1}^n + v^- \cdot p_i^n &= \frac{1}{2} \left(v \cdot p_{i-1}^n + v \cdot p_i^n + |v| \cdot (p_{i-1}^n - p_i^n) \right) \end{cases} \quad (7.17)$$

En introduisant la fonction de flux g définie par les relations :

$$\begin{cases} g(p, q) &= \frac{1}{2} \left(f(p) + f(q) + |v| \cdot (p - q) \right) \\ \text{où : } f(p) &= v \cdot p, \end{cases} \quad (7.18)$$

nous pouvons également écrire les flux numériques sous la forme :

$$\begin{cases} f_{i+1/2}^n &= g(p_i^n, p_{i+1}^n) \\ f_{i-1/2}^n &= g(p_{i-1}^n, p_i^n) \end{cases} \quad (7.19)$$

Nous généralisons maintenant les relations (7.16) à (7.19) au cas de notre équation de conservation (7.2), qui est *non linéaire* (vitesse v *non constante*), pour aboutir à l'écriture générale des schémas à trois points (Schem3p), implicites en temps :

$$\text{Schem3p : } \begin{cases} p_i^n - p_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(g(p_i^n, p_{i+1}^n) - g(p_{i-1}^n, p_i^n) \right) = \Delta t \cdot A \cdot q_{s_i}^n \\ \text{avec : } g(p, q) = \frac{1}{2} \left(f(p) + f(q) + c \cdot (p - q) \right) \\ f(p_i^n) = v_i^n \cdot p_i^n, \text{ et } c \text{ un coefficient à choisir } \mathbf{\text{homogène à une vitesse.}} \end{cases} \quad (7.20)$$

Le coefficient c est aussi appelé *viscosité numérique* (LeVeque [2004]).

Remarques :

- Le raisonnement que l'on vient de suivre pour aboutir à l'écriture générale des schémas à 3 points (7.20) n'est pas celui suivi par tous les auteurs, il permet néanmoins de classifier facilement ces schémas dont nous présentons quelques exemples dans la suite de cette section.
- Le schéma VFDAm peut aussi s'écrire sous la forme (7.20), en ne considérant que les informations amont :

7.4. SCHÉMAS À TROIS POINTS

$$\begin{cases} g(p_{i-1}^n, p_i^n) = f(p_{i-1}^n) \\ \text{et } g(p_i^n, p_{i+1}^n) = f(p_i^n) \end{cases} \quad (7.21)$$

7.4.1 Schéma de Lax-Friedrichs

Revenons à l'EDP (6.16) pour laquelle $v_s = (1 - p_s)^e$ (cf. relations (6.1)). Le *schéma de Lax-Friedrichs (LxF)* (Lax [1957]; Lax [1972]; LeVeque [2004]; Abgrall [2004]) est un schéma à trois points du type (7.20). Pour ce schéma, la viscosité numérique c a pour valeur la quantité :

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (7.22)$$

d'où :

$$\begin{cases} g(p, q) = \frac{1}{2} \left(f(p) + f(q) + \frac{\Delta x}{\Delta t} \cdot (p - q) \right) \\ f(p) = p(1 - p)^e \end{cases} \quad (7.23)$$

Pour les conditions aux limites, comme dans la section 7.3, on annule les flux numériques aux bords de la colonne fermée : $f_{1/2}^n = 0$ et $f_{M+1/2}^n = 0$. Nous obtenons ainsi le schéma de LxF :

$$LxF : \begin{cases} i = 1 : p_{s1}^n - p_{s1}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (g(p_{s1}^n, p_{s2}^n) - 0) = \Delta t \cdot A \cdot q_{s1}^n \\ 2 \leq i \leq M - 1 : p_{si}^n - p_{si}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (g(p_{si}^n, p_{si+1}^n) - g(p_{si-1}^n, p_{si}^n)) = \Delta t \cdot A \cdot q_{si}^n \\ i = M : p_{sM}^n - p_{sM}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (0 - g(p_{sM-1}^n, p_{sM}^n)) = \Delta t \cdot A \cdot q_{sM}^n \end{cases} \quad (7.24)$$

avec les flux numériques $g(p, q)$ définis par les relations (7.23).

On pourrait aussi prendre un schéma type LxF pour lequel le coefficient de viscosité est constant :

$$c = \text{constante} \quad (7.25)$$

Ainsi c ne dépend pas des pas de temps et d'espace choisis pour la discrétisation.

Le schéma que nous avons utilisé pour la résolution numérique du problème de cristallisation/sédimentation est le **Schéma de Lax-Friedrichs avec $c = \text{constante} = 1$, que nous notons schéma LxF1**. Les raisons de ce choix du coefficient c sont présentées dans l'annexe B. Ce

CHAPITRE 7. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

schéma a été assez satisfaisant et a été validé dans le chapitre 8.

Ensuite, d'autres schémas numériques à trois points ont été testés pour les comparer au schéma LxF1, dont les schémas de Lax-Friedrichs modifié, schéma de Lax-Wendroff et le schéma de Murman-Roe décrits ci-dessous.

7.4.2 Autres schémas à trois points

Nous présentons ici d'autres schémas numériques pouvant être utilisés pour notre problème. L'analyse des résultats obtenus par les différents schémas à trois points et la comparaison entre ceux-ci sont présentées dans l'annexe B. Nous verrons que le schéma de Murman-Roe est encore plus satisfaisant que le schéma LxF1.

Schéma de Lax-Friedrichs modifié

Pour le schéma de Lax-Friedrichs modifié (*LxFmodif*), on prend dans l'expression du flux $g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n)$ la valeur de c égale à la valeur absolue de la moyenne des vitesses sur les deux mailles i et $i + 1$:

$$c_{i+1/2} = \frac{|v_{s_i}^n + v_{s_{i+1}}^n|}{2} \quad (7.26)$$

d'où :

$$g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n) = \frac{1}{2} \left(f(p_{s_i}^n) + f(p_{s_{i+1}}^n) + \frac{|v_{s_i}^n + v_{s_{i+1}}^n|}{2} \cdot (p_{s_i}^n - p_{s_{i+1}}^n) \right)$$

Le schéma LxFmodif s'écrit exactement de la même façon que celui de LxF (schéma (7.24)).

Schéma de Lax-Wendroff

Ce schéma, que nous notons *schéma LxW*, a été construit par son auteur de telle façon qu'il soit d'ordre 2¹ contrairement aux schémas précédents (cf. [Godlewski and Raviart \[1991\]](#) ; [LeVeque \[2004\]](#)), le flux numérique g s'écrit pour ce schéma :

$$g(p, q) = \frac{1}{2} \left(f(p) + f(q) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot f' \left(\frac{p+q}{2} \right) \cdot (f(p) - f(q)) \right) \quad (7.27)$$

1. on dit qu'un schéma numérique est d'ordre 2 si le développement de Taylor correspondant ne comporte que des termes d'ordre 2 et plus.

7.5. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LE TRAITEMENT DE LA NON LINÉARITÉ DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

Schéma de Murman-Roe

Une autre méthode liée à la méthode de LxF est la *méthode de Murman-Roe* (cf. [Godlewski and Raviart \[1991\]](#); [LeVeque \[2004\]](#); [Abgrall \[2004\]](#)), pour laquelle c est égal à la pente de la fonction f entre les deux points p et q :

$$c = \begin{cases} \left| \frac{f(p) - f(q)}{p - q} \right| & \text{si } p \neq q \\ |f'(p)| & \text{si } p = q \end{cases} \quad (7.28)$$

et on garde la même écriture du schéma (7.24).

D'autres schémas et méthodes existent mais que nous n'avons pas abordés dans le présent travail, comme le *schéma de Rusanov* ([Rusanov \[1961\]](#)), le *schéma d'Engquist-Osher* ([Engquist and Osher \[1980\]](#)), schéma semi-Lagrangien, méthodes spectrales ([Spiegelman \[2000\]](#)) ou encore les schémas de type Godunov ([Godunov \[1959\]](#); [Godunov \[1962\]](#)).

7.5 Méthodes itératives pour le traitement de la non linéarité des équations discrètes

Nous avons vu que les schémas LxFmodif, Rusanov, Murman-Roe et LxW pour la discrétisation de l'EDP (6.16) s'écrivent tous de la même façon que le schéma (7.24) de LxF, seule la valeur du coefficient c varie. Le schéma VFDAm peut également s'écrire sous la forme (7.24) en considérant les écritures (7.21) pour la fonction g .

Nous nous intéressons alors dans cette section aux méthodes de résolution appliquées au système (7.24).

Le système (7.24) est composé de M équations à M inconnues. **Ces équations ne sont pas linéaires en les inconnues $p_{s_i}^n$.** En effet, dans l'expression du flux $g(p, q)$ (cf. (7.23)), le terme $f(p) = v.p = p(1 - p)^e$ n'est pas linéaire en p .

Pour résoudre ce système d'équations *non linéaires*, il n'y a pas de méthode explicite, nous avons donc besoin d'une *méthode itérative* qui recherche une solution approchée par approximations successives, connaissant la condition initiale $p_{s_i}^0, \forall i \in [1, M]$.

Les méthodes itératives consistent à chercher les valeurs de l'inconnue à l'instant t_n ($p_{s_i}^n, \forall i \in [1, M]$) connaissant les valeurs au temps t_{n-1} ($p_{s_i}^{n-1}, \forall i \in [1, M]$). Plusieurs méthodes existent, nous en avons implémenté deux, elles sont détaillées dans les sections qui suivent.

7.5.1 Méthode du point fixe

Soit F une fonction non linéaire à M variables représentées par un vecteur $X = (x_1, x_2, \dots, x_M) \in \mathbb{R}^M$, à valeurs dans \mathbb{R}^M :

$$\left\{ \begin{array}{l} F : \mathbb{R}^M \longrightarrow \mathbb{R}^M \\ X \longrightarrow F(X) = \begin{bmatrix} F_1(X) \\ F_2(X) \\ \vdots \\ F_M(X) \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad (7.29)$$

a) Principe et algorithme

La *méthode du point fixe* est utilisée pour approcher la solution \tilde{X} qui vérifie l'équation :

$$F(X) = X \quad (7.30)$$

En dimension 1, la méthode du point fixe consiste à trouver le point d'intersection de la courbe de F avec la première bissectrice du repère (O, X, Y) (figure 7.3).

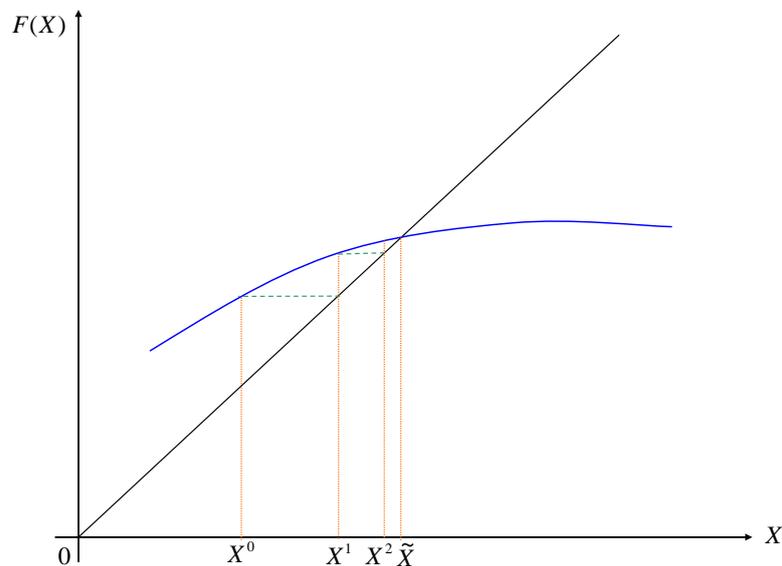


FIGURE 7.3 – Méthode du point fixe.

en dimension M , l'équation (7.30) s'écrit sous la forme d'un système :

7.5. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LE TRAITEMENT DE LA NON LINÉARITÉ DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \dots, x_M) = x_1 \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_M) = x_2 \\ \vdots \\ F_M(x_1, x_2, \dots, x_M) = x_M \end{cases} \quad (7.31)$$

Cette méthode consiste à approcher X en construisant une suite $(X^k)_{k \geq 0}$ qui converge vers X selon l'algorithme suivant :

Début

1. on choisit un nombre ϵ assez petit (10^{-8} par exemple) pour minimiser de façon satisfaisante l'écart entre la solution approchée et la solution réelle \tilde{X} ,
2. on choisit arbitrairement un point de départ $X^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_M^0)$,
3. on calcule $X^1 = F(X^0)$,
4. pour chaque itération $k \geq 1$:

a- on calcule la quantité :

$$\|X^k - X^{k-1}\|$$

b- si $\|X^k - X^{k-1}\| \leq \epsilon$,

alors la convergence est acquise et X^k est la solution approchée du système non linéaire (7.31) ;

c- si $\|X^k - X^{k-1}\| > \epsilon$,

la convergence n'est pas encore acquise ; on calcule la valeur du nouveau X pour l'itération suivante :

$$X^{k+1} = F(X^k),$$

on incrémente k et on recommence à 4a.

Fin

b) Expressions de X et de F pour le système (7.24)

Pour notre système non linéaire (schéma (7.24)), la méthode du point fixe s'applique à chaque pas de temps t_n . Et l'inconnue recherchée est le vecteur P^n des proportions de solide $p_{s_i}^n$, $i \in [1, M]$, à un temps donné (n donné) :

$$X = P^n = \begin{bmatrix} p_{s_1}^n \\ p_{s_2}^n \\ \vdots \\ p_{s_M}^n \end{bmatrix} \quad (7.32)$$

CHAPITRE 7. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

et la fonction F (qu'on note F_P pour le modèle de cristallisation/sédimentation) s'écrit :

$$F_P(P^n) = \begin{bmatrix} F_{P_1}(P^n) \\ F_{P_2}(P^n) \\ \vdots \\ F_{P_M}(P^n) \end{bmatrix} \quad (7.33)$$

le but est de résoudre le système $F_P(P^n) = P^n$, qui s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} i = 1 : F_{P_1}(P^n) = p_{s_1}^n = p_{s_1}^{n-1} - \sigma \cdot (g(p_{s_1}^n, p_{s_2}^n) - 0) + A \cdot q_{s_1}^n \\ 2 \leq i \leq M - 1 : F_{P_i}(P^n) = p_{s_i}^n = p_{s_i}^{n-1} - \sigma \cdot (g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n) - g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n)) + A \cdot q_{s_i}^n \\ i = M : F_{P_M}(P^n) = p_{s_M}^n = p_{s_M}^{n-1} - \sigma \cdot (0 - g(p_{s_{M-1}}^n, p_{s_M}^n)) + A \cdot q_{s_M}^n \end{array} \right. \quad (7.34)$$

où :

$$\sigma = \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (7.35)$$

Les itérations sont faites sur les X^k :

$$X^k = (P^n)^k = \begin{bmatrix} p_{s_1}^n \\ p_{s_2}^n \\ \vdots \\ p_{s_M}^n \end{bmatrix}^k \quad (7.36)$$

et pour chaque temps t_n , nous prenons pour point de départ X^0 la valeur de P à l'instant t_{n-1} :

$$X^0 = P^{n-1} = \begin{bmatrix} p_{s_1}^{n-1} \\ p_{s_2}^{n-1} \\ \vdots \\ p_{s_M}^{n-1} \end{bmatrix}. \quad (7.37)$$

La résolution par la méthode du point fixe est simple et ne demande pas d'effectuer des calculs matriciels compliqués. Cependant cette méthode est d'ordre 1², elle converge donc relativement lentement. Les solutions obtenues sont grossières mais cette méthode a le mérite d'être simple et permet de donner rapidement une idée sur les solutions.

Une autre méthode qui est la plus couramment utilisée dans les modèles géochimiques ([Crerar \[1975\]](#); [Steeffel and Lasaga \[1994\]](#); [Bildstein \[1998\]](#); [Van der Lee \[1998\]](#)), est la *méthode de Newton-Raphson* exposée dans la section qui suit.

2. On dit qu'une méthode est d'ordre 1 s'il existe une constante C telle que : le rapport $\frac{|X^{k+1} - \tilde{X}|}{|X^k - \tilde{X}|}$ tend vers C lorsque k est indéfiniment grand, \tilde{X} étant la solution exacte de $F(X) = X$.

7.5. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LE TRAITEMENT DE LA NON LINÉARITÉ DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

7.5.2 Méthode de Newton-Raphson

a) Principe et algorithme

Nous considérons une fonction définie par (7.29). La méthode de *Newton-Raphson* (*N-R*) est une généralisation de la méthode de *Newton* qui s'applique aux fonctions de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . Elle permet la résolution des systèmes non linéaires à plusieurs inconnues qui s'écrivent sous la forme :

$$F(X) = 0 \quad (7.38)$$

avec X une inconnue de l'espace \mathbb{R}^M . En dimension 1, la méthode de Newton consiste à trouver le point d'intersection de la courbe de F avec l'axe des abscisses (figure 7.4).

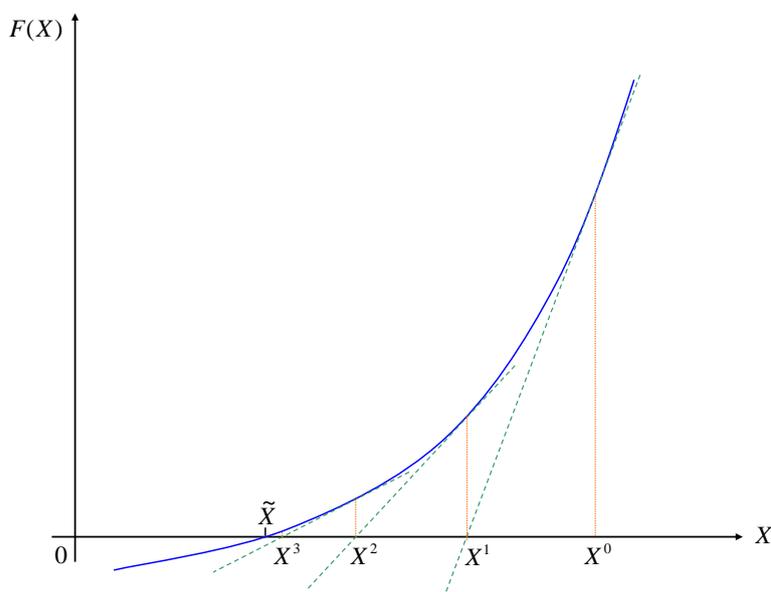


FIGURE 7.4 – La méthode de Newton.

Dans le cas général de M dimensions, l'équation (7.38) s'écrit :

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0 \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0 \\ \vdots \\ F_M(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0 \end{cases} \quad (7.39)$$

Pour appliquer la méthode N-R, nous avons besoin de calculer la *matrice jacobienne* de la fonction F . C'est une matrice carrée de dimension M , composée des dérivées premières des M fonctions F_i par rapport aux M variables x_j :

CHAPITRE 7. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

$$\bar{J}_F(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial x_M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_M}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial F_M}{\partial x_M} \end{pmatrix}$$

Pour approcher le vecteur \tilde{X} solution de ce système, la méthode N-R construit une suite $(X^k)_{k \geq 0}$ qui converge vers \tilde{X} selon l'[algorithme](#) suivant :

Début

1. on choisit un nombre ϵ assez petit pour minimiser l'écart entre la solution approchée et la solution réelle \tilde{X} ,
2. on choisit arbitrairement un point de départ $X^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_M^0)$,
3. on calcule X^1 :
 - a- on calcule la matrice jacobienne $\bar{J}_F(X^0)$,
 - b- on cherche la solution δX^0 du système linéaire :

$$\bar{J}_F(X^0) \cdot \delta X^0 = -F(X^0) \tag{7.40}$$

c- puis :

$$X^1 = X^0 + \delta X^0$$

4. pour chaque itération $k \geq 1$:

a- on calcule la quantité :

$$\|X^k - X^{k-1}\|$$

b- si $\|X^k - X^{k-1}\| \leq \epsilon$,

alors la convergence est acquise et X^k est la solution approchée du système non linéaire (7.39) ;

c- si $\|X^k - X^{k-1}\| > \epsilon$,

la convergence n'est pas encore acquise ; on calcule la valeur du nouveau X pour l'itération suivante :

- i) on calcule la matrice jacobienne $\bar{J}_F(X^k)$,
- ii) on cherche la solution δX^{k+1} du système linéaire :

$$\bar{J}_F(X^k) \cdot \delta X^k = -F(X^k) \tag{7.41}$$

iii) puis :

$$X^{k+1} = X^k + \delta X^k$$

7.5. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LE TRAITEMENT DE LA NON LINÉARITÉ DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

on incrémente k et on recommence à 4a.

Fin

Contrairement à la méthode du point fixe, la méthode N-R requiert le calcul de la jacobienne $\bar{\bar{J}}_F$ et la résolution d'un système linéaire (cf. 7.41), ce qui peut demander des dérivations parfois non aisées et présenter des problèmes d'inversion de matrice. Cette méthode est néanmoins d'ordre 2³ (*quadratique*), la convergence est donc plus rapide que pour la méthode du point fixe. La convergence est en outre certaine si la matrice $\bar{\bar{J}}_F$ est partout définie positive.

b) Expressions de \mathbf{X} et de \mathbf{F} pour le système (7.24)

Comme pour la méthode du point fixe, la méthode N-R est appliquée à chaque pas de temps t_n et les vecteurs P^n et F_p sont définis de la même façon (cf. (7.32) et (7.33)). Pour la méthode N-R, nous cherchons à résoudre $F_p(P^n) = 0$, ce qui s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} i = 1 : F_{P_1}(P^n) = 0 = p_{s_1}^n - p_{s_1}^{n-1} + \sigma.(g(p_{s_1}^n, p_{s_2}^n) - 0) - A.q_{s_1}^n \\ 2 \leq i \leq M - 1 : F_{P_i}(P^n) = 0 = p_{s_i}^n - p_{s_i}^{n-1} + \sigma.(g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n) - g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n)) - A.q_{s_i}^n \\ i = M : F_{P_M}(P^n) = 0 = p_{s_M}^n - p_{s_M}^{n-1} + \sigma.(0 - g(p_{s_{M-1}}^n, p_{s_M}^n)) - A.q_{s_M}^n \end{array} \right. \quad (7.42)$$

avec σ défini par la relation (7.35).

Les itérations de la méthode N-R se font sur les X^k définis par l'expression (7.36) et l'initialisation X^0 est donnée par la relation (7.37).

c) Calcul de la jacobienne $\bar{\bar{J}}_{F_p}$

Considérons, à l'instant t_n , les relations (7.42). Ainsi, pour $2 \leq i \leq M - 1$, $F_{p_i}(P^n)$ ne dépend pas de toutes les M inconnues du vecteur P^n , mais seulement des trois inconnues $p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n$ et $p_{s_{i+1}}^n$:

$$F_{P_i}^n = F_{P_i}^n(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n) \quad (7.43)$$

d'où pour chaque $i \in [2, M - 1]$, les trois dérivées :

3. il existe une constante C' telle que : le rapport $\frac{|X^{k+1} - \bar{X}|}{|X^k - \bar{X}|^2}$ tend vers C' lorsque k est indéfiniment grand, \bar{X} étant la solution exacte de $F(X) = 0$.

**CHAPITRE 7. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DE
CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION**

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{J}}_{F_P}(i, i-1) = \frac{\partial F_{P_i}^n}{\partial p_{s_{i-1}}^n} = -\sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n)}{\partial p_{s_{i-1}}^n} \\ \bar{\bar{J}}_{F_P}(i, i) = \frac{\partial F_{P_i}^n}{\partial p_{s_i}^n} = 1 + \sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n)}{\partial p_{s_i}^n} - \sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n)}{\partial p_{s_i}^n} \\ \bar{\bar{J}}_{F_P}(i, i+1) = \frac{\partial F_{P_i}^n}{\partial p_{s_{i+1}}^n} = -\sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n)}{\partial p_{s_{i+1}}^n} \end{array} \right. \quad (7.44)$$

pour $i = 1$, $F_{P_1}^n = F_{P_1}^n(p_{s_1}^n, p_{s_2}^n)$ et :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{J}}_{F_P}(1, 1) = \frac{\partial F_{P_1}^n}{\partial p_{s_1}^n} = 1 + \sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_1}^n, p_{s_2}^n)}{\partial p_{s_1}^n} \\ \bar{\bar{J}}_{F_P}(1, 2) = \frac{\partial F_{P_1}^n}{\partial p_{s_2}^n} = -\sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_1}^n, p_{s_2}^n)}{\partial p_{s_2}^n} \end{array} \right. \quad (7.45)$$

pour $i = M$, $F_{P_M}^n = F_{P_M}^n(p_{s_{M-1}}^n, p_{s_M}^n)$ et :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{J}}_{F_P}(M, M-1) = \frac{\partial F_{P_M}^n}{\partial p_{s_{M-1}}^n} = -\sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_{M-1}}^n, p_{s_M}^n)}{\partial p_{s_{M-1}}^n} \\ \bar{\bar{J}}_{F_P}(M, M) = \frac{\partial F_{P_M}^n}{\partial p_{s_M}^n} = 1 - \sigma \cdot \frac{\partial g(p_{s_{M-1}}^n, p_{s_M}^n)}{\partial p_{s_M}^n} \end{array} \right. \quad (7.46)$$

ce qui nous donne finalement une matrice jacobienne sous la forme suivante :

$$\bar{\bar{J}}_{F_P}(P^n) = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ * & * & * & & 0 \\ & * & * & * & \\ & & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ 0 & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{pmatrix} \quad (7.47)$$

La forme de cette matrice reste la même pour toutes les méthodes à 3 points, seules les valeurs $\bar{\bar{J}}_{F_P}(i, j)$ qui la composent varient d'une méthode à l'autre puisque la fonction flux g change d'une méthode à l'autre.

Les expressions explicites des dérivées partielles de la fonction flux numérique $g(p, q)$ présentes dans les termes de la jacobienne (relations (7.44), (7.45) et (7.46)) sont calculées dans l'annexe A.

7.5. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LE TRAITEMENT DE LA NON LINÉARITÉ DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

d) Résolution du système linéaire

La matrice jacobienne $\bar{\bar{J}}_{F_P}$ est une matrice carrée de dimension M , elle est également *tridiagonale* (seuls les éléments des trois diagonales principales sont considérées non nuls). Dans la plupart de nos simulations, nous avons pris un nombre de mailles $M = 100$, ce qui fait de $\bar{\bar{J}}_{F_P}$ une matrice *creuse* où le nombre d'éléments nuls est très élevé ($M^2 - 3M$ d'éléments nuls pour le total de M^2 éléments).

Afin de ne considérer que la partie utile de cette matrice lors de la résolution du système linéaire (7.41), nous stockons uniquement les trois diagonales non nulles de $\bar{\bar{J}}_{F_P}$ dans une nouvelle matrice $\bar{\bar{J}}'_{F_P}$ de taille $(M \times 3)$ qui remplace ainsi l'écriture (7.47) :

$$\bar{\bar{J}}'_{F_P}(P^n) = \begin{pmatrix} 0 & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & 0 \end{pmatrix} \quad (7.48)$$

Nous adaptons ensuite les algorithmes de résolution du système linéaire à cette dernière écriture de la jacobienne.

La résolution du système linéaire (7.41) à chaque pas de Newton, k , peut se faire soit par des méthodes directes comme la méthode de Gauss ou la méthode de décomposition LU, soit par des méthodes itératives comme la méthode de *Jacobi*, la méthode du *gradient conjugué*. Nous avons utilisé la méthode itérative de *Gauss-Seidel*, cette méthode assure une bonne convergence lorsque la matrice $\bar{\bar{J}}_F(X^k)$ est à diagonale strictement dominante, c'est-à-dire que : $\forall i \in [1, M]$,

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^M |\bar{\bar{J}}_F(i, j)| < |\bar{\bar{J}}_F(i, i)|.$$

Chapitre 8

Tests de validation du modèle de cristallisation/sédimentation

Afin de valider le code de résolution numérique de l'EDP (7.2), nous mettons à l'épreuve les schémas numériques que nous avons établis dans le chapitre précédent (sections 7.3 et 7.4) ainsi que les méthodes de résolution (méthode du point fixe et méthode de Newton-Raphson).

Dans un premier temps, nous considérons des cas tests allant du plus simple au plus complet : nous commençons par le cas où nous annulons le terme de flux $f(p_s)$ ainsi que le terme de solidification $A.q_s$, pour arriver au cas le plus général où $f(p_s) \neq 0$ et $A.q_s \neq 0$. Un récapitulatif des démarches de validation est inclus dans le [tableau 6.2](#) en introduction cette partie.

Dans un deuxième temps, nous traitons des difficultés plus particulières liées à la modification et l'adaptation des schémas numériques au voisinage des mailles présentant 100% de solide présent ($p_s = 1$), en particulier la maille où se trouve le front mobile de sédimentation.

8.1 Cas d'un flux imposé nul : $f(p_s) = 0$

Nous testons le cas théorique de flux de matière nul, c'est-à-dire que le mouvement du solide et du liquide sont annulés comme si leur poids était négligé ou qu'on prenait une colonne magmatique horizontale où seule la solidification serait à l'origine des variations de la proportion en solide p_s . Dans ce cas, l'EDP (7.2) devient :

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} = A.q_s \quad (8.1)$$

et le schéma numérique associé s'écrit (pour tous les schémas VFDAm ou Schem3p) :

$$p_{s_i}^n - p_{s_i}^{n-1} = \Delta t.A.q_{s_i}^n \quad (8.2)$$

Deux cas s'en déclinent :

- dans le cas trivial où l'on considère une solidification nulle ($A = 0$, $\frac{\partial p_s}{\partial t} = 0$), on vérifie que pour tout état initial $p_s(x, 0) = p_{s0}$, la simulation nous donne bien un état stable où p_s reste constante et égale à p_{s0} .
- dans le cas où $A \neq 0$, le second membre de l'équation (8.2) est non nul. Vu que nous considérons dans le présent travail des vitesses de solidification comme une fonction dépendant

8.1. CAS D'UN FLUX IMPOSÉ NUL : $F(P_S) = 0$

uniquement de la profondeur x , la solution analytique théorique (que nous notons p_{sth}) de (8.1) est simple et s'écrit :

$$\forall x \in [0, 1], p_{sth}(x, t) = p_s(x, 0) + A \cdot q_s(x) \cdot t \quad (8.3)$$

p_s doit alors augmenter au fur et à mesure des itérations :

Prenons pour valeur initiale : $\forall x \in [0, 1], p_s(x, 0) = 0$ et pour la valeur du nombre adimensionnel $A = 0.1$. Pour la vitesse de solidification nous prenons deux exemples, une vitesse de solidification linéaire avec la profondeur plus forte au sommet qu'au fond de la chambre magmatique, $q_s(x) = 1 - 0.9x$ et un deuxième profil convexe avec solidification plus forte au sommet et au fond, et faible au milieu de la chambre, son équation est du type $q_s(x) = a(x - 0.5)^4 + b$ (a et b deux paramètres tels qu'on obtient le profil de q_s représenté sur la figure 8.2). Nous présentons dans les figures 8.1 et 8.2 la comparaison entre la solution théorique et le résultat donné par la simulation pour ces deux exemples. Le pas de temps pris pour les simulations est $\Delta t = 0.1$.

Il y a parfaite adéquation entre les résultats théoriques et les résultats de simulation. Remarquons que vu que le flux de matière est fixé nul, l'évolution de p_s est uniquement verticale.

Tous les schémas numériques précédemment établis donnent les mêmes résultats. Pour que p_s ne dépasse pas la valeur 1, nous avons fixé dans le programme la valeur le seuil 1 pour l'augmentation de p_s , et ceci sur chaque maille du domaine spatial.

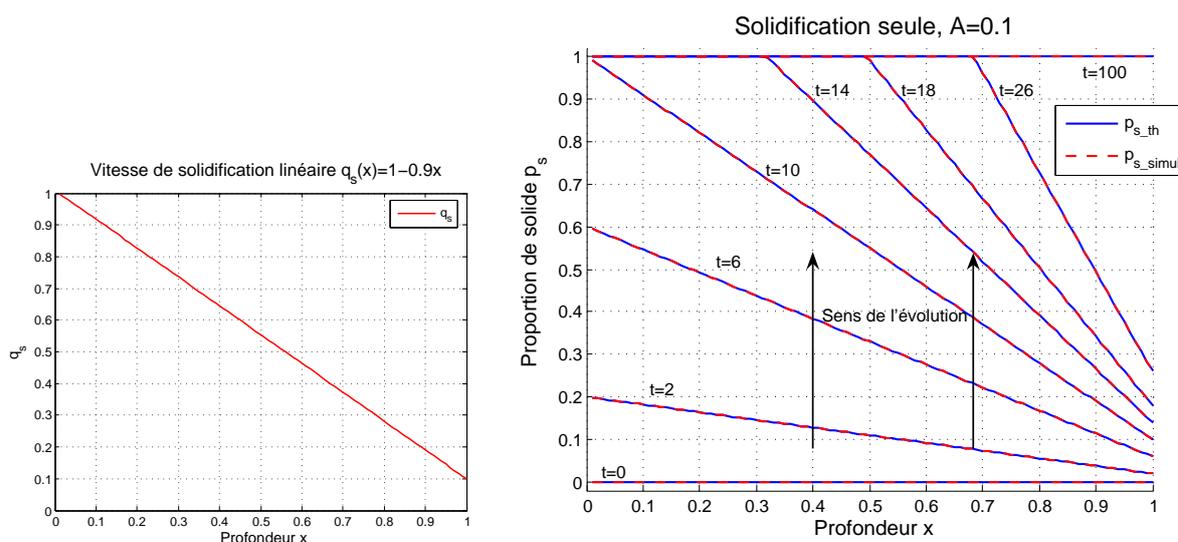


FIGURE 8.1 – Evolution au cours du temps de la proportion de solide dans le cas d'un flux nul, et d'une vitesse de solidification linéaire décroissante. — $p_s(x, 0) = 0$, $A = 0.1$, $q_s(x) = 1 - 0.9x$, $\Delta t = 0.1$.

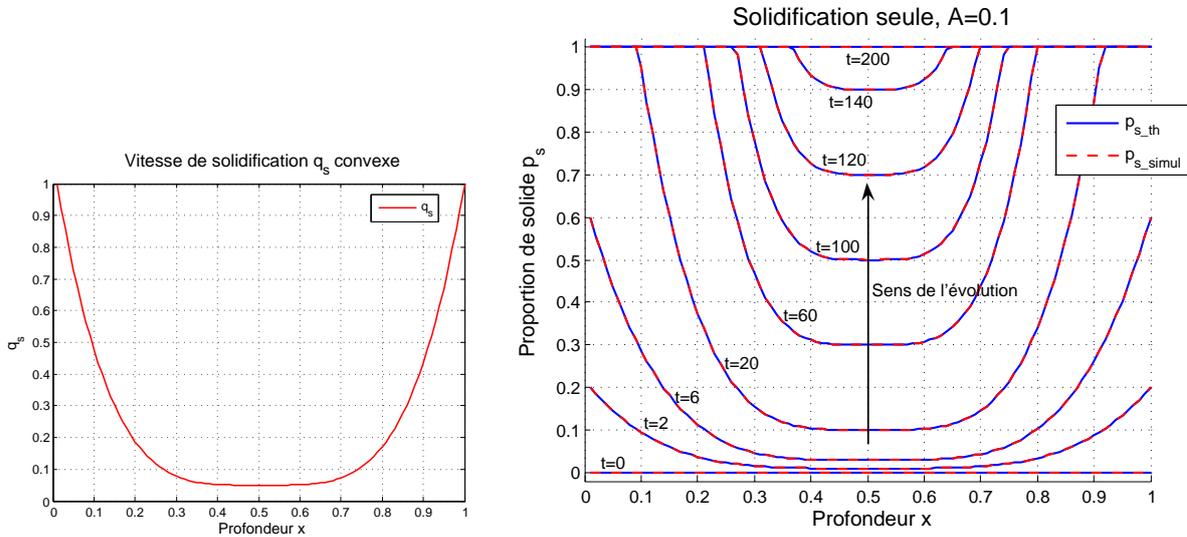


FIGURE 8.2 – Evolution au cours du temps de la proportion de solide dans le cas d’un flux nul, et d’une vitesse de solidification convexe. — $p_s(x, 0) = 0$, $A = 0.1$, $q_s(x) = a(x - 0.5)^4 + b$, $\Delta t = 0.1$.

8.2 Prise en compte d’un flux non nul : $f(p_s) \neq 0$ - Méthode des caractéristiques

8.2.1 Présentation de la méthode des caractéristiques

La *méthode des caractéristiques* est une méthode analytique adaptée aux équations hyperboliques, elle prévoit la propagation dans le temps et l’espace des valeurs de l’inconnue le long de *courbes* dites *caractéristiques*, représentées dans le repère (x, t) , sur lesquelles la valeur de l’inconnue est connue : de façon générale l’inconnue vérifie une *équation différentielle ordinaire (ODE)* le long de ces courbes caractéristiques, ce qui est facile à résoudre contrairement à l’EDP hyperbolique de départ.

La méthode des caractéristiques permet aussi de prévoir intuitivement l’évolution de l’inconnue (p_s ici) en se basant sur la forme des courbes caractéristiques et sur une analyse de la fonction flux ($f(p_s)$ ici).

Pour l’étude analytique de l’équation hyperbolique (7.2), nous commençons par l’écrire sous forme dite *caractéristique* :

$$\text{EDP hyperbolique : } \frac{\partial p_s}{\partial t} + f'(p_s) \cdot \frac{\partial p_s}{\partial x} = A \cdot q_s \quad (8.4)$$

f est une fonction non linéaire de p_s .

On appelle caractéristique une solution $X(t)$ de :

8.2. PRISE EN COMPTE D'UN FLUX NON NUL : $F(p_s) \neq 0$ - MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES

$$\text{Courbes caractéristiques : } \frac{dX(t)}{dt} = f'(p_s(X(t), t)) \quad (8.5)$$

ainsi la **pente des courbes caractéristiques** $X(t)$ est égale à $f'(p_s(X(t), t))$ ¹.

Le long de ces courbes $X(t)$, nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p_s(X(t), t) &= \frac{\partial p_s}{\partial t}(X(t), t) + \frac{\partial p_s}{\partial x}(X(t), t) \cdot \frac{dX(t)}{dt} \\ &= \frac{\partial p_s}{\partial t}(X(t), t) + f'(p_s(X(t), t)) \cdot \frac{\partial p_s}{\partial x}(X(t), t) \end{aligned} \quad (8.6)$$

en utilisant la relation (8.5), nous obtenons l'équation régissant l'évolution de p_s le long des courbes caractéristiques :

$$\text{Le long des caractéristiques : } \frac{d}{dt}(p_s(X(t), t)) = A \cdot q_s \quad (8.7)$$

Nous pouvons distinguer deux cas :

- Dans le cas où $A = 0$:

$$\frac{d}{dt}(p_s(X(t), t)) = 0,$$

la solution p_s **est alors constante le long des caractéristiques** :

$$p_s(X(t), t) = p_s(X(0), 0) = p_{s0} \quad (8.8)$$

par conséquent la pente des caractéristiques $f'(p_s(X(t), t))$ est constante et égale à $f'(p_{s0})$.

Les courbes caractéristiques sont donc des droites dont la pente est déterminée par la condition initiale p_{s0} et par la forme de la fonction f , et on a pour tout choix d'un point de départ $X(0) = \xi$:

$$A = 0 \Rightarrow \text{Droites : } X(t) = f'(p_{s0}(\xi)) \cdot t + \xi \quad (8.9)$$

1. $f'(p_s(X(t), t))$ est la valeur de la pente des caractéristiques dans le repère (t,x).

– Dans le cas où $A \neq 0$:

on doit résoudre l'équation différentielle (8.7). Dans le cas que nous considérons où q_s ne dépend que de la profondeur x , nous pouvons écrire le long des caractéristiques :

$$p_s(X(t), t) = A \cdot q_s(X(t)) \cdot t + p_s(X(0), 0) \quad (8.10)$$

la solution p_s n'est alors plus constante le long des caractéristiques.

Par conséquent **les courbes caractéristiques $X(t)$ ne sont plus des droites** mais elles sont solution de l'EDO (8.5), où p_s est décrit par (8.10).

Remarque : Un point crucial qui déterminera le comportement de la solution $p_s(x, t)$ est la forme de la fonction flux $f(p_s)$. En effet la direction de l'information est donnée par les pentes des caractéristiques qui sont données par la dérivée $f'(p_s)$.

Nous commencerons alors par une étude de la fonction f . La résolution de l'EDO (8.5) a été faite par la méthode d'*Euler explicite* pour donner les solutions analytiques de l'EDP (7.2) le long des courbes caractéristiques. Ces solutions sont ensuite comparées, dans les sections à venir, aux simulations basées sur la discrétisation par volumes finis (schémas VFDAm et Schem3p).

8.2.2 Etude de la fonction flux $f(p_s)$

Traçons la courbe de la fonction flux $f(p_s) = p_s \cdot (1 - p_s)^e$ et de sa dérivée en fonction de p_s (cf. figure 8.3), ($f'(p_s) = (1 - p_s)^e - e \cdot p_s \cdot (1 - p_s)^{e-1}$, $e = 5$ ici) :

Deux remarques peuvent être faites sur f :

– **Concavité de f :** la fonction flux f n'est pas linéaire :

$$\left\{ \begin{array}{l} f \text{ concave sur } [0, 0.33] \\ f''(0.33) = 0 \\ f \text{ convexe sur } [0.33, 1]. \end{array} \right. \quad (8.11)$$

ainsi la fonction f' , qui représente la pente des caractéristiques et la vitesse du flux du solide, est décroissante sur $[0, 0.33]$ et croissante sur $[0.33, 1]$. Nous observerons alors, selon la forme de la condition initiale p_{s0} , des phénomènes de *choc* ou de *détente*.

8.2. PRISE EN COMPTE D'UN FLUX NON NUL : $F(P_s) \neq 0$ - MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES

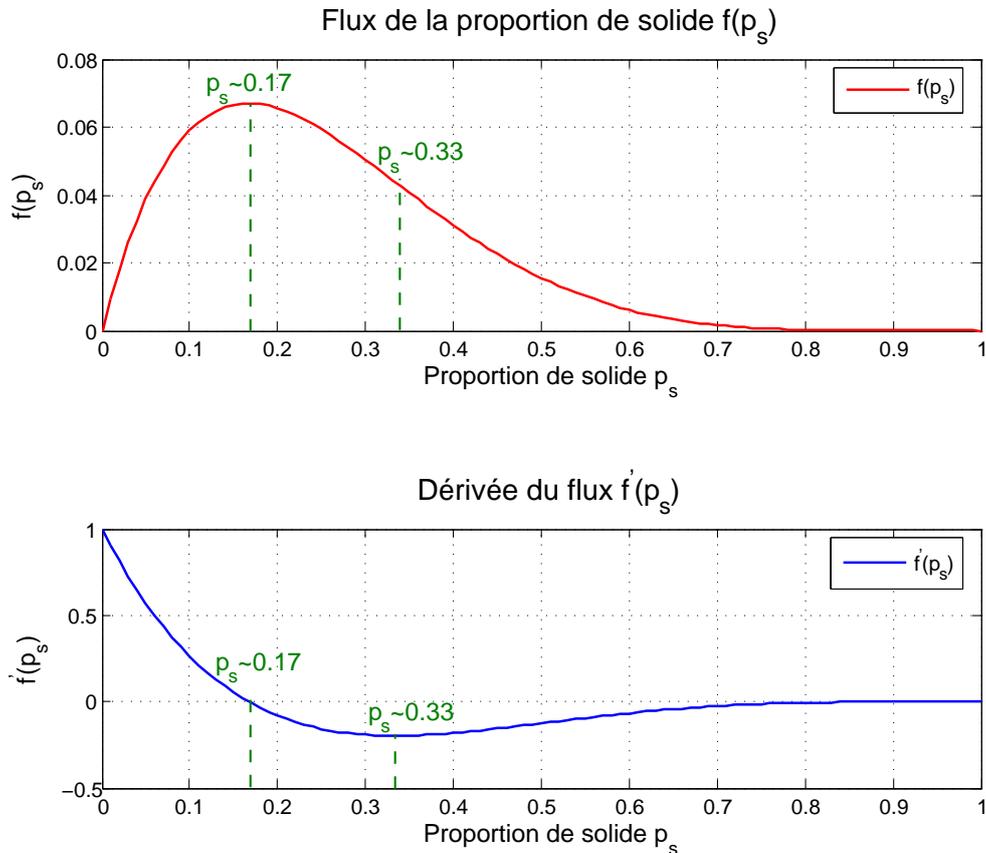


FIGURE 8.3 – Courbes du flux $f(p_s)$ et de la dérivée du flux $f'(p_s)$. — Inversement du sens de variation à $p_s = 0.17$ et changement de concavité à $p_s = 0.33$.

– **Signe de f' :**

$$\left\{ \begin{array}{l} f' > 0 \text{ sur } [0, 0.17] \\ f'(0.17) = 0 \\ f' < 0 \text{ sur } [0.17, 1]. \end{array} \right. \quad (8.12)$$

il y a renversement de la direction de l'information à partir de la valeur $p_s = 0.17$, c'est-à-dire que si p_s est en-dessous de la valeur 0.17, alors l'information se propage constamment de l'amont vers l'aval (les pentes des droites caractéristiques sont > 0). Par contre, lorsque p_s dépasse la valeur 0.17, il y a retour de l'information, et on observera un flux de solide remontant dans la direction du haut de la colonne magmatique (les pentes des droites caractéristiques sont < 0).

8.2.3 Insuffisance du schéma VFDAm

Le schéma VFDAm s'écrit pour une maille i donnée (cf. 7.13) :

$$p_{si}^n - p_{si}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_{si}^n \cdot p_{si}^n - v_{si-1}^n \cdot p_{si-1}^n) = \Delta t \cdot A \cdot q_{si}^n$$

ce schéma prend en compte l'information contenue dans la maille i elle même et la maille amont $i - 1$, mais ne prend pas en compte l'information venant de l'aval $i + 1$.

Nous distinguons alors deux cas :

- lorsque $p_s < 0.17$, $f'(p_s) > 0$, l'information arrive de l'amont vers l'aval et le schéma VFDAm ne pose pas de problème numérique :

Considérons la colonne magmatique fermée, remplie d'un magma qui à l'état initial est composé de 10% de solide sur toute la profondeur ($p_s(x) = 0.1$ pour $x \in [0, 1]$). Sur la figure 8.4a, nous avons tracé l'évolution de l'inconnue p_s au cours du temps donnée par la simulation par le schéma VFDAm en ne considérant que la sédimentation sans production de solide ($A = 0$).

Le résultat est qualitativement satisfaisant : nous observons les mailles du haut de la colonne magmatique se vider au fur et à mesure des itérations pour remplir les mailles du fond, de plus la quantité de solide totale est conservée. En effet, à l'état initial, nous avons une quantité égale à $0.1 \times 1 = 0.1$ (0.1 étant le p_s initial et 1 la hauteur de la colonne), et à l'état final, la quantité totale est égale à $1 \times 0.1 = 0.1$ (1 étant le p_s final sur une longueur de 0.1 au fond de la colonne).

- lorsque $p_s > 0.17$, $f'(p_s) < 0$ et l'information provient de l'aval, **le schéma VFDAm ne converge pas** :

Nous considérons cette fois que la colonne est remplie d'un magma composé à 25% de solide sur toute sa profondeur ($p_s(x) = 0.25$ pour $x \in [0, 1]$). La figure 8.4b montre que le schéma VFDAm est instable pour cette condition initiale : des oscillations apparaissent dès le début du calcul.

8.2. PRISE EN COMPTE D'UN FLUX NON NUL : $F(p_s) \neq 0$ - MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES

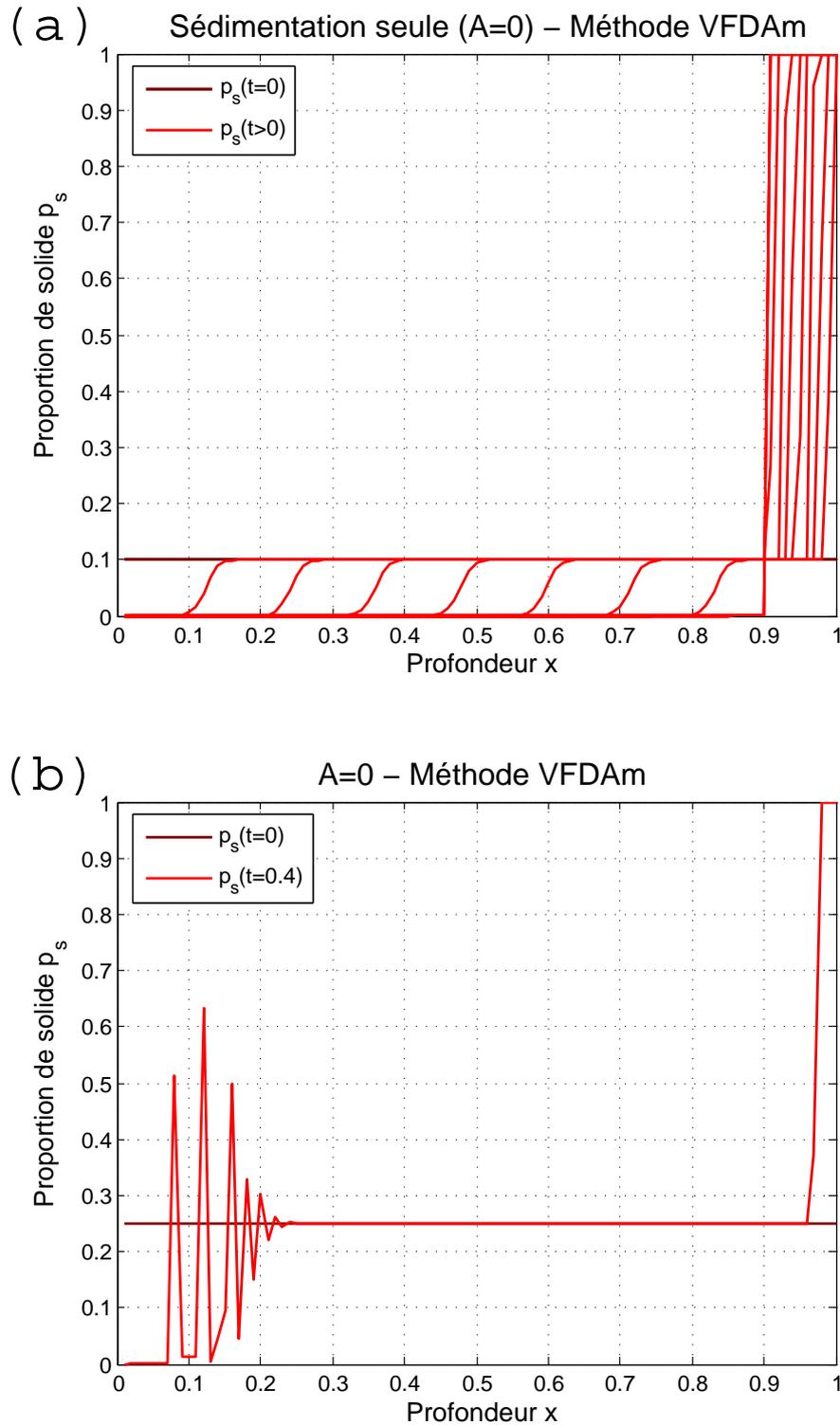


FIGURE 8.4 – (a) Simulation de l'évolution de p_s au cours du temps avec le schéma VFDAm pour $p_{s0} < 0.17$. — $t_{max} = 1.6$, $p_{s0} = 0.1$, $A = 0$, $\Delta t = 0.001$. (b) Simulation de l'évolution de p_s au cours du temps avec le schéma VFDAm pour $p_{s0} > 0.17$. — Apparition d'oscillations - $p_{s0} = 0.25$, $A = 0$, $\Delta t = 0.001$.

Pour la suite des tests de validation, nous considérons les schémas à 3 points, ceux-ci prenant en compte les informations provenant de l'amont et de l'aval.

8.3 Validation d'un schéma à 3 points, le schéma LxF1

Le but de cette section est de présenter une validation du schéma numérique à trois points de Lax-Friedrichs avec comme coefficient de viscosité numérique $c = \text{constante} = 1$ appelé schéma LxF1 (cf. section 7.4.1). Le choix de cette constante est justifié dans l'annexe B.1. Ce schéma nous a semblé assez satisfaisant du point de vue de sa stabilité et sa consistance, nous avons alors tenté de le valider.

D'autres schémas offrant de bons résultats auraient pu être testés parmi ceux présentés dans la section 7.4, notamment le schéma de Murman-Roe. La comparaison entre ces schémas à trois points est présentée en annexe B.

Nous testons à présent le schéma LxF1 :

8.3.1 Exemple d'un choc à $p_{s0} < 0.17$

Nous prenons dans un premier temps des conditions initiales pour p_s inférieures à 0.17 (point où la fonction $f'(p_s)$ change de signe).

Nous prenons une condition initiale discontinue où $p_{s0}([0, 0.1]) = 0 = p_g$ et $p_{s0}([0.1, 1]) = 0.1 = p_d$, nous la représentons ainsi que les vecteurs vitesse de flux, $f'(p_{s0})$, sur la figure 8.5. Nous considérons uniquement la sédimentation (pas de solidification $A = 0$).

La concavité de la fonction f (cf. figure 8.3) donne $f'(0) > f'(0.1)$ ($f'(0) = 1$, $f'(0.1) \cong 0.26$), les valeurs $p_s = 0$ se propagent alors plus vite que les valeurs $p_s = 0.1$.

Le nombre A étant nul, les courbes caractéristiques sont des droites (cf. relation (8.9)). Leurs pentes sont égales à 1 pour $x < 0.1$ et 0.26 pour $x \geq 0.1$ ², nous traçons ces caractéristiques sur la figure 8.6a.

Nous remarquons que les droites qui transportent l'information $p_s = 0$ ($x \in [0, 0.1]$) se chevauchent avec celles pour lesquelles $p_s = 0.1$ ($x \in [0.1, 0.3]$).

p_s étant constante le long des caractéristiques, car $A = 0$ (cf. relation (8.8)), nous arrivons à prévoir son évolution dans le temps que nous représentons sur la figure 8.6b. Le croisement des droites caractéristiques se traduit par des zones où deux valeurs de p_s coexistent pour un même x , ce qui est physiquement impossible.

2. ces pentes sont égales à 1 et $\frac{1}{0.26} \cong 3.81$ dans le repère (x,t) .

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

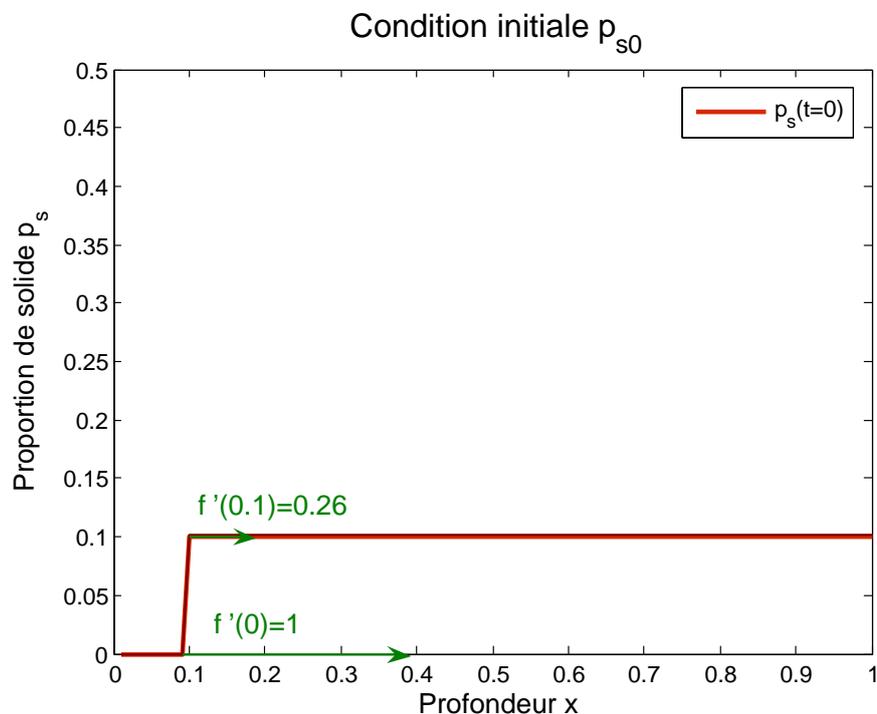


FIGURE 8.5 – Condition initiale discontinue, $p_{s0} < 0.17$. — La fonction $f'(p_s)$ représente la vitesse du flux du solide.

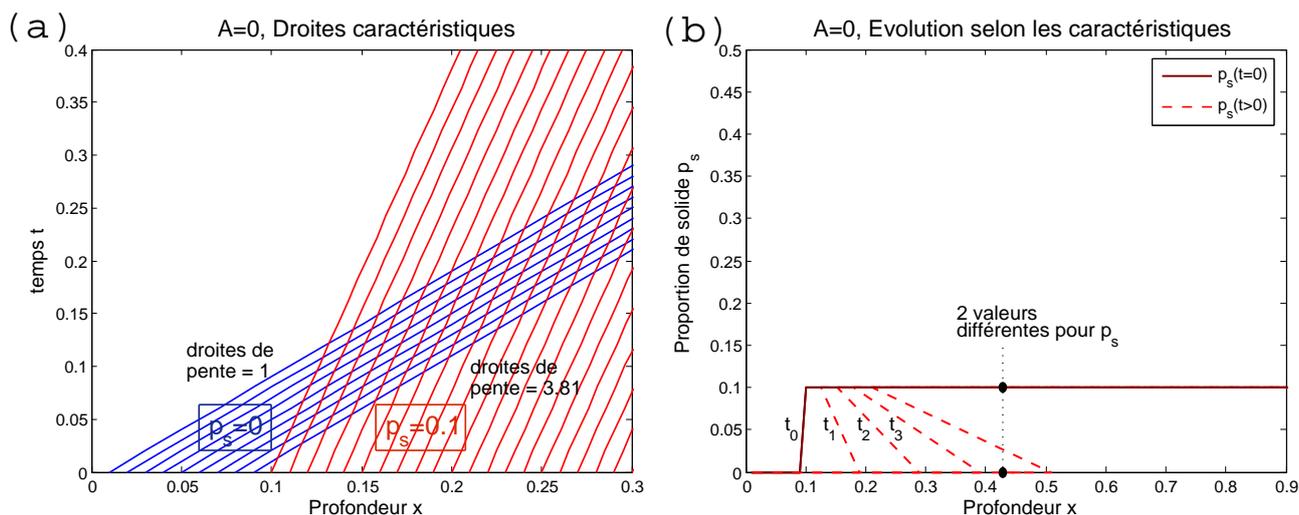


FIGURE 8.6 – (a) Représentation des droites caractéristiques avant correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — p_s est constante le long des droites caractéristiques.

Dans la réalité, une seule valeur existe pour chaque x et un *front de discontinuité* net de la

CHAPITRE 8. TESTS DE VALIDATION DU MODÈLE DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

valeur de la variable p_s , appelé aussi "choc", se propage à une vitesse bien déterminée. La vitesse de propagation de ce choc est donnée par la *relation de Rankine-Hugoniot (R-H)* (Whitham [1974]; Charrier [2000]; LeVeque [2004]) :

$$v_{choc} = v_{RH} = \frac{f(p_d) - f(p_g)}{p_d - p_g} \quad (8.13)$$

avec p_d et p_g les valeurs de la fonction $p_s(x, t)$ à droite et à gauche du choc. Ici $p_d = 0.1$ et $p_g = 0$, ce qui nous donne une pente égale à $v_{choc} = 0.59$ (1.69 dans le repère (x,t)).

Lorsque les droites caractéristiques de pente 1 rencontrent à un temps donné celles de pente 0.26, leurs pentes prennent la valeur donnée par la vitesse de R-H qui est égale à 0.59.

Nous avons implémenté un algorithme qui permet de tracer les courbes caractéristiques et de corriger leurs pentes lorsqu'un choc se produit. Le principe de correction des pentes est représenté sur la figure 8.7.

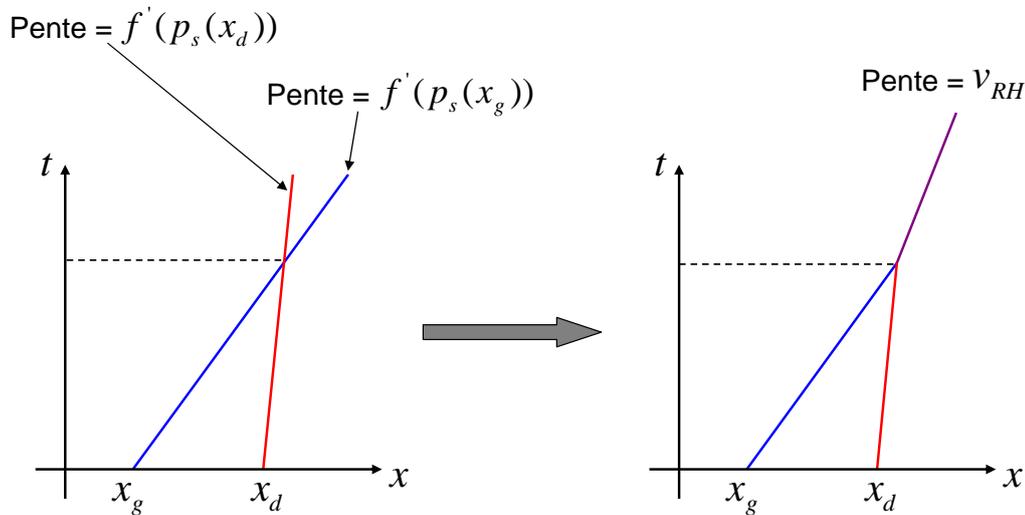


FIGURE 8.7 – Principe de correction des pentes des caractéristiques lorsqu'elles se croisent (choc). — la vitesse de *Rankine-Hugoniot*, v_{RH} , est donnée par la relation (8.13).

L'algorithme applique ce principe à chaque fois que deux courbes caractéristiques se croisent. Nous représentons l'évolution de ces caractéristiques dans le temps, après correction des pentes, sur la figure 8.8a

En utilisant le fait que la variable p_s est constante le long des caractéristiques, nous déduisons automatiquement l'évolution de p_s que nous traçons sur la figure 8.8b.

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

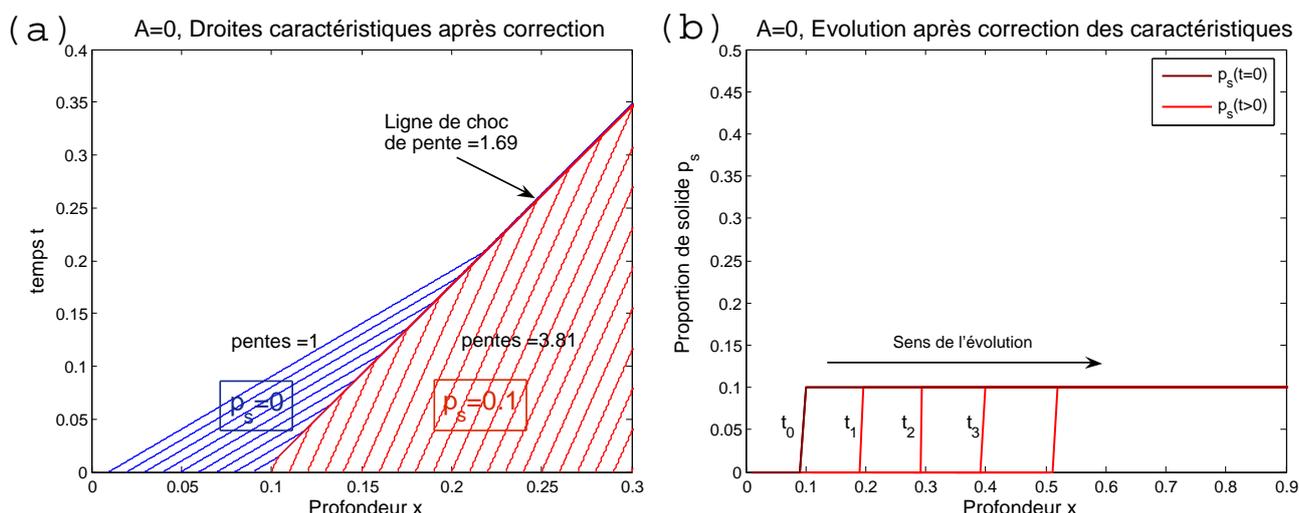


FIGURE 8.8 – (a) Représentation des courbes caractéristiques après correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Propagation du choc.

Le même raisonnement peut se faire au niveau du fond de la colonne magmatique. En effet, la colonne magmatique étant fermée, le solide sédimente et remplit son fond au détriment du sommet qui se vide, créant ainsi un *front de sédimentation* qui remonte en direction du sommet. Ce front représente alors un choc entre la zone où $p_s = 0.1$ à gauche du front et la zone solide où $p_s = 1$ à droite du front, et se déplace à une vitesse de R-H égale à $\frac{f(1)-f(0.1)}{1-0.1} \cong -0.066$.

Nous représentons dans la figure 8.9b la solution théorique de l'évolution de p_s , donnée par l'étude des caractéristiques, notée p_{s_th} , comparée à la solution donnée par la résolution numérique basée sur le schéma LxF1, notée p_{s_simul} .

La comparaison entre les deux évolutions montre que la simulation fournit un résultat globalement satisfaisant avec déplacement des deux fronts à la vitesse prévue par la relation de R-H. Nous appelons le front se déplaçant vers le fond séparant la partie supérieure de la colonne qui s'est vidée de la partie où $p_s = 0.1$, front de "vidange". La partie centrale entre les deux fronts traduit le déplacement en direction du bas de la proportion de solide à l'état initial $p_{s0} = 0.1$. Cependant la discontinuité n'est pas parfaitement marquée avec le schéma LxF1 à cause de la diffusion numérique.

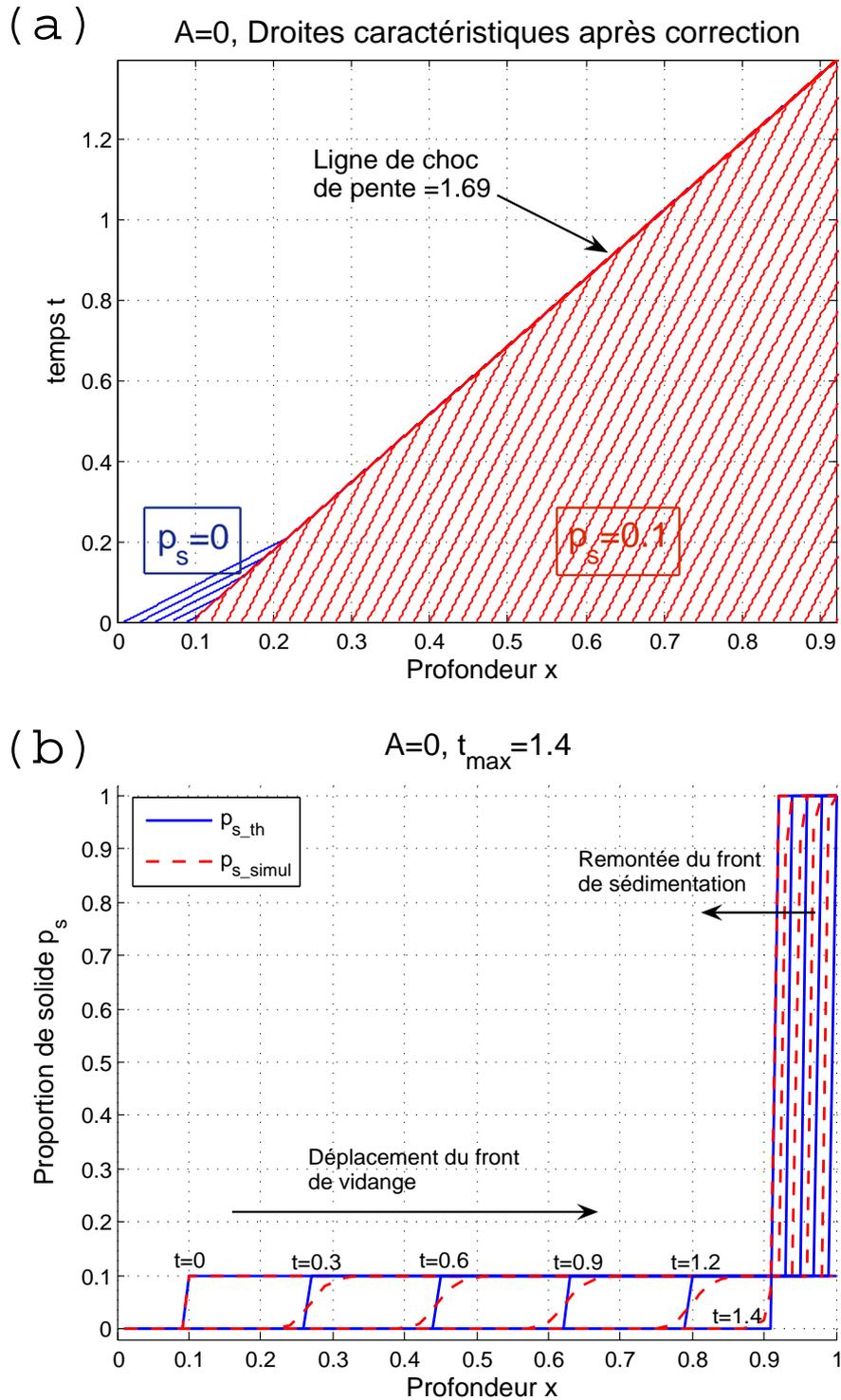


FIGURE 8.9 – (a) Courbes caractéristiques après correction des pentes représentées jusqu’au temps $t = 1.4$. (b) Comparaison entre l’évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1 dans le cas de la sédimentation seule (pas de solidification : $A = 0$). — Deux fronts se créent : l’un se déplaçant vers le fond de la colonne magnétique fermée, l’autre vers le sommet.

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

Conservation :

Nous devons vérifier également la conservation de la matière totale :

$$\forall n, \sum_{i=1}^M p_{s_i}^n = \sum_{i=1}^M p_{s_i}^0 \quad (8.14)$$

la quantité totale de solide initial étant de $0.9 \times 0.1 = 0.09$, nous vérifions cette égalité en particulier en fin de parcours : le solide remplit une épaisseur au fond de 0.09 à $p_s = 1$, et l'intervalle $[0, 0.91]$ est occupé par le liquide ($p_s = 0$). Le front de sédimentation doit arriver donc au point $x = 0.91$ où il rencontre le front de vidage. Cette rencontre se fait au temps $t = 1.4$, ce qui est bien la valeur prévue par les caractéristiques (cf figure 8.9a).

Pour $t < 1.4$, nous vérifions l'égalité (8.14) en affichant sur la fenêtre de calcul de Fortran 90, à chaque itération, la quantité $\sum_{i=1}^M p_{s_i}^n$ et en la comparant à $\sum_{i=1}^M p_{s_i}^0$ et nous observons à tout moment une parfaite conservation (0% de pertes).

Remarque :

Les schémas à 3 points prennent en compte les valeurs de l'inconnue à l'amont ($i - 1$) et à l'aval ($i + 1$) pour la discrétisation du terme de flux de matière (cf. (7.20)).

Or les valeurs p_{s_i} sont des moyennes sur les mailles i (cf. (7.8)), au niveau du front de sédimentation, ceci pose un problème numérique car une partie de cette maille est solidifiée $p_s = 1$ et ne doit donc pas entrer dans le calcul des flux de matière. Ce problème ainsi que la façon de le résoudre sont détaillés dans la section 8.4.1.

8.3.2 Exemple d'un choc à p_{s_0} dépassant 0.17

Nous prenons à présent un exemple où p_{s_0} dépasse la valeur 0.17 après laquelle la fonction $f'(p_s)$ change de signe. Le profil de p_{s_0} est représenté sur la figure ci-dessous avec une partie où $p_{s_0}(x)$ est linéaire croissante.

Nous représentons sur cette figure également les valeurs de la vitesse du flux $f'(p_s)$ en fonction de différentes valeurs prises par p_{s_0} , avec $f'(p_s) > 0$ pour $p_s < 0.17$ et $f'(p_s) < 0$ pour $p_s > 0.17$.

L'observation de la forme de p_{s_0} et de la distribution de $f'(p_s)$ le long de p_{s_0} nous indique que la partie en dessous de $p_s = 0.17$ aura tendance à avancer en direction du fond ($x = 1$) et la partie au dessus de $p_s = 0.17$ reculera en direction du sommet ($x = 0$).

CHAPITRE 8. TESTS DE VALIDATION DU MODÈLE DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

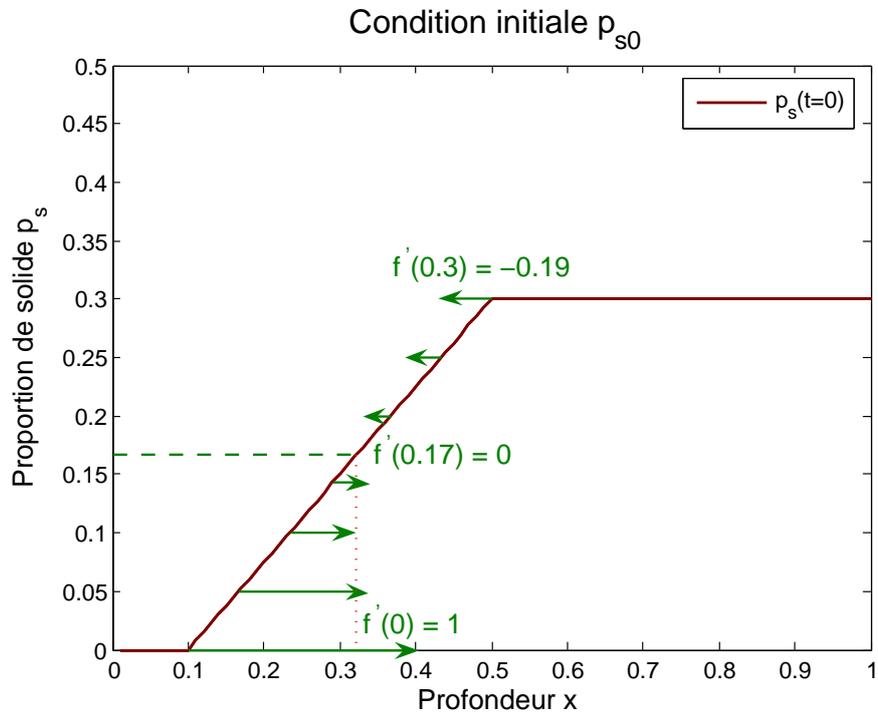


FIGURE 8.10 – Condition initiale croissante, p_{s0} dépassant 0.17. — Représentation des valeurs $f'(p_{s0})$ le long de la courbe $p_{s0}(x)$.

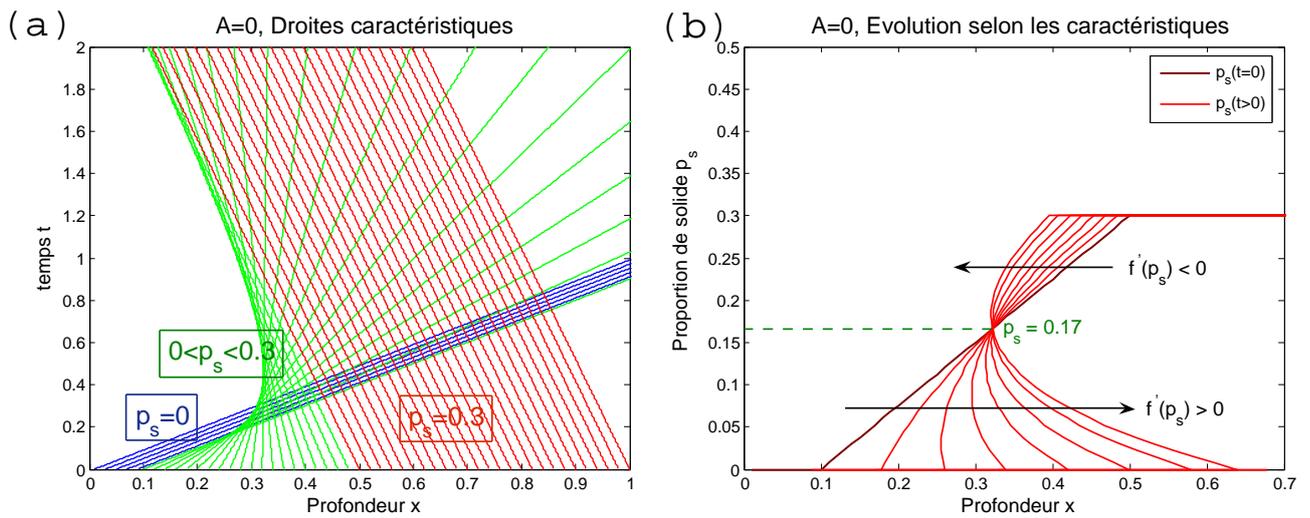


FIGURE 8.11 – (a) Droites caractéristiques avant correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Apparition de chocs.

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

Cette observation est décrite par les courbes caractéristiques que nous représentons sur la figure 8.11a. Nous pouvons y distinguer trois parties :

- $x \in [0, 0.1]$: $p_{s0} = 0$, $f'(0) = 1$, les pentes des droites caractéristiques sont parallèles sur cet intervalle avec une pente=1,
- $x \in]0.1, 0.5[$: $0 < p_{s0} < 0.3$, $-0.19 < f'(p_{s0}) < 1$, les pentes sont variables de 1 à -1/0.19=-5.26 dans le repère (x,t). Elles sont positives lorsque $x \in [0.1, 0.32]$, négatives sur $[0.32, 0.5]$ et à $x = 0.32$, $p_{s0} = 0.17$ et $f'(0.17) = 0$, la pente y est donc verticale,
- $x \in [0.5, 1]$: $p_{s0} = 0.3$, $f'(0.3) = -0.19$, les droites caractéristiques sont parallèles de pente=-5.26'

Comme pour l'exemple précédent, les droites caractéristiques se croisant entre elles traduisent l'existence de plus d'une valeur de p_s pour un même x (figure 8.11b), ce qui indique la formation de chocs. Les pentes des caractéristiques sont alors corrigées à partir de leur point d'intersection (figure 8.12a).

Nous en déduisons alors l'évolution de p_s dans le temps. Cette solution analytique (p_{s_th}) est comparée à la solution donnée par la simulation par le schéma LxF1 (p_{s_simul}), sur la figure 8.12b.

Nous observons bien sur la figure 8.12b, pour les deux solutions p_{s_th} et p_{s_simul} , le déplacement de la partie supérieure à $p_s = 0.17$ vers le sommet $x = 0$ et l'avancement de la partie inférieure vers le fond $x = 1$, ce qui conduit à la formation d'un choc puis sa propagation au cours du temps vers le fond comme prévu par la pente de la ligne de choc sur la figure 8.12a. Et à l'instant $t = 1.84$, le front se trouve à peu près à l'abscisse $x = 0.61$, ce qui s'observe aussi sur la figure 8.12a.

Quant à la netteté des discontinuités, elle est moins marquée pour p_{s_simul} à cause encore de la diffusion numérique. La conservation elle, est bien vérifiée à 100% tout au long des itérations.

Remarque : Nous avons représenté les résultats sur l'intervalle spatial $[0, 0.7]$, ce qui est suffisant pour vérifier la bonne adéquation entre p_{s_th} et p_{s_simul} . Au delà de la valeur 0.7, on pourrait suivre l'évolution du front de sédimentation qui remonte.

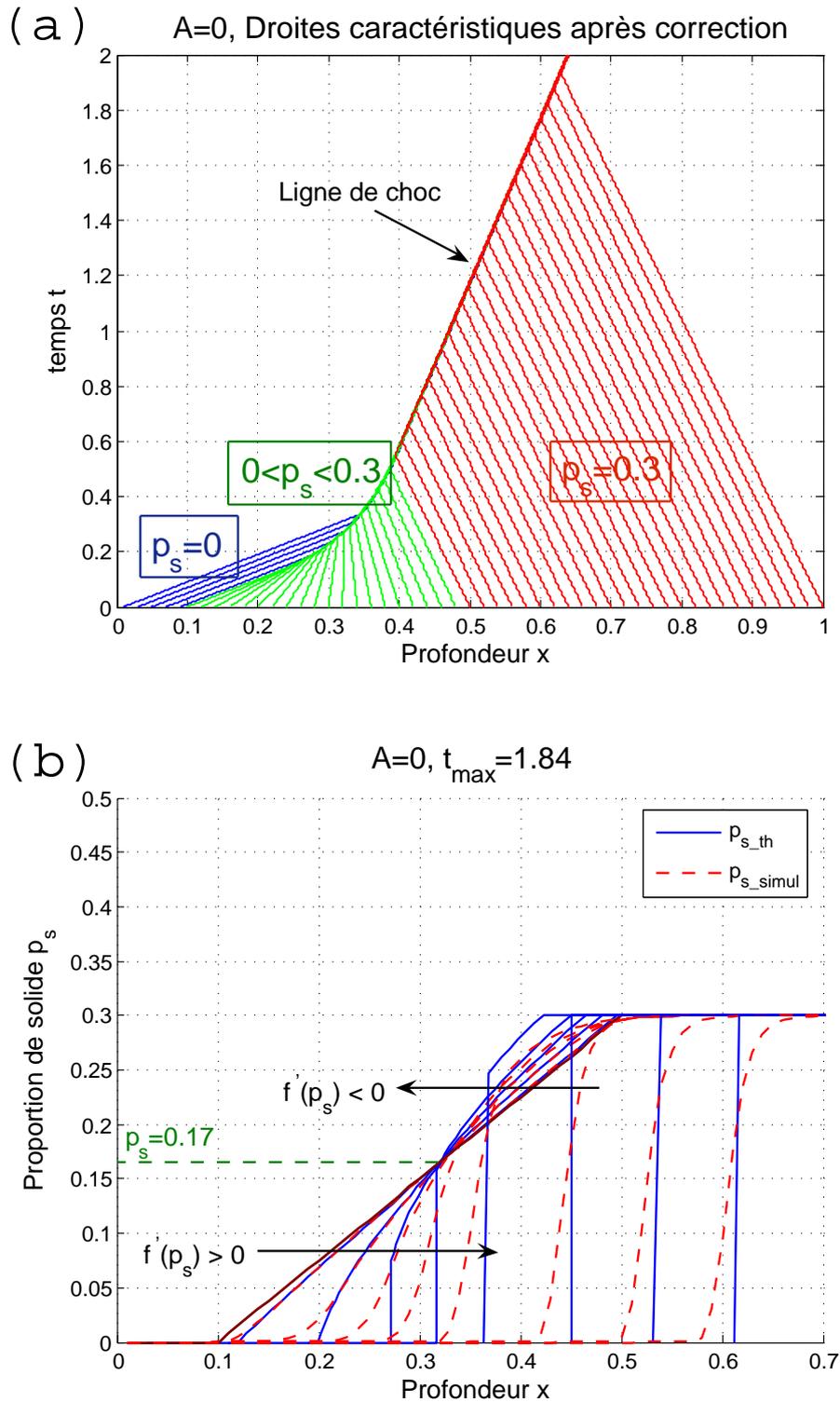


FIGURE 8.12 – (a) Courbes caractéristiques après correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Propagation d'un choc.

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

8.3.3 Exemple d'une détente à $p_{s0} < 0.33$

Nous testons ici un cas de *détente*, c'est le phénomène contraire au phénomène de choc, c'est-à-dire que le graphe de p_s s'étale sur l'espace au cours du temps, contrairement au phénomène de choc où le graphe de p_s est compressé avant de former un front de discontinuité. Nous prenons pour cela une condition initiale p_{s0} décroissante avec la profondeur x . La figure 8.13 indique que les vitesses des flux tendent à étaler la courbe de p_s .

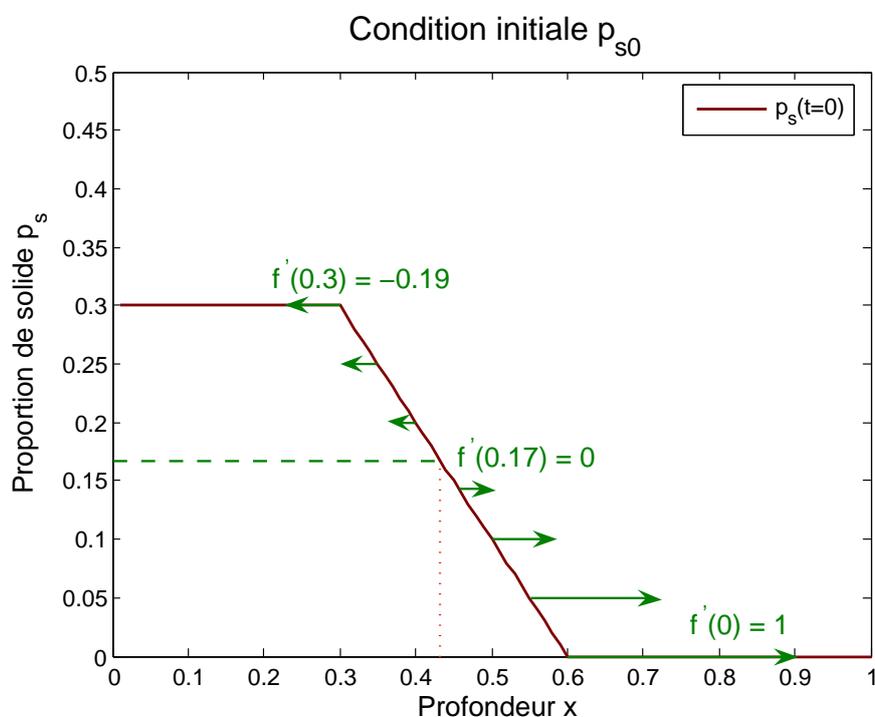


FIGURE 8.13 – Condition initiale décroissante, $p_{s0} < 0.33$.

Nous traçons les courbes caractéristiques correspondant à cette condition initiale, sur la figure 8.14a. Là encore 3 zones sont distinguées avec pour $x \leq 0.3$ des droites parallèles, de même pour $x \geq 0.6$, et des droites qui s'écartent les unes des autres pour $0.3 < x < 0.6$, formant ainsi une sorte d'éventail. A $x = 0.43$, $p_{s0} = 0.17$ et $f'(0.17) = 0$, la pente y est verticale.

Nous en déduisons l'évolution analytique de p_s au cours du temps, que nous comparons à la simulation LxF1 sur la figure 8.14b.

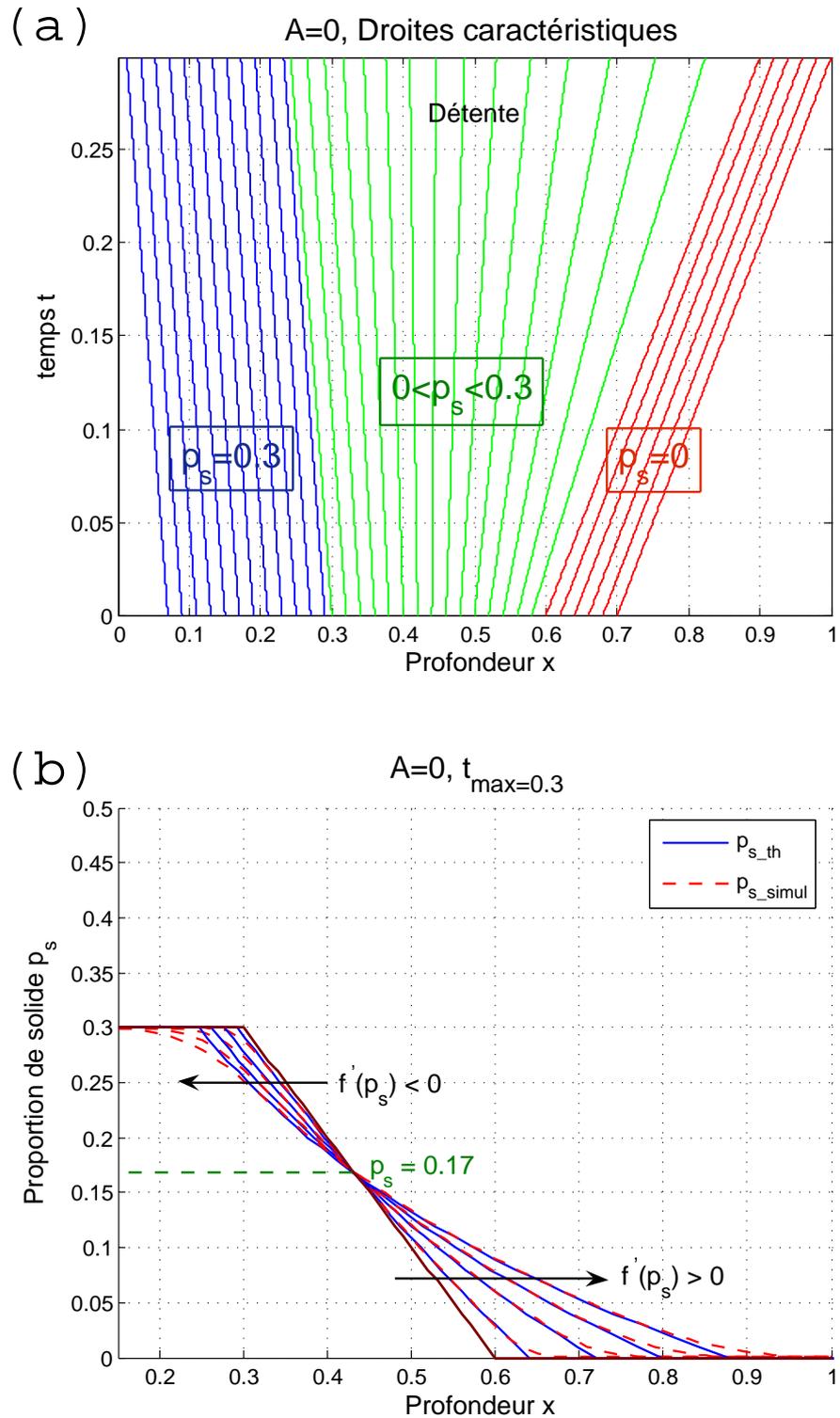


FIGURE 8.14 – (a) Courbes caractéristiques. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Phénomène de détente.

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

La partie supérieure à $p_s = 0.17$ se déplace vers le sommet et la partie inférieure vers le fond, faisant ainsi se détendre le profil de p_s . Et on observe comme précédemment, une bonne adéquation entre p_{s_th} et p_{s_simul} et l'effet de la diffusion sur la solution p_{s_simul} qui arrondit les angles au niveau de $p_s = 0$ et $p_s = 0.3$. La conservation est toujours vérifiée à 100%.

8.3.4 Exemple d'un choc à p_{s0} dépassant 0.33

Pour cet exemple, nous prenons une condition initiale p_{s0} croissante, qui dépasse la valeur 0.33 après laquelle le flux f change de concavité. Les valeurs de $f'(p_s)$ sont reportées sur la figure ci-dessous le long de la courbe de p_{s0} .

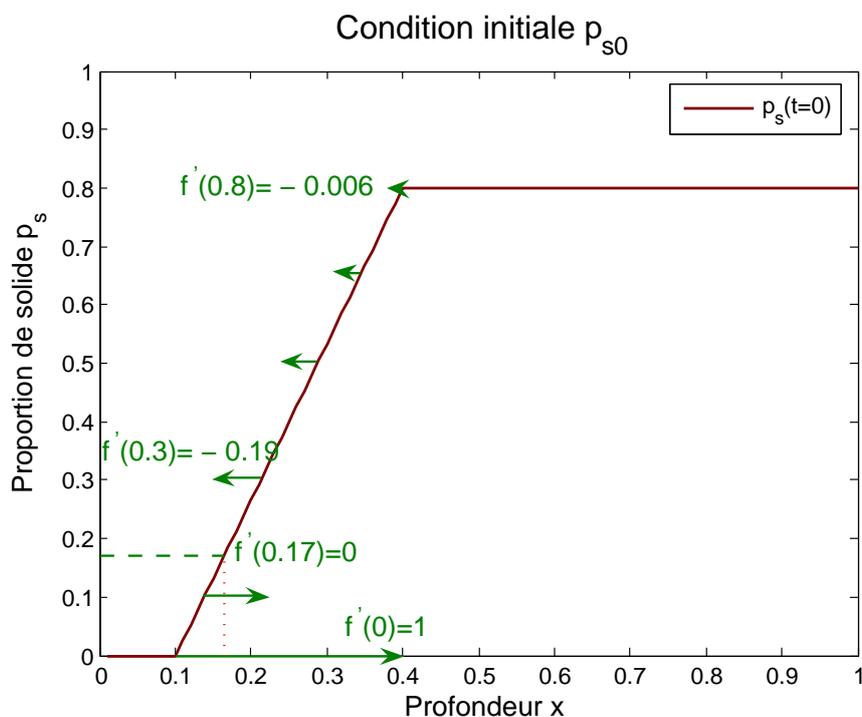


FIGURE 8.15 – Condition initiale croissante, p_{s0} dépassant 0.33.

Sur la figure 8.16a, nous représentons les courbes caractéristiques après correction de leurs pentes. Les pentes sont positives pour $x \in [0, 0.17]$, verticale à $x = 0.17$, valeur pour laquelle $p_{s0} = 0.17$, puis négatives sur $[0.17, 1]$, elles sont presque verticales pour les valeurs $x \geq 0.4$ pour lesquelles $p_{s0} = 0.8$ ($f'(0.8) = -0.006$).

Nous observons une ligne de choc qui avance légèrement vers les x croissants au cours du temps pour atteindre un seuil à environ $x = 0.24$, ce qu'on observe ensuite sur le graphe p_{s_th} correspondant (figure 8.16b). La remontée de l'information pour $p_s > 0.17$ vers le sommet est rattrapée par le choc qui avance dans le sens contraire.

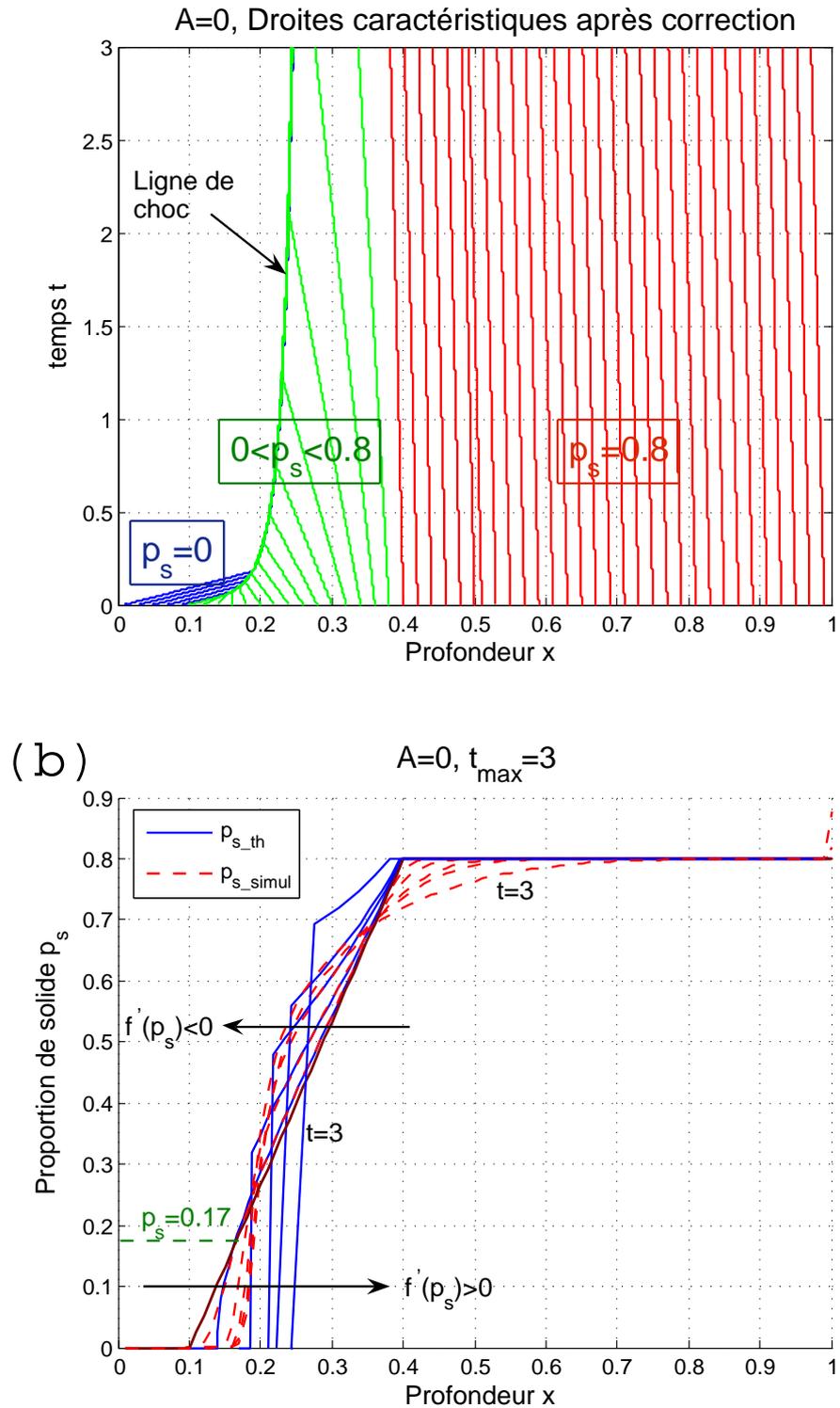


FIGURE 8.16 – (a) Courbes caractéristiques après correction des pentes. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Formation d'un choc.

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

Pour le résultat donné par le schéma LxF1, p_{s_simul} suit bien l'allure de p_{s_th} pendant les premières itérations, avec présence d'une diffusion numérique qui s'accroît lorsque l'on s'approche du temps $t = 3$: la courbe p_{s_simul} s'étale au niveau de $p_s = 0.8$ et le choc est légèrement décalé par rapport à la solution analytique. La diffusion numérique est plus visible sur cet exemple où l'avancée du choc atteint un maximum.

Remarque : Si on suit dans le temps la simulation par le schéma numérique LxF1, un front de sédimentation se forme au fond de la colonne ($x = 1$) dont nous pouvons remarquer un début d'apparition sur la figure 8.16b, se front remonte en direction du sommet, et rencontre le front de "vidage" qui descend, cette rencontre a lieu à l'abscisse $x = 0.4$. Nous aurons ainsi que du liquide ($p_s = 0$) pour $x < 0.4$ et que du solide ($p_s = 1$) pour $x \geq 0.4$.

8.3.5 Exemple d'une détente à p_{s0} dépassant 0.33

Pour ce dernier exemple de validation à solidification nulle ($A = 0$), nous testons un cas de détente avec une condition initiale décroissante avec p_{s0} dépassant 0.33.

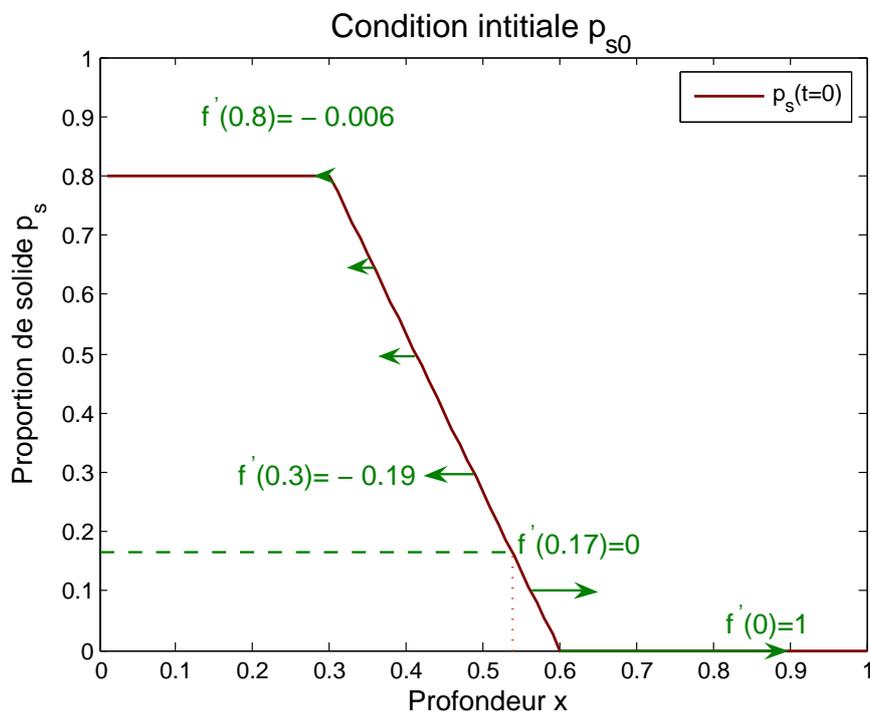


FIGURE 8.17 – Condition initiale décroissante, p_{s0} dépassant 0.33.

Sur la figure 8.18a, les caractéristiques sont des droites de pentes quasiment verticales pour $x \leq 0.3$ ($p_{s0} = 0.8$), négatives pour $x \in [0.3, 0.53]$ et positives pour $x \geq 0.53$, avec une pente verticale à $x = 0.53$ où $p_{s0} = 0.17$.

CHAPITRE 8. TESTS DE VALIDATION DU MODÈLE DE
CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

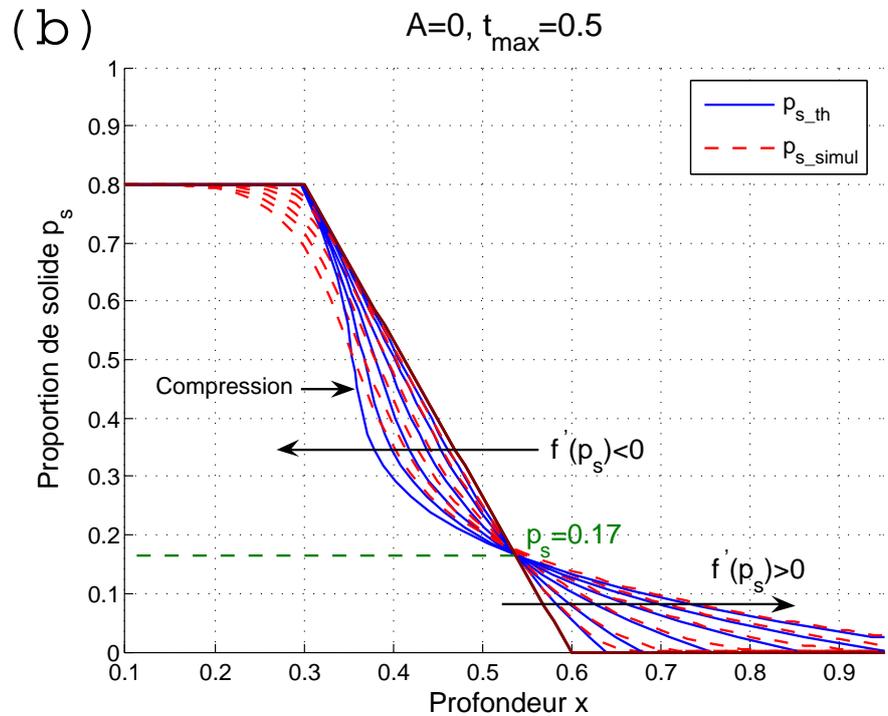
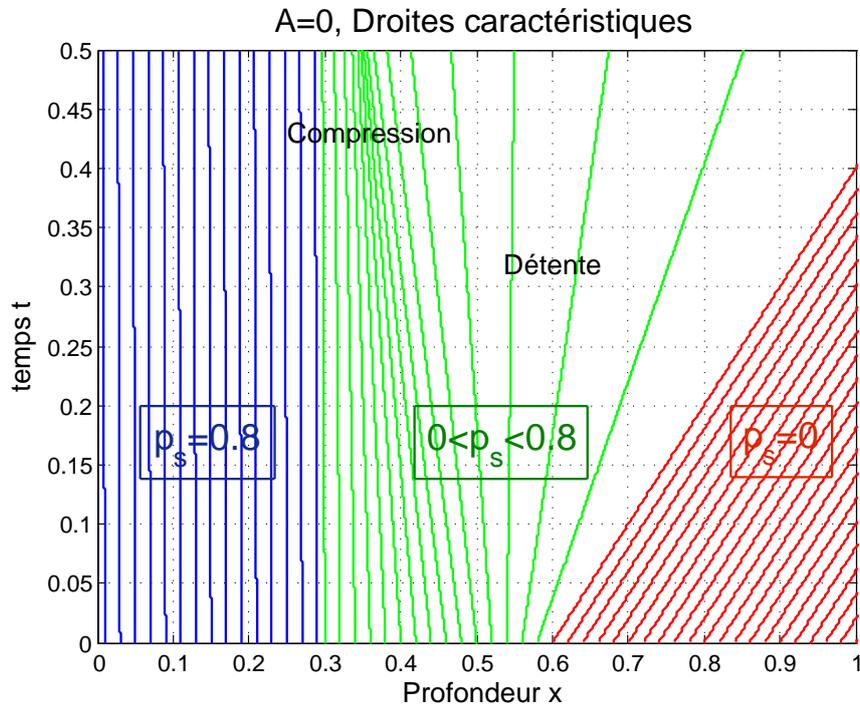


FIGURE 8.18 – (a) Courbes caractéristiques. (b) Comparaison entre l'évolution de p_s prévue par les droites caractéristiques et le résultat de simulation par le schéma LxF1. — Présence d'une zone de compression et d'une zone de détente.

8.3. VALIDATION D'UN SCHEMA À 3 POINTS, LE SCHEMA LXF1

Nous observons une zone de détente entre $x = 0.5$ et $x = 0.6$ et une zone de "compression" pour $x \in [0.3, 0.5]$ où les caractéristiques se rapprochent les unes des autres pour former plus tard, à $t > 0.5$, un choc à $x = 0.35$, ce choc qui est dû à la distribution de $f'(p_s)$ sur la courbe de p_{s0} : la valeur absolue de $f'(p_s)$ décroît pour p_s allant de 0.17 à 0.8, la courbe de p_s recule alors plus vite vers le sommet pour $p_s = 0.3$ que pour $p_s = 0.8$ créant ainsi un choc).

En comparant la solution de simulation à la solution théorique, la figure montre une bonne adéquation entre les deux solutions avec une diffusion numérique plus marquée pour les grandes valeurs de p_s .

8.3.6 Exemple avec solidification

La prise en compte de la solidification revient à considérer le paramètre A non nul. Lorsque $A \neq 0$, alors p_s n'est pas constante le long des courbes caractéristiques, p_s vérifie la relation (8.10) :

$$p_s(X(t), t) = A \cdot q_s(X(t)) \cdot t + p_s(X(0), 0)$$

avec les courbes caractéristiques $X(t)$ solution de l'EDO (8.5) :

$$\frac{dX(t)}{dt} = f'(p_s(X(t), t))$$

ces courbes caractéristiques ne sont plus des droites. La résolution de cette EDO a été faite par la méthode d'Euler explicite.

Nous prenons comme condition initiale $p_{s0} = 0.1$ partout sauf en $x = 0$ (pour des raisons de calcul des courbes caractéristiques), et nous considérons $A = 0.1$ et une vitesse de solidification constante sur la profondeur $q_s(x) = 1$.

En gardant le même algorithme utilisé pour la correction des courbes caractéristiques en cas de croisement de celles-ci, nous obtenons les courbes caractéristiques tracées sur la figure 8.19a.

Ces courbes caractéristiques prévoient un transport de l'information (en l'occurrence linconnue p_s) dans la direction du fond de la colonne, puis cette direction s'inverse à partir du temps $t = 1.25$ et à l'abscisse $x = 0.33$, l'information remonterait en direction du sommet. Le résultat de la simulation par schéma LxF1 est représenté dans la figure 8.19b.

Nous remarquons qu'il y a bien changement de direction de l'information. Cependant, ce changement se fait au temps $t \approx 2$ et à l'abscisse $x \approx 0.45$, contrairement à ce qui est prévu par les courbes caractéristiques.

Pour la partie centrale, située entre les deux chocs (par exemple $x \in [0.6, 0.7]$), la solidification fait augmenter les valeurs de p_s . On vérifie qu'à $t = 0.34$, la production de solide est de $t \times A \times q_s(x) = 3.4 \times 0.1 \times 1 = 0.34$, la valeur initiale p_s étant égale à 0.1, on doit retrouver à $t = 3.4$, $p_s(x) = 0.44$ pour $x \in [0.6, 0.7]$, c'est bien ce qu'on observe sur la figure 8.19b.

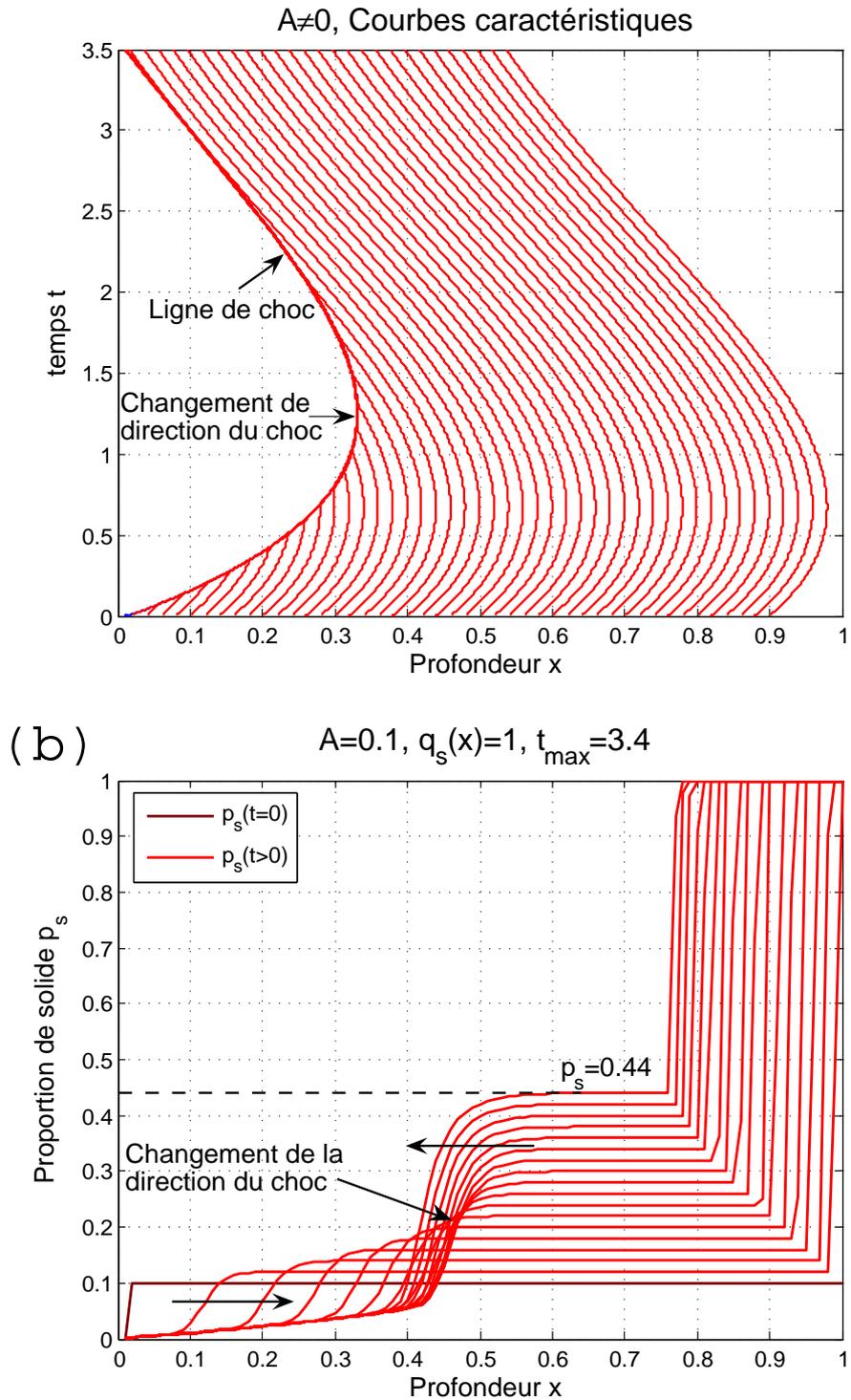


FIGURE 8.19 – (a) Courbes caractéristiques après correction des pentes. — Changement de la direction du choc à $t = 1.25$ et à $x = 0.33$. (b) Résultat obtenu par la simulation numérique utilisant le schéma LxF1. — Changement de la direction du choc à $t \approx 2$ et à $x \approx 0.45$.

8.4. MODIFICATION DES SCHÉMAS NUMÉRIQUES DANS DES CAS LIMITES

Remarque :

Le décalage entre les résultats obtenus par la simulation utilisant le schéma LxF1 et ceux prévus par les courbes caractéristiques pourrait être dû à la diffusion du schéma numérique, cette diffusion qui se fait ressentir encore plus dans le cas où l'on considère la solidification. Il faudrait peut-être aussi revoir l'algorithme de calcul des pentes des courbes caractéristiques qui ne sont plus des droites dans le cas $A \neq 0$.

Conservation :

Nous devons vérifier la conservation de la matière totale en tenant compte de la production de solide au cours du temps, à tout instant t_n , la quantité de solide totale est égale à la quantité initiale plus la quantité produite :

$$\forall n, \sum_{i=1}^M p_{s_i}^n = \sum_{i=1}^M p_{s_i}^0 + t_n \cdot \sum_{i=1}^M q_{s_i} \quad (8.15)$$

Nous vérifions cette égalité sur la fenêtre de calcul de Fortran 90, nous observons à tout moment une parfaite conservation.

8.4 Modification des schémas numériques dans des cas limites

8.4.1 Problème de frontière mobile

Ce problème est d'ordre numérique et se pose au niveau de la maille contenant le front de sédimentation. Pour représenter ce problème nous prenons deux exemples de calcul en absence de solidification ($A = 0$). Les résultats correspondants sont représentés sur la figure 8.20.

Sur ces résultats, nous remarquons que la dernière maille n'arrive pas à se remplir en solide, le schéma numérique est la cause de cette divergence. En effet, les schémas à 3 points s'écrivent de la sorte (cf. (7.20)) :

$$p_{s_i}^n - p_{s_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n) - g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n)) = \Delta t \cdot A \cdot q_{s_i}^n$$

Pour une maille i , ces schémas prennent en compte les valeurs de l'inconnue à l'amont ($i - 1$) et à l'aval ($i + 1$) pour la discrétisation du terme de flux de matière $\frac{\partial f(p_s)}{\partial x}$. Le terme $g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n)$ exprime le flux sortant de la maille i (vers la maille $i + 1$) et le terme $g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n)$ exprime le flux entrant dans la maille i (arrivant de la maille $i - 1$).

CHAPITRE 8. TESTS DE VALIDATION DU MODÈLE DE CRISTALLISATION/SÉDIMENTATION

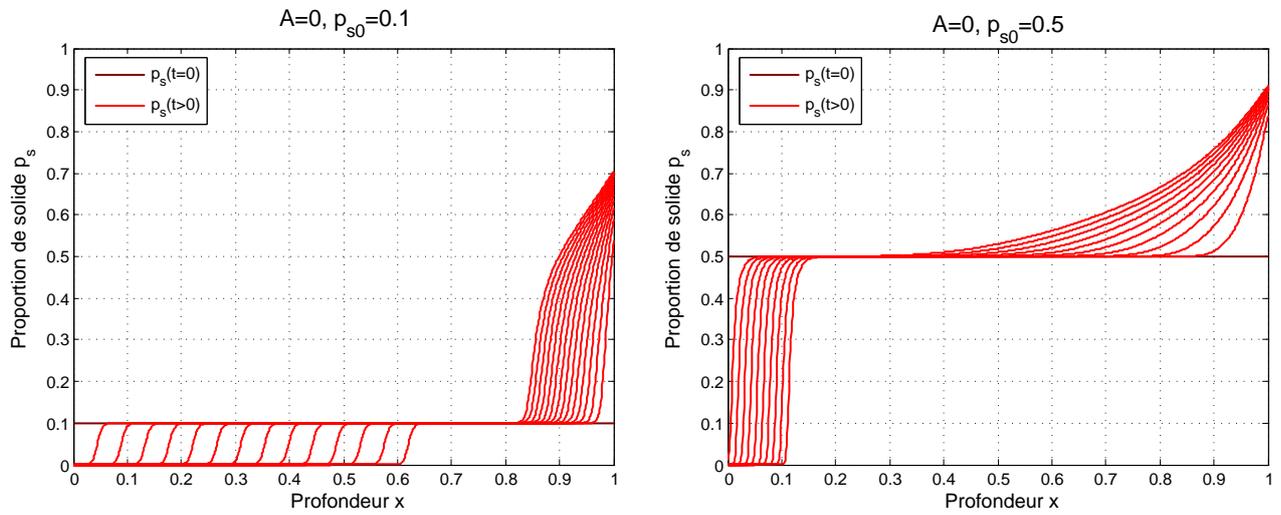


FIGURE 8.20 – Résultats de simulation avant modification des termes de flux au niveau du front de sédimentation pour deux exemples de condition initiale p_{s0} . — La dernière maille où se trouve le front de sédimentation ne se remplit pas de solide ($p_s(1)$ n’atteint pas la valeur 1).

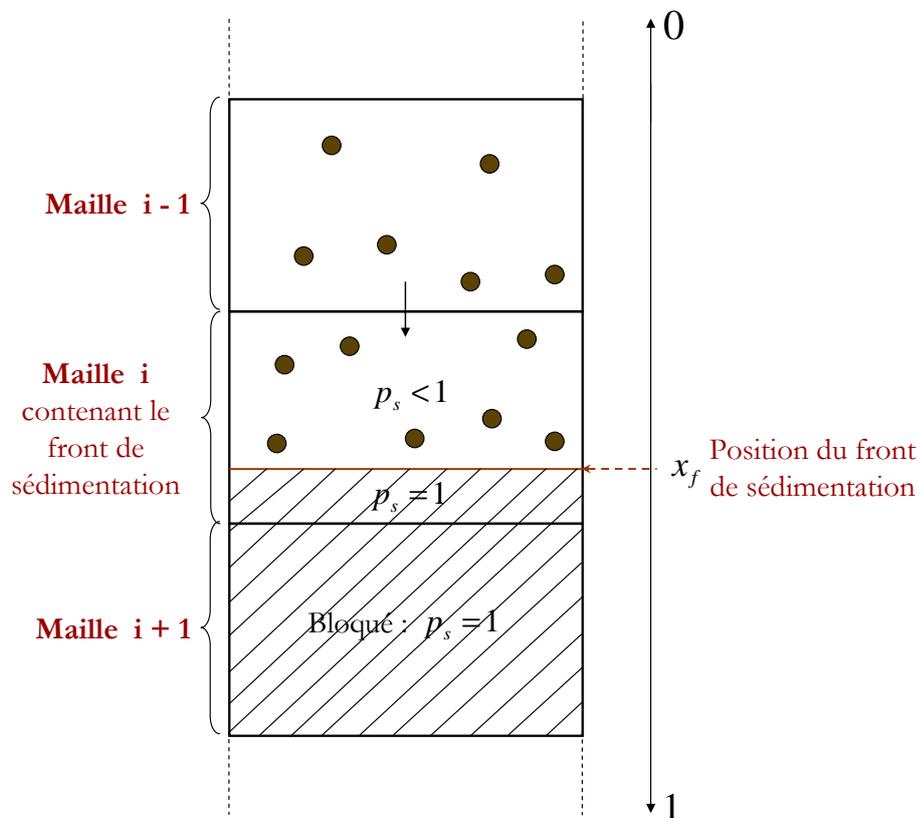


FIGURE 8.21 – Représentation du front de sédimentation. — Le front de sédimentation d’abscisse x_f , sépare la maille en deux parties : une partie inférieure sédimentée pour laquelle $p_s = 1$ et une partie supérieure ”mobile” pour laquelle $p_s < 1$.

8.4. MODIFICATION DES SCHÉMAS NUMÉRIQUES DANS DES CAS LIMITES

Supposons que la maille i contient le front de sédimentation. Alors nous annulons le flux sortant de la maille i ($g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n) = 0$), puisque toutes les mailles $j > i$ sont remplies à $p_s = 1$. Et nous ne gardons non nul que le flux entrant dans la maille i .

Or le terme de flux entrant $g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n)$ fait intervenir la valeur p_{s_i} qui est une moyenne sur la maille i (cf. relations (7.8)) alors que **la maille contenant le front de sédimentation n'est pas homogène**, ce qui pose un problème numérique. En effet, cette maille est divisée en deux parties, la partie en-dessous du front où $p_s = 1$ et une la partie au-dessus de celui-ci où $p_s < 1$ (figure 8.21). Or lorsque $p_s = 1$, le solide est figé et ne bouge plus, il ne doit donc plus être pris en compte pour le calcul du terme de flux de matière.

De plus, **ce front est mobile** : au fur et à mesure que le solide sédimente, ce front remonte en direction du sommet de la colonne magmatique, il faut donc à chaque itération Δt , identifier la maille contenant le front de sédimentation.

Nous avons résolu ce problème en utilisant une méthode simple : A chaque itération, nous localisons **la maille i contenant le front mobile de sédimentation** puis nous approximons le flux numérique entrant dans la maille i , $f_{i-1/2}^n$, comme dans le schéma VFDAm (cf. relations (7.11)), par la **valeur en amont** $f(p_{s_{i-1}}^n)$, et nous le considérons égal au flux numérique sortant de la maille $i - 1$:

$$\begin{aligned} \text{flux sortant de la maille } i - 1 &= f(p_{s_{i-1}}^n) \text{ au lieu de } g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n) \\ \text{flux entrant dans la maille } i &= f(p_{s_{i-1}}^n) \text{ au lieu de } g(p_{s_{i-1}}^n, p_{s_i}^n) \end{aligned} \quad (8.16)$$

avec : $f(p_s) = p_s \cdot (1 - p_s)^e$,

ce qui donne pour les deux mailles $i - 1$ et i les schémas suivants :

$$\begin{aligned} p_{s_{i-1}}^n - p_{s_{i-1}}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f(p_{s_{i-1}}^n) - g(p_{s_{i-2}}^n, p_{s_{i-1}}^n)) &= \Delta t \cdot A \cdot q_{s_{i-1}}^n \\ p_{s_i}^n - p_{s_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (0 - f(p_{s_{i-1}}^n)) &= \Delta t \cdot A \cdot q_{s_i}^n \end{aligned} \quad (8.17)$$

Ainsi le terme p_{s_i} n'intervient plus et nous obtenons les résultats d'avancée du front mobile pour les deux exemples précédents, avec une conservation qui reste parfaite :

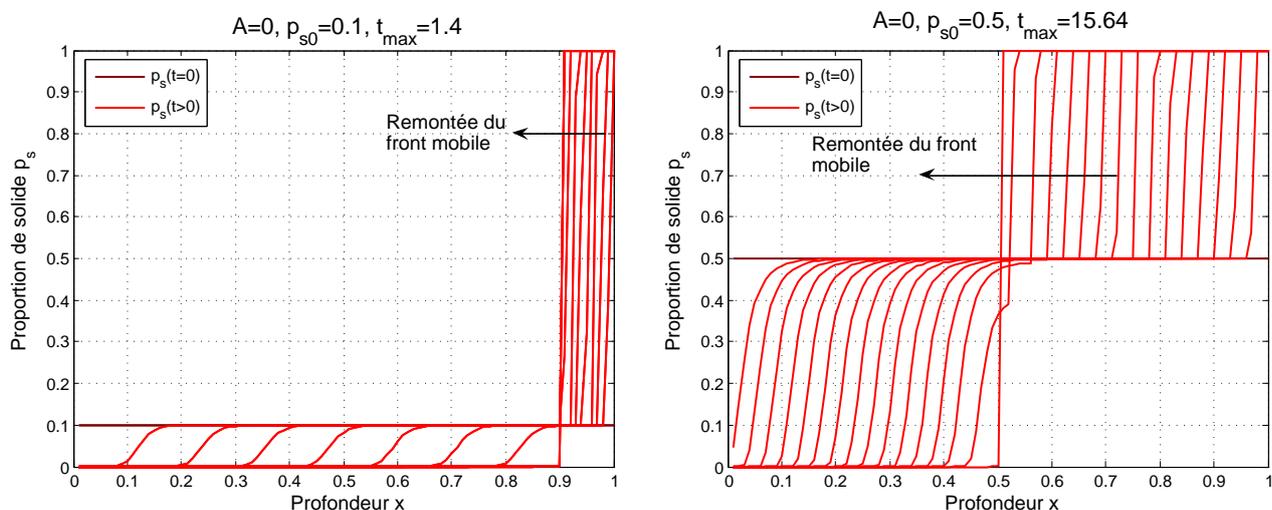


FIGURE 8.22 – Résultats de simulation après modification des termes de flux. — Les mailles du fond se remplissent normalement par le solide et le front de sédimentation remonte.

D'autres méthodes peuvent être utilisées pour résoudre ce genre de problème de frontière mobile, par exemple une *méthode de changement d'échelle* qui consiste à reprendre les EDPs en reconsidérant à chaque itération le domaine spatial réduit où seulement la partie au-dessus du front de sédimentation ($p_s < 1$) est considérée. Cette solution semble beaucoup plus laborieuse que la simple modification sur le schéma numérique à 3 points que nous effectuons au voisinage du front de sédimentation.

8.4.2 Correction des flux au voisinage de mailles remplies de solide

Lorsqu'une maille i est remplie entièrement de solide ($p_s(i) = 1$), alors le solide est bloqué dans cette maille, les flux sortant de cette maille ou entrant dans cette maille doivent donc être annulés. Pour le front de sédimentation en-dessous duquel $p_s = 1$, ce problème est traité comme présenté dans la section précédente. Dans le cas où des mailles remplies de solide se retrouvent au milieu de mailles où existe encore du liquide, il faut annuler les flux entrant et sortant des mailles entièrement solides. Nous représentons un exemple de cette situation lorsqu'une chambre magmatique est soumise à une vitesse de solidification linéaire décroissante avec la profondeur (figure 8.23) :

8.4. MODIFICATION DES SCHÉMAS NUMÉRIQUES DANS DES CAS LIMITES

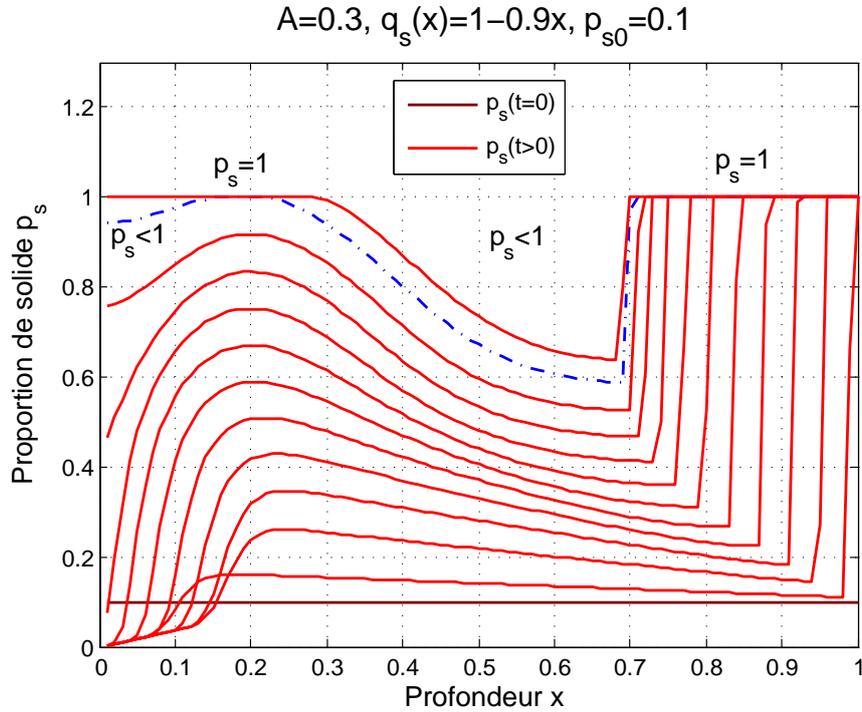


FIGURE 8.23 – Exemple de présence de mailles remplies de solide ($p_s = 1$) au milieu de mailles où existe encore du liquide ($p_s < 1$). — La courbe en tirets pointillés représente un cas, au voisinage de $x = 0.2$, où les flux entrant et sortant des mailles où $p_s = 1$ doivent être annulés.

De façon générale, pour une maille i , le flux entrant doit être annulé si la maille elle-même est entièrement remplie de solide ($p_{s_i} = 1$) et/ou si la maille précédente $i - 1$ l'est ($p_{s_{i-1}} = 1$). De même le flux sortant de la maille i doit être annulé si $p_{s_i} = 1$ et/ou $p_{s_{i+1}} = 1$. Ces différents cas sont illustrés sur la figure 8.24.

Numériquement, l'annulation du flux entrant dans la maille i s'écrit :

$$g(p_{s_{i-1}}, p_{s_i}) = 0$$

et l'annulation du flux sortant de la maille i s'écrit :

$$g(p_{s_i}, p_{s_{i+1}}) = 0$$

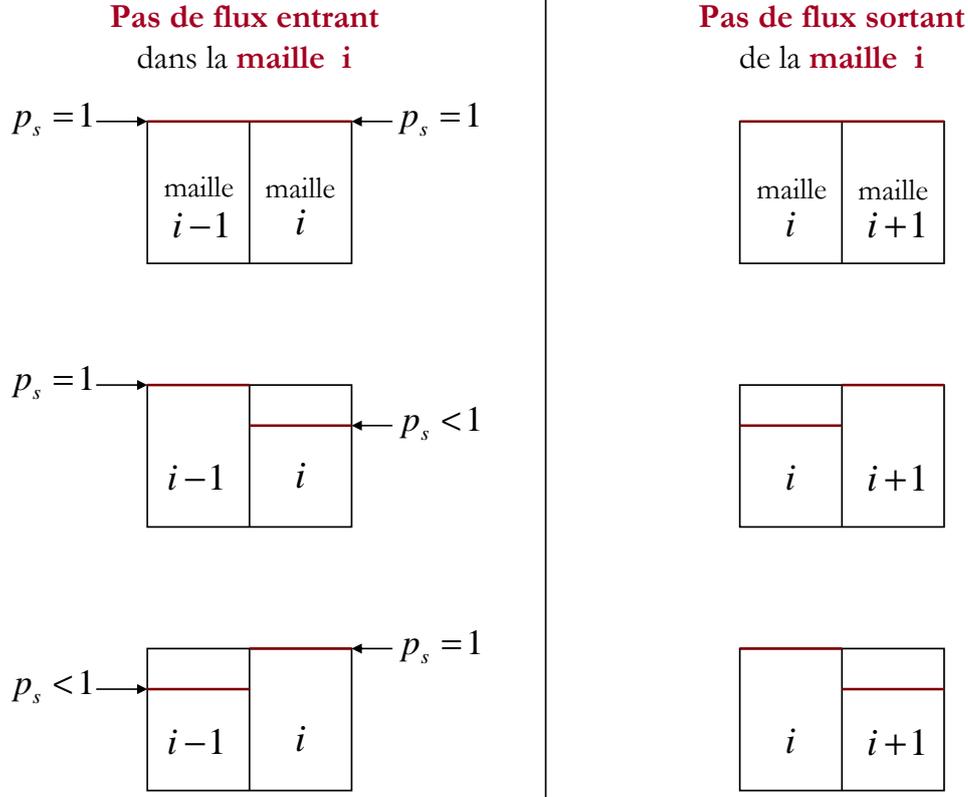


FIGURE 8.24 – Illustration des différents cas où les flux entrant ou sortant sont annulés.

8.5 Conclusion

Le schéma numérique que nous avons choisi est le schéma à 3 points de type Lax-Friedrichs avec une viscosité numérique constante $= 1$. Les tests de validation ont montré que ce schéma a l'avantage d'être stable numériquement et offre une très bonne conservation si on y apporte les modifications nécessaires dans certains cas limites. Ces tests ont aussi montré que malgré la diffusion numérique, les solutions données par ce schéma sont cohérentes avec les solutions analytiques obtenues par la méthode des courbes caractéristiques dans le cas où on ne considère pas de solidification. Pour le cas où on considère la solidification ($A \neq 0$), les résultats nous laissent penser que la diffusion numérique est plus marquée que lorsque $A = 0$.

Une façon d'améliorer la résolution numérique serait d'utiliser des schémas numériques moins diffusifs comme le schéma de Murman-Roe (cf. annexe B) ou des schémas plus adaptés aux traques des chocs comme les *schémas de type Godunov* et leurs extensions (cf. par exemple [Godunov \[1959\]](#); [Godunov \[1962\]](#); [van Leer \[1974\]](#); [van Leer \[1979\]](#); [LeVeque \[1982\]](#); [van Leer \[1984\]](#); [LeVeque \[1985\]](#); [Goodman and LeVeque \[1988\]](#); [Roe \[2001\]](#)), une description détaillée de ces méthodes peut être consultée sur les ouvrages ([Godlewski and Raviart \[1991\]](#)) et ([LeVeque \[2004\]](#)).

8.5. CONCLUSION

Tout au long de ce chapitre, nous avons testé les deux méthodes de résolution des équations discrètes : la méthode du point fixe et la méthode de Newton-Raphson. Pour la résolution de l'équation de bilan de masse, les deux méthodes convergent sans problème et fournissent toujours des résultats identiques.

Chapitre 9

Résolution numérique du problème du transport réactif

Nous voulons résoudre numériquement le système d'EDPs de conservation de l'élément chimique (6.17).

En introduisant les fonctions f_s et f_l qui évaluent respectivement les flux des quantités d'éléments chimiques dans le solide et le liquide :

$$\begin{cases} f_s(p_s \cdot c_s) = v_s \cdot p_s \cdot c_s \\ \text{et : } f_l(p_l \cdot c_l) = v_l \cdot p_l \cdot c_l, \end{cases} \quad (9.1)$$

nous pouvons réécrire le système (6.17) sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} + \frac{\partial f_s(p_s \cdot c_s)}{\partial x} = \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \left(+ D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + A \cdot q_s \cdot c_l \right) \\ \frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} + \frac{\partial f_l(p_l \cdot c_l)}{\partial x} = -D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) - A \cdot q_s \cdot c_l \end{cases} \quad (9.2)$$

avec $v_s = (1 - p_s)^e \geq 0$ et $v_l = -p_s \cdot (1 - p_s)^{e-1} \leq 0$ (cf. (3.9) et (3.13)).

La résolution de ce système suppose la connaissance de la fonction $p_s(x, t)$. Comme vu dans l'introduction de cette partie, l'EDP de cristallisation/sédimentation, dont l'inconnue est $p_s(x, t)$, est d'abord résolue avant d'être introduite dans les EDPs du système (6.17) (cf. figure 6.1). En pratique, à chaque pas de temps Δt , nous calculons $p_s(x, t_n)$ que nous injectons dans les équations de transport réactif.

Reste alors à définir les termes sources et les conditions initiales et aux limites avant de résoudre ce système :

9.1 Conditions initiales et aux limites

La constante A et la fonction $q_s(x)$ ont déjà été définis pour déterminer $p_s(x, t)$, la surface réactive adimensionnée S_r est une fonction directe de p_s (cf. (4.21)) et les masses volumiques ρ_s et ρ_l sont calculées aux température et pression définies par l'utilisateur. Enfin, le nombre de Damköhler D_a ainsi que la fonction isotherme g doivent être entrées par l'utilisateur.

Les *conditions initiales* $c_s(x, 0)$ et $c_l(x, 0)$ sont données par l'utilisateur, leur domaine de validité est l'intervalle $[0, 1]$:

$$\forall x, c_s(x, 0) \in [0, 1],$$

$$\forall x, c_l(x, 0) \in [0, 1].$$

Les *conditions aux limites* sont exprimées dans le schéma numérique en terme de flux. Les flux des quantités d'éléments chimiques sont nuls au sommet et au fond de la colonne magmatique fermée :

- Pour l'équation régissant la conservation de la quantité de l'élément chimique présent dans le solide ($p_s \cdot c_s$) :
 - en $x = 0$: $\forall t, f_s(p_s \cdot c_s)|_{x=0,t} = 0$,
 - en $x = 1$: $\forall t, f_s(p_s \cdot c_s)|_{x=1,t} = 0$.
- Pour l'équation régissant la conservation de la quantité de l'élément chimique présent dans le liquide ($p_l \cdot c_l$) :
 - en $x = 0$: $\forall t, f_l(p_l \cdot c_l)|_{x=0,t} = 0$,
 - en $x = 1$: $\forall t, f_l(p_l \cdot c_l)|_{x=1,t} = 0$.

9.2 Discrétisation par Volumes Finis

Les EDPs (9.2) sont des équations de conservation des éléments chimiques. Comme pour l'équation de conservation de la proportion de solide p_s (7.2), nous utilisons la méthode des volumes finis (VF).

Nous considérons alors la même discrétisation de l'espace que celle représentée dans le chapitre 7 par la figure 7.1 : la colonne magmatique est divisée en M mailles de centres x_i espacés d'un pas régulier Δx et les deux extrémités du domaine sont définies par $x_{1/2} = 0$ et $x_{M+1/2} = 1$. Nous gardons aussi la même discrétisation du temps $t_n = n \cdot \Delta t$, $n \in \mathbb{N}$ et nous cherchons une solution discrète pour les deux EDPs (9.2) d'inconnues $c_s(x, t)$ et $c_l(x, t)$.

CHAPITRE 9. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DU TRANSPORT RÉACTIF

Les grandeurs conservées ici sont $p_s.c_s$ et $p_l.c_l$ (cf. section 4.1), nous reprenons alors l'écriture des schémas VF implicites (7.10) pour ces deux quantités. Nous obtenons ainsi les schémas VF pour les deux EDPs :

$$\left\{ \begin{array}{l} p_{s_i}^n c_{s_i}^n - p_{s_i}^{n-1} c_{s_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f_{s_{i+1/2}}^n - f_{s_{i-1/2}}^n) = \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \left(D_a \cdot S_{r_i}^n (c_{l_i}^n - g(c_{s_i}^n)) + A \cdot q_{s_i}^n c_{l_i}^n \right) \\ p_{l_i}^n c_{l_i}^n - p_{l_i}^{n-1} c_{l_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f_{l_{i+1/2}}^n - f_{l_{i-1/2}}^n) = -\Delta t \cdot \left(D_a \cdot S_{r_i}^n (c_{l_i}^n - g(c_{s_i}^n)) + A \cdot q_{s_i}^n c_{l_i}^n \right) \end{array} \right. \quad (9.3)$$

avec $f_{s_{i-1/2}}^n$ et $f_{l_{i-1/2}}^n$ respectivement les flux numériques des quantités d'éléments chimiques dans le solide et dans le liquide à l'interface $x_{i-1/2}$, au temps t_n , et $f_{s_{i+1/2}}^n$ et $f_{l_{i+1/2}}^n$ respectivement les flux numériques des quantités d'éléments chimiques dans le solide et dans le liquide à l'interface $x_{i+1/2}$, au temps t_n .

Remarques :

- Nous rappelons que les termes $p_{s_i}^n$ ou $p_{l_i}^n$ sont des données d'entrée de ces équations de transport réactif, leurs valeurs sont données par la résolution de l'EDP de cristallisation/sédimentation (chapitre 7).
- Notons Δt_P le pas de temps pris pour le modèle de cristallisation sédimentation et Δt_C le pas de temps pour le modèle de transport réactif. Pour avoir toujours les valeurs de p_s et p_l correspondant aux c_s^n et c_l^n , il faut prendre un pas de temps Δt_C multiple de Δt_P . Cependant, la résolution des équations du transport réactif demandent un pas de temps au minimum de $\Delta t_C = 0.001$ alors que $\Delta t_P = 0.01$ suffit largement pour la résolution de l'équation de cristallisation/sédimentation. Nous avons donc pris le même pas de temps $\Delta t_C = \Delta t_P$, et qui vaut pour la plupart du temps 0.001.

9.3 Schéma numérique décentré

Pour le choix des schémas numériques, nous allons réécrire les deux équations (9.2) en fonction des inconnues c_s et c_l . Par exemple pour c_s , la décomposition des dérivées donne :

$$p_s \frac{\partial c_s}{\partial t} + c_s \frac{\partial p_s}{\partial t} + v_s \cdot p_s \cdot \frac{\partial c_s}{\partial x} + c_s \cdot \frac{\partial (v_s \cdot p_s)}{\partial x} = \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \left(+ D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + A \cdot q_s \cdot c_l \right)$$

Nous procédons de même pour la deuxième équation d'inconnue c_l , puis, en utilisant l'EDP (6.16), nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c_s}{\partial t} + v_s \cdot \frac{\partial c_s}{\partial x} = \frac{1}{p_s} \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \left(D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + A \cdot q_s \cdot (c_l - \frac{\rho_s}{\rho_l} \cdot c_s) \right) \\ \frac{\partial c_l}{\partial t} + v_l \cdot \frac{\partial c_l}{\partial x} = \frac{1}{p_l} \cdot \left(- D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) \right) \end{array} \right. \quad (9.4)$$

9.3. SCHÉMA NUMÉRIQUE DÉCENTRÉ

Ces deux EDPs forment un système de deux *équations hyperboliques linéaires* puisque v_s , en facteur de $\frac{\partial c_s}{\partial x}$, ne dépend pas de c_s mais uniquement de p_s selon la relation de Richardson & Zaki (3.9), de même pour v_l en facteur de $\frac{\partial c_l}{\partial x}$ qui ne dépend que de p_s .

Cette linéarité rend ces EDPs plus simples à résoudre que l'EDP de cristallisation/sédimentation (6.16), en particulier, nous n'aurons pas d'apparitions de discontinuités des concentrations c_s et c_l dues à la nature de ces deux équations. Il se peut que des discontinuités apparaissent à cause de l'inconnue p_s pour laquelle nous avons mis en évidence l'apparition de chocs dans le chapitre précédent.

Vue la linéarité des EDPs (9.4), nous choisissons alors d'utiliser des schémas numériques simples, en l'occurrence des **schémas décentrés**, contrairement aux EDPs de cristallisation/sédimentation (6.16) où nous avons dû recourir aux schémas à 3 points.

Le solide ayant une vitesse positive $v_s \geq 0$ et le fluide ayant une vitesse négative $v_l \leq 0$, nous choisissons pour la variable spatiale x un schéma **décentré amont** pour la première EDP d'inconnue c_s et **décentré aval** pour la deuxième EDP d'inconnue c_l , afin de tenir compte des flux descendants des constituants chimiques présents dans le solide et des flux ascendants des constituants chimiques présents dans le fluide,

ce qui donne, pour une maille i , respectivement les *flux* amont *entrant* et aval *sortant*, pour le solide :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{s_{i-1/2}}^n = v_{s_{i-1}}^n \cdot p_{s_{i-1}}^n \cdot c_{s_{i-1}}^n \geq 0 \\ \text{et : } f_{s_{i+1/2}}^n = v_{s_i}^n \cdot p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^n \geq 0 \end{array} \right. \quad (9.5)$$

et respectivement les *flux* amont *sortant* et aval *entrant*, pour le liquide :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{l_{i-1/2}}^n = v_{l_i}^n \cdot p_{l_i}^n \cdot c_{l_i}^n \leq 0 \\ \text{et : } f_{l_{i+1/2}}^n = v_{l_{i+1}}^n \cdot p_{l_{i+1}}^n \cdot c_{l_{i+1}}^n \leq 0 \end{array} \right. \quad (9.6)$$

Conditions aux limites :

Le système étant fermé, les flux d'éléments chimiques au sommet et au fond de la colonne magmatique sont nuls (cf. section 9.1). Le sommet étant représenté par le noeud $x_{1/2} = 0$ et le fond par le noeud $x_{M+1/2} = 1$, les conditions aux limites s'écrivent pour le solide :

– en $x = 0$, pas de flux entrant : $\forall n, f_{s_{1/2}}^n = (v_s^n \cdot p_s^n \cdot c_s^n)|_{i=0} = 0$, d'où :

$$p_{s_1}^n c_{s_1}^n - p_{s_1}^{n-1} c_{s_1}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (v_{s_1}^n \cdot p_{s_1}^n \cdot c_{s_1}^n - 0) = \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \left(D_a \cdot S_{r_1}^n (c_{l_1}^n - g(c_{s_1}^n)) + A \cdot q_{s_1}^n c_{l_1}^n \right)$$

CHAPITRE 9. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DU TRANSPORT RÉACTIF

– en $x = 1$, pas de flux sortant : $\forall n, f_{sM+1/2}^n = (v_s^n \cdot p_s^n \cdot c_s^n)|_{i=M} = 0$, doù :

$$p_{sM}^n c_{sM}^n - p_{sM}^{n-1} c_{sM}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (0 - v_{sM-1}^n \cdot p_{sM-1}^n \cdot c_{sM-1}^n) = \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \left(D_a \cdot S_{rM}^n (c_{lM}^n - g(c_{sM}^n)) + A \cdot q_{sM}^n c_{lM}^n \right)$$

et pour le liquide :

– en $x = 0$, pas de flux sortant : $\forall n, f_{l1/2}^n = (v_l^n \cdot p_l^n \cdot c_l^n)|_{i=0} = 0$, d'où :

$$p_{l1}^n c_{l1}^n - p_{l1}^{n-1} c_{l1}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (v_{l2}^n \cdot p_{l2}^n \cdot c_{l2}^n - 0) = -\Delta t \cdot \left(D_a \cdot S_{r1}^n (c_{l1}^n - g(c_{s1}^n)) + A \cdot q_{s1}^n c_{l1}^n \right)$$

– en $x = 1$, pas de flux entrant : $\forall n, f_{lM+1/2}^n = (v_l^n \cdot p_l^n \cdot c_l^n)|_{i=M} = 0$, doù :

$$p_{lM}^n c_{lM}^n - p_{lM}^{n-1} c_{lM}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (0 - v_{lM}^n \cdot p_{lM}^n \cdot c_{lM}^n) = -\Delta t \cdot \left(D_a \cdot S_{rM}^n (c_{lM}^n - g(c_{sM}^n)) + A \cdot q_{sM}^n c_{lM}^n \right)$$

Nous écrivons ainsi le schéma numérique décentré pour $1 \leq i \leq M$:

$$\begin{aligned}
 i = 1 : \quad & p_{s1}^n c_{s1}^n - p_{s1}^{n-1} c_{s1}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (v_{s1}^n \cdot p_{s1}^n \cdot c_{s1}^n - 0) = \Delta t \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_1^n \\
 & p_{l1}^n c_{l1}^n - p_{l1}^{n-1} c_{l1}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (v_{l2}^n \cdot p_{l2}^n \cdot c_{l2}^n - 0) = -\Delta t \cdot H_1^n \\
 2 \leq i \leq M - 1 : \quad & p_{si}^n c_{si}^n - p_{si}^{n-1} c_{si}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f_{si+1/2}^n - f_{si-1/2}^n) = \Delta t \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_i^n \\
 & p_{li}^n c_{li}^n - p_{li}^{n-1} c_{li}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f_{li+1/2}^n - f_{li-1/2}^n) = -\Delta t \cdot H_i^n \\
 i = M : \quad & p_{sM}^n c_{sM}^n - p_{sM}^{n-1} c_{sM}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (0 - v_{sM-1}^n \cdot p_{sM-1}^n \cdot c_{sM-1}^n) = \Delta t \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_M^n \\
 & p_{lM}^n c_{lM}^n - p_{lM}^{n-1} c_{lM}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (0 - v_{lM}^n \cdot p_{lM}^n \cdot c_{lM}^n) = -\Delta t \cdot H_M^n
 \end{aligned} \tag{9.7}$$

$$\text{où pour } 1 \leq i \leq M : H_i^n = D_a \cdot S_{ri}^n (c_{li}^n - g(c_{si}^n)) + A \cdot q_{si}^n c_{li}^n \tag{9.8}$$

et nous en déduisons les écritures pour les inconnues c_{si}^n et c_{li}^n sous la forme :

$$\begin{cases} c_{si}^n = \frac{1}{p_{si}^n} \cdot \left(p_{si}^{n-1} c_{si}^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f_{si+1/2}^n - f_{si-1/2}^n) + \Delta t \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_i^n \right) \\ c_{li}^n = \frac{1}{p_{li}^n} \cdot \left(p_{li}^{n-1} c_{li}^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (f_{li+1/2}^n - f_{li-1/2}^n) - \Delta t \cdot H_i^n \right) \end{cases} \tag{9.9}$$

9.4. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LA RÉOLUTION DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

9.4 Méthodes itératives pour la résolution des équations discrètes

Le système (9.7) est composé de $2M$ équations à $2M$ inconnues c_{si} et c_{li} pour $i \in [1, M]$. Dans ces équations, Les termes en facteur des inconnues c_{si} et c_{li} ne sont pas constants. Par exemple, dans les termes de flux $f_{s_{i+1/2}}^n = v_{s_i}^n \cdot p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^n$, le terme $v_{s_i}^n \cdot p_{s_i}^n = p_{s_i}^n (1 - p_{s_i}^n)^e$ -en facteur de $c_{s_i}^n$ - n'est pas constant, il dépend du temps et de l'espace. Une méthode itérative s'impose donc pour la résolution du système.

Comme pour le problème de cristallisation/sédimentation, nous avons implémenté les deux méthodes du point fixe et de Newton-Raphson (cf. section 7.5 pour le principe et l'algorithme de programmation des deux méthodes).

9.4.1 Résolution par la méthode du point fixe

On cherche à résoudre une équation non linéaire du type :

$$F(X) = X \quad (9.10)$$

Le vecteur inconnue X est composé ici de $2M$ variables c_{si} et c_{li} pour $i \in [1, M]$, il est représenté, à un temps donné t_n , par le vecteur C^n :

$$X = C^n = \begin{bmatrix} c_{s1}^n \\ c_{s2}^n \\ \vdots \\ c_{sM}^n \\ c_{l1}^n \\ c_{l2}^n \\ \vdots \\ c_{lM}^n \end{bmatrix} \quad (9.11)$$

et la fonction F (qu'on note F_C pour le modèle de transport réactif) s'écrit :

$$F_C(C^n) = \begin{bmatrix} F_{C1}(C^n) \\ F_{C2}(C^n) \\ \vdots \\ F_{CM}(C^n) \\ F_{CM+1}(C^n) \\ F_{CM+2}(C^n) \\ \vdots \\ F_{C2M}(C^n) \end{bmatrix} \quad (9.12)$$

A chaque pas de temps t_n , nous cherchons à résoudre le système $F_C(C^n) = C^n$, qui s'écrit pour $i \in [1, M]$:

$$F_{Ci}(C^n) = c_{si}^n$$

CHAPITRE 9. RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DU TRANSPORT RÉACTIF

avec F_C défini par les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} i = 1 : F_{C_1}(C^n) = \frac{1}{p_{s_1}^n} \cdot \left(p_{s_1}^{n-1} c_{s_1}^{n-1} - \sigma \cdot (v_{s_1}^n \cdot p_{s_1}^n \cdot c_{s_1}^n - 0) + \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_1^n \right) \\ 2 \leq i \leq M-1 : F_{C_i}(C^n) = \frac{1}{p_{s_i}^n} \cdot \left(p_{s_i}^{n-1} c_{s_i}^{n-1} - \sigma \cdot (f_{s_{i+1/2}}^n - f_{s_{i-1/2}}^n) + \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_i^n \right) \\ i = M : F_{C_M}(C^n) = \frac{1}{p_{s_M}^n} \cdot \left(p_{s_M}^{n-1} c_{s_M}^{n-1} - \sigma \cdot (0 - v_{s_{M-1}}^n \cdot p_{s_{M-1}}^n \cdot c_{s_{M-1}}^n) \right. \\ \left. + \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_M^n \right) \end{array} \right. \quad (9.13)$$

et pour $i \in [M+1, 2M]$, on écrit :

$$F_{C_i}(C^n) = c_{i-M}^n$$

avec F_C défini par les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} i = M+1 : F_{C_{M+1}}(C^n) = \frac{1}{p_{l_1}^n} \cdot \left(p_{l_1}^{n-1} c_{l_1}^{n-1} - \sigma \cdot (v_{l_2}^n \cdot p_{l_2}^n \cdot c_{l_2}^n - 0) - \Delta t \cdot H_1^n \right) \\ M+2 \leq i \leq 2M-1 : \text{ on définit } j = i - M : \\ F_{C_i}(C^n) = \frac{1}{p_{l_j}^n} \cdot \left(p_{l_j}^{n-1} c_{l_j}^{n-1} - \sigma \cdot (f_{l_{j+1/2}}^n - f_{l_{j-1/2}}^n) - \Delta t \cdot H_j^n \right) \\ i = 2M : F_{C_{2M}}(C^n) = \frac{1}{p_{l_M}^n} \cdot \left(p_{l_M}^{n-1} c_{l_M}^{n-1} - \sigma \cdot (0 - v_{l_M}^n \cdot p_{l_M}^n \cdot c_{l_M}^n) - \Delta t \cdot H_M^n \right) \end{array} \right. \quad (9.14)$$

$$\text{avec : } \sigma = \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (9.15)$$

et les H_i^n donnés par la relation (9.8).

9.4. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LA RÉOLUTION DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

Les itérations sont faites sur les X^k :

$$X^k = (C^n)^k = \begin{bmatrix} c_{s1}^n \\ c_{s2}^n \\ \vdots \\ c_{sM}^n \\ c_{l1}^n \\ c_{l2}^n \\ \vdots \\ c_{lM}^n \end{bmatrix}^k \quad (9.16)$$

et pour chaque temps t_n , nous prenons pour point de départ X^0 la valeur de C à l'instant t_{n-1} :

$$X^0 = C^{n-1} = \begin{bmatrix} c_{s1}^{n-1} \\ c_{s2}^{n-1} \\ \vdots \\ c_{sM}^{n-1} \\ c_{l1}^{n-1} \\ c_{l2}^{n-1} \\ \vdots \\ c_{lM}^{n-1} \end{bmatrix}. \quad (9.17)$$

9.4.2 Résolution par la méthode de Newton-Raphson

a) Expressions de X et de F pour le système (9.7)

On cherche à résoudre une équation non linéaire du type :

$$F(X) = 0 \quad (9.18)$$

Comme pour la méthode du point fixe, la méthode de Newton-Raphson est appliquée à chaque pas de temps t_n et les vecteurs $X = C^n$ et $F_C(C^n)$ sont définis également par les relations (9.11) et (9.12).

Nous cherchons à résoudre le système $F_C(C^n) = 0$, avec F_C défini pour $i \in [1, M]$ par les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} i = 1 : F_{C_1}(C^n) = c_{s_1}^n - \frac{1}{p_{s_1}^n} \left(p_{s_1}^{n-1} c_{s_1}^{n-1} - \sigma \cdot (v_{s_1}^n \cdot p_{s_1}^n \cdot c_{s_1}^n - 0) + \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_1^n \right) \\ 2 \leq i \leq M-1 : F_{C_i}(C^n) = c_{s_i}^n - \frac{1}{p_{s_i}^n} \left(p_{s_i}^{n-1} c_{s_i}^{n-1} - \sigma \cdot (f_{s_{i+1/2}}^n - f_{s_{i-1/2}}^n) + \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_i^n \right) \\ i = M : F_{C_M}(C^n) = c_{s_M}^n - \frac{1}{p_{s_M}^n} \left(p_{s_M}^{n-1} c_{s_M}^{n-1} - \sigma \cdot (0 - v_{s_{M-1}}^n \cdot p_{s_{M-1}}^n \cdot c_{s_{M-1}}^n) \right. \\ \left. + \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_M^n \right) \end{array} \right. \quad (9.19)$$

et pour $i \in [M+1, 2M]$, F_C est défini par :

$$\left\{ \begin{array}{l} i = M+1 : F_{C_{M+1}}(C^n) = c_{l_1}^n - \frac{1}{p_{l_1}^n} \left(p_{l_1}^{n-1} c_{l_1}^{n-1} - \sigma \cdot (v_{l_2}^n \cdot p_{l_2}^n \cdot c_{l_2}^n - 0) - \Delta t \cdot H_1^n \right) \\ M+2 \leq i \leq 2M-1 : \text{ on définit } j = i - M : \\ F_{C_i}(C^n) = c_{l_j}^n - \frac{1}{p_{l_j}^n} \left(p_{l_j}^{n-1} c_{l_j}^{n-1} - \sigma \cdot (f_{l_{j+1/2}}^n - f_{l_{j-1/2}}^n) - \Delta t \cdot H_j^n \right) \\ i = 2M : F_{C_{2M}}(C^n) = c_{l_M}^n - \frac{1}{p_{l_M}^n} \left(p_{l_M}^{n-1} c_{l_M}^{n-1} - \sigma \cdot (0 - v_{l_M}^n \cdot p_{l_M}^n \cdot c_{l_M}^n) - \Delta t \cdot H_j^n \right) \end{array} \right. \quad (9.20)$$

Les itérations de la méthode de Newton-Raphson se font sur les X^k définis par l'expression (9.16) et l'initialisation X^0 est donnée par la relation (9.17).

b) Calcul de la jacobienne $\bar{\bar{J}}_{F_C}$

A partir des relations (9.19), nous remarquons que pour $i \in [2, M]$, $F_{C_i}(C^n)$ ne dépend pas de toutes les inconnues qui composent le vecteur C^n mais dépend seulement des trois inconnues $c_{s_i}^n$, $c_{s_{i-1}}^n$ et $c_{l_i}^n$:

$$i \in [2, M] : F_{C_i} = F_{C_i}(c_{s_{i-1}}^n, c_{s_i}^n, c_{l_i}^n) \quad (9.21)$$

d'où pour $i \in [2, M]$, les trois dérivées :

9.4. MÉTHODES ITÉRATIVES POUR LA RÉOLUTION DES ÉQUATIONS DISCRÈTES

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{J}}_{FC}(i, i-1) = \frac{\partial F_i^n}{\partial c_{s_{i-1}}^n} = -\frac{1}{p_{s_i}^n} \cdot \left(+\sigma \cdot p_{s_{i-1}}^n v_{s_{i-1}}^n \right) \\ \bar{\bar{J}}_{FC}(i, i) = \frac{\partial F_i^n}{\partial c_{s_i}^n} = 1 - \frac{1}{p_{s_i}^n} \cdot \left(-\sigma \cdot p_{s_i}^n v_{s_i}^n + \Delta t \cdot D_a \cdot S_{r_i}^n \cdot g'(\rho_s c_{s_i}^n) \right) \\ \bar{\bar{J}}_{FC}(i, i+M) = \frac{\partial F_i^n}{\partial c_{l_i}^n} = -\frac{1}{p_{s_i}^n} \cdot \Delta t \left(\frac{\rho_l}{\rho_s} D_a \cdot S_{r_i}^n + A \cdot q_{s_i}^n \right) \end{array} \right. \quad (9.22)$$

et pour $i = 1$, $F_{C_1}^n = F_{C_1}^n(c_{s_1}^n, c_{l_1}^n)$ et :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{J}}_{FC}(1, 1) = \frac{\partial F_1^n}{\partial c_{s_1}^n} = 1 - \frac{1}{p_{s_1}^n} \cdot \left(-\sigma \cdot p_{s_1}^n v_{s_1}^n + \Delta t \cdot D_a \cdot S_{r_1}^n \cdot g'(\rho_s c_{s_1}^n) \right) \\ \bar{\bar{J}}_{FC}(1, 1+M) = \frac{\partial F_1^n}{\partial c_{l_1}^n} = -\frac{1}{p_{s_1}^n} \cdot \Delta t \left(\frac{\rho_l}{\rho_s} D_a \cdot S_{r_1}^n + A \cdot q_{s_1}^n \right) \end{array} \right. \quad (9.23)$$

Maintenant, pour $i \in [M+1, 2M-1]$, nous remarquons, à partir des relations (9.20), que $F_{C_i}(C^n)$ dépend seulement des trois inconnues $c_{l_i}^n$, $c_{l_{i+1}}^n$ et $c_{s_i}^n$:

$$i \in [M+1, 2M-1] : F_{C_i} = F_{C_i}(c_{s_i}^n, c_{l_i}^n, c_{l_{i+1}}^n) \quad (9.24)$$

d'où pour $i \in [M+1, 2M-1]$, les trois dérivées :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{J}}_{FC}(i, i-M) = \frac{\partial F_i^n}{\partial c_{s_i}^n} = -\frac{1}{p_{l_i}^n} \cdot \left(\Delta t \cdot D_a \cdot S_{r_i}^n \cdot \frac{\rho_s}{\rho_l} \cdot g'(\rho_s c_{s_i}^n) \right) \\ \bar{\bar{J}}_{FC}(i, i) = \frac{\partial F_i^n}{\partial c_{l_i}^n} = 1 - \frac{1}{p_{l_i}^n} \cdot \left(+\sigma \cdot p_{l_i}^n v_{l_i}^n - \Delta t \cdot (D_a \cdot S_{r_i}^n + A \cdot q_{s_i}^n) \right) \\ \bar{\bar{J}}_{FC}(i, i+1) = \frac{\partial F_i^n}{\partial c_{l_{i+1}}^n} = -\frac{1}{p_{m_i}^n} \cdot \left(-\sigma \cdot p_{l_{i+1}}^n v_{l_{i+1}}^n \right) \end{array} \right. \quad (9.25)$$

et pour $i = 2M$, $F_{C_{2M}}^n = F_{C_{2M}}^n(c_{s_{2M}}^n, c_{l_{2M}}^n)$ et :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\bar{J}}_{FC}(2M, M) = \frac{\partial F_{2M}^n}{\partial c_{s_M}^n} = -\frac{1}{p_{l_M}^n} \cdot \left(\Delta t \cdot D_a \cdot S_{r_M}^n \cdot \frac{\rho_s}{\rho_l} \cdot g'(\rho_s c_{s_M}^n) \right) \\ \bar{\bar{J}}_{FC}(2M, 2M) = \frac{\partial F_{2M}^n}{\partial c_{l_M}^n} = 1 - \frac{1}{p_{l_M}^n} \cdot \left(+\sigma \cdot p_{l_M}^n v_{l_M}^n - \Delta t \cdot (D_a \cdot S_{r_M}^n + A \cdot q_{s_M}^n) \right) \end{array} \right. \quad (9.26)$$

CHAPITRE 9. RÉOLUTION NUMÉRIQUE DU PROBLÈME DU TRANSPORT RÉACTIF

Finalement, toutes ces expressions, nous amènent à une matrice jacobienne qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\bar{\bar{J}}_{FC}(C^n) = \left(\begin{array}{cccc|cccc} * & 0 & & & * & & & & \\ * & * & 0 & & & * & & & \\ & * & * & 0 & & & * & & \\ & & * & * & 0 & & & * & \\ & & & * & * & 0 & & & * \\ & & & & * & * & 0 & & \\ & & & & & * & * & & \\ \hline * & & & & * & * & & & \\ & * & & & 0 & * & * & & \\ & & * & & & 0 & * & * & \\ & & & * & & & 0 & * & * \\ & & & & * & & & 0 & * & * \\ & & & & & * & & & 0 & * \\ & & & & & & & & & 0 & * \end{array} \right) \quad (9.27)$$

d) Résolution du système linéaire

La matrice jacobienne $\bar{\bar{J}}_{FC}$ est une matrice carrée de dimension $2M$ où seulement 5 de ses diagonales sont non nulles, c'est une matrice creuse : le nombre d'éléments nuls (environ $(2M)^2 - 6M$) est très élevé par rapport au nombre éléments non nuls (environ $6M$).

Comme nous l'avons fait pour le problème de cristallisation/sédimentation, nous stockons uniquement les 5 diagonales non nulles dans une nouvelle matrice $\bar{\bar{J}}'_{FC}$ de taille $(M \times 3)$ qui remplace l'écriture (9.27) :

$$\bar{\bar{J}}'_{FC}(C^n) = \left(\begin{array}{cccc|cccc} 0 & 0 & * & 0 & * & & & \\ 0 & * & * & 0 & * & & & \\ 0 & * & * & 0 & * & & & \\ 0 & * & * & 0 & * & & & \\ 0 & * & * & 0 & * & & & \\ 0 & * & * & 0 & * & & & \\ 0 & * & * & 0 & * & & & \\ \hline * & 0 & * & * & 0 & & & \\ * & 0 & * & * & 0 & & & \\ * & 0 & * & * & 0 & & & \\ * & 0 & * & * & 0 & & & \\ * & 0 & * & * & 0 & & & \\ * & 0 & * & * & 0 & & & \\ * & 0 & * & * & 0 & & & \\ * & 0 & * & 0 & 0 & & & \end{array} \right) \quad (9.28)$$

et nous résolvons ensuite le système linéaire (7.41) : $\bar{\bar{J}}'_{FC}(X^k) \cdot \delta X^k = -F_C(X^k)$, à chaque pas de Newton, k, par la méthode de Gauss-Seidel.

Chapitre 10

Tests de validation du modèle de transport réactif

Dans ce chapitre, nous exposons les tests qui ont permis de valider le programme informatique de résolution du système d'EDPs (9.2) dont les inconnues sont $c_s(x, t)$ et $c_l(x, t)$. La fonction $p_s(x, t)$ elle, intervient comme donnée d'entrée.

Comme pour la validation du code régissant la partie cristallisation/sédimentation (chapitre 8), nous considérons des cas tests allant du plus simple au plus complet. Deux grandes catégories de tests sont effectuées : celle où les termes de transport sont annulés et celles où on considère les termes de transport. Dans chaque catégorie, nous testons tour à tour l'influence des phénomènes de l'équilibrage chimique et de la solidification, en jouant sur les nombres adimensionnels A et D_a . Un récapitulatif des démarches de validation est inclus dans le [tableau 6.2](#) en introduction de cette partie.

L'analyse détaillée des résultats de simulation des tests présentés dans ce chapitre nous a permis d'anticiper sur le chapitre suivant dans lequel nous présentons et interprétons les résultats fournis par notre modèle.

Nous nous intéressons à la fin de ce chapitre également au problème d'adaptation des schémas numériques au voisinage des mailles occupées à 100% de solide.

10.1 Cas de flux imposés nuls : $f_s(p_s.c_s) = 0$ et $f_l(p_l.c_l) = 0$

Comme pour le problème de cristallisation/sédimentation, nous considérons le cas test théorique de flux des quantités d'éléments chimiques nuls, ceci se fait en annulant les termes $f_s(p_s.c_s)$ et $f_l(p_l.c_l)$ dans le système d'EDPs (9.2), ainsi que le terme de flux de matière $f(p_s)$ dans l'équation de cristallisation/sédimentation (7.2). Ce qui revient à annuler tous les termes de transport et à considérer que seuls les phénomènes de solidification et de réaction chimique sont à l'origine des variations des concentrations c_s et c_l .

Le système (9.2) devient alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial(p_s \cdot c_s)}{\partial t} = \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot \left(+ D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) + A \cdot q_s \cdot c_l \right) \\ \frac{\partial(p_l \cdot c_l)}{\partial t} = -D_a \cdot S_r \cdot (c_l - g(c_s)) - A \cdot q_s \cdot c_l \end{cases} \quad (10.1)$$

En l'absence de termes sources (pas de solidification ni de réactions chimiques : $A = 0$ et $D_a = 0$), les seconds membres des équations (10.1) sont nuls, il est évident que les concentrations c_s et c_l resteront constantes et égales à leurs valeurs initiales c_{s0} et c_{l0} . La simulation nous donne bien cette solution constante.

Pour les cas où les termes sources sont non nuls ($A \neq 0$ ou $D_a \neq 0$), les seconds membres des équations (10.1) sont non nuls. Nous considérons la réécriture de ces équations sous la forme (9.4), le système (10.1) peut donc être approché par les équations suivantes :

$$\begin{cases} c_{s_i}^n = c_{s_i}^{n-1} + \frac{1}{p_{s_i}^n} \cdot \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \left(D_a \cdot S_{r_i}^n (c_{l_i}^{n-1} - g(c_{s_i}^{n-1})) + A \cdot q_{s_i} \cdot (c_{l_i}^{n-1} - \frac{\rho_s}{\rho_l} \cdot c_{s_i}^{n-1}) \right) \\ c_{l_i}^n = c_{l_i}^{n-1} + \frac{1}{p_{l_i}^n} \cdot \Delta t \cdot \left(-D_a \cdot S_{r_i}^n (c_{l_i}^{n-1} - g(c_{s_i}^{n-1})) \right) \end{cases} \quad (10.2)$$

Nous implémentons ce dernier algorithme *explicite* et relativement simple que nous assimilons à une solution théorique et nous comparons les résultats avec ceux de la simulation par le schéma numérique (9.7) présenté dans le chapitre précédent. Nous notons les résultats de la simulation c_{s_simul} et c_{l_simul} et ceux de l'algorithme (10.2) c_{s_th} et c_{l_th} .

Nous effectuons également des calculs analytiques pour valider les résultat à l'état final dans le cas des flux f_s et f_l nuls.

10.1.1 Evolution par réaction chimique uniquement

Le paramètre D_a exprimant le rapport entre la vitesse de réaction et la vitesse d'advection (cf. relation (6.13)) et A exprimant le rapport entre la vitesse de solidification et la vitesse d'advection (relation (6.6)), considérer que l'évolution des concentrations c_s et c_l est due uniquement à l'équilibre chimique et que la proportion de solide p_s ne varie pas au cours du temps revient à considérer D_a non nul et à annuler A : $D_a \neq 0$ et $A = 0$.

Nous prenons pour la fonction isotherme l'exemple d'une fonction convexe :

$$c_l = g(c_s) = c_s^2. \quad (10.3)$$

10.1. CAS DE FLUX IMPOSÉS NULS : $F_S(P_S.C_S) = 0$ ET $F_L(P_L.C_L) = 0$

Nous prenons des conditions initiales homogènes sur toute la colonne magmatique pour les concentrations chimiques ainsi que pour la proportion de solide.

Remarque :

Tout au long de ce chapitre, nous représentons sur des fenêtres récapitulatives, tout ce qui permet de définir et de caractériser chaque expérience numérique, c'est-à-dire les conditions initiales pour p_s , c_s et c_l , les fonctions sources (la vitesse de solidification $q_s(x)$ et la fonction isotherme magmatique $c_l = g(c_s)$), les paramètres physiques A et D_a , ainsi que les paramètres numériques considérés : nombre de mailles initial M_{ini} et pas de temps pour la résolution numérique des deux systèmes d'EDPs (6.16) et (6.17) : Δt_P et Δt_C . Le nombre "freqstock" représente la fréquence à laquelle nous enregistrons les résultats, freqstock=20 signifie que les enregistrements sont faits tous les 20 pas de temps.

Pour le présent exemple, nous présentons les paramètres physiques et numériques ainsi que les conditions initiales et fonctions sources sur la figure récapitulative 10.1.

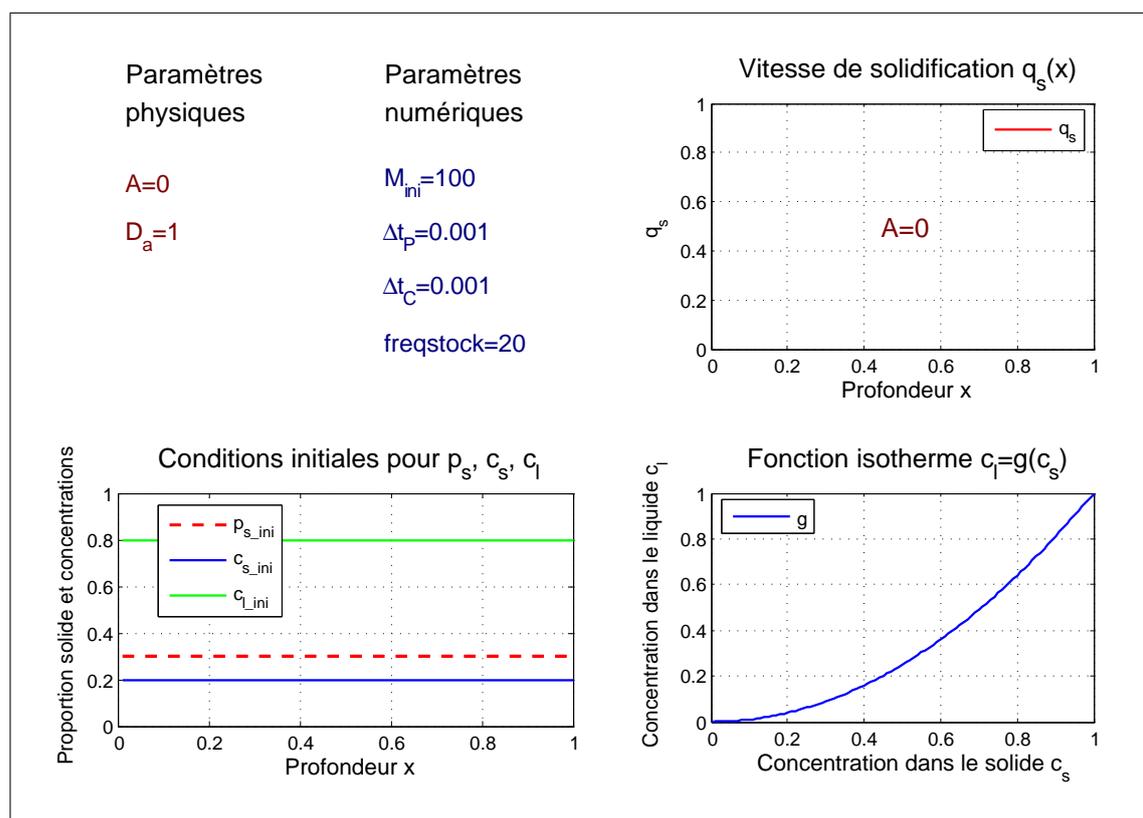


FIGURE 10.1 – Conditions initiales et fonctions sources $c_l = g(c_s)$ et $q_s(x)$. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a \neq 0$.

Puisque $A = 0$, le profil de la fonction production de solide $q_s(x)$ n'est pas représenté.

Les conditions initiales représentées dans la figure 10.1 correspondent à un mélange de solide initialement en déséquilibre chimique avec le liquide adjacent, c'est-à-dire que l'égalité $c_l = g(c_s)$ n'est pas vérifiée (car $c_l^0 = 0.8 \neq (c_s^0)^2 = 0.04$). Le rééquilibrage chimique tend donc à vérifier cette égalité. Par ailleurs, puisqu'on ne considère pas de flux de matière le long de la colonne magmatique,

CHAPITRE 10. TESTS DE VALIDATION DU MODÈLE DE TRANSPORT RÉACTIF

alors la quantité d'élément chimique se conserve à tout moment n et dans chaque maille i de cette colonne :

$$\forall n, \forall i, p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^n + p_{l_i}^n \cdot c_{l_i}^n = cte = p_{s_i}^0 \cdot c_{s_i}^0 + p_{l_i}^0 \cdot c_{l_i}^0 \quad (10.4)$$

Remarque : cette égalité est vérifiée pour les concentrations c_s et c_l avant adimensionnement ; pour les grandeurs normalisées $c_s^* = \frac{c_s}{\rho_s}$ et $c_l^* = \frac{c_l}{\rho_l}$ (cf. relations (6.8)), cette égalité s'écrit alors :

$$\forall n, \forall i, \rho_s \cdot p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^{*n} + \rho_l \cdot p_{l_i}^n \cdot c_{l_i}^{*n} = cte = \rho_s \cdot p_{s_i}^0 \cdot c_{s_i}^{*0} + \rho_l \cdot p_{l_i}^0 \cdot c_{l_i}^{*0}$$

Pour nos calculs nous avons pris $\frac{\rho_s}{\rho_l} = 1$, ce rapport varie en réalité entre 1 et 1.1, ce qui ne change que légèrement les résultats, les allures générales des courbes restent identiques en supposant ce rapport égal à 1. Nous rappelons que les valeurs de ρ_s et ρ_l n'interviennent pas dans l'expression de la vitesse relative solide/liquide v_s , la vitesse de Stokes U_s étant intrinsèquement incluse dans le paramètre A (cf. relation (6.4)), sur lequel l'utilisateur intervient directement.

Nous prenons donc en considération l'égalité (10.4), en particulier, au temps final nous avons :

$$\left\{ \begin{array}{l} p_s^f \cdot c_s^f + p_l^f \cdot c_l^f = p_s^0 \cdot c_s^0 + p_l^0 \cdot c_l^0 \\ \text{avec : } c_l^f = g(c_s^f) \text{ (équilibre chimique).} \end{array} \right. \quad (10.5)$$

or $c_s^0 = 0.2$, $c_l^0 = 0.8$, $p_s = cte = 0.3$, $p_l = cte = 0.7$ et $g(c_s) = c_s^2$, il vient :

$$0.3 \cdot 0.2 + 0.7 \cdot 0.8 = 0.62 = 0.3 \cdot c_s^f + 0.7 \cdot c_s^{f2}$$

cette équation du second degré donne une seule solution physique :

$$c_s^f \cong 0.751 \quad \text{d'où} \quad c_l^f \cong 0.564 \quad (10.6)$$

Sur la figure 10.2, nous représentons les profils des concentrations à deux temps différents, les résultats de la simulation par le schéma numérique complet (9.7) ainsi que ceux donnés par l'algorithme (10.2) sont affichés. L'état final à $t = 10.84$ est représenté sur la figure 10.3a, et l'évolution au cours du temps de c_s uniquement sur la figure 10.3b.

10.1. CAS DE FLUX IMPOSÉS NULS : $F_S(P_S.C_S) = 0$ ET $F_L(P_L.C_L) = 0$

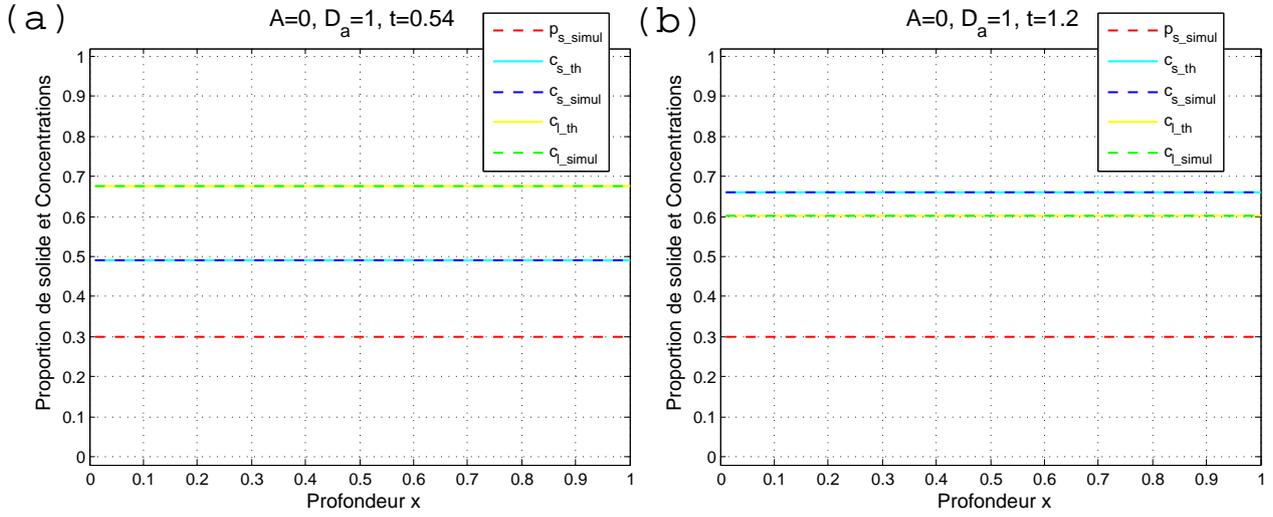


FIGURE 10.2 – Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l (a) à $t = 0.54$ et (b) à $t = 1.2$. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a = 1$.

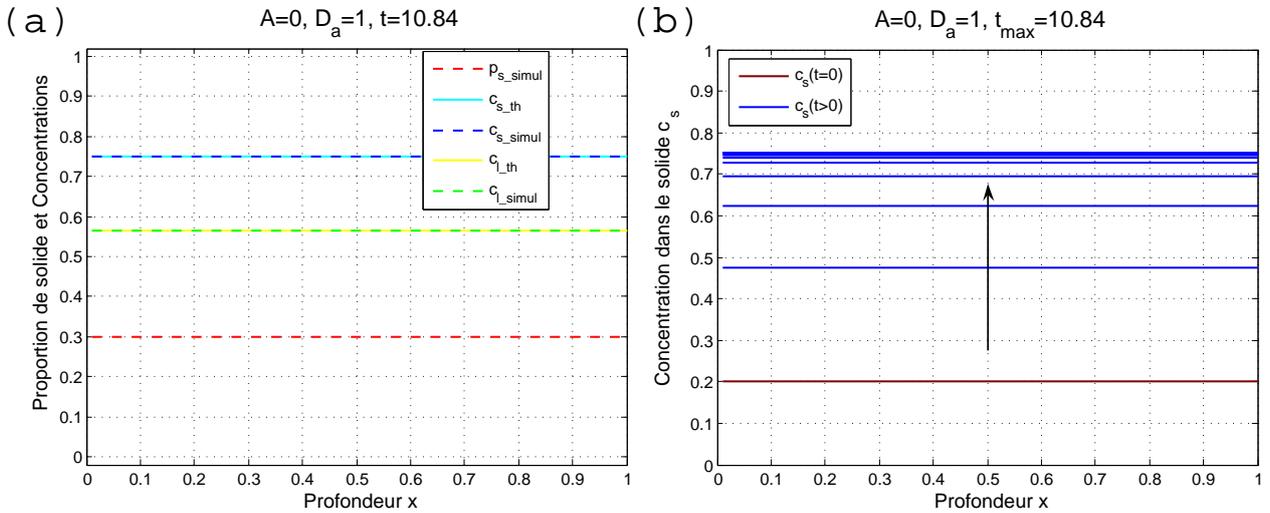


FIGURE 10.3 – (a) Concentrations à l'état final $t = 10.84$, (b) évolution de c_s au cours du temps. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a = 1$.

D'une part nous observons une parfaite coïncidence entre les résultats donnés par la simulation par le schéma (9.7) et ceux donnés par l'algorithme (10.2). D'autre part, les concentrations évoluent bien dans le sens de l'équilibrage chimique pour atteindre les valeurs finales données par les calculs analytiques effectués plus haut (cf. relations (10.5)) : la concentration c_s augmente au cours du temps pour atteindre la valeur $c_s^f \cong 0.751$ et c_l diminue pour atteindre la valeur $c_l^f \cong 0.564$.

Le rééquilibrage chimique se fait à une vitesse qui dépend du paramètre D_a , ainsi pour $D_a = 10$ (dix fois plus grand), l'équilibre est atteint après un temps $t = 1.09$ seulement (figure 10.4) alors

que pour $D_a = 1$ le temps final est à peu près dix fois plus important : $t = 10.84$ (figure 10.3). Cependant, l'état d'équilibre final est le même pour les deux valeurs du paramètre D_a .

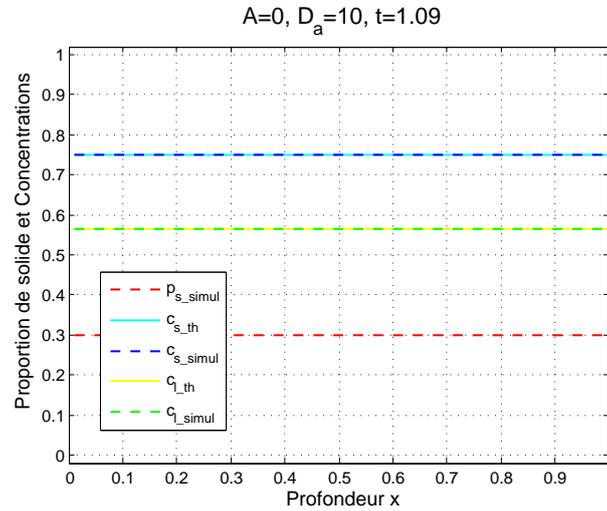


FIGURE 10.4 – Concentrations à l'état final $t = 1.09$. — Flux nuls, $A = 0$, $D_a = 10$, $\Delta t = 10^{-4}$.

Remarque : Pour avoir une bonne précision lorsque $D_a = 10$, le pas de temps a été divisé par 10 : $\Delta t = 10^{-4}$.

10.1.2 Evolution par solidification uniquement

Nous considérons ici que l'évolution des concentrations c_s et c_l est due uniquement à la production de solide : p_s varie au cours du temps, nous prenons donc $D_a = 0$ et $A \neq 0$. Dans cette section, nous prenons pour la fonction vitesse de solidification l'exemple d'une fonction linéaire décroissante :

$$q_s(x) = 1 - 0.9x \tag{10.7}$$

Et nous considérons toujours des **conditions initiales** p_s^0 , c_s^0 et c_l^0 **homogènes**.

a) 1^{er} exemple : chambre magmatique initialement entièrement liquide $p_{s0} = 0$:

Pour cet exemple, il n'y a initialement pas de solide présent dans la colonne, le liquide initial donne lieu au solide par cristallisation. A l'état initial, nous avons donc $p_s^0 = 0$ et nous considérons $c_s^0 = 0$ (cf. figure 10.5).

Comme le liquide se solidifie sans réagir et qu'initialement il n'y a pas de solide, alors on s'attend à ce que dans chaque partie solidifiée de la colonne magmatique, **la concentration dans le solide**, en l'élément chimique considéré, soit **la même que dans le liquide initial**, c'est-à-dire $c_s = c_l^0 = 0.8$, et ceci dès les premiers cristaux formés, les courbes de c_s et de c_l sont superposées (figure 10.6a). Lorsque la solidification d'une partie ou de toute la colonne magmatique est complète

10.1. CAS DE FLUX IMPOSÉS NULS : $F_S(P_S.C_S) = 0$ ET $F_L(P_L.C_L) = 0$

$p_s = 1$, on doit avoir aussi $c_s = c_l^0 = 0.8$ (figures 10.6b). Par convention, c_l est prise égale à 0 lorsqu'il n'y a plus de liquide.

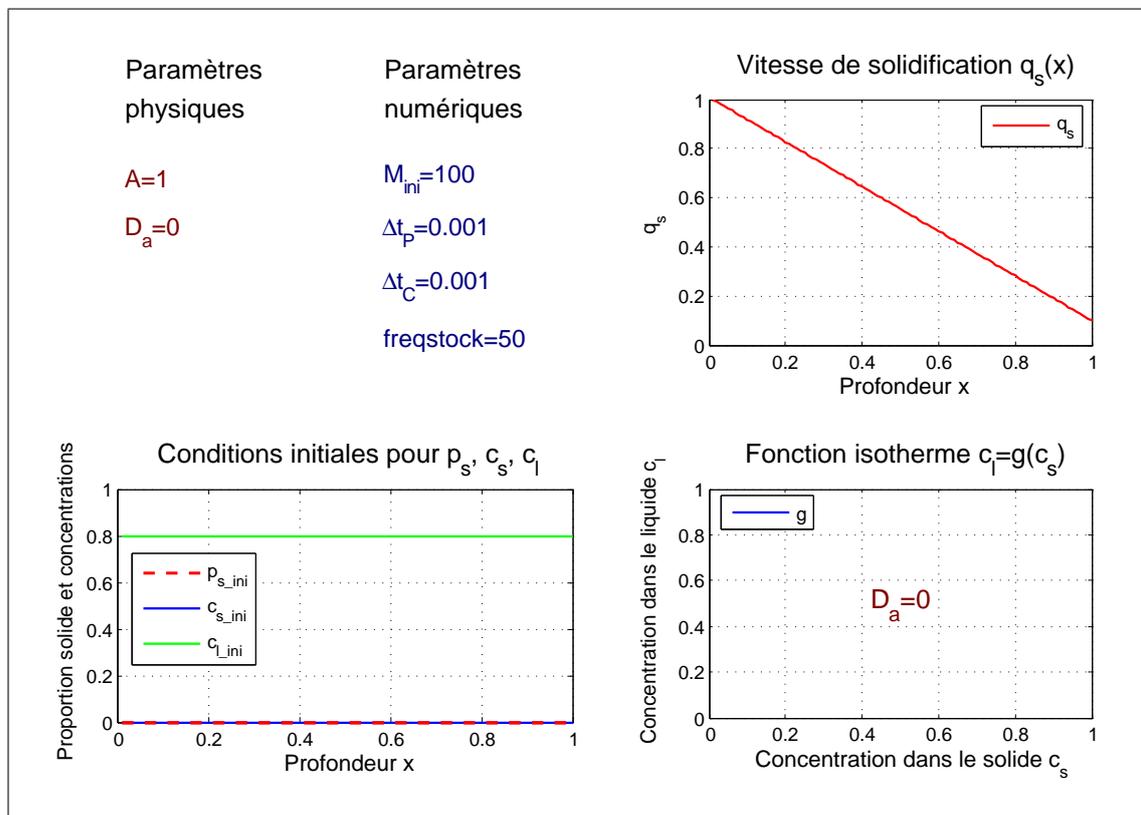


FIGURE 10.5 – Conditions initiales et fonction $q_s(x)$. — Flux nuls, $A \neq 0, D_a = 0$.

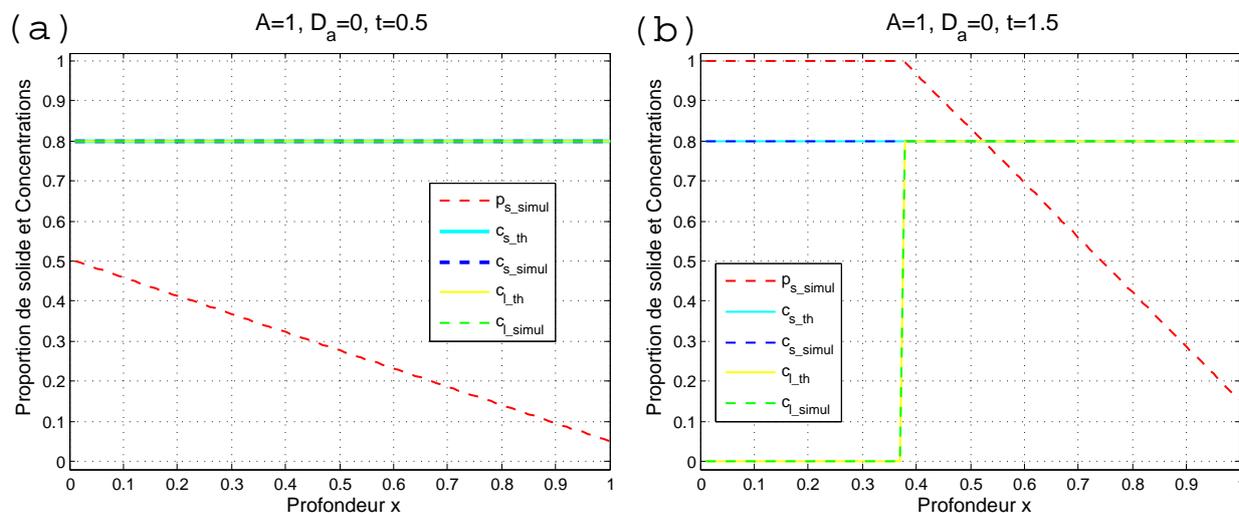


FIGURE 10.6 – Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l (a) à $t = 0.5$ et (b) à $t = 1.5$. — Flux nuls, $A = 1, D_a = 0$.

a) 2^{ème} exemple : $p_{s0} \neq 0$:

Dans cet exemple, l'évolution est calculée par le schéma numérique (9.7) et l'algorithme (10.2) et l'état final est calculé analytiquement en se basant sur la relation de conservation (10.4) et en tenant compte du fait que l'arrêt de l'évolution se fait lorsque la colonne magmatique sera entièrement solidifiée. L'état final est donc donné par les relations :

$$\left\{ \begin{array}{l} p_s^f \cdot c_s^f + p_l^f \cdot c_l^f = p_s^0 \cdot c_s^0 + p_l^0 \cdot c_l^0 \\ \text{avec : } p_s^f = 1 \text{ et } p_l^f = 0. \end{array} \right. \quad (10.8)$$

or $c_s^0 = 0.2$, $c_l^0 = 0.8$ et $p_s^0 = 0$, $p_l^0 = 1$, il vient :

$$0.3 \cdot 0.2 + 0.7 \cdot 0.8 = 0.62 = 1 \cdot c_s^f + 0 \cdot c_l^f$$

d'où :

$$c_s^f = 0.62 \text{ et } c_l^f = 0. \quad (10.9)$$

($c_l^f = 0$ puisqu'il n'y a plus de liquide).

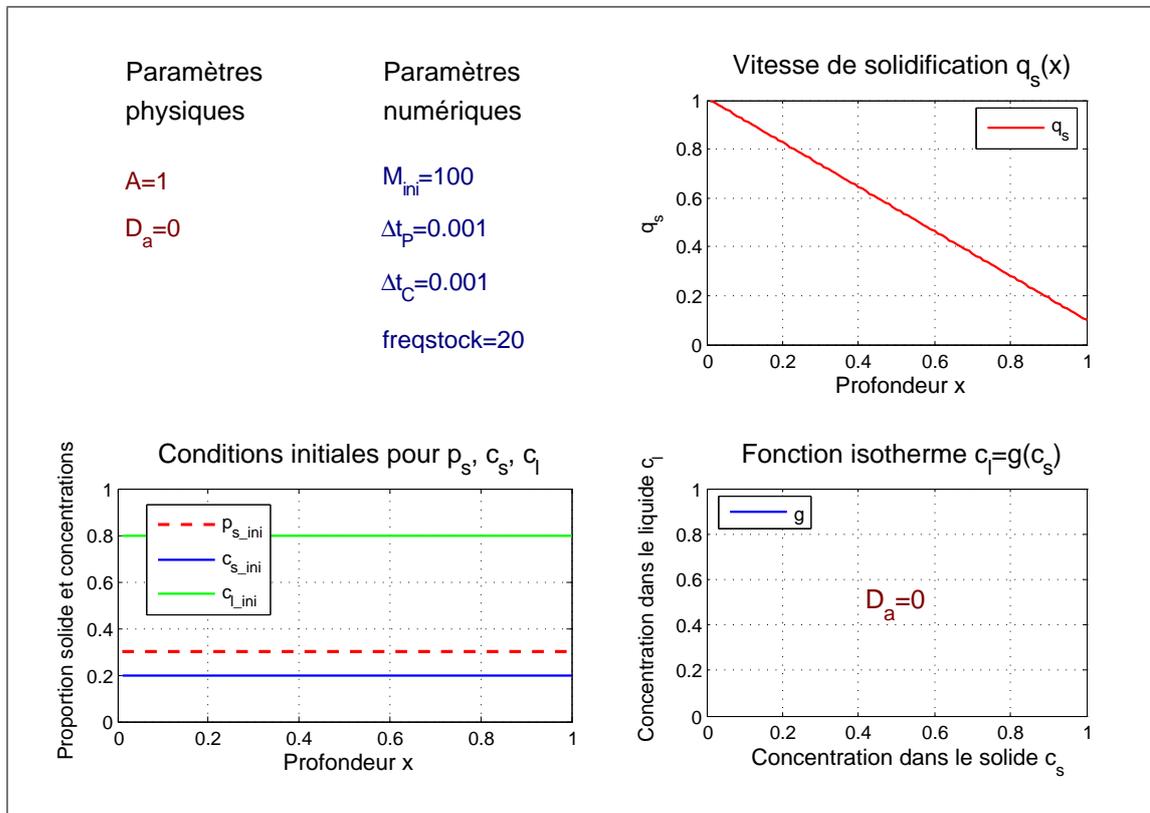


FIGURE 10.7 – Conditions initiales et fonction $q_s(x)$. — Flux nuls, $A \neq 0$, $D_a = 0$.

10.1. CAS DE FLUX IMPOSÉS NULS : $F_S(P_S.C_S) = 0$ ET $F_L(P_L.C_L) = 0$

Sur la figure 10.8, nous représentons les profils des concentrations à deux temps différents. L'état final à $t = 7.02$ est représenté sur la figure 10.9a et l'évolution au cours du temps de c_s sur la figure 10.9b.

Les résultats de l'évolution des concentrations donnés par la simulation numérique sont bien validés par ceux donnés par l'algorithme (10.2).

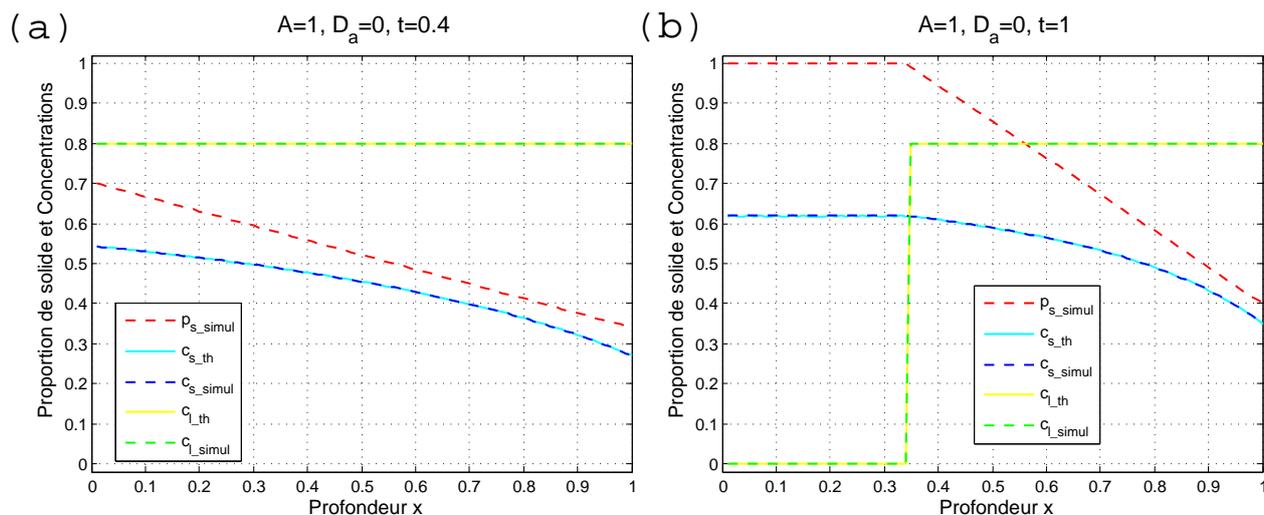


FIGURE 10.8 – Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l (a) à $t = 0.4$ et (b) à $t = 1$. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$.

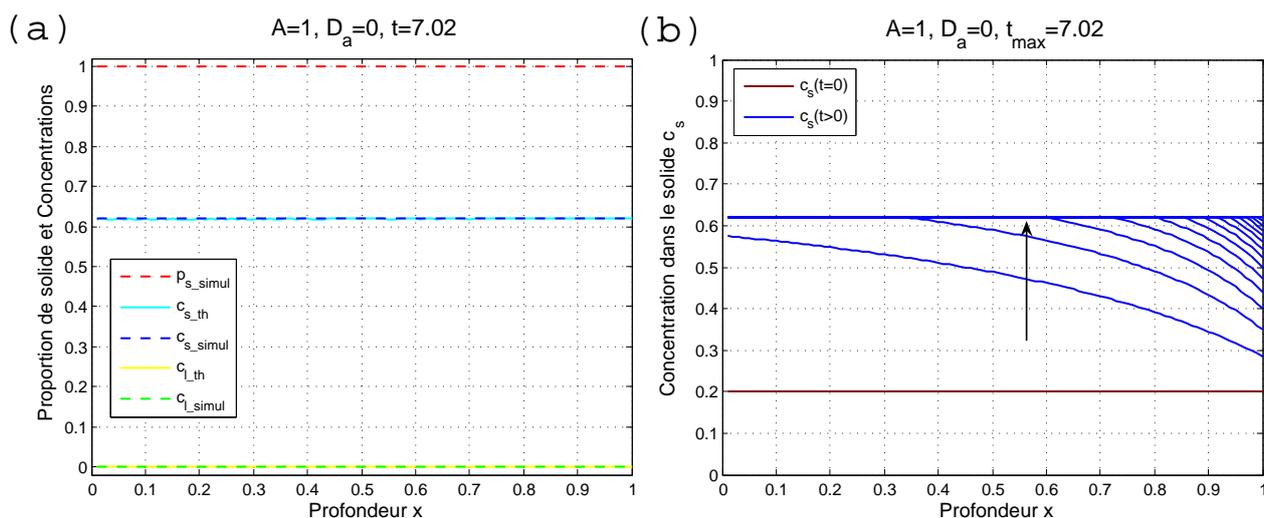


FIGURE 10.9 – (a) Concentrations à l'état final $t = 7.02$, (b) évolution de c_s au cours du temps. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$.

Au fur et à mesure que la solidification se fait et que le solide s'enrichit en l'élément chimique considéré, **la concentration en cet élément initialement de 0.3 augmente** donc avec le

temps. Par ailleurs, l'état final obtenu correspond bien au résultat du calcul analytique prévoyant $c_s^f = 0.62$ et $c_l^f = 0$.

La solidification se fait à une vitesse donnée par le paramètre A . Pour une valeur dix fois supérieure, $A = 10$, la solidification complète de la colonne magmatique se fait en un temps dix fois plus petit ($t = 0.701$ au lieu de $t = 7.02$ pour $A = 1$). L'état final, quant à lui, est indépendant de la valeur de A , on observe toujours $c_s^f = 0.62$ et $c_l^f = 0$ (figure 10.10).

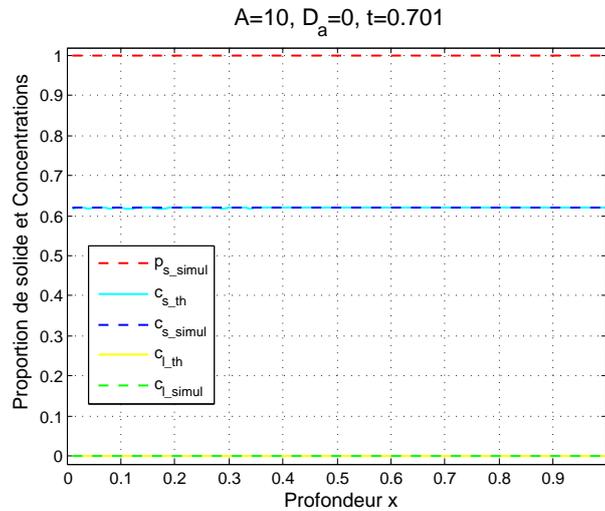


FIGURE 10.10 – Concentrations à l'état final $t = 0.701$. — Flux nuls, $A = 10$, $D_a = 0$, $\Delta t = 10^{-5}$.

Remarque : Pour avoir une bonne précision lorsque $A = 10$, le pas de temps a été divisé par 100 : $\Delta t = 10^{-5}$.

10.1.3 Combinaison des deux phénomènes : réaction chimique et solidification

Aucun des deux paramètres D_a et A n'est annulé.

Nous considérons les conditions initiales et les fonctions sources q_s et isotherme g donnés dans la figure 10.11 et nous effectuons des calculs pour différentes valeurs de A et D_a .

Les phénomènes de réaction chimique et de solidification sont considérés, la colonne magmatique se solidifie petit à petit, et simultanément, le solide réagit avec le liquide magmatique. L'évolution des concentrations est arrêtée une fois toute la colonne magmatique entièrement solidifiée. Cette évolution au cours du temps varie selon les valeurs des paramètres A et D_a , sur les figures 10.12 et 10.13 nous avons tracé les profils des concentrations pour des valeurs différentes de ces deux paramètres.

10.1. CAS DE FLUX IMPOSÉS NULS : $F_S(P_S.C_S) = 0$ ET $F_L(P_L.C_L) = 0$

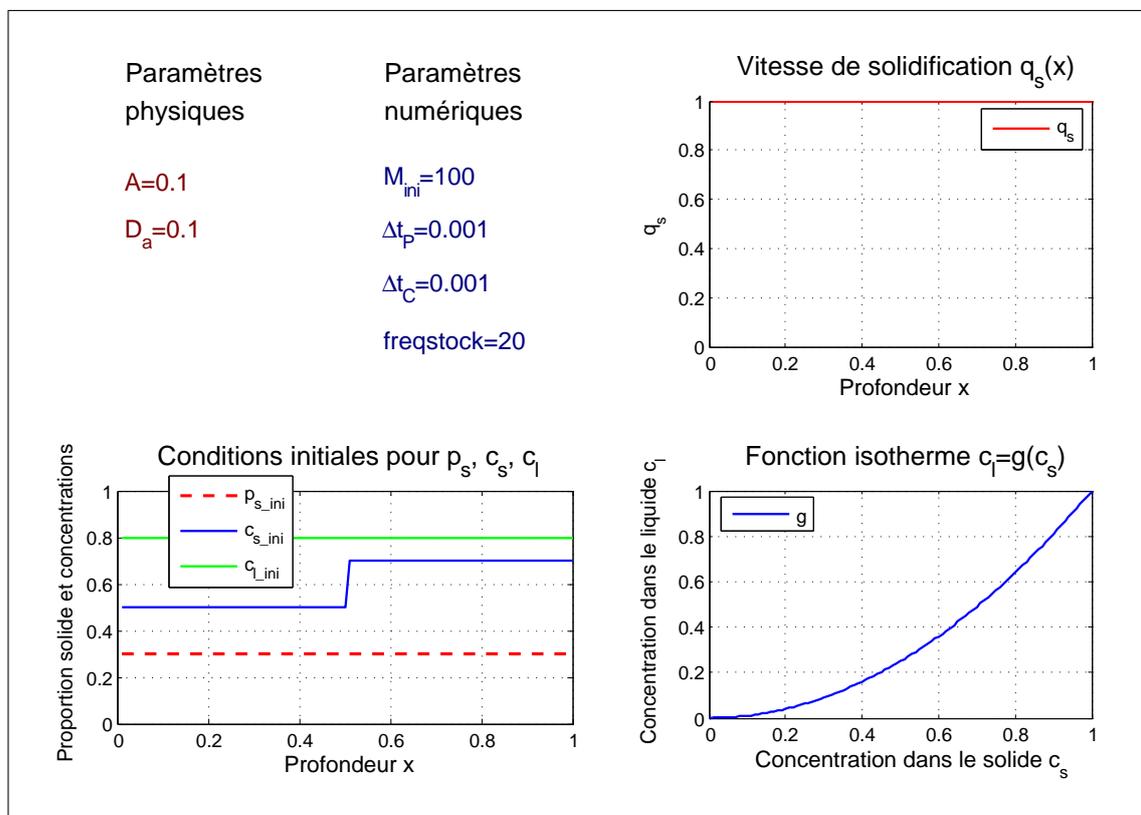


FIGURE 10.11 – Conditions initiales et fonctions sources g et q_s . — Flux nuls, $A \neq 0$, $D_a \neq 0$.

Nous observons sur les figures 10.12a et b que pour la même valeur de $A = 0.1$, et deux valeurs différentes de D_a (0.1 et 10), au même instant $t = 0.2$, les profils de c_s et c_l ne sont pas identiques, ce qui est normal puisque l'équilibre chimique se fait plus rapidement pour $D_a = 10$.

Pour $A = 1$ et $D_a = 1$, la solidification ainsi que les réactions chimiques se font 10 fois plus rapidement que lorsque $A = 0.1$ et $D_a = 0.1$, nous remarquons ainsi sur la figure 10.13a que le premier cas à $t = 0.02$ nous obtenons le même profil des concentrations que pour le deuxième cas à $t = 0.2$ (figure 10.12a).

Pour l'état final (figure 10.13b), il est le même pour tout choix de A et D_a , puisque cet état final est défini par les relations (10.8) qui ne font intervenir aucun de ces deux paramètres, mais uniquement la condition de conservation et le fait que $p_s = 1$ et $p_l = 0$ à la fin des calculs.

Remarque : Pour le cas $D_a \neq 0$ et $A \neq 0$, nous remarquons aussi une bonne correspondance entre les résultats de simulation par le schéma numérique (9.7) et ceux obtenus par l'algorithme (10.2).

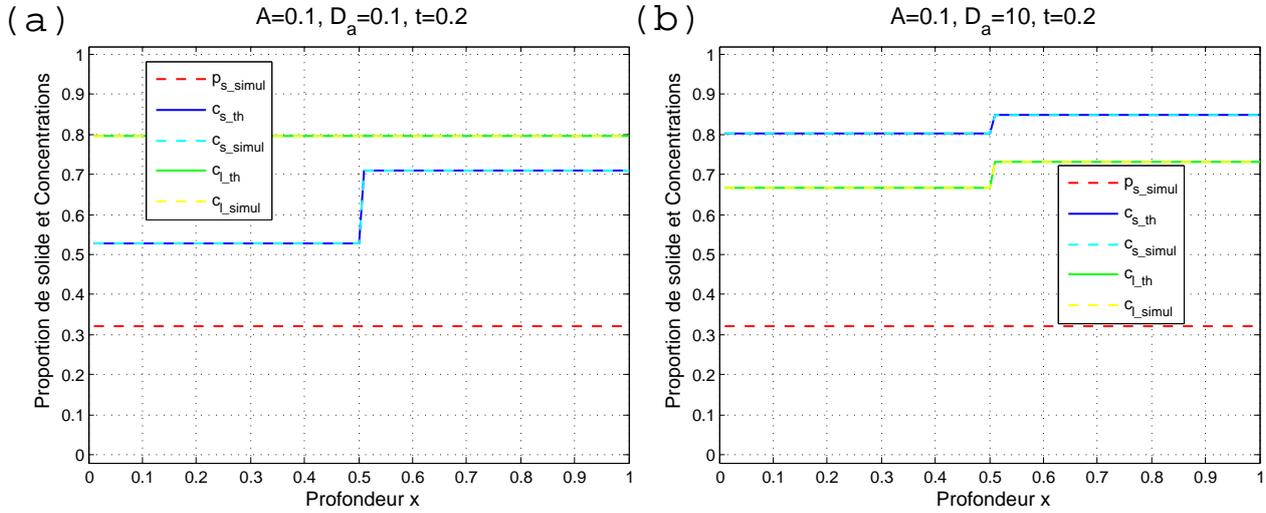


FIGURE 10.12 – Représentation des résultats de simulation comparés aux résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l à $t = 0.5$ et $t = 1.5$. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$.

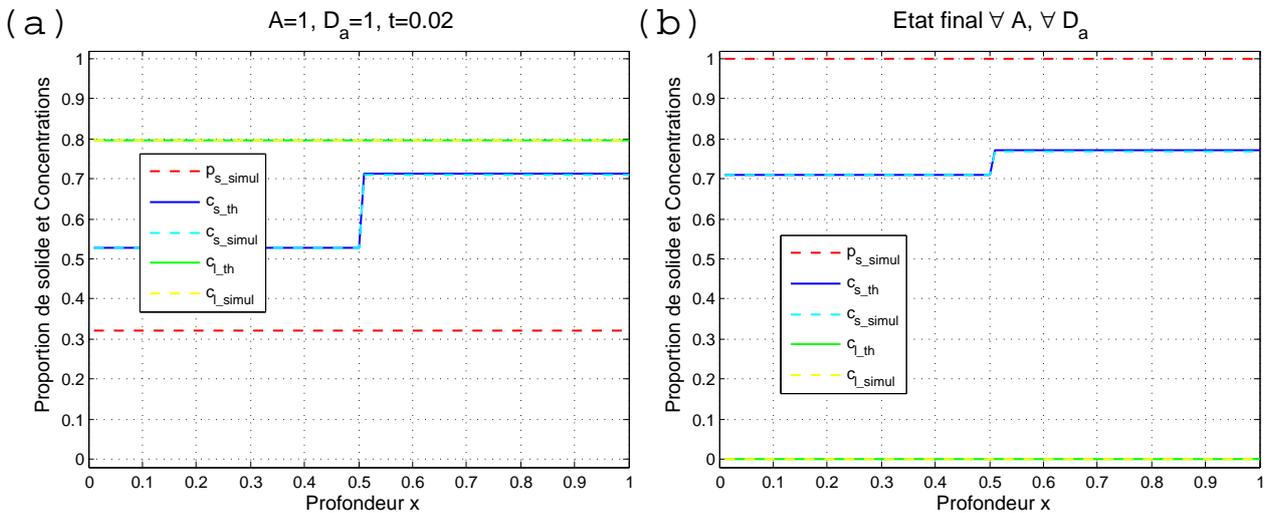


FIGURE 10.13 – Représentation des résultats de simulation avec les résultats théoriques pour les concentrations c_s et c_l à $t = 0.5$ et $t = 1.5$. — Flux nuls, $A = 1$, $D_a = 0$.

10.2 Prise en compte des termes de flux : $f_s(p_s \cdot c_s) \neq 0$ et $f_l(p_l \cdot c_l) \neq 0$

Dans cette section, nous reconsidérons les termes de transport et nous reprenons des cas tests selon les valeurs nulles ou pas des deux paramètres A et D_a .

La validation se fait ici par rapport à des calculs analytiques simples et à des considérations qualitatives.

10.2.1 Evolution par transport uniquement

Nous prenons l'exemple où seul le transport serait à l'origine des variations des concentrations des éléments chimiques ($D_a = 0$ et $A = 0$). Ce que nous souhaitons vérifier ici, c'est le déplacement d'un front de "vidange", comme nous l'avons observé et validé par la méthode des caractéristiques pour p_s dans la section 8.3.1, mais cette fois pour la concentration dans le solide c_s .

Nous considérons alors les conditions initiales représentées dans la figure 10.14, et nous traçons les profils des trois grandeurs p_s , c_s et c_l , obtenus par la simulation numérique (schéma numérique 9.7) à un temps intermédiaire et au temps final (cf. figure 10.15).

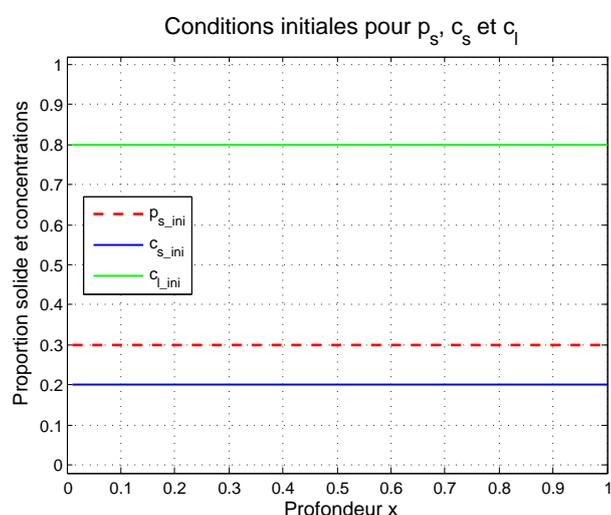


FIGURE 10.14 – Conditions initiales. — Flux non nuls, $A = 0$, $D_a = 0$.

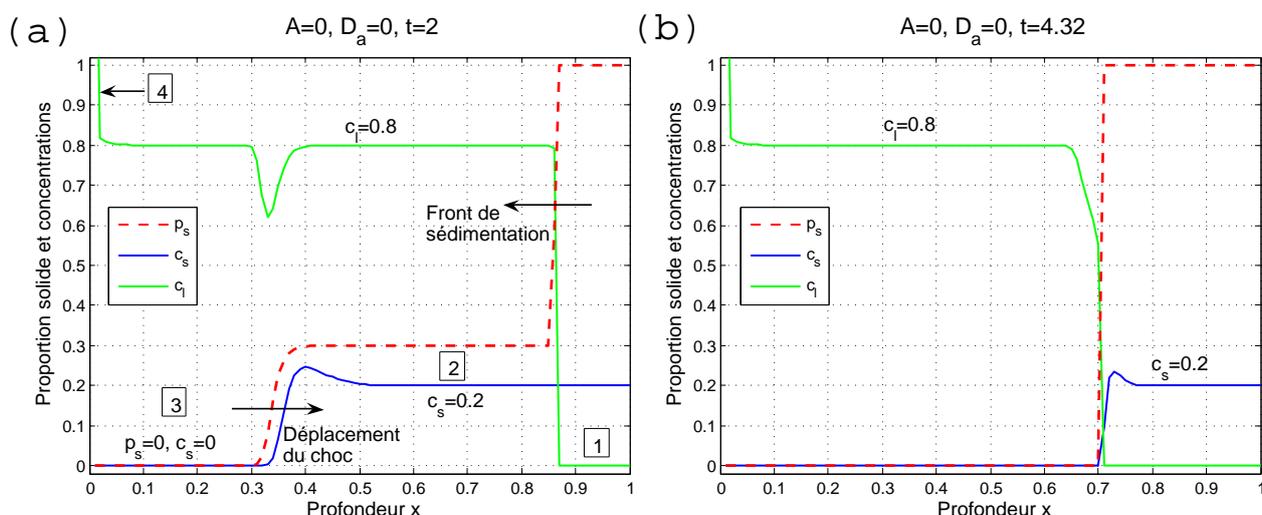


FIGURE 10.15 – Résultats de simulation pour p_s , c_s et c_l (a) à $t = 2$ et (b) à l'état final $t = 4.32$. — Flux non nuls, $A = 0$, $D_a = 0$.

CHAPITRE 10. TESTS DE VALIDATION DU MODÈLE DE TRANSPORT RÉACTIF

Sur la figure 10.15a, nous observons la propagation d'un choc pour la grandeur p_s qui correspond au front de "vidange" de la colonne magmatique en matière solide. Nous observons de même, un choc qui se produit pour la concentration dans le solide c_s , ce choc se déplace à la même vitesse que le front de "vidange" et se situe à la même profondeur que celui-ci.

Ce résultat est important et correspond bien à ce que nous pouvons prévoir. En effet, si on découpe la colonne magmatique en 3 zones comme représenté sur la figure que nous étudions, nous observons la propagation de la condition initiale $c_s^0 = 0.2$ dans les zones 1 et 2, cette valeur est justifiée par le fait que les réactions chimiques sont annulés ($D_a = 0$), il y a juste déplacement des solides et des liquides par sédimentation du solide et remontée du liquide, les concentrations dans le solide et dans le liquide doivent donc être constantes et égales à leur valeurs initiales.

Nous avons alors dans la zone 1 du solide de concentration 0.2 et pas de liquide (on considère alors sur la zone 1 une concentration c_l égale à 0).

Dans la zone 2, il y a coexistence de solide et de liquide qui ont, chacun, gardé leurs concentrations initiales.

Enfin, dans la zone 3, il n'y a plus de solide, celui-ci ayant sédimenté, le liquide garde sa concentration initiale de 0.8 et on considère alors une concentration dans le solide c_s égale à 0.

Au niveau du choc, le schéma utilisé permet de visualiser une discontinuité assez satisfaisante pour c_s , même s'il y a un léger pic vers le haut pour c_s et un autre vers le bas pour c_l dûs aux approximations numériques, mais l'allure générale des courbes est satisfaisante.

Au niveau de la zone 4, la concentration dans le liquide c_l tend vers une valeur supérieure à 1 (environ 1.4), ceci est dû à une erreur numérique liée à la difficulté d'adapter le schéma numérique au voisinage du front de sédimentation (cf. section 10.4.1) et n'affecte ici que la valeur de c_l au sommet de la colonne magmatique (en $x = 0$).

A l'état final (cf. figure 10.15b), nous observons une zone au fond de la colonne, où le solide a sédimenté pour former une couche solide de concentration $c_s = 0.2$, séparée de la partie supérieure entièrement liquide, de concentration $c_l = 0.8$, sauf légères erreurs numériques au niveau du front de sédimentation et au sommet de la colonne.

Conservation :

Pour ce premier exemple où on a $A = 0$ et $D_a = 0$, les seconds membres des EDPs (9.2) régissant l'évolution des concentrations c_s et c_l sont annulés, la conservation concerne donc séparément la quantité de l'élément chimique considéré, dans le solide et la conservation de la quantité de cet élément dans le liquide, et ceci à tout moment t_n , ce qui s'écrit :

$$\forall n, \begin{cases} \sum_{i=1}^M p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^n & = \sum_{i=1}^M p_{s_i}^0 \cdot c_{s_i}^0 \\ \sum_{i=1}^M p_{l_i}^n \cdot c_{l_i}^n & = \sum_{i=1}^M p_{l_i}^0 \cdot c_{l_i}^0 \end{cases} \quad (10.10)$$

Dans notre cas nous avons une très bonne conservation : l'erreur de conservation est de 0 % dans le solide et de 0.14 % seulement dans le liquide.

10.2.2 Evolution par réaction et transport

Nous testons ici les effets de la rééquilibration chimique avec transport et sans solidification ($D_a \neq 0$ et $A = 0$), nous prenons pour cela les mêmes conditions initiales et la même courbe isotherme ($c_l = g(c_s) = c_s^2$) que dans la section 10.1.1 (figure 10.16), puis nous choisissons trois valeurs différentes pour D_a afin de tester différents ratios 'vitesse de réaction/vitesse d'advection'.

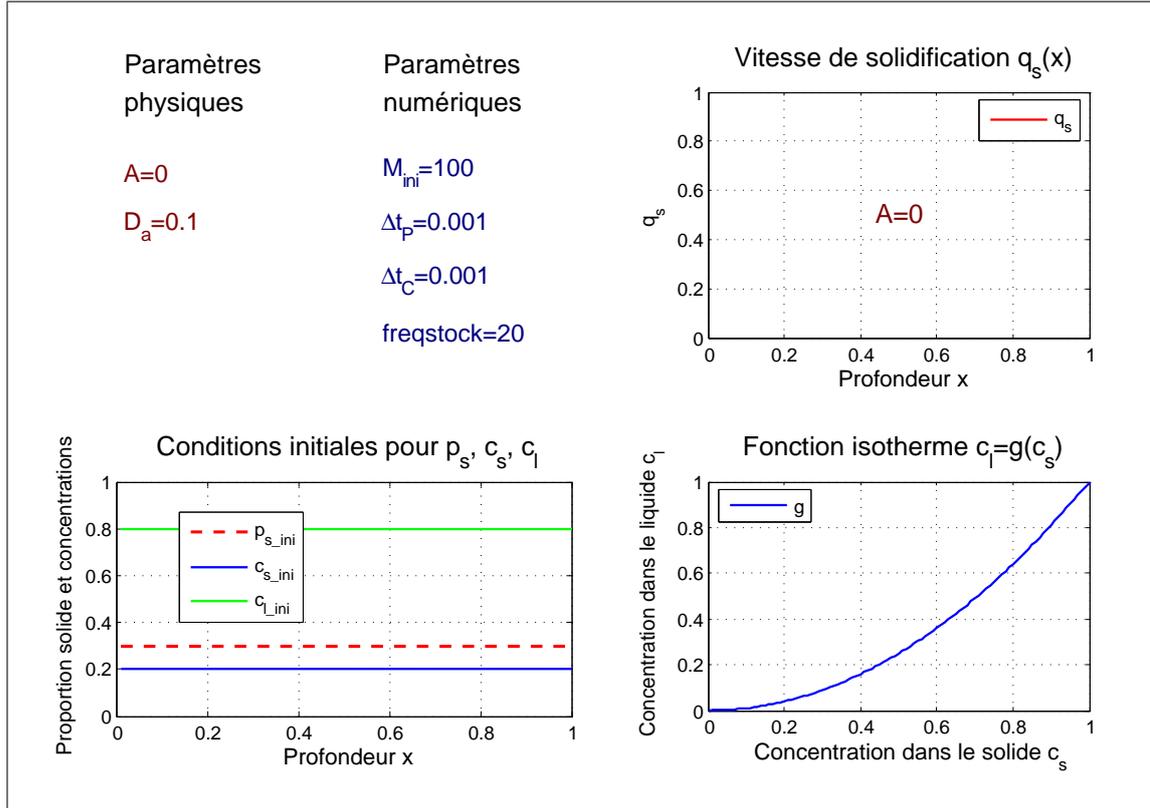


FIGURE 10.16 – Conditions initiales et fonctions $c_l = g(c_s)$ — Flux non nuls, $A = 0$, $D_a \neq 0$.

Comme vu dans la section 10.1.1, le rééquilibrage chimique (en absence de transport) conduirait à un résultat pour les concentrations de $c_s = 0.751$ et $c_l = 0.564$ (cf. relations (10.5) et résultats (10.6)). Regardons ce que cela donne pour le cas où il y a transport :

a) $D_a = 0.1$

Nous traçons les résultats de la simulation à deux temps différents et à l'état final (cf. figures 10.17 et 10.18). A $t = 2$ nous décomposons la colonne magmatique en 3 zones (cf. figure 10.17a) :

La zone 1, occupée à 100 % de solide : on y voit que la courbe des concentrations dans le solide initialement à $c_s = 0.2$ croître au fur et à mesure que le front de sédimentation avance en direction du haut de la colonne magmatique (c_s tend vers la valeur à l'équilibre 0.751), alors que la concentration en liquide est nulle. Dans chaque maille solidifiée ($p_s = 1$), la concentration c_s est figée et c_l est rendue nulle.

CHAPITRE 10. TESTS DE VALIDATION DU MODÈLE DE TRANSPORT RÉACTIF

Dans la zone 2, on peut observer la propagation d'un plateau horizontal pour c_s dont la valeur augmente par rapport à la valeur initiale (0.2). Pour c_l le palier horizontal diminue par rapport à sa valeur initiale 0.8.

Dans la zone 3, séparée de la zone 2 par le front de "vidange", il n'y a plus de solide, celui-ci ayant précipité vers le fond, et on observe la décroissance de c_l pour tendre vers la valeur à l'équilibre avec le solide.

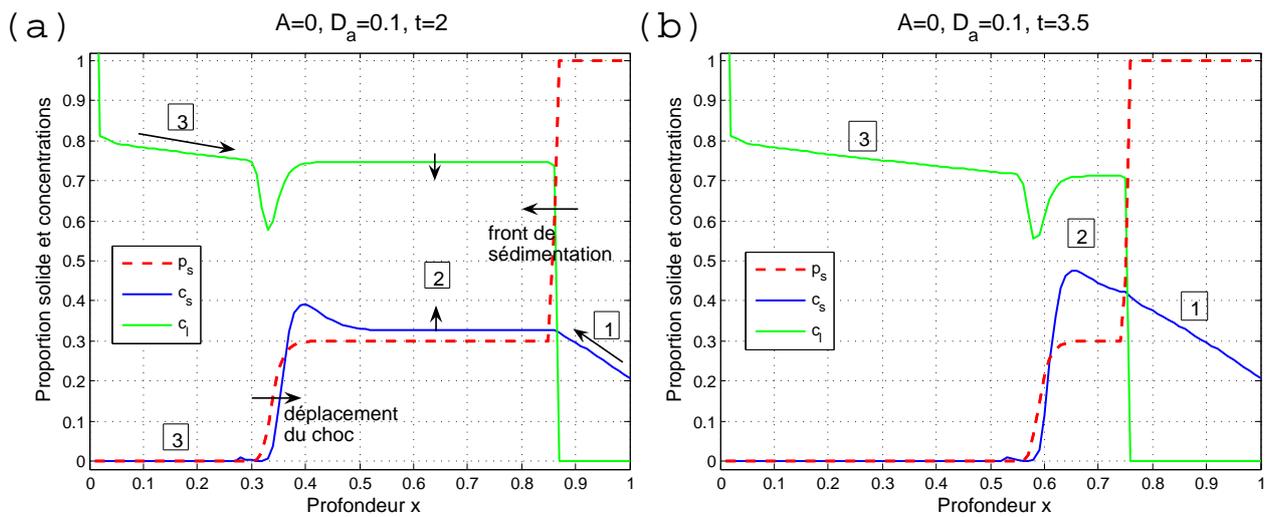


FIGURE 10.17 – Résultats de simulation pour p_s , c_s , et c_l (a) à $t = 2$ et (b) à $t = 3.5$. — $A = 0$, $D_a = 0.1$.

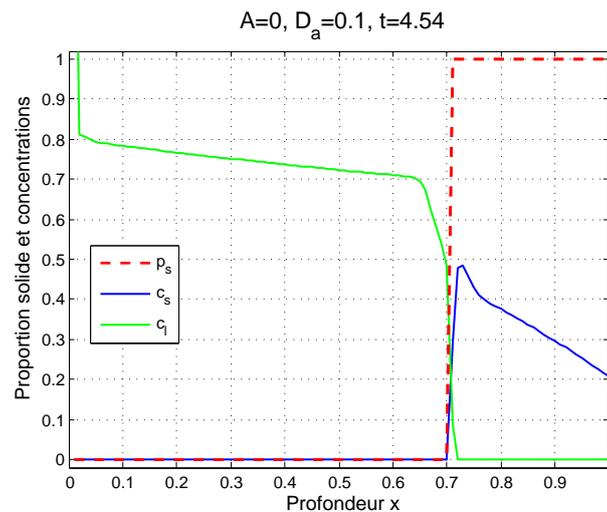


FIGURE 10.18 – Résultats de simulation à l'état final $t = 4.54$. — $A = 0$, $D_a = 0.1$.

À $t = 3.5$, c_s a continué à croître dans la zone 1, et c_l a continué à décroître dans la zone 3.

10.2. PRISE EN COMPTE DES TERMES DE FLUX : $F_S(P_S.C_S) \neq 0$ ET $F_L(P_L.C_L) \neq 0$

A l'état final $t = 4.54$, tout le solide a sédimenté en bas de la colonne magmatique et le liquide surmonte alors le solide. On observe une courbe finale de c_s traduisant une croissance vers les valeurs à l'équilibre dans la zone où il y a du solide et une courbe décroissante pour c_l pour tendre vers l'équilibre. Cependant, la valeur $D_a = 0.1$ n'est pas assez élevée pour permettre d'atteindre l'équilibre prévu par la courbe isotherme ($c_s = 0.75$ et $c_l = 0.56$) sur aucune partie de la colonne magmatique. Nous augmentons alors la valeur de D_a :

b) $D_a = 1$

La rééquilibration se fait dix fois plus vite que pour $D_a = 0.1$: à $t = 0.2$ (figure 10.19a), nous obtenons les mêmes valeurs obtenues avec $D_a = 0.1$ à $t = 2$ ($c_s \approx 0.33$ et $c_l \approx 0.75$) au niveau des paliers horizontaux.

A $t = 3$ (figure 10.19b), on observe une courbe de c_s croissante dans la zone 1, signe de la tendance à l'équilibre, et la décroissance de c_l dans la zone 2 pour également tendre vers l'équilibre. Dans la zone 2, les paliers horizontaux de c_s et c_l ont atteint l'équilibre prévu par l'isotherme ($c_s = 0.75$ et $c_l = 0.56$).

L'état final est atteint à $t = 4.58$ (figure 10.20).

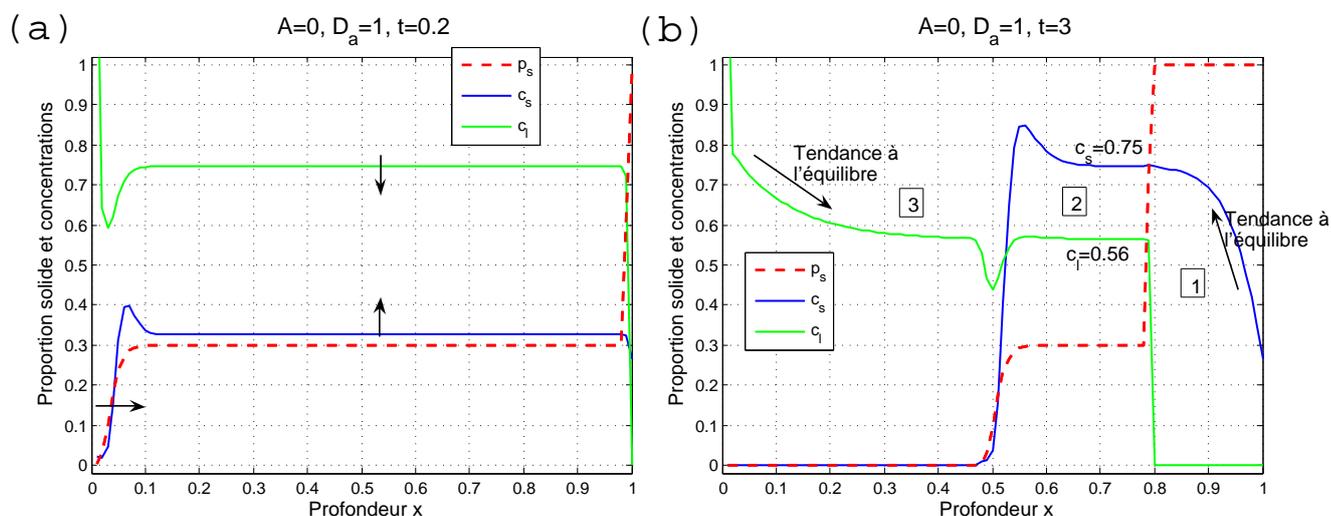


FIGURE 10.19 – Résultats de simulation (a) à $t = 0.2$ et (b) à $t = 3$. — $A = 0$, $D_a = 1$.

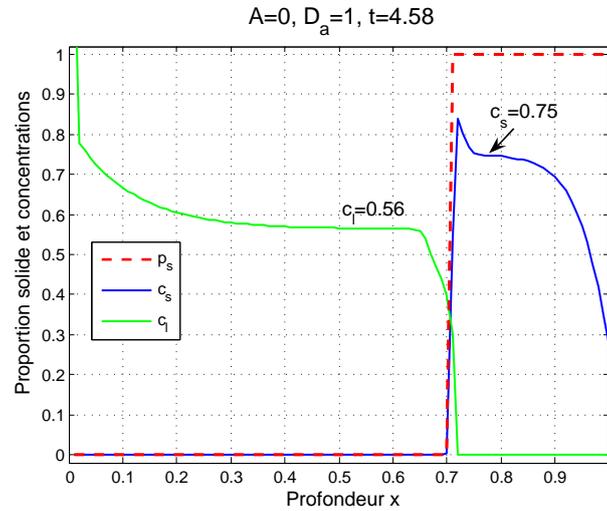


FIGURE 10.20 – Résultats de simulation à l'état final $t = 4.58$. — $A = 0, D_a = 1$.

c) $D_a = 10$

Les valeurs $c_s = 0.33$ et $c_s = 0.75$ sont obtenus à seulement $t = 0.02$ (10 fois plus vite que pour $D_a = 1$, cf. figure 10.21a).

Sur la figure 10.21b, on obtient l'équilibre (paliers à $c_s = 0.75$ et $c_l = 0.56$) à $t = 0.3$ ($t = 3$ pour $D_a = 1$).

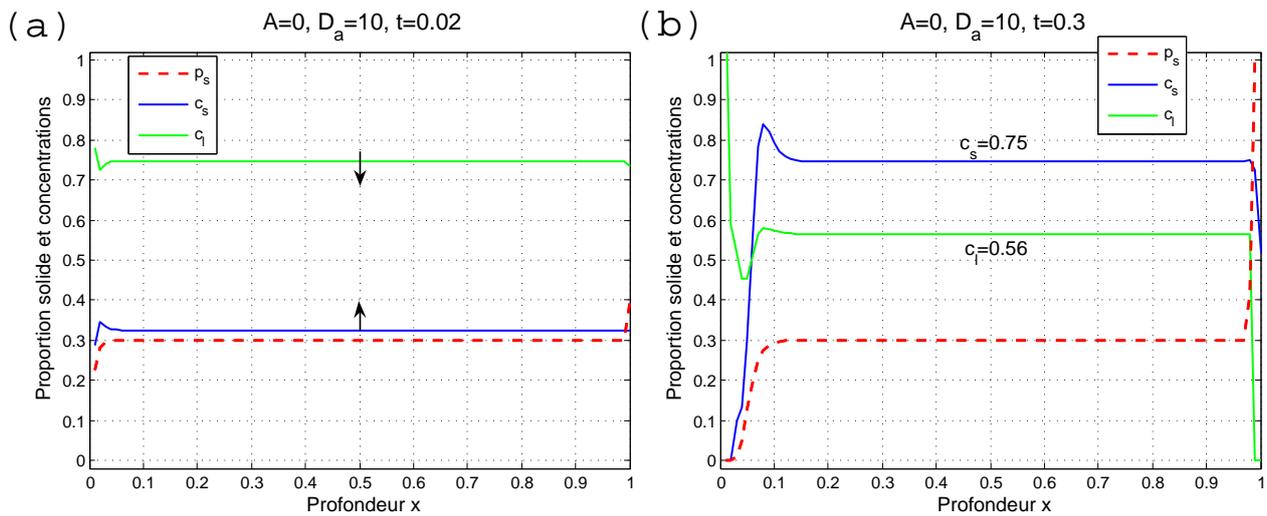


FIGURE 10.21 – Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à $t = 0.3$. — $A = 0, D_a = 10$.

Ces valeurs se propagent ensuite, ce qu'on observe à $t = 2.5$ (figure 10.22a).

À l'état final $t = 4.58$ (figure 10.22b), nous observons dans la partie solide une courbe de c_s horizontale avec une croissance rapide vers la valeur à l'équilibre au voisinage de $x = 1$, et dans la

10.2. PRISE EN COMPTE DES TERMES DE FLUX : $F_S(P_S.C_S) \neq 0$ ET $F_L(P_L.C_L) \neq 0$

partie solide une courbe horizontale pour c_l dont la valeur est celle à l'équilibre avec le solide, ce qui témoigne de la rapidité de la réaction chimique.

Nous pouvons parler dans le cas $D_a = 10$ d'un *équilibre quasi-instantané*.

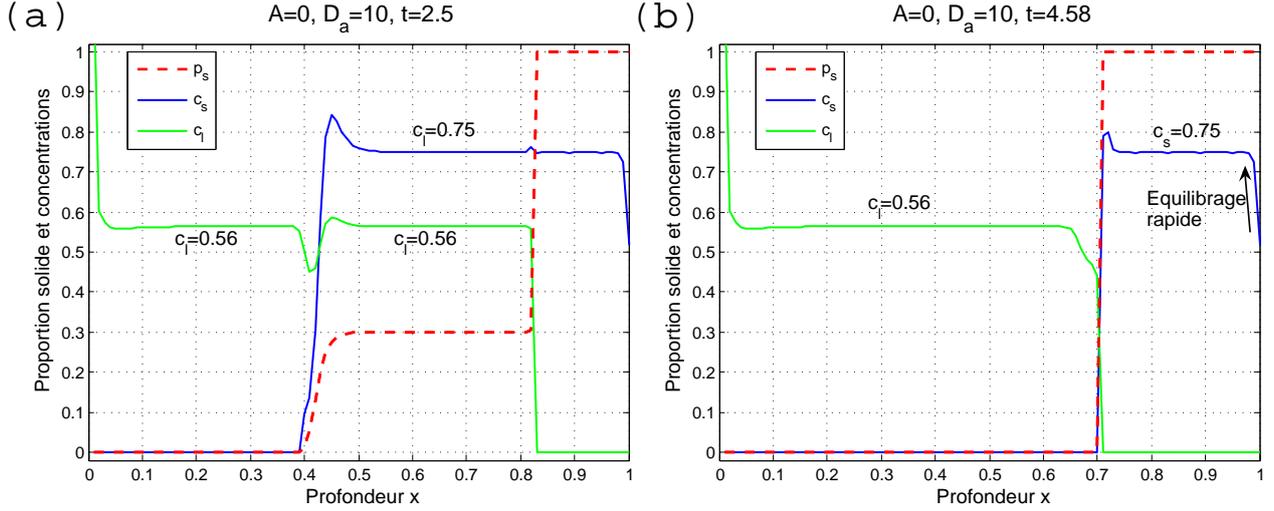


FIGURE 10.22 – Résultats de simulation (a) à $t = 2.5$ et (b) à l'état final $t = 4.58$. — $A = 0, D_a = 10$.

Conservation :

Pour les cas $D_a \neq 0$ et/ou $A \neq 0$, les seconds membres du système d'EDPs (9.2) ne sont plus nuls c'est la somme de la première équation (multipliée par $\frac{\rho_s}{\rho_l}$ à cause de l'adimensionnement) et de la deuxième équation qui est nul. Ce que nous devons vérifier est alors la conservation de la quantité totale de l'élément chimique sur toute la profondeur et à tout moment t_n :

$$\forall n, \sum_{i=1}^M (p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^n + p_{l_i}^n \cdot c_{l_i}^n) = \sum_{i=1}^M (p_{s_i}^0 \cdot c_{s_i}^0 + p_{l_i}^0 \cdot c_{l_i}^0) \quad (10.11)$$

Remarque : La notation exacte est :

$$\sum_{i=1}^M \left(\frac{\rho_s}{\rho_l} \cdot p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^n + p_{l_i}^n \cdot c_{l_i}^n \right) = \sum_{i=1}^M \left(\frac{\rho_s}{\rho_l} \cdot p_{s_i}^0 \cdot c_{s_i}^0 + p_{l_i}^0 \cdot c_{l_i}^0 \right)$$

Pour les mêmes raisons citées dans la section 10.1.1, nous continuerons à considérer l'égalité (10.11).

Nous constatons une très bonne conservation (avec le pas de temps pris de 0.001), avec une erreur de conservation de 0.09 % pour le calcul à $D_a = 0.1$, 0.15 % d'erreur pour $D_a = 1$ et 0.05 % d'erreur pour $D_a = 10$.

10.2.3 Evolution par solidification et transport

Nous allons tester maintenant l'effet de la solidification avec transport et sans réaction chimique, sur l'évolution des concentrations ($D_a = 0$ et $A \neq 0$). Nous prenons les conditions initiales présentées dans la figure ci-dessous, ce sont les mêmes prises dans la section 10.1.2. La vitesse de solidification est ici prise homogène sur toute la colonne. Nous testons plusieurs valeurs de A , celui-ci traduisant le ratio 'vitesse de solidification/vitesse d'advection'.

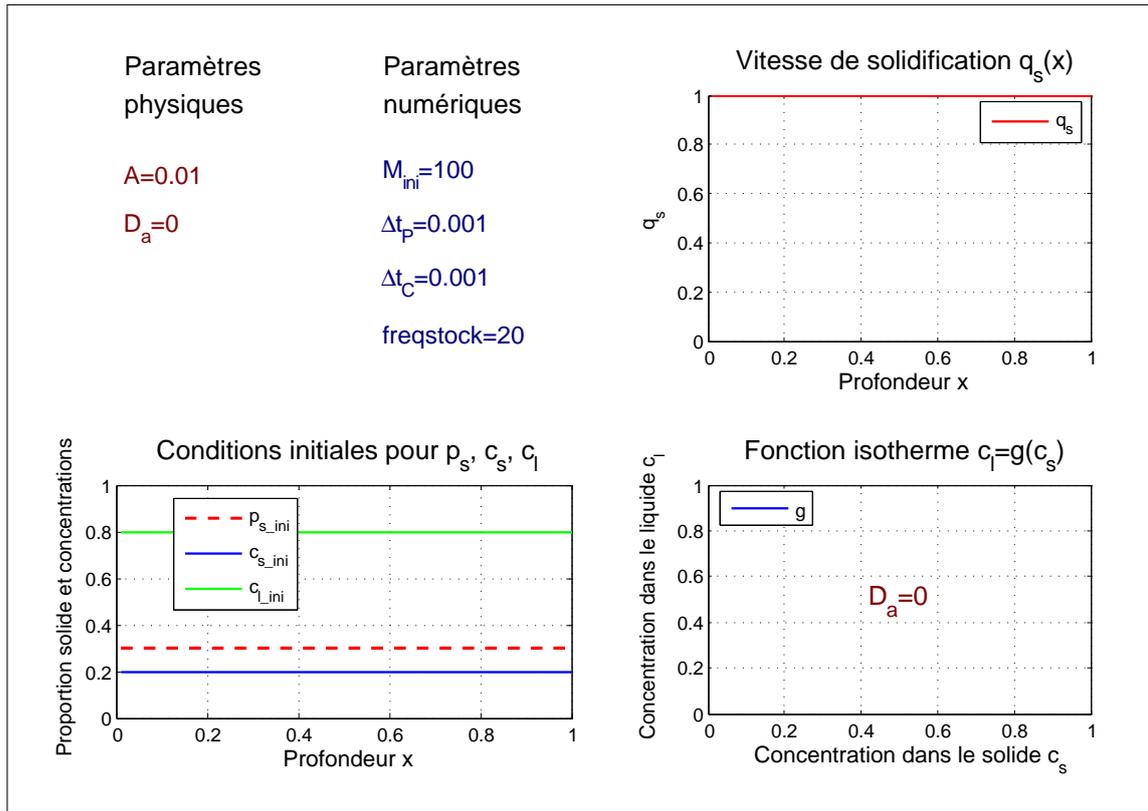


FIGURE 10.23 – Conditions initiales et fonction $q_s(x)$. — Flux nuls, $A \neq 0$, $D_a = 0$.

Comme vu dans la section 10.1.2, le remplissage de la colonne magmatique (en absence de transport) impose, via les relations (10.8), les concentrations $c_s = 0.62$ et $c_l = 0$ (cf. résultats 10.9). Ici, nous considérons en plus le phénomène de transport.

a) $A = 0.01$

Nous traçons les allures des courbes des concentrations aux deux temps $t = 1.5$ et $t = 3$ (figure 10.24), nous divisons la colonne magmatique en 3 zones :

La zone 2 où on a propagation d'un palier horizontal pour c_s , ce palier est croissant au cours du temps puisque le liquide se solidifie au cours du temps et apporte plus d'éléments chimiques au solide déjà existant, c_l quand à lui reste toujours égal à 0.8 puisqu'il n'y a pas d'équilibrage chimique ($D_a = 0$). Au fur et à mesure que le front de sédimentation se dirige vers le haut, la concentration est figée sous ce front, et donne dans la zone 1 une courbe de c_s qui est alors croissante.

10.2. PRISE EN COMPTE DES TERMES DE FLUX : $F_S(P_S.C_S) \neq 0$ ET $F_L(P_L.C_L) \neq 0$

Dans la zone 3, il y a toujours du solide qui se forme en petite quantité ($A = 0.01$), la concentration dans le solide juste formé doit être la même que dans liquide existant dans cette zone, avant de sédimenter.

Pour cette valeur de $A = 0.01$, la vitesse de solidification est faible par rapport à la vitesse d'advection, ce qui fait que la valeur $c_s = 0.62$ n'est pas atteinte au niveau de la zone 2 avant que le front de vidange ne rencontre le front de sédimentation.

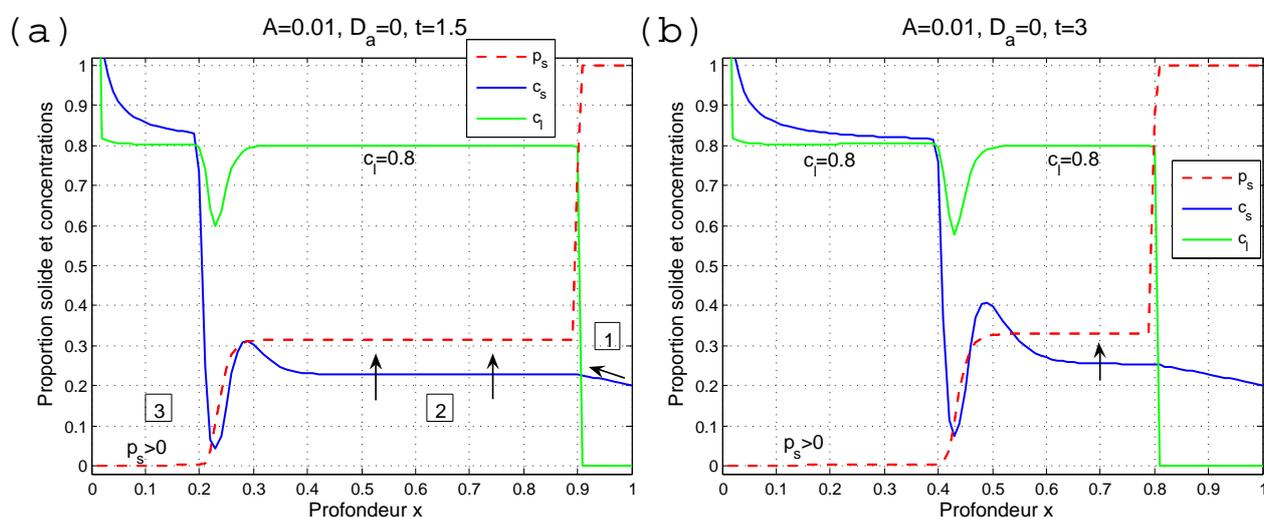


FIGURE 10.24 – Résultats de simulation (a) à $t = 1.5$ et (b) à $t = 3$. — $A = 0.01$, $D_a = 0$.

b) $A = 0.1$

Les figures 10.25a et b montrent une solidification plus rapide, la pente de croissance de c_s dans la zone 1 est supérieure au cas $A = 0.01$, la montée du palier horizontal est aussi plus rapide (zone 2), le front de vidange quand à lui n'atteint jamais le front de sédimentation, en effet, le front de vidange change de direction de propagation et retourne en direction du sommet (voir l'explication de ce phénomène dans le chapitre 8, section 8.3.6). Le palier horizontal continue à augmenter et atteint alors la valeur $c_s = 0.62$ (cf. résultats (10.9) en absence de transport).

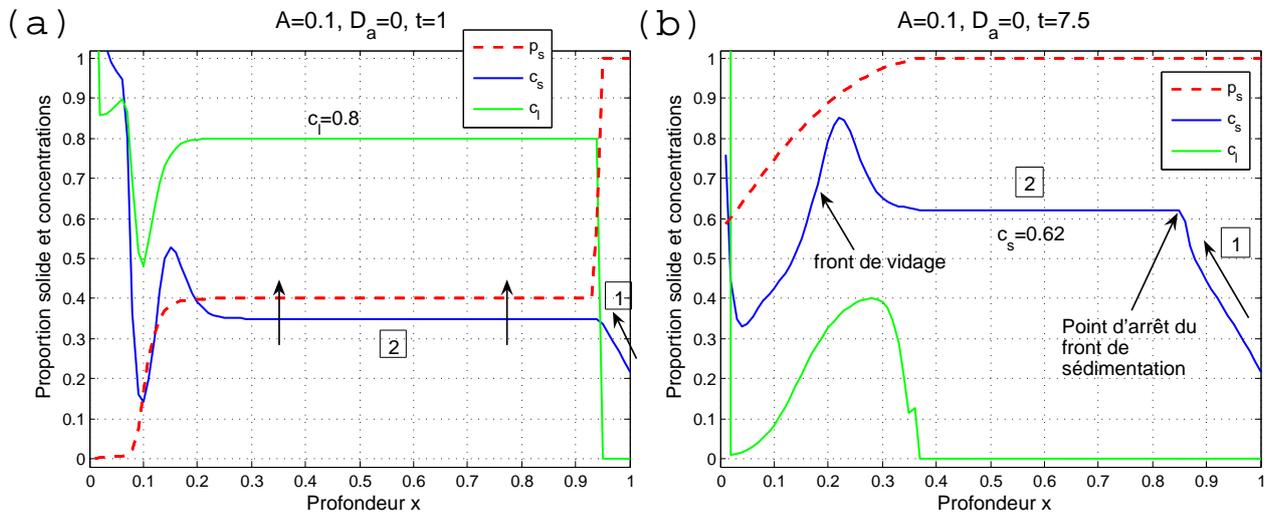


FIGURE 10.25 – Résultats de simulation (a) à $t = 1$ et (b) à $t = 7.5$. — $A = 0.1$, $D_a = 0$.

c) $A = 10$

On passe à $A = 10$ (figures 10.26a et b), la solidification est très rapide et le transport n'a pas le temps de se faire, ce qui donne en un temps très court ($t = 0.08$) une concentration finale c_s presque partout égale à 0.62 (donnée par les relations (10.8) lorsque les flux f_s et f_l sont annulés). La concentration dans le liquide reste constante et égale à 0.8 jusqu'à épuisement du liquide où c_l passe à 0.

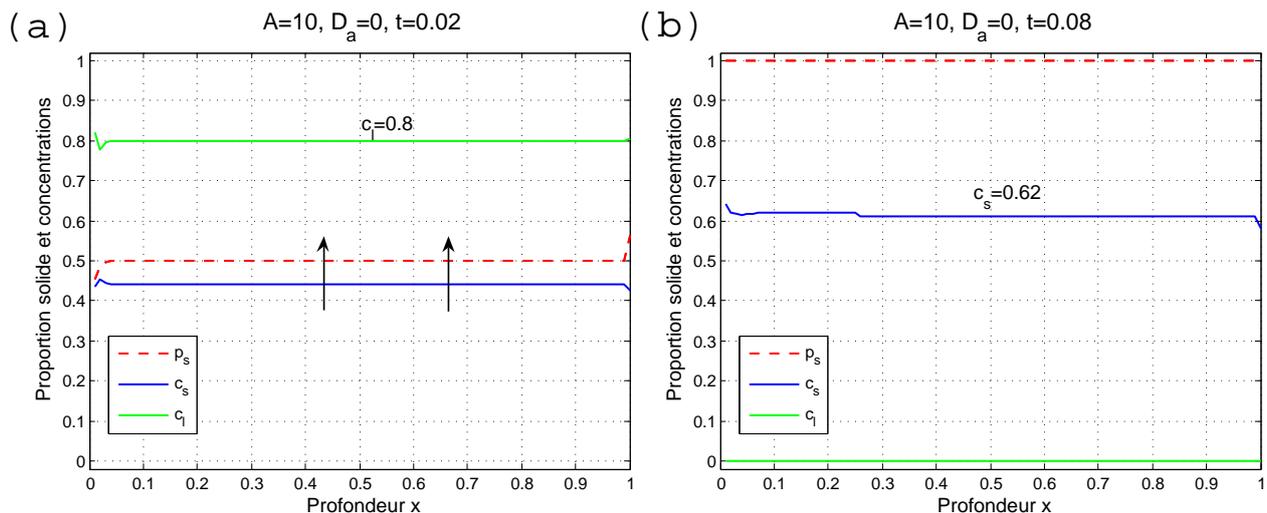


FIGURE 10.26 – Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à l'état final $t = 0.08$. — $A = 10$, $D_a = 0$.

10.3. COMBINAISON DES TROIS PHÉNOMÈNES : SOLIDIFICATION, TRANSPORT ET RÉACTION

Conservation :

La relation de conservation à vérifier est la relation (10.11). Les erreurs de conservation sont de 0.71 % pour le cas $A = 0.01$, de 0.02 % pour $A = 0.1$ et de 1 % pour $A = 10$. Ces erreurs peuvent être atténuées en diminuant le pas de temps Δt .

Pour des conditions initiales telles que la chambre est initialement entièrement liquide, nous obtenons pour une solidification rapide, une concentration finale dans le solide égale à la concentration initiale dans le liquide : $c_s^f = c_l^0 = 0.8$ (figures 10.27).

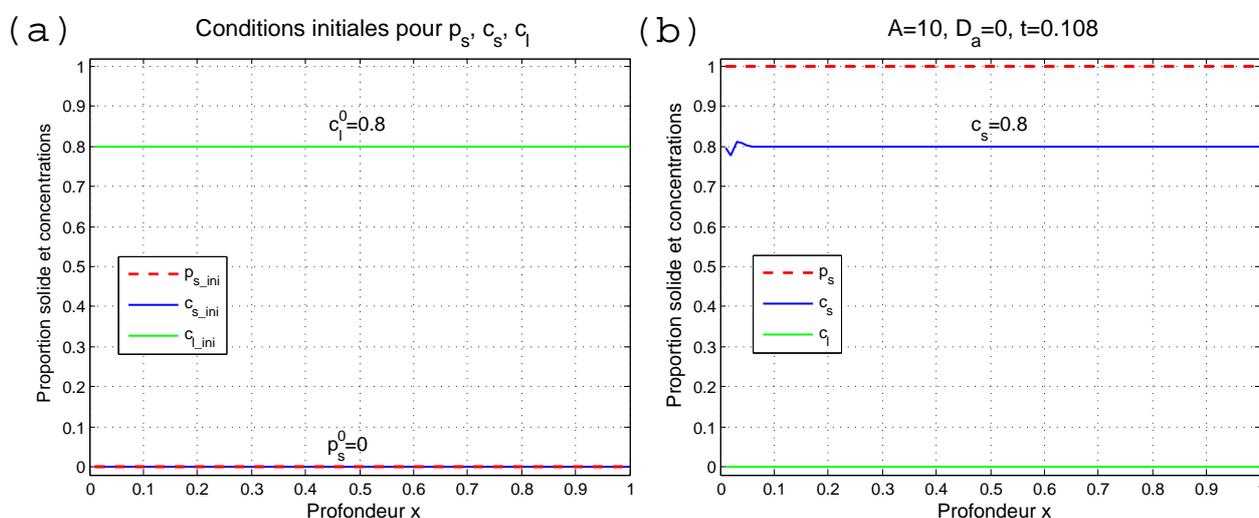


FIGURE 10.27 – (a) Conditions initiales, (b) Résultats de simulation à l'état final $t = 0.2$. — $A = 10$, $D_a = 0$, $\Delta t = 10^{-4}$.

10.3 Combinaison des trois phénomènes : solidification, transport et réaction

Ce cas général considérant les trois phénomènes moteurs en même temps est présenté comme une première expérience numérique dans le chapitre 11, section 11.1.

10.4 Modification des schémas numériques dans les cas limites

10.4.1 Problème de frontière mobile

Comme nous l'avons mentionné pour le modèle de cristallisation/sédimentation (cf. section 8.4.1), ce problème numérique se pose au niveau de la maille contenant le front de sédimentation, ce front délimite la partie supérieure où il y a du liquide, de la partie inférieure où les mailles sont entièrement remplies de solide.

Nous expliquons l'origine de ce problème numérique : Rappelons que le schéma que nous avons choisi (cf. (9.7)) s'écrit pour une maille i :

$$\begin{cases} p_{s_i}^n c_{s_i}^n - p_{s_i}^{n-1} c_{s_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{s_{i+1/2}}^n - f_{s_{i-1/2}}^n) = \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_i^n \\ p_{l_i}^n c_{l_i}^n - p_{l_i}^{n-1} c_{l_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{l_{i+1/2}}^n - f_{l_{i-1/2}}^n) = -\Delta t \cdot H_i^n \end{cases}$$

avec respectivement les *flux* amont *entrant* et aval *sortant*, pour le solide :

$$\begin{cases} f_{s_{i-1/2}}^n = v_{s_{i-1}}^n \cdot p_{s_{i-1}}^n \cdot c_{s_{i-1}}^n \\ \text{et : } f_{s_{i+1/2}}^n = v_{s_i}^n \cdot p_{s_i}^n \cdot c_{s_i}^n \end{cases} \quad (10.12)$$

et respectivement les *flux* amont *sortant* et aval *entrant*, pour le liquide :

$$\begin{cases} f_{l_{i-1/2}}^n = v_{l_i}^n \cdot p_{l_i}^n \cdot c_{l_i}^n \\ \text{et : } f_{l_{i+1/2}}^n = v_{l_{i+1}}^n \cdot p_{l_{i+1}}^n \cdot c_{l_{i+1}}^n \end{cases} \quad (10.13)$$

Supposons que la maille i contient le front de sédimentation (figure 10.28). Le solide précipitant vers le bas, le flux sortant de la maille i est annulé : $f_{s_{i+1/2}}^n = 0$ et le liquide remontant en direction du haut, le flux entrant dans la maille i est nul : $f_{l_{i+1/2}}^n = 0$.

Ainsi, d'après les relations (10.12), pour une maille i , le schéma concernant les concentrations **dans le solide** prend en compte les valeurs de l'inconnue c_s dans la maille $i - 1$ seulement, celui-ci ne considère donc pas les valeurs de l'inconnue dans la maille i contenant le front mobile, il n'y a donc pas de problème numérique qui se pose.

En revanche, dans les relations (10.13), seul $f_{l_{i+1/2}}^n = 0$ étant nul, le schéma concernant les concentrations **dans le liquide** prend en compte les valeurs de c_l dans la maille i , ce qui pose un problème numérique. En effet, la valeur c_{l_i} est une moyenne sur la maille i (cf. (7.8)) alors que **la maille contenant le front de sédimentation n'est pas homogène**.

Comme dans la section 8.4.1, nous approximations le flux numérique sortant de la maille i , $f_{l_{i-1/2}}^n$, par la **valeur en amont** $v_{l_{i-1}}^n \cdot p_{l_{i-1}}^n \cdot c_{l_{i-1}}^n$, et nous le considérons égal au flux numérique entrant dans la maille $i - 1$:

$\begin{aligned} \text{flux sortant de la maille } i &= v_{l_{i-1}}^n \cdot p_{l_{i-1}}^n \cdot c_{l_{i-1}}^n \text{ au lieu de } f_{l_{i-1/2}}^n \\ \text{flux entrant dans la maille } i - 1 &= v_{l_{i-1}}^n \cdot p_{l_{i-1}}^n \cdot c_{l_{i-1}}^n \text{ au lieu de } f_{l_{i-1/2}}^n \end{aligned} \quad (10.14)$
--

10.4. MODIFICATION DES SCHÉMAS NUMÉRIQUES DANS LES CAS LIMITES

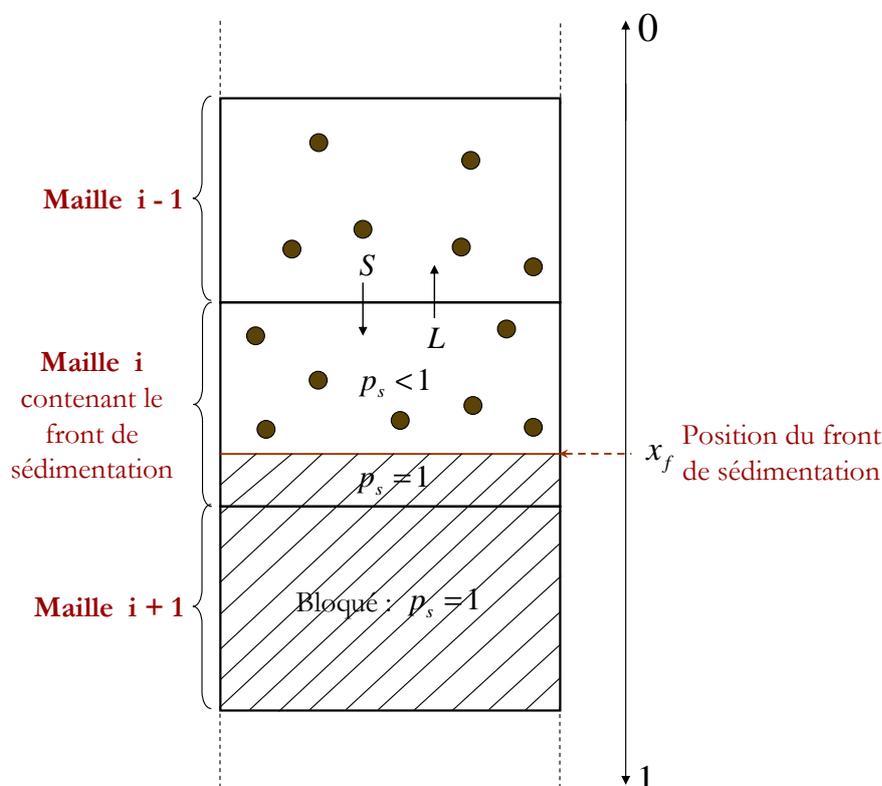


FIGURE 10.28 – Représentation du front de sédimentation. — Le front de sédimentation d’abscisse x_f , sépare la maille en deux parties : une partie inférieure sédimentée pour laquelle $p_s = 1$ et une partie supérieure “mobile” pour laquelle $p_s < 1$.

ce qui donne pour les deux mailles $i - 1$ et i les schémas suivants :

$$\begin{aligned}
 p_{s_{i-1}}^n c_{s_{i-1}}^n - p_{s_{i-1}}^{n-1} c_{s_{i-1}}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (v_{l_{i-1}}^n \cdot p_{l_{i-1}}^n \cdot c_{l_{i-1}}^n - f_{s_{i-3/2}}^n) &= \Delta t \cdot \frac{\rho_l}{\rho_s} \cdot H_i^n \\
 p_{l_i}^n c_{l_i}^n - p_{l_i}^{n-1} c_{l_i}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (0 - v_{l_{i-1}}^n \cdot p_{l_{i-1}}^n \cdot c_{l_{i-1}}^n) &= -\Delta t \cdot H_i^n
 \end{aligned} \tag{10.15}$$

Le terme c_{l_i} n’intervient plus dans le schéma numérique. L’approximation que nous venons de faire ne permet cependant pas de résoudre parfaitement le problème numérique, il subsiste une erreur, qui se propage vu la diffusion du schéma numérique, pour se faire remarquer au sommet de la colonne magmatique comme nous avons pu le voir tout au long du présent chapitre. La conservation elle, reste très satisfaisante : 0% d’erreur pour le solide et de 0.01% à un maximum de 1% d’erreur pour le liquide.

Comme nous l’avons dit dans la section 8.4.1, ce genre de problème de frontière mobile peut être résolu par d’autres méthodes telle la *méthode de changement d’échelle*.

10.4.2 Correction des flux au voisinage de mailles remplies de solide

Ce point a déjà été abordé pour l'équation de cristallisation/sédimentation dans la section 8.4.2. Pour une maille i remplie entièrement de solide ($p_s(i) = 1$), le solide est bloqué dans cette maille, les flux de matière et des éléments chimiques sortant de cette maille ou entrant dans cette maille doivent donc être annulés. Nous avons représenté un exemple où des mailles entièrement solides se retrouvent en bas, en haut ou au milieu de la chambre magmatique dans la figure 8.23.

- Pour le cas des éléments chimiques existant **dans le solide**, le raisonnement général est le même que pour le transport de matière solide (cf. section 8.4.2) : pour une maille i , le flux **entrant** doit être annulé si la maille elle-même est entièrement remplie de solide ($p_{s_i} = 1$) et/ou si la maille précédente $i - 1$ l'est ($p_{s_{i-1}} = 1$). De même le flux **sortant** de la maille i doit être annulé si $p_{s_i} = 1$ et/ou $p_{s_{i+1}} = 1$. Ces différents cas ont été illustrés sur la figure 8.24.

Numériquement, **l'annulation du flux entrant** des éléments chimiques se trouvant dans le solide qui se situe dans la maille i s'écrit :

$$f_{s_{i-1/2}}^n = 0$$

et **l'annulation du flux sortant** des éléments chimiques se trouvant dans le solide qui se situe dans la maille i s'écrit :

$$f_{s_{i+1/2}}^n = 0$$

- Pour le cas des éléments chimiques existant **dans le liquide**, vu que le liquide se déplace en direction du sommet, le raisonnement est alors différent : pour une maille i , le flux **entrant** doit être annulé si la maille elle-même est entièrement remplie de solide ($p_{s_i} = 1$) et/ou si la maille suivante $i + 1$ l'est ($p_{s_{i+1}} = 1$). De même le flux **sortant** de la maille i doit être annulé si $p_{s_i} = 1$ et/ou $p_{s_{i-1}} = 1$.

Numériquement, **l'annulation du flux entrant** des éléments chimiques se trouvant dans le liquide qui se situe dans la maille i s'écrit :

$$f_{l_{i+1/2}}^n = 0$$

et **l'annulation du flux sortant** des éléments chimiques se trouvant dans le liquide qui se situe dans la maille i s'écrit :

$$f_{l_{i-1/2}}^n = 0$$

Ces différents cas sont illustrés sur la figure 10.29 ci-dessous.

Annulation des flux des éléments chimiques se trouvant dans le liquide

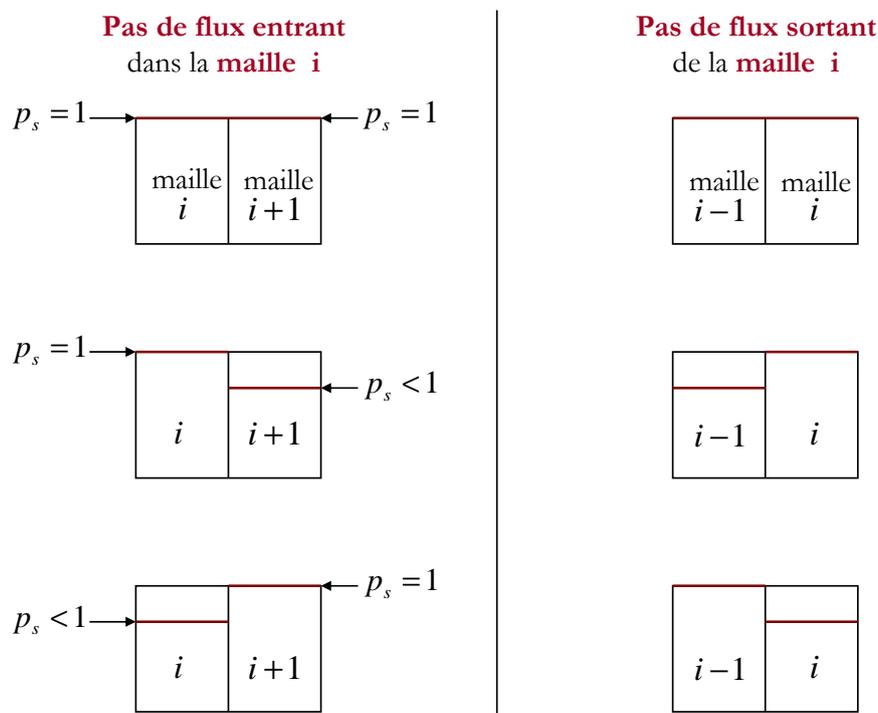


FIGURE 10.29 – Illustration des différents cas où les flux des **éléments chimiques se trouvant dans le liquide** sont annulés.

10.5 Conclusion

La validation, tantôt basée sur les comparaisons à des résultats théoriques (ou semi-théoriques) ou à des résultats analytiques et tantôt basée sur des considérations qualitatives, a montré que le simple schéma numérique décentré (9.7) est suffisant pour le traitement des EDPs de bilan des constituants chimiques (9.2). En effet, ce schéma est conservatif (erreur maximale de 0.15%), stable et converge vers des solutions cohérentes avec les calculs analytiques ainsi que les interprétations qualitatives.

Comme pour les schémas résolvant l'équation de cristallisation/sédimentation, des modifications du schéma numérique ont été apportées dans certains cas limites, ces arrangements ont permis d'obtenir une bonne convergence, tout en laissant apparaître une légère erreur numérique qui se propage et se manifeste au niveau du sommet de la colonne magmatique, ce qui n'affecte que très légèrement l'allure générale des courbes de concentrations $c_s(x, t)$ et $c_l(x, t)$. Peut-être que l'adoption d'une méthode de "changement d'échelle" où seule la partie au-dessus du front de sédimentation

serait considérée à chaque instant, résoudrait ce problème numérique.

Nous pouvons remarquer aussi qu'une amélioration du schéma résolvant l'équation de cristallisation/sédimentation peut avoir une bonne influence sur les résultats obtenus pour les concentrations chimiques. Ceci a été vérifié lorsqu'on remplace le schéma LxF1 par le schéma de Murman-Roe, des améliorations sont apportées aux courbes de concentrations essentiellement dans le cas où $A = 1$ (cf. annexe B).

Dans ce chapitre, nous n'avons pas discuté de la méthode de résolution utilisée pour la résolution des EDPs (9.2) (méthode du point fixe ou de Newton-Raphson (cf. section 9.4)). Nous avons bien testé les deux méthodes dans la plupart des simulations ; la méthode de Newton-Raphson a montré une très bonne convergence (même lorsque la matrice jacobienne n'est pas définie positive (cf. section 7.5.2)), alors que la méthode du point fixe diverge dans certains cas (pour certains profils d'isothermes g par exemple). Néanmoins, lorsque cette dernière méthode converge, les résultats obtenus sont identiques à ceux obtenus par la méthode de Newton-Raphson.

L'analyse détaillée des résultats menée tout au long de ce chapitre pour les différents tests de validation, a permis de comprendre l'influence des deux paramètres A et D_a sur les résultats, ce qui nous prépare dans le travail d'interprétation des résultats des expériences de simulation que nous exposons dans le chapitre suivant.

Quatrième partie

**Expériences numériques et analyse
des résultats**

Chapitre 11

Expériences numériques (étude de quelques situations géologiques modèles)

Dans le présent chapitre, nous voulons explorer les résultats du code de calcul élaboré sur la base du modèle de cristallisation, transport et réaction. Les données principales pour lancer un calcul sont les conditions initiales (p_s^0 , c_l^0 et c_s^0), les fonctions sources ($q_s(x)$ et $g(c_s)$) ainsi que les deux nombres adimensionnels A et D_a . Les résultats qui nous intéressent concernent les concentrations dans la chambre magmatique en cours de solidification de celle-ci et jusqu'à sa solidification complète.

Pour quasiment toutes les simulations dont nous présentons les résultats dans ce chapitre, nous considérons une **chambre magmatique initialement entièrement liquide** avec une concentration initiale dans le liquide, en l'élément chimique considéré, de 0.8. Ces conditions initiales sont représentées dans la figure suivante :

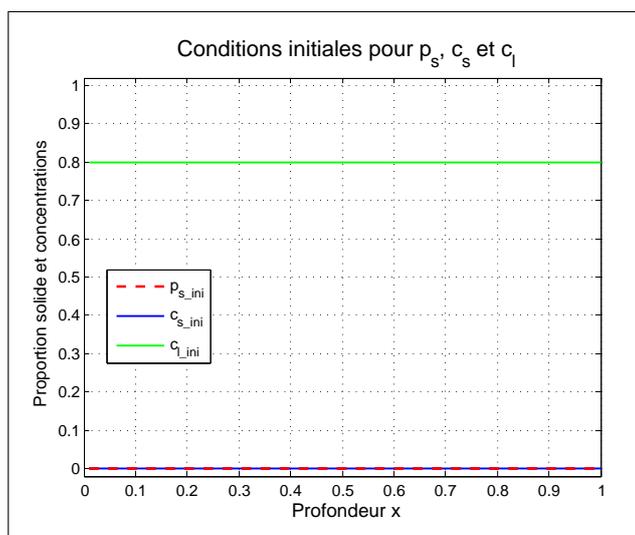


FIGURE 11.1 – Conditions initiales considérées tout le long du chapitre 11. — La chambre magmatique est initialement entièrement liquide.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

Dans la section 11.1, nous testons l'influence des paramètres A et D_a . Nous considérons alors un exemple de fonctions $q_s(x)$ et g , puis pour chaque combinaison des valeurs des deux paramètres A et D_a (valeurs discrètes entre 0.01 et 100), le résultat obtenu est analysé et interprété. Cette analyse nous a servi de base pour la compréhension des différents scénarios susceptibles de se produire dans une chambre magmatique et pour l'interprétation de la suite des expériences numériques.

Ensuite, dans les sections 11.2 et 11.3 nous testons l'influence sur les résultats respectivement des profils de vitesse de solidification $q_s(x)$ et de la fonction isotherme $c_l = g(c_s)$, les profils sont choisis parmi ceux que nous avons déduit de la littérature (cf. section 3.5.2, figure 3.5 pour q_s et section 5.7.2, figure 5.6 pour g).

Pour chaque choix des paramètres et fonctions sources, nous traçons la fonction *répartition de la concentration* dans le solide en fin de processus (lorsque toute la chambre magmatique aura été solidifiée), cette fonction est obtenue par lissage par noyaux des histogrammes. On pourra observer ainsi en particulier une répartition des concentrations *uniforme*, *uni-modale* ou *bi-modale* suivant les valeurs de A et D_a .

Dans la section 11.4, nous nous intéressons aux cas de bimodalité des concentrations. Pour cela, nous définissons un *critère* qui attribue à chaque courbe finale des concentrations dans le solide c_s^f un *degré de bimodalité*. Ces courbes dépendent des fonctions sources q_s et g et des paramètres A et D_a , nous traçons alors, pour chaque choix de q_s et g , une *carte de bi-modalité* en fonction des paramètres A et D_a .

Dans la section 11.5, nous nous intéressons à l'influence de certaines situations géologiques (composition des magmas de la chambre magmatique et profondeur de la chambre dans la croûte) sur les paramètres A et D_a , afin d'essayer de faire correspondre les différents résultats obtenus à différents environnements géologiques.

Nous faisons à la fin de chacune des sections une synthèse des résultats obtenus, et dressons finalement une conclusion générale pour ce chapitre dans la section 11.6.

11.1 Etude détaillée d'un premier exemple prenant en compte les 3 phénomènes moteurs en même temps - Effets des nombres sans dimension A et D_a

Nous présentons dans cette section, un premier exemple où les trois phénomènes moteurs considérés dans notre travail, *solidification*, *transport et réaction*, sont pris en compte.

L'exemple de conditions initiales et des fonctions sources vitesse de solidification q_s et la fonction isotherme g , sont donnés dans la figure 11.2. Les fonctions sources s'écrivent :

$$\begin{cases} q_s(x) = 1 \\ c_l = g(c_s) = c_s^2. \end{cases}$$

La fonction isotherme g que nous avons choisie dans la présente section (11.1) et tout au long du chapitre 10 est une fonction convexe partant du point (0,0) et arrivant au point (1,1), sa courbe se situe donc sous la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$. Cette courbe nous indique, comme

11.1. ETUDE DÉTAILLÉE D'UN PREMIER EXEMPLE PRENANT EN COMPTE LES 3 PHÉNOMÈNES MOTEURS EN MÊME TEMPS - EFFETS DES NOMBRES SANS DIMENSION A ET D_a

cit  dans le chapitre 5, section 5.8, que lorsqu'il y a  quilibre chimique entre le solide et le liquide (les concentrations se situent alors sur la courbe g), l' l ment chimique correspondant est plus compatible avec le solide, la tendance serait alors   l'enrichissement du solide et l'appauvrissement du liquide en cet  l ment.

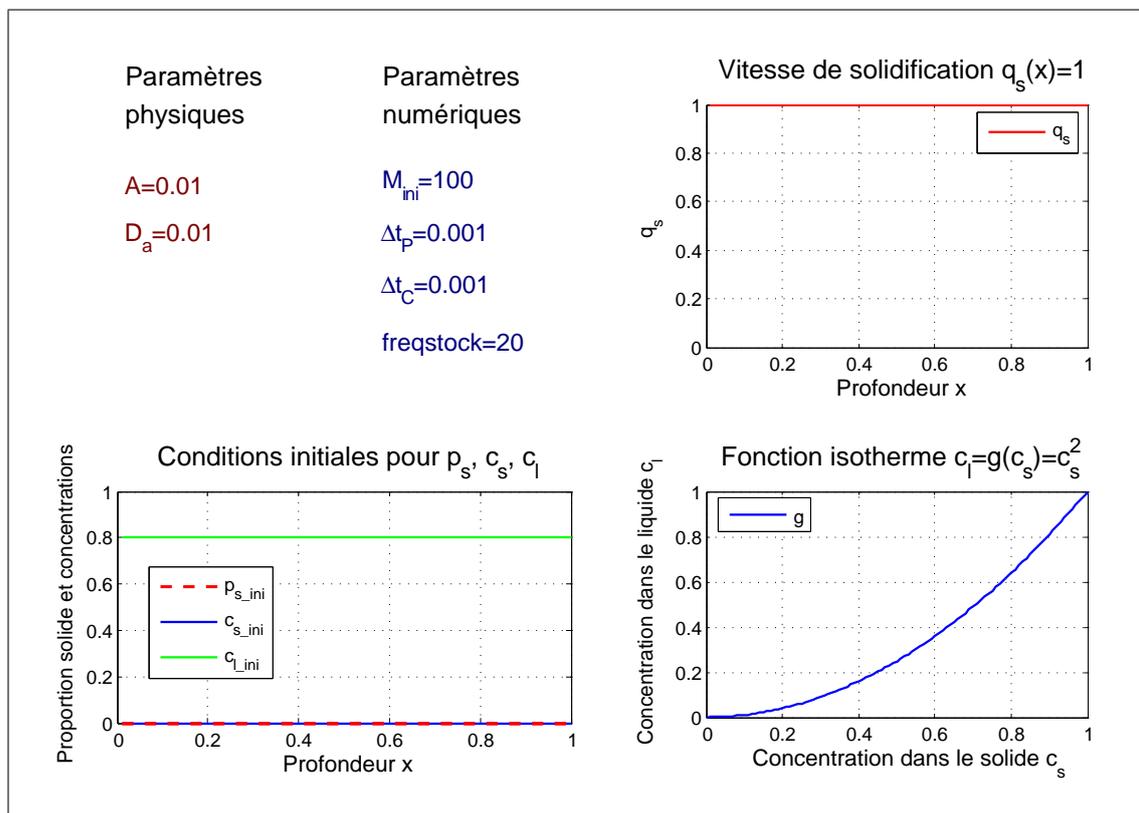


FIGURE 11.2 – Conditions initiales et fonctions sources $c_l = g(c_s)$ et $q_s(x)$. — $A \neq 0$, $D_a \neq 0$.

Nous testons dans ce qui suit diff rentes valeurs de A allant de 0.01   10, et pour chaque valeur de A , nous balayons diff rentes valeurs de D_a allant de 0.01   100 ou 1000. En dehors de ces intervalles, les r sultats sur les concentrations finales ne changent pas  norm ment.

11.1.1 $A=0.01$

Pour cette valeur de A , le rapport $\frac{v_{solidification}}{v_{advection}}$ est tr s faible, la solidification se fait tr s lentement par rapport au transport, les cristaux form s s dimentent tr s vite vers le fond et vu la condition initiale $p_s^0 = 0$, on n'observera qu'un seul front de discontinuit  pour la variable p_s , le front de s dimentation, celui-ci se forme   partir du fond de la colonne magmatique et remonte en direction du sommet (exemple sur la figure 11.3b). Nous testons les diff rentes valeurs de D_a :

a) $D_a = 0.01$

Le rapport $\frac{v_{reaction}}{v_{advection}}$ est tr s faible, les cristaux form s par solidification n'ont pas le temps de r agir avec le liquide, ils s dimentent aussit t en bas de la colonne sans changement des concentra-

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

tions dans les deux phases liquide et solide. Et puisqu'à l'état initial, il n'y a pas de solide ($p_s^0 = 0$), alors le solide formé a initialement la même concentration que le liquide initial ($c_s = c_l^0 = 0.8$), ce qu'on observe dès le début des calculs à $t = 0.02$ (cf. figure 11.3a), cette valeur n'évoluera pas par la suite puisque D_a est très faible (figure 11.3b), elle reste constante jusqu'à la fin des calculs, lorsque le front de sédimentation aura atteint le sommet de la chambre magmatique et que toute la chambre aura été solidifiée à $t = 518.24$ (cf. figure 11.4).

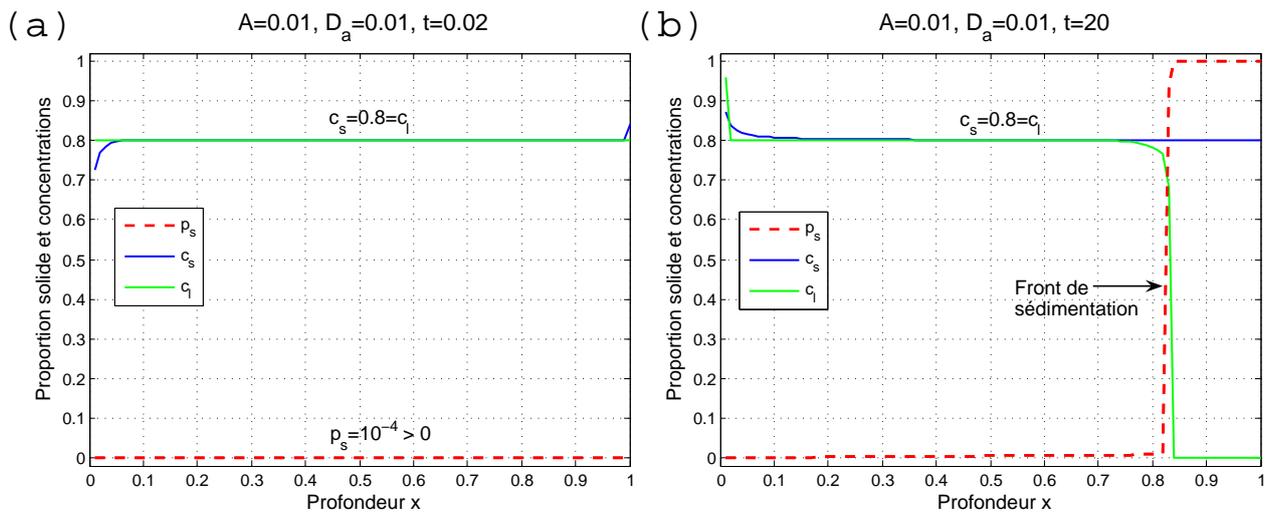


FIGURE 11.3 – Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à $t = 20$. — $A = 0.01, D_a = 0.01$.

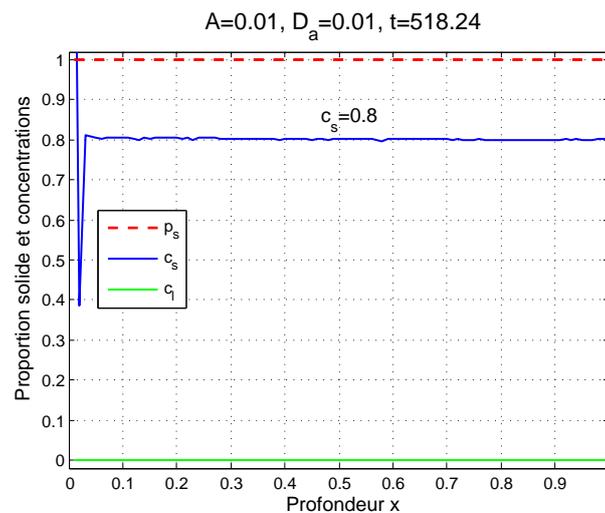


FIGURE 11.4 – Résultats de simulation à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01, D_a = 0.01$.

Pour $A = 0.01$ et $q_s(x) = 1$, d'après les simulations, le temps nécessaire à la solidification complète de la chambre magmatique est toujours égal à 518.24. Rappelons que nous prenons des temps

11.1. ETUDE DÉTAILLÉE D'UN PREMIER EXEMPLE PRENANT EN COMPTE LES 3 PHÉNOMÈNES MOTEURS EN MÊME TEMPS - EFFETS DES NOMBRES SANS DIMENSION A ET D_A

adimensionnés : $t^* = \frac{U_s}{L}t$ (cf. relations (6.1)), et lorsque $t^* = 1$, $t = \frac{L}{U_s}$. Nous avons alors établi dans la section 6.1 que pour les valeurs typiques $L = 1000$ m et $U_s = 10^{-7}$ m.s⁻¹, nous obtenons que $t^* = 1$ correspond à $t = 10^{10}$ s ≈ 317 ans. D'où $t^* = 518.24$ correspond à $t \approx 164282$ ans.

Lorsque la chambre magmatique est entièrement solidifiée, la proportion de solide est égale à 1 : $p_s = 1$, il n'y a plus de liquide et la concentration dans le liquide est prise égale à 0 : $c_l = 0$.

L'anomalie sur la courbe de concentration dans le solide c_s au niveau du sommet de la colonne magmatique (en $x = 0$), est une erreur numérique (due à la difficulté de l'adaptation du schéma numérique au niveau du front de sédimentation).

Le résultat à l'état final, que nous venons d'obtenir, ne varie que très peu lorsque l'on refait le calcul à $D_a = 0.1$. Nous passons alors directement à $D_a = 1$:

b) $D_a = 1$

Le paramètre D_a est assez grand pour pouvoir observer une tendance à l'équilibre, les concentrations c_s et c_l ne restent pas figées à la valeur 0.8. Cependant, il n'est pas assez élevé pour atteindre l'équilibre à tout instant. Par exemple à $t = 2$ (cf. figure 11.5a), juste au moment de la solidification de la maille du fond (en $x = 1$), c_l et c_s ne vérifient pas l'égalité $c_l = g(c_s)$, par exemple au voisinage de $x = 1$, c_s a augmenté et atteint la valeur 0.85 d'où $g(c_s) = c_s^2 = 0.72$ alors que c_l atteint est de 0.79.

Nous remarquons aussi sur les figures 11.5a et b, que la valeur de c_s diminue lorsque l'on se dirige du bas vers le haut de la colonne magmatique. Ceci s'explique par un processus semblable au processus de cristallisation fractionnée : l'appauvrissement du liquide et l'enrichissement du solide en l'élément chimique, puisque la fonction isotherme est convexe et se situe en-dessous de la première bissectrice ($c_l = c_s$). Or le solide qui se forme en haut de la colonne sédimente, il fait donc augmenter la valeur de c_s en bas de la colonne.

Au niveau du haut de la colonne, au tout début de la cristallisation, le solide a la même composition que le liquide, et comme c_l diminue alors c_s diminue également dans les cristaux formés (la fonction g est une fonction croissante), ce qui fait diminuer globalement c_s en haut de la colonne magmatique.

Le calcul continue et à tout instant, le liquide continue à s'appauvrir, sans pour autant atteindre la valeur à l'équilibre, en effet $c_l = g(c_s) = c_s^2$ n'est jamais vérifiée (cf. figure 11.6a). On obtient finalement, lorsque la solidification de la chambre magmatique est complète, une courbe de concentrations c_s variant linéairement avec la profondeur et qui balaie une gamme très réduite de concentrations, on parle de *distribution monomodale* autour de $c_s = 0.8$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

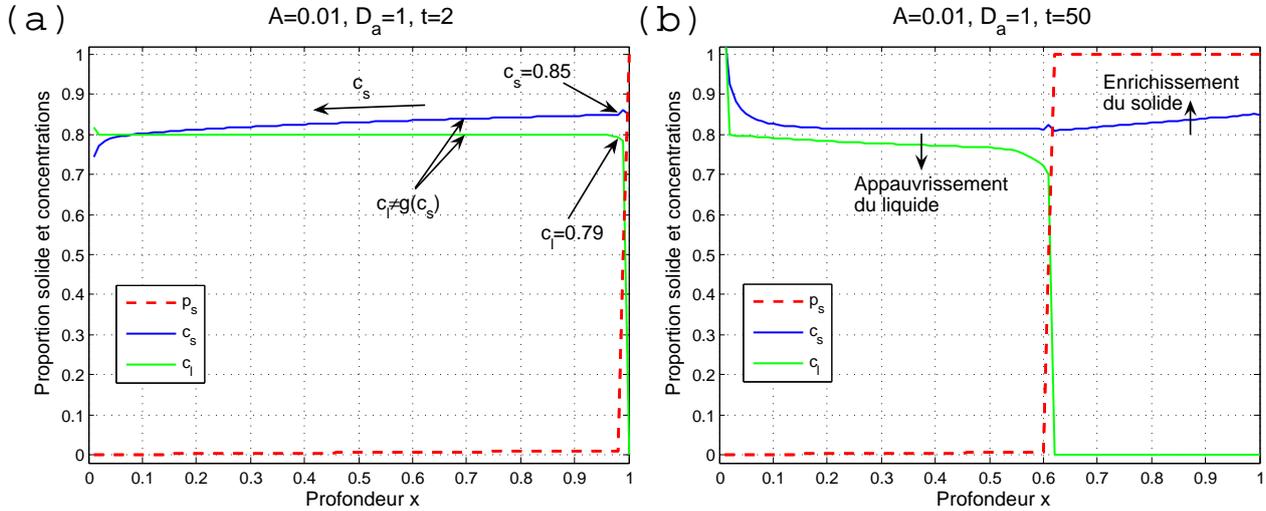


FIGURE 11.5 – Résultats de simulation (a) à $t = 2$ et (b) à $t = 50$. — $A = 0.01$, $D_a = 1$.

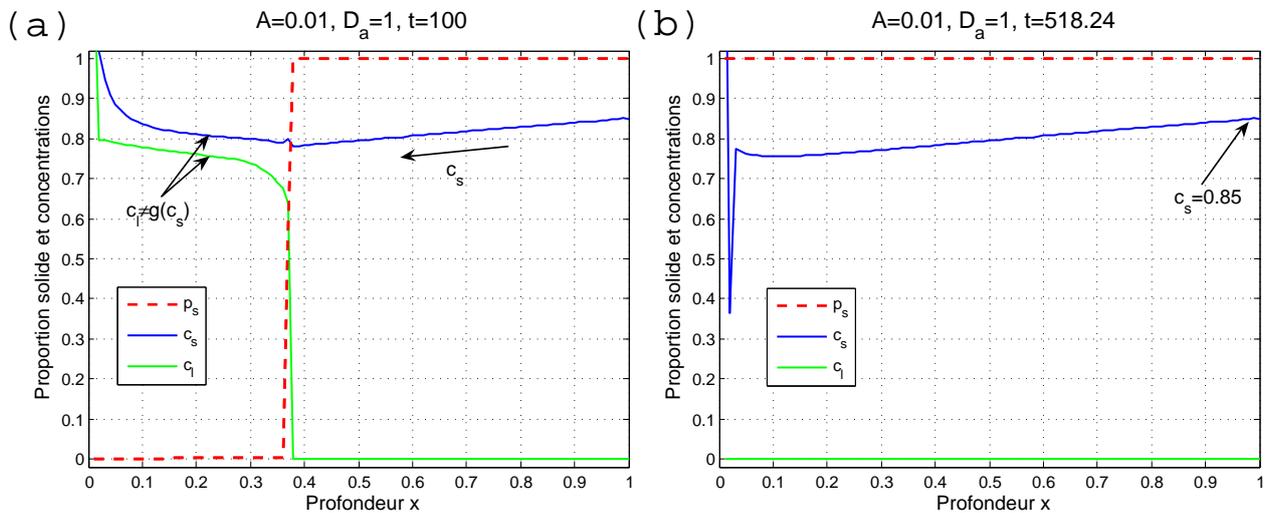


FIGURE 11.6 – Résultats (a) à $t = 100$ et (b) à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01$, $D_a = 1$.

Afin d'observer un comportement différent et de s'approcher de l'équilibre chimique, nous augmentons la valeur de D_a à 100 :

c) $D_a = 100$

A cette valeur, les cristaux qui se forment toujours à la même concentration que le liquide d'origine, s'équilibrent très rapidement avec ce liquide et on observe sur la figure 11.7a que $c_l = g(c_s) = c_s^2$ dès le temps $t = 2$! ($c_s \approx 0.89$ et $c_l \approx 0.8$). L'équilibre est maintenu pendant toute la durée de la solidification de la chambre magmatique (figures 11.7b et 11.8).

11.1. ETUDE DÉTAILLÉE D'UN PREMIER EXEMPLE PRENANT EN COMPTE LES 3 PHÉNOMÈNES MOTEURS EN MÊME TEMPS - EFFETS DES NOMBRES SANS DIMENSION A ET D_a

De plus l'appauvrissement du liquide, en l'élément chimique considéré, est plus rapide pour $D_a = 100$ en comparaison avec le cas $D_a = 1$. Nous obtenons en effet, sur la figure 11.8b une diminution plus rapide de c_s lorsque l'on remonte dans la colonne magmatique. Ceci s'explique par le fait que pour $D_a = 100$, les concentrations c_l et c_s s'approchent plus de la fonction isotherme qui prévoit une répartition de l'élément chimique plus favorablement dans le solide surtout lorsque c_l et c_s s'approchent de 0 : plus le liquide s'appauvrit, plus la vitesse de l'appauvrissement augmente (pente horizontale sur la courbe de l'isotherme g lorsqu'on s'approche de $c_s = c_l = 0$), d'où une pente de plus en plus raide de la courbe de c_s lorsque l'on s'approche du sommet (cf. figure 11.8b).

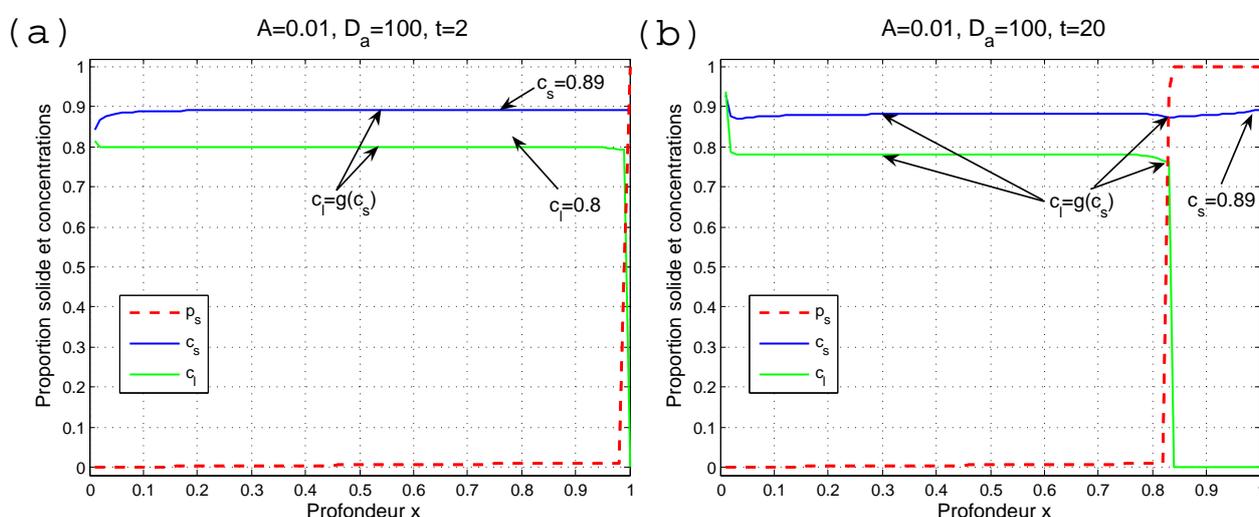


FIGURE 11.7 – Résultats (a) à $t = 20$ et (b) à $t = 20$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$.

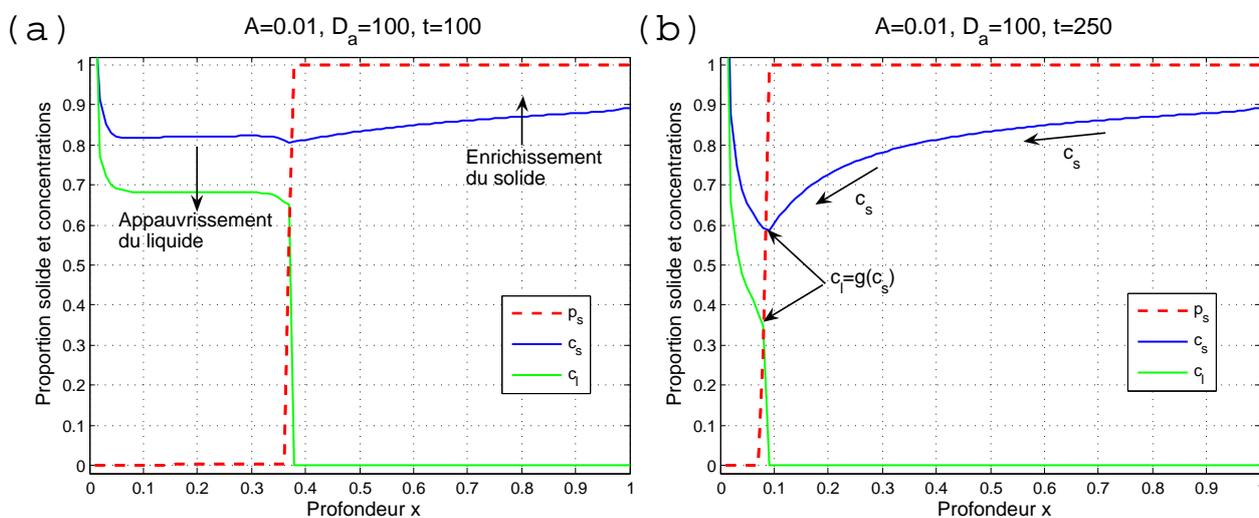


FIGURE 11.8 – Résultats (a) $t = 100$ et (b) à $t = 250$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

Nous aboutissons finalement, après solidification complète (cf. figure 11.9), à une courbe de c_s de pente linéaire pour $x \in [0.4, 1]$ puis la pente augmente lorsque l'on se dirige vers le sommet. Cette courbe balaie un plus large intervalle de concentrations (en comparaison avec le cas $D_a = 1$) qui est $[0.51, 0.89]$.

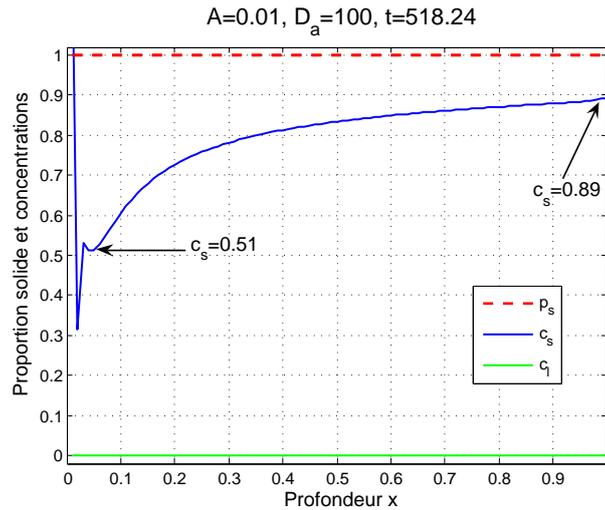


FIGURE 11.9 – Résultats de simulation à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$.

d) $D_a = 1000$

Nous avons refait le calcul avec D_a encore plus élevé et égal à 1000 et nous avons tracé l'état final sur la figure 11.10. Nous y observons une allure de la courbe de c_s semblable au cas $D_a = 100$, sauf que c_s atteint des valeurs plus basses au voisinage du sommet de la chambre magmatique, balayant ainsi un intervalle de concentrations encore plus large : $[0.44, 0.89]$.

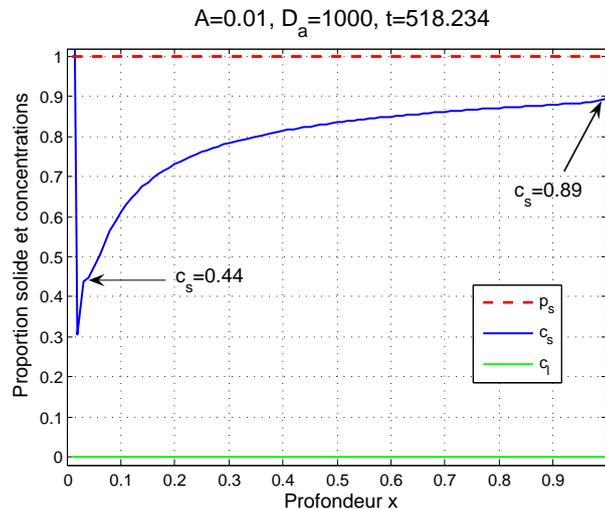


FIGURE 11.10 – Résultats de simulation à l'état final $t = 518.234$. — $A = 0.01$, $D_a = 1000$, $\Delta t = 10^{-4}$.

11.1. ETUDE DÉTAILLÉE D'UN PREMIER EXEMPLE PRENANT EN COMPTE LES 3 PHÉNOMÈNES MOTEURS EN MÊME TEMPS - EFFETS DES NOMBRES SANS DIMENSION A ET D_a

Remarque : Selon la forme de l'isotherme, nous obtenons des courbes de concentrations à l'état final c_s^f qui varient différemment avec la profondeur, aboutissant ainsi éventuellement à une *distribution bimodale* des concentrations. Par exemple pour des isothermes fortement convexes avec tangente quasi-horizontale sur un large intervalle de c_s en partant de l'origine, comme nous pouvons le voir sur la figure ci-dessous (figure 11.11). Nous verrons plus en détail l'effet de la forme de l'isotherme sur les concentrations dans la section 11.3.

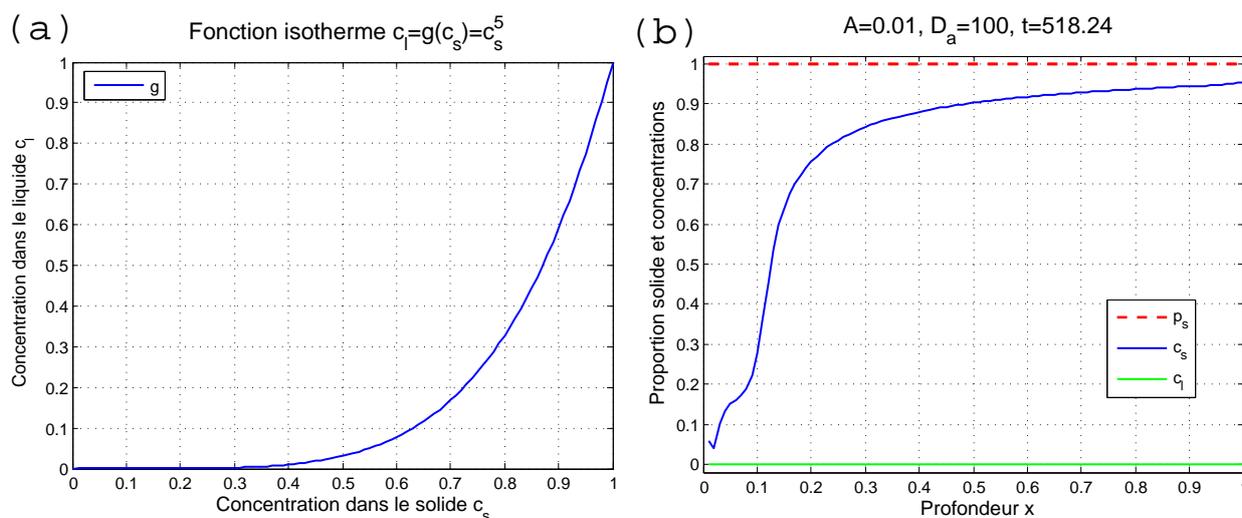


FIGURE 11.11 – Effet de la forme de l'isotherme. (a) Représentation de la courbe isotherme, (b) résultat sur c_s à l'état final $t = 518.24$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$.

11.1.2 $A=0.1$

Pour cette valeur de A , la solidification est plus rapide, elle permet l'apparition d'un deuxième front pour la variable p_s qui est le front que nous avons appelé "front de vidange", ce front qui avance initialement vers le fond de la colonne magmatique change ensuite de direction pour se diriger vers le sommet comme nous l'avons précédemment remarqué dans le chapitre 8, section 8.3.6 (cf. figure 8.19b).

Pour $A = 0.1$ et $q_s(x) = 1$, d'après les simulations, le temps adimensionné nécessaire à la solidification complète de la chambre magmatique sera de 16.76. Pour les valeurs typiques $L = 1000$ m et $U_s = 10^{-7}$ m.s $^{-1}$, $t^* = 16.76$ correspond à $t \approx 5313$ ans.

Nous testons ici les deux valeurs extrêmes pour D_a , 0.01 et 100 :

a) $D_a = 0.01$

Comme nous l'avons vu pour $A = 0.01$, cette valeur de D_a ne permet pas au solide et au liquide d'interagir assez rapidement. C'est pour cela que dans les premiers temps, par exemple à $t = 3.7$ (cf. figure 11.12a), dans les zones 1 et 2, nous avons $c_s = 0.8$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

Dans la zone 3 (figure 11.12), la présence de la discontinuité de p_s cause des oscillations pour c_s et c_l , ceci est dû visiblement au schéma numérique lui-même et/ou à l'erreur venant du traitement numérique au voisinage du front de sédimentation.

L'écart à l'équilibre s'observe par la suite à chaque instant comme à $t = 13$ (cf. figure 11.12b) où l'égalité $c_l = g(c_s)$ n'est pas vérifiée. Sur les deux figures 11.12a et b, nous observons le choc qui retourne en direction du sommet de la colonne magmatique (explication de ce phénomène vue dans le chapitre 8, section 8.3.6).

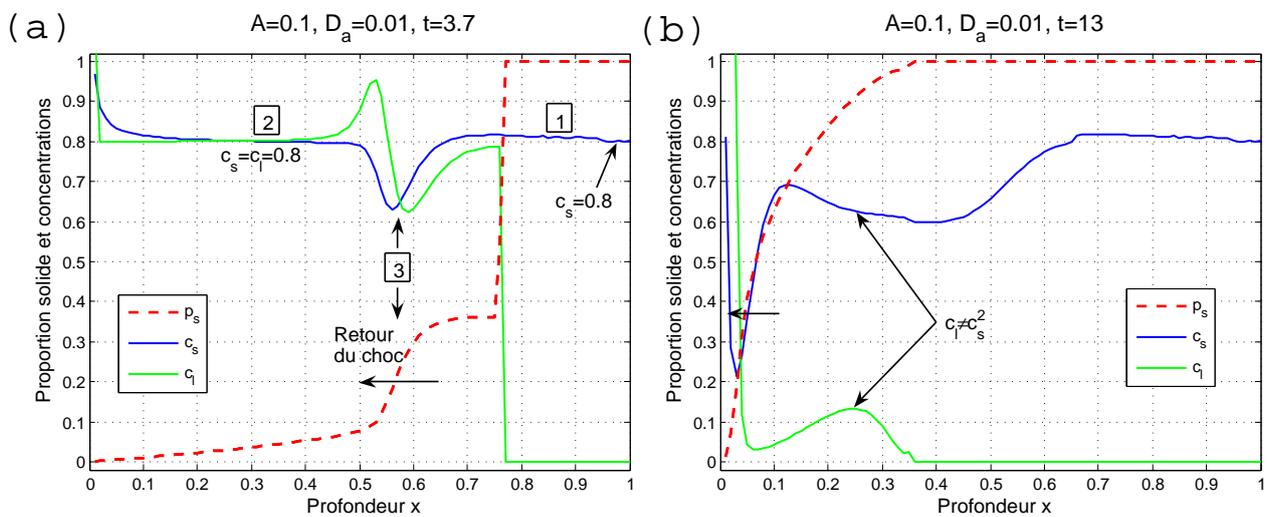


FIGURE 11.12 – Résultats de la simulation (a) à $t = 3.7$ et (b) à $t = 13$. — $A = 0.1$, $D_a = 0.01$.

A l'état final, la courbe de concentrations est la suivante :

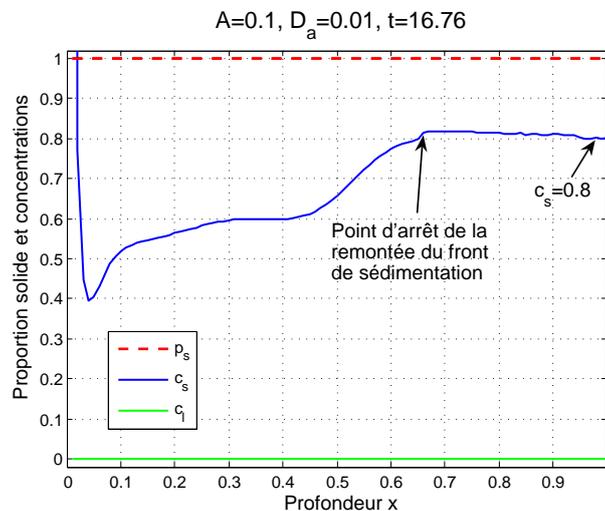


FIGURE 11.13 – Résultats à l'état final $t = 16.76$. — $A = 0.1$, $D_a = 0.01$.

11.1. ETUDE DÉTAILLÉE D'UN PREMIER EXEMPLE PRENANT EN COMPTE LES 3 PHÉNOMÈNES MOTEURS EN MÊME TEMPS - EFFETS DES NOMBRES SANS DIMENSION A ET D_A

Nous obtenons ainsi un palier à $c_s = 0.8$ puis un autre à $c_s = 0.6$ et une courbe globalement croissante avec la profondeur et qui parcourt l'intervalle $[0.4, 0.8]$. La valeur 0.8 au fond, témoigne d'une quasi-absence de réaction chimique.

Notons qu'au voisinage du sommet ($x = 0$), il subsiste une erreur numérique qui fait décrocher c_s vers une valeur supérieure à 1, cette partie de la courbe n'est pas à prendre en considération tant que le problème numérique subsiste.

b) $D_a = 100$

Pour cette autre valeur extrême, nous avons équilibre très rapide entre solide et liquide.

A $t = 6.5$ et $t = 13.8$ par exemple (cf. figures 11.14a et b, c_s et c_l vérifient, partout où il y a encore du liquide, la relation $c_l = g(c_s)$). La valeur 0.89 au fond témoigne d'un équilibre rapide aux premiers instants du calcul (comme nous l'avons montré pour le cas $A = 0.01$, $D_a \geq 100$).

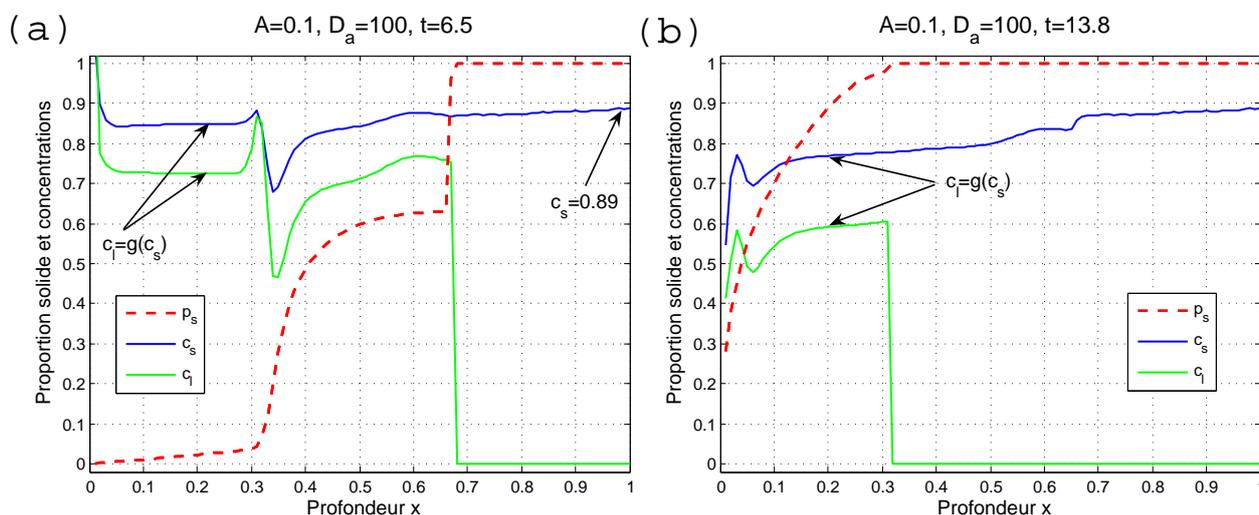


FIGURE 11.14 – Résultats (a) à $t = 6.5$ et (b) à $t = 13.8$. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

Nous obtenons à l'état final (figure 11.15) une courbe de c_s avec un palier à $c_s = 0.89$ allant du fond jusqu'à $x \approx 0.66$, point où le front de sédimentation s'arrête de remonter, puis c_s diminue en se dirigeant vers le sommet.

Encore une fois les valeurs au voisinage du sommet qui décrochent, cette fois vers le bas, ne doivent pas être prises en considération.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

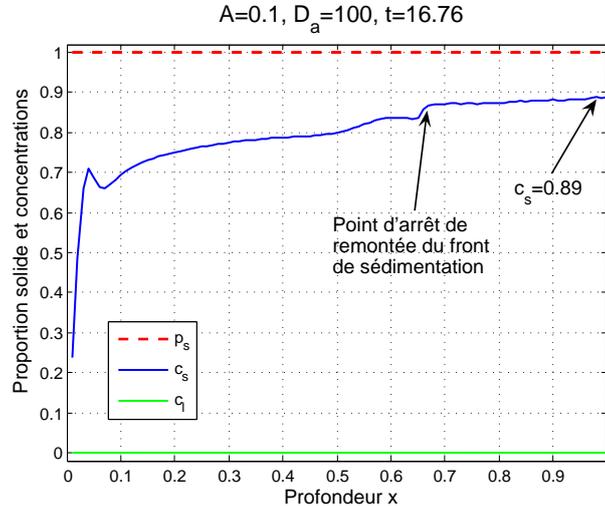


FIGURE 11.15 – Résultats à l'état final $t = 16.76$. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

11.1.3 A=1

Pour cette valeur de A , la solidification se fait rapidement, ne laissant pas le temps au transport de matières solide et liquide de jouer son rôle comme cela a été le cas pour $A = 0.01$ et $A = 0.1$.

Pour $A = 1$ et $q_s(x) = 1$, le temps adimensionné nécessaire à la solidification complète de la chambre magmatique est de 1.24. Pour les valeurs typiques $L = 1000$ m et $U_s = 10^{-7}$ m.s⁻¹, $t^* = 1.24$ correspond à $t \approx 393$ ans.

Nous testons toujours les deux valeurs extrêmes de D_a , 0.01 et 100 :

a) $D_a = 0.01$

A cette valeur de D_a , il n'y a pratiquement pas de réaction chimique, ainsi, $c_s = 0.8 = c_l$ sur la majeure partie de la chambre magmatique (cf. figures 11.16a et b). Les fronts de sédimentation et de vidange sont très vite rattrapés par la solidification de l'ensemble de la chambre (figure 11.17).

11.1. ETUDE DÉTAILLÉE D'UN PREMIER EXEMPLE PRENANT EN COMPTE LES 3 PHÉNOMÈNES MOTEURS EN MÊME TEMPS - EFFETS DES NOMBRES SANS DIMENSION A ET D_a

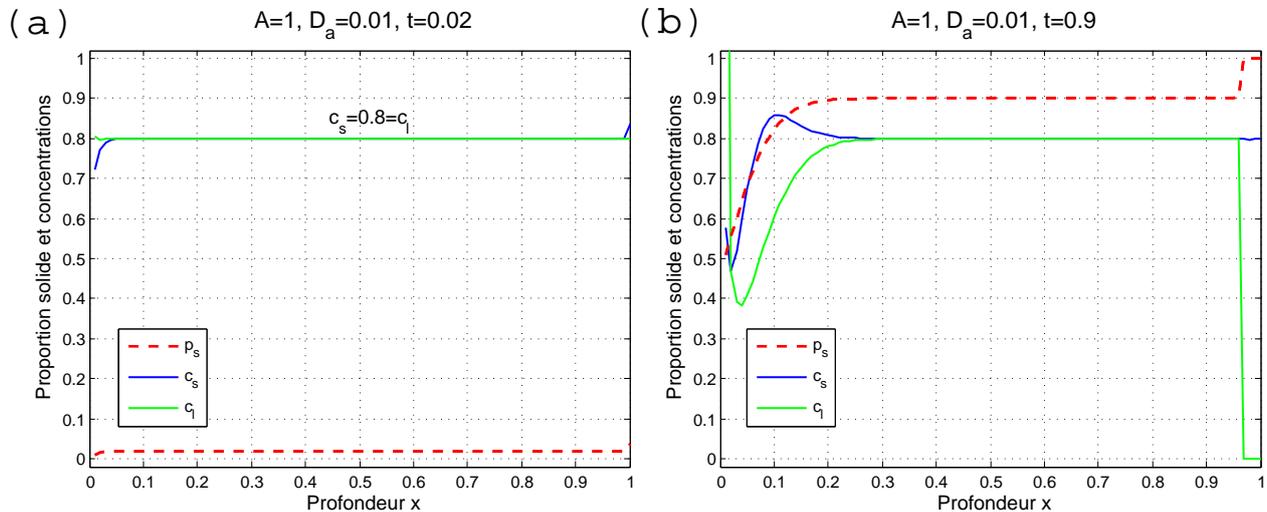


FIGURE 11.16 – Résultats de simulation (a) à $t = 0.02$ et (b) à $t = 0.9$. — $A = 1$, $D_a = 0.01$.

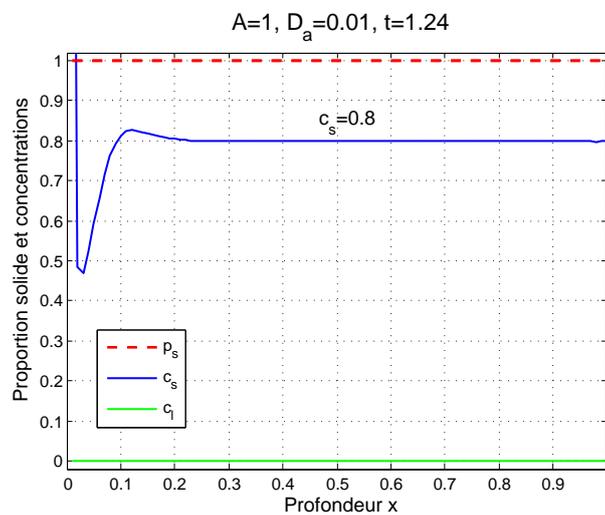


FIGURE 11.17 – Résultats à l'état final $t = 1.24$. — $A = 1$, $D_a = 0.01$.

b) $D_a = 100$

Les réactions chimiques sont rapides, l'équilibre est atteint à tout moment (figures 11.18a et b), mais la solidification rapide empêche les transports de matière et l'état final est fixé par les relations de conservation (10.8) qui imposent sur la majeure partie de la chambre une concentration finale $c_s = c_l^0 = 0.8$ (cf. figure 11.19).

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

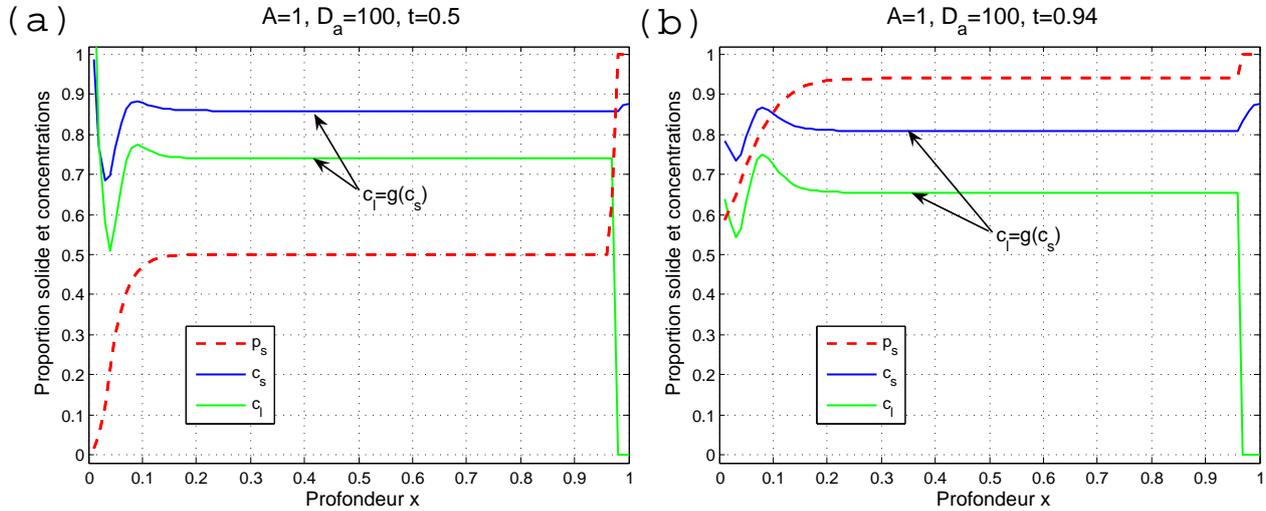


FIGURE 11.18 – Résultats (a) à $t = 0.5$ et (b) à $t = 0.94$. — $A = 1, D_a = 100$.

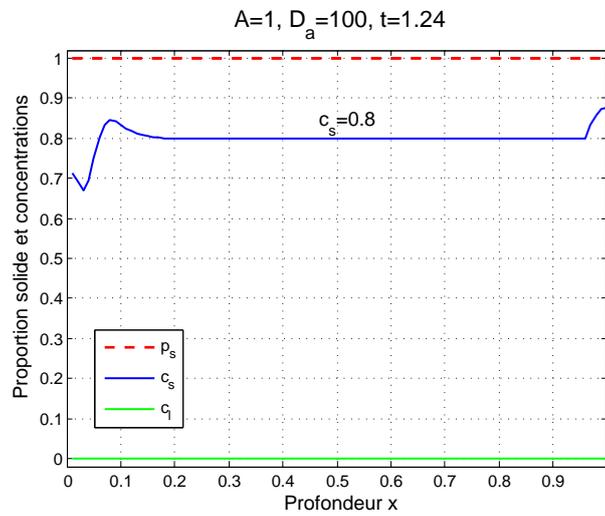


FIGURE 11.19 – Résultats à l'état final $t = 1.24$. — $A = 1, D_a = 100$.

11.1.4 $A=10$

Pour $A = 10$ et $q_s(x) = 1$, le temps adimensionné nécessaire à la solidification complète de la chambre magmatique est de 0.108. Pour les valeurs typiques $L = 1000$ m et $U_s = 10^{-7}$ m.s $^{-1}$, $t^* = 1.24$ correspond à $t \approx 34$ ans.

Sans trop détailler ce cas, nous dirons que les effets d'un paramètre A élevé que nous avons observés pour $A = 1$ sont accentués pour $A = 10$: pour toute valeur de D_a (avec nos conditions initiales $p_s^0 = 0$ et $c_l^0 = 0.8$), nous obtenons quasiment sur toute la colonne magmatique un état

11.1. ETUDE DÉTAILLÉE D'UN PREMIER EXEMPLE PRENANT EN COMPTE LES 3 PHÉNOMÈNES MOTEURS EN MÊME TEMPS - EFFETS DES NOMBRES SANS DIMENSION A ET D_A

final d'une concentration $c_s = c_l^0 = 0.8$. Nous représentons les résultats pour $D_a = 0.01$ et $D_a = 100$ dans les figures 11.20 et 11.21.

a) $D_a = 0.01$

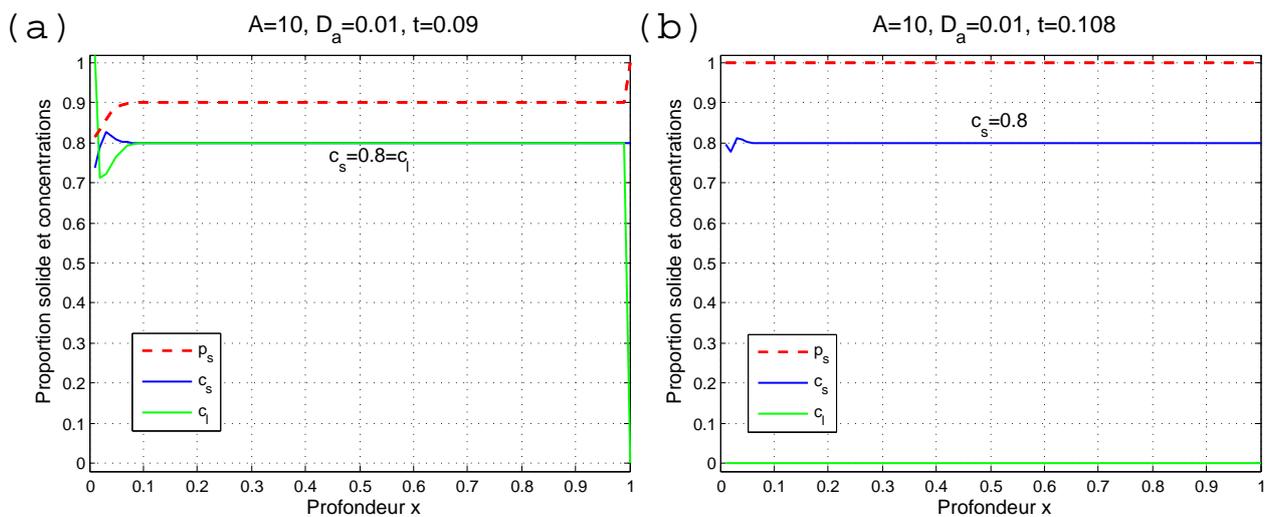


FIGURE 11.20 – Résultats (a) à $t = 0.09$ et (b) à l'état final $t = 0.108$. — $A = 10$, $D_a = 0.01$, $\Delta t = 10^{-4}$.

b) $D_a = 100$

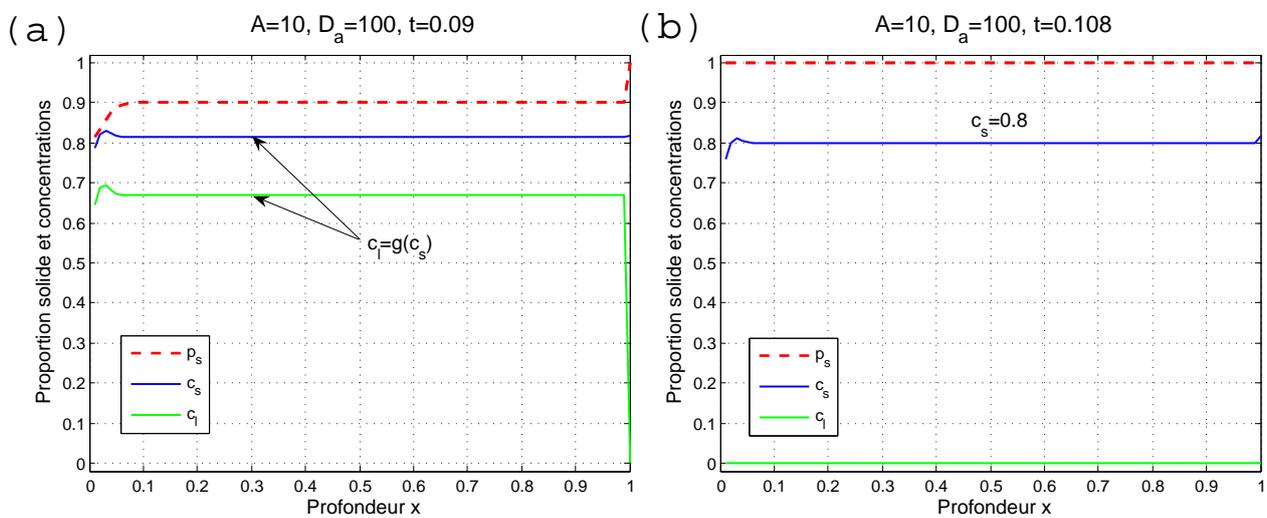


FIGURE 11.21 – Résultats (a) à $t = 0.09$ et (b) à l'état final $t = 0.108$. — $A = 10$, $D_a = 100$, $\Delta t = 10^{-4}$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

11.1.5 Conservation

La relation de conservation à vérifier pour toute cette section 11.1, où les paramètres A et D_a sont non nuls, est la relation (10.11).

Les erreurs de conservation calculées pour toutes les simulations effectuées dans cette section sont inférieures à 0.08 % à l'exception des calculs effectués pour $A = 0.01$ avec $D_a \leq 1$ où cette erreur varie entre 0.1 et 0.65 %.

Dans le cas où nous aimerions avoir une meilleure conservation lorsque $A = 0.01$, il faudrait diminuer le pas de temps Δt . Or pour cette valeur de A , les calculs durent environ 2h30 avec un pas de temps $\Delta t = 0.001$, passer à $\Delta t = 10^{-4}$ pourrait faire durer les calculs environ 20h. Nous nous suffisons alors à $\Delta t = 0.001$, l'erreur de 0.65 % restant tout de même très correcte.

11.1.6 Récapitulation

Dans cette section 11.1, nous avons pour un exemple de profils de q_s et g ($q_s(x) = 1$ et $g(c_s) = c_s^2$), testé différentes combinaisons de A (de 0.01 à 10) et D_a (de 0.01 à 100).

Il apparaît après analyse de chaque combinaison de ces deux paramètres que pour $A = 0.01$ et $A = 0.1$, chaque valeur de D_a donne une courbe de concentrations finales c_s^f différente, la vitesse de réaction chimique joue donc pleinement son rôle et on obtient ainsi des distributions uniformes, monomodales ou bimodales des concentrations sur la profondeur de la colonne magmatique.

Pour $A = 1$ ou $A = 10$, la solidification, respectivement rapide ou très rapide, ne laisse pas le temps à l'équilibrage chimique -dont la vitesse est déterminée par le paramètre D_a - et au transport de jouer un grand rôle dans la répartition finale des concentrations et on obtient généralement une concentration finale dans le solide égale à la concentration initiale dans le liquide $c_s^f = c_l^0$ (bien sûr pour les conditions initiales où la chambre magmatique est initialement à 100% liquide, sinon c_s^f serait donnée par les relations (10.8) avec $p_l^0 \neq 0$).

Nous ajoutons que le calcul numérique conserve très bien les quantités d'éléments chimiques quelles que soient les valeurs des nombres A et D_a .

Remarque :

Le temps de calcul pour les simulations dépend du pas de temps choisi Δt , il dépend aussi des paramètres A et D_a ainsi que des fonctions sources qui sont la vitesse de solidification q_s et la fonction isotherme g . Les différents calculs effectués montrent que le paramètre A est le plus déterminant. Pour un PC de 1Go de mémoire vive, pour un pas de temps $\Delta t = 0.001$, ce temps est de quelques heures lorsque $A = 0.01$, d'une trentaine de minutes lorsque $A = 0.1$ et de quelques minutes pour $A = 1$.

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

11.2 Effet de la fonction vitesse de solidification $q_s(x)$

Dans la section 11.1, nous avons étudié le cas d'une vitesse de solidification uniforme, $q_s(x) = 1$, et d'une fonction isotherme convexe, $g = c_s^2$. Dans toute la présente section, nous gardons la même fonction isotherme (cf. figure 11.22) et nous faisons varier la fonction vitesse de solidification afin d'observer l'influence de celle-ci sur la distribution des concentrations.

Nous avons choisi trois profils de la fonctions $q_s(x)$ parmi les profils déduits de la littérature et proposés dans le chapitre 3.

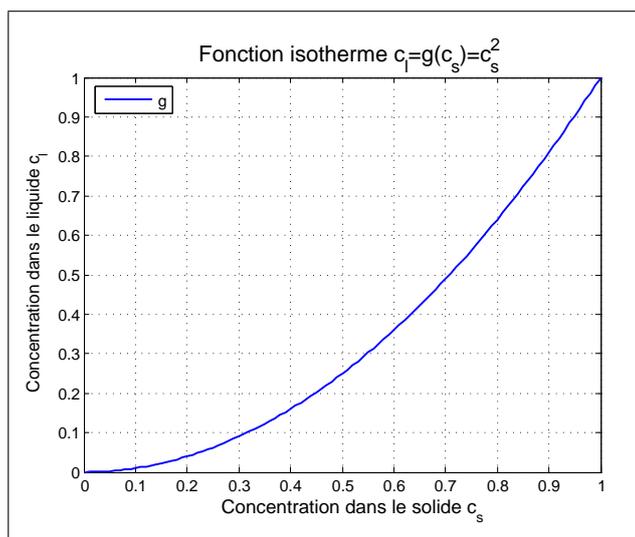


FIGURE 11.22 – Isotherme choisie pour toute la section 11.2. — $c_l = g(c_s) = c_s^2$.

11.2.1 $q_s(x)$ linéaire décroissante

Nous considérons une fonction $q_s(x)$ linéaire décroissante avec la profondeur x ($q_s(x) = 1 - 0.9x$). Ce profil traduit une situation où la chambre magmatique serait en contact avec un milieu extérieur froid au sommet et dont la température augmente avec la profondeur. Cette fonction est représentée sur la figure suivante :

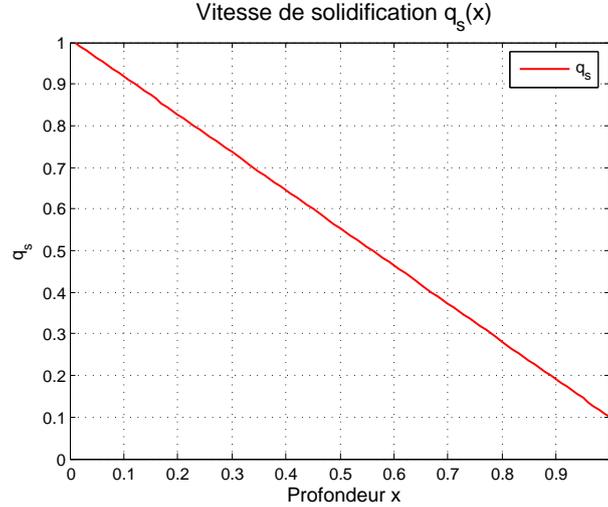


FIGURE 11.23 – Représentation de la vitesse de solidification linéaire décroissante.

Nous traçons les résultats pour A variant entre 0.01 et 10 et D_a prenant les trois valeurs 0.01, 1 et 100.

a) $A = 0.01$

Pour cette valeur de A , nous observons, comme dans le cas de $q_s(x) = 1$ (cf. section 11.1.1), un front de sédimentation qui se propage en direction du sommet de la chambre magmatique (figure 11.24a). Nous représentons les concentrations en fin de processus (solidification complète de la chambre magmatique) pour les différentes valeurs de D_a dans les figures 11.24b et 11.25.

Pour $D_a = 0.01$ (vitesse de réaction très faible), seule la valeur de $c_s = 0.8$ est représentée (cf. figure 11.24b, le problème numérique au voisinage de $x = 0$ n'est pas à prendre en compte). Sur la figure 11.26a, nous représentons la répartition des concentrations dans le solide à l'état final, les concentrations varient entre 0 et 1 et on observe alors un pic à $c_s = 0.8$, on parle de répartition *uni-modale* des concentrations.

Pour $D_a = 1$ (vitesse de réaction moyenne), l'intervalle $[0.75, 0.85]$ est représenté de façon *homogène* (cf. figure 11.25a, aucune valeur de concentration n'est privilégiée sur d'autres dans cet intervalle), on commence à observer un léger enrichissement en l'élément chimique considéré dans la partie inférieure de la chambre magmatique et un léger appauvrissement dans la partie supérieure de la chambre. Sur la figure 11.26b, nous représentons la répartition des concentrations dans le cas $D_a = 1$.

Pour $D_a = 100$ (très grande vitesse de réaction), on observe un appauvrissement en concentrations plus marqué au sommet de la chambre en comparaison avec le cas $D_a = 1$, l'enrichissement au fond de la chambre est également plus marqué (cf. figure 11.25b). Pour la courbe de répartition des concentrations, la figure 11.26c indique une *bimodalité* des concentrations avec une forte représentation des valeurs de c_s au voisinage de 0.87 par rapport à la 2ème valeur autour de $c_s = 0.47$.

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

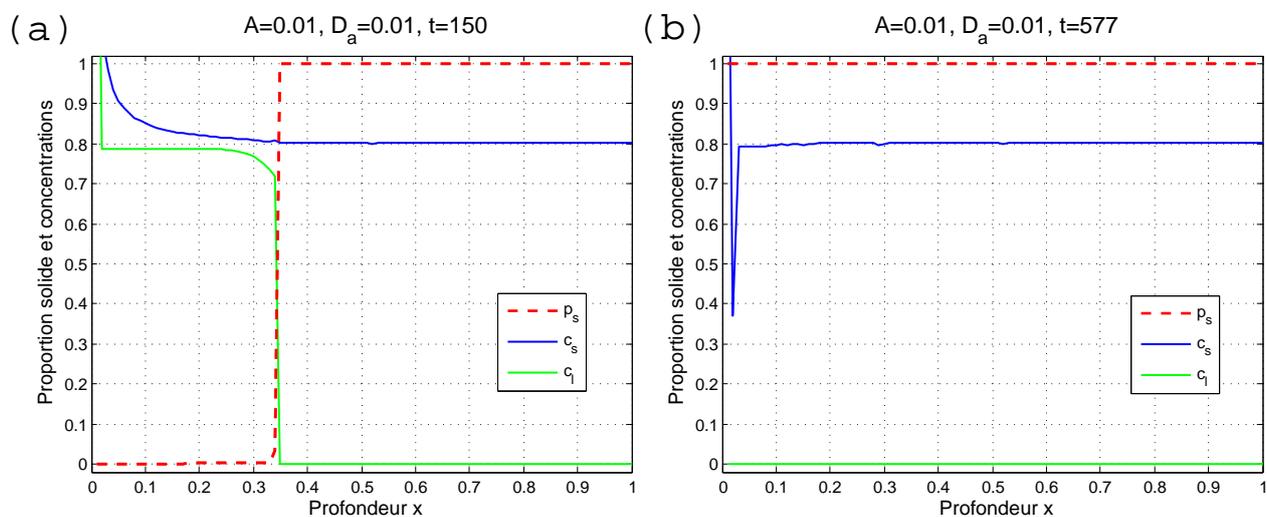


FIGURE 11.24 – Résultats de simulation (a) à $t = 150$ et (b) à l'état final $t = 577$. — $A = 0.01$, $D_a = 0.01$.

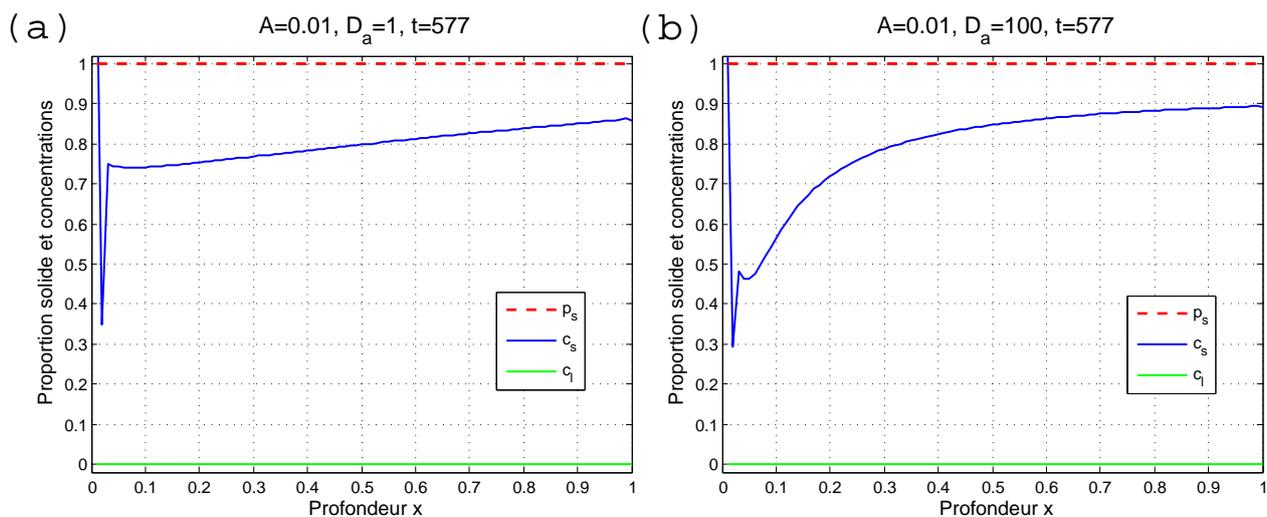


FIGURE 11.25 – Résultats à l'état final $t = 577$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 0.01$.

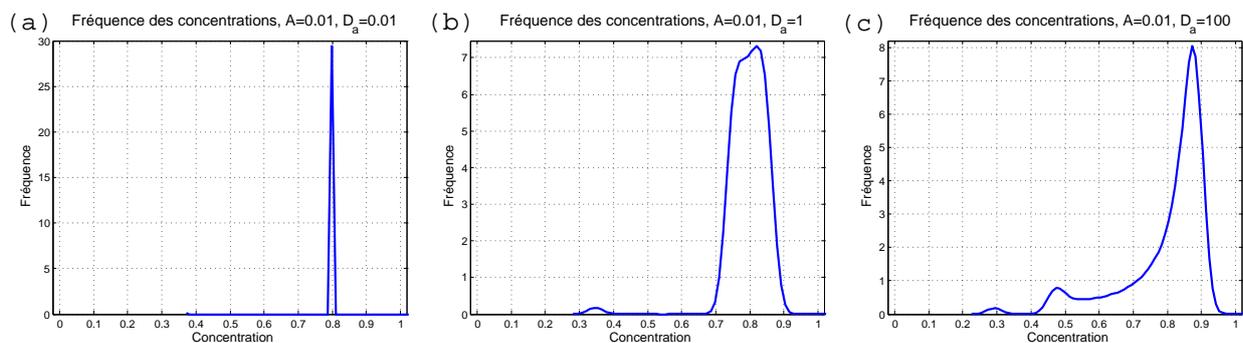


FIGURE 11.26 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.01$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

b) $A = 0.1$

Pour $A = 0.1$ nous traçons les mêmes courbes que pour $A = 0.01$:

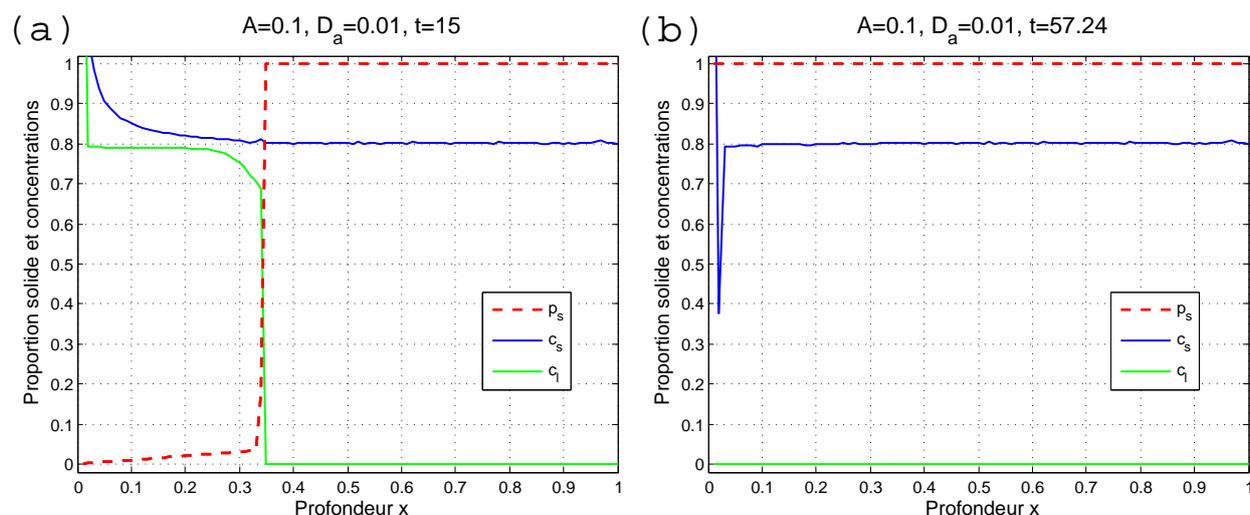


FIGURE 11.27 – Résultats (a) à $t = 15$ et (b) à l'état final $t = 57.24$. — $A = 0.1$, $D_a = 0.01$.

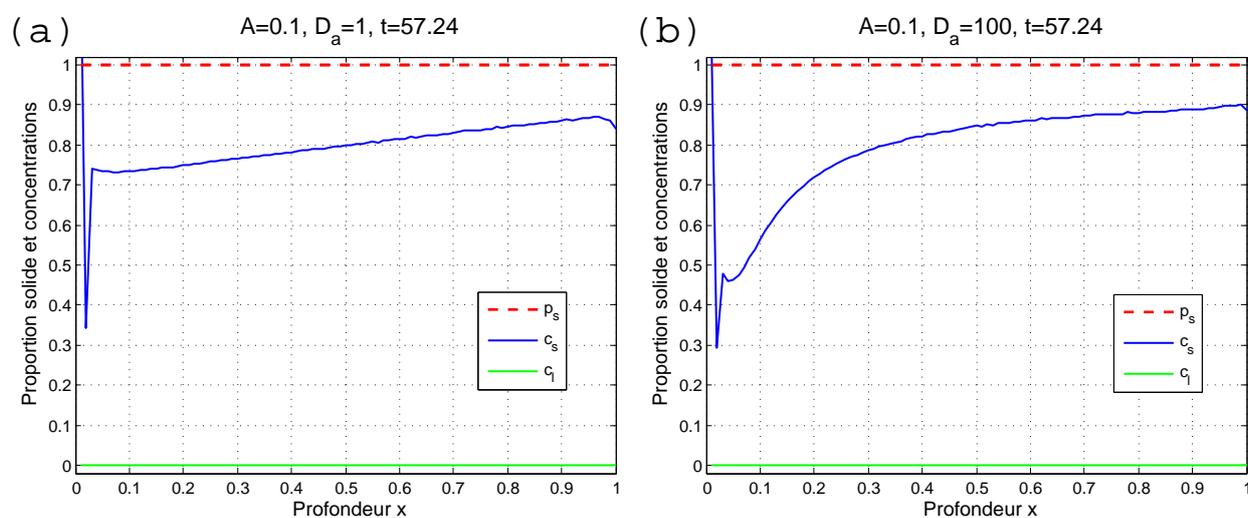


FIGURE 11.28 – Résultats à l'état final $t = 57.24$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 0.1$.

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

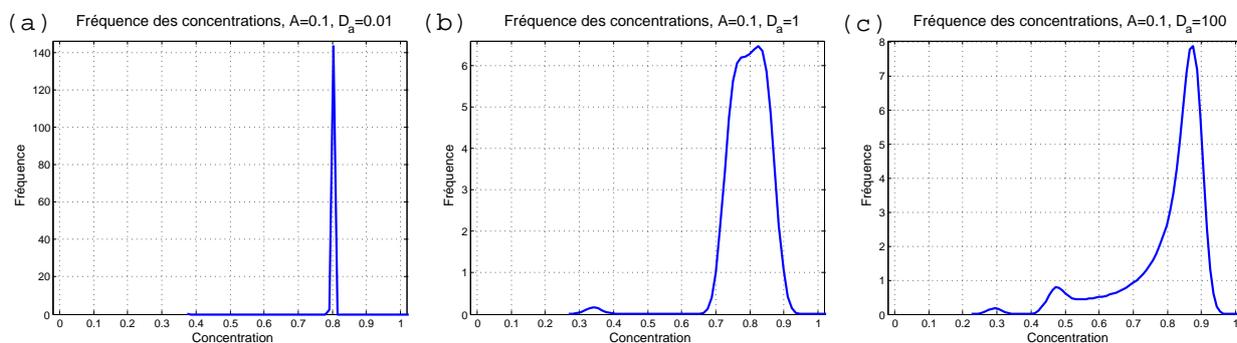


FIGURE 11.29 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.1$.

Ces courbes nous montrent une similitude avec le cas $A = 0.01$, un seul front est formé, celui de la sédimentation et on obtient les mêmes profils de concentration en fin de processus.

c) $A = 1$

Pour $A = 1$, on observe une solidification différente, contrairement au cas $A = 0.1$ il n'y a pas seulement un front de sédimentation qui remonte mais la forme de la fonction $q_s(x)$ est reflétée sur la courbe de p_s (figures 11.30a et b) et puisque $A = 1$, la solidification est rapide, les fronts de "vidange" et de sédimentation n'ont pas le temps de se propager sur toute la colonne qu'ils sont rattrapés par la solidification complète de la chambre magmatique à $t=3.88$ (cf. figures 11.31 et 11.32).

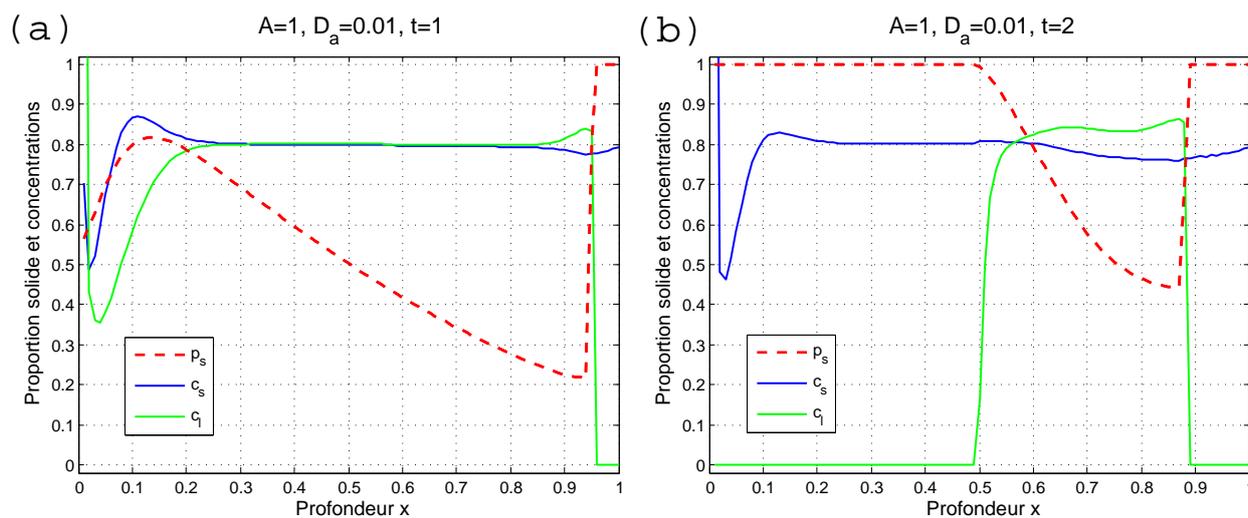


FIGURE 11.30 – Résultats (a) à $t = 1$ et (b) à $t = 2$. — $A = 1$, $D_a = 0.01$.

Concernant les concentrations, nous obtenons pour les valeurs $D_a = 0.01$, 1 ou 100, des profils de c_s en fin de processus, semblables à ceux obtenus pour $q_s(x) = 1$ (cf. section 11.1.3) et nous avons une répartition uni-modale des concentrations en fin de processus (pic à $c_s = 0.8$ sur les histogrammes des concentrations, figure 11.33).

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

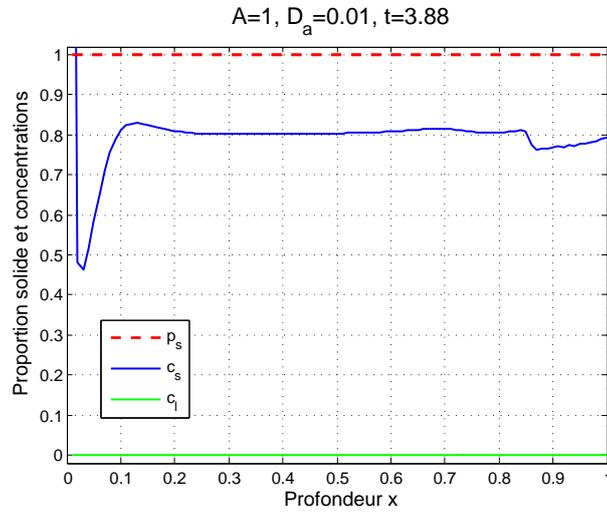


FIGURE 11.31 – Résultats à l'état final $t = 3.88$. — $A = 1, D_a = 0.01$.

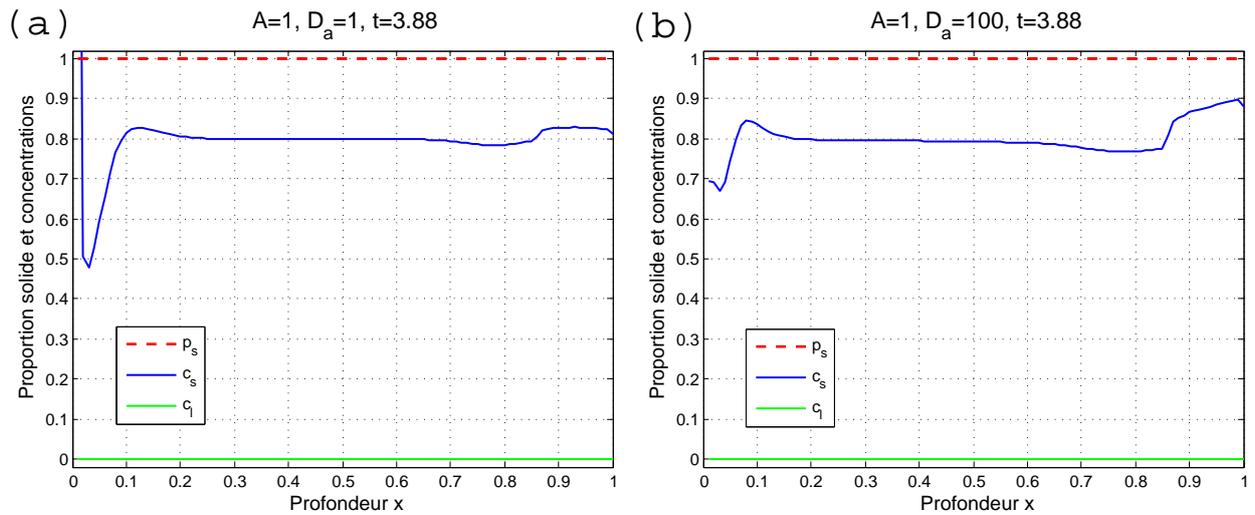


FIGURE 11.32 – Résultats à l'état final $t = 57.24$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 1$.

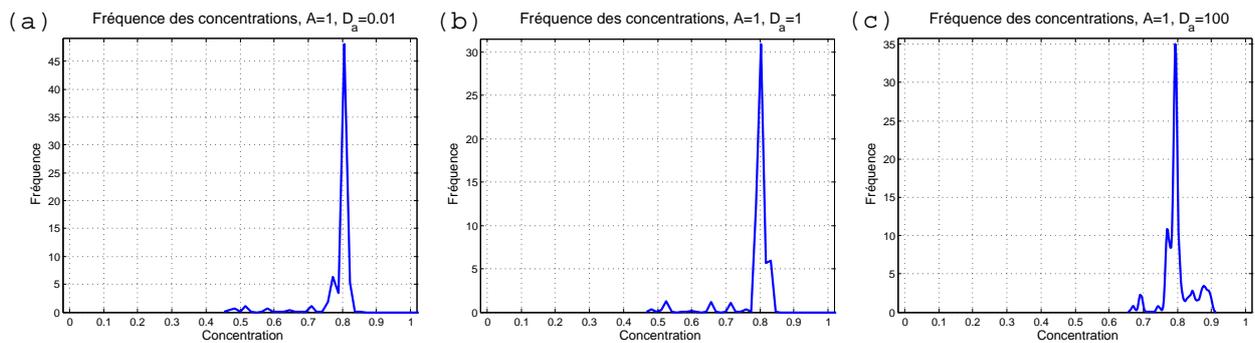


FIGURE 11.33 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 1$.

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

d) $A = 10$

Pour $A = 10$, la forme de $q_s(x)$ est reflétée aussi sur la courbe de p_s (cf. figure 11.34a), les fronts de vidange et de sédimentation se propagent de façon très limitée vu la valeur élevée de A . Nous obtenons pour toutes les valeurs de D_a une courbe de c_s , en fin de processus, quasiment constante et égale à $c_l^0 = 0.8$ (figures 11.34b et 11.35). Ce qu'on peut observer aussi sur les histogrammes des répartitions des concentrations (figure 11.36).

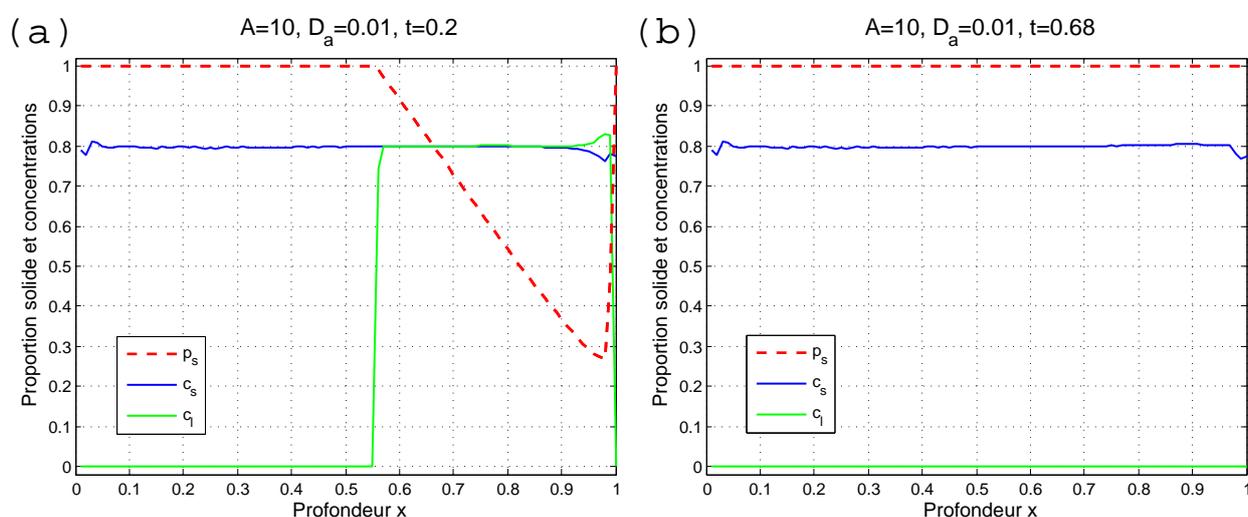


FIGURE 11.34 – Résultats (a) à $t = 0.2$ et (b) à l'état final $t = 0.68$. — $A = 10$, $D_a = 0.01$.

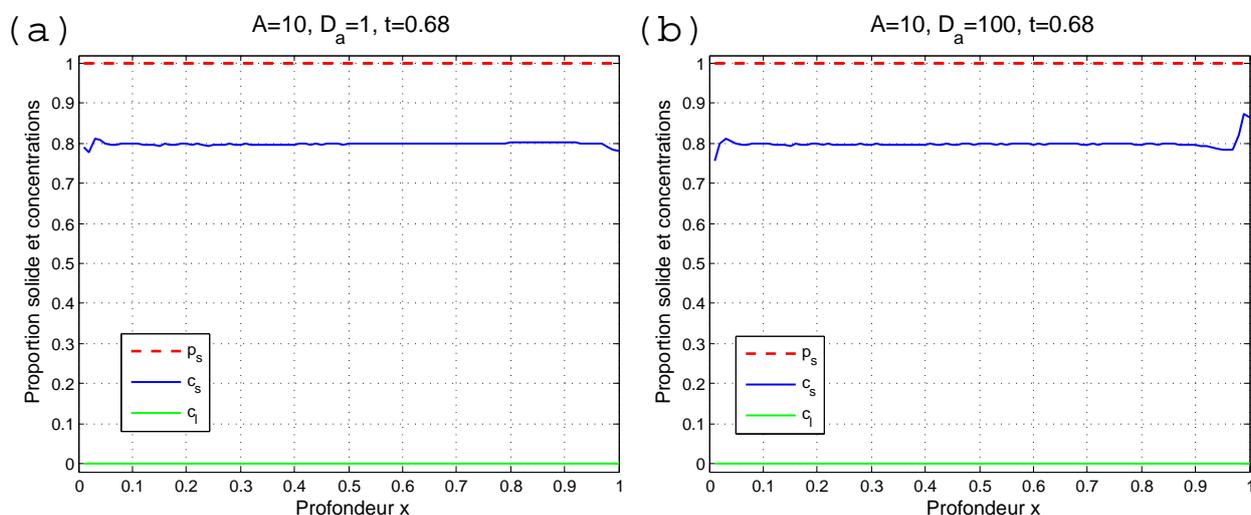


FIGURE 11.35 – Résultats à l'état final $t = 0.68$ pour (a) $D_a = 1$ et (b) $D_a = 100$. — $A = 10$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

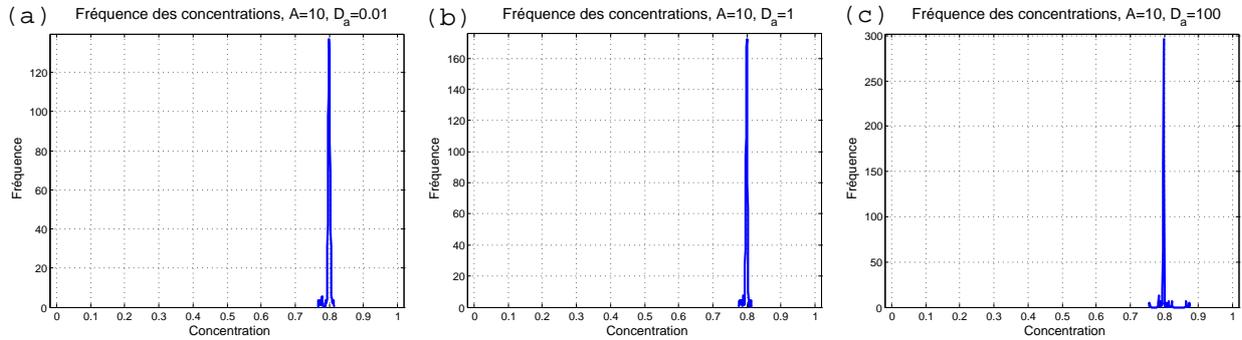


FIGURE 11.36 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 10$.

Pour la suite, pour aller à l'essentiel, **nous représenterons les concentrations finales uniquement dans le cas $D_a = 100$** pour lequel les effets des réactions chimiques sont plus accentués et donc mieux représentés et les discontinuités dans la courbe des concentrations plus marquées. Nous continuerons cependant à représenter les histogrammes des répartitions des concentrations pour les trois valeurs de D_a : 0.01, 1 et 100.

11.2.2 $q_s(x)$ non linéaire décroissante

Nous considérons une fonction $q_s(x)$ toujours décroissante avec la profondeur mais non linéaire :

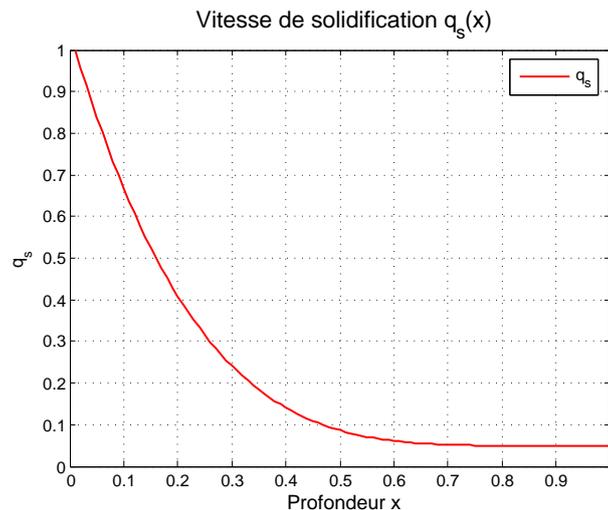


FIGURE 11.37 – Représentation de la vitesse de solidification non linéaire décroissante.

Pour A variant entre 0.01 et 10 et $D_a = 100$, nous traçons les courbes de concentration dans un temps intermédiaire ainsi qu'en fin de processus (solidification complète de la chambre magmatique à $t = 813.2$). Puis nous représentons les histogrammes des répartitions des concentrations pour chaque valeur de A .

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

a) $A = 0.01$

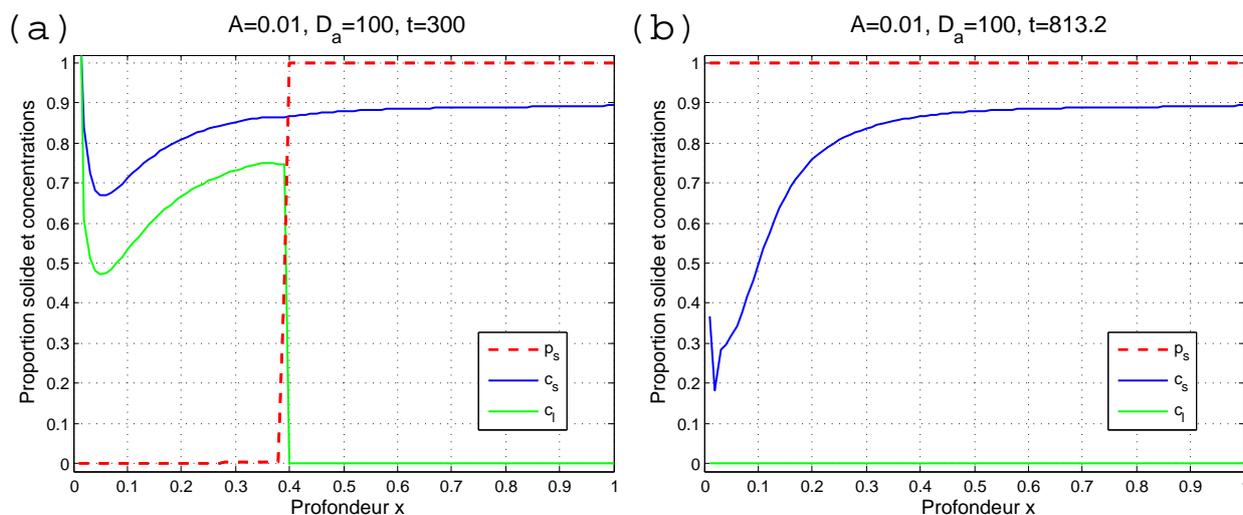


FIGURE 11.38 – Résultats de simulation (a) à $t = 300$ et (b) à l'état final $t = 813.2$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$.

Nous observons sur la figure 11.38a le déplacement d'un seul front, le front de sédimentation qui remonte en direction du sommet de la chambre magmatique. Sur la figure 11.38b, la valeur $c_s = 0.89$ est bien représentée sur une grande partie de la chambre magmatique, les autres valeurs comprises entre 0.19 et 0.8 sont représentées de façon équitable, c'est ce que nous confirme la courbe des répartitions des concentrations en figure 11.39c. En effet, nous y observons un pic en $c_s = 0.89$ et une valeur des fréquences quasi-constante entre $c_s = 0.19$ et 0.8.

Remarquons au passage que la valeur minimale de c_s est de 0.19, ce qui est inférieur au cas $q_s(x) = 1 - 0.9x$ pour les mêmes valeurs de A et D_a ($A = 0.01$ et $D_a = 100$, cf. section 11.2.1, figure 11.25).

Nous traçons également les histogrammes des concentrations pour $D_a = 0.01$ et $D_a = 1$ sur la figure suivante :

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

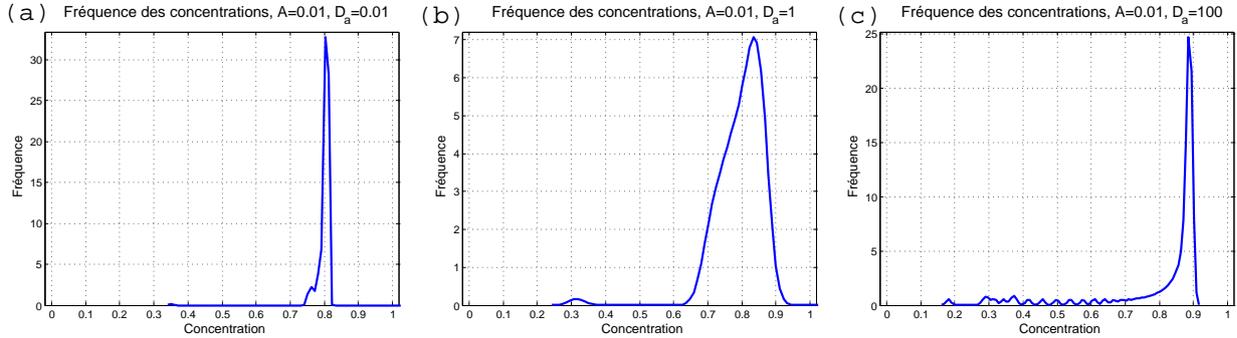


FIGURE 11.39 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.01$.

Pour $D_a = 0.01$, nous avons une répartition uni-modale des concentrations à $c_s = 0.8$ et une représentation d'une plus large gamme de valeurs pour $D_a = 1$ avec toujours une dominance d'une valeur particulière, $c_s = 0.83$ ici.

b) $A = 0.1$

Pour cette valeur de A , les résultats sont identiques au cas $A = 0.01$ pour les courbes des concentrations,

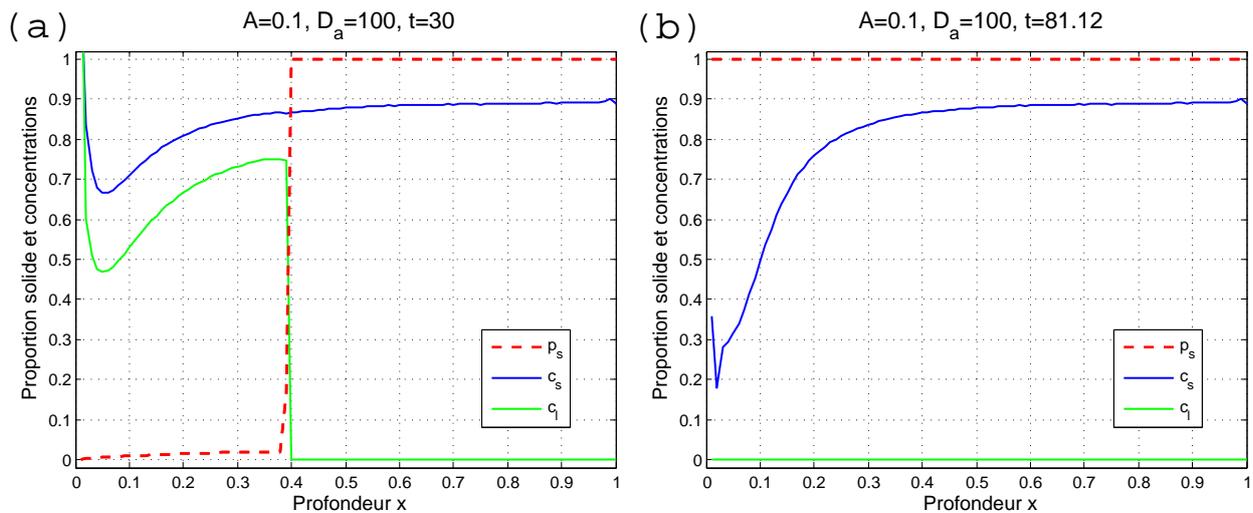


FIGURE 11.40 – Résultats de simulation (a) à $t = 30$ et (b) à l'état final 81.12. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

et pour les répartitions des concentrations en fin de processus :

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

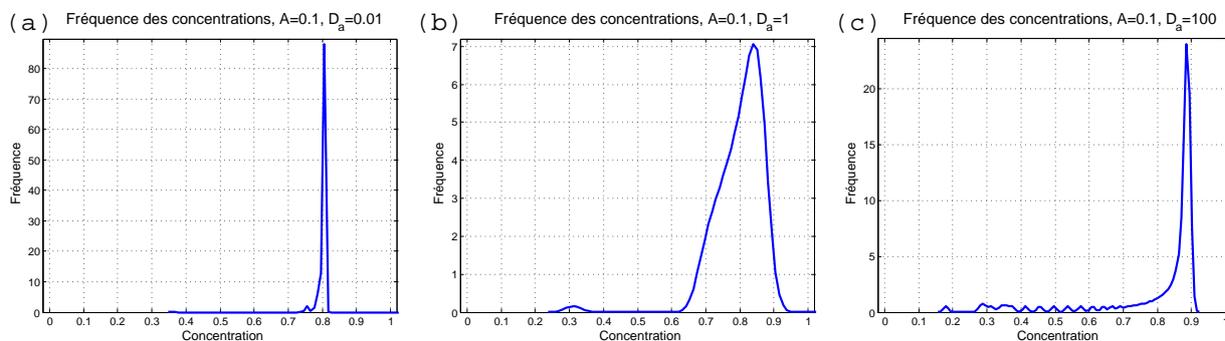


FIGURE 11.41 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.1$.

Seules les valeurs des fréquences varient (par exemple pour $D_a = 0.01$), sans modifier la nature des répartitions : uni-modale ou plus homogène.

c) $A = 1$

Pour $A = 1$, nous avons en plus du front de sédimentation, un reflet de la forme de la fonction $q_s(x)$ sur la courbe de p_s au cours de la solidification (figure 11.42a), ce qui donne en fin de processus des concentrations variant entre 0.6 et 0.89, avec, sur la moitié inférieure de la chambre magmatique, une particulière préférence pour des valeurs avoisinant $c_s = 0.88$. L'historgramme des répartitions des concentrations correspondant est représenté sur la figure 11.43c, **3 valeurs se distinguent** : $c_s = 0.6, 0.75$ et 0.88 .

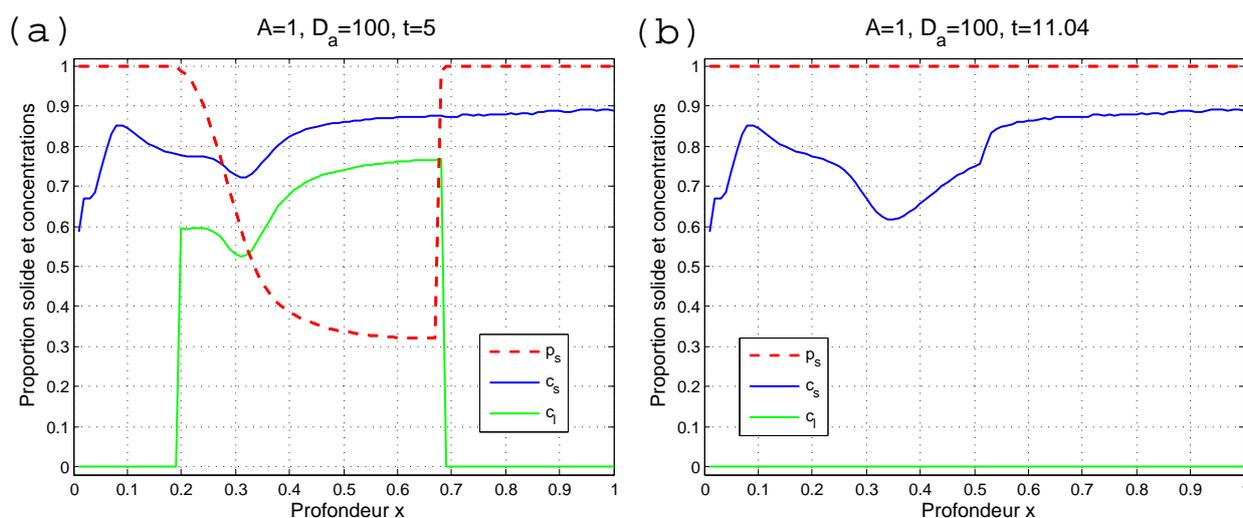


FIGURE 11.42 – Résultats (a) à $t = 5$ et (b) à l'état final $t = 11.04$. — $A = 1, D_a = 100$.

Nous représentons les histogrammes de répartition des concentrations également pour $D_a = 0.01$ et $D_a = 1$ sur la figure suivante :

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

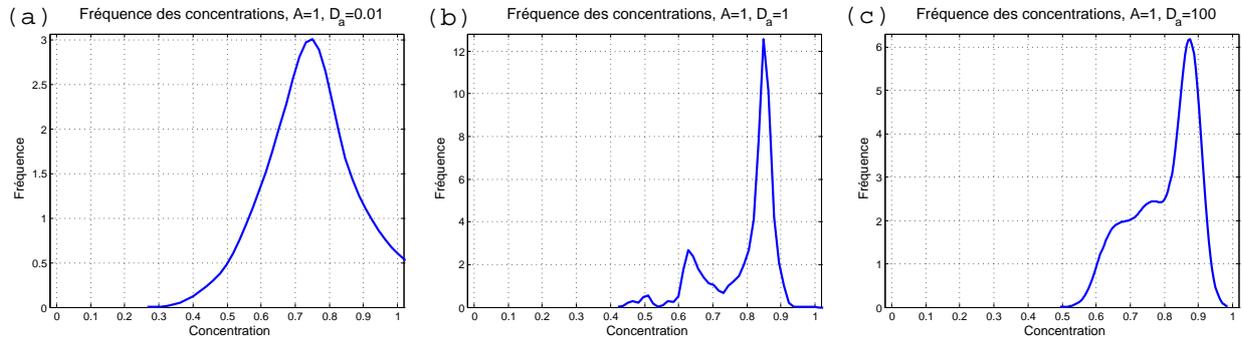


FIGURE 11.43 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 1$.

Pour $D_a = 0.01$, nous observons une représentation d'une large gamme de concentrations variant entre $c_s = 0.3$ et 1, avec tout de même un pic pour la valeur $c_s = 0.75$.

Pour $D_a = 1$, nous observons deux pics distingués en $c_s = 0.63$ et $c_s = 0.85$ avec une préférence pour la valeur 0.85.

d) $A = 10$

Pour cette valeur de A , la forme de q_s se retrouve dans la forme de p_s au cours de la solidification (figure 11.44a), et comme dans tous les exemples vus précédemment, pour cette valeur de A , sur la quasi-totalité de la chambre magmatique, nous avons $c_s^f = c_l^0 = 0.8$, ce résultat est vrai pour toute valeur de D_a (cf. figures 11.45).

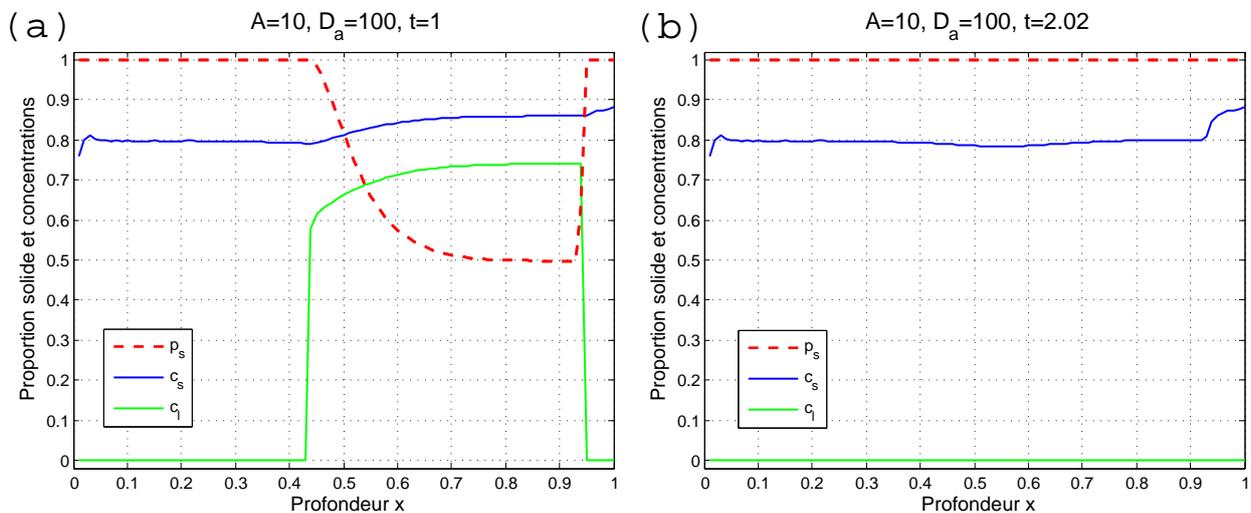


FIGURE 11.44 – Résultats (a) à $t = 1$ et (b) à l'état final $t = 2.02$. — $A = 10$, $D_a = 100$.

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

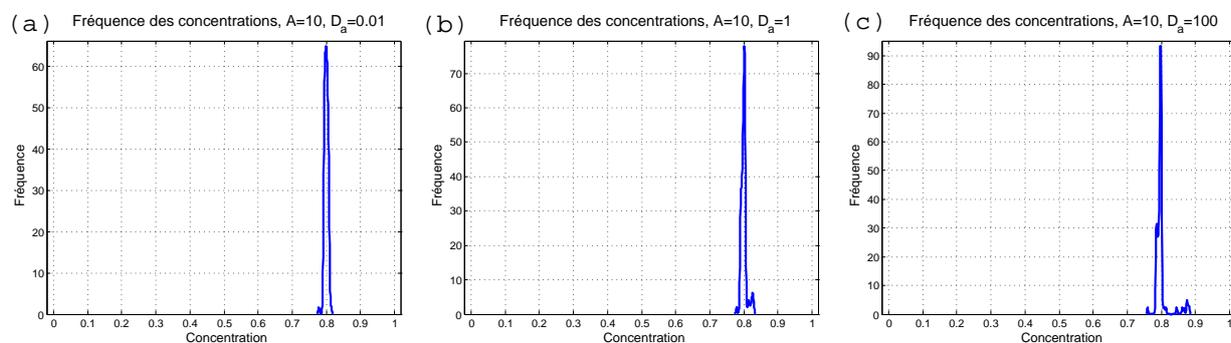


FIGURE 11.45 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 10$.

11.2.3 $q_s(x)$ convexe

Nous considérons en dernier exemple une fonction vitesse de solidification $q_s(x)$ convexe avec des pics en $x = 0$ et $x = 1$ et aplatie au milieu (figure 11.46), on garde toujours la même fonction isotherme $c_l = g(c_s) = c_s^2$. Cette forme de q_s représente une forte solidification au sommet et au fond de la chambre magmatique et faible au milieu de celle-ci.

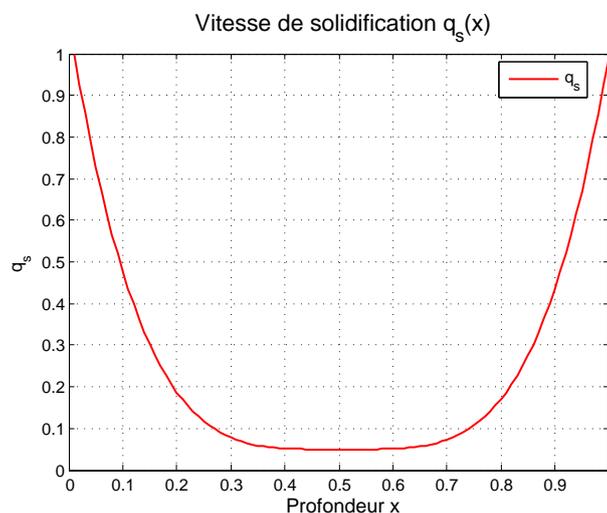


FIGURE 11.46 – Représentation de la vitesse de solidification convexe.

Pour tester ce type de profil de q_s , nous traçons les mêmes genres de courbes que dans la section précédente avec les mêmes valeurs prises pour A et D_a :

a) $A = 0.01$ et $A = 0.1$

Nous représentons les résultats pour ces deux valeurs de A dans les figures 11.47, 11.48, 11.49 et 11.50. Pour ces deux valeurs de A , nous obtenons les mêmes résultats pour les concentrations c_s .

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

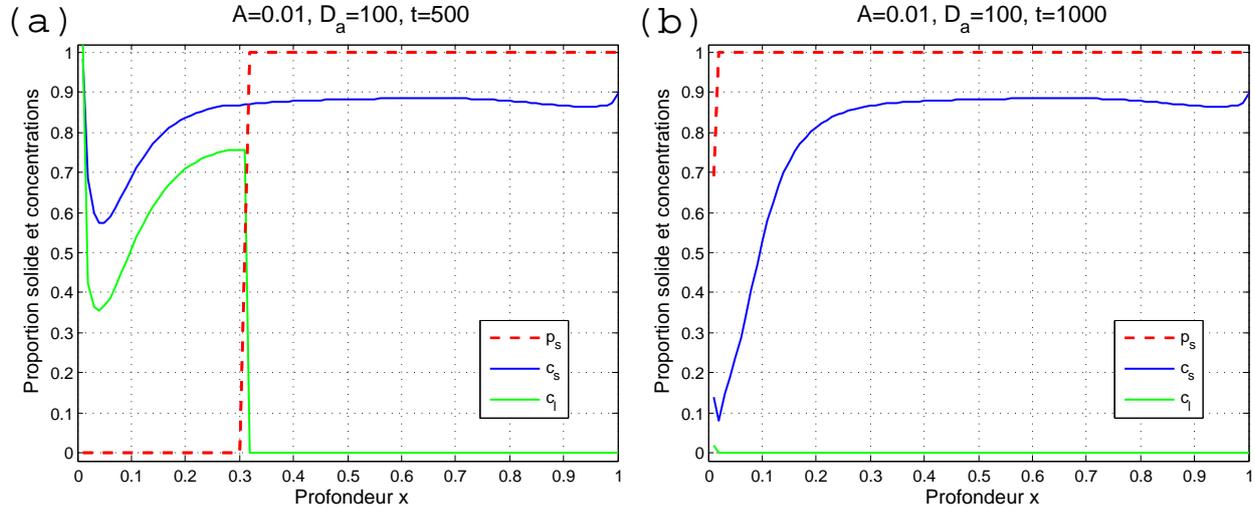


FIGURE 11.47 – Résultats de simulation (a) à $t = 500$ et (b) à l'état final $t = 1000$. — $A = 0.01$, $D_a = 100$.

Par ailleurs, on remarque que ces résultats sont très semblables au cas de q_s non linéaire décroissante (cf. section 11.2.2). Seule la valeur minimale de c_s sur la chambre magmatique est inférieure, elle est de 0.09 pour q_s convexe au lieu de 0.19 pour q_s non linéaire décroissante. Nous ne commenterons alors pas plus les cas $A = 0.01$ et $A = 0.1$.

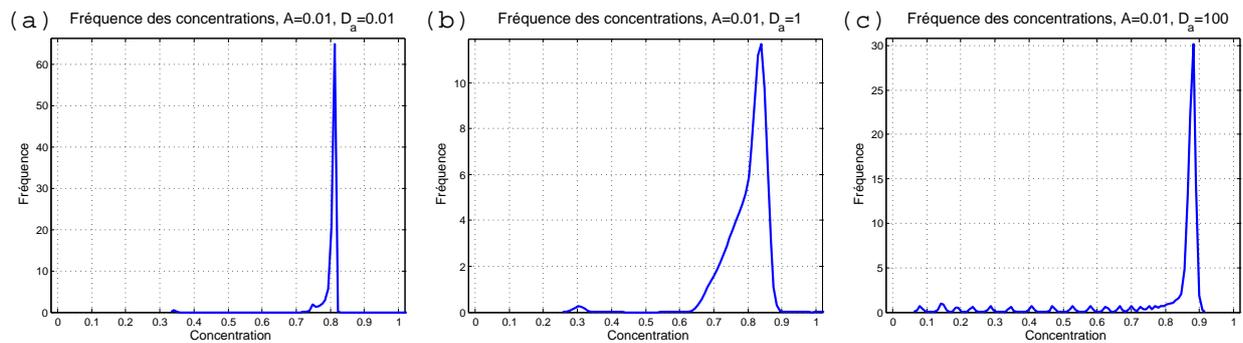


FIGURE 11.48 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.01$.

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

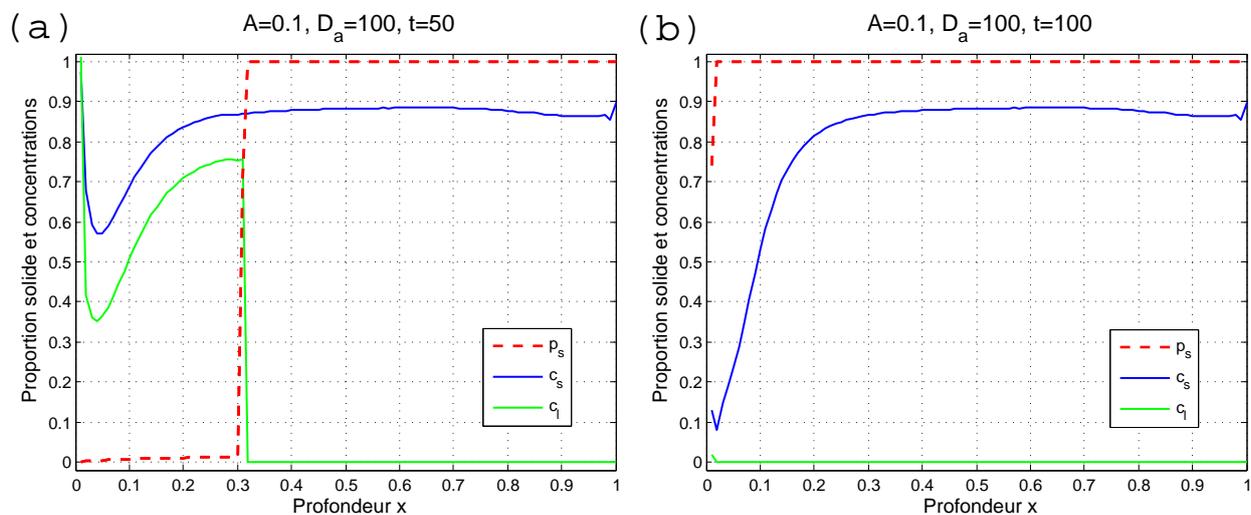


FIGURE 11.49 – résultats (a) à $t = 50$ et (b) à l'état final $t = 100$. — $A = 0.1, D_a = 100$.

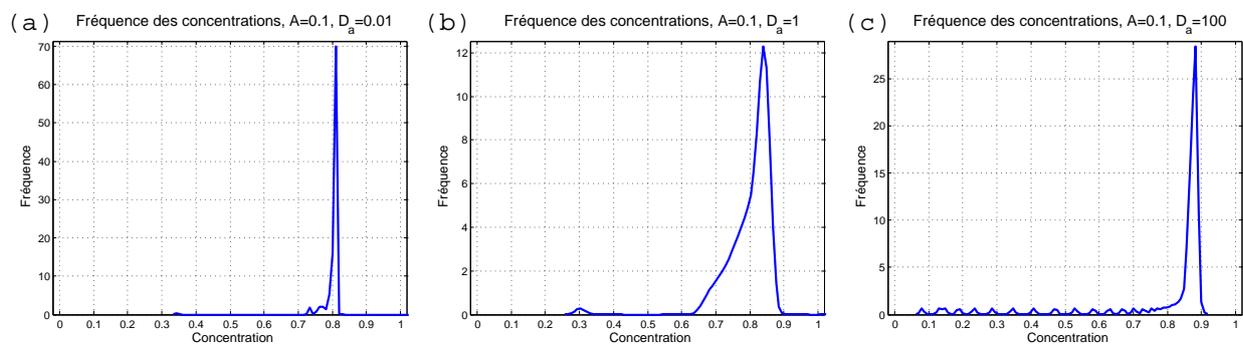


FIGURE 11.50 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 0.1$.

b) $A = 1$

Pour $A = 1$, comme vu précédemment, la forme de $q_s(x)$ est reflétée sur la courbe de p_s (cf. figure 11.51a).

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

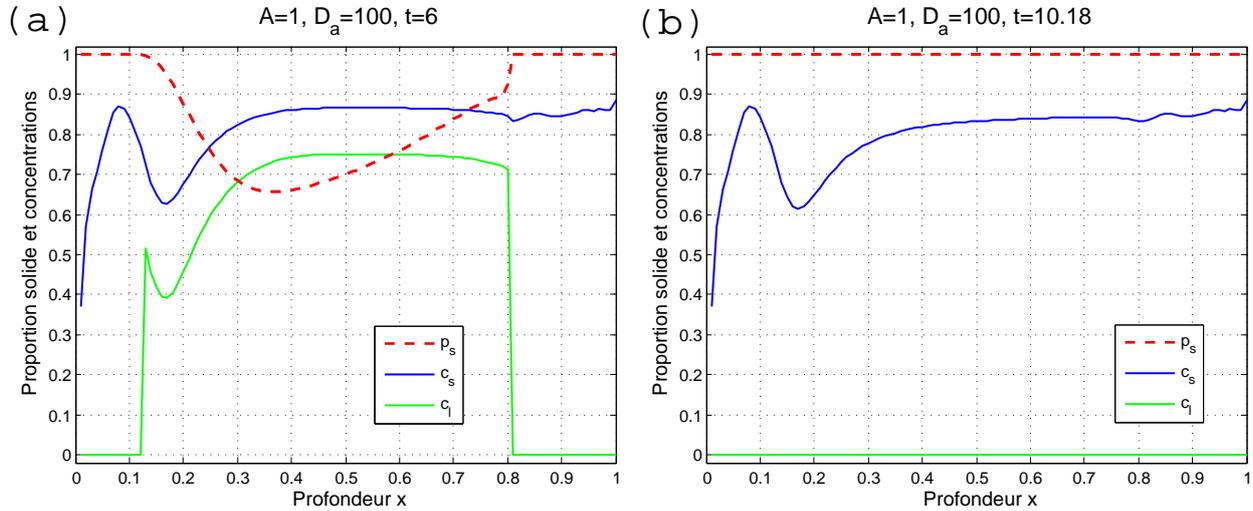


FIGURE 11.51 – Résultats (a) à $t = 6$ et (b) à l'état final $t = 10.18$. — $A = 1$, $D_a = 100$.

A l'état final, une valeur de c_s est largement représentée : $c_s = 0.8$, ce que nous confirme la courbe des répartitions des concentrations 11.52c.

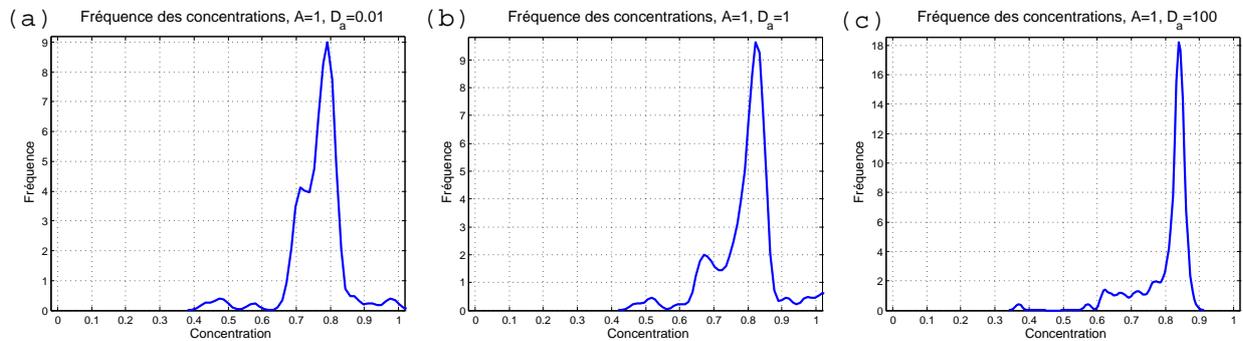


FIGURE 11.52 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 1$.

Pour $D_a = 0.01$, nous avons une relative bimodalité sans la répartition des concentrations, deux valeurs se distinguent : $c_s = 0.71$ et $c_s \approx 0.79$. Pour $D_a = 1$, deux valeurs se distinguent : $c_s = 0.68$ et $c_s = 0.82$.

c) $A = 10$

Nous représentons finalement les résultats pour le cas $A = 10$ sur les figures ci-dessous. Nous avons pour toute valeur de D_a , $c_s^f = c_i^0 = 0.8$ sur la quasi-totalité de la chambre magmatique.

11.2. EFFET DE LA FONCTION VITESSE DE SOLIDIFICATION $Q_S(X)$

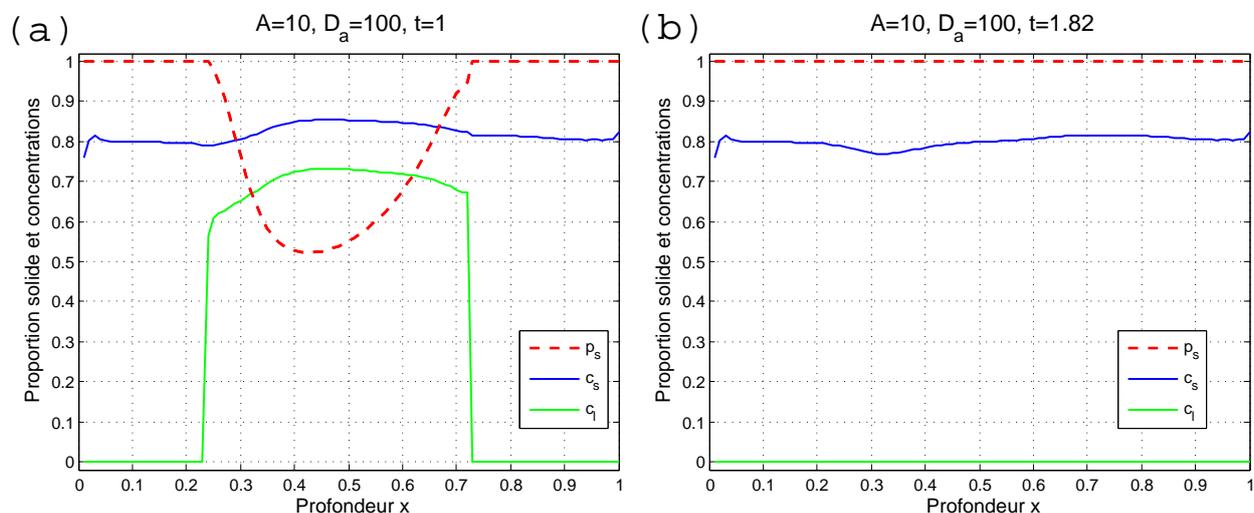


FIGURE 11.53 – Résultats (a) à $t = 1$ et (b) à l'état final $t = 1.82$. — $A = 10$, $D_a = 100$.

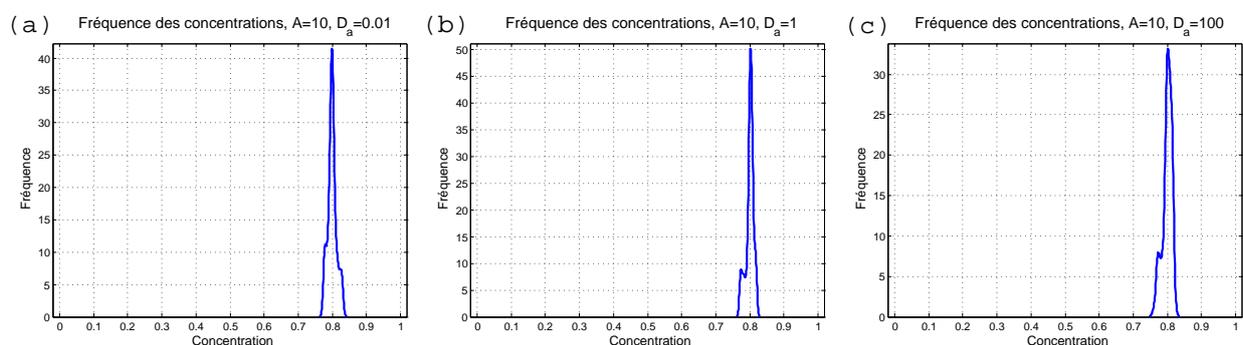


FIGURE 11.54 – Histogrammes (a) à $D_a = 0.01$, (b) à $D_a = 1$ et (c) à $D_a = 100$. — $A = 10$.

11.2.4 Récapitulation

A partir de tous les résultats obtenus dans la présente section 11.2, nous déduisons que **pour $A \neq 1$, la forme de $q_s(x)$ n'a pas un effet très considérable sur les résultats du point de vue des discontinuités et des bimodalités.** En effet, Pour la fonction isotherme considérée dans toute la section 11.2 ($g = c_s^2$), **les profils de concentration finale dans le solide c_s^f dépendent beaucoup plus des valeurs de A et D_a que de la forme de $q_s(x)$.** Le seul cas où la forme de q_s joue un rôle sur les résultats c'est lorsque $A = 1$.

Il nous reste dorénavant à tester l'effet de la fonction isotherme sur les courbes de concentrations c_s . Pour être le plus efficace possible au niveau de la représentation des résultats, nous nous sommes déjà restreints pour le paramètre D_a à la valeur 100 (les effets de l'équilibrage chimique sont alors plus accentués), choisissons maintenant les valeurs de A qui sont les plus intéressantes :

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

Pour les profils de $q_s(x)$ considérés dans la présente section 11.2, nous avons vu que les résultats sont quasi-identiques pour les deux valeurs de A , 0.1 et 0.01, ceci est vrai sauf pour le cas où $q_s(x)$ est constante (cf. section 11.1). De plus, le cas $A = 10$ donne pour toute valeur de D_a une concentration finale c_s égale à la concentration initiale dans le liquide $c_l^0 = 0.8$ sur quasiment toute la profondeur de la chambre magmatique.

C'est pour cela que pour la suite de ce chapitre, nous nous restreindrons à présenter les résultats correspondant aux seules valeurs de A **égales à 0.1 et 1**.

11.3 Effet de la fonction isotherme g

Comme la forme de q_s n'est pas très influente sur les courbes des concentrations (surtout lorsque $A \neq 1$), nous allons prendre pour toute cette section 11.3 un seul exemple de vitesse de solidification, celui de q_s non linéaire décroissante (étudiée dans la section 11.2.2) que nous représentons sur la figure 11.55, et nous testons différentes fonctions isothermes à la lumière de ce que nous avons proposé dans le chapitre 5, section 5.7.2, figures 5.6. Comme nous avons commencé à faire dans la section 11.2, nous représentons les résultats uniquement pour la valeur forte de D_a , $D_a = 100$ et pour $A = 0.1$ et $A = 1$.

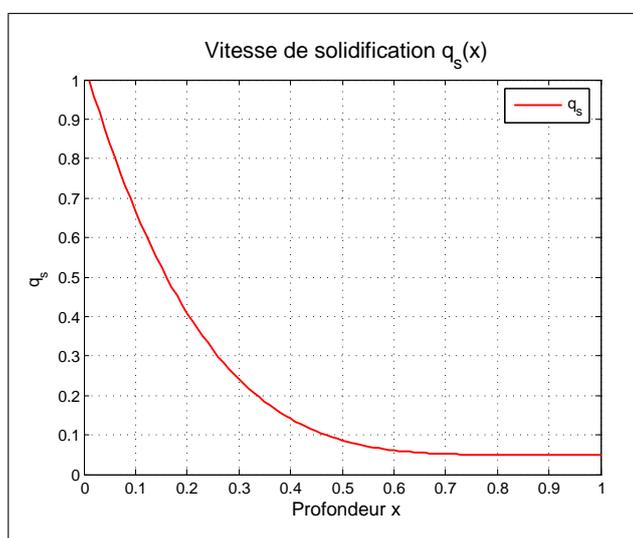


FIGURE 11.55 – Vitesse de solidification choisie pour toute la section 11.3.

11.3.1 Isotherme convexe

Nous testons plusieurs fonctions g convexes en commençant par rappeler les résultats obtenus dans la section 11.2 pour $g(c_s) = c_s^2$:

a) $g(c_s) = c_s^2$

La courbe de cette fonction a déjà été représentée sur la figure 11.22. Nous traçons les résultats obtenus pour $A = 0.1$ et $A = 1$ respectivement sur les figures 11.56a et b.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

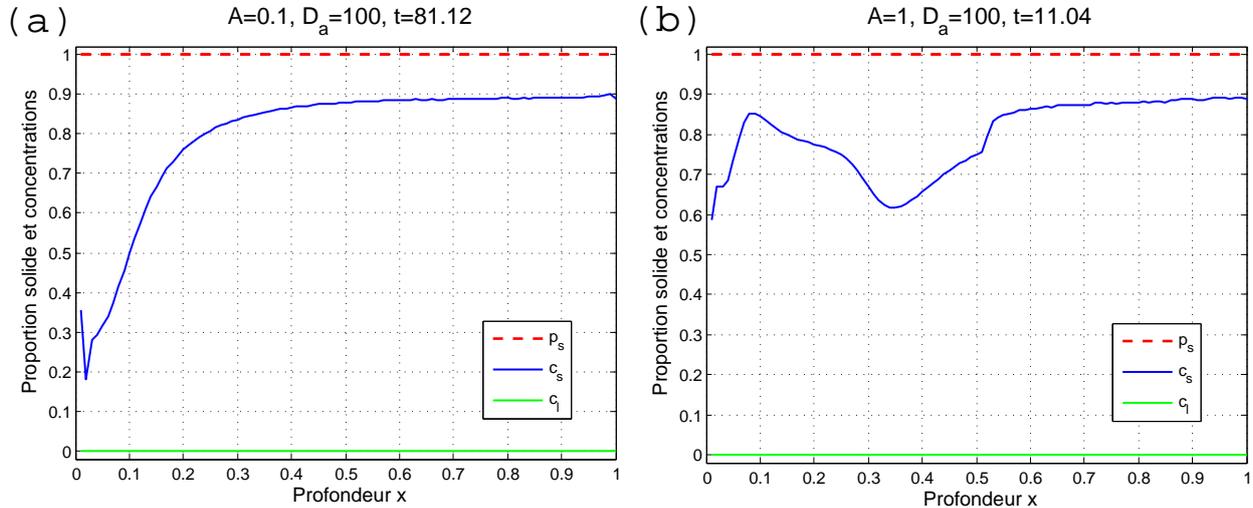


FIGURE 11.56 – Concentrations finales pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^2$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$.

Nous rappelons les histogrammes des concentrations finales obtenues pour ces valeurs de A et D_a sur la figure suivante :

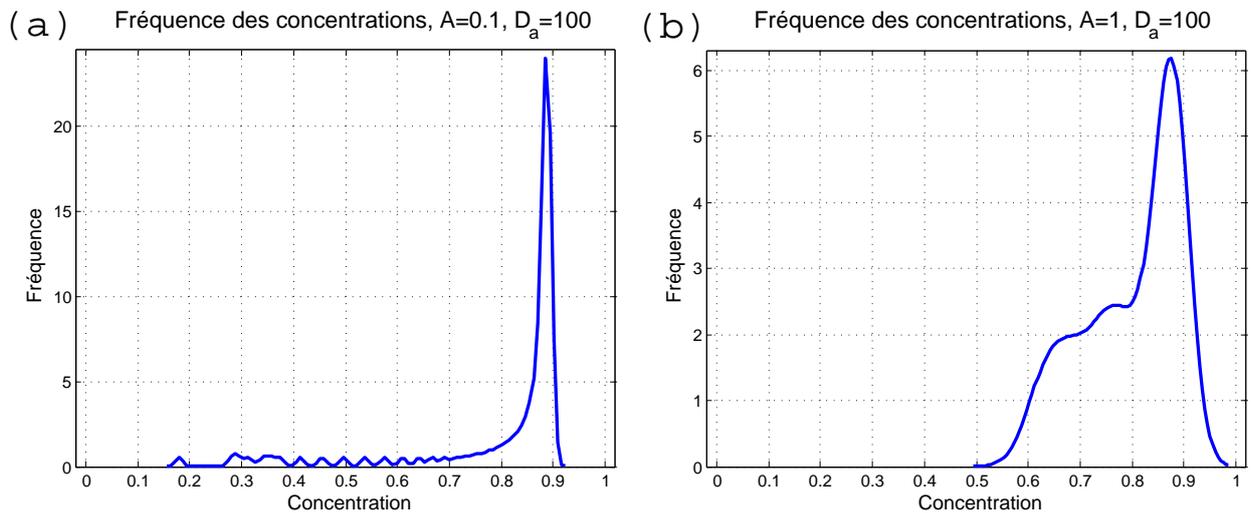


FIGURE 11.57 – Histogrammes de répartition des concentrations pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^2$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$.

Pour $A = 0.1$, nous avons un pic à $c_s = 0.88$, les autres concentrations entre 0.18 et 0.8 sont représentées de façon homogène.

Pour $A = 1$, nous avons un pic à $c_s = 0.87$ puis une répartition relativement homogène autour de $c_s = 0.7$, même si deux marches se distinguent légèrement à environ 0.68 et 0.77. Nous pouvons voir ceci comme une répartition bimodale des concentrations : un mode à 0.87 et un autre autour de 0.7.

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

Comparons maintenant avec d'autres fonctions convexes :

b) $g(c_s) = c_s^3$

La courbe de cette fonction est représentée sur la figure 11.58, sa courbe est plus convexe que dans l'exemple précédent (isotherme $g(c_d) = c_s^2$) et s'approche de l'axe des concentrations sur un plus large intervalle au voisinage de $c_s = 0$.

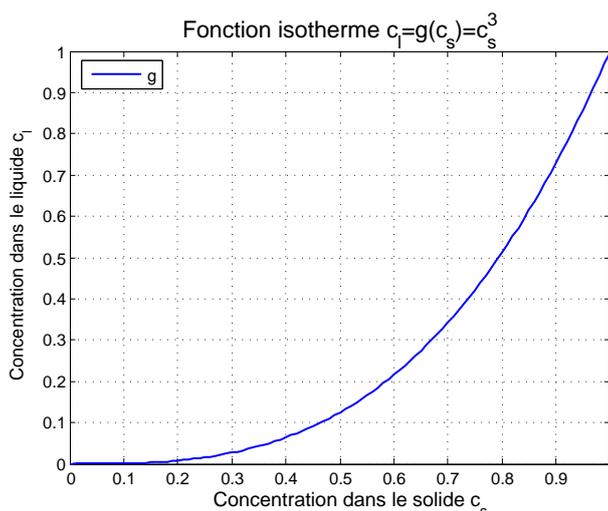


FIGURE 11.58 – Représentation de l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^3$.

Les résultats sur les concentrations en fin de processus, pour $A = 0.1$ et $A = 1$, sont représentés sur la figure ci-dessous (figure 11.59), par rapport à la figure 11.56, nous remarquons que pour $A = 0.1$, la pente de la discontinuité en haut de la colonne magmatique est plus raide et se situe à la profondeur $x = 0.12$, nous avons ainsi une bimodalité des concentrations, un mode à $c_s = 0.92$ et un autre autour de $c_s = 0.1$, même si cette dernière concentration est moins représentée ; cette bimodalité est bien visible sur la courbe de répartition des concentrations (cf. figure 11.60a).

De même pour $A = 1$, les écarts se creusent plus, dans la zone 2 représentée sur la figure 11.59b, la pente de la courbe de c_s est plus grande, et la valeur minimale à $x \approx 0.33$ a diminué, elle est à 0.55 au lieu de 0.62 pour l'exemple précédent, nous avons toujours une concentration bien représentée (pic à 0.91 sur la figure 11.60b) et deux autres valeurs qui se distinguent par rapport au cas précédent ($g(c_d) = c_s^2$) à $c_s = 0.6$ et $c_s = 0.73$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

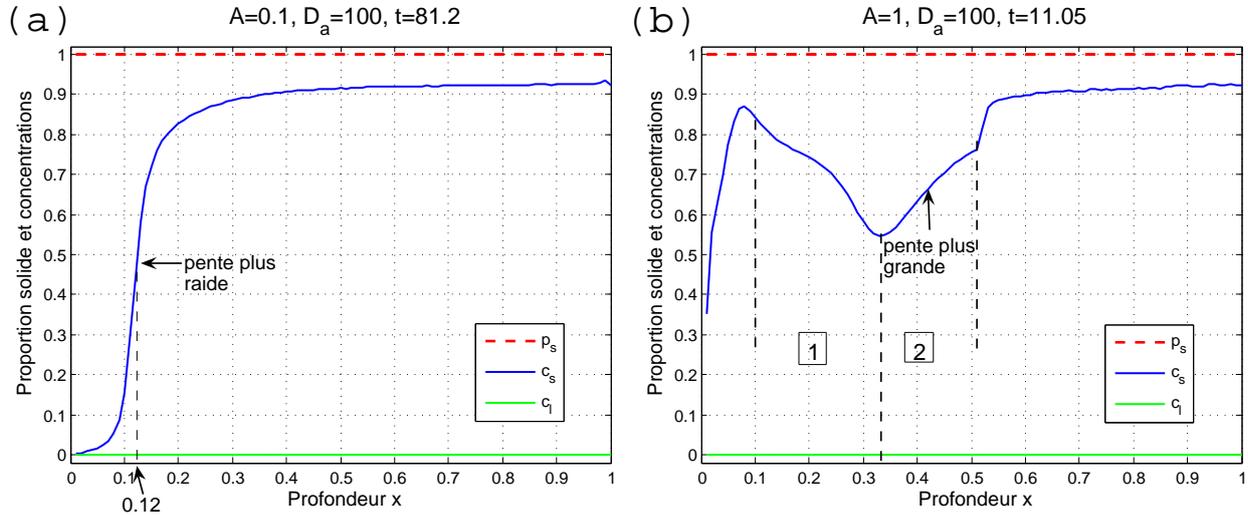


FIGURE 11.59 – Concentrations finales pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^3$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$.

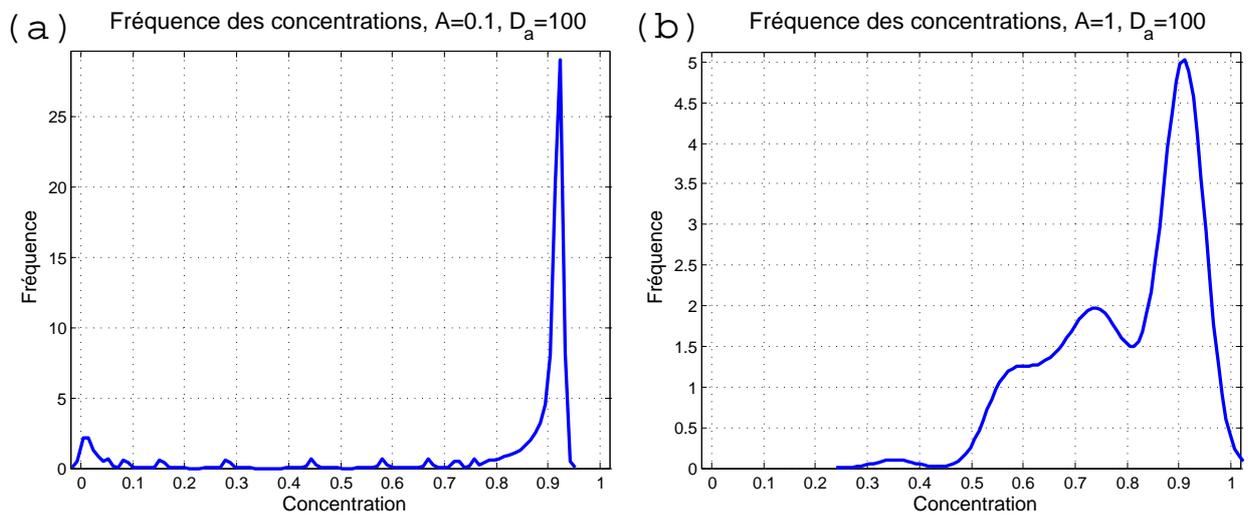


FIGURE 11.60 – Histogrammes de répartition des concentrations pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^3$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$.

c) $g(c_s) = c_s^5$

Nous continuons avec une fonction encore plus convexe et dont la courbe se rapproche encore plus de l'axe des concentrations lorsque c_l diminue :

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

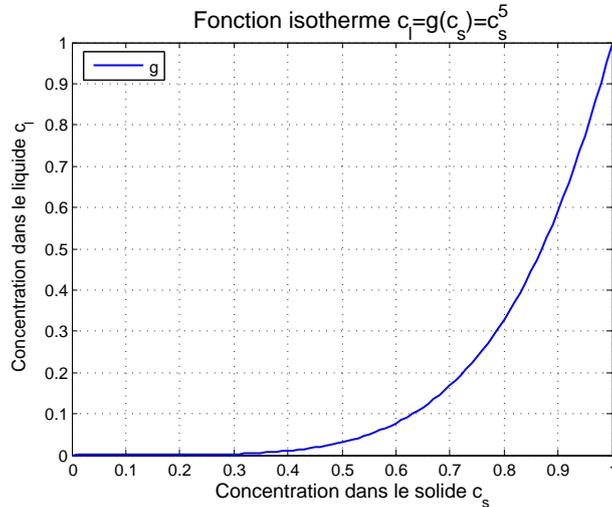


FIGURE 11.61 – Représentation de l’isotherme convexe $g(c_s) = c_s^5$.

Pour $A = 0.1$ nous remarquons sur la figure 11.62a que la discontinuité est encore plus marquée et la bimodalité encore plus visible sur l’histogramme figure 11.63a. La discontinuité se situe à une profondeur $x = 0.16$ qui est supérieure au cas $g(c_s) = c_s^3$ où elle était à 0.12.

Pour $A = 1$, dans la zone 2, la pente a augmenté plus et la valeur minimale a baissé (0.48 au lieu de 0.55 pour l’exemple précédent où $g(c_s) = c_s^3$), les écarts entre les 3 valeurs de concentrations les plus représentées se creusent encore plus, et on distingue bien 3 valeurs sur la figure 11.63b.

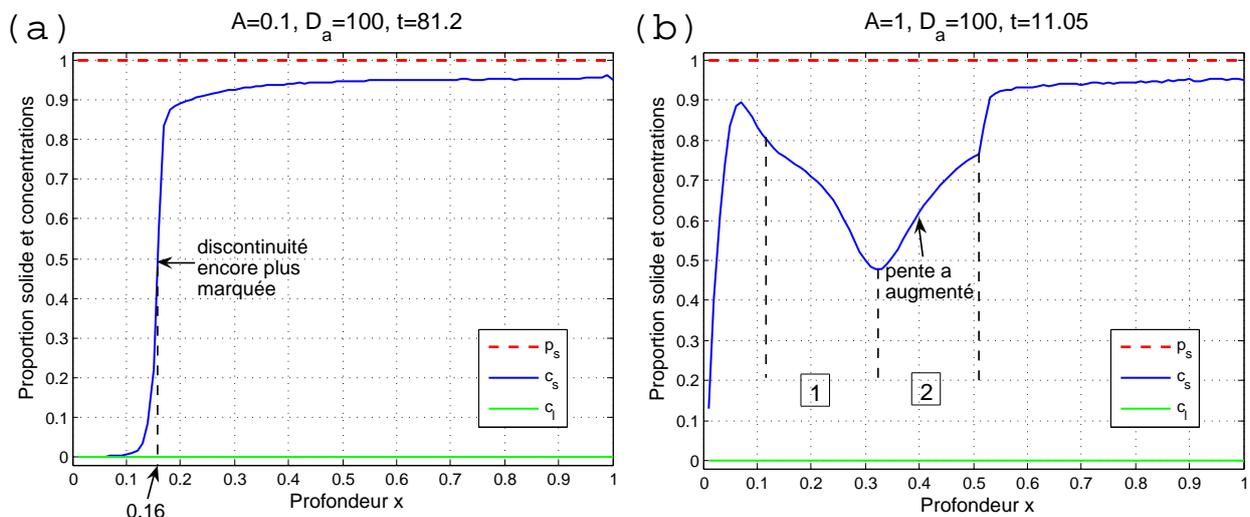


FIGURE 11.62 – Concentrations finales pour l’isotherme convexe $g(c_s) = c_s^5$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

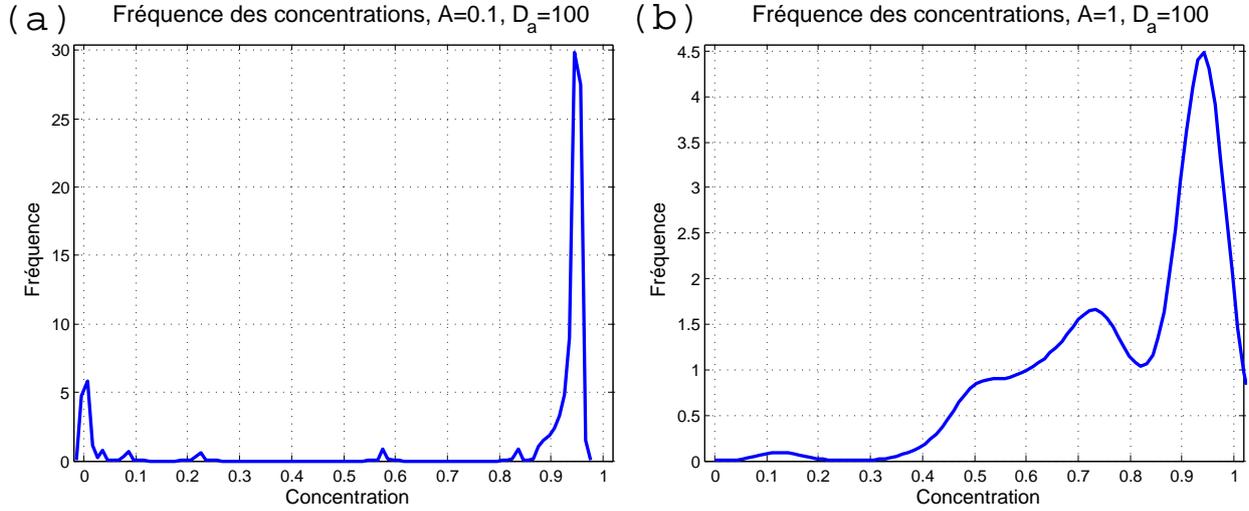


FIGURE 11.63 – Histogrammes de répartition des concentrations pour l'isotherme convexe $g(c_s) = c_s^5$. — $A = 0.1$ et $A = 1$, $D_a = 100$.

d) Comparaison et interprétation

Avant de continuer à tester d'autres exemples d'isothermes, nous nous arrêtons pour donner une explication de l'influence de la forme de l'isotherme sur les concentrations dans la chambre magmatique et nous prenons pour cela les deux exemples d'isothermes présentées dans les sections 11.3.1.a et 11.3.1.c ($g(c_s) = c_s^2$ et $g(c_s) = c_s^5$).

Nous rappelons que nous nous plaçons dans le cas où l'équilibrage chimique entre les deux phases solide et liquide est très rapide ($D_a = 100$). Nous commençons par interpréter et comparer les résultats pour $A = 0.1$.

Aux premiers moments de la cristallisation, la composition du liquide magmatique est **figée**, le solide qui se forme prend initialement la concentration du liquide d'origine, c'est-à-dire $c_s = c_l^0 = 0.8$.

La quantité de solide présente dans le magma étant faible, l'équilibrage chimique entre les deux phases, tend plus à faire varier c_s que c_l . Ainsi dans un premier temps ($t < 0.1$ d'après la simulation), le solide prend la valeur $c_s = 0.9$ pour l'exemple de l'isotherme $g(c_s) = c_s^2$ et $c_s = 0.95$ pour l'isotherme $g(c_s) = c_s^5$ (point 1 sur les courbes des deux isothermes, figures 11.64a et 11.65a et représenté aussi sur les figures 11.64b et 11.65b dans la partie inférieure de la chambre magmatique).

Prenons d'abord l'exemple de l'isotherme $g(c_s) = c_s^2$.

Au début de la cristallisation, nous avons dit que le solide en faible quantité s'équilibre avec le liquide et prend la valeur $c_s = 0.9$ et ceci sur toute la profondeur de la chambre magmatique. Ensuite, la cristallisation continue et le solide qui se forme prend, à la cristallisation et tant que c_l n'a pas varié, la concentration du liquide d'origine $c_s = c_l^0 = 0.8$. Le liquide qui est à $c_l = 0.8$ tend à ramener le solide à la concentration en équilibre avec lui, c'est-à-dire à $c_s = 0.9$ (point 1 sur la courbe de l'isotherme, figure 11.64a) mais au cours du temps, le solide formé à $c_s = 0.8$ ne va pas sans tendre à ramener le liquide à la concentration en équilibre avec lui, c'est-à-dire à $c_l = 0.64$

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

(point 2 sur la même courbe). Nous obtenons en réalité une concentration dans le solide entre 0.8 et 0.9 et une concentration dans le liquide entre 0.8 et 0.64. c_s et c_l se trouvent en réalité entre les deux points 1 et 2 de la figure 11.64a.

Analytiquement, l'équilibrage chimique se fait suivant le système d'équations (10.5) valable pour le cas de flux nuls (absence de transport) et valable ici aussi car $D_a \gg 1$, D_a représentant le rapport entre la vitesse de réaction et la vitesse de transport. Le solide ainsi produit précipite et un nouveau solide se forme dans la partie supérieure de la chambre magmatique (au-dessus du front de sédimentation), à la concentration du liquide à son origine, avant de réagir avec celui-ci. La réaction faisant baisser la valeur de c_l au cours du temps, c_s diminue aussi. **Ainsi c_s et c_l diminuent dans la partie supérieure de la chambre magmatique et tendent vers la valeur 0.**

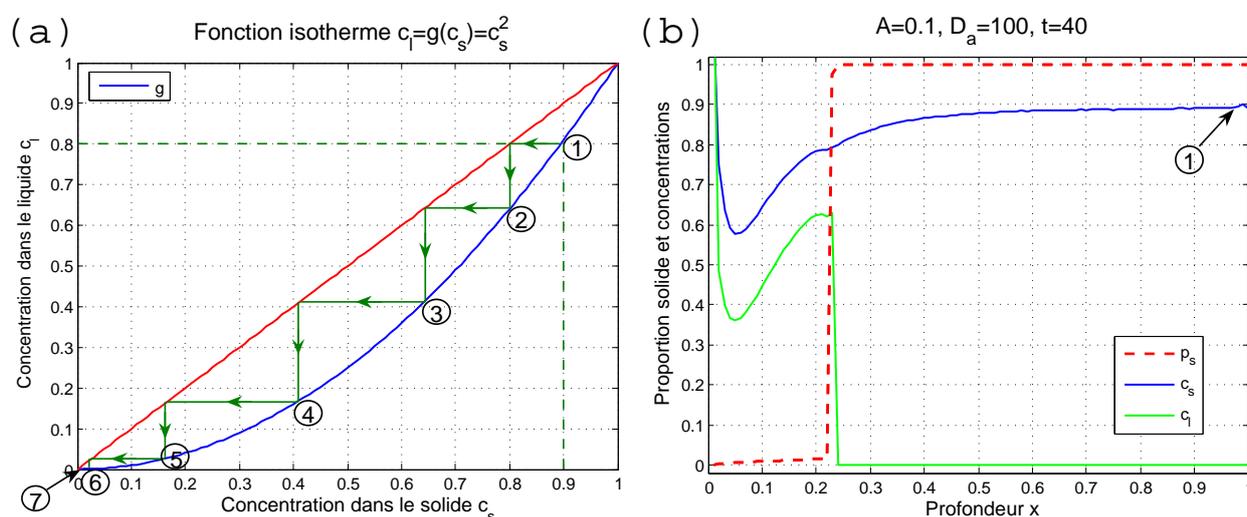


FIGURE 11.64 – (a) Isotherme $c_l = g(c_s) = c_s^2$ et schéma d'évolution des concentrations dans les cristaux produits dans la partie supérieure de la chambre magmatique à partir d'un liquide initial dans lequel $c_l = 0.8$. (b) Concentrations à $t = 40$. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

Nous pouvons résumer ce qu'on vient de dire par les étapes suivantes :

- le solide qui se forme dans la partie supérieure de la chambre prend la concentration du liquide à son origine qu'on note c_l^0 ($= c_{l1}$) (on se place sur la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$, figure 11.64a),
- les réactions entre le solide et le liquide tendent à faire baisser la concentration dans le liquide c_l , supposons qu'elle passe à la valeur c_{l2} (flèches verticales qui nous ramènent à l'isotherme),
- le solide précipite en direction du front de sédimentation et un nouveau solide se forme au-dessus de celui-ci, à la concentration du liquide à son origine : c_{l2} (flèches horizontales qui nous ramènent à la bissectrice).

Ainsi, dans la partie supérieure de la chambre magmatique (au-dessus du front de sédimentation), nous avons **compétition entre deux phénomènes : solidification** du liquide qui nous ramène

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

à la bissectrice, et **équilibrage chimique** qui nous ramène à la courbe isotherme.

Les étapes indiquées par des numéros sur la figure 11.64a ont une **visée pédagogique** ; en réalité, les concentrations c_s et c_l **sont encadrées par les deux courbes, première bissectrice et isotherme**, et baissent au cours du temps jusqu'à atteindre la valeur 0. Les deux concentrations qui sont représentées sont les concentrations en équilibre avec le liquide de départ (point 1) et la concentration en fin de processus (point 7), mais les étapes intermédiaires ne sont pas représentées.

Pour cet exemple de $g(c_s) = c_s^2$, l'arrivée au point (0,0) n'est pas assez rapide. En effet le fait que **l'isotherme soit proche de la première bissectrice** fait que le nombre d'étapes indiquées sur la figure 11.56a est élevé. C'est pour cela que c_l et c_s tendent lentement vers la valeur 0, au point qu'elles ne l'atteignent pas, contrairement à l'exemple suivant :

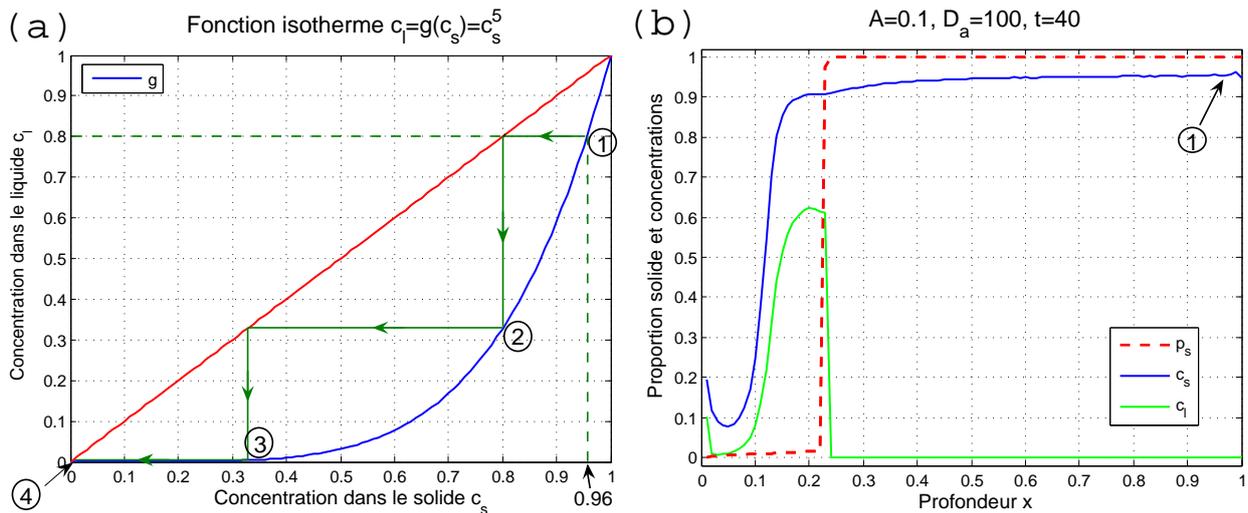


FIGURE 11.65 – (a) Isotherme $c_l = g(c_s) = c_s^5$ et schéma d'évolution des concentrations dans les cristaux produits dans la partie supérieure de la chambre magmatique à partir d'un liquide initial dans lequel $c_l = 0.8$. (b) Concentrations à $t = 40$. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

Pour l'exemple de l'isotherme $g(c_s) = c_s^5$, en partant d'un liquide initial à $c_l^0 = 0.8$, le solide initialement cristallisé et s'équilibrant très rapidement avec ce liquide est à concentration $c_s = 0.95$ (point 1 sur la courbe isotherme, cf. figure 11.65a) sur toute la profondeur de la chambre magmatique. Nous pouvons ensuite faire la même analyse que pour l'exemple de l'isotherme $g(c_s) = c_s^2$, c_l et c_s diminuent au cours du temps et atteignent la valeur 0.

La différence entre les deux isothermes c'est que **l'équilibrage fait diminuer c_l (et donc de c_s) plus rapidement pour cet isotherme**. En effet, l'isotherme est moins proche de la première bissectrice que dans l'exemple précédent (on voit ainsi 4 points au lieu de 7). Nous vérifions ceci sur la comparaison des courbes des concentrations à tout moment, nous en traçons un exemple au temps $t = 40$ sur les figures 11.64b et 11.65b. Nous y observons une diminution des grandeurs c_s et c_l dans la partie supérieure de la chambre magmatique avec des valeurs nettement plus basses dans le cas de l'isotherme $g(c_s) = c_s^5$.

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

Nous pouvons ainsi déduire que pour $A = 0.1$, plus la convexité de l'isotherme est forte (plus elle s'éloigne de la bissectrice), plus la diminution des concentrations dans la partie supérieure de la chambre magmatique se fait rapidement. Nous pouvons remarquer que ceci induit aussi que la discontinuité dans la courbe de c_s^f , s'éloigne plus du sommet de la chambre magmatique (cf. figure 11.59a -front à $x = 0.12$ - et figure 11.62a -front à $x = 0.16$ -).

Pour $A = 1$, la diminution de c_s et c_l se voit au niveau de la frontière entre la zone 1 et la zone 2 (figure 11.66a pour $g(c_s) = c_s^2$ et figure 11.66b pour $g(c_s) = c_s^5$) et nous obtenons une nette différence entre les deux cas d'isotherme, la diminution est plus prononcée pour le cas $g(c_s) = c_s^5$.

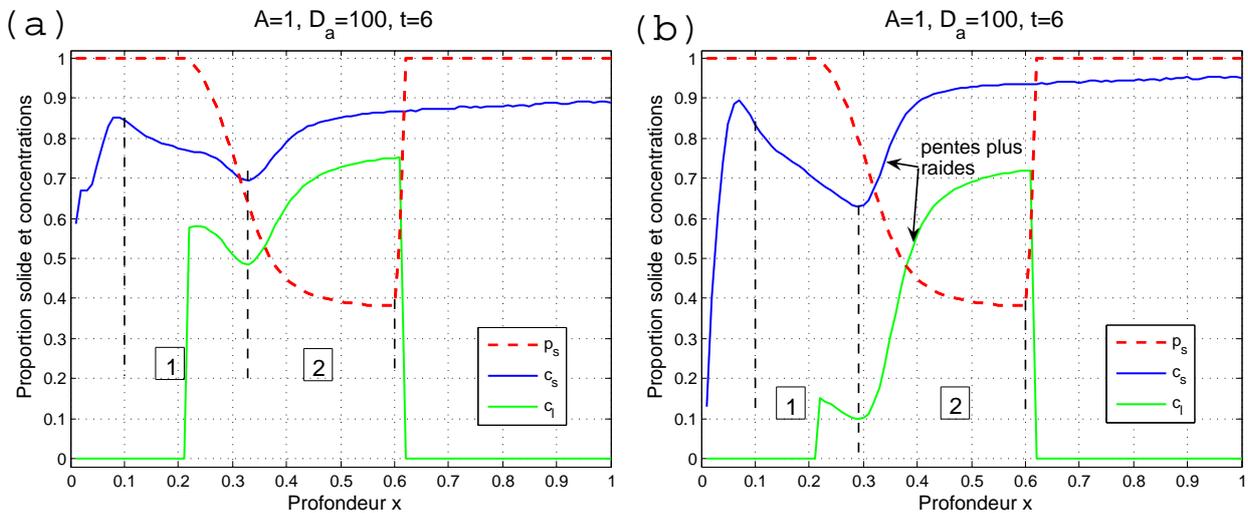


FIGURE 11.66 – Comparaison des concentrations à $t = 6$ pour les deux isothermes convexes : (a) $g(c_s) = c_s^2$ et (b) $g(c_s) = c_s^5$. — $A = 1$, $D_a = 100$.

L'analyse et interprétation graphique que nous venons de faire sur les courbes isothermes (figures 11.64a et 11.65a) permet de donner une première idée sur le rôle que joue la forme de g et sa position par rapport à la première bissectrice, sur les concentrations finales c_s^f .

Nous considérons dans les exemples suivants d'autres formes d'isothermes.

11.3.2 Isotherme concave

Nous prenons maintenant deux exemples de fonctions isothermes concaves et passant au-dessus de la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$. Nous gardons une vitesse d'équilibrage très élevée ($D_a = 100$) et nous nous restreignons à analyser l'effet de g dans le cas $A = 0.1$.

a) 1^{er} exemple

Le tracé de la courbe de l'isotherme est représenté sur la figure 11.67. **L'isotherme étant au-dessus de la première bissectrice, le sens de l'évolution des concentrations pour une isotherme concave change** : le passage du point 1, qui est sur l'isotherme, au point 2 se fait de gauche à droite et de bas en haut (cf. flèches sur la figure 11.67, ainsi de suite jusqu'à atteindre le point 4 pour lequel $c_s = c_l = 1$).

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

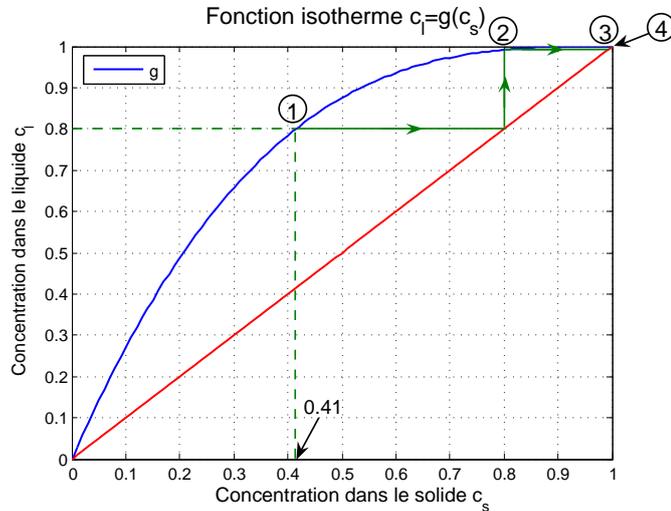


FIGURE 11.67 – Représentation d’une isotherme concave - Premier exemple.

Nous représentons la courbe des concentrations finales avec la profondeur de la chambre magmatique sur la figure 11.68a. **Les deux concentrations les plus représentées sont la concentration en équilibre avec le liquide de départ (point 1), et la concentration en fin de processus (point 4)**, les autres points ne sont pas représentés. L’histogramme de répartition de c_s sur la profondeur est représenté sur la figure 11.68b, on y observe une bimodalité des concentrations correspondant aux points 1 et 4 de la figure 11.68a.

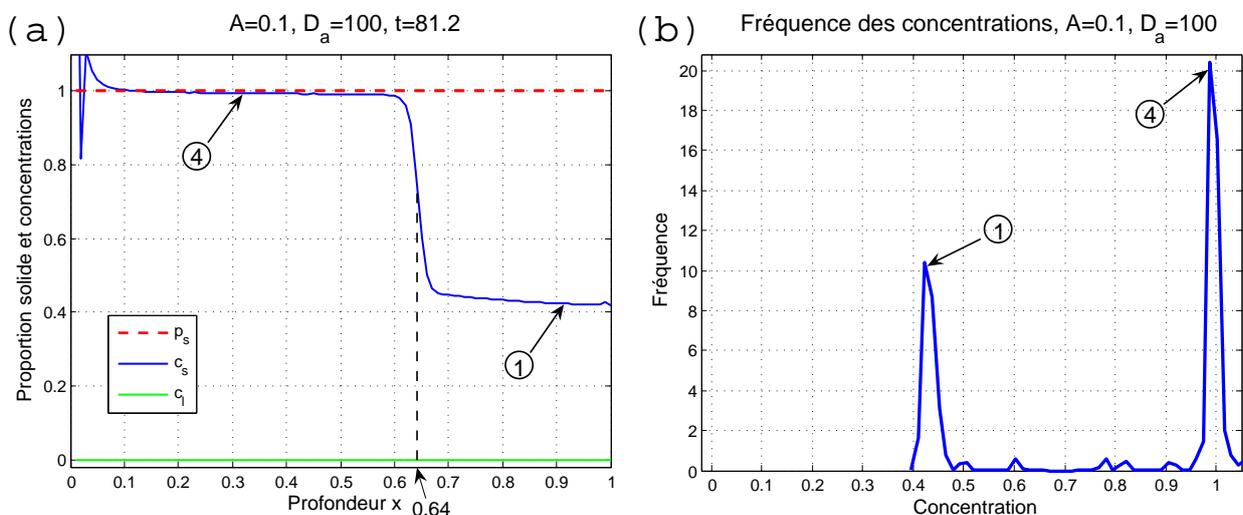


FIGURE 11.68 – (a) Concentrations finales pour la première isotherme concave, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1, D_a = 100$.

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

b) 2^{ème} exemple

Dans ce deuxième exemple, nous considérons une isotherme plus concave et dont la courbe s'approche plus rapidement de l'axe $c_l = 1$ lorsque c_s diminue. La comparaison entre cette isotherme (figure 11.69) et celle du premier exemple (cf. figure 11.67) montre que l'arrivée à la concentration $c_l = 1$ est plus rapide ici (schématiquement 3 étapes) relativement au cas précédent (4 étapes).

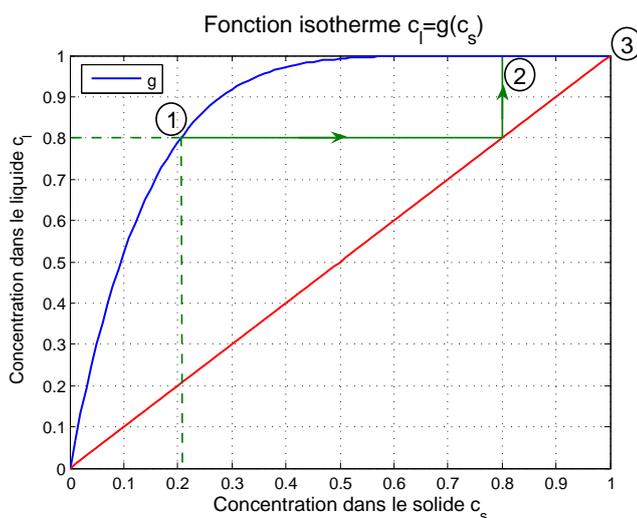


FIGURE 11.69 – Représentation d'une isotherme concave - Deuxième exemple.

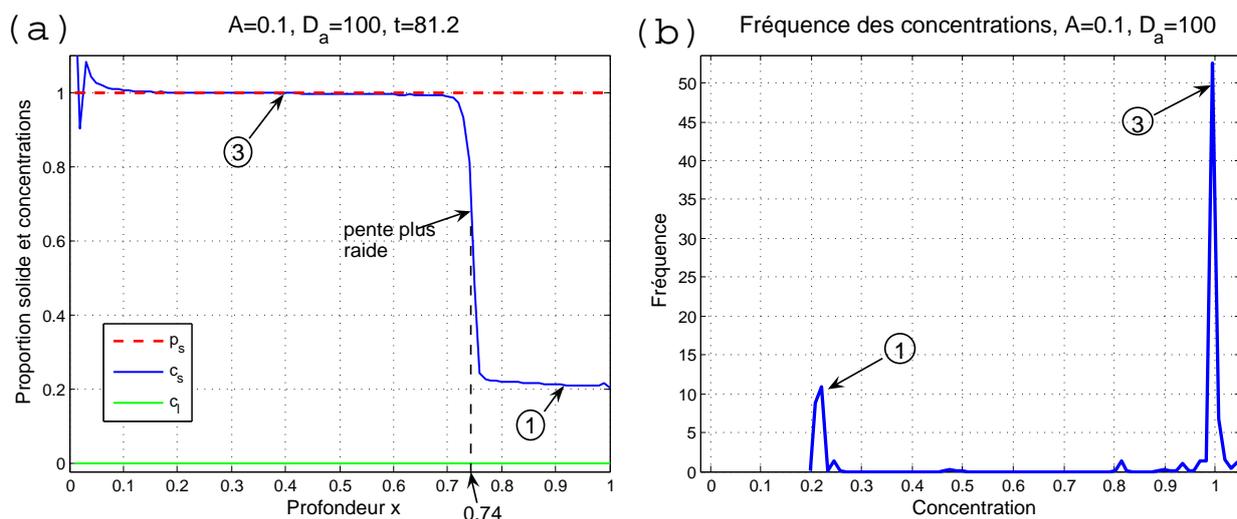


FIGURE 11.70 – (a) Concentrations finales pour la troisième isotherme concave, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

Pour la courbe représentant la concentration finale c_s^f (figure 11.70a), nous avons une première concentration correspondant au point 1 sur la courbe isotherme (où $c_s \approx 0.22$), puis une discontinuité plus prononcée que dans le cas précédent et qui arrive plutôt dans la chambre magmatique (à $x \approx 0.75$ au lieu de $x \approx 0.64$), puis une deuxième concentration ($c_s \approx 1$) pour toute la partie $x \in [0, 0.75]$. Cette bimodalité des concentrations est bien visible sur l'histogramme 11.70b.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

11.3.3 Isotherme avec changement de concavité

Nous prenons maintenant des isothermes qui changent de concavité (conformément aux exemples d'isothermes proposées dans la section 5.7.2, figure 5.6b). En se plaçant toujours dans le cas de valeur élevée de D_a (100) et de valeur faible de A (0.1), nous pouvons suivre le même raisonnement graphique que dans les sections 11.3.1 et 11.3.2, en s'appuyant sur la position des isothermes par rapport à la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$. **Nous indexons cependant seulement les points de départ et d'arrivée des flèches** sur le graphique de l'isotherme, par les symboles "i" et "f" (initial et final). En effet, ceux-ci correspondent aux deux concentrations caractérisant la bimodalité.

a) Inflexion centrée

Pour ce premier exemple, l'inflexion se fait à $c_l = 0.5$.

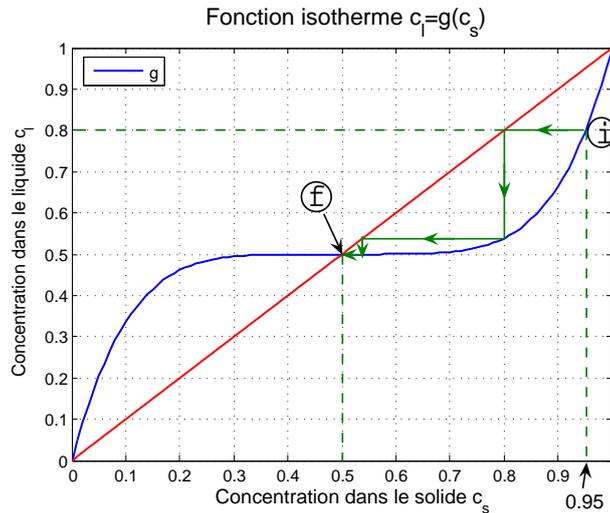


FIGURE 11.71 – Représentation d'une isotherme avec inflexion centrée.

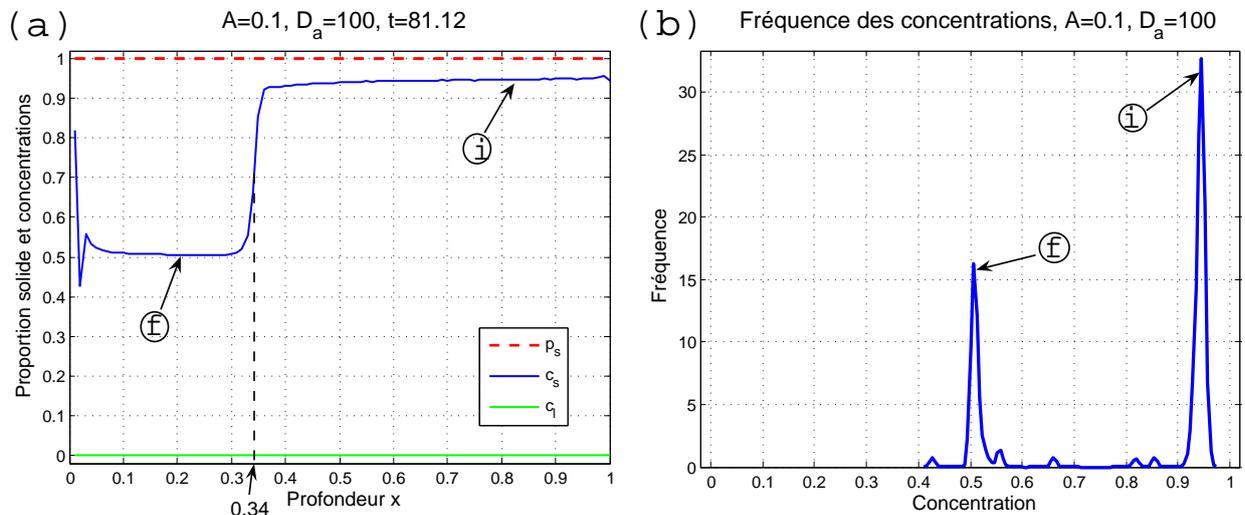


FIGURE 11.72 – (a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

Le tracé du parcours suivi par c_s et c_l sur la figure 11.71, prévoit une première concentration à $c_s = 0.95$ puis une deuxième concentration dans la partie supérieure de la chambre magmatique, $c_s = 0.5$.

Nous retrouvons cette prévision sur le résultat de la simulation (figure 11.72a) : les deux concentrations 0.95 et 0.5 sont bien représentées et séparées d'une discontinuité à $x = 0.34$, et nous pouvons observer les 2 pics correspondant aux deux valeurs de c_s sur l'histogramme des concentrations en figure 11.72b.

b) Inflexion décalée vers le bas

Pour cet exemple, l'inflexion se fait à $c_l \approx 0.27$.

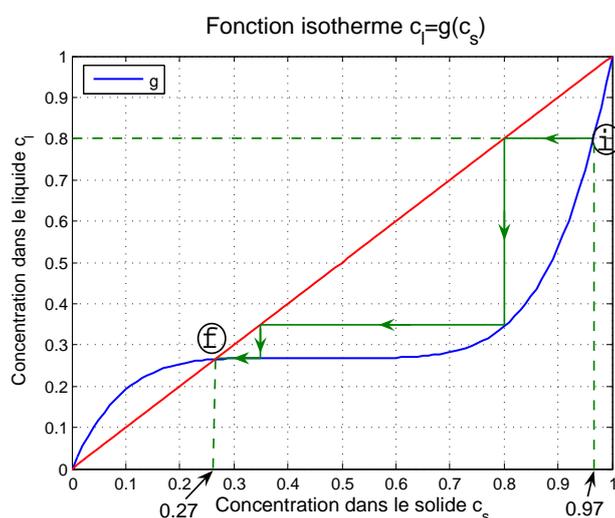


FIGURE 11.73 – Représentation d'une isotherme avec inflexion décalée vers le bas.

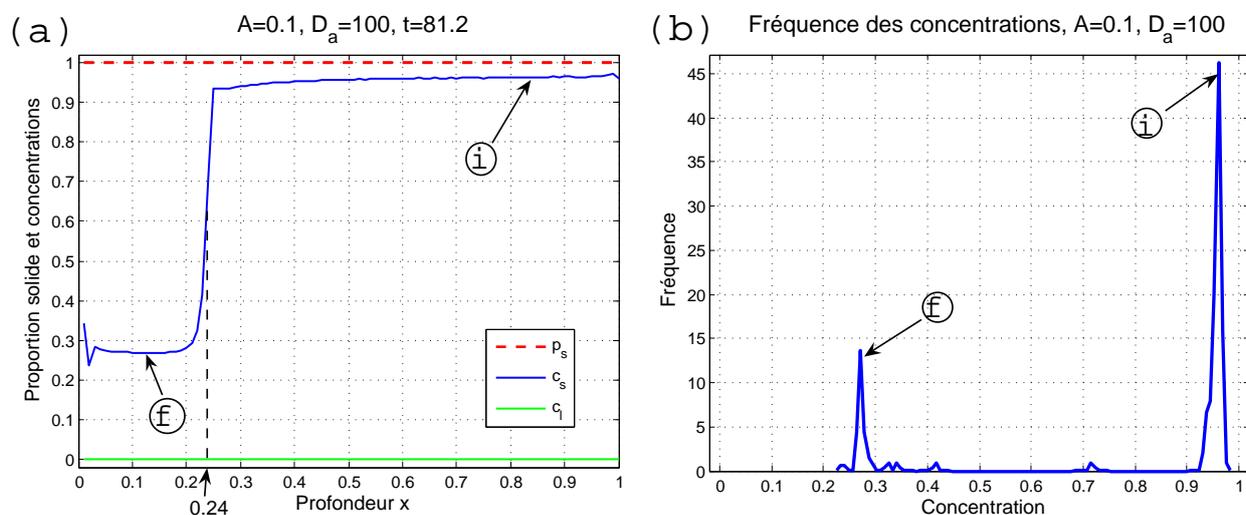


FIGURE 11.74 – (a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

L'analyse de la courbe de cette isotherme (figure 11.73) permet de prévoir deux concentrations qui dominent dans la chambre magmatique : $c_s \approx 0.97$ et $c_s \approx 0.27$, ce qui correspond bien au résultat donné par la simulation pour c_s^f et pour l'histogramme de répartition des concentrations (figures 11.74a et b).

c) Inflexion décalée vers le haut

Pour ce dernier exemple l'inflexion se fait à $c_l \approx 0.73$ et nous pouvons constater, comme précédemment, l'adéquation entre l'analyse graphique de la fonction isotherme et le résultat de la simulation sur les figures 11.76.

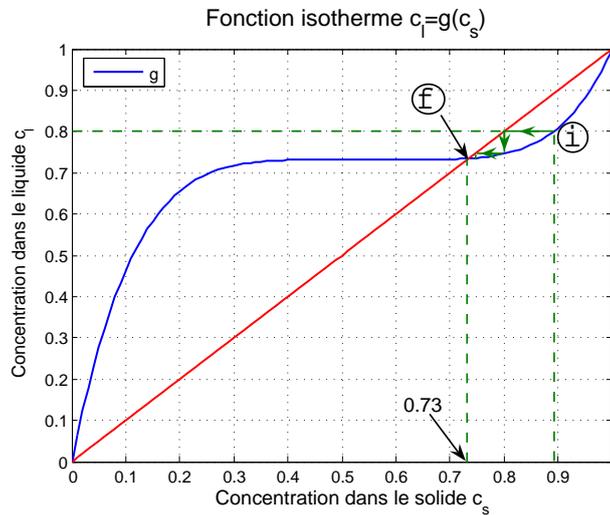


FIGURE 11.75 – Représentation d'une isotherme avec inflexion décalée vers le haut.

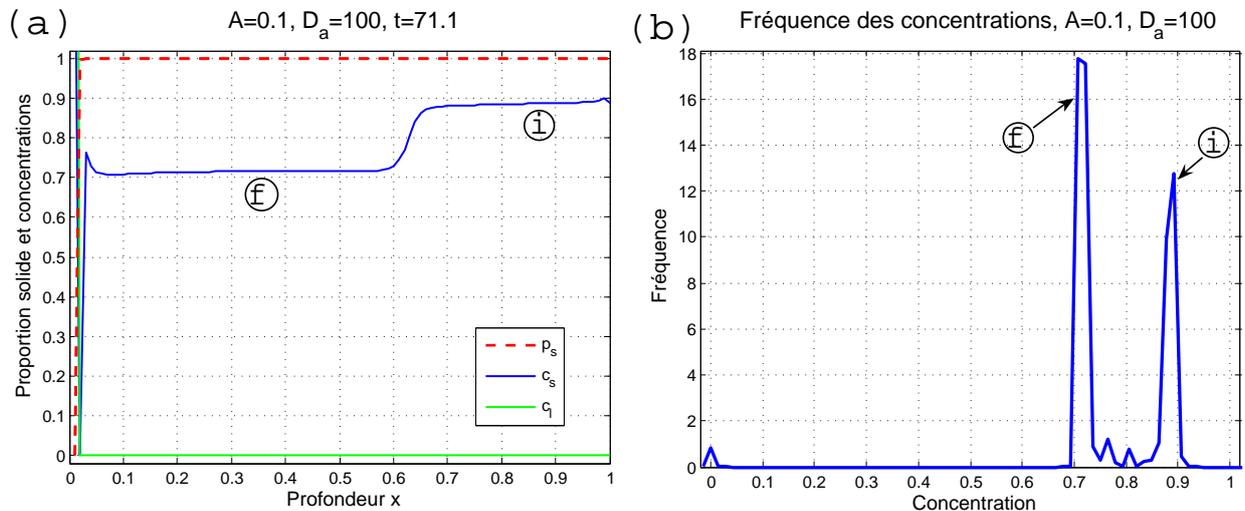


FIGURE 11.76 – (a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le haut, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

11.3.4 Exemple avec une condition initiale différente

Jusqu'ici nous avons toujours considéré en condition initiale $c_l^0 = 0.8$. Nous testons ici un cas où l'on change cette condition initiale, considérons pour cela fonction isotherme avec inflexion à $c_l = 0.5$ et prenons comme condition initiale $c_l^0 = 0.2$ (en-dessous du point d'intersection de l'isotherme avec la première bissectrice) et voyons ce que cela implique sur les résultats, en prenant bien sûr $A = 0.1$ et $D_a = 100$.

Appliquons le même raisonnement graphique adopté précédemment directement sur la figure ci-dessous :

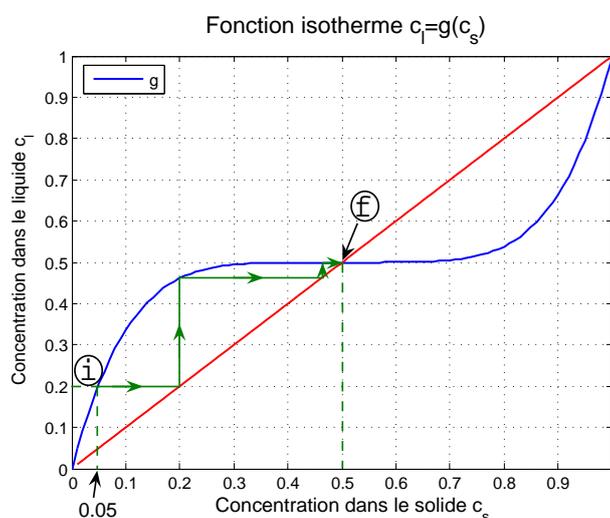


FIGURE 11.77 – Représentation d'une isotherme avec inflexion centrée.

Nous prévoyons alors l'apparition de deux modes le premier à $c_s = 0.05$ et le second à $c_s = 0.5$. Nous traçons ci-dessous les résultats de la simulation :

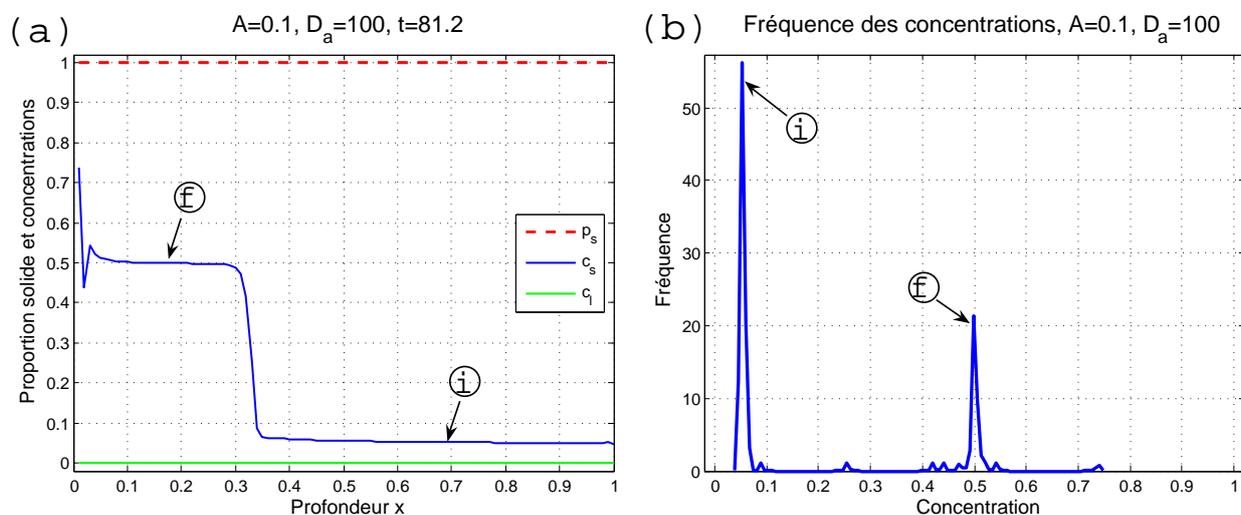


FIGURE 11.78 – (a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le haut, (b) Répartition des concentrations correspondante. — $A = 0.1$, $D_a = 100$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

Nous obtenons bien les résultats prévus par le raisonnement graphique sur la courbe de l'isotherme, à savoir une bimodalité des concentrations et deux pics sur l'histogramme de répartition des concentrations. Ce raisonnement reste donc valable quelque soit la condition initiale c_l^0 .

11.3.5 Cas de $D_a < 100$

Nous gardons $A = 0.1$ et faisons varier D_a . Nous voulons ici montrer que le raisonnement graphique développé, s'appuyant sur la courbe isotherme et la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$, permet aussi de donner une idée sur c_s en fin de processus dans le cas où $D_a < 100$. Nous considérons deux exemples : **l'exemple de l'isotherme avec une inflexion décalée vers le bas et $c_l^0 = 0.8$** et **l'exemple d'une isotherme avec inflexion centrée et $c_l^0 = 0.2$** . Nous traçons les courbes de c_s en fin de processus pour les deux isothermes respectivement sur les figures 11.79a et b.

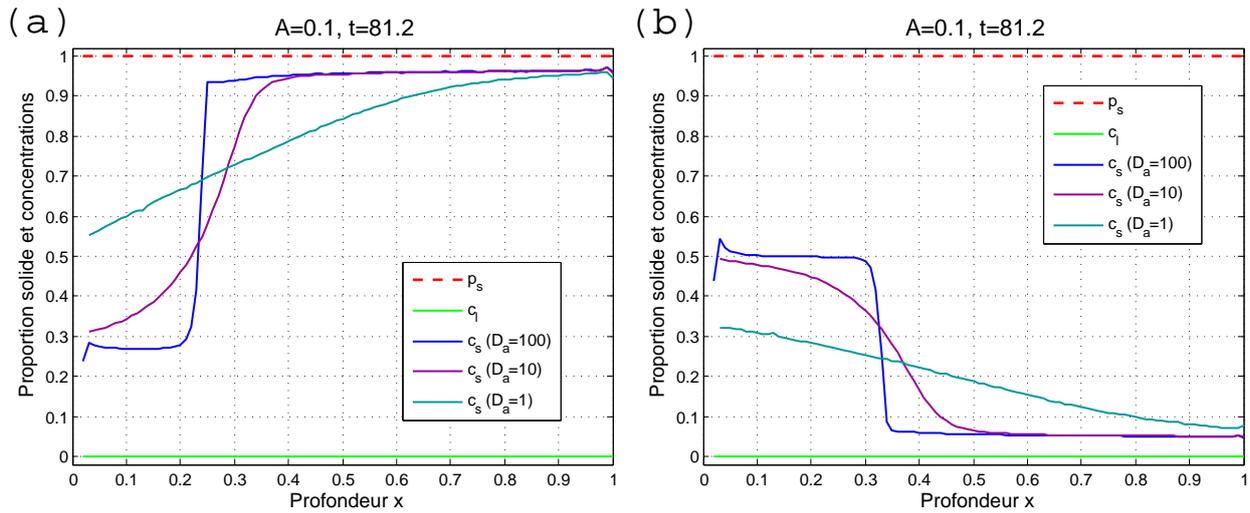


FIGURE 11.79 – (a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas et $c_l^0 = 0.8$, (b) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée. — $A = 0.1$ et D_a prenant les valeurs 100, 10 et 1.

Pour $D_a = 100$, nous avons une répartition bimodales des concentrations avec une discontinuité entre les deux concentrations, les valeurs de ces deux concentrations sont données par la raisonnement graphique appliqué à l'isotherme correspondante (figures 11.73 et 11.77).

Pour $D_a = 10$, nous avons toujours une bimodalité des concentrations, les deux valeurs les plus représentées sont les mêmes que pour $D_a = 100$ mais avec une discontinuité moins prononcée entre les deux valeurs des concentrations.

Enfin, pour $D_a = 1$, nous avons plutôt une répartition uniforme des concentrations, partant d'une valeur au fond de la chambre quasiment égale à celle trouvée pour $D_a = 100$ et en finissant au sommet de la chambre sur une valeur intermédiaire entre les valeurs trouvées au fond et au sommet de la chambre pour $D_a = 100$.

Pour $D_a \leq 0.1$ (réactions chimiques très lentes), nous savons que la courbe finale de c_s est égale à

11.3. EFFET DE LA FONCTION ISOTHERME G

c_l^0 sur quasiment toute la profondeur de la chambre (cf. sections 11.2.1.a) et 11.2.1.b)).

Ainsi, nous pouvons prévoir grâce au raisonnement graphique développé, une **évolution qualitative** des concentrations dans la chambre entièrement solidifiée, pour les valeurs de D_a **inférieures à 100**.

11.3.6 Récapitulation

Nous avons testé trois types d'isothermes : convexes, concaves et avec point d'inflexion. Pour les isothermes convexes nous avons testé les deux valeurs de $A = 0.1$ et 1 , pour les autres isothermes, nous nous sommes restreints à la valeur $A = 0.1$ pour laquelle nous observons une bimodalité des concentrations finales dans le solide c_s^f . Pour le paramètre D_a , nous n'avons testé que la valeur 100 (comme nous avons fait à partir de la section 11.2.2) pour laquelle les effets de l'équilibrage chimique sont accélérés.

Les résultats obtenus dans cette section 11.3 montrent leur grande dépendance vis-à-vis de la forme de l'isotherme magmatique choisie :

Pour les isothermes convexes, les courbes de concentrations finales présentent pour le cas $A = 0.1$ une bimodalité des concentrations, c'est-à-dire que deux concentrations sont représentées, cependant une des deux concentrations est largement plus représentée. Nous observons également une grande discontinuité entre les deux concentrations. Sur l'histogramme de répartition la bimodalité se traduit par la présence de deux pics, et la grande discontinuité entre les deux concentrations se traduit par une grande séparation entre ces deux pics. De plus, la bimodalité est d'autant plus prononcée que la convexité de l'isotherme est plus marquée et que sa courbe s'approche plus vite de l'axe des c_s lorsque c_l diminue.

Pour le cas $A = 1$, nous n'avons pas de bimodalité mais plus de concentrations sont représentées, et sur les histogrammes des concentrations nous observons le démarquage des pics les uns des autres lorsque la convexité est plus marquée.

Pour les isothermes concaves, nous avons commenté les résultats seulement pour le cas $A = 0.1$. Les courbes de concentrations dans le solide, présentent également une bimodalité mais différente du cas précédent : les deux concentrations sont représentées de façon plus équitable sur la profondeur de la chambre et leurs valeurs sont moins éloignées l'une de l'autre.

Pour les isothermes avec changement de concavité, les courbes de c_s^f présentent aussi une bimodalité et plus le point d'inflexion descend dans l'axe des c_l plus les valeurs des deux concentrations les plus représentées s'éloignent l'une de l'autre et moins elles sont représentées de façon équitable.

Le raisonnement graphique que nous avons mis au point dans cette section et que l'on pratique directement sur les courbes des isothermes permet de prévoir les valeurs exactes des concentrations que l'on trouve dans une chambre magmatique **uniquement lorsque la solidification est lente** ($A \leq 0.1$) **et lorsque l'équilibrage chimique est quasi-instantané** ($D_a \geq 10$). Ce qui est **déterminant** sur les résultats des concentrations finales c_s^f c'est la **position de la courbe de l'isotherme relativement à la première bissectrice** du repère $(0, c_s, c_l)$. En effet, le raisonnement se base sur la compétition entre le phénomène de solidification et celui de l'équilibrage chimique : solidification du liquide qui nous ramène à la bissectrice (tendance à vérifier $c_s = c_l$), et

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

équilibre chimique qui nous ramène à la courbe isotherme.

L'exemple que nous avons exposé dans la section 11.3.4.d montre que ce raisonnement graphique reste valable pour n'importe quelle condition initiale c_i^0 et que les concentrations finales dans le solide dépendent de celle-ci.

Pour des valeurs de D_a inférieures à 10 (A toujours égal à 0.1), une tendance qualitative des courbes des concentrations en fin de processus peut être donnée en se basant sur les courbes trouvées grâce au raisonnement graphique pour $D_a = 100$.

11.4. CARTES DE BIMODALITÉ

11.4 Cartes de bimodalité

Nous nous intéressons à dégager les cas où on obtient des discontinuités de composition chimique, en particulier les bimodalités de composition, cas notamment observé dans les roches volcaniques d'une même province, appelé phénomène de "*Daly gap*" (Daly [1910]).

Nous nous sommes souvent restreints dans le présent chapitre, pour la représentation des résultats, à des valeurs particulières de A et D_a , ces restrictions ont été effectuées afin de faire apparaître les cas les plus intéressants : les cas où la solidification n'est pas trop rapide (pour A) et pour lesquels les effets de l'équilibrage chimique sont plus perceptibles (pour D_a). Nous avons toutefois toujours effectué les calculs pour toutes les valeurs de A (discrètes entre 0.01 ou 0.1 et 10) et D_a (entre 0.01 et 100). Une façon de récapituler les résultats pour les tout l'intervalle de valeurs de ces deux paramètres est de tracer une carte qui fait la synthèse de ces résultats du point de vue de la bimodalité de répartition des concentrations.

Dans la section 11.4.1, nous définissons un *critère de bimodalité*, ce qui nous permet d'obtenir un *degré de bimodalité* pour chacune des combinaisons (A, D_a) et de représenter ainsi une carte de bimodalité dans un repère ayant pour axes ces deux paramètres. Ce degré de bimodalité ne dépend pas seulement des paramètres A et D_a mais aussi du choix que l'on fait des deux fonctions sources ; on obtient alors une carte de bimodalité pour chaque choix des fonctions $q_s(x)$ et $g(c_s)$. Ces cartes permettent de récapituler, du point de vue de la distribution des concentrations, les résultats de simulation pour A et D_a variant respectivement dans les intervalles $[0.01, 10]$ et $[0.01, 100]$.

Ensuite, dans la section 11.4.2, nous affichons les cartes de bimodalité pour tous les choix de combinaisons $(q_s(x), g(c_s))$ sur lesquelles nous nous sommes penché dans le présent chapitre (sections 11.1, 11.2 et 11.3) et pour lesquels les conditions initiales sont $p_s^0 = 0$ et $c_l^0 = 0.8$.

11.4.1 Définition d'un critère de bimodalité

Afin de visualiser la bimodalité en fonction des paramètres A et D_a , nous définissons un **critère de bimodalité** : pour une courbe de concentrations finale dans le solide c_s^f ou encore en considérant l'histogramme de répartition des concentrations (par exemple figures 11.76a et b), nous effectuons une classification des concentrations en 2 classes C_1 et C_2 par une méthode classique minimisant la variance intra-classe. Nous pouvons proposer alors comme degré de bimodalité un réel faisant intervenir les variances intra-classes V_1 et V_2 et la distance entre les centres de chaque classe. Ce qui donne :

$$\text{Degré de bimodalité} = |C_1 - C_2| \cdot (\exp(-V_1) + \exp(-V_2)) \quad (11.1)$$

11.4.2 Visualisation des cartes de bimodalité

Grâce au critère de bimodalité que nous venons de définir, nous arrivons à tracer les cartes de bimodalité correspondant à chaque combinaison des fonctions sources $q_s(x)$ et $g(c_s)$, dans un repère d'axes $\log(A)$ et $\log(B)$ (log en base 10).

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

Nous commençons d'abord par représenter ces cartes pour la fonction isotherme $c_l = g(c_s) = c_s^2$ et pour différents profils de vitesse de réaction ($q_s(x)$ constante, linéaire décroissante, convexe et non linéaire décroissante) sur les figures 11.92 à 11.82. Puis pour l'exemple de $q_s(x)$ non linéaire décroissante, nous représentons les cartes correspondant à différents profils d'isothermes $g(c_s)$ (convexes, concaves, ou avec changement de concavité) sur les figures 11.83 à 11.91.

Pour les premières cartes, nous avons pris A variant entre 0.01 et 10 ($\log(A)$ variant entre -2 et 1), puis pour les cartes suivantes, vu que le comportement pour $A = 0.01$ est le même que pour $A = 0.1$ (sauf pour le cas $q_s(x) = 1$), nous avons pris alors A variant entre 0.1 et 10 ($\log(A)$ variant entre -1 et 1).

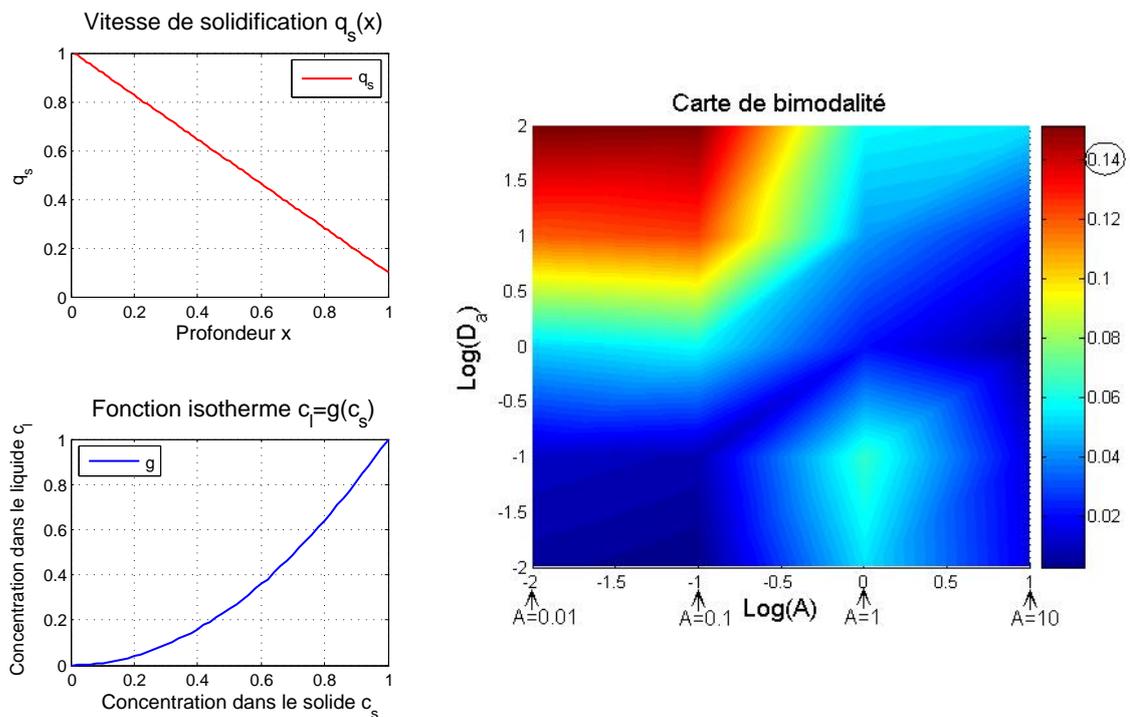


FIGURE 11.80 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^2$.

11.4. CARTES DE BIMODALITÉ

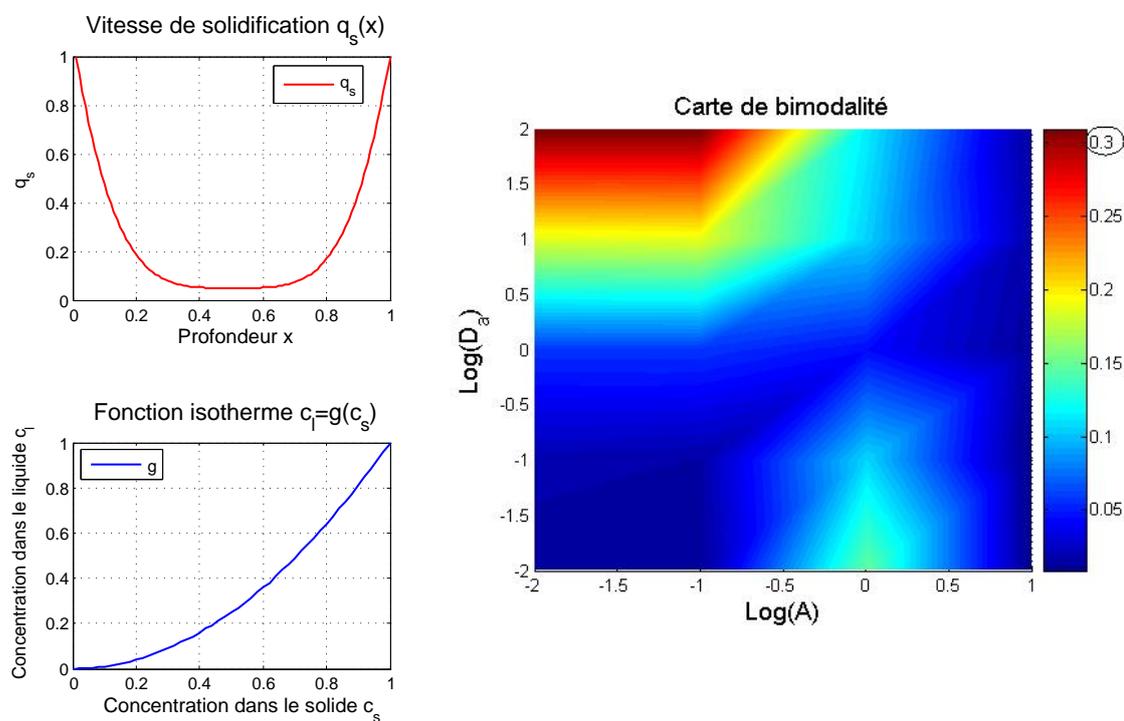


FIGURE 11.81 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ convexe, $g(c_s) = c_s^2$.

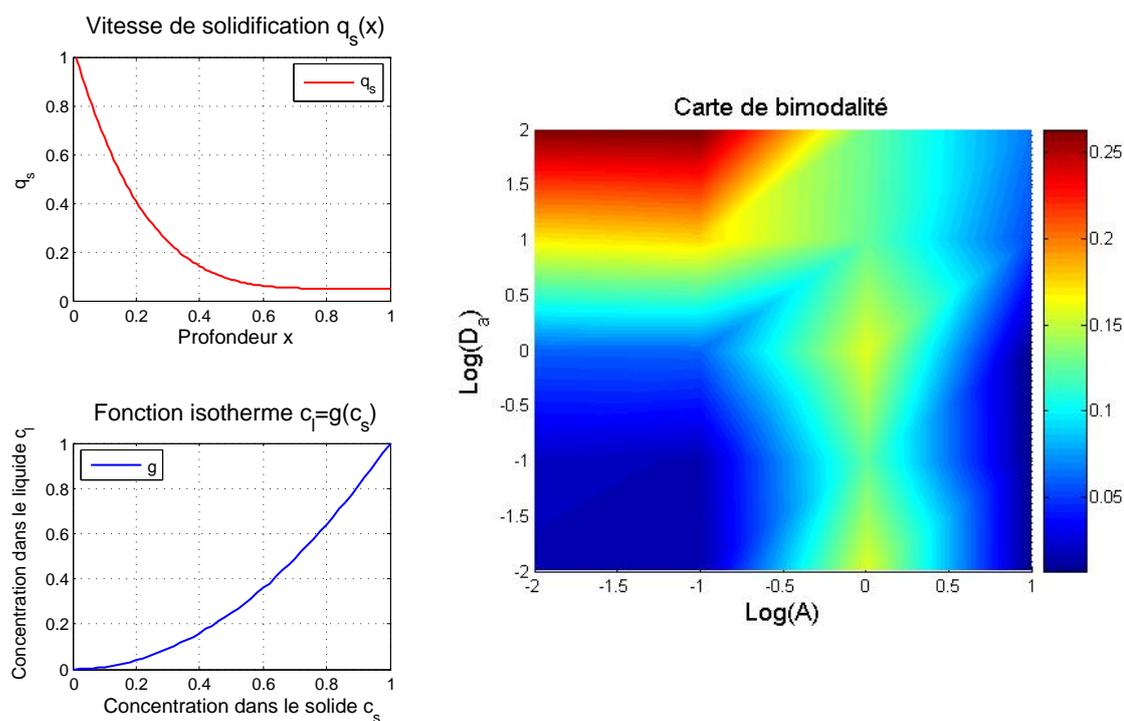


FIGURE 11.82 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^2$.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

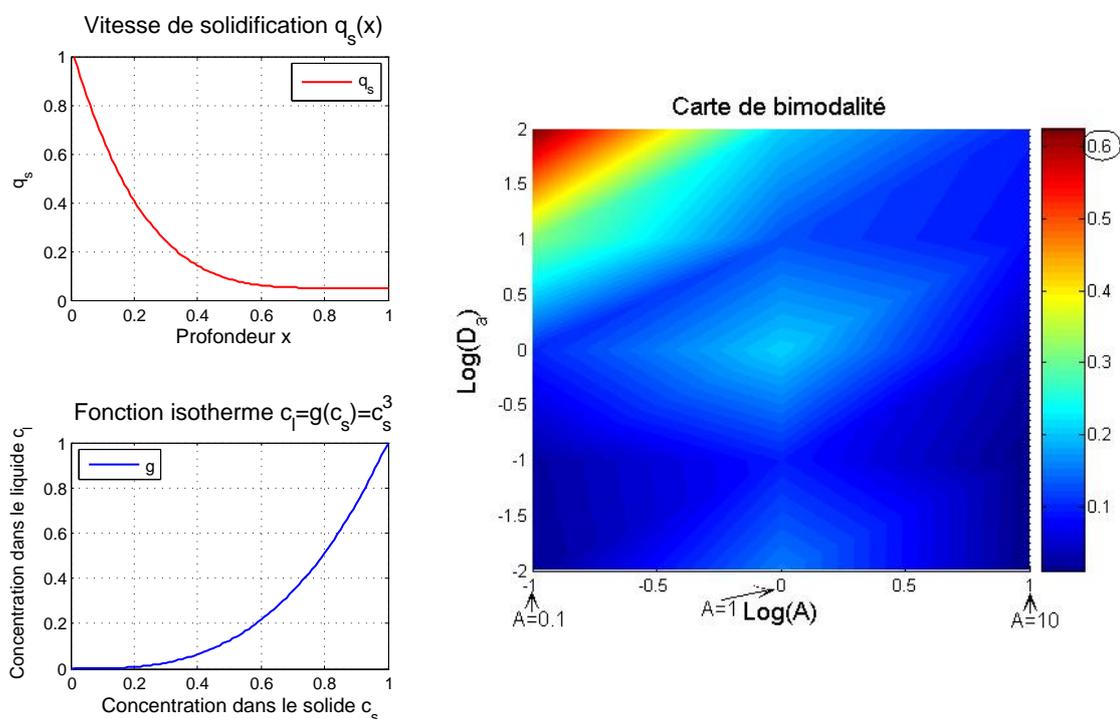


FIGURE 11.83 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^3$.

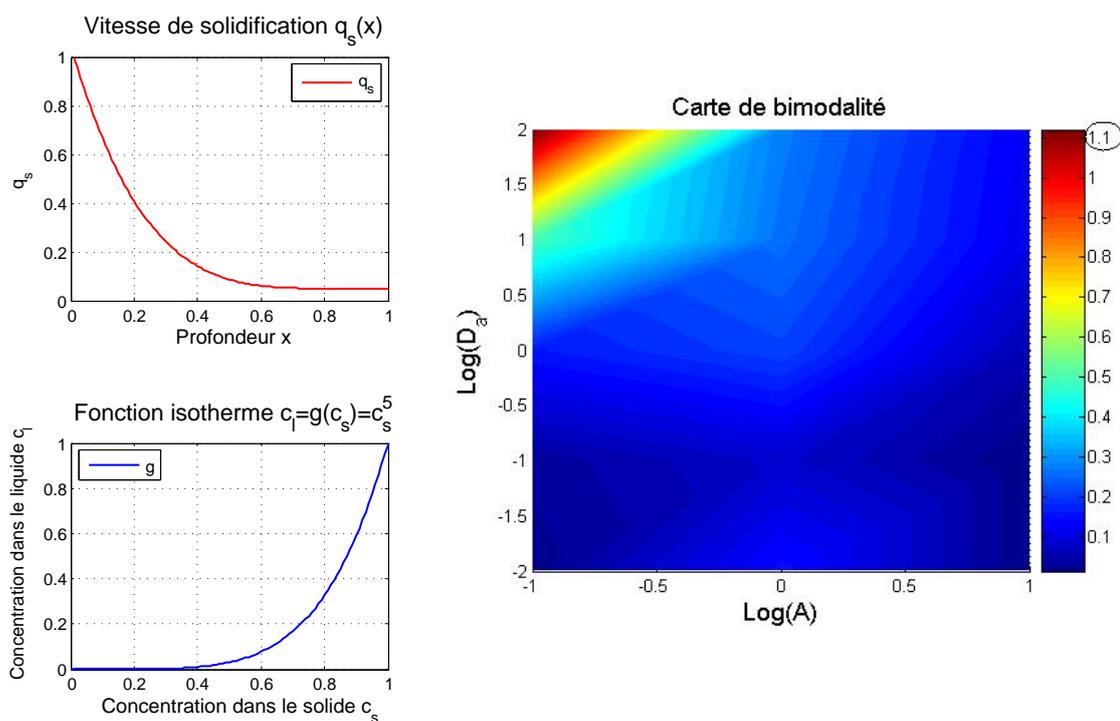


FIGURE 11.84 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^5$.

11.4. CARTES DE BIMODALITÉ

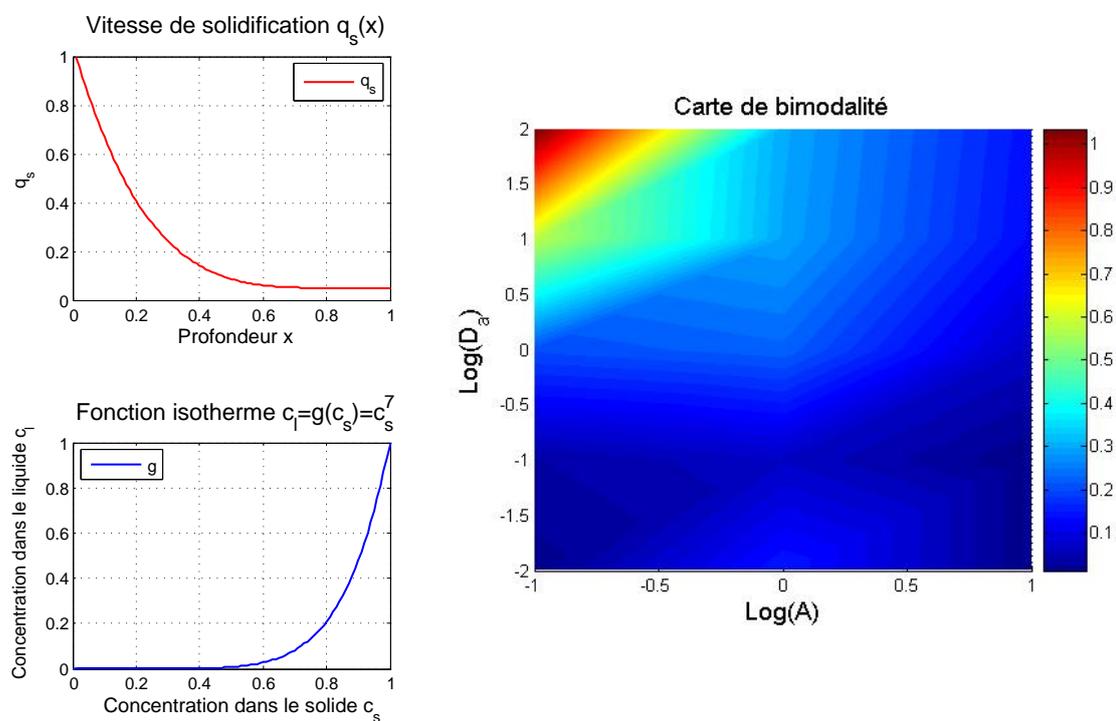


FIGURE 11.85 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s) = c_s^7$.

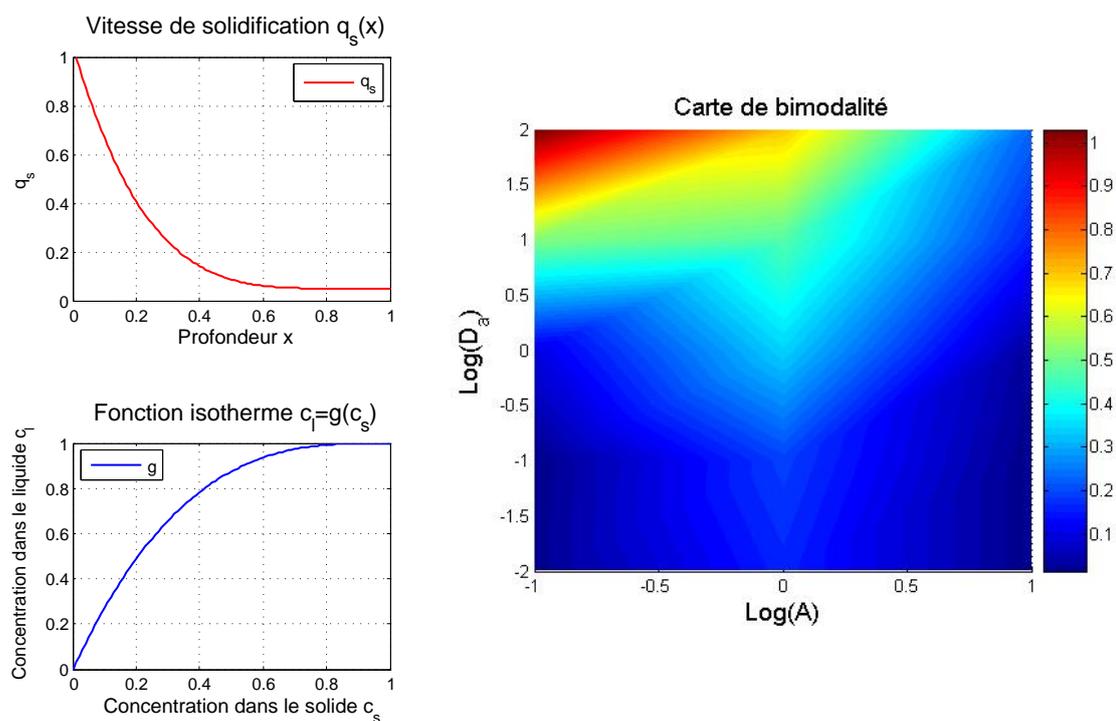


FIGURE 11.86 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, première $g(c_s)$ concave.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

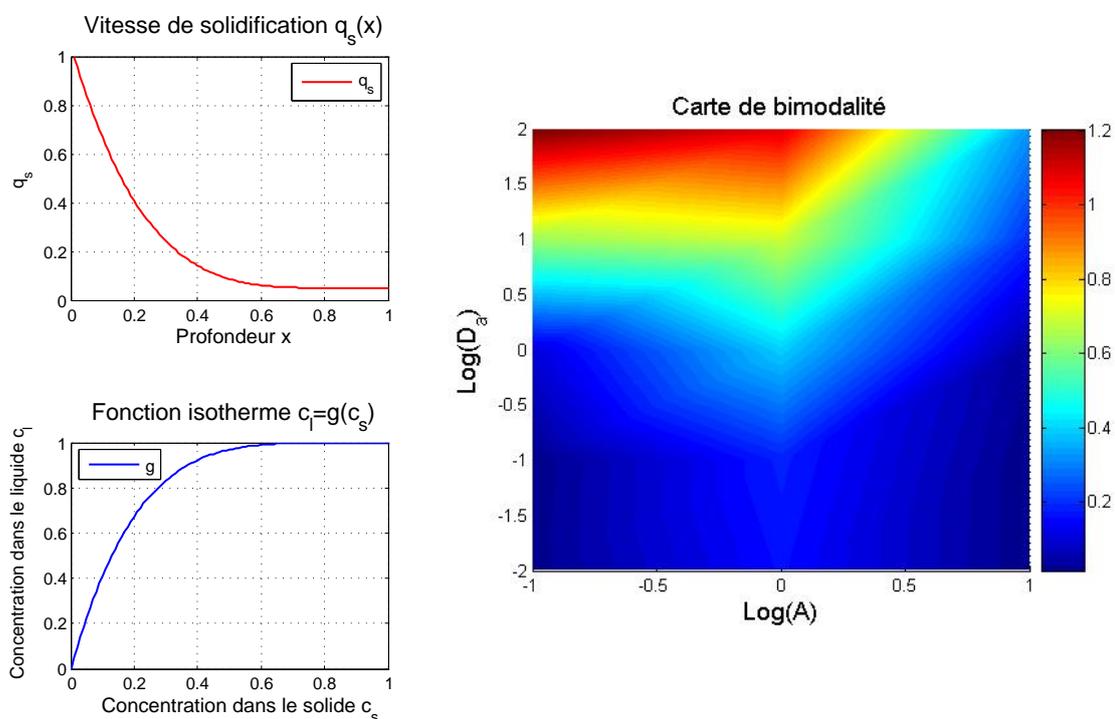


FIGURE 11.87 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, deuxième $g(c_s)$ concave.

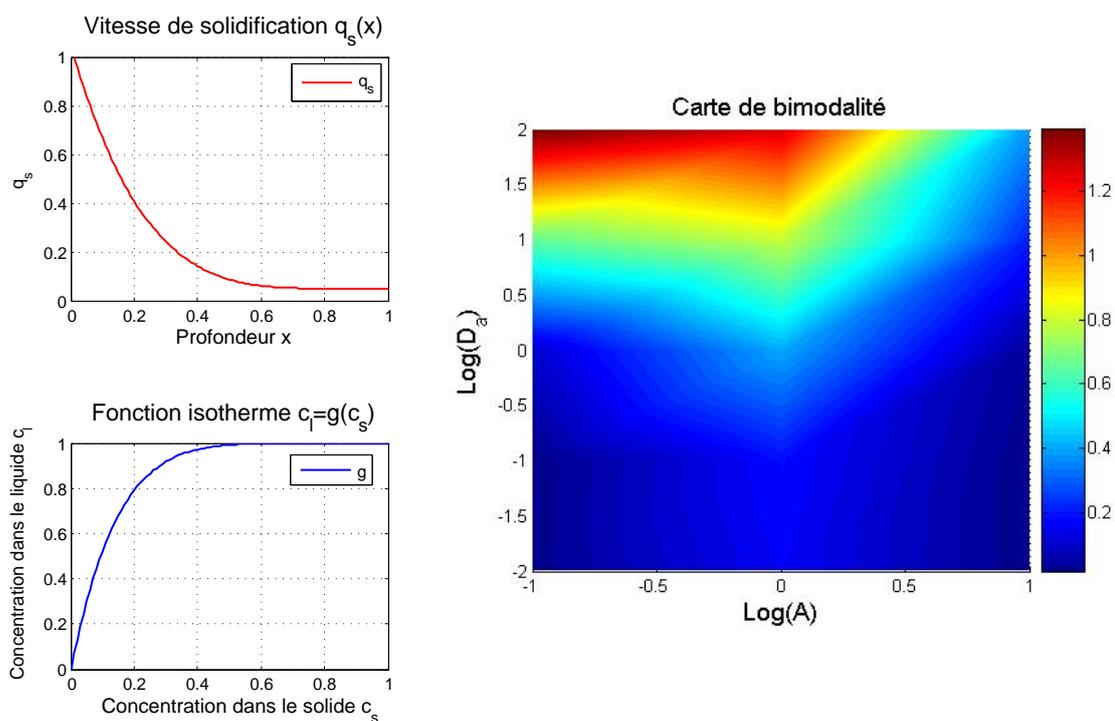


FIGURE 11.88 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, troisième $g(c_s)$ concave.

11.4. CARTES DE BIMODALITÉ

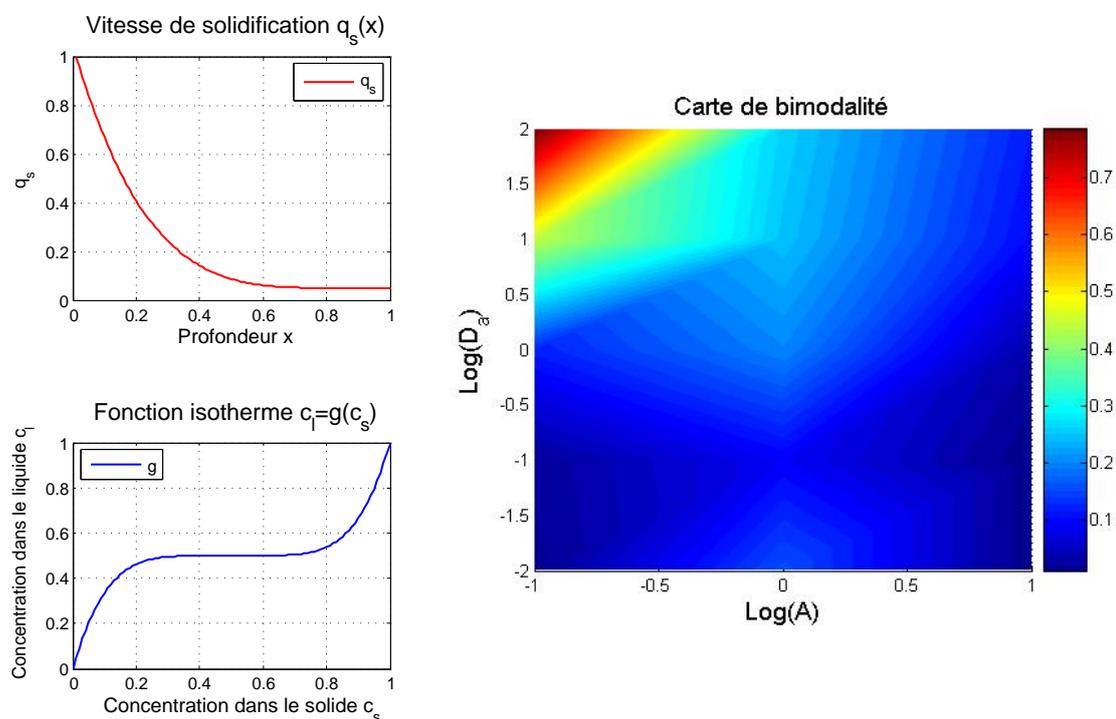


FIGURE 11.89 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion centrée.

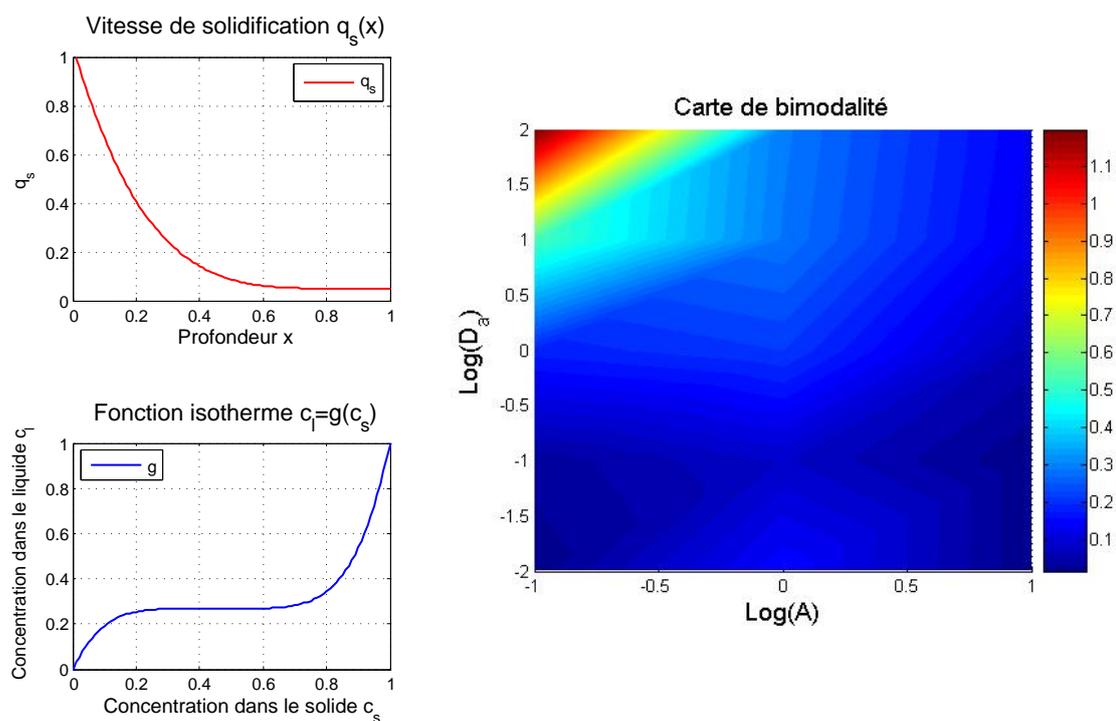


FIGURE 11.90 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion en bas.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

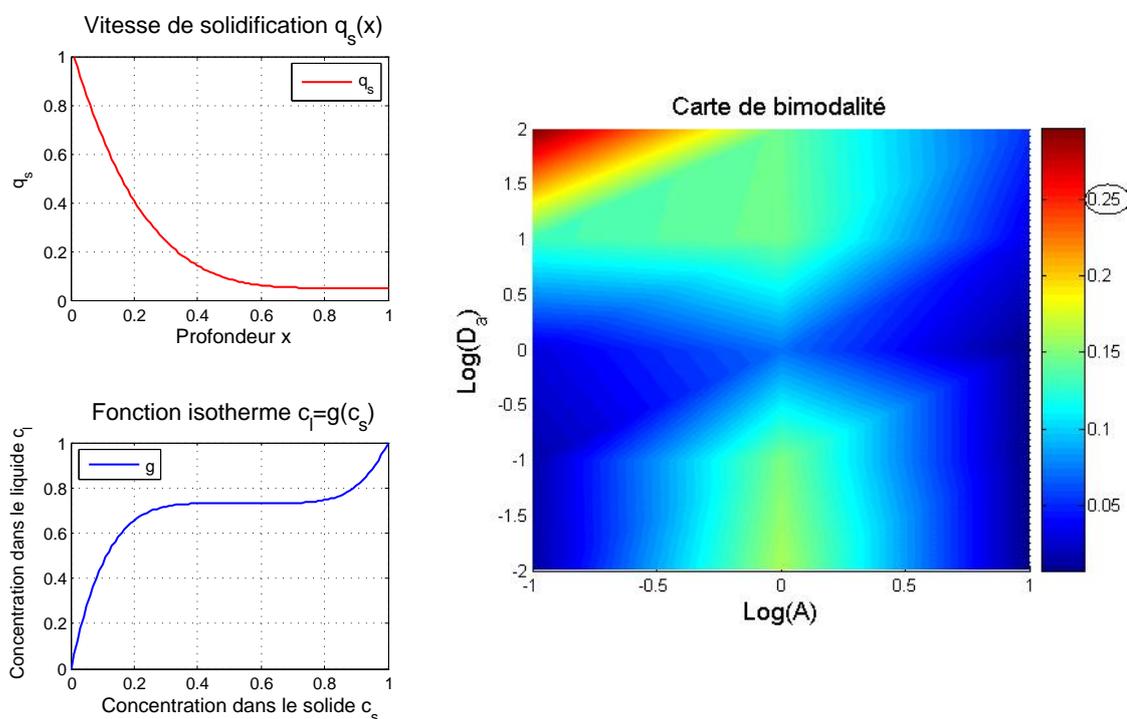


FIGURE 11.91 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion en haut.

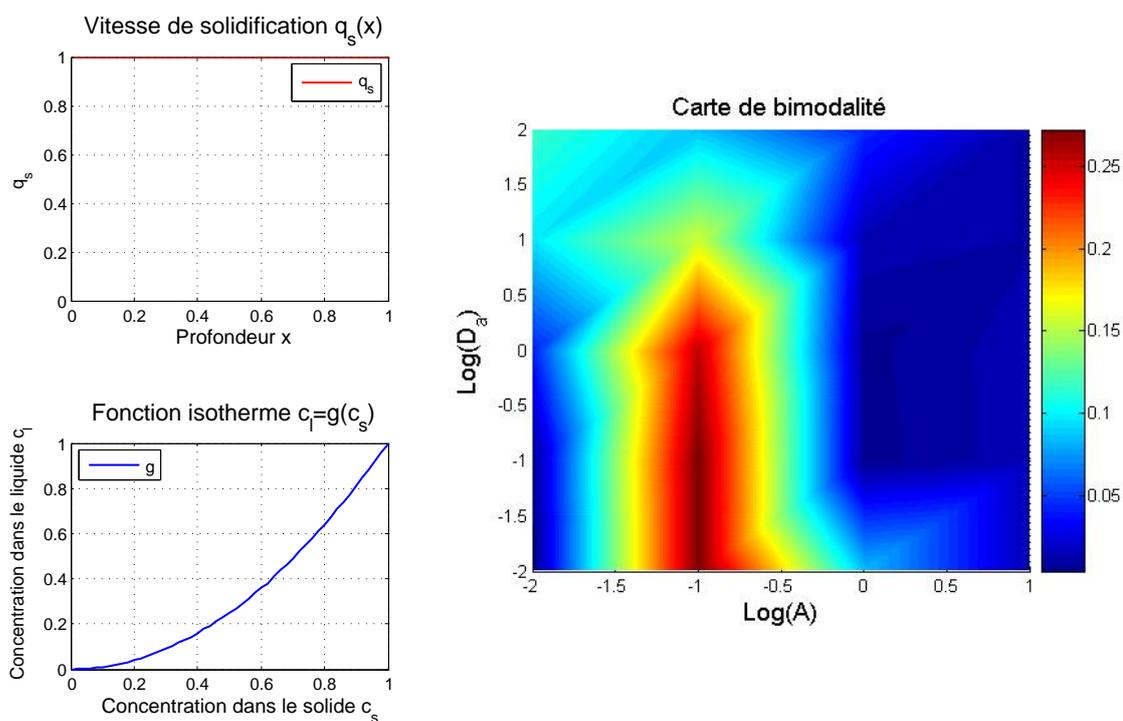


FIGURE 11.92 – Carte de bimodalité. — $q_s(x) = 1$, $g(c_s) = c_s^2$.

11.4. CARTES DE BIMODALITÉ

Sur la figure suivante, nous traçons la carte de bimodalité avec comme condition initiale toujours une chambre magmatique entièrement liquide mais dans laquelle $c_l^0 = 0.2$ comme dans l'exemple de la section 11.3.4.d :

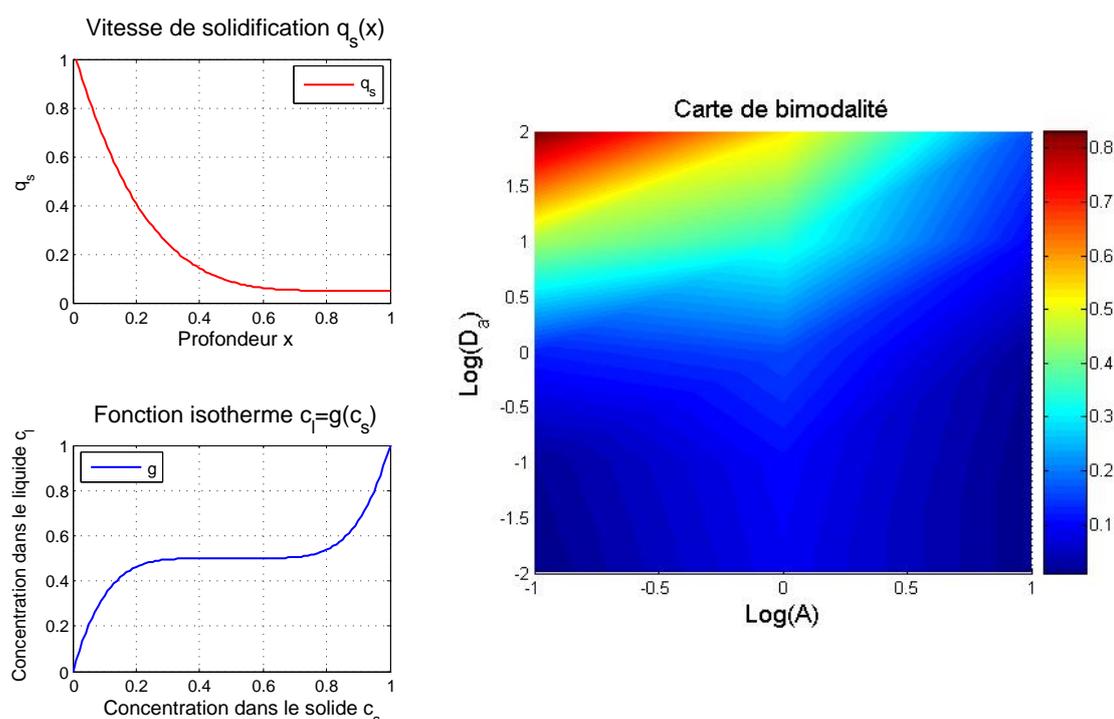


FIGURE 11.93 – Carte de bimodalité. — $q_s(x)$ non linéaire décroissante, $g(c_s)$: inflexion en haut, $c_l^0 = 0.2$.

Nous avons d'abord représenté les cartes de bimodalité pour la fonction isotherme $c_l = g(c_s) = c_s^2$ et pour différents profils de vitesse de solidification $q_s(x)$.

Pour ces figures, nous observons que pour $q_s(x)$ non constante, la **bimodalité s'observe pour** les valeurs faibles de A ($A \leq 0.1$) et les valeurs fortes de D_a ($D_a \geq 10$), autrement dit, pour les **faibles vitesses de solidification** (rapportées à la vitesse de transport) et les **fortes vitesses de réaction** (rapportées à la vitesse de transport). Le degré de bimodalité maximum est atteint pour $A = 0.01$ et $D_a = 100$, il varie cependant d'un profil de q_s à au autre, il est d'environ 0.14 pour $q_s(x)$ linéaire décroissante, de 0.25 pour q_s non linéaire décroissante et de 0.3 pour q_s convexe. Pour l'exemple où $q_s(x) = \text{constante} = 1$ (figure 11.92), la carte présente un cas particulier où la bimodalité est la plus forte lorsque $A = 0.1$ et $D_a \in [0.01, 10]$.

Ensuite, nous avons représenté les cartes de bimodalité pour $q_s(x)$ non linéaire décroissante et pour différents profils d'isothermes $g(c_s)$, en se passant pour le paramètre A de la valeur 0.01 puisque les résultats sont les mêmes que pour $A = 0.1$.

Pour les fonctions isothermes convexes, les cartes de bimodalité conservent les mêmes zones de forte bimodalité que pour le cas de $g(c_s) = c_s^2$ (tous profils de q_s confondus sauf q_s constante). Les

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

valeurs des degrés de bimodalité augmentent néanmoins, elles passent de 0.25 pour $g(c_s) = c_s^2$ à 0.6 pour $g(c_s) = c_s^3$, 1.1 pour $g(c_s) = c_s^5$ ou 1 pour $g(c_s) = c_s^7$.

Pour les isothermes concaves, la forte bimodalité s'observe cette fois pour $A \leq 1$ et $D_a \geq 10$, avec des degrés maximums atteints pour $A = 0.1$ et $D_a = 100$ variant entre 1 et 1.2.

Pour les isothermes présentant un point d'inflexion, les zones de bimodalité sont les mêmes que pour les isothermes convexes, ce qui est normal puisque pour $c_l^0 = 0.8$, c'est uniquement la partie convexe de l'isotherme qui intervient lorsque l'on fait le raisonnement graphique que nous avons développé pour prévoir les concentrations finales dans le solide c_s^f (cf. figures 11.71, 11.73 et 11.75). Pour $c_l^0 = 0.8$, le degré de bimodalité est le plus fort et atteint 1.1 lorsque le point d'inflexion est décalé vers le bas (on se rapproche plus de l'axe des c_s lorsque c_l diminue) et diminue lorsque le point d'inflexion remonte, il atteint 0.7 maximum lorsque l'inflexion est centrée à $c_l = 0.5$ et 0.25 maximum lorsqu'elle est décalée vers le haut.

Dans le dernier exemple pour lequel nous avons pris une concentration initiale différente, $c_l^0 = 0.2$, c'est la partie concave de l'isotherme qui intervient dans la prévision graphique des concentrations finales (cf. figure 11.77), les zones de forte bimodalité sont donc les mêmes que pour les isothermes convexes, c'est-à-dire pour $A \leq 1$ et $D_a \geq 10$.

11.5. INFLUENCE DES SITUATIONS GÉOLOGIQUES (PROFONDEUR DE LA CHAMBRE DANS LA CROÛTE ET NATURE BASIQUE, ACIDE OU INTERMÉDIAIRE DES MAGMAS) SUR LES PARAMÈTRES A ET D_A

11.5 Influence des situations géologiques (profondeur de la chambre dans la croûte et nature basique, acide ou intermédiaire des magmas) sur les paramètres A et D_a

Les simulations faites dans le présent chapitre s'appliquent à différentes situations géologiques possibles : profondeur de la chambre magmatique dans la croûte terrestre et nature des magmas (acides, basiques ou intermédiaires). Ces situations peuvent se caractériser dans le cadre de notre étude par une combinaison des données d'entrée de la simulation, en particulier les paramètres A (rapport $\frac{v_{solidification}}{v_{advection}}$) et D_a (rapport $\frac{v_{reaction}}{v_{advection}}$).

Ces conditions une fois fixées peuvent renseigner les différents paramètres de notre modèle, par exemple :

- on peut supposer que la *nature du magma*, acide ou basique, va jouer sur la vitesse de réactions chimiques dans le paramètre k_c , ainsi que sur la valeur de la vitesse de Stokes U_s .
En effet, plus un magma est basique, moins il est visqueux (cf. figure 3.4), d'où la sédimentation des cristaux est facilitée, d'où la vitesse U_s augmente ; de même, la diffusion des éléments chimiques est plus facilitée, d'où une constante cinétique k_c qui croît. La nature du magma joue aussi sur la fonction isotherme g selon le constituant chimique considéré, sachant que les minéraux qui peuvent précipiter sont fonction de la composition du magma.
- selon la *profondeur de la chambre magmatique* dans la croûte, les conditions de pression et de température varient, influençant ainsi le choix du profil de la fonction vitesse de solidification adimensionnée q_s , la valeur de q_{s0} (valeur maximale de la vitesse de solidification), la taille des cristaux qui se forment a , la vitesse de Stokes U_s ainsi que la vitesse de l'équilibre chimique k_c .
En effet, plus la chambre magmatique ou le conduit est profond, plus on s'enfonce dans la croûte terrestre et la température augmente, la solidification est alors réduite, d'où q_{s0} diminue ; les cristaux ont eux le temps de se former et sont de plus grande taille (a plus élevé), ce qui augmente la valeur de la vitesse de Stokes U_s qui est facteur de a^2 (cf. loi de Stokes (3.7)). De même, la température augmentant avec la profondeur, les réactions chimiques sont alors accélérées, d'où k_c augmente.

Cependant la grandeur k_c n'est pas bien corrélée avec la profondeur, ni avec la composition du magma, nous prendrons une valeur typique de $k_c = 10^{-13} \text{ m.s}^{-1}$ (cf. tableau 6.4).

De même pour L , les variations de ce paramètre ne sont pas bien corrélées avec la profondeur, nous prenons la valeur typique $L = 1000 \text{ m}$ (cf. tableau 6.4).

Plusieurs constantes peuvent donc varier. En se basant sur le tableau récapitulatif 6.4, nous schématisons les variations de ces constantes par la figure 11.94. Ces constantes se retrouvent dans les deux paramètres clés A et D_a qui sont deux paramètres d'entrée très importants de notre modèle (en plus des fonctions q_s et g et des conditions initiales), ils varient alors avec la variation des différentes constantes. Ces deux paramètres, nous le rappelons, s'écrivent :

$$\frac{v_{solidification}}{v_{advection}} : A = \frac{L \cdot q_{s0}}{U_s} \quad \text{et} \quad \frac{v_{reaction}}{v_{advection}} : D_a = 3 \cdot \frac{L}{a} \cdot \frac{k_c}{U_s}$$

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

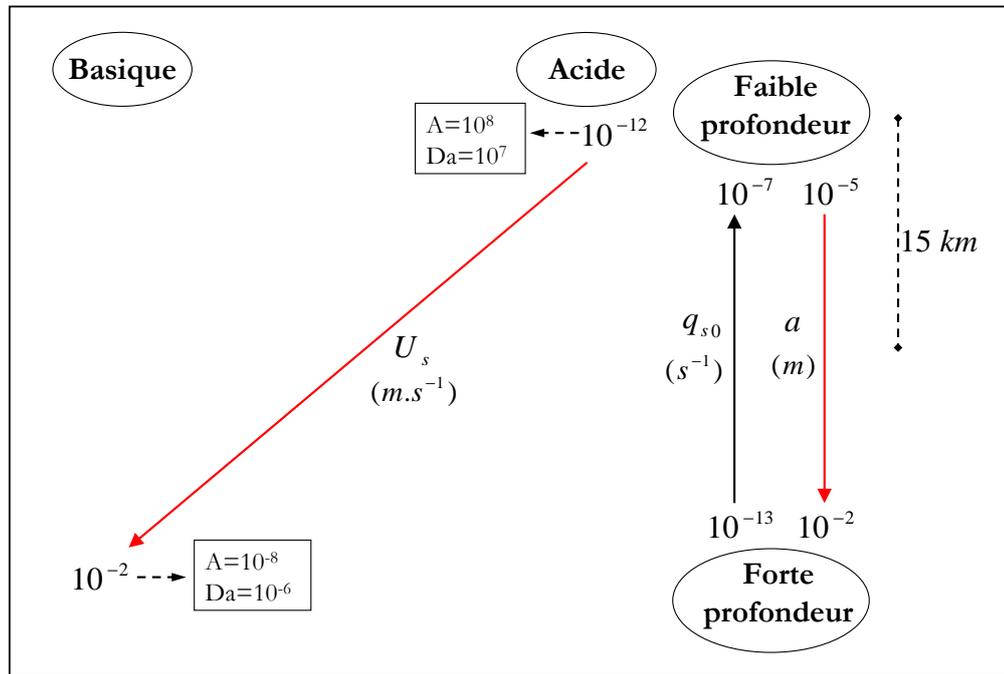


FIGURE 11.94 – Variations des paramètres a , q_{s0} et U_s avec les conditions géologiques : nature du magma et profondeur de la chambre dans la croûte terrestre. Les valeurs de A et D_a en sont déduites pour deux cas extrêmes. — Les valeurs de L et k_c sont fixées ici et prises égales à : $L = 1000$ m et $k_c = 10^{-13}$ m.s $^{-1}$.

Nous obtenons deux valeurs extrêmes pour A et D_a pour deux situations différentes : à faible profondeur pour un magma acide et à forte profondeur pour un magma basique.

Pour avoir les valeurs de A et D_a pour les combinaisons (composition acide, forte profondeur) et (composition basique, faible profondeur), nous raisonnons sur les **variations de U_s avec la profondeur** : nous considérons que **cette variation est due à la variation de la taille des cristaux**, U_s étant facteur de a^2 (loi de Stokes). Par exemple, une variation d'un facteur pour a entraîne une variation d'un facteur 100 pour U_s , ceci est vérifié sur les ordres de grandeur fournies par [Wager and Brown \[1968\]](#) (cf. section 3.3.3). D'où :

- pour la composition acide, en passant d'une faible profondeur à une forte profondeur, a varie d'un facteur 10^3 (en passant de 10^{-5} à 10^{-2} m), d'où U_s varie d'un facteur 10^6 et passe de 10^{-12} à 10^{-6} m.s $^{-1}$. En prenant bien sûr $q_{s0} = 10^{-13}$ s $^{-1}$, nous obtenons : $A = 10^{-4}$ et $D_a = 10^{-2}$.
- pour la composition basique, en passant d'une forte à une faible profondeur, a varie d'un facteur 10^{-3} , U_s varie donc d'un facteur 10^{-6} , d'où $U_s = 10^{-8}$ m.s $^{-1}$. En prenant $q_{s0} = 10^{-7}$ s $^{-1}$, nous obtenons : $A = 10^4$ et $D_a = 10^3$.

Pour les moyennes profondeurs, nous prenons $a = 5.10^{-4}$ m et $q_{s0} = 5.10^{-12}$ s $^{-1}$.

Nous essayons maintenant de donner les valeurs de A et D_a pour les compositions chimiques intermédiaires. Nous raisonnons alors sur la **variation de U_s avec la nature du magma** : la variation de U_s est très significative entre les magmas Acides et basiques (facteur 10^{-10}), **en échelle**

11.5. INFLUENCE DES SITUATIONS GÉOLOGIQUES (PROFONDEUR DE LA CHAMBRE DANS LA CROÛTE ET NATURE BASIQUE, ACIDE OU INTERMÉDIAIRE DES MAGMAS) SUR LES PARAMÈTRES A ET D_A

logarithmique ces variations sont linéaires avec la composition chimique (cf. figure 3.4). A et D_a étant directement ou indirectement proportionnels à U_s , nous pouvons déduire leurs variations linéaires à l'échelle logarithmique en fonction de la variation de U_s avec l'acidité du magma.

En tenant compte de ces considérations, nous pouvons dresser le tableau suivant :

	Composition basique	Composition intermédiaire	Composition acide
Faible profondeur	$A = 10^4$ $D_a = 10^3$	$A = 10^6$ $D_a = 10^5$	$A = 10^8$ $D_a = 10^7$
Moyenne profondeur	$A = 4,10^{-3}$ $D_a = 2,4 \cdot 10^{-2}$	$A = 0,4$ $D_a = 2,4$	$A = 40$ $D_a = 2,4 \cdot 10^2$
Forte profondeur	$A = 10^{-8}$ $D_a = 10^{-6}$	$A = 10^{-6}$ $D_a = 10^{-4}$	$A = 10^{-4}$ $D_a = 10^{-2}$

TABLE 11.1 – Valeurs de A et D_a calculées en fonction de la profondeur de la chambre magmatique dans la croûte terrestre et de la nature du magma.

Remarque : pour la combinaison (composition intermédiaire, moyenne profondeur), nous pouvons utiliser les valeurs pour les compositions intermédiaires, entre forte et moyenne profondeur ou utiliser les valeurs pour les moyennes profondeurs, entre compositions acide et basique, les résultats sur A et D_a sont presque identiques.

Commentaire

Le tableau 11.5 que nous avons dressé donne des indications générales pour les valeurs de A et D_a , du fait des nombreuses approximations que nous avons faites, et des fourchettes de valeurs pour les différents paramètres. Il conviendrait pour appliquer notre modèle à un exemple précis de fournir les valeurs exactes des différents paramètres entrant dans l'écriture des nombres sans dimension A et D_a .

Dans la section 11.4, nous avons mis en évidence les grandes classes de situations où on peut avoir une bimodalité des concentrations, il s'agit des cas où on a à la fois A faible ($A \leq 0.1$) et D_a fort ($D_a \geq 10$). Dans le tableau 11.5, ces valeurs ne sont pas représentées de façon exacte, cependant elles sont approchées pour des **compositions chimiques** plutôt **intermédiaires et à moyenne profondeur**. Ce résultat est à discuter et comparer avec des études de terrain.

Lors de nos simulations, les compositions chimiques ne restent pas les mêmes, on peut en effet passer d'un magma basaltique à un magma acide (par cristallisation fractionnée). Si les variations de l'acidité restent faible, alors on peut garder des valeurs constantes de A et D_a . Si par contre l'acidité varie beaucoup au cours de la différenciation des magmas (par exemple les concentrations sont telles qu'on balaie les compositions acides et basiques), alors pour que notre modèle reste valable, il faudrait en toute rigueur prendre des paramètres A et D_a **variables avec la composition du magma**.

11.6 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre effectué des expériences de simulation en partant dans la plupart des cas d'une chambre magmatique initialement remplie exclusivement de liquide. Nous avons testé chacune des données d'entrée du problème à savoir les fonctions sources $q_s(x)$ et $g(c_s)$ et les deux paramètres A et D_a .

Les nombreux résultats que nous avons obtenus permettent de dresser les conclusions suivantes :

- Les concentrations finales dans la chambre magmatique en fin de processus, lorsqu'elle est entièrement solidifiée, dépendent fortement des valeurs des deux paramètres A et D_a : pour $A \leq 0.1$, selon les valeurs de D_a on observe une répartition unimodale, uniforme ou bimodale des concentrations. Pour $A \geq 1$, la solidification est rapide et quelque soit la valeur de D_a , les résultats ne varient pas beaucoup, on observe des concentrations finales c_s^f égales dans la majeure partie de la chambre magmatique à la concentration initiale dans le liquide c_l^0 . Les valeurs des deux paramètres pour lesquelles nous observons des discontinuités marquées dans les concentrations sont celles vérifiant $A \leq 0.1$ et $D_a \geq 10$.
- Les concentrations dépendent également fortement de la forme de l'isotherme $c_l = g(c_s)$. Lorsque les deux paramètres vérifient $A \leq 0.1$ et $D_a \geq 10$, nous observons des bimodalités dans la répartition des concentrations : deux concentrations sont privilégiées dans la colonne magmatique. Les concentrations correspondantes peuvent être prévues grâce à un raisonnement graphique que nous avons développé dans la section 11.3, le résultat obtenu dépend de la position relative de la courbe de l'isotherme par rapport à la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$. Pour des valeurs de D_a inférieures à 10 (A toujours < 0.1), nous pouvons prévoir, qualitativement seulement, la courbe des concentrations en fin de processus en se basant les courbes obtenues pour $D_a \geq 10$.
- Les concentrations dépendent beaucoup moins de la fonction vitesse de solidification $q_s(x)$.
- Les cartes de bimodalité que nous avons tracées dans la section 11.4 confirment que la bimodalité s'observe bien pour les faibles valeurs de la vitesse de solidification rapportée à la vitesse de déplacement ($A \leq 0.1$ ou $A \leq 1$ selon l'isotherme g) et pour les fortes valeurs de la vitesse de réaction chimique rapportée à la vitesse de déplacement ($D_a \geq 10$). Le degré de bimodalité lui, peut varier très significativement lorsque les profils de q_s et de g varient.

Nous n'avons bien sûr pas exploré toutes les possibilités de résultats que peuvent fournir les simulations, ces possibilités sont très nombreuses et dépendent des combinaisons que l'on prend pour les différentes données d'entrée du problème (conditions initiales, fonctions sources et paramètres A et D_a). Les expériences effectuées permettent néanmoins d'avoir une vision globale des différentes situations pouvant être rencontrées. Les techniques d'interprétation et d'analyse des résultats que nous avons présentées ici constituent une bonne base pour toute autre expérience numérique.

Enfin, dans la section 11.5, nous avons dressé un tableau des valeurs de A et D_a en fonction des différentes situations géologiques. D'après ce tableau, une chambre magmatique se trouvant à moyenne profondeur et dont le magma est plutôt intermédiaire semble présenter un exemple favorable à la production de roches magmatiques dans lesquelles on observerait une bimodalité de la répartition des concentrations.

Conclusion générale

**CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES
SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)**

Conclusion générale

La simulation numérique des phénomènes de cristallisation fractionnée et du transport réactif dans les milieux magmatiques est de plus en plus utilisée pour décrire de façon rigoureuse les évolutions des concentrations des éléments chimiques. Des modèles chromatographiques ont notamment été développés pour suivre l'évolution des éléments chimiques dans les milieux poreux (Korzhinskii [1970]; Guy [1984]; [1989]; [1993]; Godard et al. [1995]; Hauri [1997]; Spiegelman et al. [2001]; Boudreau [2003]).

Nous nous sommes inspirés de ces modèles pour construire un nouveau système d'équations couplant les phénomènes de cristallisation fractionnée au transport réactif magma/solide dans une chambre magmatique fermée. Nous avons ensuite élaboré un code de calcul en Fortran 90 pour simuler l'évolution de nos inconnues, à savoir la proportion de solide $p_s(x, t)$ et les concentrations en constituants chimiques dans le solide $c_s(x, t)$ et dans le liquide magmatique $c_l(x, t)$. Nous nous sommes intéressés surtout aux éléments majeurs, notre modèle reste cependant valable pour les éléments en trace en considérant des isothermes linéaires (correspondant à un coefficient de partage constant entre le liquide et le solide). Pour ce faire, nous avons modélisée la chambre magmatique par une colonne verticale dans laquelle le magma initial se solidifie sous forme de cristaux qui sédiementent en direction du fond tout en réagissant avec le liquide qu'ils rencontrent au cours de leur descente.

Les termes sources de nos équations, qui sont aussi les moteurs des variations des trois inconnues sont la vitesse de solidification, la vitesse de transport des solides et liquides et l'expression du déséquilibre chimique entre le solide et le liquide :

- la vitesse de solidification $q_s(x)$, est une fonction que nous avons prise indépendante du temps et dont les différents profils ont été choisis en se basant sur des données de la littérature.
- la vitesse de transport des cristaux $v_s(x, t)$ est une loi qui dépend directement de la proportion en solide à chaque point x de la colonne magmatique et à tout instant, elle suit la loi de Richardson and Zaki [1954].
- le déséquilibre chimique est exprimé par un écart à l'équilibre défini par la différence $c_l - g(c_s)$ où g appelée "*isotherme magmatique*", l'équilibre est atteint lorsque cette différence est nulle. Nous avons établi dans le chapitre 5 une loi thermodynamique pour la fonction g pour l'exemple de l'olivine, cependant le raisonnement effectué ne peut être utilisé pour le système fermé considéré dans notre modèle. Nous avons alors choisi des profils de cette fonction en se basant sur des exemples de la littérature où g est une fonction non linéaire mais plutôt convexe, concave ou présente un changement de concavité.

L'adimensionnement des équations aux dérivées partielles (EDPs) décrivant notre modèle, a permis d'en tirer deux paramètres sans dimension A et D_a , qui expriment le rapport de force entre

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

les trois phénomènes de solidification, sédimentation et réaction chimique.

Pour résoudre numériquement les EDPs obtenues, nous avons découpé le problème en deux sous-systèmes : un modèle de cristallisation/sédimentation et un modèle de transport réactif :

- le caractère hyperbolique de l'équation de cristallisation/sédimentation a nécessité le recours aux schémas numériques volumes finis dits à 3 points, nous avons retenu le schéma de Lax-Friedrichs avec viscosité numérique constante égale à 1 (schéma LxF1). Ce schéma légèrement diffusif numériquement présente l'avantage d'être stable et conservatif.
- pour les équations du transport réactif, des schémas décentrés ont suffi pour la résolution numérique. Vu que les mouvements du solide se font en direction du fond, nous avons considéré un schéma décentré amont pour l'équation décrivant l'évolution des concentrations dans le solide c_s . Le liquide se déplaçant dans le sens contraire, nous avons considéré un schéma décentré aval pour l'équation décrivant l'évolution de c_l .

Les équations discrètes ont ensuite été résolues par la méthode de Newton-Raphson (la méthode du point fixe a aussi été programmée mais les résultats qu'elle fournit ont été moins satisfaisants).

Une fois le code de calcul écrit, nous l'avons validé :

- La validation du modèle de cristallisation/sédimentation a été effectuée par confrontation à la méthode des caractéristiques (méthode souvent utilisée pour les problèmes hyperboliques). Des modifications ont été ensuite apportées à ce schéma pour traiter le cas de la frontière mobile, ce front de sédimentation qui se déplace en direction de la surface ; ou encore dans le cas où une zone totalement solidifiée ($p_s = 1$) se trouve au milieu d'un magma contenant encore du liquide.
- Pour le modèle de transport réactif, nous avons dans certains cas simples écrit un algorithme parallèle sur Matlab, ne se basant pas sur les mêmes schémas numériques, auquel nous avons comparé les résultats de simulation. Pour des cas plus complets, la validation a été effectuée uniquement par comparaison à des calculs analytiques simples ou à des considérations purement qualitatives. Des modifications ont été apportées sur les schémas numériques pour les mêmes cas limites rencontrés pour le modèle de cristallisation/sédimentation. Cette étape de validation a demandé une analyse détaillée pour chaque valeur choisie pour A et D_a . Ceci a permis une bonne compréhension de l'influence de ces deux paramètres sur l'évolution des concentrations chimiques.

A partir de là, nous avons effectué une série d'expériences numériques et commenté les différents résultats obtenus. Nous avons montré que même si le modèle avancé reste élémentaire sur le plan des trois phénomènes (solidification, transport et réaction), le simple couplage permet d'obtenir, à partir de conditions initiales très uniformes, des roches solidifiées de *compositions variables ou d'éventuelles discontinuités* dans les chambres magmatiques. Ceci dépend des paramètres d'entrée du problème.

Nous avons aussi testé l'influence des différents paramètres d'entrée du problème à savoir les constants A et D_a , et les fonctions sources g et $q_s(x)$, nous pouvons dresser les conclusions suivantes :

11.6. CONCLUSION

- Les concentrations finales dans la chambre magmatique en fin de processus, lorsqu'elle est entièrement solidifiée, dépendent fortement des valeurs des deux paramètres A et D_a : pour $A \leq 0.1$, selon les valeurs de D_a on observe une répartition unimodale, uniforme ou bimodale des concentrations. Pour $A \geq 1$, la solidification est rapide et quelque soit la valeur de D_a , les résultats sur les concentrations ne varient pas beaucoup, on observe des concentrations finales c_s^f égales dans la majeure partie de la chambre magmatique à la concentration initiale dans le liquide c_l^0 .
- La forme de l'isotherme g influence également fortement les résultats sur les concentrations. La bimodalité s'observe aussi bien pour des isothermes convexes, concaves ou sous forme de S (changement de concavité).
- En revanche, les concentrations ne dépendent que peu de la fonction vitesse de solidification $q_s(x)$.

En ce qui concerne les cas où on observe une bimodalité des concentrations, c'est-à-dire deux valeurs des concentrations privilégiées dans le solide en fin de solidification de la chambre magmatique, avec une discontinuité entre les deux concentrations, nous l'observons lorsque la solidification est lente, relativement au transport, en même temps que les réactions chimiques sont rapides, relativement au transport ; ceci s'exprime par des valeurs faibles de A (≤ 0.1) et des valeurs fortes de D_a (≥ 10). Pour ces valeurs, l'analyse que nous avons effectuée sur les évolutions des concentrations nous a permis de construire un **raisonnement graphique**, se basant sur la forme de l'isotherme g et sa position par rapport à la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$, pour déterminer les valeurs des deux concentrations caractérisant la bimodalité.

Dans le cas d'une solidification lente et de réactions rapides, l'apparition de la bimodalité peut se comprendre qualitativement dans les cas les plus simples d'isotherme convexe ou concave. La solidification étant lente pour $A \leq 0.1$, un front de sédimentation apparaît au fond de la chambre et remonte en direction du sommet. Par exemple une isotherme convexe qui se trouve en-dessous de la première bissectrice du repère $(0, c_s, c_l)$ indique que le constituant chimique est enrichi dans le solide par rapport au liquide, les solides produits étant enrichis en constituant chimique sédimentent vers le fond et font augmenter la valeur des concentrations au fond, tandis qu'au sommet les concentrations diminuent. Ce qui provoque une discontinuité entre les deux concentrations.

Le tracé des cartes de bimodalité (degré de bimodalité en fonction de A et D_a) pour plusieurs exemples de fonctions sources et en faisant varier les conditions initiales, confirment que la bimodalité s'observe pour les faibles valeurs de la vitesse de solidification rapportée à la vitesse de déplacement, $A \leq 0.1$, et pour les fortes valeurs de la vitesse de réaction chimique rapportée à la vitesse de déplacement, $D_a \geq 10$.

Enfin, nous avons dressé un tableau des valeurs de A et D_a en fonction des différentes situations géologiques. D'après ce tableau, une chambre magmatique se trouvant à moyenne profondeur et dont le magma est plutôt intermédiaire semble présenter des conditions pouvant produire des roches magmatiques dans lesquelles on observerait une bimodalité de la répartition des concentrations. Cette conclusion reste à discuter et comparer avec des études de terrain.

Applications possibles de notre modèle

Notre modèle concerne toute situation dans la nature où un magma cristallise dans un réservoir fermé et où il y a réorganisation par un mouvement différentiel entre le solide et le liquide (c'est-à-dire une séparation du solide du liquide ou du liquide du solide, quel que soit le moteur de la séparation). S'il y a une certaine tendance à l'équilibre chimique, le processus peut donner lieu à des produits fortement différenciés, même pour des conditions initiales homogènes. Si le liquide s'échappe à un moment donné de tels systèmes, il aura une composition quantifiée dans l'espace et donc, au sortir d'un système volcanique, les compositions émises varieront dans le temps par étapes plus ou moins discrètes.

Pour l'instant, le modèle très simple à deux constituants chimiques ne peut être appliqué tel quel pour des cas précis. Nous pouvons cependant présenter notre modèle comme une piste d'explication des phénomènes de discontinuités ou de sauts des compositions chimiques observées dans la nature. Notamment le phénomène de "Daly gap".

a- **Le Daly gap** (Daly [1910]) est le nom donné à la rareté voire à l'absence de compositions chimiques intermédiaires entre laves mafiques et laves felsiques ou différenciées (trachytes, rhyolites ou phonolites) aussi bien dans les îles océaniques que dans le volcanisme intra-plaque continental (Chayes [1963]; [1963b]; [1977]; Baker [1968]; Mourtada-Bonnefoi et al. [1999]). Les roches intermédiaires sont caractérisées par une teneur en silice d'environ 52 à 65%.

Nous pouvons illustrer cette bimodalité par le diagramme SiO₂ vs. Alcalins (cf. figure 11.95). Nous remarquons sur ce diagramme un saut de composition entre des compositions mafiques (ou basiques) en bas du diagramme et les compositions felsiques (ou acides : phonolites) en haut.

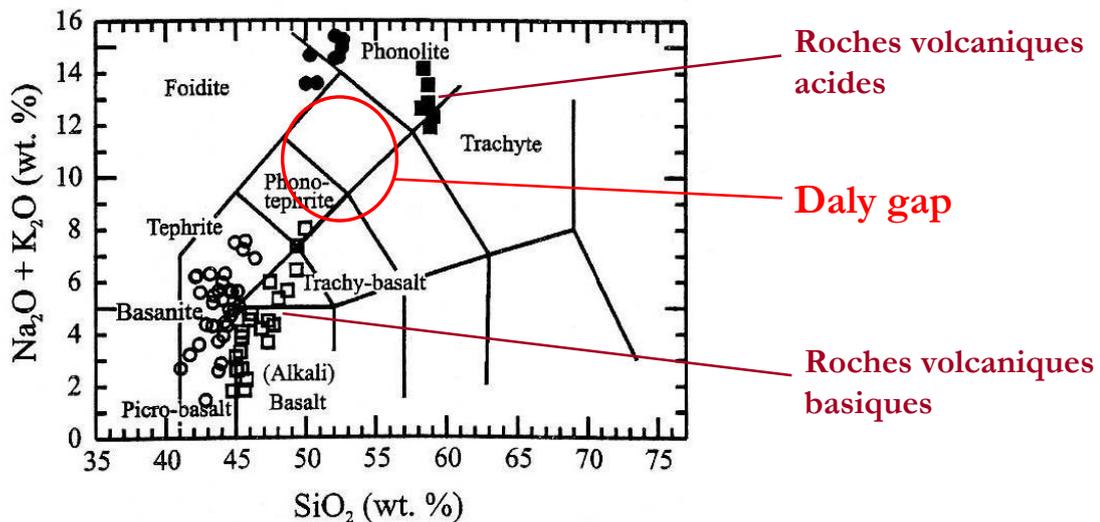


FIGURE 11.95 – Diagramme de corrélation entre silice et somme des alcalins (TAS) (classification de Le Maitre [1989]). Cercles : série sous-saturée en SiO₂ ; cercles vides : roches mafiques et cercles pleins : phonolites feldspathoïdiques. Carrés : série sur-saturée en SiO₂ ; carrés vides : roches mafiques et carrés pleins : phonolite. — Figure d'après Thompson et al. [2001], modifiée.

11.6. CONCLUSION

L'origine des roches felsiques (phonolites, trachytes) est attribuée au phénomène de *crystallisation fractionnée* des magmas mafiques dans les chambres en profondeur. Le phénomène de cristallisation fractionnée est d'ailleurs le phénomène le plus largement retenu pour expliquer l'origine des laves émises par les volcans.

Pour expliquer l'origine du Daly gap, [Thompson et al. \[2001\]](#) présentent 3 propositions :

- 1- Les magmas de composition intermédiaire ne seraient tout simplement pas produits. Cette possibilité est écartée pour Rarotonga, car elle suppose une production des phonolites par fusion partielle du manteau ou bien elle suppose une immiscibilité entre liquides felsiques et liquides mafiques durant la cristallisation fractionnée ([Clément et al. \[2003\]](#) ; [Legendre et al. \[2005\]](#)). La première supposition a été écartée puisque le modèle de fusion partielle n'a pas été retenu, et la deuxième a été écartée car il n'y a pas d'évidence pétrographique de cette immiscibilité.
- 2- Les roches intermédiaires auraient atteint la surface de la terre par éruption puis ces roches se seraient érodées. Cette supposition n'est pas retenue, car l'île est relativement jeune et un volume significatif de roches intermédiaires n'aurait pas pu être effacées par des processus d'érosion.
- 3- Les roches de compositions intermédiaires n'ont pas atteint la surface par éruption mais peuvent être trouvées seulement en profondeur.

Cette troisième explication est celle qui a été retenue pour l'île de Rarotonga : la cristallisation fractionnée fait augmenter la viscosité des magmas (on s'approche de magmas plus acides), les magmas mafiques, moins visqueux arrivent en surface par éruption et la chambre se recharge, la chambre magmatique se referme ensuite et la cristallisation fractionnée continue à opérer, mais cette fois on observe une augmentation dans la solubilité des volatils dans les magmas phonolithiques, ce qui leur donne une viscosité inférieure à la viscosité des magmas de composition intermédiaire, les magmas phonolithiques migrent alors en direction de la surface alors que les liquides intermédiaires se solidifient en profondeur et n'atteignent pas la surface de la terre. C'est d'ailleurs ce qui a été observé dans la péninsule Rallier du Baty de Kerguelen où des plutons syénitiques sont recouverts par des laves trachytiques, les syénites comblant en partie le vaste Daly gap observé dans les trachytes ([Giret et al. \[1997\]](#) ; [Gagnevin et al. \[2003\]](#)).

Dans l'étude faite sur les associations Basalte-Rhyolite au volcan Alcedo (situé à l'ouest des îles Galapagos), [Geist et al. \[1995\]](#) affirment qu'une possible explication du "Daly gap" serait que celui-ci résulterait de systèmes magmatiques où les magmas de composition intermédiaire sont plus visqueux que les basaltes arrivés en surface lors de l'éruption et moins riches en volatils que les rhyolites sorties par éruption. Ce qui fait que les roches intermédiaires restent en profondeur et n'atteignent pas la surface de la terre.

Pour [Peccerillo et al. \[2003\]](#), le Daly gap entre les roches mafiques et les roches siliciques du volcan Gedemsa (rift Ethiopien), est dû à deux facteurs concurrents. D'une part, le contraste de densités des magmas et d'autre part, la diminution régulière de la température fait que la cristallisation fractionnée passe très rapidement dans l'intervalle de température favorable à la

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

formation des magmas intermédiaires, produisant ainsi des faibles quantités de ces magmas.

Ainsi, les différents auteurs, supposent que le Daly gap est dû aux propriétés physiques des différents magmas (viscosité et contraste de densités), aux différentes phases par lesquelles passe une chambre magmatique (système fermé ou ouvert, recharge en magma et éruption de laves...) ou aux conditions de température et de pression dans lesquelles s'effectuent les processus de cristallisation fractionnée.

Le modèle théorique de [Bonnefoi et al. \[1995\]](#), apporte une analyse mathématique du phénomène de Daly gap. Des petites variations sur les temps de résidence des magmas (temps de résidence des minéraux dans le liquide avant de passer dans le solide) et de la vitesse de solidification induisent selon eux des grands changements thermiques et chimiques qui conduisent à l'apparition des bimodalités des concentrations.

- b- Les phénomènes de discontinuités ou de sauts des compositions chimiques peuvent être observés également à l'échelle des minéraux, **au niveau de petites chambres ou réservoirs** d'une longueur de quelques dizaines de mètres. Nous citons l'exemple des chromites dans les intrusions stratifiées ou dans les complexes d'accumulation des associations ophiolitiques ([Cottin and Lorrain \[1990\]](#) ; [Henderson and Wood \[1981\]](#) ; [Leblanc and Ceuleneer \[1992\]](#)).

Sur la figure 11.96a, on remarque deux zones de forte concentration (une zone plutôt riche en Al au départ s'enrichissant progressivement en Cr et une autre plutôt riche en Fe^{3+}) et une zone de relative discontinuité entre ces deux zones. Celle-ci constitue une lacune de cristallisation entre les différentes zones d'une petite chambre.

La figure 11.96b montre un petit réservoir de quelques dizaines de mètres de large et de hauteur, qui évolue de l'image à gauche à l'image à droite, on observe sur cette dernière presque une bimodalité de composition.

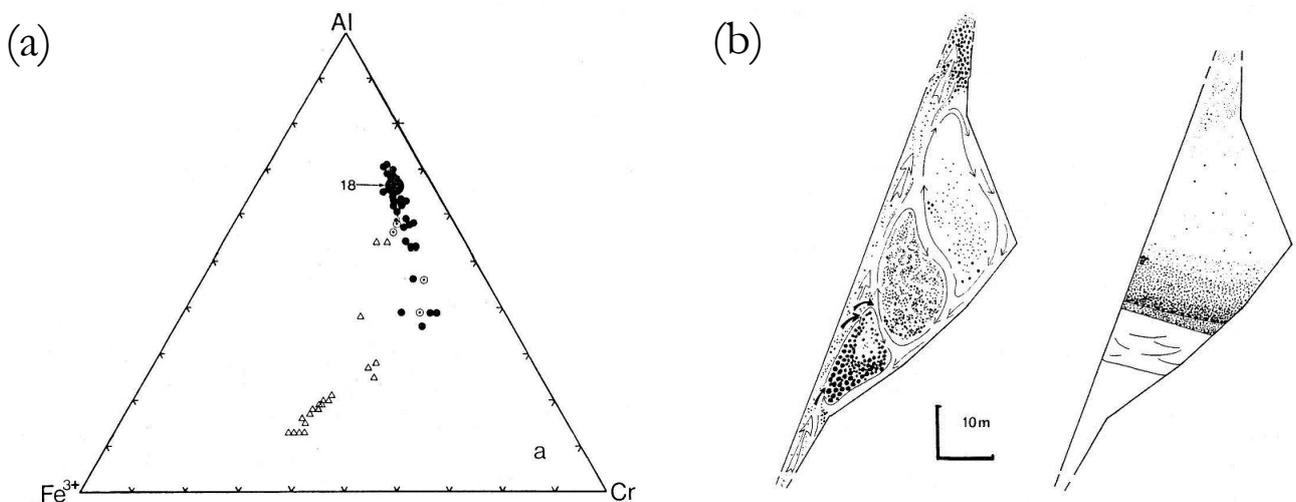


FIGURE 11.96 – (a) Concentrations en Al, Fe et Cr au sein de spinelles chromifères : lacune de cristallisation. — Figure d'après [Henderson and Wood \[1981\]](#), modifiée. (b) Bimodalité de composition dans une petite chambre (ophiolites d'Oman). — Figure d'après [Leblanc and Ceuleneer \[1992\]](#), modifiée.

11.6. CONCLUSION

Par le modèle que j'ai développé, je propose une piste d'explication supplémentaire des problèmes de discontinuités et bimodalité des concentrations chimiques dans les roches magmatiques. Je ne discute pas ni compare en détail les différents modèles d'explication existant, je pense simplement que mon modèle et le code de calcul développés seront un outil qui nourrira les réflexions et discussions des géologues, sur l'origine de ces problèmes de zonation des chambres magmatiques et des discontinuités des compositions chimiques dans les roches magmatiques.

Un article résumant ma démarche et certains des résultats décrits dans ce manuscrit a été soumis au Comptes Rendus de l'Académie des Sciences ([Lakhssassi et al., soumis](#)).

Limites du modèle et perspectives de développement

Le modèle que nous avons développé dans ce travail présente quelques limitations liées aux simplifications des phénomènes que nous avons faites :

- nous n'avons pas pris en compte la *texture des roches* (forme et taille des cristaux) . Cependant, l'absence de la variation de la taille ne pose pas de problème puisque la croissance des cristaux durant la cristallisation est compensée par une vitesse de descente plus élevée prévue par la loi de vitesse $v_s(p_s)$ que nous avons considérée. Les effets de changement de la taille des cristaux sur les échanges chimiques sont aussi inclus dans la loi d'échange considérée via la surface de réaction $S_r(p_s)$. Des modèles plus poussés existent, notamment les théories de nucléation, croissance et mûrissement pour le cas des solutions aqueuses ([Kieffer et al. \[1999\]](#) ; [Corvisier \[2006\]](#)), mais aussi des théories plus avancées pour la cristallisation en milieu magmatique, par exemple ([Hargraves \[1980\]](#) ; [Brandeis and Jaupart \[1986\]](#) ; [Brandeis and Jaupart \[1987\]](#)).
- *choix du modèle d'équilibrage chimique pour définir les ordres de grandeur de la constante cinétique k_c* : il faut souligner que, en réalité, on voit peu d'évidence de rééquilibrage par diffusion dans le solide : le déséquilibre chimique entre le solide et le liquide induit (du fait des variations du liquidus et du solidus avec la composition) des phénomènes couplés de fusion-recristallisation permettant à la composition stable d'apparaître. Cela est analogue à ce qui se passe lors du transfert réactif de solution aqueuse en milieu poreux (dissolution recristallisation plutôt que véritable échange de constituants chimiques par diffusion dans le solide). L'expérience montre que, quel que soit le phénomène physique qui a lieu, la modélisation de l'échange par une loi macroscopique fonction de la surface d'échange et de l'écart à l'équilibre donne un bon accord avec la réalité. Les valeurs obtenues pour le paramètre k_c sont analogues à celles dans les interactions fluides minéraux et peuvent varier sur plusieurs ordres de grandeur suivant les systèmes. Elles intègrent les aspects de texture et de taille des grains solides.
- *les limites de la notion d'isotherme* : il n'existe pas toujours de lois analytiques simples permettant d'écrire l'équilibre chimique de cette façon. Nous retiendrons pour l'instant que cette simplification permet de saisir rapidement la structure qualitative de la solution cherchée provenant des effets de non-linéarité. Nous avons pu trouver une expression analytique de cette fonction isotherme pour l'exemple de l'olivine se trouvant dans un bain silicaté, les trois constituants chimiques étant la forstérite, la fayalite et la silice. Pour plus de constituants chimiques, il faudrait exprimer l'équilibre thermodynamique par d'autres moyens, par exemple par la minimisation de l'énergie libre de Gibbs.

CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)

- *la prise en compte d'un seul constituant chimique* est une limitation : nous envisageons ici que nous pourrions prendre en considération les échanges chimiques et la solidification d'un magma "partiel" indépendamment des autres constituants de ce magma. En réalité, d'autres éléments chimiques, comme SiO_2 , jouent le rôle de solvant, qui le moment venu dans l'évolution chimique, va donner lieu à des cristallisations de minéraux nouveaux qui vont interférer avec tous les autres phénomènes. La présence de plusieurs minéraux simultanés peut entraîner plusieurs mouvements simultanés à des vitesses éventuellement différentes (densités différentes des minéraux) et leurs interférences complexes. Là encore, soit nous pouvons simuler des évolutions partielles toutes choses égales par ailleurs, ou des évolutions qualitatives très générales.
- *simplification des effets thermiques* : ils sont cachés derrière la loi de solidification $q_s(x)$ comme indépendante du reste, mais il est sûr que les effets thermiques interfèrent avec les autres, en particulier les effets chimiques. De même les lois de vitesse vont dépendre de la température, en particulier, les viscosités des liquides et des solides varieront avec la température. Une amélioration de notre modèle pourrait se faire en le couplant aux équations de bilan thermique.
- *vitesse de sédimentation v_s* : le choix de cette vitesse a été pris indépendamment de la viscosité du magma. Prendre en compte ce paramètre peut conditionner les durées des phénomènes, cela changera les échelles de temps mais ne devrait pas changer beaucoup le résultat sur la variabilité chimique finale une fois que toute la chambre magmatique est solidifiée.
- *les variations de volume* induite par la solidification n'est pas prise en compte, elle pourrait avoir une influence sur les lois de solidification et sur les lois de vitesse comme nous l'avons remarqué dans la section 3.2.
- *la prise en compte d'une seule dimension d'espace* limite les possibilités de mouvement : ainsi nous ne pouvons pas simuler des phénomènes comme la convection dans les chambres, les migrations latérales de magma etc. comme c'est le cas des grandes chambres magmatiques. Notre modèle serait ainsi adapté plutôt pour les chambres magmatiques de petite taille où les mouvements sont uniquement verticaux. La considération des autres possibilités de mouvement demande au minimum un modèle 2D.
- *systèmes volcaniques/plutoniques* : le passage entre les deux mériterait d'être mieux expliqué montrant comment une "quantification" dans la chambre peut conduire à une "quantification" des produits émis à un moment donné à la surface.
- notre modèle pourrait être *généralisé* aux systèmes partiellement fermés et partiellement ouverts, où les comportements peuvent varier suivant les endroits de la chambre magmatique et suivant le temps. Ceci pourrait se faire en gardant les mêmes systèmes d'équations mais en modifiant les conditions aux limites du problème suivant le temps.
- pour plus de précision dans la résolution des équations mathématiques qui sont de type hyperbolique, le schéma que nous avons utilisé qui est celui de Lax-Friedrichs avec viscosité numérique constante égale à 1, peut être remplacé par le schéma de Murman-Roe (comme décrit dans l'annexe B) ou encore par des *schémas numériques plus adaptés pour traquer les chocs* et qui présentent moins de diffusion numérique, comme les schémas de type Godunov et leurs extensions (voir les références dans le chapitre 8).

11.6. CONCLUSION

Malgré les restrictions que l'on peut formuler, ce modèle fournit un cadre intellectuel pour ordonner la discussion sur les cas naturels et la base de futurs modèles plus compliqués et plus directement applicables à des exemples géologiques précis, à la lumière des perspectives de développement que nous avons décrites ci-dessus.

**CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES
SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)**

Annexes

**CHAPITRE 11. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES (ÉTUDE DE QUELQUES
SITUATIONS GÉOLOGIQUES MODÈLES)**

Annexe A

Dérivation de la fonction flux numérique $g(p, q)$ pour les schémas à trois points

Nous considérons la fonction $g(p, q)$. Nous écrivons ici les expressions de sa dérivée par rapport à ses deux variables, ces dérivées sont utilisées dans l'écriture de la jacobienne \bar{J}_{FP} (cf. relations (7.44), (7.45) et (7.46)). Nous choisissons de l'écrire ici seulement pour les deux exemples du schéma volumes finis décentré amont (VFDAm) et du schéma de Lax-Friedrichs (LxF).

Rappelons que pour tous les schémas à trois points, le schéma numérique s'écrit :

$$p_i^n - p_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(g(p_i^n, p_{i+1}^n) - g(p_{i-1}^n, p_i^n) \right) = \Delta t \cdot A \cdot q_{si}^n$$

A.1 Dérivée de $g(p, q)$ pour le schéma VFDAm

Ce schéma peut s'écrire sous la forme des schémas à trois points en écrivant :

$$g(p, q) = f(p) = p \cdot (1 - p)^e$$

d'où :

$$\begin{cases} \frac{\partial g(p, q)}{\partial p} = f'(p) = (1 - p)^e - e \cdot p(1 - p)^{e-1} \\ \frac{\partial g(p, q)}{\partial q} = 0 \end{cases}$$

A.2 Dérivée de $g(p, q)$ pour le schéma LxF

Pour ce schéma la fonction g s'écrit :

$$g(p, q) = \frac{1}{2} \left(f(p) + f(q) + c \cdot (p - q) \right)$$

et :

$$f(p) = p \cdot (1 - p)^e$$

**ANNEXE A. DÉRIVATION DE LA FONCTION FLUX NUMÉRIQUE $G(P, Q)$
POUR LES SCHEMAS À TROIS POINTS**

d'où :

$$\begin{cases} \frac{\partial g(p, q)}{\partial p} = \frac{1}{2} \left(f'(p) + \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) \\ \frac{\partial g(p, q)}{\partial q} = \frac{1}{2} \left(f'(q) - \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) \end{cases}$$

Pour un coefficient de viscosité c constant, il suffit de remplacer dans ces dernières expressions la grandeur $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ par le coefficient c .

Annexe B

Comparaison des schémas à trois points

Pour la résolution de l'EDP hyperbolique de cristallisation/sédimentation (7.2), nous avons utilisé, pour tous les résultats présentés dans le présent travail, le schéma volumes finis à trois points de Lax-Friedrichs où la viscosité numérique a été prise constante : $c = 1$. Nous l'avons appelé schéma LxF1.

Dans cette annexe, nous testons d'autres schémas numériques à trois points afin de les comparer au schéma de Lax-Friedrichs.

B.1 Pourquoi le schéma de Lax-Friedrichs avec viscosité numérique $c = 1$

Rappelons l'écriture générale des schémas à trois points concernant notre problème de cristallisation/sédimentation (cf. relation (7.20)) :

$$Schem3p : \begin{cases} p_i^n - p_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(g(p_i^n, p_{i+1}^n) - g(p_{i-1}^n, p_i^n) \right) = \Delta t \cdot A \cdot q_{si}^n \\ \text{avec : } g(p, q) = \frac{1}{2} \left(f(p) + f(q) + c \cdot (p - q) \right) \\ f(p_i^n) = v_i^n \cdot p_i^n, \text{ et } c \text{ un coefficient à choisir } \mathbf{homogène \text{ \textit{à} une vitesse.}} \end{cases}$$

La méthode de Lax-Friedrichs (LxF) consiste à prendre un coefficient de viscosité numérique c tel que (cf. relation (7.22)) :

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

c dépend donc du pas de temps choisi ainsi que du pas d'espace, d'où du nombre de mailles ($\Delta x = \frac{1}{M}$, cf. relation(7.3)). Pour nos simulations nous considérons toujours le nombre de mailles

ANNEXE B. COMPARAISON DES SCHEMAS À TROIS POINTS

$M = 100$. c ne dépend plus que de Δt .

Nous prenons un pas de temps $\Delta t=0.001$, Nous supposons que $A=0$ (pas de solidification mais uniquement sédimentation du solide existant) et nous prenons deux exemples pour p_{s0} : $p_{s0}=0.15$ et $p_{s0}=0.4$. Nous traçons les évolutions de p_s correspondantes respectivement sur les figures B.1a et B.1b. Pour cet exemple $c = \frac{1}{0.001} = 10$.

Nous observons une grande diffusion numérique et que les fronts de vidange de la colonne magmatique ne sont pas du tout raides.

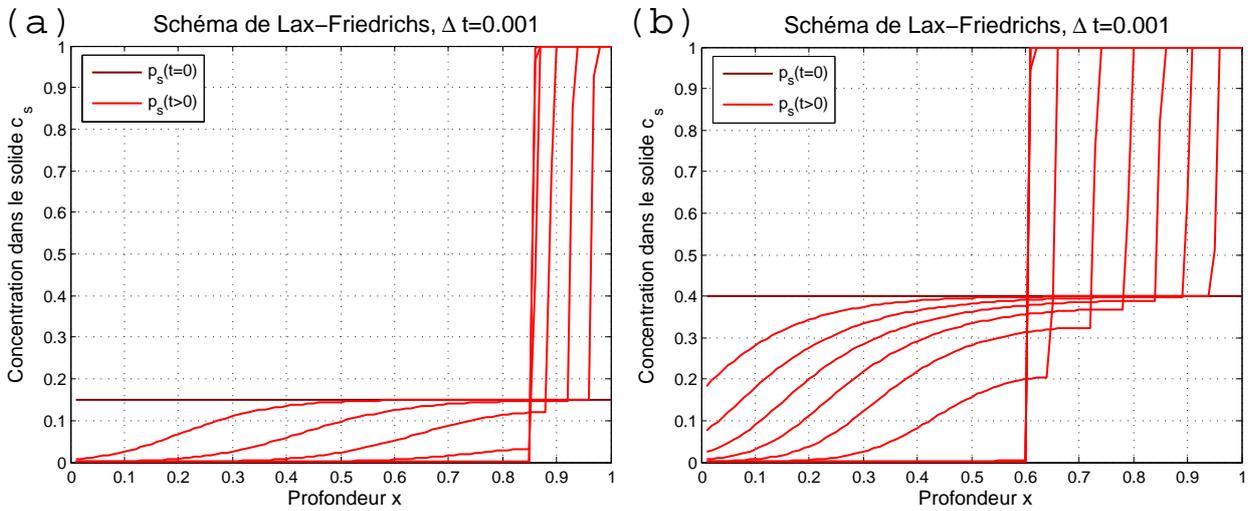


FIGURE B.1 – (a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas et $c_l^0 = 0.8$, (b) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée. — $A = 0.1$ et D_a prenant les valeurs 100, 10 et 1.

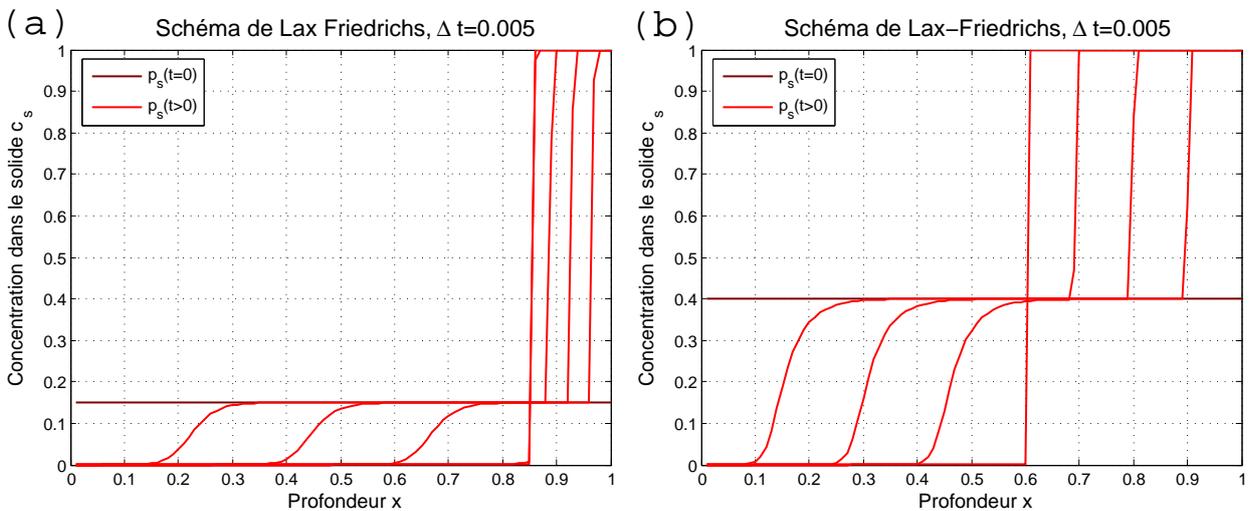


FIGURE B.2 – (a) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion décalée vers le bas et $c_l^0 = 0.8$, (b) Concentrations finales pour l'isotherme avec inflexion centrée. — $A = 0.1$ et D_a prenant les valeurs 100, 10 et 1.

B.1. POURQUOI LE SCHEMA DE LAX-FRIEDRICHS AVEC VISCOSITE NUMERIQUE $C = 1$

Nous modifions le pas de temps, nous prenons $\Delta t=0.005$, les évolutions de p_s sont tracées sur les figures B.2a et B.2b . Pour cet exemple $c = \frac{0.01}{0.005} = 2$.

Nous remarquons alors que les fronts de vidange sont plus marqués, il y a moins de diffusion numérique dans le cas de $\Delta t=0.005$. Selon le pas de temps Δt , nous obtenons donc des qualités de résolution différentes.

Nous pouvons remarquer aussi que prendre $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ avec $\Delta t = 0.005$ revient à prendre $c = 5 \cdot \frac{\Delta x}{\Delta t}$ avec $\Delta t=0.001$. Pour avoir toujours le même coefficient de viscosité c , indépendamment du pas de temps Δt , nous choisissons alors de remplacer, dans le schéma numérique de Lax-Friedrichs, le terme $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ par un coefficient de viscosité c constant (cf. relation (7.25)). Dans ce cas, la diminution du pas de temps améliorera la précision des résultats mais ne modifiera pas la diffusivité du schéma.

Pour choisir la constante c , nous nous basons sur la comparaison des deux exemples précédents : en effet, pour le schéma de Lax-Friedrichs, lorsque $\Delta = 0.001$, on avait $c = 10$, et pour $\Delta = 0.005$, on avait $c = 2$, les résultats ont été meilleurs pour $c = 2$.

Nous testons alors une valeur inférieure, $c = 1$:

Nous traçons l'évolution de p_s ainsi que les courbes des concentrations c_s et c_l à un temps donné et dans le cas simple où il n'y a ni solidification ni de réaction chimique ($A = 0$ et $D_a = 0$) :

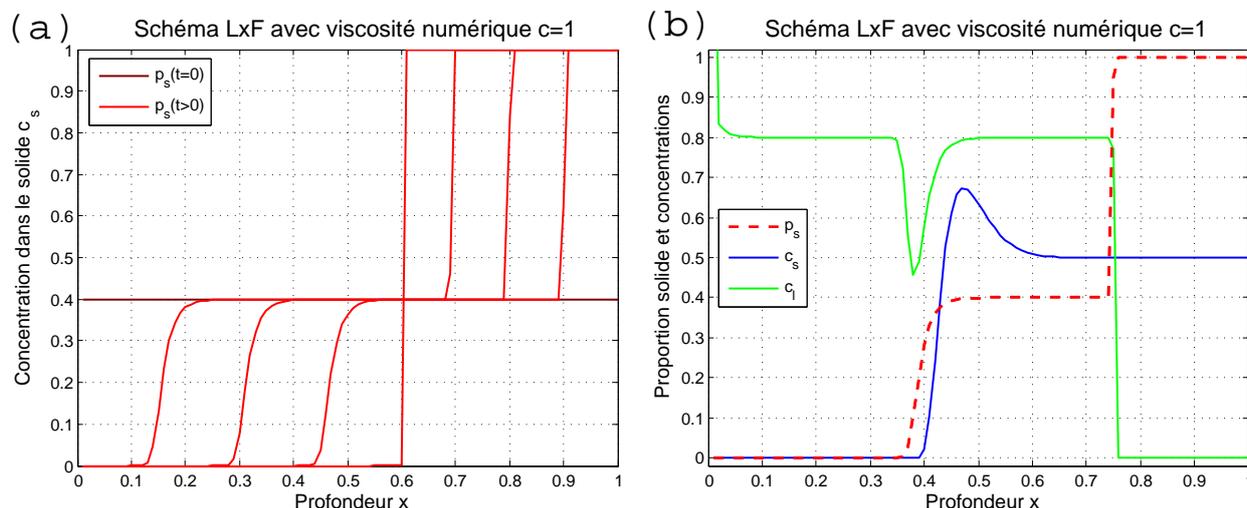


FIGURE B.3 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs avec $c = 1$; $A = 0$ et $D_a = 0$.

Les fronts de vidange sont encore plus nets que dans le cas où $c = 2$, et il n'y a pas d'instabilité numérique.

Essayons maintenant de **réduire c pour réduire encore plus la viscosité numérique**, nous prenons $c = 0.1$ et nous traçons les mêmes courbes que précédemment :

ANNEXE B. COMPARAISON DES SCHÉMAS À TROIS POINTS

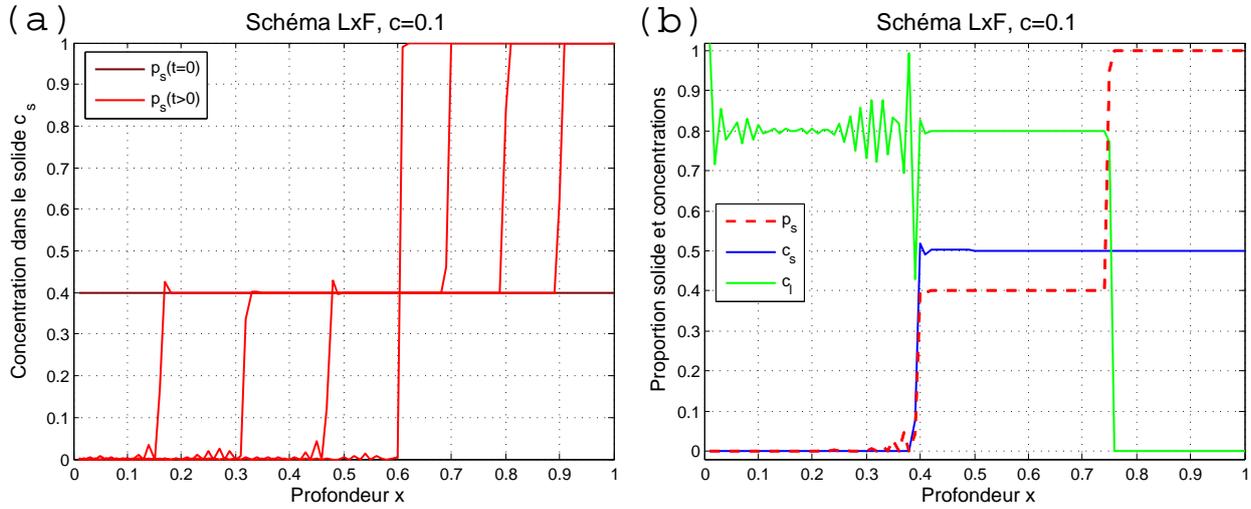


FIGURE B.4 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs avec $c = 0.1$; $A = 0$ et $D_a = 0$.

les fronts sont plus nets mais ceci se fait au coût d'une **instabilité** des résultats. En effet nous observons sur les figures ci-dessus, des oscillations des courbes de proportion de solide (figure B.4a), ces oscillations sont transmises par la suite aux courbes des concentrations (figure B.5b). La valeur $c = 0.1$ est donc trop petite, prenons $c = 0.5$:

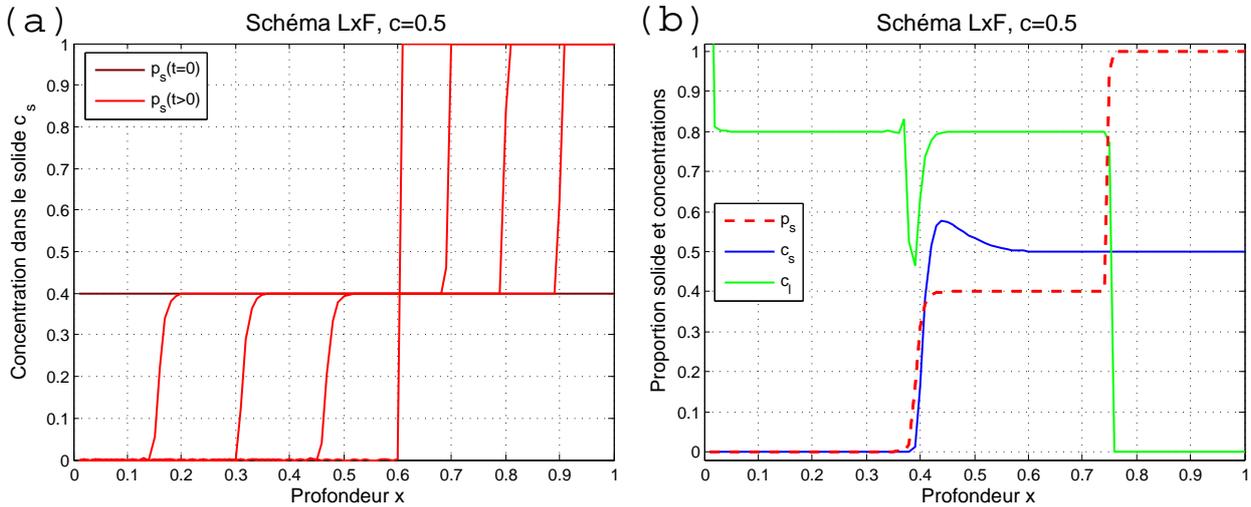


FIGURE B.5 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs avec $c = 0.5$; $A = 0$ et $D_a = 0$.

Les oscillations ont nettement baissé mais restent présentes. Ces **oscillations disparaissent si on prend $c = 1$** . C'est la constante que nous avons adoptée pour les simulations effectuées pour le reste des expériences numériques tout au long du présent travail. Nous avons appelé le schéma ainsi choisi *schéma LxF1* (cf. section 7.4.1).

Dans la suite de cette annexe, nous comparons le schéma LxF1 à d'autres schémas à trois points

B.2. SCHÉMA DE LAX-FRIEDRICHS MODIFIÉ

afin d'expérimenter ceux-ci et de proposer peut-être un schéma plus performant et qui pourrait être utilisé pour de prochains travaux.

B.2 Schéma de Lax-Friedrichs modifié

Il s'agit du schéma noté schéma LxFmodif où dans l'expression du flux $g(p_{s_i}^n, p_{s_{i+1}}^n)$ la valeur du coefficient de viscosité numérique c égal à la valeur absolue de la moyenne des vitesses sur les deux mailles i et $i + 1$ (cf. relation 7.26) :

$$c_{i+1/2} = \frac{|v_{s_i}^n + v_{s_{i+1}}^n|}{2}$$

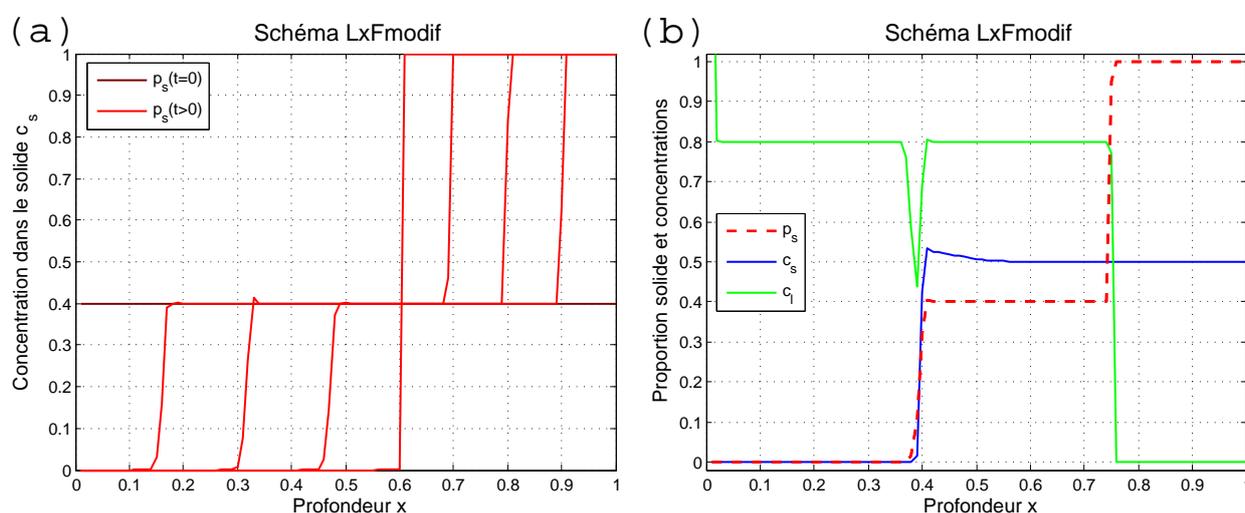


FIGURE B.6 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs modifié; $A = 0$ et $D_a = 0$.

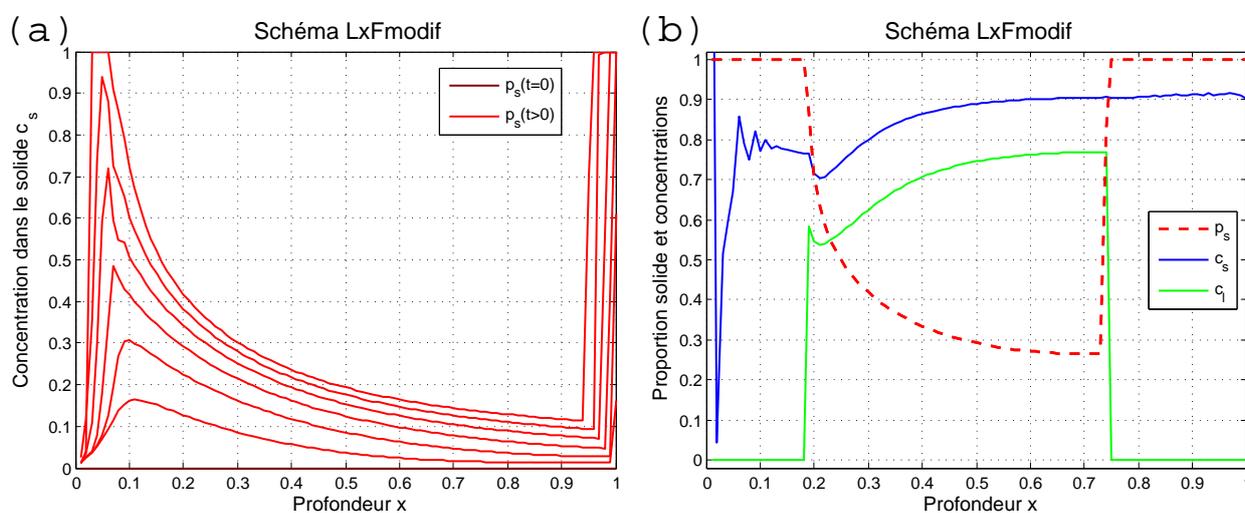


FIGURE B.7 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Friedrichs modifié; $A = 1$ et $D_a = 10$.

ANNEXE B. COMPARAISON DES SCHÉMAS À TROIS POINTS

Nous avons tracé le schéma LxFmodif toujours dans le cas simple où $A = 0$ et $D_a = 0$, avec $p_{s0} = 0.4$ (figure B.6).

Les fronts de discontinuité sont bien raides avec des petites instabilités (figure B.6a) qui sont ensuite transmises aux courbes des concentrations (figure B.6b).

Nous avons ensuite pris l'exemple où $A = 1$ et $D_a = 10$ (figure B.7).

On observe dans ce cas encore plus d'instabilités sur les courbes de p_s , celles-ci sont non négligeables sur les courbes des concentrations. Le schéma LxFmodif ne pourrait donc être retenu pour notre étude. Nous essayons maintenant le schéma de Lax-Wendroff.

B.3 Schéma de Lax-Wendroff

C'est le schéma noté schéma LxW, pour lequel le flux numérique g s'écrit (cf. relation 7.27) :

$$g(p, q) = \frac{1}{2} \left(f(p) + f(q) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot f' \left(\frac{p+q}{2} \right) \cdot (f(p) - f(q)) \right)$$

Nous avons testé également le schéma de Lax-Wendroff, les résultats n'ont pas été satisfaisants, ce schéma est très instable, nous en montrons un exemple lorsque $A = 0$, $D_a = 0$ et $p_{s0} = 0.4$.

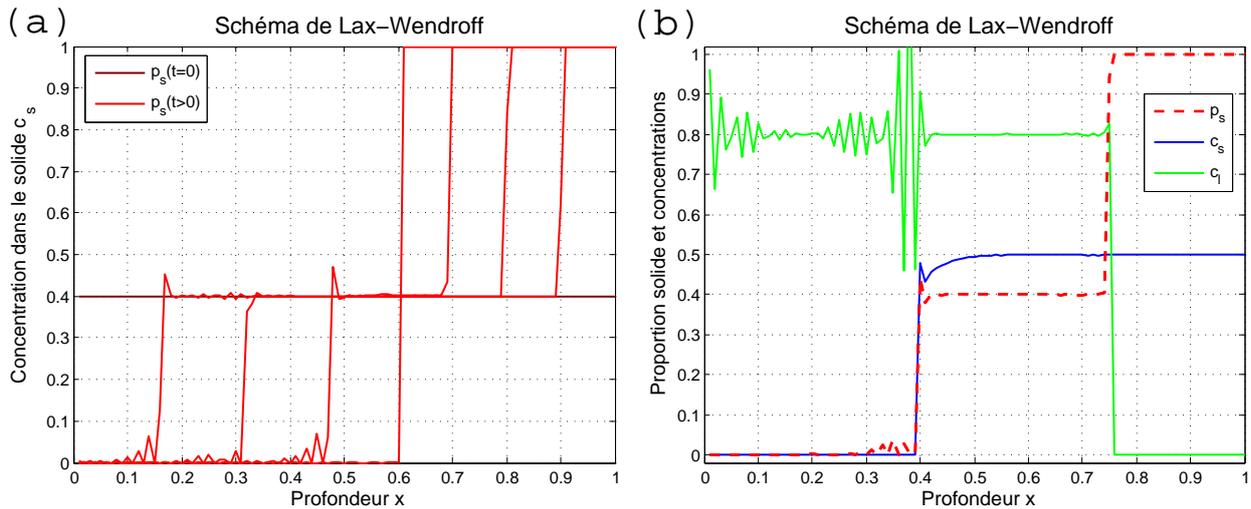


FIGURE B.8 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Lax-Wendroff; $A = 0$ et $D_a = 0$.

Nous testons maintenant le schéma de Murman-Roe :

B.4. SCHÉMA DE MURMAN ROE

B.4 Schéma de Murman Roe

Pour ce schéma, c est égal à la pente de la fonction flux $f(p_s) = v_s \cdot p_s$ entre les deux points p et q (cf. relation 7.28) :

$$c = \begin{cases} \left| \frac{f(p) - f(q)}{p - q} \right| & \text{si } p \neq q \\ |f'(p)| & \text{si } p = q \end{cases}$$

Comme pour les schémas précédents, nous testons le cas simple où $A = 0$ et $D_a = 0$, avec $p_{s0} = 0.4$:

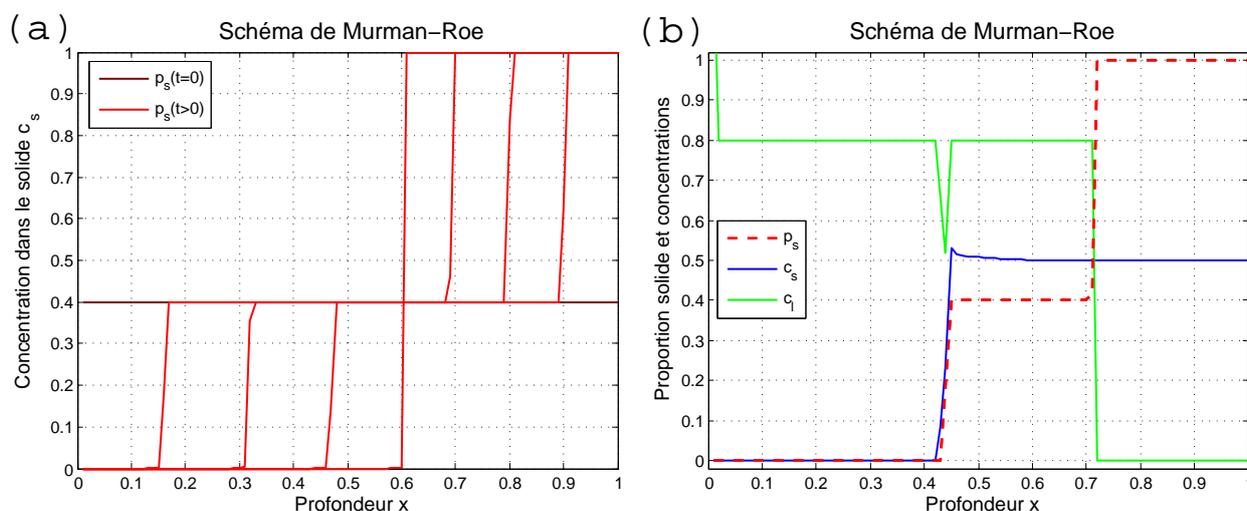


FIGURE B.9 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Murman-Roe; $A = 0$ et $D_a = 0$.

Les discontinuités de p_s sont bien marquées, les pentes sont bien raides, et il n'y a pas d'oscillations (figure B.9a). Sur la figure B.9b, les courbes des concentrations ne présentent pas non plus d'oscillations, seulement un léger rebond de la courbe de c_s est observé au niveau du front de vidange, qui est bien plus léger que ce qu'on obtient avec le schéma de Lax-Friedrichs.

Nous testons ce schéma pour d'autres situations, par exemple lorsque $A = 1$ et $D_a = 10$ (figure B.10). Contrairement au schéma LxFmodif, le schéma de Murman-Roe est stable pour ces valeurs de A et D_a .

ANNEXE B. COMPARAISON DES SCHÉMAS À TROIS POINTS

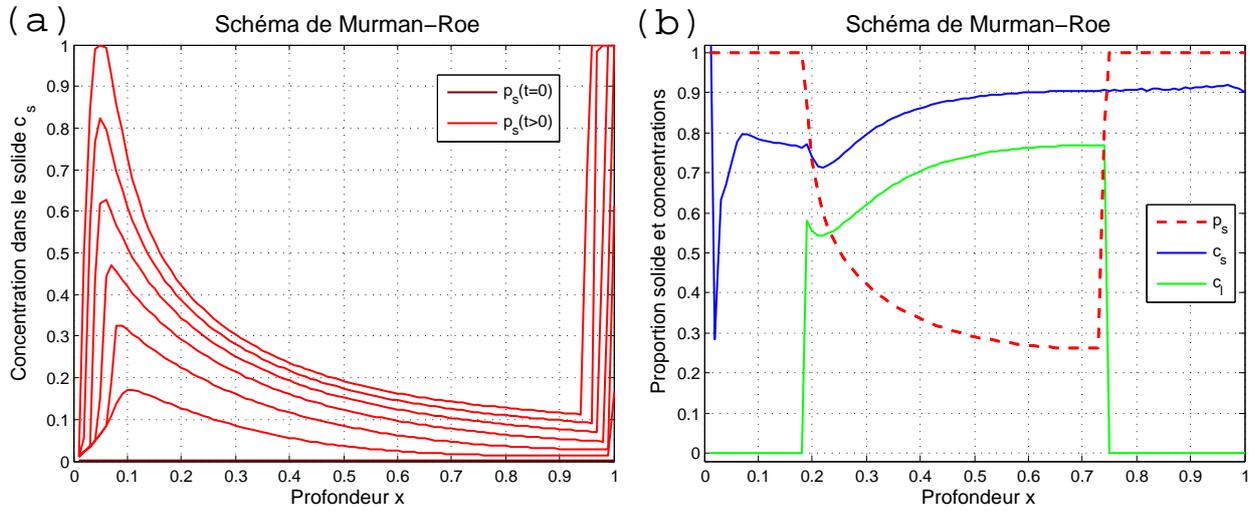


FIGURE B.10 – (a) Evolution de la proportion de solide p_s , (b) Courbes de concentrations à un instant donné. — Résultats pour le schéma de Murman-Roe; $A = 1$ et $D_a = 10$.

Comparons ce schéma avec le schéma qui a été choisi pour notre étude qui est le schéma de Lax-Friedrichs avec viscosité numérique $c = 1$ (schéma LxF1). Pour cela, nous prenons les conditions initiales et les fonctions sources définies dans la figure B.11 et nous testons les trois valeurs : $A = 0.1$, $A = 1$ et $A = 10$.

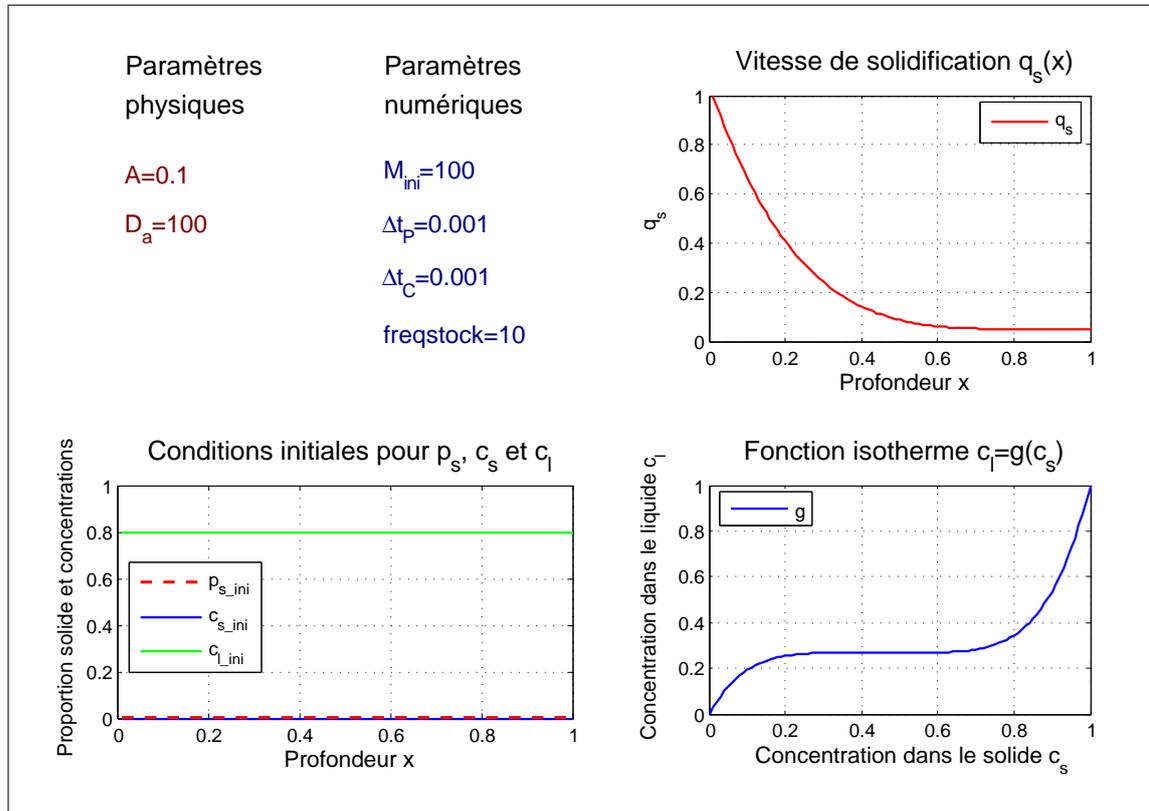


FIGURE B.11 – Conditions initiales et fonctions sources pour les tests de comparaison entre les schémas LxF1 et Murman-Roe.

B.4. SCHÉMA DE MURMAN ROE

Pour ces trois valeurs de A , nous traçons les courbes finales de c_s une fois la chambre magmatique entièrement solidifiée et pour différentes valeurs du paramètre D_a :

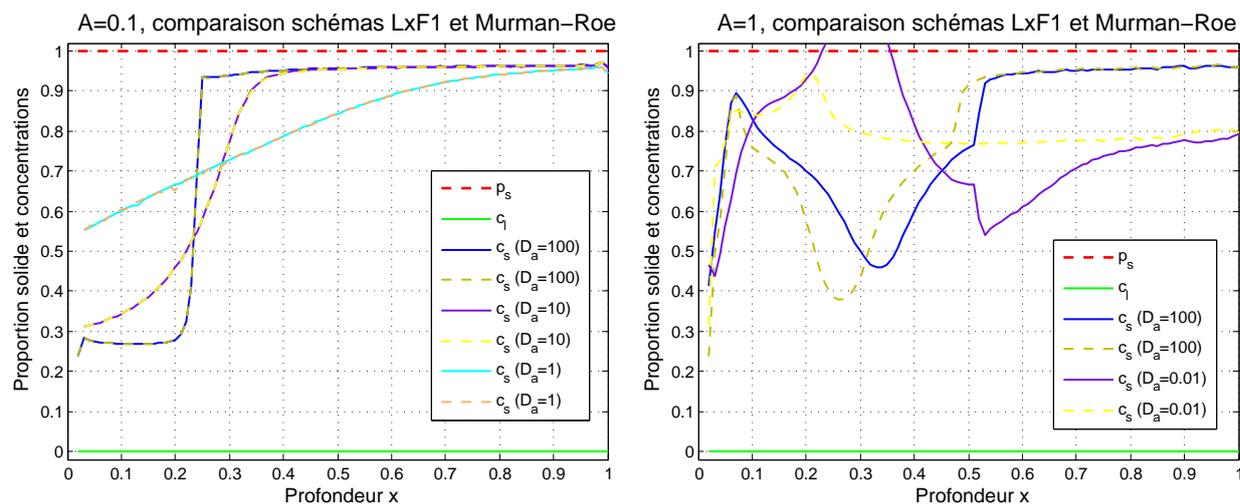


FIGURE B.12 – Comparaison entre les résultats des schémas LxF1 (traits pleins) et Murman-Roe (tirets) pour $A = 0.1$ et $A = 1$ et pour différentes valeurs de D_a .

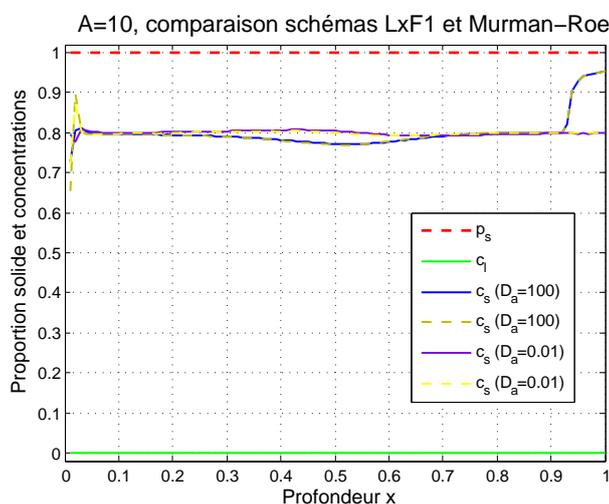


FIGURE B.13 – Comparaison entre les résultats des schémas LxF1 (traits pleins) et Murman-Roe (tirets) pour $A = 10$ et différentes valeurs de D_a .

La comparaison entre les deux schémas donne les résultats suivants :

- Pour $A = 0.1$, nous observons que les schémas LxF1 et Murman-Roe fournissent le même résultat, les courbes des deux schémas se confondent.
- **Pour $A = 1$, nous observons une différence dans les résultats entre les deux schémas numériques pour $D_a = 100$ et pour $D_a = 0.01$.** Lorsque $D_a = 0.01$, le schéma LxF1

fournit une courbe c_s qui dépasse la valeur 1 certaines profondeurs, contrairement au schéma de Murman-Roe qui fournit une courbe beaucoup plus raisonnable et régulière.

- Pour $A = 10$, les résultats des deux schémas sont quasiment identiques.

B.5 Discussion

Les différents schémas numériques testés ici donnent des résultats différents :

- le schéma de Lax-Friedrichs avec un coefficient de viscosité constant=1 est satisfaisant. En effet, il est numériquement stable et a été validé dans le chapitre 8, la diminution de ce coefficient améliore la précision au niveau des chocs mais produit des instabilités.
- le schéma de Lax-Friedrichs modifié présente des oscillations non négligeables qui se transmettent ensuite aux courbes des concentrations c_s et cl .
- le schéma de Lax-Wendroff présente de fortes oscillations est n'est pas adapté à notre problème.
- enfin, **le schéma de Murman-Roe est très satisfaisant**, la diffusion numérique est réduite et les chocs sont bien visibles. Ce qui permet d'obtenir des courbes des concentrations plus précises qu'avec les schémas précédents, en particulier lorsque $A = 1$.

Dans notre travail de thèse, nous avons adopté le schéma de Lax-Friedrichs avec $c = 1$ (que nous avons appelé schéma LxF1). Nous avons ensuite cherché à tester les schémas cités ici, **le schéma de Murman-Roe présente un bon schéma alternatif au schéma Lxf1, les discontinuités sont mieux représentées et la précision améliorée.**

Lorsque $A = 1$, des différences importantes existent entre les résultats donnés par les deux schémas. Toutefois, lorsque $A \neq 1$, et notamment dans les cas de bimodalité des compositions chimiques ($A \leq 0.1$ et $D_a \geq 10$), les résultats sur les concentrations ne changent pas entre les schémas LxF1 et le schéma de Murman-Roe et ne présentent pas une grande différence de précision. Le schéma LxF1 reste un schéma assez satisfaisant pour notre étude.

Pour améliorer la précision des résultats, il serait bien d'utiliser le schéma de Murman-Roe ou encore des schémas de type Godunov.

Glossaire

Symboles latins

a	rayon d'un cristal sphérique (utilisé aussi pour l'activité d'un constituant chimique) (m)
A	nombre sans dimension exprimant le ratio $v_{solidification}/v_{advection}$
c_l^{eq}	la concentration dans le liquide à l'équilibre avec le solide (kg.m^{-3})
c_s^{eq}	la concentration dans le solide à l'équilibre avec le liquide (kg.m^{-3})
c_s (ou c^s)	concentration d'un constituant chimique dans le solide (kg.m^{-3}), ce symbole désigne aussi la concentration adimensionnée c_s^*
c_l (ou c^l)	concentration d'un constituant chimique dans le liquide (kg.m^{-3}), ce symbole désigne aussi la concentration adimensionnée c_l^*
D_a	nombre sans dimension exprimant le ratio $v_{reaction}/v_{advection}$
D_s	coefficient de diffusion d'un élément chimique dans le solide ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$)
e	exposant dans la loi de vitesse de Richardson & Zaki v_s (sans dimension)
Fo	abréviation désignant la forstérite Mg_2SiO_4
Fa	abréviation désignant la fayalite Fe_2SiO_4
g	loi d'échange chimique entre le solide et le liquide appelée <i>fonction isotherme</i> : $c_l = g(c_s)$.
G	l'énergie libre de Gibbs (J)
h	fonction isotherme liant les fractions molaires normalisées Z et Y : $Z = h(Y)$
k_c	constante cinétique de réaction ($\text{m}.\text{s}^{-1}$)
$K_i = K_i(P, T)$	constante propre à chaque constituant chimique i et dépendant de la température et de la pression (sans dimension)
$K = K(P, T)$	rapport K_{Fa}/K_{Fo}
K_i^j	le coefficient de partage pour l'élément j entre la phase liquide et le minéral i (sans dimension)
L	hauteur de la chambre ou de la colonne magmatique (m)
M_i	masse molaire du constituant chimique i dans la phase solide (kg.mol^{-1})
m_l	masse d'un constituant chimique dans le liquide (kg)
m_s	masse de solide présent dans le VER (kg)
m_s	masse d'un constituant chimique dans le solide (kg)
m_i^s	masse du constituant chimique i dans le solide (kg)
\vec{n}	vecteur unitaire normal à la surface extérieure du VER $\partial\mathcal{V}$
$n_{i,s}$ ou n_i^s	nombre de moles d'un constituant chimique X dans la phase solide (mol)
$n_{i,l}$ ou n_i^l	nombre de moles d'un constituant chimique X dans la phase liquide (mol)
P	pression (bar)
p_s	proportion en volume de solide (ou compacité) (sans dimension)
p_l	proportion en volume de liquide (ou porosité) (sans dimension)

A suivre...

ANNEXE B. COMPARAISON DES SCHÉMAS À TROIS POINTS

Symboles latins (suite)

q_s	vitesse de solidification du liquide magmatique (ou vitesse de production de solide) (s^{-1})
q_{s0}	valeur maximale de la vitesse de solidification q_s (s^{-1})
R	constante des gaz parfaits ($R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
R_{chem}	terme d'échange en espèces chimiques entre le solide et le liquide dans les équations de bilan des espèces chimiques ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$)
S	la section du VER (et surface qui sépare deux mailles de la colonne magmatique) (m^2)
S_g	surface géométrique des grains présents dans un volume donné (m^3)
S_{grain}	surface géométrique d'un grain (m^3)
S_r	surface de réaction entre le solide et le liquide présents dans un volume donné (m^{-1})
T	température ($^{\circ}\text{C}$)
T_i^{fus}	température de fusion d'un constituant i ($^{\circ}\text{C}$)
U_s	vitesse de Stokes pour un cristal sphérique isolé (m.s^{-1})
v_{RH}	vitesse de Rankine-Hugoniot du déplacement d'un choc ($= v_{choc}$) (m.s^{-1})
v_l	vitesse de remontée du liquide (m.s^{-1}), ce symbole désigne aussi la vitesse adimensionnée
v_s	vitesse de chute du solide (ou vitesse de sédimentation) (m.s^{-1}), ce symbole désigne aussi la vitesse adimensionnée
V_{grain}	volume d'un grain (m^3)
V_l	volume de liquide présent dans le magma (m^3)
V_{OL}	volume d'olivine présent dans le magma (m^3)
V_i^l	volume du constituant i présent dans le liquide (m^3)
V_i^s	volume du constituant i présent dans le solide (m^3)
\mathcal{V}	le volume du VER (m^3)
$\partial\mathcal{V}$	surface extérieure du VER (m^2)
\mathcal{V}_l	le volume du liquide présent dans le VER (m^3)
\mathcal{V}_s	le volume du solide présent dans le VER (m^3)
V_i^l	volume molaire du constituant i dans la phase liquide ($\text{m}^3.\text{mol}^{-1}$)
V_i^s	volume molaire du constituant i dans la phase solide ($\text{m}^3.\text{mol}^{-1}$)
$W_{i,j}$	constantes d'interaction en excès entre le constituant i et le constituant j (J)
$X_{i,s}$ ou X_i^s	fraction molaire du constituants i dans le solide (sans dimension)
$X_{i,l}$ ou X_i^l	fraction molaire du constituants i dans le liquide (sans dimension)
Y	fraction molaire normalisée dans le solide (sans dimension)
Z	fraction molaire normalisée dans le liquide (sans dimension)

Symboles grecs

α	paramètre de courbure de la fonction surface réactive $S_r(p_s)$ (sans dimension)
α_i	paramètres intermédiaires pour le calcul de la fonction isotherme magmatique
β_i	paramètres intervenant dans l'expression de la fonction isotherme magmatique pour Fo
γ_i	paramètres intervenant dans l'expression de la fonction isotherme magmatique pour Fa
μ	coefficient de viscosité dynamique (Po)

A suivre...

B.5. DISCUSSION

Symboles grecs (suite)

$\mu_{i,s}$	potentiel chimique d'un constituant chimique i dans le solide (J.mol ⁻¹)
$\mu_{i,l}$	potentiel chimique d'un constituant chimique i dans le liquide (J.mol ⁻¹)
$\mu_{i,s}^0$	le potentiel chimique du constituant i à l'état standard de référence (lorsque $a = 1$) à l'état solide (J.mol ⁻¹)
$\mu_{i,l}^0$	le potentiel chimique du constituant i à l'état standard de référence (lorsque $a = 1$) à l'état liquide (J.mol ⁻¹)
ρ_s	densité du solide ou masse volumique d'un constituant chimique à l'état solide (kg.m ⁻³)
ρ_l	densité du liquide ou masse volumique d'un constituant chimique à l'état liquide

Paramètres et fonctions numériques

Remarque : le temps est en seconde ou en années pour toutes les variables de temps avant adimensionnement et l'espace est en mètres pour toutes les variables d'espace avant adimensionnement

c	coefficient de viscosité numérique
C_1	première classe de classification des concentrations pour une courbe de c_s
C_2	deuxième classe de classification des concentrations pour une courbe de c_s
δx	distance entre un grain de solide et le liquide considérée pour les réactions chimiques entre les deux phases (m)
Δt	pas de discrétisation du temps
Δx	pas de discrétisation de l'espace (et longueur du VER)
ϵ	précision pour la convergence des méthodes numériques (point fixe ou Newton-Raphson)
f	flux de matière solide ($f(p_s) = v_s \cdot p_s$)
f_l	flux des quantités d'éléments chimiques dans le liquide ($f_l(p_l, c_l) = v_l \cdot p_l \cdot c_l$)
f_s	flux des quantités d'éléments chimiques dans le solide ($f_s(p_s, c_s) = v_s \cdot p_s \cdot c_s$)
$f_{i-1/2}^n$	le flux $f(p_s)$ à l'interface $x_{i-1/2}$ entre les deux mailles $i-1$ et i et au temps t_n
$f_{i-1/2}^n$	flux numériques des quantités d'éléments chimiques dans le liquide à l'interface $x_{i-1/2}$, au temps t_n
$f_{s_{i-1/2}}^n$	flux numériques des quantités d'éléments chimiques dans le solide à l'interface $x_{i-1/2}$, au temps t_n
F	fonction à M variables dont on cherche le point fixe ou le zéro
$g(p, q)$	fonction flux intervenant dans les schémas numérique à trois points
\bar{J}_F	matrice jacobienne de la fonction F
M	nombre de mailles de la discrétisation spatiale
σ	rapport $\Delta t / \Delta x$
t_n	temps discret pour les simulations, n entier, $n \geq 0$
V_1	variance intra-classe pour la classe 1 (C_1)
V_2	variance intra-classe pour la classe 2 (C_2)
V_c	volume de contrôle pour l'intégration pour la méthode des volumes finis
x_i	point de l'espace discrétisé par volumes finis, $1/2 \leq i \leq M + 1/2$

ANNEXE B. COMPARAISON DES SCHÉMAS À TROIS POINTS

Bibliographie

- R. Abgrall. *Méthodes variationnelles pour les problèmes hyperboliques et paraboliques, application à la mécanique des fluides*. Cours de l'école MATMECA et de l'université Bordeaux 1, 2004.
- M. A. Al-Naafa and M. S. Selim. Sedimentation of monodisperse and bidisperse hard-sphere colloidal suspensions. *AIChE J.*, 38(10) :1618–1630, 1992.
- P. D. Asimow and M. S. Ghiorso. Algorithmic modifications extending melts to calculate subsolidus phase relations. *Am. Mineral.*, 83(10) :1127–1132, 1998.
- I. Baker. Intermediate oceanic volcanic rocks on the "daly gap". *Earth. Planet. Sci. Lett.*, 4 : 103–106, 1968.
- J. Baker and M. Spiegelman. Modelling an infiltration-driven geochemical front. *Earth. Planet. Sci. Lett.*, 136 :87–96, 1995.
- J.-M. Bardintzeff. *Volcans et Magmas*. Collection Sciences et Découvertes, Le Rocher. 160 p., 1986.
- R. G. Berman. wintwq (version 2.3) : a software package for performing internally-consistent thermobarometric calculations. *Commission géologique du Canada, Dossier public 5462, (éd. 2.32)*, 2007.
- R. G. Berman, L. Y. Aranovich, and D. R. M. Pattison. Reassessment of the garnet-clinopyroxene fe-mg exchange thermometer. ii. thermodynamic analysis. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 119 :30–42, 1995.
- O. Bildstein. *Modélisation géochimique des interactions eau-gaz-roche. Application à la diagenèse minérale dans les réservoirs géologiques*. Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur de Strasbourg. 236 p., 1998.
- B. Bonin. *Pétrologie endogène*. Dunod. 336 p., 1995.
- C. C. Bonnefoi, A. Provost, and F. Albarède. The 'daly gap' as a magmatic catastrophe. *Nature vol.*, 136 :270–272, 1995.
- A. E. Boudreau. Iridium-a program to model reaction of silicate liquid infiltrating a porous solid assemblage. *Computers & Geosciences*, 29 :423–429, 2003.
- N. L. Bowen. The reaction principle in petrogenesis. *J. Geology*, 30 :177–198, 1922.
- N. L. Bowen. *Evolution of the Igneous Rocks*. Princeton University Press. 334 p., 1928.
- G. Brandeis and C. Jaupart. On the interaction between convection and crystallization in cooling magma chambers. *Earth. Planet. Sci. Lett.*, 77 :345–361, 1986.

- G. Brandeis and C. Jaupart. Characteristic dimensions and times for dynamic crystallization. *In Origins of Igneous Layering*, 196 :613–639, 1987.
- J. M. Caron, A. Gauthier, A. Schaaf, J. Ulysse, and J. Wozniak. *Comprendre et enseigner la planète terre*. 271 p. Editions Ophrys, 1989.
- C. Cassou. *Modélisation numérique des interactions eau-roche : Optimisation du code de calcul Diaphore et Application à la diagenèse minérale des réservoirs*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Bordeaux. 171 p., 2000.
- P. Charrier. *Approximation Numérique de Problèmes Industriels. Volume II : Volumes Finis en Dynamique des Fluides*. Cours de l'école MATMECA et de l'université Bordeaux 1, 2000.
- F. Chayes. Relative abundance of intermediate members of the oceanic basalt-trachyte association. *J. Geophys. Res.*, 68 :1519–1534, 1963.
- F. Chayes. The oceanic basalt-trachyte relation in general and in the canary islands. *Amer. Mineral.*, 62 :666–671, 1977.
- S. P. Clark JR. *Handbook of Physical Constants*. The Geological Society of America. 587 p., 1966.
- J.-P. Clément, C. Legendre, M. Caroff, H. Guillou, J. Cotten, C. Bollinger, and G. Guille. Epiclastic deposits and 'horseshoe-shaped' calderas in tahiti (society islands) and ua huka (marquesas archipelago), french polynesia. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 120 :87–101, 2003.
- J. Corvisier. *Implémentation des phénomènes de germination/mûrissement/croissance des phases solides secondaires dans un modèle de transport-réactif en milieu poreux géologique - Développement du code de calcul ARCHIMEDE*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et Université Jean Monnet de Saint-Etienne. 309 p., 2006.
- J.-Y. Cottin and J.-P. Lorand. Nouvelles données pétrologiques sur les massifs ultramafiques-mafiques de la région de laouini (hoggar central, algérie). *Bull. Soc. géol. France*, 8(3) :525–536, 1990.
- R. Courant, F. O. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen differenzgleichungen der mathematischen physik. *Math. Ann.*, 100 :32–74, 1928.
- K. G. Cox, J. D. Bell, and R. J. Pankhurst. *The Interpretation of Igneous Rocks*. George Allen & Unwin. 450 p., 1979.
- D. A. Crerar. A method for computing multicomponent chemical equilibria based on equilibrium constants. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 39 :1375–1384, 1975.
- R. A. Daly. The origin of alkaline rocks. *Science*, 32 :220–220, 1910.
- R. A. Daly. The geology of ascension island. *Proc. Amer. Acad. Arts Sci.*, 60 :1–80, 1925.
- R. Dars. *Que sais-je, LA GEOLOGIE*. Presses universitaires de France. 128 p., 1992.
- B. Engquist and S. Osher. Stable and entropy satisfying approximations for transonic flow calculations. *Math. Comp.*, 34 :45–75, 1980.
- M. Fontelles. Les mécanismes de la métasomatose. *Bull. Mineral.*, 101 :166–194, 1978.

BIBLIOGRAPHIE

- D. Gagnevin, R. Ethien, B. Bonin, B. Moine, G. Féraud, M. C. Gerbe, J.-Y. Cottin, G. Michon, S. Tourpin, G. Mamias, C. Perrache, and A. Giret. Open-system processes in the genesis of silica-oversaturated alkaline rocks of the rallier-du-baty peninsula, kerguelen archipelago (indian ocean). *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 2570 :1–34, 2003.
- J. Garside and M. R. Al-Dibouni. Velocity-voidage relationships for fluidization and sedimentation in solid-liquid systems. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 16 :206–214, 1977.
- D. Geist, K. A. Howard, and P. Larson. The generation of oceanic rhyolites by crystal fractionation : the basalt-rhyolite association at volcan alcedo, galapagos archipelago. *J. Petrol.*, 36(4) :965–982, 1995.
- M. S. Ghiorso. Modelling magmatic systems : Thermodynamic relations. in thermodynamic modelling of geological materials : Minerals, fluids, and melts. eds. i. s. e. carmichael and h. p. eugster. *Washington : Mineral. Soc. Am.*, pages 443–465, 1987.
- M. S. Ghiorso and I. S. E. Carmichael. A regular solution model for met-aluminous silicate liquids : Applications to geothermometry, immiscibility, and the source regions of basic magmas. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 71 :323–342, 1980.
- M. S. Ghiorso and R. O. Sack. Chemical mass transfer in magmatic processes iv. a revised and internally consistent thermodynamic model for the interpolation and extrapolation of liquid-solid equilibria in magmatic systems at elevated temperatures and pressures. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 119 :197–212, 1995.
- M. S. Ghiorso, I. S. E. Carmichael, M. L. Rivers, and R. O. Sack. The gibbs free energy of mixing of natural silicate liquids ; an expanded regular solution approximation for the calculation of magmatic intensive variables. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 84 :107–145, 1983.
- M. S. Ghiorso, M. M. Hirschmann, P. W. Reiners, and V. C. Kress. The pmelts : A revision of melts for improved calculation of phase relations and major element partitioning related to partial melting of the mantle to 3 gpa. *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 3(5), 2002.
- A. Giret, M. Grégoire, J.-Y. Cottin, and G. Michon. Kerguelen, a third type of oceanic island ? *The Antarctic*, 48(1) :735–741, 1997.
- M. Godard. *Modélisation des interactions chimiques liquide/solide : application a la circulation des magmas mantelliques*. Thèse de Doctorat, Université des Sciences et Techniques du Languedoc. 194 p., 1993.
- M. Godard, J.-L. Bodinier, and G. Vasseur. Effects of mineralogical reactions on trace element re-distributions in mantle rocks during percolation processes : A chromatographic approach. *Earth. Planet. Sci. Lett.*, 133 :449–461, 1995.
- E. Godlewski and P. A. Raviart. *Hyperbolic systems of conservation laws*. Mathématiques & applications, Editions Ellipses. 252 p., 1991.
- S. K. Godunov. A difference scheme for numerical computation of discontinuous solution of hydro-dynamic equations. *Mat. Sb.*, 47 :271–306, 1959.
- S. K. Godunov. The problem of a generalized solution in the theory of quasi-linear equations and in gas dynamics. *Russian Math. Surv.*, 47 :145–156, 1962.

- E. Goncalvès. *Résolution numérique, discrétisation des EDP et EDO*. Cours de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 2005.
- J. B. Goodman and R. J. LeVeque. A geometric approach to high resolution tvd schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 25 :268–284, 1988.
- J. Grolier, M. Hucher, J. M. Pouliquen, J. Riss, and M. Lavaud. Le calcul des conductivités (thermique, électrique, etc.) des roches, selon la théorie d'ondracek généralisée. *Rev. Institut fr. du pétrole*, 44(1) :43–59, 1989.
- J. Grolier, A. Fernandez, M. Hucher, and J. Riss. *Les propriétés physiques des roches - Théories et modèles*. Masson. 462 p., 1990.
- Von? Gruenewaldt, M. R. Sharpe, and C. J. Hatton. The bushveld complex : introduction and review. *Econ. geology*, 80 :803–812, 1985.
- B. Guy. *Petrologie et géochimie isotopique (S,C,O) des skarns a scheelite de Costabonne*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Mines de Paris. 238 p., 1979.
- B. Guy. Contribution to the theory of infiltration metasomatic zoning; the formation of sharp fronts : a geometrical model. *Bull. Mineral.*, 107 :93–105, 1984.
- R. B. Hargraves. *Physics of Magmatic Processes*. Princeton University Press. 585 p., 1980.
- E. H. Hauri. Melt migration and mantle chromatography, 1 : simplified theory and conditions for chemical and isotopic decoupling. *Earth. Planet. Sci. Lett.*, 153 :1–19, 1997.
- P. Henderson and R. J. Wood. Reaction relationships of chrome-spinels in igneous rocks - further evidence from the layered intrusions of rhum and mull, inner hebrides, scotland. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 78 :225–229, 1981.
- R. Herbin. *Analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Cours de Master de mathématiques, Université Aix Marseille 1, 2006.
- T. Hoïnk, T. Schmalzl, and U. Hansen. Formation of compositional structures by sedimentation in vigorous convection. *Phys. of the Earth Planet. Inter.*, 153 :11–20, 2005.
- J.-L. Jaeger. *Que sais-je, La géochimie*. Presses Universitaires de France. 118 p., 1957.
- A. M. Jellinek and R. C. Kerr. Magma dynamics, crystallization, and chemical differentiation of the 1959 kilauea iki lava lake, hawaii, revisited. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 110 :235–263, 2001.
- G. Joberton. *Découvrons le volcanisme - Les sites volcaniques d'Auvergne*. Editions De Borée. 95 p., 1996.
- T. Juteau and R. Maury. *Géologie de la croûte océanique - Péetrologie et dynamique endogènes*. Enseignement des Sciences de la Terre, Masson. 388 p., 1997.
- K. Kaneko and T. Koyaguchi. Experimental study of the effects of crustal temperature and composition on assimilation with fractional crystallization at the floor of magma chambers. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 129 :155–172, 2004.
- P. B. Kelemen, K. Koga, and N. Shimizu. Geochemistry of gabbro sills in the crust-mantle transition zone of the oman ophiolite : implications for the origin of the oceanic lower crust. *Earth. Planet. Sci. Lett.*, 146 :475–488, 1997.

BIBLIOGRAPHIE

- B. Kieffer, C. F. Jové, E. H. Oelkers, and J. Schott. An experimental study of the reactive surface area of the fontainebleau sandstone as a function of porosity, permeability, and fluid flow rate. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 63(21) :3525–3534, 1999.
- J. Korenaga and P. B. Kelemen. Melt migration through the oceanic lower crust : a constraint from melt percolation modeling with finite solid diffusion. *Earth. Planet. Sci. Lett.*, 156 :1–11, 1998.
- D. S. Korzhinskii. *Theory of Metasomatic Zoning*. Clarendon press, Oxford. 162 p., 1970.
- T. Kuritani. Magmatic differentiation examined with a numerical model considering multicomponent thermodynamics and momentum, energy and species transport. *Lithos*, 74 :117–130, 2004.
- M. Lakhssassi, B. Guy, E. Touboul, and J.-Y. Cottin. Bimodal distribution of the products of a magmatic chamber : modelling by fractional crystallization and coupling of the chemical exchanges with the differential magma/solid transport. *Soumis aux Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, géosciences*.
- A. C. Lasaga. *Kinetic theory in the Earth sciences*. Princeton University Press. 811 p., 1998.
- P. D. Lax. Hyperbolic systems of conservation laws, ii. *Comm. Pure Appl. Math.*, 10 :537–566, 1957.
- P. D. Lax. Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves. *SIAM Regional Conference Series in Applied Mathematics 11*, 1972.
- R. W. Le Maitre. *A Classification of Igneous Rocks and Glossary of Terms : Recommendations of the International Union of Geological Sciences Subcommittee on the Systematics of Igneous Rocks*. Oxford : Blackwell Scientific. 193 p., 1989.
- M Leblanc and G. Ceuleneer. Chromite crystallization in a multicellular magma flow : Evidence from chromitite dike in the oman ophiolite. *Lithos*, 27 :231–257, 1992.
- C Legendre, R. C. Maury, D Savanier, J.-Y. Cottin, C Chauvel, C. Hermond, C. Bollinger, G Guille, S. Blais, and P. Rossi. The origin of intermediate and evolved lavas in the marquesas archipelago : an example from nuku hiva island (french polynesia). *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 143(4) :293–317, 2005.
- R. J. LeVeque. Large time step shock-capturing techniques for scalar conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19 :1091–1109, 1982.
- R. J. LeVeque. A large time step generalization of godunov's method for systems of conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 22 :1051–1073, 1985.
- R. J. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press. 558 p., 2004.
- B. D. Marsh. On bimodal differentiation by solidification front instability in basaltic magmas, part 1 : Basic mechanics. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 66(12) :2211–2229, 2002.
- D. Martin and R. Nokes. A fluid-dynamical study of crystal settling in convecting magmas. *Journal of Petrology*, 30(6) :1471–1500, 1989.

- S. Mirza and J. F. Richardson. Sedimentation of suspensions of particles of two or more sizes. *Chem. Eng. Sci.*, 34 :447–454, 1979.
- M. Morioka and H Nagasawa. Ionic diffusion in olivine. *J. Ganguly, Ed., Diffusion, Atomic ordering, and Mass Transport : Advances in Physical Geochemistry*, 8 :176–197, 1991.
- C. C. Mourtada-Bonnefoi, A Provost, and F. Albarède. The thermochemical dynamics of magma chambers : A simple model. *J. Geophys. Res.*, 104 :7103–7115, 1999.
- J. Moutte. The arxim project : modules for the computation of thermodynamic equilibrium in heterogeneous systems ; applications to the simulation of fluid - rock systems. *JETC IX (Joint Thermodynamics Conference IX), Ecole nationale supérieure des mines de Saint-Etienne, France*, pages 125–126, 12 – 15 June, 2007.
- C. W. Oseen. *Neuere Methoden und Ergebnisse in der Hydrodynamik*. Akademische Verlag, Leipzig, Germany, 1927.
- A. Peccerillo, M.R. Barberio, G. Yirgu, D. Ayalew, M. Barbieri, and T. W. Wu. Relationships between mafic and peralkaline silicic magmatism in continental rift settings : a petrological, geochemical and isotopic study of the gedemsa volcano, central ethiopian rift. *J. Petrol.*, 44(11) : 2003–2032, 2003.
- M. Rabinowicz, J.L. Dandurand, and J. Schott. Chemical transport and dissolution/precipitation of crystalline solution during hydrothermal convection. *J. Geophys. Res.*, 100 :6041–6055, 1995.
- J. F. Richardson and W. N. Zaki. Sedimentation and fluidization. part i. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 32 :35–53, 1954.
- A. Rist and G. Bonnivard. Réduction d’un lit d’oxydes de fer par un gaz. *Revue de la métallurgie*, 60(1) :23–37, 1963.
- P. L. Roe. Shock capturing. *Handbook of Shock Waves, G. Ben-Dor, O. Igra, and T. Elperin, eds., Academic Press*, 1 :787–876, 2001.
- V. V. Rusanov. Calculation of interaction of non-steady shock waves with obstacles. *J. Comput. Math. Phys. USSR*, 1 :267–279, 1961.
- K. R. Schwindinger. Particle dynamics and aggregation of crystals in magma chamber with application to kilauea iki olivines. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 88 :209–238, 1999.
- A. Sedqui. *Modélisation et simulation numérique de l’interaction Fluide-Minéral. Application à l’échange chimique avec transport entre un fluide aqueux et une solution solide à trois pôles*. Thèse de Doctorat, Université Jean Monnet de Saint-Etienne. 177 p., 1998.
- A. Sedqui and B. Guy. Echange chromatographique de deux constituants indépendants entre un fluide aqueux et une solution solide à trois pôles ; application à la substitution ca-fe-mn des grenats de skarn. *C. R. Acad. Sci.*, 332 :227–234, 2001.
- A. Simakin, H. Schmeling, and V. Trubitsyn. Convection in melts due to sedimentary crystal flux from above. *Phys. of the Earth Planet. Inter.*, 102 :185–200, 1997.
- W. R. Smith and R. W. Missen. *Chemical Reaction Equilibrium Analysis : Theory and Algorithms*. John Wiley & Sons. 364 p., 1982.

BIBLIOGRAPHIE

- M. Spiegelman. *Myths & Methods in Modeling*. LDEO, Columbia University. 166 p. + annexes, 2000.
- M. Spiegelman, P. B. Kelemen, and E. Aharonov. Causes and consequences of flow organization during melt transport : The reaction infiltration instability in compactible media. *J. Geophys. Res.*, 106 :2061–2077, 2001.
- C. I. Steefel and A. C. Lasaga. A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems. *Am. Jour. Sci.*, 294 :529–592, 1994.
- M. Stimson and G. B. Jeffery. The motion of two spheres in a viscous fluid. *Proc. R. Soc. Ser. A*, 111 :110–116, 1926.
- G. G. Stokes. On the effect of the internal friction on the motion of pendulums. *Trans. Cambridge Philos. Soc.*, 102(2) :8–106, 1851.
- D. Taylor. Phase diagrams : the composition of the material being instantaneously abstracted from the liquid during equilibrium crystallization in binary systems with solid solution between the end members. *Mineralogical magazine*, 46 :27–30, 1982.
- G. M. Thompson, I.E.M. Smith, and J.G. Malpas. Origin of oceanic phonolites by crystal fractionation and the problem of the daly gap : an example from rarotonga. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 142 :336–346, 2001.
- J. Van der Lee. *Thermodynamic and mathematical concepts of CHESSE*. Technical Report LHM/RD/98/39, Centre d’Informatique Géologique de l’Ecole des Mines de Paris. 99 p., 1998.
- B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme ii. monotonicity and conservation combined in a second order scheme. *J. Comput. Phys.*, 14 :361–370, 1974.
- B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme v. a second order sequel to godunov’s method. *J. Comput. Phys.*, 32 :101–136, 1979.
- B. van Leer. On the relation between the upwind-differencing schemes of godunov, engquist-osher, and roe. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 5 :1–20, 1984.
- L. R. Wager and G. M. Brown. *Layered igneous rocks*. Olivier & Boyd. 588 p., 1968.
- W. M. White. *Geochemistry*. Cornell University. 701 p. + annexes, 2007.
- G. B. Whitham. *Linear and nonlinear waves*. Pure & Applied Mathematics, John Wiley & Sons. 636 p., 1974.

Ecole Nationale Supérieure des Mines
de Saint-Etienne

N° d'ordre : 524 ST

Morad LAKHSSASSI

Mathematical and numerical modelling of fractional crystallization coupled with chemical exchanges and differential magma-solid transport in magmatic chambers

Speciality : Earth Sciences

Keywords : magma chamber, crystallization, sedimentation, reactive transport, thermodynamics, major elements, numerical modelling, hyperbolic equations, bimodal distribution.

Abstract :

In this work we study the modelling of the crystallization of a closed magma chamber. The physical and mathematical model couples three elementary phenomena : solidification, sedimentation and chemical reactions between the solid and the magmatic liquid. Adimensionalizing the partial differential equations makes two parameters appear : they express the respective ratios of the solidification velocity to the transport velocity, and of the chemical kinetics to the transport velocity. The relative transport velocity between the solid and the liquid, the solidification velocity and the chemical partition law between the solid and the liquid are supposed to be known ; this last one may be non-linear and applied for major elements.

The model is written for one chemical component. It is splitted into two submodels, the crystallization/sedimentation model and the reactive transport model. The first is expressed by an hyperbolic partial differential equation and is solved by a three-point scheme, the second is solved using non-centered schemes. The computing program is written in Fortran 90, it is then validated by theoretical methods such as the method of characteristic curves, analytical computations or by qualitative considerations.

Numerical simulations show that, for some values of the dimensionless parameters and for some shapes of the chemical partition curves, the chemical composition of the magma chamber can be non homogeneous, particularly bimodal, starting from homogeneous initial conditions. The degree of this bimodality notably depends on the shape of the chemical partition law.

This model provides an intellectual framework to discuss the phenomena responsible for the variety of composition of magmatic rocks, notably in the same province. It shows in particular that the coupling between three elementary phenomena is enough to account for the bimodality, or more generally the appearance of discontinuities of chemical compositions, without taking into account any additional phenomenon.

Ecole Nationale Supérieure des Mines
de Saint-Etienne

N° d'ordre : 524 ST

Morad LAKHSSASSI

Modélisation mathématique et numérique de la cristallisation fractionnée avec couplage des échanges chimiques et du transport différentiel magma-solide dans les réservoirs magmatiques

Spécialité : Sciences de la Terre

Mots clefs : chambre magmatique, cristallisation, sédimentation, transport réactif, thermodynamique, éléments majeurs, modélisation numérique, équations hyperboliques, répartition bimodale.

Résumé :

Nous étudions dans ce travail la modélisation de la cristallisation d'une chambre magmatique fermée. Le modèle physique et mathématique couple trois phénomènes élémentaires : solidification, sédimentation et réactions chimiques entre solide et liquide magmatique. L'adimensionnement des équations aux dérivées partielles permet de faire apparaître deux paramètres exprimant les ratios respectifs de la vitesse de solidification sur la vitesse de déplacement et de la cinétique d'échange chimique sur la vitesse de déplacement. La vitesse de déplacement relatif entre le solide et le liquide, la vitesse de solidification et la loi de partage à l'équilibre sont supposées connues ; la loi d'équilibre chimique peut être non linéaire et s'appliquer aux éléments majeurs.

Le modèle est écrit pour un constituant chimique. Il est scindé en deux sous modèles, celui de la cristallisation/sédimentation et celui du transport réactif. Le premier est exprimé par une équation de nature hyperbolique et est résolu par un schéma à trois points, le second est résolu par des schémas décentrés. Le code de calcul est écrit en langage Fortran 90, il est ensuite validé par des méthodes théoriques telles que la méthode des courbes caractéristiques, par des calculs analytiques ou par des considérations qualitatives.

Les simulations numériques montrent que, pour certaines valeurs des paramètres adimensionnés et pour certaines formes de la loi d'équilibre chimique, la composition chimique de la chambre peut présenter une répartition non uniforme des compositions, en particulier bimodale (deux valeurs des concentrations sont privilégiées), à partir de conditions initiales homogènes. Le degré de cette bimodalité dépend notamment de la forme de la loi de partage à l'équilibre.

Ce modèle fournit un cadre intellectuel pour discuter les phénomènes responsables de la variété de compositions des roches magmatiques, notamment dans une même province. Il montre en particulier que le couplage entre trois phénomènes élémentaires suffit à rendre compte de la bimodalité ou plus généralement de l'apparition de discontinuités de composition, sans faire intervenir de phénomène additionnel.