



Croissance et coalescence de bulles dans les magmas : analyse mathématique et simulation numérique

Louis Forestier-Coste

► To cite this version:

Louis Forestier-Coste. Croissance et coalescence de bulles dans les magmas : analyse mathématique et simulation numérique. Mathématiques générales [math.GM]. Université d'Orléans, 2012. Français. NNT : 2012ORLE2012 . tel-00736634

HAL Id: tel-00736634

<https://theses.hal.science/tel-00736634>

Submitted on 28 Sep 2012

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.



UNIVERSITÉ D'ORLÉANS



ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET TECHNOLOGIES

LABORATOIRE : Mathématiques - Analyse, Probabilités,
Modélisation - Orléans

THÈSE présentée par :

Louis FORESTIER-COSTE

soutenue le : **22 juin 2012**

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université d'Orléans**

Discipline/ Spécialité: **MATHÉMATIQUES**

**Croissance et coalescence de bulles dans les magmas :
analyse mathématique et simulation numérique**

THÈSE dirigée par :

François JAMES
Simona MANCINI

Professeur, Université d'Orléans
Maître de conférence, Université d'Orléans

RAPPORTEURS :

Pauline GODILLON-LAFITTE
Ivan L'HEUREUX

Professeur, École centrale Paris
Professeur, Université d'Ottawa

JURY :

Laurent DESVILLETES
Alain BURGISSER
Pauline GODILLON-LAFITTE
François JAMES
Simona MANCINI
Rachid TOUZANI

Professeur, e.n.s. Cachan, Président du jury
Chargé de recherche, ISTO, CNRS d'Orléans
Professeur, École centrale Paris
Professeur, Université d'Orléans
Maître de conférence, Université d'Orléans
Professeur, Université de Clermont-Ferrand

Remerciements

Je tiens à remercier François James, Simona Mancini pour m'avoir proposé ce sujet et pour avoir encadré cette thèse. Leur disponibilité et leur patience a permis à cette thèse d'aboutir. Même si nous étions parfois en désaccord, les discussions que nous avons eues ont toujours été très enrichissantes. Merci également de m'avoir accordé votre confiance et d'avoir corrigé ce manuscrit à plusieurs reprises.

Je tient également à remercier Alain Burgisser pour sa participation active à la construction de la thèse et pour ses explications sur la physique des problèmes. Les discussions que nous avons eues m'ont permis de mieux comprendre ce qu'est un volcan et les recherches qui peuvent être associées au volcanisme.

Je remercie chaleureusement Pauline Godillon-Lafitte et Ivan L'Heureux d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse. Je les remercie pour le temps passé à la relecture de ce manuscrit et leur commentaires avisés. Leur remarques et idées de corrections m'ont été utiles pour la rédaction finale de cette thèse.

Merci à Laurent Desvilletes d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse. Je tiens également à remercier Rachid Touzani, Simona Mancini, François James, Pauline Godillon-Lafitte, Laurent Desvilletes et Alain Burgisser d'avoir accepté de faire parti du jury. Leurs questions m'ont permis d'entrevoir les possibilité qu'offre cette thèse.

J'aimerais remercier Stéphane Cordier, Jérôme Le Rousseau, Simona Mancini, François James, Loïc Piffet ainsi que ceux qui attribuent les services, qui m'ont permis d'effectuer le monitorat dans les meilleures conditions.

N'oublions pas les (ex-)directeurs du MAPMO, stéphane Cordier et Romain Abraham qui m'ont permis de participer aux conférences CANUM et SMAI.

J'ai eu la chance d'effectuer ma thèse au MAPMO dont je remercie les membres pour leur gentillesse. Le cadre de travail y est idéal, agréable et motivant, ce fut un plaisir de venir y travailler pendant ces 4 années de thèse. Je tiens à remercier les (ex-)thésards pour leur conseils et discussions. Un grand merci aux secrétaires et informaticiens pour leur efficacité et leur gentillesse.

Finalement, je tiens à remercier ma famille, notamment ma mère, qui a toujours fait en sorte que mes études soient mon unique préoccupation.

Enfin, je remercie la région Centre, le CNRS et l'université d'Orléans pour l'aide financière qu'ils m'ont attribuée pour ce travail.

Table des matières

Remerciements	i
Table des matières	iii
Introduction	1
1 Modèle monodisperse	7
1.1 Présentation du modèle monodisperse (lagrangien)	7
1.2 Adimensionnement	11
1.3 Discrétisation	13
1.3.1 Conservation de la masse d'eau totale	15
1.3.2 Construction du pas d'espace de l'équation de diffusion	16
1.3.3 Conditions de stabilité	17
1.4 Cas limites	19
1.4.1 Régime visqueux	23
1.4.2 Régime à l'équilibre	23
1.4.3 Régime diffusif	24
1.5 Résultats numériques	25
1.5.1 Stabilité numérique	26
1.5.2 Étude numérique des régimes limites	29
1.6 Conclusion	51
2 Étude du modèle monodisperse	53
2.1 Résultats principaux	55
2.2 Étude de courbes limites	55
2.2.1 Équivalence entre masse et pression	57
2.2.2 Intersections des courbes limites	58
2.2.3 Position du point d'intersection	60
2.3 Estimation sur la concentration d'eau dans le magma	62
2.4 Estimations sur la pression et le rayon	64
2.5 Démonstration du théorème 2.1.1	66
2.6 Résultats sur les cas sur/sous-saturé	67
2.7 Existence d'un rayon maximum	69
2.8 Approximation du flux	70
2.9 Conclusion	71
3 Validation du système monodisperse	73
3.1 Modification du traitement de la viscosité du modèle monodisperse	73
3.2 Comparaison avec un modèle existant	74
3.3 Principes des expériences de décompression	76
3.4 Mode de décompression	78
3.5 Comparaison détaillée avec une série expérimentale	79
3.6 Comparaison expériences / résultats	83
3.6.1 Croissance par décompression	85

3.6.2	Coalescence	91
3.6.3	Nucléation	94
3.6.4	Cristallisation	95
3.6.5	Échappement	97
3.7	Conclusions de la validation	98
4	Passage aux équations cinétiques	101
4.1	Description cinétique	102
4.2	Approche des taux de croissance	103
4.2.1	Approche du flux par une formule de Green	104
4.2.2	Approximation "asymptotique" du flux	108
4.3	Approche de la coalescence	108
4.3.1	Présentation d'un noyau physique	109
4.3.2	Présentation d'un noyau simplifié	111
4.3.3	Étude des noyaux	112
4.4	Passage à un modèle bidimensionnel	113
5	Coalescence	115
5.1	Équation de coalescence unidimensionnelle	116
5.1.1	Propriétés de l'équation de coagulation-Smoluchowski	116
5.2	Discrétisation	117
5.2.1	Schéma numérique	117
5.2.2	Un schéma conservatif	122
5.3	Implémentation	125
5.4	Étude comparative de différents schéma 1-D	126
5.4.1	Le noyau constant	126
5.4.2	Le noyau additif	128
5.4.3	Le noyau multiplicatif	129
5.5	Passage au multidimensionnel	131
5.6	Étude comparative de différents schéma multi-D	132
5.6.1	Cas test 5 de [QW07]	132
5.6.2	Cas test 6 de [QW07]	134
5.6.3	Cas test 7 de [QW07]	136
5.7	Conclusion	137
6	Résolution du modèle cinétique complet	139
6.1	Le transport	140
6.1.1	Discrétisation de l'équation de transport	140
6.1.2	Test de validation	142
6.1.3	Test de convergence	145
6.2	La coalescence	153
6.2.1	Comparaison des noyaux de coalescence	153
6.3	Couplage avec la coalescence	157
6.3.1	Résultats numériques	157
6.3.2	Application à la volcanologie	158
6.4	Conclusions	160
	Conclusions et perspectives	161

A	Le programme monodisperse	163
A.1	Option	164
A.2	Le fichier d'entrée	166
A.2.1	Décompression par saut de pression	167
A.2.2	Remarque sur la viscosité	167
A.3	Historique de l'évolution	168
A.3.1	Remonter le temps	168
A.3.2	Décompression par saut de pression	168
A.3.3	Viscosité variable	169
A.3.4	Modification de la discrétisation sur la concentration	169
A.3.5	Flexibilité du fichier d'entrée	169
A.4	Structure du programme	170
A.4.1	Les fonctions utilitaires	170
A.4.2	Les différents schémas	171
A.4.3	Les différentes viscosités	171
B	Les environnements de calcul	173
B.1	Condor	173
B.2	Oarsub	174
B.3	Grid engine	174
C	Le programme polydisperse	177
C.1	Option	178
C.2	Les fichiers d'entrées	179
C.2.1	Le fichier d'entrée standard (donnees.txt)	179
C.2.2	Le fichier de distribution (distrib.txt)	180
C.3	Les fichiers de sorties	181
C.3.1	Le fichier des états initiaux (init_out.txt)	181
C.3.2	Le fichier de sortie standard (out.txt)	182
C.3.3	La marginale de f suivant M (MargM_out.txt)	183
C.3.4	La marginale de f suivant V (MargV_out.txt)	183
C.3.5	Le fichier de sortie optionnel (control_out.txt)	183
C.4	Structure du programme	183
C.4.1	Les fonctions utilitaire	183
C.4.2	La résolution	183
	Bibliographie	185
	Liste des tableaux	191
	Table des figures	193

Introduction

La compréhension des mécanismes éruptifs est une question à la fois académique et sociétale. Académique car elle permet d'aborder la construction de la croûte terrestre et donc la formation de notre planète et sociétale car elle est un des piliers de la prévention des risques liés aux volcans. Un volcan est généralement alimenté par une ou plusieurs chambres magmatiques et un système plus ou moins complexe de conduits. Ce système d'alimentation est situé dans la croûte terrestre, généralement entre 1 et 50 kilomètres de profondeur et est rempli de magma. Le magma est une roche partiellement ou totalement fondue qui provient à l'origine de la fusion du manteau terrestre. La connexion entre la zone source des magmas dans le manteau terrestre et le système d'alimentation crustal n'est pas très bien connue, mais est étroitement associée à la structuration de la croûte terrestre en morceaux appelés plaques tectoniques. Les zones d'extensions et de subductions de ces plaques, par exemple, sont favorables à la fusion partielle du manteau et à la création d'un système magmatique alimentant un volcan. La taille des chambres magmatiques varie au cours du temps ; tant qu'il n'y a pas d'éruption et qu'il y a apport en matériaux, la chambre grossit, un des plus gros volumes estimés pour une chambre magmatique est de 32000 km^3 (le supervolcan Yellowstone au Wyoming, USA), et lors d'une éruption, elles peuvent rétrécir. Les chambres magmatiques d'un volcan peuvent être reliées entre elles ou indépendantes.

Le magma est un matériau complexe car il n'est que partiellement fondu ; il contient les trois états fondamentaux de la matière : du liquide de fusion, des cristaux et des bulles de gaz. Deux éléments, la chimie du liquide et la présence des bulles de gaz, jouent un rôle essentiel car elles ont été identifiées comme contrôles majeurs de la mobilité du magma au sein du système d'alimentation ; mobilité qui régit l'occurrence et le style d'éruption que le volcan sus-jacent subit. Ainsi, les volcans présentent des cycles complexes d'éruptions, qui sont toutes causées par l'évacuation d'une quantité variable de laves (lave étant le nom donné à un magma dégazé arrivé en surface) et de gaz volcanique provenant des bulles.

Les bulles de gaz sont composées d'espèces chimiques dites volatiles, comme l'eau ou le gaz carbonique. Ces volatils peuvent soit se dissoudre dans le liquide soit être présents sous forme gazeuse. La quantité de volatils dissous dans le liquide est contrôlée par la chimie du liquide, sa pression et sa température. Toutes les éruptions impliquent une très forte décompression du magma lors de son ascension vers la surface. Comme les principaux volatils sont de moins en moins solubles lorsque la pression diminue, cette décompression induit la formation et la croissance des bulles de gaz par exsolution des volatils dissous dans le liquide.

Le lien entre style éruptif et bulles de gaz est particulièrement clair pour les magmas dont la chimie est telle que le liquide est très visqueux. Cette chimie est riche en silice et les magmas correspondant sont qualifiés d'acides. À l'extrême, les magmas les plus riches en silice qui soient, sont appelés rhyolites. Le style des éruptions de magmas acides est directement lié à la façon dont les bulles de gaz se comportent et peut se classer selon un pôle effusif et un pôle explosif. Une éruption effusive se caractérise par l'émission séparée du magma et des gaz. Les bulles grossissent et font coalescence durant la remontée du magma et permettent au gaz de s'échapper doucement. Le magma arrive dégazé en surface et forme un dôme de lave. Une éruption explosive, au contraire, se caractérise par l'arrivée

d'un magma chargé de ses bulles de gaz en surface. Les bulles grossissent durant la remontée sans faire coalescence. Le magma, gorgé de gaz mais fragilisé par la présence des bulles, fragmente de manière catastrophique et libère d'un seul coup gaz pressurisés et morceaux de lave fragmentés dans l'atmosphère. Une des causes de la fragmentation est liée à la forte viscosité des magmas acides, qui permet l'accumulation de pression dans les bulles au-delà du point de rupture du magma. La sortie des matériaux se produit généralement dans une zone de faiblesse du volcan constitué le plus souvent par son sommet. Parfois cette zone de faiblesse se trouve sur les flancs du volcan comme ce fut le cas lors de l'éruption du mont Saint Helens en 1980.



FIGURE 1 – Exemple d'éruption effusive, éruption du volcan Kilauea à Hawaï.



FIGURE 2 – Exemple d'éruption explosive, éruption du volcan Pinatubo aux Philippines en 1991

Les conséquences des éruptions effusives et explosives des magmas acides sont nombreuses pour les populations humaines environnantes. Les éruptions explosives produisent une colonne de cendres qui s'élève généralement sur plusieurs kilomètres jusque dans la stratosphère autour du point d'éruption du volcan, pouvant produire, localement ou mondialement, un hiver volcanique. Ces fines cendres retombent pendant plusieurs jours ou mois après l'éruption, rendent l'air irrespirable, et s'accumulent sur de fortes épaisseurs, causant l'effondrement d'infrastructures humaines. Lorsque la colonne de cendre est trop dense, elle peut produire des coulées pyroclastiques par effondrement gravitaire. Ces coulées pyroclastiques sont composées de gaz brûlants transportant des masses considérables de fragment de lave (de fines cendres à des blocs de plusieurs mètres) qui dévalent les pentes du volcan à des vitesses supérieures à 100 km/h et qui peuvent atteindre plusieurs dizaines de kilomètres de long.

Les éruptions effusives ont des effets plus limités, généralement circonscrits autour de l'édifice volcanique. Les laves fluides émisent forment généralement des coulées depuis des fontaines ou des lacs de lave. Ces coulées peuvent être souterraines et sortir à la surface à plusieurs kilomètres du volcan en éruption. Les coulées représentent le principal danger de ces éruptions et avancent généralement à une vitesse inférieure à 60 km/h , causant la destruction des infrastructures rencontrées. Les laves visqueuses forment des dômes de laves qui peuvent croître très rapidement (par exemple, lors de l'éruption du mont Saint Helens en 1980, le dôme a grandi de 1.5 m par jour). Ces dômes peuvent se former sur quelques jours ou plusieurs années, mesurant de quelques mètres à plusieurs centaines de mètres. Lorsque ces dômes de laves grossissent rapidement, ils peuvent devenir instables et s'effondrer donnant ainsi naissance à une coulée pyroclastique [FO04] (comme ce fut le cas le 8 mai 1902, la coulée provenant de l'effondrement du dôme de lave de la montagne Pelée qui tua les 28000 habitants de la ville de Saint Pierre). Les gaz qui s'échappent du magma peuvent être toxiques. Cependant, ils peuvent également produire des coulées pyroclastiques par effondrement. Ces deux types d'éruptions peuvent produire des bombes volcaniques, fragment de lave de plus de 64 mm de diamètre, projeté dans les airs lors de

l'éruption et pouvant retomber à plusieurs centaines de mètres, voire quelques kilomètres, du point d'éruption du volcan. Les plus grosses bombes volcaniques observées faisaient 6 m de diamètre.

Il n'est pas rare qu'une éruption commence par un dôme de lave et se poursuive par une explosion, ou même oscille entre ces deux extrêmes (ref Montserrat, Unzen, Fig.1, Fig.2). Le magma ne changeant pas de composition chimique dans ces cas, la bifurcation entre activité explosive et effusive est contrôlée par l'évolution de la population des bulles de gaz dans le conduit volcanique. Toutefois, en raison de sa complexité, cette évolution n'est pas bien comprise. Un des objectifs de cette thèse est donc une meilleure compréhension des deux phénomènes affectant la population de bulles, croissance et coalescence, afin de préciser leur rôle dans la bifurcation explosif/effusif. Ce type de travail est donc une étape essentielle dans la fabrication d'outils modernes de prévention des risques volcaniques.

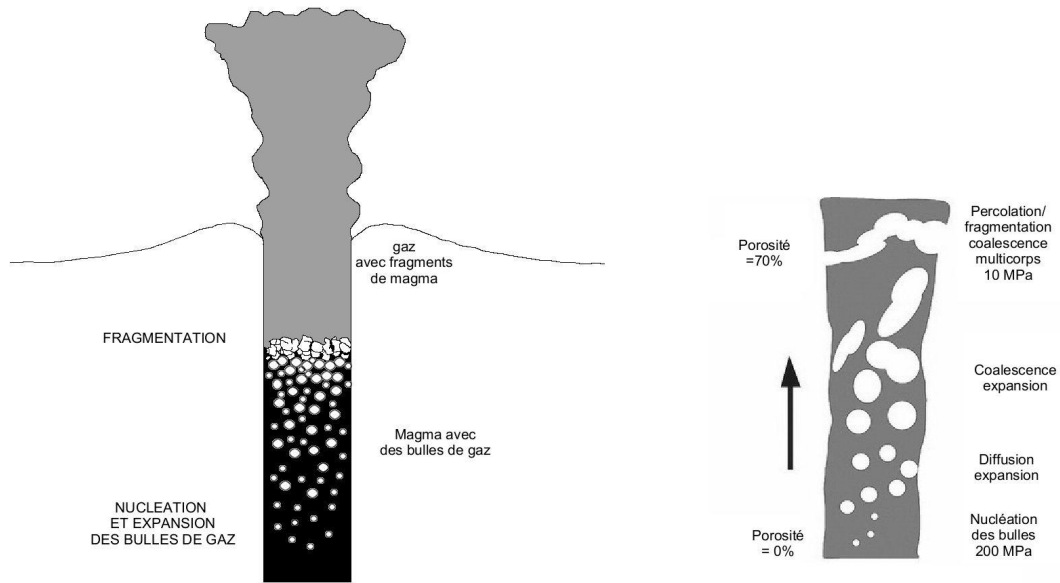


FIGURE 3 – Diagramme montrant les phases du magma remontant et le rôle central de la phase gazeuse

Un bref résumé des étapes de la vie d'une bulle de gaz lors d'une éruption de magma acide va permettre de circonscrire le périmètre des phénomènes étudiés. Tout commence en profondeur, là où le magma remonte jusqu'à ce que la nucléation commence. L'apparition de bulles par nucléation se passe à des pressions comprises entre 200 et 60 MPa, selon la quantité de volatils initialement dissoute dans le magma [MS00]. Ceci est suivi par leur croissance, due à l'exsolution des volatils d'une part, à l'expansion du gaz d'autre part, et la coalescence bulle à bulle (Fig.3). La viscosité élevée des magmas acides et la petite taille des bulles empêchent les bulles de s'échapper du magma par flottaison. Si les conditions pour la fragmentation sont atteintes, en général à une porosité $\sim 70\%$, une éruption explosive a lieu. Si les bulles forment par coalescence un réseau suffisamment étendu, le magma devient un milieu perméable au gaz, qui peut alors s'échapper sans fragmenter le magma : l'éruption est de type effusif [Jau00]. Les deux phénomènes étudiés dans cette thèse, croissance et coalescence, se passent donc dans le conduit volcanique, après la nucléation de bulles, mais avant la fragmentation du magma ou l'échappement de gaz par perméabilité. Les bulles sont en sus considérées immobiles par rapport au reste du magma (cristaux et liquide).

Une des difficultés majeures de l'étude des bulles magmatiques est l'imbrication des tailles caractéristiques impliquées. Une bulle fait typiquement 10^{-5} m et son évolution est

contrôlée par son environnement immédiat, alors qu'un conduit volcanique fait typiquement 10 m de diamètre et plusieurs kilomètres de longueur. L'étude des fragments de laves et les expériences de laboratoire simulant la croissance des bulles se focalisent sur une échelle intermédiaire de l'ordre de $10^{-3} - 10^{-2}$ m. La modélisation permet de faire le lien entre ces échelles.

Dans [LGS04], une équation d'expansion-coalescence est proposée pour simuler l'évolution statistique d'une population de bulles par décompression et coalescence. La population de bulles n'est définie qu'en fonction de leur volume. Un travail fait en stage de Master nous a montré que, lorsqu'il n'y a pas de coalescence, cette équation n'était valable que pour les cas dit à l'équilibre. Le but de cette thèse est d'améliorer ce modèle en introduisant d'autres grandeurs caractéristiques des bulles telles que la masse de volatil dans la bulle ou la pression du gaz dans la bulle. Nous travaillons uniquement sur la décompression afin de trouver une vitesse plus générale pour une population de bulles donnée. Pour cela, nous allons devoir étudier les équations qui régissent la croissance des bulles. Nous sommes partis d'un modèle d'équations différentielles couplées à une équation aux dérivées partielles décrivant la croissance d'une bulle au niveau microscopique pour construire un nouveau modèle mésoscopique décrivant l'évolution statistique d'une population de bulles.

La thèse est séparée en six chapitres reflétant les grandes étapes de cette modélisation :

Le chapitre 1 présente un modèle courant dans la littérature, voir [PSA93], pour décrire l'évolution de la croissance d'une bulle par décompression dans un magma très visqueux. Nous considérons une seule espèce volatile, nous parlerons toujours d'eau mais cela reste vrai pour d'autres volatils. La croissance de la bulle va alors dépendre de sa masse, de son rayon et de la concentration en volatil dans le magma environnant. Ce modèle peut être adimensionné pour étudier des régimes limites, voir [LNL04]. Nous proposons également une résolution numérique qui conserve la masse totale de volatil. Enfin nous étudions l'influence de certains paramètres sur la solution, et la convergence numérique du régime général vers les régimes limites.

Le chapitre 2 présente une étude théorique du modèle ainsi que de ses solutions. Cette étude nous permettra de simplifier une partie des étapes de calculs pour déterminer la solution.

Le chapitre 3 est une application de la résolution numérique à des données physiques. Nous montrons que notre choix de décompression linéaire dans le modèle peut induire quelques erreurs. Nous comparons également l'évolution obtenue par notre résolution et une résolution existante d'un modèle similaire. Enfin nous comparons les données mesurées aux données calculées par notre résolution pour un grand nombre de données physiques.

Le chapitre 4 présente le passage du modèle lagrangien présenté et étudié dans les chapitres précédent à un modèle cinétique. Le modèle cinétique ainsi défini, permet de simuler la croissance d'une population de bulle par décompression et coalescence. Nous présenterons les taux de croissance que nous considérons ainsi que quelques noyaux de coalescence issus de la physique du processus de coalescence. Une étude rapide nous permet de considérer uniquement deux dimensions physiques, le volume et la masse de volatil des bulles pour décrire leur évolution.

Le chapitre 5 étudie l'équation de coalescence multidimensionnelle et propose une résolution numérique qui conservera les propriétés de l'équation continue. Une validation du code par différents cas courants en une dimension et deux dimensions est également présentée.

Le chapitre 6 présente premièrement la résolution numérique utilisée pour résoudre la partie conservative de l'équation cinétique ainsi qu'une validation du code. Ensuite nous regardons la forme de la solution pour les noyaux de coalescence physiques. Nous présentons ensuite le couplage entre le code pour résoudre la coalescence et celui pour résoudre l'équation de transport. Enfin nous testons ce modèle sur un cas test purement

mathématique et sur quelques données expérimentales.

En annexe sont présentée les fichiers d'utilisation des fichiers C++ qui sont utilisée pour l'application à la volcanologie. Nous présentons également les différents environnements de calcul et leur utilisation pour lancer tous les calculs dont nous avons eu besoin.

Chapitre 1

Modèle monodisperse

Nous étudions l'évolution de bulles de gaz d'une seule espèce volatile. En général, nous parlerons d'eau mais la théorie reste la même pour d'autre espèce volatile. Nous ne considérons que la croissance des bulles, qui est régie par la décompression due à la remontée du magma et par la diffusion d'une espèce volatile du magma dans la bulle. Nous négligeons la coalescence des bulles. Ceci peut être décrit par un système d'équations différentielles. Depuis le travail fondateur fait dans [Scr59], de nombreux schémas numériques permettant de résoudre un tel système d'équations différentielles ont été proposées dans le cadre de fluides visco-élastiques (voir [AA91, VV98, Wel98, BLE05, REBL05]). L'application de ce système d'équations différentielles aux bulles de gaz dans les magmas est un peu plus récente (voir [PSA93, Tor95, PS98, BMW01, LNL04, PS05, CDN06]). Tous ces schémas ont en commun une discrétisation de l'équation d'advection-diffusion qui n'est pas conservative par construction pour les espèces diffusées. En fait, ils utilisent des paramètres de discrétisation qui doivent être ajustés de façon empirique pour assurer la convergence et/ou une précision suffisante du schéma. Nous proposons un schéma numérique, dont la discrétisation de l'équation de diffusion advection est conservative par construction. Nous étudions l'ensemble des équations, proposées par [LNL04], qui décrivent la croissance des bulles ainsi que leurs solutions pour différents régimes : forte ou faible diffusion d'eau dans le magma, forte ou faible viscosité du magma.

Une partie de ce chapitre et du chapitre 3 fait l'objet de l'article [FCMBJ12].

1.1 Présentation du modèle monodisperse (lagrangien)

Comme dans [LNL04] l'évolution des bulles est étudiée de manière lagrangienne, les bulles sont toutes supposées identiques, on peut donc décrire l'évolution d'une seule bulle.

On suppose que l'échange d'eau entre magma et bulle s'effectue dans une région finie autour de la bulle (voir Fig. 1.1) : c'est la zone d'influence ZI . Au-delà de cette zone, il n'y a donc plus d'interaction. Sur la bordure extérieure de la zone d'influence ∂ZI , on a donc $\frac{\partial C}{\partial \vec{n}} = 0$, où C représente la concentration d'eau dans le magma et $\vec{n}$ la normale sortante du domaine ZI . La loi de conservation de la masse totale d'eau s'écrit alors :

$$\rho V + \rho_m \int_{ZI(t)} C dx = \rho_m V_{ZI}(0) C_0 \quad (1.1)$$

où ρ est la densité de l'eau dans la bulle, ρ_m est la densité du magma, V est le volume de la bulle, V_{ZI} est le volume de la zone d'influence, C représente la concentration d'eau dans le magma et C_0 la concentration d'eau dans le magma lorsque $V = 0$. La quantité

ρV représente la masse d'eau dans la bulle, l'intégrale $\rho_m \int_{ZI(t)} C dx$ représente la masse d'eau dans la zone d'influence et la quantité $\rho_m V_{ZI(0)} C_0$ représente la concentration d'eau présente dans la zone d'influence lorsque le volume de la bulle est nul ($V = 0$).

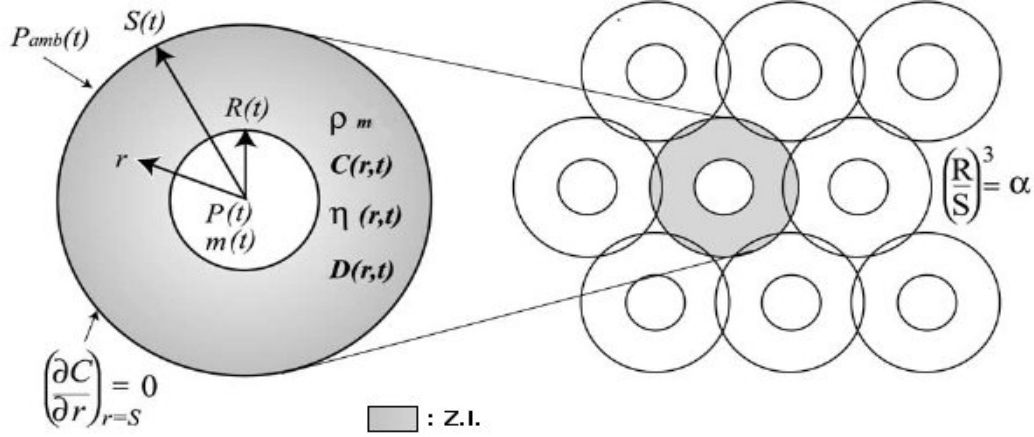


FIGURE 1.1 – Le magma est vu comme un groupe de cellules sphériques, chacune étant composée d'une bulle de gaz (vapeur d'eau) de rayon R centrée dans une coquille sphérique de magma de rayon S . Les cellules sont arrangées en treillis 3D avec quelques recouvrements, de telle façon que la fraction de volume de gaz est $\alpha = (R/S)^3$.

Suivant le formalisme de [LNL04], les bulles et leur zone d'influence sont considérées comme des sphères emboîtées. Nos inconnues sont le rayon de la bulle $R(t)$, la pression du gaz dans la bulle $P(t)$ et la concentration d'eau dans le magma $C(r, t)$, qui dépend du temps t et de la distance du bord de la bulle r . L'hypothèse de réseau hexagonal, également proposée dans [LNL04], permettra de définir une notion de porosité.

Les équations qui décrivent l'évolution en temps du rayon et de la pression d'une bulle ainsi que celle de la concentration d'eau ont été décrites dans la littérature de nombreuses fois. Par conséquent, nous ne reproduirons pas ici ce calcul et nous renvoyons le lecteur, par exemple, à [Scr59, AA91, PSA93, PS98, L'H07]. Nous présentons les équations que nous considérons pour notre modèle.

• Équation de conservation globale :

-la loi de conservation de la masse totale d'eau dans la zone d'influence (1.1) s'écrit en géométrie sphérique :

$$\frac{4}{3}\pi R^3 \rho + \int_R^S 4\pi r^2 \rho_m C dr = \frac{4}{3}\pi S_0^3 \rho_m C_0 \quad (1.2)$$

où ρ est la densité de l'eau, ρ_m est la densité du magma, C_0 est la concentration d'eau dans le magma lorsque $R = 0$, S_0 est le rayon de la zone d'influence quand $R = 0$, et $R < r < S$ est la distance par rapport au centre de la bulle, avec S le rayon de la zone d'influence.

• Équations sur la bulle :

-l'équation de conservation de la quantité de mouvement.

La conservation des moments de l'équation de Navier-Stokes pour un fluide incompressible très visqueux s'écrit :

$$P - P_a = \frac{2\sigma}{R} + 4\frac{\eta_{eff}}{R} \frac{dR}{dt} \quad (1.3)$$

où η_{eff} est la viscosité effective du milieu, P_a est la pression ambiante et σ est la tension de surface de la bulle. La viscosité effective η_{eff} sera détaillé plus tard (c.f. annexe A.2.2).
-la loi des gaz parfaits :

$$\rho = P \frac{M}{GT} \quad (1.4)$$

où M est la masse molaire de l'eau, G est la constante des gaz parfait et T est la température du gaz.

• **Équation sur le magma :**

-l'équation de diffusion advection pour l'eau dissoute :

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (1.5)$$

où D est la diffusivité de l'eau dans le magma, $R < r < S$ est la distance du centre de la bulle à une couronne extérieure de magma et dC/dt est la dérivée totale de la concentration C .

Le phénomène ayant lieu dans un milieu incompressible, on aura :

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \dot{R} \frac{R^2}{r^2} \frac{\partial C}{\partial r}$$

où le terme d'advection est dû au déplacement des bords de la bulle, et prend en compte le modèle sur la zone d'influence choisi et la vitesse radiale.

Nous complétons (1.5) par les conditions aux limites :

$$C(R, t) = K_H \sqrt{P}, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=S} = 0 \quad (1.6)$$

où la condition en $r = R$ est la loi de solubilité de Henry, et signifie qu'à l'interface bulle-magma, la concentration d'eau est localement à l'équilibre avec la pression P du gaz dans la bulle. La condition au bord $r = S$ est une condition de flux nul sur le bord externe de la zone d'influence, la masse d'eau est conservée sous forme dissoute ou de gaz dans cette zone.

• **Équation a l'interface bulle-magma :**

-en considérant le flux défini par (1.5), le bilan de masse (1.2) peut s'écrire :

$$\frac{4\pi}{3} \frac{d}{dt} (\rho R^3) = 4\pi \rho_m \left(r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right)_{r=R} \quad (1.7)$$

où ρ_m , ρ sont les densités du magma et du gaz et D est la diffusivité de l'eau dans le magma.

L'eau est diffusée à travers la membrane de la bulle et passe donc de la bulle sous forme gazeuse au magma sous forme dissoute et vice versa.

• **Conditions extérieures :**

-Nous considérons que la pression ambiante suit une décompression linéaire car c'est ce qui est usuellement considéré pour les expériences de décompression faites en laboratoire :

$$P_a(t) = P_i - t\check{P}_a \quad (1.8)$$

où $\check{P}_a$ est le taux de décompression et P_i est la pression ambiante initiale.

-le modèle choisi sur la zone d'influence :

La zone d'influence est le volume dans lequel l'eau dissoute dans le magma interagit avec la bulle.

Comme nous considérons un ensemble de bulles strictement identiques dans un magma incompressible, il est naturel de considérer que le volume de magma agissant directement sur l'évolution de la bulle est constant (voir [LNL04]) :

$$S^3 = S_0^3 + R^3 \quad (1.9)$$

où on rappelle que $S = S(t)$ représente la rayon de la sphère d'influence dans laquelle l'eau va jouer sur l'évolution de la bulle et S_0 est cette même zone d'influence lorsque $R = 0$.

Remarque 1.1.1

Avec cette définition de zone d'influence, on peut exprimer la porosité du magma α . On définit α comme le volume occupé par les bulles par rapport au volume total de notre mélange, voir [LNL04, PSA93, PS98], par :

$$\alpha(t) = \left(\frac{R(t)}{S(t)} \right)^3 \quad (1.10)$$

Remarque 1.1.2

Dans plusieurs modèles, un taux de croissance ν_R remplace $\dot{R}$ dans (1.3) et un taux de croissance ν_r apparaît dans le terme d'advection de (1.5). Le choix de modèle incompressible, (1.9), conduit à l'égalité suivante :

$$\nu_r = \dot{R} \frac{R^2}{r^2} \quad \text{et donc} \quad \nu_R = \dot{R} .$$

Dans le cas où $0 < D, R, \eta_{eff} < \infty$, on étudie donc les équations (1.3), (1.5), (1.7) complétées par (1.6). On le récrit sous la forme d'un système de deux équations différentielles :

$$\begin{cases} \frac{dR}{dt} = \frac{R}{4\eta_{eff}} \left(P - P_a - \frac{2\sigma}{R} \right) \\ \frac{d}{dt} (\rho R^3) = 3\rho_m \left(r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right)_{r=R} \end{cases} \quad (1.11)$$

où C est solution de l'équation aux dérivées partielles (1.5), avec les conditions aux limite (1.6). Et la densité ρ est liée à la pression P par la loi des gaz parfaits (1.4).

Rappelons ci-après, les variables, les paramètres et les constantes qui apparaissent dans le modèle :

-inconnues : $R(t)$: rayon de la bulle $C(r, t)$: concentration d'eau à la distance r du centre de la bulle $P(t)$: pression du gaz dans la bulle**- paramètres :** $S(t)$: rayon de la zone d'influence de la bulle $P_a(t)$: pression ambiante**-constantes :**

D	: diffusivité	($\in [10^{-13}; 10^{-8}] \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)
η_{eff}	: viscosité effective	($\in [1; 10^9] \text{ Pa s}$)
M	: masse molaire de l'eau	($18 \cdot 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}$)
G	: constante des gaz parfaits	($8.3144 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)
T	: température	($\in [900; 1500] \text{ K}$)
σ	: tension de surface	($\in [0.01; 0.5] \text{ J m}^{-2}$)
ρ_m	: densité du magma	($\in [2000; 2600] \text{ kg m}^{-3}$)
K_H	: constante de Henry	($3.44 \cdot 10^{-6} \text{ kg}^{-1/2} \text{ m}^{1/2}$)
S_0	: $S_0^3 = S^3 - R^3$ (constante)	(m)
$\dot{P}_a$	: taux de décompression	($\in [0; 10^9] \text{ Pa s}^{-1}$)
P_i	: pression ambiante initiale	($\in [10^6; 10^9] \text{ Pa}$)
C_0	: concentration d'eau quand $R = 0$	
R_i	: rayon initial	($\in [10^{-7}; 10^{-2}] \text{ m}$)

Remarque 1.1.3

La diffusivité D , la viscosité effective η_{eff} et la température T peuvent varier suivant différents modèles. Nous les considérerons souvent constantes ou nous décrirons le modèle utilisé dans le cas contraire.

1.2 Adimensionnement

En suivant [LNL04, PS98, PSA93], on adimensionne le système d'équations pour étudier le comportement des solutions par rapport aux valeurs des paramètres caractéristiques des équations. Pour cela, on utilise l'adimensionnement proposé par [LNL04] qui considère les cinq valeurs physiques significatives suivantes : un rayon de bulle, une pression, une densité, un coefficient de viscosité et un coefficient de diffusivité. Pour l'adimensionnement, on choisit les valeurs initiales de la pression ambiante $P_i = P_a(0)$, la densité de gaz initiale ρ_i associée à P_i par la loi des gaz parfaits, le rayon initial R_i , la diffusivité initiale D_i et la viscosité effective initiale η_i .

On pose alors :

$$\begin{aligned}
\hat{\eta}_{eff} &= \frac{\eta_{eff}}{\eta_i} & \hat{D} &= \frac{D}{D_i} & \hat{\rho}_m &= \frac{\rho_m}{\rho_i} & \Sigma &= \frac{2\sigma}{R_i P_i} \\
\hat{R} &= \frac{R}{R_i} & \hat{\dot{R}} &= \frac{\dot{R} P_i}{R_i \dot{P}_a} & \hat{S} &= \frac{S}{R_i} & \hat{r} &= \frac{r}{R_i} \\
\hat{P} &= \frac{P}{P_i} & \hat{P}_a &= \frac{P_a}{P_i} & \hat{\rho} &= \frac{\rho}{\rho_i} & \hat{t} &= t \frac{\dot{P}_a}{P_i}
\end{aligned}$$

On pose aussi $C_H = K_H \sqrt{P_i}$.

Remarque 1.2.1 .

Lorsque la température n'est pas constante, on rajoute une sixième valeur physique d'adimensionnement : la température initiale T_i . La loi des gaz parfait devient $\hat{\rho} \hat{T} = \hat{P}$ en adimensionnel, avec $\hat{T} = T/T_i$. À température T constante, on a donc la relation d'équivalence entre pression et densité $\hat{\rho} = \hat{P}$.

Remarque 1.2.2 .

Contrairement à [LNL04], on ne suppose pas la pression initiale de la bulle et la pression

ambiante initiale égales $P(0) = P_a(0)$, mais on laisse $P(0)$ indéterminé pour le moment.

Nous introduisons les paramètres d'adimensionnement en viscosité Θ_V et en diffusion Θ_D [LNL04] :

$$\Theta_V = \frac{4\eta_i \check{P}_a}{P_i^2} \quad \Theta_D = \frac{R_i^2 \check{P}_a}{D_i P_i}$$

Les paramètres Θ_V et Θ_D régissent l'évolution des équations et seront appelés paramètres de relaxation visqueux (Θ_V) et diffusif (Θ_D). Leurs valeurs extrêmes définissent un certain nombre de régimes spécifiques qui sont analysés en section 1.4.

Le problème s'écrit alors en variables adimensionnelles :

$$\frac{d\hat{R}}{d\hat{t}} = \frac{\hat{R}}{\Theta_V \hat{\eta}_{eff}} \left(\hat{P} - \hat{P}_a - \frac{\Sigma}{\hat{R}} \right) \quad (1.12)$$

$$\frac{d}{d\hat{t}} \left(\hat{\rho} \hat{R}^3 \right) = \frac{3\hat{\rho}_m}{\Theta_D} \left(\hat{r}^2 \hat{D} \frac{\partial C}{\partial \hat{r}} \right)_{\hat{r}=\hat{R}} \quad (1.13)$$

$$\hat{R}^3 \hat{\rho} + 3\hat{\rho}_m \int_{\hat{R}}^{\hat{S}} \hat{r}^2 C d\hat{r} = \frac{S_0^3}{R_i^3} C_0 \hat{\rho}_m \quad (1.13 \text{bis})$$

où C est solution de l'équation d'advection-diffusion :

$$\hat{r}^2 \frac{\partial C}{\partial \hat{t}} + \frac{d\hat{R}}{d\hat{t}} \hat{R}^2 \frac{\partial C}{\partial r} = \frac{1}{\Theta_D} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left(\hat{r}^2 \hat{D} \frac{\partial C}{\partial \hat{r}} \right) \quad (1.14)$$

avec les conditions aux bords :

$$C_{\hat{R}} = C_H \sqrt{\hat{P}}, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial \hat{r}} \right|_{\hat{r}=\hat{S}} = 0 \quad (1.14 \text{bis})$$

L'équation sur la zone d'influence (1.9) devient :

$$\hat{S}^3 = \hat{R}^3 + \hat{S}_0^3 \quad (1.15)$$

où maintenant $\hat{S}_0 = \frac{S_0}{R_i}$.

Enfin, l'équation pour la pression ambiante (1.8) devient :

$$\hat{P}_a = 1 - \hat{t} \quad (1.16)$$

Remarque 1.2.3

Si la pression ambiante suit une loi quelconque, il faut alors changer la façon d'adimensionner : au lieu d'adimensionner par $P_i/\check{P}_a$ qui correspond au temps auquel on atteint une pression nulle, il faudrait adimensionner par le temps final de simulation t_f . Certains paramètres et variables seraient alors adimensionnés comme suit :

$$\begin{aligned} \Theta_V &= \frac{4 \eta_i}{P_i t_f} & \Theta_D &= \frac{R_i^2}{D_i t_f} & \hat{t} &= \frac{t}{t_f} \\ \dot{\hat{R}} &= \frac{\dot{R} t_f}{R_i} & \hat{P}_a(\hat{t}) &= \frac{P_a(t_f \hat{t})}{P_i} \end{aligned}$$

Proposition 1.2.4 *Bilan de masse*

Le système d'équation (1.12)-(1.15) conserve la masse totale d'eau entre bulle et magma.

Démonstration

On considère l'équation (1.13bis) que l'on dérive par rapport au temps :

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}\hat{R}^3}{d\hat{t}} &= -\frac{d}{d\hat{t}} \left(3\hat{\rho}_m \int_{\hat{R}}^{\hat{S}} \hat{r}^2 C d\hat{r} \right) = \\ &= -3\hat{\rho}_m \left(\int_{\hat{R}}^{\hat{S}} \hat{r}^2 \partial_{\hat{t}} C d\hat{r} + \hat{S}^2 \frac{d\hat{S}}{d\hat{t}} C(\hat{S}, \hat{t}) - \hat{R}^2 \frac{d\hat{R}}{d\hat{t}} C(\hat{R}, \hat{t}) \right) \end{aligned}$$

Or d'après (1.15) on a que $\frac{d\hat{R}^3}{d\hat{t}} = \frac{d\hat{S}^3}{d\hat{t}}$, on peut donc écrire l'équation précédente sous la forme :

$$\frac{d\hat{\rho}\hat{R}^3}{d\hat{t}} = -3\hat{\rho}_m \int_{\hat{R}}^{\hat{S}} \left(\hat{r}^2 \partial_{\hat{t}} C + \hat{R}^2 \dot{\hat{R}} \partial_{\hat{r}} C \right) d\hat{r} \quad (1.17)$$

D'autre part, on peut réécrire (1.13) sous forme intégrale :

$$\frac{d\hat{\rho}\hat{R}^3}{d\hat{t}} = -3\hat{\rho}_m \int_{\hat{R}}^{\hat{S}} \frac{1}{\Theta_D} \partial_{\hat{r}} \left(\hat{r}^2 \hat{D} \partial_{\hat{r}} C \right) d\hat{r}. \quad (1.18)$$

Enfin (1.17) et (1.18) impliquent l'équation d'advection-diffusion (1.14).

Nous avons donc la conservation de la masse totale d'eau. $\square$

1.3 Discrétisation

Dans cette section, nous nous intéressons à résoudre numériquement le problème décrit par les équations (1.12)-(1.15) sur le rayon $\hat{R}(\hat{t})$, la pression $\hat{P}(\hat{t})$ et la concentration $C(\hat{r}, \hat{t})$ avec les conditions de bords (1.14bis) et les hypothèses extérieures (1.15) et (1.16).

En particulier, on propose un schéma numérique pour l'équation d'advection-diffusion qui conserve la masse d'eau. C'est un point délicat de la discrétisation, le flux au bord de la bulle doit être calculé avec attention à cause de la différence d'ordre de grandeur possible entre les paramètres de relaxation Θ_V et Θ_D .

On note par la suite f^n l'approximation de $f(t^n)$ pour toutes les variables (rayon, pression, concentration, porosité, température, ...).

La discrétisation consiste en 3 étapes principales :

1. discrétisation de l'équation en $\hat{R}$
2. discrétisation de l'équation aux dérivées partielles sur C et définition du flux discret
3. discrétisation de l'équation sur la masse d'eau dans la bulle

A chaque temps t^n , on calcule un pas de temps $\Delta t^n > 0$ vérifiant les conditions de stabilité/positivité (voir section 1.3.3). On pose $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$ et $P_a^{n+1} = 1 - t^{n+1}$.

Étape 1

On commence par résoudre l'équation différentielle 1.12 en semi-implicite pour $\hat{R}$: le rayon est traité de manière implicite alors que les pressions sont traitées en explicite.

L'évolution du rayon discret est alors donnée par :

$$R^{n+1} = \left(R^n - \Delta t^n \frac{\Sigma}{\eta_{eff} \Theta_V} \right) \left(1 - \Delta t^n \frac{(P^n - P_a^n)}{\Theta_V \eta_{eff}} \right)^{-1} \quad (1.19)$$

Une fois R^{n+1} calculé, nous calculons les valeurs de S , $\dot{R}$ et α par les relations suivantes :

$$S^{n+1} = \left((R^{n+1})^3 + \hat{S}_0^3 \right)^{1/3}, \quad \dot{R}^{n+1} = \frac{R^{n+1} - R^n}{\Delta t^n} \quad \text{et} \quad \alpha^{n+1} = \left(\frac{R^{n+1}}{S^{n+1}} \right)^3$$

Étape 2

L'équation d'advection-diffusion pour la concentration d'eau $C(\hat{r}, \hat{t})$ est résolue en séparant l'équation en une étape d'advection puis une étape de diffusion. Pour résoudre l'équation aux dérivées partielles sur C (1.14), nous devons définir une discrétisation de $\hat{r} \in [\hat{R}(\hat{t}), \hat{S}(\hat{t})]$.

On définit les points du maillage r_i^{n+1} comme :

$$r_i^{n+1} = \left((R^{n+1})^3 - (R^n)^3 + (r_i^n)^3 \right)^{1/3} \quad \forall i \in \llbracket 0, N \rrbracket \quad (1.20)$$

Un tel maillage permet de prendre en compte l'incompressibilité du magma sans faire apparaître le terme d'advection dans la discrétisation (voir section 1.3.2) et correspond donc à l'étape d'advection. Un tel maillage se raffina sur le bord de la bulle (en $\hat{R}$) si $\hat{R}$ est croissant, voir remarque 1.3.6.

Le pas d'espace est donné par :

$$\Delta r_i^{n+1} = r_{i+1}^{n+1} - r_i^{n+1} \quad \forall i \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket.$$

On note $C_i^n = C(r_i, t^n)$, constant sur $]r_i, r_{i+1}[$. La résolution de l'étape d'advection a pour expression (voir section 1.3.2) :

$$C_i^{n+1/2} = \frac{(r_{i+1/2}^n)^2 \Delta r_i^n}{(r_{i+1/2}^{n+1})^2 \Delta r_i^{n+1}} C_i^n \quad \forall i \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \quad (1.21)$$

Concernant la discrétisation de la partie diffusive de (1.14), nous définissons le flux discret entre les mailles $i-1$ et i , F_i^{n+1} , comme étant une discrétisation de $\hat{D}\hat{r}^2\partial_{\hat{r}}C$:

$$F_i^{n+1} = (r_i^{n+1})^2 D_i^{n+1} (C_i^{n+1/2} - C_{i-1}^{n+1/2}) \frac{2}{r_{i+1}^{n+1} - r_{i-1}^{n+1}} \quad \forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \quad (1.22)$$

Le flux F_N^{n+1} sur la dernière maille est déterminé par la condition de flux nul en $\hat{S}$:

$$F_N^{n+1} = 0 \quad (1.23)$$

Le flux F_0^{n+1} sera déterminé de telle sorte que la masse d'eau du système discret soit conservée (voir section 1.3.1).

Maintenant, on résout l'équation de diffusion, $\Theta_D \hat{r}^2 d_t C = \partial_{\hat{r}}(\hat{r}^2 \hat{D} \partial_{\hat{r}} C)$, par une méthode de volumes finis. En intégrant l'équation sur la maille $[t^n, t^{n+1}[\times]r_i^{n+1}, r_{i+1}^{n+1}[$, on cherche les solutions C_i constantes par morceaux sur chaque maille. En utilisant (1.21) et (1.22), on obtient :

$$C_i^{n+1} = C_i^{n+1/2} + \frac{\Delta t^n (F_{i+1}^{n+1} - F_i^{n+1})}{\Theta_D \Delta r_i^{n+1} (r_{i+1/2}^{n+1})^2} \quad \forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \quad (1.24)$$

La condition de Dirichlet en $\hat{r} = \hat{R}$ nous donne C_0^{n+1} :

$$C_0^{n+1} = C_H \sqrt{P^n}$$

Enfin, pour avoir conservation de la masse totale au niveau discret, nous définissons le flux en $\hat{r} = \hat{R}$ par (voir section 1.3.1) :

$$F_0^{n+1} = F_1^{n+1} - (r_{1/2}^{n+1})^2 \Delta r_0^{n+1} (C_0^{n+1} - C_0^{n+1/2}) \frac{\Theta_D}{\Delta t^n}. \quad (1.25)$$

Remarque 1.3.1

F_0^{n+1} dépend de la quadrature utilisée dans la résolution par volume finis de l'équation de diffusion.

Etape 3

On discrétise maintenant l'équation du bilan de masse au niveau de l'interface bulle-magma (1.13). On pose $W^n = \rho^n (R^n)^3$ qui correspond à la masse d'eau discrète dans la bulle. L'équation (1.13) devient :

$$W^{n+1} = W^n + 3\hat{\rho}_m \frac{\Delta t^n}{\Theta_D} F_0^{n+1} \quad (1.26)$$

Ce qui nous donne enfin la pression $\hat{P}(t^{n+1})$ dans la bulle :

$$P^{n+1} = \frac{W^{n+1} T^{n+1}}{(R^{n+1})^3} \quad (1.27)$$

1.3.1 Conservation de la masse d'eau totale

Définissons la masse d'eau comme étant la somme de la masse d'eau discrète dans la bulle W^n et la masse discrète de l'eau dans la zone d'influence :

$$\mathcal{M}^n = W^n + 3\hat{\rho}_m \sum_{i=0}^{N-1} C_i^n (r_{i+1/2}^n)^2 \Delta r_i^n \quad (1.28)$$

Lemme 1.3.2

Le schéma (1.19)-(1.27) conserve la masse totale d'eau au niveau discret $\mathcal{M}^n$; pour tout temps t^n : $\mathcal{M}^n = \mathcal{M}^0$.

Démonstration

À l'instant t^{n+1} , en utilisant (1.28), on a :

$$\mathcal{M}^{n+1} = W^{n+1} + 3\hat{\rho}_m \sum_{i=0}^{N-1} C_i^{n+1} (r_{i+1/2}^{n+1})^2 \Delta r_i^{n+1}$$

En utilisant la définition de W^n (1.26), en séparant le premier terme de la somme et en utilisant le schéma (1.24) dans la somme, on obtient :

$$\begin{aligned} & W^n + 3\hat{\rho}_m \frac{\Delta t^n}{\Theta_D} F_0^{n+1} + 3\hat{\rho}_m C_0^{n+1} (r_{1/2}^{n+1})^2 \Delta r_0^{n+1} + \\ & + 3\hat{\rho}_m \sum_{i=1}^{N-1} \left(C_i^{n+1/2} + \frac{\Delta t^n}{\Theta_D} \frac{(F_{i+1}^{n+1} - F_i^{n+1})}{\Delta r_i^{n+1} (r_{i+1/2}^{n+1})^2} \right) (r_{i+1/2}^{n+1})^2 \Delta r_i^{n+1} \end{aligned}$$

Ensuite en utilisant la définition de $C_i^{n+1/2}$ (1.21) dans la somme que l'on sépare en deux et la valeur, (1.25) du flux discret en $\hat{r} = \hat{R}$, on obtient :

$$\begin{aligned} & W^n + 3\hat{\rho}_m C_0^{n+1} (r_{1/2}^{n+1})^2 \Delta r_0^{n+1} + \\ & + 3\hat{\rho}_m \frac{\Delta t^n}{\Theta_D} \left(F_1^{n+1} - (r_{1/2}^{n+1})^2 \Delta r_0^{n+1} (C_0^{n+1} - C_0^{n+1/2}) \frac{\Theta_D}{\Delta t^n} \right) + \\ & + 3\hat{\rho}_m \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{(r_{i+1/2}^n)^2 \Delta r_i^n}{(r_{i+1/2}^{n+1})^2 \Delta r_i^{n+1}} C_i^n \right) (r_{i+1/2}^{n+1})^2 \Delta r_i^{n+1} + \end{aligned}$$

$$+3\hat{\rho}_m \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\Delta t^n}{\Theta_D} (F_{i+1}^{n+1} - F_i^{n+1})$$

On remplace $C_0^{n+1/2}$ par sa valeur donnée par (1.21) et on simplifie les deux sommes :

$$\begin{aligned} & W^n + 3\hat{\rho}_m C_0^{n+1} (r_{1/2}^{n+1})^2 \Delta r_0^{n+1} + \\ & + 3\hat{\rho}_m \frac{\Delta t^n}{\Theta_D} \left(F_1^{n+1} - \frac{\Theta_D}{\Delta t^n} ((r_{1/2}^{n+1})^2 \Delta r_0^{n+1} C_0^{n+1} - (r_{1/2}^n)^2 \Delta r_0^n C_0^n) \right) + \\ & + 3\hat{\rho}_m \sum_{i=1}^{N-1} (r_{i+1/2}^n)^2 \Delta r_i^n C_i^n + \\ & + 3\hat{\rho}_m \frac{\Delta t^n}{\Theta_D} (F_N^{n+1} - F_1^{n+1}) \end{aligned}$$

Enfin en utilisant la condition de bord (1.23) et en simplifiant, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}^{n+1} &= W^n + 3\hat{\rho}_m (r_{1/2}^n)^2 \Delta r_0^n C_0^n + 3\hat{\rho}_m \sum_{i=1}^{N-1} (r_{i+1/2}^n)^2 \Delta r_i^n C_i^n = \\ &= W^n + 3\hat{\rho}_m \sum_{i=0}^{N-1} (r_{i+1/2}^n)^2 \Delta r_i^n C_i^n \end{aligned}$$

d'où : $\mathcal{M}^{n+1} = \mathcal{M}^n$. □

Remarque 1.3.3

Cette propriété est indépendante de la définition du flux discret F_i , $\forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$. Elle ne dépend que de F_0 , qui dépend de la quadrature utilisée dans la méthode des volumes finis pour obtenir (1.24). La même quadrature est utilisée pour approcher l'intégrale dans l'équation de conservation (1.13bis).

1.3.2 Construction du pas d'espace de l'équation de diffusion

Nous montrons dans cette partie comment nous avons construit le pas d'espace défini par (1.20) pour l'équation d'advection diffusion, (1.24).

La partie qui pose problème dans cette équation est le terme d'advection, considérons l'équation d'advection :

$$\hat{r}^2 \partial_{\hat{r}} C + \hat{R} \hat{R}^2 \partial_{\hat{r}} C = 0.$$

On définit notre maillage r_i^{n+1} pour que la masse associée à l'équation d'advection soit conservée sur chaque maille $[r_i^{n+1}, r_{i+1}^{n+1}]$, cela revient à suivre les caractéristiques de l'équation d'advection, soit :

$$r_i^{n+1} = ((R^{n+1})^3 + I_i S_0^3)^{1/3} \quad \forall i \in \llbracket 0, N \rrbracket \quad (1.29)$$

avec I_i un ensemble de $N+1$ réels, ordonnés, compris entre 0 et 1, tel que $I_0 = 0$ et $I_N = 1$.

On pose alors :

$$\Delta r_i^{n+1} = r_{i+1}^{n+1} - r_i^{n+1} \quad \forall i \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket$$

Lemme 1.3.4 Avec un maillage donné par (1.29), la partie advection de notre équation se résume à :

$$C_i^{n+1/2} = \frac{(r_{i+1/2}^n)^2 \Delta r_i^n}{(r_{i+1/2}^{n+1})^2 \Delta r_i^{n+1}} C_i^n \quad \forall i \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \quad (1.21)$$

Où $C_i^{n+1/2}$ représente l'état de C_i^n sur le maillage au temps t^{n+1} .

Démonstration

On cherche à déterminer des points de discrétisation $r_i(t)$, discrets en espace et continus en temps tels que la masse d'eau sur la maille r_i, r_{i+1} soit conservée à tout temps, c'est-à-dire :

$$\frac{d}{d\hat{t}} \int_{r_i}^{r_{i+1}} \hat{r}^2 C d\hat{r} = 0$$

On obtient alors :

$$\int_{r_i}^{r_{i+1}} \hat{r}^2 \frac{\partial C}{\partial \hat{t}} d\hat{r} + r_{i+1}^2 \frac{dr_{i+1}}{d\hat{t}} C(r_{i+1}, \hat{t}) - r_i^2 \frac{dr_i}{d\hat{t}} C(r_i, \hat{t}) = 0$$

Or C est solution de l'équation aux dérivées partielles :

$$\hat{r}^2 \partial_{\hat{t}} C + \dot{\hat{R}} \hat{R}^2 \partial_{\hat{r}} C = 0$$

On remplace donc $\hat{r}^2 \partial_{\hat{t}} C$ dans l'intégrale par $-\dot{\hat{R}} \hat{R}^2 \partial_{\hat{r}} C$, et on identifie terme à terme. On veut donc que

$$\dot{\hat{R}} \hat{R}^2 = r_i^2 \frac{dr_i}{d\hat{t}} = r_{i+1}^2 \frac{dr_{i+1}}{d\hat{t}}$$

soit vérifié. On remarque que $r_i^3 = \hat{R}^3 + I_i \hat{S}_0^3$, vérifie bien ces égalités pour n'importe quel fraction $I_i \in [0, 1]$.

Sachant que $C(r, t) = C_i$ sur $]r_i, r_{i+1}[$, on a alors :

$$\int_{r_i^n}^{r_{i+1}^n} \hat{r}^2 C d\hat{r} = \int_{r_i^{n+1}}^{r_{i+1}^{n+1}} \hat{r}^2 C d\hat{r}$$

Soit (1.21). □

Remarque 1.3.5 .

On note que (1.20) est la formule de récursion associée à la formule (1.29).

Remarque 1.3.6

En prenant un maillage régulier au temps initial, si le rayon R croît, notre maillage se raffinera au bord de la bulle (voir Fig.1.2). Comme il est dit dans [PSA93], ceci nous permet d'être précis sans pour autant prendre trop de points.

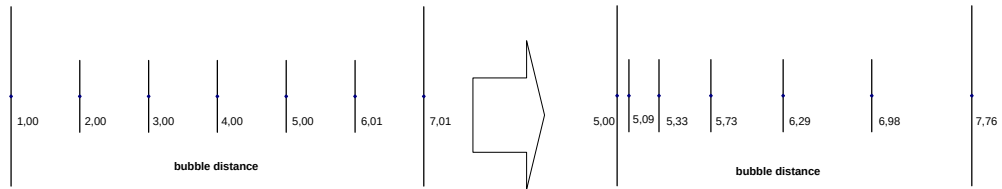


FIGURE 1.2 – Évolution du maillage quand le rayon croît.

1.3.3 Conditions de stabilité

Dans cette partie, on décrit les conditions de stabilité sur le pas de temps pour le schéma numérique (1.19)-(1.27).

Les conditions que nous déterminons dépendent souvent des variables au temps $n + 1$, et

nous supposons que la variation des variables est suffisamment faible pour prendre leur valeur aux temps n . On ne peut pas obtenir une condition de stabilité satisfaisante pour (1.26), assurant la positivité de la masse de la bulle et la stabilité de la solution. En effet, on obtient une relation faisant intervenir la différence des pressions qui est très faible et la variation du rayon qui peut croître de manière exponentielle. Toutefois, après de nombreux tests, une condition partielle apparaît :

$$\Delta t < \Theta_V \left| \frac{(P_a^n - P^n)(R^n)^3 - \hat{\rho}_m C_0^n (r_{1/2}^n)^2 \Delta r_0^n}{3\hat{\rho}_m F_1} \right|$$

Cette condition n'est pas suffisante pour éviter les oscillations de la solution qui peuvent se produire lorsque les paramètres Θ_V et Θ_D sont très petits.

Proposition 1.3.7 *Condition de positivité liée à (1.19)*

$$\Delta t < \min \left(\frac{R^n \eta_{eff} \Theta_V}{\Sigma}, \frac{\eta_{eff} \Theta_V}{|P^n - P_a^n|} \right) \quad (1.30)$$

Démonstration

On cherche une majoration de Δt tel que R^{n+1} soit positif, sachant que toutes les variables à l'étape n sont positives :

$$\left(R^n - \Delta t \frac{\Sigma}{\eta_{eff} \Theta_V} \right) \left(1 - \Delta t \frac{(P^n - P_a^n)}{\eta_{eff} \Theta_V} \right)^{-1} > 0$$

Si $P^n - P_a^n \leq 0$, on a alors $1 - \Delta t (P^n - P_a^n) / (\eta_{eff} \Theta_V) > 0$ donc R^{n+1} est du même signe que $R^n - \Delta t \Sigma / (\eta_{eff} \Theta_V)$ d'où $\Delta t < \eta_{eff} \Theta_V R^n / \Sigma$.

Si $P^n - P_a^n > 0$, on a alors R^{n+1} est du même signe que

$$\left(R^n - \Delta t \frac{\Sigma}{\eta_{eff} \Theta_V} \right) \left(1 - \Delta t \frac{(P^n - P_a^n)}{\eta_{eff} \Theta_V} \right) > 0.$$

On en revient à étudier ce polynôme d'ordre 2 en Δt . Comme le coefficient dominant $\Sigma(P^n - P_a^n) / (\eta_{eff}^2 \Theta_V^2)$ est positif, pour que R^{n+1} soit positif, il faudra que Δt ne soit pas compris entre ses deux racines : $\eta_{eff} \Theta_V / (P^n - P_a^n)$ et $R^n \eta_{eff} \Theta_V / \Sigma$. On obtient donc que

$$\Delta t < \min \left(\frac{R^n \eta_{eff} \Theta_V}{\Sigma}, \frac{\eta_{eff} \Theta_V}{(P^n - P_a^n)} \right).$$

Enfin, en réunissant les deux cas, on obtient (1.30). $\square$

Proposition 1.3.8 *Conditions de positivité liées à (1.24)*

$$\Delta t < \begin{cases} \frac{\Theta_D}{2} \left(\frac{\Delta r_i (r_{i+1/2})^2}{\frac{D_i (r_i)^2}{r_{i+1} - r_{i-1}} + \frac{D_{i+1} (r_{i+1})^2}{r_{i+2} - r_i}} \right) & \forall i \in \llbracket 1, N-2 \rrbracket \\ \frac{\Theta_D}{2D_{N-1}} \left(\frac{\Delta r_{N-1} (r_{N-1/2})^2}{\frac{(r_{N-1})^2}{r_N - r_{N-2}}} \right) & \end{cases} \quad (1.31)$$

Démonstration

On cherche une majoration de Δt tel que C_i^{n+1} reste positif. Depuis (1.24), nous avons :

$$C_0^{n+1} = C_H \sqrt{P^n}$$

C_0^{n+1} est donc positif en tout temps,

$$C_i^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{\Theta_D} \frac{(F_{i+1}^{n+1} - F_i^{n+1})}{\Delta r_i^{n+1} (r_{i+1/2}^{n+1})^2} > 0 \quad \forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$$

où F_i^{n+1} est défini par (1.22) et (1.23). On enlève les termes positifs $C_{i+1}^{n+1/2}$ et $C_{i-1}^{n+1/2}$ dans notre inégalité, et on obtient :

$$\forall i \in \llbracket 1, N-2 \rrbracket,$$

$$C_i^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\Theta_D} \frac{C_i^{n+1/2}}{\Delta r_i^{n+1} (r_{i+1/2}^{n+1})^2} \left(\frac{D_i^{n+1} (r_i^{n+1})^2}{(r_{i+1}^{n+1} - r_{i-1}^{n+1})/2} + \frac{D_{i+1}^{n+1} (r_{i+1}^{n+1})^2}{(r_{i+2}^{n+1} - r_i^{n+1})/2} \right) > 0$$

$$i = N-1,$$

$$C_{N-1}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\Theta_D} \frac{C_{N-1}^{n+1/2} D_{N-1}^{n+1}}{\Delta r_{N-1}^{n+1} (r_{N-1/2}^{n+1})^2} \left(\frac{(r_{N-1}^{n+1})^2}{(r_N^{n+1} - r_{N-2}^{n+1})/2} \right) > 0$$

Comme $C_i^{n+1/2}$ est positif, on obtient donc :

$$\forall i \in \llbracket 1, N-2 \rrbracket,$$

$$1 - \frac{\Delta t}{\Theta_D} \frac{1}{\Delta r_i^{n+1} (r_{i+1/2}^{n+1})^2} \left(\frac{D_i^{n+1} (r_i^{n+1})^2}{(r_{i+1}^{n+1} - r_{i-1}^{n+1})/2} + \frac{D_{i+1}^{n+1} (r_{i+1}^{n+1})^2}{(r_{i+2}^{n+1} - r_i^{n+1})/2} \right) > 0$$

et pour $i = N-1$,

$$1 - \frac{\Delta t}{\Theta_D} \frac{D_{N-1}^{n+1}}{\Delta r_{N-1}^{n+1} (r_{N-1/2}^{n+1})^2} \left(\frac{(r_{N-1}^{n+1})^2}{(r_N^{n+1} - r_{N-2}^{n+1})/2} \right) > 0$$

D'où (1.31). □

1.4 Cas limites

Dans de nombreux cas, Θ_V et Θ_D sont très petits, de l'ordre de 10^{-7} . Comme on l'a vu en section 1.3.3, le pas de temps Δt^n dépend de ces paramètres, ainsi le temps de calcul peut être très long. L'utilisation de cas limites est une alternative indispensable à la résolution du système complet, car cela revient à résoudre des modèles simplifiés qui ont des temps de calcul moins longs.

Définition 1.4.1

On classe les différents régimes limites en considérant le rapport Θ_V/Θ_D . On définit les trois régimes suivants :

- *un régime visqueux quand le rapport est très petit (voir 1.4.1), car l'équation dominante est (1.12)*
- *un régime à l'équilibre quand le rapport est d'ordre 1 (voir 1.4.2), car les équations (1.12) et (1.13) sont alors dominantes simultanément*
- *un régime diffusif quand le rapport est très grand (voir 1.4.3), car l'équation dominante est (1.13)*

Dans cette section, nous nous intéressons à toutes les possibilités de limites pour les paramètres Θ_D et Θ_V et à leur discrétisation associée.

Ce qui nous intéresse étant les dimensions physiques de la bulle : la pression P et le rayon R , on décrira uniquement la façon d'obtenir ces quantités.

À la fin de chaque partie, on résumera si nécessaire le schéma numérique correspondant au cas simplifié.

Le tableau suivant présente les sections qui traiteront chaque cas simplifié :

Θ_D	∞	1.4.1.3 polynôme sur $\hat{R}$	1.4.1.1 edo sur $\hat{R}$	1.4.2.2 "gelé" ($\partial_t = 0$)
	1	1.4.1.2 flux à résoudre		1.4.3.1 $\hat{R}=1$
	0	1.4.2.1 (équilibre)	1.4.3.3 edo sur $\hat{R}$	1.4.3.2 $\hat{R} = 1$
		0	1	∞
		Θ_V		

Considérons d'abord les cas $\Theta_V \rightarrow \infty$, $\Theta_V \rightarrow 0$, $\Theta_D \rightarrow \infty$, $\Theta_D \rightarrow 0$ séparément, ce qui fournit un certain nombre d'équations limites utilisées par la suite.

- $\Theta_V \rightarrow 0$

Ceci équivaut au cas physique où le magma serait peu visqueux (η_{eff} très petit). On multiplie par Θ_V dans (1.12) et on fait tendre Θ_V vers 0. On obtient une relation entre $\hat{P}$ et $\hat{R}$:

$$\hat{P} = \hat{P}_a(\hat{t}) + \frac{\Sigma}{\hat{R}} \quad (1.32)$$

Ce qui remplacé dans (1.13), en utilisant la loi des gaz parfaits, nous donne une équation différentielle sur $\hat{R}$:

$$\frac{d\hat{R}}{d\hat{t}} = \left(\frac{3\hat{\rho}_m}{\Theta_D} \left(\hat{r}^2 \hat{D} \frac{\partial C}{\partial \hat{r}} \right)_{\hat{r}=\hat{R}} - \frac{\hat{R}^3}{\hat{T}} \frac{d\hat{P}_a}{d\hat{t}} + \frac{\hat{R}^2(\hat{P}_a \hat{R} + \Sigma)}{\hat{T}^2} \frac{d\hat{T}}{d\hat{t}} \right) \hat{T} \left(3\hat{R}^2 \hat{P}_a + 2\Sigma \hat{R} \right)^{-1} \quad (1.33)$$

- $\Theta_V \rightarrow \infty$

Ceci équivaut au cas physique où le magma est très visqueux, à la limite du solide (η très grand). Quand Θ_V tend vers ∞ , (1.12) se réduit à :

$$\frac{d\hat{R}}{d\hat{t}} = 0, \quad (1.34)$$

c'est-à-dire que le rayon de la bulle est constant en temps.

Ce qui remplacé dans (1.13), en utilisant la loi des gaz parfaits, nous donne une équation différentielle sur $\hat{P}$:

$$\frac{d\hat{P}}{d\hat{t}} = \frac{\hat{P}}{\hat{T}} \frac{d\hat{T}}{d\hat{t}} + \frac{3\hat{T}\hat{\rho}_m}{\hat{R}^3\Theta_D} \left(\hat{r}^2 \hat{D} \frac{\partial C}{\partial \hat{r}} \right)_{\hat{r}=\hat{R}} \quad (1.35)$$

• $\Theta_D \rightarrow 0$

Ceci équivaut au cas physique de diffusion quasi-instantanée.

Lorsque $\Theta_D \rightarrow 0$, l'équation d'advection-diffusion, (1.14), devient :

$$\frac{1}{\hat{r}^2} \frac{\partial}{\partial \hat{r}} \left(\hat{r}^2 \hat{D} \frac{\partial C}{\partial \hat{r}} \right) = 0$$

Dans ce cas, en utilisant les conditions aux limites (1.14bis), on obtient une solution explicite pour $C(\hat{r}, \hat{t})$:

$$C(\hat{r}, \hat{t}) = C_H \sqrt{\hat{P}} \quad , \forall \hat{r} \in [\hat{R}, \hat{S}] \quad (1.36)$$

On remarque aussi que, quand $\Theta_D \rightarrow 0$, on ne peut plus utiliser (1.13) pour décrire le flux au niveau de l'interface. On revient alors à l'équation de la conservation de masse totale de l'eau (1.13bis).

On remplace (1.36) dans (1.13bis) et on obtient :

$$\frac{\hat{P}\hat{R}^3}{\hat{T}} = C_0\hat{\rho}_m\hat{S}_0^3 - \hat{\rho}_m\hat{S}_0^3C_H\sqrt{\hat{P}} \quad (1.37)$$

où l'on a utilisé (1.15).

Dans (1.37), on fait le changement de variable $\hat{P} = X^2$, où $X > 0$:

$$X^2 \frac{\hat{R}^3}{\hat{T}} + X\hat{\rho}_m C_H \hat{S}_0^3 - C_0\hat{\rho}_m\hat{S}_0^3 = 0 \quad (1.38)$$

On cherchera une solution positive puisque $X = \sqrt{\hat{P}}$ est positif.

L'équation (1.38) admet une unique solution positive X :

$$X = \frac{-C_H\hat{\rho}_m\hat{T}\hat{S}_0^3 + \sqrt{\hat{\rho}_m\hat{T}\hat{S}_0^3(C_H^2\hat{\rho}_m\hat{T}\hat{S}_0^3 + 4\hat{R}^3C_0)}}{2\hat{R}^3}$$

On a enfin :

$$\hat{P} = \left(\frac{-C_H Y + \sqrt{Y(C_H^2 Y + 4\hat{R}^3 C_0)}}{2\hat{R}^3} \right)^2, \quad Y = \hat{\rho}_m \hat{S}_0^3 \hat{T}. \quad (1.39)$$

Remarque 1.4.2

Notons que la porosité $\alpha(t)$ intervient dans l'expression de $\hat{P}$ par le biais de

$$\frac{\hat{S}_0^3}{\hat{R}^3} = \frac{1}{\alpha(t)} - 1.$$

On obtient ainsi une expression de $\hat{P}$ en fonction de α :

$$\hat{P} = \left(\frac{-C_H Z + \sqrt{Z(C_H^2 Z + 4C_0)}}{2} \right)^2, \quad Z = \hat{\rho}_m \frac{1 - \alpha}{\alpha} \hat{T}. \quad (1.40)$$

Remarque 1.4.3

De (1.37), on obtient une expression de la porosité, $\alpha(\hat{t})$ similaire à celle connue à l'équilibre (c.f. [BG05]) :

$$\alpha_{eq} = \frac{\beta}{MP_a + \beta} \quad \text{avec } \beta = GT\rho_m K_H \left(\sqrt{P_0} - \sqrt{P_a} \right). \quad (1.41)$$

En reprenant l'équation (1.37) et en remplaçant $\hat{S}_0^3$ par $\hat{R}^3(1 - \alpha)/\alpha$, on obtient :

$$\alpha(\hat{t}) = \frac{\beta}{\hat{P} + \beta} \quad \text{avec } \beta = \hat{T} \left(\hat{\rho}_m C_0 - \hat{\rho}_m C_H \sqrt{\hat{P}} \right). \quad (1.42)$$

La différence vient du fait que $\hat{P}$ n'est pas toujours égal à $\hat{P}_a$ et sera déterminé par la résolution de (1.12) et de (1.39).

• $\Theta_D \rightarrow \infty$

Ceci équivaut au cas physique où il n'y aurait plus de diffusion dans le magma, donc plus d'apport en eau dans la bulle, ce qui se traduit par simplification de (1.14) en :

$$\int_{\hat{R}}^{\hat{S}} \hat{r}^2 C(\hat{r}, \hat{t}) d\hat{r} = \int_{\hat{R}}^{\hat{S}} \hat{r}^2 C(r, 0) d\hat{r} \quad (1.43)$$

L'évolution de la masse d'eau dans la bulle (1.13) donne alors :

$$\frac{d\hat{\rho}\hat{R}^3}{d\hat{t}} = 0, \quad (1.44)$$

en intégrant, on obtient :

$$\hat{\rho}\hat{R}^3 = \hat{\rho}(0). \quad (1.44\text{bis})$$

Comme $\hat{T}(0) = 1$, on a la relation $\hat{P}(0) = \hat{\rho}(0)$. D'où, en remplaçant dans (1.12), on obtient une équation différentielle sur $\hat{R}$:

$$\frac{d\hat{R}}{d\hat{t}} = \frac{1}{\Theta_V \hat{\eta}_{eff}} \left(\hat{T} \frac{\hat{P}(0)}{\hat{R}^2} - \hat{R}\hat{P}_a - \Sigma \right) \quad (1.45)$$

ou sur $\hat{\rho}$:

$$\frac{d\hat{\rho}}{d\hat{t}} = -\frac{3\hat{\rho}}{\Theta_V \hat{\eta}_{eff}} \left(\hat{\rho}\hat{T} - \hat{P}_a - \Sigma \left(\frac{\hat{\rho}}{\hat{P}(0)} \right)^{1/3} \right) \quad (1.46)$$

Remarque 1.4.4

Les deux formes de cette équation sont similaires à celles de la section 3.7 de [LNL04]. Dans notre cas $\hat{P}(0) \neq 1$, $\hat{T} \neq 1$ et $\hat{\eta}_{eff} \neq 1$, alors que dans [LNL04] $\hat{P}(0) = \hat{T} = \hat{\eta}_{eff} = 1$.

Nous passons maintenant à l'étude des cas limites couplées.

1.4.1 Régime visqueux : $\Theta_V \ll \Theta_D$

On regarde d'abord le cas où le paramètre de relaxation visqueux Θ_V est plus petit que celui de diffusion Θ_D . Il y a 3 possibilités : quand Θ_V tend vers zéro et Θ_D est d'ordre 1 ou tend vers l'infini et quand Θ_V est d'ordre 1 et Θ_D tend vers l'infini.

1.4.1.1 $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$

Lorsque $\Theta_D \rightarrow \infty$, la masse d'eau ($\hat{P}\hat{R}^3$) étant constante (1.44), on en revient à étudier l'équation différentielle sur le rayon (1.45).

Numériquement, on résout (1.45) en implicite pour obtenir le rayon. La masse d'eau dans la bulle étant constante, nous obtenons la pression dans la bulle grâce à (1.44bis).

1.4.1.2 $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \sim 1$

Dans ce cas, on en revient à étudier l'équation différentielle (1.33), où le flux en $\hat{R}$ est donné par la résolution de (1.14) et où $\hat{P}$ est lié à $\hat{R}$ par (1.32). Numériquement, on calcule le flux en $\hat{R}$ en résolvant (1.14). On obtient la pression par (1.32). Enfin, il est plus simple d'obtenir le rayon par la résolution de (1.13).

1.4.1.3 $\Theta_V \rightarrow 0$, $\Theta_D \rightarrow \infty$

En utilisant (1.44bis) et (1.32), on obtient : $\hat{\rho}\hat{R}^3 = \hat{P}(0)$ et

$$\hat{R}^3 \hat{P}_a(\hat{t}) + \Sigma \hat{R}^2 - \hat{P}(0) \hat{T} = 0 \quad (1.47)$$

Le rayon $\hat{R}$ est donc défini comme la solution réelle positive de (1.47). Il est donné, pour tout $\hat{t}$ tel que $27\hat{P}_a(\hat{t})^2 \hat{P}(0) \hat{T} > 4\Sigma^3$, par la relation explicite :

$$\hat{R} = \frac{c}{6a} + \frac{2b^2}{3ca} - \frac{b}{3a} \quad (1.48)$$

où

$$a = \frac{\hat{P}_a(\hat{t})}{\hat{P}(0)\hat{T}} \quad , \quad b = \frac{\Sigma}{\hat{P}(0)\hat{T}}$$

$$c = \left(108a^2 - 8b^3 + 12\sqrt{3}\sqrt{27a^2 - 4b^3a}\right)^{1/3}$$

On est donc ramené au système donné par les relations (1.48), (1.44bis) et (1.43). Numériquement, on obtient le rayon par la formule (1.48), et la masse d'eau dans la bulle étant constante, nous obtenons la pression dans la bulle grâce à (1.44bis).

1.4.2 Régime à l'équilibre : $\Theta_V \sim \Theta_D$

Dans cette partie, on étudie les régimes qui ont des paramètres de relaxations Θ_V et Θ_D de même ordre, plus précisément quand tous deux tendent vers zéro ou l'infini, sinon il n'y a pas de simplifications.

1.4.2.1 $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \rightarrow 0$

C'est un cas très intéressant car les temps de calculs sont très long et il correspond à la croissance à l'équilibre qui est une situation courante dans les magmas naturels (les bulles sont toujours à leur rayon maximum possible).

Lorsque $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \rightarrow 0$, on étudie alors le système de deux équations (1.39) et (1.32).

On obtient une expression de $\hat{P}_a$ en fonction de $\hat{R}$:

$$\hat{P}_a = -\frac{\Sigma}{\hat{R}} + \frac{Y}{2\hat{R}^3} \left(\frac{C_H^2 Y}{\hat{R}^3} + 2C_0 - C_H \sqrt{\frac{Y}{\hat{R}^3} \left(\frac{C_H^2 Y}{\hat{R}^3} + 4C_0 \right)} \right), \quad Y = \hat{T} \hat{\rho}_m \hat{S}_0^3 \quad (1.49)$$

On peut résoudre le cas simplifié en exprimant le rayon en fonction de $\hat{P}_a$ à partir de (1.49)

Remarque 1.4.5

On retrouve également une formulation de la porosité α similaire à celle à l'équilibre avec (1.37) et (1.32) :

$$\alpha(t) = \frac{\beta}{\beta + \hat{P}} \quad (1.50)$$

$$\text{avec } \beta = \hat{T} \hat{\rho}_m \left(C_0 - C_H \sqrt{\hat{P}} \right) \quad \text{et} \quad \hat{P} = \hat{P}_a + \frac{\Sigma}{\hat{R}}.$$

L'équation (1.50) est l'équivalent adimensionnel de la formule la plus couramment utilisée pour calculer la porosité (ex [JA91, BG05]).

Remarque 1.4.6

On retrouve également une formule sur le rayon similaire à celle de la section 3.5 de [LNL04] : on reprend (1.50) et on remplace α par $\hat{R}^3 / \hat{S}^3$ afin d'obtenir

$$\hat{R}^3 = \hat{S}_0^3 \frac{\hat{T} \hat{\rho}_m \left(C_0 - C_H \sqrt{\hat{P}} \right)}{\hat{P}} \quad (1.51)$$

La différence entre les formulations sont que, dans [LNL04], $\hat{T} = 1$, $\hat{P} = \hat{P}_a$, alors que pour nous $\hat{P} = \hat{P}_a + \Sigma / \hat{R}$.

Numériquement, il est plus simple d'obtenir la pression P^{n+1} en fonction de P_a^{n+1} et de R^n par la formule (1.32). Puis nous obtenons la masse d'eau dans la bulle par (1.37), d'où nous obtenons le rayon.

1.4.2.2 $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$

Lorsque $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$, nous obtenons (1.34), (1.44bis) et (1.43). Ce qui implique que tout est constant. Nous sommes dans le cas où plus rien ne se passe. D'après des résultats expérimentaux (voir [GHC00]), on peut imaginer que le système physique est "fixé" ou "gelé".

1.4.3 Régime diffusif : $\Theta_V \gg \Theta_D$

Dans cette dernière partie, on étudie les régimes qui ont le paramètre de relaxation visqueux Θ_V plus grand que celui de diffusion Θ_D . Il y a 3 possibilités : quand Θ_V tend vers l'infini et Θ_D tend vers zéro ou est d'ordre 1 et quand Θ_V est d'ordre 1 et Θ_D tend vers zéro.

1.4.3.1 $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \sim 1$

Lorsque $\Theta_V \rightarrow \infty$, on a (1.34), donc le rayon de la bulle ne varie pas en temps : $\hat{R}(\hat{t}) = \hat{R}(0) = 1$. Avec cette simplification, on obtient l'équation différentielle suivante sur la densité :

$$\frac{d\hat{\rho}}{d\hat{t}} = \frac{3\hat{\rho}_m}{\Theta_D \hat{R}^3} \left(\hat{r}^2 \hat{D} \frac{\partial C}{\partial \hat{r}} \right)_{\hat{r}=\hat{R}} \quad (1.52)$$

où C est solution de (1.14).

Numériquement, le rayon ne varie pas, et la pression est obtenue par résolution de (1.13) et (1.14) comme décrit en section 1.3.

1.4.3.2 $\Theta_V \rightarrow \infty$, $\Theta_D \rightarrow 0$

On reprend les simplifications (1.39) et (1.34), $\hat{R}$ est donc constant égal à 1 et on obtient une formule explicite pour $\hat{P}$:

$$\hat{P} = \left(\frac{-C_H Y + \sqrt{Y(C_H^2 Y + 4C_0)}}{2} \right)^2, \quad Y = \hat{T} \hat{\rho}_m \hat{S}_0^3 \quad (1.53)$$

Remarque 1.4.7

Lorsque la température est constante au cours du temps, $\hat{P}$ ne dépend plus du temps $\hat{t}$. $\hat{P}$ et C se stabilisent instantanément.

Numériquement, le rayon ne varie pas et la pression est obtenue par la formulation (1.53).

1.4.3.3 $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow 0$

Lorsque $\Theta_D \rightarrow 0$, on étudie l'équation (1.12) où $\hat{P}$ est donné par (1.39).

Numériquement, le rayon est obtenu de la façon décrite en section 1.3, et la pression est obtenue par la formule (1.39).

1.5 Résultats numériques

Dans cette partie, nous utilisons le schéma décrit en section 1.3 avec une diffusivité, une viscosité effective et une température constante ($\hat{D} = \hat{T} = \hat{\eta}_{eff} = 1$). Dans un premier temps, nous étudions la convergence de ce schéma en fonction du nombre de points utilisés dans (1.24). Ensuite, nous étudions l'influence de certains paramètres sur les résultats. En effet, certains paramètres tels que la tension de surface σ , sont souvent inconnus. Enfin, nous comparons les résultats obtenus par le schéma avec des expériences faites en laboratoire. Les données fournies dans chaque cas sont expliquées en section A.2.

Par la suite, tous les graphiques auront pour abscisse la pression ambiante adimensionnelle, car c'est cette grandeur qui est contrôlée dans les expériences en laboratoire. Rappelons que la pression adimensionnelle s'écrit $\hat{P}_a(\hat{t}) = 1 - \hat{t}$ dans le cas d'une décompression linéaire. Dans le modèle adimensionnel, le temps $\hat{t}$ est compris entre 0 et 1. Quand nous parlerons de temps long, cela signifie un temps proche de 1 et donc une pression proche de 0. D'un point de vue physique, comme le temps adimensionnel dépend de la pression et du taux de décompression, cela peut être quelques secondes pour les décompression rapide à plusieurs jours pour les décompression plus lente.

Nous utilisons les tests d'arrêt sur la pression $\hat{P}_a = 0$ et sur la porosité $\alpha \geq 99\%$ dans les différents schémas numériques utilisés. Pour ce qui suit, nous initialisons la pression

du gaz à l'équilibre mécanique : $\hat{P}(0) = 1 + \Sigma$, nous prenons, à l'état initial, un profil de concentration constant en r .

1.5.1 Stabilité numérique

Nous allons regarder l'influence de certain paramètre sur la précision de la solution. Dans un premier temps, nous regarderons l'influence du nombre de points de discrétisation de l'équation d'advection-diffusion sur la précision de la solution. Ensuite, nous nous intéresserons à l'incertitude sur les données initiales et à leurs conséquences sur la solution. Comme la plupart des variables apparaît dans les paramètres d'adimensionnement Θ_V et Θ_D , les conséquences sont assez vite connues, puisque une erreur sur une de ces données change les paramètres d'adimensionnement et donc les solutions. Enfin, il reste les variables qui n'apparaissent pas dans les paramètres d'adimensionnement, certaines sont fixées par le modèle choisi, telle que la pression de gaz initiale que nous avons choisi de fixer pour être en équilibre mécanique ($\dot{R} = 0$). Il ne reste que trois variables à considérer : la tension de surface σ dont la valeur est difficile à obtenir, la constante de Henry K_H et la concentration initiale. Nous verrons en chapitre 2 l'influence de la concentration initiale. Pour la constante de Henry, aucun test n'a été fait, car en changeant la pression ambiante initiale de manière adéquate, nous pouvons retrouver la même condition de bord pour l'équation d'advection-diffusion et donc, une incertitude sur K_H revient à changer les paramètres d'adimensionnement. Seuls le nombre de points de discrétisation de l'équation d'advection-diffusion et la tension de surface seront donc traités dans cette section.

1.5.1.1 Influence du nombre de points N de discrétisation de l'équation d'advection -diffusion

Dans un premier temps, on regarde l'effet du nombre de points de discrétisation pour la diffusion. On a pris cinq valeurs différentes pour le nombre de points de discrétisation N : 2500, 250, 100, 50 et 20 et on a lancé notre programme avec les données suivantes : $R_i = 17.5 \cdot 10^{-6}$, $\alpha = 5.6$, $D = 5.79 \cdot 10^{-12}$, $C_{ini} = 0.0344$, $P_i = 10^8$, $\sigma = 0.1$, $\eta_{eff} = 59000$, $\rho_m = 2400$, $T = 825$ et $\check{P}_a = 10^7$.

Nous avons considéré la valeur absolue de l'erreur relative en fonction de la pression ambiante $\check{P}_a$ entre les résultats à $N = 2500$ et les autres : pour la pression (Fig.1.3), le rayon (Fig.1.4) et la porosité (Fig.1.5). Nous observons que l'erreur numérique commise en prenant peu de points est petite ($\sim 10^{-2}$ en erreur relative), on a donc choisi d'utiliser 50 points pour les calculs afin de gagner en temps de calcul.

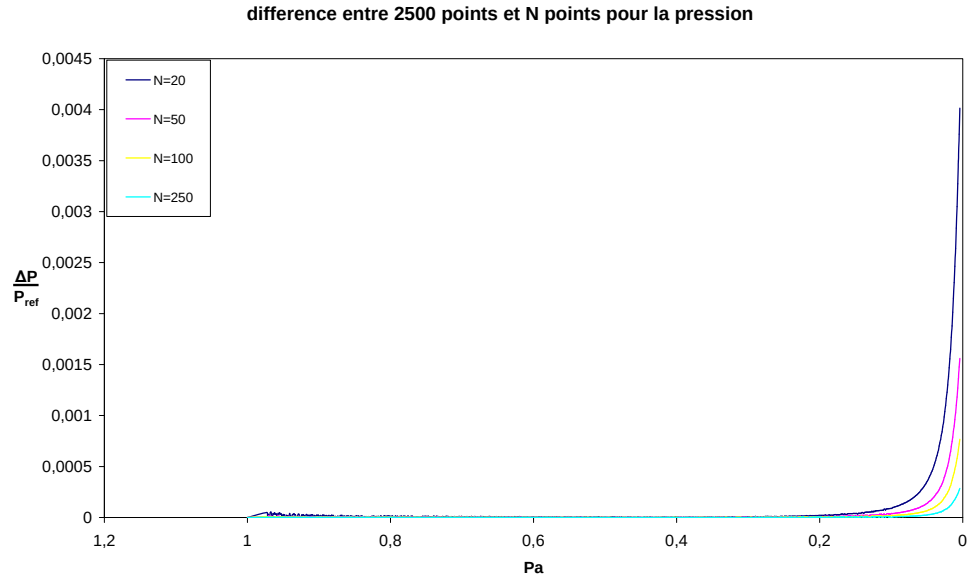


FIGURE 1.3 – Erreur relative due au nombre de points de discrétisation dans (1.14) par rapport à 2500 points pour la pression en fonction de la pression ambiante adimensionnelle

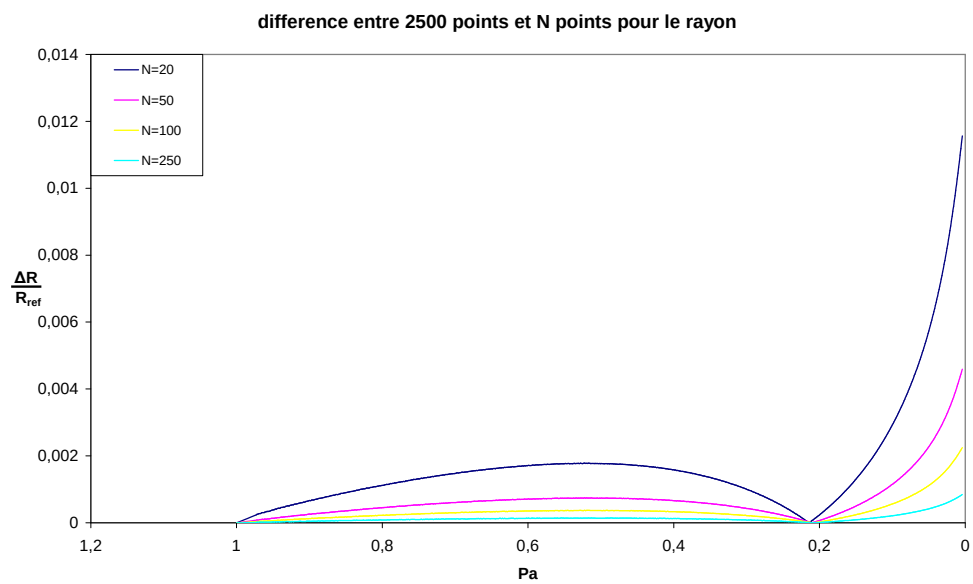


FIGURE 1.4 – Erreur relative due au nombre de points de discrétisation dans (1.14) par rapport à 2500 points pour le rayon en fonction de la pression ambiante adimensionnelle

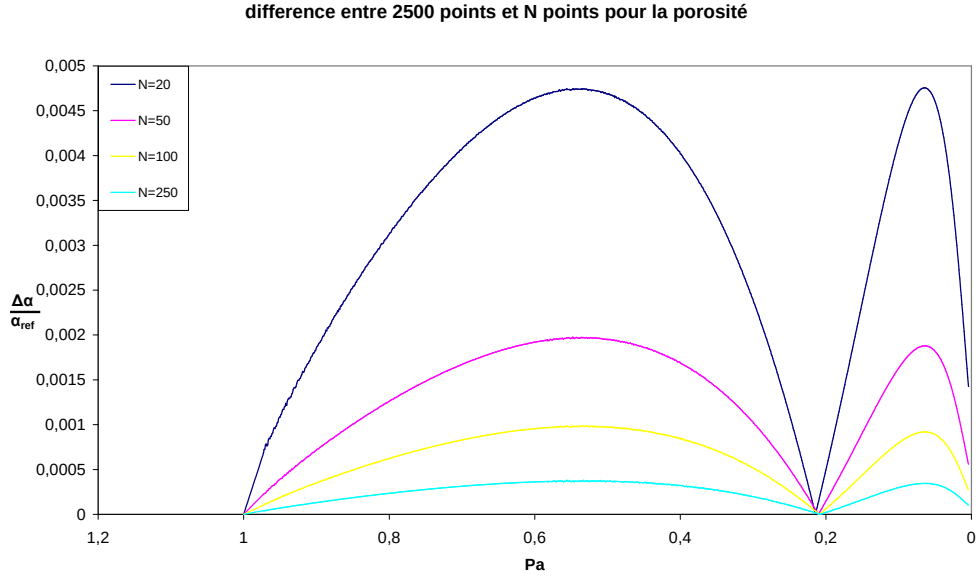


FIGURE 1.5 – Erreur relative due au nombre de points de discrétisation dans (1.14) par rapport à 2500 points pour la porosité en fonction de la pression ambiante adimensionnelle

1.5.1.2 Influence de la tension de surface σ

On regarde ici l'influence de la tension de surface σ , qui est souvent inconnue, sur les résultats.

On a pris quatre valeurs différentes pour σ : 0.5, 0.15, 0.06 et 0.015 et on a lancé notre programme avec les données suivantes :

$R_i = 9.74 \cdot 10^{-6}$, $\alpha = 4.8$, $D = 9.47 \cdot 10^{-12}$, $C_{ini} = 0.0486$, $N = 50$, $P_i = 10^8$, $\eta_{eff} = 19000$, $\rho_m = 2350$, $T = 875$, $\check{P}_a = 25000$.

On a ensuite tracé l'erreur relative en fonction de la pression ambiante $\hat{P}_a$ entre les résultats à $\sigma = 0.5$ et les autres : pour la pression (Fig.1.6), le rayon (Fig.1.7) et la porosité (Fig.1.8). L'erreur relative étant de l'ordre de 10^{-3} , le choix de la tension de surface a donc une influence minime sur le résultat.

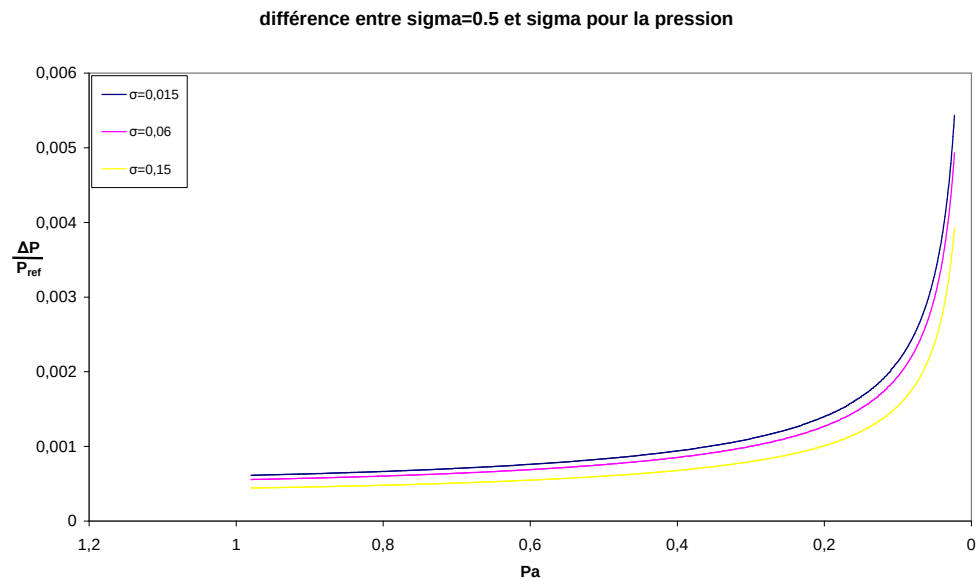


FIGURE 1.6 – Erreur relative due à la tension de surface σ dans (1.12) par rapport à $\sigma = 0.5$ pour la pression en fonction de la pression ambiante adimensionnelle

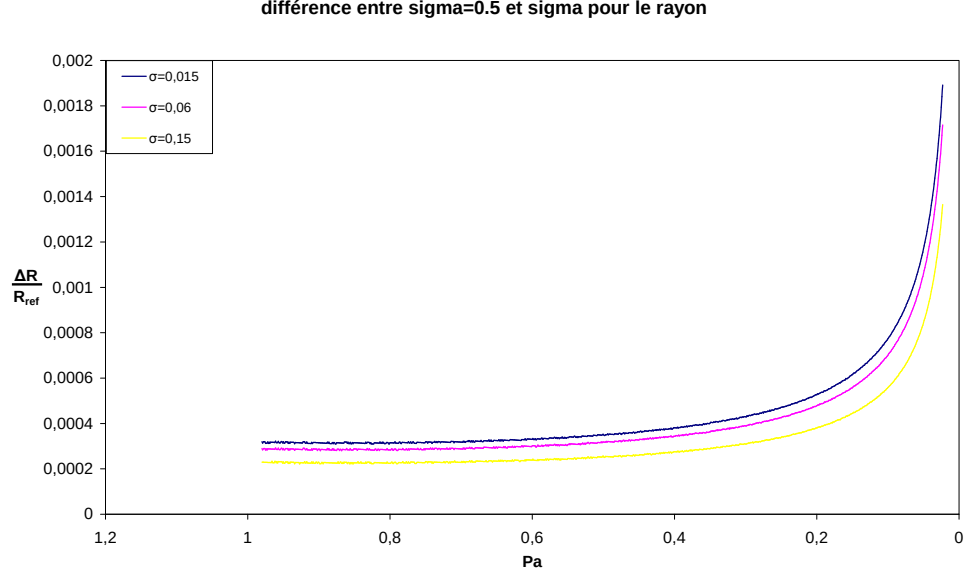


FIGURE 1.7 – Erreur relative due à la tension de surface σ dans (1.12) par rapport à $\sigma = 0.5$ pour le rayon en fonction de la pression ambiante adimensionnelle

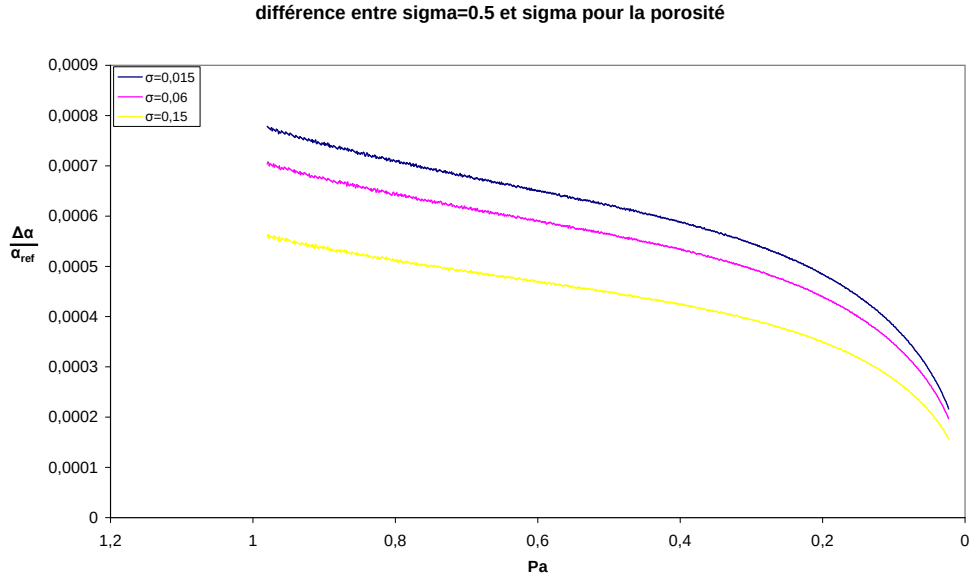


FIGURE 1.8 – Erreur relative due à la tension de surface σ dans (1.12) par rapport à $\sigma = 0.5$ pour la porosité en fonction de la pression ambiante adimensionnelle

1.5.2 Étude numérique des régimes limites

Dans cette partie, nous comparons les résultats obtenus (pour le rayon, la pression et la porosité) par la discrétisation du cas général décrit dans la section 1.3 et ceux obtenus par la discrétisation des cas détaillés en section 1.4.1.1, 1.4.1.2, 1.4.1.3, 1.4.2.1, 1.4.2.2, 1.4.3.1, 1.4.3.2 et 1.4.3.3. Nous avons donc choisi un jeu de paramètres : $R_i = 10^{-5}$, $\alpha = 7.79$, $C_{ini} = 0.0421$, $N = 50$, $P_i = 10^8$, $\sigma = 0.1$, $\rho_m = 2400$, $T = 825$, $\tilde{P}_a = 10^5$. Nous avons fait varier les paramètres Θ_V et Θ_D en modifiant la valeur de D et η_{eff} . Nous pouvons nous permettre cette approche puisque nous considérons dans cette partie que D et η_{eff} sont constant au cours du temps. Nous considérons également la température T constante.

Dans les graphiques, les schémas simplifiés sont numérotés comme indiqué dans le tableau de l'annexe A :

1. $\Theta_V \rightarrow 0, \Theta_D \rightarrow 0$
2. $\Theta_V \sim 1, \Theta_D \rightarrow 0$
3. $\Theta_V \rightarrow \infty, \Theta_D \rightarrow 0$
4. $\Theta_V \rightarrow 0, \Theta_D \rightarrow \infty$
5. $\Theta_V \sim 1, \Theta_D \rightarrow \infty$
6. $\Theta_V \rightarrow \infty, \Theta_D \rightarrow \infty$
7. $\Theta_V \rightarrow 0, \Theta_D \sim 1$
8. $\Theta_V \rightarrow \infty, \Theta_D \sim 1$

Nous avons testé tous les schémas avec toutes les combinaisons de paramètres suivantes : $\Theta_V \in \{10^{-9}, 10^{-7}, 10^{-5}, 10^{-3}, 10^{-1}, 10^1\}$ et $\Theta_D \in \{10^{-5}, 10^{-3}, 10^{-1}, 10^1, 10^3\}$. Pour chaque schéma simplifié, nous présentons la convergence pour un seul paramètre.

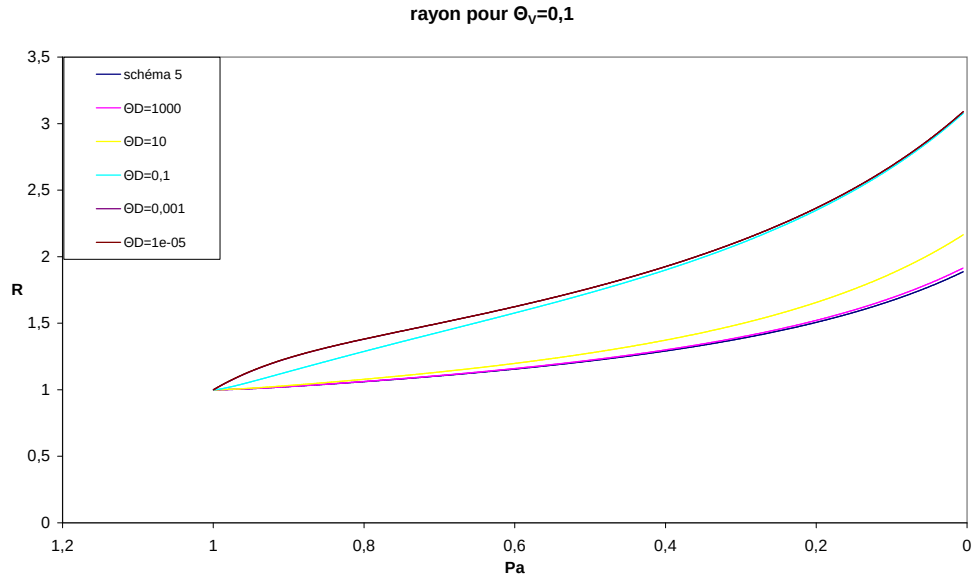
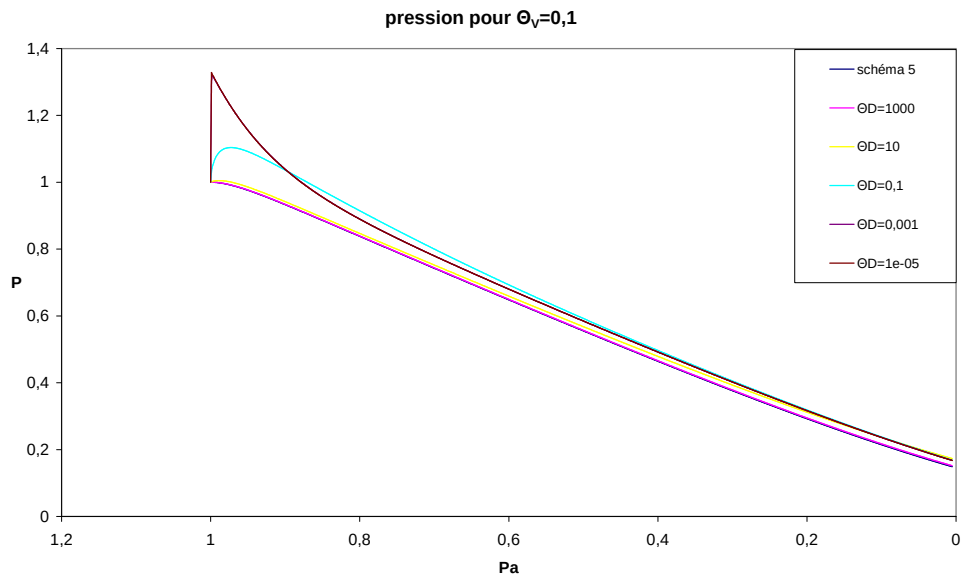
Dans [LNL04], une étude de cas limites est également proposée. Les cas limites, qu'ils obtiennent par des considérations physiques, sont différents des nôtres bien que certains soient comparables. Ils regardent également la convergence du cas général vers leur cas limites, pour cela, ils comparent à un certain temps la pression dans la bulle soit à la pression initiale, soit à la pression ambiante. Lorsque la pression $\hat{P}$ vérifie $|\hat{P}(\hat{t}) - \hat{P}_a(\hat{t})| \leq (1 - \hat{P}_a(\hat{t}))5/100$, alors la solution est considérée comme étant dans un des cas limites de faible viscosité. Lorsque la pression $\hat{P}$ vérifie $|\hat{P}(0) - \hat{P}_a(\hat{t})| \leq (1 - \hat{P}_a(\hat{t}))5/100$, alors la solution est considérée comme étant en régime visqueux.

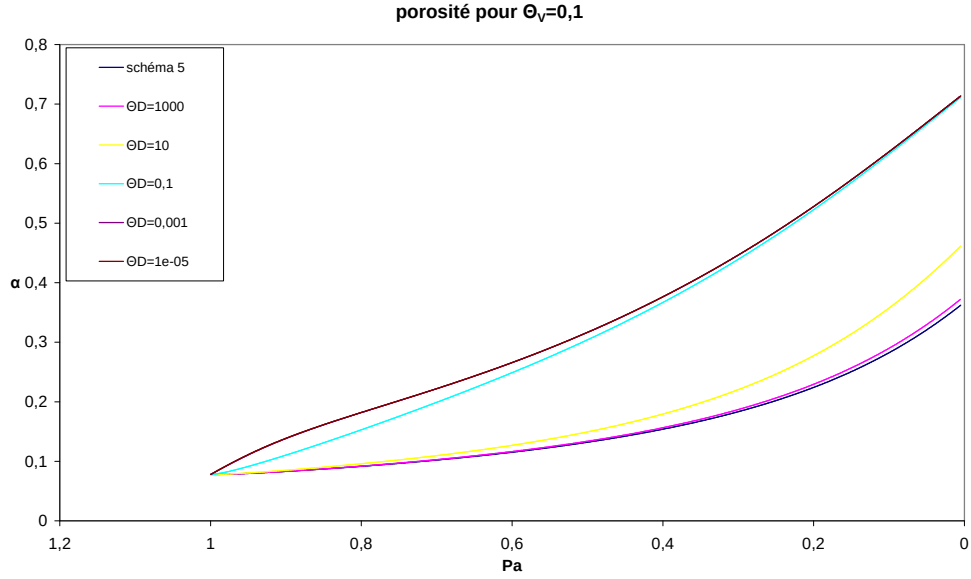
Le régime visqueux considéré dans [LNL04] est ce que nous avons appelé régime diffusif. C'est-à-dire dans le cas d'une forte viscosité où l'équation de diffusion-advection est dominante.

Nous considérerons que nous convergeons lorsque l'erreur relative à la courbe limite est inférieure à 10^{-2} pour les trois variables : rayon $\hat{R}$, pression $\hat{P}$ et porosité α . Dans ce cas, nous dirons que les courbes sont confondues ou qu'on ne les distingue plus l'une de l'autre.

1.5.2.1 Convergence du cas général vers 1.4.1.1

Ici, on se fixe un Θ_V et on observe le comportement de la solution lorsque Θ_D augmente. Dans les graphiques, on a pris $\Theta_V = 0.1$. Pour rappel, le schéma 5 correspond au cas $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$.

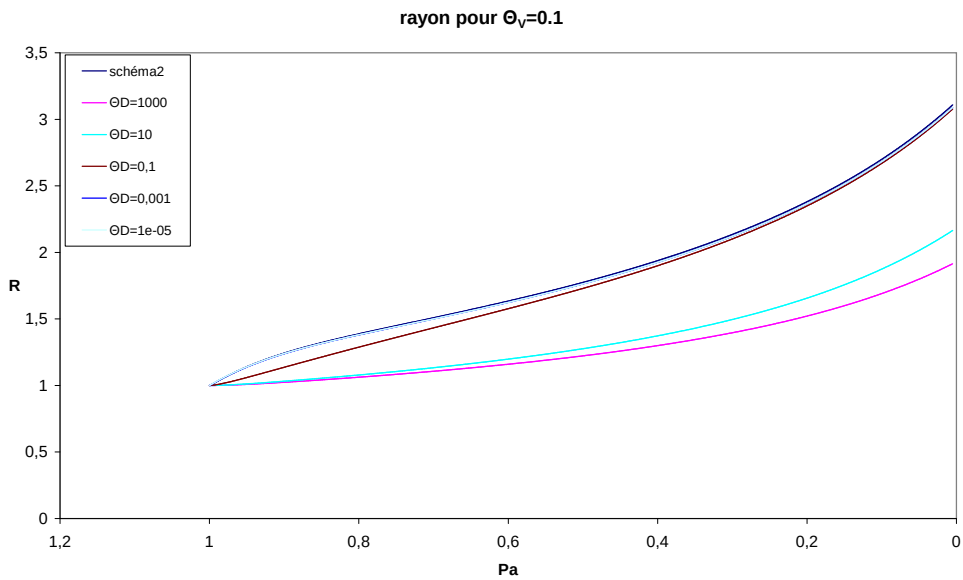
FIGURE 1.9 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.1FIGURE 1.10 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.1

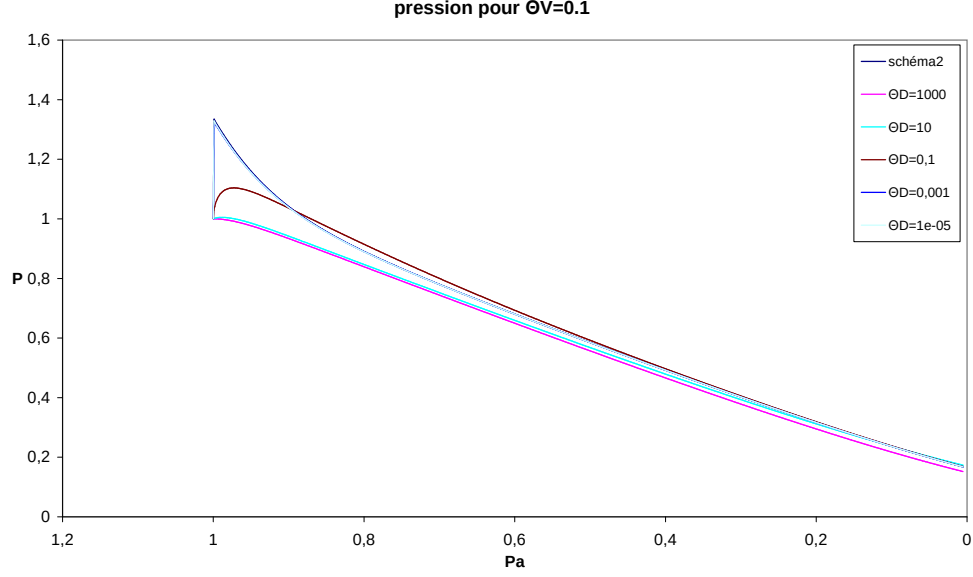
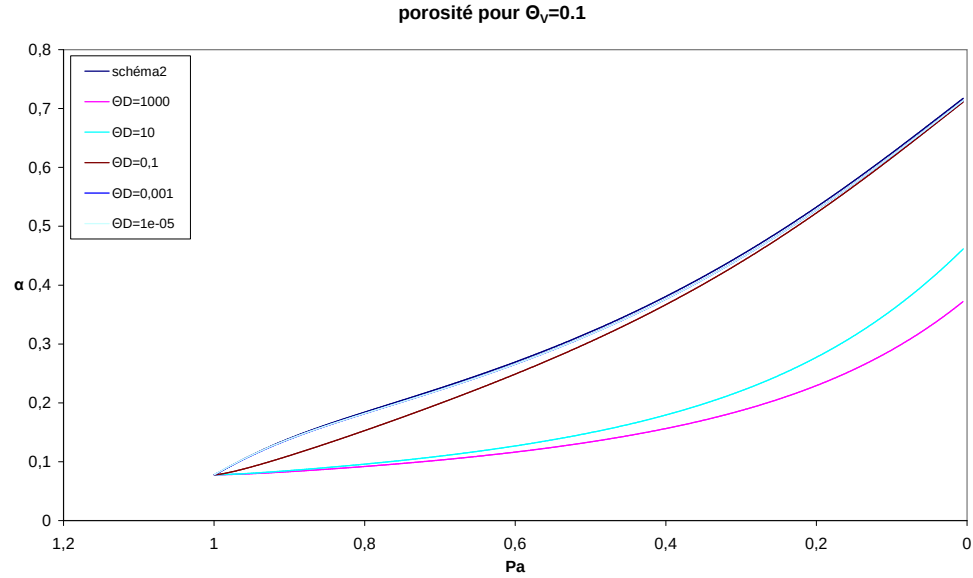
FIGURE 1.11 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.1

Lorsque Θ_D augmente, le rayon et la porosité croissent moins vite et la pression dans la bulle se rapproche de la pression ambiante. On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), seule une courbe est dans le régime de transition, $\Theta_D = 10$. La zone de convergence vers le régime limite, dans ce cas, se comporte de la même façon que dans [LNL04, fig.3] où le régime limite en temps grand est atteint pour une plus faible gamme de Θ_D . Comme on peut le voir sur les graphiques Fig.1.9, Fig.1.10 et Fig.1.11, lorsque $\Theta_D = 1000$, on approche bien la courbe donnée par le schéma simplifié de la section 1.4.1.1.

1.5.2.2 Convergence du cas général vers 1.4.3.3

Ici, on se fixe un Θ_V et on observe le comportement de la solution lorsque Θ_D diminue. Dans les graphiques, on a pris $\Theta_V = 0.1$. Pour rappel, le schéma 2 correspond au cas $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow 0$.

FIGURE 1.12 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.3

FIGURE 1.13 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.3FIGURE 1.14 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.3

Lorsque Θ_D augmente, le rayon et la porosité croissent moins vite et la pression dans la bulle se rapproche de la pression ambiante. On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), seule une courbe est dans le régime de transition, $\Theta_D = 10$. Toutes les courbes avec $\Theta_D \leq 0.1$ se confondent avec la courbe limite. La zone de convergence vers le régime limite, dans ce cas, se comporte de la même façon que dans [LNL04, fig.3] où le régime limite en temps grand est atteint pour une plus large gamme de Θ_D . Comme on peut le voir sur les graphiques Fig.1.12, Fig.1.13 et Fig.1.14, à partir de $\Theta_D = 10^{-3}$, nous ne différencions que difficilement les courbes obtenues pour un Θ_D plus petit et celle obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.3.3.

1.5.2.3 Convergence du cas général vers 1.4.1.2

Ici, on se fixe un Θ_D et on observe le comportement de la solution lorsque Θ_V diminue. Dans les graphiques, on a pris $\Theta_D = 0.1$. Pour rappel, le schéma 7 correspond au cas

$\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \sim 1$.

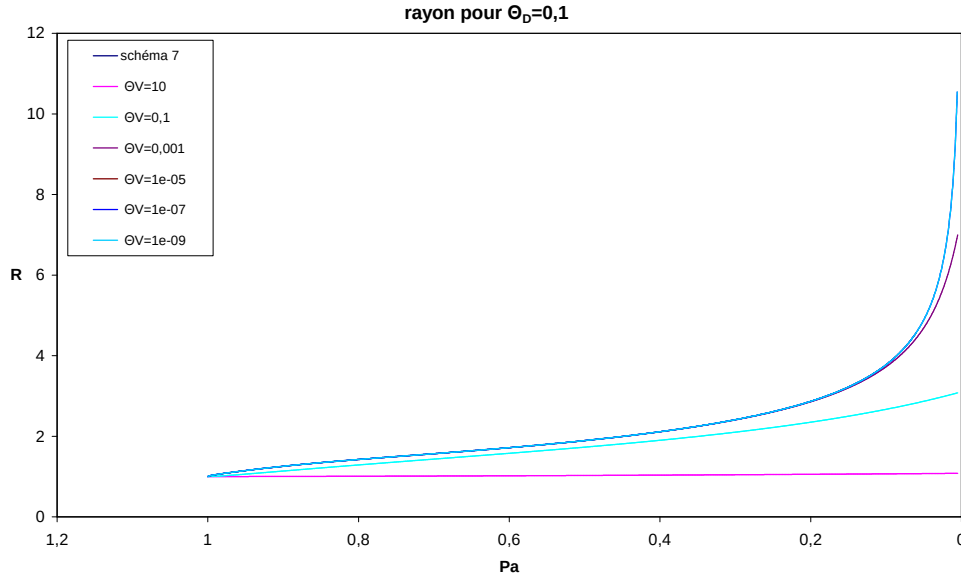


FIGURE 1.15 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.2

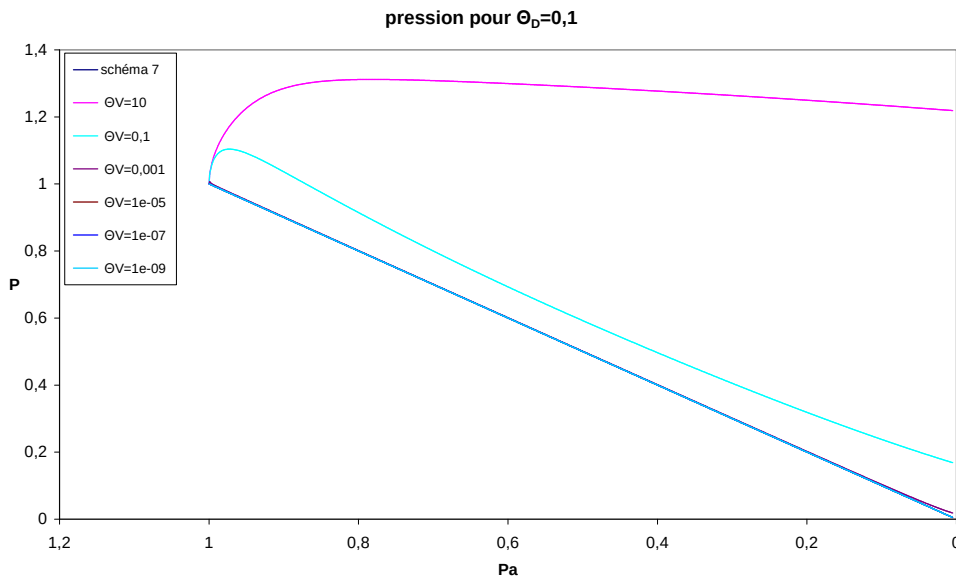
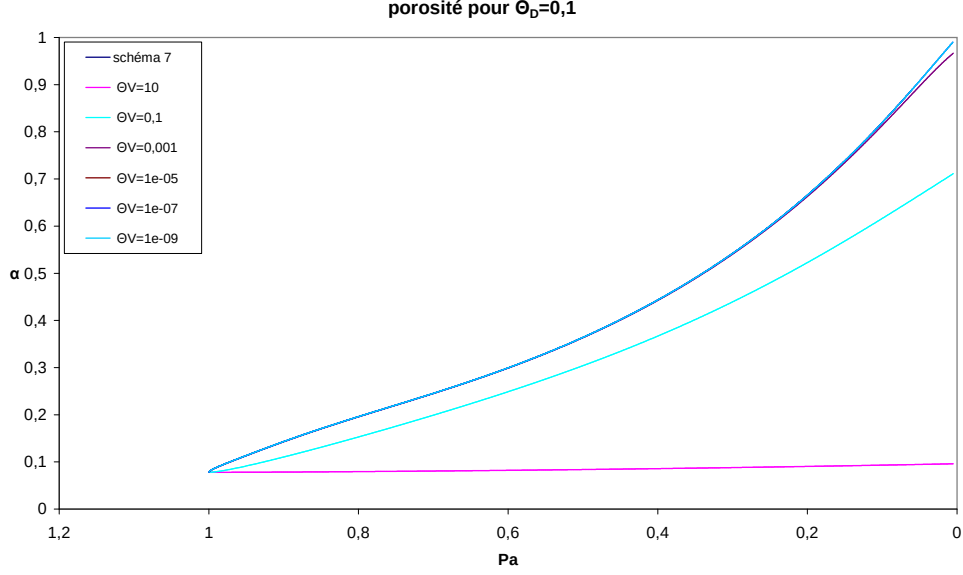


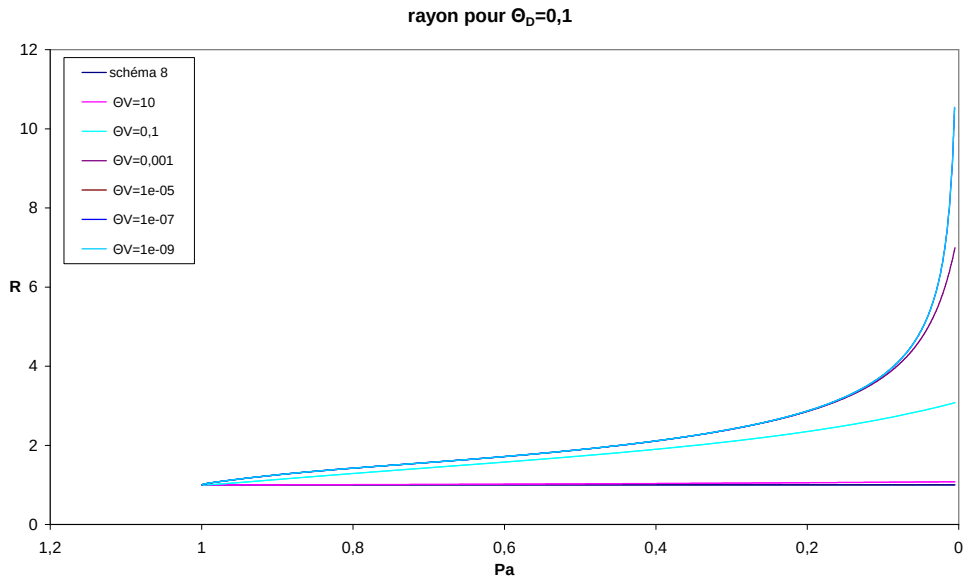
FIGURE 1.16 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.2

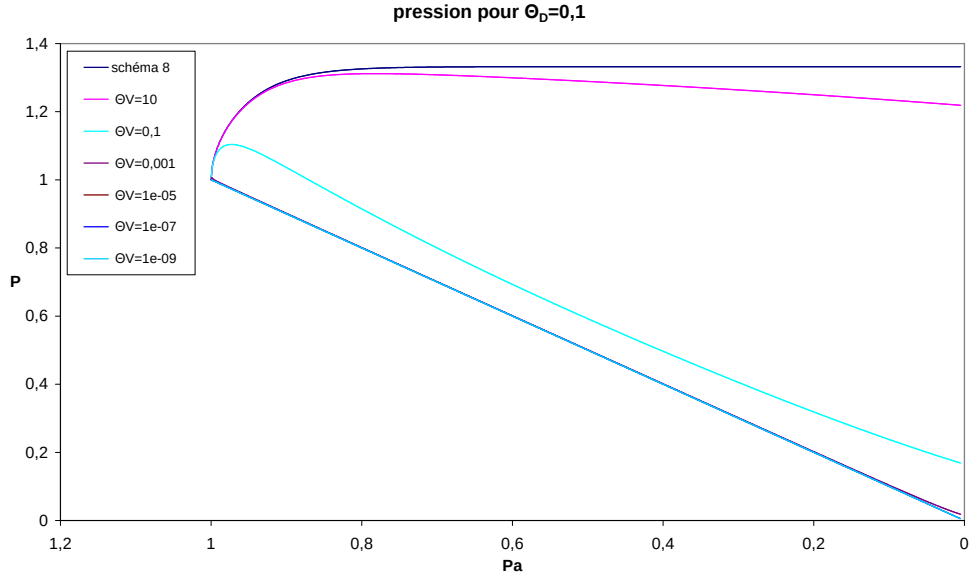
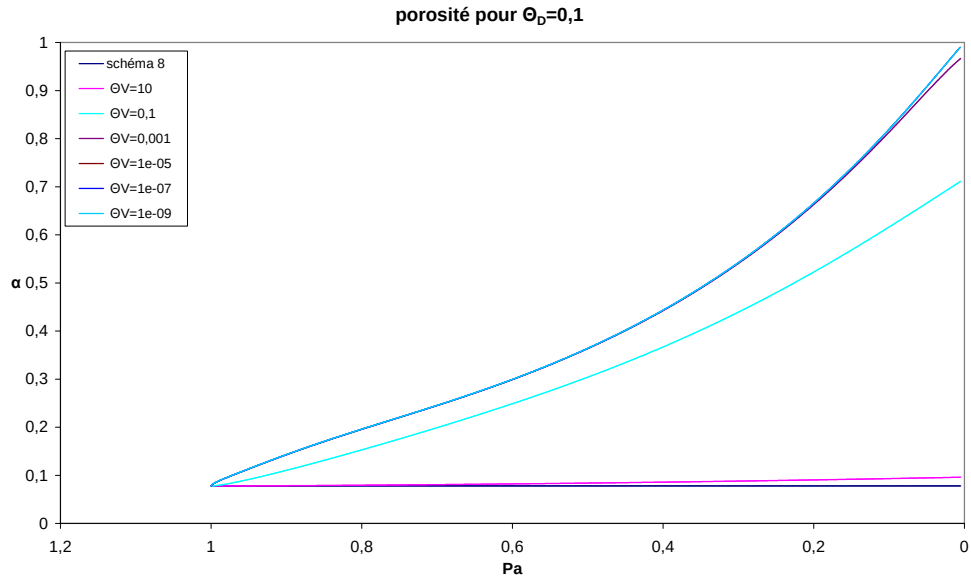
FIGURE 1.17 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.2

Lorsque Θ_V diminue, le rayon et la porosité croissent plus vite et la pression dans la bulle se rapproche de la pression ambiante. On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), les courbes $\Theta_V \geq 0.001$ ne sont pas confondues avec le cas simplifié, la courbe $\Theta_V = 0.001$ suit le régime limite et finit par s'en distinguer en temps long (90% du temps). La zone de convergence vers le régime limite, dans ce cas, ne se comporte pas de la même façon que dans [LNL04, fig.3] où le régime limite en temps grand est atteint pour une plus grande gamme de Θ_V . Sur les trois graphiques : Fig.1.15, Fig.1.16 et Fig.1.17, la courbe $\Theta_V = 10^{-5}$ et celle du schéma simplifié de la section 1.4.1.2 sont confondues.

1.5.2.4 Convergence du cas général vers 1.4.3.1

Ici, on se fixe un Θ_D et on observe le comportement de la solution lorsque Θ_V augmente. Dans les graphiques, on a pris $\Theta_D = 0.1$. Pour rappel, le schéma 8 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \sim 1$.

FIGURE 1.18 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.1

FIGURE 1.19 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.1FIGURE 1.20 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.1

Lorsque Θ_V augmente, le rayon et la porosité croissent moins vite et la pression dans la bulle s'écarte de plus en plus de la pression ambiante. On constate qu'en temps court (P_a proche de 1), seule une courbe est dans le régime de transition, $\Theta_V = 0.1$. Comme on peut le voir sur les graphiques Fig.1.18, Fig.1.19 et Fig.1.20, lorsque $\Theta_V = 10$, la courbe se rapproche de celle donnée par le schéma numérique décrit en section 1.4.3.1. Nous venons de voir que le modèle général convergeait numériquement vers les modèles simplifiés décrits en sections 1.4.1.1, 1.4.3.3, 1.4.1.2 et 1.4.3.1. Nous pouvons donc nous permettre de considérer la convergence de ces quatre modèles limites vers les modèles limites décrits en sections 1.4.1.3, 1.4.2.1, 1.4.2.2 et 1.4.3.2. Ceci afin de gagner du temps de calcul, comme le modèle général peut être très long, il est préférable d'utiliser les modèles simplifiés.

1.5.2.5 Convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.1.3

Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_V diminue, du schéma numérique décrit en section 1.4.1.1 ($\Theta_D \rightarrow \infty$). Pour rappel, le schéma 5 correspond au cas $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$, et le schéma 4 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$.

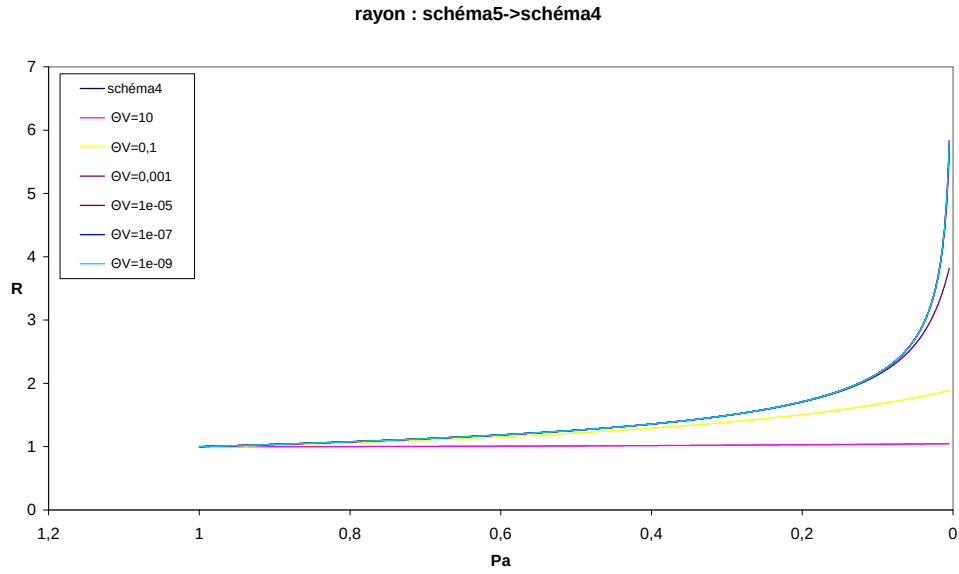


FIGURE 1.21 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.1.3

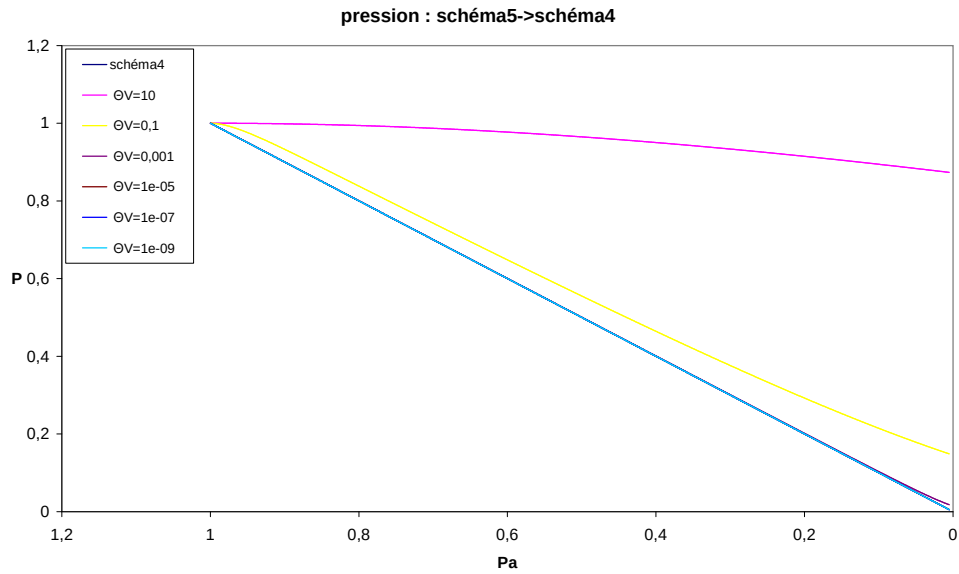
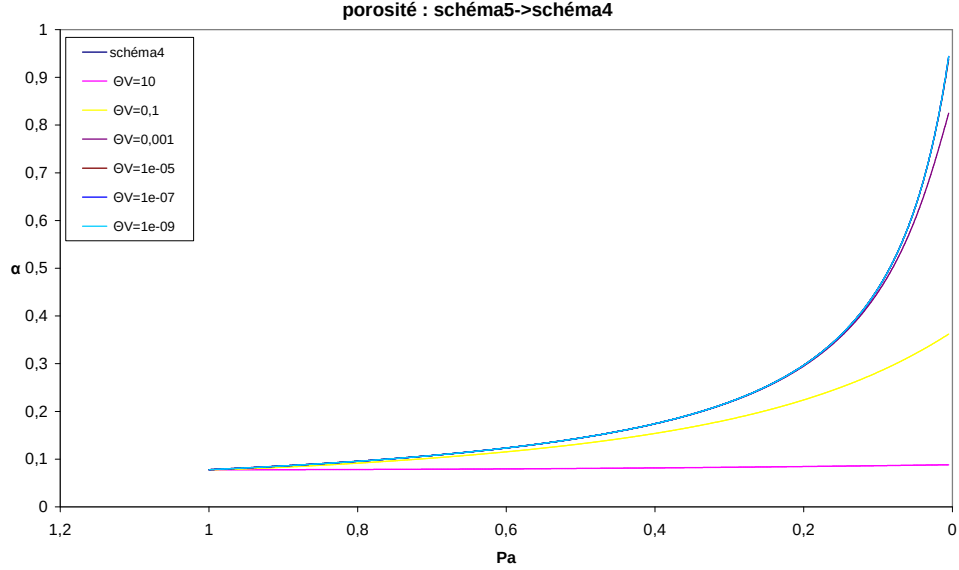


FIGURE 1.22 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.1.3

FIGURE 1.23 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.1.3

Lorsque Θ_V diminue, le rayon et la porosité croissent plus vite et la pression dans la bulle se rapproche de la pression ambiante. On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), les courbes $\Theta_V \geq 0.001$ n'ont pas convergé vers le régime limite considéré. La courbe $\Theta_V = 0.001$ suit le régime limite en temps court puis on constate une différence en temps long. La zone de convergence vers le régime limite, dans ce cas, ne se comporte pas de la même façon que dans [LNL04, fig.3] où le régime limite en temps grand est atteint pour une plus grande gamme de Θ_V . Comme on peut le voir sur les graphiques Fig.1.21, Fig.1.22 et Fig.1.23, à partir de $\Theta_V = 10^{-5}$, on ne différencie plus les courbes avec la courbe obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.1.3.

1.5.2.6 Convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.2.2

Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_V augmente, du schéma numérique décrit en section 1.4.1.1 ($\Theta_D \rightarrow \infty$). Pour rappel, le schéma 5 correspond au cas $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$, et le schéma 6 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$.

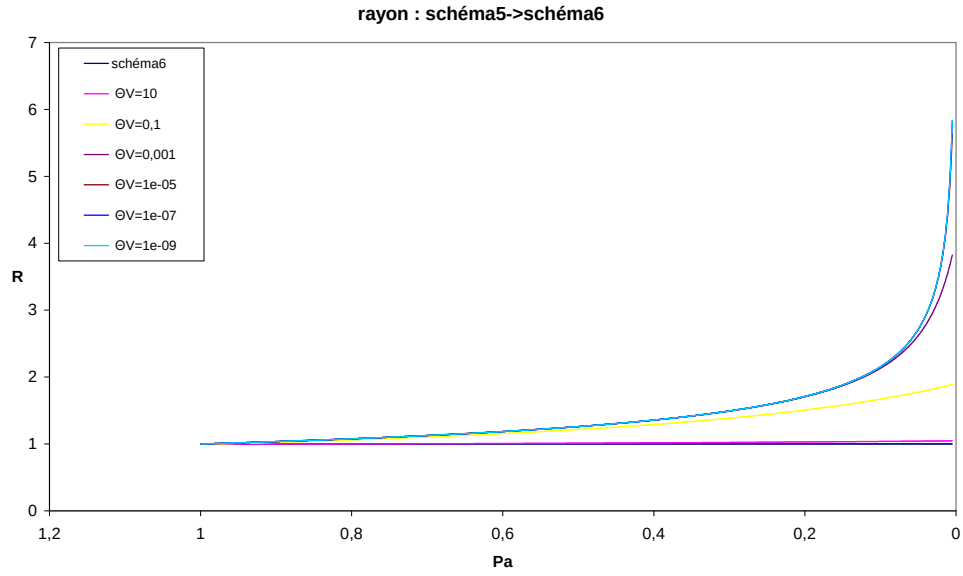


FIGURE 1.24 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.2.2

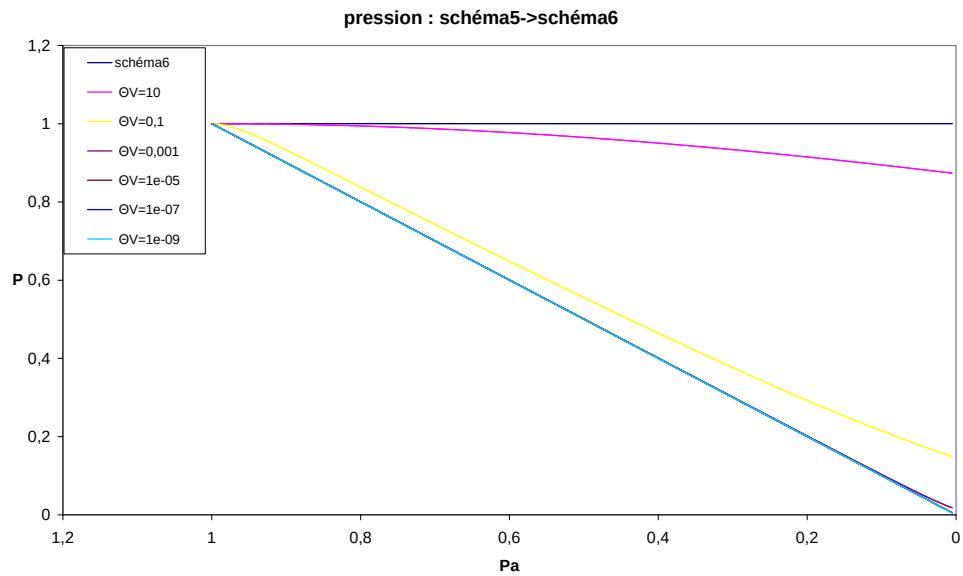
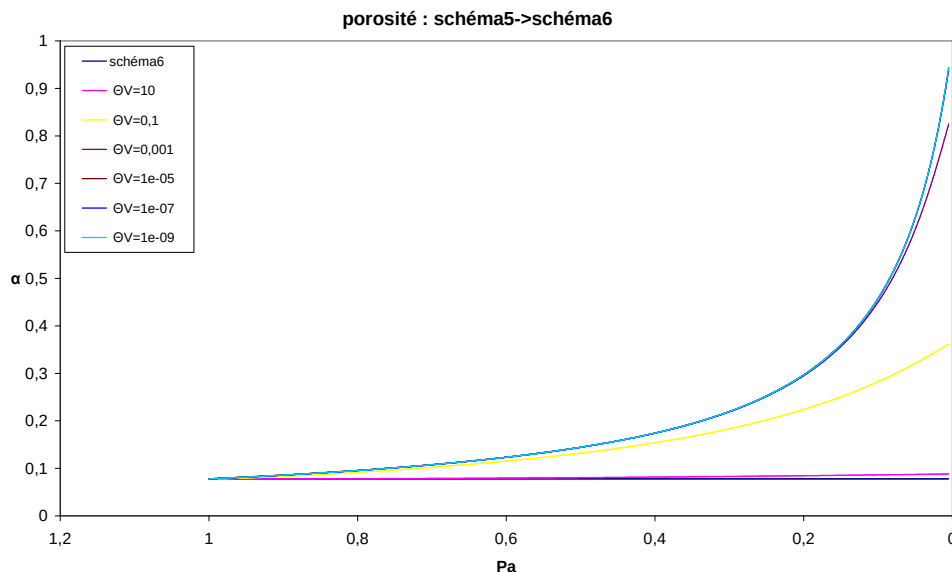


FIGURE 1.25 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.2.2

FIGURE 1.26 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.2.2

Lorsque Θ_V augmente, le rayon et la porosité croissent moins vite jusqu'à ne plus croître et la pression dans la bulle diminue de moins en moins vite que la pression ambiante. On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), aucune courbe n'a convergé vers le régime limite considéré. Les courbes $\Theta_V = 10$ et $\Theta_V = 0.1$ semblent d'après la courbes sur leur pression être en régime de transition. La courbe $\Theta_V = 10$ est toutefois proche du régime limite considéré concernant le rayon et la porosité, seule la pression affiche une nette différence en temps long. Comme on peut le voir sur les graphiques Fig.1.24, Fig.1.25 et Fig.1.26, lorsque $\Theta_V = 10$, il existe encore une légère différence avec la courbe obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.2.2, il faut donc que Θ_V soit plus grand que 10 pour que l'on converge vers cette simplification.

1.5.2.7 Convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.2.1

Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_V diminue, du schéma numérique décrit en section 1.4.3.3 ($\Theta_D = 0$). Pour rappel, le schéma 2 correspond au cas $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow 0$, et le schéma 1 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \rightarrow 0$.

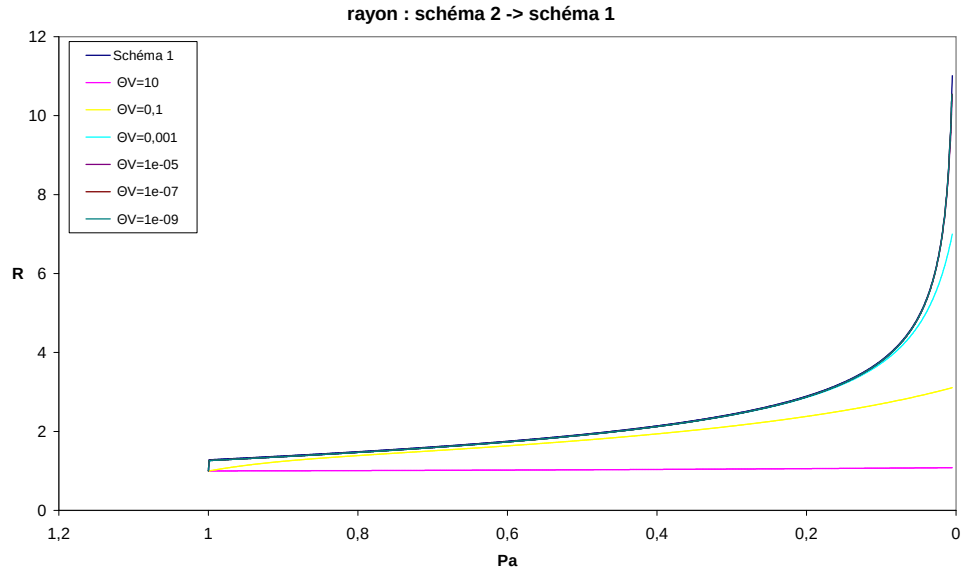


FIGURE 1.27 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.2.1

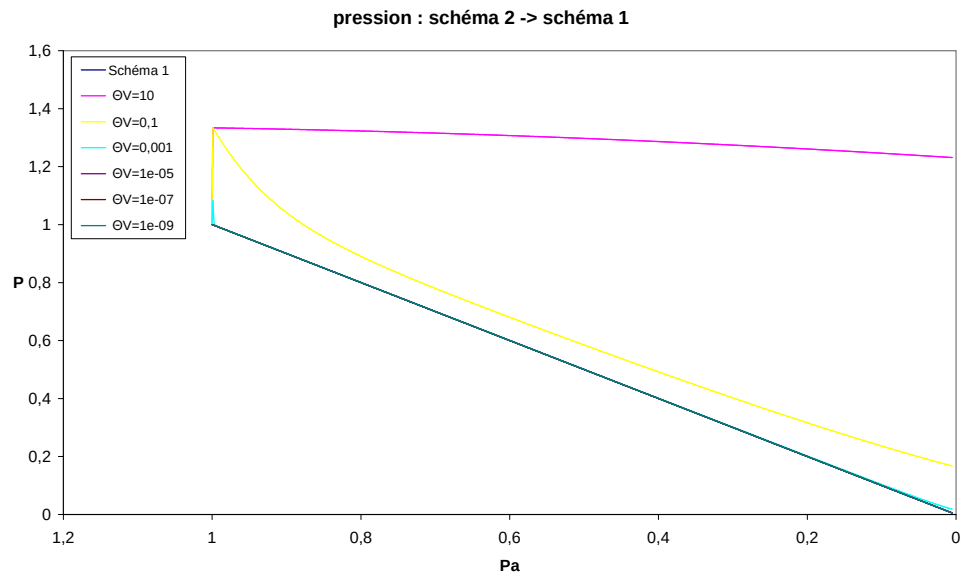
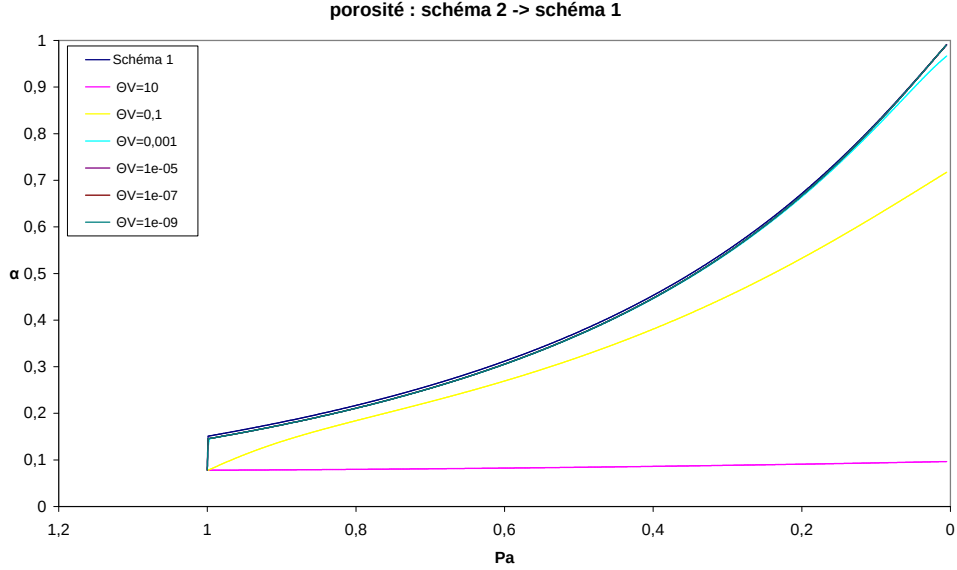


FIGURE 1.28 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.2.1

FIGURE 1.29 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.2.1

Lorsque Θ_V diminue, le rayon et la porosité croissent plus vite et la pression dans la bulle se rapproche de la pression ambiante. On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), les courbes $\Theta_V \geq 0.001$ n'ont pas convergé vers le régime limite considéré. La courbe $\Theta_V = 0.001$ suit le régime limite en temps court puis on constate une différence en temps long. La zone de convergence vers le régime limite, dans ce cas, ne se comporte pas de la même façon que dans [LNL04, fig.3] où le régime limite en temps grand est atteint pour une plus grande gamme de Θ_V . Comme on peut le voir sur les graphiques Fig.1.27, Fig.1.28 et Fig.1.29, à partir de $\Theta_V = 10^{-5}$, on ne distingue plus les différentes courbes avec celle obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.2.1.

1.5.2.8 Convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.3.2

Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_V augmente, du schéma numérique décrit en section 1.4.3.3 ($\Theta_D = 0$). Pour rappel, le schéma 2 correspond au cas $\Theta_V \sim 1$ et $\Theta_D \rightarrow 0$, et le schéma 3 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \rightarrow 0$.

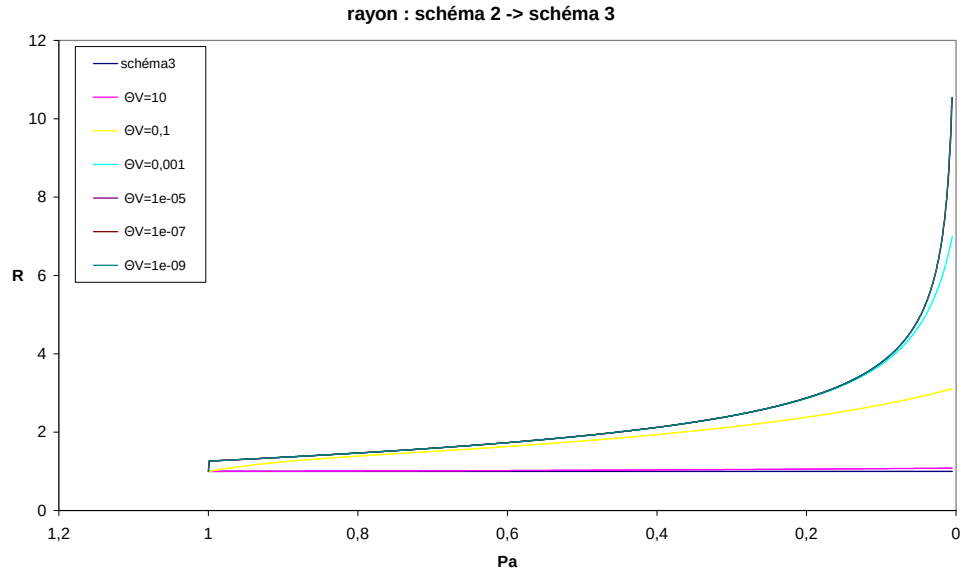


FIGURE 1.30 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.3.2

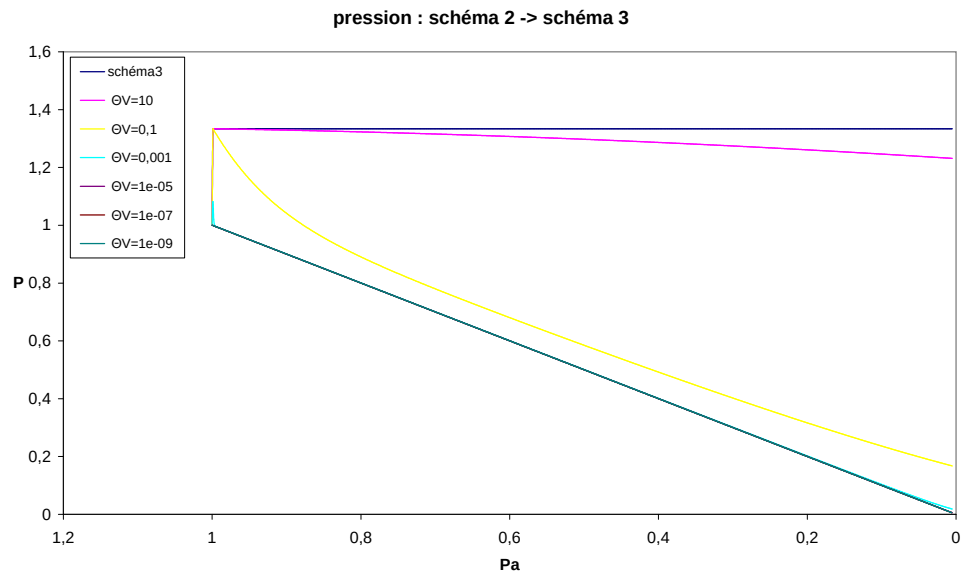
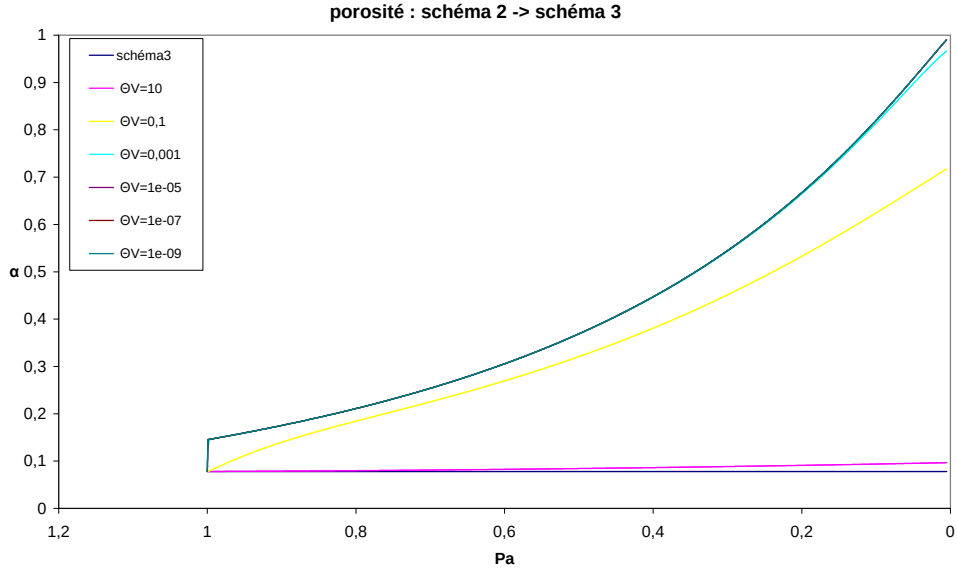


FIGURE 1.31 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.3.2

FIGURE 1.32 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.3.2

Lorsque Θ_V augmente, le rayon et la porosité croissent de moins en moins vite jusqu'à devenir constant et la pression dans la bulle se rapproche de plus en plus de la pression visqueuse définie par (1.53). On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), aucune courbe n'a convergé vers le régime limite considéré. Pour la pression, les courbes $\Theta_V = 10$ et $\Theta_V = 0.1$ sont dans le régime limite à l'instant initial ($P_a = 1$), puis la courbe $\Theta_V = 0.1$ décroît brutalement et reste entre les deux cas limites alors que la courbe $\Theta_V = 10$ décroît lentement au cours du temps, sa pression finale est supérieure à la pression ambiante initiale. Comme on peut le voir sur les graphiques Fig.1.30, Fig.1.31 et Fig.1.32, lorsque $\Theta_V = 10$, il existe encore une légère différence avec la courbe obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.2.2, il faut donc que Θ_V soit plus grand que 10 pour que l'on converge vers cette simplification.

1.5.2.9 Convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.1.3

Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_D augmente, du schéma numérique décrit en section 1.4.1.2 ($\Theta_V = 0$). Pour rappel, le schéma 7 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \sim 1$, et le schéma 4 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$.

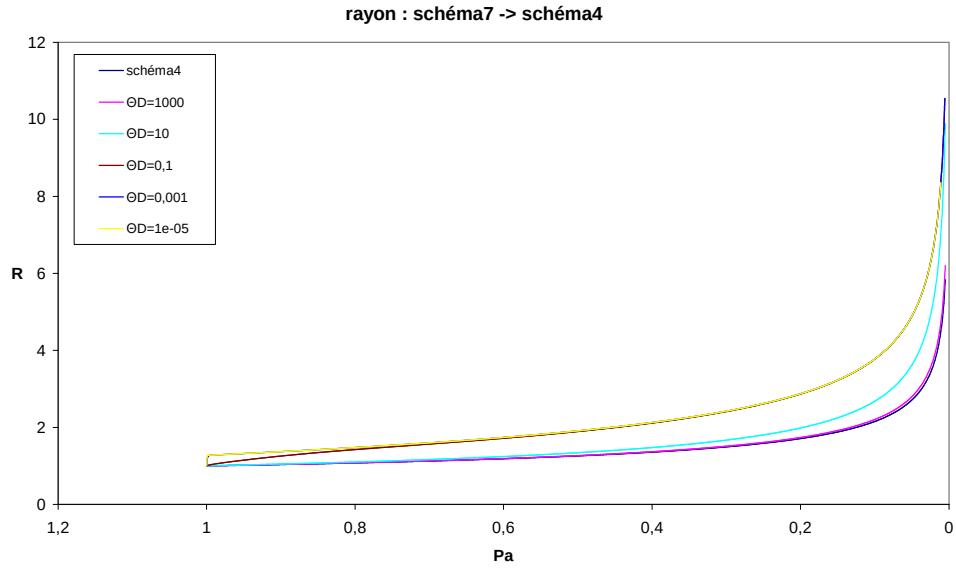


FIGURE 1.33 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.1.3

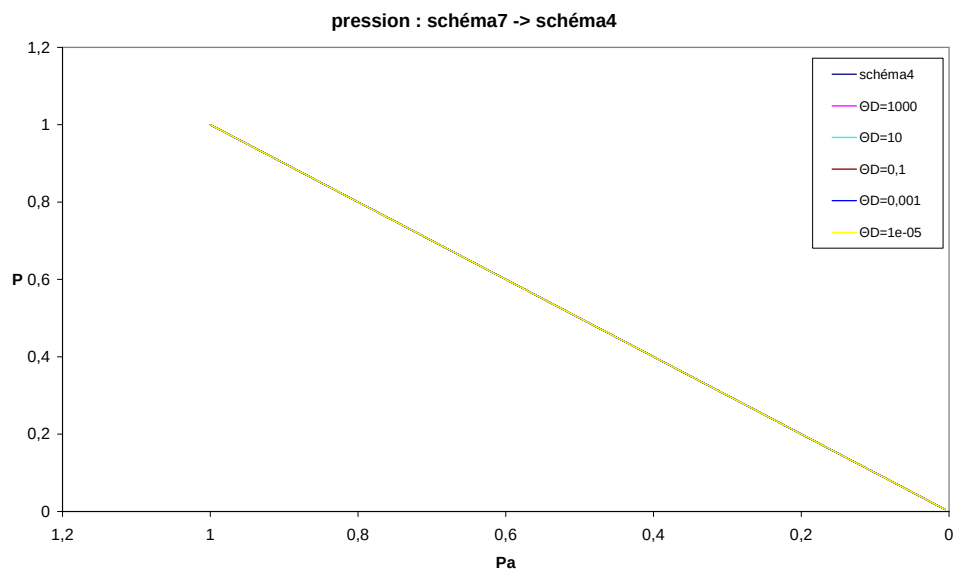
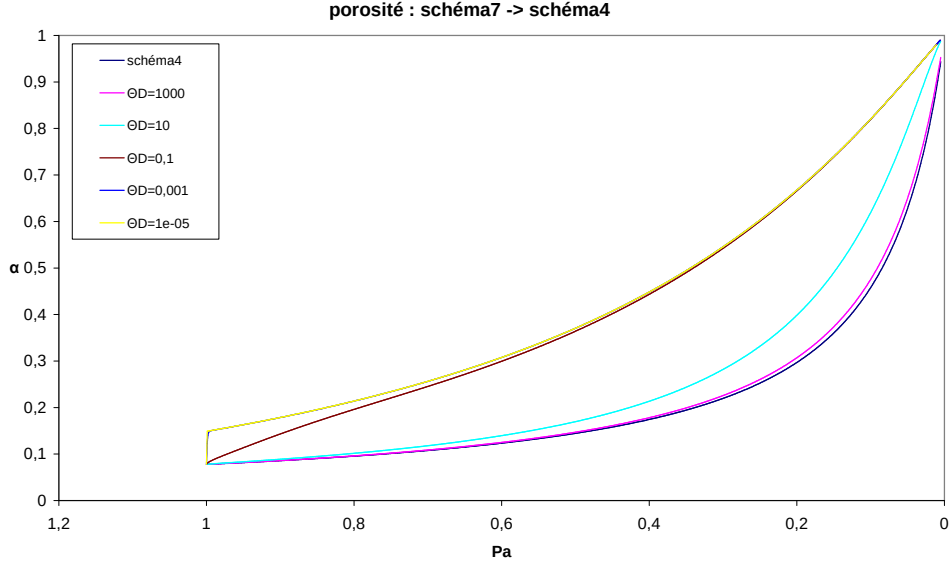


FIGURE 1.34 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.1.3

FIGURE 1.35 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.1.3

Lorsque Θ_D augmente, le rayon et la porosité croissent moins vite et la pression dans la bulle suit la pression ambiante. On constate qu'en temps court (P_a proche de 1), les courbes $\Theta_D \geq 10$ sont dans le régime limite considéré. La courbe $\Theta_D = 10$ suit le régime limite en temps court puis on constate une différence en temps long. La zone de convergence vers le régime limite, dans ce cas, se comporte de la même façon que dans [LNL04, fig.3] où le régime limite en temps grand est atteint pour une plus petite gamme de Θ_D . Sur les graphiques Fig.1.33, Fig.1.34 et Fig.1.35, nous pouvons considérer que la courbe pour $\Theta_D = 1000$ du schéma simplifié de la section 1.4.1.2 et celle du schéma simplifié de la section 1.4.1.3 sont confondues.

1.5.2.10 Convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.2.1

Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_D diminue, du schéma numérique décrit en section 1.4.1.2 ($\Theta_V = 0$). Pour rappel, le schéma 7 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \sim 1$, et le schéma 1 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow 0$ et $\Theta_D \rightarrow 0$.

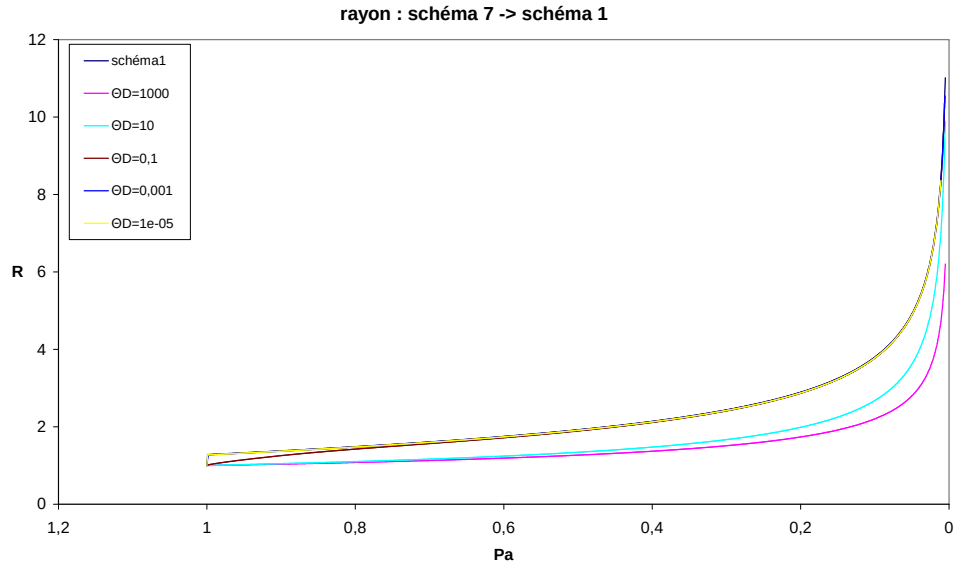


FIGURE 1.36 – $\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.2.1

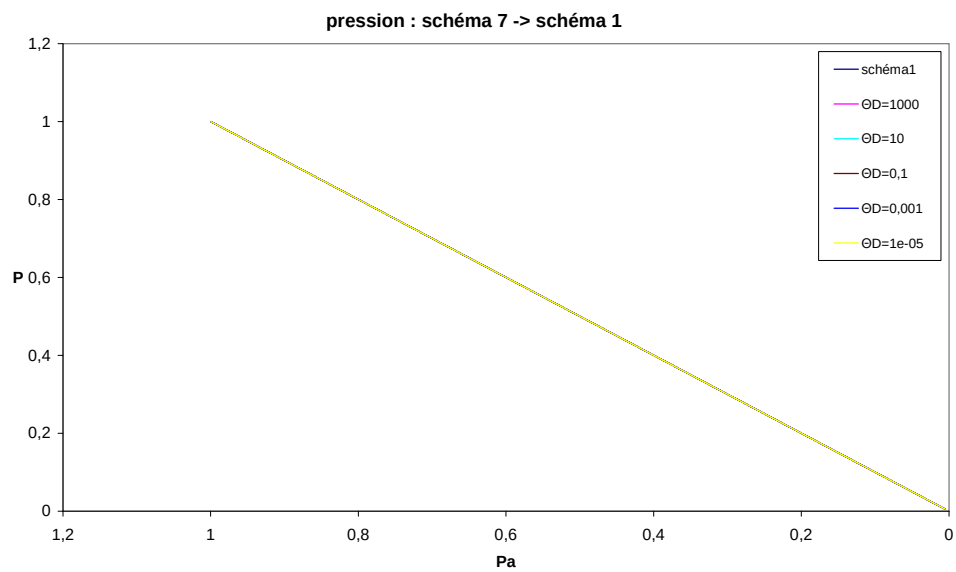
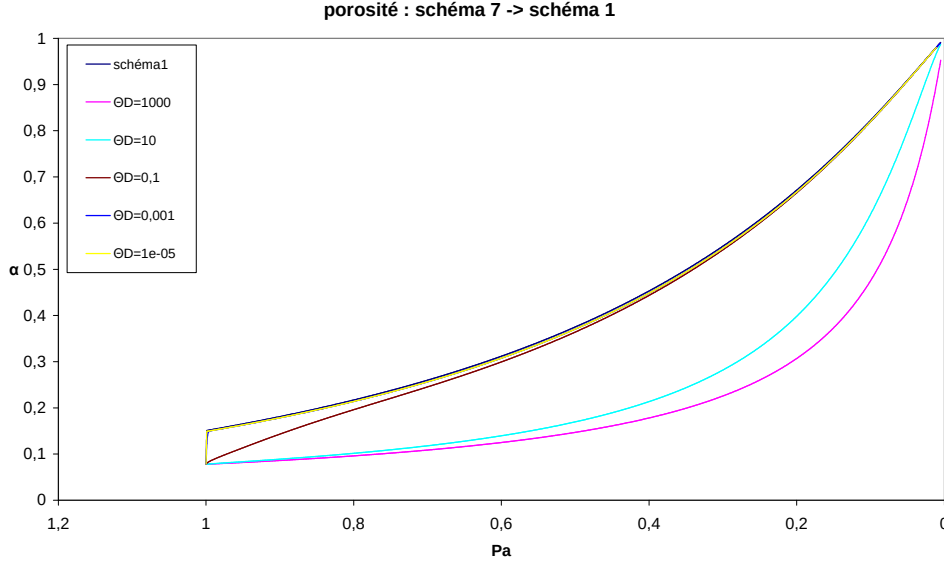


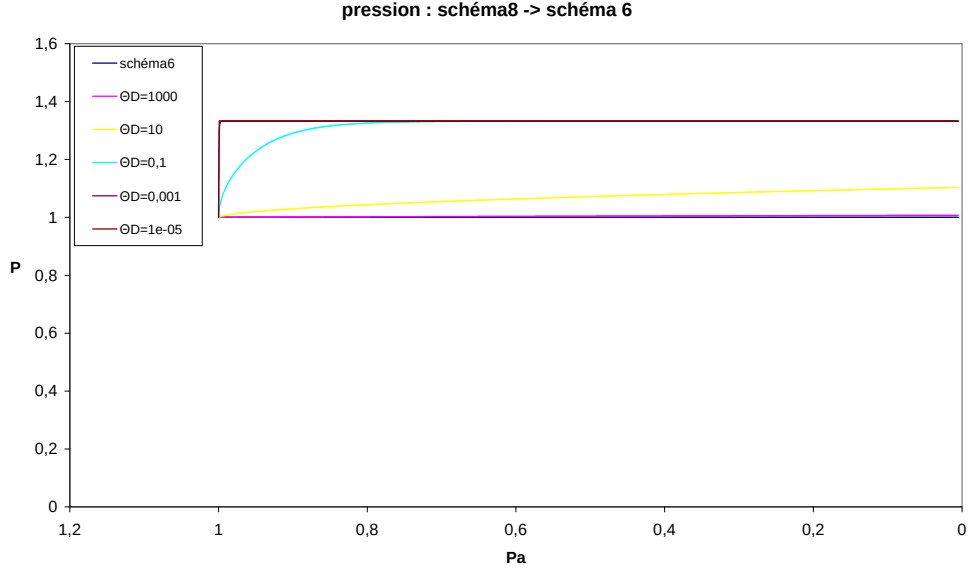
FIGURE 1.37 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.2.1

FIGURE 1.38 – α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.2.1

Lorsque Θ_D diminue, le rayon et la porosité croissent plus vite et la pression dans la bulle suit la pression ambiante. On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), les courbes $\Theta_V \leq 0.1$ ont convergé vers le régime limite considéré. La courbe $\Theta_V = 0.1$ suit le régime limite en temps long alors qu'en temps court, elle est continue là où le régime limite à une discontinuité au temps initial ($P_a = 1$). La courbe $\Theta_V = 10$ au temps final semble avoir rejoint la courbe limite. La zone de convergence vers le régime limite, dans ce cas, se comporte de la même façon que dans [LNL04, fig.3] où le régime limite en temps grand est atteint pour une plus grande gamme de Θ_D . Sur les graphiques Fig.1.36, Fig.1.37 et Fig.1.38, lorsque $\Theta_D \leq 10^{-3}$, nous ne différencions plus les courbes du schéma de la section 1.4.1.2 de celle du schéma simplifié de la section 1.4.2.1, nous retrouvons même le saut initial en rayon.

1.5.2.11 Convergence de 1.4.3.1 vers 1.4.2.2

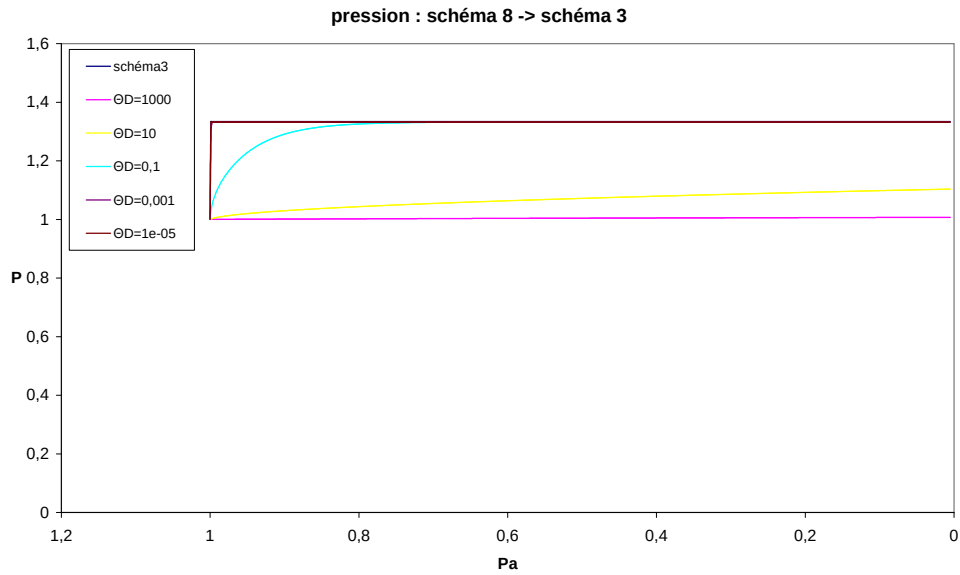
Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_D augmente, du schéma numérique décrit en section 1.4.3.1 ($\Theta_V \rightarrow \infty$). Comme dans les deux section considérées, le rayon est constant, nous n'avons pas mis les graphiques représentants le rayon et la porosité. Pour rappel, le schéma 8 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \sim 1$, et le schéma 6 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \rightarrow \infty$.

FIGURE 1.39 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.1 vers 1.4.2.2

Lorsque Θ_D augmente, la pression dans la bulle tend à rester constante. Comme on peut le voir sur le graphique Fig.1.39, lorsque $\Theta_D = 1000$, on observe une infime différence entre la courbe obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.3.1 et celle obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.2.2.

1.5.2.12 Convergence de 1.4.3.1 vers 1.4.3.2

Ici, on observe le comportement, lorsque Θ_D diminue, du schéma numérique décrit en section 1.4.3.1 ($\Theta_V \rightarrow \infty$). Comme dans les deux section considérées, le rayon est constant, nous n'avons pas mis les graphiques représentant le rayon et la porosité. Pour rappel, le schéma 8 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \sim 1$, et le schéma 3 correspond au cas $\Theta_V \rightarrow \infty$ et $\Theta_D \rightarrow 0$.

FIGURE 1.40 – $\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.1 vers 1.4.3.2

Lorsque Θ_D diminue, la pression dans la bulle se rapproche de plus en plus de la pression

visqueuse définie par (1.53). On constate qu'en temps long (P_a proche de 0), les courbes $\Theta_D \leq 0.1$ ont pas convergé vers le régime limite considéré. La courbe $\Theta_D = 0.1$ suit le régime limite en temps long alors qu'en temps court, elle est continue là où le régime limite est discontinue au temps initial ($P_a = 1$). Ceci signifie que lorsque le temps augmente, la zone de convergence vers le régime limite grandit. Comme on peut le voir sur le graphique Fig.1.40, à partir de $\Theta_D = 10^{-3}$, on ne différencie plus les courbes obtenues par le schéma numérique décrit en section 1.4.3.1 de celle obtenue par le schéma numérique décrit en section 1.4.3.2.

1.5.2.13 Conclusion de la convergence numérique

Pour le jeu de paramètres que l'on a choisi en début de section 1.5.2, on arrive au tableau des cas simplifié suivant :

		1.4.1.3	1.4.1.1	1.4.2.2
Θ_D	10^3	1.4.1.2	cas général	1.4.3.1
	10^{-3}	1.4.2.1	1.4.3.3	1.4.3.2
			10^{-5}	10^2
			Θ_V	

TABLE 1.1 – Tableau des cas limites

Les temps de calculs pouvant être long (plusieurs jours, voire un ou deux mois) lorsque les paramètres sont petits, il est préférable d'utiliser les régimes simplifiés pour réduire le temps de calcul.

Nous avons vu que les modèles convergeaient numériquement vers les modèles simplifiés. Les différents tests nous ont permis de constater que les schémas numériques étaient stables. Seul le schéma 7 a des problèmes de stabilité dus à la condition sur le pas de temps qui, en plus d'être mal connue, est encore plus restrictive que pour le schéma général. Il est donc préférable d'utiliser les schémas simplifiés dans les autres cas et faire attention lorsque l'on est dans le cadre du schéma 7.

Contrairement à [LNL04], nous ne considérons pas un état initial à l'équilibre chimique ($C_{ini} = C_H \sqrt{\hat{P}}$), ceci nous permet en particulier de distinguer trois type de comportement dans le régime visqueux.

1.6 Conclusion

Nous avons adimensionné le système en nous inspirant de [LNL04]. Contrairement à [LNL04], nous n'avons pas fixé la pression initiale, la concentration initiale ou la température. De ce fait, nous avons pu déterminer de nouveaux cas limites.

Nous avons discrétisé le problème adimensionnel afin qu'il conserve la masse totale d'eau par construction. La discrétisation de l'équation de diffusion-advection ne nécessite pas un nombre important de points grâce au maillage que nous considérons. Ce maillage se distingue de celui de [PSA93] par le fait qu'il ne dépend que du rayon au temps considéré et du rayon et du maillage au temps précédent. Dans [PSA93], un paramètre doit être calibré pour construire un maillage non-uniforme et assurer la convergence de la solution numérique vers la solution de l'équation de diffusion-advection pour un petit nombre de points de discrétisation.

Ensuite, nous avons étudié les différents cas limites possibles. Nous avons vu que l'état d'équilibre $\Theta_V \rightarrow 0$, $\Theta_D \rightarrow 0$ (section 1.4.2.1) a une formulation très proche de l'état d'équilibre défini [BG05] par la formule (1.41) :

$$\alpha_{eq} = \frac{\beta}{MP_a + \beta}$$

$$\text{avec } \beta = GT\rho_m K_H \left(\sqrt{P_0} - \sqrt{P_a} \right)$$

où P_0 est la pression avant le début de la décompression et avant la nucléation ($R = 0$).

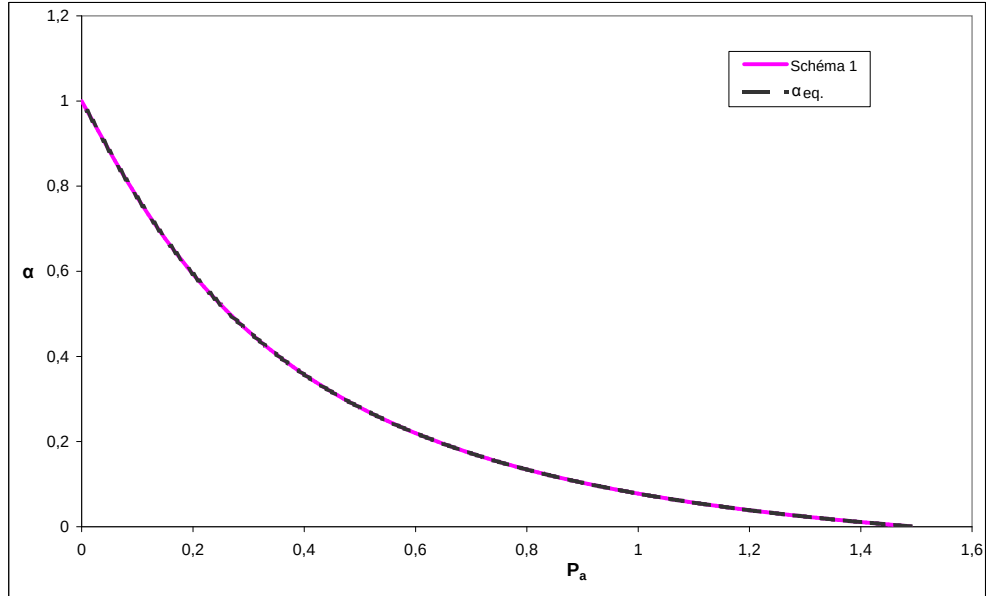


FIGURE 1.41 – comparaison de la porosité α en fonction de la pression ambiante adimensionnelle P_a donnée par (1.41) et la section 1.4.2.1

De plus, lorsque l'on compare les courbes de P_a en fonction de la porosité α obtenue à partir de (1.49) et de son expression à l'équilibre (1.41), on ne peut pas les distinguer l'une de l'autre, l'erreur étant inférieure à 10^{-3} .

Sur Fig.1.41, nous avons tracé la porosité pour différentes pressions ambiantes. Les pressions ambiantes adimensionnelles varient entre 0 et 1.5, car nous avons pris des pressions ambiantes allant jusqu'à P_0 avec $P_i = 100 \text{ MPa}$ et $P_0 = 150 \text{ MPa}$.

Nous avons étudié le comportement numérique de la discrétisation suivant certains paramètres. Cette étude nous a permis de constater que la tension de surface a peu d'influence sur la solution, de même, on a pu vérifier que nous pouvions prendre un petit nombre de points pour la discrétisation de l'équation de diffusion-advection sans diverger de la solution. Puis nous avons vu que le schéma général converge numériquement vers les différents cas simplifiés. Ceci nous a permis de fixer l'utilisation des cas simplifiés en fonction des paramètres Θ_V et Θ_D pour un jeu de données.

Les temps de calculs pour le schéma numérique général pouvant être très long, comme nous l'avons constaté pour cette étude, il faut utiliser les cas limites pour gagner en temps de calcul.

Chapitre 2

Étude du modèle monodisperse

Dans le chapitre 1, nous avons résolu numériquement le système d'équations (1.12-1.16) et étudié les cas limites suivant les paramètres d'adimensionnement Θ_D et Θ_V . Dans les cas testés en section 1.5.2, où $C_i \geq C_H \sqrt{P(0)}$, il semblerait que toutes les courbes solutions possibles (Fig.2.3) restent dans une zone délimitée par les courbes limites suivantes :

$\Theta_D = 0$ (limite supérieure) : soient $C_H = K_H \sqrt{P_i}$ et $Y = \rho_m S_0^3$

$$P_1(R) = \left(\frac{-YC_H + \sqrt{Y(C_H^2 Y + 4R^3 C_0)}}{2R^3} \right)^2 \quad (2.1)$$

$\Theta_D = \infty$ (limite inférieure) :

$$P_2(R) = \frac{1 + \Sigma}{R^3} \quad (2.2)$$

$\Theta_V = \infty$ (limite gauche) : $R = 1$

Dans ce chapitre nous allons donc étudier le comportement des solutions du système d'équation (2.3-2.7) dans l'espace des phases (P, R) , en supposant la température T et la diffusivité D constantes. Rappelons d'abord le système d'équations :

$$\frac{dR}{dt} = \frac{R}{\Theta_V \eta_{eff}} \left(P - P_a - \frac{\Sigma}{R} \right) \quad (2.3)$$

$$\frac{d}{dt}(PR^3) = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} \left(r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right)_{r=R} \quad (2.4)$$

$$R^3 P + 3\rho_m \int_R^S r^2 C dr = S_0^3 C_0 \rho_m \quad (2.4bis)$$

où C est solution de l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$\left(r^2 \frac{dC}{dt} \right) = r^2 \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{dR}{dt} R^2 \frac{\partial C}{\partial r} = \frac{1}{\Theta_D} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (2.5)$$

avec les conditions aux bords :

$$C_R = C_H \sqrt{P} \quad \text{et} \quad \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=S} = 0 \quad (2.5bis)$$

Le rayon de la zone d'influence S satisfait :

$$S^3 = R^3 + S_0^3 \quad (2.6)$$

Enfin, la pression ambiante suit une décompression linéaire :

$$P_a(t) = 1 - t \quad (2.7)$$

Nous associons au système d'équations (2.3-2.7) les conditions initiales suivantes :

- Suite à l'adimensionnement, on doit avoir :

$$R(t = 0) = 1 \quad (2.8)$$

- Nous avons choisi d'initialiser la pression en supposant que la bulle est à l'équilibre mécanique ($\dot{R} = 0$) :

$$P(t = 0) = 1 + \Sigma \quad (2.9)$$

- Par convention, nous prenons à l'état initial un profil de concentration constant en r :

$$C(r, t = 0) = C_i \quad (2.10)$$

Notons que C_0 , la concentration d'eau dissoute lorsqu'il n'y a pas de bulle, est calculée par (2.4bis) au temps $t = 0$ avec (2.9) :

$$YC_0 = P(0) + YC_i \quad (2.11)$$

avec $Y = S_0^3 \rho_m$. On posera également la concentration moyenne $\bar{C}$

$$\bar{C}(t) = \frac{3}{S_0^3} \int_R^S r^2 C(r, t) dr. \quad (2.12)$$

Dans ce cas, (2.4bis) se réécrit comme

$$PR^3 + Y\bar{C} = YC_0.$$

Le système d'équations (2.3)-(2.7) est contrôlé par trois quantités principales : le paramètre de viscosité Θ_V , le paramètre de diffusivité Θ_D et la concentration d'eau initiale dans la zone d'influence (C_i).

Définition 2.0.1

Nous dirons que les conditions initiales sont

- bien préparées, si au temps $t = 0$, la concentration d'eau dans le magma vérifie

$$C_i = C_H \sqrt{P(0)}$$

- sursaturées, si au temps $t = 0$, la concentration d'eau dans le magma vérifie

$$C_i > C_H \sqrt{P(0)}$$

- sous-saturées, si au temps $t = 0$, la concentration d'eau dans le magma vérifie

$$C_i < C_H \sqrt{P(0)}$$

Dans le cas bien préparé, on va montrer que la pression et le rayon de la bulle, solution du système (2.3)-(2.7), appartient à une région bornée par la pression de la bulle dans l'espace des phases (P, R) . On va également montrer qu'il existe une borne maximale pour le rayon R .

Dans un premier temps, nous allons énoncer quelques résultats importants sur les solutions du système. Dans un second temps, nous étudierons les courbes limites P_1 et P_2 définies par les équations (2.1) et (2.2). Ensuite nous démontrerons les résultats énoncés. Nous montrerons aussi que le comportement de la solution dans l'espace des phases a pour conséquence de borner le rayon R . Enfin cette étude nous permet de définir un flux pour approcher le flux $(r^2 D\partial_r C)_{r=R}$ dans (2.4), sans besoin de calculer la solution de (2.5). Ceci sera utilisé dans les chapitres 6 et 4.

2.1 Résultats principaux

Nous rappelons la forme des courbes limites par rapport à Θ_D :

$$P_1(R) = \left(\frac{-YC_H + \sqrt{Y(C_H^2 Y + 4R^3 C_0)}}{2R^3} \right)^2, \quad C_H = K_H \sqrt{P_i}, \quad Y = \rho_m S_0^3 \quad (2.1)$$

$$P_2(R) = \frac{P(0)}{R^3} \quad (2.2)$$

Nous avons les résultats suivants :

Théorème 2.1.1 .

Lorsque les données sont bien préparées, le couple solution (P, R) reste, pour tout temps, entre les courbes de P_1 et P_2 .

On a de plus que $\dot{R} \geq 0 \quad \forall t$.

La démonstration détaillée du théorème est faite en section 2.5.

Un autre résultat important, valable dans tous les cas, est le suivant :

Théorème 2.1.2 Existence d'un rayon maximum

En tout temps t , il existe une borne supérieure pour le rayon.

La démonstration détaillée de ce théorème est faite en section 2.7

2.2 Étude de P_1, P_2

Dans cette section, nous étudions les courbes limites P_1 (2.1) et P_2 (2.2) dans l'espace des phases (P, R) .

Les courbes définies par P_1 et P_2 vérifient :

Lemme 2.2.1 .

(i) $P_1, P_2 > 0$ pour tout $R > 0$

(ii) $\lim_{R \rightarrow 0} P_2(R) = \infty, \quad \lim_{R \rightarrow 0} P_1(R) = \left(\frac{C_0}{C_H} \right)^2$

(iii) P_1 et P_2 sont strictement décroissantes.

Démonstration

(i) P_1 et P_2 sont positifs d'après leur définition.

(ii) La limite de P_2 est évidente.

En utilisant le développement limité en 0 de la racine de P_1 :

$$\sqrt{P_1(R)} = \frac{-YC_H + YC_H + \frac{4R^3C_0Y}{2\sqrt{Y^2C_H^2}} + \mathcal{O}(R^6)}{2R^3}$$

on obtient

$$\lim_{R \rightarrow 0} P_1(R) = \left(\frac{C_0}{C_H} \right)^2.$$

(iii) $P_2 = P(0)/R^3$ est évidemment strictement décroissante.

Soit $g = \sqrt{P_1}$, on a alors :

$$g(R) = \frac{-YC_H + \sqrt{Y(C_H^2Y + 4R^3C_0)}}{2R^3}$$

• $g > 0 \forall R > 0$

• $P_1' = 2gg'$

P_1 est donc strictement décroissante si g' est strictement négative.

$$g'(R) = \frac{1}{2R^3} \left(\frac{12R^2C_0Y}{2\sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0}} \right) - \frac{3}{R^4} \left(\frac{-YC_H + \sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0}}{2} \right)$$

En réduisant au même dénominateur, on obtient :

$$g'(R) = \frac{3Y}{2R^4\sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0}} \times \left[(2R^3C_0) + \left(\frac{YC_H\sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0} - (Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0)}{Y} \right) \right]$$

En simplifiant, on obtient :

$$g'(R) = \frac{3Y}{2R^4\sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0}} \left(C_H\sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0} - YC_H^2 - 2R^3C_0 \right)$$

Ceci implique que $g'(R)$ est du même signe que

$$f(R) = C_H\sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0} - YC_H^2 - 2R^3C_0.$$

On a $f(0) = 0$ et $\lim_{R \rightarrow +\infty} f(R) = -\infty$ et :

$$f'(R) = -6R^2C_0 + \frac{C_H 12R^2YC_0}{2\sqrt{Y^2C_H^2 + 4R^3YC_0}}.$$

En simplifiant, on obtient :

$$f'(R) = \frac{6R^2 C_0}{\sqrt{Y^2 C_H^2 + 4R^3 Y C_0}} \left(C_H Y - \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4R^3 Y C_0} \right)$$

Donc f' est strictement négative pour tout R strictement positif, d'où finalement f est strictement décroissante donc strictement négative pour tout R strictement positif et comme g' est du même signe que f , P_1 est donc strictement décroissante. $\square$

2.2.1 Équivalence entre masse M et pression P

Nous rappelons le lien entre M et P , puisqu'il est parfois plus simple de travailler sur la masse $M = PR^3$. Il en suit que comme R est positif, les relations vérifiées par P sont aussi vérifiées par $M = PR^3$ et inversement.

Nous obtenons alors la définition des deux courbes limites M_1 et M_2 à partir de (2.1) et (2.2) :

$$M_1 = \frac{\left(-YC_H + \sqrt{Y(C_H^2 Y + 4R^3 C_0)} \right)^2}{4R^3} \quad \text{et} \quad M_2 = P(0)$$

avec $C_H = K_H \sqrt{P_i}$ et $Y = \rho_m S_0^3$.

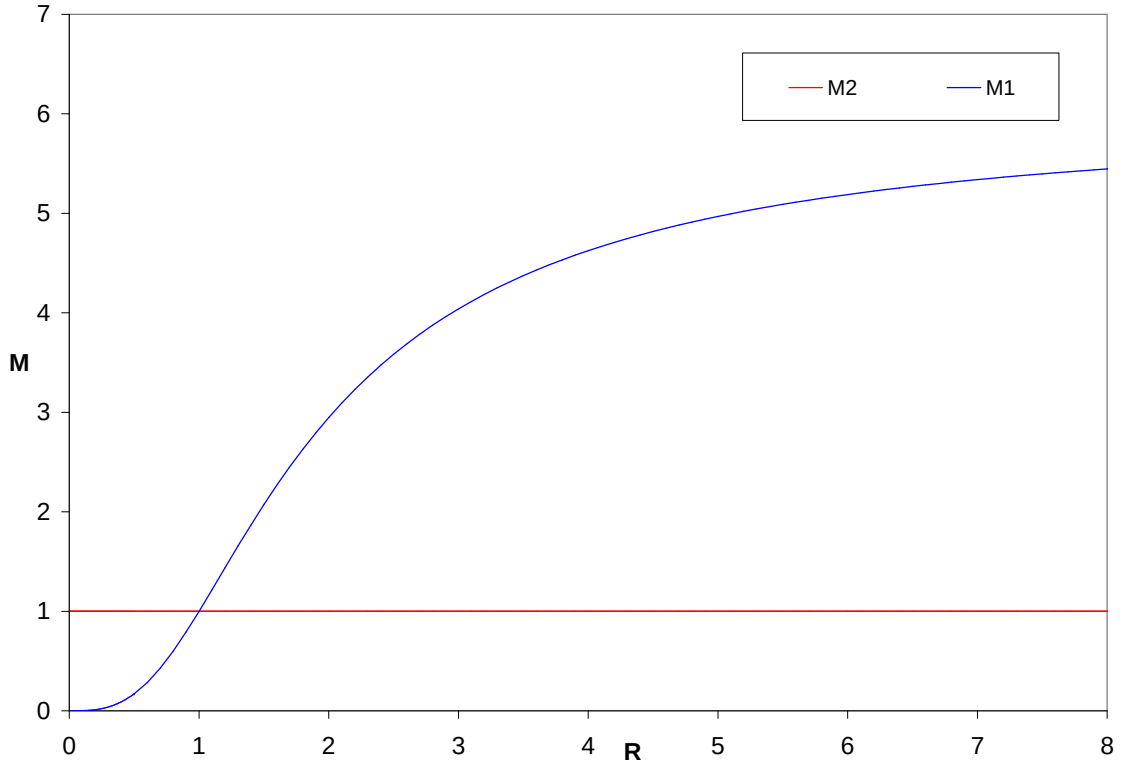


FIGURE 2.1 – Allure des fonctions M_1 (en bleu) et M_2 (en rouge)

La Fig.2.1 montre l'allure des courbes M_1 et M_2 en fonction de R . On remarque que M_2 est constante en R , on commence donc par l'étude de M_1 .

La proposition 2.2.3 et le lemme 2.2.1 énoncés sur la pression deviennent :

Lemme 2.2.2 .

- a) $\lim_{R \rightarrow 0} M_1(R) = 0$,
- b) $\lim_{R \rightarrow \infty} M_1(R) = YC_0$
- c) $M_1(R)$ est strictement croissante.
- d) $\exists ! \tilde{R} > 0, M_1(\tilde{R}) = M_2(\tilde{R})$

Démonstration

- a) On obtient le résultat en multipliant par R^3 le résultat de la proposition 2.2.3 et du lemme 2.2.1.
- b) M_1 peut s'écrire sous la forme

$$M_1(R) = \frac{Y^2 C_H^2 + 2R^3 Y C_0 - Y C_H \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4R^3 Y C_0}}{2R^3}$$

La limite quand R tend vers l'infini de M_1 est alors YC_0 .

- c) Rappelons que M_1 est solution de l'équation (voir (1.37))

$$M_1 + Y C_H \sqrt{\frac{M_1}{R^3}} - Y C_0 = 0,$$

on a alors en dérivant par rapport à R :

$$d_R(M_1) + \frac{Y C_H d_R(M_1)}{2\sqrt{M_1}\sqrt{R^3}} - \frac{3}{2} Y C_H \sqrt{\frac{M_1}{R^5}} = 0$$

D'où finalement

$$d_R(M_1) = \frac{3Y C_H M_1}{R Y C_H + 2\sqrt{M_1} R^2 \sqrt{R}} > 0$$

M_1 est donc strictement croissante.

- d) Comme M_1 est strictement croissante, vaut 0 en $R = 0$ et converge vers YC_0 quand R tend vers l'infini, et $YC_0 = YC_i + P(0) = YC_i + M_2 > M_2$, alors le point d'intersection existe et est unique.

□

Il est donc équivalent de travailler sur $M(R)$ ou sur $P(R)$, pour les différentes démonstrations, on peut donc se permettre de passer de P à M . Par convention, nous continuons d'énoncer les résultats avec la pression plutôt qu'avec la masse.

2.2.2 Intersection des courbes limites P_1 et P_2

Nous pouvons désormais montrer que ces deux courbes possède un unique point d'intersection.

Proposition 2.2.3 .

Il existe un unique point d'intersection entre P_1 et P_2 , donné par

$$R = \left(\frac{P(0)C_H^2}{C_i^2} \right)^{1/3}. \quad (2.13)$$

Démonstration

On a vu dans le lemme 2.2.2 c) qu'il existait un unique point d'intersection R^* tel que $M_1(R^*) = M_2(R^*)$, or $M_1(R) = P_1(R)R^3$ et $M_2(R) = P_2(R)R^3$, donc toutes les relations d'ordre suivies par M_1 et M_2 le sont également pour P_1 et P_2 . Cela signifie que $P_1(R) < P_2(R)$ pour tout $R < R^*$, $P_1(R) > P_2(R)$ pour tout $R > R^*$ et $P_1(R^*) = P_2(R^*)$, le point d'intersection des courbes P_1 et P_2 est donc unique.

Nous cherchons maintenant l'expression de ce point d'intersection R^* . Ce point doit vérifier $P_1(R^*) = P_2(R^*)$, ce qui nous donne :

$$\left(\frac{-YC_H + \sqrt{Y^2C_H^2 + 4YC_0(R^*)^3}}{2(R^*)^3} \right)^2 = \frac{P(0)}{(R^*)^3}$$

On multiplie par $4(R^*)^6$ et on développe le carré :

$$2Y^2C_H^2 + 4YC_0(R^*)^3 - 2YC_H\sqrt{Y^2C_H^2 + 4YC_0(R^*)^3} = 4(R^*)^3P(0)$$

Nous utilisons (2.11) pour remplacer $P(0)$ et nous isolons la racine :

$$Y^2C_H^2 + 2YC_0(R^*)^3 - 2(R^*)^3(YC_0 - YC_i) = YC_H\sqrt{Y^2C_H^2 + 4YC_0(R^*)^3}$$

En passant au carré, on obtient alors la relation suivante :

$$Y^4C_H^4 + 4Y^3C_i(R^*)^3C_H^2 + 4(R^*)^6Y^2C_i^2 = Y^4C_H^4 + 4Y^3C_0(R^*)^3C_H^2$$

En simplifiant et en divisant par $4Y^2(R^*)^3$, on obtient :

$$YC_iC_H^2 + (R^*)^3C_i^2 = YC_0C_H^2$$

Soit en regroupant, nous obtenons :

$$(R^*)^3 = \frac{C_H^2(YC_0 - YC_i)}{C_i^2}$$

Finalement en utilisant (2.11), nous obtenons l'expression attendue :

$$R^* = \left(\frac{P(0)C_H^2}{C_i^2} \right)^{1/3}$$

□

2.2.3 Position du point d'intersection

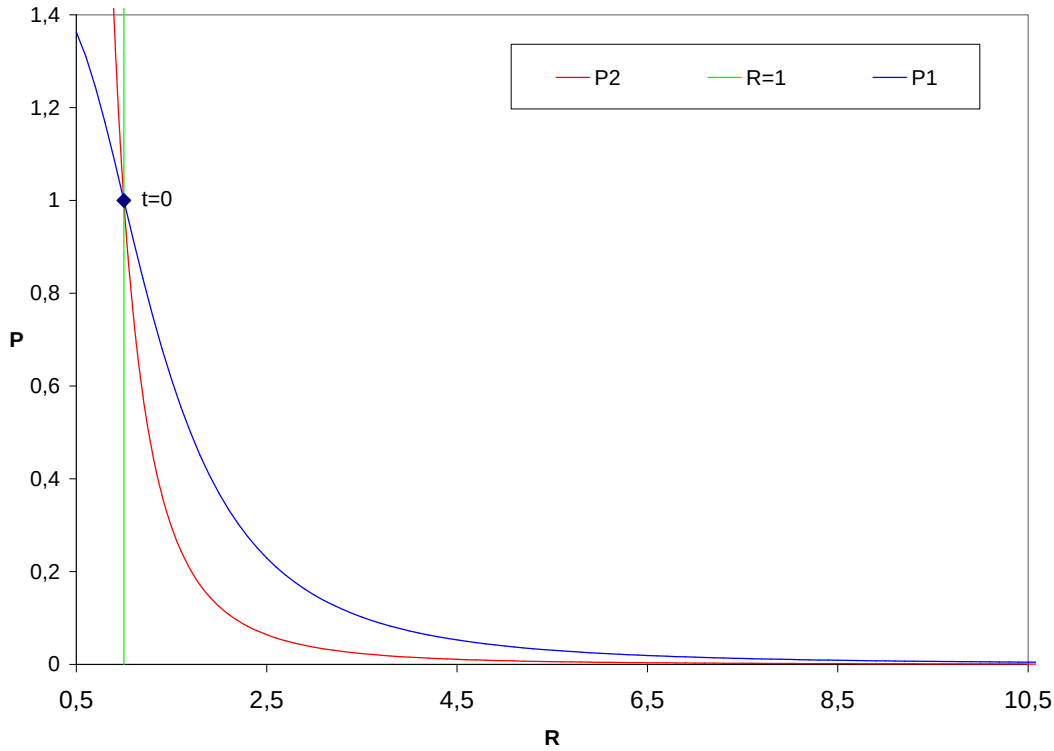


FIGURE 2.2 – Dans le cas bien préparé, les courbes se croisent toutes les trois en un point, $R = 1, P = 1 + \Sigma$. En rouge est représenté P_2 , en bleu P_1 et en vert $R = 1$

La Fig. 2.2 montre le comportement des courbes P_1 et P_2 en fonction de R dans le cas bien préparé et illustre le premier point du lemme suivant :

Lemme 2.2.4 .

- Dans le cas bien préparé, on a $P_1(1) = P_2(1)$.
- Dans le cas sursaturé, on a $P_1(1) > P_2(1)$.
- Dans le cas sous-saturé, on a $P_1(1) < P_2(1)$.

Démonstration

- D'après la proposition 2.2.3, il existe un unique point d'intersection au point R donné par (2.13). Or dans le cas bien préparé, $C_i = C_H \sqrt{P(0)}$, on a donc bien que l'intersection a lieu en $R = 1$.
Nous avons $P_2(1) = P(0)$. Vérifions maintenant que $P_1(1) = P(0)$:

$$P_1(1) = \left(\frac{-YC_H + \sqrt{Y(C_H^2 Y + 4C_0)}}{2} \right)^2$$

D'après la relation (2.11), avec $C(r, 0) = C_H \sqrt{P(0)}$, on a $YC_0 = YC_H \sqrt{P(0)} + P(0)$. Alors, le terme dans la racine se simplifie :

$$Y(C_H^2 Y + 4C_0) = Y^2 C_H^2 + 4YC_H \sqrt{P(0)} + 4P(0) = (YC_H + 2\sqrt{P(0)})^2$$

D'où finalement,

$$P_1(1) = \left(\frac{-YC_H + YC_H + 2\sqrt{P(0)}}{2} \right)^2 = P(0) = P_2(1).$$

– Dans le cas sursaturé, il est plus simple de montrer que $M_1(1) > M_2(1)$. On a

$$M_1(R) = \frac{Y^2 C_H^2 + 2R^3 Y C_0 - YC_H \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4R^3 Y C_0}}{2R^3}$$

et $M_2(R) = P(0)$. Alors

$$M_1(1) = \frac{Y^2 C_H^2 + 2YC_0 - YC_H \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_0}}{2}.$$

En remplaçant YC_0 grâce à (2.11), on obtient :

$$M_1(1) = P(0) + \frac{YC_H}{2} \left(YC_H + 2\frac{C_i}{C_H} - \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4P(0)} \right)$$

que l'on peut écrire sous la forme

$$M_1(1) = M_2(1) + \frac{YC_H}{2} \left(\sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4\frac{C_i^2}{C_H^2}} - \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4P(0)} \right).$$

Or, par hypothèse de donnée initiale sursaturée, on a $C_i > C_H \sqrt{P(0)}$, donc

$$\sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4\frac{C_i^2}{C_H^2}} - \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4P(0)} > 0$$

Ce qui montre que $M_1(1) > M_2(1)$, d'où $P_1(1) > P_2(1)$.

– Comme précédemment, pour le cas sous-saturé on montre que $M_1(1) < M_2(1)$. On obtient :

$$M_1(1) = M_2(1) + \frac{YC_H}{2} \left(\sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4\frac{C_i^2}{C_H^2}} - \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4P(0)} \right).$$

Par hypothèse de donnée initiale sous-saturée, on a $C_i < C_H \sqrt{P(0)}$, donc

$$\sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4\frac{C_i^2}{C_H^2}} - \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4YC_i + 4P(0)} < 0,$$

et enfin, $M_1(1) < M_2(1)$, d'où $P_1(1) < P_2(1)$.

□

Remarque 2.2.5 .

Le résultat précédent signifie que dans le cas sursaturé, on a $P_2(R(0)) = P(0) < P_1(R(0))$, alors que dans le cas sous-saturé, on a $P_2(R(0)) = P(0) > P_1(R(0))$.

2.3 Estimation sur la concentration d'eau dans le magma C

Maintenant que l'on connaît l'évolution des courbes limites, que ce soit en pression P ou en masse M , il nous faut étudier la façon dont évolue la concentration d'eau C dans la magma. De plus on peut déjà lier certains états pour le rayon et la pression.

Lemme 2.3.1 *Résultats sur la diffusion*

Soit K une constante.

$$\begin{aligned} \Theta_D r^2 \frac{dC}{dt} &= \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right) \\ C(r = R, t) &= K \\ \partial_r C|_{r=S} &= 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Le système (2.14) satisfait les propriétés suivantes :

- (i) Il existe un état stationnaire associé au système : $C(r, t) = K$.
- (ii) Si $C(r, 0) \in [a, b]$, alors $C(r, t) \in [a, b]$, $\forall t > 0$
- (iii) Si $\partial_r C(r, 0) \geq 0$ (resp. ≤ 0), alors $\partial_r C(r, t) \geq 0$ (resp. ≤ 0) $\forall t > 0$.
- (iv) Si $\partial_r C(r, 0) > 0$ et $\partial_t C(r, 0) < 0 \forall r \in]R, S[$, alors $(r^2 \partial_r C)(R, t)$ est décroissant en tout temps $t > 0$.

Démonstration

- (i) $C(r, t) = K$ vérifie les conditions de bords et est solution du système (2.14).
- (ii) Soit $t \geq 0$. Soit $r_1 \in]R, S[$ tel que $C(r_1, t)$ soit un maximum local, on a alors $\partial_r C(r_1, t) = 0$ et $\partial_{r^2} C(r_1, t) \leq 0$, d'où :

$$r_1^2 \Theta_D d_t C(r_1, t) = r_1^2 D \partial_{r^2} C(r_1, t) + 2r_1 D \partial_r C(r_1, t) \leq 0$$

On a donc que C est décroissant en temps en ses maxima locaux. De la même façon, on peut montrer que C est croissant en ses minima locaux.

Si $C(S, t) = a$ ou b , comme $\partial_r C|_{r=S} = 0$, on peut utiliser le raisonnement précédent. Enfin si $C(R, t) = a$ ou b , comme c'est une condition de Dirichlet, $C(R, t)$ ne bougera pas.

Enfin, on a bien que, pour tout temps, les maxima ne peuvent pas augmenter et les minima ne peuvent pas diminuer, donc si $C(r, 0) \in [a, b]$, on a $C(r, t) \in [a, b]$ en tout temps t .

- (iii) Comme on l'a vu dans la démonstration du point (ii), les extrema locaux ne peuvent pas exister. Il en suit donc que si aucun extremum local n'était présent au temps initial, c'est à dire $\partial_r C(r, 0)$ de signe constant, nous conservons ce signe au cours du temps.
- (iv) Soit un point r_1 et un temps t_1 , tel que $r_1^2 d_t C(r_1, t_1) = 0$, $r_1^2 d_t C(r, t_1) < 0$ pour tout $r \neq r_1$, et C n'est pas dans son état stationnaire, $C(r, t) \neq K$. En d'autre terme $r_1^2 \partial_{r^2} C(r_1, t_1) + 2r_1 \partial_r C(r_1, t_1) = 0$ et $\partial_r C \geq 0$ pour $r \in]R, S[$. Or dans le voisinage de r_1 , la concentration est décroissante en temps, ce qui implique que la concavité s'accroît ($\partial_{r^2} C < 0$ décroissant). Ceci signifie que $r^2 d_t C < 0$ en r_1 dans un voisinage de t_1 . Finalement $r^2 d_t C < 0$ est décroissant pour tout temps $t > 0$ et $\Theta_D r^2 d_t C = \partial_r (D r^2 \partial_r C)$, d'où le résultat annoncé.

□

On pose

$$F(t) = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} (r^2 D \partial_r C)_{r=R}.$$

La variable F représente le flux de gaz diffusant entre la bulle et le magma.

Lemme 2.3.2 .

Soit t tel que $\partial_r C \geq 0$, $\forall r \in [R, S]$, alors les propriétés suivantes sont vérifiées :

- a) $\dot{R} = 0 \Rightarrow \dot{P} \leq 0$.
- b) $\dot{P} \leq 0 \Rightarrow \dot{R} \geq 0$.
- c) $\dot{R} \geq 0 \Rightarrow F \geq 0$.
- d) $\dot{P} \leq 0 \Leftrightarrow F \leq 3PR^2\dot{R}$.

Démonstration

Rappelons que $\dot{M} = F$ (voir (2.4)).

- a) Si $\dot{R} = 0$, alors, d'après (2.3), $P = P_a + \Sigma/R$, et puisque $P_a(t) = 1 - t$, on obtient $\dot{P} = -1 \leq 0$.
- b) Si $\dot{P} \leq 0$, comme $\partial_r C > 0$, alors la diffusion ne change pas de régime ($\partial_r C \geq 0$, voir lemme 2.3.1), on a donc par définition $F \geq 0$. Ce qui implique $\dot{M} \geq 0$ et donc $3\dot{R}/R \geq -\dot{P}/P \geq 0$, d'où $\dot{R} \geq 0$.
- c) Si $\dot{R} \geq 0$, alors, d'après (2.4), $P \geq P_a + \Sigma/R$, on a donc $F = \dot{M} \geq \dot{P}R^3$.
Si $F < 0$, alors $\dot{P}R^3 \leq F < 0$, d'où $\dot{P} < 0$. Or si $\dot{P} < 0$, on a vu dans la démonstration de b) que $F > 0$, ce qui est contradictoire. Le flux F est donc positif.
- d) Les points b) et c) nous disent que si $\dot{P} \leq 0$ alors $F \geq 0$.
On a $\dot{P}R^3 = F - 3P\dot{R}R^2$ et $R > 0$.
Si $\dot{P} \leq 0$, alors $F - 3P\dot{R}R^2 \leq 0$ d'où $0 \leq F \leq 3P\dot{R}R^2$.
Enfin, si $F \leq 3P\dot{R}R^2$ alors $\dot{P} \leq 0$.

□

On montre maintenant que si la solution du système évolue dans un certain sens à un instant donné t_0 , alors la solution évoluera dans ce sens pour tout temps $t > t_0$:

Lemme 2.3.3 .

Soit un temps $t_1 > 0$, tel que

$$\dot{R}(t_1) > 0, \dot{P}(t_1) < 0, \dot{M}(t_1) > 0 \text{ et } \partial_r C(r, t_1) > 0 \text{ pour tout } r \in [R, S],$$

alors pour tout temps $t > t_1$, on a

$$\dot{R}(t) > 0, \dot{P}(t) < 0, \dot{M}(t) > 0 \text{ et } \partial_r C(r, t) > 0 \text{ pour tout } r \in [R, S].$$

Démonstration

Supposons qu'il existe un temps $T > t_1$, tel que l'un de ces états change.

- Comme $\partial_r C(r, t_1) > 0$ alors (lemme 2.3.1.(iv)) $\partial_r C(r, t)$ ne change pas de signe $\forall t > t_1$.
- Supposons que $\dot{M}(T) = 0$, on a alors que $\partial_r C(R, T) = 0$. Or le lemme 2.3.1 nous indique que la seule configuration possible serait $C(r, T) = C(R, T) = C_H\sqrt{P}(T)$. Or P est décroissante, le flux ne peut donc pas être nul.
- Supposons alors $\dot{R}(T) = 0$, on a alors, par le lemme 2.3.2, $\dot{P}(T) < 0$, d'où $\dot{M}(T) < 0$. Or on a supposé que $\dot{R}$ était le premier à changer d'état, donc $\dot{M} > 0$.
- Enfin supposons $\dot{P}(T) = 0$. On a donc, par (2.3), que $P - P_a > \Sigma/R > 0$ et on a :

$$\ddot{R} = \frac{\dot{R}}{\Theta_V} (P - P_a) + \frac{R}{\Theta_V} (\dot{P} + 1),$$

ce qui implique que $\ddot{R}(T) > 0$. D'où $\dot{R}$ croissant au voisinage de T . Or $\dot{M}(T) = 3P(T)R^2(T)\dot{R}(T)$, $\dot{M}$ est donc également croissant au voisinage de T , ce qui signifie que le flux est également croissant.

Comme $\partial_r C > 0$, et que $d_t C < 0$ car $\dot{M} > 0$, on peut appliquer le lemme 2.3.1 (iv) au voisinage de T , et on obtient que le flux est décroissant, ce qui est contradictoire avec $\dot{M}(T)$ croissant. La pression ne peut donc pas croître.

Ce qui montre le résultat annoncé.

□

2.4 Estimations sur la pression P et le rayon R

Maintenant que l'on connaît quelques résultats sur les différentes variables, on peut étudier la position du couple solution, $(P(t), R(t))$, par rapport aux courbes P_1 et P_2 .

Théorème 2.4.1 *Estimation de la pression*

Soit $C(r, t)$ la solution de l'équation de diffusion (2.5). Sous certaines hypothèses, la solution restera entre P_1 et P_2 . Plus précisément :

(i) Si $C(r, t) \in [C_H \sqrt{P(t)}, C_H \sqrt{P(0)}]$ pour tout temps $t \in [a, b]$, alors

$$P_2(R(t)) \leq P(t) \leq P_1(R(t)), \quad \forall t \in [a, b]$$

(ii) Si $C(r, t) \in [C_H \sqrt{P(0)}, C_H \sqrt{P(t)}]$ pour tout temps $t \in [a, b]$, alors

$$P_1(R(t)) \leq P(t) \leq P_2(R(t)), \quad \forall t \in [a, b]$$

Démonstration

Il est plus simple de raisonner en masse pour cette démonstration, posons $M_1(R) = P_1(R)R^3$ et $M_2(R) = P_2(R)R^3$. Il est clair que montrer que $M = PR^3$ reste entre M_1 et M_2 revient à montrer que P reste entre P_1 et P_2 .

On ne fait la démonstration que pour (i), les calculs pour (ii) étant les mêmes avec les inégalités inversées.

Si $C(r, t) \in [C_H \sqrt{P(t)}, C_H \sqrt{P(0)}]$, alors

$$3\rho_m \int_R^S r^2 C(r, t) dr \in [YC_H \sqrt{P(t)}, YC_H \sqrt{P(0)}]$$

avec $Y = \rho_m S_0^3$.

En utilisant (1.13bis), on obtient alors :

$$M \in [YC_0 - YC_H \sqrt{P(0)}, YC_0 - YC_H \sqrt{P(t)}]$$

Rappelons que $YC_0 = YC_H \sqrt{P(0)} + P(0)$ et que $M_2(R) = P(0)$, on a alors, d'une part :

$$M(t) \geq YC_0 - YC_H \sqrt{P(0)} = P(0) = M_2(R(t))$$

et d'autre part, on a :

$$M(t) \leq YC_0 - YC_H \sqrt{\frac{M(t)}{R^3(t)}} \quad (2.15)$$

En considérant que M_1 est solution de $M_1 + YC_H \sqrt{M_1/R^3} - YC_0 = 0$, si $M = M_1$, on a égalité dans (2.15), si $M > M_1$, l'inégalité n'est pas vérifiée, et si $M < M_1$, on retrouve l'inégalité. On a donc pour tout temps t :

$$M(t) \leq M_1(R(t)).$$

Finalement, en divisant par R^3 , on retrouve $P_2 \leq P \leq P_1$. □

Remarque 2.4.2

Ce théorème reste vrai si au lieu de $C(r, t)$, nous considérons le même encadrement pour la concentration moyenne : $\bar{C}(t)$, définie par (2.12).

Nous montrons maintenant que la solution et les courbes limites sont inférieures à la courbe d'équation $P = YC_0/R^3$.

Lemme 2.4.3 .

Pour tout temps, on a :

- a) $P(t) < \frac{YC_0}{R^3(t)}$
- b) $P_1(R(t)) < \frac{YC_0}{R^3(t)}$
- c) $P_2(R(t)) < \frac{YC_0}{R^3(t)}$

Démonstration

- a) Remarquons que C est positif et que M est borné. En effet, $C(r, 0) \geq 0$ et au cour du temps, l'équation de diffusion sur C , avec la condition de bord $C(R, t) = C_H \sqrt{P(t)} \geq 0$, ne peut amplifier ses minima ou maxima (lemme 2.3.1). La concentration C ne peut donc jamais être négative, c'est-à-dire que la diffusion ne peut créer que des valeurs comprise dans l'intervalle $\left[\min_r(C(r, t)), \max_r(C(r, t)) \right]$.

Comme $C \geq 0$ et $M + Y\bar{C} = YC_0$ (2.4bis), alors $M \leq YC_0 = YC_i + 1 + \Sigma$.

Finalement $P = M/R^3 \leq YC_0/R^3$.

- b) Pour montrer que $P_1(R(t)) < YC_0/R^3(t)$, il est plus simple de travailler sur la masse. Dans ce cas, on a M_1 strictement croissante avec $\lim_{R \rightarrow \infty} M_1(R) = YC_0$ (lemme 2.2.2).

On a donc $M_1(R(t)) < YC_0$, en divisant par $R^3(t)$, on retrouve le résultat annoncé.

- c) Grâce à (2.11), on obtient $M_2 = Y(C_0 - C_i)$. Or $C_0 > C_i > 0$, d'où le résultat. $\square$

Lemme 2.4.4 .

Si $P(t) \leq (C_i/C_H)^2 = P^*$ pour tout temps t , où P^* est la pression en le point d'intersection des courbes P_1 et P_2 , alors

$$P(t) \geq P_2(R(t)) \quad \forall t$$

Démonstration

Si $P(t) \leq (C_i/C_H)^2$ pour tout temps t , alors en utilisant le lemme 2.3.1 (ii), on a $\bar{C} \leq C_H \sqrt{\max_t(P(t))}$, donc $\bar{C}(t) \leq C_i$. Finalement, d'après (2.4bis), on a $M(t) + Y\bar{C}(t) = M(0) + Y\bar{C}(0) = 1 + \Sigma + YC_i$, on a bien $M(t) \geq P(0)$. D'où $P(t) \geq P(0)/R^3(t) = P_2(R(t))$. $\square$

Remarque 2.4.5 .

Si $\dot{R} > 0$ et $P(t) < P_1(R(t))$ pour tout temps dans les cas bien préparé ($C_i = C_H \sqrt{P(0)}$) et sursaturé ($C_i > C_H \sqrt{P(0)}$), alors on a la borne inférieure $P(t) > P_2(R(t))$. En effet, dans ces deux cas, on a $P_1(1) \leq P^*$, où P^* est la pression en le point d'intersection des courbes P_1 et P_2 .

Lemme 2.4.6 .

Si $R(t)$ est positif en tout temps, alors pour tout temps t , $P(t)$ est positif.

Démonstration

On suppose $R > 0$. Soit $0 < \epsilon < \Sigma/R(t)$, supposons qu'il existe un temps t_1 , tel que $P(t_1) = \epsilon$ et $\dot{P}(t_1) < 0$, alors on a $\dot{R}(t_1) < 0$, et $\dot{M} < 0$. La concentration moyenne $\bar{C}$ est donc croissante en t_1 . Le lemme 2.3.1 nous dit qu'aucun extremum ne peut être créé dans la solution de l'équation de diffusion avec terme de Dirichlet indépendant du temps. Ici le

terme de Dirichlet décroît en temps, puisque la pression P est décroissante, et crée donc un minimum sur le bord, donc $\bar{C}$ ne peut pas être croissant au voisinage de 0. La pression P ne peut donc pas être décroissante lorsqu'elle est proche de zéro. $\square$

Lemme 2.4.7 .

Soit un temps $t_1 > 0$, tel que $\dot{R}(t_1) > 0$, $\dot{P}(t_1) < 0$, $\dot{M}(t_1) > 0$, $\partial_r C(r, t_1) > 0$ pour tout $r \in [R, S]$, $P(t_1) \leq (C_i/C_H)^2$ et $\bar{C}(t_1) \in [C_H \sqrt{P(t_1)}, C_i]$. Alors

$$P_2(R(t)) < P(t) < P_1(R(t)) \text{ pour tout temps } t > t_1$$

Démonstration

Le lemme 2.3.3 nous dit que $\dot{R}(t) > 0$, $\dot{P}(t) < 0$, $\dot{M}(t) > 0$, $\partial_r C(r, t) > 0$ pour tout $r \in [R, S]$ pour tout temps $t > t_1$.

Le lemme 2.3.1 nous dit que l'équation de diffusion ne peut pas amplifier les maxima de la concentration et que la concentration C est décroissante au cours du temps. On a donc que $\bar{C}(t) < C_i$ pour tout temps $t > t_1$, ce qui signifie, d'après (2.4bis), que $M(t) = M_1(R(t)) + YC_i - Y\bar{C}(t) < M_1(R(t))$, donc que $P(t) < P_1(R(t))$ pour tout temps $t > t_1$. Comme $P(t) < P_1(R(t))$ en tout temps, alors (lemme 2.4.4) $P(t) > P_2(R(t))$ pour tout temps $t > t_1$. $\square$

2.5 Démonstration du théorème 2.1.1

Rappelons l'énoncé :

Si les données sont bien préparées, $C(r, 0) = C_H \sqrt{P(0)}$, $P(0) = 1 + \Sigma$ et $R(0) = 1$, alors le couple solution (P, R) restera entre les courbes de P_1 et P_2 :

$$P_2(R(t)) \leq P(t) \leq P_1(R(t))$$

Démonstration

Dans un premier temps, montrons que pour ϵ proche de zéro, on a $(P(\epsilon), R(\epsilon))$ compris entre P_1 et P_2 . Il suffit de montrer que $\dot{R} > 0$ et que $\dot{P} < 0$ et appliquer le lemme 2.4.7.

Rappelons que nous considérons une décompression linéaire : $P_a(\epsilon) = 1 - \epsilon$. Rappelons également l'équation sur la variation du rayon :

$$\dot{R}(\epsilon) = \frac{R(\epsilon)}{\Theta_V} (P(\epsilon) - P_a(\epsilon)) - \frac{\Sigma}{\Theta_V} . \quad (2.16)$$

Raisonnons par l'absurde :

– Supposons $\dot{P}(\epsilon) = 0$.

Comme $\dot{P}(\epsilon) = 0$, alors $P(\epsilon) = P(0) = 1 + \Sigma$. En développant $R(0)$ en ϵ et en remplaçant $\dot{R}(\epsilon)$ par

$$\frac{\epsilon}{2} \ddot{R}(\epsilon) + \frac{R(\epsilon) - R(0)}{\epsilon} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

dans (2.16), on obtient :

$$R(\epsilon) - R(0) + \frac{\epsilon^2}{2} \ddot{R}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^3) = \frac{R(\epsilon)}{\Theta_V} (\epsilon^2 + \epsilon \Sigma) - \epsilon \frac{\Sigma}{\Theta_V} .$$

En regroupant, on obtient que $\ddot{R}(\epsilon) > 0$. On a donc que $\dot{R}$ est croissante au voisinage de $t = 0$, d'où $\dot{R} > 0$.

Si $\dot{R} > 0$ et $\dot{P} = 0$, on a alors $\dot{M} > 0$. Ce qui implique que la concentration moyenne $\bar{C}$ a diminué, or $\dot{P} = 0$ implique que la concentration ne peut pas varier, $\dot{P}$ ne peut donc pas être nul au voisinage de 0.

– Supposons $\dot{P}(\epsilon) > 0$.

Comme $\dot{P} > 0$, on remplace P par un développement limité en ϵ , $P(\epsilon) = P(0) + \epsilon\dot{P}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$, et on remplace $\dot{R}(\epsilon)$ par

$$\frac{\epsilon}{2}\ddot{R}(\epsilon) + \frac{R(\epsilon) - R(0)}{\epsilon} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

dans (2.16), et on obtient :

$$R(\epsilon) - R(0) + \frac{\epsilon^2}{2}\ddot{R}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^3) = \frac{R(\epsilon)}{\Theta_V} \left(\epsilon^2(1 + \dot{P}(\epsilon)) + \epsilon\Sigma \right) - \epsilon \frac{\Sigma}{\Theta_V}$$

soit en regroupant, on obtient que $\ddot{R}(\epsilon) > 0$, donc que $\dot{R}$ est croissante au voisinage de $t = 0$, d'où $\dot{R} > 0$.

Si $\dot{R} > 0$ et $\dot{P} > 0$, on a alors $\dot{M} > 0$, ce qui implique que la concentration moyenne $\bar{C}$ a diminué, or la concentration au voisinage de $t = 0$ évolue de la même manière que P . Ceci signifie, dans notre cas, que la concentration moyenne $\bar{C}$ est croissante, ce qui contredit le fait qu'elle diminue, $\dot{P}$ ne peut donc pas être positif au voisinage de 0.

La solution P est donc strictement décroissante au voisinage de $t = 0$, donc $\dot{C} \leq 0$ (évolue comme P), d'où $\dot{M} \geq 0$ et donc $\dot{R} > 0$. On est dans le cadre du lemme 2.4.7, on a donc que le couple solution (P, R) vérifie bien

$$P_2(R(t)) < P(t) < P_1(R(t)).$$

□

2.6 Résultats sur les cas sur/sous-saturé

Dans le cas sursaturé, le lemme 2.2.4 signifie que le rayon en l'unique point d'intersection de P_1 et P_2 est inférieur à 1 (voir Fig.2.3). On commence donc dans la zone délimitée par P_1 pour la limite supérieure et P_2 pour la limite inférieure. Dans les deux cas, le rayon et la pression peuvent faire un saut à l'instant initial (c.f. section 1.5.2). L'évolution de la solution dans l'espace des phases est donc moins facile à étudier, nous nous contenterons de constater sur plusieurs exemples le comportement des solutions.

La Fig.2.3 montre le comportement de la pression P de différentes simulations en fonction du rayon R et leurs positions aux courbes P_1 et P_2 . Comme on le voit sur la figure 2.3, dans le cas sursaturé ($C(r, t = 0) > C_H\sqrt{P(0)}$), la pression P peut être croissante au début, et il semble qu'ensuite elle évolue entre P_1 et P_2 .

Dans le cas sous-saturé, le lemme 2.2.4 signifie que le rayon en l'unique point d'intersection de P_1 et P_2 est supérieur à 1 (voir Fig.2.4). On commence donc hors de la zone délimitée par P_1 pour la limite supérieure et P_2 pour la limite inférieure.

La Fig.2.4 montre le comportement de la pression P pour différentes simulations en fonction du rayon R ainsi que leurs positions par rapport aux courbes P_1 et P_2 . Comme on peut le voir sur la figure 2.4, dans le cas sous-saturé, il peut ne pas y avoir de solution, par exemple si $\Theta_D = \Theta_V = 0$ et C_i tel que $(YC_i + P(0))^2 < P(0)Y^2C_H^2$, ou il peut y avoir des solutions qui vont atteindre la zone délimitée par P_1 et P_2 et qui vont y rester.

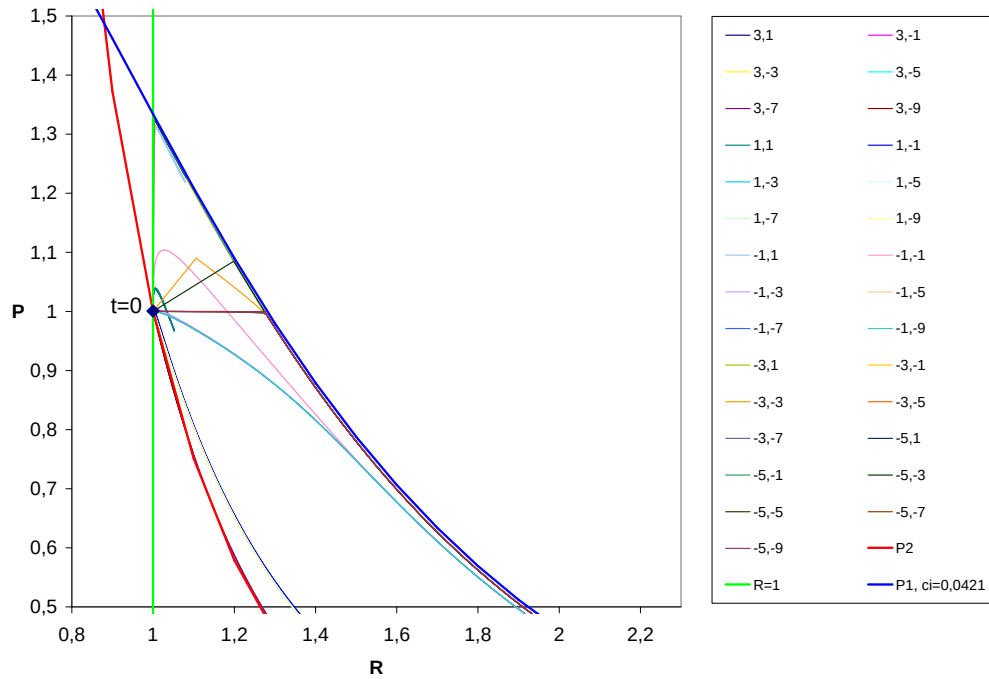


FIGURE 2.3 – Cas sursaturé. Comportement des solutions dans l'espace des phases (R, P) ; la légende des courbes est $\log(\Theta_D), \log(\Theta_V)$, les courbes en épais sont des cas limites

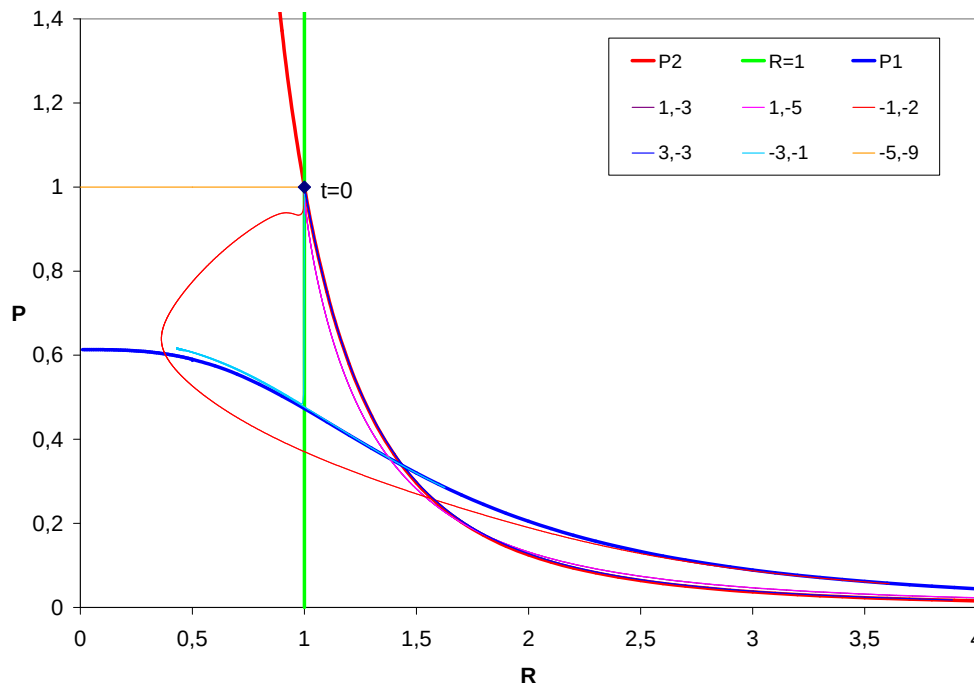


FIGURE 2.4 – Cas sous-saturé. Comportement des solutions dans l'espace des phases (R, P) ; la légende des courbes est $\log(\Theta_D), \log(\Theta_V)$, les courbes en épais sont des cas limites

2.7 Existence d'un rayon maximum

Dans cette section, on montre que pour tout temps, il existe un rayon maximum (Th.2.1.2).

Dans un premier temps, remarquons que si $\dot{R} \geq 0$, alors $P \geq P_a + \Sigma/R$, nous définissons donc la courbe suivante

$$P_{3,t}(R) = P_a(t) + \frac{\Sigma}{R},$$

or, comme nous l'avons démontré, la fonction $P(R)$ est comprise entre P_2 et P_1 , on a donc les résultats suivants :

Proposition 2.7.1

i) Il existe un unique point d'intersection entre les courbes $P_{3,1}$ et P_2 en

$$R = \sqrt{1 + \frac{1}{\Sigma}}$$

ii) $P_{3,1}(R) > P_1(R)$ pour R assez grand.

iii) Il existe un unique point d'intersection entre les courbes $P_{3,t}(R)$ et $R \mapsto YC_0/R^3$.

Démonstration

i) On cherche R tel que $P_{3,1}(R) = P_2(R)$. On obtient la relation suivante :

$$\frac{P(0)}{R^3} = P_2(R) = P_{3,1}(R) = \frac{\Sigma}{R}.$$

En utilisant $P(0) = 1 + \Sigma$, on obtient $R^2 = \frac{1 + \Sigma}{\Sigma}$.

ii) Montrons que $P_1 - P_{3,1} < 0$ pour tout R assez grand.

$$P_1 - P_{3,1} = \frac{Y^2 C_H^2 - Y C_H \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4R^3 Y C_0}}{2R^6} + \frac{Y C_0 - \Sigma R^2}{R^3}.$$

$$\text{Comme } \frac{Y^2 C_H^2 - Y C_H \sqrt{Y^2 C_H^2 + 4R^3 Y C_0}}{2R^6} < 0,$$

on a $P_1(R) < P_{3,1}(R)$, $\forall R \geq \sqrt{Y C_0 / \Sigma}$. De plus, on a en développant $Y C_0$ par (2.11),

$$\sqrt{\frac{Y C_0}{\Sigma}} = \sqrt{1 + \frac{1 + Y C_i}{\Sigma}} > 1.$$

iii) Cherchons les zéros de $P_{3,t}(R) - \frac{Y C_0}{R^3}$, autrement dit les points d'intersections des courbes $P_{3,t}(R)$ et $Y C_0/R^3$.

Remarquons que $P_{3,t}(R) < Y C_0/R^3$ pour tout $R \in [0, 1]$. En effet, si $R \in [0, 1]$, on peut écrire :

$$R^3 P_{3,t}(R) - Y C_0 = (R^3 - 1) + \Sigma(R^2 - 1) - Y C_i - t R^3 < 0.$$

On cherche donc R tel que $P_a(t)R^3 + \Sigma R^2 = Y C_0$. Puisque $R^3 P_{3,t}(R)$ est une fonction continue strictement croissante pour $R > 1$, que en $R = 1$, $R^3 P_{3,t}(R) - Y C_0 < 0$ et que $\lim_{R \rightarrow \infty} R^3 P_{3,t}(R) - Y C_0 = +\infty$, il existe, pour tout temps, un unique point d'intersection entre les courbes définies par les fonctions $P_{3,t}(R)$ et $R \mapsto Y C_0/R^3$.

□

La démonstration du théorème 2.1.2 est la suivante :

Démonstration du Théorème 2.1.2

Rappelons que si le rayon est croissant en un instant t , alors, d'après (2.3), $P(t) > P_{3,t}(R(t))$.

Rappelons également que le lemme 2.4.3 implique que $P(t)R^3(t) < YC_0$.

Or la proposition 2.7.1 nous dit que les fonctions $P_{3,t}(R)$ et YC_0/R^3 possèdent un unique point d'intersection, que l'on appellera ici R_t^* , et que pour tout $R > R_t^*$, $P_{3,t}(R) > YC_0/R^3$, en tout temps. Le rayon ne peut donc pas dépasser R_t^* .

Si le rayon est décroissant, le rayon ne peut pas non plus dépasser R_t^* . □

Corollaire 2.7.2

Si les données sont bien préparées, alors pour tout R^* , tel que $P_1(R^*) < P_a(t)$, on a $R(t) < R^*$, avec $R(t)$, solution du système (2.3), (2.4).

Démonstration

Si $\dot{R} \geq 0$, alors $P \geq P_a + \Sigma/R$. Or $P(t) \leq P_1(R(t))$ (Th. 2.4.1) et si $P_1(R^*) < P_a(t)$, on obtient $P_1(R^*) < P_a(t) \leq P(t) \leq P_1(R(t))$. Enfin, comme P_1 est décroissante (Lemme 2.2.1 (iii)), alors $R(t) < R^*$. □

2.8 Approximation du flux

Dans notre recherche d'une résolution rapide, un problème majeur est la résolution de l'équation de diffusion pour obtenir un flux et la CFL associée. C'est pourquoi nous cherchons l'expression d'un flux approché qui remplacerait la résolution de l'équation de diffusion. Ceci nous permettra également de considérer un modèle cinétique au chapitre 4 basé sur ce modèle.

Nous avons vu que, si la solution existe, lorsque $\Theta_D \rightarrow 0$, alors le couple solution (R, P) appartient à la courbe définie par P_1 et quand $\Theta_D \rightarrow \infty$ alors le couple solution (R, P) appartient à la courbe définie par P_2 . De la même manière, quand $\Theta_V \rightarrow 0$, le couple solution (R, P) appartient à la courbe définie par $P_{3,t}$ et quand $\Theta_V \rightarrow \infty$, le couple solution (R, P) appartient à la courbe définie par l'équation $R = 1$, or (2.3) peut s'écrire

$$\dot{R} = \frac{R}{\Theta_V}(P - P_{3,t}(R)) ,$$

ce qui implique que $P_{3,t}(R)$ est une solution d'équilibre.

Par analogie, on souhaite que M_1 soit attracteur et que les cas limites soient M_1 lorsque $\Theta_D \rightarrow 0$ et $M_2 = P(0)$ lorsque $\Theta_D \rightarrow \infty$.

On pose l'approximation sur la masse plutôt que sur la pression, car lorsque $\Theta_D \rightarrow \infty$, c'est la masse qui devient constante et le cas limite M_2 vérifie également $d_t M_2 = 0$. Pour que le cas limite M_1 soit attracteur, il faut que la masse M vérifie : si $M > M_1$ alors $d_t M < 0$ et si $M < M_1$ alors $d_t M > 0$. Soit A une constante positive, on pose alors l'approximation suivante pour le bilan de masse :

$$\dot{M} = \frac{A}{\Theta_D}(M_1(R) - M) \quad (2.17)$$

Une telle approximation converge donc vers les cas limites définis par M_1 et M_2 .

Remarque 2.8.1

Afin que le flux soit consistant en dimensionnel, il faut que le coefficient A vérifie

$$[A] \equiv \frac{[D]}{[R]^2} = \frac{1}{s} .$$

On reviendra sur la détermination de A et l'étude numérique de la précision de cette approximation au chapitre 6.

2.9 Conclusion

L'étude numérique du chapitre 1 laissait penser que la solution restait entre les deux courbes de cas limites en Θ_D . Après avoir défini trois façons distinctes d'initialiser la concentration : bien préparé, sursaturé et sous-saturé, nous avons étudié les courbes limites du système d'équation (2.3-2.7). L'unique point d'intersection de ces deux courbes et une étude sur l'équation d'advection-diffusion nous a permis d'annoncer un premier encadrement de la solution sous certaines hypothèses sur la concentration.

Nous avons ensuite montré que la solution du problème et les deux courbes limites était borné, d'où nous avons déduit que le rayon solution admet une limite supérieure en tout temps pour toutes données initiales.

Tout ceci nous a finalement conduit à montrer que, dans le cas bien préparé, la solution du problème est borné par les deux courbes limites.

Des considérations numériques nous laisse penser que le cas sursaturé se comporte de la même manière que le cas bien préparé, alors que le comportement des solutions du cas sous-saturé dépend de la valeur des deux paramètres d'adimensionnement Θ_V et Θ_D .

Enfin, de tout ceci, nous définissons un flux asymptotique, qui nous permet de nous affranchir de l'équation de diffusion et de passer plus tard à un modèle cinétique. Ce flux est défini à partir des courbes limites vers lesquelles il doit converger. Il sera validé numériquement au chapitre 6.

Chapitre 3

Validation du système monodisperse

Nous avons, au chapitre 1, vérifié l'implémentation de la résolution numérique du modèle monodisperse de croissance de bulles dans les magmas visqueux. Le chapitre 3 se concentre sur la validation de ce modèle. La procédure de validation que nous avons respectée consiste à comparer les résultats de sortie de notre modèle et d'autres données indépendantes de type expérimentales et numériques. Ce type de comparaison ne peut se faire que si notre modèle monodisperse est le plus conforme possible à la réalité expérimentale d'une part et aux hypothèses et équations résolues par d'autres modèles d'autre part. Cette considération nous a amené à apporter une modification au modèle monodisperse présenté au chapitre 1. Pour ce chapitre, nous utilisons le programme monodisperse présenté en annexe A.

Nous présentons, dans un premier temps, la modification du modèle monodisperse et ses conséquences sur la résolution numérique du système d'équations modifié. S'ensuit une comparaison avec un modèle numérique existant et basé sur un système d'équations similaire. La validation du modèle se poursuit avec une explication généraliste du principe des expériences de décompression en laboratoire. Nous démontrons ensuite en détail la capacité du modèle à simuler une série expérimentale et présentons une comparaison générale avec les données des expériences produites durant les 30 dernières années. Le chapitre se clôt sur nos conclusions de cette étude de validation.

3.1 Modification du traitement de la viscosité du modèle monodisperse

Dans les chapitres 1 et 2, nous travaillions avec une viscosité effective du liquide constante. Comme on peut le voir figure 3.1, la viscosité du liquide varie de plusieurs ordres de grandeur. C'est pourquoi nous allons comparer (section 3.5) les résultats obtenus avec une viscosité constante et une viscosité variable sur un cas concret. Désormais, la viscosité effective du liquide est calculée de la manière suivante :

$$\eta_{eff} = \eta(R) - \alpha(t)\eta(S) + R^3 \int_R^S \frac{d\eta}{dr} \frac{1}{r^3} dr \quad (3.1)$$

La viscosité, η , sera variable et dépendra à la fois de la concentration en eau dans le magma, de sa température et du type de magma [HD96, GRPD04, WHB⁺09]. La façon de calculer la viscosité variable η est détaillée en section A.2.2. La variable η_{eff} est recalculée à chaque pas de temps.

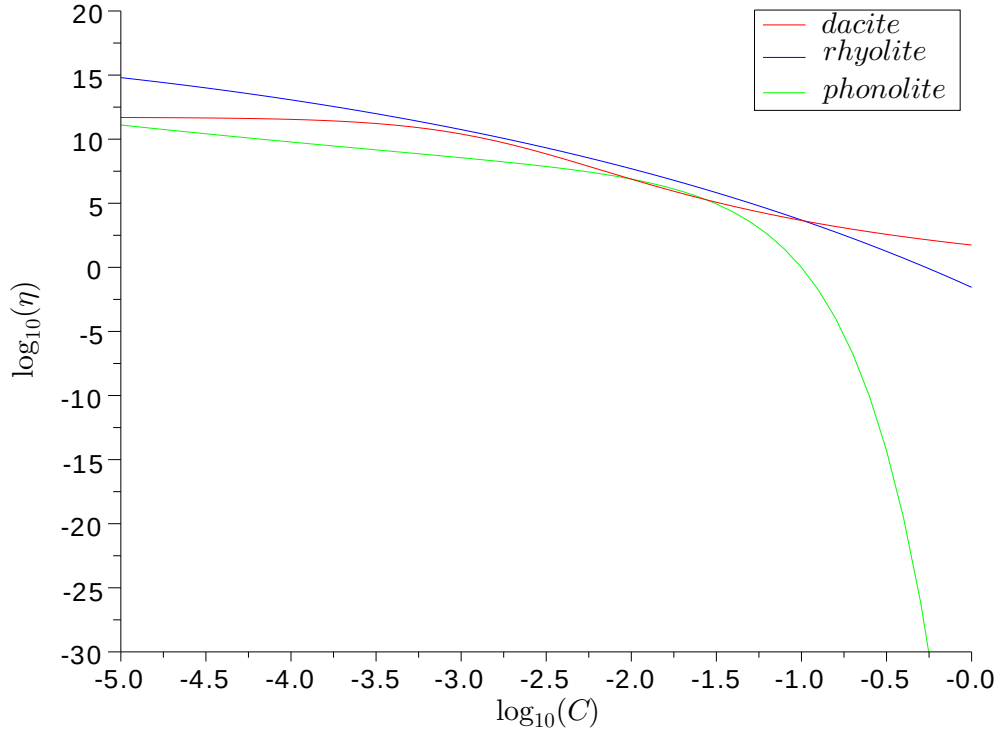


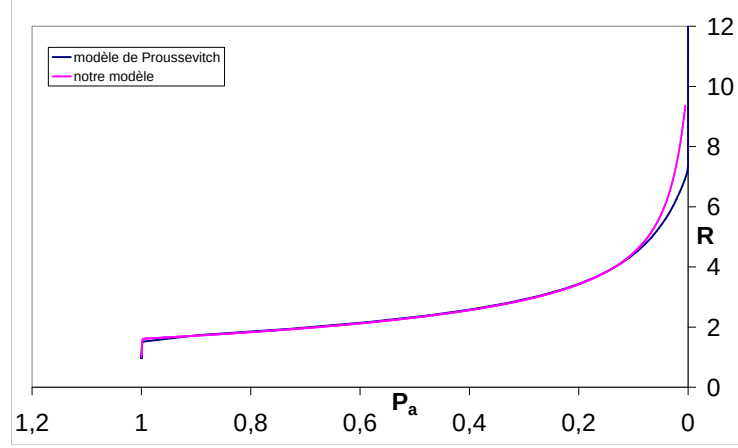
FIGURE 3.1 – Comparaison des différentes valeurs de la viscosité en fonction de la concentration en eau pour trois compositions chimiques de magma à une température de 1050 K

3.2 Comparaison avec un modèle existant

Nous comparons, dans cette section, le résultat fourni par notre modèle et celui d'un modèle existant (celui de [PS98]). Nous nous intéressons particulièrement au temps de calcul, à la précision du résultats et aux différences entre les résultats.

Les différences majeures entre les deux modèles sont : [PS98] discrétise un modèle plus complexe qui considère la température du gaz et la température du magma comme des variables, et fait intervenir la température de vitrification/cristallisation ; nous considérons le coefficient de diffusion constant, ce qui n'est pas le cas dans [PS98] et nous n'utilisons pas le même modèle pour les différentes viscosités ; les temps d'enregistrement des données de sortie sont sélectionnés par l'algorithme dans [PS98].

Comme les deux programmes ne prennent pas les mêmes données en entrée, nous avons choisi des données initiales similaires pour les deux programmes et tracé l'évolution du rayon au cours du temps (Fig.3.2) :

FIGURE 3.2 – Rayon R des bulles en fonction de la pression ambiante P_a .

La Fig.3.2 montre l'évolution du rayon adimensionnel en fonction de la pression ambiante adimensionnelle pour notre modèle et celui de [PS98]. Nous pouvons constater une différence entre les courbes, très légère pour une pression ambiante proche de 1 et plus visible pour une pression ambiante proche de 0. La légère différence pour une pression ambiante proche de 1 vient du fait que nous ne maîtrisons pas la discrétisation temporelle dans [PS98], il nous manque donc quelques points pour mieux voir le saut de pression effectué au voisinage du temps initial.

La différence pour les basses pressions (< 0.1) peut venir du calcul de la viscosité ou de la cristallisation/vitrification que nous ne traitons pas.

Nous nous sommes placé dans le cas le plus long à calculer pour notre schéma numérique ($\Theta_V = 7 \cdot 10^{-7}$, $\Theta_D = 7 \cdot 10^{-4}$).

De cette comparaison, on a pu constater que :

1. L'évolution de R en fonction de P_a est similaire pour les deux programmes.
2. La discrétisation de [PS98] est plus rapide.
Le fichier fortran de [PS98] a été compilé avec le compilateur GNU Fortran (Debian 4.4.5-8) 4.4.5 et notre fichier c++ a été compilé avec le compilateur g++ (Debian 4.4.5-8) 4.4.5. Pour que le code fortran fonctionne correctement, il ne faut pas oublier de passer l'option -O lors de la compilation.
Les temps suivants ont été obtenus sur une même machine avec la commande time sous linux :
nous mettons 902min27.416s avec le schéma général et 0min0.048s avec le schéma simplifié $\Theta_V, \Theta_D \rightarrow 0$, et celui de [PS98] prend 0min1.031s. Nous faisons remarquer que nous avons 1000 enregistrements et [PS98] a 100 enregistrements. Si nous demandons 100 enregistrements, nous obtenons un temps identique au précédent pour le schéma général et un temps de 0min0.009s pour le schéma simplifié $\Theta_V, \Theta_D \rightarrow 0$.
3. Notre discrétisation nous laisse le contrôle de la résolution temporelle qui peut être aussi précise que l'on veut. La gestion du temps et des temps d'enregistrement est obscure dans [PS98], les enregistrements se font régulièrement par rapport au rayon.
4. Notre modèle gère des taux de décompression linéaires (positifs et négatifs) ou instantanés. Le modèle de [PS98] ne gère que des décompressions instantanées suivies d'un temps de repos.

3.3 Principes des expériences de décompression

Nous expliquons ici la façon dont sont effectuées les expériences en laboratoire que nous considérerons dans cette section. Pour commencer, une roche magmatique naturelle ou une synthèse de composés chimiques présents dans les roches magmatiques est choisie. La roche peut être réduite en poudre ou carottée en petits blocs. Les échantillons sont initialement secs. Comme il n'y a pas d'eau dissoute dans la roche, il faut en rajouter afin de pouvoir former des bulles. L'échantillon est placé en présence d'eau dans une capsule en métal qui ne réagit pas chimiquement avec la roche (or ou platine) (Fig.3.3). Cette capsule est ensuite placée dans un four et exposée à une forte température et une forte pression pendant un certain temps, souvent plusieurs jours. Ceci est appelé la phase d'hydratation et permet à la roche de se saturer en eau.

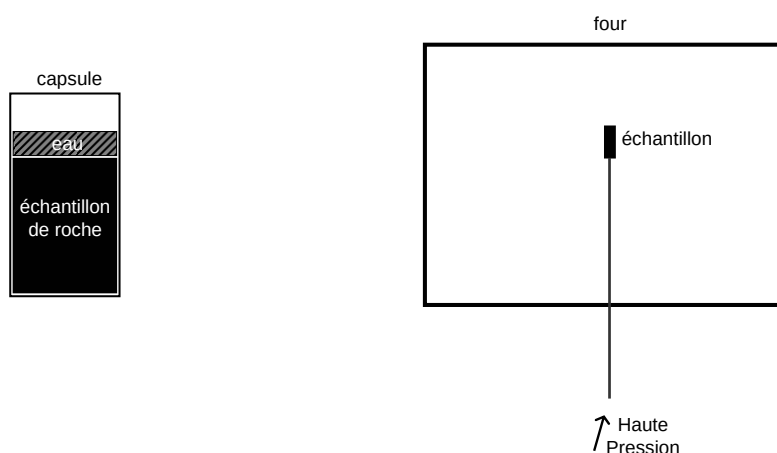


FIGURE 3.3 – Schéma du dispositif expérimental. Dans la capsule l'échantillon de roche est en contact avec de l'eau. Ensuite le tout (échantillon et capsule) est mis dans un four à haute température (fixée) et à haute pression (contrôlée par une arrivée extérieure)

La décompression comporte plusieurs étapes, résumées sur la Fig.3.4. Toutes ces étapes ne sont pas obligatoires. Un saut de pression important peut être effectué pour faire apparaître des bulles. Cette étape n'est pas toujours faite ; en effet les bulles peuvent également apparaître durant la phase de décompression, lorsque la roche atteint un seuil critique de saturation en eau. À la suite du saut de pression, une phase de repos peut être observée afin que les bulles présentes soient dans un équilibre thermodynamique. Vient ensuite la phase de décompression, où la roche est maintenue à haute température et soumise à une pression qui va décroître jusqu'à une pression finale choisie. Un temps de repos peut également être observé après la décompression. Enfin, au temps final, l'échantillon est refroidi très rapidement à pression fixe. Cette étape trempe l'échantillon, figeant les bulles. Le trempage se fait généralement en sortant l'échantillon du four par un mécanisme qui l'amène rapidement dans une zone froide. Les échantillons refroidis sont sortis de la capsule pour analyse. La taille des bulles et la porosité sont généralement mesurées, au microscope, sur des tranches 2D de la roche (Fig.3.5). La teneur en eau dissoute dans le magma refroidi peut être mesurée de plusieurs façons, comme par exemple en fusionnant la roche et quantifiant l'eau qui en sort.

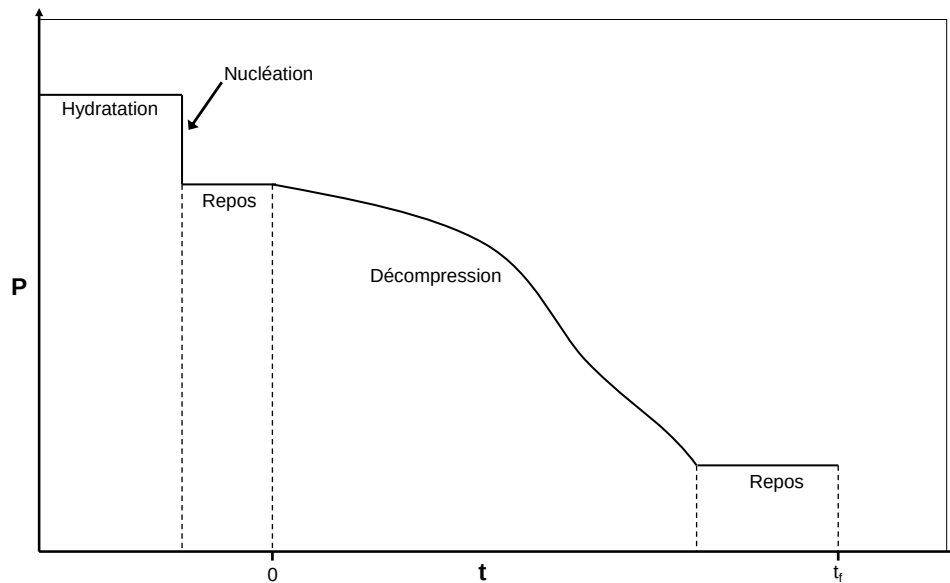


FIGURE 3.4 – Évolution de la pression ambiante au cours du temps. Les temps affichés en abscisse sont les temps considérés dans la décompression. La phase d'hydratation et de repos avant $t = 0$ peut durer plusieurs jours. Seules les phases d'hydratation et de décompression sont présentes dans toutes les expériences que l'on considèrera, la phase de repos finale est en générale absente.

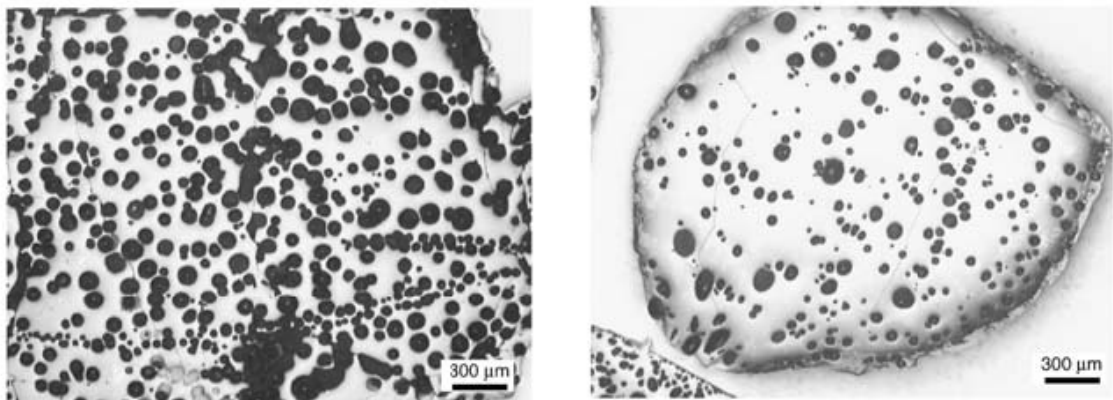


FIGURE 3.5 – Exemples de tranches d'échantillon pour les mesures 2D de taille de bulles et de porosité (photos extraites de [BG05])

Par ailleurs, en laboratoire, il est très difficile d'effectuer une décompression de manière linéaire, la décompression se fait plutôt par sauts de pression successifs. Nous regarderons donc dans la section suivante ce que produit une avancée par saut de pression à la place d'une décompression linéaire avec notre résolution numérique.

3.4 Mode de décompression

Jusqu'ici, nous avons modélisé la décompression comme étant linéaire. En réalité, les expériences faites en laboratoire effectuent des sauts de pression réguliers pour approcher une décompression linéaire. Nous avons donc regardé l'influence que cela pouvait avoir dans le cas suivant :

le rayon initial $R_i = 4.45904 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, la porosité initiale $\alpha_i = 4.1 \text{ vol } \%$, la diffusivité $D = 2 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, la concentration initiale $C_i = 0.0364$, un maillage de 50 points pour l'équation de diffusion, une pression initiale $P_i = 7 \cdot 10^7 \text{ Pa}$, une tension de surface $\sigma = 0.1 \text{ J m}^{-2}$, une viscosité variable pour un magma rhyolitique, une densité du magma $\rho_m = 2354 \text{ kg m}^{-3}$, une température $T = 725 \text{ }^\circ\text{C}$, un taux de décompression équivalent à $P_a = 250000 \text{ Pa s}^{-1}$, des sauts de pression toutes les 20s.

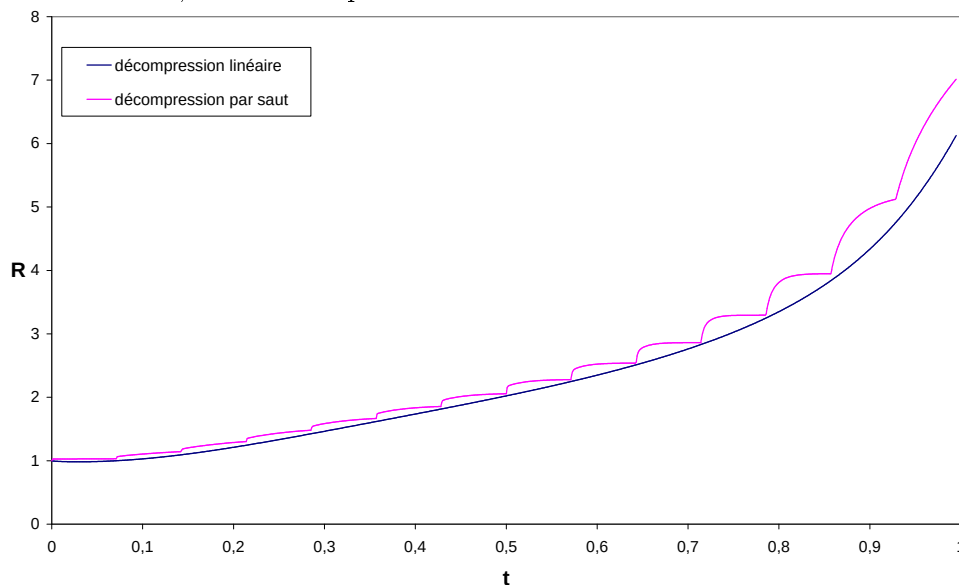


FIGURE 3.6 – Comparaison de l'évolution du rayon des bulles R entre une décompression linéaire et une décompression par sauts de pression successifs

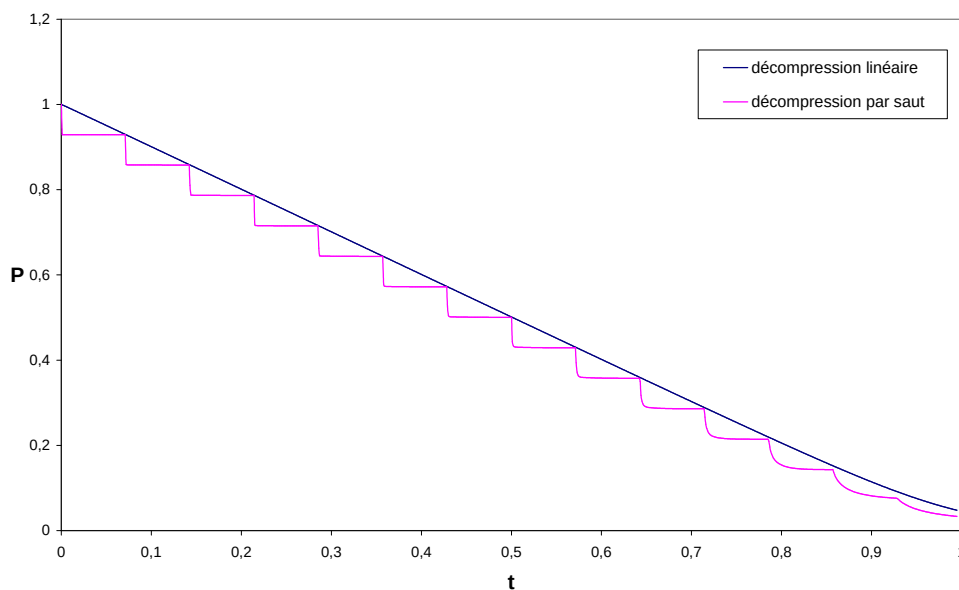


FIGURE 3.7 – Comparaison de l'évolution de la pression de la bulle P entre une décompression linéaire et une décompression par sauts de pression successifs

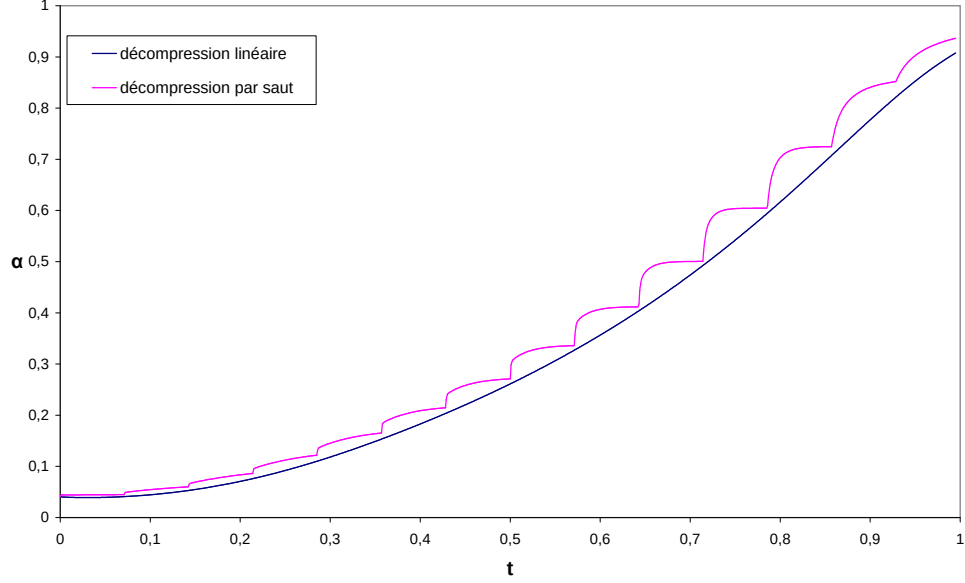


FIGURE 3.8 – Comparaison de l'évolution de la porosité α entre une décompression linéaire et une décompression par sauts de pression successifs

Les Fig.3.6, Fig.3.7 et Fig.3.8 montrent l'évolution du rayon adimensionnel, de la pression interne adimensionnelle et de la porosité en fonction du temps adimensionnel. La pression ambiante adimensionnelle pour une décompression linéaire s'écrit $P_a(t) = 1 - t$. Les points de comparaisons sont les points juste avant le saut de pression suivant.

L'exemple que nous avons pris a pour paramètres adimensionnels : $\Theta_V = 0.000265$ et $\Theta_D = 0.02956$, ce qui correspond à un cas hors-équilibre (Table 1.1). Les résultats entre décompression linéaire et décompression par saut de pression sont donc différents. Comme on peut le voir sur les Fig.3.6, Fig.3.7 et Fig.3.8, la différence entre les solutions pour la décompression linéaire et la décompression par sauts de pression successifs est faible, même s'il est mesurable que les rayons et porosités trouvés avec les sauts de pressions sont plus grands que ceux trouvés dans le cas d'une décompression linéaire. À titre d'exemple, nous fournissons les valeurs des pressions, porosités et rayons au moment des deux derniers sauts de pression dans la table 3.1. Ces écarts sont petits. On estime que l'écart entre les courbes serait plus grand si Θ_V , Θ_D étaient plus grands.

	linéaire	saut		linéaire	saut
rayon	3.8379	3.9489	rayon	4.75	5.12
pression	0.1522	0.1431	pression	0.0913	0.076
porosité	0.7073	0.7247	porosité	0.821	0.8517

TABLE 3.1 – Données au saut de pression à $P_a \sim 0.1429$ (gauche) et au saut de pression à $P_a \sim 0.0714$ (droite)

3.5 Comparaison détaillée avec une série expérimentale

Nous travaillons avec un jeu de données fourni par A. Burgisser & J.E.Gardner [BG05]. Les données viennent d'expériences faites en laboratoire sur des roches magmatiques naturelles appelées rhyolites. Pour les expériences de [BG05], des échantillons d'une même roche sont placés dans des petits tubes en présence d'eau, puis sont laissés au repos pendant 5 jours à haute pression (150 MPa) et haute température (825 °C), ceci afin de permettre

à la roche de se saturer en eau. Les échantillons sont ensuite décompressés à des taux de décompression fixes puis refroidis rapidement afin de préserver la taille des bulles à un instant donné pour l'analyse de l'échantillon.

Les tailles finales des bulles ont été mesurées au microscope sur des tranches 2D de l'échantillon. La densité de bulles par unité de magma varie entre chaque expérience et elle correspond au volume de la zone d'influence que notre modèle considère constante. Nous proposons donc de recalculer le rayon final.

Si nous posons N_T le nombre total de bulles, V_T le volume total occupé par l'échantillon, N_V le nombre de bulle par unité de volume et N_q le nombre de bulles par quantité de matière (par volume de magma), alors on a les relations suivantes :

$$N_V = \frac{N_T}{V_T} \quad (3.2)$$

$$N_q = \frac{N_T}{V_T(1 - \alpha)} = \frac{N_V}{1 - \alpha} \quad (3.3)$$

Ce qui est conservé au cours du temps lors d'une décompression est le nombre de bulles par quantité de magma N_q . En général, les données expérimentales reportées dans les articles fournissent le nombre de bulles par unité de volume (N_V). Ce chiffre peut énormément varier si α change durant la décompression. Nous avons supposé que la porosité était exacte pour tout temps et recalculé le rayon à l'aide de la relation suivante :

$$\alpha = N_V \frac{4}{3} \pi R^3 \quad (3.4)$$

α	: porosité
N_V	: nombre de bulle par unité de volume
R	: rayon
N_q	: nombre de bulle par quantité de matière
X_i	: valeur de la variable X à l'état initial
X_f	: valeur de la variable X à l'état final
X_{f_r}	: valeur de la variable X recalculée à l'état final
X_{i_r}	: valeur de la variable X recalculée à l'état initial

TABLE 3.2 – Table des notations pour recalculer le rayon

Nous pouvons donc recalculer les rayons finaux de la manière suivante. En supposant la porosité finale α_f et la porosité finale recalculée α_{f_r} identiques : $\alpha_f = \alpha_{f_r}$, on a alors que le rayon final recalculé vaut :

$$R_{f_r}^3 = R_f^3 \frac{N_{V_f}}{N_{V_i}} \frac{1 - \alpha_i}{1 - \alpha_f}. \quad (3.5)$$

Les notations sont expliquées dans la table 3.2.

Nous trouvons ces relations de la manière suivante :

Les échantillons n'étant pas identiques à l'état initial, les valeurs de N_q ne sont pas les mêmes pour un même jeu de données expérimentales. On suppose que la quantité N_q qui est juste est celle donnée au temps initial. On pose alors $N_{q_{f_r}} = N_{q_i}$. En utilisant (3.3), on obtient $(1 - \alpha_{f_r})N_{V_i} = (1 - \alpha_i)N_{V_{f_r}}$. En remplaçant α_{f_r} par α_f que l'on suppose identique et en utilisant (3.4), on obtient d'abord que $\frac{4}{3} \pi N_{V_{f_r}} R_{f_r}^3 = \alpha_{f_r} = \alpha_f = \frac{4}{3} \pi N_{V_f} R_f^3$ et finalement en remplaçant $N_{V_{f_r}}$, on obtient :

$$(1 - \alpha_f)N_{V_i} = (1 - \alpha_i)N_{V_f} \frac{R_f^3}{R_{f_r}^3}$$

d'où (3.5).

Nous présentons, dans le tableau 3.3, les rayons originaux et recalculés pour des expériences de [BG05]. Dans les expériences choisies, il y a eu de la coalescence, c'est pourquoi les rayons médians originaux sont plus grands dans la première et dernière expérience que dans les deux autres. On constate qu'après les avoir recalculés, les rayons des trois dernières expériences sont voisins alors que celui de la première est supérieur. Ceci peut nous faire penser que le processus de coalescence est devenu dominant entre les deux premières expériences.

échantillon	diamètre original(μm)	diamètre recalculé (μm)
G300	77	74,07
G303	62	57,8
G327	65	59,24
G328	72	57,12

TABLE 3.3 – Table des diamètres originaux et recalculés pour une série expérimentale

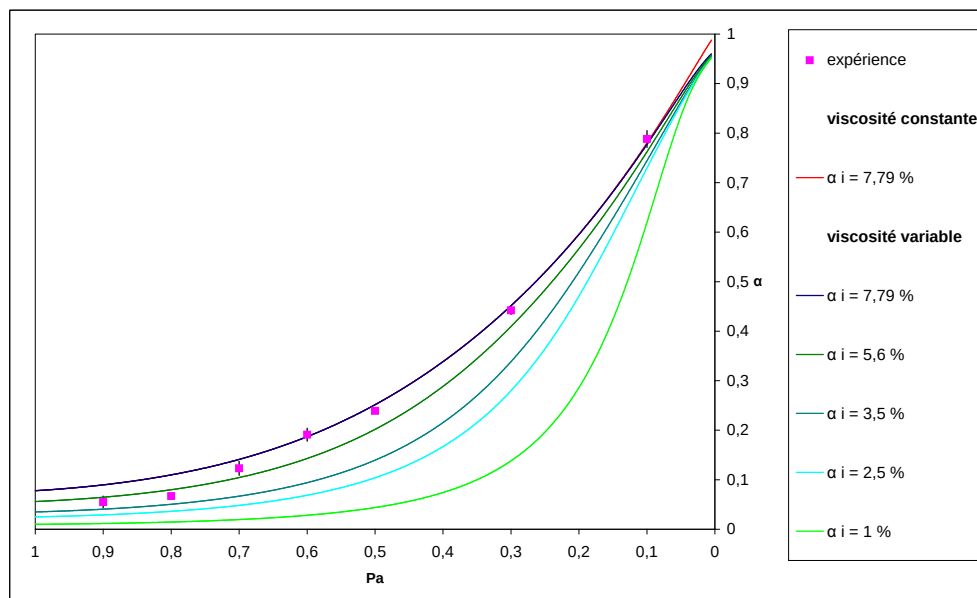


FIGURE 3.9 – Les expériences présentes sont celles de [BG05] avec taux de décompression constant à $5 \cdot 10^5 \text{ Pa s}^{-1}$. Les courbes représentent les simulations de la porosité en fonction de la pression ambiante à viscosité constante (rouge) ou variable (vert et bleu) pour plusieurs porosités de départ.

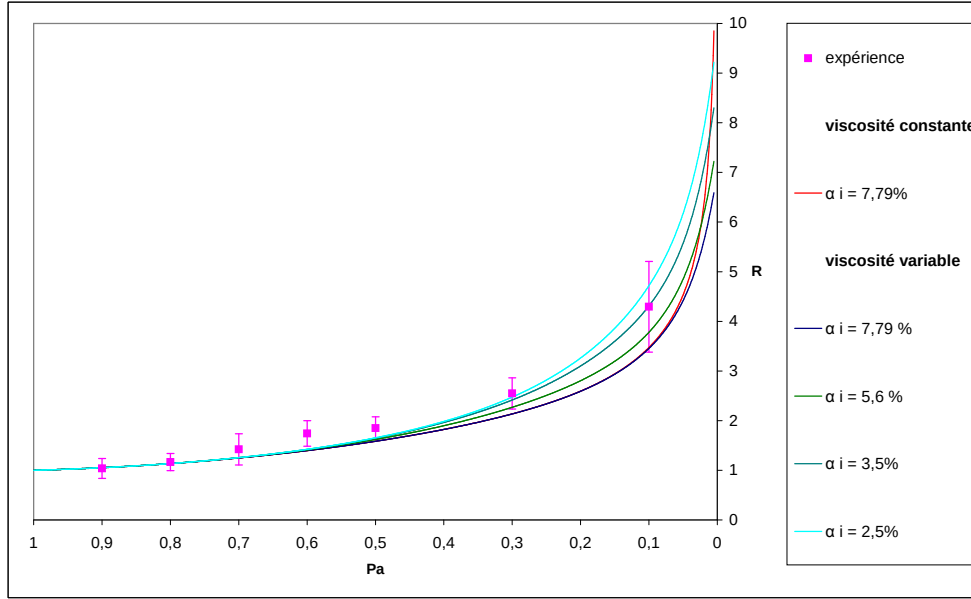


FIGURE 3.10 – Les expériences présentes sont celles de [BG05] avec taux de décompression constant à 5.10^5 Pa s^{-1} . Les courbes représentent les simulations du rayon en fonction de la pression ambiante à viscosité constante (rouge) ou variable (vert et bleu) pour plusieurs porosités de départ.

Les figures 3.9 et 3.10 montrent l'évolution du rayon adimensionnel des bulles R et de la porosité α en fonction de la pression ambiante adimensionnelle P_a . Les courbes ont été tracées avec un rayon initial de $R_i = 17.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, une diffusivité de $D = 6.95076 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, une concentration initiale de $C_i = 0.0344$, un maillage de 50 points, une pression initiale de $P_i = 10^8 \text{ Pa}$, une tension de surface de $\sigma = 0.1 \text{ J m}^{-2}$, une densité pour le magma de $\rho_m = 2354 \text{ kg m}^{-3}$, une température de $T = 825^\circ\text{C}$ et une viscosité effective de $\eta_{eff} = 59000 \text{ Pa s}$ pour la courbe de la simulation à viscosité constante (rouge) et une viscosité effective variable de rhyolite (bleu et vert) pour les autres (voir A.2.2).

Les expériences sont les échantillons *ABG20*, *ABG14*, *ABG25*, *ABG15*, *ABG16*, *ABG30* et *ABG32* de [BG05], qui forment une série temporelle de croissance de bulles sans coalescence.

La porosité de la donnée expérimentale initiale, $\alpha = 5.6 \%$, censée être à l'équilibre, est différente de la porosité calculée à l'équilibre, $\alpha = 7.79\%$. Cette incertitude nous a conduit à considérer plusieurs valeurs initiales pour la porosité comprises, entre 3.5% et 7.79% . Comme on le voit dans la Fig.3.9, la porosité de la simulation coïncide avec les données expérimentales pour la courbe démarrante avec une porosité de 7.79% pour les pressions ambiantes adimensionnelles inférieures à 0.7 . Pour les hautes pressions, la porosité expérimentale se situe entre les courbes démarrantes avec une porosité de 3.5% et de 5.6% et croît jusqu'à atteindre la courbe démarrante avec une porosité de 7.79% .

Pour le rayon, les courbes ne sont distinguables que lorsque la pression atteint la moitié de sa valeur initiale. Les données expérimentales correspondent mieux aux courbes de rayon démarrantes avec une petite porosité (2.5% et 3.5%), mais l'erreur expérimentale est telle que la courbe démarrante avec une porosité de 5.6% est plus acceptable que celle démarrante avec une porosité de 7.79% .

Nous pouvons donc conclure que la porosité initiale change d'expérience en expérience, variant entre la valeur à l'équilibre (7.79%) et celle de l'échantillon initial (5.6%). On re-

marque également que lorsque la viscosité est fixe, la croissance du rayon et de la porosité est similaire à celle avec viscosité variable pour les hautes pressions, sauf qu'elle est plus rapide à partir de 10% de la pression initiale.

3.6 Comparaison générale avec des données d'expériences de décompression en laboratoire

Nous avons regroupé les données issues de différents articles et exploitables par notre modèle : [BG05, GHC00, MS00, LHN96, MLK08, LG04, Gar07, GHC99, IMSD07, TTS09, TNTS05, MS03, SGL⁺10]. Ces travaux représentent l'ensemble des expériences de décompression de magma réalisées jusqu'en 2010. Cette comparaison permet de faire le point sur la capacité du modèle à reproduire les données expérimentales. La table 3.4 détaille quelles conditions initiales ont été utilisées pour chaque jeu d'expériences ainsi que leur provenance et la table 3.5 détaille les expériences considérées dans chaque article.

localisation des données finales / initiales	Données utilisées ²	Constante de Henry ($K_H(10^{-6})) \text{ m}^{1/2} \text{ kg}^{-1/2}$	Tension de surface (σ) N m	Densité du magma (ρ_m) kg m^{-3}	modèle de viscosité ⁷ ([HD96] , [WHB ⁺ 09] , [GRPD04])
[BG05]	ABG1	3.44	0.1	2354	rhyolite
[GHC00]	JPG-33 ¹	4.5	0.1	2354	rhyolite
[MS00] / [MS05]	.345 / (F8, F10, F34) ⁴⁵	3.44	0.11/0.042, 0.06, 0.073	2218/2200	rhyolite
[LHN96] / [HN94]	LGB-105 ¹	4.4	0.06	2300	rhyolite
[MLK08]	79VS7_6	3.9	0.063	2300	phonolite
[LG04]	.456, LPG3	4.3	0.1	2400	phonolite
[Gar07]	G-440 ⁶	3.44	0.15	2350	rhyolite
[GHC99]	(JPG-13, BN-17, BN-20) ⁴⁵	4.08	0.15	2354	rhyolite
[IMSD07]	B37 ⁴⁵	3.58	0.095	2470	phonolite
[TTS09]	JR1-2	3.44	0.5	2280	rhyolite
[TNTS05] / [NIY ⁺ 02]	.456	3.44	0.06	2200	dacite
[MS03]	(150, 50)	3.44	0.1	2300	rhyolite
[SGL ⁺ 10]	(EU1, EU2) ⁴⁵	3.44	0.1	2400	phonolite

1. rayon recalculés pour conserver le volume de la zone d'influence au temps final

2. Diffusivité calculée par la formule de [ZB00]

3. Concentration initiale fixé à la moyenne des valeur de solubilité aux conditions initiales

4. rayon initial inconnu fixé à $1\mu\text{m}$

5. porosité initiale inconnue fixée à 0.1%

6. Concentration initiale inconnue fixée à pression initiale par la loi de Henry (1.14bis)

7. viscosité détaillée en annexe A

TABLE 3.4 – Liste des différentes données expérimentales initiales

localisation des données finales / initiales	Données finales comparées
[BG05]	ABG6, ABG4, ABG2, ABG7, ABG20, ABG14, ABG25, ABG15, ABG16, ABG30, ABG32, ABG26, ABG27, ABG28, ABG31, ABG29, ABG33, PPE6, PPE2, PPE4, PPE5, PPE7, PPE1, PPE10, PPE11, G318, G322, G321, G323, G300, G303, G327, G328
[GHC00]	JPG-42, JPG-43, JPG-44
[MS00]/ [MS05]	MS-64, MS-58, MS-69, MS-66, MS-60 / F50, F29, F49, F31, F18, F19, F17, F28, F27, F75, F76, F37, F74, F55, F39
[LHN96]/ [HN94]	LGB-10, LGB-17, LGB-24, LGB-35, LGB-52, LGB-58, LGB-89, LGB-97, LGB-98, LGB-104, LGB-124, LGB-59, LGB-7, LGB-16, LGB-18, LGB-39, LGB-53, LGB-55, LGB-57, LGB-84, LGB-85, LGB-88, LGB-101, LGB-102, LGB-135, LGB-136, LGB-74, LGB-76, LGB-81, LGB-82, LGB-95, LGB-111, LGB-114, LGB-115, LGB-116, LGB-117, LGB-118, LGB-119, LGB-120, LGB-121, LGB-122, LGB-123, LGB-125, LGB-126, LGB-127, LGB-128, LGB-129, LGB-130
[MLK08]	79VS15_2_6, 79VS15_2_1, 79VS15_2_10, 79VS7_5, 79VS7_3, 79VB15_2_12_3_4, 79VS7_2, 79VS7_4, 79VB15_2_12_3_6, 79VS15_7_12, 79VS15_7_11, 79VS15_7_13, 79VS15_7_14, 79VB_8_3, 79VB15_7_15, 79VB8_4
[LG04]	LPG1, LPG2, LPG3, LPG3a, G213, G214, G236, G239, G242, G251, G253, G254, G255
[Gar07]	G-433, G-432, G-434, G-435, G-442, G-437, G-436, G-438, G-439, G-443, G-470
[GHC99]	BN-10, BN-11, BN-14, BN-16, BN-18, BN-19, JGP-7, JGP-8, JGP-9, JGP-10, JGP-11, JGP-12, JGP-14, JGP-15, JGP-16, JGP-18, JGP-17, JGP-19, JGP-22, JGP-23, JGP-24, JGP-25, JGP-27, JGP-28
[IMSD07]	B72, B77, B112, B74, B59, B89, B88, B53, B54
[TTS09]	JRGD2, JRGD5, JRGD3, JRGD13, JRGD6, JRGD7, JRGD14, JRGD25, JRGD28, JRGD10a, JRGD15, JRGD23, JRGD16, JRGD24, JRGD18, JRGD20
[TNTS05]/ [NIY ⁺ 02]	D1, D2, D3, D4-1, D4-2, D4-3, D5, D6, D7, D8, D11
[MS03]	D5, D3, D4, D1, D11, D12, D18, D16, D15, D6, D7, D8, D10, D9, D14
[SGL ⁺ 10]	EU1-1-2a, EU1-1-2b, EU1-1-2c, EU1-1-2d, EU1-1-2e, EU2-2-3a, EU2-2-3b, EU2-2-3c, EU2-2-3d, EU2-2-3e, EU2-26a, EU2-26b, EU2-26c, EU2-26d

TABLE 3.5 – Liste des différentes données finales expérimentales

Nous avons choisi pour modèle de solubilité la loi de Henry ($C_R = K_H \sqrt{P}$). Il a donc parfois fallu calculer une constante de Henry correspondant au mieux aux données et lois de solubilité des articles proposant un autre modèle.

De la même manière qu'en 3.5, une correction a été faite sur des rayons pour pouvoir comparer les résultats expérimentaux et les résultats numériques. Ici, cependant, nous recalculons le rayon initial pour chaque expérience car nous ne savons pas si les conditions initiales sont à l'équilibre. Les notations sont données dans la table 3.2. Soit R_{ir} le rayon initial recalculé, en supposant la porosité initiale bonne $\alpha_i = \alpha_{ir}$, on a alors

$$R_{ir}^3 = R_i^3 \frac{N_{Vi}}{N_{Vf}} \frac{1 - \alpha_f}{1 - \alpha_i}.$$

Sur la Fig.3.11, nous présentons la répartition des différentes données en terme de Θ_V et Θ_D . Nous remarquons que les paramètres Θ_V et Θ_D pour les différentes expériences sont souvent dans les cas limites tels qu'ils sont déterminés au chapitre 1. Certains cas limites sont donc utilisables avec la viscosité variable.

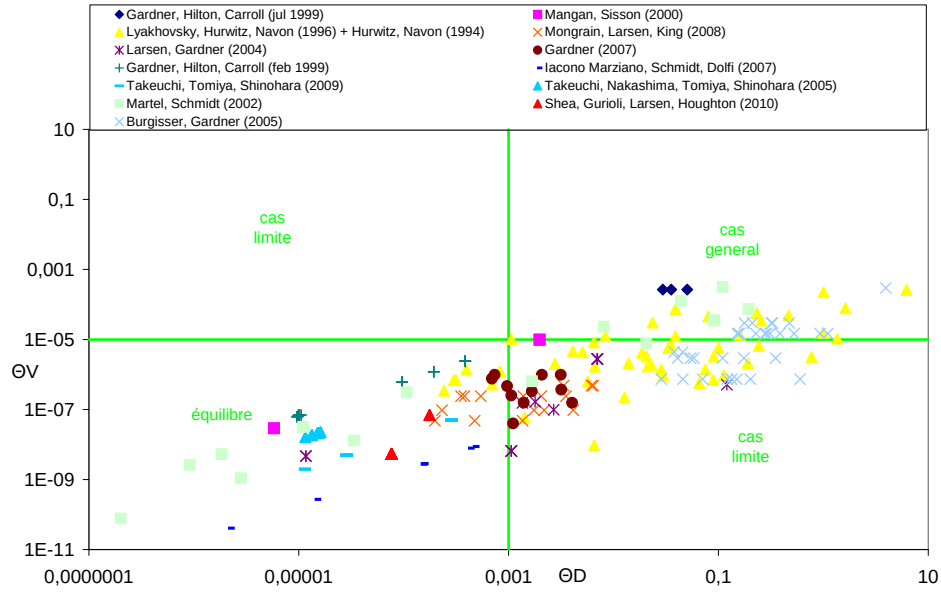


FIGURE 3.11 – Distribution des expériences de laboratoire en termes de Θ_V et Θ_D . (Données provenant de 13 études). Les 4 champs en vert (cas limites, général et équilibre) font référence à la table 1.1

Puis nous avons comparé les résultats obtenus par notre modèle et les résultats expérimentaux obtenus en laboratoire. On a remarqué que l'on pouvait classer les résultats suivant les conditions expérimentales connues :

Les expériences où il y a eu

- uniquement croissance par décompression.
- coalescence, c'est à dire que les bulles ont pu croître en se regroupant, ce processus ne modifie pas la porosité mais modifie la taille et le nombre de densité des bulles.
- nucléation, c'est à dire que des bulles sont apparues pendant la décompression, ce qui a pour conséquence d'augmenter la porosité et la densité de bulles par unité de volume de magma et de diminuer la valeur du rayon moyen.
- cristallisation, c'est à dire que lors de la décompression, des cristaux se sont formés dans le magma
- échappement des bulles, c'est à dire qu'une partie de la population de bulle est sortie de l'échantillon par flottation, ce processus réduit la porosité.

Analysons maintenant les différentes familles de résultats.

3.6.1 Croissance par décompression

Regardons les cas expérimentaux ne faisant intervenir que les processus de croissance considérés par notre modèle (décompression/exsolution). Nous pouvons considérer des expériences tirés de quatre articles [BG05, GHC99, GHC00, LHN96]. Notre programme devrait retrouver les bonnes valeurs pour ce cas.

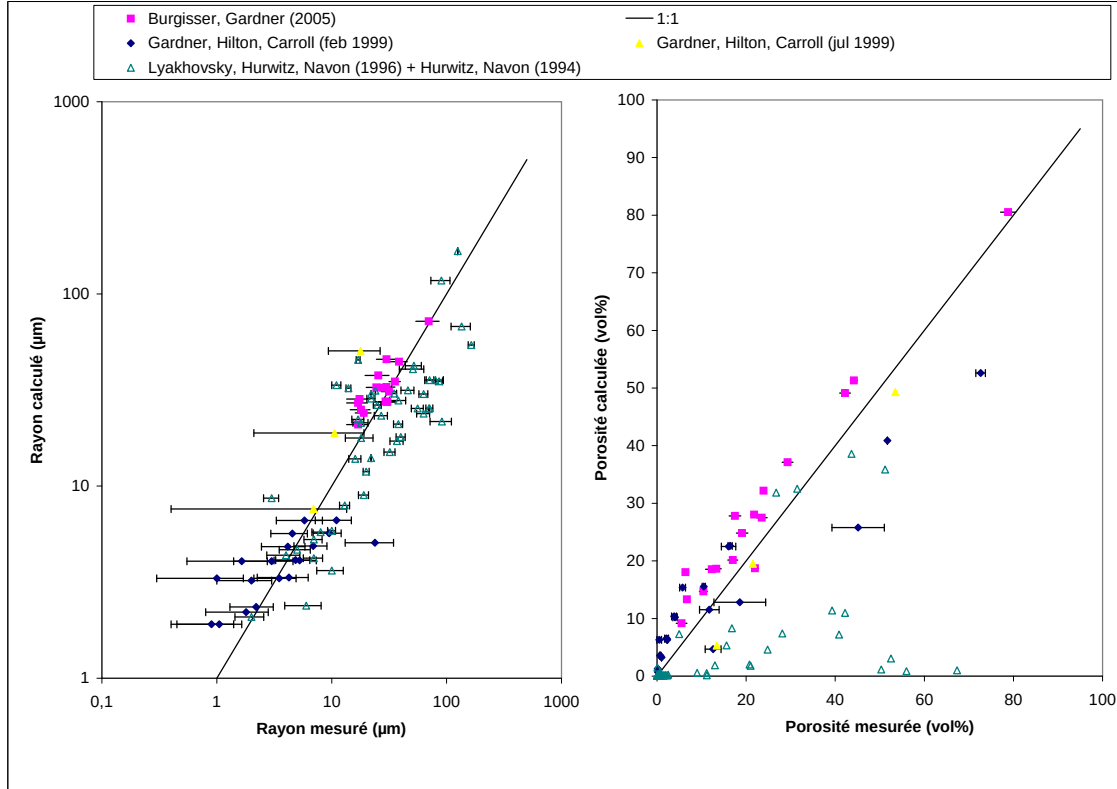


FIGURE 3.12 – Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences sans autres processus que la décompression/exsolution. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.

On représente (Fig.3.12), sur le graphique de gauche, en échelle logarithmique, le rayon calculé par le programme en fonction du rayon mesuré en laboratoire et sur le graphique de droite la porosité calculée par le programme en fonction de la porosité mesurée en laboratoire. Nous constatons que les rayons sont estimés avec une marge acceptable, et la porosité est bien estimée pour ces expériences sauf celles de [LHN96]. Un examen plus détaillé de chaque série expérimentale est donc nécessaire.

- [BG05] (Burgisser, Gardner (2005)) : En apparence, le modèle estime bien les rayons. Le modèle nous donne presque toujours une porosité 5 vol.% supérieur à la porosité mesurée, ceci peut être dû à l'incertitude sur la porosité initiale. En effet nous considérons qu'à l'instant initial, les bulles sont dans un état d'équilibre, or ce n'était pas le cas : le temps de repos après le trempage étant un peu court (c.f. Fig.3.9 et Fig.3.10 pour voir les conséquences). La porosité à l'équilibre devrait être plus grande que celle prise à l'état initial. Hormis le départ légèrement hors équilibre, le modèle estime de manière acceptable les données.
- [GHC99] (Gardner, Hilton, Carroll (fév 1999)) : On constate que l'évolution globale des rayons et porosités modélisés est en accord avec les mesures, bien que quelques expériences aient un écart non négligeable avec le modèle. Les données initiales (rayon et porosité) inconnues (supposées $R_i = 1\mu m$ et $\alpha_i = 0.1\%$) peuvent expliquer en partie cela. Il existe également une porosité d'hydratation qui peut aller jusqu'à 20 % que nous ne considérons pas. La porosité d'hydratation correspond aux bulles créées lors de la phase d'hydratation, probablement des espaces entre les grains de la poudre utilisée. Lors de la mesure du rayon moyen, les bulles d'hydratation, plus grosses,

n'ont pas été prises en compte. Les bulles d'hydratation grossissent aussi pendant la décompression et influent sur la concentration d'eau et la porosité totale qui est limitée. Elles vont donc agir comme limitant pour les bulles que nous considérons. Il ne faut peut être pas entièrement les ignorer comme nous l'avons fait. De plus sur la fig.2d-e-f de [GHC99], il semble y avoir un peu de coalescence. Ces deux phénomènes (bulles d'hydratation et coalescence) génèrent une dispersion des tailles de bulles et perturbent les mesures de porosités, ce qui explique les écarts sporadiques.

- [GHC00] (Gardner, Hilton, Carroll (jul 1999)) : Seules les trois expériences à 725° étaient exploitables par notre modèle. Le modèle surestime de plus en plus le rayon quand la pression diminue, contrairement à la porosité qui ne semble fortement sous-estimée que pour les hautes pressions. La présence de bulles d'hydratation peut là aussi expliquer une partie de ces écarts, mais le peu de données ne permet pas une conclusion claire.
- [LHN96] (Lyakhovsky, Hurwitz, Navon (1996) + Hurwitz, Navon (1994)) : En apparence, le modèle sous-estime les porosités. Les valeurs de porosité reportées ne sont pas issues de mesures directes, car ce qui est mesuré par [LHN96] est le rayon moyen et la densité de population de bulles, deux valeurs qui nous ont permis de calculer une porosité grâce à (3.4). Les porosités résultantes, comme expliqué dans [LHN96], sont fortement sous-estimées. Cet écart ne peut être corrigé en l'absence de porosités mesurées directement sur les échantillons. Le rayon initial étant recalculé en partie grâce à cette porosité, on peut s'attendre à ce que les conditions initiales ne correspondent pas à la réalité et aient des conséquences sur le rayon final modélisé. On constate que l'évolution des rayons modélisée est en accord global avec les mesures, bien qu'il y ait une dispersion non négligeable des données. Ceci nous amène à considérer l'importance de la précision des conditions initiales et y dédier une section.

Conditions initiales inconnues

Nous avons parlé des conditions initiales inconnues pour certaines courbes. Afin d'étudier leur influence sur le résultat final, nous avons pris l'article avec le plus de résultats et qui n'avait pas de conditions initiales ([LHN96]). Les données reportées par [LHN96] sont reprises et corrigées d'un travail antérieur ([HN94]). Le travail de [HN94] concernait la nucléation, et les expériences que nous avons considérées sont celles contenant peu (< 1%) de microlites (petits cristaux) d'oxyde de fer (magnétite, ilménite).

La nucléation a lieu aux endroits où se trouvent ces microlites quand il y en a. La donnée initiale que nous avons prise est une expérience à 790°C, or, comme il est dit dans [HN94], à partir de 800°C les microlites commencent à disparaître et la nucléation se fait en beaucoup plus petit nombre. La plupart des expériences considérées étant à 800°C, la porosité et le nombre de densité initial réel seront bien inférieurs à l'expérience à 790°C que nous avons choisie comme donnée initiale pour tout les calculs. Ce choix vient du fait qu'il n'y avait pas d'autre donnée initiale dans les articles.

Les données expérimentales ont été confrontées, dans [LHN96], à des résultats numériques obtenus sur le même modèle que nous, défini par les équations (1.3), (1.5) et (1.7). La différence vient de la définition de la viscosité effective η_{eff} et de l'initialisation des inconnues. Nous donnons, dans les explications des codes numériques, les valeurs des constantes utilisées pour obtenir les points de Fig.3.13.

Dans [LHN96], les paramètres d'entrée du code numérique sont la concentration d'eau initiale $C_i = 0.054$, la pression ambiante initiale $P_a = 150 \text{ MPa}$, la température $T = 780 - 850 \text{ }^\circ\text{C}$, la viscosité $\eta = 50000 \text{ Pa s}$, la constante de Henry $K_H = 4.4 \text{ Pa}^{1/2}$, la densité du magma $\rho_m = 2300 \text{ kg m}^{-3}$, la tension de surface $\sigma = 0.06 \text{ J m}^{-2}$, la constante de diffusivité $D = 2 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, le rayon au temps final R_f et la distance de séparation des bulles calculées S . Le paramètre S est obtenu par le calcul suivant $4\pi S^3 = 3/N_{V_f}$, où

N_{V_f} est la densité de bulles au temps final. La viscosité effective est calculée de la manière suivante :

$$\eta_{eff} = \eta \left(1 - \frac{R^3}{S^3} \right) ,$$

ceci revient à considérer, dans (3.1), la viscosité constante en r , donc indépendante de la concentration en eau dissoute C . Le volume d'influence S_0^3 est calculé grâce au rayon et à la distance de séparation des bulles $S_0^3 = S^3 - R^3$, la pression du gaz dans la bulle à l'instant initial $P(0)$ est donnée, en supposant l'équilibre chimique du système, par $P(0) = (C_i/K_H)^2$, et le rayon initial R_i est obtenu, en supposant l'équilibre mécanique du système, de la manière suivante $R_i = 2\sigma/(P(0) - P_i)$.

Les paramètres d'entrée de notre code numérique sont la concentration d'eau initiale C_i , la pression ambiante initiale P_a , la température T , la constante de Henry K_H , la densité du magma ρ_m , la tension de surface σ , la constante de diffusivité D , le rayon initial R_i et la porosité initiale α_i . La viscosité effective est calculée en utilisant (3.1) :

$$\eta_{eff} = \eta(R) - \frac{R^3}{S^3} \eta(S) + R^3 \int_R^S \frac{1}{r^3} \frac{d\eta}{dr} dr,$$

la viscosité $\eta(r)$ est décrite en annexe A. Le volume d'influence S_0^3 est calculé par $S_0^3 = R_i^3(1 - \alpha_i)/\alpha_i$ et la pression du gaz dans la bulle à l'instant initial $P(0)$ est obtenue en supposant l'équilibre mécanique du système, et est donnée par $P(0) = P_i + 2\sigma/R$.

Les conditions initiales fournies par [HN94] n'étant pas toujours compatibles avec les mesures expérimentales de [LHN96] aux temps finaux (par exemple, le rayon et la porosité initiale supérieurs au rayon et porosité finale), nous avons essayé d'autres conditions initiales. L'étude numérique de [LHN96] utilise D comme variable d'ajustement, qu'ils choisissent de fixer à $2 \cdot 10^{-11}$. Nous avons donc choisi trois conditions initiales :

1. Comme expliqué précédemment, nous prenons pour condition initiale les données de l'expérience à $790^\circ C$ avec le rayon, la porosité et la constante de diffusivité qui valent alors $R_i = 0.000012 \text{ m}$, $\alpha_i = 0.0217\%$ et $D = 3 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ et traçons les résultats Fig.3.13 sous la légende $R_i = 12\mu\text{m}$.
2. Nous fixons le rayon initial à 0.000001 m , la porosité à 0.0217% et la constante de diffusivité à $3 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ pour toutes les expériences. Nous traçons les résultats Fig.3.13 sous la légende $R_i = 1\mu\text{m}$.
3. Nous reprenons les données de l'expérience à $790^\circ C$ et recalculons un rayon initial pour chaque expérience de la même manière que dans la section 3.5. Nous gardons la porosité $\alpha_i = 0.0217\%$ et recalculons pour chaque expérience la constante de diffusivité avec [ZB00]. Nous traçons les résultats Fig.3.13 sous la légende R_i recalculé.

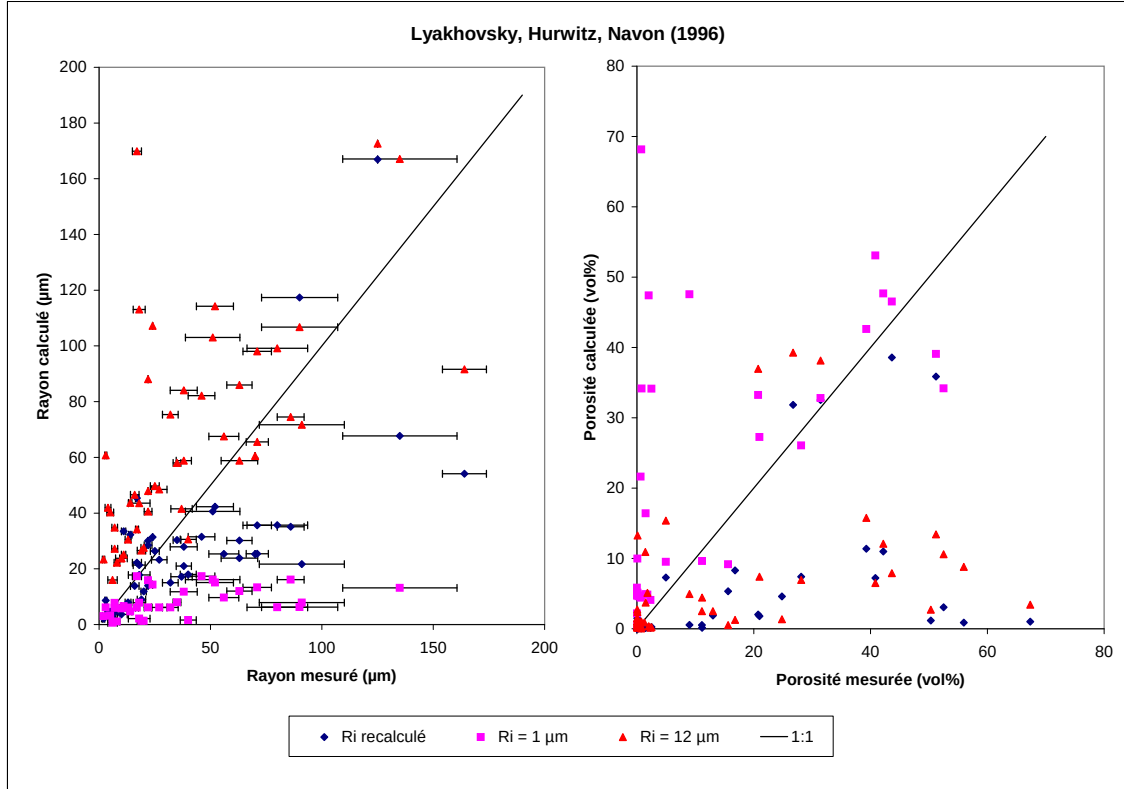


FIGURE 3.13 – Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec conditions initiales mal contraintes. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue. On a utilisé une constante de diffusivité de $3 \cdot 10^{-11}$ pour les deux rayons fixés et une constante de diffusivité recalculée par [ZB00] pour chaque rayon recalculé.

On représente (figure 3.13) sur le graphique de gauche le rayon calculé par le programme en fonction du rayon mesuré en laboratoire et sur le graphique de droite la porosité calculée par le programme en fonction de la porosité mesurée en laboratoire. Nous constatons que le choix de la condition initiale influe beaucoup sur le résultat. Le fait de recalculer le rayon initial dans ce cas passe d'une surestimation à une sous-estimation du rayon. La meilleure estimation de la porosité est obtenue pour le rayon initial choisi arbitrairement à $10^{-6}m$ même si certains points sont clairement surestimés.

Dans [LHN96], une représentation des résultats pour le rayon était publiée, nous avons essayé de reproduire les mêmes graphiques avec les résultats de nos simulations. Sur Fig.3.14, nous représentons les rayons calculés par nos simulations en fonction des rayons mesurés. Nous avons tracé quatre jeux de résultats :

1. lorsque l'on recalcule le rayon et le coefficient de diffusivité avec [ZB00] à la place de celui proposé dans [LHN96] (D , Ri recalculé)
2. lorsque l'on fixe le rayon à $12\mu m$ et que l'on prend le coefficient de diffusivité ($D = 3e - 11$) de [LHN96] ($D = 3e - 11$, $Ri = 12\mu m$)
3. lorsque l'on recalcule le rayon initial et que l'on fixe la constante de diffusivité à $2 \cdot 10^{-11}$ ($D = 2e - 11$, Ri recalculé)
4. on a reproduit les points des figure 5c-d de [LHN96] (fig5-c-d LHN (1996)).

Suivant [LHN96], nous représentons à gauche les résultats pour une pression ambiante supérieure à $110 MPa$ et à droite les résultats pour une pression ambiante inférieure à

110 MPa.

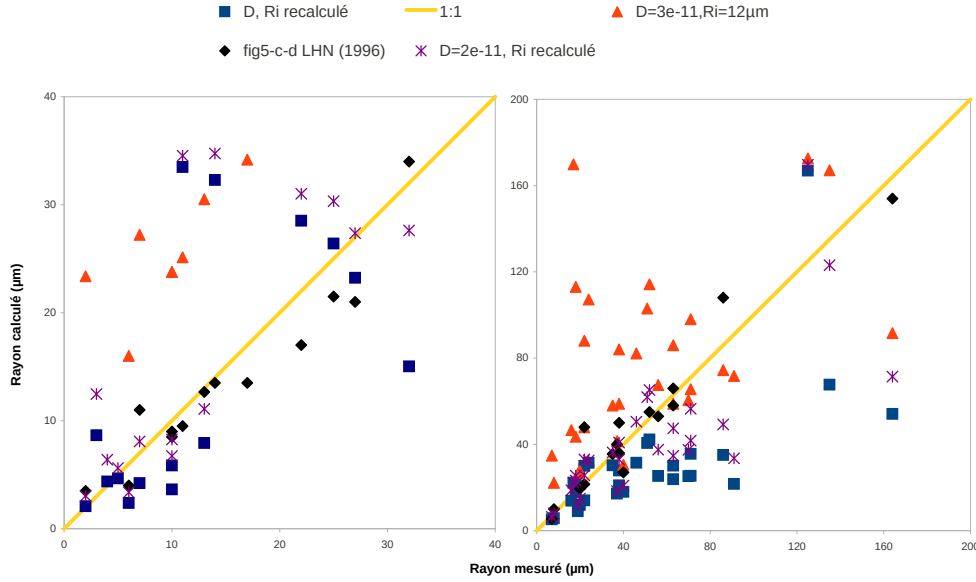


FIGURE 3.14 – Comparaison avec les résultats numériques et expérimentaux de fig.5c-d dans [LHN96] pour un rayon initial recalculé et une constante de diffusivité obtenue par la formule de [ZB00], un rayon initial recalculé et une constante de diffusivité proposée par [LHN96] ($D = 2e - 11$) et pour une diffusivité plus grande proposée par [LHN96] ($D = 3e - 11$) et un rayon fixé à $12\mu m$.

Les résultats présentés à gauche sont pour une pression ambiante finale supérieure à 110 MPa et à droite pour une pression inférieure à 110 MPa. Il existe des symboles hors échelle.

On remarque que certaines de nos données sont similaires à celles de [LHN96], particulièrement celles de notre série avec la diffusivité proposée par [LHN96] et le rayon fixé à $12\mu m$. Comme expliqué précédemment, la différence entre nos données et celles de [LHN96] vient des hypothèses faites pour les conditions initiales : nous supposons que la pression dans la bulle est à l'équilibre ($\dot{R} = 0$) et nous prenons un rayon initial et une concentration initiale donnés, ce qui nous permet d'étudier les cas de sur/sous-saturation. Dans [LHN96], ils supposent que la pression dans la bulle P est telle que $K_H \sqrt{P} = C_i$ avec K_H constante de Henry et C_i la concentration d'eau initiale. Le rayon est alors tel que $\dot{R} = 0$.

Les rayons initiaux que nous calculons diffèrent pour chaque expérience et se situent entre $8 \cdot 10^{-7} m$ et $5.2 \cdot 10^{-5} m$ alors que le rayon initial calculé par [LHN96] par la formule du rayon critique, avec $K_H = 0.0000044 m^{1/2} kg^{-1/2}$, $\sigma = 0.06 N m$, $P_i = 1.5 \cdot 10^8 Pa$ et $C_i = 0.054$ vaut $R_{cr} = 1.936 \cdot 10^{-07}$. Cette série expérimentale est donc mieux reproduite par de petits rayons de départ ($< 1\mu m$) et une diffusivité de $2 \cdot 10^{-11}$.

3.6.2 Coalescence

Regardons maintenant les cas où il y a eu coalescence. La coalescence est le fait que deux bulles s'unissent pour n'en former plus qu'une. Un tel processus conserve la porosité, mais diminue la densité de bulles par unité de magma et augmente le rayon moyen de la population de bulles. De plus le volume des régions d'influence va augmenter lors de la coalescence, ce qui va augmenter la valeur du rayon maximum en tout temps. La coalescence est présente dans les travaux de [BG05,IMSD07,TNTS05,TTS09,LG04,MLK08,Gar07].

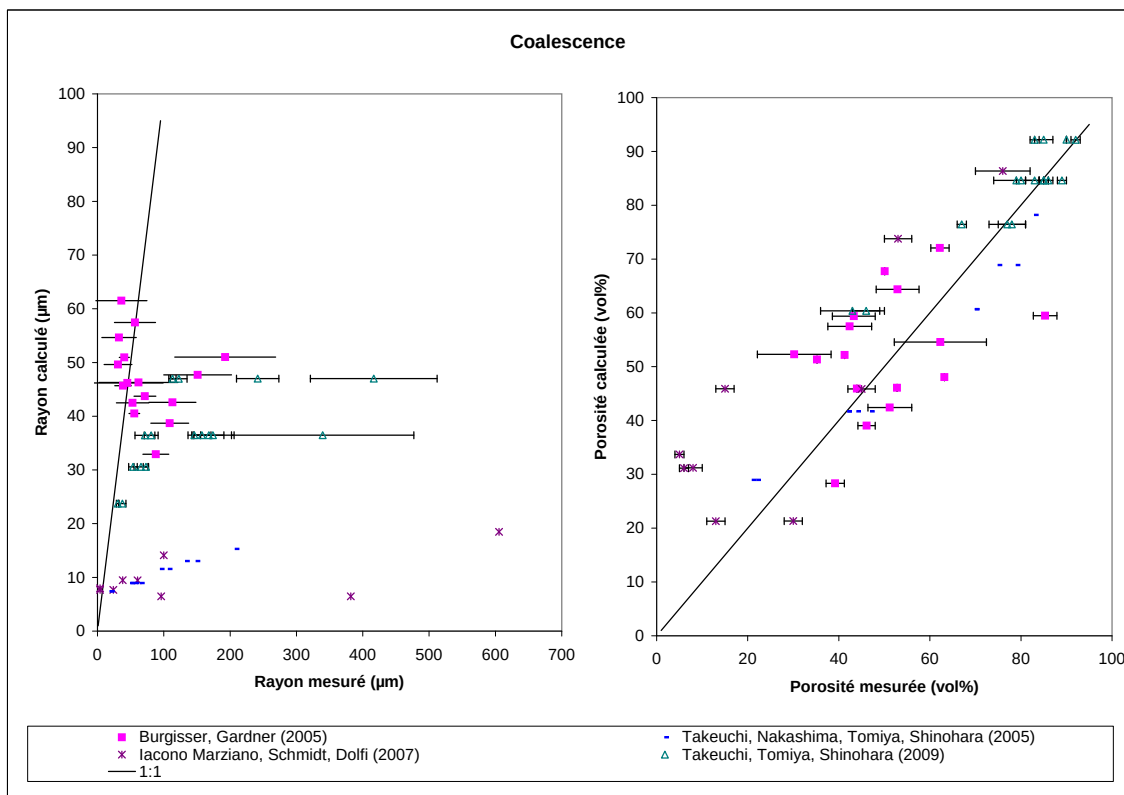


FIGURE 3.15 – Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec coalescence. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.

On représente (Fig.3.15 et Fig.3.16) sur les graphiques de gauche le rayon calculé par le programme en fonction du rayon mesuré en laboratoire et sur les graphiques de droite la porosité calculée par le programme en fonction de la porosité mesurée en laboratoire.

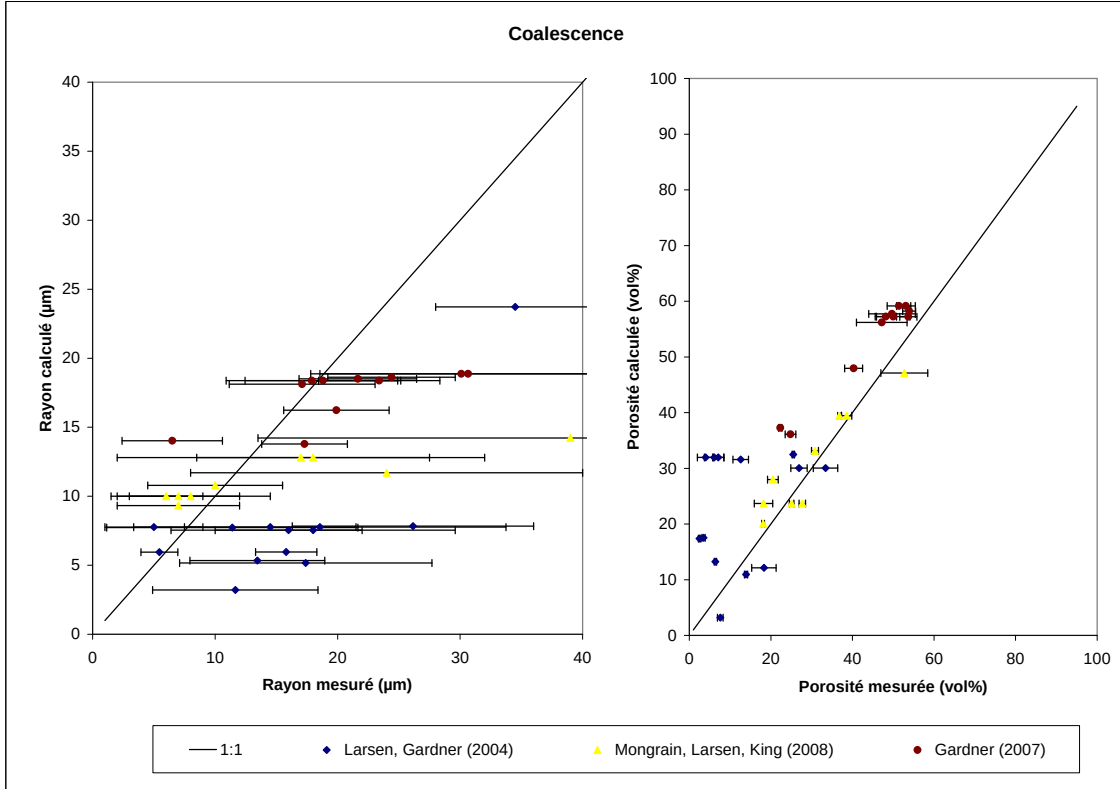


FIGURE 3.16 – Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec coalescence. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.

Nous constatons que les rayons sont souvent sous-estimés comme nous l'avions prévu, puisque le rayon augmente sous l'effet de la coalescence et que les porosités ont tendance à être surestimées et dispersées autour de la droite idéale (1 : 1). Les barres d'erreur peuvent être assez grandes, ceci vient du fait que la coalescence étale la distribution de population (la taille des bulles qui coalescent évolue beaucoup plus vite que les autres).

Un examen plus détaillé de chaque série expérimentale est nécessaire pour mieux comprendre les comportements sur les graphiques.

- [BG05] (Burgisser, Gardner (2005)) : Nous sous-estimons la porosité et le rayon de toutes les expériences à faible taux de décompression (*PPE*) sauf *PPE1*. Les expériences *PPE* sont les points les plus éloignés sous la droite 1 : 1. Ceci est dû à la présence probable de bulles d'hydratation dans les échantillons *PPE* qui ont été préparés selon la même méthode que [GHC99, GHC00] (voir 3.6.1) [A.Burgisser, communication personnelle, 2012]. Tous les autres échantillons de [BG05] ont été préparés afin d'éviter les bulles d'hydratation. Lorsque le taux de décompression est faible (0.025 MPa s^{-1}), nous sous-estimons le rayon comme attendu. Nous trouvons un rayon bien estimé pour le taux de décompression à 0.1 MPa s^{-1} et, pour la décompression la plus rapide, nous surestimons le rayon et la porosité de la même manière que pour les expériences sans coalescence. Ces observations corroborent celles de [BG05], qui concluaient que la coalescence a un rôle plus important lorsque la décompression est suffisamment lente.
- [TNTS05] (Takeuchi, Nakashima, Tomiya, Shinohara (2005)) : Le rayon et la porosité à l'état initial sont inconnus (supposé $R_i = 10^{-6} \text{ m}$ et $\alpha_i = 0.1\%$). Le modèle

approche bien la porosité et sous-estime fortement le rayon. La plupart des expériences produisent des bulles sphériques et contiennent 20 %*poids* de cristaux. Les bulles sphériques signifient que l'on est exactement dans le modèle considéré, qui considère une expansion isotropique. Nous ne prenons pas en compte la cristallisation dans notre modèle, ce qui entraîne une surestimation de la porosité. Le modèle surestime la porosité des deux plus hautes pressions, ce qui fait penser que la cristallisation a lieu dans les hautes pressions, au début de la décompression. Les points pour la porosité semblent alignés dans les expériences avec bulles sphériques, mais les porosités sont sous-estimées d'environ 5 %. Les données initiales que nous avons fixées ne semblent donc pas correspondre à la réalité. Le rayon a un comportement normal pour des expériences où il y a eu coalescence.

- [IMSD07] (Iacono Marziano, Schmidt, Dolfi (2007)) : Les données initiales étaient inconnues, nous avons donc fixé les mêmes conditions initiales pour toutes les expériences (supposées $R_i = 10^{-6}$ et $\alpha_i = 0.1\%$). La porosité est surestimée en général. Le rayon est sous-estimé pour les basses pressions. La nucléation n'est pas homogène pour trois des cas traités. La décompression n'est pas continue pour deux des cas traités (bien que la plupart des décompressions se fassent par sauts de pression, ici certaines sont décompressées continûment). Comme vu dans la section 3.4, la différence entre ces deux types de décompression est de plus en plus grande quand la pression diminue mais les expériences étant à l'équilibre, cette erreur est infime, cela ne peut donc pas être la cause de la surestimation de la porosité. Dans [IMSD07], les auteurs ont observé que la coalescence a lieu dans les basses pressions. Les rayons dans ce cas se comportent comme attendu, le modèle les sous-estime fortement. Les conditions initiales incertaines et la nucléation durant la décompression expliquent la surestimation de la porosité.
- [TTS09] (Takeuchi, Tomiya, Shinohara (2009)) : Le rayon est sous-estimé par le modèle et la porosité est globalement bien estimée. Il est surprenant que les porosités soient aussi bien estimées, alors que dans certaines expériences, il y a eu rupture de la capsule et perte de masse de gaz importante avant la fin de la décompression. Les porosités pour les pressions les plus hautes (30 MPa) sont toutefois fortement surestimées par notre modèle pour une raison inconnue.
- [LG04] (Larsen, Gardner (2004)) : Les rayons et porosités initiales sont inconnues (supposés $R_i = 10^{-6}m$ et $\alpha_i = 0.1\%$). D'autres données étaient parfois inconnues telles que la concentration d'eau initiale pour les expériences commençant à plus de 140 MPa pour les phonolites de type LST 3-1-140 et celle commençant à 150 MPa pour les phonolite de type HAE 2-1-95. La plupart des rayons sont sous-estimés comme nous l'avions prévu. En apparence, la moitié des porosités semble bien estimées, et l'autre moitié est clairement surestimée par notre modèle. Il y a plusieurs raisons à cela. Des bulles d'hydratation sont présentes, mais la porosité mesurée n'est pas corrigée par les auteurs. Les expériences dont on ne connaissait pas la concentration d'eau initiale, à l'exception d'une, sont celles dont nous avons surestimé la porosité. La concentration que nous avons choisie était trop importante. Le rayon et la porosité initiale que nous avons choisis semblent acceptables au vu des résultats. Les résultats correspondent à ce que nous attendions lorsque les données initiales sont connues. Pour pouvoir estimer la porosité, il nous faut bien connaître la concentration d'eau.
- [MLK08] (Mongrain, Larsen, King (2008)) : Ici sont représentées les expériences s'arrêtant avant 40 MPa, les autres ayant eu de l'échappement et étant détaillées dans la section échappement. Les porosités sont bien estimées. Les rayons sont, pour les hautes pressions, bien estimés et, pour les basses pressions, sous-estimés comme nous l'avions prévu.
- [Gar07] (Gardner (2007)) : Nous avons choisi la même concentration initiale pour

toutes les expériences alors que la température n'était pas toujours la même. Le rayon est bien estimé dans la plupart des cas ; en considérant les erreurs de mesure, seules deux expériences ont un écart important. La porosité est surestimée, ce qui peut s'expliquer par le fait que nous avons choisi une constante de Henry qui n'était pas adapté pour la concentration initiale considérée. Le choix d'une concentration unique pour différentes températures et d'une constante de Henry mal adaptée expliquent les écarts constatés.

3.6.3 Nucléation

Regardons maintenant les cas où il y a eu nucléation durant la décompression. On dit qu'il y a nucléation durant la décompression quand la majorité des bulles apparaissent durant la décompression. Un tel processus va augmenter la densité de bulles par quantité de liquide, ainsi que la porosité et diminuer le rayon moyen de la population de bulles.

On peut donc s'attendre à ce que notre modèle sous-estime la porosité et surestime le rayon. En effet la distance de diffusion est plus petite quand il y a plus de bulles et la sursaturation du liquide implique une porosité sous-équilibre. La nucléation est présente dans les articles [MS00, MS05].

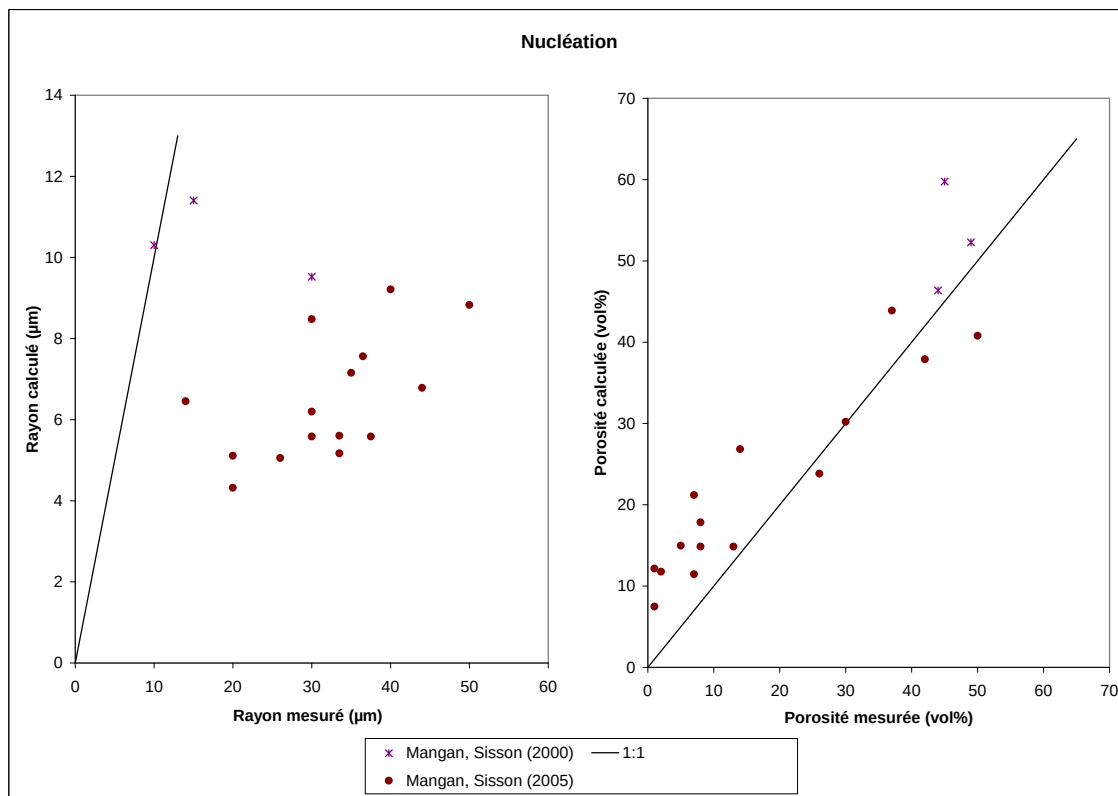


FIGURE 3.17 – Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec nucléation. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.

On représente (figure 3.17) sur le graphique de gauche le rayon calculé par le programme en fonction du rayon mesuré en laboratoire et sur le graphique de droite la porosité calculée par le programme en fonction de la porosité mesurée en laboratoire.

Nous constatons que le rayon est sous-estimé et presque toutes les porosités sont surestimées. Un examen plus détaillé de chaque série expérimentale est nécessaire pour mieux comprendre les comportements sur les graphiques.

- [MS00] (Mangan, Sisson (2000)) : Seules trois expériences, dont les rayons et porosité initiaux étaient inconnus (supposés $R_i = 10^{-6}$ et $\alpha_i = 0.1\%$), ont pu être modélisées. On constate une sous-estimation du rayon par notre modèle (légère dans un cas) et une surestimation (légère dans deux cas) de la porosité par notre modèle. Ceci peut être dû au choix du rayon et de la porosité initiale, car le choix que nous avons fait équivaut à une densité de bulles d'environ 10^8 cm^{-3} alors que la densité de bulles des expériences varie entre 10^5 cm^{-3} et 10^7 cm^{-3} . [MS00] étudie les systèmes H_2O-CO_2 . Dans les différentes expériences qui nous ont servies de données initiales : il y avait entre 18 ppm et 62 ppm de CO_2 dissout. Au temps final, deux expériences ont moins de 4 ppm de CO_2 dissout, alors que le dernier en a 20 ppm. Cette dernière a pu être mieux modélisée que les deux autres, ce qui confirme que les bulles de ces dernières expériences contiennent un mélange H_2O-CO_2 et ne suivent donc pas les mêmes lois de diffusion que notre modèle qui ne tient compte que de H_2O .
- [MS05] (Mangan, Sisson (2005)) : Les rayons et porosité initiaux étaient inconnus (supposés $R_i = 10^{-6}$ et $\alpha_i = 0.1\%$). Les rayons sont sous-estimés par notre modèle. Par contre il semblerait que l'on ait deux catégories de porosités. Les petites porosités sont surestimées par notre modèle alors que les grandes porosités ($> 30\%$) sont bien estimées. Ceci laisse penser que la nucléation n'a lieu que dans les hautes pressions, puis que la décompression a un effet régulateur.

La porosité initiale choisie était trop grande, car Fig. 3.10 nous montre que si on prend une porosité initiale plus grande, le rayon estimé sera plus petit. Dans ce cas, une expérience a une porosité initiale de 1 %. Peut être aurait-il fallu prendre une porosité initiale plus petite et un rayon initial plus gros que $0.1 \mu m$ car les rayons varient entre $14 \mu m$ et $100 \mu m$. Ceci est en relation avec la densité de bulles pour laquelle on a une différence de 2 à 4 ordres de grandeur. Les expériences ont une densité de bulles qui varient entre 10^4 cm^{-3} et 10^6 cm^{-3} alors que les conditions initiales que nous avons prises imposent une densité de bulle de 10^8 cm^{-3} . L'écart entre les résultats numériques et expérimentaux est donc dû à un mauvais choix du rayon et de la porosité initiale, qui nous empêche de retrouver le comportement attendu.

3.6.4 Cristallisation

Regardons maintenant les cas où il y a eu cristallisation durant la décompression. La cristallisation est le fait qu'une partie du magma se solidifie et se transforme en cristaux. Un tel processus va diminuer la taille de la zone d'influence. La porosité sera limitée par le volume de cristaux, puisque la porosité mesurée prend en compte les cristaux dans le volume total. La porosité calculée sera donc plus grande que la porosité mesurée. Certains types de cristaux ne contiennent pas d'eau (plagioclase, pyroxène et oxyde) et vont donc sursaturer le liquide magmatique restant. Lorsque ces types de cristaux sont les seuls présents, le rayon réel grossit plus vite que la prédiction que l'on va faire car leur zone d'influence se charge en eau tout en étant limitée par les cristaux. La cristallisation est présente dans les travaux de [MS03, SGL⁺10].

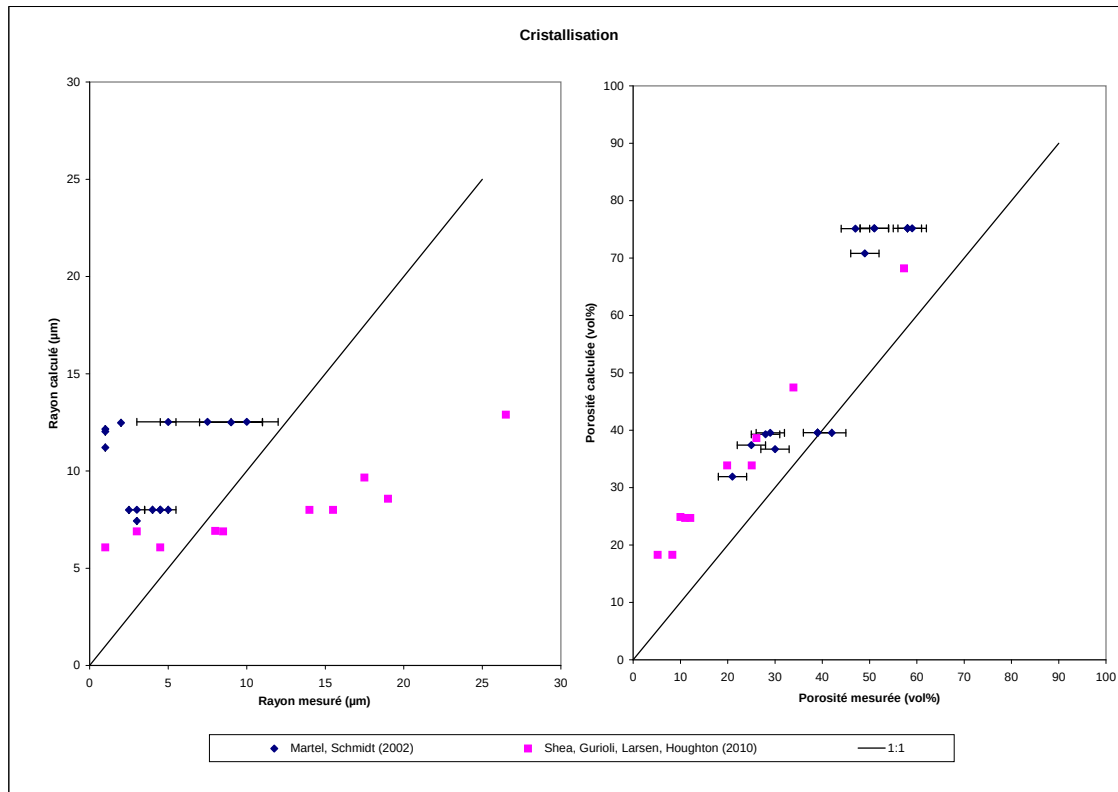


FIGURE 3.18 – Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec cristallisation. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.

On représente (figure 3.18) sur le graphique de gauche le rayon calculé par le programme en fonction du rayon mesuré en laboratoire et sur le graphique de droite la porosité calculée par le programme en fonction de la porosité mesurée en laboratoire. Un examen plus détaillé de chaque série expérimentale est nécessaire pour mieux comprendre les comportements sur les graphiques.

- [MS03] (Martel, Schmidt (2002)) : Les rayons finaux médians ne figurent pas dans l'article, ils nous ont été fournis par C. Martel. La porosité semble être légèrement surestimée par notre modèle pour les hautes pressions et davantage surestimée pour les basses pressions. La porosité mesurée a été recalculée sur une base sans cristal (cela correspond à la porosité de notre modèle), la surestimation ne vient donc pas de là. Il existe de la sursaturation locale du magma autour des cristaux qui va faire croître plus vite les bulles et donc la porosité. Comme dit dans [MS03], le nombre de cristaux ne cesse d'augmenter avec la chute de pression. Notre surestimation de la porosité est donc normale. D'après les conclusions de [MS03], la cristallisation a lieu après que l'exsolution soit achevée. Les types de cristaux présents sont titanomagnétite, orthopyroxène, plagioclase et cristobalite. Ces trois premiers types de cristaux ne contiennent pas d'eau et vont donc sursaturer le liquide magmatique localement, provoquant un surcroît de masse d'eau dans les bulles. Les cristobalites ont des effets inconnus sur le magma environnant. Leur présence est difficilement distinguable, nous ne savons donc pas l'importance de leur perturbations. Certaines expériences ayant des rayons au temps final plus petit qu'au temps initial, on peut penser que la donnée initiale est très variable suivant les types de cristaux présents et leurs concentrations.
- [SGL⁺10] (Shea, Gurioli, Larsen, Houghton (2010)) : Les rayons et porosités initiaux

sont inconnus (supposés $R_i = 10^{-6}m$ et $\alpha_i = 0.1\%$). On constate une surestimation systématique de la porosité. Les cristaux présents sont essentiellement des titanomagnétites. De la même manière que précédemment, surestimer la porosité paraît normal, puisque la cristallisation entraîne une sursaturation du liquide magmatique et donc une croissance plus importante pour les bulles et la porosité associée. La porosité mesurée est en fait calculée à partir de la porosité 2D, qui n'est pas faite sur une base libre de cristal. De plus lors des expériences, il y a nucléation, fragmentation et coalescence. La densité de bulles est recalculée dans [SGL⁺10], et correspond à la densité de bulles que nous avons imposée. Les échantillons sont trop petits pour voir les bulles de rayon supérieur à 0.120 mm , donc le volume moyen des bulles mesurées est inférieur à ce qu'il devrait être. La porosité initiale choisie est donc trop grande, en effet on remarque un alignement des points le long de la droite idéale (1 : 1).

3.6.5 Échappement

Regardons maintenant les cas où il y a eu échappement des bulles durant la décompression. L'échappement est le fait que des bulles sortent de l'échantillon par flottation, nous faisant ainsi perdre une partie des données. Un tel processus va diminuer la porosité et la densité de bulles par quantité de liquide et faire varier aléatoirement le rayon moyen de la population de bulles puisqu'on ne sait pas quelles bulles s'échappent. L'échappement des bulles est présent dans les articles [LG04, MLK08, IMSD07].

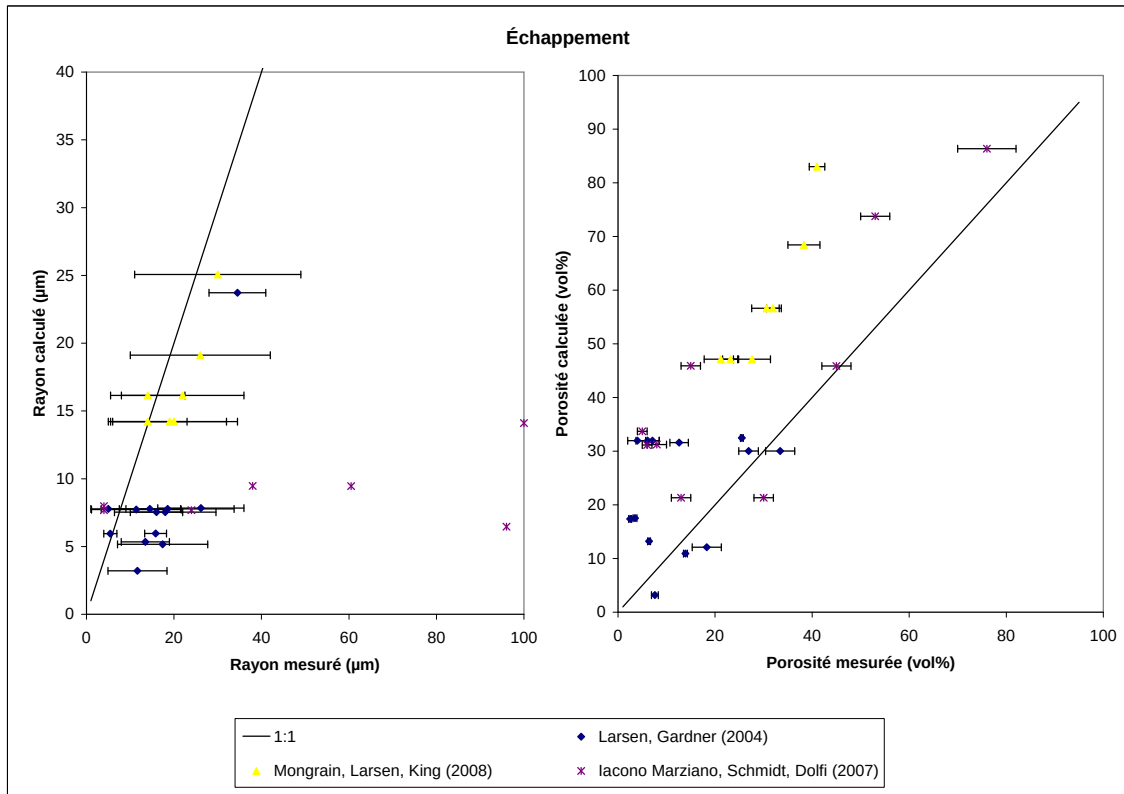


FIGURE 3.19 – Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec échappement de bulles. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.

On représente (figure 3.19) sur le graphique de gauche le rayon calculé par le programme

en fonction du rayon mesuré en laboratoire et sur le graphique de droite la porosité calculée par le programme en fonction de la porosité mesurée en laboratoire. Nous constatons que la porosité est surestimée pour un certain nombre d'expériences. Les tailles de bulles sont plus grandes car l'échappement cause la coalescence. Un examen plus détaillé de chaque série expérimentale est nécessaire pour mieux comprendre les comportements sur les graphiques.

- [LG04] (Larsen, Gardner (2004)) : Les porosités sont surestimées et les rayons sont partiellement sous-estimés au vu de leur erreur de mesure. Les rayons et porosités initiaux sont inconnues (supposés $R_i = 10^{-6}m$ et $\alpha_i = 0.1\%$). D'autres données étaient parfois inconnues telle que la concentration d'eau initiale pour les expériences commençant à plus de 140 MPa pour les phonolites de type LST 3-1-140 et celle commençant à 150 MPa pour les phonolites de type HAE 2-1-95. Toutes les décompressions se font par saut de pression compris entre 5 et 100 MPa. Les expériences que nous représentons ici sont celles où nous n'avons pas de concentration initiale ou bien celles avec une décompression par saut de 100 MPa. Il y a également des bulles d'hydratation. Il existe également une différence de deux ordres de grandeur entre la densité de bulle reportée dans [LG04] et celle que l'on impose. Ceci signifie qu'un phénomène autre que la décompression a fortement influencé l'évolution des bulles. Le modèle se comporte comme nous le pensions en surestimant la porosité. La sous-estimation du rayon est probablement due à la coalescence.
- [MLK08] (Mongrain, Larsen, King (2008)) : Notre modèle surestime de plus en plus la porosité. Les porosités surestimées sont celles des expériences stoppées à 40 MPa avec un temps de repos plus ou moins important (de 60 à 600 secondes) et celles des expériences stoppées à 30, 20 et 10 MPa. Si il y a bien échappement pour les faibles pressions, alors il est normal que notre modèle surestime toutes les porosités. Les rayons sont assez bien estimés au vu de l'erreur de mesure, la coalescence ne serait donc pas dominante.
- [IMSD07] (Iacono Marziano, Schmidt, Dolfi (2007)) : Les données initiales étaient inconnues, nous avons donc fixé les mêmes conditions initiales pour toutes les expériences (supposées $R_i = 8.10^{-6} m$ et $\alpha_i = 13.7\%$). Les rayons dans ce cas se comportent comme attendu, le modèle les sous-estimant fortement. Plusieurs processus interviennent dans ces expériences. La nucléation n'est pas homogène pour trois des cas traités et la décompression n'est pas continue pour deux des cas traités (bien que la plupart des décompressions se fassent par saut de pression, ici seules deux se sont déroulées de cette manière). La coalescence a lieu dans les basses pressions. Finalement, il y a eu échappement, d'où la dispersion et la surestimation des données de porosité.

3.7 Conclusions de la validation

Les simulations de notre modèle retrouvent bien des comportements similaires à des simulations d'anciens modèles. L'application aux différents articles testés nous montre que les simulations sont en accord avec les expériences de liquide sans cristaux dans lesquels il n'y a eu qu'une seule nucléation. Dans les situations plus complexes, nous retrouvons le bon comportement en tenant compte des autres mécanismes qui rentrent en jeu lors de la décompression.

Notre choix d'initialisation semble bon pour certains cas, mais problématique pour d'autres, comme on a pu le voir en comparant nos résultats à ceux de [LHN96]. D'une manière générale, il est important de s'assurer que les données initiales choisies (R_i et α_i) sont en adéquation avec la densité de bulles de l'expérience, excepté quand il y a coalescence.

La décompression peut être vue comme linéaire si on est dans le cas d'équilibre, sinon, comme vu à la section 3.4, les rayons et porosités calculés avec la décompression linéaire

sont sous-estimés par rapport à ceux calculés avec une décompression par sauts de pression successifs. La plupart des expériences ayant des paramètres Θ_D et Θ_V plus petits que le cas testé en section 3.4, la décompression par saut de pression ne posera pas de problème. Pour celles ayant des paramètres plus grands (certaines expériences de [GHC00, LHN96, MS03, BG05]), en revanche, nous avons estimé que la différence créée par les sauts de pression pourrait être plus importante.

Suite aux différents exemples étudiés, on peut conclure que le modèle permet de modéliser l'évolution de la porosité avec une erreur acceptable dans le cas de coalescence et décompression. L'évolution du rayon ne peut être déterminée correctement pour aucun autre processus que la décompression seule, et ce seulement si les données initiales sont connues pour chaque expérience.

Chapitre 4

Passage aux équations cinétiques

Comme on l'a vu dans le chapitre précédent, le modèle monodisperse ne suffit pas toujours pour prévoir l'évolution d'un ensemble de bulles, puisque, par exemple, le phénomène de coalescence ne peut être décrit. Pour cela, nous considérons une population de bulles polydisperse, en d'autres termes, nous allons étudier l'évolution de la fonction de distribution $n(t, v, m, w)$ qui représente la nombre de bulles ayant à un instant $t \geq 0$, un volume v , une masse m et un volume de zone d'influence w .

La croissance monodisperse de bulles sphériques dans un magma a été décrite dans les chapitres précédents par le système d'équations différentielles adimensionnelles (voir [PSA93, LNL04, FCMBJ12]) qui décrit l'évolution en temps d'une bulle de rayon R et de masse M entourée par une région d'influence de rayon S . Je le rappelle ci-dessous :

$$\dot{R} = \frac{R}{\Theta_V} \left(P - P_a - \frac{\Sigma}{R} \right) , \quad (4.1)$$

où P représente la pression du gaz dans la bulle et est reliée à la masse et au rayon par la loi des gaz parfaits $M = PR^3$, quand la température est constante.

$$\dot{M} = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} (r^2 \partial_r C)_{r=R} \quad (4.2)$$

couplée au modèle de diffusion pour la concentration de la masse de gaz dissous dans la région d'influence :

$$d_t C(t, r) = \frac{1}{r^2 \Theta_D} \partial_r (r^2 \partial_r C(t, r)) \quad (4.3)$$

L'équation (4.3) est conditionnée par une condition de solubilité sur le bord interne $r = R$ et une condition de flux nul sur le bord extérieur $r = S$ de la région d'influence :

$$C(t, R) = C_H \sqrt{P(t)} , \quad S^2 \partial_r C(t, S) = 0 . \quad (4.4)$$

Nous supposons qu'au temps initial $t = 0$, le système bulle-magma est à l'équilibre et que la concentration d'eau dans la région d'influence (dans le magma) est uniformément distribuée :

$$C_i = C(0, r) = C_H \sqrt{1 + \frac{\Sigma}{R}} , \quad (4.5)$$

où C_H est une constante donnée par $C_H = K_H \sqrt{P_i}$, avec P_i la pression ambiante dimensionnelle et K_H la constante de solubilité de Henry.

Par hypothèse, le volume W de la région d'influence reste constant :

$$W = S^3 - R^3 = S_0^3 \quad (4.6)$$

Les détails sur ces équations sont donnés au chapitre 1 ou dans [LNL04, FCMBJ12].

Nous décrivons l'évolution de la distribution du groupe de bulles par une équation cinétique de type coagulation-Smoluchowski. Pour un modèle similaire, voir [LGS04] dans lequel la fonction de distribution ne dépend que du volume des bulles et du temps.

Nous ferons ensuite le lien entre les valeurs macroscopiques et microscopiques afin de s'assurer que nous évoluons de manière similaire en monodisperse et polydisperse.

Afin d'écrire l'équation aux dérivées partielles vérifiée par n , nous voulons découpler le système d'équations différentielles ordinaires (4.1)-(4.2) du problème de diffusion (4.3). Nous devons donc approcher le flux d'eau rentrant dans la bulle par diffusion de la région d'influence par une formule explicite (section 4.2).

Ensuite, nous devons modéliser la coalescence de deux bulles, c'est-à-dire donner leur taux de coalescence. Nous définissons ainsi deux noyaux physiques (section 4.3).

Enfin, nous redéfinirons le modèle en deux dimensions (section 4.4).

4.1 Description cinétique

Notons Ω l'espace borné défini par

$$\Omega = [v_{min}, v_{max}] \times [m_{min}, m_{max}] \times [w_{min}, w_{max}] \quad (4.7)$$

et par $d\omega = dv dm dw$ son élément infinitésimal. Ici et dans la suite v représente le volume de la bulle, m sa masse et w le volume de sa région d'influence. La fonction de distribution $n = n(t, \omega)$, avec $(t, \omega) = (t, v, m, w) \in [0, 1] \times \Omega$, représente le nombre de bulles ayant leur paramètres entre ω et $\omega + d\omega$ au temps t par volume de magma. La croissance des bulles par décompression, diffusion et coalescence est décrite par l'équation cinétique suivante :

$$\partial_t n + \partial_v(\Phi n) + \partial_m(\Xi n) + \partial_w(\Gamma n) = Q(n), \quad (4.8)$$

où $\Phi = \Phi(t, v, m, w)$, $\Xi = \Xi(t, v, m, w)$ et $\Gamma = \Gamma(t)$ sont respectivement les taux de croissance de chaque variable d'espace v , m et w et sont respectivement déduits de (4.1), (4.2) et (4.6) :

$$\Phi(t, v, m, w) = \frac{3}{\Theta_V} \left(m - v P_a(t) - \Sigma v^{(2/3)} \right) \quad (4.9)$$

$$\Xi(t, v, m, w) = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} F(t, v, m, w) \quad (4.10)$$

avec $F(t, v, m, w)$ à déterminer (voir section 4.2) et

$$\Gamma(t) = 0, \quad (4.11)$$

par hypothèse, le volume de la zone d'influence est constant pendant la décompression et la diffusion (voir (4.6)). Nous remarquons que (4.9) est la réécriture en volume de (4.1).

L'opérateur $Q(n)$ que l'on présentera dans la section 4.3 et le chapitre 5, représente le terme de coalescence.

Lien entre les variables polydisperses et monodisperses

La porosité peut être mesurée aux niveaux microscopique et mésoscopique, elle résulte du rapport entre le volume occupé par les bulles sur le volume total, qui est égal à la somme du volume des bulles et du volume de liquide :

$$\alpha(t) = \frac{\text{volume des bulles}}{\text{volume des bulles} + \text{volume du liquide}} \quad (4.12)$$

Au niveau microscopique, on avait :

$$\alpha(t) = \left(\frac{R}{S} \right)^3 = \frac{R^3}{R^3 + S_0^3}, \quad (4.13)$$

avec S_0 constante. Le volume de la zone d'influence, S_0^3 , représente le volume de liquide interagissant avec la bulle que l'on considère.

Dans le cas polydisperse, nous devons d'abord définir le volume total occupé par les bulles et celui occupé par le magma. Pour cela, définissons les moments de la fonction de distribution $n(t, v, m, w)$:

$$\mathcal{M}_{i,j,k}(t) = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty v^i m^j w^k n(t, v, m, w) dv dm dw, \quad (4.14)$$

Le moment d'ordre 0 ($i + j + k = 0$) représente le nombre de bulles, $\mathcal{M}_{0,0,0}(t)$; les moments d'ordre 1 ($i + j + k = 1$) représentent le volume total occupé par les bulles, $\mathcal{M}_{1,0,0}(t)$, la masse d'eau totale contenue dans les bulles, $\mathcal{M}_{0,1,0}(t)$, et le volume total occupé par le liquide, $\mathcal{M}_{0,0,1}(t)$. Ainsi, pour une population de bulles (niveau mésoscopique), la porosité sera définie par :

$$\alpha(t) = \frac{\mathcal{M}_{1,0,0}(t)}{\mathcal{M}_{1,0,0}(t) + \mathcal{M}_{0,0,1}(t)} \quad (4.15)$$

On remarque que si $Q(n) = 0$ (pas de coalescence), alors $\mathcal{M}_{0,0,0}(t)$ est constant, et on verra que si $\Phi = \Xi = \Gamma = 0$ (coalescence seule), alors les moments d'ordre 1 seront conservés : $\mathcal{M}_{1,0,0}$, $\mathcal{M}_{0,1,0}$ et $\mathcal{M}_{0,0,1}$ sont constants, ainsi la porosité est également constante.

Lemme 4.1.1 . Posons $N(t) = \mathcal{M}_{0,0,0}(t)$.

Lorsqu'il n'y a pas coalescence, $Q(n) = 0$, pour une fonction de distribution n à support compact en $t = 0$, si $F(t, v, 0, w) \geq 0$ et $\lim_{m \rightarrow \infty} F(t, v, m, w) < 0$, alors l'équation cinétique vérifiera $\dot{N}(t) = 0$.

Démonstration

On intègre l'équation cinétique en se rappelant que $\Gamma(t) = 0$. On a donc une relation entre Φ et Ξ :

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt}(t) = & -\frac{1}{\Theta_V} \int_0^\infty \int_0^\infty [\Phi(t, v, m, w) n(t, v, m, w)]_{v=0}^\infty dm dw + \\ & -\frac{1}{\Theta_D} \int_0^\infty \int_0^\infty [\Xi(t, v, m, w) n(t, v, m, w)]_{m=0}^\infty dv dw \end{aligned} \quad (4.16)$$

Or, par hypothèse, n est à support compact en $t = 0$: $\lim_{v \rightarrow \infty} n(0, v, m, w) = 0$ et $\lim_{m \rightarrow \infty} n(0, v, m, w) = 0$. Pour que cela reste vrai en tout temps, il faut que $\lim_{v \rightarrow \infty} \Phi(t, v, m, w) < 0$ pour tout temps t , toute masse m et tout volume d'influence w , ce qui est vrai, et $\lim_{m \rightarrow \infty} \Xi(t, v, m, w) < 0$ pour tout temps t , tout volume v et tout volume d'influence w .

Pour que les intégrales soient nulles, il faut également que $n(t, v = 0, m, w) = 0$ pour tout temps t , toute masse m et tout volume d'influence w et que $n(t, v, m = 0, w) = 0$ pour tout temps t , tout volume v et tout volume d'influence w . Une condition suffisante pour cela est que $\Phi(t, v = 0, m, w) > 0$ pour tout temps t , toute masse m et tout volume d'influence w , ce qui est vrai, et $\Xi(t, v, m = 0, w) \geq 0$ pour tout temps t , tout volume v et tout volume d'influence w . $\square$

Pour avoir conservation de la quantité de bulles $\mathcal{M}_{0,0,0}(t)$, il nous faut donc une expression du flux telle que $F(t, v, 0, w) \geq 0$ et $\lim_{m \rightarrow \infty} F(t, v, m, w) < 0$.

4.2 Approche des taux de croissance

Comme on l'a vu, les taux de croissance de l'équation (4.8) sont Φ défini par (4.9), Ξ défini par (4.10) et Γ défini par (4.11), toutefois pour que Ξ soit entièrement défini, il

nous faut une expression du flux, $F(t, v, m, w)$, à l'interface de la bulle et du magma. Ceci revient à approcher la solution de l'équation de diffusion en tout temps pour toute donnée initiale. Nous approchons le flux de deux manières : en utilisant les fonctions de Green, et par la méthode présentée en section 2.8.

Une comparaison numérique de ces deux flux est faite en chapitre 6.

4.2.1 Approche du flux par une formule de Green

Dans cette section, on cherche à résoudre l'équation de diffusion (4.3). En négligeant le mouvement de la paroi de la bulle, nous devons trouver une solution explicite du problème :

$$\Theta_D r^2 \partial_t C = \partial_r(r^2 \partial_r C), \quad C(R, t) = C_H \sqrt{P}, \quad \partial_r C(S, t) = 0 \quad (4.17)$$

avec une condition initiale uniforme en $r \in [R, S]$: $C(0, r) = C_i, \forall r$.

En appliquant le changement d'inconnue :

$$T(t, r) = C(t, r) - C_H \sqrt{P(t)}$$

on obtient le problème suivant, pour $t \geq 0, r \in [R, S]$, avec $L = S - R$

$$\begin{cases} \Theta_D \partial_t T = \frac{1}{r^2} \partial_r(r^2 \partial_r T) + \Theta_D g(t, r) \\ T(0, r) = C(0, r) - C_H \sqrt{P(0)} \\ T(t, R) = 0 \\ \partial_r T(t, S) = 0 \end{cases} \quad (4.18)$$

où nous posons

$$g(t, r) = -C_H \frac{\dot{P}(t)}{2\sqrt{P(t)}}.$$

Pour résoudre (4.18), on va utiliser les fonctions de Green (voir [CBHSL11, GLi]). On a la relation suivante entre les notations de [GLi] et les nôtres : $\alpha = k = 1/\Theta_D$, $k_2 = S$, $h_2 = -1$, $a = R$ et $b = S$.

Remarquons que $T(0, r)$ est constante en r , la fonction T s'écrira donc de la manière suivante :

$$T(t, r) = \int_{r'=a}^b G(r, t|r', 0) T(0, r') 4\pi r'^2 dr' \quad (4.19)$$

$$+ \int_{\tau=0}^t \int_{r'=a}^b G(r, t|r', \tau) g(\tau, r') 4\pi r'^2 dr' d\tau \quad (4.20)$$

où $G(r, t|r', \tau)$ est la fonction de Green.

Dans le cas d'un domaine sphérique décrit de manière radiale avec une condition de Dirichlet à gauche et une condition de Neumann à droite, il nous faut utiliser la fonction

de Green notée G_{RS12} dans [GLi] et défini pour $\frac{t-\tau}{(b-a)^2\Theta_D} < 0.022$ par :

$$\begin{aligned}
 G_{RS12}(r, t \mid r', \tau) = & \frac{1}{8\pi r r' [\pi\alpha(t-\tau)]^{1/2}} \left\{ \exp \left[-\frac{(r-r')^2}{4\alpha(t-\tau)} \right] \right. \\
 & - \exp \left[-\frac{(r+r'-2a)^2}{4\alpha(t-\tau)} \right] + \exp \left[-\frac{(2b-r-r')^2}{4\alpha(t-\tau)} \right] \Big\} \\
 & - \frac{B_2}{4\pi r r' b} \exp \left[B_2 \frac{(2b-r-r')}{b} + B_2^2 \frac{\alpha(t-\tau)}{b^2} \right] \\
 & \times \operatorname{erfc} \left[\frac{2b-r-r'}{[4\alpha(t-\tau)]^{1/2}} + \frac{B_2 [\alpha(t-\tau)]^{1/2}}{b} \right]
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

ou, définie pour $\frac{t-\tau}{(b-a)^2\Theta_D}$ grand par :

$$\begin{aligned}
 G_{RS12}(r, t \mid r', \tau) = & \frac{1}{2\pi(b-a)r r'} \sum_{m=1}^{\infty} \exp \left[-\frac{\beta_m^2 \alpha(t-\tau)}{(b-a)^2} \right] \\
 & \frac{\beta_m^2 + H_2^2}{\beta_m^2 + H_2^2 + H_2} \sin \left(\beta_m \frac{r-a}{b-a} \right) \sin \left(\beta_m \frac{r'-a}{b-a} \right)
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

avec $H_2 = B_2 R_2$, $B_2 = -1$ et $R_2 = (b-a)/b$ et β_m solution de

$$\beta_m \cot(\beta_m) = -H_2$$

Le temps que nous considérons est petit $t \in [0, 1]$, mais lorsque la porosité augmente, la distance L rétrécit et nous travaillons essentiellement sur des cas avec Θ_D petit, nous allons donc travailler avec (4.22). Ceci entraînera une erreur, car (4.22) n'est valable que pour $\tau < t - \varpi\Theta_D(b-a)^2$ avec ϖ grand et > 0.022 . Le cas où Θ_D grand ne nous intéresse pas car dans cette limite, $\dot{M} = 0$ et donc le flux est nul. Il n'y a donc pas besoin de chercher une autre expression du flux.

4.2.1.1 Solution de Green pour $\Theta_D \ll 1$

Proposition 4.2.1 *Si $\Theta_D \ll 1$, la solution de (4.18) calculée en utilisant le formalisme de Green se lit :*

$$T(t, r) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{r} B_m C_m \sin \left(\beta_m \frac{r-R}{L} \right) (I_m^\infty(t) + I_m^0(t, r)) \tag{4.23}$$

où, pour $m \in \mathbb{N}^*$, β_m sont les solutions positives de :

$$\beta_m \cot(\beta_m) = -H_2, \quad H_2 = \frac{-L}{S} = -1 + \alpha^{1/3}$$

les coefficients B_m et C_m sont respectivement définis par :

$$B_m = \frac{\beta_m^2 + H_2^2}{\beta_m^2 + H_2^2 + H_2} \tag{4.24}$$

$$C_m = \frac{2}{\beta_m} R, \tag{4.25}$$

la fonction $I_m^\infty(t)$ est donnée par l'intégrale :

$$I_m^\infty(t) = - \int_0^t \exp\left(\frac{-\beta_m^2(t-\tau)}{\Theta_D L^2}\right) \frac{C_H \dot{P}(\tau)}{2\sqrt{P(\tau)}} d\tau \quad (4.26)$$

et la fonction $I_m^0(t, r)$ est donnée par :

$$I_m^0(t, r) = \left(C(t_0, r) - C_H \sqrt{P(t_0)}\right) \exp\left[-t \frac{\beta_m^2}{\Theta_D L^2}\right] \quad (4.27)$$

Démonstration

Nous posons $a = R$, $b = S$, $L = b - a$, $\alpha = 1/\Theta_D$. Nous allons d'abord résoudre la première intégrale (4.19) qui représente les conditions initiales pour le cas $\frac{t-\tau}{(b-a)^2\Theta_D}$ grand :

$$\text{On pose } B_m = \frac{\beta_m^2 + H_2^2}{\beta_m^2 + H_2^2 + H_2}$$

$$\begin{aligned} A_1 &= \int_R^S \frac{T(0, r) 4\pi r'^2}{2\pi L r r'} \sum_{m=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{\beta_m^2 t}{\Theta_D L^2}\right] B_m \sin\left(\beta_m \frac{r-R}{L}\right) \sin\left(\beta_m \frac{r'-R}{L}\right) dr' \\ &= T(0, r) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2}{Lr} \exp\left[-\frac{\beta_m^2 t}{\Theta_D L^2}\right] B_m \sin\left(\beta_m \frac{r-R}{L}\right) \int_R^S r' \sin\left(\beta_m \frac{r'-R}{L}\right) dr' \end{aligned}$$

on intègre par parties et on utilise le fait que $\beta_m \cos(\beta_m) = -H_2 \sin(\beta_m)$. On obtient :

$$\begin{aligned} A_1 &= T(0, r) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2}{Lr} \exp\left[-\frac{\beta_m^2 t}{\Theta_D L^2}\right] B_m \sin\left(\beta_m \frac{r-R}{L}\right) \\ &\quad \times \left(\int_R^S \frac{L}{\beta_m} \cos\left(\beta_m \frac{r'-R}{L}\right) dr' - \left[r' \frac{L}{\beta_m} \cos\left(\beta_m \frac{r'-R}{L}\right) \right]_R^S \right) \\ &= T(0, r) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2}{Lr} \exp\left[-\frac{\beta_m^2 t}{\Theta_D L^2}\right] B_m \sin\left(\beta_m \frac{r-R}{L}\right) \\ &\quad \times \left(-S \frac{L}{\beta_m} \cos(\beta_m) + R \frac{L}{\beta_m} + \left(\frac{L}{\beta_m}\right)^2 \sin(\beta_m) \right) \\ &= T(0, r) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2}{Lr} \exp\left[-\frac{\beta_m^2 t}{\Theta_D L^2}\right] B_m \sin\left(\beta_m \frac{r-R}{L}\right) R \frac{L}{\beta_m} \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} B_m \frac{2R}{r\beta_m} \sin\left(\beta_m \frac{r-R}{L}\right) T(0, r) \exp\left[-\frac{\beta_m^2 t}{\Theta_D L^2}\right] \end{aligned}$$

En utilisant (4.27) et (4.25), on a :

$$A_1 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{r} B_m C_m \sin\left(\beta_m \frac{r-R}{L}\right) I_m^0(t, r) \quad (4.28)$$

Pour l'intégrale (4.20), comme $g(\tau, r')$ ne dépend pas de l'espace, nous pouvons l'écrire

sous la forme $g(\tau, r') = g(\tau)$ et on obtient :

$$\begin{aligned}
 A_2 &= \int_0^t \int_R^S \sum_{m=1}^{\infty} \exp \left[-\frac{\beta_m^2(t-\tau)}{\Theta_D L^2} \right] \sin \left(\beta_m \frac{r-R}{L} \right) \\
 &\quad \times \sin \left(\beta_m \frac{r'-R}{L} \right) \frac{B_m g(\tau) 4\pi r'^2}{2\pi L r r'} dr' d\tau \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2B_m}{Lr} \sin \left(\beta_m \frac{r-R}{L} \right) \int_0^t \exp \left[-\frac{\beta_m^2(t-\tau)}{\Theta_D L^2} \right] g(\tau) d\tau \\
 &\quad \times \int_R^S r' \sin \left(\beta_m \frac{r'-R}{L} \right) dr'
 \end{aligned}$$

On pose

$$I_m^\infty = \int_0^t \exp \left[-\frac{\beta_m^2(t-\tau)}{\Theta_D L^2} \right] g(\tau) d\tau$$

et, comme fait précédemment, on obtient

$$\int_R^S r' \sin \left(\beta_m \frac{r'-R}{L} \right) dr' = R \frac{L}{\beta_m}$$

Finalement :

$$A_2 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2B_m R}{\beta_m r} \sin \left(\beta_m \frac{r-R}{L} \right) \int_0^t \exp \left[-\frac{\beta_m^2(t-\tau)}{\Theta_D L^2} \right] g(\tau) d\tau$$

En utilisant (4.26) et (4.25), on a :

$$A_2 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{r} B_m C_m \sin \left(\beta_m \frac{r-R}{L} \right) I_m^\infty(t, r) \quad (4.29)$$

On somme A_1 et A_2 , et la solution $T(t, r)$ est donnée par (4.23). $\square$

Nous calculons le flux $F_G(t, r) = r^2 \partial_r T(t, r)$ à partir de la solution de Green (4.23), on obtient :

$$F_G(t, R) = R^2 (\partial_r T)(t, R) \quad (4.30)$$

Finalement, si $T(0, r)$ n'est pas singulière en $r = R$, alors nous obtenons grâce aux relations (4.23) et (4.26), le flux simplifié $F_G(t, R)$ suivant :

$$F_G(t, R) = \frac{R}{L} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m B_m C_m (I_m^\infty(t) + I_m^0(t, R)) \quad (4.31)$$

Rappelons que les coefficients β_m sont les solutions de l'équation $X + H_2 \tan(X) = 0$.

Pour le calcul de I_m^∞ comme on ne connaît les dérivées de $P(t)$ qu'au temps t , on utilise l'approximation suivante :

$$I_m^\infty(t) = \hat{I}_m(t) \hat{C}(t) \quad (4.32)$$

$$\text{avec } \hat{C}(t) = -C_H \frac{\dot{P}(t)}{2\sqrt{P(t)}} \quad (4.33)$$

et en posant $\lambda = \beta_m^2 / (\Theta_D L^2)$, l'intégrale devient :

$$\hat{I}_m(t) = \int_0^t \exp(-\lambda(t-\tau)) d\tau = \frac{1 - \exp(-\lambda t)}{\lambda}$$

Comme l'équation cinétique ne dépend pas de P mais de M et V , on remplace P grâce à la loi des gaz parfaits $M = PV$. On a alors :

$$F_G(t, R) \approx \frac{R}{L} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m B_m C_m \left(I_m^0 - C_H \hat{I}_m(t) \frac{\dot{M}V - \dot{V}M}{2V^2} \sqrt{\frac{V}{M}} \right) \quad (4.34)$$

En notant $A = \left(\frac{R}{L} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m B_m C_m \hat{I}_m(t) \right)$ et $B = \left(\frac{R}{L} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m B_m C_m I_m^0(t, R) \right)$ on obtient alors en remplaçant dans (4.2) :

$$\dot{M}(t) = 3\rho_m \frac{AC_H \frac{\dot{V}M}{V} + 2B\sqrt{MV}}{2\Theta_D \sqrt{VM} + 3\rho_m AC_H} \quad (4.35)$$

Le taux de croissance de la masse sera donc donné par

$$\Xi(t, V, M, W) = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} F_G(t, R)$$

avec le flux défini par

$$F_G(t, R) = \Theta_D \frac{AC_H \frac{\dot{V}M}{V} + 2B\sqrt{MV}}{2\Theta_D \sqrt{VM} + 3\rho_m AC_H} \quad (4.36)$$

4.2.2 Approximation "asymptotique" du flux

On reprend le résultat énoncé dans la section 2.8 qui nous définit un taux de croissance pour la masse, M , et on pose

$$F(t, v, m, w) = A \left(\frac{\left(-C_H w \rho_m + \sqrt{C_H^2 w^2 \rho_m^2 + 4w \rho_m v C_0} \right)^2}{12\rho_m v} - \frac{m}{3\rho_m} \right), \quad (4.37)$$

Le coefficient A est pour le moment indéterminé, sa valeur sera fixée en chapitre 6 par des tests numériques. La concentration C_0 représente la quantité d'eau totale par bulle et est supposé indépendante de v , m et w , constante au cours du temps.

Remarque 4.2.2 Les deux flux que nous venons de définir, vérifient les hypothèses du lemme 4.1.1.

4.3 Approche de la coalescence

Comme montré par les simulations numériques du chapitre 3 et par de récents travaux en volcanologie (voir [BG05, FCMBJ12]), la coalescence de bulles de gaz qui croissent par décompression et exsolution dans le conduit du volcan est un phénomène important et peut lourdement influencer le type d'éruption.

On choisit de modéliser la coalescence des bulles de gaz par l'équation de type coagulation-Smoluchowski (4.38).

$$\partial_t f = \frac{1}{2} \int_0^x H(x', x - x') f(x') f(x - x') dx' - \int_0^\infty H(x, x') f(x) f(x') dx' \quad (4.38)$$

La première intégrale est appelée terme de gain, elle quantifie la formation de bulles de taille x . La seconde intégrale est appelée terme de perte et quantifie la disparition des bulles de taille x .

La première forme de cette équation a été introduite par M.Smoluchowski [Smo16, Smo17] afin de modéliser la coagulation de particules colloïdales, c'est-à-dire de particules qui vont interagir entre elles et entre autres se réunir tout en conservant certaines quantités. Cette équation a aussi souvent été appelée "équation de Smoluchowski", "équation de coalescence" et "équation de coagulation" (voir [Dra72, Lee01]). Aujourd'hui, les principaux domaines d'application comprennent notamment la formation d'aérosols (voir [Fri61, TY99]), la croissance des hydrométéores (par exemple [SP80, Bro95]), la croissance de polymères (c.f. [Lus73, Don87]), les réactions nucléaires (par exemple [MP92]) et l'astrophysique (en particulier la croissance planétaire, par exemple [Lee00]).

Cette équation a été largement étudiée que ce soit du point de vue théorique (voir par exemple [DE87, Don87, DE88, LM04]) ou numérique (voir par exemple [EEE94, Kri95, Bab99] ou les citations du chapitre 5). Ces études sont souvent en une dimension, comme on le verra, nous avons à étudier la coalescence multidimensionnelle.

Nous allons maintenant définir le terme de coalescence $Q(n)$ de l'équation cinétique (4.8). Notons $\omega = (v, m, w)$ où v est le volume de la bulle, m , sa masse et w le volume de sa région d'influence, et considérons deux bulles de variable d'espace ω' et ω'' qui vont coalescer pour ne laisser plus qu'une bulle de variable d'espace ω . Nous pouvons décrire le processus de coalescence par l'opérateur intégrale de coalescence :

$$Q(n)(t, \omega) = \frac{1}{2} \int_0^\omega H(t, \omega', \omega - \omega') n(t, \omega') n(t, \omega - \omega') d\omega' - n(t, \omega) \int_\Omega H(t, \omega', \omega) n(t, \omega') d\omega' \quad (4.39)$$

où H est le noyau de coalescence et représente le taux de coalescence et sera décrit plus tard. Le noyau de coalescence H doit être symétrique, $H(t, \omega, \omega') = H(t, \omega', \omega)$, et positif $H(t, \omega, \omega') > 0$.

Commençons par donner les relations liant les deux bulles qui ont coalescé à la nouvelle bulle. Comme nous intégrons par rapport à ω , les volumes, masses et volumes d'influence des deux bulles vont s'additionner afin de conserver ces trois quantités, ceci se traduit par la conservation des moment d'ordre 1 (voir section 5.1.1). Il est naturel en physique de supposer que dans le processus de coalescence, les masses des deux bulles s'additionnent (conservation de la masse), tout comme le volume des régions d'influence (magma incompressible). Nous supposons pour plus de simplicité que le volume des bulles s'additionne également. Ceci nous amène aux relations suivantes :

$$v = v' + v'' \quad (4.40)$$

$$m = m' + m'' \quad (4.41)$$

$$w = w' + w'' \quad (4.42)$$

En supposant qu'après la coalescence, le masse, le volume et la pression interne de la bulle satisfont la loi des gaz parfait, $m = pv$, la combinaison convexe suivante définit la pression dans la bulle créée par coalescence :

$$p = \delta p' + (1 - \delta) p'', \quad \delta = \frac{v'}{v' + v''} \quad (4.43)$$

4.3.1 Présentation d'un noyau physique

Nous présentons maintenant un noyau de coalescence $H(t, \omega', \omega'')$, qui donne la fréquence de coalescence de deux bulles de variables d'espace $\omega' = (v', m', w')$ et $\omega'' = (v'', m'', w'')$. Ce noyau a été déterminé en premier lieu dans [CBSM12]. Nous supposons

que les bulles effectuent une coalescence planaire, voir Fig.4.1 dans laquelle nous décrivons les différentes dimensions du problème. Cela signifie que le contact entre deux bulles a un profil plat.

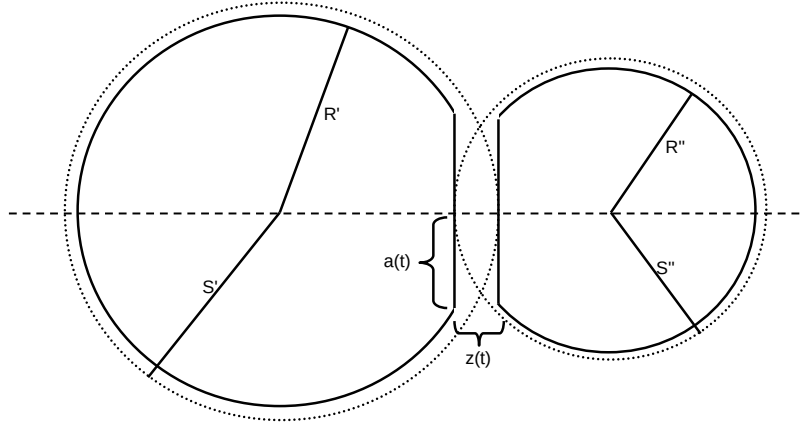


FIGURE 4.1 – Coalescence planaire de deux bulles

Nous rappelons que les bulles ne se rapprochent que par croissance. Dans [CBSM12], les auteurs supposent que, dans le processus de coalescence, la masse de magma présente entre les deux bulles reste constante. Le noyau de coalescence H ne va donc dépendre que du taux de croissance du rayon de la bulle, $\Psi(t, v, m, w)$ et pas du taux de croissance de la masse. Le taux de croissance du rayon de la bulle est déduit de (4.9) en notant que $\Phi(t, v, m, w) = 3v^{(2/3)}\Psi(t, v, m, w)$:

$$\Psi(t, v, m, w) = \frac{1}{\Theta_V} \left(\frac{m}{v^{2/3}} - v^{1/3}(1-t) - \Sigma \right), \quad (4.44)$$

les constantes Σ et Θ_V sont les mêmes que dans le cas monodisperse. Le noyau H est inversement proportionnel à un temps, nous cherchons donc un temps de coalescence. La masse de magma présente entre les deux bulles est donnée par :

$$M_p(t) = \rho_m \pi z(t) a^2(t) \quad (4.45)$$

où ρ_m est la densité du magma, $z(t)$ est la distance entre les bords des deux bulles et $a(t)$ est la demi-longueur du profil plat de la bulle (voir Fig.4.1). Nous supposons que $a(t)$ croît linéairement en temps :

$$a(t) = a_0 + ct, \quad (4.46)$$

où la vitesse d'aminicissement c est définie, par exemple, par la moyenne des taux de croissance pour le rayon de chaque bulle :

$$c = \frac{\Psi' + \Psi''}{2}, \quad (4.47)$$

et où a_0 est une fraction ϵ de la moyenne des rayons des deux bulles, déterminée par des analyses statistiques sur les expériences :

$$a_0 = \epsilon \frac{(v')^{(1/3)} + (v'')^{(1/3)}}{2}. \quad (4.48)$$

En considérant que la masse $M_p(t)$ est constante en temps, et en notant t_f l'instant où les deux bulles coalescent (le temps final), on obtient :

$$\rho_m \pi z(0) a_0^2 = M_p(0) = M_p(t_f) = \rho_m \pi z(t_f) a^2(t_f). \quad (4.49)$$

De ceci, il est facile de déduire t_f :

$$t_f = \frac{a_0}{c} \left(\sqrt{\frac{z_0}{z_f}} - 1 \right), \quad (4.50)$$

Si $z_0 < z_f$ alors la bulle a déjà coalescé et comme nous cherchons $t \geq 0$, nous fixons $t_f = 0$. De la même manière si la vitesse d'amincissement est négative, il ne peut pas y avoir de coalescence, nous fixons donc $t_f = \infty$ dans ce cas. Tout ceci peut s'exprimer comme :

$$t_f = \frac{a_0}{(c)_+} \left(\sqrt{\frac{z_0}{z_f}} - 1 \right)_+, \quad (4.51)$$

où $z_0 = z(0)$ est la distance initiale entre les bulles et sera détaillée plus tard et $z_f = z(t_f)$ est donné par la physique du magma et est l'épaisseur minimale entre les bulles avant que le film de magma ne se casse (en supposant que la bulle ainsi formée atteigne une géométrie sphérique instantanément).

La distance initiale z_0 peut être exprimée en termes du volume de chaque bulle, v' et v'' , et du volume de leur région d'influence, w' et w'' :

$$z_0 = (w' + v')^{(1/3)} + (w'' + v'')^{(1/3)} - (v')^{(1/3)} - (v'')^{(1/3)} \quad (4.52)$$

Nous pouvons maintenant définir le noyau de coalescence $H = H(t, \omega', \omega'')$ comme l'inverse de t_f :

$$H(t, \omega', \omega'') = \frac{(\Psi' + \Psi'')_+}{\epsilon((v')^{(1/3)} + (v'')^{(1/3)})} \frac{\sqrt{z_f}}{(\sqrt{z_0} - \sqrt{z_f})_+} \quad (4.53)$$

avec Ψ' et Ψ'' les taux de croissance du rayon de la bulle donnés par (4.44), z_0 donné par (4.52), et ϵ et z_f définis par les propriétés physiques du magma et les expériences. On remarque que le noyau H est positif grâce aux parties positives de la vitesse d'amincissement et de $\sqrt{z_0} - \sqrt{z_f}$ et qu'il est symétrique.

4.3.2 Présentation d'un noyau simplifié

Comme il n'est pas toujours facile d'obtenir des valeurs pour les constantes ϵ et z_f nécessaires à (4.53), nous avons décidé de regarder un noyau plus simple. On considère deux bulles dont les rayons grossissent à des vitesses Ψ et Ψ' et qui sont à une distance z_0 l'une de l'autre (cf fig. 4.2).

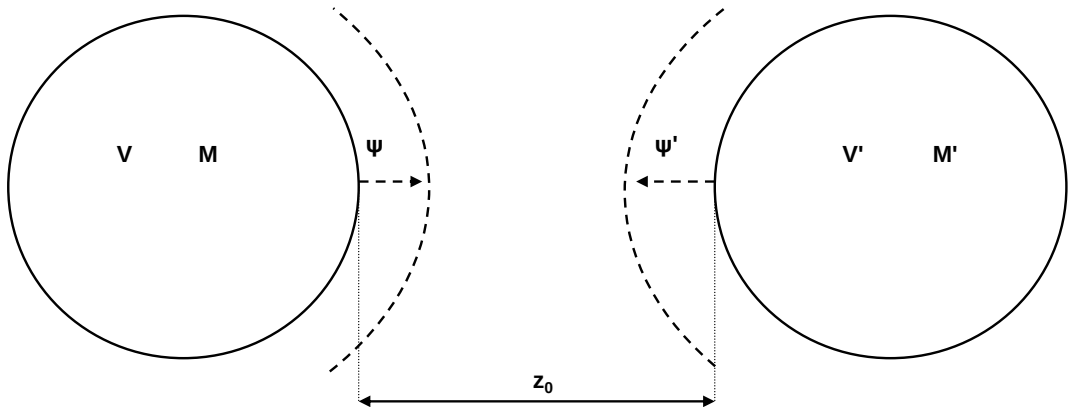


FIGURE 4.2 – Noyau simplifié

Nous considérons la vitesse de rapprochement des parois des deux bulles, $\Psi + \Psi'$, avec la vitesse de croissance Ψ donnée par (4.44) et la distance z_0 donnée par (4.52). Le temps qu'il faut pour que les bulles se touchent, c'est-à-dire pour que $z = 0$ est $t_f = \frac{z_0}{\Psi + \Psi'}$, d'où le noyau simplifié :

$$H(t, \omega, \omega') = \left(\frac{\Psi + \Psi'}{z_0} \right)_+ \quad (4.54)$$

4.3.3 Étude des noyaux

On s'intéresse aux solutions stationnaires du problème de coalescence : $Q(f) = 0$.

Proposition 4.3.1 . *Les solutions stationnaires de l'équation de coalescence pour les noyaux (4.53) et (4.54) sont de la forme :*

$$f(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } m > \Sigma v^{2/3} \\ g(\omega) & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.55)$$

avec g une fonction quelconque.

Démonstration

Nous utilisons la notation $f(\omega) = f(t, \omega)$ pour la démonstration. Puisque toute solution de $Q(f) = 0$ est également solution de

$$\int_0^\infty Q(f) d\omega = 0 ,$$

on étudie cette égalité. On a :

$$0 = \int_0^\infty Q(f) d\omega = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty f(\omega) f(\omega') H(t, \omega, \omega') d\omega' d\omega .$$

Puisque f et H sont positifs, il vient que $f(\omega) \neq 0$ si et seulement si $H(t, \omega, \omega') = 0$. Comme

$$\frac{\sqrt{z_f}}{\epsilon((v)^{(1/3)} + (v')^{(1/3)}) (\sqrt{z_0} - \sqrt{z_f})_+} \geq 0$$

et $z_0 \geq 0$, on obtient $(\Psi + \Psi')_+ = 0$.

Posons, pour $t \in [0, 1]$,

$$k(t) = \Theta_V(\Psi + \Psi') = \frac{m}{v^{2/3}} - (1-t)v^{1/3} - \Sigma + \frac{m'}{(v')^{2/3}} - (1-t)(v')^{1/3} - \Sigma .$$

On note que $H = 0$ si $k \leq 0$. Comme k est croissante au cours du temps, si $k(1) \leq 0$, alors $H(t, \omega, \omega') = 0$ pour tout temps $t \in [0, 1]$.

Or

$$k(1) = \frac{m}{v^{2/3}} + \frac{m'}{(v')^{2/3}} - 2\Sigma$$

et $k(1) < 0$ si les variables vérifient la relation suivante :

$$\frac{m}{v^{2/3}} + \frac{m'}{(v')^{2/3}} \leq 2\Sigma \quad (4.56)$$

• Supposons que $\Psi > 0$, $\Psi' < 0$ avec $\Psi + \Psi' < 0$. Soit $m > \Sigma v^{2/3}$, on a alors $H(1, \omega, \omega) > 0$,

donc $f(\omega) = 0$ pour un tel choix.

• Supposons maintenant que $m < \Sigma v^{2/3}$ et $m' < \Sigma (v')^{2/3}$, on a alors que

$H(t, \omega, \omega') = 0$, en effet, Ψ et Ψ' sont tout deux négatif dans ce cas.

De plus $H(t, \omega, \omega) = 0$, donc la fonction f au point ω peut être non nulle en tout temps.

Les solutions stationnaires sont donc de la forme :

$$f(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } m > \Sigma v^{2/3} \\ g(\omega) & \text{sinon} \end{cases}$$

□

4.4 Passage à un modèle bidimensionnel

Comme $\Gamma(t) = 0$ et que la coalescence conserve le volume total occupé par le liquide $\mathcal{M}_{0,0,1}(t) = \mathcal{M}_{0,0,1}(0)$ (voir chapitre 5), on peut réduire l'équation à deux dimensions en utilisant l'expression microscopique de la porosité (4.13). En supposant que la porosité locale de chaque bulle est égale à la porosité globale, on peut définir le volume d'influence w pour une bulle de volume v et de masse m par :

$$w = v \frac{1 - \alpha(t)}{\alpha(t)} \quad (4.57)$$

où $\alpha(t)$ est donné par (4.15) avec le volume du liquide, $\mathcal{M}_{0,0,1}$, constant, calculé à l'instant initial, $t = 0$, pour une porosité initiale donnée :

$$\mathcal{M}_{0,0,1} = \mathcal{M}_{1,0,0}(0) \frac{(1 - \alpha(0))}{\alpha(0)}$$

Cette simplification revient à répartir les volumes d'influence des bulles qui ont coalescé sur l'ensemble des bulles. Nous réduisons ainsi la complexité du problème à deux dimensions, le volume v et la masse m des bulles. La fonction de distribution sera $n(t, v, m) = \int_0^\infty n(t, v, m, w) dw$. Elle représente le nombre de bulles de volume compris entre v et $v+dv$ et de masse comprise entre m et $m+dm$ au temps $t \geq 0$, et doit satisfaire à

$$\partial_t n + \partial_v(\Phi n) + \partial_m(\Xi n) = Q(n) .$$

Nous allons donc étudier l'équation cinétique ci-dessus. L'opérateur de coalescence $Q(n)$ est donné par (4.39) avec les noyaux (4.53) et (4.54) dans lesquels w est remplacé par (4.57) dans la définition de z_0 (4.52) et dans la définition des flux (4.36) et (4.37).

La résolution numérique sera présentée en deux chapitres, un sur l'équation de coalescence et un autre sur l'équation cinétique complète.

Chapitre 5

Coalescence

Jusqu'ici, nous n'avons étudié que la croissance des bulles par décompression et exsolution, un autre mécanisme important de la croissance des bulles est la coalescence. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la résolution numérique de la coalescence. Ce chapitre est résumé dans un article actuellement soumis [FCMis].

Nous nous plaçons dans un cadre abstrait. Nous modélisons la coalescence par l'équation de type coagulation-Smoluchowski continue (5.1), où $f(t, x)$ désigne la fonction densité numérique qui représente le nombre moyen d'individus ayant un certain état x à l'instant t . En une dimension, x représente souvent la masse. On note $H(t, x, x')$ le noyau de coalescence qui représente le taux auquel la coalescence des particules ayant pour volume respectif x et x' produit une particule de volume $x + x'$ à l'instant t . Le noyau de coalescence peut dépendre du temps, mais comme cela n'influera pas sur les résultats énoncés dans ce chapitre, on simplifie la notation par $H(x, x')$, de la même manière, en général nous noterons $f(x)$ la fonction densité numérique.

$$\partial_t f(x) = \frac{1}{2} \int_0^x H(x', x - x') f(x') f(x - x') dx' - \int_0^\infty H(x, x') f(x) f(x') dx' \quad (5.1)$$

La fusion successive de particules a lieu dans de nombreux phénomènes physiques allant de la science planétaire aux aérosols, ou aux polymères (voir [Lee01] et ses références). La première forme de cette équation a été introduite par M.Smoluchowski [Smo16, Smo17] afin de modéliser la coagulation de particules colloïdales, c'est-à-dire de particules qui vont interagir entre elles et entre autre se réunir tout en conservant certaines quantités. Cette équation a aussi souvent été appelée "équation de Smoluchowski", "équation de coalescence" et "équation de coagulation" (voir [Dra72]). Aujourd'hui, les principaux domaines d'application comprennent notamment la formation d'aérosols (voir [Fri61, TY99]), la croissance de polymères (par exemple [Lus73, Don87]), la croissance des hydrométéores (par exemple [SP80, Bro95]), les réactions nucléaires (par exemple [MP92]), l'astrophysique (en particulier la croissance planétaire, par exemple [Lee00]) et la volcanologie (voir [GLSS96, LGS04]).

Cette équation a été largement étudiée que ce soit du point de vue théorique (voir par exemple [DE87, Don87, DE88, LM04]) ou numérique. Du point de vue numérique, de nombreuses méthodes ont été proposées pour résoudre l'équation de coalescence, soit à partir de la forme discrète (voir par exemple [Lee00, KPWH08]), soit en considérant la forme continue (voir [EEE94, Kri95, Lee00, FL04, QW07] pour les méthodes déterministes, ou [Bab99, EW00, EW01, DFT03] pour les méthodes stochastiques). Plus récemment, des travaux concernant la résolution numérique du problème de coalescence multidimensionnel ont été proposés (voir [QW07, KKW11] et leurs références).

Pour la future application à la volcanologie, la coalescence des bulles impliquant que la dimension des bulles peut croître de plusieurs ordres de grandeur, un maillage non-uniforme

sera donc mieux adapté pour approcher le domaine.

Nous proposons, dans cette partie, une nouvelle façon de discrétiser l'équation de coalescence en introduisant une notion de chevauchement qui permet d'avoir une solution lisse et conservation exacte du moment d'ordre 1 discret. Dans un premier temps, on valide le code en 1D avec quelques tests et comparaisons de résultats avec [FL04] et [QW07]. Ensuite, on le transpose au cas bidimensionnel où certaines restrictions s'imposent, et nous validons le cas bidimensionnel avec les tests de [QW07].

Le but est d'avoir un code qui sera couplé dans le chapitre suivant avec le terme de transport du modèle cinétique décrit en chapitre 4 afin de l'appliquer à des cas concrets volcanologiques.

5.1 Équation de coalescence unidimensionnelle

Nous nous plaçons dans le cadre unidimensionnel. L'équation de coalescence est donnée par l'équation de type coagulation-Smoluchowsky continue et homogène en espace, voir (5.1), où la fonction de distribution $f(t, x)$ est définie pour un ensemble de particules de taille $x \geq 0$ au temps $t \geq 0$. Par convention, on appellera x la masse.

On s'intéresse à discrétiser l'équation de coalescence (5.1) pour une fonction de distribution $f(t, x)$. Le noyau de coalescence $H(x, x')$ représente le taux de particules de masse x et x' qui coalescent et doit être positif, $H(x, x') \geq 0$, et symétrique, $H(x, x') = H(x', x)$.

Cette équation conserve le moment d'ordre 1 de f (la masse totale) défini par

$$\mathcal{M}_1(t) = \int_0^\infty x f(t, x) dx .$$

Nous allons donc discrétiser (5.1) de façon que le moment discret associé à $\mathcal{M}_1(t)$ soit constant en temps.

5.1.1 Propriétés de l'équation de coagulation-Smoluchowski

Je rappelle ici quelques résultats connus pour l'équation de coagulation-Smoluchowski (4.38) dans le cadre uni-dimensionnel. Le cadre multi-dimensionnel est analogue.

Définition 5.1.1 *Le moment d'ordre i , en dimension 1, se définit comme suit :*

$$\mathcal{M}_i(t) = \int_0^\infty x^i f(t, x) dx \quad (5.2)$$

Dans la suite, on suppose que $\mathcal{M}_i$ est défini pour tout indice i .

Proposition 5.1.2 *L'équation de coagulation-Smoluchowski vérifie alors les propriétés suivantes :*

- si $i < 1$, alors $\mathcal{M}_i(t)$ est une fonction décroissante
- si $i = 1$, alors $\mathcal{M}_1(t)$ est une fonction constante
- si $i > 1$, alors $\mathcal{M}_i(t)$ est une fonction croissante

Démonstration

On considère l'équation (4.38), on la multiplie par une fonction test $\beta(x)$ et on l'intègre. On obtient alors :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \beta(x) \partial_t f(t, x) dx &= \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^x \beta(x) H(x - x', x') f(t, x - x') f(t, x') dx' dx - \\ &\quad - \int_0^\infty \int_0^\infty \beta(x) H(x, x') f(t, x') f(t, x) dx' dx \end{aligned} \quad (5.3)$$

En inversant l'ordre d'intégration dans la première double intégrale, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^x \beta(x) H(x-x', x') f(t, x-x') f(t, x') dx' dx = \\ = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_{x'}^\infty \beta(x) H(x-x', x') f(t, x-x') f(t, x') dx dx' \end{aligned} \quad (5.4)$$

Puis, en effectuant le changement de variable $z = x - x'$ et en remarquant que la deuxième intégrale est symétrique, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \beta(x) \partial_t f(t, x) dx = \\ = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty (\beta(x+x') - \beta(x) - \beta(x')) H(x, x') f(t, x) f(t, x') dx' dx \end{aligned} \quad (5.5)$$

Les quantités conservées sont donc celles pour lesquelles $\beta(x)$ satisfait : $\beta(x) + \beta(x') = \beta(x+x')$, tant que $H(x, x') f(t, x) f(t, x')$ reste fini.

Si on prend $\beta(x) = x^i$, alors on obtient les résultats annoncés. $\square$

Ce résultat peut être généralisé au cadre multi-dimensionnel.

Remarque 5.1.3

Il existe un phénomène pour lequel le moment d'ordre 1 n'est pas conservé. Il s'agit de la gélotion (voir par exemple [LT81, BCSZ11]). Comme nous l'avons vu dans la démonstration précédente, le moment d'ordre 1 est conservé tant que $H(x, x') f(t, x) f(t, x')$ reste fini. Il n'existe pas d'hypothèse sur H pour vérifier cela, mais certaines formes de H sont connues pour ne pas vérifier cela, tel que le noyau multiplicatif. Prenons le noyau multiplicatif $H(x, x') = xx'$, et intégrons l'équation (4.38) et en inversant l'ordre d'intégration et en utilisant le même changement de variable que précédemment, on obtient alors :

$$\dot{\mathcal{M}}_0(t) = \frac{1}{2} (\mathcal{M}_1(t))^2 - (\mathcal{M}_1(t))^2 . \quad (5.6)$$

En intégrant (5.6) sur l'intervalle de temps $[0, t]$, on obtient :

$$\mathcal{M}_0(t) = \mathcal{M}_0(0) - \frac{1}{2} \int_0^t (\mathcal{M}_1(s))^2 ds . \quad (5.7)$$

Comme $f(t, x) \geq 0$, pour tout temps, le moment d'ordre zéro doit satisfaire $\mathcal{M}_0(t) \geq 0$. D'après (5.7), ceci n'est possible que pour un temps fini. Il existe donc un temps t^* tel que $\mathcal{M}_1(t)$ soit décroissant pour $t > t^*$: $\mathcal{M}_1(t) < \mathcal{M}_1(t^*) \forall t > t^*$, en contradiction avec la conservation de $\mathcal{M}_1(t)$. Comme annoncé, cette contradiction vient du fait que $H(x, x') f(t, x) f(t, x')$ croît très vite en temps.

5.2 Discrétisation

On s'intéresse à discrétiser l'équation de Smoluchowski continue et homogène en espace (5.1) pour une dimension d'espace des états (x).

On souhaite construire un schéma numérique qui prend en compte toutes les mailles dans l'intégrale de gain. On va également chercher à construire un schéma numérique qui conserve par construction le moment d'ordre 1 discret.

5.2.1 Schéma numérique

On considère une discrétisation quelconque de la droite réelle définie par des points $x_{i-1/2}$ pour tout entier naturel i . On utilise les notations suivantes : par convention $x_{-1/2} =$

0, $f_i^n = f(t^n, x_i)$ définie sur la maille $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ et $H_{i,j} = H(x_i, x_j)$. On définit les pas de discrétisation $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ et les points milieu

$$x_i = \frac{x_{i-1/2} + x_{i+1/2}}{2}.$$

Définition 5.2.1 .

On définit les ensembles $\mathcal{F}(i)$ et $\mathcal{S}(i, j)$ associés au maillage de la discrétisation de la manière suivante :

$$\mathcal{F}(i) = \{(k, j) \mid x_{k-1/2} + x_{j-1/2} < x_{i+1/2} \text{ et } x_{k+1/2} + x_{j+1/2} > x_{i-1/2}\} \quad (5.8)$$

$$\mathcal{S}(j, k) = \{i \mid x_{k-1/2} + x_{j-1/2} < x_{i+1/2} \text{ et } x_{k+1/2} + x_{j+1/2} > x_{i-1/2}\} \quad (5.9)$$

L'ensemble $\mathcal{F}(i)$ ainsi défini représente l'ensemble des couples de mailles dont la somme intersecte la maille i . L'ensemble $\mathcal{S}(i, j)$ ainsi défini représente l'ensemble des mailles qui intersectent la somme des mailles i et j .

Remarque 5.2.2 .

Soit j et k deux indices, alors pour tout indice i tel que $i \in \mathcal{S}(j, k)$, on a $(j, k) \in \mathcal{F}(i)$.

De même, soit i un indice, alors pour tout couple d'indices (j, k) tel que $(j, k) \in \mathcal{F}(i)$, on a $i \in \mathcal{S}(j, k)$.

Proposition 5.2.3 . En utilisant une discrétisation par volumes finis, l'équation (5.1) est approchée par :

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \sum_{(k,j) \in \mathcal{F}(i)} H_{j,k} f_h f_j \lambda_{j,k}^i \Delta x_j \frac{\Delta x_k}{\Delta x_i} - \sum_{j=0}^{\infty} H_{i,j} f_i f_j \Delta x_j \quad (5.10)$$

avec $\mathcal{F}(i)$ définie par (5.8) et $\lambda_{j,k}^i$ défini par :

$$\lambda_{k,j}^i = \left(\frac{\min(x_{i+1/2}, x_{j+1/2} + x_{k+1/2}) - \max(x_{i-1/2}, x_{j-1/2} + x_{k-1/2})}{\Delta x_j + \Delta x_k} \right)_+ \quad (5.11)$$

Démonstration

Premièrement, on intègre l'équation (5.1) sur la maille i , $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, en utilisant une quadrature du point milieu. Le terme en temps devient :

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \partial_t f(t, x) dx = \partial_t f_i(t) \Delta x_i \quad (5.12)$$

En appliquant la relation de Chasles, le terme de perte, que nous noterons L_i , devient :

$$L_i = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_0^\infty H(x, x') f(x) f(x') dx' dx = \sum_{j=0}^{\infty} H_{i,j} f_i f_j \Delta x_j \Delta x_i \quad (5.13)$$

Enfin pour le terme de gain, notons

$$G_i = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{1}{2} \int_0^x H(x', x - x') f(x') f(x - x') dx' dx, \quad (5.14)$$

on a alors, en inversant l'ordre d'intégration de cette intégrale double :

$$\begin{aligned} 2G_i &= \int_0^{x_{i-1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} H(x', x - x') f(x') f(x - x') dx dx' + \\ &+ \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{x'}^{x_{i+1/2}} H(x', x - x') f(x') f(x - x') dx dx' \end{aligned}$$

Maintenant, en utilisant le changement de variable $y = x - x'$ dans ces deux intégrales,

$$\begin{aligned} 2G_i &= \int_0^{x_{i-1/2}} \int_{x_{i-1/2}-x'}^{x_{i+1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' + \\ &+ \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_0^{x_{i+1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' \end{aligned}$$

En écrivant que

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^{x_{i-1/2}} \int_0^{x_{i-1/2}-x'} f(x') f(y) H(x', y) dy dx' - \\ &\int_0^{x_{i-1/2}} \int_0^{x_{i-1/2}-x'} f(x') f(y) H(x', y) dy dx', \end{aligned}$$

on obtient :

$$2G_i = \int_0^{x_{i+1/2}} \int_0^{x_{i+1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' - \quad (5.15)$$

$$- \int_0^{x_{i-1/2}} \int_0^{x_{i-1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' \quad (5.16)$$

On peut réécrire l'intégrale double (5.15) sous la forme :

$$\sum_{k=0}^i \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \int_0^{x_{i+1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) dy dx'$$

Posons $I_i(k)$ et $J_i(k)$ tels qu'ils soient les plus grands entiers à vérifier

$$x_{I_i(k)+1/2} + x_{k+1/2} < x_{i+1/2} \quad \text{et} \quad x_{J_i(k)-1/2} + x_{k-1/2} < x_{i+1/2}.$$

Entre $I_i(k)$ et $J_i(k)$, il y a chevauchement, nous ne pouvons plus intégrer sur la maille i entière, mais seulement sur une partie de cette maille. On définira alors une proportion $\Lambda_{j,k}^i$ telle que

$$\sum_{i=0}^{\infty} \Lambda_{j,k}^i = 1.$$

Elle représente la proportion de la maille i intersectée avec la somme des mailles j et k .

On remarquera que $I_i(k) = \emptyset$ pour tout indice $k \geq i$, de la même façon, $J_i(k) = \emptyset$ pour tout indice $k \geq i + 1$.

Puisque $x' \in [x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$ et $I_i(k)$ est tel que pour tout $j \leq I_i(k)$, $x_{i+1/2} - x' > x_j$, on peut séparer la deuxième intégrale de (5.15) en deux parties :

$$\begin{aligned} &\sum_{k=0}^i \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \sum_{j=0}^{I_i(k)} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' + \\ &+ \sum_{k=0}^i \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \int_{x_{I_i(k)+1/2}}^{x_{i+1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' \end{aligned}$$

On définit $\Lambda_{i,j}^k$, pour tout $j \in]I_i(k), J_i(k)]$, tel que :

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \int_{x_{j-1/2}}^{\max(x_{j+1/2}-y, x_{j-1/2})} g(y, x') dx' dy = \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} g(y, x') \Lambda_{k,j}^i dx' dy.$$

On peut donc écrire (5.15) de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=0}^i \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \sum_{j=0}^{I_i(k)} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' + \\
 & + \sum_{k=0}^i \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \sum_{j=I_i(k)+1}^{J_i(k)} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} H(x', y) f(x') f(y) \Lambda_{k,j}^i dy dx'
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

De la même manière, on obtient la réécriture suivante de (5.16) :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=0}^{i-1} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \sum_{j=0}^{I_{i-1}(k)} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) dy dx' + \\
 & + \sum_{k=0}^{i-1} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \sum_{j=I_{i-1}(k)+1}^{J_{i-1}(k)} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}-x'} H(x', y) f(x') f(y) \Lambda_{k,j}^{i-1} dy dx'
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

En regroupant (5.17) et (5.18) et en utilisant une quadrature du point milieu, on obtient alors :

$$\begin{aligned}
 2G_i &= \sum_{k=0}^i \sum_{j=0}^{I_i(k)} H_{k,j} f_k f_j \Delta x_j \Delta x_k + \\
 &+ \sum_{k=0}^i \sum_{j=I_i(k)+1}^{J_i(k)} H_{k,j} f_k f_j \Lambda_{k,j}^i \Delta x_j \Delta x_k - \\
 &- \sum_{k=0}^{i-1} \sum_{j=0}^{I_{i-1}(k)} H_{k,j} f_k f_j \Delta x_j \Delta x_k - \\
 &- \sum_{k=0}^{i-1} \sum_{j=I_{i-1}(k)+1}^{J_{i-1}(k)} H_{k,j} f_k f_j \Lambda_{k,j}^{i-1} \Delta x_j \Delta x_k
 \end{aligned}$$

Soit, en factorisant :

$$\begin{aligned}
 2G_i &= \sum_{k=0}^i \left(\sum_{j=I_{i-1}(k)+1}^{I_i(k)} H_{k,j} f_k f_j \Delta x_j \Delta x_k + \right. \\
 &+ \sum_{j=I_i(k)+1}^{J_i(k)} H_{k,j} f_k f_j \Lambda_{k,j}^i \Delta x_j \Delta x_k - \\
 &- \sum_{j=I_{i-1}(k)+1}^{J_{i-1}(k)} H_{k,j} f_k f_j \Lambda_{k,j}^{i-1} \Delta x_j \Delta x_k \left. \right) + \\
 &+ \sum_{j=0}^{I_{i-1}(i)} H_{i,j} f_i f_j \Delta x_j \Delta x_i + \\
 &+ \sum_{j=I_{i-1}(i)+1}^{J_{i-1}(i)} H_{i,j} f_i f_j \Lambda_{i,j}^{i-1} \Delta x_j \Delta x_k
 \end{aligned}$$

Les indices des deux dernières sommes n'existant pas, leur somme vaut 0, et on obtient :

$$2G_i = \sum_{k=0}^i \left(\sum_{j=I_{i-1}(k)+1}^{I_i(k)} H_{k,j} f_k f_j \Delta x_j \Delta x_k + \right. \quad (5.19)$$

$$+ \sum_{j=I_i(k)+1}^{J_i(k)} H_{k,j} f_k f_j \Lambda_{k,j}^i \Delta x_j \Delta x_k - \quad (5.20)$$

$$\left. - \sum_{j=I_{i-1}(k)+1}^{J_{i-1}(k)} H_{k,j} f_k f_j \Lambda_{k,j}^{i-1} \Delta x_j \Delta x_k \right) \quad (5.21)$$

La première somme (5.19) représente l'intégrale sur les mailles k, j , telles que l'intersection de la maille i avec la somme des mailles k et j soit non nulle et que le maximum de la somme des mailles k et j soit inférieur au maximum de la maille i (c.f. figure 5.1).

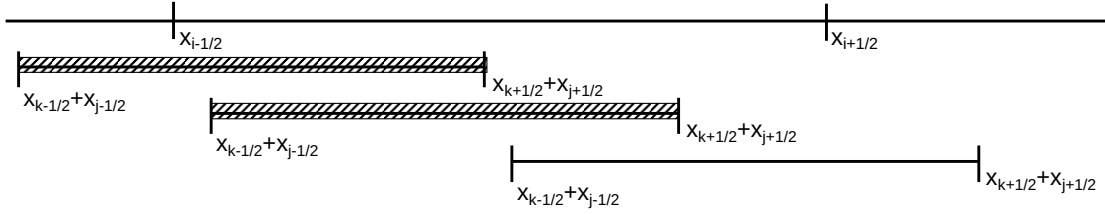


FIGURE 5.1 – Les mailles j utilisées dans la première somme sont hachurées

La deuxième somme (5.20) représente l'intégrale sur les mailles k et j , tel que l'intersection de la maille i avec la somme des mailles k et j soit non nulle et que le maximum de la somme des mailles k et j soit supérieur au maximum de la maille i (c.f. figure 5.2).

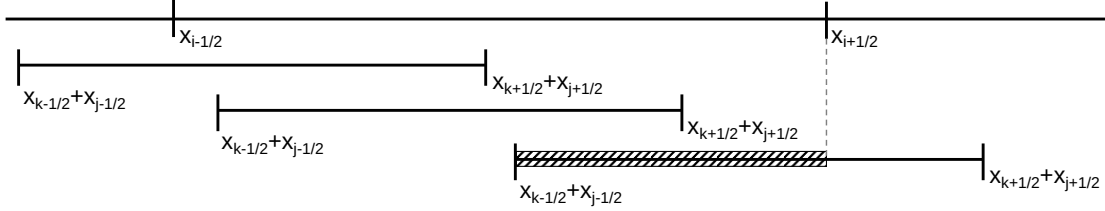


FIGURE 5.2 – Les mailles j utilisées dans la deuxième somme sont hachurées

La troisième somme (5.21) représente l'intégrale sur les mailles k, j , tel que l'intersection de la maille $i-1$ avec la somme des mailles k et j soit non nulle et que le maximum de la somme des mailles k et j soit supérieur au maximum de la maille $i-1$ (c.f. figure 5.3).

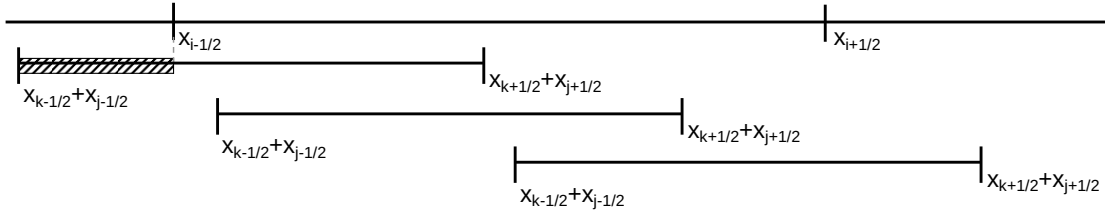


FIGURE 5.3 – Les mailles j utilisées dans la troisième somme sont hachurées

On peut donc réécrire le terme de gain de la manière suivante :

$$G_i = \frac{1}{2} \sum_{(k,j) \in \mathcal{F}(i)} H_{k,j} f_k f_j \lambda_{j,k}^i \Delta x_j \Delta x_k \quad (5.22)$$

où $\lambda_{j,k}^i$ est une combinaison entre 1, $\Lambda_{j,k}^i$ et $-\Lambda_{j,k}^{i-1}$ pour regrouper les sommes (5.19), (5.20) et (5.21) en une seule somme et arriver à (5.22), avec $\mathcal{F}(i)$ défini par (5.8). En reprenant (5.12), (5.13) et (5.22) et en discrétisant le temps, on obtient (5.10).

Nous définissons, ici, les proportions $\lambda_{k,j}^i$ de manière très intuitive comme la proportion de la somme des mailles k et j qui intersecte la maille i :

$$\lambda_{k,j}^i = \left(\frac{\min(x_{i+1/2}, x_{j+1/2} + x_{k+1/2}) - \max(x_{i-1/2}, x_{j-1/2} + x_{k-1/2})}{\Delta x_j + \Delta x_k} \right)_+$$

Nous avons bien un nombre compris entre 0 et 1, qui vaut 0 lorsque l'intersection est vide et 1 lorsque la somme des mailles k et j est incluse dans la maille i . $\square$

Avec la définition de $\mathcal{F}(i)$ et $\mathcal{S}(j,k)$, on prend en compte tout les maillages représentés sur la figure 5.4, ainsi que toute leur combinaison linéaire.

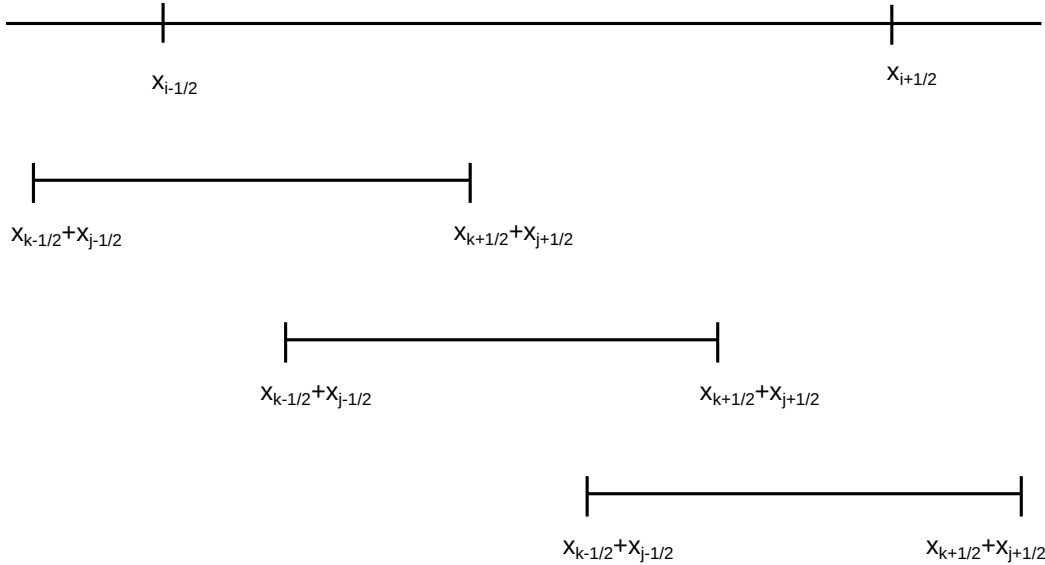


FIGURE 5.4 – Représentation des différents cas pris en compte par $\mathcal{F}(i)$

Enfin, notre discrétisation conserve la taille des mailles obtenues par coalescence : $\{\Delta x_i\} + \{\Delta x_j\} \rightarrow \{\Delta x_i + \Delta x_j\}$.

5.2.2 Un schéma conservatif

On souhaite conserver le moment d'ordre 1 discret, puisqu'il est conservé au niveau continue. Nous définissons le moment d'ordre i discret, en utilisant une quadrature du

point milieu, par :

$$M_i^n = \sum_{j=0}^{\infty} x_j^i f_j^n \Delta x_j \quad (5.23)$$

Nous allons modifier le terme de gain discret, pour que le moment d'ordre 1 discret soit conservé.

Proposition 5.2.4 *Conservation discrète*

Soit $\tilde{H}_{i,j}$ le noyau modifié discret :

$$\tilde{H}_{i,j} = H_{i,j} \frac{2(x_i + x_j)}{\sum_{k \in \mathcal{S}(i,j)} (\lambda_{i,j}^k + \lambda_{j,i}^k) x_k}, \quad (5.24)$$

alors la forme discrétisée suivante

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \sum_{(k,j) \in \mathcal{F}(i)} \tilde{H}_{j,k} f_k f_j \lambda_{j,k}^i \frac{\Delta x_j \Delta x_k}{\Delta x_i} - \sum_{j=0}^{\infty} H_{i,j} f_i f_j \Delta x_j$$

conserve le moment d'ordre 1 discret (5.23) :

$$M_1^n = M_1^0 \quad \forall n.$$

Démonstration

On cherche $\tilde{H}_{i,j}$ tel que $M_1^n = \sum_{i=0}^{\infty} f_i^n x_i \Delta x_i$ reste constante à chaque itération.

On veut donc :

$$\sum_{i=0}^{\infty} x_i \Delta x_i \left(\frac{1}{2} \sum_{(k,j) \in \mathcal{F}(i)} \tilde{H}_{j,k} f_k f_j \lambda_{j,k}^i \frac{\Delta x_j \Delta x_k}{\Delta x_i} - \sum_{j=0}^{\infty} H_{i,j} f_i f_j \Delta x_j \right) = 0.$$

Si on suppose tout les f_i nuls sauf aux indices m et n , ce qui revient à ne considérer que les parties des sommes qui affectent $H_{n,m}$, $H_{n,n}$ et $H_{m,m}$. On obtient alors :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(f_n f_m \tilde{H}_{n,m} (\lambda_{m,n}^{\mathcal{S}(m,n)} + \lambda_{n,m}^{\mathcal{S}(m,n)}) \frac{\Delta x_m \Delta x_n}{\Delta x_{\mathcal{S}(m,n)}} x_{\mathcal{S}(m,n)} \Delta x_{\mathcal{S}(m,n)} + \right. \\ & \quad f_n f_n \tilde{H}_{n,n} \lambda_{n,n}^{\mathcal{S}(n,n)} \frac{\Delta x_n \Delta x_n}{\Delta x_{\mathcal{S}(n,n)}} x_{\mathcal{S}(n,n)} \Delta x_{\mathcal{S}(n,n)} + \\ & \quad \left. f_m f_m \tilde{H}_{m,m} \lambda_{m,m}^{\mathcal{S}(m,m)} \frac{\Delta x_m \Delta x_m}{\Delta x_{\mathcal{S}(m,m)}} x_{\mathcal{S}(m,m)} \Delta x_{\mathcal{S}(m,m)} \right) - \\ & \quad (f_n f_m H_{n,m} \Delta x_n \Delta x_m (x_n + x_m) + \\ & \quad f_n f_n H_{n,n} \Delta x_n \Delta x_n (x_n) + \\ & \quad f_m f_m H_{m,m} \Delta x_m \Delta x_m (x_m)) = 0 \end{aligned}$$

soit en regroupant :

$$\tilde{H}_{i,j} = \begin{cases} H_{i,j} \frac{2(x_i + x_j)}{\sum_{k \in \mathcal{S}(i,j)} (\lambda_{i,j}^k + \lambda_{j,i}^k) x_k} & \text{si } i \neq j \\ H_{i,i} \frac{2(x_i)}{\sum_{k \in \mathcal{S}(i,i)} \lambda_{i,i}^k x_k} & \text{si } i = j \end{cases} \quad (5.25)$$

Les deux formes peuvent finalement s'écrire comme dans (5.24). $\square$

Remarque 5.2.5 .

Lorsque $\lambda_{k,j}^i$ est symétrique, comme dans notre cas, la définition (5.24) se simplifie en :

$$\tilde{H}_{i,j} = H_{i,j} \frac{(x_i + x_j)}{\sum_{k \in \mathcal{S}(i,j)} \lambda_{j,i}^k x_k}$$

Proposition 5.2.6 .

On a :

- (i) Le noyau modifié est consistant avec la formule continue : $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \tilde{H}_{j,k} = H_{j,k}$
- (ii) Si le maillage est uniforme, on a $\tilde{H}_{j,k} = H_{j,k}$.

Démonstration

- (i) Tout d'abord, on remarque que $(x_i + x_j)(\Delta x_i + \Delta x_j)$ est une quadrature du point milieu pour approcher $\int_{x_{i-1/2} + x_{j-1/2}}^{x_{i+1/2} + x_{j+1/2}} x dx$.

Il nous reste donc à travailler sur

$$\frac{(\Delta x_i + \Delta x_j)}{2} \sum_{k \in \mathcal{S}(i,j)} (\lambda_{i,j}^k + \lambda_{j,i}^k) x_k .$$

De par le lien entre $\Lambda_{i,j}^k$ et $\lambda_{i,j}^k$ et la relation satisfaite par $\Lambda_{i,j}^k$, on obtient que $\sum_{k=0}^{\infty} \lambda_{i,j}^k =$

1. Ceci ressemble à une quadrature élémentaire, sauf que x_k n'est pas toujours dans la maille $[x_{i-1/2} + x_{j-1/2}, x_{i+1/2} + x_{j+1/2}]$, mais est toujours au maximum à $\frac{\Delta x_k}{2}$ de cette maille. Cela signifie que

$$\frac{(\Delta x_i + \Delta x_j)}{2} \sum_{k \in \mathcal{S}(i,j)} (\lambda_{i,j}^k + \lambda_{j,i}^k) x_k$$

converge vers $\int_{x_{i-1/2} + x_{j-1/2}}^{x_{i+1/2} + x_{j+1/2}} x dx$, lorsque la taille des mailles tend vers 0.

On a donc

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \tilde{H}_{j,k} = H_{j,k} \frac{\int_{x_{i-1/2} + x_{j-1/2}}^{x_{i+1/2} + x_{j+1/2}} x dx}{\int_{x_{i-1/2} + x_{j-1/2}}^{x_{i+1/2} + x_{j+1/2}} x dx}$$

Finalement, on a bien $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \tilde{H}_{j,k} = H_{j,k}$

- (ii) Dans le cas d'un maillage uniforme, on peut écrire $x_{i-1/2} = i\Delta x$

On a alors

$$\tilde{H}_{i,j} = H_{i,j} \frac{(i + j + 1)\Delta x}{\sum_{k \in \mathcal{S}(i,j)} \lambda_{i,j}^k (k + 1/2)\Delta x}$$

de plus les mailles d'indices $k \in \mathcal{S}(i,j)$ sont entièrement incluses dans la maille formée par la somme des mailles i et j , et on a $k \in \{i+j, i+j+1\}$, on a alors la simplification suivante : $\lambda_{i,j}^k = 1/2$. Le noyau modifié $\tilde{H}_{i,j}$ devient alors :

$$\tilde{H}_{i,j} = H_{i,j} \frac{2(i + j + 1)}{(i + j + 1/2) + (i + j + 1 + 1/2)}$$

On a bien $\tilde{H}_{i,j} = H_{i,j}$, ce qui conclut la démonstration.

□

Proposition 5.2.7 *Condition de positivité lié au schéma*

$$\Delta t < \min_i \left(\frac{f_i}{(G_i - L_i)_-} \right), \quad (5.26)$$

où G_i^n est le terme de gain, L_i^n est le terme de perte au temps t^n et $(a)_-$ est la partie négative de a et est donnée par $\max(0, -a)$.

Démonstration

Concernant la stabilité du schéma, nous imposons que la solution reste positive :

$$0 < f_i^{n+1} = f_i^n + \Delta t (G_i^n - L_i^n)$$

Comme il peut arriver que $L_i^n > G_i^n$, on pose alors :

$$\Delta t < \min_i \left(\frac{f_i}{(G_i - L_i)_-} \right),$$

où $(a)_-$ est la partie négative de a et est donnée par $\max(0, -a)$. □

5.3 Implémentation

Dans le but d'optimiser la complexité de l'implémentation, nous avons codé le calcul de $Q = G - L$ de la manière suivante :

```

01  | i = 0 → N
02  |   j = 0 → N
03  |     k = i - 1; L = 0; k1 = 0;
04  |     tant que  $V_{k-1/2} < V_{i+1/2} + V_{j+1/2}$ 
05  |       si  $V_{i-1/2} + V_{j-1/2} < V_{k+1/2}$ 
06  |          $M = \min(V_{i+1/2} + V_{j+1/2}, V_{k+1/2})$ 
07  |          $m = \max(V_{i-1/2} + V_{j-1/2}, V_{k-1/2})$ 
08  |          $L = L + V_k (M - m)$ 
09  |         k1 = k1 + 1
10  |     k = k + 1
11  |   si  $L \neq 0$ 
12  |      $L = H_{i,j} \frac{(V_i + V_j)(\Delta V_i + \Delta V_j)}{L}$ 
13  |   p = k - k1 → k - 1
14  |     si  $V_{i-1/2} + V_{j-1/2} < V_{p+1/2}$ 
15  |        $M = \min(V_{i+1/2} + V_{j+1/2}, V_{p+1/2})$ 
16  |        $m = \max(V_{i-1/2} + V_{j-1/2}, V_{p-1/2})$ 
17  |        $\lambda_{i,j}^p = \max(0, (M - m)) / (\Delta V_i + \Delta V_j)$ 
18  |        $Q_p = Q_p + 0.5 f_i f_j L \lambda_{i,j}^p \frac{\Delta V_i \Delta V_j}{\Delta V_p}$ 
19  |    $Q_i = Q_i - f_i f_j H_{i,j} \Delta V_j$ 

```

Quand on sort de la boucle "while" (ligne 4 à 10), L contient $\sum_{k \in \mathcal{S}(i,j)} V_k \lambda_{j,i}^k (\Delta V_i + \Delta V_j)$.

Après la ligne 12, L contient $\tilde{H}_{i,j}$.

Ensuite les lignes 13 à 18 ajoutent à $Q_{\mathcal{S}(i,j)}$ les gains de bulles, les gains de la classe i sont donc donnés par :

$$Q_i = \frac{1}{2} \sum_{(k,j) \in \mathcal{F}(i)} f_k f_j \tilde{H}_{j,k} \lambda_{j,k}^i \frac{\Delta V_k \Delta V_j}{\Delta V_i}.$$

Et enfin la ligne 19 calcule le terme de perte : $Q_i = Q_i - \sum_{j=0}^N H_{i,j} f_i f_j \Delta V_j$.

La complexité de cet algorithme est de N^3 , soit le minimum que l'on pouvait obtenir pour ce genre de schéma.

On peut réduire un peu la complexité en enregistrant dans des matrices de tailles $N \times N \times N$ la valeur des constante $\lambda_{j,k}^i$, $\tilde{H}_{i,j}/H_{i,j}$ et en faisant appel à celles ci. Mais la taille des matrices risque d'être limitant pour les maillages.

5.4 Comparaison des résultats de coalescence avec des modèles numériques existants

Nous comparerons les résultats obtenus pour un noyau constant, $H(x, x') = 1$, et multiplicatif, $H(x, x') = x x'$, avec ceux obtenus dans [FL04] et pour un noyau additif, $H(x, x') = x + x'$, avec ceux de [QW07].

Tous les schémas proposés dans ces articles sont construits de façon à fonctionner avec un maillage non-uniforme qui prend en compte les chevauchements.

Dans [FL04], le schéma est écrit à partir de la forme conservative (voir par exemple [TIN96, FL04]) de l'équation de coalescence (5.27). Dans [QW07], ils utilisent un schéma similaire à celui de [FL04] pour les tests en une dimension. Nous comparons donc notre schéma avec deux schémas basés sur l'équation continue :

$$x \partial_t f = -\partial_x \int_0^x \int_{x-u}^\infty u H(u, v) f(u) f(v) dv du \quad (5.27)$$

Le schéma de [FL04] est également conservatif.

Nous testons les cas suivants où la valeur maximum du maillage correspond à la troncature, x_{max} , effectuée dans l'intégrale de perte, le pas de temps vérifie $\Delta t \leq 10^{-3}$ et est contraint par (5.26) et avec un test d'arrêt lorsque l'on atteint $t = 1.5$ ou que l'on a perdu 2% de masse :

1. maillage régulier de 0 à 50 par pas de 0.1
2. maillage régulier de 0 à 50 par pas de 0.5
3. maillage régulier de 0 à 50 par pas de 0.01
4. maillage régulier de 0 à 2500 par pas de 0.5
5. maillage non-uniforme de 0 à 5000 donné par $x_i = x_{max} 2^{(i-N)/3}$ avec $N = 150$ points.
6. maillage non-uniforme de 0 à 500000 donné par $x_i = x_{max} 2^{(i-N)/3}$ avec $N = 165$ points.
7. maillage non-uniforme de 0 à 5000 donné par $x_i = x_{max} 2^{(i-N)/6}$ avec $N = 300$ points.

5.4.1 Le noyau constant

Comme dans [FL04], nous considérons la donnée initiale :

$$f(0, x) = C^2 \exp(-Cx)$$

L'équation (5.1) a pour solution explicite :

$$f(t, x) = \left(\frac{2C}{2 + Ct} \right)^2 \exp \left(-\frac{2C}{2 + Ct} x \right) \quad (5.28)$$

où C est une constante positive, et ses moments d'ordre 0 et 1 sont donnés par :

$$\mathcal{M}_0 = \frac{2C}{2 + Ct}, \quad \mathcal{M}_1 = 1$$

Nous prenons $C = 1$ et $H = 1$ pour la suite. Sur les graphiques de Fig.5.5, nous traçons les moments d'ordre 0 et 1, ainsi que les erreurs et erreurs relatives du moment d'ordre 0. Pour les moments numériques, nous utilisons toujours la forme donnée par la quadrature du point milieu.

Comme on peut le constater, Fig.5.5 (haut), le moment d'ordre 1 (droite) est bien conservé au cours du temps, la différence entre les différents cas n'est due qu'à l'intégration numérique utilisée pour calculer le moment. On ne peut que difficilement distinguer les courbes de celle de la solution explicite pour le moment d'ordre 0 (gauche), on regarde donc leur erreur et erreur relative par rapport à la solution explicite.

Comme on le voit, Fig.5.5 (bas), le meilleur des cas testés est le cas uniforme le plus fin, les maillages non-uniformes sont les moins précis mais l'erreur commise reste acceptable. On peut donc utiliser un maillage non-uniforme, bien que l'on perde un peu en précision, cela permet de connaître le comportement de la solution sur de plus grands intervalles. Ceci permet également de gagner en temps de calcul, si le maillage non-uniforme le permet.

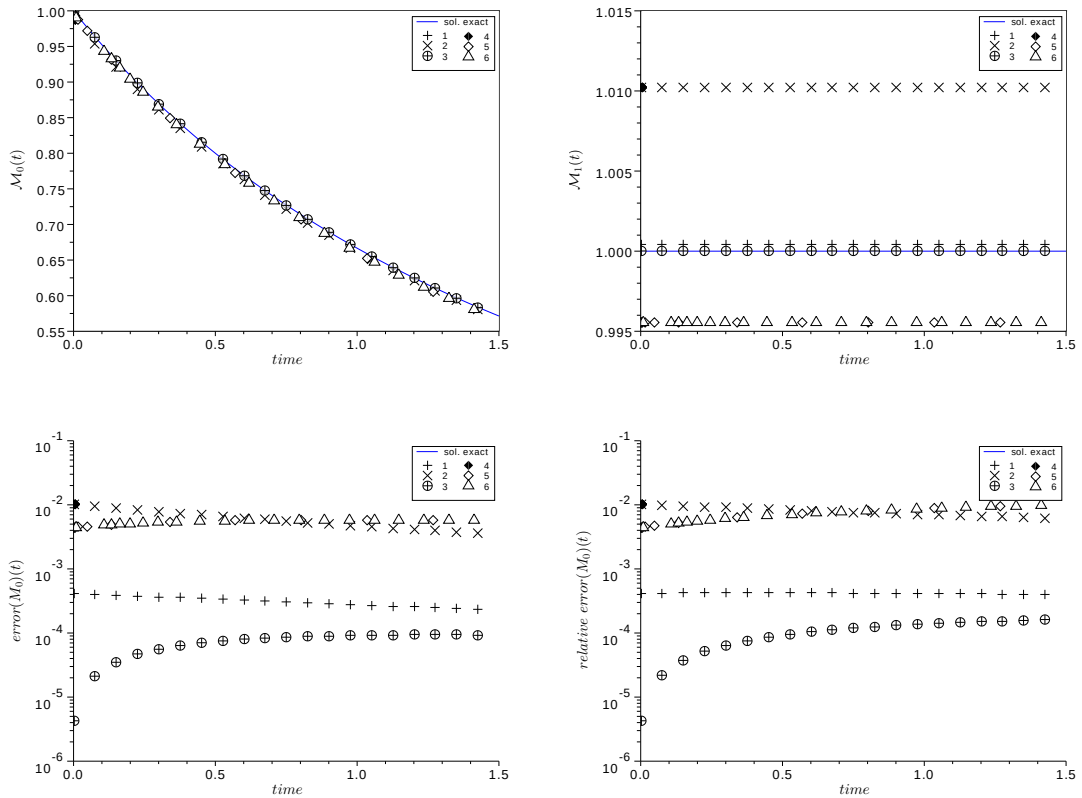


FIGURE 5.5 – Moments d'ordre 0 et 1 pour la coalescence 1D avec noyau constant, $H = 1$ (haut). Erreur commise sur le moment d'ordre 0 (bas).

Nous allons maintenant tracer, Fig.5.6, la norme de l'erreur discrète L^1 définie par :

$$\epsilon(t^n) = \sum_{i=0}^N \Delta x_i |f_i^n - f(x_i, t^n)| \quad (5.29)$$

pour un maillage régulier, tronqué à 50 et avec nx mailles.

On constate en Fig.5.6 que l'erreur commise pour $nx = 125$ points est de l'ordre de 10^{-3} et l'erreur commise pour $nx = 500$ points est de l'ordre de 10^{-4} . Nous constatons également que notre schéma est d'ordre 2, tout comme celui de [FL04]. Dans [FL04], les auteurs résolvent l'équation conservative et comparent donc l'erreur discrète de $xf(t, x)$. On obtient un bon résultat pour $nx = 125$ points, il est donc inutile de prendre plus de points, afin d'économiser du temps de calcul.

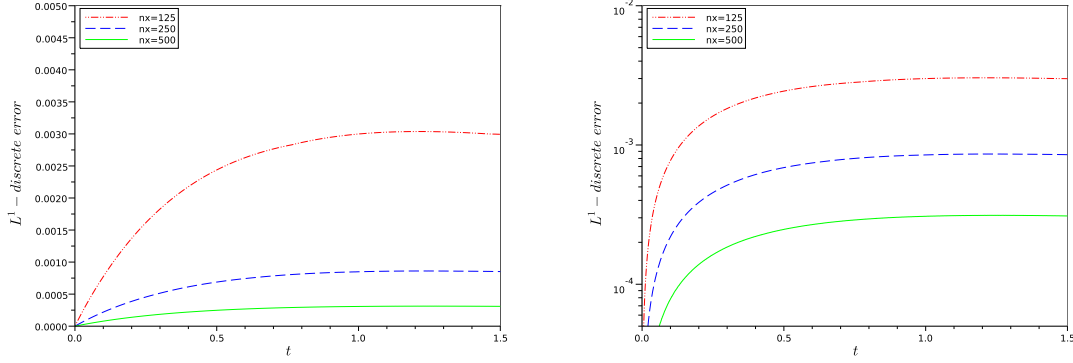


FIGURE 5.6 – Norme de l'erreur discrète L^1 pour la coalescence 1D avec noyau constant, $H = 1$, en échelle normale (gauche) et en échelle logarithmique (droite). nx représentent le nombre de mailles, le maillage est uniforme et la troncature $x_{max} = 50$

5.4.2 Le noyau additif

Nous utilisons le même cas test que [QW07]. La donnée initiale est définie par :

$$f(0, x) = \frac{N_0}{C} \exp\left(-\frac{x}{C}\right).$$

L'équation (5.1) a pour solution explicite :

$$f(t, x) = \frac{N_0(1 - \beta)}{Cx'\sqrt{\beta}} \exp\left(-(1 + \beta)x\right) I_1(2x'\sqrt{\beta}), \quad (5.30)$$

avec N_0 et C constante, $\beta = 1 - \exp(-C\tau)$, $x' = x/C$, $\tau = N_0xt$ et I_1 la fonction de Bessel modifiée de premier ordre :

$$I_1(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \exp(x \cos(\theta)) \cos(\theta) d\theta \quad (5.31)$$

On a également les moments suivants :

$$\mathcal{M}_0(t) = N_0 \exp(-CN_0t) \quad \mathcal{M}_1(t) = CN_0 \quad \mathcal{M}_2(t) = 2N_0C^2 \exp(2CN_0t)$$

Nous comparons au moment d'ordre 3 tracé dans [QW07]. Le calcul de celui ci nous donne :

$$\mathcal{M}_3(t) = 6N_0C^3 \exp(3N_0Ct) (2 \exp(N_0Ct) - 1)$$

Nous prenons $C = 1$ et $N_0 = 1$. Sur le graphique de Fig.5.7, nous traçons les moments discrets d'ordre 0, 1, 2 et 3, ainsi que ceux donnés par les formules explicites.

Sur Fig.5.7, nous comparons les moments d'ordre 0, 1 et 2 (ligne pleine) donnés par les formules précédentes, et les moments calculés à partir de la solution de la simulation, le tout en échelle logarithmique et normalisé par leur valeur initiale.

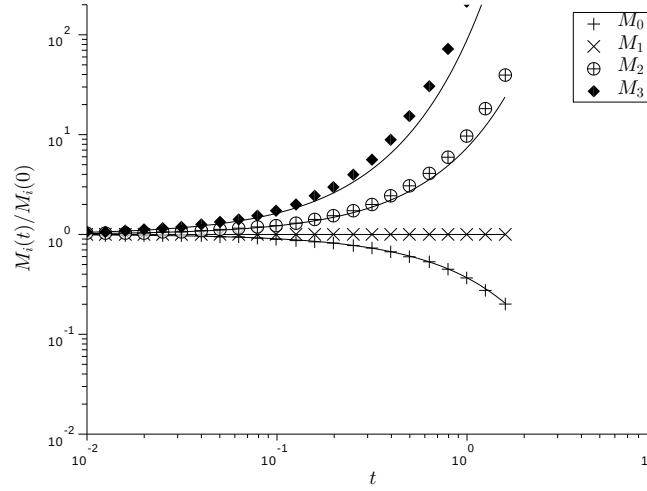


FIGURE 5.7 – Comparaison des moments pour le noyau additif, $H = x + x'$, les lignes pleines représentent les moments explicites.

Nous surestimons les moments d'ordre 2 et 3. La quadrature utilisée pour calculer les moments discrets peut expliquer cette différence. Comme attendu, le moment d'ordre 3 est croissant en temps. Dans [QW07], le moment d'ordre 2 est sous-estimé.

La surestimation vient d'une part, de la quadrature utilisée et d'autre part, de la troncature. En effet, la solution du problème tronqué est plus grande que celle que nous considérons. Dans ce sens, notre schéma résout le problème de manière satisfaisante.

5.4.3 Le noyau multiplicatif

Nous utilisons le même cas test que [FL04]. La donnée initiale est définie par :

$$f(0, x) = \frac{\exp(-x)}{x}.$$

L'équation (5.1) a pour solution explicite :

$$f(t, x) = \exp(-Tx) \frac{I_1(2x\sqrt{t})}{x^2\sqrt{t}}. \quad (5.32)$$

$$\text{où } T = \begin{cases} 1+t & \text{si } t \leq 1 \\ 2\sqrt{t} & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.33)$$

et I_1 est la fonction de Bessel modifiée du premier ordre (5.31).

Le moment d'ordre 1 est donné par

$$\mathcal{M}_1(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t < 1 \\ t^{-1/2} & \text{sinon} \end{cases}$$

Nous rappelons que nous avons gelation dans le cas du noyau multiplicatif.

Sur le graphique Fig.5.8, nous traçons le moment d'ordre 1 normalisé afin de pouvoir comparer les courbes sans voir l'erreur d'intégration faite pour calculer le moment. Pour calculer le moment numérique, on utilise toujours le moment discret défini par (5.23).

Sur Fig.5.8, les moments numériques ont été normalisés :

En bleu est tracée la solution explicite donnée par la formule (5.32).

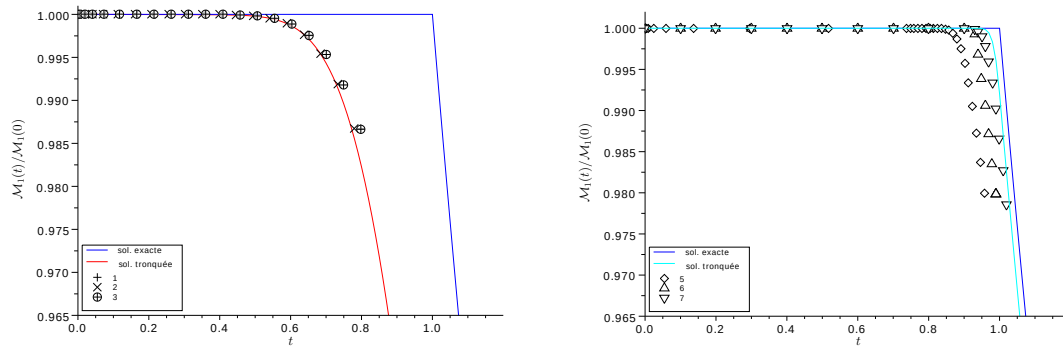


FIGURE 5.8 – Moment d'ordre 1 pour le noyau multiplicatif, $H = x x'$, maillage uniforme (gauche), maillage non-uniforme (droite)

En rouge est tracé le moment numérique de la solution explicite tronquée à 50 (gauche). En cyan est tracé le moment numérique de la solution explicite tronquée à 5000 avec le même maillage que 5 (droite).

On remarque que les cas 1 à 3 retrouvent bien la courbe rouge avec une légère surestimation, ceci confirme que la troncature intervient au bon endroit dans notre schéma numérique. La légère surestimation s'explique par le fait que nous ne prenons pas en compte les particules de grande taille qui sont perdues à cause de la troncature.

Les cas 5 à 7 ont l'air d'avoir quelques difficultés à retrouver la courbe bleue. Ceci est dû aux trop grands pas d'espace. Si on augmente le nombre de points, par exemple en prenant $x_i = x_{max} 2^{(i-N)/6}$ (maillage 6), on converge vers la courbe cyan. Les maillages non-uniformes permettent de gagner en temps de calcul pour un espace très grand, mais introduisent quelques erreurs.

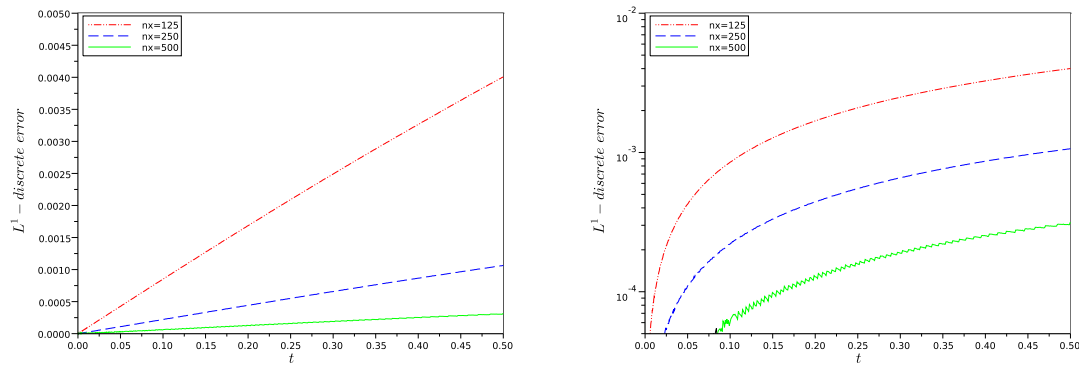


FIGURE 5.9 – Norme de l'erreur discrète L^1 pour le noyau multiplicatif, $H = x x'$, en échelle normale (gauche) et en échelle logarithmique (droite). nx représentent le nombre de maille, le maillage est uniforme et $x_{max} = 50$

Nous traçons en Fig.5.9 la norme de l'erreur discrète L^1 définie par (5.29) pour un maillage régulier, tronqué à 50 et avec nx mailles. L'erreur est de l'ordre de 10^{-3} à 10^{-4} et croît quasiment linéairement en temps. La différence entre les différentes courbes obtenues pour 125, 250 et 500 mailles reste acceptable sur l'intervalle de temps testé, et est essentiellement due à la troncature. Le passage en maillage non-uniforme est donc préférable si

on veut un résultat plus précis en temps long.

Tout comme dans [FL04], notre schéma est d'ordre 2 et reproduit le phénomène de gélotion quand il a lieu. Nous avons également testé un maillage non-uniforme et nous avons remarqué que la gélotion n'était pas très bien reproduite pour un nombre de points trop faible. Le maillage non-uniforme sous-estime le moment d'ordre 1 et sous-estime aussi le temps de gélotion. Aucun maillage non-uniforme n'est testé dans [FL04].

5.5 Passage au multidimensionnel

Comme annoncé, nous considérons le cas multidimensionnel, nécessaire à l'application à la volcanologie. Soit $\vec{X} = (X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^d$. Nous cherchons à résoudre numériquement le problème de coalescence multidimensionnelle :

$$\begin{aligned} \partial_t f = & \frac{1}{2} \int_{\vec{0}}^{\vec{X}} f(\vec{X}') f(\vec{X} - \vec{X}') H(\vec{X}', \vec{X} - \vec{X}') d\vec{X}' - \\ & - \int_{\vec{0}}^{\vec{X}} f(\vec{X}) f(\vec{X}') H(\vec{X}, \vec{X}') d\vec{X}' \end{aligned} \quad (5.34)$$

avec $d\vec{X} = dX_1 dX_2 \dots dX_d$, $\int_{\vec{0}}^{\vec{X}} = \int_0^{X_1} \int_0^{X_2} \dots \int_0^{X_d}$ et $f(\vec{X}, t)$ la fonction de densité numérique.

En généralisant la démonstration du cas unidimensionnel, on peut montrer que les quantités conservées par (5.34) sont :

$$\int_{\vec{0}}^{\vec{X}} f(\vec{X}, t) \Phi(\vec{X}) d\vec{X}$$

avec Φ tel que $\Phi(\vec{X} + \vec{X}') - \Phi(\vec{X}) - \Phi(\vec{X}') = 0$. En particulier, la fonction

$$\Phi(\vec{X}) = \sum_{i=1}^d c_i X_i$$

pour tous coefficients $c_i \in \mathbb{R}$ donne que les moments d'ordre 1 multidimensionnels sont conservés au cours du temps.

Si on pose $I \in \mathbb{N}^d$ et $(X_i)_j$ la valeur de la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur $\vec{X}$ sur la maille j et que l'on passe en discret comme pour le cas unidimensionnel, on obtient le schéma :

$$\frac{f_I^{n+1} - f_I^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \sum_{(K,J) \in \mathcal{F}(I)} f_K f_J \tilde{H}_{J,K} \lambda_{J,K}^I \frac{\Delta \vec{X}_J \Delta \vec{X}_K}{\Delta \vec{X}_I} - \sum_{J=0}^{\infty} H_{I,J} f_I f_J \Delta \vec{X}_J \quad (5.35)$$

où $f_I^n = f((X_1)_{I_1}, \dots, (X_d)_{I_d}, t^n)$, les sommes correspondent en fait à :

$$\sum_{J=0}^{\infty} = \sum_{J_1=0}^{\infty} \sum_{J_2=0}^{\infty} \dots \sum_{J_d=0}^{\infty},$$

$$\sum_{(K,J) \in \mathcal{F}(I)} = \sum_{(K_1, J_1) \in \mathcal{F}_1(I_1)} \sum_{(K_2, J_2) \in \mathcal{F}_1(I_2)} \dots \sum_{(K_d, J_d) \in \mathcal{F}_1(I_d)},$$

avec $\mathcal{F}_p$ associé au maillage sur X_p défini comme dans (5.8),

$$H_{I,J} = H(\vec{X}_I, \vec{X}_J),$$

$$\Delta \vec{X}_J = \prod_{i=1}^d \Delta(X_i)_{J_i} ,$$

$$\lambda_{J,K}^I = \prod_{p=1}^d \lambda_{J_p, K_p}^{I_p}$$

où les indices p sont associés à la $p^{\text{ème}}$ composante du vecteur $\vec{X}$.

La définition de $\tilde{H}_{I,J}$ dépend de l'expression de Φ . Dans le cas général :

$$\tilde{H}_{I,J} = H_{I,J} \frac{2(\Phi_I + \Phi_J)}{\sum_{K \in \mathcal{S}(I,J)} \Phi_K (\lambda_{I,J}^K + \lambda_{J,I}^K)}$$

où $\Phi_I = \Phi(\vec{X}_I)$ et $K = (K_1, \dots, K_d) \in \mathcal{S}(I, J)$ correspond à $K_n \in \mathcal{S}_{X_n}(I_n, J_n)$, avec $1 \leq n \leq d$ où $\mathcal{S}_{X_n}$ signifie que l'ensemble est associé au maillage de la variable X_n .

Comme dans [QW07], il nous faut choisir une forme de Φ pour écrire la forme conservative, l'équivalent de ce qui est fait en deux dimensions dans [QW07] serait de prendre $c_1 = \dots = c_d = 1$.

Remarque 5.5.1

Nous ne pouvons pas conserver plus d'un moment d'ordre 1 en discret à la fois pour une discrétisation quelconque. Il nous faut donc choisir un unique d -uplet $(c_1, c_2, \dots, c_d) \in \mathbb{R}^d$ pour lequel on souhaite conserver le moment d'ordre 1 qui lui est associé :

$$\sum_{i=1}^d c_i X_i .$$

Tous les moments d'ordre 1 seront conservés, si et seulement si on a le même maillage sur tous les états.

5.6 Comparaison des résultats de coalescence avec des modèles numériques multidimensionnel existants

Il existe quelques exemples connus de solutions explicites en deux dimensions qui vont nous permettre de tester notre résolution numérique. Nous comparerons nos résultats avec ceux de [QW07] et avec la solution explicite. Le nom de chaque comparaison est celui qui était donné dans [QW07] pour des données identiques. Dans tout les cas tests considérés, le noyau est constant, $H = 1$, et le temps final est fixé à $t = 100$, comme dans [QW07].

5.6.1 Cas test 5 de [QW07]

Nous commençons par le cas 5 de [QW07]. La condition initiale est :

$$f(0, x, y) = \exp(-x - y)$$

et la solution analytique, voir [QW07, Lus76], est :

$$f(t, x, y) = \frac{4}{(t+2)^2} \exp(-x - y) I_0(\theta)$$

avec $\theta = \left(\frac{4t}{t+2} \right)^{1/2}$

Ici I_0 est la fonction de Bessel modifiée de première espèce d'ordre 0 (voir [Olv72]) :

$$I_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{z^k}{2^k k!} \right)^2 = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cosh(z \cos \theta) d\theta \quad (5.36)$$

Nous représentons Fig.5.10 la solution analytique tracée en échelle $\log_{10}$.

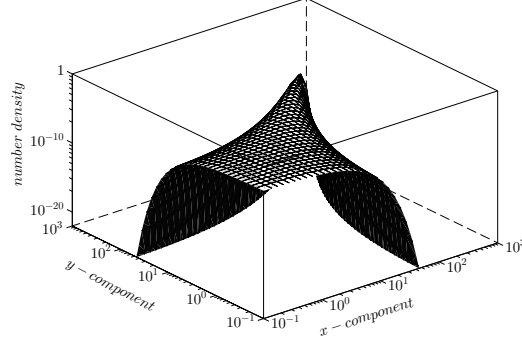


FIGURE 5.10 – Solution analytique à $t = 100$ du cas 5 de [QW07]

Les moments correspondant s'écrivent, voir [QW07],

$$\mathcal{M}_{0,0}(t) = 2/(2+t), \quad \mathcal{M}_{1,0}(t) = 1, \quad \mathcal{M}_{1,1}(t) = 1+t.$$

Nous avons choisis un maillage similaire à celui de [QW07] avec $N = 40$ points pour chaque composantes et on a supposé la troncature à $R_x = R_y = 1000$. Comme le maillage est le même sur les deux coordonnées, nous conserverons les deux moments d'ordre 1.

Nous reportons en Fig.5.11 et Fig.5.12, les résultats obtenus dans [QW07] (gauche) et ceux que l'on a obtenus (droite).

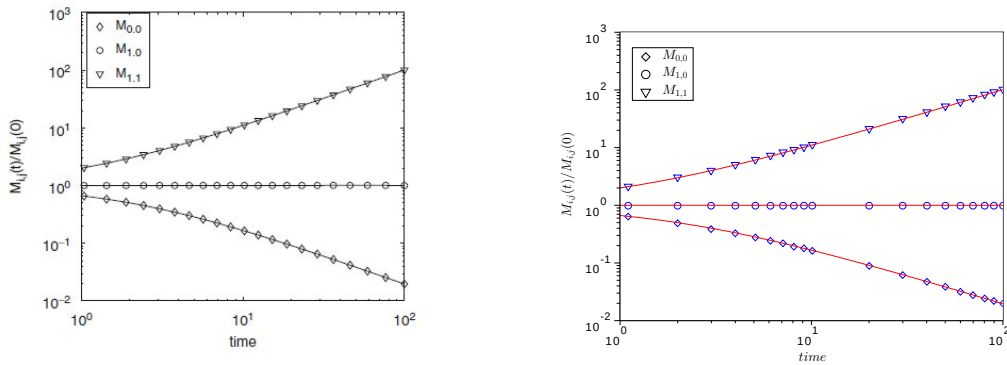


FIGURE 5.11 – Comparaison des moments numériques avec les résultats de [QW07] pour le cas test 5

Dans Fig.5.11, sont représentées en échelle $\log_{10}$, l'évolution exacte des premiers moments (courbe pleines) ainsi que leurs estimations par le code de [QW07] (gauche) et les nôtres (droite). Tout comme [QW07], nous approchons bien les premiers moments.

Les figures de Fig.5.12 représentent la fonction numérique $f(t, x, y)$ (number density) à l'instant $t = 100$ en échelle $\log_{10}$.

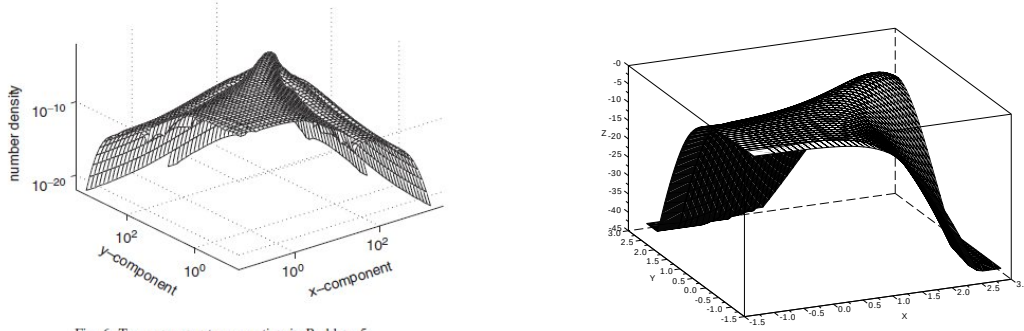


Fig. 6. Two-component aggregation in Problem 5.

FIGURE 5.12 – Comparaison de la fonction densité numérique à l'instant $t = 100$, avec les résultats de [QW07] pour le cas test 5

Notre solution (droite) est lisse et n'a pas de discontinuité. Nous avons diffusé légèrement sur tout le domaine alors que [QW07] (gauche) diffuse beaucoup sur les bords du domaine $x = R_x$ et $y = R_y$, et peu pour les valeurs de x et y proche de 0.

5.6.2 Cas test 6 de [QW07]

Nous poursuivons avec le cas 6 de [QW07] avec un noyau constant égal à 1 et un temps égal à 100. La condition initiale est :

$$f(0, x, y) = 16xy \exp(-2x - 2y)$$

et la solution analytique, voir [QW07, GS78], est :

$$f(t, x, y) = \frac{8}{\sqrt{t(t+2)}^3} \exp(-2x - 2y) [I_0(\theta) - J_0(\theta)], \quad \theta = 4\sqrt{xy} \left(\frac{t}{t+2} \right)^{1/4}.$$

Ici J_0 et I_0 sont, respectivement, la fonction de Bessel et la fonction de Bessel modifiée de première espèce d'ordre 0 (voir [Olv72]) :

$$J_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{z^k}{2^k k!} \right)^2 = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(z \cos \theta) d\theta \quad (5.37)$$

À nouveau, la solution exacte est tracée en échelle $\log_{10}$ en Fig. 5.13. Pour cette solution, les moments correspondants s'écrivent ([QW07, VM05]) :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{0,0}(t) &= 2/(2+t), \quad \mathcal{M}_{1,0}(t) = 1 \\ \mathcal{M}_{2,0}(t) &= \frac{1}{2}(3+2t), \quad \mathcal{M}_{1,1}(t) = 1+t \\ \mathcal{M}_{3,0}(t) &= \frac{3}{2}(1+t)(2+t), \quad \mathcal{M}_{2,1}(t) = \frac{1}{2}(3+7t+3t^2) \end{aligned}$$

Nous reportons maintenant en Fig. 5.14 et Fig. 5.15, les résultats obtenus dans [QW07] (gauche) et ceux que l'on a obtenus (droite).

Nous avons choisi le même maillage que dans [QW07] avec $N = 40$ points pour chaque composantes et une troncature $R_x = R_y = 1000$. Comme le maillage est le même sur les deux coordonnées, nous conserverons les deux moments d'ordre 1.

Les graphiques de Fig. 5.14 représentent en échelle $\log_{10}$, l'évolution exacte des premiers moments (courbe pleines) ainsi que leur estimation par notre code (droite) et celui de [QW07]

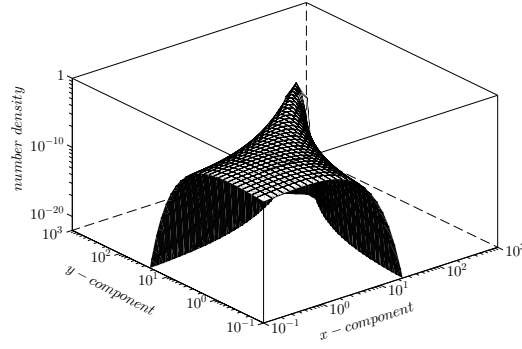
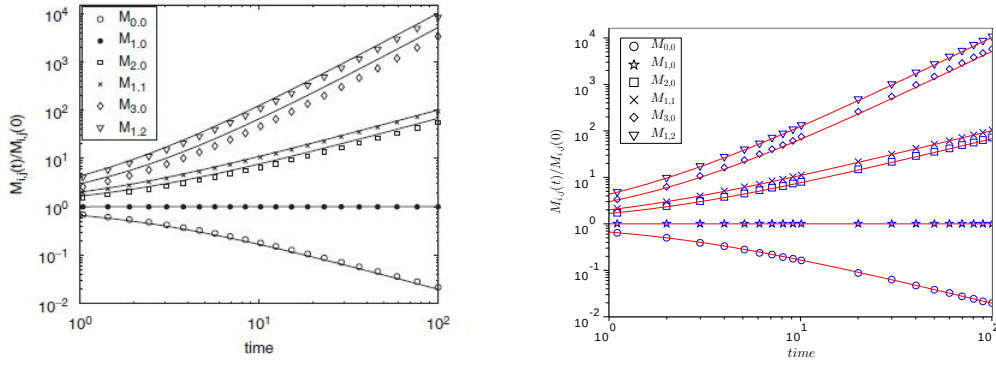
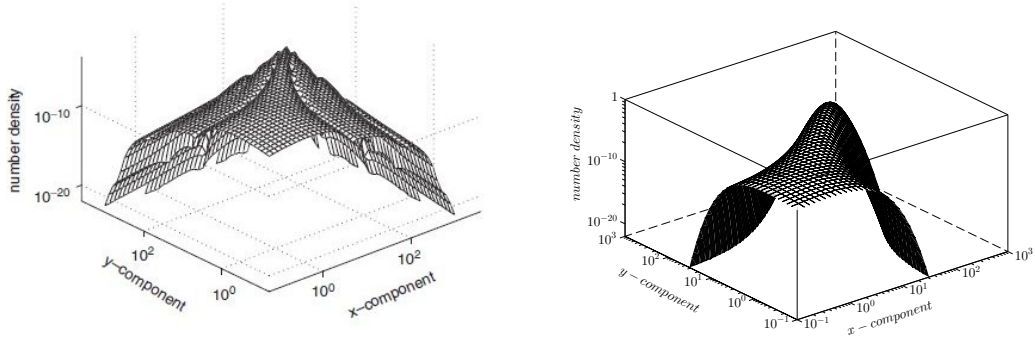
FIGURE 5.13 – Solution analytique à $t = 100$ du cas 6 de [QW07]

FIGURE 5.14 – Comparaison des moments numériques avec les résultats de [QW07] pour le cas test 6

FIGURE 5.15 – Comparaison de la fonction densité numérique à l'instant $t = 100$ avec les résultats de [QW07] pour le cas test 6

(gauche). Tout comme [QW07], nous approchons bien les premiers moments, plus l'ordre est élevé. Néanmoins, nous approchons mieux que [QW07] tout les moments tracés, y compris $M_{3,0}(t)$ qui bien que surévalué, reste plus proche de la courbe que dans [QW07].

Les figures de Fig. 5.15 représentent, en échelle $\log_{10}$, la solution numérique $f(x, y, t)$ (number density) à l'instant $t = 100$ de notre code (droite) et de celui de [QW07] (gauche). Notre solution est lisse et n'a pas de discontinuité contrairement à [QW07]. Nous avons diffusé légèrement sur tout le domaine alors que [QW07] diffuse beaucoup sur les bords

$x = R_x$ et $y = R_y$ et peu pour les valeurs de x et y proche de 0.

5.6.3 Cas test 7 de [QW07]

Terminons avec le cas 7 de [QW07] avec un noyau constant égal à 1 et un temps égal à 100.

La condition initiale est :

$$f(0, x, y) = 4x \exp(-2x - y)$$

et la solution analytique, voir [QW07, GS78], est :

$$f(t, x, y) = \frac{16}{(t+2)^2} \exp(-2x - y) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{4ty}{t+2}\right)^k x^{2k+1}}{k!(2k+1)!}$$

Pour cette solution, les moments correspondant s'écrivent [QW07, VM05] :

$$\mathcal{M}_{0,0}(t) = 2/(2+t), \quad \mathcal{M}_{1,0}(t) = 1$$

$$\mathcal{M}_{2,0}(t) = \frac{1}{2}(3+2t), \quad \mathcal{M}_{1,1}(t) = 1+t$$

$$\mathcal{M}_{3,0}(t) = \frac{3}{2}(1+t)(2+t), \quad \mathcal{M}_{2,1}(t) = \frac{1}{2}(3+7t+3t^2)$$

Nous avons choisis le même maillage que dans [QW07] avec $N = 40$ points pour chaque composantes et une troncature $R_x = R_y = 1000$. Comme le maillage est le même sur les deux coordonnées, nous conserverons les deux moments d'ordre 1.

Nous reportons en Fig.5.16 et Fig.5.17, les résultats obtenus dans [QW07] (gauche) et ceux que l'on a obtenus (droite)

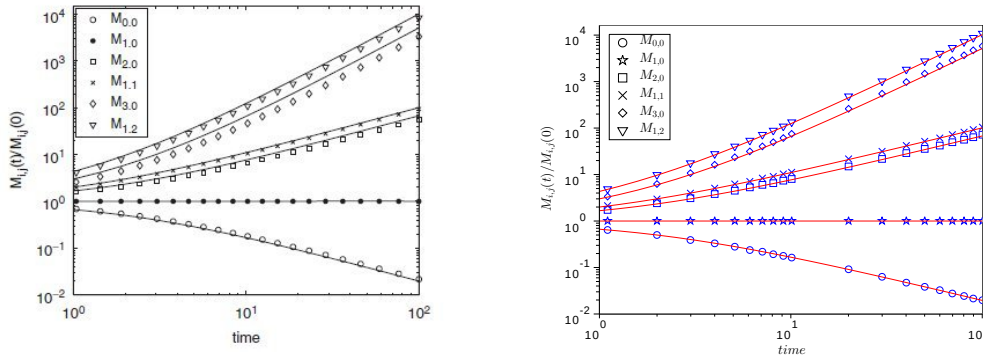


FIGURE 5.16 – Comparaison des moments numériques avec les résultats de [QW07] pour le cas test 7

Les graphiques de Fig.5.16 représentent en échelle $\log_{10}$, l'évolution exacte des premiers moments (courbe pleines) ainsi que leur estimation par notre code (droite) et celui de [QW07] (gauche). Tout comme [QW07], nous approchons bien les premiers moments, plus l'ordre est élevé, plus on surestime.

Les figures de Fig.5.17 représentent, en échelle $\log_{10}$, la fonction numérique $f(x, y, t)$ (number density) à l'instant $t = 100$. Comme pour les autres cas tests, notre solution (droite) n'a pas de discontinuité et a diffusé.

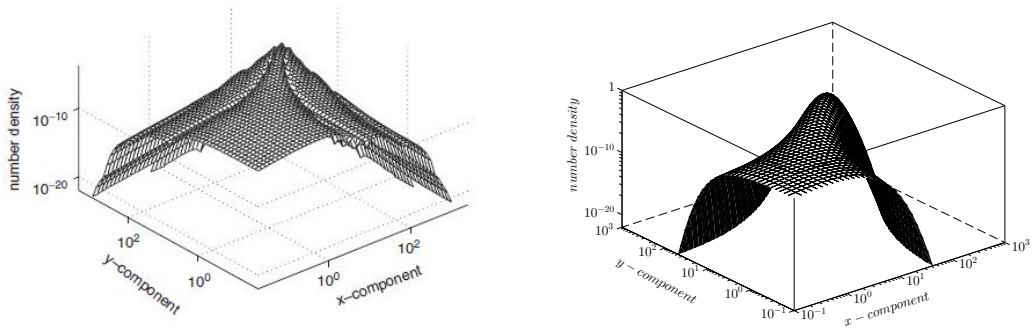


FIGURE 5.17 – Comparaison de la fonction densité numérique à l'instant $t = 100$ avec les résultats de [QW07] pour le cas test 7

5.7 Conclusion

Nous avons construit un schéma numérique pour résoudre la coalescence tout en conservant au moins un moment d'ordre 1. Nous avons vu que ce schéma en une dimension est d'ordre 2. Nous avons vu que notre code donnait de bons résultats, que ce soit en une dimension avec un maillage uniforme ou non, ou en multidimensionnel avec un maillage non-uniforme. Cependant, nous avons remarqué de la diffusion numérique et une surestimation des moments d'ordre strictement supérieur à 1. Ceci peut être dû à la quadrature utilisée, mais aussi à la définition du facteur de proportionnalité $\lambda_{i,j}^k$

Chapitre 6

Résolution du modèle cinétique complet

Dans ce chapitre, nous montrons comment nous résolvons numériquement le modèle de croissance-coalescence présenté au chapitre 4. Soit $n(t, v, m) = n$ la fonction de distribution des bulles, elle représente le nombre de bulles par unité de volume à l'instant t dont le volume est compris entre v et $v + dv$ et la masse entre m et $m + dm$. On s'intéresse donc à la résolution numérique de l'équation

$$\partial_t n + \partial_v(\Phi(t, v, m)n) + \partial_m(\Xi(t, v, m)n) = \zeta(t)Q(n) \quad (6.1)$$

où Φ et Ξ sont les taux de croissance et sont donnés par :

$$\phi(t, v, m) = \frac{1}{\Theta_V} \left(m - vP_a - \Sigma v^{2/3} \right), \quad \Xi(t, v, m) = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} F(t, v, m) \quad (6.2)$$

avec Σ la tension de surface adimensionnelle, ρ_m la densité du magma adimensionnelle et P_a la pression ambiante adimensionnelle, et où $Q(n)$ est l'opérateur de coalescence de Smoluchowski, donné par (4.39). Nous avons rajouté un terme $\zeta(t)$ devant l'opérateur de coalescence qui représente l'efficacité de la coalescence, sauf mention contraire, nous le supposons constant égal à 1. Nous considérons une donnée initiale $n_0(v, m)$ et des conditions aux bords de sortie libre.

Nous discrétisons (6.1), au temps $t = t^k$. On note $\Delta t^k = t^{k+1} - t^k$ et $n^k = n(t^k, v, m)$. Comme la coalescence est résolue en explicite dans le chapitre 5, nous souhaitons ne pas contraindre plus le pas de temps et donc résoudre la partie transport de l'équation en implicite :

$$\frac{n^{k+1} - n^k}{\Delta t^k} + \partial_v(\Phi(t^{k+1}, v, m)n^{k+1}) + \partial_m(\Xi(t^{k+1}, v, m)n^{k+1}) = \zeta(t^n)Q(n^k),$$

ce qui peut s'écrire sous la forme :

$$n^{k+1} + \Delta t^k \left(\partial_v(\Phi(t^{k+1}, v, m)n^{k+1}) + \partial_m(\Xi(t^{k+1}, v, m)n^{k+1}) \right) = \tilde{n}^{k+1} \quad (6.3)$$

$$\text{avec} \quad \tilde{n}^{k+1} = n^k + \Delta t^k \zeta(t^n)Q(n^k). \quad (6.4)$$

La résolution de (6.4) utilisée est celle donnée au chapitre 5. Il ne nous reste donc plus qu'à résoudre (6.3). L'ordre de résolution est important : la coalescence doit être résolue avant et fixera le pas de temps avec sa condition de positivité, puis le transport sera résolu avec le même pas de temps.

Nous avons vu dans le chapitre 5, que la discrétisation de la coalescence retournait des résultats acceptables. Nous validerons la résolution numérique de la partie transport et regarderons l'erreur commise. Ensuite, nous comparerons numériquement les noyaux physiques présentés en chapitre 4. Enfin, nous présenterons les résultats sur le schéma couplé.

Avant de détailler la résolution numérique, nous présentons la discrétisation de l'espace en v et m . Comme les données expérimentales sont souvent données en rayon sur un maillage uniforme, et que la fonction de distribution dépend du volume, pour ce qui suit, nous considérons le maillage suivant en volume et masse : pour tout $i = 0 \dots N$,

$$v_{i-1/2} = \left(\frac{R_0 + i\Delta R}{R_m} \right)^3, \quad \text{avec } \Delta R, R_m \text{ constante}$$

$$m_{i-1/2} = v_{i-1/2} + \Sigma v_{i-1/2}^{2/3}$$

La constante R_m est le rayon moyen de l'état initial qui sert de constante d'adimensionnement, R_0 est le rayon minimum considéré, ΔR est le pas du maillage uniforme en rayon et Σ est la tension de surface adimensionnelle. Nous avons pris un maillage tel que le couple $(v_{i-1/2}, m_{i-1/2})$ soit à l'équilibre à l'instant initial. Nous définissons les pas d'espaces et les points milieux :

$$\Delta v_i = v_{i+1/2} - v_{i-1/2}, \quad \Delta m_i = m_{i+1/2} - m_{i-1/2},$$

$$v_i = (v_{i+1/2} + v_{i-1/2})/2 \quad \text{et} \quad m_i = (m_{i+1/2} + m_{i-1/2})/2.$$

Comme, dans les expériences physiques, nous ne connaissons que la distribution des bulles comme fonction de leur volume, on appellera marginale en fonction du volume au temps t^n la somme suivante

$$Marg(v_i) = \sum_{j=0}^N n_{i,j}^n \Delta m_j, \quad (6.5)$$

et "marginale massique" en fonction du volume au temps t^n la somme suivante

$$Marg_m(v_i) = \sum_{j=0}^N n_{i,j}^n \Delta m_j \Delta v_i. \quad (6.6)$$

6.1 Le transport

Nous considérons ici la partie transport de (6.1) :

$$\partial_t n(t, v, m) + \partial_v (\Phi(t, v, m) n) + \partial_m (\Xi(t, v, m) n) = 0 \quad (6.7)$$

6.1.1 Discrétisation de l'équation de transport

Puisqu'un schéma explicite amènerait à un pas de temps Δt contrôlé par le plus petit des paramètres de relaxation Θ_V et Θ_D qui sont en général très petits, nous discrétisons (6.7) par un schéma aux différences finies implicite. Ainsi nous n'avons pas de conditions sur le pas de temps Δt .

Soit une discrétisation de l'espace v_i et m_j pour $i, j = 1 \dots N$. On discrétise la fonction de distribution $n(t, v, m)$ par $n_{i,j}^k = n(t^k, v_i, m_j)$ et les taux de croissance $\Phi(t, v, m)$ et $\Xi(t, v, m)$ respectivement par $A_{i,j}^k = \Phi(t^k, v_i, m_j)$ et $B_{i,j}^k = \Xi(t^k, v_i, m_j)$.

Donnons la version discrétisée de l'évolution en temps de la pression ambiante et des taux de croissance (4.10) et (4.9) :

$$P_a^k = 1 - t^k \quad (6.8)$$

$$A_{i,j}^k = \frac{1}{\Theta_V} \left(m_j - v_i P_a^k - \Sigma v_i^{2/3} \right) \quad (6.9)$$

$$B_{i,j}^k = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} F_{i,j}^k \quad (6.10)$$

Dans un premier temps, nous splittons l'équation et résolvons d'abord le transport en v puis le transport en m .

Nous utilisons la méthode de Engquist-Osher [Per02] pour obtenir un schéma implicite :

On pose

$$(A^+)^k_{i,j} = \max(0, A_{i,j}^k) \text{ et } (A^-)^k_{i,j} = \max(0, -A_{i,j}^k),$$

ainsi : $A_{i,j}^k = (A^+)^k_{i,j} - (A^-)^k_{i,j}$ et $|A_{i,j}^k| = (A^+)^k_{i,j} + (A^-)^k_{i,j}$.

Le schéma numérique s'écrit alors

$$(1 + \delta_{v_i} |A_{i,j}^{k+1}|) n_{i,j}^{k+1} = n_{i,j}^k + \delta_{v_i} \left((A^+ n)_{i-1,j}^{k+1} + (A^- n)_{i+1,j}^{k+1} \right), \quad (6.11)$$

où on pose $\delta_{v_i} = \frac{\Delta t}{\Delta v_i}$.

On considère donc le problème de transport discret suivant :

$$(1 + \delta_{v_i} |A_{i,j}^{k+1}|) n_{i,j}^{k+1} - \delta_{v_i} \left((A^+ n)_{i-1,j}^{k+1} + (A^- n)_{i+1,j}^{k+1} \right) = n_{i,j}^k \quad (6.12)$$

Pour chaque temps k et indice $j = 1 \dots N$, nous considérons le vecteur X_h^k où

$$h = i + j \ N, \quad (6.13)$$

pour $i = 1 \dots N$, et nous réorganisons les éléments de la fonction de distribution inconnue $n_{i,j}^k$ dans un vecteur de taille N^2 :

$$X^k = (n_{1,1}^k, n_{2,1}^k, n_{3,1}^k, \dots, n_{N-2,N}^k, n_{N-1,N}^k, n_{N,N}^k)^T \quad (6.14)$$

De plus, pour chaque pas de temps, considérons les vecteurs a^k, c^k de taille $N^2 - 1$ respectivement définis par :

$$a_h^k = \begin{cases} -\delta_{v_i} (A^-)^k_{i+1,j} & , \text{ si } i = 1 \dots N-1 \\ 0 & , \text{ si } i = N \end{cases}, \quad j = 1 \dots N$$

$$c_h^k = \begin{cases} -\delta_{v_i} (A^+)^k_{i-1,j} & , \text{ si } i = 2 \dots N \\ 0 & , \text{ si } i = 1 \end{cases}, \quad j = 1 \dots N$$

le vecteur b^k de taille N^2 défini par :

$$b_h^k = 1 + \delta_{v_i} |A_{i,j}^k|, \quad j = 1 \dots N, \ i = 1 \dots N$$

et la matrice tridiagonale D^k associée à a, b, c pour laquelle la ligne h se lit :

$$D_h^k = (0 \ \dots \ 0 \ c_h^k \ b_h^k \ a_h^k \ 0 \ \dots \ 0)$$

Le problème de transport (6.12) se lit alors, pour $h = 1 \dots N^2$:

$$D_{h,h-1}^{k+1} X_{h-1}^{k+1} + D_{h,h}^{k+1} X_h^{k+1} + D_{h,h+1}^{k+1} X_{h+1}^{k+1} = X_h^k \quad (6.15)$$

qui peut être résolu en inversant la matrice tridiagonale D . Pour cela, on utilise la décomposition LU [DHP03].

De façon analogue, pour le terme de dérivation par rapport à m :

$$\partial_t n + \partial_m(\Xi n) = 0 ,$$

on réorganise les éléments de la fonction de distribution $n_{i,j}^k$ dans un vecteur de taille N^2 :

$$Y^k = (n_{1,1}^k, n_{1,2}^k, n_{1,3}^k, \dots, n_{N,N-2}^k, n_{N,N-1}^k, n_{N,N}^k)^T ,$$

Pour chaque pas de temps, nous considérons les vecteurs $\tilde{a}^k, \tilde{c}^k$ de taille $N^2 - 1$ respectivement définis par :

$$\tilde{a}_h^k = \begin{cases} -\delta_{v_i} (B^-)_{i,j+1}^k & , \text{ si } j = 1 \dots N-1 \\ 0 & , \text{ si } i = N \end{cases} , \quad i = 1 \dots N$$

$$\tilde{c}_h^k = \begin{cases} -\delta_{v_i} (B^+)_{i,j-1}^k & , \text{ si } j = 2 \dots N \\ 0 & , \text{ si } i = 1 \end{cases} , \quad i = 1 \dots N$$

le vecteur $\tilde{b}^k$ de taille N^2 défini par :

$$\tilde{b}_h^k = 1 + \delta_{v_i} |B_{i,j}^k| , \quad j = 1 \dots N, i = 1 \dots N$$

et la matrice tridiagonale E^k associée à $\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}$ pour laquelle la ligne h se lit :

$$E_h^k = (0 \dots 0 \tilde{c}_h^k \tilde{b}_h^k \tilde{a}_h^k 0 \dots 0)$$

Le problème de transport en m se lit alors, pour $h = 1 \dots N^2$:

$$E_{h,h-1}^{k+1} Y_{h-1}^{k+1} + E_{h,h}^{k+1} Y_h^{k+1} + E_{h,h+1}^{k+1} Y_{h+1}^{k+1} = Y_h^k \quad (6.16)$$

qui peut être résolu en inversant la matrice tridiagonale E . Pour cela, on utilise la décomposition LU [DHP03].

À chaque itération, on résout un pas de transport en v , puis un pas de transport en m .

6.1.2 Test de validation

Nous testons maintenant numériquement la précision d'une telle discrétisation. Nous allons donc valider le code en regardant les cas classique du transport linéaire et du transport en rotation uniforme, dont les solutions analytiques sont connues.

6.1.2.1 Transport linéaire

Nous considérons l'équation (6.7). Nous fixons Ξ et Φ successivement à 0 ou 10^5 . Nous prenons les données qui seront traitées pour définir le maillage : $R_0 = 10^{-5}$, $\Delta R = 5 \cdot 10^{-6}$, $R_m = 1.75 \cdot 10^{-5}$ et $\Sigma = 2 \cdot 10^{-9}/R_m$ et $N = 250$. La donnée initiale est définie par un double dirac dans la maille (4, 4) et (5, 5) : $n_{i,j}(t=0) \Delta v_i \Delta m_j = \delta_{4,4}(i, j) + 5\delta_{5,5}(i, j)$ où

$$\delta_{x,y}(i, j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = x \text{ et } j = y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On ne présente que les graphiques obtenus pour $\Phi = \Xi = 10^5$. Dans le cas où un des deux taux de croissance est nul, on obtient une projection sur l'axe correspondant de la solution lorsque Φ et Ξ sont non nuls et la marginale suivant cet axe est identique à celle

de la solution lorsque Φ et Ξ sont non nuls. Dans ce cas, la solution analytique est donnée par

$$n(t, v, m) = n_0(v - 10^5 t, m - 10^5 t) ,$$

où $n_0(v, m) = n(t = 0, v, m)$ est la donnée initiale.

On a $m_4 \approx v_4 \approx 1.714^3 \approx 5.038$, $m_5 \approx v_5 \approx 2^3 = 8$ et $m_6 \approx v_6 \approx 2.286^3 \approx 11.94$.

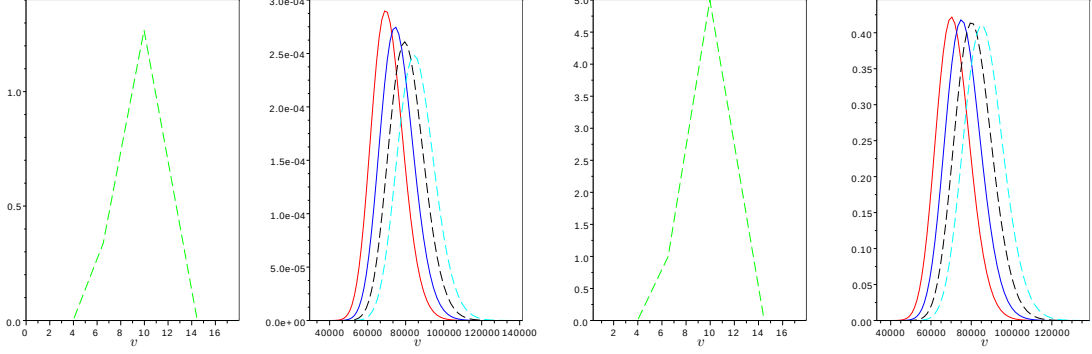


FIGURE 6.1 – Transport de $n(t = 0)$ avec $\Phi = \Psi = 10^5$ aux temps $t = 0.70$, $t = 0.75$, $t = 0.80$ et $t = 0.85$, les graphiques de gauche représentent la marginale de notre inconnue en fonction de son volume et ceux de droite la "marginale massique" de n en fonction du volume v . En vert sont tracées les données initiales, en rouge la résolution au temps $t = 0.7$, en bleu le temps $t = 0.75$, en noir pointillé le temps $t = 0.8$ et en cyan pointillé le temps $t = 0.85$.

Sur Fig.6.1, on peut voir en vert que les données initiales sont centrées sur $v = 10 \in [8, 11.94]$, on retrouve bien sur les graphiques le résultat attendu : les courbes sont respectivement centré sur $v \approx 70000$ pour $t = 0.7$, $v \approx 75000$ pour $t = 0.75$, $v \approx 80000$ pour $t = 0.8$ et $v \approx 85000$ pour $t = 0.85$. Au vu de la précision, la solution numérique retrouve la solution exacte (un pic centré en $v = 10 + 10^5 t$). Il existe de la diffusion numérique, la donnée initiale étant non nulle sur deux mailles et les solutions sont non nulles sur une vingtaine de mailles.

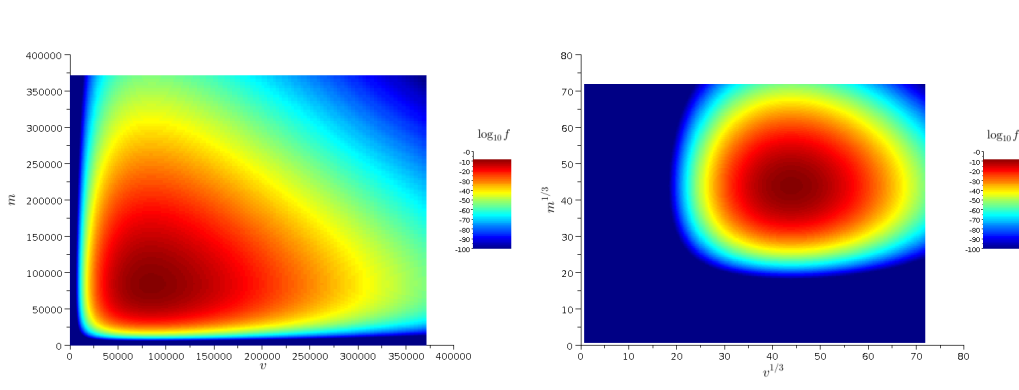


FIGURE 6.2 – Transport de $n(t = 0)$ avec $\Phi = \Psi = 100000$ au temps $t = 0.85$, tracé en fonction de v et m (gauche) et en fonction de $v^{1/3}$ et $m^{1/3}$ (droite).

Sur Fig.6.2, nous traçons le résultat de la résolution par notre schéma avec $\Phi = \Xi = 10^5$ au temps $t = 0.85$, sur le graphique de gauche, nous traçons en fonction des variables v et m , mais comme le maillage est non-uniforme, nous distinguons mal la diffusion numérique,

nous avons alors tracé la solution en fonction de $v^{1/3}$ qui est alors régulier et $m^{1/3}$ qui est presque régulier. Le maximum est atteint sur la 151^{ème} maille en v et en m soit dans l'intervalle $[83535.324, 85184]$, nous sommes donc dans l'intervalle où la solution doit être. Les solutions étant tracées en échelle logarithmique, la diffusion numérique constatée sur la Fig.6.2 est faible.

Les cas, où $\Phi = 0$ ou $\Xi = 0$, sont en fait les projection sur les axes $V = V_{init}$ ou $M = M_{init}$, où V_{init} , respectivement M_{init} représentent les volumes, respectivement les masses, où la donnée initiale était non nulle, ici ce sont les mailles 4 et 5 en volume, respectivement en masse. La diffusion numérique est du même ordre de grandeur et les marginales obtenues sont les mêmes sur V quand $\Phi = 10^5$, $\Xi = 0$ et sur M quand $\Phi = 0$, $\Xi = 10^5$.

6.1.2.2 Transport en rotation uniforme

Nous considérons l'équation (6.7). Nous posons

$$\Phi(t, v, m) = 2\pi(m - M)$$

$$\Xi(t, v, m) = -2\pi(v - V) ,$$

avec $M = m_{N/4}$ et $V = v_{N/4}$. La solution de ce problème est la rotation des données dans le sens horaire autour du point de coordonnée (V, M) dont la période vaut 1. Comme les conditions aux bords sont une sortie libre, les coins du carré initial se feront rogner au cours de la rotation.

Nous prenons les données qui seront traitées pour définir le maillage : $R_0 = 9 \cdot 10^{-6}$, $\Delta R = 5 \cdot 10^{-7}$, $R_m = 10^{-5}$ et $\Sigma = 2 \cdot 10^{-9}/R_m$ et $N = 250$.

La donnée initiale est définie par :

$$n_{i,j}(t=0) = \begin{cases} i \cdot j & \text{si } v_i \leq 1.8 \cdot v_{N/4} \text{ et } m_j \leq 1.8 \cdot m_{N/4} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

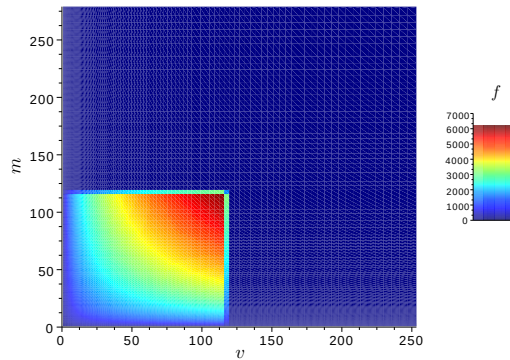


FIGURE 6.3 – Donnée initiale pour le transport en rotation uniforme

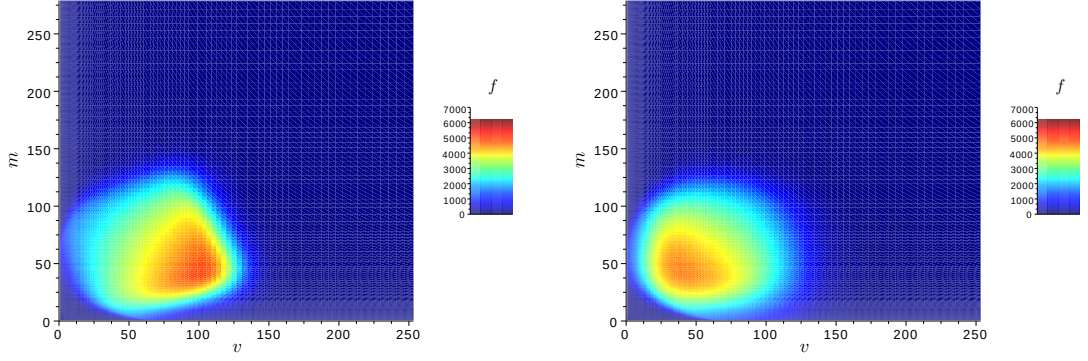


FIGURE 6.4 – Transport en rotation uniforme : solution numérique pour $t = 0.2$ (gauche) et $t = 0.5$ (droite).

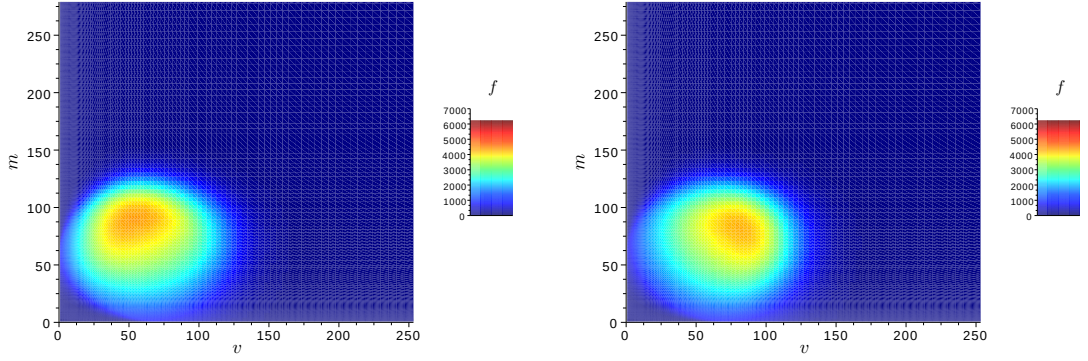


FIGURE 6.5 – Transport en rotation uniforme : solution numérique pour $t = 0.8$ (gauche) et $t = 1.0$ (droite).

Nous constatons sur Fig.6.4 et Fig.6.5, la rotation horaire de la données initiale bien qu'il y ait de la diffusion. La rotation se fait à la bonne vitesse puisqu'au temps 0.5, nous constatons que la donnée initiale a effectué une demi rotation.

Comme nous l'avons vu précédemment, la résolution diffuse, mais donne une bonne approximation de la solution exacte.

6.1.3 Test de convergence

Nous allons maintenant utiliser la résolution présentée en section 6.1.1 pour Φ et Ξ donnée par le modèle de volcanologie par (6.2). Nous comparerons donc dans un premier temps, les résultats obtenus avec le modèle cinétique et le système d'équations différentielles.

6.1.3.1 Comparaison des flux

Nous allons maintenant nous intéresser au flux F présent dans la définition de Ξ .

Afin de comparer les résultats obtenus par la simulation du modèle cinétique avec le modèle monodisperse (chapitres 1, 2 et 3), nous modifions le code décrit au chapitre 1 (et annexe A) et remplaçons la résolution de l'équation de diffusion par une formule pour approcher le flux. Il s'agit ici de voir quelle approximation est la meilleure afin de ne travailler qu'avec celle-ci sur l'équation cinétique.

Les données utilisées sont une porosité $\alpha_i = 7.79\%$, une constante de diffusivité $D = 6.95 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, une concentration d'eau dans le magma $C = 4.213$, une pression initiale $P_i = 10^8 \text{ Pa}$, une tension de surface $\sigma = 0.1 \text{ J m}^{-2}$, une viscosité effective constante $\eta_{eff} = 59000 \text{ Pa s}$, une densité du magma $\rho_m = 2354 \text{ kg m}^{-3}$, une température de 825°C (1098.5K), un taux de décompression $DP = 500000 \text{ Pa s}^{-1}$, une constante de Henry $K_H = 3.44 \cdot 10^{-6} \cdot \text{Pa}^{-1/2}$, un rayon moyen $R_m = 1.75 \cdot 10^{-5} \text{ m}$, un rayon minimum $R_0 = 5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, un pas d'espace $\Delta R = 2.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, et 250 mailles pour la discrétisation en espace.

Nous avons comparé les résultats pour les paramètres $\Theta_D \in \{10^{-5}, 10^{-3}, 10^{-1}, 10^1, 10^3\}$ et $\Theta_V \in \{10^{-9}, 10^{-7}, 10^{-5}, 10^{-3}, 10^{-1}, 10^1\}$ et nous présentons les graphiques les plus représentatifs.

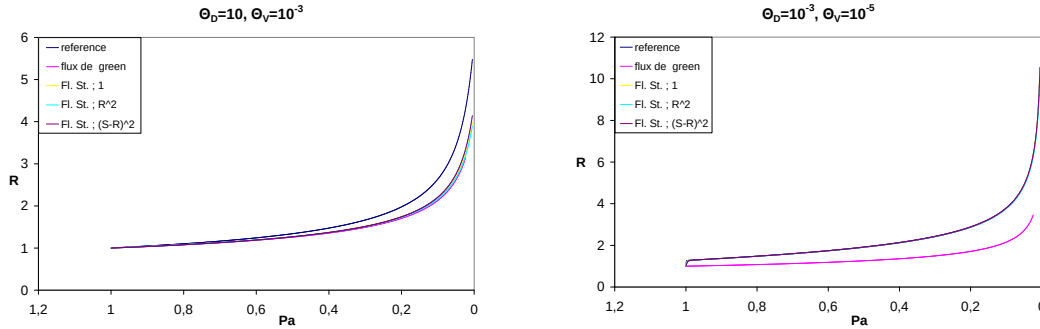


FIGURE 6.6 – Comparaisons de l'évolution du rayon pour différents flux pour $\Theta_D = 10$, $\Theta_V = 10^{-3}$ (à gauche) et pour $\Theta_D = 10^{-3}$, $\Theta_V = 10^{-5}$ (à droite).

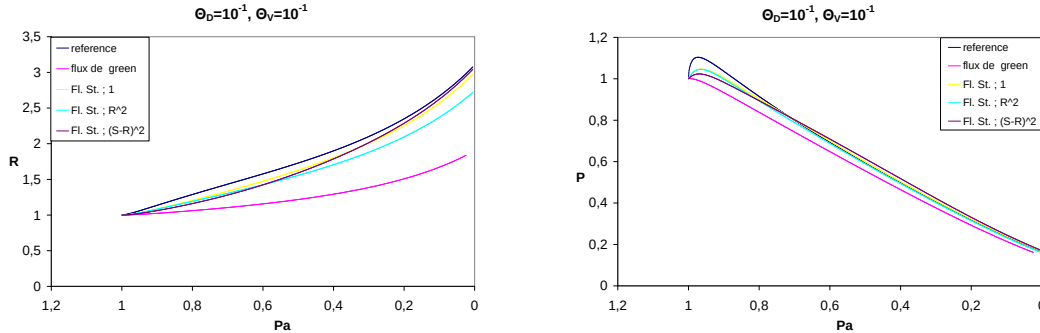


FIGURE 6.7 – Comparaisons de l'évolution du rayon (à gauche) et de la pression (à droite) pour différents flux pour $\Theta_D = 10^{-1}$, $\Theta_V = 10^{-1}$

Dans Fig.6.6 et Fig.6.7, nous traçons le rayon R ou la pression P en fonction de la pression ambiante P_a . Dans la légende des graphiques, "reference" correspond à la courbe obtenue par le système d'équations différentielles couplé à l'équation de diffusion, le flux de Green est celui défini par (4.36), les "Fl. St. ; xxx" est le flux asymptotique défini par (4.37) où xxx définit l'inverse du coefficient A que l'on considère, $A = 1/\text{xxx}$.

Nous constatons sur Fig.6.6 et Fig.6.7 que le flux de Green et le flux asymptotique donnent le même résultat dans certain cas ($\Theta_D \gg 1$), alors que nous avons défini le flux de Green pour les Θ_D petit. Mais le flux de Green ne peut être que continu alors que la solution a une discontinuité au temps initial, de ce fait, le flux asymptotique est meilleur.

Nous avons testé plusieurs flux asymptotiques, en modifiant la valeur du coefficient A , que nous avons fixé à 1, $1/R^2$, puis à $1/(S - R)^2$. On remarque peu de différences sur les résultats. Les endroits où l'on peut distinguer une différence montrent que la meilleure approximation de A testée est 1. Nous choisissons donc le flux asymptotique avec $A = 1$ pour la suite de nos simulations.

6.1.3.2 Comparaison Monodisperse/Polydisperse

Nous allons maintenant comparer les résultats obtenus par notre modèle monodisperse (système d'équation différentielles) et notre modèle polydisperse (équation cinétique) avec les mêmes conditions initiales : une porosité $\alpha_i = 7.79\%$, une constante de diffusivité $D = 10^{-10} \cdot m^2 \cdot s^{-1}$, une concentration d'eau dans le magma $C = 4.21$, une pression initiale $P_i = 10^8 \text{ Pa}$, une tension de surface $\sigma = 0.1 \text{ J} \cdot m^{-2}$, une viscosité effective constante $\eta_{eff} = 250000 \text{ Pa} \cdot s$, une densité du magma $\rho_m = 2400 \text{ kg} \cdot m^{-3}$, une température de $825^\circ C$ ($1098.5K$), un taux de décompression $DP = 100000$, une constante de Henry $K_H = 3.44 \cdot 10^{-6} \text{ Pa}^{-1/2}$ et un rayon moyen $R_m = 10^{-5} \text{ m}$. Pour le polydisperse, nous avons également un rayon minimum $R_0 = 0 \text{ m}$, un pas d'espace $\Delta R = 0.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, et 250 mailles pour la discrétisation en espace et une condition initiale

$$n_{i,j}(0)\Delta v_i\Delta m_j = \delta_{20,20}(i,j) \text{ .}$$

Comme nous l'avons vu précédemment, le flux que nous avons choisi n'est pas exact mais reste toutefois assez proche de celui du modèle monodisperse complet, c'est pourquoi nous allons comparer les résultats du système d'équations différentielles pour le flux exact et le flux approché avec les résultats de l'équation cinétique.

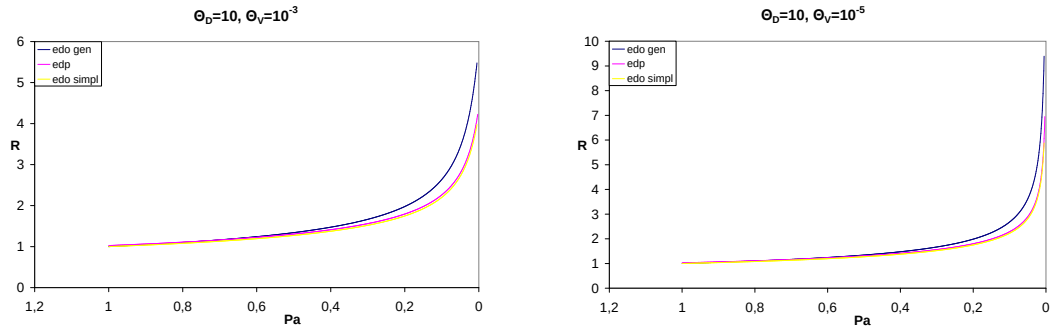


FIGURE 6.8 – Comparaisons de l'évolution du rayon médian obtenue par résolution de l'équation cinétique, et le système d'équation avec flux simplifié et équation de diffusion pour $\Theta_D = 10$, $\Theta_V = 10^{-3}$ (à gauche) et pour $\Theta_D = 10$, $\Theta_V = 10^{-5}$ (à droite).

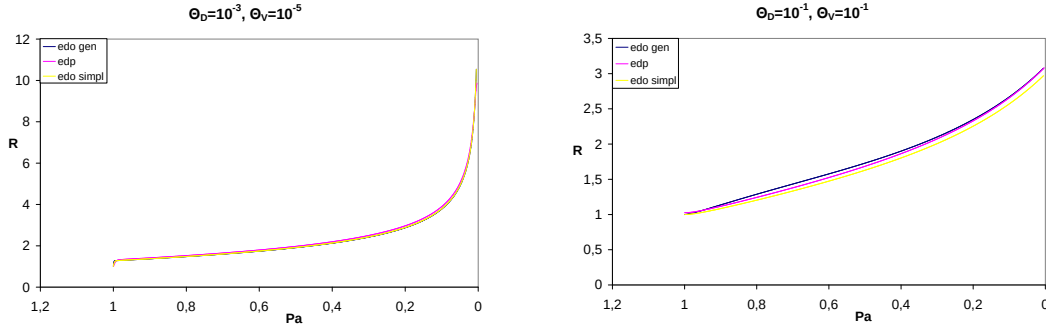


FIGURE 6.9 – Comparaisons de l'évolution du rayon médian obtenue par résolution de l'équation cinétique, et le système d'équation avec flux simplifié et équation de diffusion pour $\Theta_D = 10^{-3}$, $\Theta_V = 10^{-5}$ (à gauche) et pour $\Theta_D = 10^{-1}$, $\Theta_V = 10^{-1}$ (à droite).

Dans Fig.6.8 et Fig.6.9, nous traçons le rayon (moyen) R en fonction de la pression ambiante P_a . Dans la légendes des graphiques, "edo gen" correspond à la courbe obtenue par le système d'équations différentielles couplé à l'équation de diffusion, "edo simpl" correspond à la courbe obtenue avec le système d'équations différentielles avec le flux simplifié et "edp" correspond à la courbe obtenue par l'équation cinétique. On constate que la résolution de l'équation cinétique donne des résultats quasiment identiques à ceux de la résolution du système d'équations différentielles. La légère différence vient du fait qu'en cinétique, la donnée est sur une maille dont seule la valeur moyenne est considérée, elle n'est pas exactement sur un rayon moyen adimensionné de 1. L'équation cinétique et le système d'équations différentielles donnant le même résultat pour une seule bulle, nous allons regarder la différence entre l'évolution d'une seule bulle et l'évolution du volume moyen d'une population de bulles.

Nous comparons maintenant les résultats obtenus avec le modèle cinétique entre une population de bulles initiale et une bulle dont le volume est le volume médian de la population précédemment citée. Nous considérons donc le modèle cinétique avec les mêmes conditions initiales : une porosité $\alpha_i = 7.79\%$, une constante de diffusivité $D = 6.95076 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, une concentration d'eau dans le magma $C = 3.44$, une pression initiale $P_i = 10^8 \text{ Pa}$, une tension de surface $\sigma = 0.1 \text{ J m}^{-2}$, une viscosité effective constante $\eta_{eff} = 59000 \text{ Pa s}$, une densité du magma $\rho_m = 2354 \text{ kg m}^{-3}$, une température de 825°C (1098.5K), un taux de décompression $DP = 500000$, une constante de Henry $K_H = 3.44 \cdot 10^{-6} \text{ Pa}^{-1/2}$ et un rayon moyen $R_m = 1.75 \cdot 10^{-5} \text{ m}$. Nous avons pris un rayon minimum $R_0 = 0 \text{ m}$, un pas d'espace $\Delta R = 0.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, et 250 mailles pour la discrétisation en espace. Ici, dans le cas monodisperse, la donnée initiale s'écrit

$$n_{i,j}(0)\Delta v_i\Delta m_j = \delta_{6,6}(i,j) \quad (6.17)$$

et dans le cas polydisperse, la donnée initiale (série expérimentale ABG1) s'écrit

$$\begin{aligned} n_{i,j}(0)\Delta v_i\Delta m_j &= \frac{1}{149} \left(6\delta_{4,4}(i,j) + 27\delta_{5,5}(i,j) + 45\delta_{6,6}(i,j) + 30\delta_{7,7}(i,j) + \right. \\ &\quad \left. + 17\delta_{8,8}(i,j) + 18\delta_{9,9}(i,j) + 4\delta_{11,11} + 2\delta_{11,11} \right) \end{aligned} \quad (6.18)$$

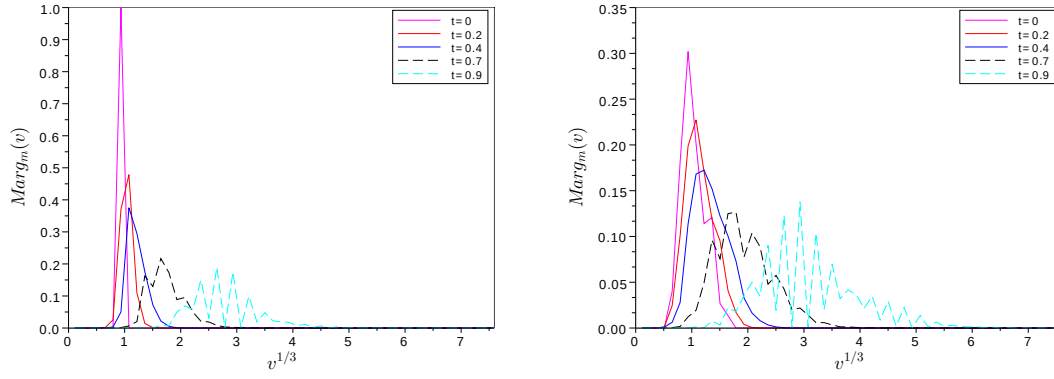


FIGURE 6.10 – Marginale "massique" pour le cas monodisperse (gauche) et le cas polydisperse (droite) aux temps $t = 0$, $t = 0.2$, $t = 0.4$, $t = 0.7$ et $t = 0.9$.

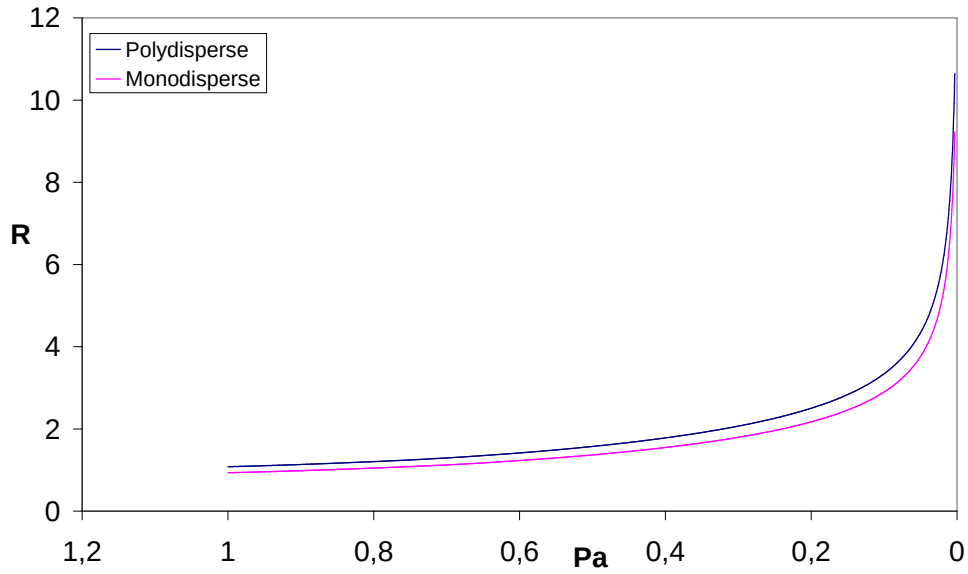


FIGURE 6.11 – Évolution du rayon moyen R en fonction de la pression ambiante P_a , pour le cas monodisperse et le cas polydisperse.

Nous montrons (Fig. 6.10) comment évolue la population de bulles aux temps $t = 0$, $t = 0.2$, $t = 0.4$, $t = 0.7$ et $t = 0.9$. On constate qu'au cours du temps des oscillations apparaissent, nous les étudions dans la section suivante.

Dans Fig. 6.11, nous traçons l'évolution du rayon moyen obtenu par la résolution de l'équation cinétique. La légende "Polydisperse" se rapporte à la donnée initiale (6.18) et la légende "Monodisperse" se rapporte à la donnée initiale (6.17). Nous constatons que lorsque différents volumes de bulles sont présents, l'évolution du rayon moyen est légèrement différente (plus rapide ici). Le rayon initial n'est pas le même pour les deux

cas, en effet, le rayon moyen pour chacun des deux cas était identique en continu, mais est différent en discret. Cette erreur est due à la discrétisation.

6.1.3.3 Dimension des pas de discrétisation

On a constaté des oscillations dans les marginales de la solution des tests précédents (Fig.6.10), nous allons donc vérifier que ces oscillations ne viennent ni du pas de temps, ni du pas d'espace et qu'il est nécessaire de faire un post-traitement pour les éliminer.

Les données utilisées pour le test témoin de cette partie sont une porosité $\alpha_i = 7.79\%$, une constante de diffusivité $D = 0 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (on fixe $\Xi(t, v, m) = 0$), une concentration d'eau dans le magma $C = 4.213$, une pression initiale $P_i = 10^8 \text{ Pa}$, une tension de surface $\sigma = 0.1 \text{ J m}^{-2}$, une viscosité effective constante $\eta_{eff} = 59000 \text{ Pa s}$, une densité du magma $\rho_m = 2354 \text{ kg m}^{-3}$, une température de 825°C (1098.15K), un taux de décompression $DP = 500000 \text{ Pa s}^{-1}$, un rayon moyen $R_m = 1.75 \cdot 10^{-5} \text{ m}$, un rayon minimum $R_0 = 5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, un pas d'espace $\Delta R = 2.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, et 250 mailles pour la discrétisation en espace.

Nous prenons la donnée initiale suivante :

$$n_{i,j}(0)\Delta v_i\Delta m_j = \frac{1}{149} \left(6\delta_{4,4}(i,j) + 27\delta_{5,5}(i,j) + 45\delta_{6,6}(i,j) + 30\delta_{7,7}(i,j) + \right. \\ \left. + 17\delta_{8,8}(i,j) + 18\delta_{9,9}(i,j) + 4\delta_{11,11} + 2\delta_{11,11} \right)$$

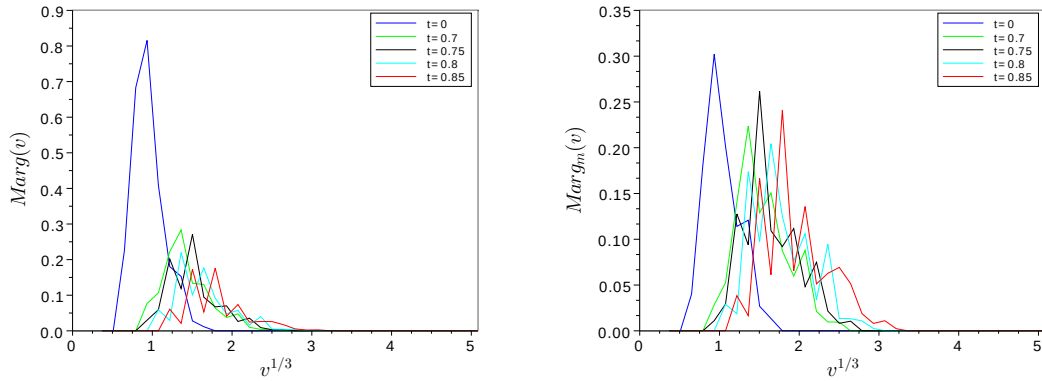


FIGURE 6.12 – Résolution témoin. Sont représentés sur les graphiques, la marginale (gauche) et la marginale "massique" (droite) aux temps $t = 0, t = 0.7, t = 0.75, t = 0.8$ et $t = 0.85$ en fonction du rayon $v^{1/3}$

On constate, sur Fig.6.12, des oscillations sur la marginale et la marginale "massique". Le cas choisi ($D = 0$) signifie que les oscillations ne viennent pas de la définition du flux. On utilisait un pas de temps de $\Delta t = 0.001$ pour le cas témoin, nous fixons maintenant le pas de temps à $\Delta t = 0.00001$ et nous reprenons les mêmes données que le cas témoin :

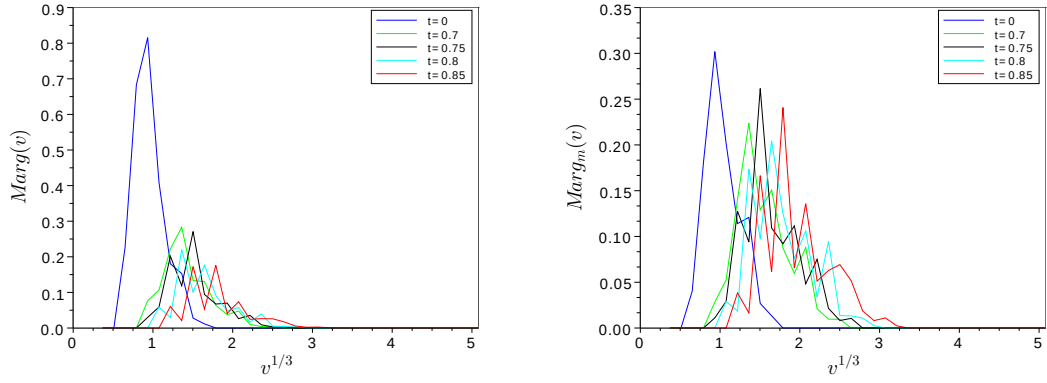


FIGURE 6.13 – Résolution pour un pas de temps 100 fois plus petit. Sont représentés sur les graphiques, la marginale (gauche) et la marginale "massique" (droite) aux temps $t = 0$, $t = 0.7$, $t = 0.75$, $t = 0.8$ et $t = 0.85$ en fonction du rayon $v^{1/3}$

On constate, sur Fig.6.13, exactement les mêmes oscillations sur les marginales. Par contre, comme attendu, il y a atténuation de la diffusion numérique sur la solution. Les oscillations ne viennent donc pas d'une erreur sur la résolution en temps, ni du pas de temps choisi. Nous vérifions maintenant le pas d'espace. Nous reprenons les données initiales du cas témoin sauf le pas d'espace $\Delta R = 1.25 \cdot 10^{-6}$ et le nombre de mailles que l'on augmente à 500, le pas de temps est à nouveau $\Delta t = 0.001$. La nouvelle donnée initiale $f_{i,j}(t = 0)$ est construite à partir de la donnée initiale témoins de la manière suivante :

$$f_{2i,2j} = f_{2i+1,2j} = f_{2i,2j+1} = f_{2i+1,2j+1} = n_{i,j}$$

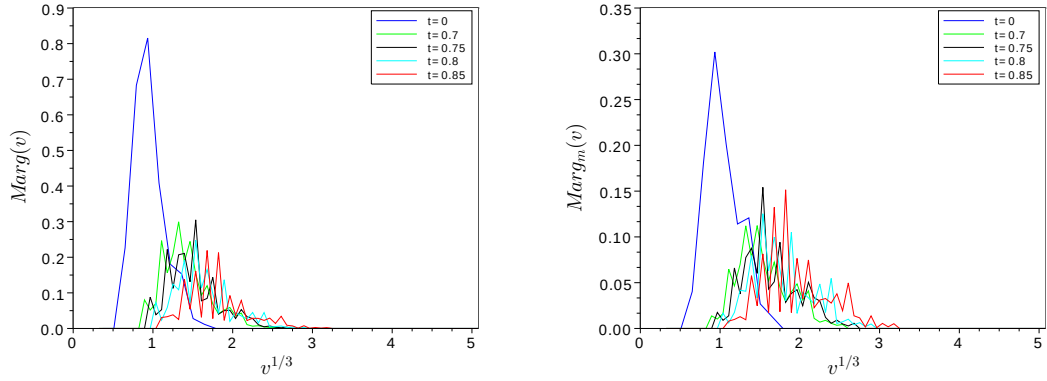


FIGURE 6.14 – Résolution pour un pas d'espace 2 fois plus petit. Sont représentés sur les graphiques, la marginale (gauche) et la marginale "massique" (droite) aux temps $t = 0$, $t = 0.7$, $t = 0.75$, $t = 0.8$ et $t = 0.85$ en fonction du rayon $v^{1/3}$

On constate, sur Fig.6.14, qu'il y a encore plus d'oscillations lorsque l'on prend un pas d'espace plus petit. Le problème n'est donc pas une instabilité due à la discrétisation en espace.

6.1.3.4 Post-traitement nécessaire

Suite aux résultats des études sur les pas d'espace Δx et de temps Δt , nous pensons que les oscillations viennent peut-être du fait que notre état d'équilibre (la courbe $\Phi = 0$)

varie au cours du temps. Nous fixons alors un état d'équilibre constant égal à celui du temps $t = 0.85$. Nous considérons l'équation (6.7). Nous avons donc fixé $\Xi = 0$ (équivalent à regarder le cas limite $D = 0$) car nous pensons que les oscillations viennent de Φ et $\Phi(t, v, m) = 3(m - 0.15v - \Sigma v^{2/3})$ (équivalent à regarder le cas $P_i = 1.5 \cdot 10^7$ et $DP = 0$), ceci pour être sûr que les oscillations ne viennent pas du fait que l'état stationnaire de Φ était variable en temps. Nous prenons les données qui seront traitées pour définir le maillage : $R_0 = 10^{-5} m$, $\Delta R = 5 \cdot 10^{-6} m$, $R_m = 1.75 \cdot 10^{-5} m$ et $\Sigma = 2 \cdot 10^{-9}/R_m$ et $N = 250$. Nous définissons la donnée initiale :

$$n_{i,j}(0)\Delta v_i\Delta m_j = \left(6\delta_{2,2}(i,j) + 27\delta_{3,3}(i,j) + 45\delta_{4,4}(i,j) + 30\delta_{5,5}(i,j) + 17\delta_{6,6}(i,j) + 18\delta_{7,7}(i,j) + 4\delta_{8,8}(i,j) + 2\delta_{9,9}(i,j)\right)/149$$

$$\text{où } \delta_{x,y}(i,j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = x \text{ et } j = y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Sur Fig.6.15, le graphique du haut représente l'état de la fonction f définie par $f_{i,j} = n_{i,j}\Delta v_i\Delta m_j$ c'est à dire, les coordonnées qui contiennent le plus de masse, de plus nous avons tracé en bleu la courbe d'équilibre $\Phi(t, v, m) = 0$ au temps $t = 0.85$ définie par

$$m = (1 - 0.85)v + \Sigma v^{2/3}.$$

Le graphique du bas représente la marginale "massique" $Marg_m(v)$ définie par (6.6). On constate que pour chaque classe de masse, le transport en volume est correct, la solution tend vers la courbe d'équilibre tracée en bleu.

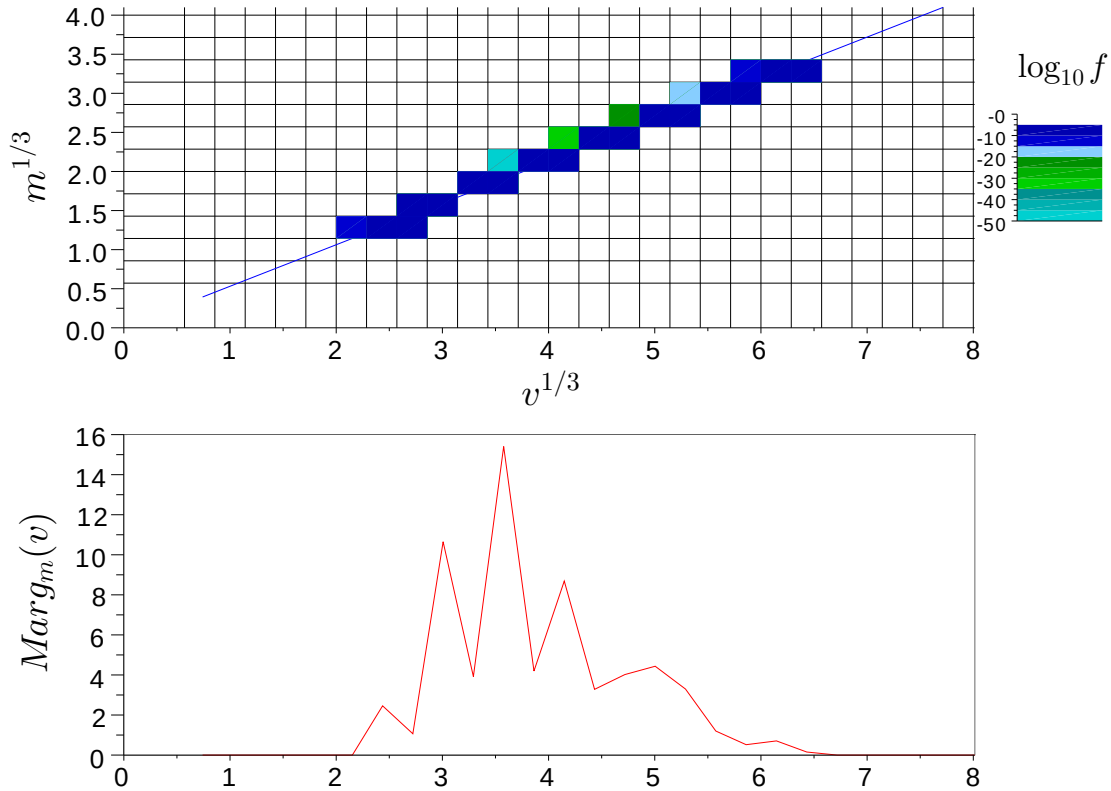


FIGURE 6.15 – Résultat à $t = 0.85$ pour la densité de distribution et la marginale "massique"

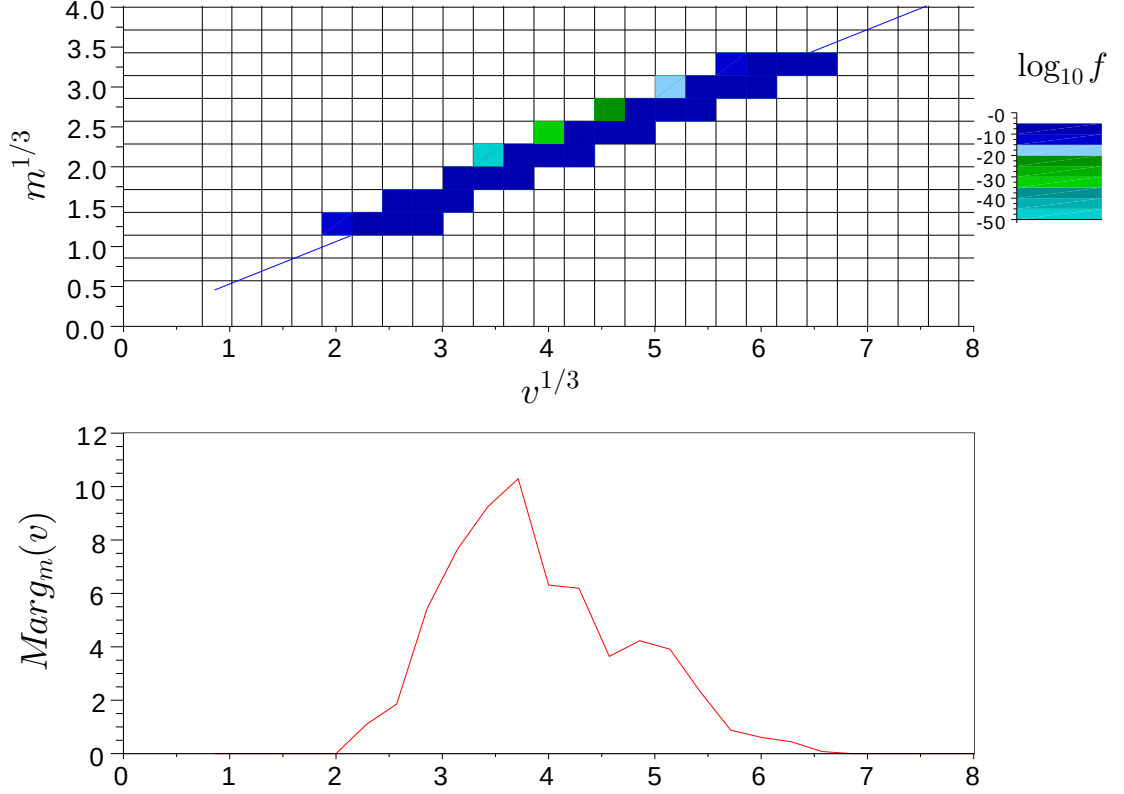


FIGURE 6.16 – Résultat à $t = 0.85$ pour la densité de distribution et la marginale "massique" après post-traitement

Les oscillations ne viennent pas de l'état d'équilibre variable en temps, mais de la position de la courbe d'équilibre par rapport au maillage. Il est donc nécessaire de post-traiter les données.

On propose d'utiliser une méthode de type moyenne glissante sur les volumes : la fonction de distribution $n_{i,j}$ est redéfinie en $f_{i,j}$ sur le maillage décalé en volume d'une demi-maille :

$$f_{i,j} = n_{i,j} \frac{v_{i+1/2} - v_i}{\Delta v_i} + n_{i+1,j} \frac{v_{i+1} - v_{i+1/2}}{\Delta v_{i+1}}, \quad \forall i > 0.$$

La fonction de distribution et la marginale "massique" calculées à partir de la fonction de distribution f sont tracées en Fig. 6.16. Comme attendu, les oscillations sont amorties.

6.2 La coalescence

6.2.1 Comparaison des noyaux de coalescence

Nous voulons comparer le comportement de deux noyaux de coalescence, ainsi que vérifier numériquement l'existence de solutions stationnaires du type (4.55).

Nous prenons la condition initiale suivante : une porosité $\alpha_i = 2\%$, une constante de diffusivité $D = 6.95076 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, une concentration d'eau dans le magma $C = 3.4 \text{ \%oids}$, une pression initiale $P_i = 3 \cdot 10^7 \text{ Pa}$, une tension de surface $\sigma = 5.775 \cdot 10^2 \text{ J m}^{-2}$, une viscosité effective constante $\eta_{eff} = 59000 \text{ Pa s}$, une densité du magma $\rho_m = 2354 \text{ kg m}^{-3}$, une température de 825°C (1098.15K), un taux de décompression $DP = 500000$ et un rayon moyen $R_m = 3.85 \cdot 10^{-5} \text{ m}$. Nous avons pris un rayon minimum $R_0 = 0 \text{ m}$, un pas d'espace $\Delta R = \sqrt[3]{0.25} R_m \text{ m}$, et 60 mailles pour la discrétisation en espace.

Avec de telles données, la tension de surface adimensionnelle vaut $\Sigma = 1$ et nous permet de distinguer la zone où la solution stationnaire est définie.

Nous définissons deux fonctions $f_{i,j}$ et $g_{i,j}$, $i, j \in \{0 \dots N-1\}^2$ comme suit :

$$f_{i,j} = \begin{cases} 10^{-6} & \text{si } i = 2 \text{ et } 1 \leq j < N/3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$g_{i,j} = \begin{cases} 10^{-3} & \text{si } m_3 < \Sigma v_i^{2/3} \text{ et } j = 3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Nous allons regarder le comportement des deux noyaux présentés en section 4.3 avec trois données initiales : f , g et $f + g$. La donnée initiale g est une solution stationnaire (voir proposition 4.3.1).

Tous les graphiques de cette section ont pour abscisse $v^{1/3}$ et pour ordonnée $m^{1/3}$, ceci afin de distinguer les plus petits volumes. Sur tout les graphiques de cette section, la courbe d'équation $m = \Sigma v^{2/3}$ est tracée en blanc. Nous traçons d'abord les données initiales f et g en Fig.6.17.

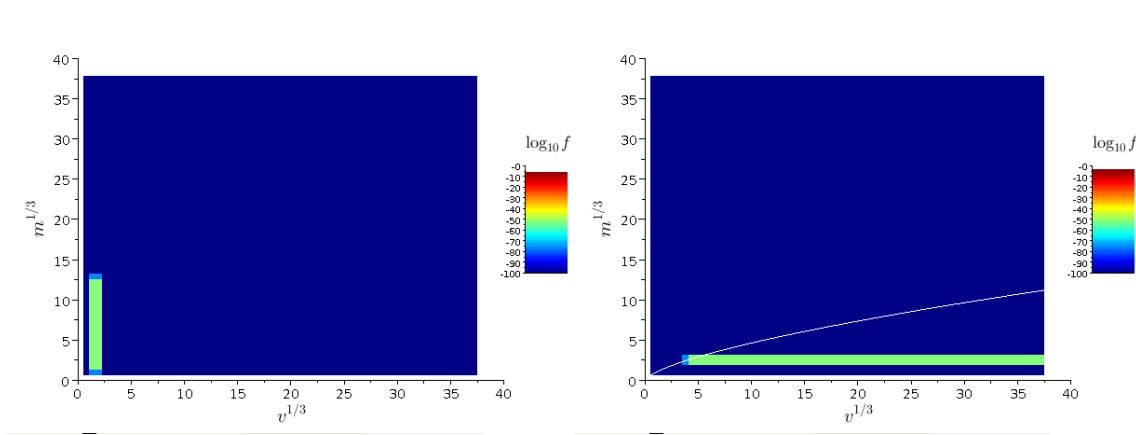


FIGURE 6.17 – Données initiales pour tester les noyaux de coalescence : f (gauche), g (droite)

Puis nous traçons, en Fig.6.18, Fig.6.19 et Fig.6.20, pour chaque donnée initiale, la solution numérique pour chacun des noyaux, à gauche pour le noyau défini par (4.54) et à droite pour le noyau défini par (4.53).

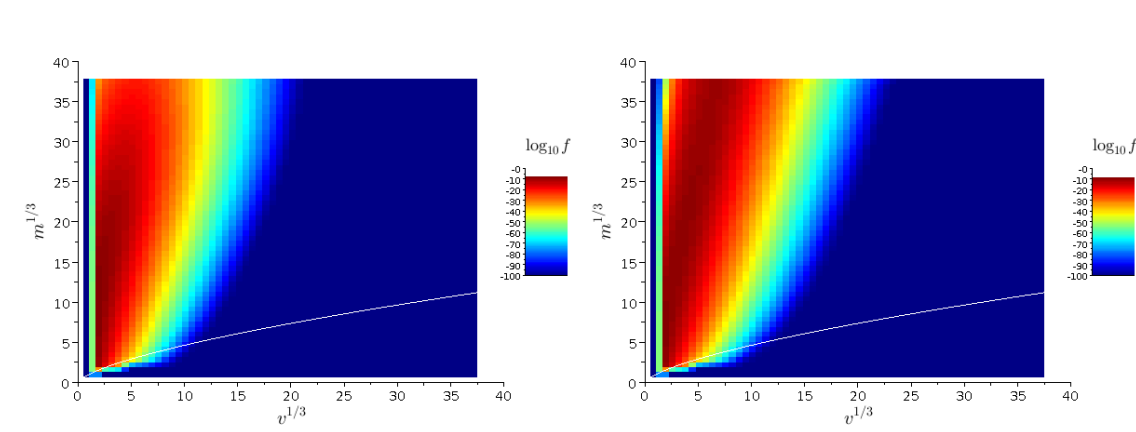


FIGURE 6.18 – Évolution de la donnée initiale f pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$.

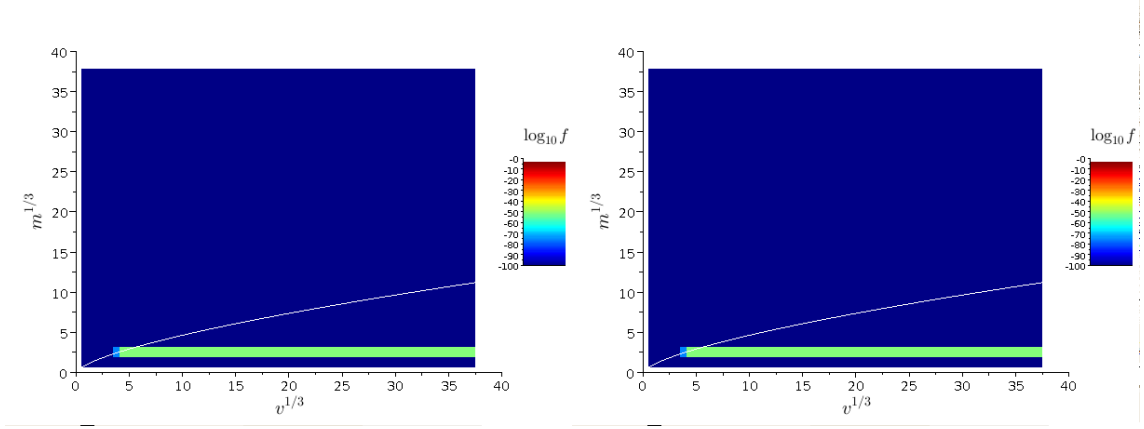


FIGURE 6.19 – Évolution de la donnée initiale g pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$.

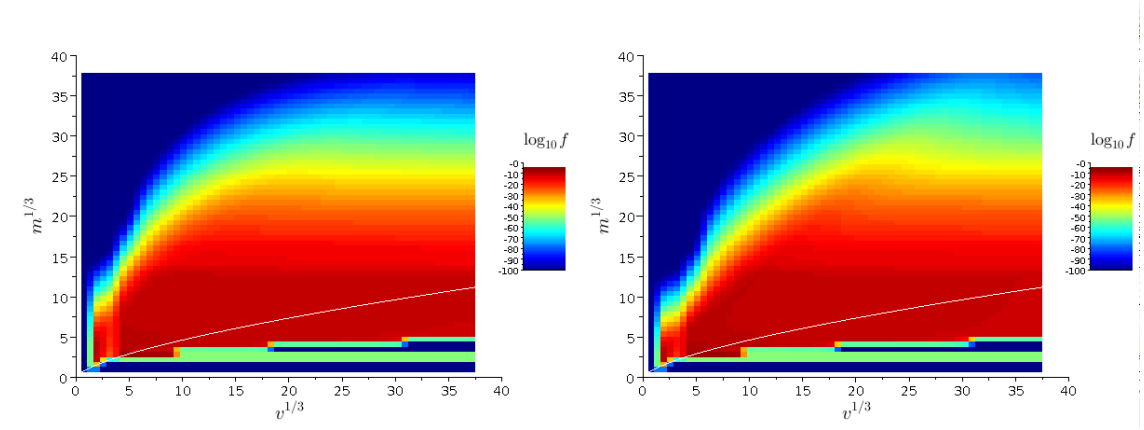


FIGURE 6.20 – Évolution de la donnée initiale $f + g$ pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.043$.

Nous modifions les deux fonctions $f_{i,j}$ et $g_{i,j}$, $i, j \in \{0 \dots N-1\}^2$:

$$f_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = 2 \text{ et } 1 \leq j < N/3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$g_{i,j} = \begin{cases} 10 & \text{si } m_3 < \Sigma v_i^{2/3} \text{ et } j = 3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Nous traçons les nouvelles données initiales f et g en Fig.6.21.

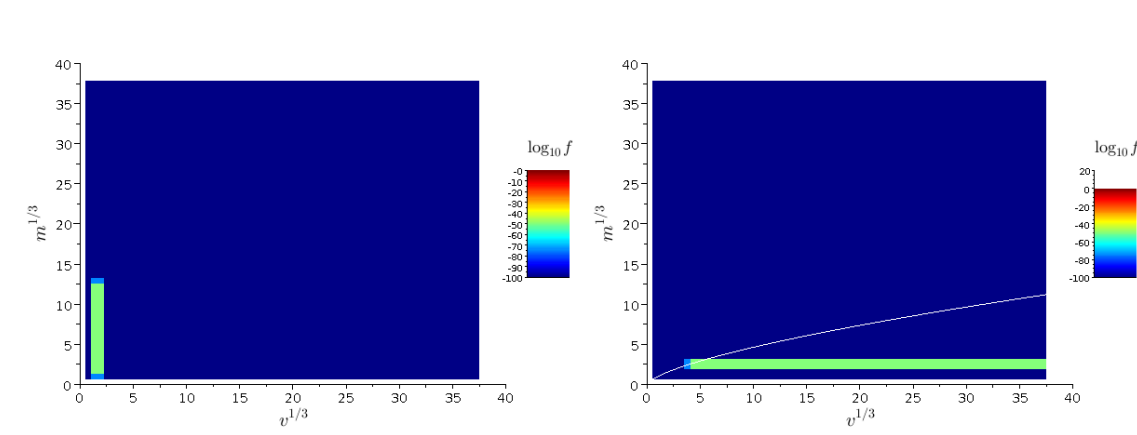
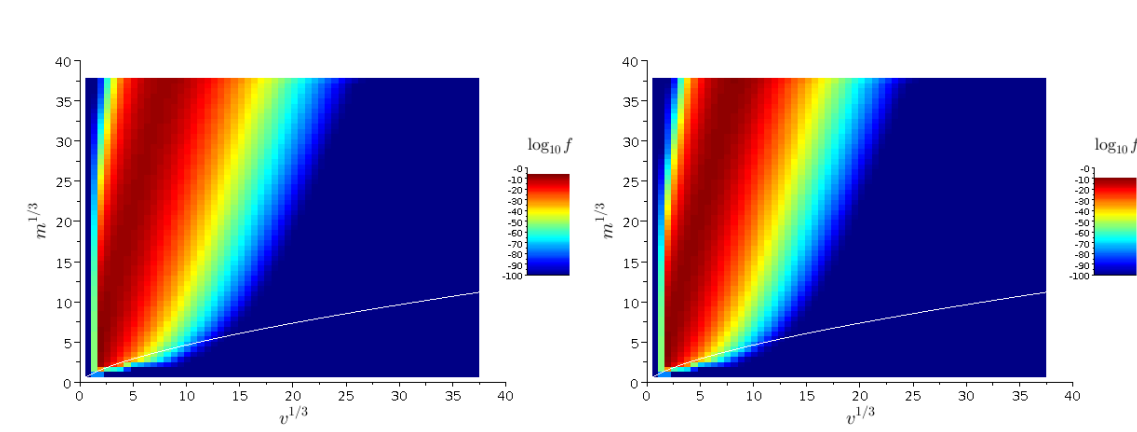
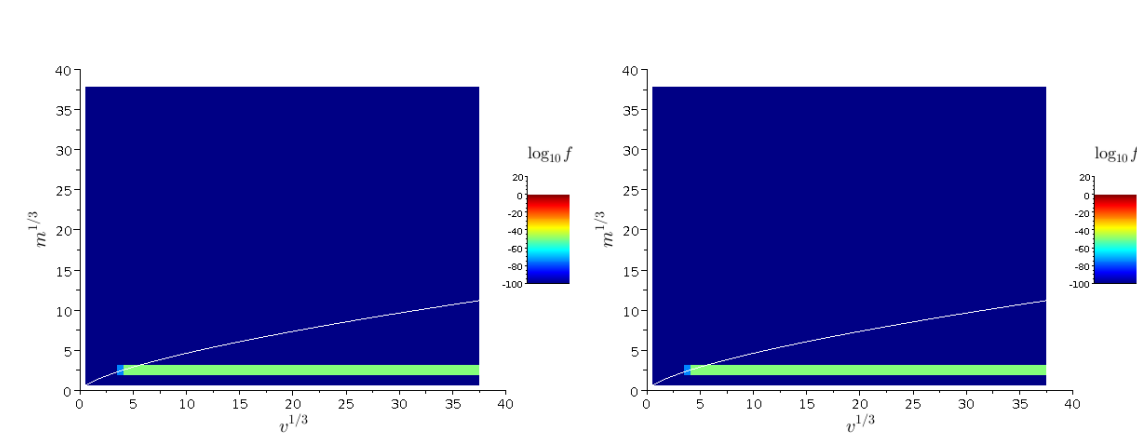


FIGURE 6.21 – Données initiales pour tester les noyaux de coalescence

Puis nous traçons, en Fig.6.22 et Fig.6.23, pour chaque données initiales, la solution numérique pour chacun des noyaux, à gauche pour le noyau défini par (4.54) et à droite pour le noyau défini par (4.53).


 FIGURE 6.22 – Évolution de la donnée initiale f pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$.

 FIGURE 6.23 – Évolution de la donnée initiale g pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$.

Nous constatons dans les deux cas que la donnée initiale g est bien une solution stationnaire. La solution pour les données initiales f et $f + g$ sont différentes, la donnée initiale g interagit avec la donnée initiale f dans le cas de $f + g$.

Bien que l'évolution soit similaire, la population grossit plus vite pour le noyau défini par (4.53) dans les cas traités.

6.3 Couplage avec la coalescence

6.3.1 Résultats numériques

Dans un premier temps nous testons le couplage en prenant un noyau constant $H(\omega, \omega', t) = 1$, des vitesses de transport linéaire $\Phi = \Xi = 100$. Nous prenons les données qui seront traitées pour définir le maillage : $R_0 = 0$ m, $\Delta R = 12.5 \cdot 10^{-6}$ m, $R_m = 3.85 \cdot 10^{-5}$ m et $\sigma = 0.06$, $P_i = 3 \cdot 10^7$ et $N = 250$.

Nous prenons la donnée initiale suivante :

$$n_{i,j}(0) = 1\delta_{0,0}(i,j) + 15\delta_{1,1}(i,j) + 30\delta_{2,2}(i,j) + 40\delta_{3,3}(i,j) + 17\delta_{4,4}(i,j) + 4\delta_{5,5}(i,j)$$

que nous normalisons successivement pour que le moment d'ordre 0 fasse 1 puis 100.

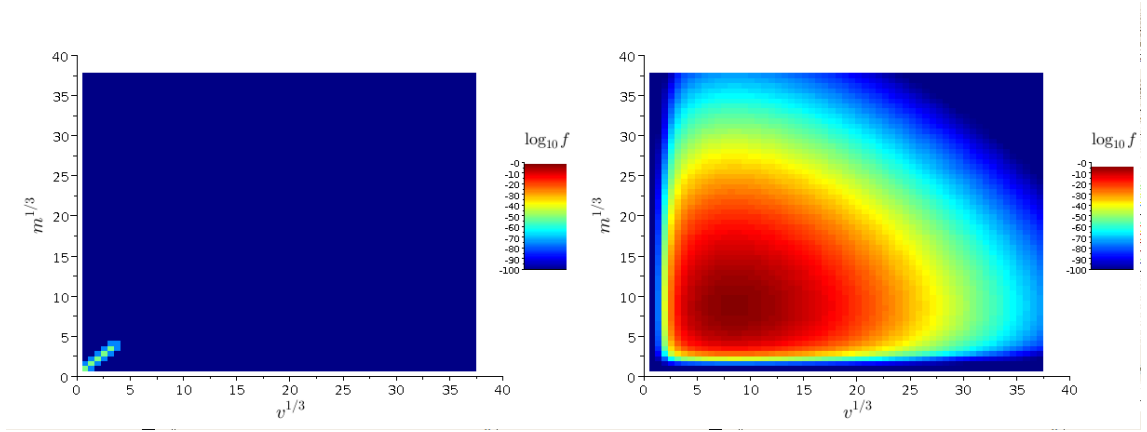


FIGURE 6.24 – Donnée initiale pour un test simple de couplage transport/coalescence (gauche). Solution quand il n'y a pas de coalescence pour un temps final de $t = 0.85$ (droite).

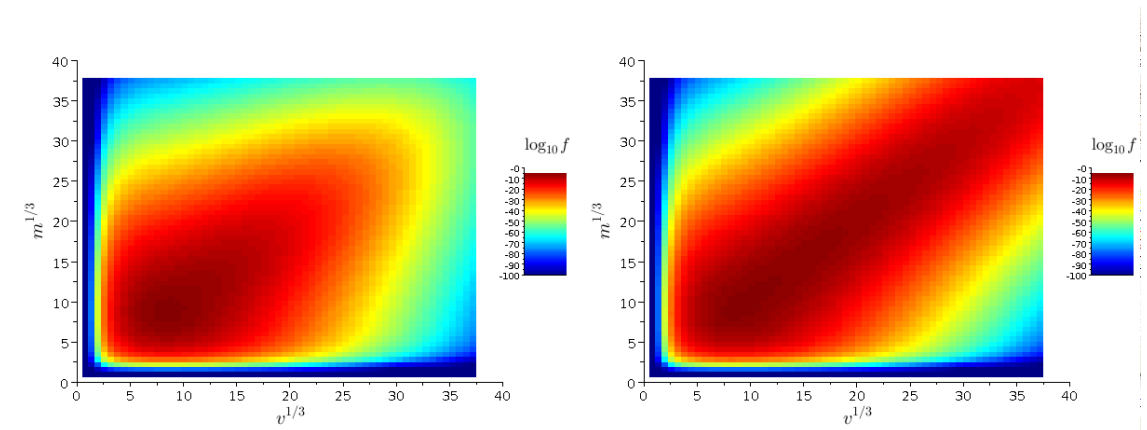


FIGURE 6.25 – Solution pour la donnée initiale normalisée à 1 (gauche) et à 100 (droite) pour un temps final de $t = 0.85$.

Nous traçons en Fig.6.24 la donnée initiale (gauche) et la solution au temps final $t = 0.85$ lorsqu'il n'y a pas coalescence (droite) et en Fig.6.25 les solutions au temps $t = 0.85$ lorsqu'il y a coalescence avec un noyau constant et que la donnée initiale est normalisée pour que le moment d'ordre 0 fasse 1 (gauche) ou 100 (droite). Sur les axes figurent $v^{1/3}$ et $m^{1/3}$ avec v et m le volume adimensionnel et la masse adimensionnelle.

Nous traçons en Fig.6.26, la marginale "massique" pour le problème sans et avec coalescence au temps initial et au temps $t = 0.85$ pour la donnée initiale normalisée à 1 et la marginale "massique" pour le problème avec coalescence au temps $t = 0.85$ pour la donnée initiale normalisée à 100. Ce choix est motivé par la lisibilité du graphique. Les marginales "massiques" pour le problème sans coalescence au temps initial et au temps $t = 0.85$ pour la donnée initiale normalisée à 100 sont 100 fois celles pour une donnée initiale normalisée à 1. Dans la légende de Fig.6.26, "initial, 1" correspond à la donnée initiale normalisée à 1, "sans coal., 1" correspond à la solution numérique de l'équation cinétique sans coalescence et dont la donnée initiale est normalisée à 1, "coal., 1" correspond à la solution numérique de l'équation cinétique avec coalescence et dont la donnée initiale est normalisée à 1 et "coal., 100" correspond à la solution numérique de l'équation cinétique avec coalescence et dont la donnée initiale est normalisée à 100.

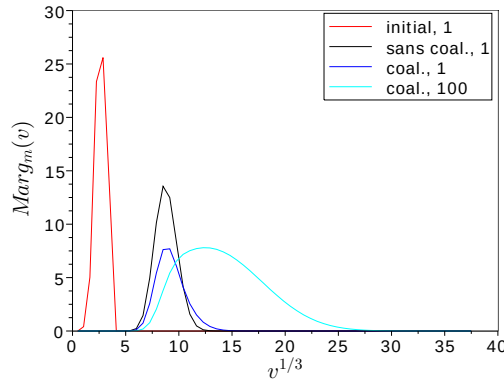


FIGURE 6.26 – Marginale "massique" initiale, et au temps $t = 0.85$ pour la croissance sans coalescence et la croissance avec coalescence pour une donnée initiale normalisée à 1 et 100.

Nous constatons Fig.6.26 que lorsque la donnée initiale est normalisée à 1, la solution est faiblement influencée par la coalescence, alors que pour la donnée initiale normalisée à 100, la coalescence joue un rôle important dans l'obtention de la solution.

Nous constatons que la normalisation est importante, la solution normalisée initialement pour avoir un moment d'ordre 0 égal à 100 évolue plus rapidement que celle normalisée initialement pour avoir un moment d'ordre 0 égal à 1. Il faut donc faire attention au moment de définir la distribution initiale.

6.3.2 Application à la volcanologie

Ensuite nous appliquons la résolution numérique à certains cas traités au chapitre 3. Comme nous l'avons vu, la normalisation de la donnée initiale est importante, il nous faut donc la déterminer.

Lorsqu'il n'y a pas de coalescence, nous avons montré que le moment d'ordre 0 est conservé. Or, ce qui est conservé physiquement, est le nombre de bulles par quantité de magma. En effet, comme le magma est supposé incompressible, lorsque le volume des bulles augmente, la taille totale de l'échantillon augmente également, et la quantité de magma reste constante au cours du temps. Nous utilisons l'unité standard internationale adéquate,

le mètre cube, pour exprimer la quantité de magma. Le nombre de bulle par quantité de magma N_q est obtenue à partir de la porosité α et de la densité de bulles N_V de la manière suivante :

$$N_q = \frac{N_V}{1 - \alpha}, \quad (6.19)$$

ou à partir de la porosité α et du volume moyen V_{mean} de la manière suivante :

$$N_q = \left(\frac{\alpha}{1 - \alpha} \right) \frac{1}{V_{mean}}, \quad (6.20)$$

Si le moment d'ordre 0 représente le nombre de bulles par quantité de magma, on obtient que le moment d'ordre 1

$$\mathcal{M}_{1,0}(t) = \int_0^\infty \int_0^\infty vn(t, v, m) dm dv$$

représente la vésicularité c'est-à-dire le rapport entre le volume occupé par les bulles et le volume occupé par le magma. La porosité α sera alors obtenu par

$$\alpha(t) = \frac{\mathcal{M}_{1,0}(t)}{V_l + \mathcal{M}_{1,0}(t)}, \quad (6.21)$$

où V_l est une constante, vaut idéalement 1 en théorie et est calculée au temps $t = 0$ grâce à la porosité initiale et au volume moyen initial.

Nous faisons varier le coefficient d'efficacité de la coalescence $\zeta(t)$, nous le prenons successivement constant égal à 10^{-5} , 10^{-10} et 10^{-15} . Lorsque $\zeta(t) = 0$, cela signifie qu'il n'y a pas coalescence, et plus $\zeta(t)$ est grand, plus la coalescence joue un rôle important.

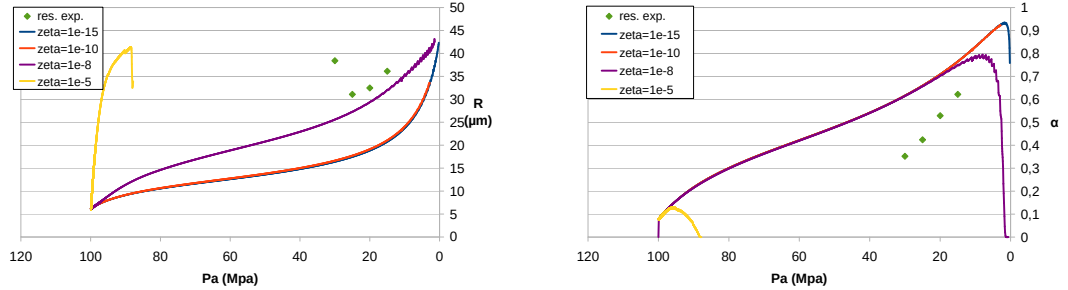


FIGURE 6.27 – Solution pour la donnée initiale ABG1. Rayon (gauche) et porosité (droite) en fonction de la pression ambiante.

Nous avons tracé sur Fig.6.27 et Fig.6.28, l'évolution du rayon et de la porosité en fonction de la pression ambiante. Dans les légendes, les points "res. exp." sont les données expérimentales $G300$, $G303$, $G327$ et $G328$ de [BG05], les courbes "zeta=x" sont les solutions de l'équation cinétique avec $\zeta = x$. Dans les deux cas, nous avons pris un taux de décompression de $5 \cdot 10^5 \text{ Pa s}^{-1}$, une température de 825°C , une densité de 2354 kg m^{-3} , une constante de diffusivité de $6.95076 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ et une concentration initiale de 0.034. En Fig.6.27, nous avons utilisé la distribution initiale de l'expérience ABG1, avec une porosité initiale de 7.79%, une pression initiale de 100 MPa, 60 mailles uniforme en rayon allant de 0 m à 0.00015 m et une densité de bulle initiale, N_V , de $8.6759 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$. En Fig.6.28, nous avons utilisé la distribution initiale de l'expérience G300, avec une porosité initiale de 35.2%, une pression initiale de 30 MPa, 60 mailles uniforme en rayon allant de 0 m à 0.00075 m et une densité de bulle initiale, N_V , de $7.128 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$.

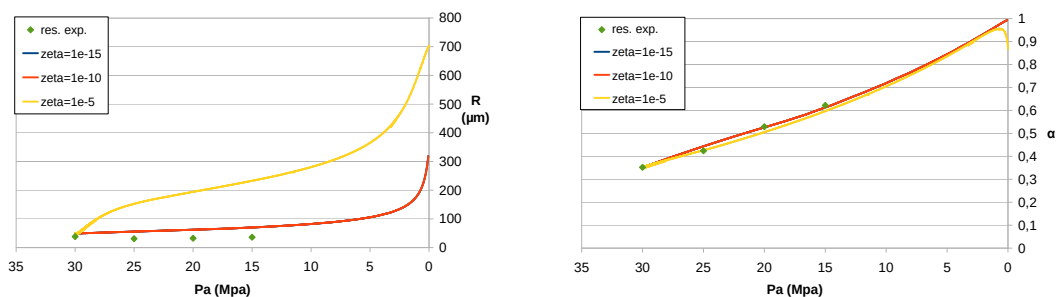


FIGURE 6.28 – Solution pour la donnée initiale G300. Rayon (gauche) et porosité (droite) en fonction de la pression ambiante.

Nous constatons que dans Fig.6.27, la courbe correspondant à " $\zeta = 1e-5$ " décroche, ceci est dû à la troncature, en effet, on peut le voir sur la courbe du rayon, nous perdons des bulles aux environs de 95 MPa .

Toutefois, il est raisonnable de penser que les expériences *G303*, *G327* et *G328* sont sur une même courbe pour une efficacité ζ comprise entre 10^{-5} et 10^{-10} .

Sur Fig.6.28, aucun rayon n'est rattrapé, rien d'étonnant à cela, puisque le rayon initial est plus grand que les autres. Par contre, on peut constater que la porosité est bien approchée, l'expérience *G303* est mieux approché par la courbe " $\zeta = 1e-5$ " et les expériences *G327* et *G328* sont mieux approchées par la courbe " $\zeta = 1e-10$ ". On remarquera que les courbes " $\zeta = 1e-10$ " et " $\zeta = 1e-15$ " sont confondues. Ceci laisse à penser que la coalescence a joué un rôle plus important dans *G303* que dans les deux autres expériences.

6.4 Conclusions

Nous avons résolu numériquement l'équation cinétique décrivant la croissance par décompression, diffusion et coalescence d'une population polydisperse de bulles dans un magma visqueux.

Les premiers résultats numériques montrent que nous avançons dans la bonne direction et ouvrent la voie à plusieurs approches et axes de recherches pour leur amélioration.

La résolution numérique de l'équation cinétique de croissance par décompression et diffusion est possible grâce à une formulation approchée du taux de variation de la masse. Le couplage avec la coalescence est direct et n'introduit pas d'erreur supplémentaire. Nous avons vu qu'il est important de donner la bonne dimension à la distribution initiale afin d'obtenir la solution du problème considéré. Il reste des constantes physiques, tel que ζ , à déterminer pour pouvoir appliquer la résolution de l'équation cinétique de type coalescence à la volcanologie.

Conclusions et perspectives

Nous avons présenté et étudié un modèle courant dans la littérature pour décrire l'évolution de la croissance d'une bulle par décompression dans un magma très visqueux, voir [PSA93, LNL04]. La croissance de la bulle dans ce modèle monodisperse dépend de sa masse, de son rayon et de la concentration en volatil dans le magma environnant. Une seule espèce volatile est considérée, on a appliqué ce modèle aux bulles d'eau, mais il peut être utilisé pour d'autres espèces volatiles, tant qu'il n'y a qu'une seule espèce considérée. Nous avons étudié ce modèle adimensionné et déterminé neuf régimes limites. La résolution numérique que nous avons proposée pour résoudre ce problème, conserve la masse totale de volatil par construction. L'influence des paramètres mal connus tels que la tension de surface sur la solution est minime. De même l'étude numérique de l'influence du nombre de points de discrétisation de l'équation de diffusion-advection sur la solution nous a montré que 50 points étaient suffisants pour avoir une solution précise. L'étude de la convergence numérique du régime général vers les régimes limites a permis de déterminer des valeurs pour lesquelles nous nous trouvons en régime limite pour un jeu de données. L'étude théorique du modèle nous a permis de montrer que sous certaines conditions initiales, le rayon et la pression, solution du problème monodisperse sont bornés dans l'espace des phases. Cette étude nous a permis de définir un flux approché pour l'équation d'interface et donc de simplifier une partie des étapes de calculs pour déterminer la solution. Nous avons ensuite validé ce modèle par l'application de la résolution numérique à des données physiques. Nous avons montré que le choix de décompression linéaire dans le modèle est une bonne approche sous certaines conditions (proche de l'équilibre), sinon il peut induire quelques erreurs (sous-évaluation du rayon solution). La comparaison de l'évolution obtenue par notre résolution et une résolution existante d'un modèle similaire, [PS98], nous a montré une solution quasiment identique sur le rayon sauf pour les temps initiaux et finaux. Ceci venait de la fréquence d'enregistrement pour le temps initial et probablement de la différence entre les modèles pour le temps final. Nous avons comparé les données mesurées aux données calculées par notre résolution pour un grand nombre de données physiques. Cette comparaison nous a permis de conclure que l'évolution du rayon ne peut être déterminée pour aucun autre processus que la décompression seule, et ce seulement si les données initiales sont connues pour chaque expérience et que le modèle permet de modéliser l'évolution de la porosité avec une erreur acceptable dans le cas de coalescence et décompression. Ceci a abouti à développer un code en C++ présenté en annexe A et actuellement utilisé à l'Institut des Sciences de la Terre d'Orléans par Ian Schipper (post-doctorant).

Ensuite en passant au modèle cinétique, une étude rapide nous a permis de considérer uniquement le volume et la masse de volatil des bulles pour décrire leur évolution dans ce modèle et pour décrire la fonction de distribution des bulles. Nous avons étudié l'équation de coalescence multidimensionnelle et proposé une résolution numérique qui conserve, par construction, les propriétés de l'équation continue. Le code a été validé suite à de multiples comparaisons uni-dimensionnelles et bi-dimensionnelles pour des exemples courants. Cette validation nous a permis de déterminer que notre résolution numérique unidimensionnelle était d'ordre deux. Nous avons vu que notre code donnait de bons résultats, que ce soit en une dimension avec un maillage uniforme ou non, ou en multidimensionnel avec un

maillage non-uniforme. Cependant, nous avons remarqué de la diffusion numérique et une petite surestimation des moments d'ordre strictement supérieur à 1, probablement due à la quadrature utilisée, mais aussi à la définition du facteur de proportionnalité $\lambda_{i,j}^k$. La comparaison du flux approché déterminé par l'étude théorique du problème monodisperse et du flux obtenu par une formule de Green nous a permis de voir que le flux approché est la meilleure des deux approches. Une étude numérique entre solutions du problème monodisperse et solutions du problème polydisperse nous a permis de conclure que le passage au polydisperse avec cette définition du flux était fait de manière correcte, la différence entre les solutions monodisperse et polydisperse étant inférieure à celle commise par le flux approché. Ensuite, une étude numérique sur les marginales de la solution polydisperse nous a permis de montrer que les oscillations de celles-ci n'étaient pas dues au pas de temps ou d'espace. Ces oscillations, dues à la position de la courbe d'équilibre par rapport au maillage, nécessitent un post-traitement, par exemple de type moyenne glissante. Par ailleurs, les états stationnaires de l'équation de coagulation-Smoluchowski pour les deux noyaux sont bien reproduits par les solutions numériques. Enfin, le couplage de la coalescence et du transport a été utilisé sur un cas d'école simple. Ce cas simple nous a permis de comprendre que le nombre de bulles initial est important, la solution pour 100 bulles et la même donnée initiale normalisée étant différentes. Le test sur quelques données expérimentales nous permet de juger si le modèle complet et le noyau sont acceptables et dans ce cas l'efficacité de la coalescence. Ceci a abouti à développer un code en C++, présenté en annexe C, facile d'utilisation mais pas encore testé par autrui.

Parmi les perspectives ouvertes par ce travail, nous présentons certaines d'entre elles :

1. Nous pouvons tenter de résoudre le problème couplé par d'autres méthodes de résolution numérique, comme on l'a vu, le pas de temps imposé par la coalescence est très contraignant.
2. Comme nous avons fixé une inconnue à 1 dans l'expression du flux approché, une étude plus poussée pourrait nous permettre de déterminer ce coefficient et ainsi réduire l'erreur commise par ce flux approché. Une étude plus approfondie du système d'équations permettrait de déterminer rigoureusement un meilleur flux approché.
3. Une autre approche serait d'étendre les équations pour prendre en compte les magmas fluides. Ceci se traduit par une équation plus complexe de conservation de la quantité de mouvement [PSA93] :

$$P - P_a = \frac{2\sigma}{R} + \frac{4\eta_{eff}}{R} \frac{dR}{dt} + \rho R \frac{d^2 R}{dt^2} \left(1 - \frac{R}{S}\right) + \rho \left(\frac{dR}{dt}\right)^2 \left(\frac{R^4}{S^4} + 1 - \frac{2R}{S}\right) \quad (6.22)$$

4. Une suite naturelle au problème sous forme cinétique serait d'introduire d'autres phénomènes tels que la nucléation qui dépendrait alors de la masse totale d'eau dans les bulles, de la concentration initiale et de la pression. Il y a nucléation lorsque la concentration d'eau dans le magma dépasse un seuil critique. Les bulles nucléées peuvent avoir des tailles et pressions internes variées et dépendent de l'environnement. Cela revient donc à rajouter un terme de source de bulles dans l'équation cinétique.

Annexe A

Le programme monodisperse

Nous présentons ici le programme résolvant les cas traités en chapitre 1, 2 et 3, celui ci résout le système décrivant l'évolution d'une bulle soumise à une décompression dans un magma visqueux.

Le programme est codé en un seul fichier C++ : [MonoDeBuG.cpp](#).
Le nom du programme signifie "Monodisperse Decompressing Bubble Growth".
Pour compiler le fichier :

```
g++ [option de compilation] -o nomprgm MonoDeBuG.cpp
```

où nomprgm est le nom que le programme aura une fois compilé et option de compilation suivant votre façon de compiler (telle que -O3 pour une méthode de compilation optimisée, -Wall pour afficher les warnings lors de la compilation), on peut ne rien mettre.

Pour le lancer :
nomprgm si vous êtes sur windows
./nomprgm sinon

Assurez vous que le fichier de données "donnees.txt" est présent dans le dossier où vous travaillez.

En sortie, deux fichiers vont être créés dans votre dossier :
Le fichier donneesSAV.txt, dans lequel sont sauvegardés les Rayon, Pression gaz, rayon zone d'influence, Pression ambiante, porosité et masse d'eau totale.
Le fichier concentrationSAV.txt, dans lequel est sauvegardé la concentration d'eau dans le magma, chaque $C_i (= C(r_i, t))$ est valable entre $(R^3 + iS_0^3/N)^{1/3}$ et $(R^3 + (i+1)S_0^3/N)^{1/3}$.

Contrairement à [LNL04], on initialise la pression dans la bulle $\hat{P}$ à $1 + \Sigma$

$$\hat{P}(\hat{t} = 0) = 1 + \Sigma, \quad (\text{A.1})$$

car on suppose qu'au départ, le rayon des bulles ne bouge plus ($\dot{R} = 0$).

Les enregistrements dans les fichiers de sorties se font tout les $\hat{t} = \frac{i}{1000} \quad \forall i \in \llbracket 0, 1000 \rrbracket$.

Le programme est modulaire et choisi un cas simplifié dans les cas montrés par le tableau suivant :

	4	5	6
400	7	0 / 10	8
0.01	1	2	3
	0.000011		100000
	Θ_V		

A.1 Option

Dans ce qui suit, tout les exemples sont donnés pour une console windows avec un programme appeler prgm.

Le programme est muni de 11 options :

•in : permet de définir le fichier d'entrée

exemples d'utilisation :

-prgm in=donnee.txt

-prgm in=test/data.txt

Attention, assurez vous que le fichier que vous donnez, existe et contient les données selon le formatage expliqué en partie suivante.

•Dout : permet de définir le fichier de sortie pour les données autres que la concentration

exemples d'utilisation :

-prgm Dout=donneeSAV.txt

-prgm Dout=test/dataOut.txt

Attention, assurez vous que le chemin du fichier que vous donnez existe, pour l'exemple 2, assurez vous qu'il existe bien un dossier "test" dans votre dossier de travail sinon le fichier par défaut sera utilisé.

•Cout : permet de définir le fichier de sortie pour la concentration

exemples d'utilisation :

-prgm Cout=concentration.txt

-prgm Cout=test/Conc.txt

Attention, assurez vous que le chemin du fichier que vous donnez existe, pour l'exemple 2, assurez vous qu'il existe bien un dossier "test" dans votre dossier de travail sinon le fichier par défaut sera utilisé.

•**vers** : permet de forcer le schéma que l'on veut suivant les numéros du tableau des cas simplifiés

exemple d'utilisation :

-prgm vers=3

Attention, si le chiffre entré ne correspond pas à un des 8 cas simplifié, le programme utilisera le schéma général sans l'équivalent simplifié.

Le cas 10 correspond au cas où on effectue des sauts de pression pour la pression ambiante, attention à ne pas oublier la ligne TDP (si aucun cas n'est choisi et que cette ligne existe, c'est ce cas qui sera choisi automatiquement, les autres cas ne prenant pas en compte les sauts de pression).

•**alph** : permet de redéfinir la porosité maximum souhaitée au temps final

Le programme s'arrête quand $t = 0$ ou $\alpha = alph$.

exemple d'utilisation :

-prgm alph=0.75

Attention, si le chiffre entré est négatif, alph sera initialisé à 0 (pas de calcul), si il est supérieur à 1, il sera initialisé à 1 et si il contient des caractères autres que *e* ($alph = 0.07e1t5e4$), alph sera initialisé à la troncature (ici à $0.07e1 = 0.7$).

•**tmin** : permet de redéfinir le pas de temps adimensionnel minimal autorisé

La précision des "double" en C++ nous oblige à prendre un pas de temps minimal d'au moins 10^{-15} qui est la valeur par défaut.

exemple d'utilisation :

-prgm tmin=1e-12

Attention, si vous prenez un pas de temps inférieur à 10^{-15} , le temps final risque de ne pas pouvoir être atteint.

•**tmax** : permet de redéfinir le pas de temps adimensionnel maximal autorisé

Cette valeur permet d'obliger le pas de temps à être plus petit qu'une certaine valeur, par défaut, elle est fixée à $1/Nsav$.

exemple d'utilisation :

-prgm tmax=1e-8

Attention à ce que tmax reste supérieur à tmin

•**Pf** : permet de redéfinir la pression ambiante minimale souhaitée au temps final.

Par défaut, Pf vaut 0, même si ce n'est pas très physique, elle doit être exprimé en *Pa*.

exemple d'utilisation :

-prgm Pf=10000

La pression finale doit être inférieure à la pression initiale, les enregistrements ne se feront alors plus tout les 0.001s adimensionnelles, mais en fera 1000 régulièrement de la pression initiale à la pression finale choisie.

•**KH** : permet de redéfinir la constante d'Henry pour l'interface bulle-magma

Le KH doit être dans une loi telle que $C_R = KH\sqrt{P}$, exprimée en $Pa^{-1/2}$

exemple d'utilisation :

-prgm KH=0.0000043

•**amin** : permet de redéfinir la porosité minimale autorisée au cours des calculs

Elle vaut par défaut 10^{-6} , elle ne sert que lorsque l'on veut augmenter la pression (ou remonter le temps) comme test d'arrêt.

exemple d'utilisation :

-prgm amin=0.1

Attention à ce que la valeur donnée soit inférieure à la porosité initiale

•Nsav : permet de demander plus ou moins d'enregistrements.

Par défaut, Nsav vaut 1000, ceci signifie que les enregistrements se feront tout les $dt = \frac{P_i - P_f}{Nsav}$.

exemple d'utilisation :

-prgm Nsav=100

Ces options peuvent être appelées dans n'importe quel ordre, mais seules leurs premières apparitions seront prises en compte (si la même est appelée plusieurs fois).

A.2 Le fichier d'entrée

Le fichier d'entrée doit contenir les lignes suivantes :

```
// CONSTANTES PHYSIQUES
R0 = 0.00001;
alpha = 7.79;
D = 0.0000000001;
C0 = 0.0421;
CR = 0.02;
N = 50;
err = 0.0001;
Pi = 100000000;
sig = 0.1;
neff = 250000000000000000;
rhom = 2400;
T = 825;
DP = 100000;
```

Il ne faut surtout pas oublier les ";", les espaces autour du "=" et ne pas changer les noms du début de lignes.

Vous pouvez rajouter vos commentaires sur la droite de chaque ligne, exemple :

```
// CONSTANTES PHYSIQUES
R0 = 0.00001; rayon en mètre
alpha = 7.79; porosité, max=100
D = 0.0000000001; diffusivité en m2 s-1
C0 = 0.0421; concentration initiale en %
CR = 0.02;
N = 50; nombre de points du maillage en C
err = 0.0001;
Pi = 100000000; pression initiale en Pa
sig = 0.1; tension de surface en J m-2
neff = 250000000000000000; viscosité en Pa s
rhom = 2400; densité du magma en kg m-3
T = 825; température en degrés celsius
DP = 100000; taux de décompression en Pa s-1
```

Si on veut "remonter" le temps, il suffit de mettre un taux de décompression négatif.

On peut également demander à ce que la pression ambiante ne diminue plus de manière

linéaire mais par saut successif, en rajoutant une ligne en fin de fichier :

A.2.1 Décompression par saut de pression

Pour pouvoir utiliser cette version, il faut rajouter une ligne supplémentaire au fichier d'entrée :

```
// CONSTANTES PHYSIQUES
R0 = 0.00001; rayon en mètre
alpha = 7.79; porosité, max=100
D = 0.0000000001; diffusivité
C0 = 0.0421; concentration initiale
CR = 0.02;
N = 50; nombre de points du maillage en C
err = 0.0001;
Pi = 100000000; pression initiale
sig = 0.1; tension de surface
neff = 25000000000000000; viscosité
rhom = 2400; densité du magma
T = 825; température en degrés celsius
DP = 100000; taux de décompression
TDP = 25; temps de repos entre chaque saut, le saut de pression est égal à TDPxDP
```

La version 10 sera alors utilisée par défaut, si une autre version est demandée, la dernière ligne sera ignorée et la décompression sera linéaire.

A.2.2 Remarque sur la viscosité

Nous avons le choix entre considérer la viscosité effective constante dans les équations ou en prendre une plus réaliste. Si on la veut constante, on précise juste la valeur voulue à la ligne "neff = ". Si on en veut une qui va varier au cours du temps, les choix suivants sont disponibles :

neff = -1; représentera la viscosité pour un rhyolite
neff = -2; représentera la viscosité pour un phonolite
neff = -3; représentera la viscosité pour un dacite

en fait on peut préciser un chiffre négatif à ± 0.5 , tout autre chiffre négatif inférieur à -3.5 prendra la valeur de la rhyolite.

La viscosité effective est calculée de la manière suivante :

$$\eta_{eff} = \eta_R - \eta_S \alpha + R^3 \int_R^S \frac{d\eta}{dr} \frac{1}{r^3} dr$$

η_R est la viscosité au bord de la bulle, η_S celle à la limite de la zone d'influence et η la viscosité qui dépend de sa distance à la bulle ($\eta(r, t)$).

Pour la phonolite :

$$\log_{10}(\eta(r)) = -5.863 + (-0.117 * \log_{10}(100 * C(r))) + \\ + \left(\frac{(12747 + (-673.5 * 100 * C(r)))}{(T - 103.4 - (-59.85 * \log_{10}(100 * C(r))))} \right)$$

Pour la dacite :

$$\log_{10}(\eta(r)) = -4.43 + \left(\frac{(7618.3 - (17.25 * \log_{10}(100 * C(r) + 0.26)))}{(T - 406.1 + (292.6 * \log_{10}(100 * C(r) + 0.26)))} \right)$$

Pour la rhyolite :

$$\log_{10}(\eta(r)) = -3.545 + 0.833 * \ln(100 * C(r)) + \left(\frac{(9601 - 2368 * \ln(100 * C(r)))}{(T - 195.7 - 32.25 * \ln(100 * C(r)))} \right)$$

A.3 Historique de l'évolution

Au début, notre code ne pouvait que décompresser linéairement et considérait η_{eff} constant.

Les modifications présentées par la suite n'ont été faites que sur la version générale (aucune simplification), sauf mention contraire.

A.3.1 Remonter le temps

Lorsque l'on veut remonter le temps ou augmenter la pression, l'effet est le même au niveau adimensionnel.

Afin de pouvoir faire augmenter la pression linéairement, les changements suivants ont dû être faits :

- on a passé le temps adimensionnel en valeur absolue, ainsi que les conditions de stabilité.
- on a introduit une nouvelle valeur pour garder le signe du taux de décompression.
- on a également introduit une nouvelle condition d'arrêt contrôlée par l'option *amin*.
- attention toutefois, la pression finale n'est pas redéfinie automatiquement, mais si elle est inférieure à la pression initiale, alors la pression finale d'arrêt sera $P_i + P_i - P_f$.
- cette version n'est pas très stable car le maillage va "s'éloigner" du bord de la bulle.

A.3.2 Décompression par saut de pression

En laboratoire, il est souvent trop dur d'effectuer une vraie décompression linéaire, des petits sauts de pression sont donc effectués régulièrement pour simuler cette décompression linéaire.

Nous avons donc codé cette partie, car les sauts peuvent paraître grand pour un petit temps d'attente.

Afin de pouvoir simuler ces sauts de pression, les changements suivants ont été nécessaires :

- modification du fichier d'entrée expliqué en partie précédente avec prise en compte ou non de la ligne supplémentaire.
- rajout d'un choix possible dans les versions.
- modification de la définition de P_a dans ce cas, en adimensionnel, on a :

$$\hat{P}_a(\hat{t}) = 1 - \left\lceil \frac{\hat{t}}{\tau_{P_a}} \right\rceil \tau_{P_a}$$

avec $\tau_{P_a} = \frac{\check{P}_a * TDP}{P_i}$ où TDP est la valeur de la ligne supplémentaire du fichier d'entrée.

La variable τ_{P_a} représente le saut de pression en Pa ($\check{P}_a * TDP$) adimensionnée par la pression initiale (P_i).

Ces modifications nous permettent de conserver le reste du code inchangé.

A.3.3 Viscosité variable

Nous nous sommes intéressés à l'influence de la viscosité et de l'erreur produite en supposant que la viscosité effective était constante.

Pour cela, nous avons juste eu à rajouter une ligne dans le code de la résolution générale. Cette ligne fait appel à une fonction qui va calculer la viscosité effective, selon ce que l'utilisateur a donné dans le fichier d'entrée.

Cette modification est applicable à l'ensemble des versions (générale, simplifié ou décompression par sauts).

A.3.4 Modification de la discrétisation sur la concentration

On reprend l'équation (1.14) et au lieu d'approcher $\int_R^S r^2 C dr$ par $\sum_i r_{i+1/2}^2 \Delta r_i C_i$, on l'approche par $S_0^3 \sum_i C_i / 3$, on obtient alors comme discrétisation, (1.21) devient inutile :

$$C_i^{n+1/2} = C_i^n \quad (\text{A.2})$$

(1.24) devient alors :

$$C_i^{n+1} = C_i^n + 3 \frac{\Delta t}{\Theta_D} \left(\frac{F_{i+1}^{n+1} - F_i^{n+1}}{(r_{i+1}^{n+1})^3 - (r_i^{n+1})^3} \right) \quad (\text{A.3})$$

Et enfin, (1.25) devient :

$$F_0^{n+1} = F_1^{n+1} - \left(\frac{(r_{i+1}^{n+1})^3 - (r_i^{n+1})^3}{3} \right) (C_0^{n+1} - C_0^n) \frac{\Theta_D}{\Delta t} \quad (\text{A.4})$$

Et la formule de conservation de la masse totale (1.28) devient :

$$\mathcal{M}^n = W^n + \hat{\rho}_m \sum_{i=0}^{N-1} C_i^n ((r_{i+1}^n)^3 - (r_i^n)^3) \quad (\text{A.5})$$

A.3.5 Flexibilité du fichier d'entrée

Deux lignes étaient inutiles dans le fichier d'entrée, nous les avons donc enlevées. L'ordre des variables dans le fichier d'entrée était imposé et la forme du fichier d'entrée également. Maintenant nous pouvons rajouter des commentaires sur n'importe quelle ligne, y compris une nouvelle et l'ordre des lignes n'est plus stricte. Par exemple, nous pouvons désormais passer le fichier suivant en entrée :

```
Exemple de fichier d'entrée
**Rayon initial en mètre
R0 = 0.00001 ;
alpha = 7.79 ; porosité, max=100
La pression ambiante initiale
Pi = 100000000 ; pression initiale en Pa
Constante de diffusivité en m2 s-1
D = 0.0000000001 ;
C0 = 0.0421 ; concentration initiale en %
N = 50 ; nombre de points du maillage en C

sig = 0.1 tension de surface en J m-2
la viscosité est une constante positive si on veut
que la viscosité effective soit constante ou
-1, -2, ou -3 si on veut une viscosité calculée
pour un rhyolite, phonolite ou dacite
neff = 250000000000000000 ; viscosité en Pa s
rhom = 2400 ; densité du magma en kg m-3
T = 825 ; température en degrés celsius
DP = 100000 ; taux de décompression en Pa s-1
Et si on veut une décompression par saut de pression,
il faut rajouter la ligne expliquée plus tôt.
```

Ce qui figure en gras dans ce fichier d'entrée sont les parties obligatoires du fichier, bien qu'elles puissent être passées dans n'importe quel ordre, toutes ces lignes sont nécessaires au bon fonctionnement du programme. La ligne spécifiant le nombre de points pour l'équation d'advection-diffusion n'est pas obligatoire, 50 points sont pris par défaut si cette ligne manque.

L'espacement autour du "=" et les ";" ne sont plus obligatoires, nous pouvons aussi bien passer par exemple "**Pi = 1000000 ;**" que "**Pi = 1000000**", "**Pi = 1000000 ;**" ou "**Pi = 1000000**". Toutefois, chaque entrée doit être en début de ligne.

A.4 Structure du programme

Le programme est composé de plusieurs fonctions :

A.4.1 Les fonctions utilitaires

Nous avons eu besoin de redéfinir les fonctions de bases

- *min* : donne le minimum entre deux nombres.
- *max* : donne le maximum entre deux nombres.
- *abs* : retourne la valeur absolue du nombre.
- *sign* : retourne le signe du nombre.

Pour les différents choix et options, les différentes fonctions sont présentes :

- *edslimite* : permet de choisir la version utilisée suivant les options passées en ligne de commande et dans le fichier d'entrée.
- *Option* : permet de déterminer quelle option est passée en ligne de commande.
- *chargerdonnees* : permet de charger les données du fichier d'entrée.
- *ETAefficace* : permet de calculer la viscosité efficace en fonction de l'option choisie par

l'utilisateur (constant, rhyolite, phonolite ou dacite).

A.4.2 Les différents schémas

Chaque cas a été codé séparément :

- *limite1* : discrétise le cas 1 (1.4.2.1).
- *limite2* : discrétise le cas 2 (1.4.3.3).
- *limite3* : discrétise le cas 3 (1.4.3.2).
- *limite4* : discrétise le cas 4 (1.4.1.3).
- *limite5* : discrétise le cas 5 (1.4.1.1).
- *limite6* : discrétise le cas 6 (1.4.2.2).
- *limite7* : discrétise le cas 7 (1.4.1.2).
- *limite8* : discrétise le cas 8 (1.4.3.1).
- *edgCombo* : discrétise le cas général.
- *edgCombosaut* : discrétise le cas général avec une décompression par saut de pression.

A.4.3 Les différentes viscosités

Chaque viscosité réelle est codée séparément :

- *ETAphonolite* : retourne la viscosité du magma pour les phonolites comme expliqué dans la partie précédente.
- *ETAdacite* : retourne la viscosité du magma pour les dacites comme expliqué dans la partie précédente.
- *ETArhyolite* : retourne la viscosité du magma pour les rhyolites comme expliqué dans la partie précédente.

On peut en rajouter assez facilement en modifiant également *ETAefficace*.

Annexe B

Les environnements de calcul

Pour obtenir les résultats numériques, il a fallu lancer beaucoup de fois les programmes avec des données initiales différentes. Pour lancer autant de calcul, il a fallu les lancer sur un ensemble de machines. Tout les calculs ont été lancés sous linux.

B.1 Condor

Au laboratoire du MAPMO, les ordinateurs n'étant pas utilisés à un instant peuvent être utilisés pour nos calculs grâce à condor.

Condor est un programme qui gère les différentes machines en réseau et les différents travaux en attente ou en cours de calcul sur ces machines.

Pour pouvoir utiliser condor, il faut d'abord compiler notre programme avec `condor_compil`, dans notre cas cela a été `condor_compil g++ -O3 -o prgm file.cpp`.
une fois compilé, il faut créer un fichier de soumission de la façon suivante :

```
Executable=prgm
output=screen/output.%(Cluster).%(Process)
arguments= in=datain.txt Cout=dataoutC.txt Dout=dataout.txt
error=erreur/error.%(Cluster).%(Process)
Log=prgm.log
Queue
```

ce fichier lancera prgm avec comme argument arguments.

Executable est le nom du programme que l'on veut lancer, output est le chemin du fichier des sorties standard, error est le chemin du fichier des erreurs, Log est le fichier d'état et arguments représentent les arguments du programme sur la ligne de commande, ici, c'est comme si on avait tapé `./prgm in=datain.txt Cout=dataoutC.txt Dout=dataout.txt`
`%(Cluster)` sera remplacé par le numéro du job et `%(Process)` par celui du sous-job.

Pour lancer plusieurs calculs qui ont le même programme, il suffit de rajouter les lignes

```
output=screen/output.%(Cluster).%(Process)
arguments= in=datain2.txt Cout=dataoutC2.txt Dout=dataout2.txt
error=erreur/error.%(Cluster).%(Process)
Log=prgm.log
Queue
```

à la fin du fichier de soumission pour lancer deux job à la fois. Pour soumettre ce fichier, on utilise la commande `condor_submit submit.txt`, où `submit.txt` est le fichier de soumission. Quelques problèmes encore indéfinis font redémarrer les calculs avant leur fin de manière aléatoire. Les calculs peuvent prendre très longtemps de par ce problème et la puissance

des machines.

B.2 Oarsub

Entre 2009 et 2010, le CNRS d'Orléans utilisait OAR pour gérer le centre de calcul phoebus.

Ici pas besoin de recompiler, le compilateur `g++` suffit.

Il suffisait de remplir un fichier avec les arguments voulus, par exemple

```
in=datain.txt Cout=dataoutC.txt Dout=dataout.txt
in=datain2.txt Cout=dataoutC2.txt Dout=dataout2.txt
in=datain3.txt Cout=dataoutC3.txt Dout=dataout3.txt
in=datain4.txt Cout=dataoutC4.txt Dout=dataout4.txt
```

et de le soumettre avec la commande `oarsub ./prgm --array-param-file param.txt` pour que tout les jobs soit soumis au centre de calcul. Le problème de OAR est qu'il faut réserver une plage horaire pour le calcul et si celui ci n'est pas fini à la fin de la réservation, on ne peut pas le relancer où il en était.

J'utilisais la ligne suivante pour lancer mes calculs :

```
oarsub --stdout='OAR.%jobid%.stdout' --stderr='OAR.%jobid%.stderr' -l walltime=960 :00 :00
./prgm --array-param-file param.txt
```

Les options `--stdout` et `--stderr` définissent les fichiers de sorties standard et des erreurs, `-l walltime` permet de définir le temps réservé pour les calculs, ici 960 heures, `./prgm` est notre programme à lancer (on travaille en linux) et `param.txt` avec les différentes lignes que l'on veut lancer.

`%jobid%` sera remplacé par le numéro du job.

B.3 Grid engine

Depuis la rentrée 2010, le calculateur phoebus est maintenant géré par grid engine. Ce programme est mieux pour les calculs en parallèle mais pas pour le paramétrique comme nous, cette fois, il faut construire un script par lancer de la manière suivante :

```
#!/bin/bash
#$ -cwd
#$ -e SGE.$JOB_ID.err
#$ -o SGE.$JOB_ID.out
#$ -r y

./prgm in=datain.txt Cout=dataoutC.txt Dout=dataout.txt
```

et ensuite on le soumet au calculateur par la commande `qsub script.sh`.

où `script.sh` est le fichier détaillé plus haut.

`-cwd` signifie que l'on travaille dans le répertoire courant, `-e` indique le nom du fichier d'erreur (qui contiendra les erreurs), `-o` indique le nom du fichier de sortie (qui contiendra ce qui s'affiche habituellement sur la console) et `$JOB_ID` sera remplacé par le numéro du job.

Afin de ne pas créer autant de fichier de soumission que de lancer, nous avons rajouté une fonction dans le .bashrc de notre compte :

```
function LFCsub() {
execNAME="jobTemporaireLFCXXX.lfc"
prgm=$1 ;
shift
temp="";
paramfile="";
i=1;
while [ "$1" != "" ]
do
if [ "$1" != "--array-param-file" ]&&[ "$1" != "--array_param_file" ]; then
temp="$temp$1 ";
i=$((i+1))
shift
else
paramfile="$2"
shift 2
fi
done
if [ ! -e SGEinfo/ ]; then
mkdir "SGEinfo"
fi
if [ "$paramfile" != "" ]; then
while read line
do
if [ "$line" != "" ]; then
echo '#!/bin/bash' > $execNAME
echo '#$ -cwd' > $execNAME
echo '#$ -e "SGEinfo/SGE.$JOB_ID.err"' > $execNAME
echo '#$ -o "SGEinfo/SGE.$JOB_ID.out"' > $execNAME
echo '#$ -r y' > $execNAME
echo ' ' > $execNAME
echo "$prgm $temp $line" > $execNAME
echo ' ' > $execNAME
qsub $execNAME
fi
done < $paramfile
else
echo '#!/bin/bash' > $execNAME
echo '#$ -cwd' > $execNAME
echo '#$ -e "SGEinfo/SGE.$JOB_ID.err"' > $execNAME
echo '#$ -o "SGEinfo/SGE.$JOB_ID.out"' > $execNAME
echo '#$ -r y' > $execNAME
echo ' ' > $execNAME
echo "$prgm $temp" > $execNAME
echo ' ' > $execNAME
qsub $execNAME
fi
rm -i $execNAME }
```

Et nous n'avons plus qu'à lancer la ligne `LFCsub ./prgm --array-param-file param.txt`. De la même façon qu'avec OAR, à ceci prêt que nous n'avons plus de limites de temps, les calculs continuent jusqu'à leur fin ou jusqu'à ce qu'on les arrête.

Annexe C

Le programme polydisperse

Nous présentons ici le programme résolvant les cas traités en chapitre 6, celui ci résout le système décrivant l'évolution d'une population de bulles soumise à une décompression et au phénomène de coalescence.

Le programme est codé en un seul fichier C++ : [PolyDeBuG.cpp](#).
Le nom du programme signifie "Polydisperse Decompressing Bubble Growth".
Pour compiler le fichier :

```
g++ [option de compilation] -o nomprgm PolyDeBuG.cpp
```

où nomprgm est le nom que le programme aura une fois compilé et option de compilation suivant votre façon de compiler (telle que -O3 pour une méthode de compilation optimisée, -Wall pour afficher les warnings lors de la compilation), on peut ne rien mettre.

Pour le lancer :
nomprgm si vous êtes sur windows
./nomprgm sinon

Assurez vous que les fichiers de données "donnees.txt" et "distrib.txt" sont présents dans le dossier où vous travaillez.

En sortie, plusieurs fichiers vont être créés dans votre dossier :

Le fichier "out.txt", dans lequel sont sauvegardés les temps, porosité, masse d'eau totale et autre variable globale.

Le fichier "MargM_out.txt", dans lequel est sauvegardé la discrétisation en masse et la marginal suivant les masses à chaque temps choisi.

Le fichier "MargV_out.txt", dans lequel est sauvegardé la discrétisation en volume et la marginal suivant les volumes à chaque temps choisi.

Le fichier "init_out.txt", dans lequel est sauvegardé l'ensemble des données initiales du fichier d'entrée "donnees.txt" et des options passées en ligne de commande.

Le fichier "control_out.txt" peut également être demandé et sauvegarde l'ensemble de la fonction sous forme de matrice à chaque temps choisi.

Les enregistrements dans les fichiers de sorties se font tout les $\hat{t} = \frac{i}{100} \quad \forall i \in \llbracket 0, 100 \rrbracket$.

Pour le moment, le chevauchement est linéaire et la viscosité est constante au cour du temps.

C.1 Option

Dans ce qui suit, tout les exemples sont donnés pour une console windows avec un programme appeler prgm.

Le programme est muni de 11 options :

- in : permet de définir le fichier d'entrée.

exemples d'utilisation :

-prgm in=donnee.txt

-prgm in=test/data.txt

Attention, assurez vous que le fichier que vous donnez, existe et contient les données selon le formatage expliqué en partie suivante.

- Dout : permet de définir le nom générique des fichiers de sortie.

exemples d'utilisation :

-prgm Dout=donneeSAV.txt

-prgm Dout=test/dataOut.txt

Attention, assurez vous que le chemin du fichier que vous donné existe, pour l'exemple 2, assurez vous qu'il existe bien un dossier "test" dans votre dossier de travail sinon le fichier par défaut sera utilisé.

- Dist : permet de définir le fichier d'entrée pour la distribution.

exemples d'utilisation :

-prgm Dist=dist.txt

-prgm Dist=test/dist.txt

Attention, assurez vous que le chemin du fichier que vous donné existe, pour l'exemple 2, assurez vous qu'il existe bien un dossier "test" dans votre dossier de travail sinon le fichier par défaut sera utilisé.

- alph : permet de redéfinir la porosité maximum souhaitée au temps final.

Le programme s'arrête quand $t = 0$ ou $\alpha = alph$.

exemple d'utilisation :

-prgm alph=0.75

Attention, si le chiffre entré est négatif, alph sera initialisé à 0 (pas de calcul), si il est supérieur à 1, il sera initialisé à 1 et si il contient des caractères autre que e ($alph = 0.7e - 1 - 3t5e4$), alph sera initialisé à la troncature (ici à $0.7e - 1$).

- tmin : permet de redéfinir le pas de temps minimal autorisé.

La précision des "double" en C++ nous oblige à prendre un pas de temps minimal d'au moins 10^{-15} qui est la valeur par défaut.

exemple d'utilisation :

-prgm tmin=1e-12

- tmax : permet de redéfinir le pas de temps maximal autorisé.

Cette valeur permet d'obliger le pas de temps à être plus petit qu'une certaine valeur, par défaut, elle est fixée à 10^{-3} .

exemple d'utilisation :

-prgm tmax=1e-8

Attention à ce que tmax reste supérieur à tmin.

- Pf : permet de redéfinir la pression ambiante minimale souhaitée au temps final.

Par default, Pf vaut 0, même si ce n'est pas très physique. Elle doit être exprimée en Pa .

exemple d'utilisation :

-prgm Pf=10000

La pression finale doit être inférieure à la pression initiale, les enregistrements ne se feront alors plus tout les 0.001s adimensionnelles, mais en fera 1000 régulièrement de la pression initiale à la pression finale choisie.

•coal : permet au programme d'enregistrer tout les $f_{i,j}$ dans un fichier "control_ "

Par défaut, coal vaut 0, le faire passer a 1 pour avoir ce fichier de sortie.

exemple d'utilisation :

-prgm coal=1

•adim : permet de demander les sorties en dimensionnelles ou non.

Par défaut, adim vaut 0 et signifie que les sorties seront dimensionnelles, le passer a 1 pour avoir les sorties en adimensionnelles.

exemple d'utilisation :

-prgm adim=0

•Nsav : permet de demander plus ou moins d'enregistrements.

Par défaut, Nsav vaut 100, ceci signifie que les enregistrements se feront tout les $dt = \frac{P_i - P_f}{Nsav}$.

exemple d'utilisation :

-prgm Nsav=1000

•Cvar : sert a choisir la précision de l'algorithme (autorise une certaine variation maximale entre chaque temps).

Par défaut Cvar vaut 0.5 et signifie que l'on autorise f à varier de 50% au maximum entre deux itérations.

Cvar doit être compris entre 0 et 1 où 0 correspond à aucune variation autorisée et 1 une variation de 100% autorisée (on peut vider une classe en une itération).

exemple d'utilisation :

-prgm Cvar=0.1

Ces options peuvent être appelées dans n'importe quel ordre, mais seules leur premières apparitions seront généralement prises en compte (si la même est appelée plusieurs fois).

C.2 Les fichiers d'entrées

Toutes les valeurs physiques entrées doivent être en format standard, Pa pour les pression, m pour les rayons, m^3 pour les volume, s pour les temps, $Pa\ s^{-1}$ pour le taux de décompression, $^{\circ}C$ pour la température, ...

C.2.1 Le fichier d'entrée standard (donnees.txt)

le fichier d'entrée doit contenir au moins les lignes suivantes :

```
R0 = 0.00001;
alpha = 7.79;
D = 0.0000000001;
C0 = 0.0421;
N = 50;
Pi = 100000000;
sig = 0.1;
neff = 25000000000000000;
rhom = 2400;
T = 825;
DP = 100000;
```

Il ne faut surtout pas oublier les ";" et ne pas changer les noms du début de lignes.
 Vous pouvez rajouter vos commentaires dans le fichier, une ligne optionnelle existe pour préciser l'efficacité de la coalescence, exemple :

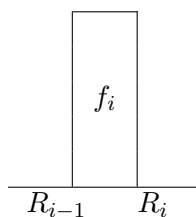
```
Exemple de fichier d'entrée standard
N = 50; nombre de points de distribution
**le rayon moyen en mètre
R0 = 0.00001; rayon moyen en mètre
alpha = 7.79; porosité, max=100
la pression initiale et le taux de décompression
en Pa
Pi = 100000000; pression initiale
DP = 100000; taux de décompression
sig = 0.1; tension de surface
neff = 25000000000000000; viscosité
rhom = 2400; densité du magma
D = 0.0000000001; diffusivité
une diffusivité comme toute les variable en unité standard internationale
C0 = 0.0421; concentration initiale
T = 825; température en degrés celsius
Et une ligne qui n'est pas obligatoire
Zeta = 0.5; efficacité de la coalescence a 50%
par défaut, l'efficacité est fixée à 1; attention à la ne pas oublier le Z majuscule
```

Dans ce fichier, figure en gras, les partie obligatoire du fichier, l'ordre des entrées n'est pas imposé.

C.2.2 Le fichier de distribution (distrib.txt)

Le fichier de distribution doit contenir $N + 1$ lignes :
 la première colonne représente le maillage (R_i) et la deuxième colonne représente le nombre de bulle présentes (f_i) entre les rayons R_{i-1} et R_i (la valeur en première ligne vaudra toujours 0).

R_0	, 0
R_1	, f_1
$\dots$	, $\dots$
R_N	, f_N



par exemple :

5e-6	, 0
10e-6	, 1
15e-6	, 10
20e-6	, 21
25e-6	, 1
30e-6	, 12
35e-6	, 11
40e-6	, 1
45e-6	, 0
50e-6	, 2
55e-6	, 0

avec $N = 10$ dans le fichier d'entrée standard "donnees.txt".

C.3 Les fichiers de sorties

Le fichier init_out.txt enregistre l'état initiale des variables.

Le fichier out.txt enregistre tout ce qui est calculé, les autres ne font que Nsav enregistrer les maximums.

Si l'option a été passée, les temps, volumes et masses sont enregistrés en dimensionnel.

C.3.1 Le fichier des états initiaux (init_out.txt)

Ici est enregistré tout ce qui est nécessaire pour pouvoir relancer exactement le même calcul. Voici un exemple de ce fichier de sortie :

Donnees initiales et options utilisees

fichiers d'entrees :

donnees.txt

distrib.txt

DONNEES INITIALES :

rayon moyen : 1.75e-05

porosite : 0.0779

diffusivite : 6.95076e-12

concentration d'eau : 0.04213

taille de la distribution : 10

pression ambiante : 1e+08

tension de surface : 0.1

viscosite : 59000

densite magma : 2354

temperature : 825

taux de decompression : 500000

efficacite de la coalescence : 0.8

OPTIONS :

pas de temps autorise : $1e-10 < Dt < 0.01$

pression finale : 0

nombre de sauvegarde maximum : 100

variation autorise pour la coalescence : 0.5

les donnees enregistrees sont dimensionnelles

PARAMETRE

Theta V = 1.18e-05 Theta D = 0.2203

C.3.2 Le fichier de sortie standard (out.txt)

Ici est enregistré à tout temps les valeurs suivantes :

t	Nb	$Mtot$	α	V_{mean}	V_{med}	V_{σ}	R_{mean}	R_{med}	R_{σ}
avec									
t	,le temps d'enregistrement				(dim ou adim)				
Nb	,le nombre de bulle par quantité de magma				(calculé à partir de α et R_0)				
$Mtot$	,la masse d'eau totale dans les bulles				(dim ou adim)				
α	,la porosité								
V_{mean}	,le volume moyen				(dim ou adim)				
V_{med}	,le volume median				(dim ou adim)				
V_{σ}	,l'écart type des volumes				(dim ou adim)				
R_{mean}	,le rayon moyen				(dim ou adim)				
R_{med}	,le rayon median				(dim ou adim)				
R_{σ}	,l'écart type des rayons				(dim ou adim)				

Remarque :

La première ligne n'enregistre que les trois premières données au temps 0.

C.3.3 La marginale de f suivant M (MargM_out.txt)

La première ligne de ce fichier enregistre le maillage en masse (adimensionnel ou non) ($N+1$ points comme pour le fichier distrib.txt), puis à chaque temps, on enregistre le temps ($t = xx;$) et le nombre de bulles ayant une masse appartenant à chaque maille.

C.3.4 La marginale de f suivant V (MargV_out.txt)

La première ligne de ce fichier enregistre le maillage en volume (adimensionnel ou non) ($N+1$ points comme pour le fichier distrib.txt), puis à chaque temps, on enregistre le temps ($t = xx;$) et le nombre de bulles ayant un volume appartenant à chaque maille.

C.3.5 Le fichier de sortie optionnel (control_out.txt)

Ici, on enregistre dans la première ligne V_0 puis la taille de chaque maille de volume (adimensionnelle ou dimensionnelle), on enregistre dans la deuxième ligne M_0 puis la taille de chaque maille de masse (adimensionnelle ou dimensionnelle).

Puis, à chaque temps d'enregistrement, on enregistre le temps ($t = xx;$) et la fonction f distribution en 2D en commençant par $f(V_0, M_0)$ puis $f(V_1, M_0)$, ...

C.4 Structure du programme

Le programme est composé de plusieurs fonctions :

C.4.1 Les fonctions utilitaire

Nous avons eu besoin de redéfinir les fonctions de bases

- *min* : donne le minimum entre deux nombres
- *max* : donne le maximum entre deux nombres
- *abs* : retourne la valeur absolue du nombre

Pour les différents choix et options, les différentes fonctions sont présentes :

- *CoalGlob* : créer les maillages en masse et volume et la matrice de données.
- *Option* : permet de déterminer quelle option est passée en ligne de commande et de l'initialiser.
- *chargerdonnees* : permet de charger les données du fichier d'entrée.
- *chargerdonneesVect* : permet de charger les données du fichier de distribution.

C.4.2 La résolution

- *ker* : fonction du noyau de coalescence.

L'adimensionnement, la résolution et l'enregistrement dans les fichiers de sorties sont tous effectué par :

- *Coal* : résout l'équation cinétique de transport coalescence.

Bibliographie

- [AA91] A. Arefmanesh and S. G. Advani. (1991). Diffusion-induced growth of a gas bubble in a viscoelastic fluid. *Rheol. Acta*, **30** :274–283. doi : [10.1007/BF00366641](https://doi.org/10.1007/BF00366641) .
- [Bab99] H. Babovsky. (1999). On a monte carlo scheme for smoluchowski’s equation. *Monte Carlo Methods Appl.*, **5** :1–18. doi : [10.1515/mcma.1999.5.1.1](https://doi.org/10.1515/mcma.1999.5.1.1) .
- [BCSZ11] Robin C. Ball, Colm Connaughton, Thorwald H. M. Stein, and Oleg Zaboronski. (2011). Instantaneous gelation in smoluchowski’s coagulation equation revisited. *Phys. Rev. E*, **84** :011111. doi : [10.1103/PhysRevE.84.011111](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.84.011111) .
- [BG05] A. Burgisser and J.E. Gardner. (2005). Experimental constraints on degassing and permeability in volcanic conduit flow. *Bull Volcanol*, **67** :42–56. doi : [10.1007/s00445-004-0359-5](https://doi.org/10.1007/s00445-004-0359-5) .
- [BLE05] T. Beechem, K. Lafdi, and A. Elgafy. (2005). Bubble growth mechanism in carbon foams. *Carbon*, **43** :1055–1064. doi : [10.1016/j.carbon.2004.11.046](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.11.046) .
- [BMW01] J. D. Blower, H. M. Mader, and S. D. R. Wilson. (2001). Coupling of viscous and diffusive controls on bubble growth during explosive volcanic eruptions. *Earth and Planet. Sci. Letters*, **193** :47–56. doi : [10.1016/S0012-821X\(01\)00488-5](https://doi.org/10.1016/S0012-821X(01)00488-5) .
- [Bro95] P.S. Brown. (1995). Structural stability of the coalescence/breakup equation. *J. Atmos. Sci.*, **52**(22) :3857–3865. doi : [10.1175/1520-0469\(1995\)052<3857:SSOTCE>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1995)052<3857:SSOTCE>2.0.CO;2) .
- [CBHSL11] K.D. Cole, J.V. Beck, A. Haji-Sheik, and B. Litkouhi. *Heat Conduction Using Green’s Functions*. CRC Press, Boca Raton, second edition, (2011).
- [CBSM12] J.M. Castro, A. Burgisser, I. Shipper, and S. Mancini. (2012). Mechanisms and dynamics of bubble coalescence in silicic magmas. *Bulletin of Volcanology*, . en préparation.
- [CDN06] B. Chouet, P. Dawson, and M. Nakano. (2006). Dynamics of diffusive bubble growth and pressure recovery in a bubbly rhyolitic melt embedded in an elastic solid. *J. Geophys. Res.*, **111** :B07310. doi : [10.1029/2005JB004174](https://doi.org/10.1029/2005JB004174) .
- [DE87] P.G.J. van Dongen and M.H. Ernst. (1987). tail distribution of large clusters from the coagulation equation. *Journal of colloid and interface science*, **115** :27–35. doi : [10.1016/0021-9797\(87\)90005-1](https://doi.org/10.1016/0021-9797(87)90005-1) .
- [DE88] P.G.J. van Dongen and M.H. Ernst. (1988). scaling solutions of Smoluchowski’s coagulation equation. *journal of statistical physics*, **50** :295–329. doi : [10.1007/BF01022996](https://doi.org/10.1007/BF01022996) .
- [DFT03] M. Deaconu, N. Fournier, and E. Tanré. (2003). Study of a stochastic particle system associated with the smoluchowski coagulation equation. *Methodol. Comput. Appl. Propab.*, **5** :131–158. doi : [10.1023/A:1024524500111](https://doi.org/10.1023/A:1024524500111) .
- [DHP03] I. Danaila, F. Hecht, and O. Pironneau. *Simulation numérique en c++*. Dunod, (2003).

- [Don87] P.G.J. van Dongen. (1987). solution of Smoluchowski's coagulation equation at large cluster sizes. *Physica A*, **145** :15–66. doi : [10.1016/0378-4371\(87\)90240-8](https://doi.org/10.1016/0378-4371(87)90240-8) .
- [Dra72] R.L. Drake. A general mathematical survey of the coagulation equation. In G.M. Hidy and J.R. Brock, editors, *Topics in Current Aerosol Research (part 2)*, volume 3, pages 201–376. Pergamon, New York, (1972).
- [EEE94] L. D. Erasmus, D. Eyre, and R. C. Everson. (1994). Numerical treatment of the population balance equation using a spline-galerkin method. *Computers & Chemical Engineering*, **8** :775–783. doi : [10.1016/0098-1354\(94\)E0007-A](https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)E0007-A) .
- [EW00] A. Eibeck and W. Wagner. (2000). An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena. *SIAM J. Sci. Comput.*, **22** :802–821. doi : [10.1137/S1064827599353488](https://doi.org/10.1137/S1064827599353488) .
- [EW01] A. Eibeck and W. Wagner. (2001). Stochastic particle approximations for smoluchowski's coagulation equation. *Ann. Appl. Probab.*, **11** :1137–1165. doi : [10.1214/aoap/1015345398](https://doi.org/10.1214/aoap/1015345398) .
- [FCMBJ12] L. Forestier-Coste, S. Mancini, A. Burgisser, and F. James. (2012). numerical resolution of a mono-disperse model of bubble growth in magmas. *Applied Mathematical Modeling*, . doi : [10.1016/j.apm.2012.01.031](https://doi.org/10.1016/j.apm.2012.01.031) .
- [FCMis] L. Forestier-Coste and S. Mancini. (soumis). A finite volume preserving scheme on non-uniform meshes and for multidimensional coalescence. , .
- [FL04] F. Filbet and P. Laurençot. (2004). Numerical simulation of the smoluchowski equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, **25** :2004–2028. doi : [10.1137/S1064827503429132](https://doi.org/10.1137/S1064827503429132) .
- [FO04] P. Francis and C. Oppenheimer. *Volcanoes*. Oxford University Press, New-York, second edition, (2004).
- [Fri61] S.K. Friedlander. (1961). Theoretical considerations for the particle size spectrum of the stratospheric aerosol. *J. Meteorol.*, **18**(6) :753–759. doi : [10.1175/1520-0469\(1961\)018<0753:TCFTPS>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1961)018<0753:TCFTPS>2.0.CO;2) .
- [Gar07] J.E. Gardner. (2007). Bubble coalescence in rhyolitic melts during decompression from high pressure. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, **166** :161–176. doi : [10.1016/j.jvolgeores.2007.07.006](https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2007.07.006) .
- [GHC99] J.E. Gardner, M. Hilton, and M.R. Carroll. (feb 1999). Experimental constraints on degassing of magma : isothermal bubble growth during continuous decompression from high pressure. *Earth and Planetary Science Letters*, **168** :201–218. doi : [10.1016/S0012-821X\(99\)00051-5](https://doi.org/10.1016/S0012-821X(99)00051-5) .
- [GHC00] J.E. Gardner, M. Hilton, and M.R. Carroll. (2000). Bubble growth in highly viscous silicate melts during continuous decompression from high pressure. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **64**(8) :1473–1483. doi : [10.1016/S0016-7037\(99\)00436-6](https://doi.org/10.1016/S0016-7037(99)00436-6) .
- [GLi] <http://www.engr.unl.edu/~glibrary/home/>. Accédé : 08/12/2011.
- [GLSS96] G. Goanac'h, S. Lovejoy, J. Stix, and D. Schertzer. (1996). A scaling cascade model for bubble growth in lavas. *Earth Planet. Sci. Lett.*, **139** :395–409. doi : [10.1016/0012-821X\(96\)00039-8](https://doi.org/10.1016/0012-821X(96)00039-8) .
- [GRPD04] D. Giordano, C. Romano, P. Papale, and D.B. Dingwell. (2004). The viscosity of trachytes and comparison with basalts, phonolites and rhyolites. *Chemical Geology*, **213** :49–61. doi : [10.1016/j.chemgeo.2004.08.032](https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2004.08.032) .

- [GS78] F. Gelbard and J.H. Seinfeld. (1978). Coagulation and growth of a multi-component aerosol. *Journal of Colloid and Interface Science*, **63**(3) :472–479. doi : [10.1016/S0021-9797\(78\)80008-3](https://doi.org/10.1016/S0021-9797(78)80008-3) .
- [HD96] K-U. Hess and D.B. Dingwell. (1996). Viscosities of hydrous leucogranitic melts : A non-arrhenian model. *American Mineralogist*, **81** :1297–1300.
- [HN94] S Hurwitz and O Navon. (1994). Bubble nucleation in rhyolitic melts : experiments at high pressure, temperature and water content. *Earth Planet Sci Lett*, **122** :267–280. doi : [10.1016/0012-821X\(94\)90001-9](https://doi.org/10.1016/0012-821X(94)90001-9) .
- [IMSD07] G. Iacono Marziano, B.C. Schmidt, and D. Dolfi. (2007). Equilibrium and disequilibrium degassing of a phonolite melt (vesuvius ad 79 "white pumice") simulated by decompression experiments. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, **161** :151–164. doi : [10.1016/j.jvolgeores.2006.12.001](https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2006.12.001) .
- [JA91] C. Jaupart and C. Allegre. (1991). Gas content, eruption rate and instabilities of eruption regime in silicic volcanoes. *Earth and Planet. Sci. Letters*, **102** :413–429. doi : [10.1016/0012-821X\(91\)90032-D](https://doi.org/10.1016/0012-821X(91)90032-D) .
- [Jau00] C. Jaupart. (2000). Magma ascent at shallow levels. *Encyclopedia of volcanoes*, :237–245.
- [KKW11] R. Kumar, J. Kumar, and G. Warnecke. (2011). Numerical methods for solving two-dimensional aggregation population balance equations. *Computers & Chemical Engineering*, **35** :999–1009. doi : [10.1016/j.compchemeng.2010.08.002](https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.08.002) .
- [KPWH08] J. Kumar, M. Peglow, G. Warnecke, and S. Heinrich. (2008). An efficient numerical technique for solving population balance equation involving aggregation, breakage, growth and nucleation. *Powder Technology*, **182** :81–104. doi : [10.1016/j.powtec.2007.05.028](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2007.05.028) .
- [Kri95] D. S. Krivitsky. (1995). Numerical solution of the smoluchowski kinetik equation and asymptotics of the distribution function. *J. Phys. A*, **63** :2025–2039. doi : [10.1088/0305-4470/28/7/022](https://doi.org/10.1088/0305-4470/28/7/022) .
- [Lee00] M. H. Lee. (2000). On the validity of the coagulation equation and the nature of runaway growth. *Icarus*, **143** :74–86. doi : [10.1006/icar.1999.6239](https://doi.org/10.1006/icar.1999.6239) .
- [Lee01] M. H. Lee. (2001). A survey of numerical solutions to the coagulation equation. *J. Phys. A*, **34** :10219–10241. doi : [10.1088/0305-4470/34/47/323](https://doi.org/10.1088/0305-4470/34/47/323) .
- [LG04] J.F. Larsen and J.E. Gardner. (2004). Experimental study of water degassing from phonolite melts : implications for volatile oversaturation during magmatic ascent. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, **134** :109–124. doi : [10.1016/j.jvolgeores.2004.01.004](https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2004.01.004) .
- [LGS04] S. Lovejoy, H. Gaonac'h, and D. Schertzer. (2004). Bubble distributions and dynamics : The expansion-coalescence equation. *J. Geophys. Res.*, **109** :B11203. doi : [10.1029/2003JB002823](https://doi.org/10.1029/2003JB002823) .
- [L'H07] I. L'Heureux. (2007). A new model of volatile bubble growth in a magmatic system : Isobaric case. *J. Geophys. Res.*, **112** :B12208. doi : [10.1029/2006JB004872](https://doi.org/10.1029/2006JB004872) .
- [LHN96] V. Lyakhovsky, S. Hurwitz, and O. Navon. (1996). Bubble growth in rhyolitic melts : experimental and numerical investigation. *Bull. Volcanol.*, **58**(1) :19–32. doi : [10.1007/s004450050122](https://doi.org/10.1007/s004450050122) .
- [LM04] P. Laurençot and S. Mischler. On coalescence equations and related models. In P. Degond, L. Pareschi, and G. Russo, editors, *Modeling and computational methods for kinetic equations*, Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology, pages 321–356. Birkhäuser Boston, MA, (2004).

- [LNL04] N.G. Lensky, O. Navon, and V. Lyakhovsky. (2004). Bubble growth during decompression of magma : experimental and theoretical investigation. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, **129** :7–22. doi : [10.1016/S0377-0273\(03\)00229-4](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(03)00229-4) .
- [LT81] F. Leyvraz and H. R. Tschudi. (1981). Singularities in the kinetics of coagulation processes. *J. Phys. A*, **14** :3389–3405. doi : [10.1088/0305-4470/14/12/030](https://doi.org/10.1088/0305-4470/14/12/030) .
- [Lus73] A.A. Lushnikov. (1973). Evolution of coagulating systems. *J. Colloid Interface Sci.*, **45**(3) :549–556. doi : [10.1016/0021-9797\(73\)90171-9](https://doi.org/10.1016/0021-9797(73)90171-9) .
- [Lus76] A.A. Lushnikov. (1976). Evolution of coagulating systems iii. coagulating mixtures. *Journal of Colloid and Interface Science*, **54**(1) :94–101. doi : [10.1016/0021-9797\(76\)90288-5](https://doi.org/10.1016/0021-9797(76)90288-5) .
- [MLK08] J. Mongrain, J.F. Larsen, and P.L. King. (2008). Rapid water exsolution, degassing, and bubble collapse observed experimentally in k-phonolite melts. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, **173** :178–184. doi : [10.1016/j.jvolgeores.2008.01.026](https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2008.01.026) .
- [MP92] J.L. Meunier and R. Peschanski. (1992). Intermittency, fragmentation and the Smoluchowski equation. *Nucl. Phys. B*, **374**(2) :327–339. doi : [10.1016/0550-3213\(92\)90356-G](https://doi.org/10.1016/0550-3213(92)90356-G) .
- [MS00] M. Mangan and T. Sisson. (2000). Delayed, disequilibrium degassing in rhyolite magma : decompression experiments and implications for explosive volcanism. *Earth and Planetary Science Letters*, **183** :441–455. doi : [10.1016/S0012-821X\(00\)00299-5](https://doi.org/10.1016/S0012-821X(00)00299-5) .
- [MS03] C. Martel and B.C. Schmidt. (2003). Decompression experiments as an insight into ascent rates of silicic magmas. *Contrib Mineral Petrol*, **144** :397–415. doi : [10.1007/s00410-002-0404-3](https://doi.org/10.1007/s00410-002-0404-3) .
- [MS05] M. Mangan and T. Sisson. (2005). Evolution of melt-vapor surface tension in silicic volcanic systems : Experiments with hydrous melts. *Journal of Geophysical Research*, **110** :B01202. doi : [10.1029/2004JB003215](https://doi.org/10.1029/2004JB003215) .
- [NIY⁺02] M. Nakagawa, Y. Ishizuka, M. Yoshimoto, T. Kudo, K. Aizawa, J. Kitagawa, N. Hiraga, A. Matsumoto, H. Togari, R. Takahashi, E. Ishii, M. Egusa, T. Seino, M. Amma-Miyasaka, K. Wada, and K. Niida. (2002). Eruptive materials of the 2000 eruption of Usu volcano, northern Japan : Component materials and their temporal change(<special section>the 2000 eruption of Usu volcano (2)). *Bulletin of the Volcanological Society of Japan*, **47**(4) :279–288. online : ci.nii.ac.jp/naid/110003041260/en/ .
- [Olv72] F.W.J. Olver. Bessel function of integer order. In M. Abramowitz and I.A. Stegun, editors, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, pages 355–434. New-York : Dover, tenth edition, (1972).
- [Per02] B. Perthame. *Kinetic formulation of conservation laws*. Oxford lecture series in mathematics and its applications. Oxford University Press, (2002).
- [PS98] A. Proussevitch and D. Sahagian. (1998). Dynamics and energetics of bubble growth in magmas : Analytical formulation and numerical modeling. *J. Geophys. Res.*, **103**(B8) :18223–18251. doi : [10.1029/98JB00906](https://doi.org/10.1029/98JB00906) .
- [PS05] A. A. Proussevitch and D. L. Sahagian. (2005). A numerical model of volcanic eruption mechanisms driven by disequilibrium magma degassing. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, **143** :89–111. doi : [10.1016/j.jvolgeores.2004.09.012](https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2004.09.012) .

- [PSA93] A.A. Proussevitch, D.L. Sahagian, and A.T. Anderson. (1993). Dynamics of diffusive bubble growth in magmas : Isothermal case. *Journal of Geophysical Research*, **98**(B12) :22283–22307. doi : [10.1029/93JB02027](https://doi.org/10.1029/93JB02027) .
- [QW07] S. Qamar and G. Warnecke. (2007). Solving population balance equations for two-component aggregation by a finite-volume scheme. *Chemical Engineering Science*, **62** :679–693. doi : [10.1016/j.ces.2006.10.001](https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.10.001) .
- [REBL05] G. Rosebrock, A. Elgafy, T. Beechem, and K. Lafdi. (2005). Study of the growth and motion of graphitic foam bubbles. *Carbon*, **43** :3075–3087. doi : [10.1016/j.carbon.2005.06.044](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2005.06.044) .
- [Scr59] L. E. Scriven. (1959). On the dynamics of phase growth. *Chem. Eng. Sci.*, **10** :1–13. doi : [10.1016/0009-2509\(59\)80019-1](https://doi.org/10.1016/0009-2509(59)80019-1) .
- [SGL⁺10] T. Shea, L. Gurioli, J.F. Larsen, B.F. Houghton, J.E. Hammer, and K.V. Cashman. (2010). Linking experimental and natural vesicle texture in vesuvius 79ad white pumice. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, **192** :69–84. doi : [10.1016/j.jvolgeores.2010.02.013](https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2010.02.013) .
- [Smo16] M. V. Smoluchowski. (1916). Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen. *Physikalische Zeitschrift*, **17** :557–585.
- [Smo17] M. V. Smoluchowski. (1917). Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie, Stöchiometrie und Verwandtschaftslehre*, **92**(2) :129–168. online : publikationen.ub.uni-frankfurt.de/frontdoor/index/index/docId/13699.
- [SP80] R.C. Srivastava and R.E. Passarelli. (1980). Analytical solutions to simple models of condensation and coalescence. *journal of the atmospheric sciences*, **37** :612–621. doi : [10.1175/1520-0469\(1980\)037<0612:ASTSMO>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1980)037<0612:ASTSMO>2.0.CO;2) .
- [TIN96] H. Tanaka, S. Inaba, and K. Nakazawa. (1996). Steady-state size distribution for the self-similar collision cascade. *Icarus*, **123** :450–455. doi : [10.1006/icar.1996.0170](https://doi.org/10.1006/icar.1996.0170) .
- [TNTS05] S. Takeuchi, S. Nakashima, A. Tomiya, and H. Shinohara. (2005). Experimental constraints on the low gas permeability of vesicular magma during decompression. *Geophysical Research Letters*, **32**(L10312). doi : [10.1029/2005GL022491](https://doi.org/10.1029/2005GL022491) .
- [Tor95] A. Toramaru. (1995). Numerical study of nucleation and growth of bubbles in viscous magmas. *J. Geophys. Res.*, **100** :1913–1931. doi : [10.1029/94JB02775](https://doi.org/10.1029/94JB02775) .
- [TTS09] S. Takeuchi, A. Tomiya, and H. Shinohara. (2009). Degassing conditions for permeable silicic magmas : Implications from decompression experiments with constant rates. *Earth and Planetary Science Letters*, **283** :101–110. doi : [10.1016/j.epsl.2009.04.001](https://doi.org/10.1016/j.epsl.2009.04.001) .
- [TY99] R.P. Turco and F. Yu. (1999). Particle size distributions in an expanding plume undergoing simultaneously coagulation and condensation. *J. Geophys. Res.*, **104**(D16) :19227–19241. doi : [10.1029/1999JD900321](https://doi.org/10.1029/1999JD900321) .
- [VM05] H.M. Vale and T.F. Mckenna. (2005). Solution of the population balance equation for two-component aggregation by an extended fixed pivot technique. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **44**(20) :7885–7891. doi : [10.1021/ie050179s](https://doi.org/10.1021/ie050179s) .
- [VV98] J. S. Vrentas and C. M. Vrentas. (1998). Slow bubble growth and dissolution in a viscoelastic fluid. *J. Appl. Polym. Sci.*, **67** :2093–2103. doi : [10.1002/\(SICI\)1097-4628\(19980321\)67:12<2093::AID-APP16>3.0.CO;2-2](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4628(19980321)67:12<2093::AID-APP16>3.0.CO;2-2) .

- [Wel98] S. W. J. Welch. (1998). Direct simulation of vapor bubble growth. *Int. J. Heat and Mass Transf.*, **41** :1655–1666. doi : [10.1016/S0017-9310\(97\)00285-8](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(97)00285-8) .
- [WHB⁺09] A.G. Whittington, B.H. Hellwig, H. Behrens, B. Joachim, A. Stechern, and F. Vetere. (2009). The viscosity of hydrous dacitic liquids : implications for the rheology of evolving silicic magmas. *Bulletin of Volcanology*, **71** :185–199. doi : [10.1007/s00445-008-0217-y](https://doi.org/10.1007/s00445-008-0217-y) .
- [ZB00] Y. Zhang and H. Behrens. (2000). H₂O diffusion in rhyolitic melts and glasses. *Chemical Geology*, **169**(1-2) :243–262. doi : [10.1016/S0009-2541\(99\)00231-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2541(99)00231-4) .

Liste des tableaux

1.1	Tableau des cas limites	50
3.1	Données au saut de pression à $P_a \sim 0.1429$ (gauche) et au saut de pression à $P_a \sim 0.0714$ (droite)	79
3.2	Table des notations pour recalculer le rayon	80
3.3	Table des diamètres originaux et recalculés pour une série expérimentale . .	81
3.4	Liste des différentes données expérimentales initiales	83
3.5	Liste des différentes données finales expérimentales	84

Table des figures

1	Exemple d'éruption effusive, éruption du volcan Kilauea à Hawaï.	2
2	Exemple d'éruption explosive, éruption du volcan Pinatubo aux Philippines en 1991	2
3	Diagramme montrant les phases du magma remontant et le rôle central de la phase gazeuse	3
1.1	Vu monodisperse	8
1.2	Évolution du maillage quand le rayon croît.	17
1.3	Erreur relative due au nombre de points de discrétisation dans (1.14) par rapport à 2500 points pour la pression en fonction de la pression ambiante adimensionnelle	27
1.4	Erreur relative due au nombre de points de discrétisation dans (1.14) par rapport à 2500 points pour le rayon en fonction de la pression ambiante adimensionnelle	27
1.5	Erreur relative due au nombre de points de discrétisation dans (1.14) par rapport à 2500 points pour la porosité en fonction de la pression ambiante adimensionnelle	28
1.6	Erreur relative due à la tension de surface σ dans (1.12) par rapport à $\sigma = 0.5$ pour la pression en fonction de la pression ambiante adimensionnelle	28
1.7	Erreur relative due à la tension de surface σ dans (1.12) par rapport à $\sigma = 0.5$ pour le rayon en fonction de la pression ambiante adimensionnelle .	29
1.8	Erreur relative due à la tension de surface σ dans (1.12) par rapport à $\sigma = 0.5$ pour la porosité en fonction de la pression ambiante adimensionnelle	29
1.9	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.1	31
1.10	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.1	31
1.11	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.1	32
1.12	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.3	32
1.13	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.3	33
1.14	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.3	33
1.15	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.2	34
1.16	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.2	34
1.17	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.1.2	35
1.18	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.1	35
1.19	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.1	36
1.20	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence du cas général vers 1.4.3.1	36
1.21	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.1.3	37
1.22	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.1.3	37
1.23	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.1.3	38
1.24	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.2.2	39
1.25	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.2.2	39
1.26	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.1 vers 1.4.2.2	40
1.27	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.2.1	41

1.28	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.2.1	41
1.29	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.2.1	42
1.30	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.3.2	43
1.31	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.3.2	43
1.32	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.3 vers 1.4.3.2	44
1.33	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.1.3	45
1.34	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.1.3	45
1.35	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.1.3	46
1.36	$\hat{R}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.2.1	47
1.37	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.2.1	47
1.38	α fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.1.2 vers 1.4.2.1	48
1.39	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.1 vers 1.4.2.2	49
1.40	$\hat{P}$ fonction de $\hat{P}_a$ pour la convergence de 1.4.3.1 vers 1.4.3.2	49
1.41	Comparaison de la porosité à l'équilibre et de la section 1.4.2.1	51
2.1	Allure des fonctions M_1 (en bleu) et M_2 (en rouge)	57
2.2	Dans le cas bien préparé, les courbes se croisent toutes les trois en un point, $R = 1, P = 1 + \Sigma$. En rouge est représenté P_2 , en bleu P_1 et en vert $R = 1$	60
2.3	Cas sursaturé	68
2.4	Cas sous-saturé	68
3.1	Comparaison des différentes valeurs de la viscosité en fonction de la concentration en eau pour trois compositions chimiques de magma à une température de 1050 K	74
3.2	Rayon R des bulles en fonction de la pression ambiante P_a .	75
3.3	Schéma du dispositif expérimental.	76
3.4	Évolution de la pression ambiante au cours du temps	77
3.5	Exemples de tranches d'échantillon pour les mesures 2D de taille de bulles et de porosité (photos extraites de [BG05])	77
3.6	Comparaison de l'évolution du rayon des bulles R entre une décompression linéaire et une décompression par sauts de pression successifs	78
3.7	Comparaison de l'évolution de la pression de la bulle P entre une décompression linéaire et une décompression par sauts de pression successifs	78
3.8	Comparaison de l'évolution de la porosité α entre une décompression linéaire et une décompression par sauts de pression successifs	79
3.9	Besoin de polydisperse	81
3.10	Besoin de polydisperse	82
3.11	Distribution des expériences de laboratoire en termes de Θ_V et Θ_D . (Données provenant de 13 études). Les 4 champs en vert (cas limites, général et équilibre) font référence à la table 1.1	85
3.12	Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences sans autres processus que la décompression/exsolution. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.	86
3.13	Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec conditions initiales mal contraintes. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue. On a utilisé une constante de diffusivité de $3 \cdot 10^{-11}$ pour les deux rayons fixés et une constante de diffusivité recalculée par [ZB00] pour chaque rayon recalculé.	89

3.14	Comparaison avec les résultats numériques et expérimentaux de fig.5c-d dans [LHN96] pour un rayon initial recalculé et une constante de diffusivité obtenue par la formule de [ZB00], un rayon initial recalculé et une constante de diffusivité proposée par [LHN96] ($D = 2e - 11$) et pour une diffusivité plus grande proposée par [LHN96] ($D = 3e - 11$) et un rayon fixé à $12\mu m$. Les résultats présentés à gauche sont pour une pression ambiante finale supérieure à $110 MPa$ et à droite pour une pression inférieure à $110 MPa$. Il existe des symboles hors échelle.	90
3.15	Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec coalescence Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.	91
3.16	Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec coalescence Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.	92
3.17	Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec nucléation. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.	94
3.18	Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec cristallisation. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.	96
3.19	Confrontation des résultats expérimentaux et numériques pour des expériences avec échappement de bulles. Sur chaque graphique est représentée l'erreur de mesure pour chaque expérience lorsque cette erreur était précisée. L'absence de barre d'erreur indique une erreur inconnue.	97
4.1	Coalescence planaire de deux bulles	110
4.2	Noyau simplifié	111
5.1	Mailles j utilisées dans la première somme	121
5.2	Mailles j utilisées dans la deuxième somme	121
5.3	Mailles j utilisées dans la troisième somme	121
5.4	Représentation des différents cas pris en compte par $\mathcal{F}(i)$	122
5.5	Comparaison des moments d'ordre 0 et 1 pour la coalescence $1D$ avec noyau constant	127
5.6	Norme de l'erreur discrète L^1 pour la coalescence $1D$ avec noyau constant	128
5.7	Comparaison des moments pour la coalescence $1D$ avec noyau additif	129
5.8	Moment d'ordre 1 pour la coalescence $1D$ avec noyau multiplicatif	130
5.9	Norme de l'erreur discrète L^1 pour la coalescence $1D$ avec noyau multiplicatif	130
5.10	Solution analytique à $t = 100$ du cas 5 de [QW07]	133
5.11	Comparaison des moments numériques avec les résultats de [QW07] pour le cas test 5	133
5.12	Comparaison de la fonction densité numérique à l'instant $t = 100$, avec les résultats de [QW07] pour le cas test 5	134
5.13	Solution analytique à $t = 100$ du cas 6 de [QW07]	135
5.14	Comparaison des moments numériques avec les résultats de [QW07] pour le cas test 6	135
5.15	Comparaison de la fonction densité numérique à l'instant $t = 100$ avec les résultats de [QW07] pour le cas test 6	135

5.16	Comparaison des moments numériques avec les résultats de [QW07] pour le cas test 7	136
5.17	Comparaison de la fonction densité numérique à l'instant $t = 100$ avec les résultats de [QW07] pour le cas test 7	137
6.1	Marginales pour le transport linéaire	143
6.2	Transport de $n(t = 0)$ avec $\Phi = \Psi = 100000$ au temps $t = 0.85$	143
6.3	Donnée initiale pour le transport en rotation uniforme	144
6.4	Transport en rotation uniforme : solution numérique pour $t = 0.2$ (gauche) et $t = 0.5$ (droite).	145
6.5	Transport en rotation uniforme : solution numérique pour $t = 0.8$ (gauche) et $t = 1.0$ (droite).	145
6.6	Comparaisons de l'évolution du rayon pour différents flux pour $\Theta_D = 10$, $\Theta_V = 10^{-3}$ (à gauche) et pour $\Theta_D = 10^{-3}$, $\Theta_V = 10^{-5}$ (à droite).	146
6.7	Comparaisons de l'évolution du rayon (à gauche) et de la pression (à droite) pour différents flux pour $\Theta_D = 10^{-1}$, $\Theta_V = 10^{-1}$	146
6.8	Comparaisons de l'évolution du rayon médian obtenue par résolution de l'équation cinétique, et le système d'équation avec flux simplifié et équation de diffusion pour $\Theta_D = 10$, $\Theta_V = 10^{-3}$ (à gauche) et pour $\Theta_D = 10$, $\Theta_V = 10^{-5}$ (à droite).	147
6.9	Comparaisons de l'évolution du rayon médian obtenue par résolution de l'équation cinétique, et le système d'équation avec flux simplifié et équation de diffusion pour $\Theta_D = 10^{-3}$, $\Theta_V = 10^{-5}$ (à gauche) et pour $\Theta_D = 10^{-1}$, $\Theta_V = 10^{-1}$ (à droite).	148
6.10	Marginale "massique" pour le cas monodisperse (gauche) et le cas polydisperse (droite) aux temps $t = 0$, $t = 0.2$, $t = 0.4$, $t = 0.7$ et $t = 0.9$	149
6.11	Évolution du rayon moyen R en fonction de la pression ambiante P_a , pour le cas monodisperse et le cas polydisperse.	149
6.12	Résolution témoin. Sont représentés sur les graphiques, la marginale (gauche) et la marginale "massique" (droite) aux temps $t = 0$, $t = 0.7$, $t = 0.75$, $t = 0.8$ et $t = 0.85$ en fonction du rayon $v^{1/3}$	150
6.13	Résolution pour un pas de temps 100 fois plus petit. Sont représentés sur les graphiques, la marginale (gauche) et la marginale "massique" (droite) aux temps $t = 0$, $t = 0.7$, $t = 0.75$, $t = 0.8$ et $t = 0.85$ en fonction du rayon $v^{1/3}$	151
6.14	Résolution pour un pas d'espace 2 fois plus petit. Sont représentés sur les graphiques, la marginale (gauche) et la marginale "massique" (droite) aux temps $t = 0$, $t = 0.7$, $t = 0.75$, $t = 0.8$ et $t = 0.85$ en fonction du rayon $v^{1/3}$	151
6.15	Résultat à $t = 0.85$ pour la densité de distribution et la marginale "massique"	152
6.16	Résultat à $t = 0.85$ pour la densité de distribution et la marginale "massique" après post-traitement	153
6.17	Données initiales pour tester les noyaux de coalescence : f (gauche), g (droite)	154
6.18	Évolution de la donnée initiale f pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$	154
6.19	Évolution de la donnée initiale g pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$	155
6.20	Évolution de la donnée initiale $f + g$ pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.043$	155
6.21	Données initiales pour tester les noyaux de coalescence	156
6.22	Évolution de la donnée initiale f pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$	156
6.23	Évolution de la donnée initiale g pour les noyaux définis par (4.54) (gauche) et par (4.53) (droite) au temps $t = 0.8$	156

6.24	Donnée initiale pour un test simple de couplage transport/coalescence (gauche). Solution quand il n'y a pas de coalescence pour un temps final de $t = 0.85$ (droite).	157
6.25	Solution pour la donnée initiale normalisée à 1 (gauche) et à 100 (droite) pour un temps final de $t = 0.85$	157
6.26	Marginale "massique" initiale, et au temps $t = 0.85$ pour la croissance sans coalescence et la croissance avec coalescence pour une donnée initiale nor- malisée à 1 et 100.	158
6.27	Solution pour la donnée initiale ABG1. Rayon (gauche) et porosité (droite) en fonction de la pression ambiante.	159
6.28	Solution pour la donnée initiale G300. Rayon (gauche) et porosité (droite) en fonction de la pression ambiante.	160

Louis FORESTIER-COSTE

Croissance et coalescence de bulles dans les magmas : analyse mathématique et simulation numérique

Résumé :

Cette thèse est consacrée à l'étude mathématiques et numérique d'un problème physique issu de la volcanologie. On s'intéresse à la modélisation polydisperse de croissance de bulles par exsolution, décompression et coalescence. Un modèle de croissance polydisperse a été proposé dans la littérature, mais ne prenait en compte que le volume des bulles, ce qui restreint le domaine d'application car la croissance par exsolution dépend également de la masse d'eau présente dans la bulle. Pour améliorer ce modèle, nous sommes parti d'une description monodisperse adimensionnelle de la croissance d'une bulle par décompression et exsolution, donnée par le couplage de deux EDO et une EDP. Un code numérique est proposé pour résoudre le problème monodisperse et est actuellement utilisé. Après avoir validé numériquement ce code et considéré plusieurs cas limites, nous avons étudié les solutions du problème et défini une approximation du flux qui nous permet de découpler le système d'équations. Ensuite, nous avons étendu le modèle polydisperse de une à deux dimensions. Une résolution de la coalescence est proposée et couplée avec le modèle de croissance polydisperse. La résolution de la coalescence est confrontée à d'autres schémas numériques en une et deux dimensions afin de valider le schéma numérique proposé. Les premiers test numériques appliqués au problème physique donnent de bon résultats.

Mots clés : croissance de bulles, volumes finis, système d'edo couplé à une équation de diffusion, coalescence, C++, schéma conservatif par construction

Bubbles growth and coalescence in magmas : mathematical analysis and numerical simulation

Abstract :

This thesis is devoted to mathematical and numerical study of a physical problem coming from volcanology. We look at the polydisperse modeling of bubbles growth by exsolution, decompression and coalescence. A polydisperse growth model has been proposed in literature, but it takes into account only the volume of bubbles, which restrict the application field, because growth by exsolution also depends on the water mass in the bubbles. In order to upgrade this model, we start with a non-dimensional monodisperse description of the bubble growth by decompression and exsolution, given by a coupled ODE system and a PDE. A numerical code is proposed to solve the monodisperse problem and is currently used. After validating this code numerically and considering several limit cases, we studied the solutions of the system and defined a flux approximation to decouple the equations system. Next, we extend the polydispers model from one to two dimensions, the volume and the water mass of bubbles. A resolution of coalescence is proposed and coupled with the polydisperse growth model. The resolution of coalescence is confronted with others numericals schemes in one and two dimensions in order to validate the proposed numerical scheme. The first numerical tests applied to a physical problem give good results.

Keywords : bubble growth, finite volume, coupled ode system and diffusion equation, coalescence, C++, conservative scheme by construction



MAPMO UMR 6628, Fédération Denis Poisson
Université d'Orléans, UFR Sciences
Bâtiment de mathématiques - Route de Chartres
B.P. 6759 - 45067 Orléans cedex 2
FRANCE

