Simulation aéro-thermo-mécanique des effets du feu sur les parois d'un milieu confiné : application à l'étude des thermo-altérations de la grotte Chauvet-Pont d'Arc

Fabien Salmon

▶ **To cite this version:**

Fabien Salmon. Simulation aéro-thermo-mécanique des effets du feu sur les parois d'un milieu confiné : application à l'étude des thermo-altérations de la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Mécanique [physics]. Université de Bordeaux, 2019. Français. NNT : 2019BORD0041 . tel-02303048

HAL Id: tel-02303048

https://theses.hal.science/tel-02303048

Submitted on 2 Oct 2019

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.

THÈSE PRÉSENTÉE
POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

SPÉCIALITÉ : MÉCANIQUE

Par Fabien Salmon

Simulation aéro-thermo-mécanique des effets du feu sur les parois d'un milieu confiné. Application à l'étude des thermo-altérations de la grotte Chauvet-Pont d'Arc

---

Sous la direction de Colette Sirieix et Delphine Lacanette

Et sous l'encadrement de Catherine Ferrier et Jean-Christophe Mindeguia

Soutenue le 28 mars 2019

Membres du jury

Jean-Christophe Batsale	Professeur	Université de Bordeaux	Président
Alain Millard	Ingénieur-Chercheur	CEA	Rapporteur
Olivier Vauquelin	Professeur	Université d'Aix-Marseille, IUSTI	Rapporteur
Alexis Coppalle	Professeur	INSA de Rouen	Examinateur
Carole Fritz	Chargé de recherche	Université de Toulouse	Examinateur
Colette Sirieix	Professeur	Université de Bordeaux	Directrice
Delphine Lacanette	Maître de Conférences	Université de Bordeaux	Co-directrice
Catherine Ferrier	Maître de Conférences	Université de Bordeaux	Encadrante
Jean-Claude Leblanc	Chercheur	Université de Toulouse	Invité
Jean-Christophe Mindeguia	Maître de Conférences	Université de Bordeaux	Invité

Simulation aéro-thermo-mécanique des effets du feu sur les parois d'un milieu confiné. Application à l'étude des thermo-altérations de la grotte Chauvet-Pont d'Arc

Résumé

En 1994, la découverte de la grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche, France) révéla des marques thermiques, d'origine anthropique, uniques au monde. Elles sont les témoins de feux préhistoriques effectués dans la partie profonde de la cavité. La datation par thermoluminescence des chauffes est cohérente avec la première période de fréquentation humaine il y a entre 37 000 et 33 500 ans. Les archéologues ont identifié deux types de thermo-altérations : des changements de couleur et des écaillages. Les changements de couleur résultent de réactions chimiques s'opérant à haute température dans le calcaire, rendant la roche rouge ou grise. Des essais *ex situ* ont montré que la couleur rouge survient après une chauffe de 10 minutes à 250^oC tandis qu'une température minimum de 350^oC est nécessaire pour la couleur grise. Le phénomène d'écaillage provient de fortes contraintes mécaniques dans la roche causées par la dilatation thermique et des processus thermo-hydriques. De plus, des particules de suie recouvrent encore une partie des parois dans les zones altérées. À partir de ces indices, l'objectif de la thèse est de caractériser les feux de la Galerie des Mégacéros qui se situe dans la partie profonde de la grotte. L'estimation des quantités de bois, du nombre de feux et de la capacité à alimenter les foyers pourrait aider les archéologues à faire des hypothèses sur la fonction de ces feux.

Pour des raisons de conservation, seule la simulation peut reproduire des feux dans la géométrie de la grotte sans nécessiter sa reconstitution. Cette étude consiste à construire une modélisation numérique de feux confinés et des impacts thermiques résultants. Un couplage fluide-structure est donc développé à partir de deux logiciels *open source* : OpenFOAM et Cast3m. Le premier effectue la simulation de scénarios de feux grâce au module FireFOAM. Le second réalise les calculs thermo-mécaniques dans le massif. Afin d'étendre le champ d'application initial de FireFOAM, des modèles numériques ont été implémentés dans le code. Ceux-ci concernent le dépôt de suie, l'évaluation des risques, la correction des mesures par thermocouple et une condition limite en température. De plus, quelques exigences de modélisation améliorant la qualité des résultats sont détaillées dans le manuscrit. Le modèle ainsi développé est validé sur des feux expérimentaux exécutés dans une ancienne carrière de calcaire dont les dimensions sont proches de celles de la Galerie des Mégacéros. Du pin sylvestre, qui correspond à l'essence dont sont issus les échantillons de charbon analysés de la grotte, est utilisé comme combustible. La combustion aboutit à des thermo-altérations analogues à celles observées dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Des écaillages et des changements de couleur se sont produits au plafond et aux parois de la carrière. La comparaison avec la simulation est effectuée à partir des mesures de températures, de vitesses ainsi que de concentrations de gaz et de particules.

Le modèle numérique est ensuite appliqué à la simulation de feux dans la géométrie de la Galerie des Mégacéros. Toutes les zones altérées de cette galerie sont traitées et les scénarios qui ont pu se produire sont précisés. Ces travaux fournissent ainsi une vue d'ensemble de la localisation et de l'intensité des feux dans cette partie de la grotte. De plus, l'adéquation avec les conditions de vie est indiquée pour les feux les plus puissants. Ces informations pourraient aider les archéologues dans la compréhension des fonctions de ces feux.

Mots clés : Grottes ornées, Chauvet-Pont d'Arc, Combustion, Feu, Dépôt de suie, Simulation numérique, CFD, OpenFOAM, Thermo-mécanique, Écaillage, Rubéfaction, Cast3m

Aero-thermo-mechanical simulation of fire effects on the walls of a confined space. Application to the study of the thermo-alterations of the Chauvet-Pont d'Arc cave

Abstract
In 1994, the discovery of the Chauvet-Pont d'Arc cave (Ardèche, France) revealed singular anthropogenic thermal marks on walls. They are the witnesses of high intensity prehistorical fires carried out deep in the cavity. The thermoluminescence evaluation of the heating ages is consistent with the earlier period of human occupation between 37,000 and 33,500 years ago. The archaeologists identified two kinds of thermo-alterations : colour changes and spallings. The colour changes result from high-temperature chemical reactions in limestone, turning rock red or grey. *Ex situ* tests showed that red colour happens after heating at 250^oC for ten minutes while at least 350^oC is necessary for grey. Spalling stems from high stresses in rock due to restrained thermal expansion and thermohydric processes. In addition, part of the walls near thermo-altérations is still covered with soot. From these clues, this investigation aims to characterize the fires of the Megaloceros Gallery which is located in the deep part of the cave. Estimating the amounts of wood, the fires number and the ability to supply the hearths could help make assumptions about the function of these fires.

For the sake of conservation, only simulation can reproduce fires in the cave geometry without requiring any reconstruction. This study is to set up a numerical modelling of fires in confined geometries and the induced thermal impacts on walls. A fluid-structure coupling is then developed from two free open source codes : OpenFOAM and Cast3m. The former manages the simulation of fire scenarios through the FireFOAM tool. The latter handles the thermo-mechanical calculations in the rock mass. To extend the initial scope of FireFOAM, some numerical models have been implemented in the code. This relates to soot deposit, danger assessment, thermocouple correction and a thermal boundary condition. In addition, some modelling requirements improving the quality of the results are detailed in the manuscript. The advanced model is then validated on experimental fires in a former limestone quarry which has dimensions close to the Megaloceros Gallery ones. The same fuel (pinus sylvestris) as the one identified in the cave is burnt. The combustion led to similar thermo-alterations as those observed in the Chauvet-Pont d'Arc cave. Spallings and colour changes occurred on the ceiling and walls of the quarry. The comparison with simulation is carried out thanks to the measurement of temperatures, velocities, soot deposits, gases and particles concentrations.

The numerical model is then applied to the simulation of fires in the Megaloceros Gallery geometry. All the impacted areas of this gallery are considered and the scenarios that may have occurred are specified. This investigation then provides an overview of the fires locations and intensities in this part of the cave. Moreover, the compatibility with living conditions is indicated for the most powerful fires. These information could help for archaeologists in the understanding of the functions of these fires.

Keywords: Painted caves, Chauvet-Pont d'Arc, Combustion, Fire, Soot deposit, Numerical simulation, CFD, OpenFOAM, Thermo-mechanics, Spalling, Rubification, Cast3m

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au sein de l'Institut de mécanique et d'ingénierie (I2M) aux laboratoires TREFLE (Transfert Fluide Énergétique) et GCE (Génie Civile Environnement). Elle s'inscrit dans le cadre du programme CarMoThaP porté par Catherine Ferrier (PACEA) et financé par la région Nouvelle-Aquitaine.

Je tiens à remercier Alain Millard et Olivier Vauquelin qui ont accepté d'être rapporteurs de ce travail, ainsi que Carole Fritz, Alexis Coppalle et Jean-Christophe Batsale pour leur participation au jury de thèse.

Je remercie tout particulièrement les personnes qui m'ont encadré au cours de cette thèse. Merci à ma directrice de thèse, Colette, pour les discussions, sa patience et l'attention qu'elle porte, je pense, à tous ses doctorants. Je remercie aussi grandement Delphine pour sa gentillesse rare et le temps accordé au quotidien sur les questions scientifiques dès que j'en avais besoin. Merci enfin à mes encadrants, Catherine pour les discussions archéologiques qui découlèrent des résultats de simulation et Jean-Christophe pour, entre autres, les après-midi dédiés aux avancées de la thèse qui ont toujours étaient fructueux.

Je vous suis également reconnaissant de m'avoir choisi pour ce sujet singulier et original que j'ai eu plaisir à étudier. Merci de plus pour la confiance que vous m'avez accordé dès le début de la thèse et pendant toute la durée de celle-ci.

Je remercie bien sûr Jean-Claude Leblanc pour son omniprésence dans le projet. Sans lui et ses idées, les expérimentations auraient sans aucun doute étaient différentes. Merci pour cette grande implication dans ces travaux de thèse qui n'est pas étrangère aux résultats de ces travaux.

À travers Axel Bellivier, je remercie le LCPP (Laboratoire Central de la Préfecture de Police) pour sa collaboration lors des expérimentations menées dans la carrière de Lugasson. Sans cette aide, la thèse n'aurait pas pu s'appuyer sur autant de données expérimentales. De même, il me faut remercier C. Bouchet, propriétaire de la carrière de Lugasson, qui nous a permis d'effectuer tous les essais nécessaires dans cette cavité ainsi que les pompiers du SDIS 33 qui ont participé aux expérimentations.

Je suis reconnaissant des ressources mises à disposition par le CINES (GENCI-CINES Grant 2017-A0032B10268). Sans ces millions d'heures de calcul, la thèse n'aurait pas pu être menée. Je remercie également le Ministère de la Culture pour son aide financière concernant les recherches relatives à la grotte Chauvet-Pont d'Arc.

Cette thèse résulte évidemment d'un ensemble de facteurs extérieurs à ces travaux spécifiques. Je remercie donc tous ceux qui de près ou de loin ont permis la réalisation de ces travaux : la famille ainsi que les professeurs des petites classes aux études supérieures.

Je remercie enfin ceux qui m'ont accompagné au quotidien. J'aimerais citer Valérie, capable de remplir des papiers administratifs avant même que je réalise en avoir besoin ! Je remercie pêle-mêle tous les permanents pour leurs traits plus ou moins humoristiques (Cédric, Antoine, Mathieu, Pierre, Stéphane, ...) ainsi que les emplois précaires (Cécile, Lucas, ...). Pour les doctorants présents à la fin de cette thèse (Florian, Quentin, Baptiste, Félix), n'oubliez pas qu'un *expert est un homme qui a fait toutes les erreurs qui peuvent être faites dans un domaine restreint* (Niels Bohr). De ce point de vue, vous êtes très précoces et deviendrez rapidement des experts, dans de nombreux domaines !

Table des matières

Introduction **1**

1 État de l'art **5**
1.1 Présentation de la grotte Chauvet-Pont d'Arc . . . 5
1.1.1 Un exemple de l'art pariétal de la grotte Chauvet-Pont d'Arc . . . 6
1.1.2 Les marques de chauffe . . . 7
1.2 Chimie de la combustion . . . 11
1.2.1 Pyrolyse du bois . . . 11
1.2.2 Equation de combustion . . . 14
1.2.3 Energie de combustion libérée par rayonnement . . . 14
1.2.4 Cinétique chimique . . . 16
1.3 Comportement des feux localisés . . . 17
1.3.1 Panache thermique . . . 17
1.3.2 Jet sous plafond . . . 19
1.3.3 Extension du jet sous plafond aux parois verticales . . . 22
1.4 Transferts thermiques . . . 22
1.4.1 Conduction . . . 23
1.4.2 Convection . . . 25
1.4.3 Rayonnement thermique . . . 28
1.5 Dynamique des fluides compressibles & Turbulence . . . 31
1.5.1 Théorème de transport de Reynolds . . . 31
1.5.2 Equations de l'aérothermochimie instantanées . . . 32
1.5.3 La turbulence et sa modélisation . . . 37
1.5.4 Traitement de la turbulence proche des parois . . . 45
1.6 Description théorique et bibliographique des thermo-altérations . . . 48
1.6.1 Les changements de couleur . . . 48
1.6.2 Écaillage . . . 50
1.6.3 Propriétés des calcaires rupélien et urgonien . . . 52
1.6.4 Cadre théorique . . . 54
1.7 La simulation numérique relative aux feux . . . 56
1.7.1 Quelques références bibliographiques . . . 56
1.7.2 Choix du logiciel de combustion . . . 57
1.8 Structure numérique de FireFOAM . . . 57
1.8.1 Méthode des volumes finis . . . 58
1.8.2 Schémas d'interpolation des termes de surface . . . 59
1.8.3 Schéma en temps . . . 62
1.8.4 Résolution de l'équation de transfert radiatif . . . 63
1.8.5 Résolution du champ de pression et de la vitesse . . . 64
1.8.6 Résolution du système d'équations . . . 66
1.8.7 Organigramme de FireFOAM . . . 71
1.9 Structure numérique de Cast3m . . . 74
1.9.1 Méthode des éléments finis appliquée à la thermique . . . 75
1.9.2 Méthode des éléments finis appliquée à la mécanique . . . 76

1.9.3 Algorithme de résolution . . . 77

2 Développements numériques 79
2.1 Contributions au logiciel OpenFOAM . . . 79
2.1.1 Conditions limites en température aux parois . . . 79
2.1.2 Correction de la température mesurée par un thermocouple . . . 80
2.1.3 Évaluation des dangers d'un feu en milieu confiné . . . 84
2.1.4 Dépôt de suie . . . 89
2.2 Remarque sur le HRR numérique . . . 91
2.3 Considérations empiriques appliquées aux simulations numériques . . . 93
2.3.1 Transfert convectif aux parois . . . 93
2.3.2 Hypothèse de la vitesse exclusivement horizontale . . . 98
2.4 Couplage OpenFOAM-Cast3m . . . 104

3 Reproduction expérimentale des thermo-altérations 109
3.1 Description de l'expérimentation . . . 109
3.1.1 Protocole . . . 109
3.1.2 Instrumentation . . . 112
3.1.3 Résultats expérimentaux . . . 112
3.2 Choix des paramètres numériques . . . 115
3.2.1 Convergence en maillage . . . 115
3.2.2 Convergence en temps . . . 118
3.2.3 Convergence de la résolution du rayonnement . . . 120
3.3 Validation du modèle numérique . . . 122
3.3.1 Circulation des gaz . . . 122
3.3.2 Impacts thermo-mécaniques . . . 132
3.4 Évaluation des dangers . . . 139
3.4.1 Observateur . . . 139
3.4.2 Porteur de fagots . . . 140

4 Application à la grotte Chauvet-Pont d'Arc 143
4.1 Méthodologie de l'étude . . . 143
4.2 Hypothèses de l'étude . . . 145
4.2.1 Hypothèses relatives aux thermo-altérations . . . 145
4.2.2 Hypothèses de modélisation . . . 148
4.3 Modélisation de la géométrie et de la puissance des feux de pin sylvestre . . . 150
4.3.1 Caractéristiques du foyer . . . 150
4.3.2 Modèle des *wood cribs* . . . 150
4.3.3 Adaptation du modèle . . . 152
4.4 Les feux de la Galerie des Mégacéros . . . 156
4.4.1 Quelques considérations préalables . . . 156
4.4.2 Zone 1 . . . 157
4.4.3 Zone 2 . . . 165
4.4.4 Zone 3 . . . 173
4.4.5 Zone 4 . . . 178
4.4.6 Zone 5 . . . 183
4.4.7 Zone 6 . . . 190
4.4.8 Zone 7 . . . 197
4.4.9 Évaluation des dangers au voisinage des feux . . . 202
4.5 Analyse globale des thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros . . . 208

Conclusion 211

Annexes **225**
A Un aperçu de l'art pariétal de la grotte Chauvet-Pont d'Arc 225
B Absorptivités des gaz et des suies 229
C Loi de paroi pour la couche limite thermique 231
D Coefficients du modèle de Beresnev-Chernyak 232
E Scripts Python du couplage OpenFOAM-Cast3m 233
F Résultats expérimentaux des trois feux effectués dans la carrière de Lugasson 235
F.1 Conditions initiales des trois feux 235
F.2 Mesures expérimentales lors des trois feux 236
G Article publié 242

Liste des figures

1.1 Plan de la grotte Chauvet-Pont d'Arc accompagné de la dénomination des salles. 6
1.2 a - Photographie du Secteur des Chevaux (C. Fritz - G. Tosello [1]). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte. 7
1.3 Localisation en violet des surfaces thermiquement altérées (Ferrier *et al.* [2]). 8
1.4 a - Photographie d'un des trois ours peints au fond du Diverticule des Ours (C. Ferrier). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte. 9
1.5 Surfaces altérées par des températures élevées dans le Secteur d'Entrée. La roche est devenue rouge ou grise selon l'emplacement (C. Ferrier [2]). 10
1.6 Zone altérée à l'entrée de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). La surface grise se trouve à environ 1,30 mètre du sol. 11
1.7 Évolution du PCI du pin sylvestre en fonction de l'humidité. 13
1.8 Chemins thermodynamiques réel ① et fictif ② + ③. 15
1.9 Les trois parties dans un panache d'incendie d'après Drysdale [3]. 17
1.10 Profil de température dans le panache thermique issu d'un foyer de 600 kW et de 80 cm de diamètre. 19
1.11 Profils de température et de vitesse dans un jet sous plafond [4]. 20
1.12 Comparaison entre les différentes corrélations des températures maximum du jet sous plafond pour $H_p = 2,5\ m$ et $\dot{Q}_c = 70\ kW$. La corrélation d'Oka (1.3.17) est tracée pour différents angles. 22
1.13 Schématisation de l'extension du jet sous plafond aux parois verticales. 23
1.14 Champ de température dans le sol à la fin du feu. 24
1.15 Représentation schématique d'une couche limite. 25
1.16 Comparaison des approches de résolution de la turbulence. 40
1.17 Divisions de la couche limite. 46
1.18 Comparaison des lois de paroi avec des données expérimentales [5] (Clauser, 1956). . . . 47
1.19 Comparaison des lois de paroi avec la formule de Spalding (1.5.127). 47
1.20 a - Observation des points étudiés avant et après une chauffe de 250^oC pendant 45 minutes dans un four électrique à rayonnement. La consigne est basée sur la température de surface des échantillons. b - Intensité des spectres Raman avant et après la chauffe pour les deux points étudiés. Ces spectres sont comparés avec ceux de la goethite et de l'hématite. Essai effectué par C. Ferrier, A. Queffelec et J.-C. Mindeguia. 49
1.21 Description schématique des étapes d'un écaillage dû à des contraintes thermo-mécaniques [6]. 51
1.22 Profil de la pression interstitielle sur les premiers centimètres de la roche exposée au feu. 51
1.23 Formation d'une couche saturée putative empêchant l'écoulement des vapeurs d'eau vers l'intérieur du massif. Le schéma représente une zone de l'ordre de quelques centimètres et les flèches vertes matérialisent la circulation des vapeurs d'eau. 51
1.24 Courbe de traction conventionnelle représentant la contrainte en fonction de la déformation. σ_e est la limite d'élasticité. 55
1.25 Maillage cartésien en 2 dimensions et notations utilisées. 58
1.26 Interpolations de la valeur de la variable au point e par les schémas linéaire, upwind et LUST. 61
1.27 Schéma d'un maillage quelconque avec représentation des vecteurs utilisés dans le texte. $\mathbf{n_e}$ est un vecteur unitaire. 62

1.28 Schématisation de l'angle solide et notations utilisées. 63
1.29 Schéma de l'algorithme PIMPLE. 67
1.30 Passage d'une grille fine de pas h à une grille grossière de pas $2h$. 71
1.31 Schéma de l'algorithme GAMG 72
1.32 Organigramme de FireFOAM-4.0. 73

2.1 Description schématique de la condition limite. La taille des cellules n'est pas à l'échelle. 80
2.2 Comparaison du profil de température pour différentes discrétisations spatiales. 81
2.3 Comparaison de la température de surface entre les résolutions 1D et 2D de la diffusion thermique lorsque les températures de deux cellules adjacentes sont 300^oC et 330^oC. . . 81
2.4 Évolution de la température d'un thermocouple calculée par le modèle théorique (2.1.16), le modèle implémenté dans OpenFOAM [7] (2.1.17) et la solution analytique du cas test. 84
2.5 Temps d'incapacité de chaque gaz (O_2, CO_2 et CO) calculés respectivement par les équations (2.1.26), (2.1.28) et (2.1.27). 86
2.6 Temps de tolérance et d'incapacité (2.1.30) sous un rayonnement q_r. 86
2.7 Temps de tolérance (2.1.32) et d'incapacité (2.1.31) sous une température T. 87
2.8 Temps de tolérance en air saturé (2.1.33) et non saturé (2.1.32) sous une température T. 88
2.9 Schéma du parcours d'un individu alimentant le foyer. 89
2.10 Liserés noirs sur une paroi de la grotte Chauvet. 90
2.11 Photomicrographie d'un agrégat de particules sphériques (diesel) [8]. 91
2.12 Géométrie du cas test. L'enceinte est un cube d'un mètre de côté et le foyer plat (couleur noire) a une taille variable. 92
2.13 Comparaison entre les HRR numériques pour chaque configuration [9]. La droite horizontale en pointillé noir correspond au HRR théorique. 93
2.14 Comparaison entre les deux corrélations du coefficient de transfert thermique pour $H_p = 2,5\ m$ et $\dot{Q}_c = 70\ kW$. La corrélation d'Oka (2.3.8) est tracée pour différents angles. . . 95
2.15 Le profil de température réel est schématisé par les courbes noires. a) Profil numérique de la température du jet sous plafond pour un maillage raffiné sous la première cellule (en vert). b) Profil numérique de la température du jet sous plafond pour un maillage non raffiné (en bleu). 96
2.16 Le profil de température réel est schématisé par les courbes noires. Les profils numériques de la température du jet sous plafond schématisé (à gauche) et plus réaliste (à droite) sont schématisés par les courbes bleues. 97
2.17 Profil de température typique lors de l'établissement de deux couches de températures distinctes : une couche chaude de température homogène et une couche froide de température presque identique à l'air ambiant. 98
2.18 Position des points de comparaison pour le cas test. La figure de gauche indique la localisation spatiale des arbres de points verticaux et la figure de droite détaille la disposition verticale des points de chaque arbre. Les arbres sont systématiquement placés au centre des galeries. 99
2.19 A - Profil de température simulée le long de l'arbre A. B - Profil de température simulée le long de l'arbre B. C - Profil de température simulée le long de l'arbre C. D - Profil de température simulée le long de l'arbre D. 100
2.20 Comparaison des profils de températures des arbres A, B, C et D pour des mailles de 3 cm et 6 cm. 101
2.21 Représentation schématique du passage du mouvement vertical au mouvement horizontal. L'hypothèse de vitesse exclusivement horizontale est seulement appliquée loin du feu. . . 102
2.22 Comparaison des profils de températures des arbres A, B, C et D entre une résolution classique sans l'hypothèse de vitesse exclusivement horizontale et une résolution personnalisée avec l'hypothèse. 103
2.23 Comparaison des champs de température dans les sections médianes des deux galeries de la carrière à la fin de la simulation (100 s). 103
2.24 Définition de l'intersection du plan de coupe avec la surface de la géométrie de la carrière. Seule la partie délimitée par l'utilisateur est conservée pour la suite. 104

2.25 Construction des points qui formeront le contour de la géométrie 2D utilisée par Cast3m. 105
2.26 Intersection entre le plan de coupe et une maille. 105
2.27 Points résultant de l'intersection du plan de coupe avec la carrière. Les points encadrés en rouge sont des points ajoutés afin de fermer la géométrie. 105
2.28 Contour de la géométrie utilisée par Cast3m lors de l'étude thermo-mécanique. 106
2.29 Méthodologie décrivant le procédé de lissage des angles droits. 106
2.30 a - Contour de la géométrie lissée utilisée par Cast3m lors de l'étude thermo-mécanique. b - Maillage réalisé grâce à GMSH. 106

3.1 a) Entrée de l'ancienne carrière. b) Géométrie 3D de la carrière réalisée par photogrammétrie avec une résolution de 10 cm (P. Mora, Archéotransfert). 110
3.2 À gauche : comparaison entre la taille d'un pin sylvestre (ayant poussé sous des conditions différentes de celles régnant au Paléolithique supérieur) et celle d'un homme (C. Ferrier). En haut à droite : les branches peuvent être brisées manuellement et se cassent à une longueur d'environ 80 cm (C. Ferrier). En bas à droite : fagots issus de la récolte et du calibrage (C. Ferrier). 111
3.3 Structure du foyer juste avant l'allumage composé de quatre fagots positionnés en tipi (environ 18 kg). 111
3.4 Plan de la carrière indiquant l'emplacement du foyer, des arbres de thermocouples, des capteurs de concentration, des cibles pour les suies, des PPS, des capteurs de vitesse et de la caméra. 113
3.5 a) Foyer composé des 4 fagots initiaux 70 s après l'allumage. b) Évacuation des fumées par l'entrée de la carrière 152 s après l'allumage. c) Absence de fumées blanches 500 s après l'allumage. d) Alimentation du foyer par les pompiers 6 min 25 s après l'allumage. e) Combustion 7 min 34 après l'allumage. 114
3.6 Comparaison des mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T1 pour les trois feux. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. . . . 114
3.7 Comparaison des mesures des concentrations de gaz effectuées en C2 pour les trois feux. 115
3.8 Parois et plafond de la carrière après les trois feux successifs. 116
3.9 Fine cicatrice d'écaillage survenu au plafond de la carrière. 116
3.10 Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 4 maillages (3 cm, 6 cm, 12 cm et 24 cm). 117
3.11 Comparaison des températures dans la flamme pour 3 maillages (1,5 cm, 3 cm et 6 cm). 117
3.12 Maillage utilisée pour l'étude de convergence en maillage. 118
3.13 Comparaison des températures et des contraintes en compression à différentes profondeurs pour plusieurs discrétisations. La première colonne correspond aux températures et la seconde aux contraintes. Chaque ligne est associée à une profondeur : 1 mm pour la première, 5 mm pour la deuxième, 1 cm pour la troisième et 3 cm pour la dernière. . . . 119
3.14 Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 4 conditions CFL différentes (0,4, 0,6, 0,8 et 1). 120
3.15 Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 3 discrétisations angulaires différentes (4, 32 et 128). 121
3.16 Comparaison des températures dans la flamme pour 5 fréquences (1, 2, 5, 10 et 100). . . 121
3.17 Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 4 fréquences de résolution (2, 5, 10 et 100). 122
3.18 Maillage du foyer au fond de la seconde galerie. Les brûleurs (en rouge) sont parsemés sur toute la surface du foyer (en marron). 123
3.19 Comparaison entre les HRR simulé et mesuré par la balance en supposant le pouvoir calorifique constant. 124
3.20 Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T1. La localisation des thermocouples est indiquée à droite. 124
3.21 Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T2. La localisation des thermocouples est indiquée à droite. 125

3.22 Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T3. La localisation des thermocouples est indiquée à droite. . . . 126
3.23 Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T4. La localisation des thermocouples est indiquée à droite. . . . 127
3.24 Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T5. La localisation des thermocouples est indiquée à droite. . . . 127
3.25 Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T6. La localisation des thermocouples est indiquée à droite. . . . 128
3.26 Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T7. La localisation des thermocouples est indiquée à droite. . . . 129
3.27 Concentrations simulées et mesurées par les capteurs en C1. . . . 130
3.28 Concentrations simulées et mesurées par les capteurs en C2. . . . 131
3.29 Concentrations des suies simulées et mesurées par les capteurs en S1 et S2. . . . 131
3.30 Vitesses des gaz simulées et mesurées par les deux capteurs positionnés sur l'arbre T7. . 132
3.31 Dénomination de chaque paroi et localisation des points analysés lors de l'étude mécanique. 133
3.32 Comparaison des rubéfactions expérimentale et numérique pour les parois droite et gauche. La couleur rouge correspond à la rubéfaction, le gris foncé au dépôt de suie et le vert à l'écaillage. a - Paroi gauche expérimentale. b - Paroi gauche simulée. c - Paroi droite expérimentale. d - Paroi droite simulée. . . . 134
3.33 Comparaison des rubéfactions expérimentale et numérique pour la paroi du fond et le plafond. La couleur rouge correspond à la rubéfaction, le gris clair à la coloration grise, le gris foncé au dépôt de suie et le vert à l'écaillage. a - Plafond expérimental. b - Plafond simulé. c - Paroi du fond expérimentale. d - Paroi du fond simulée. . . . 135
3.34 Contrainte mécanique σ_{xx} 45 minutes après le début de la combustion. La simulation est effectuée par Cast3m dans le plan xOz (O étant le centre du foyer). . . . 136
3.35 Contrainte mécanique σ_{yy} 45 minutes après le début de la combustion. La simulation est effectuée par Cast3m dans le plan yOz (O étant le centre du foyer). . . . 136
3.36 Évolution temporelle de la contrainte mécanique σ_{xx} dans les parois de la carrière pour plusieurs profondeurs (surface, 1 cm et 3 cm). Les emplacements des points A, B et C sont définis sur la figure 3.31. . . . 137
3.37 Évolution temporelle de la contrainte mécanique σ_{yy} dans les parois de la carrière pour plusieurs profondeurs (surface, 1 cm et 3 cm). Les emplacements des points A', B' et C' sont définis sur la figure 3.31. . . . 137
3.38 Évolution temporelle de la contrainte mécanique σ_{yy} dans les parois de la carrière pour plusieurs profondeurs (surface, 1 cm et 3 cm). Les emplacements des points D', E' et F' sont définis sur la figure 3.31. . . . 138
3.39 FED relative à la toxicité pour un observateur séjournant dans la carrière pendant toute la combustion. . . . 139
3.40 FED relative au rayonnement et à la température pour un observateur séjournant dans la carrière pendant toute la combustion. . . . 140
3.41 FED relative à la toxicité pour un porteur alimentant le foyer 43 minutes après l'allumage. 140
3.42 FED relative au rayonnement et à la température pour un porteur alimentant le foyer 43 minutes après l'allumage. . . . 141

4.1 a - Lasergrammétrie de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de dessus (Ministère de la Culture DRAC Auvergne – Rhônes-Alpes & P. Mora, Archéotransfert). b - Maillage de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de dessus réalisée avec la version 1.1.2 de l'outil cfMesh [10]. c - Lasergrammétrie de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de trois-quarts. d - Maillage de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de trois-quarts. . . . 144
4.2 Dispositif expérimental permettant les chauffes isochrones d'un échantillon calcaire sec déconnecté de toute arrivée d'eau et du massif saturé en eau (C. Ferrier). . . . 145
4.3 État de la paroi et de l'échantillon ayant subi une chauffe à 260^oC (C. Ferrier). a - Après 5 minutes de chauffe. b - Après 10 minutes de chauffe. c - Après 20 minutes de chauffe. d - Après 50 minutes de chauffe. . . . 146

4.4 État de la paroi et de l'échantillon (C. Ferrier). a - Après 50 minutes de chauffe sous une consigne de 250^oC. b - Après 50 minutes de chauffe sous une consigne de 250^oC et 5 minutes sous une consigne de 270^oC. 147
4.5 a - Photographies dans le domaine visible (C. Ferrier). b - Photographies dans le domaine infrarouge (J.-C. Mindeguia). c - Champ de température montrant les surfaces dont la température excède 250^oC (en rouge). 147
4.6 Comparaison des températures simulées avec une capacité thermique prenant en compte le pic théorique et le pic doublé par rapport à la théorie. a - Comparaison à 1 mm de profondeur. b - Comparaison à 5 mm de profondeur. c - Comparaison à 1 cm de profondeur. d - Comparaison à 3 cm de profondeur. 149
4.7 Photographie de la première zone de thermo-altération à l'entrée de la Galerie des Mégacéros, sur la paroi gauche (Panneau du Rhinocéros). 151
4.8 Structure du *wood crib* [11]. 152
4.9 Courbe conventionnelle du HRR selon le modèle des *wood cribs*. 152
4.10 Photographie des foyers constitués de pin sylvestre pour toutes les masses étudiées avant et 5 minutes après l'allumage (J.-C. Mindeguia). 153
4.11 Comparaison expérimentale des HRR pour différentes masses initiales. Les points correspondent aux mesures tandis que les courbes pleines correspondent aux résultats du modèle des *wood cribs* adapté à ce type de foyer. 154
4.12 Comparaison des HRR modélisés et expérimentaux pour le premier feu de la carrière de Lugasson. 155
4.13 Comparaison des HRR modélisés et expérimentaux pour le deuxième feu de la carrière de Lugasson. 155
4.14 Répartition des sept zones thermo-altérées dans la Galerie des Mégacéros (cercles rouges). L'image centrale est un plan de la galerie, extrait du relevé 3D. Le profil longitudinal est présenté dans le coin supérieur gauche de la figure. Le sol de la galerie est jaune tandis que les parois sont noires. 156
4.15 Hauteur calculée des flammes des foyers en tipi de pin sylvestre en fonction de leur masse. 158
4.16 a - Emplacement de la coupole altérée de la zone 1 au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations (D. Lacanette et J.-C. Leblanc). La zone grise correspond à la coloration grise, la zone rose à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. c - Gros plan sur la zone écaillée (C. Ferrier). 159
4.17 a - Volume supposé du foyer de la zone 1. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 1. 160
4.18 a - Relevé des thermo-altérations (D. Lacanette et J.-C. Leblanc). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 1 pour un foyer de 20 kg de bois. 160
4.19 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 1 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 161
4.20 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 1 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 161
4.21 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 1 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 162
4.22 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 1 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 162

4.23 Coupe transversale de la Galerie des Mégacéros correspondant à la FED relative au rayonnement et à la température pour une personne alimentant le foyer 10 minutes après l'allumage, dans le cadre du protocole C. 163

4.24 Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 20 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression du calcaire urgonien à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer. 164

4.25 a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 20 kg de bois dans la zone 1. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). 165

4.26 a - Emplacement de la niche altérée de la zone 2 à l'entrée de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la niche de la zone 2 (F. Salmon). La zone grise correspond à la coloration grise, la zone rose à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. c - Relevé des thermo-altérations de la paroi gauche de la niche de la zone 2 (F. Salmon). La zone rose entourée de blanc est probablement rubéfiée sans que les observations puissent l'attester. 166

4.27 a - Volume supposé du foyer de la zone 2. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 2. 166

4.28 Champs calculé sur une coupe orthogonale à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer 450 s après l'allumage d'un feu de 25 kg de bois. a - Champ de température. b - Champ de vitesse verticale. 167

4.29 a - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la zone 2 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi droite de la zone 2 pour un foyer de 28 kg de bois. c - Relevé des thermo-altérations de la paroi gauche de la zone 2 (F. Salmon). d - Changements de coloration simulés sur la paroi gauche de la zone 2 pour un foyer de 28 kg de bois. 168

4.30 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 2 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 168

4.31 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 2 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 169

4.32 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 2 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 170

4.33 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 2 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 170

4.34 FED relative au rayonnement et à la température pour une personne alimentant le foyer 10 minutes après l'allumage, dans le cadre du protocole C. 171

4.35 Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 25 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 470 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer. . 171

4.36 a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 28 kg de bois dans la zone 2. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). 172

4.37 a - Emplacement de la coupole altérée de la zone 3 au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations de la zone 3 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. 173

4.38 a - Volume supposé du foyer de la zone 3. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations de la zone 3. 174

4.39 a - Relevé des thermo-altérations de la zone 3 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 3 pour un foyer de 20 kg de bois. 174

4.40 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 3 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 175

4.41 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 3 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 175

4.42 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 3 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 176

4.43 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 3 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 176

4.44 Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 20 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{xx} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{xx} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer. . 177

4.45 a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 20 kg de bois dans la zone 3. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). 178

4.46 a - Emplacement de la paroi altérée de la zone 4 par rapport aux trois autres zones au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Détail de la paroi altérée (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). c - Relevé des thermo-altérations de la zone 4 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. 179

4.47 a - Volume supposé du foyer de la zone 4. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 4. 179

4.48 a - Relevé des thermo-altérations de la zone 4 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 4 pour un foyer de 10 kg de bois. 180

4.49 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 4 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 181
4.50 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 4 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 181
4.51 Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 10 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer. . 182
4.52 a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 10 kg de bois dans la zone 4. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). 182
4.53 a - Emplacement de la zone 5 au sein de la Galerie des Mégacéros. b - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la zone 5 (F. Salmon). La zone grise correspond à la coloration grise, la zone rose à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. c - Relevé des thermo-altérations de la paroi gauche de la zone 5 (F. Salmon). 184
4.54 a - Volume supposé du foyer de la zone 5. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 5. Le volume du bloc effondré est repositionné à son emplacement initial (P. Mora, Archéotransfert). 185
4.55 a - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la zone 5 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi droite de la zone 5 pour un foyer de 25 kg de bois. 185
4.56 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 5 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 186
4.57 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 5 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 186
4.58 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 5 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 187
4.59 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 5 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 187
4.60 Coupe transversale de la Galerie des Mégacéros correspondant à la FED relative au rayonnement et à la température pour une personne alimentant le foyer 19 minutes après l'allumage dans le cadre du protocole C. 188
4.61 a - Paroi droite de la zone 5 vue de l'extérieur (photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). b - Présentation des deux coupes (coupe 1 en jaune et coupe 2 en bleu) pour lesquelles une étude thermo-mécanique est effectuée. c - Paroi gauche de la zone 5 vue de l'extérieur (photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). d - Présentation des deux coupes (coupe 3 en rouge et coupe 4 en vert) pour lesquelles une étude thermo-mécanique est effectuée. 189

4.62 Champ de contrainte σ_{yy} 470 secondes après l'allumage d'un feu de 25 kg de bois. Le numéro des coupes correspond à celles présentées sur la figure 4.61. 190
4.63 Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). Les graphes sont associés aux numéros des plans de coupes définis sur la figure 4.61. La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par les lignes en pointillé sur la figure 4.62. 191
4.64 a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 25 kg de bois dans la zone 5. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). La galerie est orientée de la Salle du Fond vers la Salle Hillaire. 191
4.65 a - Emplacement de la paroi altérée de la zone 6 au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations de la zone 6 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction. 192
4.66 a - Volume supposé du foyer de la zone 6. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 6. 193
4.67 Champ de température dans le plan orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer 460 s après l'allumage d'un foyer de 15 kg de bois. 193
4.68 a - Relevé des thermo-altérations de la zone 6 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 6 pour un foyer de 15 kg de bois. 194
4.69 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 6 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 194
4.70 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 6 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 194
4.71 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 6 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 195
4.72 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 6 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 196
4.73 Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 15 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer. . 196
4.74 a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 15 kg de bois dans la zone 6. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). 197
4.75 Relevé des thermo-altérations de la zone 7 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. 198
4.76 a - Volume supposé du foyer de la zone 7. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 7. 199
4.77 a - Détail de la zone écaillée et rubéfiée du pendant rocheux correspondant à la zone 7 (C. Ferrier). b - Rubéfaction simulée pour un foyer de 15 kg de bois. 199

4.78 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 7 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 200
4.79 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 7 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 200
4.80 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 7 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 201
4.81 Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 7 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*. 201
4.82 Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 10 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à la galerie et passant par le centre du foyer. 202
4.83 a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 15 kg de bois dans la zone 7. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). 203
4.84 Maillage raffiné de la grotte Chauvet-Pont d'Arc constitué d'environ 1 million de mailles. La géométrie dans le carré vert correspond au maillage vu de côté. 204
4.85 FED relative à la toxicité pour un observateur ayant demeuré dans la Salle Hillaire pendant toute la combustion d'un foyer de 34 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 2. 205
4.86 Taux de CO_2 dans la Salle Hillaire à la fin de la combustion d'un foyer de 34 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 2. 205
4.87 FED relative à la toxicité pour un observateur ayant demeuré dans la Salle Hillaire pendant toute la combustion d'un foyer de 30 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 5. 206
4.88 Taux de CO_2 dans la Salle Hillaire à la fin de la combustion d'un foyer de 30 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 5. 206
4.89 Comparaison de la répartition du CO_2 au plafond de la Salle Hillaire. La géométrie est vue de dessus. a - Pour un foyer de 34 kg à l'emplacement du feu de la zone 2. b - Pour un foyer de 30 kg à l'emplacement du feu de la zone 5. 207
4.90 Répartition probable des sites de combustion à l'origine des thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros. L'image centrale est une coupe de la galerie (issue de la photogrammétrie réalisée par Archéotransfert) dont le profil est présenté dans le coin supérieur gauche de la figure. Le sol de la galerie est jaune tandis que les parois sont noires. 208
A.1 a - Photographie générale du Panneau de l'Entrée dans la Salle Brunel (Ministère de la Culture). b - Agrandissement sur le signe en gerbe surmonté d'une croix (D. Genty/MCC). c - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte. 225
A.2 a - Photographie de deux têtes de chevaux jaunes accompagnées de signes rouges appartenant au Panneau des Chevaux jaunes dans la Salle Brunel (Ministère de la Culture). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte. 226
A.3 a - Photographie du Panneau de la Panthère dans la Galerie des Panneaux rouges (D. Lacanette). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte. 226

A.4 a - Photographie du Panneau du Grand Cheval gravé dans la Salle Hillaire (Ministère de la Culture). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte. 227
A.5 a - Photographie du tracé digital d'un hibou sur un pendant de la Salle Hillaire (T. Sagoury - Ministère de la Culture). b - Localisation du hibou dans la géométrie de la grotte. 227
A.6 a - Photographie du Grand Panneau de la Salle du Fond (C. Ferrier [12]). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte. 228
B.1 Coefficient d'absorption moyen de Planck du dioxyde de carbone, du monoxyde de carbone et de la vapeur d'eau. 229
E.1 Construction des points qui formeront le contour de la géométrie 2D utilisée par Cast3m. 233
E.2 Coupe entre deux cellules du maillage 3D. 233
E.3 La géométrie réelle correspond à un créneau. a) Cas présentant un succès de la méthode. b) Cas présentant un échec de la méthode. 234
F.2.1 Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T1. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. 236
F.2.2 Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T2. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. 236
F.2.3 Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T3. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. 237
F.2.4 Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T4. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. 237
F.2.5 Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T5. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. 237
F.2.6 Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T6. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. 238
F.2.7 Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T7. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm. 238
F.2.8 Mesures des concentrations de gaz effectuées en C1. 238
F.2.9 Mesures des concentrations de gaz effectuées en C2. 239
F.2.10 Mesures des concentrations en particules effectuées en S1. 239
F.2.11 Mesures des concentrations en particules effectuées en S2. 239
F.2.12 Mesures des vitesses effectuées sur l'arbre T7. La localisation verticale des sondes est indiquée en cm. 240
F.2.13 Perte de masse mesurée sur les 30 premières minutes des feux. 240
F.2.14 Perte de masse mesurée sur les 30 dernières minutes des feux. 241

Liste des tableaux

1.1 Chaleur de combustion des produits de combustion du hêtre européen. 13
1.2 Valeurs des paramètres C et n intervenant dans la corrélation du nombre de Nusselt pour un cylindre en fonction du nombre de Reynolds [13]. 27
1.3 Propriétés thermiques dépendantes de la température du calcaire rupélien. 53
1.4 Propriétés mécaniques dépendantes de la température du calcaire rupélien. 53
1.5 Propriétés thermiques dépendantes de la température du calcaire urgonien. 53
1.6 Propriétés mécaniques dépendantes de la température du calcaire urgonien. 53
1.7 Résumé des interpolations aux surfaces des termes de divergence. 74
1.8 Méthodes numériques employées pour la résolution des équations. 74

2.1 Surface des foyers plats en fonction de la configuration. 92

3.1 Répartition des diamètres des branches dans chaque fagot. 110
3.2 Temps d'alimentation et masses correspondantes des fagots pour le deuxième feu. 112
3.3 Masse moyenne de suie déposée sur les plaques positionnées en S1 et S2. 134

4.1 Désignations des critères des changements de coloration dans la section des résultats. . . 148
4.2 Désignations des modélisations des transferts thermiques dans la section des résultats. . 150
4.3 Variation des paramètres du modèle sans alimentation basé sur celui des *wood cribs* en fonction de la masse initiale du foyer. 154
4.4 Valeurs des paramètres du modèle avec alimentation se basant sur celui des *wood cribs*. 154
4.5 Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 1. 162
4.6 Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 2. 169
4.7 Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 3. 176
4.8 Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 5. 187
4.9 Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 6. 195
4.10 Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 7. 200
4.11 Masse les plus probables pour les foyers de chaque zone. 208
D.1 Coefficients $f_{k,1}$ et $f_{k,2}$ du modèle de Beresnev-Chernyak [14]. 232
D.2 Coefficients $\varphi_{k,1}$ et $\varphi_{k,2}$ du modèle de Beresnev-Chernyak [14]. 232
F.1.1 Temps d'alimentation et masse des fagots correspondante pour le premier feu. 235
F.1.2 Temps d'alimentation et masse des fagots correspondante pour le deuxième feu. 235
F.1.3 Temps d'alimentation et masse des fagots correspondante pour le troisième feu. 235
F.1.4 Températures initiales et humidités relatives moyennes dans la carrière. Teneur en eau moyenne mesurée dans les branches brûlées le jour de l'essai. 235
F.2.1 Dépôt de suie lors des trois feux. Les lettres a, b et c correspondent à une des trois plaques placées pour chaque emplacement. 241

Liste des symboles

$[i]$	Concentration de l'élément i	$mol.m^{-3}$
$\dot{m}$	Débit massique	$kg.s^{-1}$
$\dot{Q}_c$	Puissance convective dégagée par le feu	kW
$\dot{Q}$	Puissance dégagée par le feu	W
$\dot{Q}_{kW}$	Puissance dégagée par le feu	kW
$\boldsymbol{u}$	Déplacement vectoriel	m
$\mathbf{F}$	Forces extérieures	N
$\mathbf{n}$	Normale à la surface considérée	
$\mathbf{q_r}$	Flux radiatif	$W.m^{-2}$
$\mathbf{q_{cond}}$	Flux de conduction thermique	$W.m^{-2}$
$\mathbf{q_{conv}}$	Flux de convection thermique	$W.m^{-2}$
$\mathbf{q_{in}}$	Flux radiatif reçu	$W.m^{-2}$
$\mathbf{T}$	Contrainte locale	Pa
$\mathbf{V}_k$	Vitesse de diffusion de l'espèce k	$m.s^{-1}$
$\mathbf{z}$	Altitude vectorielle	m
$\mathscr{D}_k$	Coefficient de diffusion massique de l'espèce k	$m^2.s^{-1}$
$\mathscr{G}$	Filtre normalisée pour la modélisation LES	
$\mathscr{H}$	Enthalpie massique	$J.kg^{-1}$
$\mathscr{H}_t$	Enthalpie totale massique	$J.kg^{-1}$
$\mathscr{J}_k$	Flux massique de l'espèce k	$kg.m^{-2}.s^{-1}$
$\mathscr{r}$	Constante spécifique des gaz parfaits	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
$\mathscr{U}$	Énergie interne massique	$J.kg^{-1}$
$\mathscr{U}_t$	Énergie interne totale massique	$J.kg^{-1}$
$\overline{\overline{I}}$	Tenseur identité	
$\overline{\overline{S}}$	Tenseur des taux de déformation	s^{-1}
a	Coefficient d'absorption	m^{-1}
c_p	Capacité thermique massique à pression constante	$J.K^{-1}.kg^{-1}$
c_v	Capacité thermique massique à volume constant	$J.K^{-1}.kg^{-1}$
$c_{p,\infty}$	Capacité thermique massique de l'air à température ambiante	$kJ.kg^{-1}.K^{-1}$
D	Diamètre du foyer	m

$d\Omega$	Angle solide	sr
D_c	Longueur de la base carrée des bâtons du *wood crib*	m
D_m	Distance entre le centre du foyer et le mur le plus proche	m
E	Module de Young	Pa
e^{sm}	Énergie cinétique de sous-maille	$m^2.s^{-2}$
e_c^{sm}	Énergie cinétique de sous-maille dans le cas compressible	$m^2.s^{-2}$
E_ϕ	Puissance de combustion dégagée par rayonnement	W
E_h	Taux d'humidité sur brut	
$E_{\phi,v}$	Puissance volumique de combustion dégagée par rayonnement	$W.m^{-3}$
E_a	Énergie d'activation	$J.mol^{-1}$
G	Rayonnement incident	$W.m^{-2}$
H	Enthalpie	J
h	Coefficient de transfert thermique	$W.m^{-2}.K^{-1}$
h_c	Hauteur du *wood crib*	m
H_p	Hauteur sous plafond	m
I	Luminance (ou radiance)	$W.m^{-2}.sr^{-1}$
I_λ	Luminance (ou radiance) spectrale	$W.m^{-2}.sr^{-1}.m^{-1}$
I_b	Luminance d'un corps noir	$W.m^{-2}.sr^{-1}$
J	Déterminant de la matrice Jacobienne	
k	Energie cinétique de turbulence	$m^2.s^{-2}$
k_{cin}	Constante de vitesse (dimensions dépendantes des ordres partiels)	
L	Longueur caractéristique	m
L_h	Hauteur de la flamme	m
M	Masse molaire du mélange	$kg.mol^{-1}$
m	Masse	kg
n_k	Quantité de matière de l'espèce k	
p	Pression	Pa
p_{ref}	Pression de référence au niveau de la mer	Pa
p_{rgh}	Pression sans la contribution hydrostatique	Pa
Q	Quantité de chaleur	J
q_r	Flux radiatif normal à la paroi	$W.m^{-2}$
q_{conv}	Flux de convection thermique normal à la paroi	$W.m^{-2}$
q_{em}	Flux radiatif émis normal à la paroi	$W.m^{-2}$
q_{in}	Flux radiatif reçu normal à la paroi	$W.m^{-2}$
r	Distance radiale par rapport au centre du foyer	m
S	Surface du foyer	m^2
S_ϕ	Source de puissance volumique	$W.m^{-3}$

S_c	Espace entre chaque bâton du *wood crib*	m
S_{comb}	Puissance volumique libérée par la réaction chimique	$W.m^{-3}$
S_{ray}	Puissance volumique radiative	$W.m^{-3}$
T	Température	K
$t_{50\%}$	Temps au bout duquel 50% des individus perdent connaissance ou ressentent une douleur	s
U	Énergie interne	J
u	Vitesse des gaz	$m.s^{-1}$
u^*	Vitesse de frottement	$m.s^{-1}$
u^+	Vitesse normale à la paroi adimensionnelle	
v_{cin}	Vitesse volumique instantanée de réaction	$mol.m^{-3}.s^{-1}$
W	Travail du milieu extérieur sur le système	J
X_k	Fraction molaire de l'espèce k	
y^+	Distance adimensionnelle à la paroi	
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	
z	Hauteur du point considéré dans le panache thermique	m

Lettres grecques

α	Absorptivité	
α_i	Ordre partiel de la réaction par rapport à l'espèce i	
α_T	Coefficient de dilatation thermique linéaire	K^{-1}
α_{cin}	Facteur de conversion	
β_T	Coefficient de dilatation thermique volumétrique	K^{-1}
χ	Efficacité de combustion	
χ_{conv}	Fraction d'énergie libérée par convection	
χ_{rad}	Fraction d'énergie libérée par rayonnement	
$\Delta\mathscr{H}_c$	Enthalpie massique de combustion	$J.kg^{-1}$
$\Delta H^0_{f,i}$	Enthalpie de formation de l'espèce i	J
ΔT_0	Variation de température dans l'axe du foyer par rapport à l'air ambiant	K
δ	Symbole de Kronecker	
$\Delta_r H^0$	Enthalpie de réaction standard	J
$\dot{\omega}_k$	Taux de production de l'espèce k	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
ϵ	Taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente	$m^2.s^{-3}$
κ	Diffusivité thermique	$m^2.s^{-1}$
κ_{sm}	Diffusivité thermique de sous-maille	$m^2.s^{-1}$
λ	Conductivité thermique	$W.m^{-1}.K^{-1}$
μ	Viscosité dynamique	$Pa.s$

μ_t	Viscosité dynamique turbulente	$Pa.s$
μ_{eff}	Viscosité dynamique effective ($\mu_{eff} = \mu + \mu_{sm}$)	$Pa.s$
μ_{sm}	Viscosité dynamique de sous-maille	$Pa.s$
ν	Viscosité cinématique	$m^2.s^{-1}$
ν_i	Coefficient stœchiométrique associé à l'élément i	
ν_p	Coefficient de Poisson	
ν_{sm}	Viscosité cinématique de sous-maille	$m^2.s^{-1}$
$\overline{\Delta}$	Épaisseur du filtre LES	m
$\overline{\overline{\sigma}}$	Tenseur des contraintes	Pa
$\overline{\overline{\tau^R}}$	Tenseur de Reynolds	Pa
$\overline{\overline{\tau_c^{sm}}}$	Tenseur de sous-maille dans le cas compressible	Pa
$\overline{\overline{\tau^{sm}}}$	Tenseur de sous-maille	$m^2.s^{-2}$
$\overline{\overline{\tau}}$	Tenseur des contraintes visqueuses	Pa
$\overline{\overline{\varepsilon}}$	Tenseur des déformations linéarisées	
ψ	Angle d'inclinaison du plafond	rad
ψ	Compressibilité	$m^{-2}.s^2$
ρ	Masse volumique	$kg.m^{-3}$
τ	Contrainte de cisaillement	Pa
ε	Émissivité	

Nombres sans dimension

Bi	Nombre de Biot
Fr	Nombre de Froude
Gr	Nombre de Grashof
Kn	Nombre de Knudsen
Le_k	Nombre de Lewis de l'espèce k
Nu	Nombre de Nusselt
Pr	Nombre de Prandtl
Ra	Nombre de Rayleigh
Re	Nombre de Reynolds
Ri	Nombre de Richardson
Sc_k	Nombre de Schmidt

Constantes physiques

$\mathscr{K}$	Constante de von Kàrmàn	$0,41$
σ	Constante de Stephan-Boltzmann	$\sim 5,67.10^{-7}\ W.m^{-2}.K^{-4}$

c	Vitesse de la lumière dans le vide	$\sim 3.10^8\ m.s^{-1}$
g	Accélération de la pesanteur	$\sim 9,81\ m.s^{-2}$
h_p	Constante de Planck	$\sim 6,626.10^{-34}\ J.s$
k_B	Constante de Boltzmann	$\sim 1,38.10^{-23}\ J.K^{-1}$
R	Constante universelle des gaz parfaits	$\sim 8,314\ J.mol^{-1}.K^{-1}$

Indices

∞	Air ambiant
λ	Caractère spectral de la variable (dépendant de la longueur d'onde)
g	Gaz hors de la couche limite
TC	Thermocouple
w	Paroi

Exposants

abs	Absorbée
'	Caractère directionnel (dépendant de l'orientation)

Acronymes

CFAST	Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport
CFD	Computational Fluid Dynamics (mécanique des fluides numériques)
DNS	Direct Numerical Simulation (simulation numérique directe)
FDS	Fire Dynamics Simulator
FED	Fractional Effective Dose (dose efficace fractionnaire)
HRR	Heat Release Rate (puissance dégagée par la combustion)
LES	Large Eddy Simulation (simulation des grandes structures de la turbulence)
OpenFOAM	Open Field Operation And Manipulation
PCI	Pouvoir Calorifique Inférieur
PPS	Pegasor Particle Sensor (capteur de suie Pegasor)
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes (équation de Reynolds)

Introduction

Contexte archéologique

La maîtrise du feu, qui date de 300 000 - 400 000 ans en Europe, fut une avancée majeure pour la lignée humaine. D'anciennes traces d'utilisation du feu ont été découvertes sur différents sites datant du Pléistocène moyen, notamment sur les sites de Beeches Pit en Angleterre [15], de Schöningen en Allemagne [16], de Terra Amata à Nice où un foyer a été daté de 380 000±80 000 ans [17]. Des combustions localisées ont aussi été rapportées pour le site de Menez-Dregan, une ancienne grotte marine du domaine sud-armoricain [18], [19]. Les fonctions attribuées aux foyers domestiques sont relatives à la vie quotidienne. Ainsi, la cuisson des aliments, la protection contre des animaux hostiles ou l'éclairage sont l'apanage du feu durant le Paléolithique [20].

Le feu a permis la fréquentation de milieux souterrains sombres qui restaient inaccessibles auparavant. La grotte de Bruniquel en Tarn-et-Garonne, datée de 176 500 ± 2000 ans, renferme plusieurs structures circulaires réalisées par l'Homme de Néandertal à 300 mètres de l'entrée de la cavité. Ces structures sont composées de plusieurs centaines de stalagmites brisées. Ces aménagements, qui constituent la plus ancienne preuve de la fréquentation humaine dans une grotte profonde, sont aussi accompagnés de points de chauffe, dont l'un correspond à un foyer [21].

L'art préhistorique prend son essor durant le Paléolithique supérieur, notamment avec l'art pariétal. Plusieurs centaines de grotte ornées ont ainsi été découvertes, majoritairement en France et en Espagne, l'exemple le plus fameux étant la grotte de Lascaux, découverte en 1940.

Des stigmates de combustions passées ont ainsi été découverts dans ces cavités, pour des périodes couvrant l'Aurignacien, le Gravettien, le Solutréen et le Magdalénien. Ces feux sont interprétés comme des foyers domestiques, des structures destinées à l'éclairage, à l'allumage de torches, au balisage du cheminement ou encore à la production de colorant [22]. En France, la grotte d'Aldène dans l'Hérault contient par exemple quelques gravures de 30 000 ans BP [23]. De même, le réseau karstique d'Arcy-sur-Cure [24] contient les uniques figurations pariétales de la Bourgogne. Leurs datations situent leurs créations durant le gravettien aux environs de 28 000 ans BP. La grotte Cosquer [25] dans le massif des calanques, dont une partie est immergée, renferme aussi des traces de petits foyers en plus de dessins pariétaux du gravettien (entre environ 31 000 et 22 000 ans BP) et du solutréen (entre environ 22 000 et 17 000 ans BP). La caverne du Tuc d'Audoubert dans le département de l'Ariège contient des cicatrices de feux datant du Magdalénien (14 000 ans BP) [26].

Dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc, découverte en 1994, des peintures pour certaines antérieures à 32 000 ans BP coexistent avec des vestiges d'aires de combustion se trouvant à divers endroits de la grotte. De plus, des impacts thermiques sont observables sur certains plafonds et parois jusqu'à 4 mètres de hauteur. Il s'agit de colorations rouges et grises accompagnées d'écaillages et de dépôts de suie qui trahissent une chauffe conséquente de ces surfaces calcaires. Ces observations sont pour l'heure uniques puisqu'aucune autre grotte découverte n'a livré d'indice de tels effets thermiques. Les cavités évoquées précédemment ont abrité des foyers d'une intensité vraisemblablement inférieure à celles des combustions effectuées dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Si les sols peuvent avoir subi des altérations importantes, ni les parois, ni les voûtes n'ont été altérées par le feu comme à Chauvet. Ainsi, les fonctions domestiques des foyers suggérées pour les autres grottes ornées pourraient ne pas s'appliquer à cette dernière.

L'évaluation de l'intensité des combustions est une condition *sine qua non* pour comprendre les raisons de la réalisation de tels foyers.

Objectifs

Dans ce cadre, le programme CarMoThaP [27] (Caractérisation et Modélisation des Thermo-altérations et des résidus de combustion sur les Parois), porté par C. Ferrier et financé par la région Nouvelle-Aquitaine, débuta en 2016 avec l'ambition d'étudier les feux paléolithiques dans la partie profonde des grottes (l'endokarst). À partir de la reproduction expérimentale des feux et des foyers en domaine confiné, qui se base sur les données archéologiques, le programme a plusieurs objectifs. Le premier consiste à construire un référentiel des faciès thermiques permettant leur reconnaissance à partir de signatures minéralogiques et structurales, à différentes échelles. Il sera établi pour deux types de matériaux : le calcaire et les spéléothèmes. Le deuxième objectif est de constituer une base de données pour l'identification des combustibles (bois et os) à partir de l'analyse des résidus de combustion conservés sur les parois, notamment les suies. Le dernier objectif est la mise en œuvre d'un modèle numérique de simulation des feux avec couplage thermo-mécanique afin de tester différents scénarios portant par exemple sur la quantité de combustible et la possibilité d'entretien du foyer compte tenu des températures et du dégagement des fumées.

Ce projet concerne trois sites archéologiques. Le premier est la grotte de Bruniquel (Tarn-et-Garonne) qui renferme des marques de chauffes associées à une structure circulaire formée de spéléothèmes datée vers $-176\ 500 \pm 2000$ ans [21]. La deuxième cavité est la grotte d'Enlène (Ariège) qui a dû abriter une trentaine de combustions. Elle correspond à un habitat profond du Magdalénien. La grotte Chauvet-Pont d'Arc constitue la troisième grotte. La présente thèse, financée par la région Nouvelle-Aquitaine, s'intéresse uniquement à cette dernière. Plus précisément, la thèse concerne les marques de chauffes observables dans la Galerie des Mégacéros. Ce point est détaillé dans la section se concentrant sur la grotte (§1.1).

La grotte Chauvet-Pont d'Arc est un site préhistorique majeur qui nous donne des informations précieuses sur les sociétés préhistoriques. Il est bien évident que la cavité doit être conservée à l'identique. Afin d'estimer l'intensité des feux réalisés dans la grotte, il est néanmoins nécessaire d'expérimenter des feux dans la géométrie de la Galerie des Mégacéros. Deux possibilités s'ouvrent alors. La première consiste à recréer la géométrie de la galerie dans la même roche dans un lieu dénué d'intérêt archéologique. Ce travail serait extrêmement coûteux puisqu'aucune grotte ne possède une configuration identique. La seconde consiste à s'appuyer sur la simulation numérique. Cette approche permet la réalisation d'autant de scénarios de feux que désirés dans la géométrie de la cavité sans coût superflu. Elle est basée sur la résolution mathématique d'équations décrivant les phénomènes physico-chimiques associés à la dynamique du feu. Cette résolution est effectuée sur chaque cellule issue d'un découpage préalable de la géométrie en petites mailles. Les paramètres sont considérés constants dans chaque cellule. Ces petits volumes constituent donc l'unité spatiale en deçà de laquelle aucune information n'est fournie par la simulation. Ils correspondent à la précision de la simulation. Plus ces volumes sont petits, plus la résolution est précise. Mais dans ce cas, le nombre de résolution des équations est élevé et le temps de calcul devient très long. Même si les ordinateurs sont de plus en plus puissants, la précision de la simulation numérique est souvent limitée par leur capacité. Ainsi, la simulation numérique est soumise à un dilemme entre précision et temps de calcul.

La modélisation numérique des feux et de ses impacts repose sur un couplage entre deux logiciels. Le code OpenFOAM [28] dédié à la simulation dans le domaine de la mécanique des fluides est employé pour la simulation de la combustion. Plus précisément, le module FireFOAM [29], inclus dans OpenFOAM, résoudra les équations décrivant l'environnement de la cavité pendant un feu. Cast3m [30], un logiciel thermo-mécanique, permet quant à lui de simuler les impacts thermiques à la surface de la roche. Ce couplage est détaillé au chapitre 2 en même temps que les implémentations au code OpenFOAM qui furent nécessaires pour mener ces travaux.

La complexité des phénomènes en jeu lors d'une combustion exige cependant une grande prudence. La simulation numérique seule peut parfois être insuffisante pour assurer une précision convenable. À cet effet, des expérimentations ont été effectuées dans le cadre du projet CarMoThaP. Dans le cadre de ce programme, la présente thèse s'appuie sur des expérimentations menées dans une ancienne carrière dénuée d'intérêt archéologique dans la localité de Lugasson (Gironde). Cette carrière a des dimensions qui rappellent celles de la Galerie des Mégacéros. Les expérimentations qui s'y sont déroulées seront décrites au chapitre 3.

Structure du manuscrit

Le premier chapitre constitue l'état de l'art des disciplines abordées dans ce mémoire. Une description succincte de la grotte Chauvet-Pont d'Arc au travers de son environnement, d'un exemple de son art pariétal et de la localisation des marques thermiques est proposée. Puis, la combustion de bois, la dynamique du feu, les transferts thermiques, la mécanique des fluides, la thermo-mécanique et la simulation numérique sont présentés. Les équations mathématiques des différentes théories sont indiquées dans ce chapitre. Une description numérique des logiciels employés, et particulièrement d'OpenFOAM, est proposée.

Le deuxième chapitre traite d'ajouts et de modifications numériques, concernant principalement OpenFOAM. Les modèles de dépôt de suie et d'évaluation des dangers dus à la toxicité et aux hautes températures sont notamment détaillés. Des difficultés intrinsèques aux simulations réalisées par le logiciel OpenFOAM sont précisées et leur solution évoquée. La condition limite du débit calorifique, le transfert thermique aux parois ainsi que la mise en place de couches chaude et froide distinctes sont discutés. Le couplage entre Cast3m et OpenFOAM est aussi décrit dans ce chapitre.

Le troisième chapitre s'intéresse à la reproduction expérimentale de thermo-altérations similaires à celles observables dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Les expérimentations menées dans l'ancienne carrière de Lugasson sont d'abord décrites. Puis la modélisation numérique mis au point durant cette thèse est confrontée aux données expérimentales. Les températures, les concentrations et les vitesses des gaz forment en particulier les variables de comparaison. Les impacts thermo-mécaniques affectant les parois de la carrière sont aussi comparés avec la simulation. Ces travaux sont en partie synthétisés dans un article [9] présenté en annexe G.

Le dernier chapitre présente l'application du modèle aux thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros. Une première partie détaille la construction d'un modèle empirique permettant la prédiction du débit calorifique d'un foyer constitué de branches de pin sylvestre. Chaque zone thermo-altérée de la galerie est ensuite étudiée en détail et les scénarios les plus probables sont individuellement fournis. Les dangers de ces combustions dans un tel milieu sont estimés et une analyse globale des résultats est proposée.

Chapitre 1

État de l'art

La grotte Chauvet-Pont d'Arc, hormis un art rupestre exceptionnel, renferme des marques thermiques qui résultent nécessairement de combustions. La combustion de bois concentre une multitude de réactions chimiques isochrones qui engendrent généralement la formation d'une flamme visible. Le dégagement d'énergie issu des réactions chimiques exothermiques chauffe les gaz environnants ainsi que les produits de la réaction. Étant moins denses, ils s'élèvent par convection tandis que l'air frais, au sol, alimente le foyer en oxygène. La flamme et les gaz chauds sont alors régis par la mécanique des fluides. De plus, la vitesse des gaz est souvent conséquente à cause du dégagement d'énergie. Leurs mouvements deviennent donc rapidement chaotiques et le régime d'écoulement évolue vers la turbulence. La flamme visible résulte quant à elle du rayonnement des suies en partie produit dans le domaine perceptible par l'œil humain. La présence de suies trahit le caractère incomplet de la combustion ; il n'y a pas assez d'oxygène par rapport à la quantité de combustible. Enfin, une partie de l'énergie dégagée est diffusée dans le sol au contact de la flamme.

Les thermo-altérations observables sur les parois de la grotte Chauvet-Pont d'Arc proviennent de la diffusion thermique dans la roche. Les hautes températures induisent ensuite des phénomènes chimiques, mécaniques et hydriques à la surface de la roche.

L'ensemble de ces phénomènes est décrit numériquement à travers deux logiciels : OpenFOAM [28] et Cast3m [30].

L'objectif de cette partie est d'exposer l'état des connaissances actuelles relatives à ces différents aspects ainsi que les théories mathématiques permettant la description des phénomènes physiques rencontrés.

1.1 Présentation de la grotte Chauvet-Pont d'Arc

La grotte Chauvet-Pont d'Arc tire son nom de son inventeur Jean-Marie Chauvet, qui était accompagné d'Eliette Brunel et Christian Hillaire, mais aussi de l'arche naturelle appelée Pont d'Arc, fruit d'une lente érosion de l'Ardèche, qui se trouve à proximité. Ce pont naturel, qui enjambe la rivière, est d'ailleurs considéré aujourd'hui comme l'entrée des gorges de l'Ardèche. Dans l'état actuel des connaissances, il semble que les Aurignaciens aient observé une morphologie proche de celle d'aujourd'hui. La grotte se situe dans les corniches de calcaire urgonien qui délimitent le cirque d'Estre, à quelques dizaines de mètres au-dessus du lit actuel de l'Ardèche. Outre la grotte Chauvet-Pont d'Arc, une vingtaine de grottes ornées ont été découvertes aux abords des gorges de l'Ardèche. Les fréquentations couvrent une large période s'étendant de l'Aurignacien au Magdalénien. Le climat était rude et froid comme l'ont montré les analyses palynologiques (des pollens fossiles) réalisées sur des séquences régionales contemporaines [31]. La rigueur du climat était propice à certains arbres comme le genévrier, le bouleau et le pin sylvestre qui devaient se situer à proximité de la grotte [32].

La cavité, dont la géométrie est présentée sur la figure 1.1, s'étend sur environ 230 mètres de l'entrée jusqu'à la Salle du Fond. Des éboulis successifs et l'écroulement polyphasé de la corniche surmontant le porche originel ont progressivement scellé l'entrée de la grotte. Les deux derniers épisodes, datés par le ^{36}Cl de $23,5 \pm 1,2$ et $21,5 \pm 1$ ka, ont coupé la grotte du monde extérieur, interdisant la pénétration

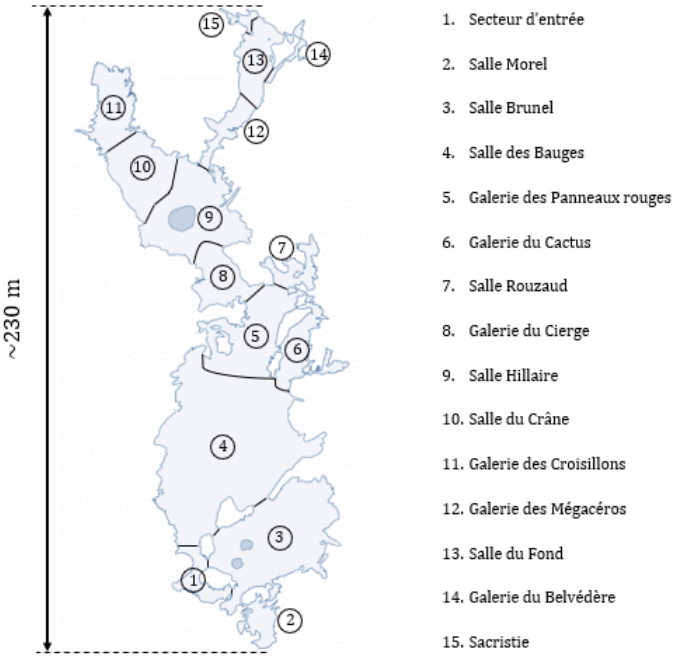

Figure 1.1 – Plan de la grotte Chauvet-Pont d'Arc accompagné de la dénomination des salles.

des hommes et des grands animaux [33]. Ces événements sont à l'origine de l'excellente conservation des vestiges archéologiques [34].

Les datations au carbone 14 ont été menées sur les représentations pariétales, les mouchages de torche et les charbons présents sur les sols. Rapidement, il a été démontré que la grotte a été fréquentée à deux périodes distinctes, durant l'Aurignacien et le Gravettien [32]. Sur la base de nombreux échantillons issus de différents secteurs de la grotte (Salle des Bauges, Galerie du Cierge, Salle Hillaire, Salle du Crâne, Galerie des Croisillons, Galerie des Mégacéros et Salle du Fond) et d'un programme d'intercomparaison, ces deux périodes ont pu être datées de 33 à 29 ka BP pour la première et de 27 à 24,5 ka BP pour la seconde [35], [36]. Ces premières datations ne tenaient pas compte de la variation du taux de production de carbone 14 au cours du temps. La publication de la courbe IntCal09 [37] a permis la calibration des dates et leur modélisation par une approche bayésienne. La correction conduit à une première période s'étendant de 37,0-36,2 à 34,4-33,5 ka cal BP et à une seconde période comprise entre 31,4-30,7 à 29,7-27,9 ka cal BP [36], [38]. Par ailleurs, de nombreux os jonchant le sol de la cavité ont aussi été analysés. Appartenant majoritairement à des ours des cavernes (Ursus spelaeus), leurs âges ont permis de démontrer la présence de ces animaux avant, pendant et après les fréquentations humaines [39].

1.1.1 Un exemple de l'art pariétal de la grotte Chauvet-Pont d'Arc

Les centaines de figurations ne peuvent pas toutes être présentées dans ce mémoire qui traite uniquement des combustions. Pour cela, nous renvoyons au livre de Jean Clottes [32] et au site internet du Ministère de la Culture [40]. Afin de donner un aperçu de la qualité de l'art pariétal à Chauvet, des photographies de certaines œuvres sont tout de même proposées dans l'annexe A. Ces choix sont subjectifs et non exhaustifs. Ils permettront au lecteur néophyte l'accès rapide à une partie de l'art de la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Dans ce paragraphe, nous proposons la description du Secteur des Chevaux, puisque celui-ci a fait l'objet d'études approfondies [1].

Il comprend plusieurs panneaux successifs sur une quinzaine de mètres de paroi (Fig. 1.2) : le Panneau des Chevaux, l'Alcôve des Lions, le Panneau des Rennes et l'Alcôve du Rhinocéros. Ces dessins se situent à l'intersection entre la Galerie des Mégacéros à droite et la Salle du Crâne à gauche (Fig. 1.1). De nombreux animaux y sont représentés : cheval, rhinocéros, lion, aurochs (espèce de bovidé disparue

il y a quelques siècles), renne, cerf, bison et bouquetin. Au total, 52 figurations ont été dénombrées dont 48 réalisées au charbon de bois [1]. Ces panneaux regroupent environ 20% des figures noires de l'ensemble de la grotte.

Le Panneau des Chevaux regroupe une vingtaine d'animaux, en majorité noirs, hormis un mammouth et un rhinocéros gravés à plus de 2,50 m de haut. Ces deux figurations sont les restes d'anciens tracés effacés par raclage de la surface afin de préparer la paroi aux dessins au fusain. Se détachent du panneau un groupe de quatre chevaux ainsi qu'un groupe d'aurochs. À 60 cm du sol, une représentation unique parmi les œuvres pariétales préhistoriques met en scène deux rhinocéros qui semblent s'affronter même si cette interprétation n'est pas certaine. L'Alcôve des Lions correspond à un renfoncement étroit de 2 mètres de profond capable de n'accueillir qu'une personne à la fois. Cette niche reçoit 17 figurations dominées par les chevaux et les lions. Le Panneau des Rennes est quant à lui constitué par 13 animaux correspondant à des cerfs, un bison, un auroch et une tête de cheval entre deux rennes dos à dos. Enfin, juste avant la Galerie des Mégacéros, l'Alcôve du Rhinocéros accueille un unique rhinocéros noir qui semble être en mouvement.

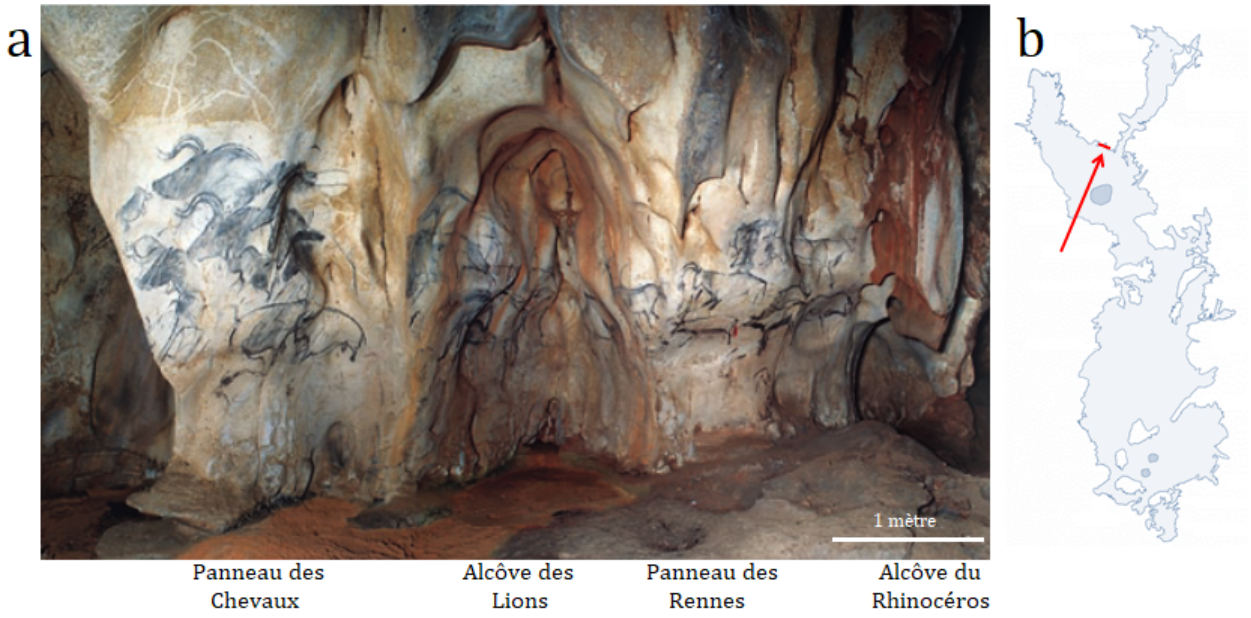

Figure 1.2 – a - Photographie du Secteur des Chevaux (C. Fritz - G. Tosello [1]). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte.

L'exécution des figurations du Panneau des Chevaux a été analysée [32], [1]. Le pigment noir est composé de charbon de bois. Après application, il est étalé par pression des doigts de l'artiste. Ce procédé génère un mélange du charbon et de l'argile présente en surface du calcaire. Selon la quantité de colorant, le dessin présentera différentes nuances de couleur.

La réalisation des chevaux a demandé plusieurs étapes d'après Tosello et Fritz [1]. Tout d'abord, la surface est préparée et la silhouette de l'animal est tracée au doigt ou par raclage. Puis, le tracé est effectué au pigment noir et le poitrail de l'animal est légèrement rempli. Les particules de fusain de la tête de l'animal sont ensuite étalées à l'estompe afin d'uniformiser la couleur. Enfin, le contour de la tête est retouché à l'aide de gravure et de traits noirs afin de préciser ses caractéristiques.

Ce procédé est utilisé pour une grande partie des représentations même si des nuances peuvent exister. Par exemple, dans l'Alcôve des Lions, l'utilisation de la gravure est moins fréquente.

1.1.2 Les marques de chauffe

L'existence de foyers paléolithiques fut mentionnée dès la découverte de la grotte Chauvet [41]. Les marques thermiques sur les parois sont ensuite évoquées par J.-M. Geneste [42]. Depuis, des études

ont été menées pour rendre compte de la localisation et de la chronologie des chauffes [43], [44], [2]. La figure 1.3 indique les zones thermiquement altérées en reprenant le plan proposé par Ferrier *et al.* [2].

Cette partie présente succinctement les localisations des impacts thermiques dans la cavité et détaille la zone d'étude de ce mémoire. Les thermo-altérations se caractérisent principalement par :

- des changements de couleur de la roche. Des températures élevées déclenchent des réactions chimiques qui rendent macroscopiquement la roche rouge (rubéfaction due à la présence d'oxydes de fer) ou grise selon l'intensité de la chauffe.

- des écaillages superficiels dus aux fortes contraintes thermo-mécaniques et à des processus thermo-hydriques. Les écailles correspondent à de fines plaques (quelques millimètres d'épaisseur au maximum) se détachant de la paroi ou de la voûte. Ces processus sont détaillés dans la partie 1.6.

- des dépôts de suie associés à ces altérations révèlent l'exécution passée de combustions de bois. Par ailleurs, l'analyse des charbons présents sur les sols a montré que les paléolithiques ont brûlé du pin sylvestre [31], un bois qui devait se trouver dans les environs de la grotte (voir *supra*).

Figure 1.3 – Localisation en violet des surfaces thermiquement altérées (Ferrier *et al.* [2]).

Les secteurs où les altérations thermiques sont les plus étendues correspondent au Diverticule des Ours, au Secteur d'Entrée, à la partie sud de la Salle des Bauges et à la Galerie des Mégacéros.

Dans la Salle Brunel, au sein du Diverticule des Ours, des dessins ont été effectués avec de l'ocre rouge, un pigment très utilisé dans les grottes ornées. Elles représentent trois ours des cavernes de profil (Fig. 1.4). Les artistes ont joué avec la structure du support afin de poursuivre le contour

Figure 1.4 – a - Photographie d'un des trois ours peints au fond du Diverticule des Ours (C. Ferrier). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte.

des animaux. Les colorations grise et rouge de la roche à droite de la photo correspondent à des altérations thermiques. Un ou plusieurs feux ont donc été réalisés dans une rotonde d'environ 2,80 mètres de largeur. Le tracé a visiblement été effectué après la chauffe puisqu'il se superpose à une cicatrice d'écaille thermique [2]. La surface altérée est néanmoins relativement petite en comparaison de celles visibles vers l'entrée paléolithique. Le Secteur d'Entrée et le sud de la Salle des Bauges sont en effet les zones les plus affectées par les feux. Les parois et le plafond du Secteur d'Entrée furent nécessairement altérés par des feux d'une très grande intensité. La figure 1.5 révèle une roche parfois rouge et majoritairement devenue grise. Cette coloration requiert une température surfacique de roche de 350^oC pendant au moins 10 minutes [44] (§1.6). Sachant que le niveau du sol paléolithique se trouve à cet endroit une vingtaine de centimètres en-dessous du sol actuel, l'importance de la surface grise qui se prolonge jusqu'à des plafonds situés à 2 m de hauteur interroge sur l'intensité des feux. Les datations des charbons correspondant probablement aux foyers indiquent que les feux ont été réalisés pendant la fréquentation aurignacienne de la cavité [2].

Le sud de la Salle des Bauges est aussi fortement altéré. La voûte de la salle a été modifiée jusqu'à une hauteur maximale de 4 m au-dessus du sol. Environ 25 m^2 de plafond sont affectés par les thermo-altérations [2], notamment dans les coupoles où se développe une coloration grise. La position de ce secteur, proche de l'entrée paléolithique, a facilité l'apport du combustible nécessaire à la réalisation de feux intenses. Des impacts thermiques ont été relevés plus profondément dans la cavité (Fig. 1.3) comme par exemple dans les galeries du Cactus, du Cierge et des Croisillons. Toutefois, l'étendue des changements de coloration est très inférieure à celle de l'entrée de la grotte. Dans chacune des galeries, moins d'un mètre carré cumulé a été relevé. Seule la Galerie des Croisillons renferme quelques surfaces grises, les autres ne montrant que des traces de rubéfaction.

Des traces de feux plus conséquentes se trouvent dans la Galerie des Mégacéros. Ce conduit de 30 mètres de long possède une largeur variable. Dans la première moitié adjacente à la Salle Hillaire, il mesure de 2 à 3 mètres de large. Vers la Salle du Fond, il s'élargit jusqu'à 6 m. La hauteur de la voûte reste proche de 2 m au début de la galerie mais peut être ponctuellement plus élevée de par la présence de coupoles. Les parois sont assez peu ornées par rapport à certaines zones denses en dessins comme le passage de la Salle Hillaire vers la Salle du Crâne ou la Salle du Fond. Il existe cependant des dessins au fusain, surtout localisés vers la fin de la galerie juste avant l'entrée dans la Salle du Fond.

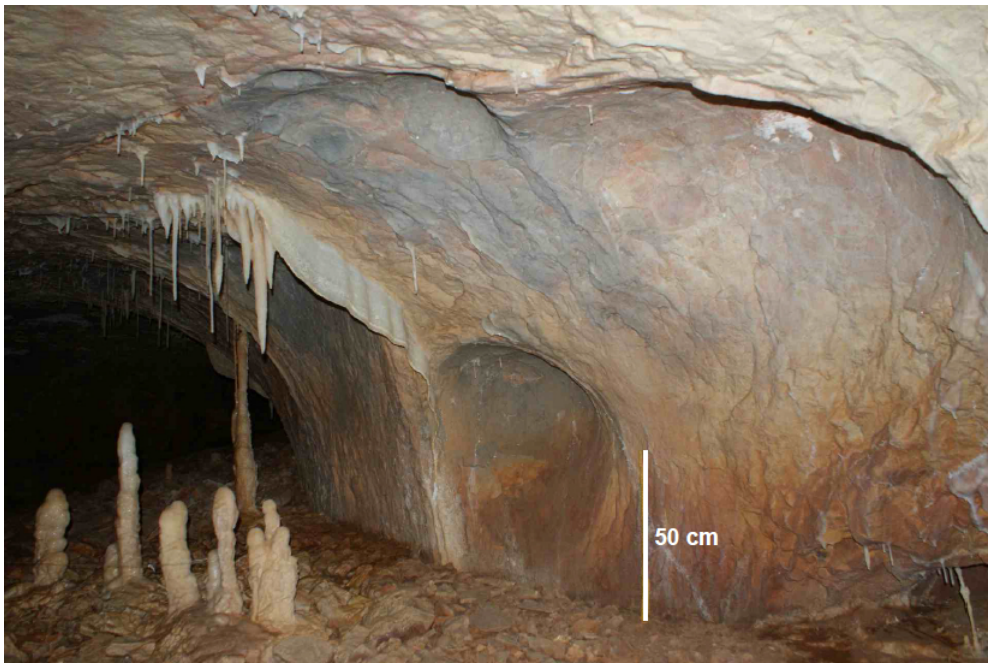

Figure 1.5 – Surfaces altérées par des températures élevées dans le Secteur d'Entrée. La roche est devenue rouge ou grise selon l'emplacement (C. Ferrier [2]).

Après le Secteur d'Entrée et le sud de la Salle des Bauges, la Galerie des Mégacéros correspond au secteur de la grotte renfermant le plus d'impacts thermiques. Les thermo-altérations sont localisées et correspondent à plusieurs feux distincts. Cependant, l'absence de vestiges sur les sols empêche leur localisation exacte. À l'image d'ossements d'ours et de spéléothèmes [42], les Aurignaciens ont peut-être concentré les charbons dans d'autres lieux afin de les utiliser pour la réalisation des œuvres pariétales [42]. Le passage des ours dans la galerie a aussi pu favoriser la dispersion des charbons sur le sol [2]. Les observations *in situ* ont toutefois permis d'estimer à au moins sept le nombre de foyers distincts. Les impacts thermiques correspondants sont individuellement détaillés en même temps que les résultats de ce mémoire au chapitre 4. Néanmoins, un exemple est proposé sur la figure 1.6 qui montre la première zone altérée, à l'entrée de la Galerie des Mégacéros.

Un échantillon de calcaire rubéfié de la Galerie des Mégacéros a pu être daté par thermoluminescence. Cette méthode de datation est basée sur le principe suivant : la radioactivité ambiante au sein de la grotte émet de l'énergie qui s'accumule au sein du calcaire. Lors d'une chauffe importante, cette énergie est libérée par rayonnement. Une remise à zéro de l'énergie accumulée est ainsi effectuée. Entre la chauffe et aujourd'hui, l'énergie s'est à nouveau accumulée et son niveau permet une datation. Un thermoclaste de la Galerie des Mégacéros a ainsi pu être daté de $36\ 900 \pm 2300$ ans [45]. Ce résultat est en accord avec les datations au carbone 14 des charbons présents sur le sol de la même galerie.

Par rapport aux surfaces altérées thermiquement du Secteur d'Entrée et de la Salle des Bauges, celles de la Galerie des Mégacéros sont moindres. Néanmoins, une telle densification de feux dans une galerie étroite située entre deux vastes salles pose question. De plus, leur emplacement, au fond de la cavité, a forcément nécessité le transport de branches sur environ 200 m avec pour seul éclairage des torches ou des lampes à graisse. Ces particularités interrogent quant aux rôles attribués à ces feux. Les fonctions habituelles d'éclairage, de production de charbon ou de ravivage de flamme pourraient être attribuées aux feux des galeries du Cierge, du Cactus et des Croisillons puisque ceux-ci sont relativement modestes. Mais les feux de la Galerie des Mégacéros ne semblent pas vérifier les conditions permettant de remplir une de ces fonctions. Ainsi, d'autres hypothèses ont été formulées [2] pour justifier la réalisation de tels feux : protection contre les animaux, fonction symbolique ou modification volontaire de l'aspect de la paroi. Estimer l'échelle des feux exécutés dans cette galerie constituerait ainsi un premier pas dans la compréhension de leur rôle.

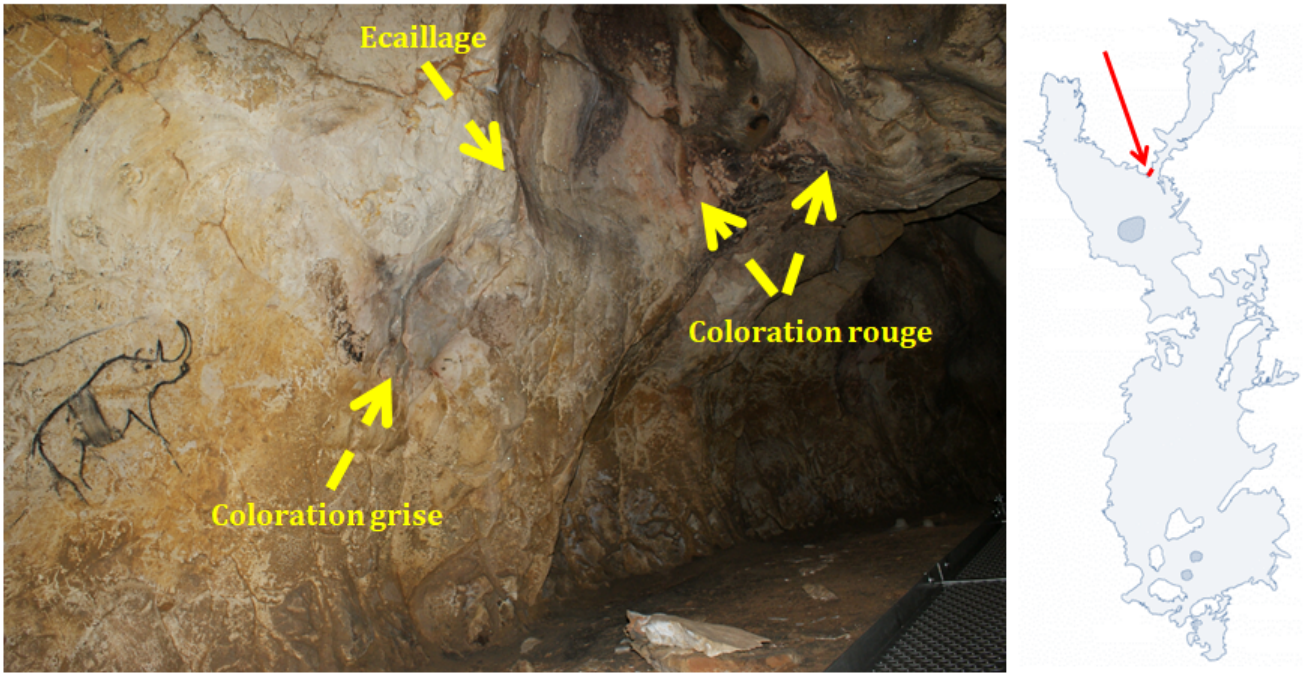

Figure 1.6 – Zone altérée à l'entrée de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). La surface grise se trouve à environ 1,30 mètre du sol.

1.2 Chimie de la combustion

La combustion s'opère uniquement lorsque les trois éléments du triangle de feu sont rassemblés : un combustible, un comburant (souvent le dioxygène de l'air) et une énergie d'activation (souvent de la chaleur). Dans la suite, l'énergie d'activation ne sera plus évoquée puisqu'elle n'est jamais modélisée dans les théories mathématiques décrites dans le mémoire. Numériquement, la combustion s'amorce dès qu'un combustible et un comburant rentrent "en contact". L'allumage est supposé être réalisé juste avant le début de la simulation numérique et aucune source d'énergie extérieure n'est donc utile dans les théories.

Cette partie se focalise sur le combustible et le comburant, ainsi que sur la réaction chimique qui en découle.

1.2.1 Pyrolyse du bois

Cette partie décrit d'abord le combustible du point de vue moléculaire puis du point de vue énergétique.

1.2.1.1 Composition chimique du bois

La structure moléculaire du bois est un mélange de polymères. La cellulose ($\sim 50\%$), les hémicelluloses ($\sim 25\%$) et la lignine ($\sim 25\%$) constituent les trois polymères principaux. Leur proportion dans la composition chimique du bois dépend de l'essence considérée, du lieu de présence sur l'arbre (branche, tronc, écorce, ...), de l'âge de l'arbre, etc. Il est donc difficile de connaître exactement la composition du bois en cours de pyrolyse. Néanmoins, la principale caractéristique influençant les proportions de chaque type de polymère est l'essence de bois. Comme indiqué dans la section précédente, l'espèce de bois utilisée par les Aurignaciens est le pin sylvestre. Pour cette espèce, les taux donnés dans la littérature sont les suivants [46] :

Cellulose	49,8%
Hémicellulose	20,8%
Lignine	26,7%

Ces trois polymères ne se décomposent pas à la même température. Lors d'une pyrolyse, la première réaction est le séchage ($T < 120^oC$) pendant lequel l'eau contenue dans le bois s'évapore. Puis les hémicelluloses se décomposent à partir de 200^oC, la cellulose entre 240^oC et 350^oC, et enfin la lignine se décompose pour des températures supérieures à 280^oC et ce jusqu'à 500^oC [3]. En plus de la température, la vitesse de combustion joue aussi un rôle sur la décomposition de ces polymères. Les produits de combustion ne seront donc pas les mêmes selon les caractéristiques de la pyrolyse. Tous ces obstacles rendent difficile l'établissement d'un modèle de pyrolyse. Cette étude ne contiendra donc pas de tel modèle. L'estimation des proportions des produits de combustion est un substitut *ad hoc* aux modèles de pyrolyse. Lorsque l'étude n'est pas particulièrement centrée sur la vitesse de combustion, les auteurs considèrent souvent ces proportions constantes pendant la réaction [47], [48].

Le raisonnement ne doit donc pas s'appuyer sur une partition du combustible en polymères mais plutôt sur une division atomique. Le bois est principalement constitué de trois éléments chimiques : le carbone C, l'hydrogène H et l'oxygène O. Cette propriété permet de symboliser le bois par la formule simplifiée $C_xH_yO_z$. Pour le pin sylvestre, la littérature [49] donne les proportions $y = 1,635x$ et $z = 0,719x$. La formule chimique du pin sylvestre s'écrit donc $C_xH_{1,635x}O_{0,719x}$. Cette formule brute est valable pour du bois sec. Lorsque celui-ci est humide, les proportions sont différentes mais la formulation reste identique.

1.2.1.2 Le pouvoir calorifique

Le pouvoir calorifique correspond à l'enthalpie de réaction par unité de masse dans les conditions normales de température et de pression. En d'autres termes, il s'agit de la quantité de chaleur dégagée par la combustion complète d'un kilogramme de combustible à la pression atmosphérique et à une température de 0^oC. Il existe deux genres de pouvoir calorifique. Le premier est le pouvoir calorifique supérieur (PCS). Le PCS est la quantité de chaleur maximale pouvant être générée par une unité de masse de combustible lors d'une combustion complète lorsque l'eau produite est condensée. Il s'agit de l'énergie mesurée lors d'un essai visant à déterminer le pouvoir calorifique du combustible. Le second est le pouvoir calorifique inférieur (PCI). Le PCI est la quantité de chaleur maximale pouvant être générée par une unité de masse de combustible lors d'une combustion complète lorsque l'eau produite reste sous forme de vapeur. Ainsi, le PCI sera toujours inférieur au PCS puisque la condensation est une réaction exothermique. Lorsqu'une circulation d'air s'opère entre l'intérieur d'une cavité et l'extérieur comme c'est le cas dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc, la vapeur d'eau produite est supposée s'échapper avec les fumées vers la sortie de la galerie sans avoir le temps de condenser. Ainsi, il est recommandé d'utiliser le PCI dans les problématiques rencontrées dans ce mémoire [50].

Pour le pin sylvestre, le PCI est de $22,4\ MJ.kg^{-1}$. Cette énergie est libérée par un bois sec et devrait donc plutôt être appelée $PCI_{anhydre}$. En réalité, le bois contient forcément une quantité non nulle d'eau déterminée par le taux d'humidité. Le taux d'humidité sur brut est défini par

$$E_h = 100\frac{m_{Bois\ humide} - m_{Bois\ anhydre}}{m_{Bois\ humide}} \tag{1.2.1}$$

où m représente la masse. Il s'agit du pourcentage d'eau contenue dans le bois par rapport à la masse totale. Le pouvoir calorifique réel du combustible est alors déterminé par la formule

$$PCI = \frac{100 - E_h}{100}PCI_{anhydre} - \frac{E_h}{100}L_{v,eau} \tag{1.2.2}$$

où $L_{v,eau}$ est la chaleur de vaporisation de l'eau à 100^oC sous 1 atm qui vaut $L_{v,eau} = 2257\ kJ.kg^{-1}$. Puisque la vaporisation de l'eau est une réaction endothermique, elle diminue l'énergie dégagée par la combustion. La courbe du pouvoir calorifique inférieur du pin sylvestre en fonction de l'humidité est tracée sur la figure 1.7.

Par exemple, une humidité de 20% fait chuter le PCI à environ $17,5\ MJ.kg^{-1}$, ce qui représente plus de 20% de perte sur l'énergie dégagée. Cette variable est donc importante et devra être quantifiée.

Dans la suite, pour une meilleure compréhension, le pouvoir calorifique sera noté $\Delta\mathscr{H}_c$ (pour enthalpie massique de combustion) dans les équations.

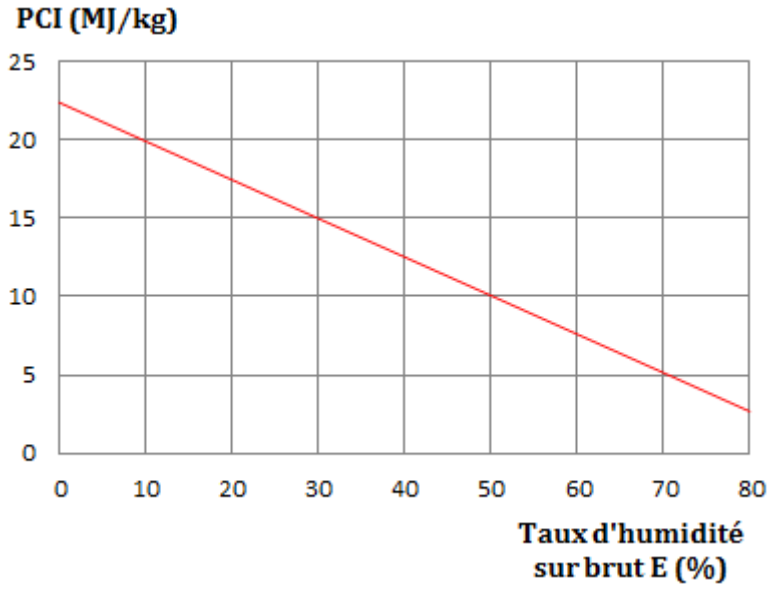

Figure 1.7 – Évolution du PCI du pin sylvestre en fonction de l'humidité.

Les valeurs numériques précédentes correspondent toutes à des combustions complètes. L'apport du comburant est ainsi supposé suffisant pour extraire le maximum d'énergie de la combustion. En général, le pouvoir calorifique réel est moindre puisqu'il faut tenir compte du caractère incomplet de la combustion. Toutes ces pertes dues à des paramètres difficilement quantifiables sont modélisées par une efficacité de combustion, notée χ, définie par la formule

$$\chi = \frac{\text{Énergie massique réellement libérée}}{\Delta \mathscr{H}_c} \tag{1.2.3}$$

Une variable très utilisée par les scientifiques est le HRR (*Heat Release Rate*) qui correspond à la puissance réellement dégagée par la combustion. Le HRR est relié à l'énergie massique libérée par la formule :

$$\dot{Q} = \chi \dot{m} \Delta \mathscr{H}_c \tag{1.2.4}$$

avec $\dot{Q}$ le HRR en W et $\dot{m}$ le débit massique de combustible brûlé en $kg.s^{-1}$. Le HRR est un paramètre important puisqu'il fournit la puissance dégagée à chaque instant et renseigne donc sur l'ordre de grandeur des températures obtenues lors de la combustion.

Pour clore ce paragraphe, revenons à une hypothèse faite implicitement depuis le début, la constance du pouvoir calorifique. Par commodité, le PCI est supposé invariable dans les calculs mais cette hypothèse est en général erronée comme l'a montré Spearpoint [51] sur du chêne rouge. Il a observé un pic en fin d'expérimentation dû à la combustion de charbon qui ne possède pas le même pouvoir calorifique que le bois. De manière générale, la pyrolyse correspond à la décomposition d'un combustible solide sous l'effet de la température en matières volatiles composées de gaz et de goudrons (hydrocarbures gazeux) et en charbons

$$\text{Solide} \rightarrow \text{ Matières volatiles } + \text{ Charbons} \tag{1.2.5}$$

Les matières volatiles peuvent ensuite être oxydées par l'air environnant et libérer de l'énergie. Chaque produit de la réaction possède des chaleurs de combustion différentes. Roberts [52] mesure la chaleur de combustion des produits de combustion pour du hêtre européen (Tab. 1.1). La grande valeur du pouvoir

Produit de combustion	Bois	Matières volatiles	Charbons
Chaleur de combustion ($MJ.kg^{-1}$)	19,5	16,6	34,3

Tableau 1.1 – Chaleur de combustion des produits de combustion du hêtre européen.

calorifique du charbon explique le pic observé par Spearpoint à la fin de la combustion. Roberts n'a pas observé d'évolution de la composition des gaz et des goudrons durant la combustion. Cependant, d'autres études suggèrent une variation de ce type. Browne et Brenden [53] étudient la variation de la chaleur de combustion des matières volatiles au cours de la combustion de pin de Ponderosa

$$\Delta\mathscr{H}_c = \begin{cases} 11\ MJ.kg^{-1} & 10\% \text{ de la masse initiale est brûlée} \\ 14,2\ MJ.kg^{-1} & 60\% \text{ de la masse initiale est brûlée} \end{cases} \tag{1.2.6}$$

La complexité de la combustion de bois ne permet pas au pouvoir calorifique de rester constant. Toutefois, la chaleur de combustion (1.2.6) présente des variations raisonnablement faibles. Ainsi, le pouvoir calorifique sera supposé constant dans la suite de l'étude et sera considéré comme une valeur moyenne du véritable pouvoir calorifique dépendant du temps. Sa valeur est déterminée par un test sous hotte calorimétrique mené conjointement avec la société Efectis France [54]. Un taux d'humidité mesuré sur le pin sylvestre d'environ 20% conduit à la valeur de $12,5\ MJ.kg^{-1}$. Cette énergie massique de combustion est cohérente avec les valeurs données par la littérature pour des bois semblables. Une valeur d'environ $12\ MJ.kg^{-1}$ pour du sapin de Douglas et du pin de Monterey est par exemple indiquée dans [55].

1.2.2 Equation de combustion

D'après la partie précédente 1.2.1, la formule chimique du bois s'écrit $C_xH_yO_z$. L'équation de combustion complète correspondante est :

$$C_xH_yO_z + (x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2})(O_2 + 3,764N_2) = xCO_2 + \frac{y}{2}H_2O + 3,764(x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2})N_2 \tag{1.2.7}$$

Les seuls produits de la réaction sont le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau. En réalité, bien d'autres éléments sont rejetés comme le monoxyde de carbone, les suies, le méthane, le dihydrogène, etc. Deux cas se présentent alors. En milieu pauvre, il y a trop de comburant par rapport au combustible. À l'inverse, le milieu est dit riche lorsqu'il y a trop de combustible. Dans ce cas, l'équation chimique de la réaction est difficile à écrire car la combustion est incomplète. La combustion naturelle d'un foyer de bois correspond au second cas. Les principaux éléments libérés par la combustion incomplète sont le CO et les suies. L'écriture de l'équation de combustion incomplète du bois fera donc intervenir quatre produits : CO_2, H_2O, CO, C (suie). L'équation chimique s'écrit alors

$$\begin{aligned} C_xH_yO_z + (x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2} - \frac{\nu_{CO}}{2} - \nu_C)(O_2 + 3,764N_2) = (x - \nu_{CO} - \nu_C)CO_2 + \frac{y}{2}H_2O + \nu_{CO}CO + \nu_C C \\ + 3,764(x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2} - \frac{\nu_{CO}}{2} - \nu_C)N_2 \end{aligned} \tag{1.2.8}$$

Les coefficients stœchiométriques du CO et du C sont des paramètres difficiles à évaluer. Ils dépendent de la quantité d'oxygène disponible pour brûler le combustible. Cette quantité varie au cours du temps au gré de la circulation des gaz. Dans la suite, ces deux coefficients seront fixés expérimentalement en supposant que la réaction chimique de combustion reste identique à chaque instant. De même, les facteurs de proportionnalité entre les coefficients x, y et z devront être ajustés par rapport à ceux évoqués au paragraphe 1.2.1. Ils devront en effet tenir compte de la teneur en eau du bois ainsi que de possibles différences endémiques avec le pin étudié dans [49].

Il faut aussi garder à l'esprit que la pyrolyse est le siège d'une multitude de réactions chimiques et les approximer par une seule réaction globale permet seulement d'approcher la réalité. De plus, à la fin de la combustion d'un foyer de bois, la combustion des braises suit une équation différente de (1.2.8). Cette dernière étape ne pourra donc pas être simulée.

1.2.3 Energie de combustion libérée par rayonnement

La température adiabatique de flamme est la température atteinte par une flamme si elle ne cède pas d'énergie à l'environnement extérieur lors d'une réaction isobare (à pression constante). Cela suppose donc que toute la chaleur générée par la réaction contribue à l'échauffement des produits de la réaction.

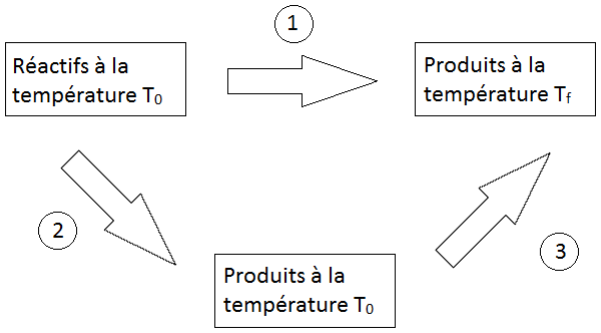

Figure 1.8 – Chemins thermodynamiques réel ① et fictif ② + ③.

Ainsi, la température adiabatique de flamme est la température maximale que peut prendre la flamme en théorie. Le calcul de cette température nécessite l'application de la théorie thermochimique. La réaction étant isobare, l'enthalpie est privilégiée pour les calculs sans travail extérieur sur le système. Le premier principe de la thermodynamique s'écrit $dH = \delta Q$ (la variation de l'énergie du système est égale à la quantité de chaleur échangée avec l'extérieur). De plus, le système étant supposé adiabatique, il n'y a pas d'échange de chaleur avec l'extérieur. Il n'y a donc pas de variation d'enthalpie pendant la réaction ($dH = 0$).

Aussi, l'enthalpie est une fonction d'état, c'est-à-dire qu'elle est fonction des variables d'état définissant l'état d'équilibre. L'enthalpie ne dépend donc que de l'état d'équilibre du système, et non du chemin sélectionné pour aboutir à cet état. L'utilisation d'un chemin fictif permet le calcul de la température adiabatique de flamme. Tout d'abord, faisons réagir les réactifs à la température $T_0 = 25^oC$ puis échauffons les produits jusqu'à une température T_f censée être la température finale (chemin ② + ③ sur Fig. 1.8).

Le chemin ① donne $\Delta H = 0$ comme expliqué précédemment. L'enthalpie du chemin ② est par définition donnée par l'enthalpie de réaction standard $\Delta_r H^0(T_0)$ et l'enthalpie du chemin ③ vaut

$$\int_{T_0}^{T_f} \sum_{\substack{i \\ produits}} \nu_i C_p \, \mathrm{d}T \tag{1.2.9}$$

Afin de calculer l'enthalpie de réaction à T_0 du chemin ②, la loi de Hess est utilisée

$$\Delta_r H^0(T_0) = \sum_i \nu_i \Delta H^0_{f,i}(T_0) \tag{1.2.10}$$

avec $\Delta H^0_{f,i}(T_0)$ les enthalpies de formation des espèces à T_0 dont les valeurs sont présentes dans la littérature. Par égalité des enthalpies,

$$\sum_i \nu_i \Delta H^0_{f,i}(T_0) + \int_{T_0}^{T_f} \sum_{\substack{i \\ produits}} \nu_i C_p \, \mathrm{d}T = \Delta H = 0 \tag{1.2.11}$$

Les capacités thermiques isobares dépendent de la température. En utilisant des développements polynomiaux en température, l'équation (1.2.11) devient une équation polynomiale en la variable T_f qu'il reste à résoudre numériquement pour obtenir la température adiabatique de flamme. Dans le cas où le combustible est du pin sylvestre totalement sec, une combustion complète donne une température adiabatique de flamme de 2493^oC. En pratique, cette température n'est jamais atteinte par cette combustion. D'une part parce que le bois contient généralement de l'eau et parce que la combustion n'est pas complète, et d'autre part parce que la réaction n'est pas adiabatique. En effet, les produits de la réaction sont transportés par les vitesses issues de la combustion empêchant l'énergie de rester au voisinage de la combustion. À haute température, des réactions de dissociation endothermiques peuvent se produire. Enfin, des pertes par rayonnement ne sont pas négligeables. Lorsque l'énergie

est libérée, une partie est transférée par "convection" et permet d'échauffer les gaz voisins. Mais ces gaz chauds rayonnent à leur tour une quantité d'énergie non négligeable. Bien que les gaz issus de la combustion absorbent du rayonnement, seule une faible proportion de cette énergie profite à la montée en température puisque leur absorption reste modeste. Pour tenir compte de ce rayonnement, l'efficacité de la combustion (1.2.3) est divisée en deux contributions, une convective et une radiative :

$$\chi = \chi_{conv} + \chi_{rad} \tag{1.2.12}$$

Les valeurs de la fraction d'énergie libérée par rayonnement sont généralement comprises entre 30% et 35%. Toutefois, la valeur de χ_{rad} dépend du combustible. Pour le pin sylvestre, la valeur retenue est de 30% [56].

1.2.4 Cinétique chimique

Durant une combustion, les réactions chimiques ne se déroulent pas instantanément. Il y a une certaine cinétique dans la succession des réactions. Étudions l'équation chimique de forme générale

$$\nu_A A + \nu_B B = \nu_C C + \nu_D D \tag{1.2.13}$$

La vitesse volumique instantanée de réaction est définie par

$$v_{cin} = \frac{1}{\nu_i}\frac{d[i]}{dt} \tag{1.2.14}$$

avec i représentant une des quatre espèces et $[i]$ étant la concentration de l'espèce i en $mol.m^{-3}$. Par convention, le coefficient stœchiométrique des produits est négatif dans la définition de la vitesse. La vitesse de réaction s'exprime aussi d'une seconde façon (loi de Guldberg et Waage [57])

$$v_{cin} = k_{cin}[A]^{\alpha_A}[B]^{\alpha_B} \tag{1.2.15}$$

avec α_i les ordres partiels de la réaction par rapport à l'espèce i et k_{cin} la constante de vitesse. Cette formule se généralise à N réactifs R_i

$$v_{cin} = k_{cin}\prod_{i=1}^{N}[R_i]^{\alpha_i} \tag{1.2.16}$$

La loi de Van't Hoff [58] affirme que pour une étape élémentaire (pas de réaction intermédiaire), les ordres partiels sont égaux aux coefficients stœchiométriques. La vitesse de réaction se réécrit

$$v_{cin} = k_{cin}\prod_{i=1}^{N}[R_i]^{\nu_i} \tag{1.2.17}$$

Il reste à déterminer la constante de vitesse pour entièrement caractériser la vitesse de réaction. Une formule théorique peut être établie pour la constante de vitesse à partir de la théorie des collisions s'appuyant sur la physique statistique. Elle établit le lien de proportionnalité suivant

$$k_{cin} \propto \sqrt{T}e^{-\frac{E}{RT}} \tag{1.2.18}$$

De son côté, la loi d'Arrhenius stipule

$$k_{cin} = Ae^{-\frac{E_a}{RT}} \tag{1.2.19}$$

avec A le facteur de fréquence, R la constante des gaz parfaits et E_a l'énergie d'activation d'Arrhenius. La dépendance en $\sqrt{T}$ est absente de la loi d'Arrhenius. Pour approcher la réalité, un terme en puissance de la température est souvent ajouté à la loi d'Arrhenius

$$k_{cin} = AT^b e^{-\frac{E_a}{RT}} \tag{1.2.20}$$

avec b un facteur permettant d'ajuster la loi d'Arrhenius modifiée.

La cinétique de la réaction est donc déterminée par le coefficient k_{cin}. La loi d'Arrhenius permet d'approcher certaines réactions. Néanmoins, dans les simulations numériques, la pyrolyse est souvent modélisée par un combustible gazeux rejeté par le foyer (voir §1.7.1). Cette modélisation permet d'éluder l'utilisation d'un modèle de pyrolyse complexe. Puis, l'interaction avec l'oxygène de l'air permet la réaction chimique. Les combustibles étant gazeux, ils sont soumis aux processus de turbulence. La mise en équation de la mécanique des fluides lorsque la turbulence est modélisée nécessite l'emploi de moyennes. Or, la loi d'Arrhenius se compose d'une multiplication de variables qui rend la moyenne du taux de réaction chimique fortement non linéaire [59]. Le modèle d'Arrhenius n'est donc pas utilisable dans ce cas. Le modèle qui lui est préféré dans les simulations est présenté au paragraphe 1.5.3.5.

1.3 Comportement des feux localisés

Cette partie traite des caractéristiques des feux localisés. À partir des observations et des mesures expérimentales, les scientifiques ont décrit les températures et les vitesses dans les flammes et les gaz issus de la combustion.

1.3.1 Panache thermique

Un panache thermique issu d'une combustion est un écoulement de température et de composition différentes par rapport à l'air environnant. Dans ce mémoire, les feux restent localisés pendant toute la combustion du bois. Le panache thermique présent au-dessus du feu existera donc pendant toute la durée de la pyrolyse du combustible. Des flammes, correspondant au rayonnement de particules produites par la combustion, vont se former. Les flammes peuvent être divisées en trois zones (figure 1.9).

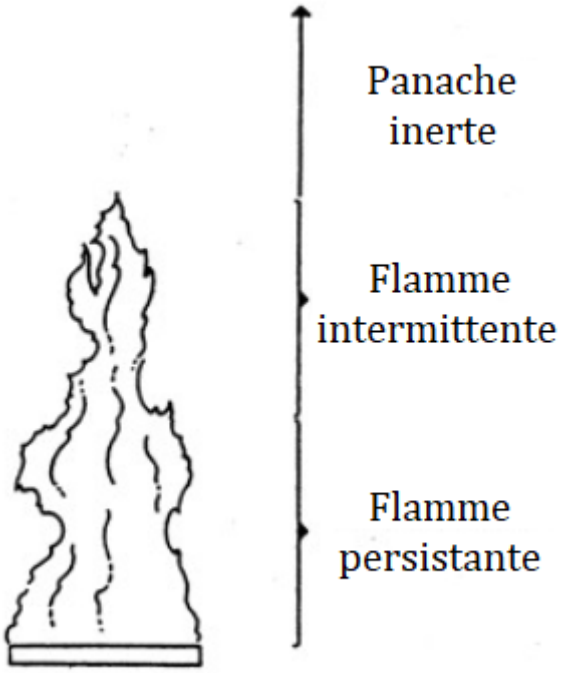

Figure 1.9 – Les trois parties dans un panache d'incendie d'après Drysdale [3].

La zone se situant juste au-dessus de la combustion s'appelle la zone de flamme persistante. Il s'agit de la zone où la flamme resterait visible en régime stationnaire. C'est ici que la vitesse ainsi que la température sont maximales. La deuxième zone est une région qui n'est pas toujours visible par un observateur. La vitesse verticale est quasiment constante dans cette partie de la flamme. La dernière zone correspond au panache thermique caractérisé par une baisse de la vitesse et de la température avec la hauteur.

Des études ont été menées à la fin des années 1970 et au début des années 1980, avec des foyers plats afin d'obtenir des informations sur les paramètres physiques importants dans les flammes [60], [61] et [62]. Les corrélations basées sur ces expérimentations ainsi que sur des méthodes analytiques expriment l'ordre de grandeur des températures et des vitesses dans les flammes.

L'importance des forces de flottabilité au cœur du foyer est quantifiée par une comparaison avec l'inertie à travers le nombre de Froude

$$Fr = \frac{u}{\sqrt{gD}} \tag{1.3.1}$$

avec u la vitesse des gaz ascendants, g l'accélération de la pesanteur et D le diamètre du foyer. La vitesse initiale au voisinage de la combustion peut être calculée par la formule du débit

$$\dot{m} = \rho u S \tag{1.3.2}$$

avec S la surface du foyer $\pi\frac{D^2}{4}$ et ρ la masse volumique du mélange de gaz. Le débit $\dot{m}$ correspond au débit de gaz. L'équation (1.2.4) qui a trait au combustible solide ne peut être appliquée directement. La puissance dégagée par la combustion peut néanmoins s'écrire aussi

$$\dot{Q} = \chi \dot{m}_{vap} \Delta\mathscr{H}_{c,vap} \tag{1.3.3}$$

où l'indice vap correspond aux matières volatiles issues de la pyrolyse. En supposant que l'efficacité de combustion est égale à un

$$\dot{m}_{vap} = \frac{\dot{Q}}{\Delta\mathscr{H}_{c,vap}} \tag{1.3.4}$$

Par égalité des deux relations précédentes, la vitesse initiale des matières volatiles s'exprime de la manière suivante

$$u = \frac{\dot{Q}}{\Delta\mathscr{H}_{c,vap}\rho\pi D^2/4} \tag{1.3.5}$$

A partir de l'expression de la vitesse (1.3.5) et la définition standard du nombre de Froude (1.3.1), un "HRR" sans dimension équivalent à un nombre de Froude est introduit

$$\dot{Q}^* = \frac{\dot{Q}_{kW}}{\rho_\infty c_{p,\infty} T_\infty \sqrt{gD} D^2} \tag{1.3.6}$$

avec $\dot{Q}_{kW}$ la puissance dégagée par le feu en kW et $c_{p,\infty}$ la capacité thermique massique de l'air à température ambiante en $kJ.kg^{-1}.K^{-1}$. Ce nombre sans dimension introduit dans les années 1970 a une grande importance puisqu'il permet de connaître le régime de combustion. Pour un HRR de 600 kW et un diamètre de 80 cm, la valeur de ce nombre est d'environ 1. Pour un foyer de taille raisonnable, composé de pin sylvestre, les forces de flottabilités sont les forces motrices dans la flamme. Tant que $0,12 < \dot{Q}^* < 12000$, la hauteur des flammes peut s'évaluer par la corrélation d'Heskestad [63]

$$\frac{L_h}{D} = 3,7\dot{Q}^{*2/5} - 1,02 \tag{1.3.7}$$

où L_h est la hauteur de la flamme. Cette relation est utile pour estimer de prime abord la hauteur des flammes. Elle est basée sur des essais de feux de piscine. Il a cependant été montré que la corrélation (1.3.7) fournit des résultats satisfaisants, par exemple, pour des feux de palettes [64]. La présence de thermo-altérations sur certaines surfaces du plafond de la grotte Chauvet-Pont d'Arc suggère que les flammes devaient atteindre celles-ci. Ainsi, l'application de cette corrélation sera un préliminaire aux calculs numériques afin de supprimer une partie des scénarios envisageables. Dans le même cas que précédemment, c'est-à-dire celui d'un HRR de 600 kW provenant d'un foyer de 80 cm de diamètre, la hauteur de flamme vaut environ $2,1$ m. Un tel foyer pouvait donc induire une flamme capable de lécher le plafond.

De la même manière, des corrélations concernant la température des panaches thermiques existent. Des expérimentations [60], [65] ont été menées sur différents combustibles afin d'élaborer ces formules

empiriques. Les trois zones de la flamme précédemment évoquées nécessitent des coefficients différents au sein de la corrélation de McCaffrey [60]

$$\frac{\Delta T_0}{T_\infty} = \left(\frac{k}{0,9\sqrt{2g}}\right)^2 \left(\frac{z}{\dot{Q}_{kW}^{2/5}}\right)^{2\eta-1} \tag{1.3.8}$$

avec

Région	k	η
Flamme $z/\dot{Q}_{kW}^{2/5} < 0,08$	$6,8\ m^{1/2}.s^{-1}$	1/2
Intermittente $z/\dot{Q}_{kW}^{2/5} \in [0,08;0,2]$	$1,9\ m.kW^{-1/5}.s^{-1}$	0
Panache inerte $z/\dot{Q}_{kW}^{2/5} > 0,2$	$1,1\ m^{4/3}.kW^{-1/3}.s^{-1}$	-1/3

où z est la hauteur dans le panache thermique et $\Delta T_0 = T - T_\infty$ est la variation de température dans l'axe du foyer par rapport à l'air ambiant. En reprenant alors l'exemple précédent, la température peut être tracée le long de l'axe du panache thermique (figure 1.10). La température de la flamme atteint quasiment 900^oC. Puis elle chute rapidement jusqu'à 350^oC à 2 m 50 de hauteur. Un feu de cette intensité pourrait donc être suffisant pour causer certains types de thermo-altérations présentes dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc.

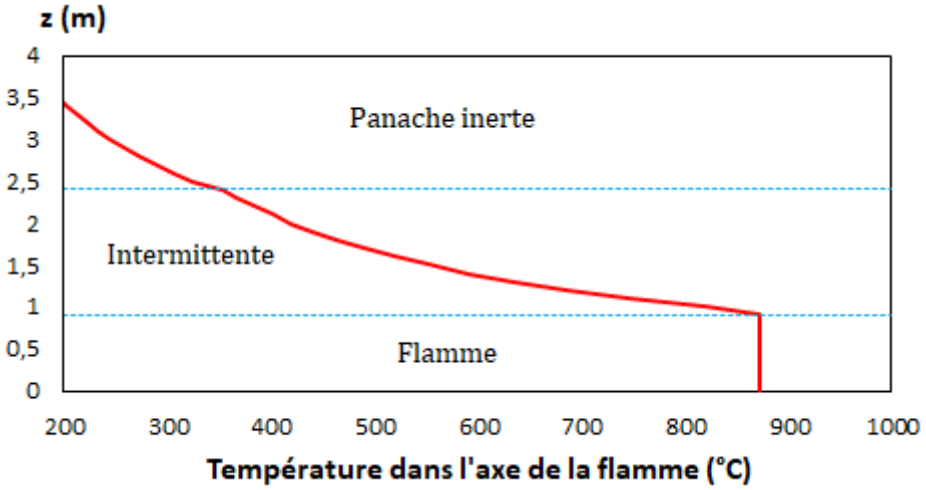

Figure 1.10 – Profil de température dans le panache thermique issu d'un foyer de 600 kW et de 80 cm de diamètre.

1.3.2 Jet sous plafond

Lorsque le panache thermique est limité par la présence d'un plafond à l'aplomb du foyer, les gaz chauds sont déviés et épousent la forme du plafond pour former un jet sous plafond horizontal. Ce jet est une couche de gaz de vitesse et de température différentes du reste des gaz se situant en partie inférieure. Les profils de température et de vitesse dans cette couche fine sous le plafond sont schématisés par la figure 1.11.

1.3.2.1 Plafond plat

Les 10% de la hauteur sous le plafond correspondent au jet sous plafond. La température ainsi que la vitesse passent par un maximum au sein de cette couche (à environ 1% de la hauteur du plafond). Dans les années 1970 et 1980, des expérimentateurs ont développé des corrélations empiriques relatives aux températures et vitesses maximales du jet sous plafond. Beyler [66] réalisa une revue détaillée des corrélations empiriques existantes en 1986. Parmi elles, basées sur des expérimentations concernant des

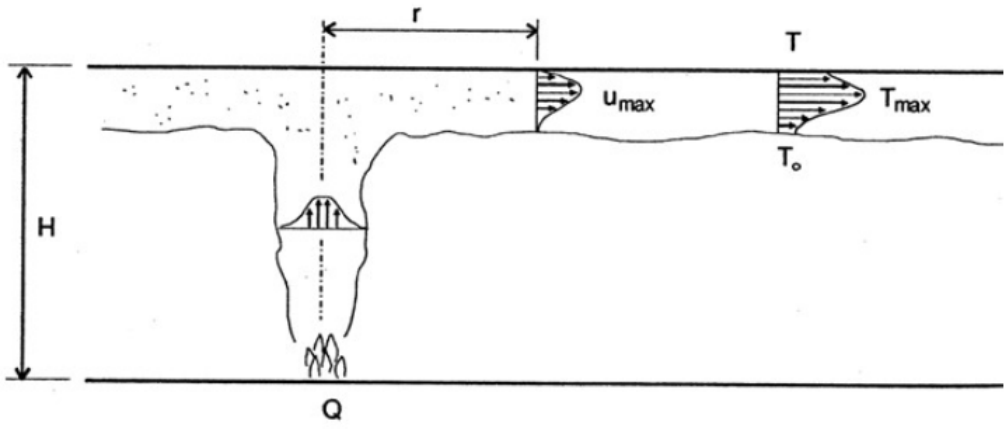

Figure 1.11 – Profils de température et de vitesse dans un jet sous plafond [4].

feux de 670 kW à 98 MW avec des hauteurs sous plafond de $4,6$ m jusqu'à $15,5$ m, les corrélations d'Alpert s'écrivent [67] :

$$T_{max} - T_\infty = \begin{cases} 16,9\dfrac{\dot{Q}_c^{2/3}}{H_p^{5/3}} & \text{si } r \leq 0,18H_p \\ 5,38\dfrac{\left(\dot{Q}_c/r\right)^{2/3}}{H_p} & \text{sinon} \end{cases} \tag{1.3.9}$$

$$u_{max} = \begin{cases} 0,947\left(\dfrac{\dot{Q}_c}{H_p}\right)^{1/3} & \text{si } r \leq 0,15H_p \\ 0,197\left(\dfrac{\dot{Q}_c}{H_p}\right)^{1/3}\left(\dfrac{r}{H_p}\right)^{-5/6} & \text{sinon} \end{cases} \tag{1.3.10}$$

où T_∞ est la température ambiante sous le jet sous plafond, H_p est la hauteur sous plafond, r est la distance radiale et

$$\dot{Q}_c = \chi_{conv}\dot{Q}_{kW} \tag{1.3.11}$$

est la puissance dégagée convective (kW). Dans la littérature, la variable $\dot{Q}_c$ est souvent remplacée par $\dot{Q}_{kW}$ dans les corrélations d'Alpert précédentes puisqu'elles ont été établies ainsi à l'origine. Toutefois, Alpert recommande aujourd'hui d'utiliser ces corrélations avec la puissance dégagée convective $\dot{Q}_c$ [68]. Cet aspect est aussi valable pour les corrélations suivantes relatives à un plafond plat.

Beyler [66] et Alpert [68] accordent une plus grande confiance à la corrélation de la température maximale d'Heskestad & Delichatsios [69] plutôt qu'à la corrélation (1.3.9) puisque les relations (1.3.12) et (1.3.13) sont issues d'une gamme expérimentale plus étendue

$$\frac{T_{max} - T_\infty}{T_\infty} = \dot{Q}_c^{*2/3}\left[0,188 + 0,313\frac{r}{H_p}\right]^{-4/3} \tag{1.3.12}$$

$$u_{max} = 0,59\sqrt{gH_p}\dot{Q}_c^{*1/3}\left(\frac{r}{H_p}\right)^{-0,63}\left[0,188 + 0,313\frac{r}{H_p}\right]^{-2/3} \tag{1.3.13}$$

avec

$$\dot{Q}_c^* = \frac{\dot{Q}_c}{\rho_\infty c_{p,\infty}T_\infty\sqrt{g}H_p^{5/2}} \tag{1.3.14}$$

Un écart maximum de 40% est observé entre les deux corrélations de température [66]. Alpert [68] propose un ajustement prenant en compte les deux précédentes corrélations

$$\frac{T_{max} - T_\infty}{T_\infty} = \begin{cases} \dot{Q}_c^{*2/3}\left[0,225 + 0,27\frac{r}{H_p}\right]^{-4/3} & \text{si } 0,2 \leq \frac{r}{H_p} < 4 \\ 6,3\dot{Q}_c^{*2/3} & \text{si } r \leq 0,2H_p \end{cases} \tag{1.3.15}$$

$$u_{max} = \begin{cases} 1,06\sqrt{gH_p}\dot{Q}_c^{*1/3}\left(\frac{r}{H_p}\right)^{-0,69} & \text{si } 0,17 \leq \frac{r}{H_p} < 4 \\ 3,61\sqrt{gH_p}\dot{Q}_c^{*1/3} & \text{si } r \leq 0,17H_p \end{cases} \tag{1.3.16}$$

Ces corrélations sont uniquement valables lorsqu'aucun mur n'entrave la propagation radiale du jet sous plafond. Dans un couloir, l'énergie se concentrera davantage dans la direction longitudinale. Dans ce cadre, de nombreux auteurs tels que Delichatsios [70] ou Zukoski *et al.* [71] ont étudié les jets sous plafond dans des configurations confinées. À partir des données expérimentales et de celles issues de [71], You et Faeth [72] montre que le confinement ne modifie que très peu la tendance du transfert thermique par convection au plafond. La corrélation (1.3.15) peut donc être utilisée à un coefficient de proportionnalité près. La température maximale dans le jet est souvent considérée de 25 à 50% plus importante pour des feux confinés [73].

Les précédentes corrélations sont théoriquement applicables pour des feux stationnaires. Elles sont étendues à des cas instationnaires par l'hypothèse quasi-statique. Le débit calorifique stationnaire est simplement remplacé par le débit réel instationnaire. De plus, les corrélations sont valides tant qu'aucune couche chaude ne s'est formée au sein de la géométrie. Le confinement de la géométrie conduit en effet à la mise en place de deux couches, une froide restant à des températures souvent proches de l'air extérieur, et une chaude où la température est quasiment homogène [74], [75]. Les corrélations précédentes ne sont donc théoriquement valables qu'aux premiers instants de la combustion, tant qu'aucune couche chaude n'a eu le temps de se créer. Une extension au cas général est présentée dans le logiciel CFAST [74]. La température T_∞ est simplement remplacée par la température de la couche chaude.

1.3.2.2 Plafond incliné

La corrélation (1.3.15) requiert un plafond plat pour être appliquée et la grotte Chauvet-Pont d'Arc ne s'inscrit pas dans cette hypothèse. De récentes études ont été menées afin d'établir des relations empiriques dépendantes de l'angle d'inclinaison du plafond. Oka *et al.* [76] contient une corrélation générale sur le profil de température dans le jet sous plafond qui a été complétée dans [77]

$$\left(\frac{T_{max} - T_\infty}{T_\infty}\right) \frac{1}{\left[\dot{Q}_c^*(1 + sin\psi)\right]^{2/3}} = 2,778 \left(\frac{r_{up}cos\psi}{H_p}\right)^{-0,781} \tag{1.3.17}$$

Cette corrélation est basée sur la corrélation d'Heskestad & Delichatsios (1.3.12). La distance radiale r_{up} correspond ici à la distance avec l'aplomb du foyer mesurée le long du plafond. Elle correspond ainsi à $r_{up} = \frac{r}{cos\psi}$. Oka [77] développa aussi des corrélations sur les vitesses maximales atteintes par le jet sous plafond

$$u_{max} = \alpha\sqrt{g(H_p + r_{up}sin\psi)} \left(\frac{r_{up}cos\psi}{H_p + r_{up}sin\psi}\right)^\beta \left[\dot{Q}_c^*(1 + sin\psi)\right]^{1/3} \tag{1.3.18}$$

avec

Domaine de validité	α	β
$0,037 < \frac{r_{up}cos\psi}{H_p + r_{up}sin\psi} \leq 0,151$	$\alpha = 6,051$	$\beta = 0,458$
$0,151 < \frac{r_{up}cos\psi}{H_p + r_{up}sin\psi} \leq 0,350$	$\alpha = 2,540$	$\beta = 0$
$0,350 < \frac{r_{up}cos\psi}{H_p + r_{up}sin\psi} \leq 1,80$	$\alpha = 0,855$	$\beta = -1,040$

Cette corrélation est basée sur la corrélation d'Alpert (1.3.10). Les corrélations sur la temérature et la vitesse sont corroborées par des données expérimentales sur des feux de puissances inférieures à 100 kW pour des angles allant de 0^o à 40^o [77], [78].

La figure (1.12) compare les corrélations (1.3.9), (1.3.12), (1.3.15) et (1.3.17) pour différents angles sur le cas d'un feu de puissance $\dot{Q}_c = 70\ kW$ se déroulant dans une géométrie non confinée telle que

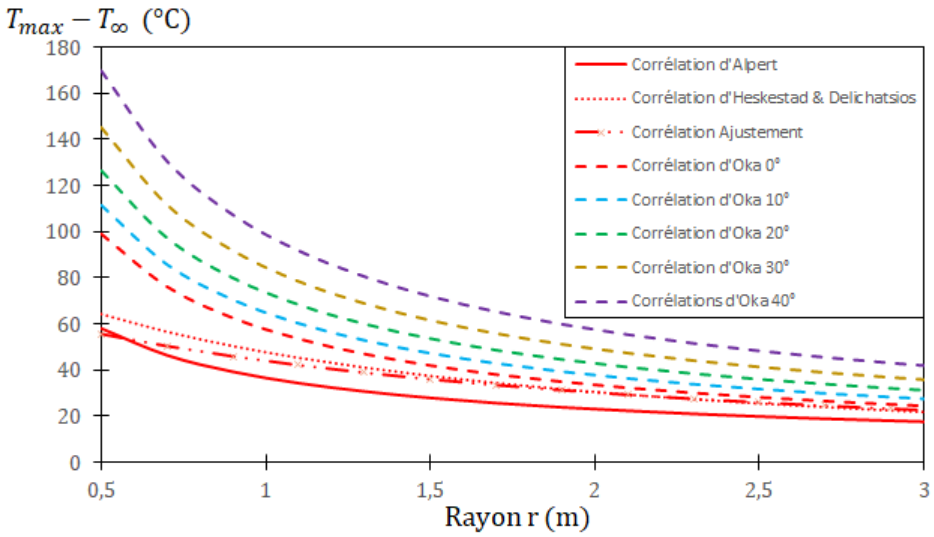

Figure 1.12 – Comparaison entre les différentes corrélations des températures maximum du jet sous plafond pour $H_p = 2,5\ m$ et $\dot{Q}_c = 70\ kW$. La corrélation d'Oka (1.3.17) est tracée pour différents angles.

la hauteur sous plafond est 2,5 mètres. Même pour un plafond non incliné, toutes les corrélations fournissent des résultats différents, avec un écart substantiel entre celle d'Oka et les trois autres. De plus, l'inclinaison favorise une augmentation de la température maximale du jet sous plafond.

1.3.3 Extension du jet sous plafond aux parois verticales

Le confinement influence aussi la circulation des gaz proches des parois. Lorsque le jet sous plafond atteint le coin formé par le plafond et le mur, les forces d'inertie peuvent être encore très importantes. Si elles sont supérieures aux forces de flottabilité, l'inertie entraîne le jet sous plafond en direction du sol, en épousant la forme des parois [79] (Fig. 1.13). Cooper [80] affirme que le jet sous plafond peut descendre le long de la paroi jusqu'à 80% de la hauteur sous plafond. Le transfert thermique convectif à la paroi peut ainsi doubler [81].

Ce phénomène intervient lorsque la distance D_m entre le foyer et le mur est inférieur à la hauteur sous plafond H_p au niveau du foyer [80] (Fig. 1.13). La configuration de la Galerie des Mégacéros satisfait ce critère ce qui facilite l'impact thermique en paroi.

1.4 Transferts thermiques

Les transferts thermiques jouent un rôle prépondérant lors d'une combustion. D'une part, une contribution importante de l'énergie est rayonnée et transportée par des ondes électromagnétiques (voir *supra* §1.2.3). De plus, l'étude est centrée sur des feux réalisés au sein de géométries confinées. Le rayonnement des parois doit donc être considéré puisqu'il n'est pas négligeable.

La convection permet la propagation de la chaleur par des mouvements de gaz. La vitesse des gaz lors d'une combustion étant élevée, la convection est le moteur principal de la propagation de l'énergie. D'ailleurs, les gaz vont aussi transmettre une fraction de leur énergie par convection proche des parois. La modélisation des transferts thermiques des gaz vers les parois doit donc être effectuée.

Enfin, la conduction intervient dans les parois. Sous le feu tout d'abord, une partie de l'énergie est absorbée par conduction dans le sol. Une autre partie est diffusée dans les parois éloignées du foyer mais atteintes par les gaz chauds. La conduction est aussi présente dans les gaz mais cette contribution reste faible par rapport aux deux autres transferts thermiques.

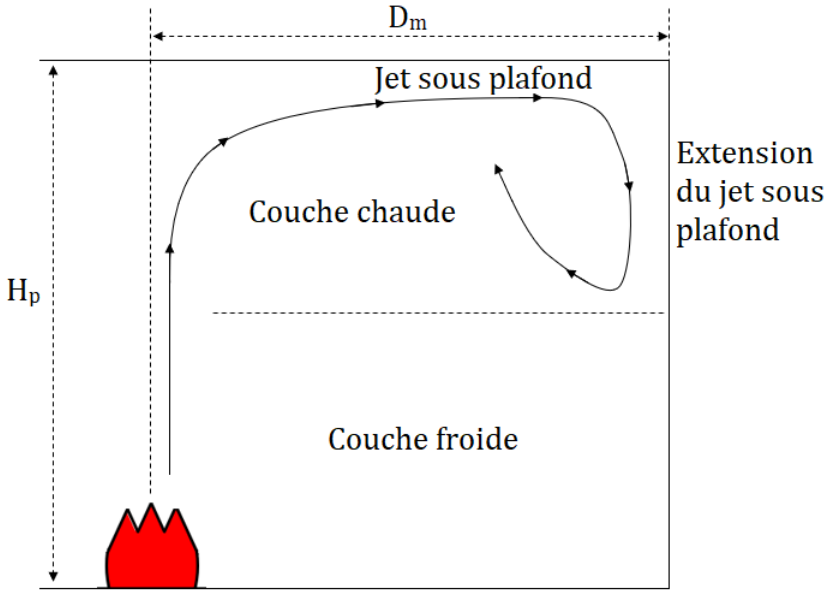

Figure 1.13 – Schématisation de l'extension du jet sous plafond aux parois verticales.

1.4.1 Conduction

Cette partie traite de la conduction thermique. La théorie mathématique relative à ce phénomène est d'abord présentée puis elle est appliquée au transfert d'énergie perdue à travers le sol lors d'une combustion.

1.4.1.1 Équation de la chaleur

La conduction thermique résulte de deux phénomènes physiques que sont les mouvements des porteurs de charge (conductivité électrique) et la vibration des atomes autour de leur position d'équilibre. Cette dernière permet la transmission du mouvement des atomes de proche en proche aboutissant à une certaine agitation.

Lorsque deux corps sont à deux températures différentes, l'expérience montre la présence d'un flux proportionnel au gradient de température (au premier ordre). Cette propriété correspond à la loi de Fourier (1807) s'énonçant

$$\mathbf{q_{cond}} = -\lambda \boldsymbol{\nabla} T \tag{1.4.1}$$

où λ, jouant le rôle de coefficient de proportionnalité, s'appelle la conductivité thermique ($W.m^{-1}.K^{-1}$). Le signe moins traduit l'orientation du flux de la source chaude vers la source froide.

L'équation régissant la propagation de la chaleur dérive du premier principe de la thermodynamique

$$dU = \delta Q + \delta W \tag{1.4.2}$$

où dU est la différentielle exacte de l'énergie interne (en joule), δQ est la différentielle inexacte de la quantité de chaleur et δW est la différentielle inexacte du travail du milieu extérieur sur le système considéré. En appliquant le premier principe à un système fermé de volume fixe Ω, le travail élémentaire $\delta W = -pdV$ (avec p la pression et dV une variation infinitésimale du volume du système) est nul et il ne reste que la chaleur échangée avec l'extérieur dans le membre de droite de l'équation (1.4.2). En introduisant l'énergie interne massique $\mathscr{U}$ ($J.kg^{-1}$),

$$U = \iiint_{\Omega} \rho \mathscr{U} \mathrm{d}V = \iiint_{\Omega} \rho c_v T \mathrm{d}V \tag{1.4.3}$$

avec c_v la capacité thermique massique à volume constant ($J.K^{-1}.kg^{-1}$). Le premier principe mène alors à

$$\frac{dU}{dt} = \iiint_{\Omega} \frac{\partial \rho c_v T}{\partial t} dV = \frac{dQ}{dt} = \iint_{\partial\Omega} \mathbf{q_{cond}}.\mathbf{n} d\Sigma \tag{1.4.4}$$

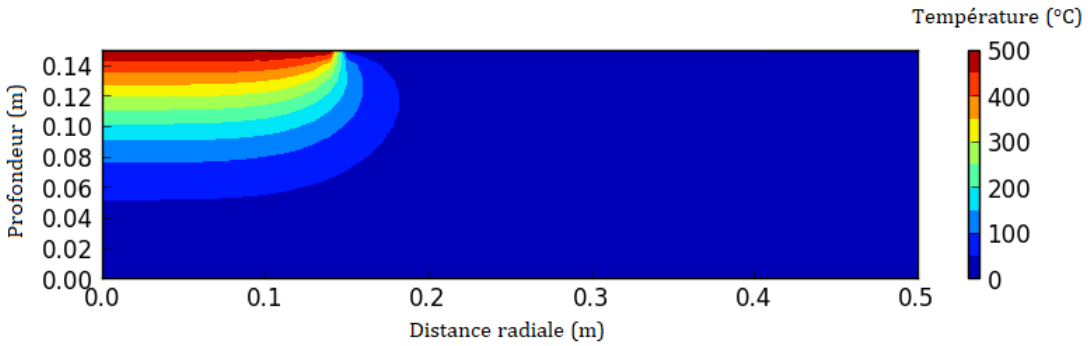

Figure 1.14 – Champ de température dans le sol à la fin du feu.

car le volume Ω est fixe ($\mathbf{n}$ est la normale à la surface $\partial\Omega$). Le théorème de Green-Ostrogradski permet de ramener l'intégrale de surface à une intégrale de volume

$$\iint_{\partial\Omega} \mathbf{q_{cond}}.\mathbf{n}d\Sigma = \iiint_{\Omega} \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_{cond}}dV \tag{1.4.5}$$

La loi de Fourier (1.4.1) permet le calcul du flux thermique $\mathbf{q_{cond}}$. Enfin, puisque l'équation intégrale porte sur un volume fixe quelconque, elle reste vraie localement

$$\frac{\partial \rho c_v T}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}.(\lambda \boldsymbol{\nabla} T) \tag{1.4.6}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \rho c_v T}{\partial t} = -\lambda \Delta T - \boldsymbol{\nabla}\lambda.\boldsymbol{\nabla} T \tag{1.4.7}$$

Dans cette analyse, le volume a été supposé constant et l'équation (1.4.7) n'est donc pas valable pour un gaz dont le volume varie. La propagation de la chaleur dans un massif rocheux satisfait néanmoins l'équation (1.4.7) puisque son volume reste constant à quelques déformations négligeables près. Puisque cette équation concerne uniquement les solides, il est permis d'assimiler les capacités thermiques à pression et à volume constants $c_v = c_p$.

1.4.1.2 Energie transmise au sol

Hormis les parois et le plafond, le sol est aussi vecteur de propagation d'énergie par conduction thermique. Les Aurignaciens brûlaient certainement des branches de pin sylvestre à même le sol. Une partie de l'énergie libérée par la combustion était donc diffusée à travers le sol. L'équation régissant cette diffusion est l'équation de la chaleur (1.4.7). L'ordre de grandeur de l'énergie dissipée dans le sol est quantifié à partir d'une étude réalisée par Brodard *et al.* [82]. Plusieurs sols de propriétés différentes accueillent un foyer selon des durées variables. Des capteurs de températures à différentes profondeurs permettent l'acquisition de données sur la diffusion thermique dans le sol. Outre la partie expérimentale, un des feux est simulé à l'aide d'un code résolvant l'équation de la chaleur. Les propriétés thermiques du sol évoluant en fonction de la profondeur (évaporation de l'eau), la simulation présentée utilise des propriétés *ad hoc* réalisant le meilleur ajustement aux températures mesurées. Dans cette simulation, le feu est approché par une condition limite en température de 500^oC. Puisque les auteurs n'étaient pas intéressés par l'énergie diffusée dans le sol, cette donnée n'est pas fournie dans [82]. L'étude numérique a donc été reproduite avec les mêmes propriétés thermiques et les mêmes conditions que celles précisées dans l'article. Un code Python a résolu l'équation de la chaleur en deux dimensions axisymétrique. Le foyer est représenté par une condition de Dirichlet en température sur les 15 premiers centimètres puisque celui-ci mesure 30 cm de diamètre. Le champ de température dans le sol à la fin du feu est présenté Fig. 1.14. Ce champ est identique avec celui affiché sur la figure 12 de [82] nonobstant la différence de mise en donnée en deux dimensions non axisymétrique.

La résolution personnelle étant validée, l'énergie diffusée dans le sol peut être calculée par

$$\int_V \rho c_p (T_{finale} - T_0) \mathrm{d}V \tag{1.4.8}$$

où V est le volume du cylindre engendrée par l'axe de révolution vertical passant par le centre du foyer. Le programme numérique fournit une énergie d'environ 2 MJ. D'après [82], le foyer a libéré au total 120 MJ. L'énergie diffusée dans le sol représente donc moins de 2% de l'énergie délivrée par la combustion. Elle sera donc négligée dans les simulations numériques de ce mémoire.

1.4.2 Convection

La partie précédente traitait des transferts thermiques au sein de la roche. Ce paragraphe décrit le flux thermique associé au mouvement du fluide échangé à la paroi (le rayonnement est étudié dans la partie suivante).

La roche possède une diffusivité thermique faible donc la diffusion thermique dans le massif est lente et nécessite un temps relativement long pour observer une hausse de température. Les gaz voisins de la paroi peuvent changer rapidement de température grâce aux mouvements et aux transports d'énergie. Les gaz sont ainsi beaucoup plus chauds que le massif rocheux. Par continuité, la surface de la roche possède donc une température relativement faible par rapport à celle des gaz. La perte de température doit donc être importante dans les gaz en proche paroi car il est plus facile de perdre de l'énergie sur quelques millimètres dans un gaz que dans la roche. L'énergie peut en effet se dissiper par viscosité à des échelles plus petites telles que les tourbillons dans les gaz. Il existe donc une zone localisée sur les premiers centimètres de la paroi où la température chute brutalement. Cette zone s'appelle la couche limite thermique.

Outre la température, la vitesse chute aussi brusquement dans cette zone. Macroscopiquement, le fluide est souvent considéré à l'arrêt à la surface de la paroi même si une vitesse résiduelle due à la porosité peut exister. Cette vitesse négligeable et considérée comme nulle dans la suite, induit un fort gradient de vitesse dans la direction normale à la surface. Sur une distance faible, la quantité de mouvement du fluide est diffusée. Cette zone est appelée couche limite dynamique.

En règle générale, les chutes de température et de vitesse s'opèrent sur des épaisseurs différentes (Fig. 1.15). Des formules analytiques de l'épaisseur des couches limites existent tant que les vitesses restent suffisamment faibles (régime laminaire). À titre indicatif, pour de l'air à 500^oC évoluant à une vitesse de 5 $m.s^{-1}$, à 10 cm du bord d'attaque (point de formation de la couche limite), l'épaisseur de la couche limite dynamique vaut environ 6 mm tandis que la couche limite thermique possède une épaisseur de 7 mm.

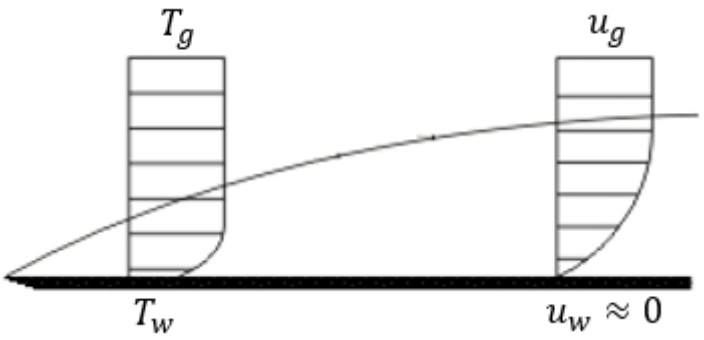

Figure 1.15 – Représentation schématique d'une couche limite.

Le transfert par convection s'effectue entre la zone proche paroi, où la vitesse est négligeable, et la surface. Ainsi, le transfert s'accomplit en réalité par conduction entre le gaz au repos et la paroi. La convection est donc un transfert par conduction entre un gaz, quasiment au repos suite à la diffusion de la quantité de mouvement dans la couche limite, et une paroi.

Idéalement, il faudrait résoudre les équations de la mécanique des fluides jusqu'à une distance infiniment proche de la paroi. Les propriétés évoluant d'une manière brusque, il serait nécessaire d'utiliser des mailles très petites pour la résolution, augmentant considérablement le temps de calcul des simulations. Pour éviter de réaliser tous ces calculs, des corrélations analytiques et empiriques ont été

développées. Celles-ci s'appuient sur la loi de Newton fournissant le flux cédé par le gaz à la paroi

$$q_{conv} = h\,(T_g - T_w) \tag{1.4.9}$$

avec T_g la température du gaz hors de la couche limite, T_w la température de la paroi et h le coefficient de convection thermique s'exprimant en $W.m^{-2}.K^{-1}$. Les relations empiriques concernent l'expression du coefficient h dépendant des propriétés locales du fluide. Tout d'abord, définissons le nombre de Nusselt qui représente le rapport du flux thermique sur l'hypothétique flux qui ne serait que conductif

$$Nu = \frac{hL}{\lambda} \tag{1.4.10}$$

avec L une longueur caractéristique (dépendant de la géométrie). En effet, le flux réel est $h\Delta T$ tandis que le flux qui serait uniquement conductif serait de l'ordre de $\lambda\frac{\Delta T}{L}$. Le rapport des deux flux fournit le nombre de Nusselt. Lorsque le nombre de Nusselt s'approche de 1 (valeur minimale), le transfert est seulement conductif et la vitesse du fluide voisin de la paroi est quasiment nulle. Le régime d'écoulement est dit laminaire. Au contraire, lorsque la valeur du nombre de Nusselt devient importante, le régime d'écoulement est turbulent. Ces deux termes, laminaire et turbulent, représentent deux régimes d'écoulement d'un fluide. Le régime laminaire correspond à une circulation du fluide organisée, évoluant globalement dans une seule direction. Dans ce cas, une particule de fluide et sa voisine à un instant t seront encore voisines dans le futur. Au contraire, lors d'un écoulement turbulent, le fluide est désorganisé et a un aspect erratique. Ce régime est caractérisé par la présence de tourbillons qui ne sont pas dissipés par la viscosité rendant ainsi la prévision du mouvement du fluide extrêmement difficile. Le nombre de Reynolds (1.4.11) permet de trancher plus finement quant à la nature de l'écoulement

$$Re = \frac{uL}{\nu} \tag{1.4.11}$$

avec u la vitesse du fluide et ν la viscosité cinématique du fluide ($m^2.s^{-1}$). Ce nombre représente le rapport des forces d'inertie sur les forces de viscosité. Lorsque l'inertie est plutôt faible, les forces de viscosité l'emportent, le nombre de Reynolds est faible et le régime est laminaire. Lorsque l'inertie domine la viscosité, le nombre de Reynolds est élevé et le régime est turbulent. Les valeurs du nombre de Reynolds pour identifier le régime d'écoulement varient selon la géométrie. Sur une plaque plane, la limite se situe autour de $Re = 10^5$ tandis que dans une conduite cylindrique, la limite se situe entre $Re = 10^3$ et $Re = 10^4$. Le mécanisme de la turbulence est détaillé au paragraphe 1.5.3.

1.4.2.1 Convection forcée

La convection forcée est une convection provoquée par une source "artificielle". Dans le cas présent, la source est le feu. Les vitesses des gaz sont ainsi beaucoup plus élevées qu'en convection naturelle où les différences de température sont beaucoup plus faibles. Le théorème de Vaschy-Buckingham [83], [84] permet de démontrer que le nombre de Nusselt dépend du nombre de Reynolds (1.4.11) et du nombre de Prandtl

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa} \tag{1.4.12}$$

avec $\kappa = \frac{\lambda}{\rho c_p}$ la diffusivité thermique ($m^2.s^{-1}$). Ce nombre représente le rapport de la dissipation de quantité de mouvement sur la dissipation thermique. Si le nombre de Prandtl est élevé, la diffusion thermique est faible et le champ de température sera fortement influencé par le champ de vitesse (qui transportera l'énergie thermique). Si le nombre de Prandtl est faible, la diffusion thermique est élevée et la température peut se diffuser facilement sans l'aide de la circulation des gaz. Le champ de vitesse influencera peu le champ de température. Pour les gaz, le nombre de Prandtl est médian (0,7 pour l'air à 25^oC).

L'analyse dimensionnelle donne ainsi $Nu = f(Re, Pr)$. À partir de cette formulation, des corrélations peuvent être établies analytiquement. Pour une plaque plane, la corrélation suivante sera utilisée [13]

$$Nu = \begin{cases} 0,66Pr^{1/3}Re^{1/2} \text{ si } Re < 5,10^5 \text{ (laminaire)} \\ 0,037Pr^{1/3}Re^{0,8} \text{ si } 5,10^5 < Re < 10^7 \text{ (turbulent)} \end{cases} \tag{1.4.13}$$

Le critère d'applicabilité est respecté par les vitesses rencontrées dans ce mémoire. Par exemple, en choisissant une vitesse de l'ordre de 10 m/s, une viscosité cinématique de l'ordre de 10^{-5} $m^2.s^{-1}$ et une longueur caractéristique de 1 m, le nombre de Reynolds $Re \sim 10^6$ est bien inférieur à 10^7. L'estimation du transfert convectif autour de thermocouples cylindriques sera nécessaire lors des comparaisons entre simulations et expérimentations (§3.3). Autour d'un cylindre, les corrélations sont de la forme $Nu = CRe^n Pr^{1/3}$ [13]. Les paramètres C et n sont obtenus expérimentalement et regroupés dans le tableau 1.2.

Re	C	n
0,4-4	0,989	0,330
4-40	0,911	0,385
40-4000	0,683	0,466
4000-40000	0,193	0,618
40000-400000	0,0266	0,805

Tableau 1.2 – Valeurs des paramètres C et n intervenant dans la corrélation du nombre de Nusselt pour un cylindre en fonction du nombre de Reynolds [13].

Pour le cylindre, la longueur caractéristique utilisée est le diamètre de celui-ci. Les nombres sans dimension sont calculés à partir des propriétés du fluide à la température $\frac{T_g+T_w}{2}$.

1.4.2.2 Convection naturelle

En couche basse, les vitesses sont plus faibles et l'hypothèse de convection forcée peut devenir caduque. La convection pourrait plutôt être qualifiée de "naturelle". Les précédentes corrélations pourraient ainsi ne plus être applicables. En effet, le théorème de Vaschy-Buckingham montre cette fois-ci que le nombre de Nusselt dépend du nombre de Prandtl et du nombre de Grashof

$$Gr = \frac{g\beta_T(T_w - T_g)L^3}{\nu^2} \tag{1.4.14}$$

avec β_T le coefficient de dilatation thermique volumétrique en K^{-1}. Pour un gaz parfait, $\beta_T = \frac{1}{T}$. Ce nombre représente le rapport des forces de flottabilité (appelées aussi forces de gravité ou forces d'Archimède) sur les forces de viscosité. Le type de convection est statué grâce au nombre de Richardson $Ri = Gr/Re^2$. Si $Ri << 1$, les forces d'inertie dominent et la convection est forcée. Si au contraire, $Ri >> 1$, les forces de flottabilité l'emportent et la convection est naturelle.

Lors d'une convection naturelle, le nombre de Nusselt s'écrit donc $Nu = f(Pr, Gr)$. L'expression des corrélations est simplifiée par l'introduction du nombre de Rayleigh $Ra = PrGr$.

$$Ra = \frac{g\beta_T(T_w - T_\infty)L^3}{\kappa\nu} \tag{1.4.15}$$

Le nombre de Nusselt est alors fonction du seul nombre de Rayleigh. En convection naturelle, les corrélations diffèrent selon les régimes d'écoulement (laminaire ou turbulent) dont la transition de l'un vers l'autre s'établit autour de $Ra = 10^9$ [85]. Une convection naturelle ne pourra s'établir qu'en couche basse où les gaz de combustion sont, *a priori*, absents lors des feux rencontrés dans l'étude. La composition en couche basse sera donc proche de celle de l'air à une température proche de 20^oC. Dans ce cas, $T = 300$ K, $\beta_T = \frac{1}{300}$ K^{-1}, $\kappa \sim 10^{-5}$ $m^2.s^1$, $\nu \sim 10^{-5}$ $m^2.s^{-1}$, $L = 1$ m, et une différence de température entre le gaz et le mur de 5^oC par exemple donnent $Ra = \frac{5}{3}10^9$. Des instabilités dans la couche limite peuvent donc se produire et les corrélations doivent exprimer le nombre de Nusselt dans les deux régimes d'écoulement. Pour un mur vertical, Holman [13] conseille les corrélations empiriques

$$Nu = \begin{cases} 0,59Ra^{1/4} \text{ si } 10^4 < Ra < 10^9 \\ 0,10Ra^{1/3} \text{ si } 10^9 < Ra < 10^{13} \end{cases} \tag{1.4.16}$$

Les nombres de Rayleigh rencontrés sont très inférieurs à la limite de 10^{13} des corrélations (1.4.16) qui sont donc suffisantes. Ces corrélations seront aussi appliquées au sol horizontal puisque l'erreur

commise restera modérée compte tenu des faibles variations de températures en couche froide. Pour un cylindre horizontal, Holman [13] recommande les corrélations empiriques

$$Nu = \begin{cases} 0,53Ra^{1/4} \text{ si } 10^4 < Ra < 10^9 \\ 0,13Ra^{1/3} \text{ si } 10^9 < Ra < 10^{12} \end{cases} \tag{1.4.17}$$

Dans les calculs, le maximum des deux corrélations (forcée et naturelle) sera utilisé. Cette approche, permettant de trancher quant au régime de convection, est par exemple implémentée dans le logiciel FDS (Fire Dynamics Simulator) [86].

1.4.3 Rayonnement thermique

Tout corps dont la température est au-dessus du zéro absolu ($\sim -273,15^oC$) émet des ondes électromagnétiques du fait de l'agitation moléculaire. Lorsque la température est suffisamment basse, le rayonnement thermique est souvent négligeable par rapport à la convection et la conduction. L'expression mathématique des flux pour ces trois mécanismes reflète la différence d'ordre de grandeur entre le rayonnement thermique et les deux autres transferts thermiques. Les flux conductif et convectif sont proportionnels à la température tandis que le flux radiatif est proportionnel à la puissance quatrième de la température pour un corps noir (loi de Stefan-Bolztmann). Le rayonnement thermique devient donc dominant pour des températures très élevées. Les températures mises en jeu lors de la combustion sont telles qu'elles nécessitent la prise en compte des phénomènes radiatifs, à la fois à la surface des parois mais aussi dans les gaz. En effet, les gaz étant un milieu diathermane (semi-transparent), ils émettent et absorbent une partie de l'énergie radiative qui les traverse. La quantité d'énergie radiative transportée par les ondes électromagnétiques dépend de la longueur d'onde. Les gaz restent invisibles malgré le rayonnement car l'énergie est transportée par des ondes dont les longueurs d'ondes sont hors du spectre visible ($400\ nm - 800\ nm$). À l'inverse, les particules de suies rayonnent dans le spectre visible pour les températures rencontrées lors de la combustion du bois. Ce rayonnement forme ainsi la flamme jaune orangée typique de ce genre de combustion.

1.4.3.1 Équation de transfert radiatif

Mathématiquement, ce rayonnement est présent dans l'équation d'énergie à travers la divergence du flux radiatif $\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_r}$. Ce terme doit donc être calculé en résolvant l'équation régissant le rayonnement thermique. Cette équation est établie par un bilan des contributions énergétiques sur un volume infinitésimal. Par commodité, l'équation portera sur la luminance (ou radiance) spectrale notée $I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s})$ ($W.m^{-2}.sr^{-1}.m^{-1}$) dans ce mémoire afin d'être consistant avec la notation du logiciel OpenFOAM, même si celle-ci est fréquemment notée L_λ dans le reste de la littérature. La luminance (énergétique) spectrale dépend des coordonnées spatiales $\mathbf{x}$ et de la direction du rayon noté $\mathbf{s}$. En notant ϕ le flux échangé entre le volume infinitésimal et l'extérieur passant à travers la surface dS dans l'angle solide $d\Omega$ autour de la direction considérée et λ la longueur d'onde, la définition de la luminance est

$$I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s}) = \frac{d^3\phi}{dSd\Omega d\lambda} \tag{1.4.18}$$

Une partie de l'énergie reçue est absorbée par le volume, une partie est émise, et une partie est diffusée par les particules de suie. En effet, un rayon dans la direction $\mathbf{s}$ peut être dévié dans une autre direction à cause d'une particule présente sur le chemin. De même, d'autres rayons provenant d'une direction $\mathbf{s}'$ peuvent être déviés vers le volume infinitésimal grâce aux suies. L'écriture mathématique de ces contributions fournit l'équation de transfert radiatif

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s})}{\partial t} + \mathbf{s}.\boldsymbol{\nabla} I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s}) = \underbrace{j_\lambda}_{\text{Emission}} - \underbrace{a_\lambda I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s})}_{\text{Absorption}} - \underbrace{\sigma_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s})I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s})}_{\text{Pertes par diffusion}} + \underbrace{\frac{\sigma_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s})}{4\pi}\int_{4\pi}\mathscr{P}(\mathbf{s}',\mathbf{s})I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s}')\mathrm{d}\Omega}_{\text{Gains par diffusion}} \tag{1.4.19}$$

a_λ est le coefficient d'absorption (m^{-1}), σ_λ est le coefficient de diffusion (m^{-1}), $\mathscr{P}$ est la fonction de phase (densité de probabilité) et $\mathrm{d}\Omega$ est l'angle solide autour de la direction $\mathbf{s}$. La fonction j_λ correspond

à la partie émise. Elle s'écrit comme le produit du coefficient d'absorption par la luminance spectrale d'un corps noir (formule de Planck)

$$I_{b\lambda}(T) = \frac{2h_p c^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{h_p c}{\lambda k_B T}} - 1} \tag{1.4.20}$$

avec $k_B \sim 1,38.10^{-23}\ J.K^{-1}$ la constante de Boltzmann et $h_p \sim 6,626.10^{-34}\ J.s$ la constante de Planck. Un corps noir est un corps idéal qui absorbe tout rayonnement incident, quelles que soient la température, la longueur d'onde ou l'incidence. L'intégrale de la formule de Planck sur toutes les longueurs d'ondes conduit à la formule

$$I_b(T) = \frac{\sigma T^4}{\pi} \tag{1.4.21}$$

avec $\sigma \sim 5,67 \times 10^{-8}\ W.m^{-2}.K^{-4}$ la constante de Stefan-Boltzmann.

La vitesse de propagation des ondes est de l'ordre de la vitesse de la lumière. Le rayonnement a donc un temps caractéristique très court par rapport à tous les autres phénomènes physiques rencontrés dans l'étude. Il n'est donc pas utile de garder la dérivée temporelle dans l'équation (1.4.19) et le rayonnement peut être approximé par un processus instantané. De plus, les expérimentations présentées au chapitre 3 ont montré que le taux de suie produit par la pyrolyse du pin sylvestre n'est pas très important. La flamme n'étant pas très fuligineuse, les termes de diffusion sont occultés de l'équation (1.4.19) ($\sigma_\lambda = 0$)

$$\mathbf{s}.\boldsymbol{\nabla} I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s}) = j_\lambda - a_\lambda I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s}) \tag{1.4.22}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{s}.\boldsymbol{\nabla} I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s}) = a_\lambda (I_{b\lambda}(T) - I_\lambda(\mathbf{x},\mathbf{s})) \tag{1.4.23}$$

Cette équation dépend de la longueur d'onde ce qui complique sa résolution puisque les propriétés des matériaux doivent être connues pour toutes les longueurs d'onde. Les calculs s'avèrent de plus très coûteux en temps. En faisant l'hypothèse que les gaz sont des corps gris (propriétés indépendantes de la longueur d'onde), l'équation précédente se simplifie

$$\mathbf{s}.\boldsymbol{\nabla} I(\mathbf{x},\mathbf{s}) = a\left(\frac{\sigma T^4}{\pi} - I(\mathbf{x},\mathbf{s})\right) \tag{1.4.24}$$

Cette équation est souvent utilisée par défaut dans les logiciels comme FDS [86] ou ISIS [87]. C'est aussi le cas du logiciel OpenFOAM [28].

Par définition, le flux radiatif vaut

$$\mathbf{q_r}(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I(\mathbf{x},\mathbf{s})\mathbf{s}\mathrm{d}\Omega \tag{1.4.25}$$

et le rayonnement incident vaut

$$G(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I(\mathbf{x},\mathbf{s})\mathrm{d}\Omega \tag{1.4.26}$$

En intégrant sur l'angle solide l'équation de transfert radiatif (1.4.24), il vient

$$\int_{4\pi} \mathbf{s}.\boldsymbol{\nabla} I(\mathbf{x},\mathbf{s})\mathrm{d}\Omega = a\left(\int_{4\pi} \frac{\sigma T^4}{\pi}\mathrm{d}\Omega - \int_{4\pi} I(\mathbf{x},\mathbf{s})\mathrm{d}\Omega\right) \tag{1.4.27}$$

Puisque $\mathbf{s}.\boldsymbol{\nabla} f = \boldsymbol{\nabla}.(f\mathbf{s})\ \forall f, \forall \mathbf{s}$ indépendant de $\mathbf{x}$, $\mathbf{s}.\nabla I(\mathbf{x},\mathbf{s}) = \nabla.(\mathbf{s}I(\mathbf{x},\mathbf{s}))$. L'opérateur divergence à l'intérieur de l'intégrale n'affecte que les variables d'espace. Or, la variable d'intégration correspond à l'angle solide de la direction du rayon. L'intégrale et la divergence peuvent donc être échangées dans l'équation (1.4.27). De plus, le dernier terme de l'équation correspond à la définition de G et *in fine*

$$\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_r} = a\left(4\sigma T^4 - G\right) \tag{1.4.28}$$

Lors des simulations numériques, une exception est appliquée à l'équation (1.4.28) lorsque la cellule traitée abrite une quantité de combustible et de comburant. Dans ce cas, l'énergie rayonnée est sous-estimée par la simulation numérique puisque la taille des mailles permet uniquement le calcul de

températures moyennes sur toute la maille, et non locales. Un maillage très fin serait ainsi nécessaire pour approcher localement des températures plus élevées. Or, l'énergie dégagée par rayonnement est proportionnelle à la puissance quatrième de la température. Une sous-estimation de la température pénalise donc fortement la simulation du rayonnement de la flamme. Afin de pallier ce problème numérique sans utiliser un maillage très fin, un terme empirique $E_{\phi,v}$ $(W.m^{-3})$ est ajouté dans le membre de droite de l'équation (1.4.28) correspondant à la fraction d'énergie de la flamme perdue par rayonnement

$$\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_r} = a\left(4\sigma T^4 - G\right) + E_{\phi,v} \tag{1.4.29}$$

Ce terme $E_{\phi,v}$ correspond à la puissance volumique dégagée par rayonnement évoquée dans le paragraphe 1.2.3. Ainsi

$$E_{\phi,v} = \chi_{rad}\dot{m}\frac{\Delta\mathscr{H}_c}{V_\phi} \tag{1.4.30}$$

avec $\chi_{rad} = 0,3$ d'après §1.2.3 et V_ϕ le volume sur lequel la réaction s'opère. Dans OpenFOAM, ce terme est ajouté au rayonnement émis par les gaz à la température sous-évaluée T ; il ne s'agit donc pas d'une simple substitution comme ce qui pourrait être attendu. Il s'avère de plus que le rayonnement des gaz estimé à partir de la température simulée n'est pas toujours négligeable devant le terme source ajouté. Par exemple, un cas numérique a mené à des températures de l'ordre de 1800 K, un coefficient d'absorption de l'ordre de 3 m^{-1} et une puissance de combustion pour une cellule de $E_\phi \sim 450$ W pour une fraction radiative de 30% et des cellules de 3 cm de côté. La puissance calculée uniquement à partir de la température simulée du gaz est

$$4a\sigma T^4 V \sim 200\ W \tag{1.4.31}$$

avec $V = 27\ cm^3$ le volume de la cellule. La puissance radiative émise par la cellule correspond donc dans ce cas à 650 W.

1.4.3.2 Conditions limites

Ce paragraphe discute des conditions limites qui concernent le flux radiatif à la paroi. Définissons d'abord l'émissivité monochromatique directionnelle ε'_λ d'un corps comme le rapport de la luminance spectrale de ce corps sur la luminance spectrale du corps s'il était noir

$$\varepsilon'_\lambda(\varphi, T) = \frac{I_\lambda(\varphi, T)}{I_{b,\lambda}(T)} \tag{1.4.32}$$

où φ est la direction du rayonnement. Ainsi, pour un corps noir, l'émissivité vaut 1. Définissons de même l'absorptivité monochromatique directionnelle α'_λ d'un corps comme le rapport de la luminance spectrale absorbée par le corps sur la luminance spectrale effectivement reçue

$$\alpha'_\lambda(\varphi, T) = \frac{I^{abs}_\lambda(\varphi, T)}{I_\lambda(\varphi, T)} \tag{1.4.33}$$

La loi de Kirchhoff permet de relier ces deux quantités. La luminance spectrale d'un corps en équilibre thermodynamique à la température T soumis à un rayonnement est égale au produit de l'absorptivité monochromatique directionnelle par la luminance spectrale du corps noir à la même température

$$I_\lambda(\varphi, T) = \alpha'_\lambda(\varphi, T) I_{b,\lambda}(T) \tag{1.4.34}$$

De cette loi découle la relation générale

$$\varepsilon'_\lambda(\varphi, T) = \alpha'_\lambda(\varphi, T) \tag{1.4.35}$$

En supposant maintenant que les parois sont des corps gris (leur rayonnement ne dépend pas de la longueur d'onde), la loi de Kirchhoff se simplifie et lie les absorptivités et émissivités totales directionnelles

$$\varepsilon'(\varphi, T) = \alpha'(\varphi, T) \tag{1.4.36}$$

En supposant que les parois sont en plus des corps lambertiens, alors ni l'émissivité, ni l'absorptivité ne vont dépendre de la direction du rayonnement. Dans ce cas, il y a égalité entre l'émissivité totale hémisphérique et l'absorptivité totale hémisphérique

$$\varepsilon(T) = \alpha(T) \tag{1.4.37}$$

En réalité, il est quasiment impossible d'obtenir l'émissivité des parois en fonction de la température. Les calculs seront donc réalisés avec une émissivité constante.

En résumé, beaucoup d'hypothèses sont nécessaires pour mettre en œuvre les conditions limites en rayonnement. Toutefois, puisque les parois des massifs rocheux possèdent une grande rugosité qui accentue fortement l'émissivité des parois calcaires, cette variable possède une valeur élevée, proche de 1. Ainsi, sa dépendance avec la température se réduit à des variations négligeables et la constance de l'émissivité est une hypothèse admissible. Les simulations de ce mémoire seront réalisées avec $\varepsilon = 0,95$.

Pour un corps gris, la luminance s'écrit donc

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \varepsilon I_b(T) = \frac{\varepsilon \sigma T^4(\mathbf{x})}{\pi} \tag{1.4.38}$$

Au niveau d'une surface, la luminance est la somme de la partie réfléchie et de la partie émise

$$I_w(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \underbrace{(1-\varepsilon) I_w(\mathbf{r}, -\mathbf{s})}_{\text{Réflexion}} + \underbrace{\frac{\varepsilon \sigma T^4}{\pi}}_{\text{Émission}} \tag{1.4.39}$$

1.5 Dynamique des fluides compressibles & Turbulence

La circulation des gaz dans la géométrie accueillant le feu représente la partie la plus importante de la résolution du problème. La dynamique des fluides compressibles est gouvernée par les équations de Navier-Stokes auxquelles des équations de convection-diffusion relatives aux espèces chimiques sont ajoutées pour décrire le transport des différents gaz. Le traitement de la turbulence est également nécessaire.

La théorie développée ci-après repose sur l'hypothèse des milieux continus. Il est donc supposé que la description des fluides peut se faire de manière continue. L'argumentation n'est donc pas valable au niveau microscopique où les propriétés sont discrètes mais à une échelle où les fluides paraissent continus.

1.5.1 Théorème de transport de Reynolds

Soit Ω un volume de contrôle limité par une surface fermée $\mathcal{S}$ de normale $\mathbf{n}$ et soit f une fonction continue et dérivable. Notons Ω_0 le volume de contrôle à l'instant initial. Par changement de variable

$$\int_\Omega f \, \mathrm{d}V = \int_{\Omega_0} f J \, \mathrm{d}V_0 \tag{1.5.1}$$

avec J le déterminant de la matrice Jacobienne de la transformation du volume V_0 en volume V $J = det \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}_0}$. La dérivation temporelle de l'équation précédente fournit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega f \, \mathrm{d}V = \int_{\Omega_0} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} J + \frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t} f \, \mathrm{d}V_0 \tag{1.5.2}$$

La dérivée temporelle peut rentrer sous le signe intégrale puisque le volume d'intégration est maintenant constant. La formule cinématique d'Euler $\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t} = J \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u}$ permet la substitution de la dérivée temporelle du Jacobien. Une preuve de cette formule se trouve à la page 83 de la référence [88]. Ainsi,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega f \, \mathrm{d}V = \int_{\Omega_0} \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} + f \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u} \right) J \mathrm{d}V_0 \tag{1.5.3}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega f\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} + f\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u}\right)\mathrm{d}V \tag{1.5.4}$$

ce qui constitue le théorème de transport de Reynolds. L'introduction de l'identité vectorielle

$$\boldsymbol{\nabla}.(f\mathbf{u}) = \boldsymbol{\nabla}f.\mathbf{u} + f\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u} \tag{1.5.5}$$

et de la relation

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}f.\mathbf{u} \tag{1.5.6}$$

dans le théorème de transport de Reynolds (1.5.4) donne

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega f\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(f\mathbf{u})\right)\mathrm{d}V \tag{1.5.7}$$

Ce théorème permet d'établir les équations de la mécanique des fluides en choisissant judicieusement la fonction f.

1.5.2 Equations de l'aérothermochimie instantanées

Les équations de l'aérothermochimie sont composées des équations de Navier-Stokes et des équations de conservation des espèces chimiques. Les équations de Navier-Stokes décrivent le comportement général des fluides. Elles peuvent représenter le mouvement de fluides variés comme les gaz et les liquides. Lorsque le fluide est incompressible, elles sont formées de deux équations basées sur la conservation de la masse et la conservation de la quantité de mouvement. Dès que le fluide devient compressible, ces deux principes ne suffisent plus puisque des variables dues à la compressibilité s'ajoutent. Le principe de conservation de l'énergie permet l'ajout d'une relation. Le système d'équations est complété par une relation entre les différentes variables appelée équation d'état.

Chacune des équations évoquées devrait *a priori* être multipliée par le nombre d'espèces chimiques puisque chaque gaz possède des propriétés différentes des autres. Néanmoins, la résolution numérique d'un problème mathématique de ce type s'avère très coûteux en temps de calcul. À la place, les simulations numériques reposent habituellement sur l'hypothèse que toutes les espèces chimiques sont parfaitement mélangées [86]. Ainsi, même si la résolution tient compte de la proportion de chaque espèce dans le mélange global, les équations de Navier-Stokes portent sur des variables moyennes caractéristiques du mélange. Cela se traduit par l'utilisation de la masse volumique globale ρ plutôt que des masses volumiques de chaque espèce ρ_k ; il en va de même pour la vitesse $\mathbf{u}$, la pression p, etc. L'objectif de cette approche consiste à limiter le nombre d'équations tout en conservant une représentation convenable de la réalité.

1.5.2.1 Conservation de la masse

La fonction f est remplacée par la masse volumique ρ dans l'équation (1.5.7)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \rho\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho\mathbf{u})\right)\mathrm{d}V \tag{1.5.8}$$

L'intégrale du membre de gauche correspond à la masse. Celle-ci étant conservée pendant le mouvement, sa dérivée temporelle est nulle. Ceci étant vrai pour tout volume Ω, l'équation de conservation de la masse s'écrit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho\mathbf{u}) = 0 \tag{1.5.9}$$

1.5.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

La fonction f est remplacée par ρu_i avec $i = 1, 2, 3$ selon la direction considérée dans l'équation (1.5.7)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \rho u_i\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho u_i\mathbf{u})\right)\mathrm{d}V \tag{1.5.10}$$

La mise sous forme vectorielle laisse apparaître l'équation

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \rho\mathbf{u}\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})\right)\,\mathrm{d}V \tag{1.5.11}$$

en notant $\otimes$ le produit tensoriel. Le terme $\int_\Omega \rho\mathbf{u}\,\mathrm{d}V$ correspond à la quantité de mouvement. Par le principe fondamental de la dynamique (deuxième loi de Newton), la dérivée temporelle de la quantité de mouvement est égale à la somme des forces extérieures. En mécanique des milieux continus, deux types de forces sont distinguées. Le premier type correspond aux efforts appliqués par des matériaux extérieurs (généralement réduit à la pesanteur). Le second type correspond aux efforts exercés par les molécules du matériau situé en dehors du domaine considéré. Ces forces d'origine moléculaires décroissent rapidement avec la distance ($\propto d^{-8}$), si bien qu'il est possible de les supposer ponctuelles dans l'étude macroscopique. Ces forces vont donc s'appliquer sur la surface délimitant le volume de fluide considéré. Notons qu'à l'intérieur du domaine fluide, ces efforts existent mais s'annulent par le principe des actions réciproques (troisième loi de Newton). Les efforts s'exerçant sur le fluide s'écrivent donc

$$\int_{\partial\Omega}\mathbf{T}(\mathbf{n},\mathbf{x},t)\,\mathrm{d}S + \int_\Omega \mathbf{F}(\mathbf{x},t)\,\mathrm{d}V \tag{1.5.12}$$

où $\mathbf{n}$ est la normale à la surface , $\mathbf{T}$ est la contrainte locale et $\mathbf{F}$ est la somme des forces extérieures. Il est possible de démontrer que ce vecteur $\mathbf{T}$ peut se mettre sous la forme

$$\mathbf{T}(\mathbf{n},\mathbf{x},t) = \overline{\overline{\sigma}}(\mathbf{x},t).\mathbf{n} \tag{1.5.13}$$

$\overline{\overline{\sigma}}$ est appelé tenseur des contraintes. Ce tenseur contient l'information concernant les contraintes (efforts intérieurs) s'exerçant dans le fluide. L'expression du vecteur $\mathbf{T}$ permet l'application du théorème de Green-Ostrogradski

$$\int_{\partial\Omega}\mathbf{T}(\mathbf{n},\mathbf{x},t)\,\mathrm{d}S = \int_{\partial\Omega}\overline{\overline{\sigma}}(\mathbf{x},t).\mathbf{n}\,\mathrm{d}S = \int_\Omega \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\sigma}}(\mathbf{x},t)\,\mathrm{d}V \tag{1.5.14}$$

L'introduction du terme d'accélération

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \rho\mathbf{u}\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\sigma}}(\mathbf{x},t) + \mathbf{F}(\mathbf{x},t)\,\mathrm{d}V \tag{1.5.15}$$

dans l'équation (1.5.11) fournit

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}) = \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\sigma}} + \mathbf{F} \tag{1.5.16}$$

Il est enfin d'usage de décomposer le tenseur des contraintes en deux contributions

$$\overline{\overline{\sigma}} = -p\overline{\overline{I}} + \overline{\overline{\tau}} \tag{1.5.17}$$

où p désigne la pression au sein du fluide, $\overline{\overline{I}}$ le tenseur identité et $\overline{\overline{\tau}}$ le tenseur des contraintes visqueuses. Le fluide est dit newtonien lorsque la contrainte de cisaillement est proportionnelle à la vitesse de déformation

$$\tau = \mu\frac{\partial u}{\partial y} \tag{1.5.18}$$

avec $\mathbf{y}$ la direction normale à la direction du cisaillement et μ la viscosité dynamique qui joue le rôle d'un coefficient de proportionnalité. En d'autres termes, cela signifie que la viscosité du fluide ne dépend pas des forces agissant sur celui-ci. Le comportement du fluide sera donc le même quel que soit l'effort appliqué. La plupart des gaz ainsi que l'eau sont des exemples de fluides newtoniens. Au contraire, des sables mouvants peuvent devenir liquides lorsqu'ils sont soumis à des vibrations. Leur viscosité va donc être modifiée selon le mouvement ; ce sont donc des fluides non newtoniens. Dans ce mémoire, les gaz sont considérés newtoniens (très proche de la réalité). Pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses est donné par

$$\overline{\overline{\tau}} = \mu(\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u}}} + {}^t\,\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u}}}) + \Lambda\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u}\;\overline{\overline{I}} \tag{1.5.19}$$

avec μ la viscosité dynamique et Λ la seconde viscosité. En supposant l'hypothèse de Stokes valide pour les fluides rencontrés, les deux viscosités sont reliées par $\Lambda = -\frac{2}{3}\mu$. L'équation de quantité de mouvement est ainsi

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\tau}} + \mathbf{F} \tag{1.5.20}$$

La viscosité dynamique dépend de l'espèce, de la température et de la pression. En pratique, la loi de Sutherland [89] modélise souvent dans les simulations la variation de la viscosité pour une espèce donnée en fonction de la température. Cette loi s'écrit

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \frac{T_0 + C}{T + C} \tag{1.5.21}$$

avec $\mu_0 = \mu(T_0)$ la viscosité du fluide considéré à la température T_0 et C un coefficient dépendant de l'espèce considérée. L'hypothèse des fluides parfaitement mélangés permet d'écrire $\mu = \sum_{k=1}^{N} X_k \mu_k$ en posant

$$X_k = \frac{n_k}{n_{totale}} \tag{1.5.22}$$

la fraction molaire de l'espèce k.

1.5.2.3 Conservation de l'énergie

Notons $\mathscr{H}_t = \mathscr{H} + \frac{1}{2}u^2$ l'enthalpie totale massique et $\mathscr{U}_t = \mathscr{U} + \frac{1}{2}u^2$ l'énergie interne totale massique. Ces deux grandeurs sont reliées par

$$\rho \mathscr{H}_t = \rho \mathscr{U}_t + p \tag{1.5.23}$$

L'application du théorème de transport de Reynolds (1.5.7) à la quantité $\rho \mathscr{H}_t$ donne

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega \rho \mathscr{H}_t \, \mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\partial \rho \mathscr{H}_t}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \mathscr{H}_t \mathbf{u}) \right) \mathrm{d}V \tag{1.5.24}$$

Le premier terme, grâce à la relation (1.5.23), se réécrit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega \rho \mathscr{H}_t \, \mathrm{d}V = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega \rho \mathscr{U}_t \, \mathrm{d}V + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega p \, \mathrm{d}V \tag{1.5.25}$$

En vertu du premier principe de la thermodynamique,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega \rho \mathscr{U}_t \, \mathrm{d}V = \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} \tag{1.5.26}$$

où W est le travail développé par les forces volumiques et les contraintes appliquées à la surface du volume et Q est la chaleur. La dérivée temporelle du travail s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} = \int_\Omega \mathbf{F}.\mathbf{u} \, \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega} \mathbf{T}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t).\mathbf{u} \, \mathrm{d}S \tag{1.5.27}$$

L'expression de la contrainte locale et la loi de comportement du fluide supposé newtonien permettent le remplacement de $\mathbf{T}$

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} = \int_\Omega \mathbf{F}.\mathbf{u} \, \mathrm{d}V + \int_\Omega \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\overline{\sigma}}.\mathbf{u}) \, \mathrm{d}V = \int_\Omega \mathbf{F}.\mathbf{u} \, \mathrm{d}V + \int_\Omega \left[-\boldsymbol{\nabla}.(p\mathbf{u}) + \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\overline{\tau}}.\mathbf{u}) \right] \mathrm{d}V \tag{1.5.28}$$

La dérivée temporelle de la chaleur se décompose aussi en deux termes : un terme volumique représenté par une densité volumique de sources distribuées S_ϕ et un terme surfacique définie par un flux $\mathbf{q}$ représentant le flux de chaleur perdu ou gagné par le système

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} = \int_\Omega S_\phi \, \mathrm{d}V + \int_{\partial\Omega} \mathbf{q}.\mathbf{n} \, \mathrm{d}S = \int_\Omega \left[S_\phi + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q} \right] \mathrm{d}V \tag{1.5.29}$$

En unifiant les précédentes équations

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \rho\mathscr{H}_t\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \mathbf{F}.\mathbf{u}\,\mathrm{d}V + \int_\Omega \left[-\boldsymbol{\nabla}.(p\mathbf{u}) + \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\overline{\tau}}.\mathbf{u})\right]\,\mathrm{d}V + \int_\Omega \left[S_\phi + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q}\right]\,\mathrm{d}V + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega p\,\mathrm{d}V \quad (1.5.30)$$

Appliquons enfin le théorème de transport (1.5.7) à la pression p

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega p\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(p\mathbf{u})\right)\,\mathrm{d}V \quad (1.5.31)$$

En réinjectant cette formule dans l'équation (1.5.30), il vient

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \rho\mathscr{H}_t\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left[\mathbf{F}.\mathbf{u} + \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\overline{\tau}}.\mathbf{u}) + S_\phi + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q} + \frac{\partial p}{\partial t}\right]\,\mathrm{d}V \quad (1.5.32)$$

L'application de la relation (1.5.24) fournit l'équation de conservation d'énergie

$$\frac{\partial \rho\mathscr{H}_t}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho\mathbf{u}\mathscr{H}_t) = \frac{\partial p}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\overline{\tau}}\mathbf{u}) + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q} + \mathbf{F}.\mathbf{u} + S_\phi \quad (1.5.33)$$

Il reste encore à spécifier le flux de chaleur $\mathbf{q}$. Ce flux s'écrit de manière générale

$$\mathbf{q} = \underbrace{-\lambda\boldsymbol{\nabla}T}_{\text{Conduction}} + \underbrace{\rho\sum_{k=1}^{N}\mathscr{H}_k Y_k \mathbf{V}_k}_{\text{Diffusion moléculaire}} + \underbrace{p\sum_{k=1}^{N}\lambda_k^R \mathbf{V}_k}_{\text{Effet Dufour}} + \underbrace{\mathbf{q_r}}_{\text{Rayonnement}} \quad (1.5.34)$$

avec $\lambda = \sum_{k=1}^{N} X_k\lambda_k$, $\mathscr{H}_k$ l'enthalpie massique de l'espèce k, $\mathbf{V}_k$ la vitesse de diffusion de l'espèce k et λ_k^R le rapport de diffusion thermique de l'espèce k. Les conductivités thermiques de chaque espèce k sont calculées par la formule d'Eucken [90]

$$\lambda_k = \mu_k c_{v,k}\left(1,32 + 1,77\frac{R}{c_{v,k}}\right) \quad (1.5.35)$$

avec $R \sim 8,314\ J.mol^{-1}.K^{-1}$ la constante des gaz parfaits. Les capacités thermiques massiques à volume constant de chaque espèce k sont calculées par des approximations polynomiales (Janaf [91]). L'effet Dufour, correspondant à la diffusion de l'énergie causée par des gradients de concentrations massiques, est généralement négligé dans l'équation (1.5.34). La loi de Fick [92] permet de reformuler la contribution relative à la diffusion moléculaire

$$Y_k\mathbf{V}_k = -\mathscr{D}_k\boldsymbol{\nabla}Y_k \quad (1.5.36)$$

où $\mathscr{D}_k$ est le coefficient de diffusion massique de l'espèce k en $m^2.s^{-1}$ dans le milieu. L'enthalpie massique du mélange est donnée par $\mathscr{H} = \sum_{k=1}^{N} Y_k\mathscr{H}_k$. La dérivée spatiale vaut donc

$$\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\mathscr{H}_k + Y_k\frac{\partial\mathscr{H}_k}{\partial x_i}\right) = \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\mathscr{H}_k + Y_k\frac{\partial c_{p,k}T}{\partial x_i}\right) \quad (1.5.37)$$

En supposant $\sum_{k=1}^{N} Y_k\frac{\partial c_{p,k}T}{\partial x_i} \approx c_p\frac{\partial T}{\partial x_i}$ avec $c_p = \sum_{k=1}^{N} Y_k c_{p,k}$,

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{1}{c_p}\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial x_i} - \frac{1}{c_p}\sum_{k=1}^{N}\frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\mathscr{H}_k \quad (1.5.38)$$

En réinjectant cette expression dans (1.5.34) à la place du gradient de température, il vient

$$q_i = -\frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\lambda}{c_p} - \rho\mathscr{D}_k\right)\mathscr{H}_k\frac{\partial Y_k}{\partial x_i} + q_{ri} \quad (1.5.39)$$

$$\Leftrightarrow q_i = -\frac{\lambda}{c_p}\left[\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\rho\mathscr{D}_k c_p}{\lambda} - 1\right)\frac{\partial Y_k}{\partial x_i}\mathscr{H}_k\right] + q_{ri} \quad (1.5.40)$$

Le nombre de Lewis de l'espèce k est défini par

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p \mathscr{D}_k} \tag{1.5.41}$$

Le flux de chaleur se réécrit donc

$$\mathbf{q} = -\frac{\lambda}{c_p}\left[\boldsymbol{\nabla}\mathscr{H} + \sum_{k=1}^{N}(\frac{1}{Le_k} - 1)\mathscr{H}_k \boldsymbol{\nabla} Y_k\right] + \mathbf{q_r} \tag{1.5.42}$$

L'hypothèse d'un nombre de Lewis égal à 1 pour toutes les espèces est généralement appliquée au calcul du flux pour des problèmes de combustion [93], [86]. En théorie, cette hypothèse n'est pas justifiée exactement pour toutes les espèces mais il est difficile d'obtenir la valeur du coefficient de diffusion de masse. Cette hypothèse permet aussi de simplifier l'équation d'énergie puisqu'une partie du flux disparait

$$\mathbf{q} = -\frac{\lambda}{c_p}\boldsymbol{\nabla}\mathscr{H} + \mathbf{q_r} \tag{1.5.43}$$

L'expression du flux (1.5.43) repose sur beaucoup d'hypothèses sur lesquelles sont basées les codes généralistes de simulation de feux comme FDS [86] ou FireFOAM [29] :

- L'effet Dufour est négligé
- Le nombre de Lewis est égal à 1
- Les capacités thermiques sont constantes

Ces fortes hypothèses sont supposées ne pas influencer le résultat final car la partie conductive du flux (1.5.43) est relativement négligeable devant les phénomènes produits par la turbulence.

1.5.2.4 Conservation des espèces chimiques

La fonction f est remplacée par la masse volumique de l'espèce k, $\rho_k = Y_k\rho$, dans l'équation de transport (1.5.7)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega Y_k\rho\,\mathrm{d}V = \int_\Omega \left(\frac{\partial Y_k\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(Y_k\rho\mathbf{u})\right)\mathrm{d}V \tag{1.5.44}$$

L'intégrale dans le terme de gauche correspond à la masse de l'espèce k. Le membre de gauche correspond donc au débit de l'espèce k. La variation temporelle de la masse de l'espèce k dans le volume V peut être due d'une part à la diffusion des molécules correspondant à un flux de matière traversant la surface enveloppant le volume considéré, et d'autre part à une production ou une disparition de l'espèce causée par une réaction chimique. Ainsi,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega Y_k\rho\,\mathrm{d}V = -\int_{\partial\Omega}\mathscr{J}_k\,\mathrm{d}S + \int_\Omega \dot{\omega}_k\,\mathrm{d}V \tag{1.5.45}$$

avec $\mathscr{J}_k$ le flux massique de l'espèce k en $kg.m^{-2}.s^{-1}$ qui correspond à la diffusion de l'espèce k dans le milieu (le signe "moins" est arbitraire) et $\dot{\omega}_k$ le taux de production de l'espèce k en $kg.m^{-3}.s^{-1}$. Le théorème de Green-Ostrogradski est appliqué au flux de la même manière que pour les autres équations. Cela donne

$$\frac{\partial\rho Y_k}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho\mathbf{u}Y_k) = -\boldsymbol{\nabla}.\mathscr{J}_k + \dot{\omega}_k \tag{1.5.46}$$

Il reste à exprimer les deux termes de droite. Concernant le flux massique, la loi de Fick est à nouveau utilisée sous la forme

$$\mathscr{J}_k = -\rho\mathscr{D}_k\boldsymbol{\nabla}Y_k \tag{1.5.47}$$

Afin de rester cohérent avec l'hypothèse de mélange parfait, un unique coefficient de diffusion massique $\mathscr{D}$ pour le mélange est utilisé. De plus, celui-ci est égal au coefficient de diffusion thermique du mélange par hypothèse sur le nombre de Lewis égal à 1

$$\mathscr{D} = \kappa \tag{1.5.48}$$

Notons ici qu'en réalité, la loi de Fick ne représente pas complètement les différents processus de diffusion puisque l'effet Soret (thermophorèse) correspondant au déplacement de matière dû à un gradient de température est par exemple négligé. Ce mécanisme est cependant prépondérant lors de la déposition de suie sur les parois. Il est donc détaillé dans le paragraphe correspondant (§2.1.4).

Le taux de production de l'espèce k peut être calculé à partir de la loi d'Arrhenius modifiée (1.2.20)

$$\dot{\omega_k} = -A\rho^2 T^b Y_F Y_O e^{-\frac{E_a}{RT}} \tag{1.5.49}$$

avec Y_F la fraction massique de combustible et Y_O la fraction massique d'oxydant.

1.5.2.5 Système d'équations

Le système d'équations se présente donc sous la forme

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\tau}} + \mathbf{F} \\ \frac{\partial \rho \mathscr{H}_t}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \mathbf{u} \mathscr{H}_t) = \frac{\partial p}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\overline{\tau}}.\mathbf{u}) + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q} + \mathbf{F}.\mathbf{u} + S_\phi \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \mathbf{u} Y_k) = -\boldsymbol{\nabla}.\mathscr{J}_k + \dot{\omega_k} \end{cases} \tag{1.5.50}$$

Ce système d'équations n'est pas fermé puisqu'il y a $4 + N$ variables $(p, \rho, \mathscr{H}_t, \mathbf{u}, Y_{k,1 \leq k \leq N})$ pour $3 + N$ équations (dont une vectorielle). Il faut rajouter une autre équation pour pouvoir résoudre le problème. L'équation d'état des gaz parfaits est majoritairement utilisée car cette équation est valable tant que la pression n'est pas trop forte. Or, la géométrie ouverte sur l'extérieur laisse place à une combustion quasiment isobare et les variations de température sont compensées par les variations de masse volumique.

L'équation d'état des gaz parfaits s'écrit

$$\frac{p}{\rho} = \mathscr{r} T \tag{1.5.51}$$

avec $\mathscr{r} = \frac{R}{M}$ la constante spécifique des gaz parfaits où R est la constante universelle des gaz parfaits et M est la masse molaire du mélange $(kg.mol^{-1})$. La température est directement reliée à l'enthalpie $\mathscr{H}$ par le biais de la décomposition polynomiale de la capacité thermique à pression constante (modèle de Janaf [91]) et la définition

$$c_p = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial T}\Big)_p \tag{1.5.52}$$

1.5.3 La turbulence et sa modélisation

La turbulence est un régime d'écoulement caractérisé par un comportement chaotique dû à des irrégularités à l'intérieur du fluide. Ces irrégularités sont des tourbillons de plus ou moins grandes tailles. Les tourbillons plus grands se divisent en plusieurs tourbillons plus petits. Ce processus permet de transférer l'énergie cinétique du fluide des gros tourbillons jusqu'aux plus petits. Ce phénomène s'appelle cascade d'énergie. La turbulence se manifeste pour des vitesses élevées par rapport aux forces visqueuses. C'est ce qu'exprime le nombre de Reynolds qui a été évoqué dans la partie 1.4.2

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \tag{1.5.53}$$

Pour des nombres de Reynolds supérieurs à une certaine valeur (dépendant de la géométrie du problème), la viscosité joue un rôle négligeable et l'énergie n'est donc pas dissipée par viscosité à l'échelle macroscopique. Au sein du fluide, se créent alors des tourbillons qui par le phénomène de cascade, deviennent de plus en plus petits jusqu'à ce que le nombre de Reynolds s'approche de 1 (puisque L diminue avec la taille des tourbillons). L'écoulement devient alors visqueux pour cette longueur $L \approx \frac{\mu}{\rho u}$ (dimension de Kolmogorov). Il s'agit de la taille des plus petits tourbillons car les forces de viscosité dissipent totalement l'énergie à cette échelle.

Ce phénomène se traduit mathématiquement par l'instabilité des solutions pour des grands nombres de Reynolds. Pour des nombres de Reynolds faibles, en régime laminaire, les solutions obtenues sont mathématiquement stables et sont donc obtenues en résolvant simplement le système d'équation. En régime turbulent, les équations sont toujours valables mais il faudrait les résoudre sur un maillage très fin possédant des mailles dont la taille est inférieure à la dimension de Kolmogorov afin de capturer l'ensemble des phénomènes. Par exemple, pour de l'air à 25^oC, sous une vitesse de $1\ m.s^{-1}$, la dimension de Kolmogorov vaut $L \approx 15\ \mu m$. Pour mailler un simple cube d'un mètre de côté, il faudrait $\left(\frac{1}{15.10^{-6}}\right)^3 \approx 3.10^{14}$ cellules. Cela demanderait un temps de calcul colossal qui est hors d'atteinte à l'heure actuelle. Ce type d'approche s'appelle DNS (direct numerical simulation). Elle est employée pour des petites géométries et lorsqu'une grande précision est nécessaire.

Les équations de l'aérothermochimie ne peuvent donc pas être résolues directement car la géométrie des sites est bien trop grande.

1.5.3.1 Equation de Reynolds

Dans un souci de compréhension, le cas d'un fluide incompressible est d'abord étudié ($\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{u} = 0$). La masse volumique est donc constante en fonction du temps et indépendante de la température et de la pression. Cela permet de découpler le problème initial et de ne garder que les équations de conservation de masse et de quantité de mouvement car l'équation d'énergie devient l'équation de la chaleur portant uniquement sur la température. Les variables intervenant dans le système des deux équations (dont une vectorielle) ne sont plus qu'au nombre de deux : la vitesse $\mathbf{u}$ et la pression p.

Supposons que nous réalisions N fois la même expérience. Pour chaque expérience, la valeur d'une quantité ϕ est notée au même instant et au même endroit. La moyenne de Reynolds est alors définie par

$$\overline{\phi(\mathbf{x},t)} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \phi(\mathbf{x},t) \tag{1.5.54}$$

L'idée de la décomposition de Reynolds est de décomposer chaque variable en la somme de la moyenne (1.5.54) et de l'écart à cette moyenne

$$\phi(\mathbf{x},t) = \overline{\phi(\mathbf{x},t)} + \phi'(\mathbf{x},t) \tag{1.5.55}$$

La moyenne des perturbations est nulle $\overline{\phi'(\mathbf{x},t)} = 0$. Par linéarité de l'intégrale, la moyenne de Reynolds est aussi linéaire

$$\overline{f+g} = \overline{f} + \overline{g} \tag{1.5.56}$$

Ainsi, en injectant la décomposition de Reynolds (1.5.55) dans le système d'équations (1.5.50), en tenant compte de l'incompressibilité du fluide, et en prenant la moyenne de Reynolds de ces équations, il vient les équations RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes)

$$\begin{cases} \boldsymbol{\nabla}.\overline{\mathbf{u}} = 0 \\ \rho\frac{\partial\overline{\mathbf{u}}}{\partial t} + \rho\boldsymbol{\nabla}.(\overline{\mathbf{u}}\otimes\overline{\mathbf{u}}) = -\boldsymbol{\nabla}\overline{p} + \mu\triangle\overline{\mathbf{u}} - \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\tau^R}} + \overline{\mathbf{F}} \end{cases} \tag{1.5.57}$$

avec

$$\overline{\overline{\tau^R}} = \rho\overline{\mathbf{u}'}\otimes\overline{\mathbf{u}'} \tag{1.5.58}$$

le tenseur de Reynolds. Outre le tenseur de Reynolds, les équations RANS ne sont constituées que des variables moyennes et leur résolution est donc beaucoup plus simple. Les différents modèles de turbulence visent à modéliser le tenseur de Reynolds pour fermer le système d'équations dont les variables sont $\overline{\mathbf{u}}$ et $\overline{p}$. Une classe de modélisation (modèle du premier ordre) du tenseur de Reynolds consiste à adopter l'approximation de Boussinesq

$$\tau_{ij}^R = -\mu_t\left(\frac{\partial\overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u_j}}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}\mu_t\frac{\partial\overline{u_k}}{\partial x_k}\delta_{ij} + \frac{2}{3}\rho k\delta_{ij} \tag{1.5.59}$$

avec $k = \frac{1}{2}\sum \overline{u_i' u_i'}$ l'énergie cinétique de turbulence, δ le symbole de Kronecker et μ_t la viscosité dynamique turbulente. Cette formulation du tenseur de Reynolds rappelle celle de la contrainte visqueuse d'un fluide newtonien

$$\tau_{ij} = -\mu\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}\mu\frac{\partial \overline{u_k}}{\partial x_k}\delta_{ij} \tag{1.5.60}$$

Néanmoins, un terme représentant l'énergie cinétique de turbulence est ajouté au tenseur de Reynolds par rapport à la contrainte visqueuse, sans quoi cette énergie serait nulle pour un fluide incompressible. Le deuxième terme du second membre représente la divergence de la vitesse. Il est donc nul puisque le fluide est considéré incompressible. Les modèles du premier ordre visent donc à modéliser la viscosité turbulente et l'énergie cinétique turbulente. Il existe différentes possibilités classées selon le nombre d'équations résolues (0 équation avec la longueur de mélange, 1 équation sur l'énergie cinétique turbulente, 2 équations $k-\epsilon$, $k-\omega$, $k-l$ etc). La modélisation choisie est présentée au paragraphe 1.5.3.5.

L'équation de conservation de quantité de mouvement devient ainsi

$$\rho\frac{\partial \overline{\mathbf{u}}}{\partial t} + \rho\boldsymbol{\nabla}.(\overline{\mathbf{u}}\otimes\overline{\mathbf{u}}) = -\boldsymbol{\nabla}\left(\overline{p} + \frac{2}{3}\rho k\right) + (\mu+\mu_t)\boldsymbol{\Delta}\overline{\mathbf{u}} + \overline{\mathbf{F}} \tag{1.5.61}$$

La forme des équations n'a pas donc changé.

Cette méthode présente l'avantage de réduire les temps de calculs par rapport à l'approche DNS puisqu'un maillage plus grossier peut être employé. Néanmoins, seuls les champs moyens sont résolus tandis que le reste de l'écoulement est modélisé. Ainsi, lorsque les structures modélisées jouent un rôle important dans la dynamique de l'écoulement, la méthode RANS souffre d'imprécisions. Les simulations numériques de combustion sont donc de plus en plus basées sur une troisième approche, appelée LES (Large Eddy Simulation), qui constitue un compromis entre l'approche DNS très coûteuse en temps et l'approche RANS qui contient une part très importante de modélisation.

1.5.3.2 LES

L'acronyme LES (Large Eddy Simulation) désigne un type de simulation basée sur la résolution des tourbillons "assez grands" et la modélisation des plus petits tourbillons. Ces simulations résolvent davantage de structures que les simulations RANS du paragraphe précédent puisque celles-ci demandent la modélisation de l'ensemble des structures tourbillonnaires. Ainsi, le fluide n'est pas totalement décrit mais seulement la partie la plus énergétique. Les tourbillons les plus petits sont modélisés par un modèle de turbulence. Cet outil permet la réduction du temps de calcul par rapport à la DNS tout en conservant une précision supérieure aux méthodes statistiques. La figure 1.16 résume les méthodes de résolution de la turbulence. $\overline{\Delta}$ est une longueur caractéristique de la coupure.

Mathématiquement, les étapes de mise en équation sont similaires aux équations RANS du paragraphe précédent. Les champs sont décomposés en une partie filtrée et une partie représentant les petites échelles

$$\phi(\mathbf{x},t) = \overline{\phi(\mathbf{x},t)} + \phi'(\mathbf{x},t) \tag{1.5.62}$$

avec cette fois la partie filtrée valant

$$\overline{\phi(\mathbf{x},t)} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t')\phi(\mathbf{x}',t')\,\mathrm{d}\mathbf{x}'\mathrm{d}t' \tag{1.5.63}$$

où $\mathcal{G}$ est un filtre normalisé (dont l'intégrale sur l'espace vaut 1)

$$\iiint G(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t')\,\mathrm{d}\mathbf{x}'\mathrm{d}t' = 1 \tag{1.5.64}$$

Cette normalisation assure que le filtrage d'une constante C fournit bien $\overline{C} = C$. Au sens mathématique, cette partie filtrée est un produit de convolution $\overline{\phi} = \mathcal{G} * \phi$. Remarquons cette fois que $\overline{\phi'} \neq 0$ car $\overline{\phi} \neq \overline{\overline{\phi}}$. L'un des filtres les plus simples est appelé filtre boîte

$$\mathcal{G}_{Box}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{\overline{\Delta}^3} & \text{si } \mid \mathbf{x}-\mathbf{x}' \mid \leq \frac{\overline{\Delta}}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{1.5.65}$$

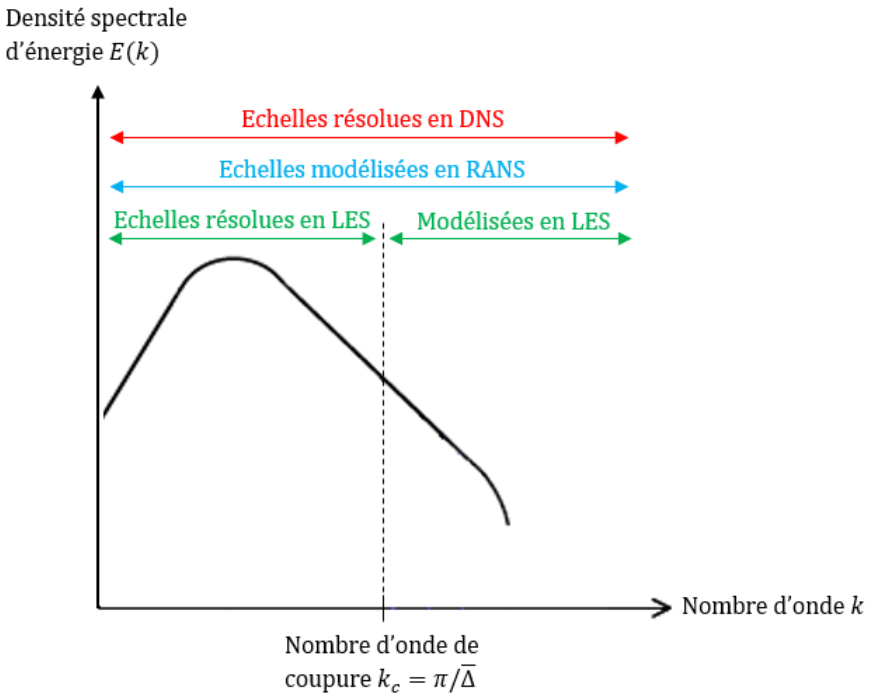

Figure 1.16 – Comparaison des approches de résolution de la turbulence.

avec $\overline{\Delta} = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$ où chaque paramètre correspond à la discrétisation du maillage dans chaque direction. Il existe aussi des filtres plus compliqués comme le filtre gaussien

$$\mathscr{G}_{Gauss}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \left(\frac{6}{\pi\overline{\Delta}^2}\right)\exp\left(-\frac{6}{\overline{\Delta}^2}|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2\right) \tag{1.5.66}$$

Les simulations présentées dans ce mémoire utilisent le filtre boîte.

Les équations LES sont un peu différentes des équations (1.5.57). En procédant de la même manière que pour les équations RANS, il vient

$$\begin{cases} \boldsymbol{\nabla}.\overline{\mathbf{u}} = 0 \\ \rho\frac{\partial\overline{\mathbf{u}}}{\partial t} + \rho\boldsymbol{\nabla}.(\overline{\mathbf{u}}\otimes\overline{\mathbf{u}}) = -\boldsymbol{\nabla}\overline{p} + \mu\boldsymbol{\Delta}\overline{\mathbf{u}} - \rho\boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\tau^{sm}}} + \overline{F} \end{cases} \tag{1.5.67}$$

avec

$$\overline{\overline{\tau^{sm}}} = \overline{\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}} - \overline{\mathbf{u}}\otimes\overline{\mathbf{u}} \tag{1.5.68}$$

le tenseur de sous-maille. Comme pour les équations RANS, le tenseur doit être modélisé pour fermer le système d'équations. Une fois encore, divers modèles de turbulence existent. En utilisant la même hypothèse que dans la partie précédente sur l'existence d'une viscosité de sous-maille (Boussinesq), il vient

$$\tau_{ij}^{sm} = -2\nu_{sm}\overline{S_{ij}} + \frac{2}{3}\nu_{sm}\overline{S_{kk}}\delta_{ij} + \frac{1}{3}\tau_{kk}^{sm}\delta_{ij} \tag{1.5.69}$$

avec ν_{sm} la viscosité cinématique de sous-maille et

$$\overline{S_{ij}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u_j}}{\partial x_i}\right) \tag{1.5.70}$$

De la même manière, le deuxième terme correspond à la divergence de la vitesse qui disparait en incompressible. Le terme $e^{sm} = \frac{1}{2}\tau_{kk}^{sm}$ correspond à l'énergie cinétique de sous-maille. Ce terme sera incorporé dans le terme de gradient de pression. La pression modifiée sera donc différente de la pression si l'énergie de sous-maille est importante. L'équation de conservation de quantité de mouvement devient donc :

$$\rho\frac{\partial\overline{u_i}}{\partial t} + \rho\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u_i}\overline{u_j}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{p} + \frac{1}{3}\rho\tau_{kk}\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(2(\mu+\mu_{sm})\overline{S_{ij}}\right) + \overline{F} \tag{1.5.71}$$

Le plus ancien modèle LES est le modèle de Smagorinsky qui consiste à poser

$$\nu_{sm} = (C_s\overline{\Delta})^2\sqrt{2\overline{S_{ij}S_{ij}}} \tag{1.5.72}$$

avec C_s une constante dont la valeur est basée sur l'expérience et $\overline{\Delta}$ l'épaisseur du filtre. Ce modèle n'est pas capable de reproduire le comportement asymptotique proche des parois.

1.5.3.3 Moyenne de Favre

Revenons maintenant au cas du fluide compressible. La masse volumique n'est plus constante. Voyons ce que nous donne l'équation de conservation de la masse (1.6.4.2) dans le cas des moyennes de Reynolds

$$\begin{cases} \overline{\frac{\partial\rho}{\partial t}} = \frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} \\ \overline{\frac{\partial\rho u_i}{\partial x_i}} = \frac{\partial\overline{\rho u_i}}{\partial x_i} \end{cases} \tag{1.5.73}$$

Or, par définition des moyennes de Reynolds, $\rho = \overline{\rho} + \rho'$ et $u_i = \overline{u_i} + u_i'$. Donc

$$\rho u_i = \overline{\rho}\ \overline{u_i} + \overline{\rho}u_i' + \rho'\overline{u_i} + \rho' u_i' \tag{1.5.74}$$

Ainsi, en prenant la moyenne de Reynolds de ρu_i, les moyennes des fluctuations vont s'annuler

$$\overline{\rho u_i} = \overline{\rho}\ \overline{u_i} + \overline{\rho' u_i'} \tag{1.5.75}$$

Au final, l'équation de conservation de la masse s'écrit

$$\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\ \overline{u_i}}{\partial x_i} + \frac{\partial\overline{\rho' u_i'}}{\partial x_i} = 0 \tag{1.5.76}$$

Un terme parasite apparait dans l'équation (1.5.76). Remarquons que dans le cas incompressible, $\rho' = 0$ et l'équation de la conservation de la masse fournit bien $\boldsymbol{\nabla}.\overline{\mathbf{u}} = 0$. Mais dans le cas compressible, il faudrait modéliser le terme supplémentaire $\overline{\rho' u_i'}$. Les autres équations rencontrent le même problème et d'autres termes s'ajoutent. Au final, les moyennes de Reynolds ne sont pas idoines pour un fluide compressible. Favre a donc introduit les moyennes qui portent son nom pour pallier ce problème

$$\begin{aligned} Q &= \widetilde{Q} + Q'' \\ \widetilde{Q} &= \frac{\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}} \end{aligned} \tag{1.5.77}$$

La moyenne de Favre reposant sur la moyenne de Reynolds, les propriétés sont similaires. Par exemple,

$$\widetilde{Q''} = \widetilde{Q - \widetilde{Q}} = \frac{\overline{\rho(Q-\widetilde{Q})}}{\overline{\rho}} = \frac{\overline{\rho(Q - \frac{\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}})}}{\overline{\rho}} = \frac{\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}} - \frac{\overline{\rho}\,\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}^2} = \frac{\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}} - \frac{\overline{\rho Q}\,\overline{\rho}}{\overline{\rho}^2} = 0 \tag{1.5.78}$$

La linéarité de la moyenne de Favre découle de la linéarité des moyennes de Reynolds. De plus, en notant P et Q deux grandeurs physiques,

$$\widetilde{\widetilde{P}Q} = \frac{\overline{\rho\widetilde{P}Q}}{\overline{\rho}} = \frac{\overline{\rho\frac{\overline{\rho P}}{\overline{\rho}}Q}}{\overline{\rho}} = \frac{\overline{\rho P}}{\overline{\rho}}\frac{\overline{\rho Q}}{\overline{\rho}} = \widetilde{P}\widetilde{Q} \tag{1.5.79}$$

L'inconvénient de la moyenne de Favre est l'absence de relation simple avec la moyenne de Reynolds d'une grandeur Q

$$\overline{\rho}\widetilde{Q} = \overline{\rho Q} = \overline{\rho}\,\overline{Q} + \overline{\rho' Q'} \tag{1.5.80}$$

où la dernière partie de l'égalité s'obtient de la même manière que (1.5.75). Ainsi,

$$\widetilde{Q} = \overline{Q} + \frac{\overline{\rho' Q'}}{\overline{\rho}} \tag{1.5.81}$$

Puisque $\overline{\widetilde{Q}} = \widetilde{Q}$, la définition de la moyenne de Favre (1.5.77) induit

$$\overline{Q} = \widetilde{Q} + \overline{Q''} \tag{1.5.82}$$

Les deux équations précédentes impliquent

$$\overline{Q} - \widetilde{Q} = \overline{Q''} = -\frac{\overline{\rho' Q'}}{\overline{\rho}} \tag{1.5.83}$$

La moyenne du terme perturbatif est non nulle contrairement à la moyenne de Reynolds. Dans certains cas, il sera donc difficile de comparer des données d'expérience (que l'on peut assimiler aux moyennes de Reynolds des différentes grandeurs physiques) à des données numériques issues de la résolution des équations. Néanmoins, Favre a montré [94] que pour des nombres de Reynolds suffisamment peu élevés et pour des vitesses subsoniques, les moyennes de Favre sont équivalentes aux moyennes de Reynolds. Revenons au cas de l'équation de conservation de la masse (1.5.76). Par la formule (1.5.80), il vient directement

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u_i}}{\partial x_i} = 0 \tag{1.5.84}$$

Cette équation possède la même forme que l'équation instantanée (1.6.4.2) ce qui était l'objectif initial. Le reste des équations est établi au paragraphe suivant.

1.5.3.4 Equations moyennées au sens de Favre

En prenant la moyenne de Reynolds de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, il vient

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho} \widetilde{u_i u_j}\right) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} + \overline{F_i} \tag{1.5.85}$$

De la même manière que pour le cas incompressible, le terme $\overline{\rho} \widetilde{u_i u_j}$ est décomposé

$$\overline{\rho} \widetilde{u_i u_j} = \overline{\rho}\left(\widetilde{u_i}\widetilde{u_j} + \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i}\widetilde{u_j}\right) \tag{1.5.86}$$

L'équation de conservation de quantité de mouvement devient

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho} \widetilde{u_i}\widetilde{u_j}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i}\widetilde{u_j})\right) - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} + \overline{F_i} \tag{1.5.87}$$

Sur le même principe, l'équation moyennée de la conservation de l'enthalpie s'écrit

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{\mathscr{H}_t}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho} \widetilde{u_j} \widetilde{\mathscr{H}_t}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\widetilde{\overline{\rho} u_j'' \mathscr{H}_t''}\right) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_i \tau_{ij}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{q_j}}{\partial x_j} + \overline{F_j u_j} + \overline{S_\phi} \tag{1.5.88}$$

L'équation moyennée de la conservation des espèces chimiques est

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho} \widetilde{u_j} \widetilde{Y_k}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\widetilde{\overline{\rho} u_j'' Y_k''}\right) - \frac{\partial \overline{\mathscr{J}_{k,j}}}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_k} \tag{1.5.89}$$

Enfin, l'équation d'état des gaz parfaits se réécrit en grandeurs moyennées

$$\overline{p} = \overline{\rho \varkappa T} = \overline{\rho} \widetilde{\varkappa T} \tag{1.5.90}$$

Il reste à décomposer $\widetilde{\varkappa T}$ qui est inconnu

$$\widetilde{\varkappa T} = \widetilde{\varkappa} \widetilde{T} + \widetilde{\varkappa'' T''} \tag{1.5.91}$$

Puisque $\varkappa = \frac{R}{M}$ et que $\frac{1}{M} = \sum_j \frac{1}{M_j} Y_j$ par l'équation (B.11) de l'annexe B,

$$\widetilde{\varkappa} = R \sum_j \frac{1}{M_j} \widetilde{Y_j} \tag{1.5.92}$$

$\widetilde{\mathscr{r}}$ est ainsi déterminé par les fraction molaires calculées. L'autre partie de l'équation est supposée nulle

$$\widetilde{\mathscr{r}''T''} = 0 \tag{1.5.93}$$

Cela revient à supposer que $\mathscr{r}$ est une constante et donc que la composition chimique est quasiment constante pendant les différents processus. Ceci est rigoureusement faux mais cette hypothèse est couramment admise faute de mieux.

Le système d'équations se présente finalement sous la forme

$$\begin{cases} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u_i}}{\partial x_i} = 0 \\ \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{u_j}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i}\widetilde{u_j})\right) - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} + \overline{F_i} \\ \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{\mathscr{H}_t}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_j}\widetilde{\mathscr{H}_t}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_j''\mathscr{H}_t''}\right) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_i\tau_{ij}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{q_j}}{\partial x_j} + \overline{F_j u_j} + \overline{S_\phi} \\ \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_j}\widetilde{Y_k}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_j''Y_k''}\right) - \frac{\partial \overline{\mathscr{F}_{k,j}}}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_k} \\ \overline{p} = \overline{\rho}\widetilde{\mathscr{r}}\widetilde{T} \end{cases} \tag{1.5.94}$$

Il faut maintenant fermer les quantités inconnues. Concernant la quantité de mouvement, comme pour le cas d'un fluide incompressible, un tenseur de sous-maille est introduit

$$\overline{\overline{\tau_c^{sm}}} = \overline{\rho}\left(\widetilde{\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}} - \widetilde{\mathbf{u}}\otimes\widetilde{\mathbf{u}}\right) \tag{1.5.95}$$

Par application de l'hypothèse de Boussinesq, le tenseur de sous-maille pour un fluide compressible ressemble à (1.5.69)

$$\tau_{c,ij}^{sm} = -2\overline{\rho}\nu_{sm}\widetilde{S_{ij}} + \frac{2}{3}\overline{\rho}\nu_{sm}\widetilde{S_{kk}}\delta_{ij} + \frac{1}{3}\tau_{c,kk}^{sm}\delta_{ij} \tag{1.5.96}$$

Cette fois-ci, les termes correspondant à des divergences de vitesse ne s'annulent pas puisque le fluide est compressible. L'équation de quantité de mouvement s'écrit

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_i}\widetilde{u_j}\right) = -\frac{\partial\left(\overline{p} + \frac{1}{3}\tau_{c,kk}^{sm}\right)}{\partial x_i} + \frac{\partial 2\overline{\rho}(\nu+\nu^{sm})\left[\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3}\widetilde{S_{kk}}\delta_{ij}\right]}{\partial x_j} + \overline{F_i} \tag{1.5.97}$$

L'énergie de sous-maille $e_c^{sm} = \frac{1}{2}\frac{\tau_{c,kk}^{sm}}{\overline{\rho}}$ dans l'équation de quantité de mouvement est incorporée dans la pression de sorte que

$$\overline{p} \longleftrightarrow \overline{p} + \frac{2}{3}\overline{\rho}e_c^{sm} \tag{1.5.98}$$

L'équation d'état reste inchangée. Notons que cela suppose que l'énergie cinétique de sous-maille reste faible par rapport à la pression. Cette hypothèse est largement vérifiée puisque la pression est de l'ordre de $10^5\ Pa$ alors que l'énergie cinétique de sous-maille est de l'ordre de $1\ m^2.s^{-2}$ dans les simulations les plus défavorables de ce mémoire.

Concernant le terme $\overline{\rho}\widetilde{u_j''Y_k''}$, une approximation de type gradient est utilisée

$$\overline{\rho}\widetilde{u_j''Y_k''} = -\frac{\overline{\rho}\nu_{sm}}{Sc_{kt}}\frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_j} \tag{1.5.99}$$

où Sc_{kt} est le nombre de Schmidt turbulent de l'espèce k. Le nombre de Schmidt est défini par

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho\mathscr{D}_k} \tag{1.5.100}$$

Puisque le nombre de Lewis est supposé égal à 1 (1.5.48), l'approximation de type gradient se reformule

$$\overline{\rho}\widetilde{u_j''Y_k''} = -\overline{\rho}\kappa_{sm}\frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_j} \tag{1.5.101}$$

avec κ_{sm} la diffusivité thermique de sous-maille qui est l'analogue de la viscosité cinématique de sous-maille pour l'aspect thermique. La forme de ce terme rappelle celle du flux moléculaire de la loi de Fick

(1.5.47). La diffusivité thermique de sous-maille est reliée à la viscosité de sous-maille par le nombre de Prandtl turbulent

$$Pr_t = \frac{\nu_{sm}}{\kappa_{sm}} \tag{1.5.102}$$

La partie suivante inclut la modélisation du nombre de Prandtl turbulent. La quantité $\widetilde{\overline{\rho} u_j'' \mathscr{H}_t''}$ est aussi modélisée par un gradient. L'équation suivante

$$\widetilde{u_j'' \mathscr{H}_t''} = \widetilde{u_j'' \mathscr{H}''} + \frac{1}{2} u_j'' \widetilde{(u_i u_i)}'' \tag{1.5.103}$$

est ainsi remplacée par une modélisation de type gradient

$$\widetilde{u_j'' \mathscr{H}''} = -\kappa_{sm} \frac{\partial \widetilde{\mathscr{H}}}{\partial x_j} \tag{1.5.104}$$

La forme est similaire au flux thermique (1.5.43). Le terme d'ordre trois $\frac{1}{2} u_j'' \widetilde{(u_i u_i)}''$ est négligé dans les équations.

Chaque équation laisse apparaître la somme des divergences des flux laminaire et turbulent (diffusions visqueuse, thermique et moléculaire). Les sommes des deux contributions de chaque processus correspondront à un terme effectif

$$\begin{cases} \mu_{eff} = \mu_{sm} + \mu \\ \kappa_{eff} = \kappa_{sm} + \kappa \end{cases} \tag{1.5.105}$$

Enfin, en négligeant l'énergie perdue par la viscosité du fluide ($\overline{u_i \tau_{ij}} = 0$) ainsi que l'énergie potentielle de pesanteur ($\overline{F_j u_j} = 0$) dans l'équation portant sur l'enthalpie, le système d'équations devient

$$\begin{cases} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u_i}}{\partial x_i} = 0 \\ \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \widetilde{u_i} \widetilde{u_j} \right) = -\frac{\partial \left(\overline{p} + \frac{2}{3} \overline{\rho} e_c^{sm} \right)}{\partial x_i} + \frac{\partial 2 \overline{\rho} \nu_{eff} \left[\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3} \widetilde{S_{kk}} \delta_{ij} \right]}{\partial x_j} + \overline{F_i} \\ \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{\mathscr{H}_t}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \widetilde{u_j} \widetilde{\mathscr{H}_t} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho} \kappa_{eff} \frac{\partial \widetilde{\mathscr{H}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{q_{rj}}}{\partial x_j} + \overline{S_\phi} \\ \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{Y_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \widetilde{u_j} \widetilde{Y_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho} \kappa_{eff} \frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_j} + \overline{\dot{\omega}_k} \\ \overline{p} = \overline{\rho} \widetilde{r} \widetilde{T} \end{cases} \tag{1.5.106}$$

L'équation de transfert radiatif (1.4.24) n'est pas affectée par la turbulence. Il s'agit d'une hypothèse forte généralement admise dans les logiciels de combustion classiques (FDS [86], OpenFOAM [28], ISIS [87], etc). Seule la température est remplacée par la température moyennée au sens de Favre.

Il reste à modéliser la moyenne du taux de réaction chimique, la viscosité de sous-maille et la diffusivité thermique de sous-maille.

1.5.3.5 Modélisation des paramètres de la turbulence

La viscosité de sous-maille est calculée à partir d'un modèle à une équation. Celui-ci se base sur une équation exacte portant sur l'énergie cinétique de sous-maille

$$e_c^{sm} = \sum_i \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} \tag{1.5.107}$$

Cette équation est généralement écrite

$$\frac{\partial \overline{\rho} e_c^{sm}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u_i} e_c^{sm}}{\partial x_i} = -\overline{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\overline{\rho} \nu_{eff} \frac{\partial e_c^{sm}}{\partial x_i} \right] - \overline{\rho} \epsilon \tag{1.5.108}$$

où

$$\overline{\rho} \epsilon = \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} \tag{1.5.109}$$

ϵ est le taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente ($m^2.s^{-3}$). L'hypothèse de Boussinesq (1.5.96) est appliquée au terme $-\overline{\rho}\widetilde{u_i''u_j''} = -\overline{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i}\widetilde{u_j})$

$$\begin{aligned} -\overline{\rho}\widetilde{u_i''u_j''} &= 2\overline{\rho}\nu_{sm}\widetilde{S_{ij}} - \frac{2}{3}\overline{\rho}\nu_{sm}\widetilde{S_{kk}}\delta_{ij} - \frac{2}{3}\overline{\rho}e_c^{sm}\delta_{ij} \\ \Leftrightarrow\ -\overline{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}\frac{\partial\widetilde{u_i}}{\partial x_j} &= 2\overline{\rho}\nu_{sm}\frac{\partial\widetilde{u_i}}{\partial x_j}\left(\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3}\overline{\rho}\nu_{sm}\widetilde{S_{kk}}\delta_{ij}\right) - \frac{2}{3}\overline{\rho}e_c^{sm}\frac{\partial\widetilde{u_i}}{\partial x_i} \end{aligned} \tag{1.5.110}$$

Dans la suite, la notation

$$G_k = 2\nu_{sm}\frac{\partial\widetilde{u_i}}{\partial x_j}\left(\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3}\overline{\rho}\nu_{sm}\widetilde{S_{kk}}\delta_{ij}\right) \tag{1.5.111}$$

est employée dans l'équation de turbulence

$$\frac{\partial\overline{\rho}e_c^{sm}}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{u_i}e_c^{sm}}{\partial x_i} = \overline{\rho}G_k - \frac{2}{3}\overline{\rho}e_c^{sm}\frac{\partial\widetilde{u_i}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\overline{\rho}\nu_{eff}\frac{\partial e_c^{sm}}{\partial x_i}\right] - \overline{\rho}\epsilon \tag{1.5.112}$$

Le modèle de turbulence utilisé pour les simulations de ce mémoire utilise la formulation empirique suivante

$$\epsilon = C_\epsilon\frac{(e_c^{sm})^{3/2}}{\overline{\Delta}} \tag{1.5.113}$$

Après résolution de l'équation (1.5.112), ν_{sm} est déduit par

$$\nu_{sm} = C_k\overline{\Delta}\sqrt{e_c^{sm}} \tag{1.5.114}$$

Un ajustement par rapport à des données expérimentales fournit $C_\epsilon = 1,048$ et $C_k = 0,094$. Ce modèle est appelé "kEqn" dans OpenFOAM [95].

La diffusivité thermique de sous-maille est reliée à la viscosité cinématique de sous-maille par le nombre de Prandtl turbulent. Il est classique de le considérer constant autour de la valeur $0,85$ (d'après des expérimentations). La diffusivité thermique de sous-maille est donc modélisée par

$$\kappa_{sm} = \frac{\nu_{sm}}{0,85} \tag{1.5.115}$$

Le taux de production de l'espèce k moyenné $\overline{\dot{\omega}_k}$ ne peut pas être calculé à partir de la formule d'Arrhénius (1.2.20). En effet, cette expression étant constituée d'un produit de variables, sa moyenne n'est pas facilement calculable. À la place, le modèle de Magnussen [96] est largement employé dans les simulations numériques (modèle par défaut de FDS par exemple). Le taux de production moyenné du modèle est

$$\overline{\dot{\omega}} = -\overline{\rho}C_\omega\frac{\epsilon}{e_c^{sm}}\min\left(\widetilde{Y_f}, \frac{\widetilde{Y_{O_2}}}{\nu_{O_2}}\right) \tag{1.5.116}$$

avec ν_{O_2} le coefficient stœchiométrique du dioxygène et $C_\omega = 0,05$ un coefficient du modèle ajusté empiriquement sur les essais du chapitre 3 pour approcher la pyrolyse. Le taux de production de l'espèce k moyenné est relié à $\overline{\dot{\omega}}$ par

$$\overline{\dot{\omega}_k} = \nu_k\overline{\dot{\omega}} \tag{1.5.117}$$

1.5.4 Traitement de la turbulence proche des parois

La turbulence proche d'une surface doit se traiter différemment compte tenu des limitations de la puissance des ordinateurs. La couche limite évoquée au paragraphe 1.4.2, étant le siège de forts gradients, oblige, *a priori*, la création d'un maillage très dense proche de la paroi. Toutefois, une simulation complète de la couche limite nécessite des mailles de taille prohibitive. Les scientifiques ont donc tenté d'établir une alternative intermédiaire permettant la manipulation d'un maillage plus grossier et moins coûteux en temps de calcul. L'explication exige l'introduction de la contrainte visqueuse (1.5.18)

$$\frac{\tau}{\rho} = \nu\frac{\partial\overline{u}}{\partial y} \tag{1.5.118}$$

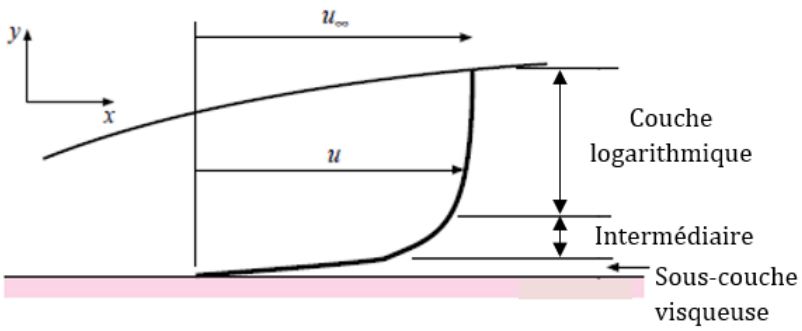

Figure 1.17 – Divisions de la couche limite.

À l'interface entre un fluide et une paroi, la contrainte pariétale τ_w sera notée

$$\frac{\tau_w}{\rho} = \nu \frac{\partial \overline{u}}{\partial y}\bigg|_{y=0} \tag{1.5.119}$$

Une échelle de vitesse, dite vitesse de frottement, est introduite

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \tag{1.5.120}$$

Il est maintenant possible de définir une échelle de longueur basée sur la viscosité et sur la vitesse de frottement

$$l = \frac{\nu}{u^*} \tag{1.5.121}$$

Cette échelle est intéressante puisque dans la couche limite, les effets visqueux sont dominants. Par commodité, cette échelle est adimensionnée

$$y^+ = \frac{y}{l} = \frac{yu^*}{\nu} \tag{1.5.122}$$

La couche limite peut être subdivisée en 3 parties. Prés de la paroi, une couche limite laminaire se forme. Cette zone s'appelle sous-couche visqueuse. La deuxième zone est une couche intermédiaire. La dernière zone est dominée par la turbulence et est appelée couche logarithmique (figure 1.17). Très près de la paroi, la turbulence est négligeable et le profil de la vitesse est linéaire

$$\overline{u}(y) = \frac{u^{*2}}{\nu} y \tag{1.5.123}$$

De la même manière que pour y^+, une vitesse adimensionnelle u^+ est définie

$$u^+ = \frac{\overline{u}(y)}{u^*} \tag{1.5.124}$$

Ainsi, dans la sous-couche visqueuse,

$$u^+ = y^+ \tag{1.5.125}$$

Les effets visqueux dominent dans la région $y^+ < 5$. Dans la zone $y^+ > 30$ appelée couche logarithmique, la loi est logarithmique

$$u^+ = \frac{1}{\mathscr{K}} ln E_+ y^+ \tag{1.5.126}$$

avec $\mathscr{K} = 0,41$ la constante de von Kàrmàn et $E_+ \approx 7,81$. Dans la zone $5 < y^+ < 30$, un raccordement s'opère entre ces deux profils (figure 1.18).

La formule de Spalding modélise les trois domaines de la couche limite [97]

$$y^+ = u^+ + \frac{1}{E_{sp}} \left[e^{\mathscr{K} u^+} - 1 - \mathscr{K} u^+ - \frac{(\mathscr{K} u^+)^2}{2} - \frac{(\mathscr{K} u^+)^3}{6} \right] \tag{1.5.127}$$

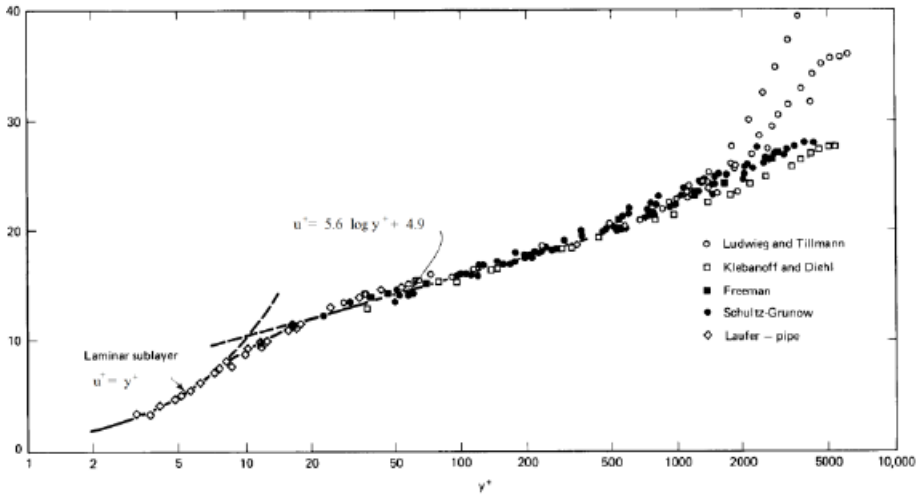

Figure 1.18 – Comparaison des lois de paroi avec des données expérimentales [5] (Clauser, 1956).

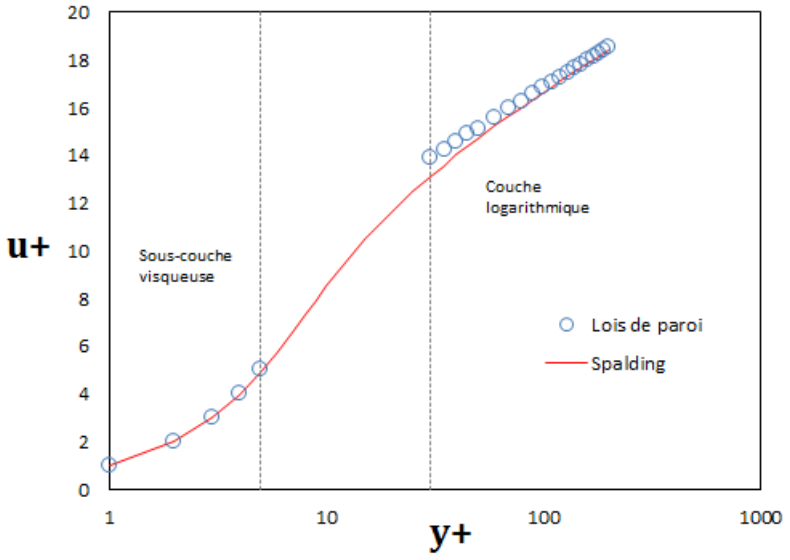

Figure 1.19 – Comparaison des lois de paroi avec la formule de Spalding (1.5.127).

avec $E_{sp} = 9,8$ une constante. Cette formule est valable dans toute la couche limite et permet d'obtenir la valeur de u^+ par la méthode de Newton par exemple. Le profil de vitesse est donc connu dans toute la couche limite (Fig. 1.19).

Sans loi de paroi, la première maille jouxtant la surface devrait correspondre à $y^+ = 1$. Avec une loi de paroi, une précision suffisante peut être obtenue pour une taille supérieure. Par exemple, choisissons un fluide (air à $T = 800\ K$) dont la vitesse est $u_\infty = 5\ m.s^{-1}$. En choisissant comme longueur caractéristique $L = 1\ m$, l'égalité $y^+ = 1$ demande une première maille de $0,6\ mm$ alors que $y^+ = 100$ correspond à une première maille de taille $> 6\ cm$. Cette modélisation autorise donc un maillage plus grossier en proche paroi.

La température évolue aussi rapidement proche des parois. Une étude similaire à celle de la vitesse peut être réalisée. Cette méthode est présentée dans l'annexe C. Néanmoins, l'approche préférée dans ce mémoire est basée sur la loi de Newton (1.4.9) et les corrélations du paragraphe 1.4.2 sur le coefficient de convection thermique. Cette seconde méthode évite en effet l'emploi d'un raffinement intermédiaire proche de la surface et permet un maillage grossier qui modère le temps de calcul. Dans l'optique de tester beaucoup de scénarios de feux dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc, ce gain de temps est

indispensable.

1.6 Description théorique et bibliographique des thermo-altérations

L'aspect thermo-mécanique de la thèse réside dans les thermo-altérations induites par une forte température. D'une part, des réactions chimiques s'opèrent au sein du calcaire lorsqu'il subit des températures élevées. D'autre part, à travers la dilatation thermique du calcaire et des processus thermo-hydriques, les fortes températures provoquent des contraintes mécaniques qui peuvent fissurer voire rompre la roche proche de la surface. Le dépôt de suie sera traité dans le paragraphe 2.1.4. Puisque ces thermo-altérations sont les seuls indices observables permettant l'analyse, le traitement thermo-mécanique des parois rocheuses est un point indispensable dans cette étude.

1.6.1 Les changements de couleur

Lorsque le calcaire est chauffé avec une intensité suffisante, un changement de couleur devient perceptible. La couleur observée varie en fonction de la chauffe opérée sur la roche. Une couleur rouge, à laquelle est associé le terme de rubéfaction, est d'abord constatée, puis une couleur grise apparaît suite à une température plus élevée. Une couleur blanche caractéristique de la calcination à haute température du calcaire ($CaCO_3$) en chaux (CaO) peut aussi émerger pour des températures avoisinant les 900^oC. Ici, seuls les deux premiers stades seront discutés puisqu'aucune trace de chaux n'a été observée dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc, contrairement aux deux autres changements de couleur.

Ces changements de couleur sont la manifestation macroscopique de réactions chimiques qui se produisent à haute température (quelques centaines de degrés) dans le calcaire. Ces réactions sont décrites ci-après.

1.6.1.1 Rubéfaction

Il est reconnu par la communauté scientifique que la couleur rouge provient d'une réaction chimique [98], [99], [100]. Cette réaction chimique correspond à la transformation

$$2\ \alpha FeOOH\ (\text{Goethite})\ \rightarrow \alpha Fe_2O_3\ (\text{Hématite})\ +\ H_2O \tag{1.6.1}$$

La couleur rouge provient ainsi du changement de phase minéralogique de la goethite (hydroxyde de fer) en hématite (oxyde de fer). Une température de transformation d'environ 250^oC est couramment indiquée dans la littérature [98], [101], [102], [103]. Gialanella *et al.* [104] obtiennent néanmoins une température de transformation d'environ 300^oC.

Des auteurs ont étudié la cinétique de la réaction chimique (1.6.1). Par exemple, différents modèles cinétiques sont comparés dans [105]. Le modèle fournissant le meilleur ajustement avec les données expérimentales est le modèle d'Avrami-Erofeev [106], [107]

$$-\ ln(1-\alpha_{cin}) = (k_{cin}t)^n \tag{1.6.2}$$

à l'ordre $n = 1$. α_{cin} est le facteur de conversion ($\alpha_{cin} = 0$ s'il n'y a que de la goethite et $\alpha_{cin} = 1$ s'il n'y a que de l'hématite) et k_{cin} est la constante de vitesse déjà évoqué (§1.2.4). Diamandescu *et al.* [108] et Murray *et al.* [109] démontrent de même que le modèle d'Avrami-Erofeev à l'ordre 1 présente le meilleur ajustement avec leurs expérimentations. Afin d'établir la loi cinétique de la transformation goethite-hématite, la valeur de k_{cin} est nécessaire. En supposant que la constante suit une loi d'Arrhenius (1.2.19), des auteurs fournissent la valeur de l'énergie d'activation. Beuria *et al.* [105] ont mesuré environ $E_a \sim 60\ kJ.mol^{-1}$ selon les échantillons. Une autre étude [110] conduit à $E_a = 27,3\ kJ.mol^{-1}$ tandis que Pelino *et al.* [111] mesurent $119\ kJ.mol^{-1}$, Murray *et al.* [109] $137,8\ kJ.mol^{-1}$ et Goss [112] $154\ kJ.mol^{-1}$. La gamme de valeur de l'énergie d'activation est donc relativement importante. Murray *et al.* [109] ont analysé l'influence de certaines variables sur la cinétique de transformation. Par exemple, la proportion initiale d'hématite influence la valeur de la constante de vitesse. La température joue

aussi un rôle sur la valeur de k_{cin} ce qui implique une cinétique chimique différente selon la température. Cet aspect a d'ailleurs aussi été étudié par Diamandescu *et al.* [108]. En outre, beaucoup de paramètres difficilement mesurables influencent la cinétique de la réaction.

La rubéfaction devient visible par l'œil humain lorsque le facteur de conversion α_{cin} atteint une valeur critique α_c non étudiée dans la littérature. Le critère de rubéfaction pourrait ainsi être formulé sous forme d'un temps au bout duquel la roche apparaît rouge aux observateurs

$$t_{rubéfaction} = -\frac{ln(1-\alpha_c)}{k_{cin}} \tag{1.6.3}$$

La connaissance des paramètres k_{cin} et α_c suffirait à connaître un temps de rubéfaction fonction de la température.

En l'absence de tels paramètres, des essais ont été réalisés sur les calcaires rupélien (roche de la carrière expérimentale) et urgonien (roche de la grotte Chauvet-Pont d'Arc). Des tests ont, entre autres, été menés par spectroscopie Raman sur des échantillons de calcaire urgonien de 3 cm de côté. Cette méthode non destructive permet la caractérisation chimique du matériau étudié suite aux changements de fréquence des photons ayant traversé l'échantillon. L'étude s'est focalisée sur des points précis avant et après une chauffe d'environ 250^oC pendant 45 minutes. La figure 1.20 compare le spectre des longueurs d'onde avec ceux de la goethite et de l'hématite en deux points.

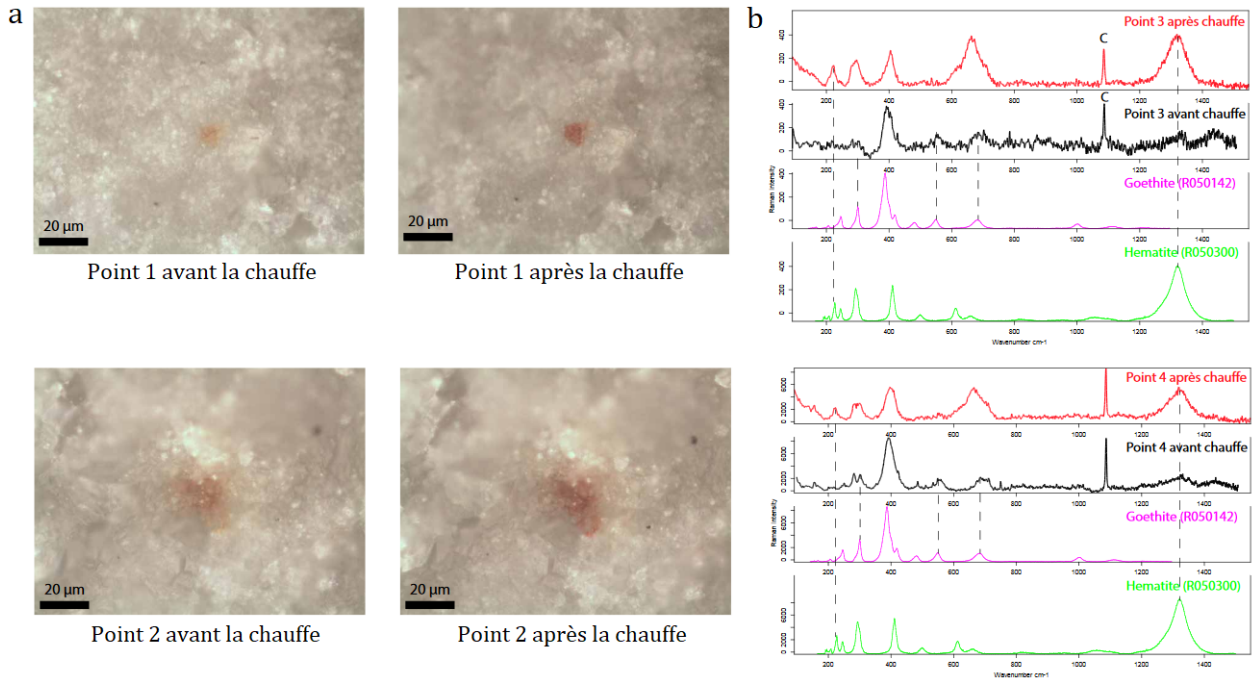

Figure 1.20 – a - Observation des points étudiés avant et après une chauffe de 250^oC pendant 45 minutes dans un four électrique à rayonnement. La consigne est basée sur la température de surface des échantillons. b - Intensité des spectres Raman avant et après la chauffe pour les deux points étudiés. Ces spectres sont comparés avec ceux de la goethite et de l'hématite. Essai effectué par C. Ferrier, A. Queffelec et J.-C. Mindeguia.

L'intensité du pic caractéristique de la goethite autour de la longueur d'onde 400 cm^{-1} décroit après la chauffe pour les deux points. Au contraire, le pic caractéristique de l'hématite autour de 1300 cm^{-1} croit après la chauffe. Il y a bien transformation de la goethite en hématite lorsqu'un échantillon de calcaire est chauffé à des températures de 250^oC.

L'ensemble des essais effectués sur les deux types de calcaire a montré que la couleur rouge apparait vers 250^oC, après environ 10 minutes de chauffe [113], [2], [44]. Ce critère est cohérent avec celui développé dans [98] et sera donc retenu dans les simulations. Afin de pallier les imprécisions, une

incertitude de 30^oC sur le critère sera considérée, i.e, les résultats avec une température de rubéfaction de 280^oC seront examinés. L'influence du critère de temps n'est pas directement testée mais le critère de 280^oC pendant 10 minutes est sans doute équivalent à un critère de 250^oC pendant une durée supérieure à 10 minutes. Ainsi, l'influence du temps est indirectement considérée.

1.6.1.2 La couleur grise

L'étude de l'apparition de la couleur grise est quasiment absente de la littérature. Elle a néanmoins été observée par Borg *et al.* [114] et Chakrabarti *et al.* [115] sur plusieurs types de calcaire à des températures plus élevées que celle relative à la rubéfaction. Une explication est proposée par Yavuz *et al.* [116] qui affirment que cette coloration provient de matières organiques fondues et plus précisément de kérogènes.

Comme précédemment pour la rubéfaction, un critère numérique doit être établi. Expérimentalement, le calcaire urgonien devient gris après une chauffe de 10 minutes à environ 350^oC [2], [44]. Concernant le calcaire rupélien, la couleur grise se manifeste lorsque le calcaire est chauffé à environ 450^oC pendant 10 minutes [113].

1.6.2 Écaillage

L'écaillage est une thermo-altération présente dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc (§1.1). Il résulte de contraintes mécaniques souvent dues à un impact thermique sur la roche qui la rend vulnérable à une fracture. Des écailles de roches peuvent alors se détacher du massif à la suite de ces fortes contraintes mécaniques [117].

La compréhension et la prédiction d'écaillage sont d'une grande importance dans plusieurs domaines. Par exemple, le principe d'écaillage est utilisé pour le forage de certaines roches par jet de flamme supersonique [118], [119]. Une modélisation de cette technique est présentée dans [120]. L'impact des feux sur les structures en béton est d'une importance capitale en sécurité incendie. Un grand nombre d'études concernant l'écaillage de ce matériau ont donc été réalisées comme par exemple [121] ou [122].

Aujourd'hui, les processus physico-chimiques à l'origine de l'écaillage ne sont pas encore connus avec certitude. Plusieurs explications sont avancées pour comprendre les causes de ce phénomène. La première est un processus thermo-mécanique. Puisque la roche est soumise à une forte température en surface, l'énergie se diffuse dans la roche et un gradient thermique existe au sein de celle-ci. Les roches possédant une diffusion thermique relativement faible, de forts gradients thermiques s'établissent sur les premiers centimètres du massif puisque l'énergie s'y propage lentement. Or, la loi de comportement thermo-élastique du matériau (1.6.8) révèle une déformation mécanique proportionnelle à la température de chauffe. Un fort gradient thermique induit ainsi des déformations différentes selon la profondeur. Ainsi, les zones les plus chaudes tendent à se dilater plus que les zones froides qui les en empêchent. Des contraintes mécaniques (de la compression bi-axiale dans le cas d'un matériau dilatant comme le béton ou la roche) découlent donc des gradients thermiques dans la roche et ceux-ci seraient une des causes du processus d'écaillage. La figure 1.21 décrit les étapes thermo-mécaniques d'un écaillage initié par un défaut dans la roche [6]. Selon Walsh *et al.* [6], un défaut pré-existant proche de la surface influence la formation d'une fissure parallèle à la paroi causée par les contraintes en compression. Lorsque la fissure a suffisamment affaibli la zone fragile, l'écaille subit un flambement dû aux contraintes en compression qui provoque son détachement.

La majorité des scientifiques s'accordent sur l'insuffisance de ce phénomène pour décrire les écaillages. Ils supposent plutôt un couplage avec d'autres processus, notamment la pression de vapeur d'eau au sein des pores. Puisque la température dépasse les 100^oC dans la roche proche de la surface, le massif anciennement saturé voit l'eau liquide contenu dans les pores s'évaporer. Le confinement des pores pourrait rendre difficile l'évacuation des vapeurs et ainsi augmenter la pression en leur sein (Fig. 1.22).

De plus, les vapeurs s'évacuant vers l'intérieur du massif finissent par se condenser suite à des conditions thermodynamiques favorables. Lorsque la durée du feu le permet, les pores de la zone 3 (Fig. 1.23) pourraient saturer entièrement et empêcher l'évacuation des vapeurs d'eau de la zone 2 vers les profondeurs du massif. La zone 2 n'aurait alors d'autres choix que de se désemplir vers le côté

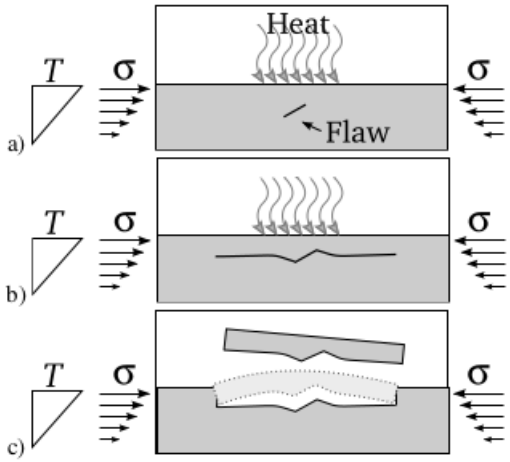

Figure 1.21 – Description schématique des étapes d'un écaillage dû à des contraintes thermo-mécaniques [6].

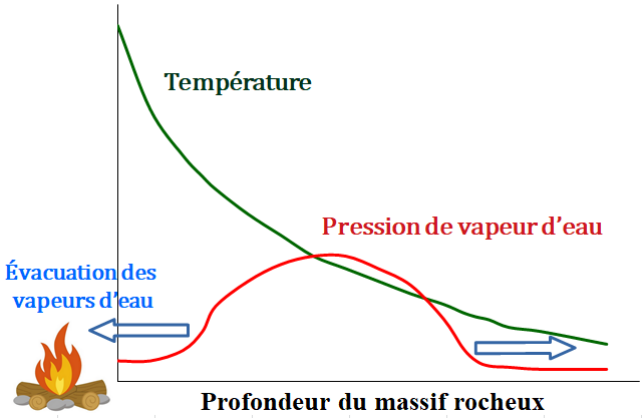

Figure 1.22 – Profil de la pression interstitielle sur les premiers centimètres de la roche exposée au feu.

exposé au feu. Ceci ralentirait la sortie des vapeurs d'eau du massif et entraînerait une augmentation de la pression. Pour l'instant, personne n'a réussi à mettre en évidence l'existence d'une telle zone faute de technique expérimentale le permettant. Cet aspect thermo-hydrique ajoute ainsi une contrainte mécanique, en plus de celle induite par les dilatations.

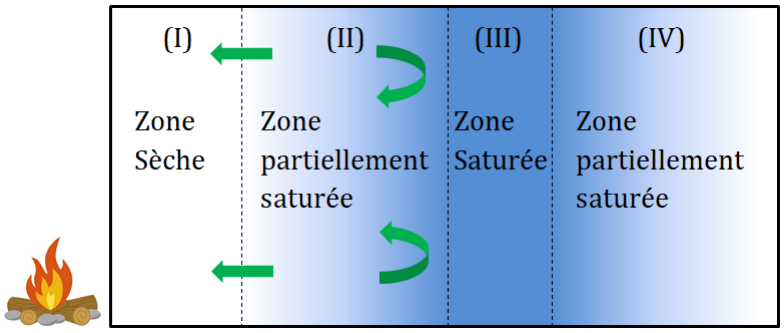

Figure 1.23 – Formation d'une couche saturée putative empêchant l'écoulement des vapeurs d'eau vers l'intérieur du massif. Le schéma représente une zone de l'ordre de quelques centimètres et les flèches vertes matérialisent la circulation des vapeurs d'eau.

Cette approche est préférée dans [123] et [124] pour l'étude d'un feu de tunnel afin d'expliquer l'écaillage suite à un réel incendie. La même conclusion a été apportée par Zhang *et al.* [125] suite à l'analyse de plusieurs roches (granite, gabro et schiste). Par exemple, il a été observé qu'un granite dont le degré de saturation était plus élevé qu'un granite sec subissait plus d'écaillage suite à la génération de pression interstitielle (vapeur d'eau et eau liquide). Cependant, cette étude affirme que la pression interstitielle n'est pas dominante dans le processus d'écaillage puisque la mesure des pressions dans les pores montre que celles-ci restent faibles. De même, Mindeguia *et al.* [121] montrent que la pression de vapeur d'eau n'explique pas entièrement la présence d'écaillage. Les auteurs notent néanmoins que leurs résultats expérimentaux peuvent s'expliquer par l'existence d'une couche saturée dans les premiers centimètres de la surface chauffée, conférant au matériau un comportement particulièrement instable dans cette zone.

Enfin, une autre source de contraintes mécaniques dans la roche correspond à la dilatation thermique de l'eau liquide. D'après [126], en supposant que des pores sont complètement fermés, la dilatation volumique de l'eau liquide augmente la saturation de la zone. Une fois la zone complètement saturée, la dilatation de l'eau liquide appliquerait une contrainte sur le squelette rocheux.

Ainsi, l'origine des écaillages reste encore aujourd'hui peu comprise. Il semblerait qu'un couplage entre tous les processus détaillés ci-dessus soit à l'oeuvre. Cette méconnaissance des processus physiques entraînant l'écaillage rend difficile sa prédiction. De plus, les défauts initiaux peuvent jouer un rôle majeur dans la poursuite de fissures déjà existantes. Prévoir la localisation exacte d'un écaillage requerrait la connaissance totale des propriétés du massif rocheux (fissures, tailles des grains, porosité etc), ce qui est impossible. La simulation numérique de l'écaillage reste ainsi difficile. Généralement, elle porte uniquement sur le premier processus évoqué, la dilatation thermique de la roche. Deux types de simulation sont possibles : modélisation microscopique ou macroscopique. Par exemple, une simulation à l'échelle des grains est réalisée par Walsh *et al.* dans [6] où le domaine d'étude est de l'ordre du millimètre. Les auteurs concluent que les aspérités en surface permettent le départ d'une fissure et que des petits grains limitent l'écaillage par rapport à des grains plus volumineux. Les mêmes auteurs ont aussi réalisé une modélisation microscopique d'une roche granitique. La simulation a rendu des résultats similaires à l'expérience sur la forme des écaillages (plaque fine parallèle à la paroi) et démontre qu'il existe une température critique en deça de laquelle aucun écaillage n'apparaît (300^oC pour la roche de l'étude). Nordlund *et al.* [127] exposent deux simulations numériques basées sur deux modèles différents où le domaine d'étude est intermédiaire (quelques dizaines de centimètres). La première prend en compte la disparité des minéraux (quartz, feldspath, plagioclase, etc) et utilise une dispersion stochastique des grains. Cette méthode permet la simulation directe des fissures. La seconde utilise un modèle macroscopique continu avec des propriétés thermo-mécaniques globales uniquement dépendantes de la température. Elle requiert ainsi un critère de fracturation. Pour des roches en situation de confinement (comme un massif rocheux), les deux modèles sont en accord avec les résultats expérimentaux.

En résumé, la simulation numérique d'écaillage est souvent réalisée en deux dimensions compte tenu du temps de calcul nécessaire, même pour un modèle macroscopique. En général, elle considère uniquement les contraintes résultant de la dilatation thermique de la roche. Cette approche simplifiée est uniquement qualitative. Dans ce mémoire, l'étude de l'écaillage se base sur l'approche macroscopique thermo-mécanique.

1.6.3 Propriétés des calcaires rupélien et urgonien

Cette partie précise les propriétés thermiques et mécaniques des deux types de roches rencontrés dans ce mémoire. La carrière de Lugasson est constituée de calcaire du Rupélien tandis qu'il s'agit de calcaire urgonien pour la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Le comportement de ces deux roches n'est pas identique en raison de leurs propriétés qui diffèrent.

Les propriétés thermiques du calcaire rupélien sont consignées dans le tableau 1.3. Les valeurs des variables sont basées sur des expérimentations [128] menées sur des carottes cylindriques prélevées

sur les parois de la carrière et des données bibliographiques [129], [130], [131] pour l'extrapolation des propriétés à des températures élevées. La faible densité de cette roche est justifiée par sa porosité élevée qui peut atteindre 40% [132].

Température (^oC)	20	95	100	120	200	300	400	500
Conductivité thermique ($W.m^{-1}.K^{-1}$)	0,74	0,55	0,54	0,52	0,43	0,37	0,31	0,25
Masse volumique ($kg.m^{-3}$)	1675	1675	1675	1670	1660	1635	1565	1520
Capacité thermique massique ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)	669	1266	7232	7232	1446	1600	1700	1850

Tableau 1.3 – Propriétés thermiques dépendantes de la température du calcaire rupélien.

La valeur élevée de la capacité thermique massique autour des 100^oC est une modélisation de la vaporisation de l'eau. En effet, le massif rocheux de la carrière peut être considéré comme saturé sur les premiers centimètres [132]. Afin de tenir compte de l'énergie nécessaire demandée par le changement d'état, un pic affecte la capacité thermique selon la méthode développée dans [133].

Les propriétés mécaniques du calcaire rupélien sont rassemblées dans le tableau 1.4. Elles sont issues d'essais de compression sur des carottes provenant du massif de la carrière [128]. Le coefficient de Poisson est considéré constant dans les simulations. La résistance en compression du calcaire rupélien est de 1,96 MPa à température ambiante et de 2,33 MPa vers 300^oC.

Température (^oC)	20	250	600	800
Module de Young (GPa)	2,5	2	2	1.10^{-3}
Coefficient de Poisson	0,3			
Coefficient de dilatation thermique (K^{-1})	2.10^{-6}	$1,6.10^{-5}$		

Tableau 1.4 – Propriétés mécaniques dépendantes de la température du calcaire rupélien.

Les propriétés du calcaire urgonien sont basées sur les mêmes principes et expérimentations. Elles ont été mesurées sur des échantillons provenant de blocs prélevés dans l'éboulis présent au pied de la corniche à l'entrée paléolithique de la grotte. Les propriétés thermo-mécaniques sont indiquées dans les tableaux 1.5 et 1.6. La résistance en compression du calcaire urgonien vaut environ 25 MPa à 20^oC et 21 MPa à 250^oC.

Température (^oC)	20	95	100	110	115	200	300	400	500
Conductivité thermique ($W.m^{-1}.K^{-1}$)	1,83	1,37	1,34	1,31	1,3	1,07	0,92	0,76	0,61
Masse volumique ($kg.m^{-3}$)	2180								
Chaleur spécifique ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)	894	894	10000	10000	894				

Tableau 1.5 – Propriétés thermiques dépendantes de la température du calcaire urgonien.

Température (^oC)	20	250	600	800
Module de Young (GPa)	25	9	9	10^{-3}
Coefficient de Poisson	0,3			
Coefficient de dilatation thermique (K^{-1})	4.10^{-6}	10^{-5}		

Tableau 1.6 – Propriétés mécaniques dépendantes de la température du calcaire urgonien.

Les propriétés des deux calcaires sont ainsi très différentes. La porosité du calcaire urgonien est très faible (de quelques %) par rapport à celle du calcaire rupélien. Des études [134], [135], [136] ont examiné l'effet de la porosité sur la détérioration de la roche subissant des impacts thermiques. Plus la

porosité est importante, moins la roche subit d'écaillage. La densité de la roche de la grotte Chauvet-Pont d'Arc la rend ainsi beaucoup plus sensible à l'écaillage que le calcaire de la carrière de Lugasson. À chauffe équivalente, le calcaire urgonien subira donc probablement davantage d'endommagements que le calcaire rupélien.

De plus, la quantité d'éléments insolubles dans le calcaire rupélien est supérieure à celle relative au calcaire urgonien. Puisque ces éléments se composent, entre autres, d'hydroxydes de fer, leur quantité influence directement l'intensité de la rubéfaction. La couleur rouge sera ainsi plus marquée sur le calcaire rupélien que sur le calcaire urgonien.

1.6.4 Cadre théorique

Cette partie présente le cadre théorique dans lequel s'inscrit la modélisation thermo-mécanique de ce mémoire permettant la simulation des thermo-altérations précédemment décrites.

1.6.4.1 Comportement thermique des parois

Dans la roche, seul le transfert thermique par conduction est pris en compte. D'une part, les transports par convection dans ce milieu poreux sont négligés. D'autre part, la variation volumique de la roche entraîne d'infimes variations de température qui sont tout autant négligées. Le traitement de la conduction est réalisé au paragraphe 1.4.1. L'équation résolue afin de décrire la diffusion de la température dans la roche est l'équation (1.4.7).

1.6.4.2 Comportement mécanique des parois

La théorie utilisée afin de décrire les processus mécaniques est la mécanique des milieux continus. La partie 1.5.2 discute de l'application de cette théorie aux fluides. Ici, elle se simplifie puisque l'étude d'un solide permet l'utilisation d'hypothèses simplificatrices. Puisque le massif rocheux ne subit que des déplacements minimes pendant la combustion, l'hypothèse des petites perturbations est applicable. En d'autres termes, les déformations sont suffisamment faibles pour être linéarisées et abandonner les termes d'ordre supérieur. Sous cette hypothèse, il est permis d'utiliser le tenseur des déformations en petites perturbations

$$\overline{\overline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \mathbf{x}} + {}^{t}\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)\right) \tag{1.6.4}$$

$\boldsymbol{u}$ est le déplacement vectoriel (homogène à une longueur) et $\mathbf{x}$ correspond aux vecteurs d'une base orthonormée de l'espace. Les composantes du tenseur des déformations s'écrivent ainsi

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{1.6.5}$$

Les termes diagonaux représentent les allongements relatifs tandis que les autres termes correspondent à la moitié de la variation d'angle (distorsion) entre les vecteurs de la base.

Les équations décrivant les phénomènes mécaniques découlent de celles de la partie 1.5.2. D'une part, l'équation de la conservation de la masse devient inutile puisque la roche est supposée subir des déformations très petites. Les variations de masse en tout point sont négligeables. L'équation (1.5.16) se simplifie grâce à l'hypothèse des petites déformations. Le terme en divergence dans (1.5.16) étant d'ordre 2, il est négligé à l'ordre 1. De plus, la masse volumique est supposée constante puisque les variations en fonction de la température sont faibles. L'équation de quantité de mouvement devient

$$\rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2} = \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\sigma}} + \rho \mathbf{g} \tag{1.6.6}$$

L'équation d'énergie devient l'équation de la chaleur décrivant la conduction thermique.
Une loi reliant le tenseur des contraintes avec le tenseur des déformations linéarisées doit être adoptée. Pour des solides, un comportement élastique isotrope est souvent supposé puisqu'il est suffisant pour

rendre compte de la déformation dans le domaine élastique (déformation réversible Fig. 1.24). Dans cette étude, le comportement plastique (déformation irréversible) du calcaire ne sera pas étudié et le matériau sera supposé élastique isotrope à travers la loi de Hooke

$$\overline{\overline{\varepsilon}} = \frac{1+\nu_p}{E}\overline{\overline{\sigma}} - \frac{\nu_p}{E} tr(\overline{\overline{\sigma}})\overline{\overline{I}} \tag{1.6.7}$$

où E est le module de Young (Pa) et ν_p le coefficient de Poisson du matériau. Toutefois, afin de rendre

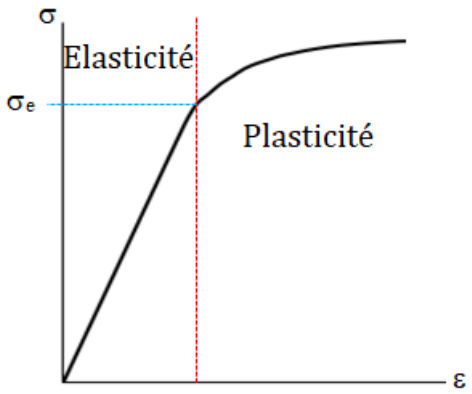

Figure 1.24 – Courbe de traction conventionnelle représentant la contrainte en fonction de la déformation. σ_e est la limite d'élasticité.

compte du phénomène de thermoélasticité, la loi de Hooke doit être modifiée. Un terme de dilatation thermique est ajouté dans l'équation (1.6.7)

$$\overline{\overline{\varepsilon}} = \frac{1+\nu_p}{E}\overline{\overline{\sigma}} - \frac{\nu_p}{E} tr(\overline{\overline{\sigma}})\overline{\overline{I}} + \alpha_T(T-T_0)\overline{\overline{I}} \tag{1.6.8}$$

avec

$$\alpha_T = \frac{1}{L_0}\frac{dL}{dT} \tag{1.6.9}$$

le coefficient de dilatation thermique linéaire (K^{-1}). T_0 est une température de référence pour laquelle la déformation est nulle et L_0 est la longueur de l'échantillon à cette température. En théorie, la définition de α_T n'est valable que lorsque la variation de longueur est proportionnelle à la température. En pratique, des essais permettant d'obtenir la dépendance de α_T avec la température légitiment l'emploi du coefficient de dilatation thermique linéaire (1.6.9) pour des variations non linéaires. La loi de comportement peut se réécrire

$$\overline{\overline{\sigma}} = \frac{E}{1+\nu_p}\overline{\overline{\varepsilon}} + \frac{E\nu_p}{(1+\nu_p)(1-2\nu_p)} tr(\overline{\overline{\varepsilon}})\overline{\overline{I}} - \frac{E\alpha_T}{1-2\nu_p}(T-T_0)\overline{\overline{I}} \tag{1.6.10}$$

Les calculs mécaniques se feront en deux dimensions sous l'hypothèse des déformations planes

$$\overline{\overline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.6.11}$$

Sous cette hypothèse, la loi de comportement (1.6.10) peut être simplifiée

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \frac{E}{(1+\nu_p)(1-2\nu_p)} \begin{pmatrix} 1-\nu_p & \nu_p & 0 \\ \nu_p & 1-\nu_p & 0 \\ \nu_p & \nu_p & 0 \\ 0 & 0 & 1-2\nu_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} - \frac{E\alpha_T}{1-2\nu_p}(T-T_0) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1.6.12}$$

Cette formule sera notée

$$\boldsymbol{\varsigma} = C\boldsymbol{\varepsilon} + \beta(T - T_0)\mathscr{I} \tag{1.6.13}$$

avec $\boldsymbol{\varsigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix}$, $C = \frac{E}{(1+\nu_p)(1-2\nu_p)} \begin{pmatrix} 1-\nu_p & \nu_p & 0 \\ \nu_p & 1-\nu_p & 0 \\ \nu_p & \nu_p & 0 \\ 0 & 0 & 1-2\nu_p \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix}$, $\beta = -\frac{E\alpha_T}{1-2\nu_p}$ et $\mathscr{I} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

1.7 La simulation numérique relative aux feux

1.7.1 Quelques références bibliographiques

L'avènement de la simulation numérique a renouvelé la science du feu dont les études s'axaient majoritairement sur les expérimentations et la recherche de relations empiriques. La CFD (Computational Fluid Dynamics) a notamment permis la simulation d'un spectre de plus en plus large de combustions malgré la complexité des phénomènes. La simulation du comportement des flammes a par exemple été confrontée aux relations empiriques telles que celles développées dans la section 1.3. Le jet sous plafond et le panache thermique ont ainsi été souvent étudiés par différents auteurs [137], [138], [139]. La sécurité incendie a tout particulièrement favorisé la progression de la modélisation de feux dans des géométries à risque. Parmi elles, les milieux confinés sont particulièrement dangereux à cause des intoxications par le dioxide ou le monoxide de carbone par exemple. Les effets du feu dans de tels milieux sont donc ardemment simulés pour des raisons de sécurité. Ces simulations peuvent être mises en perspective avec les simulations réalisées dans ce mémoire puisqu'elles ont en commun une topologie confinée. Parmi les applications sécuritaires, les simulations de feux de tunnel sont légion. Des scénarios de feu peuvent ainsi être simulés afin de prévenir des dangers [140]. Des simulations post-incendie sont aussi effectuées comme pour le tunnel Hsuehshan à Taïwan [141]. La circulation des fumées intéresse aussi beaucoup les ingénieurs pour des raisons de toxicité. Par exemple, Rho *et al.* [142] étudient le comportement des fumées dans les tunnels tandis que Zhao *et al.* [143] ainsi que Meng *et al.* [144] simulent la circulation de fumées dans un métro. Outre les tunnels, les parkings représentent aussi un danger de par la proximité des voitures les unes aux autres. Cet aspect est d'ailleurs étudié dans [145] en plus de la circulation des fumées dans un tel milieu. Le comportement des fumées est aussi analysé dans [146] et [147] par la simulation numérique. D'autres applications comme le stockage de déchets inflammables sont aussi examinées [148]. Notons que la simulation de feux dans des milieux confinés est très souvent réalisée dans des géométries régulières limitées par des parois planes. Cette propriété découle de l'application sécuritaire dans des structures modernes.

Les interactions entre feu et structure sont de même largement étudiées par la communauté scientifique. L'impact de scénarios de feux a ainsi été testé sur la structure d'un parking ouvert [149]. De même, la modélisation thermo-mécanique des effets de feux sur des murs ont été effectuées par Nguyen *et al.* [150], Nadjai *et al.* [151] et Nassif *et al.* [152]. Le comportement d'une myriade de matériaux aux hautes températures est aussi analysé par beaucoup d'auteurs comme par exemple le béton [153] ou l'acier [154]. Plus généralement, à l'image de ce qui est proposé dans ce mémoire, certains auteurs proposent un couplage fluide-structure afin de simuler l'ensemble des phénomènes (combustion et thermo-mécanique). C'est le cas par exemple des recherches conduites par Luo *et al.* [155] et par Pesavento *et al.* [156].

Dans le cadre du projet IThEM précédant l'actuel programme CarMoThaP, des études numériques de feux ont aussi été menées. Grâce au logiciel FDS, un scénario de feu fut simulé dans une géométrie approchée de la Galerie des Mégacéros [157]. De même, les logiciels FDS et Cast3m [128] ont permis de simuler un feu et ses effets sur une paroi de la carrière expérimentale de Lugasson évoquée dans

l'introduction. L'étude numérique de feux préhistoriques est entièrement novatrice puisqu'aucune étude similaire n'a pour l'heure été conduite.

1.7.2 Choix du logiciel de combustion

Les simulations numériques de feux des études précédentes ont été réalisées par différents logiciels. Pour cette étude, le choix du code de calcul doit être réfléchi. Le code doit permettre la simulation de combustion dans des milieux confinés, totalement irréguliers comme peut l'être une grotte. Il devra de plus être couplé avec un logiciel de simulation mécanique donc le caractère *open source* du logiciel de combustion constituerait un avantage indispensable. Parmi les logiciels *open source*, plusieurs codes bien établis sont souvent utilisés par les scientifiques : FDS (Fire Dynamics Simulator) [86], ISIS [87] et FireFOAM [29], un module du logiciel OpenFOAM [28]. Le code FDS est largement répandu et constitue le logiciel le plus utilisé en ingénierie incendie. FireFOAM et ISIS sont plus appliqués dans le domaine de la recherche. Par ailleurs, le logiciel Fluent [158] couvre un très large éventail d'applications liées à la mécanique des fluides. Son coût est malheureusement rédhibitoire. FDS ne permet pas la simulation de feux dans des géométries irrégulières puisque ce logiciel est construit sur une résolution des équations uniquement valables sur des maillages réguliers. Il est ainsi principalement dédié à des applications modernes où les parois sont la plupart du temps régulières et planes. Le maillage d'une grotte pourrait être approché à l'aide de sous-blocs réguliers (des pavés) mais cela constituerait une tâche fastidieuse et imprécise. L'utilisation du module de maillage Pyrosim [159] (payant) avec FDS permet les simulations dans des géométries singulières mais d'autres inconvénients apparaissent. La rapidité de FDS pour des géométries régulières est basée sur un solveur de Poisson qui n'est plus aussi efficace pour des maillages irréguliers. De plus, FDS n'est pas massivement parallélisable. Cet aspect constitue un frein à la réalisation de calculs dans une géométrie telle que la grotte.

Dans ce mémoire, la simulation de la combustion a été exécutée par le logiciel OpenFOAM. Cet outil est massivement parallélisable et il gère tout type de géométrie. Étant moins utilisé que le logiciel FDS, il possède néanmoins des inconvénients inhérents au manque d'usage. Le manque de documentation ne facilite pas la prise en main de ce logiciel et la présence d'erreurs au sein du code exige une attention particulière.

Parmi les références citées plus haut, l'étude menée par Zadeh *et al.* [137] est basée sur le logiciel FireFOAM. Ce code est très utilisé pour modéliser les flammes et les panaches thermiques [160], [161], [47], [162] puisqu'une précision importante est nécessaire dans ce type d'étude. FireFOAM est aussi utilisé pour des feux de compartiments qui sont par définition confinés. Vilfayeau *et al.* [163], Le *et al.* [164] et Trouvé *et al.* [165] ont ainsi mené des recherches sur la simulation de feux de compartiment. À la connaissance de l'auteur, aucune étude réalisée dans une géométrie irrégulière avec FireFOAM n'a été publiée.

1.8 Structure numérique de FireFOAM

Cette partie, dédiée à OpenFOAM, vise à donner un grand nombre d'éléments pour la compréhension du code. Inclus dans OpenFOAM, le module FireFOAM gère la résolution du système d'équations (1.5.106) et de l'équation de transfert radiatif (1.4.24). Ce logiciel, possédant une notice avare en explications numériques, cette partie détaille les étapes de calcul des simulations effectuées par FireFOAM dans ce mémoire. Ces étapes sont facilement transposables à d'autres calculs possédant des paramètres différents (schémas numériques, interpolations, préconditionnement, etc). De plus, l'utilisation d'un autre module que FireFOAM modifie simplement le système d'équations résolues sans altérer l'idéologie de la procédure de résolution commune à tout module d'OpenFOAM.

Les méthodes développées ci-après sont pour la plupart décrites en détail dans des livres dédiés à la résolution numérique de la mécanique des fluides [166], [167] (contient une introduction à OpenFOAM) et [168]. Certaines considérations numériques sont issues de la thèse de H. Jasak [169].

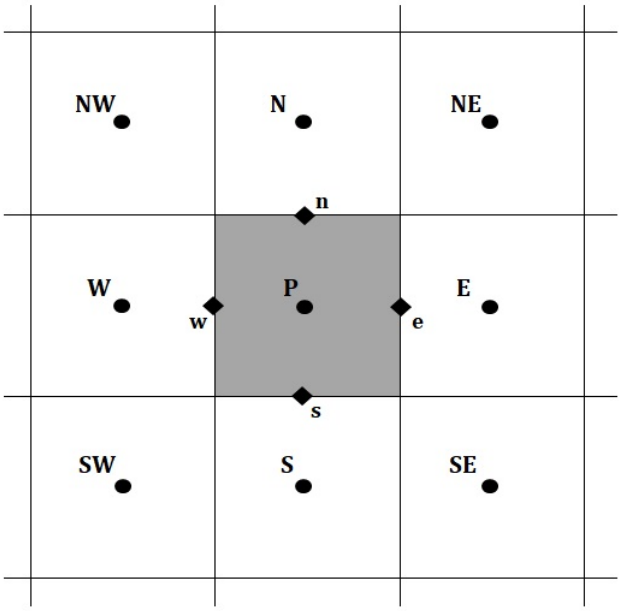

Figure 1.25 – Maillage cartésien en 2 dimensions et notations utilisées.

1.8.1 Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis permet la résolution de systèmes d'équations aux dérivées partielles. Cette approche requiert le maillage du domaine d'étude par des volumes élémentaires nommés cellules. Les cellules ne s'intersectent pas et couvrent l'ensemble de la géométrie. Chaque variable est alors approchée sur ces cellules grâce à la résolution des équations mathématiques par la méthode des volumes finis. Toutefois, les équations doivent être écrites sous forme intégrale puisque le travail s'effectue sur des volumes. Or, le système d'équations (1.5.106) établi dans la partie 1.5.2 décrit les différentes variables de manière locale.

Avant d'établir la formulation intégrale de ces équations, notons que ces équations peuvent toutes s'écrire

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{F}(\phi) = \mathcal{S}(\phi) \tag{1.8.1}$$

Par exemple, l'équation de conservation de la masse est obtenue en posant $\phi = \overline{\rho}$ et $\mathbf{F}(\phi) = \overline{\rho}\widetilde{\mathbf{u}}$, le terme source étant nul. Ainsi, il suffit de traiter l'équation (1.8.1) puis d'extrapoler le résultat pour chacune des équations de l'aérothermochimie.

L'intégration de (1.8.1) sur le volume V d'une cellule quelconque appartenant au maillage du domaine mène à

$$\int_V \frac{\partial \phi}{\partial t}\,\mathrm{d}V = -\int_V \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{F}(\phi)\,\mathrm{d}V + \int_V \mathcal{S}(\phi)\,\mathrm{d}V \tag{1.8.2}$$

Le terme contenant la divergence peut se réécrire sous la forme d'une intégrale de surface grâce au théorème de Green-Ostrogradski

$$\int_\Omega \frac{\partial \phi}{\partial t}\,\mathrm{d}V = -\int_{\partial V} \mathbf{F}(\phi).\mathbf{n}\,\mathrm{d}\partial V + \int_V \mathcal{S}(\phi)\,\mathrm{d}V \tag{1.8.3}$$

où ∂V est l'enveloppe surfacique du volume V et $\mathbf{n}$ la normale à cette surface. Il reste à approximer chaque membre de l'équation précédente à l'aide des valeurs de la cellule étudiée. Par souci de simplicité, la formulation des expressions s'effectuera en 2 dimensions sur un maillage cartésien dont l'emplacement des variables sera le centre de gravité des volumes de contrôle (Fig. 1.25). Ainsi, les volumes en 3 dimensions deviennent des surfaces en deux dimensions, et les surfaces deviennent des segments.

Approximation de l'intégrale de volume Les intégrales de volume sont de la forme $\int_V \mathcal{S}(\phi)\,\mathrm{d}V$. L'approximation la plus simple consiste à poser

$$\int_V \mathcal{S}(\phi)\,\mathrm{d}V \approx \mathcal{S}_P V \tag{1.8.4}$$

Ainsi, aucune interpolation n'est nécessaire car la valeur en P est connue. Cette approximation est exacte si la valeur de $\mathcal{S}$ est constante sur toute la cellule ou si $\mathcal{S}$ évolue linéairement au sein de la cellule. Il s'ensuit que l'approximation est d'ordre 2. D'autres approximations prenant en compte les valeurs de $\mathcal{S}$ au centre des cellules voisines permettent d'atteindre des ordres plus élevés [166]. Néanmoins, par défaut, OpenFOAM utilise cette approximation.

Approximation de l'intégrale de surface Tout d'abord, l'intégrale de surface peut être décomposée sur toutes les surfaces de la cellule :

$$\int_{\partial V} \mathbf{F}(\phi).\mathbf{n}\,\mathrm{d}\partial V = \sum_k \int_{S_k} \mathbf{F}(\phi).\mathbf{n}\,\mathrm{d}S_k \tag{1.8.5}$$

avec $\partial V = \cup_k S_k$. En 2 dimensions, S_k est la longueur du segment k. En appliquant cela à la cellule grisée de la figure 1.25,

$$\int_{\partial V} \mathbf{F}(\phi).\mathbf{n}\,\mathrm{d}\partial V = F_e S_e + F_n S_n + F_w S_w + F_s S_s \tag{1.8.6}$$

Les valeurs des variables aux surfaces ne sont pas connues. Il reste donc à exprimer les inconnues aux surfaces à l'aide des inconnues principales, c'est-à-dire celles aux centres des cellules. Pour la surface e par exemple,

$$F_e = \lambda_e F_P + (1-\lambda_e) F_E \tag{1.8.7}$$

Il existe de nombreux schémas d'interpolation permettant de fixer λ_e. OpenFOAM donne le choix du schéma d'interpolation pour chaque variable entrant en jeu. Chaque cas est décrit dans la partie suivante.

1.8.2 Schémas d'interpolation des termes de surface

Seuls les schémas d'interpolation utilisés dans les simulations de ce mémoire sont détaillés. Cependant, d'autres schémas numériques sont décrits dans [166] ou [168]. Le premier schéma consiste en une interpolation linéaire, de sorte que

$$\lambda_{e,lin} = \frac{1}{2} \tag{1.8.8}$$

tant que le maillage est régulier (la distance entre P et e est égale à celle entre e et E).

Le second est le schéma upwind du premier ordre. Il consiste à supposer que la variable n'a pas évolué dans le sens de l'écoulement

$$\lambda_{e,upw} = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{u}.\mathbf{n_e} > 0 \\ 0 & \text{si } \mathbf{u}.\mathbf{n_e} < 0 \end{cases} \tag{1.8.9}$$

où $\mathbf{n_e}$ est la normale à la face e.

Il est intéressant d'examiner les propriétés des deux schémas. Le développement en série de Taylor de la variable F_e au point P révèle que le schéma est d'ordre 1 car seul le premier terme du développement est retenu

$$F_e = F_P + (x_e - x_P)\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_P + \frac{(x_e - x_P)^2}{2}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right)_P + o((x_e - x_P)^3) \tag{1.8.10}$$

Ainsi, l'erreur s'apparente à un flux puisqu'elle est de la forme $\gamma\frac{\partial F}{\partial x}$. Ce schéma numérique apporte ainsi une diffusion numérique importante qui atténue l'amplitude des phénomènes par rapport à la réalité en évitant toutefois les oscillations.

L'approximation linéaire correspond à un schéma aux différences centrées d'ordre 2. En effet, le développement en série de Taylor de F_E autour du point P est

$$F_E = F_P + (x_E - x_P)\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_P + \frac{(x_E - x_P)^2}{2}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right)_P + o((x_E - x_P)^3) \tag{1.8.11}$$

En soustrayant ce développement au double du précédent et en supposant toujours que le maillage est régulier, l'équation obtenue est

$$F_e = \frac{F_P + F_E}{2} - \frac{(x_E - x_P)^2}{2}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right)_P + o((x_E - x_P)^3) \tag{1.8.12}$$

$\frac{F_P+F_E}{2}$ correspond à l'approximation de F_e. L'erreur est bien sous la forme d'une dérivée seconde. La solution converge plus facilement en espace mais ce schéma n'évite pas les oscillations.

Deux autres schémas d'interpolation sont basés sur les deux précédents. Ils consistent à estimer la valeur du point à la surface en faisant une moyenne pondérée des valeurs approchées par le schéma upwind et le schéma linéaire

$$F_e = \eta F_{e,lin} + (1 - \eta) F_{e,upw} \tag{1.8.13}$$

Cette méthode permet d'obtenir un schéma d'ordre supérieur à 1 tout en évitant des oscillations grâce à l'introduction d'une faible diffusion numérique due au schéma upwind. Chacun des deux schémas choisit une valeur pour η. Le premier s'appelle LUST (Linear Upwind Stabilised Transport). Il s'agit d'un mélange contenant 75% du schéma linéaire et 25% du schéma upwind : $\eta_{LUST} = 0,75$.

Le second schéma est un schéma TVD (Total Variation Diminishing) s'appelant limitedLinear dans OpenFOAM. Il nécessite le calcul d'un limiteur Ψ dépendant de la variable $\hat{r}$ définie par le rapport des deux gradients successifs dans le sens de la circulation du fluide

$$\hat{r} = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_E - \phi_P} \tag{1.8.14}$$

lorsque $\mathbf{u}.\mathbf{n_e} > 0$. Le limiteur utilisé est le limiteur Minmod [170] qui demande à l'utilisateur de renseigner un coefficient k tel que $0 < k \leq 1$

$$\Psi(\hat{r}) = \frac{2}{k}\hat{r} \tag{1.8.15}$$

η correspond au limiteur Ψ borné entre 0 et 1

$$\eta_{TVD} = max(min(\Psi(\hat{r}), 1), 0) \tag{1.8.16}$$

Ainsi, lorsque le point P n'est pas le siège d'un changement de comportement du fluide, $\hat{r} \simeq 1$. De plus, le coefficient k est fréquemment choisi unitaire. De ce fait, $\eta = 1$ et le schéma employé est le schéma linéaire. Il n'y a pas besoin de diffusion numérique puisqu'il n'y a pas de changement brusque. Dans le cas contraire où le point P abrite un fort changement, $\hat{r}$ est très petit de sorte que $\eta = 0$ permette l'utilisation du schéma upwind, plus diffusif et évitant les oscillations.

La figure 1.26 compare l'application de trois interpolations (linéaire, upwind et LUST) à un cas quelconque. L'écoulement est supposé être dirigé de P vers E.

1.8.2.1 Termes en gradient

Les termes en gradient intervenant dans les équations correspondent au cas $\mathbf{F}(\phi) = \phi\overline{\overline{I}}$. Ces termes sont traités par le schéma linéaire. Il vient ainsi

$$\int_{\partial V} \phi\overline{\overline{I}}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}\partial V \approx \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_E)\mathbf{n} \tag{1.8.17}$$

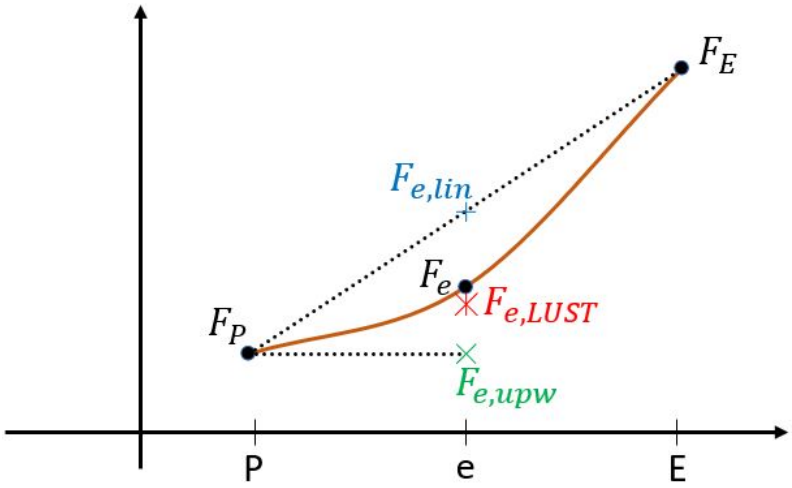

Figure 1.26 – Interpolations de la valeur de la variable au point e par les schémas linéaire, upwind et LUST.

1.8.2.2 Termes d'advection

Les termes d'advection correspondent au cas où $\mathbf{F}(\phi) = \phi\mathbf{u}$ dans l'équation (1.8.1). Ils apparaissent donc comme des intégrales de surface dans la discrétisation. Ils représentent le transport de la quantité ϕ par le mouvement des fluides dont la vitesse locale est $\mathbf{u}$. Le terme d'advection dans les équations de quantité de mouvement correspond à $\phi = \rho u_i$. Le schéma d'interpolation LUST est utilisé pour traiter ce terme. Dans les équations de transport des espèces chimiques se trouvent les termes d'advection correspondant à $\phi = \rho Y_j$. Le schéma "limitedLinear" est utilisé dans ce cas avec un coefficient $k = 1$. Le même schéma est employé pour traiter le cas $\phi = \rho h$ dans l'équation d'énergie et $\phi = \rho k$ dans l'équation d'énergie cinétique de turbulence.

Enfin, une partie des contraintes visqueuses est traitée comme un terme d'advection. La divergence de la contrainte visqueuse apparait dans le système d'équation (1.5.106). Ce terme s'écrit aussi

$$\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}.\left(\mu_{eff}\left({}^{t}\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u} + \overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u} - \frac{2}{3}tr\left(\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u}\right)\overline{\overline{\mathbf{I}}}\right)\right) = \overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}.(\mu_{eff}\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u}) + \overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}.\left(\mu_{eff}dev_2\left({}^{t}\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u}\right)\right) \tag{1.8.18}$$

en introduisant un déviateur modifié $dev_2(A) = A - \frac{2}{3}tr(A)\overline{\overline{I}}$. La propriété selon laquelle la trace d'une matrice est égale à la trace de la transposée de cette matrice est aussi utilisée dans l'égalité (1.8.18). Le terme correspondant au déviateur est traité comme un terme d'advection par un schéma linéaire. Le premier terme pouvant s'apparenter à un laplacien est traité comme un terme de diffusion.

1.8.2.3 Termes de diffusion

Les termes de diffusion correspondent au cas $\mathbf{F}(\phi) = \Gamma\boldsymbol{\nabla}\phi$. Il faut donc interpoler aux faces les valeurs du coefficient de diffusion et du gradient de ϕ. Le coefficient de diffusion est calculé par l'interpolation linéaire. Concernant le gradient, il est nécessaire d'utiliser une méthode pour l'estimer. L'approche utilisée par OpenFOAM est détaillée dans la suite mais la thèse de H. Jasak [169] fournit des compléments. Une première méthode consiste à développer le gradient à la surface en une combinaison des gradients aux centres des cellules

$$(\boldsymbol{\nabla}\phi)_e = \lambda_e(\boldsymbol{\nabla}\phi)_P + (1 - \lambda_e)(\boldsymbol{\nabla}\phi)_E \tag{1.8.19}$$

Une interpolation linéaire correspondant à $\lambda_e = \frac{1}{2}$ est ensuite appliquée. Puis, l'approximation des gradients au centre des cellules est effectuée comme au paragraphe 1.8.2.1. Cette approche est malheureusement imprécise. Une seconde méthode consiste à discrétiser le gradient autour du point e

$$(\boldsymbol{\nabla}\phi)_e.\mathbf{n_e} = \frac{\phi_E - \phi_P}{\|\mathbf{PE}\|} \tag{1.8.20}$$

Mais l'équation (1.8.20) est uniquement valable lorsque le maillage est orthogonal (par exemple, comme la figure 1.25). Or, même l'utilisation de mailles exclusivement hexaédriques peut mener à un maillage non orthogonal à cause des changements de taille des cellules. Il n'est donc pas possible d'utiliser cette méthode pour un maillage quelconque (Fig. 1.27). L'idée est de diviser le vecteur normal à la face e en

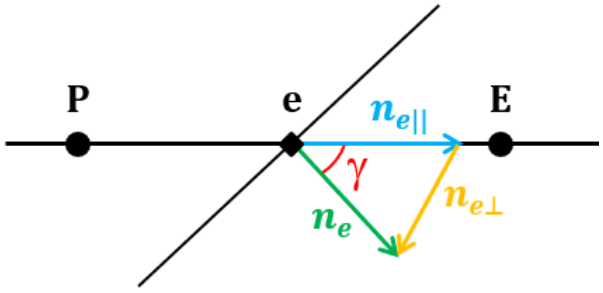

Figure 1.27 – Schéma d'un maillage quelconque avec représentation des vecteurs utilisés dans le texte. $\mathbf{n_e}$ est un vecteur unitaire.

deux vecteurs dont l'un est parallèle à **PE**

$$\mathbf{n_e} = \mathbf{n_{e\perp}} + \mathbf{n_{e\|}} \tag{1.8.21}$$

Plusieurs choix sont possibles. OpenFOAM définit les vecteurs de sorte que

$$\mathbf{n_{e\|}} = \frac{\mathbf{PE}}{\mathbf{n_e}.\mathbf{PE}} \tag{1.8.22}$$

$$\mathbf{n_{e\perp}} = \mathbf{n_e} - \mathbf{n_{e\|}} \tag{1.8.23}$$

La seconde méthode peut maintenant être utilisée sur la partie concernant $\mathbf{n_{e\|}}$

$$(\boldsymbol{\nabla}\phi)_e.\mathbf{n_{e\|}} = \frac{\phi_E - \phi_P}{\|\mathbf{PE}\|}\frac{\mathbf{PE}}{\|\mathbf{PE}\|}.\frac{\mathbf{PE}}{\mathbf{n_e}.\mathbf{PE}} = \frac{1}{cos\gamma}\frac{\phi_E - \phi_P}{\|\mathbf{PE}\|} \tag{1.8.24}$$

Il en résulte

$$(\boldsymbol{\nabla}\phi)_e.\mathbf{n_e} = \frac{1}{cos\gamma}\frac{(\phi_E - \phi_P)}{\|\mathbf{PE}\|} + \mathbf{n_{e\perp}}.(\boldsymbol{\nabla}\phi)_e \tag{1.8.25}$$

Le dernier terme de l'égalité est calculé par la première méthode décrite dans ce paragraphe car il n'existe pas d'autre moyen. Dans OpenFOAM, cette méthode correspond au schéma "corrected". Elle est suffisante tant que le paramètre "non-orthogonalité" du maillage global ne dépasse pas 60^o. En d'autres termes, tant que l'angle entre $\mathbf{n_e}$ et **PE** reste inférieur à 60^o pour tous les points du maillage, la méthode utilisée est suffisante.

L'application de cette méthode permet donc d'estimer le gradient à la surface et donc d'estimer le terme en laplacien à la surface.

1.8.3 Schéma en temps

La discrétisation temporelle s'effectue par le schéma d'Euler. Ainsi, la dérivée temporelle d'une variable $\mathscr{V}$ est approximée par

$$\frac{\partial \mathscr{V}}{\partial t} = \frac{\mathscr{V}^{n+1} - \mathscr{V}^n}{\Delta t} \tag{1.8.26}$$

Il s'agit d'un schéma du premier ordre correspondant à la discrétisation la plus simple. Toutes les dérivées temporelles des équations résolues dans ce mémoire sont traitées par cette méthode.

1.8.4 Résolution de l'équation de transfert radiatif

L'équation de transfert radiatif (1.4.24) est plus coûteuse numériquement que les autres équations décrivant la physique du problème. Non seulement, cette équation doit être résolue sur toutes les cellules, mais elle doit aussi être résolue dans toutes les directions de l'espace (en théorie). La méthode employée dans ce mémoire s'appelle fvDOM (finite volume discrete ordinates method) dans OpenFOAM. Elle consiste à résoudre l'équation (1.4.24) dans toutes les cellules ainsi que dans un certain nombre de directions défini par l'utilisateur. L'ensemble de l'espace peut être parcouru par deux angles, souvent notés $\theta \in [0;\pi]$ et $\varphi \in [0;2\pi]$ (Fig. 1.28). À l'angle solide infinitésimal $\mathrm{d}\Omega$ sont associés les angles infinitésimaux $\Delta\theta$ et $\Delta\varphi$. Ces angles infinitésimaux sont déterminés par le nombre de directions choisi par l'utilisateur. Dans ce mémoire, 32 discrétisations angulaires sont effectuées. Cela correspond à 8 discrétisations dans le disque engendré par φ et 4 dans le demi-disque engendré par θ. Ainsi, $\Delta\theta = \Delta\varphi = 45^o$. Concernant la résolution spatiale, la méthode des volumes finis est employée. L'équa-

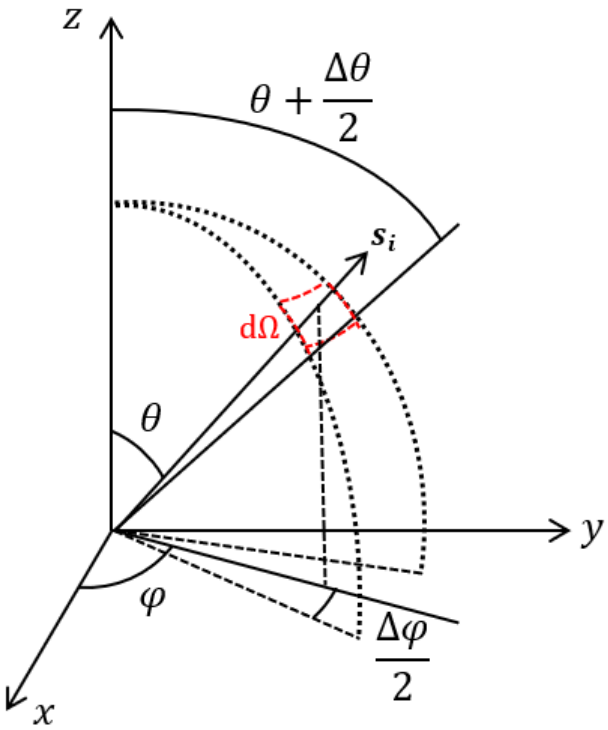

Figure 1.28 – Schématisation de l'angle solide et notations utilisées.

tion de transfert radiatif se prête à cette méthode puisqu'elle est de la même forme que l'équation (1.8.1) en choisissant $\mathbf{F}(\phi) = I(\mathbf{x},\mathbf{s})\mathbf{s}$. Ainsi, l'équation est intégrée sur chaque volume élémentaire comme précédemment, mais est aussi intégrée sur l'angle solide autour de chaque direction $\mathbf{s_i}$

$$\int_{\Omega_i}\int_V \boldsymbol{\nabla}.(I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\mathbf{s_i})\,\mathrm{d}V\mathrm{d}\Omega_i = \int_{\Omega_i}\int_V \left[a\left(\frac{\sigma T^4}{\pi} - I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\right) + \frac{E_{\phi,v}}{4\pi}\right]\mathrm{d}V\mathrm{d}\Omega_i \tag{1.8.27}$$

Par le théorème de Green-Ostrogradski, le membre de gauche est transformé en intégrale surfacique

$$\int_{\Omega_i}\int_{\partial V} I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\mathbf{s_i}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}S\mathrm{d}\Omega_i = \int_{\Omega_i}\int_V \left[a\left(\frac{\sigma T^4}{\pi} - I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\right) + \frac{E_{\phi,v}}{4\pi}\right]\mathrm{d}V\mathrm{d}\Omega_i \tag{1.8.28}$$

$I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})$ ne dépend pas de la direction à l'intérieur de l'angle solide autour de $\mathbf{s_i}$ et il peut donc sortir de l'intégrale portant sur l'angle solide

$$\left(\int_{\partial V} I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\,\mathrm{d}S\right)\left(\int_{\Omega_i}\mathbf{s_i}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}\Omega_i\right) = \int_{\Omega_i}\int_V \left[a\left(\frac{\sigma T^4}{\pi} - I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\right) + \frac{E_{\phi,v}}{4\pi}\right]\mathrm{d}V\mathrm{d}\Omega_i \tag{1.8.29}$$

L'intégrande du terme de droite est aussi considéré indépendant de la direction dans l'angle solide. De plus, l'intégrale de volume est approximée par la méthode explicitée au paragraphe du même nom dans la section 1.8.1. Il en découle

$$\left(\int_{\partial V} I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\,\mathrm{d}S\right)\left(\int_{\Omega_i}\mathbf{s_i}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}\Omega_i\right)=\left[a\left(\frac{\sigma T^4}{\pi}-I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})\right)+\frac{E_{\phi,v}}{4\pi}\right]V\int_{\Omega_i}\mathrm{d}\Omega_i \tag{1.8.30}$$

L'intégrale surfacique du membre de gauche est approximée par la méthode précédemment décrite (§1.8.1) basée sur le schéma upwind. Les deux autres intégrales sont calculées analytiquement

$$\int_{\Omega_i}\mathrm{d}\Omega_i=\int_{\varphi-\frac{\Delta\varphi}{2}}^{\varphi+\frac{\Delta\varphi}{2}}\int_{\theta-\frac{\Delta\theta}{2}}^{\theta+\frac{\Delta\theta}{2}} sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=2\Delta\varphi\ sin\theta\ sin\frac{\Delta\theta}{2} \tag{1.8.31}$$

$$\int_{\Omega_i}\mathbf{s_i}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}\Omega_i=\int_{\varphi-\frac{\Delta\varphi}{2}}^{\varphi+\frac{\Delta\varphi}{2}}\int_{\theta-\frac{\Delta\theta}{2}}^{\theta+\frac{\Delta\theta}{2}}\begin{pmatrix} sin\theta\ sin\varphi\\ sin\theta\ cos\varphi\\ cos\theta\end{pmatrix}.\mathbf{n}sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\begin{pmatrix} sin\varphi\ sin\frac{\Delta\varphi}{2}(\Delta\theta-cos2\theta\ sin\Delta\theta)\\ cos\varphi\ sin\frac{\Delta\varphi}{2}\ (\Delta\theta-cos2\theta\ sin\Delta\theta)\\ \frac{\Delta\varphi}{2}sin2\theta\ sin\Delta\theta\end{pmatrix}.\mathbf{n} \tag{1.8.32}$$

Concernant le déroulement de la résolution numérique, une direction $\mathbf{s_i}$ est d'abord choisie, puis $I(\mathbf{x},\mathbf{s_i})$ est résolu sur toutes les cellules. Une fois cette tâche effectuée, une nouvelle direction est choisie et la résolution s'effectue de nouveau sur toutes les cellules et ainsi de suite pour toutes les directions. À l'issue de ces calculs, il y a autant de variables I_i stockées que de directions.

Cette résolution ne s'effectue pas à chaque pas de temps. Le temps de calcul d'une telle approche est en effet prohibitif. Le calculateur va donc résoudre (1.5.106) sur plusieurs pas de temps avant de résoudre l'équation de transfert radiatif. Le choix est laissé à l'utilisateur. La fréquence choisie pour cette étude est d'une résolution de l'équation de rayonnement tous les dix pas de temps. Pendant les neuf autres pas, les luminances obtenues lors du précédent calcul sont conservées. Une étude de l'impact de la fréquence sur les résultats est menée au paragraphe 3.2.3.

1.8.5 Résolution du champ de pression et de la vitesse

Les équations de Navier-Stokes ne contiennent pas d'équation propre à la pression. Celle-ci apparait dans l'équation de quantité de mouvement et dans celle d'énergie. L'équation d'énergie est plutôt utilisée pour calculer l'enthalpie et la température. L'équation de quantité de mouvement relie principalement la vitesse au champ de pression. Il est ainsi nécessaire de résoudre ces deux variables qui sont couplées dans une équation vectorielle non linéaire. Pour ce faire, OpenFOAM utilise une méthode à correction de pression. Elle nécessite une équation de pression obtenue à partir des équations de continuité et de quantité de mouvement.

1.8.5.1 Équation de pression

Intéressons-nous tout d'abord à l'équation de quantité de mouvement du système (1.5.106). Par souci de simplicité, les symboles des moyennes sont retirés dans la suite. OpenFOAM décompose le champ de pression statique

$$p=p_{rgh}+\rho\mathbf{g}.\mathbf{z}+p_{ref} \tag{1.8.33}$$

où $\mathbf{z}=z\mathbf{u_z}$ est la hauteur (vectorielle) de la cellule par rapport à l'altitude de référence, p_{ref} est la pression de référence à l'altitude de référence et p_{rgh} est la pression statique sans la contribution hydrostatique. Cette décomposition permet de réécrire le gradient de pression

$$\boldsymbol{\nabla}p=\boldsymbol{\nabla}p_{rgh}+\mathbf{g}.\mathbf{z}\boldsymbol{\nabla}\rho+\rho\mathbf{g} \tag{1.8.34}$$

En vue d'injecter cette relation dans l'équation de quantité de mouvement, les termes sont réarrangés

$$\boldsymbol{\nabla}p-\rho\mathbf{g}=\boldsymbol{\nabla}p_{rgh}+\mathbf{g}.\mathbf{z}\boldsymbol{\nabla}\rho \tag{1.8.35}$$

L'équation de quantité de mouvement du système (1.5.106) se réécrit donc (sans les symboles de moyenne)

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\boldsymbol{\nabla} p_{rgh} - \mathbf{g}.\mathbf{z}\boldsymbol{\nabla}\rho + \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\tau}} + \mathbf{F_i} \tag{1.8.36}$$

Maintenant, par des jeux de notation, la discrétisation au point P peut se mettre sous la forme

$$A_p \mathbf{u}_P + \sum_l A_l \mathbf{u}_l = \mathbf{Q} - (\boldsymbol{\nabla} p_{rgh})_P - (\mathbf{g}.\mathbf{z})_P (\boldsymbol{\nabla}\rho)_P \tag{1.8.37}$$

où la somme porte sur toutes les cellules voisines de P intervenant dans la discrétisation de l'équation et $\mathbf{Q}$ correspond aux termes sources. Les termes A_i dépendent aussi de la vitesse puisque l'équation n'est pas linéaire. Cette approche est détaillée dans [166]. Plus spécifiquement, la discrétisation implémentée dans OpenFOAM est décrite dans [171]. En posant, $\mathbf{H} = \mathbf{Q} - \sum_l A_l \mathbf{u}_l$, l'équation précédente se réécrit

$$\mathbf{u}_P = \frac{\mathbf{H}}{A_P} - \frac{1}{A_P}(\boldsymbol{\nabla} p_{rgh})_P - \frac{(\mathbf{g}.\mathbf{z})_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla}\rho)_P \tag{1.8.38}$$

Cette équation permet donc d'obtenir le champ de vitesse en cellule P. Le gradient de pression doit être conservé sous cette forme et ne doit pas être discrétisé pour l'instant. En effet, OpenFOAM utilise une localisation collocative des inconnues aux centres des cellules. Cela signifie que tous les termes stockés se trouvent aux centres des cellules. Or l'utilisation d'interpolations linéaires aux surfaces couplée à ce type de localisation entraîne un problème nommé découplage pair-impair. La discrétisation du gradient de pression serait telle que les termes p_i ne dépendraient que de p_{i-2} et p_{i+2}. Le résultat serait symétriquement le même pour p_{i-1}. Ainsi, le champ de pression serait divisé en deux sous-champs indépendants l'un de l'autre. Retarder la discrétisation du gradient de pression permet d'éviter le problème du découplage pair-impair. Cette approche est appelée interpolation de Rhie-Chow [172].

Une seconde équation est nécessaire pour calculer la pression à partir de ce champ de vitesse. Pour ce faire, l'opérateur divergence est appliqué à l'équation précédente multipliée par la masse volumique du fluide

$$\boldsymbol{\nabla}.(\rho_P \mathbf{u}_P) = \boldsymbol{\nabla}.\left(\rho_P \frac{\mathbf{H}}{A_P}\right) - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla} p_{rgh})_P\right) - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P (\mathbf{g}.\mathbf{z})_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla}\rho)_P\right) \tag{1.8.39}$$

Le premier terme de cette équation est présent dans l'équation de continuité. En injectant cette relation dans l'équation de continuité, il vient l'équation de pression

$$-\frac{\partial \rho_P}{\partial t} = \boldsymbol{\nabla}.\left(\rho_P \frac{\mathbf{H}}{A_P}\right) - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla} p_{rgh})_P\right) - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P (\mathbf{g}.\mathbf{z})_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla}\rho)_P\right) \tag{1.8.40}$$

OpenFOAM fait intervenir la compressibilité dans l'équation plutôt que la masse volumique ρ

$$\psi = \frac{\partial \rho}{\partial p}\Big)_T = \frac{\rho}{p} \tag{1.8.41}$$

In fine, l'équation (1.8.40) se réécrit

$$\frac{\partial \psi (p_{rgh} + \rho \mathbf{g}.\mathbf{z} + p_{ref})_P}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.\left(\rho_P \frac{\mathbf{H}}{A_P}\right) - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla} p_{rgh})_P\right) - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P (\mathbf{g}.\mathbf{z})_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla}\rho)_P\right) = 0 \tag{1.8.42}$$

La discrétisation de la divergence de la pression donne

$$\int_V \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla} p_{rgh})_P\right) \mathrm{d}V = \sum_f \left(\frac{\rho_P}{A_P}(\boldsymbol{\nabla} p_{rgh})_P\right)_f S_f \tag{1.8.43}$$

Maintenant, le gradient de pression nécessaire au calcul se trouve aux faces des cellules. Il s'exprime en fonction des valeurs de la pression aux centres des cellules. Cela supprime le découplage pair-impair.

Pour des raisons de stabilité, un terme correctif est ajouté à l'équation de pression (1.8.42)

$$\mathbf{Corr} = \frac{\rho_P}{A_P}\left[1 - \min\left(\frac{|\boldsymbol{\varphi}_P^{n-1} - \rho_P^{n-1}\mathbf{u}_P^{n-1}|}{|\boldsymbol{\varphi}_P^{n-1}|}, 1\right)\right]\frac{\boldsymbol{\varphi}_P^{n-1} - \rho_P^{n-1}\mathbf{u}_P^{n-1}}{\Delta t} \tag{1.8.44}$$

où l'exposant n est relatif au pas de temps, Δt est le pas de temps et $\boldsymbol{\varphi}$ est censé représenter $\rho\mathbf{u}$. Le terme **Corr** est dépendant de l'erreur au pas précédent sur le calcul de $\boldsymbol{\varphi}$. S'il n'y a pas d'erreur, $\boldsymbol{\varphi} = \rho\mathbf{u}$ et $\mathbf{Corr} = \mathbf{0}$. L'équation de pression résolue par OpenFOAM est

$$\frac{\partial\psi(p_{rgh} + \rho\mathbf{g}.\mathbf{z} + p_{ref})_P}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.\left(\rho_P\frac{\mathbf{H}}{A_P}\right) + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{Corr} - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P}{A_P}\left(\boldsymbol{\nabla}p_{rgh}\right)_P\right) - \boldsymbol{\nabla}.\left(\frac{\rho_P(\mathbf{g}.\mathbf{z})_P}{A_P}\left(\boldsymbol{\nabla}\rho\right)_P\right) = 0 \tag{1.8.45}$$

A chaque pas de temps, $\boldsymbol{\varphi}$ est actualisé par

$$\boldsymbol{\varphi} = \rho\mathbf{u} + \mathbf{Corr} \tag{1.8.46}$$

Des explications complémentaires peuvent être trouvées dans [173]. Vuorinen *et al.* étudient de plus l'influence de ce terme sur la dissipation d'énergie cinétique de turbulence.

1.8.5.2 Méthode de correction de pression

FireFOAM utilise l'algorithme appelé PIMPLE dans OpenFOAM. Puisque cet algorithme est basé sur la méthode PISO [174], cette dernière est d'abord explicitée. Suite à la partie précédente, une équation sur la vitesse et une équation sur la pression sont disponibles. L'idée de l'algorithme est de calculer séquentiellement la pression, puis de corriger la vitesse avec la nouvelle pression, etc.

Le champ de pression calculé au pas précédent est nécessairement connu (à l'instant initial, il s'agit de la pression initiale). L'équation de quantité de mouvement est résolue de manière implicite (deuxième équation du système (1.5.106)). C'est la prédiction de vitesse.

L'équation (1.8.42) est ensuite utilisée pour prédire la pression à partir de la vitesse calculée au pas précédent. Puis, la vitesse est corrigée par l'équation (1.8.38). Ces deux calculs correspondent à une correction pression/vitesse. Le nombre de correction de ce type est donné par le paramètre "nCorrectors" dans OpenFOAM. Lorsque ce paramètre vaut 1, la boucle ne contient qu'une correction pression/vitesse. Pour les calculs présentés dans la suite, la boucle comportera deux corrections pression/vitesse (approche classique). Cette description correspond à la méthode PISO.

FireFOAM utilise par défaut l'algorithme PIMPLE qui est équivalent à appliquer plusieurs fois l'algorithme PISO. PISO est appliqué "nOuterCorrectors" fois au même pas de temps. À la fin de la première utilisation de l'algorithme PISO, la vitesse et la pression correspondante corrigées sont connues. Elles sont réinjectées dans le début d'une autre boucle PISO.

Les équations de conservation des espèces chimiques et d'énergie sont résolues au sein de la boucle PIMPLE juste après la prédiction de vitesse (Fig. 1.29). Dans ce mémoire, une seule boucle PIMPLE est effectuée et l'algorithme PIMPLE devient simplement l'algorithme PISO.

1.8.6 Résolution du système d'équations

OpenFOAM nécessite la résolution de systèmes linéaires de la forme $AX = b$ où A est une matrice carrée, b un vecteur et X un vecteur inconnu à déterminer. La résolution directe de ce système nécessite le calcul de l'inverse de A. Très souvent, celui-ci est très coûteux en temps de calcul et d'autres procédés sont utilisés.

À chaque équation est associée une méthode de résolution dont le choix est laissé à l'utilisateur. En plus de la méthode de résolution du système linéaire, OpenFOAM peut demander un préconditionnement ou un "smoother" selon la méthode utilisée. Tous les choix utilisés pour les calculs numériques sont précisés dans ce paragraphe.

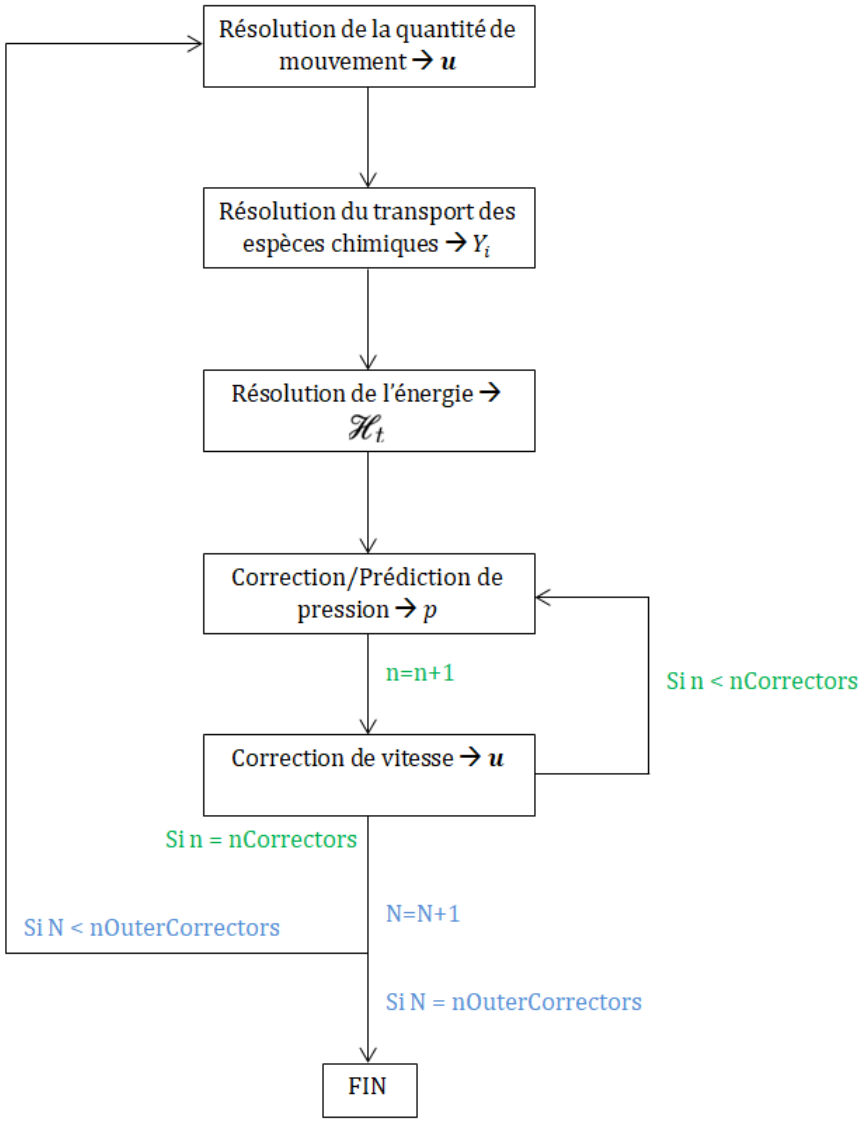

Figure 1.29 – Schéma de l'algorithme PIMPLE.

1.8.6.1 Préconditionnement

Le conditionnement d'une matrice inversible A associé à une norme subordonnée $\|.\|$ (norme matricielle définie à partir d'une norme vectorielle) est défini par

$$C(A) = \|A\| \ \|A^{-1}\| \tag{1.8.47}$$

Le conditionnement mesure la sensibilité aux imprécisions numériques et aux perturbations des données initiales. Lorsque le conditionnement est élevé, ces petites erreurs peuvent s'amplifier de manière importante. Au contraire, lorsqu'il est faible, le problème est dit "bien conditionné" puisque la résolution reste peu sensible à ces perturbations d'ordre expérimental ou numérique. Cet aspect est démontrable mathématiquement.

Dans le système linéaire $Ax = b$, les erreurs peuvent provenir de b ou de A. En notant x et $x + \delta x$ les solutions respectives de $Ax = b$ et $A(x + \delta x) = b + \delta b$, l'inégalité suivante découle de la définition

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq C(A)\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \tag{1.8.48}$$

Le second cas afférent à la perturbation de la matrice A fournit une inégalité similaire

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x + \delta x\|} \leq C(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \tag{1.8.49}$$

en supposant que $x+\delta x$ est solution de $(A+\delta A)(x+\delta x)=b$. Ainsi, quelque soit la source de l'erreur, la perturbation de la solution δx reste faible si le conditionnement de A est petit. Il est donc intéressant de réaliser les calculs avec une matrice A de faible conditionnement.

Le préconditionnement est un processus permettant l'abaissement du conditionnement de la matrice du système linéaire afin de limiter l'erreur sur la solution. Cette opération utilise un préconditionneur de la matrice A. Il correspond à une matrice P telle que $C(P^{-1}A) < C(A)$. Le système résolu n'est plus $Ax=b$ mais $P^{-1}Ax=P^{-1}b$.

Différentes méthodes de calcul de P existent. Dans cette étude, deux d'entre elles sont utilisées : D-IC (Diagonal Incomplete Cholesky) et D-ILU (Diagonal Incomplete LU).

D-ILU Cette première méthode se base sur la décomposition LU. Une matrice carrée A admet une décomposition LU lorsqu'il existe une matrice triangulaire inférieure L et une matrice triangulaire supérieure U telles que $A=LU$. En remplaçant par des 1 les termes diagonaux de L et U, une matrice diagonale D peut être définie telle que $A=LDU$. Souvent, les matrices L et U ne sont plus aussi creuses que A (il y a moins de termes nuls) et les calculs deviennent plus coûteux en temps. Pour pallier ce problème, les termes non nuls dans L et U correspondant à un terme nul dans A sont annulés

$$a_{i,j}=0 \Rightarrow l_{i,j}=0 \text{ et } u_{i,j}=0 \tag{1.8.50}$$

La factorisation devient alors incomplète et s'écrit

$$A=\widehat{L}D\widehat{U}+R \tag{1.8.51}$$

où R représente les termes éliminés, $\widehat{L}$ est équivalent à L avec l'annulation des termes *ad hoc* et $\widehat{U}$ est définie de manière analogue à $\widehat{L}$. Le préconditionneur de cette méthode (ILU(0)) est alors

$$P=\widehat{L}D\widehat{U} \tag{1.8.52}$$

Cette approche demande le calcul, gourmand en temps, de L et U. OpenFOAM utilise plutôt une méthode simplifiée nommée D-ILU [175], [176]. La matrice A est décomposée en 3 parties correspondant à la partie triangulaire inférieure L_A, la partie triangulaire supérieure U_A et la diagonale D_A de sorte que $A=D_A+L_A+U_A$. Le préconditionneur utilisé par la méthode D-ILU est alors

$$P=(D+L_A)D^{-1}(D+U_A) \tag{1.8.53}$$

La matrice D est celle de la décomposition LDU. Il n'y a plus besoin de calculer complètement les matrices L et U et cette méthode nécessite simplement le stockage de la matrice D.

D-IC Cette seconde méthode se base sur la factorisation de Cholesky. Lorsque A est symétrique définie positive ($\forall x \in \mathbb{R}^n,\ x \neq 0,\ {}^txAx>0$), il existe une matrice triangulaire inférieure possédant uniquement des 1 sur sa diagonale, noté L, et une matrice diagonale D telles que

$$A={}^t LDL \tag{1.8.54}$$

Puis, de la même manière, les termes non nuls dans L et ${}^tL$ correspondant à des termes nuls dans A sont annulés. La factorisation devient alors incomplète et s'écrit

$$A={}^t \widehat{L}D\widehat{L}+R \tag{1.8.55}$$

où R représente les termes éliminés. Le préconditionneur de cette méthode (IC(0)) est alors donné par

$$P={}^t \widehat{L}D\widehat{L} \tag{1.8.56}$$

Comme précédemment, la méthode D-IC utilise le préconditionneur

$$P=(D+L_A)D^{-1}(D+U_A) \tag{1.8.57}$$

avec cette fois la matrice diagonale D de la décomposition de Cholesky.

1.8.6.2 Méthodes de résolution d'un système linéaire

Dans ce mémoire, les méthodes utilisées dans les simulations permettant de résoudre les systèmes linéaires $Ax = b$ peuvent se classer en 3 groupes. La méthode de Gauss-Seidel est d'abord présentée. Puis, deux méthodes de gradient seront détaillées dans la suite en se concentrant essentiellement sur le principe de ces méthodes. Enfin, une méthode multigrille clôturera cette partie.

Méthode de Gauss-Seidel La matrice A est décomposée en somme de trois matrices

$$A = D - E - F \tag{1.8.58}$$

où D est la diagonale de A, $-E$ est la partie inférieure stricte et $-F$ est la partie supérieure stricte. Le problème linéaire $Ax = b$ peut se réécrire $(D - E)x = Fx + b$. L'algorithme consiste alors à itérer

$$(D - E)x_{k+1} = Fx_k + b \tag{1.8.59}$$

La matrice $D-E$ étant triangulaire inférieure, l'algorithme de descente est utilisé afin d'obtenir toutes les composantes du vecteur x_{k+1}.

Méthodes de gradient Le principe de cette méthode repose sur l'équivalence suivante

$$A\overline{x} = b \Leftrightarrow J(x) = \frac{1}{2}\ {}^t xAx - \ {}^t xb \text{ atteint son minimum en } \overline{x} \tag{1.8.60}$$

valable lorsque la matrice A est symétrique définie positive ($\forall x \neq 0, {}^t xAx > 0$). Ainsi la solution au système $Ax = b$ minimise la fonctionnelle J. Ainsi, en itérant sur des solutions x_k de sorte que $J(x_{k+1}) < J(x_k)$, la méthode converge vers la solution. L'autre idée de la méthode est de se donner une suite de vecteurs conjugués par rapport à A
($ {}^t p_i A p_k = 0\ \forall i \neq k$). Les $\{p_k\}_{k=0,n}$ forment une base de $\mathbb{R}^n$ et la solution au système linéaire peut s'écrire en fonction des vecteurs de cette base : $x = \sum \alpha_i p_i$. Les coefficients α_i sont calculés par la relation $Ax = b$.

Chaque méthode de gradient détermine ces directions p_i de sorte que seule une partie d'entre elles est nécessaire pour approcher convenablement la solution. Nous donnons ci-après l'idée générale pour la méthode des gradients conjugués. À chaque itération, en restant cohérent avec ce qui précède, le nouveau vecteur solution sera $x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$. Il faut estimer p_i et α_i. La direction p_i doit être dirigée dans le sens de la minimisation de J correspondant à $-\boldsymbol{\nabla} J(x = x_i) = b - Ax_i = r_i$. Dans l'idéal, p_i doit être orienté dans le sens du résidu. Néanmoins, il faut respecter la contrainte de la conjugaison des p_k. Concernant les coefficients α_k, ils sont ensuite calculés par minimisation de $J(x_{k+1}) = J(x_k + \alpha_k p_k)$. Dans les calculs numériques, deux méthodes de gradients sont utilisées, PCG (Gradient Conjugué Préconditionné) et PBiCGStab (Gradient BiConjugué Stabilisé Préconditionné).

PCG La matrice A doit être symétrique définie positive. L'algorithme est équivalent à la méthode des gradients conjugués sauf qu'un préconditionnement est appliqué à la matrice A. Le préconditionneur est noté P de sorte que le problème résolu est maintenant $P^{-1}Ax = P^{-1}b$. L'algorithme PCG est

Algorithme 1 PCG (Gradient Conjugué Préconditionné)

Initialisation $x_k \leftarrow x_0,\ r_k \leftarrow b - Ax_k\ ,\ p_k \leftarrow P^{-1}r_k$
while $r_k >$ Tolérance **do**
  $\alpha_k = \frac{{}^t r_k P^{-1} r_k}{{}^t p_k A p_k}$
  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
  $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$
  $p_{k+1} = P^{-1} r_{k+1} + \frac{{}^t r_{k+1} P^{-1} r_{k+1}}{{}^t r_k P^{-1} r_k} p_k$
  $x_k \leftarrow x_{k+1},\ r_k \leftarrow r_{k+1},\ p_k \leftarrow p_{k+1}$
end while

PBiCGStab Cette méthode récente est issue de [177]. La matrice n'a pas besoin d'être symétrique. Le préconditionneur est toujours noté P. L'algorithme de résolution est le suivant

Algorithme 2 PBiCGStab (Gradient BiConjugué Stabilisé Préconditionné)

Initialisation $x_k \leftarrow x_0,\ r_k \leftarrow b - Ax_k,\ \widehat{r_0} \leftarrow r_k,\ \rho_k = \alpha = \omega_k = 1,\ v_k = p_k = 0$
while $r_k >$ Tolérance **do**
$\rho_{k+1} = {}^t\widehat{r_0} r_k$
$p_{k+1} = r_k + \frac{\rho_{k+1}}{\rho_k}\frac{\alpha}{\omega_k}(p_k - \omega_k v_k)$
$v_{k+1} = AP^{-1}p_{k+1}$
$\alpha = \frac{\rho_{k+1}}{{}^t\widehat{r_0} v_{k+1}}$
$s = r_k - \alpha v_{k+1},\ \tau = AP^{-1}s$
$\omega_{k+1} = \frac{{}^t\tau\,{}^t(P^{-1})P^{-1}s}{{}^t\tau\,{}^t(P^{-1})P^{-1}\tau}$
$x_{k+1} = x_k + \alpha P^{-1}p_{k+1} + \omega_{k+1}P^{-1}s$
$r_{k+1} = s - \omega_{k+1}\tau$
$x_k \leftarrow x_{k+1},\ r_k \leftarrow r_{k+1},\ \omega_k \leftarrow \omega_{k+1},\ p_k \leftarrow p_{k+1},\ v_k \leftarrow v_{k+1},\ \rho_k \leftarrow \rho_{k+1}$
end while

Méthode multigrille Il s'agit d'une méthode se basant sur la résolution du système linéaire $Ax = b$ par une méthode itérative sur un maillage plus grossier que le maillage utilisé. Une méthode itérative peut se formuler sous la forme $x_{k+1} = Bx_k + c$ (voir *supra*). Sachant que la vraie solution x doit satisfaire $x = Bx + c$, en notant $e_n = x_n - x$ l'erreur commise à chaque itération,

$$e_{k+1} = Be_k \Rightarrow e_k = B^k e_0 \tag{1.8.61}$$

Une méthode itérative converge si et seulement si $\|B\| < 1$. Pour que la norme de la matrice B soit strictement inférieure à 1, il est nécessaire que la plus grande valeur propre en valeur absolue (aussi appelée rayon spectral) de B soit strictement inférieure à 1. D'ailleurs, plus le rayon spectral de B est petit, plus la méthode converge vite. Cette propriété est à la base des méthodes multigrilles. Sur un maillage grossier, les méthodes itératives convergent plus rapidement. La méthode consiste ainsi à approcher rapidement la solution sur un maillage grossier, puis de se servir de la solution obtenue comme initialisation du problème sur le maillage réel. La solution étant déjà approchée, moins d'itérations sont nécessaires pour atteindre une précision suffisante.

Il existe différentes manières d'appliquer cette méthode. OpenFOAM, à travers l'algorithme GAMG (*Geometric Algebraic MultiGrid*), résout un V-cycle que nous allons expliciter. Seule cette manière de procéder sera présentée mais les autres en découlent.

La première étape correspond à itérer n fois le problème linéaire sur le maillage de base noté Ω_h par une méthode itérative définie par l'utilisateur. La valeur n est notée *nPreSweeps* dans OpenFOAM. Suite à ces quelques itérations, en notant x_h la solution obtenue, l'erreur vaut $e_h = x - x_h$ et le résidu est égal à $r_h = b - Ax_h$. Il découle directement de ces relations

$$Ae_h = r_h \tag{1.8.62}$$

Il s'agit d'un nouveau système linéaire portant sur l'erreur. Ce système est résolu sur un maillage plus grossier noté Ω_{2h}. Généralement, pour un maillage 1D régulier, le pas passe de h à $2h$ (Fig. 1.30). Cette division est pilotée par le paramètre "mergeLevels" dans OpenFOAM. Une valeur de 1 divise par deux un pas régulier, une valeur de 2 divise par quatre un pas régulier, etc. Le résidu r_h doit être restreint sur le nouveau maillage Ω_{2h}. La méthode de restriction correspond à l'injection qui consiste à associer les valeurs en I aux valeurs en i (Fig. 1.30). En notant $I_{h\to 2h}$ cet opérateur,

$$r_{2h} = I_{h\to 2h} r_h \tag{1.8.63}$$

De même, il faut utiliser la matrice A sur la grille Ω_{2h}. Le système à résoudre s'écrit

$$A_{2h}e_{2h} = r_{2h} \tag{1.8.64}$$

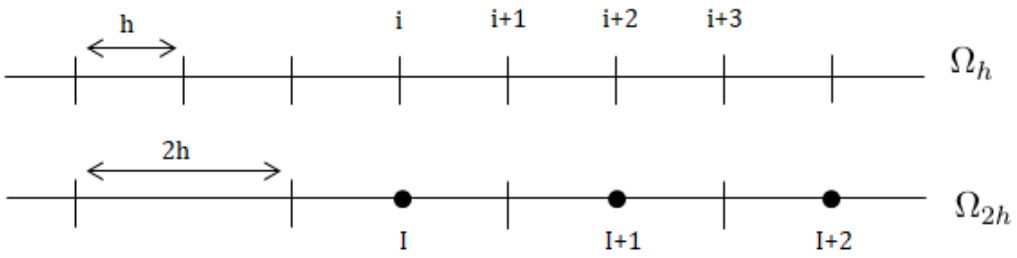

Figure 1.30 – Passage d'une grille fine de pas h à une grille grossière de pas $2h$.

Après n itérations ($nPreSweeps$), une solution de l'erreur e_{2h} est obtenue. Puis, l'algorithme poursuit de la même manière jusqu'à la grille la plus grossière. La taille de cette grille est donnée par le paramètre $nCellsCoarsestLevel$.

La seconde étape consiste à remonter toutes les grilles grossières jusqu'au maillage réel. La prolongation des variables se fait par interpolation linéaire. Par exemple, les termes en $i+1$ sont calculés grâce aux termes en I et $I+1$ (Fig. 1.30). Chaque résolution est itérée n' fois où n' est le paramètre $nPostSweeps$ dans OpenFOAM.

La schématisation de l'algorithme complet (Fig. 1.31) nécessite deux procédures :

- $F(A, b, h)$

1) nPreSweeps itérations de $Ax = b$; la solution est notée $\widetilde{x}$
2) Calcul du résidu $r = b - A\widetilde{x}$
3) Restriction $r_{2h} = I_{h\to 2h} r$

- $G(A, b, e_{2h}, x_0, h)$

1) Prolongation $e_h = I_{2h\to h} e_{2h}$
2) Initialisation $x_0 = x_0 + e_h$
3) nPostSweeps itérations de $Ax = b$ à partir de x_0 ; la solution est notée $\overline{x}$

Par défaut dans OpenFOAM, $nPreSweeps = 0$, $nPostSweeps = 2$ et $mergeLevels = 1$. De plus, le seuil du maillage le plus grossier correspond à 256 cellules.

1.8.7 Organigramme de FireFOAM

Cette partie relie toutes les considérations numériques et mathématiques précédentes en résumant les méthodes de calculs employées par l'outil FireFOAM. La figure 1.32 représente l'organigramme de FireFOAM tel qu'il est implémenté dans OpenFOAM-4.0.

Le terme ρ_{rauf} correspond à l'interpolation de $\frac{\rho_P}{A_P}$ aux surfaces. Le terme $\boldsymbol{\varphi_{H/A}}$ correspond à $\rho_P \frac{\mathbf{H}}{A_p} + \boldsymbol{Corr} + \boldsymbol{\varphi_g}$ avec $\boldsymbol{\varphi_g} = -\rho_{rauf}(\mathbf{g}.\mathbf{z})_P(\boldsymbol{\nabla}\rho)_P$. Ainsi, l'équation de pression résolue par OpenFOAM est bien la même que l'équation (1.8.45). Le terme G_k correspond au produit doublement contracté $\nu_t^t \overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u}$: $dev(2\overline{\overline{S}})$ où $\overline{\overline{S}}$ est le tenseur des taux de déformation $\overline{\overline{S}} = \frac{1}{2}({}^t\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u} + \overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u})$. dev est l'opérateur déviateur défini par la relation

$$dev(A) = A - \frac{1}{3} tr(A) \overline{\overline{I}} \tag{1.8.65}$$

$\boldsymbol{divDevRhoReff}(\mathbf{u})$ correspond à la divergence de la contrainte visqueuse qui est donnée par l'équation (1.8.18). Le terme S_{comb} est la puissance volumique ($W.m^{-3}$) libérée par la réaction chimique. Par définition, elle s'écrit

$$S_{comb} = \nu_F \dot{\omega_F} Y_F \Delta \mathscr{H}_c \tag{1.8.66}$$

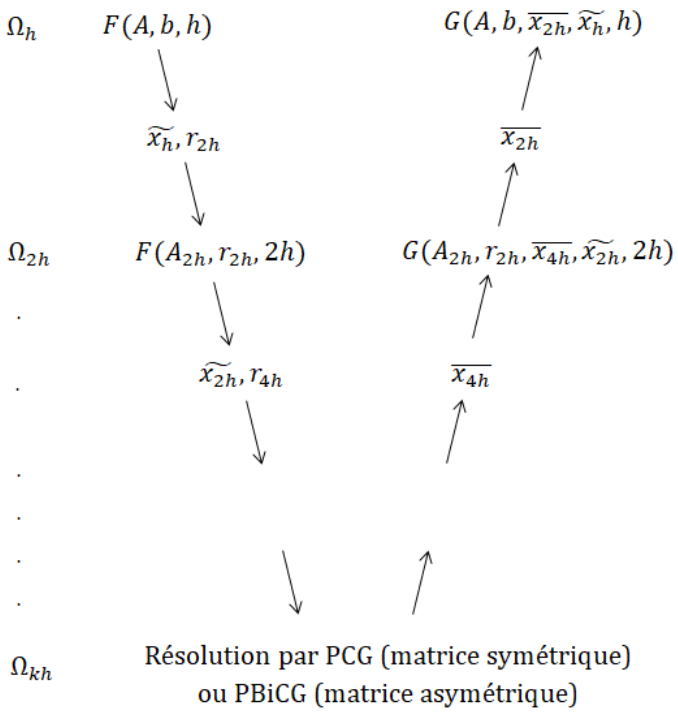

Figure 1.31 – Schéma de l'algorithme GAMG

Le terme $E_{\phi,v}$ correspond à la puissance volumique de combustion émise par rayonnement. Elle se calcule à partir de S_{comb} en ne prenant que la fraction radiative de cette puissance volumique

$$E_{\phi,v} = \chi_r S_{comb} \tag{1.8.67}$$

Enfin, le terme S_{ray} correspond au bilan de la puissance volumique radiative. Il est équivalent à la divergence du flux radiatif $-\mathbf{q_r}$. D'après l'équation (1.4.29), ce terme s'écrit

$$S_{ray} = a(G - 4\sigma T^4) - E_{\phi,v} \tag{1.8.68}$$

Les termes en rouge sont traités explicitement. Après discrétisation, ils correspondent à un vecteur dont chaque composante est associée à une cellule du maillage. Les termes en bleu sont traités implicitement. Après discrétisation, ils correspondent à une matrice A telle que

$$terme = AV^{n+1} \tag{1.8.69}$$

où V^{n+1} est le vecteur inconnu au pas suivant $n+1$. Par exemple, dans l'équation de quantité de mouvement, l'inconnue est la vitesse. Ainsi, le terme $\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{u}$ renvoie une matrice B contenant des éléments relatifs à la variable φ au temps n telle que

$$\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}.\boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{u} = Bu^{n+1} \tag{1.8.70}$$

La matrice B dépend de la discrétisation employée pour l'opérateur divergence.

Les dérivées temporelles sont traitées par la méthode d'Euler mais deux cas doivent être séparés. Lorsque la dérivée s'applique à la variable inconnue de l'équation, comme $\frac{\partial \psi p_{rgh}}{\partial t}$ dans l'équation de pression, les termes en p_{rgh}^n sont stockés dans un vecteur comme les termes explicites. Les termes en p_{rgh}^{n+1} génèrent une matrice comme précédemment expliqué. Lorsqu'elle s'applique à des termes secondaires de l'équation, comme $\frac{\partial \psi(\rho \mathbf{g}.\mathbf{z}+p_{ref})}{\partial t}$ dans l'équation de pression, tous les termes (en n et $n+1$) sont stockés dans un vecteur. Ils sont donc totalement traités de manière explicite.

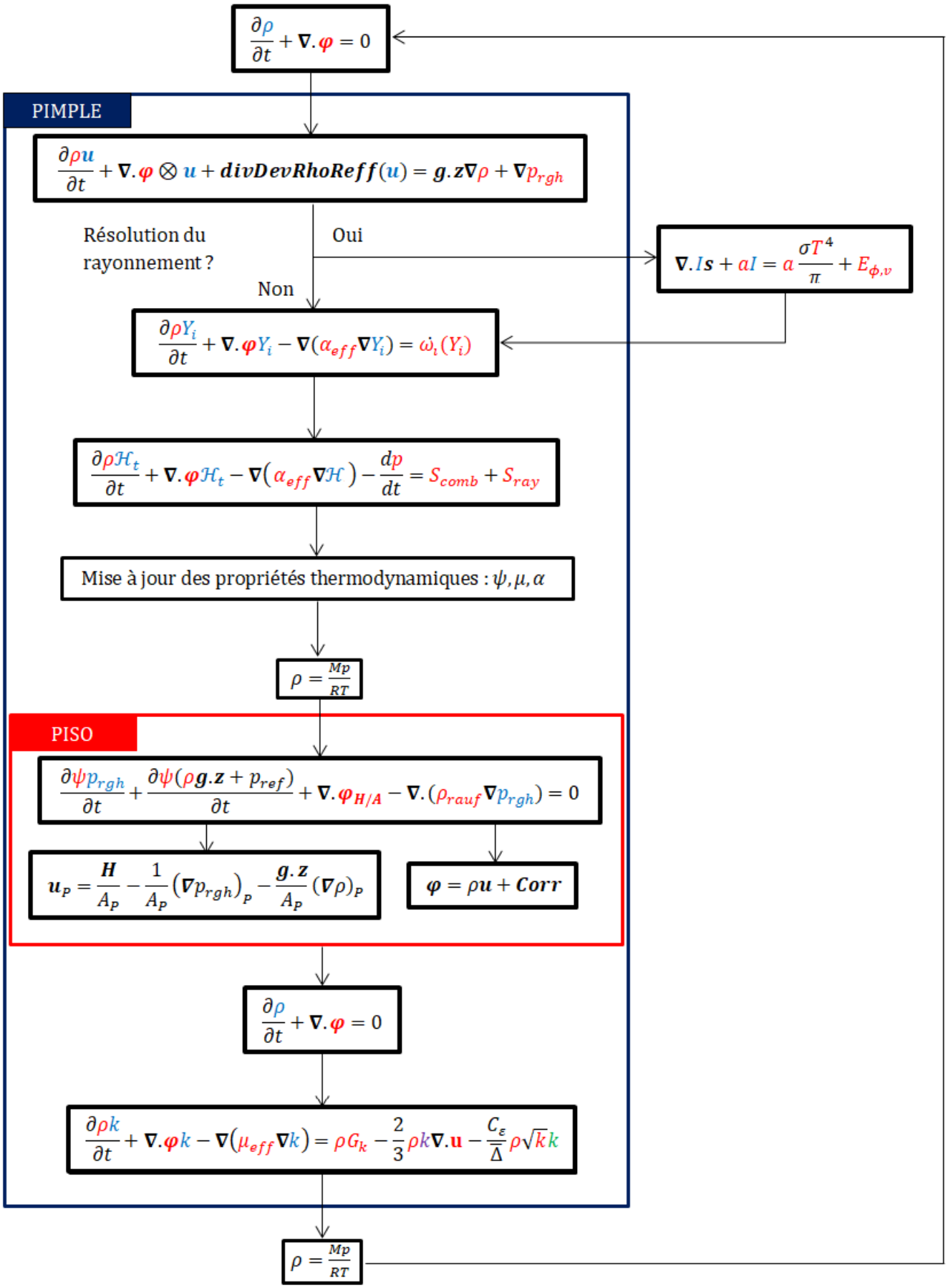

Figure 1.32 – Organigramme de FireFOAM-4.0.

L'équation de turbulence bénéficie d'un traitement particulier. Premièrement, le terme en vert (Fig. 1.32) est linéarisé au même titre que le terme d'advection dans l'équation de quantité de mouvement. Le terme $\frac{C_\epsilon}{\Delta}\rho\sqrt{k}$ est pris au pas n. Seul le terme k est pris au pas de temps $n+1$. Ce terme est donc traité de manière implicite, il renvoie une matrice mais celle-ci contient la variable k au pas n. Enfin, le terme violet peut être traité de manière implicite ou explicite selon le signe de la divergence de la vitesse. Lorsque cette divergence est positive, le terme est traité implicitement et renvoie une matrice. Lorsqu'elle est négative, un traitement explicite est appliqué et le terme renvoie un vecteur au pas de temps n. Cette méthode permet d'améliorer la stabilité de la résolution. Lorsque la divergence est positive, en passant le terme dans le membre de gauche, un terme positif s'ajoute à la diagonale de la matrice du système linéaire (puisque le terme est proportionnel à k). Ainsi, cela contribue à rendre cette matrice à diagonale strictement dominante ($\forall i,\ |a_{ii}| \geq \sum_{j\neq i}|a_{ij}|$). Or, une matrice à diagonale strictement dominante est forcément inversible. De plus, des résultats concernant la convergence de certaines méthodes itératives découlent de cette propriété.

Les détails de la boucle PIMPLE et de la boucle PISO (nombre de boucles) se situent dans la partie correspondante 1.8.5.2. Les termes de divergence sont discrétisés de diverses manières résumées dans le tableau 1.7. La méthode de résolution de chaque terme est présentée dans le tableau 1.8.

$\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}.\boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{u}$	LUST
$\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{\varphi} Y_i$	limitedLinear
$\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{\varphi}\mathscr{H}_t$	limitedLinear
$\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{\varphi} k$	limitedLinear
$\boldsymbol{\nabla}.I\boldsymbol{s}$	upwind
$\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}.\left(\mu_{eff}\left[{}^t\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u} - \frac{2}{3}tr({}^t\overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\mathbf{u})\overline{\overline{\mathbf{I}}}\right]\right)$	linear

Tableau 1.7 – Résumé des interpolations aux surfaces des termes de divergence.

Équation	Inconnue	Méthode	Préconditionneur	Smoother	Tolérance	Tolérance relative
Continuité	ρ	PCG	DIC	/	10^{-6}	0
Quantité de mouvement	$\mathbf{u}$	PBiCGStab	DILU	/	10^{-8}	0
Fractions massiques	Y_i	PBiCGStab	DILU	/	10^{-8}	0
Énergie	$\mathscr{H}_t$	PBiCGStab	DILU	/	10^{-8}	0
Pression	p_{rgh}	GAMG	/	Gauss-Seidel	10^{-5} | 10^{-6}	0,01 | 0
Turbulence	k	PBiCGStab	DILU	/	10^{-8}	0
Rayonnement	I	GAMG	/	DILU	10^{-4}	0

Tableau 1.8 – Méthodes numériques employées pour la résolution des équations.

1.9 Structure numérique de Cast3m

Cast3m [30] est un logiciel éléments finis permettant la résolution de problèmes de mécanique, thermique, mécanique des fluides et magnétostatique (dans la version de 2016). Ici, il résoudra les équations de la thermo-mécanique dans la roche (1.4.7) et (1.6.6). Puisque la notice de Cast3m [30] fournit toutes les explications sur le fonctionnement de ce code, seul un résumé de la mise en données est proposé.

1.9.1 Méthode des éléments finis appliquée à la thermique

Le problème de thermique résolu par Cast3m s'écrit

$$\begin{cases} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}.(\lambda \boldsymbol{\nabla} T) = 0 \text{ sur } \Omega \\ T = T_d \text{ sur } \partial\Omega_1 \\ \mathbf{q}.\mathbf{n} = q_d \text{ sur } \partial\Omega_2 \end{cases} \tag{1.9.1}$$

Dans la suite, $q_d = 0$ puisque seule une condition adiabatique est prescrite dans les simulations de ce mémoire. La méthode des éléments finis n'est pas basée sur la formulation forte (1.9.1) mais sur la formulation faible du problème. Celle-ci correspond à la mise sous forme variationnelle du problème

$$\forall P, \int_\Omega P \left(\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}.(\lambda \boldsymbol{\nabla} T) \right) \mathrm{d}V = 0 \tag{1.9.2}$$

Cette formulation du problème conduit à plusieurs méthodes de résolution dépendant du choix des fonctions de pondération P et d'approximation. La méthode des éléments finis correspond à une de ces méthodes. Le choix des fonctions de pondération et d'approximation est décrit après une étape de réécriture de la formulation (1.9.2). Puisque $P\boldsymbol{\nabla}.(\lambda\boldsymbol{\nabla}T) = \boldsymbol{\nabla}.(P\lambda\boldsymbol{\nabla}T) - \lambda\boldsymbol{\nabla}T.\boldsymbol{\nabla}P$, la formulation variationnelle du problème (1.9.1) devient

$$\forall P, \int_\Omega \left(P\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}.(P\lambda\boldsymbol{\nabla}T) + \lambda\boldsymbol{\nabla}T.\boldsymbol{\nabla}P \right) \mathrm{d}V = 0 \tag{1.9.3}$$

Par la formule de Green-Ostrograski,

$$\int_\Omega \boldsymbol{\nabla}.(P\lambda\boldsymbol{\nabla}T)\mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega_1} (P\lambda\boldsymbol{\nabla}T)\mathrm{d}S + \int_{\partial\Omega_2} (P\lambda\boldsymbol{\nabla}T)\mathrm{d}S \tag{1.9.4}$$

Or, le gradient de température est nul sur $\partial\Omega_2$ donc l'intégrale correspondante disparait. De plus, en choisissant une fonction de pondération thermiquement admissible, notée δT, l'intégrale sur $\partial\Omega_1$ devient nulle puisque $\delta T = 0$ sur $\partial\Omega_1$ par définition. La formulation variationnelle du système (1.9.1) devient donc

$$\forall \delta T, \delta T = 0 \text{ sur } \partial\Omega_1, \int_\Omega \left(\delta T \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \lambda \boldsymbol{\nabla}\delta T.\boldsymbol{\nabla}T \right) \mathrm{d}V = 0 \tag{1.9.5}$$

Une solution approchée T^* du problème (1.9.1) est recherchée sous la forme $T^*(\mathbf{x},t) = N(\mathbf{x})\mathbf{a}(t)$ avec N la matrice des fonctions de forme ($N = (N_1\ N_2\ ...\ N_k)$) et $\mathbf{a}$ le vecteur des paramètres de l'approximation qui contient les températures T_i de chaque nœud i. Les fonctions de forme déterminent la forme de la solution approchée dans chaque élément du maillage. En d'autres termes, il s'agit de la forme de l'interpolation de la solution dans chaque élément. Dans toute cette étude, une interpolation linéaire est choisie donc la température aura l'allure d'une droite dans chaque élément. La méthode des éléments finis repose sur la méthode de Galerkin qui consiste à utiliser comme fonctions de pondération les fonctions de forme du problème. Ainsi, $\delta T = N(\mathbf{x})\delta\mathbf{a}$. En injectant ces relations dans l'équation (1.9.5)

$$\int_\Omega \left({}^t\delta\mathbf{a}\, {}^tN\rho c_p N\dot{\mathbf{a}} + {}^t\delta\mathbf{a}\, {}^tB\lambda B\mathbf{a} \right) \mathrm{d}V = 0 \tag{1.9.6}$$

avec

$$B = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & ... & \frac{\partial N_k}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & ... & \frac{\partial N_k}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial z} & ... & \frac{\partial N_k}{\partial z} \end{pmatrix} \tag{1.9.7}$$

Ceci étant vrai $\forall\delta\mathbf{a}$, le système s'écrit sous forme matricielle

$$C\dot{\mathbf{a}} + K_{th}\mathbf{a} = \mathbf{0} \tag{1.9.8}$$

avec

$$C = \int_\Omega {}^tN\rho c_p N\mathrm{d}V \tag{1.9.9}$$

$$K_{th} = \int_\Omega {}^tB\lambda B\mathrm{d}V \tag{1.9.10}$$

1.9.2 Méthode des éléments finis appliquée à la mécanique

Le problème de mécanique résolu par Cast3m correspond aux équations statiques

$$\begin{cases} \boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\sigma}} + \rho\mathbf{g} = 0 \text{ sur } \Omega \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u_d} \text{ sur } \partial\Omega_1 \\ \overline{\overline{\sigma}}.\mathbf{n} = \mathbf{F_d} \text{ sur } \partial\Omega_2 \end{cases} \tag{1.9.11}$$

Dans la suite, $\boldsymbol{u_d} = 0$ puisque les seuls déplacements imposés aux limites sont des blocages. La mise sous forme variationnelle du problème mène à

$$\forall \mathbf{P}, \int_\Omega \left[\mathbf{P}.\left(\boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\sigma}} + \rho\mathbf{g}\right)\right] \mathrm{d}V = 0 \tag{1.9.12}$$

Puisque $\mathbf{P}.\boldsymbol{\nabla}.\overline{\overline{\sigma}} = -\overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\nabla}}\mathbf{P} + \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\sigma}\mathbf{P})$, la formulation variationnelle de (1.9.11) devient

$$\forall \mathbf{P}, \int_\Omega \left[-\overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\nabla}}\mathbf{P} + \boldsymbol{\nabla}.(\overline{\sigma}\mathbf{P}) + \mathbf{P}.\rho\mathbf{g}\right] \mathrm{d}V = 0 \tag{1.9.13}$$

Par la formule de Green-Ostrograski,

$$\int_\Omega \nabla.(\overline{\sigma}\mathbf{P})\mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega_1} (\overline{\sigma}\mathbf{P}.\mathbf{n})\mathrm{d}S + \int_{\partial\Omega_2} (\overline{\sigma}\mathbf{P}.\mathbf{n})\mathrm{d}S \tag{1.9.14}$$

avec $\mathbf{n}$ la normale à la surface d'intégration. En choisissant une fonction de pondération cinématiquement admissible, noté $\delta\boldsymbol{u}$, l'intégrale sur $\partial\Omega_1$ devient nulle puisque $\delta\boldsymbol{u} = \mathbf{0}$ sur $\partial\Omega_1$ par définition. De plus, par symétrie du tenseur des contraintes, $\overline{\sigma}\mathbf{P}.\mathbf{n} = \mathbf{P}.\overline{\sigma}\mathbf{n} = \mathbf{P}.\mathbf{F_d}$ sur $\partial\Omega_2$. La formulation variationnelle du problème (1.9.11) est donc

$$\forall \delta\boldsymbol{u} \text{ tel que } \delta\boldsymbol{u} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial\Omega_1, \int_\Omega \left[-\overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\nabla}}\delta\boldsymbol{u} + \delta\boldsymbol{u}.\rho\mathbf{g}\right] \mathrm{d}V = -\int_{\partial\Omega_2} (\delta\boldsymbol{u}.\mathbf{F_d})\mathrm{d}S \tag{1.9.15}$$

Une solution approchée $\boldsymbol{u}^*$ du problème (1.9.11) est recherchée sous la forme $\boldsymbol{u}^*(\mathbf{x},t) = W(\mathbf{x})\mathbf{q}(t)$ avec W la matrice des fonctions de forme et $\mathbf{q}$ le vecteur contenant les vitesses inconnues aux nœuds. La même forme est retenue pour le déplacement virtuel $\delta\boldsymbol{u} = W(\mathbf{x})\delta\mathbf{q}$. Le produit doublement contracté $\overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\nabla}}\delta\boldsymbol{u}$ peut ainsi s'écrire

$$\overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\nabla}}\delta\boldsymbol{u} = \sigma_{ij}\delta u_{i,j} = {}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tB\boldsymbol{\sigma} \tag{1.9.16}$$

avec $\boldsymbol{\sigma}$ le vecteur contenant les contraintes inconnues aux nœuds et B une matrice contenant des dérivées des fonctions de forme. La convention d'Einstein est adoptée dans la première égalité (tout indice apparaissant deux fois est sommé) et la dérivée est remplacée par une virgule. L'application de la transposée sur la seconde égalité est possible puisque le terme est un scalaire. En injectant cette relation dans la formulation (1.9.15), il vient

$$\int_\Omega \left({}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tB\boldsymbol{\sigma} - {}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tW\rho\mathbf{g}\right) \mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega_2} ({}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tW\mathbf{F_d})\mathrm{d}S \tag{1.9.17}$$

Ceci étant vrai $\forall\delta\mathbf{q}$, le système s'écrit sous forme matricielle

$$Z\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{F} \tag{1.9.18}$$

avec

$$Z = \int_\Omega {}^tB\mathrm{d}V \tag{1.9.19}$$

$$\mathbf{F} = \int_{\partial\Omega_2} ({}^tW\mathbf{F_d})\mathrm{d}S + \int_\Omega \left({}^tW\rho\mathbf{g}\right) \mathrm{d}V \tag{1.9.20}$$

La résolution du problème de mécanique nécessite aussi une équation sur le déplacement. Notons d'abord la relation suivante

$$\overline{\overline{\sigma}} : \delta\overline{\overline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}\sigma_{ij}(\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i}) = \frac{1}{2}(\sigma_{ij}\delta u_{i,j} + \sigma_{ji}\delta u_{j,i}) = \sigma_{ij}\delta u_{i,j} = \overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\delta\boldsymbol{u} \tag{1.9.21}$$

De plus,

$$\overline{\overline{\sigma}} : \delta\overline{\overline{\varepsilon}} = {}^t\delta\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varsigma} \tag{1.9.22}$$

avec les notations du paragraphe 1.6.4.2. Le remplacement de $\overline{\overline{\sigma}}$ par $\boldsymbol{\varsigma}$ est possible puisque tous les termes σ_{ij} sont contenus dans le vecteur $\boldsymbol{\varsigma}$. Donc les sommes sur i et j peuvent être remplacées par une somme unique sur tous les termes de $\boldsymbol{\varsigma}$. Par la relation (1.6.5), il est possible d'introduire un opérateur différentiel L liant $\boldsymbol{\varepsilon}$ à $\boldsymbol{u}$ tel que $\boldsymbol{\varepsilon} = L\boldsymbol{u}$. Ainsi, l'équation (1.6.13) mène à

$$\boldsymbol{\varsigma} = CL\boldsymbol{u} + \beta(T - T_0)\mathcal{J} \tag{1.9.23}$$

Le produit doublement contracté avec le tenseur de déformation devient donc

$$\overline{\overline{\sigma}} : \delta\overline{\overline{\varepsilon}} = {}^t\delta\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varsigma} = {}^t\delta\boldsymbol{u}\,{}^tL(CL\boldsymbol{u} + \beta(T - T_0)\mathcal{J}) \tag{1.9.24}$$

En injectant cette relation à la place de $\overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\boldsymbol{\nabla}}}\delta\boldsymbol{u}$ dans la relation (1.9.15), il vient

$$\int_\Omega \left({}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tW\,{}^tLCLW\mathbf{q} + {}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tW\,{}^tL\beta(T - T_0)\mathcal{J} - {}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tW\rho\mathbf{g}\right) \mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega_2} ({}^t\delta\mathbf{q}\,{}^tW\mathbf{F_d})\mathrm{d}S \tag{1.9.25}$$

Ceci étant vrai $\forall\delta\mathbf{q}$, le système s'écrit sous forme matricielle

$$K_{mec}\mathbf{q} = \mathbf{F}' \tag{1.9.26}$$

$$K_{mec} = \int_\Omega {}^tW\,{}^tLCLW\mathrm{d}V \tag{1.9.27}$$

$$\mathbf{F}' = \int_{\partial\Omega_2} ({}^tW\mathbf{F_d})\mathrm{d}S - \int_\Omega \left({}^tW\,{}^tL\beta(T - T_0)\mathcal{J} - {}^tW\rho\mathbf{g}\right) \mathrm{d}V \tag{1.9.28}$$

1.9.3 Algorithme de résolution

La résolution d'un problème de thermo-mécanique est traitée par l'algorithme PASAPAS. Le problème thermique est d'abord résolu par la procédure TRANSNON. Dans cette procédure, l'équation de la thermique (1.9.8) est résolue par la theta-méthode :

$$\frac{1}{\Delta t}C(\mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{a}^n) + K_{th}(\theta\mathbf{a}^{n+1} - (1 - \theta)\mathbf{a}^n) = \mathbf{0} \tag{1.9.29}$$

où θ est un coefficient de relaxation qui vaut $\frac{1}{2}$ par défaut (méthode de Crank-Nicolson). Les matrices C et K_{th} sont évaluées à la température $a^* = \theta a^{n+1} + (1 - \theta)a^n$ et au temps $t^* = \theta t^{n+1} + (1 - \theta)t^n$. Puis les équations de la mécanique sont résolues par la procédure UNPAS à partir des températures calculées par la résolution thermique précédente. Cette procédure suit l'algorithme suivant

Algorithme 3 UNPAS

Initialisation du résidu $\mathbf{R}^* = \mathbf{F} - Z\boldsymbol{\sigma}^n$ (équilibre des forces (1.9.18))
while $\| \mathbf{R}^* \|$ > Précision **do**
  Calcul du déplacement associé par la relation (1.9.26) $\mathbf{q}^* = \mathbf{q}^n + K_{mec}^{-1}\mathbf{R}^*$
  Calcul des autres variables (déformations par $\boldsymbol{\varepsilon}^* = L\boldsymbol{u}^*$, contraintes $\boldsymbol{\sigma}^*$ par (1.9.23), ...)
  Calcul du nouveau résidu $\mathbf{R}^{**} = \mathbf{F} - Z\boldsymbol{\sigma}^*$
  $\mathbf{R}^* \leftarrow \mathbf{R}^{**}$
end while

La description détaillée de l'algorithme est présentée dans la documentation principale de Cast3m [30].

Chapitre 2

Développements numériques

Afin d'étendre les capacités de la simulation, des modélisations absentes de la version classique d'OpenFOAM-4.0 furent implémentées au cours de la thèse et sont présentées dans ce chapitre. Le dépôt de suie, l'estimation des dangers de la combustion, la correction des mesures par thermocouple et la diffusion thermique dans les murs virtuels constituent ces implémentations. Aussi, il a été nécessaire de mettre en place des modélisations basées sur des faits expérimentaux. Celles-ci sont détaillées dans ce chapitre. Enfin, la construction du couplage OpenFOAM-Cast3m est exposée à la fin du chapitre.

2.1 Contributions au logiciel OpenFOAM

Cette partie est dédiée aux implémentations numériques utilisées par les simulations des chapitres 3 et 4. Ces contributions ne sont pas présentes dans la version publique 4.0 du logiciel OpenFOAM.

2.1.1 Conditions limites en température aux parois

L'interaction entre les gaz et les parois doit être, entre autres, modélisée au travers d'une condition limite en température. Considérons une surface délimitant les gaz et la partie solide sur laquelle des flux de convection et de rayonnement sont appliqués. L'énergie transmise par ces deux transferts thermiques est ensuite diffusée dans le solide. Le transfert convectif est calculé par la formule de Newton (1.4.9) tandis que le transfert conductif est traité par la loi de Fourier (1.4.1). L'égalité des flux à la surface conduit à

$$q_r + h(T_g - T_w) = \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \tag{2.1.1}$$

avec les indices g et w respectivement relatifs au gaz hors couche limite et au mur, $\mathbf{n}$ la normale à la paroi et $\frac{\partial T}{\partial n} = \boldsymbol{\nabla} T.\mathbf{n}$. Le flux conductif est estimé à partir de la température T_x dans le mur à une distance δ de la surface

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \approx \lambda \frac{T_w - T_x}{\delta} \tag{2.1.2}$$

La condition limite en température correspond ainsi au calcul de T_w

$$q_r + h(T_g - T_w) = \lambda \frac{T_w - T_x}{\delta} \tag{2.1.3}$$

$$\Leftrightarrow T_w = \frac{\lambda T_x + \delta(q_r + hT_g)}{\lambda + \delta h} \tag{2.1.4}$$

Le calcul de T_x est réalisé à partir de la résolution du problème de conduction dans la roche. Dans cette étude, l'équation de la chaleur (1.4.7) en une dimension est résolue pour chaque face. Cette méthode consiste à résoudre pour chaque face limite (Fig. 2.1) l'équation de la chaleur en une dimension à chaque pas de temps simultanément au calcul de la condition limite (2.1.4). Les pas de temps sont pilotés par la partie fluide dont l'ordre de grandeur est 10^{-3} s. Le calcul du coefficient de convection thermique est détaillé dans la partie 2.3.1.

Cette méthode est notamment employée par les logiciels FDS [86] et ISIS [87] puisqu'elle est un compromis entre précision et temps de calcul. La discrétisation virtuelle du solide doit comprendre

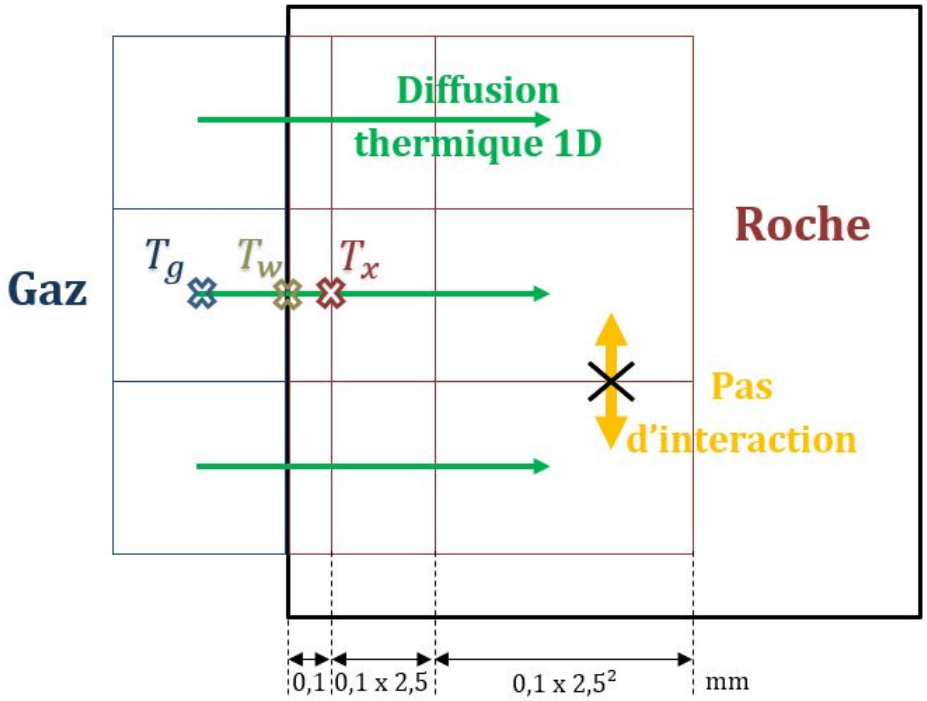

Figure 2.1 – Description schématique de la condition limite. La taille des cellules n'est pas à l'échelle.

une première maille suffisamment fine pour estimer correctement le gradient thermique à la surface. Afin d'évaluer l'influence du maillage sur le résultat, un cas test est résolu sur plusieurs maillages. La température du gaz hors de la couche limite est supposée être $T_g = 300^oC$. Le coefficient de transfert convectif est supposé égal à 10 $W.m^{-2}.K^{-1}$ et une conductivité thermique de $0,2$ $W.m^{-1}.K^{-1}$ est utilisée. Plusieurs discrétisations sont testées afin de comparer l'influence du maillage (Fig. 2.2). La première cellule varie de 1 cm à $0,01$ mm puis une raison de 1,5 est appliquée sur la taille des mailles (chaque maille est $1,5$ fois plus grande que la précédente). La résolution du cas correspondant à une maille de $0,01$ mm a été réalisée par le schéma de Crank-Nicolson puisque la condition de stabilité n'était pas satisfaite pour un schéma d'Euler explicite. Pour les mailles plus grossières, la méthode d'Euler explicite est employée. Une comparaison entre les deux méthodes de discrétisation a été effectuée pour les discrétisations plus grossières et n'a montré aucune différence significative.

Une première maille d'un millimètre apparait suffisante (Fig. 2.2) pour estimer convenablement le profil de température. Neuf mailles permettent le maillage des sept premiers centimètres. La diffusion étant très lente, l'énergie n'atteint pas une telle profondeur pendant la durée d'un feu (45 min).

L'impact de l'hypothèse d'unidimensionnalité est aussi évalué sur le cas test précédent qui est résolu avec le même maillage en une et deux dimensions. La température du gaz hors de la couche limite est cependant supposée être 300^oC au centre d'une première cellule et 330^oC au centre d'une seconde. La figure 2.3 expose le profil temporel de la température de surface de ces deux cellules voisines.

L'écart sur la température de paroi T_w entre les deux traitements restant inférieur à 5^oC au bout de 40 minutes, la modélisation de la diffusion thermique dans la roche en une dimension est jugée satisfaisante.

2.1.2 Correction de la température mesurée par un thermocouple

Lorsqu'un capteur de température est plongé dans un milieu où convection et rayonnement interviennent, la mesure ne correspond pas nécessairement à la température du gaz environnant. L'inertie du thermocouple ainsi que les transferts par convection et rayonnement sont responsables de l'écart entre mesure et température réelle. Puisque les mesures issues des expérimentations ont été réalisées au moyen de thermocouples, l'écart doit être pris en compte. Une méthode idéale consisterait à introduire

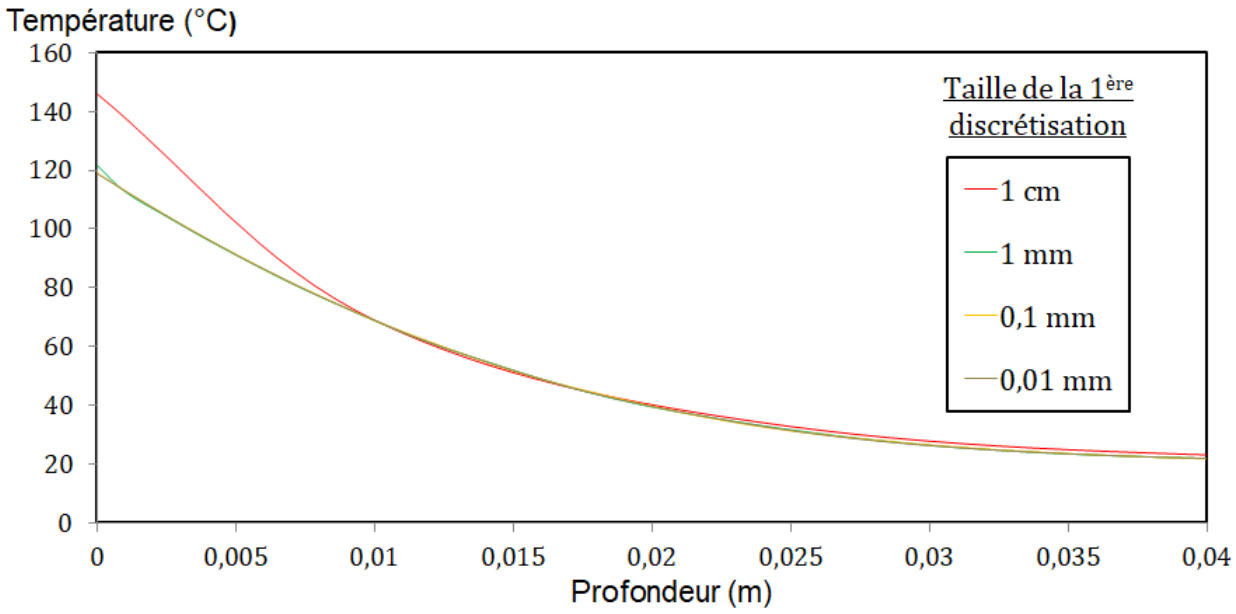

Figure 2.2 – Comparaison du profil de température pour différentes discrétisations spatiales.

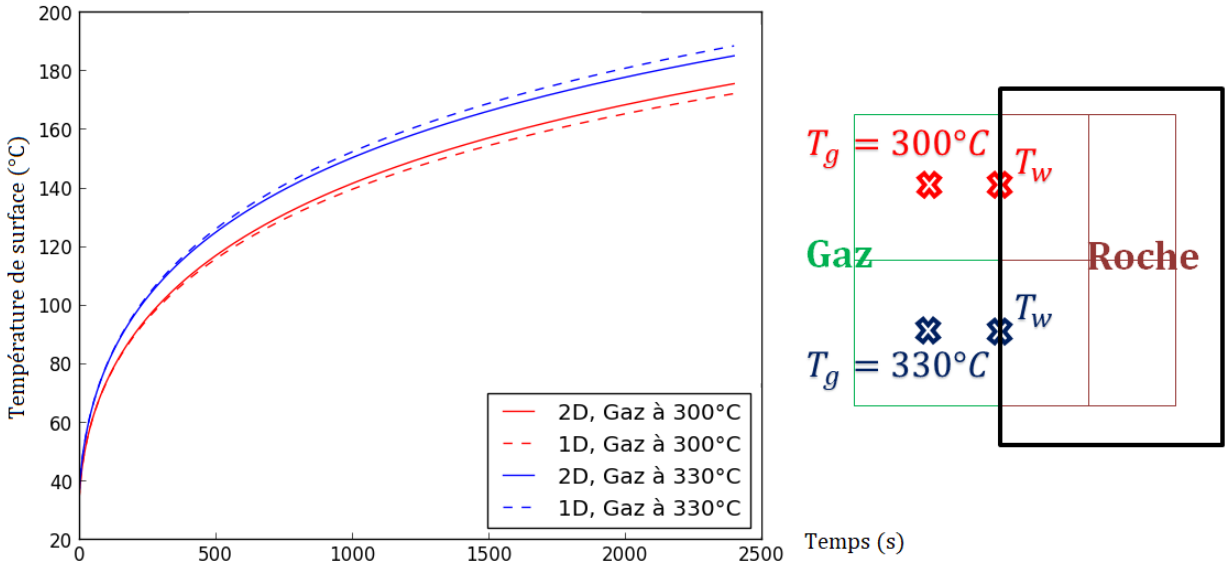

Figure 2.3 – Comparaison de la température de surface entre les résolutions 1D et 2D de la diffusion thermique lorsque les températures de deux cellules adjacentes sont 300^oC et 330^oC.

des thermocouples directement dans la simulation numérique mais elle se révélerait coûteuse en temps. Habituellement, les numériciens optent pour une correction de températures s'appuyant sur un modèle basé sur un bilan des transferts thermiques. La modélisation détaillée dans ce paragraphe est présentée plus succinctement dans les articles [9] et [178].

L'équation différentielle générale décrivant l'évolution de la température du thermocouple s'écrit

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_r} + \nabla.\mathbf{q_{conv}} + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_{cond}} \tag{2.1.5}$$

Cette équation correspond à l'équation de la chaleur (1.4.7) possédant deux termes sources représentant les flux de convection et de rayonnement frappant le thermocouple. Afin de simplifier l'équation (2.1.5), définissons le nombre de Biot

$$Bi = \frac{hL}{\lambda} \tag{2.1.6}$$

avec λ la conductivité thermique du solide. Le nombre de Biot compare les transferts thermiques à l'extérieur et à l'intérieur du solide. Pour un thermocouple, ce nombre adimensionnel est très faible. En effet, le métal est très conducteur et une conductivité thermique de l'ordre de 100 $W.m^{-1}.K^{-1}$ correspondant à du nickel peut être sélectionnée. La longueur caractéristique est souvent estimée par le rapport du volume sur la surface d'échange [179]. Pour un thermocouple cylindrique, $L = \frac{d}{4}$ avec d le diamètre du thermocouple de l'ordre du millimètre : $L \sim 10^{-3}m$. Enfin, un coefficient de convection thermique dont l'ordre de grandeur est ~ 10 $W.m^{-2}.K^{-1}$ est choisi pour le calcul. Les valeurs numériques conduisent à un nombre de Biot très petit devant 1

$$Bi_{TC} \sim 10^{-4} \ll 1 \tag{2.1.7}$$

La résistance thermique de conduction est négligeable par rapport à la résistance thermique des autres transferts thermiques. La température du thermocouple peut ainsi être considérée homogène puisque la conduction se fait quasiment instantanément. Ainsi, dans l'équation (2.1.5), la conduction peut être négligée

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_r} + \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_{conv}} \tag{2.1.8}$$

En intégrant cette relation sur le volume du thermocouple, l'équation devient

$$\iiint_V \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \mathrm{d}V = \iiint_V \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_r} \mathrm{d}V + \iiint_V \boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_{conv}} \mathrm{d}V \tag{2.1.9}$$

La température étant uniforme dans le thermocouple, les grandeurs caractéristiques du thermocouple ne dépendent pas des variables en espace. En supposant que les flux de rayonnement et de convection sont uniformes sur toute la surface du thermocouple, les deux termes peuvent sortir de l'intégrale. L'application du théorème de Green-Ostrogradski conduit à

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} V = q_r A + h(T_g - T)A \tag{2.1.10}$$

Pour un thermocouple cylindrique tel que celui utilisé dans les expérimentations (type-K), le rapport du volume sur la surface est

$$\frac{V}{A} = \frac{d}{4} \tag{2.1.11}$$

Finalement,

$$\frac{\rho c_p d}{4} \frac{\partial T}{\partial t} = q_r + h(T_g - T) \tag{2.1.12}$$

Le flux radiatif q_r peut se décomposer en deux contributions

$$q_r = \varepsilon(q_{in} - q_{em}) \tag{2.1.13}$$

avec q_{in} le flux radiatif reçu et q_{em} le flux radiatif émis. Le flux reçu est défini par

$$\mathbf{q_{in}} = \int_{\mathbf{s}.\mathbf{n_{TC}}<0} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \mathbf{s} \mathrm{d}\Omega \tag{2.1.14}$$

avec $\mathbf{n_{TC}}$ la direction du thermocouple. Lors des mesures, la direction des thermocouples peut varier suite à des mouvements de ceux-ci. Une moyenne sur les 6 directions spatiales principales balayant tout le volume est effectuée afin de calculer q_{in}. La partie émise correspond à un flux σT^4. Ainsi,

$$q_r = \varepsilon \left(\int_{\mathbf{s}.\mathbf{n_{TC}}<0} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \mathbf{s}.\mathbf{n_{TC}} \mathrm{d}\Omega - \sigma T^4 \right) \tag{2.1.15}$$

La température du thermocouple satisfait ainsi

$$\frac{\rho c_p d}{4} \frac{\partial T}{\partial t} = \varepsilon \left(\mathbf{q_{in}}.\mathbf{n_{TC}} - \sigma T^4 \right) + h(T_g - T) \tag{2.1.16}$$

où h est calculé à partir du tableau 1.2 et $\mathbf{q_{in}}$ par sa définition (2.1.14). La solution T_{TC} peut ensuite être comparée aux mesures expérimentales.

Un modèle de correction de thermocouple est déjà implémenté dans OpenFOAM [7]. S'il repose sur le même principe physique, le calcul du bilan radiatif est extrêmement imprécis. L'équation résolue pour un thermocouple cylindrique dans [7] est

$$\frac{\rho c_p d}{4}\frac{\partial T}{\partial t} = \varepsilon\left(G - \sigma T^4\right) + h(T_g - T) \tag{2.1.17}$$

L'équation (2.1.17) est équivalente à l'équation (2.1.16) en choisissant $\mathbf{q_{in}}.\mathbf{n_{TC}} = G$ où G est défini par l'équation (2.1.18)

$$G = \int_{4\pi} I(\mathbf{x}, \mathbf{s})\mathrm{d}\Omega \tag{2.1.18}$$

Ce choix est donc illicite puisque G ne correspond pas au flux incident.

Afin de confirmer cette erreur, l'écart entre le modèle théorique (2.1.16) et l'équation implémentée dans OpenFOAM (2.1.17) est quantifié sur un cas test. Soit un thermocouple d'une émissivité de $0,9$ dans une enceinte vide. Les parois de cette enceinte sont maintenues à une température constante de $T_w = 500\ K$ et sont supposées vérifier l'hypothèse du corps noir. Le calcul du flux radiatif est réalisable de manière analytique. Le flux émis par le thermocouple vers les parois est

$$\phi_{TC\to w} = \varepsilon_{TC} S_{TC} \sigma T_{TC}^4 \tag{2.1.19}$$

Le flux émis par les parois vers le thermocouple est

$$\phi_{w\to TC} = S_w \frac{S_{TC}}{S_w}\sigma T_w^4 \tag{2.1.20}$$

Le flux absorbé par le thermocouple est $\varepsilon_{TC}\phi_{w\to TC}$. Le bilan radiatif s'écrit ainsi

$$q_r = \varepsilon_{TC}\phi_{w\to TC} - \phi_{TC\to w} = \varepsilon_{TC} S_{TC}\sigma(T_w^4 - T_{TC}^4) \tag{2.1.21}$$

Notons que la surface du thermocouple est considérée négligeable devant la surface des parois pour supposer que la température des parois reste fixe. L'équation gouvernant la température du thermocouple est ainsi

$$\rho c_p \frac{d}{4}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \varepsilon\sigma\left(T_\infty^4 - T^4\right) \tag{2.1.22}$$

La figure 2.4 compare les solutions des équations (2.1.16) et (2.1.17) avec la solution analytique pour $\rho = 8800\ kg.m^{-3}$, $d = 1\ mm$ et $C_p = 440\ J.kg^{-1}.K^{-1}$.

Dans le cas test, le flux incident vaut $\sigma T_\infty^4 = 3544\ W.m^{-2}$. Le calcul réalisé par OpenFOAM-4.0 donne $q_{in} = 3544\ W.m^{-2}$ et $G = 14175\ W.m^{-2}$. Le flux incident est donc bien égal à $\mathbf{q_{in}}.\mathbf{n_{TC}}$ et non à G. Le flux incident doit donc être calculé à partir de sa définition (2.1.14). L'utilisation de l'équation (2.1.17) conduit à une surestimation de la température d'environ 200^oC en régime permanent (Fig. 2.4).

Une modélisation fondée sur le rayonnement incident G est néanmoins utilisée par les logiciels FDS [86] et ISIS [87] où le flux incident est remplacé par $\frac{G}{4}$ sans justification théorique. Relativement au cas test, ces deux logiciels fournissent donc un résultat correct puisque $\frac{G}{4} \simeq 3544\ W.m^{-2}$. Dans ce cas particulier, la relation est même théoriquement une égalité puisque le bilan radiatif des parois reste nul et

$$\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{q_r} = a(4\sigma T^4 - G) = 0 \Rightarrow \frac{G}{4} = \sigma T^4 \tag{2.1.23}$$

Or $q_{in} = q_{em} = \sigma T^4$ par définition. Donc $\frac{G}{4} = q_{in}$.

Plus largement, des simulations de cas plus complexes semblent confirmer l'approximation $q_{in} \simeq \frac{G}{4}$ qui n'est cependant pas une égalité mathématique stricte. La correction de température s'effectuera donc avec le modèle théorique implémenté plus représentatif de la physique du phénomène.

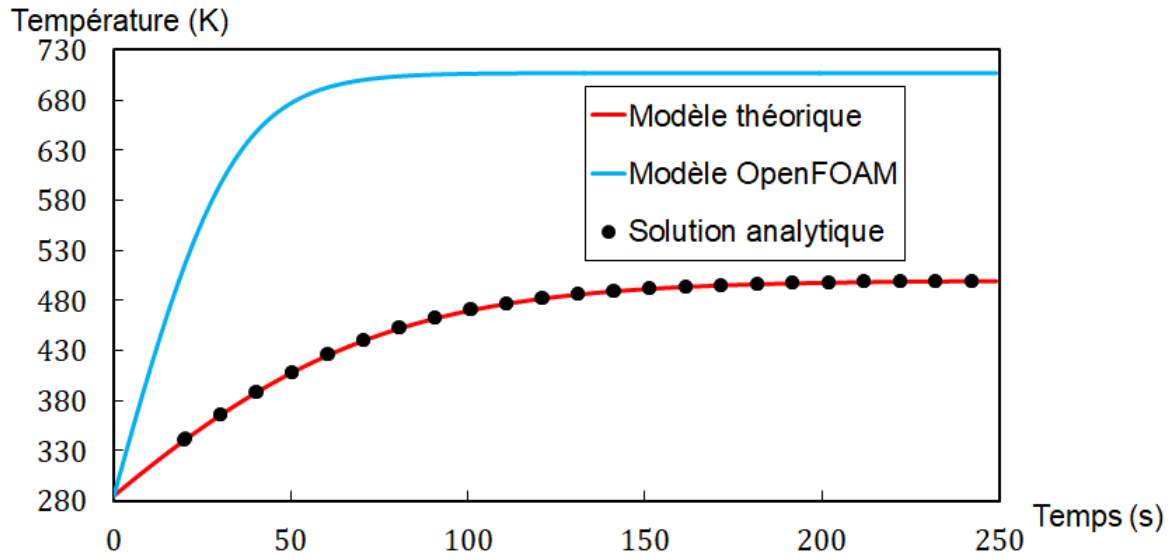

Figure 2.4 – Évolution de la température d'un thermocouple calculée par le modèle théorique (2.1.16), le modèle implémenté dans OpenFOAM [7] (2.1.17) et la solution analytique du cas test.

2.1.3 Évaluation des dangers d'un feu en milieu confiné

La toxicité mérite d'être analysée puisqu'elle permet de trancher quant à la possibilité pour un humain de rester proche d'un feu voire de l'alimenter. L'émission de gaz tels que le dioxyde de carbone ou le monoxyde de carbone peut en effet entraîner la mort des sujets. Il est donc primordial dans l'étude d'évaluer les risques pris par un Aurignacien qui alimenterait le foyer pendant sa combustion. De la même manière, la température de l'intérieur de la grotte est une contrainte pour les organismes. L'humidité d'un tel milieu souterrain est aussi défavorable à l'occupation humaine puisqu'elle accroit les dangers intrinsèques aux feux. Enfin, le rayonnement des flammes et des parois constitue également une menace. Lorsque le flux reçu par rayonnement devient important, le sang ne peut plus évacuer l'énergie qui s'accumule chez l'être humain. Ce seuil est, d'après la littérature [180], $2,5\ kW.m^{-2}$. Dans ce cas, un humain aura du mal à tenir plus de 30 minutes. En comparaison, le rayonnement solaire en zone tropicale est d'environ $1\ kW.m^{-2}$.

Pour tous ces dangers, une distinction entre deux missions différentes assignées aux Aurignaciens est considérée. La première correspondra à une observation du feu (séjour prolongé relativement loin du feu) et la seconde correspondra à l'alimentation du foyer (séjour bref au voisinage du feu). Les dangers seront estimés dans ces deux cas.

Pour évaluer les dangers, de nombreux tests ont été effectués sur des animaux et des humains. Speitel [181] dresse une liste d'expériences qui ont été réalisées. Pour chaque individu, le temps au bout duquel l'être vivant succombe ou est dans l'incapacité d'évacuer la zone de danger et le temps de tolérance à la douleur (pour le rayonnement et la température) sont estimés. Il est certain qu'un aspect statistique intervient dans ces mesures de temps d'incapacité et de létalité. Un individu robuste pourrait ainsi résister plus longtemps que la prévision moyenne.

La dangerosité est évaluée à l'aide de la FED (*Fractional Effective Dose*)

$$\int_0^{T_s} \frac{1}{t_{50\%}} \mathrm{d}t \tag{2.1.24}$$

où T_s est la durée du séjour de l'individu dans la zone de danger et $t_{50\%}$ est le temps au bout duquel la moitié des individus sont dans l'incapacité de fuir par leurs propres moyens ou ressentent une douleur (selon le cas considéré). Ainsi, lorsque la FED basée sur le temps d'incapacité vaut 1, la moitié des individus ne peuvent plus quitter la zone. Une FED de 0,3 correspond à un taux de $11,4\%$ tandis qu'une FED de 3 fait grimper le taux à 89%. Une FED de 0,3 devait donc *a priori* freiner un Aurignacien

dans sa volonté d'alimenter un feu. De même, une observation à proximité du foyer semble impossible pour des FED de ce niveau-là.

Dans ce mémoire, les dangers sont divisés en deux groupes. Le premier coïncide avec la toxicité des gaz dont les effets se cumulent. Le second regroupe les effets convectifs (température de l'environnement) et les effets radiatifs (flux reçu). Deux FED distinctes sont donc calculées.

2.1.3.1 Toxicité des gaz

Dans les simulations, tous les produits de combustion ne sont pas considérés, seuls les dégagements de CO, CO_2, vapeur d'eau et suie sont estimés. Certains gaz, en faible quantité, sont supposés ne jouer aucun rôle dans la toxicité. La FED de la toxicité des gaz correspond donc aux contributions du monoxyde de carbone, du dioxyde de carbone et du manque d'oxygène (la vapeur d'eau n'intervient pas dans la toxicité). De manière générale, cette FED s'écrit

$$FED = HV_{CO_2} FED_{CO} + FED_{O_2} + FED_{CO_2} \tag{2.1.25}$$

avec HV_{CO_2} un facteur d'hyperventilation marquant l'interaction entre la contribution du monoxyde de carbone et celle du dioxyde de carbone. Les temps d'incapacité sont donnés par les corrélations suivantes [181],[182],[180]

$$t_{50\%,O_2} = exp(8,13 - 0,54(20,9 - X_{O_2})) \tag{2.1.26}$$

$$t_{50\%,CO} = \frac{10^5}{2,764} X_{CO}^{-1,036} \tag{2.1.27}$$

$$t_{50\%,CO_2} = \begin{cases} 0 \text{ si } X_{CO_2} < 5,5\% \\ 2193,8 - 311,6 X_{CO_2} \text{ si } 5,5\% < X_{CO_2} < 7\% \\ exp(6,1623 - 0,5189 X_{CO_2}) \text{ si } X_{CO_2} > 7\% \end{cases} \tag{2.1.28}$$

Le facteur d'hyperventilation est quant à lui donné par la formule

$$HV_{CO_2} = \frac{exp(0,1903 X_{CO_2} + 2,0004)}{7,1} \tag{2.1.29}$$

Les espèces sont repérées par leur fraction molaire X_i en % pour l'oxygène et le dioxyde de carbone et en ppm (partie par million) pour le monoxyde de carbone. Lorsque la FED (2.1.25) vaut 1, la toxicité empêche 50% des individus de s'extraire par eux-même de la zone dangereuse.

L'évolution des temps d'incapacité (équations (2.1.26) à (2.1.28)) est présentée sur la figure 2.5. Il faut tout de même garder à l'esprit que les FED des gaz s'ajoutent. Ainsi, en général, les temps sont inférieurs à ceux présentés sur cette figure. Par exemple, un taux de CO_2 de 6% couplé avec un taux de monoxyde de carbone de 800 ppm et un taux d'oxygène de 15% donnent un temps d'incapacité de moins de 7 minutes. L'interaction entre les dangers de chaque gaz amplifie les risques.

2.1.3.2 Température & Rayonnement

Rayonnement Le temps d'incapacité radiatif est fourni par la corrélation empirique [180]

$$t_{50\%,rad} = K q_r^{-1,33} \text{ si } q_r > 2,5 \ kW.m^{-2} \tag{2.1.30}$$

avec $K = 10$. Le temps au bout duquel le sujet ressent une douleur est calculé par la relation (2.1.30) avec $K = 1,33$. Les courbes associées à ces deux temps sont présentées sur la figure 2.6.

Le temps d'incapacité est beaucoup plus faible que celui des gaz mais il ne faut pas oublier que la douleur arrive avant. Dès que le rayonnement devient supérieur à 5 $kW.m^{-2}$, la douleur apparaît quasiment instantanément et le seuil d'incapacité est d'environ une minute. Une fois encore, une FED basée sur le temps d'incapacité valant 0,3 devait suffire à repousser les Aurignaciens hors de la zone dangereuse puisque le temps de douleur est inférieur au tiers du temps d'incapacité.

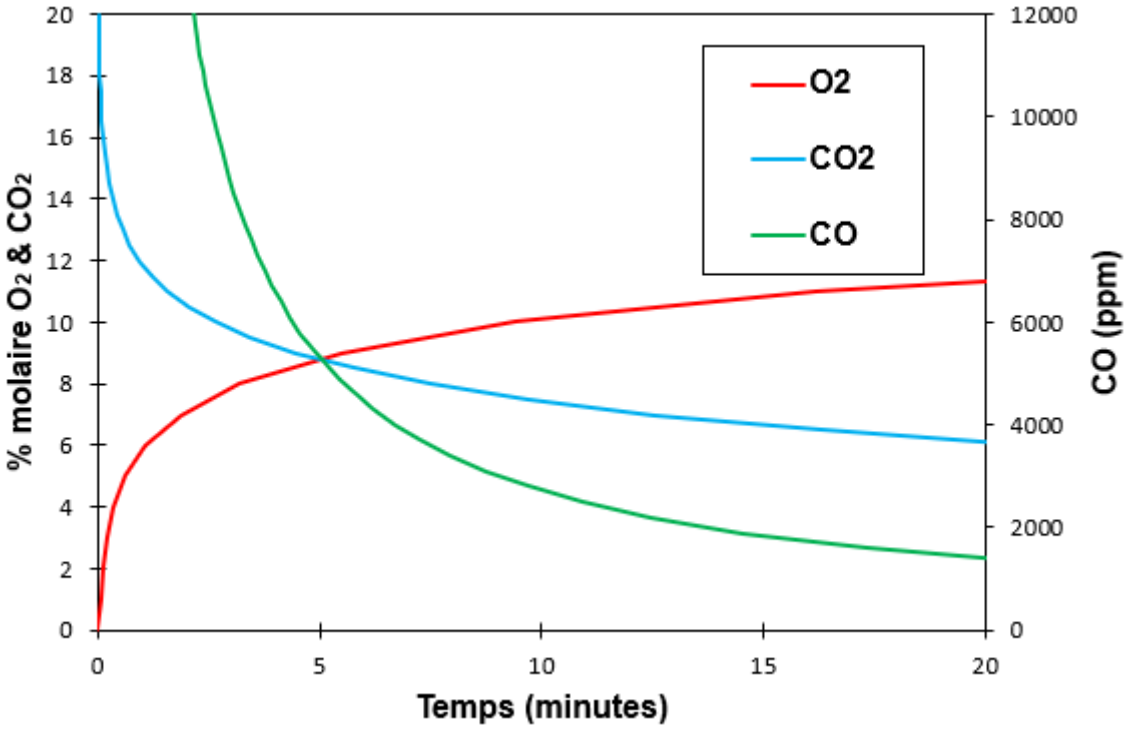

Figure 2.5 – Temps d'incapacité de chaque gaz (O_2, CO_2 et CO) calculés respectivement par les équations (2.1.26), (2.1.28) et (2.1.27).

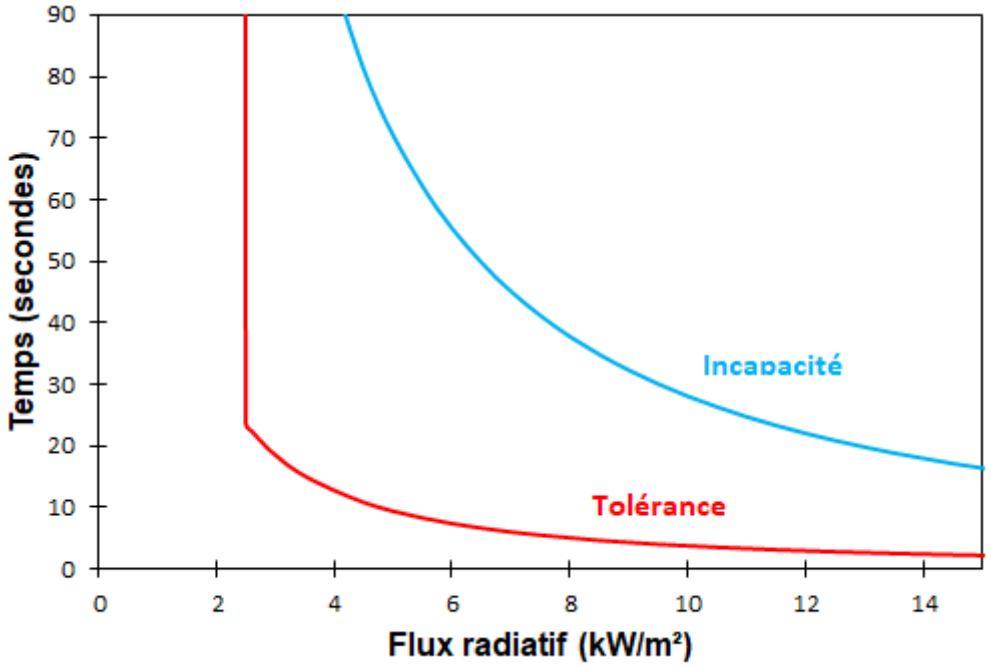

Figure 2.6 – Temps de tolérance et d'incapacité (2.1.30) sous un rayonnement q_r.

Convection La même analyse est conduite pour le danger provenant de la température élevée. Le temps d'incapacité est donné par la formule empirique [180]

$$t_{50\%,conv,inc} = 5.10^{22} T^{-11,783} + 3.10^{7} T^{-2,9636} \tag{2.1.31}$$

Le temps de tolérance est calculé par la formule de Blockley [183]

$$t_{50\%,conv,tol} = 2.10^{31} T^{-16,963} + 4.10^{8} T^{-3,7561} \tag{2.1.32}$$

La comparaison de ces deux formules est présentée sur la figure 2.7.

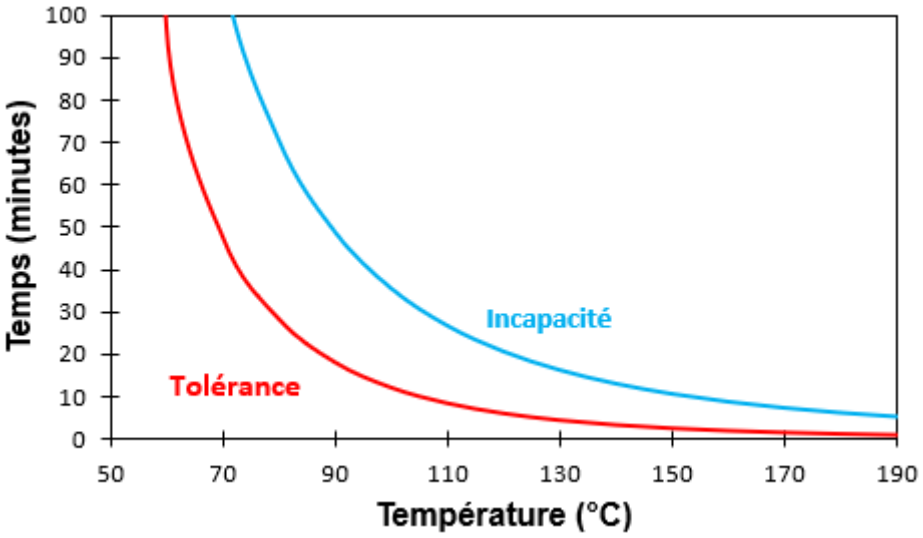

Figure 2.7 – Temps de tolérance (2.1.32) et d'incapacité (2.1.31) sous une température T.

Notons que ces deux formules supposent un sujet nu et par conséquent, un individu habillé devrait tenir plus longtemps. Ces formules présupposent de plus un individu au repos. Un individu en mouvement qui porte du bois ayant besoin d'un air frais pour évacuer la chaleur interne, devrait subir davantage les contraintes extérieures. Enfin, l'humidité de l'air est supposée être de 50%. Or, dans une cavité telle que la grotte Chauvet-Pont d'Arc, l'air est saturé (100%). Dans ce cas, une autre formule est fournie par la littérature. Le temps de tolérance pour un air saturé est calculé grâce à la formule [184]

$$t_{50\%,conv,sat} = e^{5,1849-0,0273T} \tag{2.1.33}$$

Sur la figure 2.8, cette formulation est comparée avec la relation (2.1.32).

À basse température, le temps de tolérance est plus faible pour un air saturé que pour un air plus sec. Cependant, pour des températures plus élevées, les deux courbes coïncident et les temps de tolérance sont les mêmes. À haute température, le danger survenant le plus rapidement est la brûlure de la peau. Le taux d'humidité n'a donc plus d'importance lorsque les températures deviennent élevées.

Aucune relation présentant le temps d'incapacité dans un air saturé n'a été trouvée dans la littérature. Remarquons cependant qu'à des températures inférieures à $100^{o}C$, le temps de tolérance est supérieur à 10 minutes. Un Aurignacien voulant alimenter le foyer pouvait donc sans problème traverser la zone de danger car cela lui nécessitait un temps moins important. Le facteur humidité n'affectait donc pas la dangerosité pour une alimentation du foyer. Cependant, il pouvait influencer le temps de séjour maximal d'un Aurignacien voulant assister à la combustion. Ainsi, pour un individu dont la mission était l'alimentation du foyer, la formule (2.1.31) sera utilisée pour les dangers de la température et la formule (2.1.30) avec $K = 10$ pour le rayonnement. Pour un Aurignacien restant à proximité du foyer pour admirer la vision, la formule (2.1.33) sera employée pour exprimer le danger de la température basé sur le temps de tolérance et la formule (2.1.30) avec $K = 1,33$ rendra compte du danger radiatif. Ainsi, un Aurignacien pourra visualiser le feu tant que la FED sera inférieure à 1 (aucune douleur sous ce seuil). En résumé, deux types de FED sont calculés. Celle correspondant

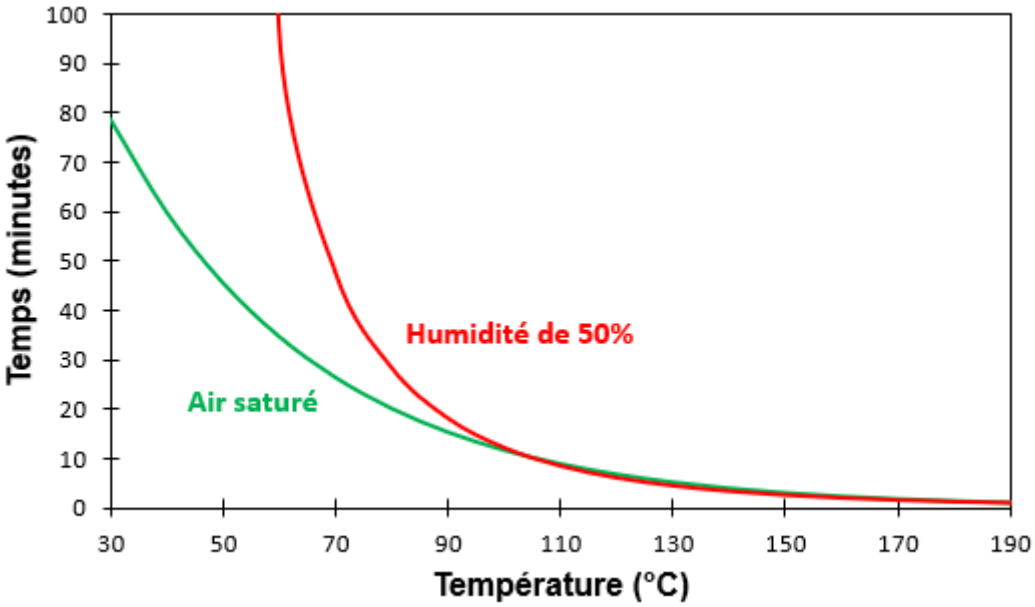

Figure 2.8 – Temps de tolérance en air saturé (2.1.33) et non saturé (2.1.32) sous une température T.

aux Aurignaciens dont la mission était d'alimenter le foyer repose sur des temps d'incapacité. Celle correspondant aux Aurignaciens spectateurs repose sur des temps de tolérance à la douleur. Cette formulation permettra de savoir si un feu pouvait être alimenté et si les Aurignaciens pouvaient l'observer sans douleur. Le cas de l'observation avec douleur mais sans incapacité n'est pas étudiée.

Globalement, la FED calculée sera la somme des contributions de la température et du rayonnement

$$FED_{conv+rad} = \int_0^T \frac{1}{t_{conv}} + \frac{1}{t_{rad}} \, \mathrm{d}t \tag{2.1.34}$$

2.1.3.3 Calcul et estimation du temps de séjour

Pour un Aurignacien voulant observer le feu, le temps de séjour est facile à calculer puisque l'individu reste au même endroit. À chaque pas de temps, le calcul suivant est effectué dans chaque cellule du maillage

$$FED_{obs}(t + dt) = FED_{obs}(t) + \frac{dt}{t_{50\%}} \tag{2.1.35}$$

Ici, $t_{50\%}$ est le temps de tolérance à l'instant $t + dt$. Il y aura deux FED, l'une pour la toxicité et l'autre pour le rayonnement et la température.

L'autre cas correspond à l'alimentation du foyer. Dans ce cas, le sujet est en mouvement et il est difficile d'évaluer précisément sa FED du point de vue numérique. Pour simplifier le problème, à chaque cellule du maillage sera associée une durée de parcours directement liée à la distance qui sépare cette cellule du foyer. Cette approche est schématisée sur la figure 2.9. Le chemin sera très simplifié puisque par exemple, cette modélisation ne repérera pas un mur entre le foyer et la cellule. Ainsi, la réalité ferait contourner le mur à l'Aurignacien alors que numériquement, sa trajectoire sera une ligne droite. Le temps de parcours correspond alors à

$$T_{parcours} = 2\frac{r_{\to Feu}}{V_{Porteur}} \tag{2.1.36}$$

avec $V_{Porteur}$ la vitesse du porteur et $r_{\to Feu}$ la distance entre la cellule et le foyer. Le facteur 2 provient de la prise en compte du retour. Une estimation de la vitesse d'un Aurignacien apportant du bois au

foyer est sans doute hasardeuse mais nécessaire. Nous choisissons $V_{Porteur} = 1,4\ m/s = 5\ km/h$ ce qui est une bonne allure de marche pour un être humain en bonne condition physique. Pour chaque cellule, la FED sera calculée par

$$FED_{porteur} = \frac{T_{parcours}}{t_{50\%}} \tag{2.1.37}$$

Ici, $t_{50\%}$ est le temps d'incapacité à l'instant $t + dt$. Ainsi, cette FED indique si le sujet a le temps d'apporter le bois et de revenir à partir de la cellule concernée. Puisque les conditions deviennent *a priori* plus extrêmes proche du foyer, cette approche minimise la FED car seul le temps d'incapacité de la cellule est considéré. Or les conditions de cette cellule sont plus favorables que celles à proximité du feu. Donc la FED calculée minore le danger réel. Il y aura aussi deux FED pour les porteurs, l'une pour la toxicité (même corrélation que pour les observateurs) et l'autre pour le rayonnement et la température. Quatre FED seront donc calculées afin d'estimer les dangers de l'environnement confiné pendant une combustion.

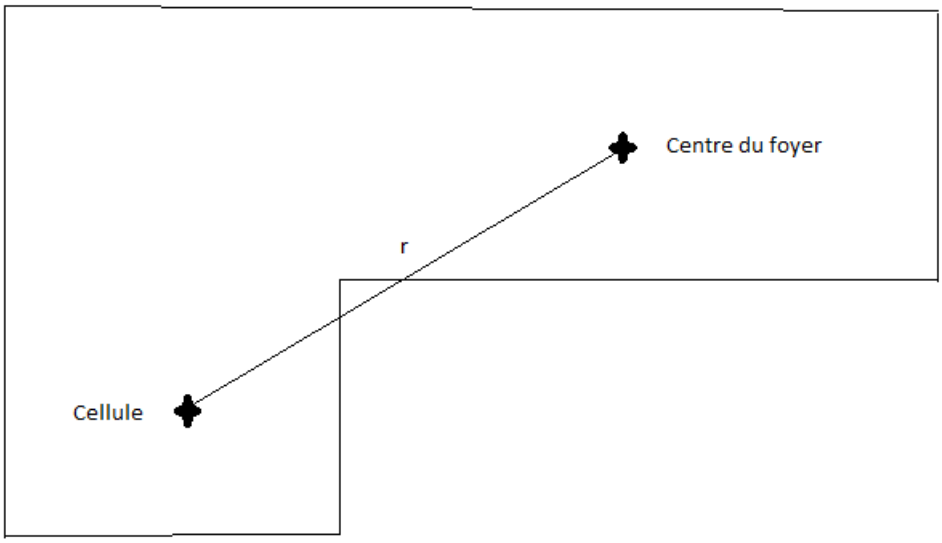

Figure 2.9 – Schéma du parcours d'un individu alimentant le foyer.

2.1.4 Dépôt de suie

Dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc, il existe encore dans certaines zones des liserés noirs caractéristiques d'anciens dépôts de suie (Fig. 2.10). Puisque ce sont des témoins de la présence de feux préhistoriques, il est important d'être capable, par la simulation, de reproduire ces dépositions. La modélisation de ces dépôts souffrira néanmoins d'une certaine imprécision de par sa complexité inhérente. Mais la quantité de dépôt n'est pas une donnée incontournable pour cette étude puisque d'une part, le temps a dégradé les dépôts de suie de l'époque qui ne sont sans doute plus identiques aux vestiges actuels, et d'autre part, des raisons évidentes de conservation empêchent la quantification de la masse des particules déposées. Ainsi, les simulations fourniront uniquement des résultats qualitatifs sur la limite entre la présence et l'absence de suie.

Physiquement, il existe plusieurs mécanismes responsables du dépôt de suie sur des parois. Le premier correspond à la diffusion des particules de suie dans le milieu gazeux. L'inertie des particules étant plus importante, elles ne peuvent se comporter comme le gaz qui les entoure. Certaines sont projetées sur la paroi. Ce dépôt est souvent qualifié d'inertiel. Le deuxième mécanisme correspond à la sédimentation. Il s'agit simplement d'un dépôt par gravité sur paroi horizontale. Le phénomène de thermophorèse est aussi responsable du mouvement de suies vers les parois. Sous l'effet d'un gradient de température, les particules se déplacent dans le sens du gradient. En effet, l'agitation moléculaire des particules de gaz dans la zone chaude étant plus importante que celle dans la zone froide, la force résultante des impacts des particules de gaz sur la particule de suie est dirigée de la zone chaude vers

Figure 2.10 – Liserés noirs sur une paroi de la grotte Chauvet.

la zone froide. Puisque la paroi solide est plus froide que le gaz contenu dans l'enceinte, la particule se dirige vers la paroi.

Selon le diamètre des particules, certains processus sont plus ou moins importants dans la déposition. La taille des particules varie selon leurs étapes de formation dans la flamme. Aussi, les chocs entre elles permettent la création d'agrégats. Les particules ne sont alors plus sphériques mais une composition de petites particules sphériques (Fig. 2.11). Il est donc impossible de caractériser les particules autrement que de manière statistique. Néanmoins, l'ordre de grandeur de la taille de ces agrégats reste entre 0,1 et 1 micromètre. Pour ces diamètres, la déposition de suie s'effectue principalement par thermophorèse [185]. Dans cette étude, seule la déposition par thermophorèse est donc analysée.

De manière générale, le dépôt de suie est caractérisé par une vitesse de dépôt en m/s. Dans le cadre de la thermophorèse, celle-ci est définie par

$$\mathbf{V_{th}} = -K_{th}\frac{\nu_g}{T_g}\boldsymbol{\nabla} T \tag{2.1.38}$$

Dans cette équation, ν_g et T_g font respectivement référence à la viscosité cinématique et à la température du gaz au plus près de la paroi. Le coefficient K_{th} doit être modélisé puisqu'il englobe l'aspect stochastique ayant trait aux particules. Plusieurs modèles existent, mais différentes études [185], [186] s'accordent pour attribuer au modèle de Beresnev-Chernyak [14] les meilleurs résultats. Celui-ci définit K_{th} par

$$K_{th} = \frac{6}{8+\pi}\frac{F_3+(1-\alpha_t)F_4}{F_1+(1-\alpha_t)F_2}\frac{\left[\alpha_t+\frac{15\sqrt{\pi}(1-\alpha_t)}{8R\lambda_g/\lambda_p}\right]\phi_1+\alpha_t\frac{\lambda_p}{\lambda_g}\phi_2}{\left[\alpha_t+\frac{15\sqrt{\pi}(1-\alpha_t)}{8R\lambda_g/\lambda_p}\right]\phi_3+\left[\alpha_t+\frac{5\sqrt{\pi}(3-\alpha_t)}{8R\lambda_g/\lambda_p}\right]\phi_4} \tag{2.1.39}$$

avec $\phi_k = f_{k1}+(1-\alpha_m)f_{k2}+(1-\alpha_m)f_{k3}$, $F_k = \varphi_{k1}+(1-\alpha_m)\varphi_{k2}$ et $R = \frac{\sqrt{\pi}}{3PrKn}$. Les valeurs des fonctions f_k et φ_k sont présentées dans l'annexe D. Les coefficients α_t et α_m sont les coefficients d'accommodation. Ils caractérisent la réflexion des molécules sur les particules de suie. Ils seront pris égaux à 1 puisque cette valeur permet d'atteindre des résultats proches de la réalité [185]. Kn est le nombre de Knudsen défini par le rapport du libre parcours moyen (distance moyenne parcourue par une particule entre deux chocs) sur le rayon de la particule

$$Kn = \frac{2l}{d} \tag{2.1.40}$$

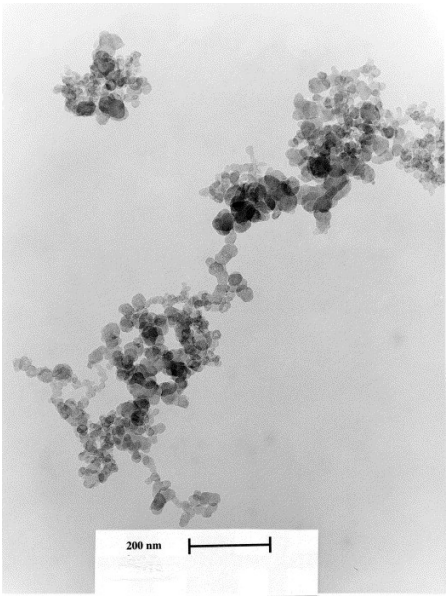

Figure 2.11 – Photomicrographie d'un agrégat de particules sphériques (diesel) [8].

Le nombre de Knudsen permet de caractériser le milieu dans lequel évolue une particule. Lorsque celui-ci est grand, la particule a peu de voisines et peut se déplacer sans choc (milieu moléculaire). Dans l'autre cas, les chocs sont nombreux car le milieu est plus dense en particules (milieu continu). Dans les limites de la théorie des collisions, le libre parcours moyen dans un gaz parfait peut s'écrire

$$l = 2\nu\sqrt{\frac{\pi}{8\mathscr{r}T}} \tag{2.1.41}$$

Enfin, le rapport des conductivités λ_g/λ_p peut être approximé à 1 pour des agrégats. En effet, ils sont très poreux et le gaz s'infiltre facilement à l'intérieur des particules. Les propriétés de la suie sont alors négligeables et celles de l'agrégat correspondent à celles de l'air. Ce raisonnement se déduit des faits expérimentaux qui sont mieux modélisés avec l'hypothèse $\lambda_g/\lambda_p \sim 1$.

Une fois la vitesse de thermophorèse calculée, un débit surfacique ($kg.s^{-1}.m^{-2}$) est déterminé par la relation

$$\dot{m}_{dpt} = \rho_{suie} Y_{suie} \mathbf{V_{th}}.\mathbf{n} \tag{2.1.42}$$

où $\mathbf{n}$ est la normale à la paroi. Il est à noter que les propriétés de l'écoulement doivent être très bien connues pour pouvoir estimer correctement le dépôt de suie. En effet, le gradient thermique apparaissant dans la formule de la vitesse de thermophorèse (2.1.38) correspond au changement de température proche de la paroi au sein de la couche limite thermique. Comme il a été décrit précédemment (§1.5.4), la couche limite thermique n'est pas simulée mais seulement modélisée par un coefficient de convection. La précision des résultats numériques sur le dépôt de suie pâtira donc dans une certaine mesure de cette modélisation. C'est la raison pour laquelle la quantité de particules déposées sera difficile à estimer par le modèle numérique.

2.2 Remarque sur le HRR numérique

Les simulations présentées dans les parties suivantes ne contiennent pas de modèle de pyrolyse. La puissance du feu est donc une donnée d'entrée que l'utilisateur doit fournir au logiciel. L'utilisateur doit donc être certain que cette puissance peut réellement être dégagée lors de la combustion. La puissance dégagée est imposée au travers d'une condition limite en vitesse sur les parois du foyer. Le combustible est ainsi supposé gazeux dans la simulation. La puissance calorifique et la vitesse limite sont alors liées

par la relation (1.3.5) qui s'écrit

$$U = \frac{\dot{Q}}{\chi \Delta \mathscr{H}_c \rho A_{foyer}} \tag{2.2.1}$$

où A_{foyer} est l'aire du foyer numérique. Imposer la vitesse au foyer est donc équivalent à imposer la puissance du foyer. OpenFOAM demande plutôt à l'utilisateur de fixer le débit massique puis le logiciel calcule la condition limite en vitesse à partir de la surface du foyer. En théorie, la surface du foyer ne devrait donc pas influencer la valeur du débit massique puisque la vitesse est ajustée par OpenFOAM pour satisfaire la demande de l'utilisateur. La puissance dégagée s'écrit donc

$$\dot{Q} = \chi \dot{m} \Delta \mathscr{H}_c \tag{2.2.2}$$

Des observations numériques ont cependant révélé le contraire [9]. Malgré une valeur correcte du débit massique aux limites, la puissance dégagée numériquement par la réaction chimique peut être surestimée, indépendamment de la constante choisie dans le modèle de combustion (1.5.116). Pour démontrer cette affirmation, étudions un cas test correspondant à un foyer plat de taille variable dans une enceinte cubique d'un mètre de côté maillée par des cellules de 3 centimètres (Fig. 2.12). Le débit massique est fixé à $0,02\ kg.s^{-1}$ de sorte que la puissance dégagée reste théoriquement la même quelque soit la surface du foyer. Une enthalpie de combustion de $12,5\ MJ.kg^{-1}$ induit une puissance dégagée de $250\ kW$ en supposant une efficacité maximale de 1 dans la relation (2.2.2). Quatre

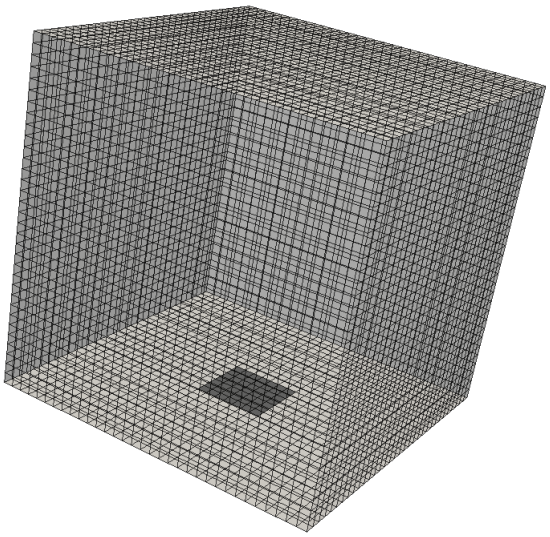

Figure 2.12 – Géométrie du cas test. L'enceinte est un cube d'un mètre de côté et le foyer plat (couleur noire) a une taille variable.

configurations sont testées dans lesquelles la surface du foyer varie selon le tableau 2.1. La figure 2.13

Configuration	1	2	3	4
Surface	$9 \times 9\ cm^2$	$21 \times 21\ cm^2$	$39 \times 39\ cm^2$	$57 \times 57\ cm^2$

Tableau 2.1 – Surface des foyers plats en fonction de la configuration.

présente les courbes de HRR numérique pour chacune des configurations. Les fluctuations autour de la valeur théorique sont cohérentes avec le caractère chaotique de la turbulence. Toutefois, seules les deux premières configurations oscillent autour de la valeur théorique. La troisième configuration surestime légèrement la valeur analytique et la quatrième s'éloigne grandement de $250\ kW$. Une fois une certaine surface critique dépassée, le feu dégage une énergie plus importante que celle prescrite par l'utilisateur. Cette surface critique se trouve entre les configurations 2 et 3. Pour des mailles de $3\ cm$ et avec

le modèle de combustion (1.5.116), la surface critique de cette combustion est proche de la seconde configuration $21 \times 21 = 441\ cm^2$. Une autre combustion pourrait être soumise à une surface critique différente puisque tous les cas possibles n'ont pas été testés. Cependant, toutes les combustions réalisées avec l'outil FireFOAM (plusieurs débits et maillages) ont montré l'existence d'une telle surface critique sans qu'elle soit analysée systématiquement. Dans la suite, la surface du foyer respectera toujours le critère établi.

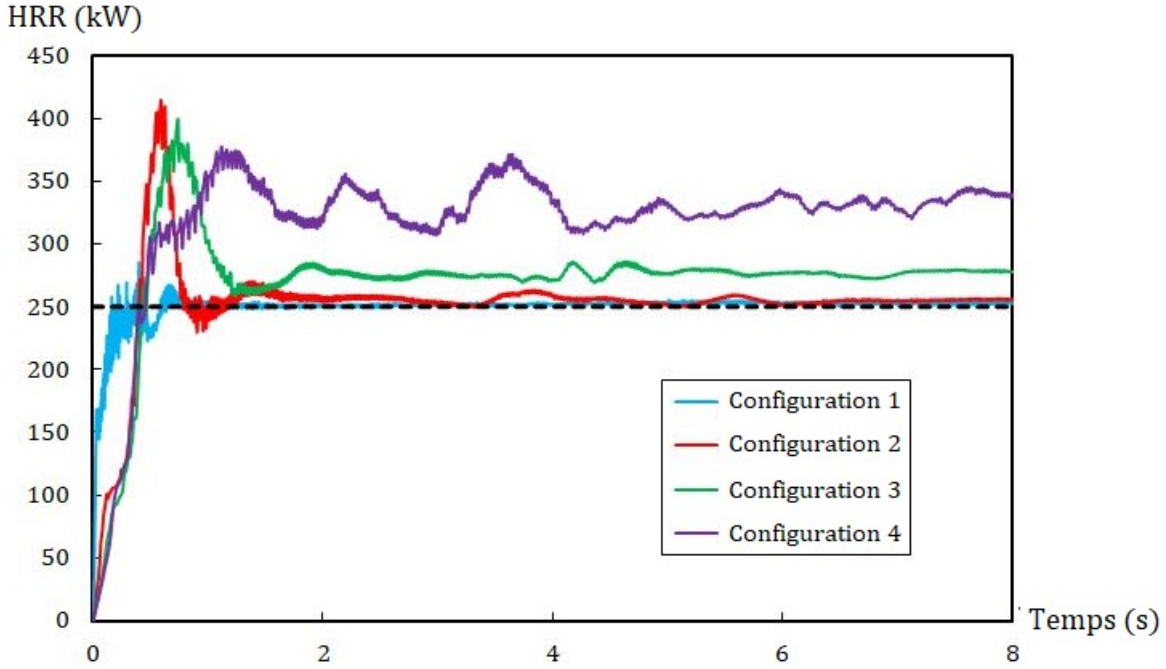

Figure 2.13 – Comparaison entre les HRR numériques pour chaque configuration [9]. La droite horizontale en pointillé noir correspond au HRR théorique.

2.3 Considérations empiriques appliquées aux simulations numériques

Au moment d'écrire cette thèse, la simulation numérique de feux reste une discipline complexe. D'une part, les phénomènes physico-chimiques décrivant la combustion ne peuvent être complètement modélisés. Par exemple, la turbulence, qui intervient lors de la circulation des gaz, n'est pas encore une science résolue. Pour aider la simulation numérique dans l'obtention de résultats précis, les scientifiques ont souvent recours à des considérations empiriques. Par exemple, la valeur du nombre de Prandtl turbulent (1.5.102) est basée sur des expérimentations. Les modèles de turbulence nécessitent l'utilisation de coefficients empiriques. Les interactions avec les parois nécessitent la simulation de couche limite. Majoritairement, les simulations modélisent ce phénomène sans le résoudre explicitement par des lois de paroi ou des relations empiriques portant sur le coefficient de convection thermique.

2.3.1 Transfert convectif aux parois

Les couches limites thermiques seront modélisées par la loi de Newton (1.4.9) $q_{conv} = h\,(T_\infty - T_w)$ (§1.4.2). Par défaut, le logiciel FDS [86] utilise ce type de corrélation. Le logiciel CFAST (Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport) [74], basé sur une modélisation en deux zones (couches froide et chaude), utilise aussi ce type de corrélation. Toutefois, le coefficient de transfert convectif est choisi différemment selon la localisation du flux, au plafond, au sol ou aux murs.

2.3.1.1 Transfert au plafond

À cause du jet sous plafond, l'utilisation des corrélations du nombre de Nusselt de la partie 1.4.2 est prohibée. Une autre corrélation du coefficient de transfert convectif propre au jet sous plafond est donc nécessaire. Beyler [66] regroupe des corrélations de ce coefficient. You et Faeth [72] ont développé une corrélation pour des feux faibles. Cooper [187] élabora une formule requérant la connaissance de la température du plafond si celui-ci était adiabatique. Enfin, Alpert [188] a développé une relation basée sur les corrélations de vitesse (1.3.10) et sur l'analogie de Reynolds. Cette dernière est la plus utilisée par la communauté scientifique [74], [68] et sa construction est donc détaillée ci-dessous.
L'analogie de Reynolds suppose que les phénomènes thermiques se comportent comme les phénomènes hydrodynamiques. Elle repose donc sur l'hypothèse d'un nombre de Prandtl unitaire : $\nu = \kappa$. Rappelons l'expression de la contrainte pariétale (1.5.18) $\tau_w = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{y=0}$ et du flux thermique à la paroi $\varphi_w = \kappa \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{y=0}$. Il en découle l'égalité suivante valable lorsque $y = 0$

$$\mathrm{d}y = \mu \frac{\mathrm{d}u}{\tau_w} = \kappa \frac{\mathrm{d}T}{\varphi_w} \Rightarrow \mathrm{d}T = \frac{\varphi_w}{\tau_w c_p} \mathrm{d}u \tag{2.3.1}$$

où la relation $\frac{\mu}{\kappa} = \frac{1}{c_p}$ découlant de l'hypothèse du nombre de Prandlt unitaire a été utilisée. En intégrant l'équation (2.3.1),

$$\int_w^\infty \mathrm{d}T = \int_w^\infty \frac{\varphi_w}{\tau_w c_p} \mathrm{d}u \Rightarrow (T_\infty - T_w) = \frac{\varphi_w}{\tau_w c_p} u_\infty \tag{2.3.2}$$

en supposant que la vitesse à la paroi est nulle. En injectant $\varphi_w = h(T_\infty - T_w)$ dans l'équation précédente,

$$St = \frac{h}{\rho_\infty c_p u_\infty} = \frac{\tau_w}{\rho_\infty u_\infty^2} = \frac{C_f}{2} \tag{2.3.3}$$

où St est le nombre de Stanton et C_f le coefficient de frottement. L'analogie de Reynolds correspond ainsi à

$$\frac{h}{\rho_\infty c_p u_\infty} = \frac{C_f}{2} \tag{2.3.4}$$

L'analogie de Reynolds-Colburn étend la relation précédente à des nombres de Prandtl différents de un

$$\frac{C_f}{2} = StPr^{2/3} \tag{2.3.5}$$

Il en découle une formule générale du coefficient de transfert convectif

$$h = \rho_\infty c_p u_\infty Pr^{-2/3} \frac{C_f}{2} \tag{2.3.6}$$

En remplaçant u_∞ par la corrélation (1.3.16), il vient la corrélation d'Alpert [188]

$$h = \begin{cases} 0,835 C_f \left(\frac{\dot{Q}_c}{H_p}\right)^{1/3} & \text{si } r \leq 0,17 H_p \\ 0,246 C_f \left(\frac{\dot{Q}_c}{H_p}\right)^{1/3} \left(\frac{r}{H_p}\right)^{-0,69} & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.3.7}$$

en supposant que le nombre de Prandtl est égal à 0,7. Le nombre de Prandtl pour l'air variant de moins de 3% sur une plage de température s'étendant de 0^oC à 1000^oC, cette valeur a été choisie dans la corrélation (2.3.7). D'après [68], le choix $C_f = 0,03$ fournit des résultats en accord avec l'expérience.

Le transfert thermique par convection sera donc calculé grâce à la corrélation d'Alpert pour le plafond. Cette relation est néanmoins uniquement valable dans le cas restrictif d'un plafond plat non confiné tant qu'aucune couche chaude n'existe. Dans le cas confiné, le transfert sera en réalité plus important mais la tendance restera similaire (§1.3.2). Lorsqu'une couche chaude est présente, CFAST calcule le transfert convectif par la formule $q_{conv} = h(T_u - T_w)$ où T_u est la température de la couche

chaude calculée par le modèle. L'équation (2.3.7) pourra donc être utilisée dans notre modèle tant que le plafond peut être supposé plat comme dans la carrière de Lugasson.

Cependant, la Galerie des Mégacéros ne peut être représentée avec un plafond plat. Les indices laissés par les feux réalisés par les Aurignaciens sont parfois localisés dans des coupoles ou sur des parois inclinées. Il est donc utile de développer une corrélation sur le coefficient de transfert convectif dans le cas d'un plafond incliné. L'analogie de Reynolds-Colburn peut être appliquée aux corrélations d'Oka (1.3.18) de la même manière que pour les corrélations d'Alpert. Le coefficient de transfert convectif pour un plafond incliné s'écrit dans ce cas

$$h = 0,231 C_f \frac{\dot{Q}_c^{1/3}}{H_p^{5/6}} \alpha \sqrt{H_p + r_{up} sin\theta} \left(\frac{r_{up} cos\theta}{H_p + r_{up} sin\theta} \right)^{\beta} (1 + sin\theta)^{1/3} \tag{2.3.8}$$

Les corrélations pour un plafond plat (2.3.7) et incliné (2.3.8) sont confrontées sur la figure 2.14 pour le cas $H_p = 2,5\ m$ et $\dot{Q}_c = 70\ kW$. Un angle de 40^o double la valeur du coefficient de convection thermique. Notons que pour un angle de 0^o, les deux corrélations diffèrent quasiment d'un facteur 2. Cet écart provient sans doute de la différence d'échelle entre les essais menés dans les deux études. La corrélation basée sur les travaux d'Oka n'est théoriquement valable que pour de très modestes feux ($< 100\ kW$). Les feux réalisés dans la Galerie des Mégacéros sont *a priori* plus puissants, de l'ordre

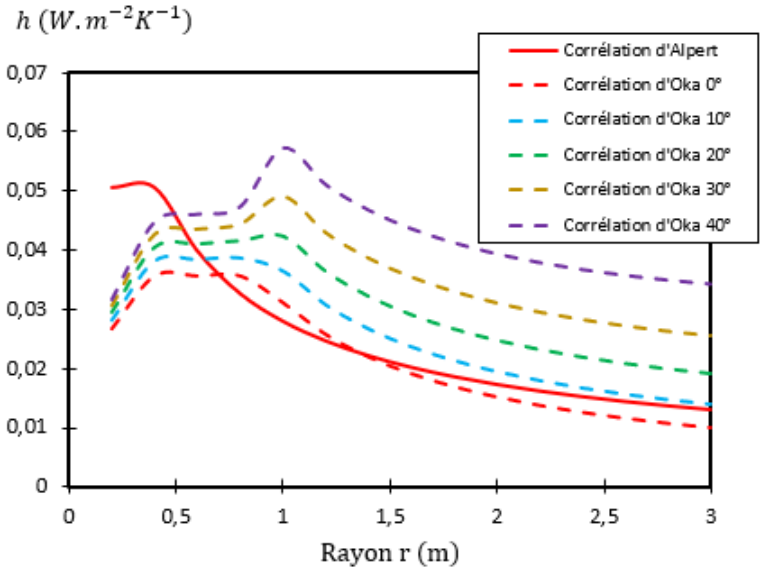

Figure 2.14 – Comparaison entre les deux corrélations du coefficient de transfert thermique pour $H_p = 2,5\ m$ et $\dot{Q}_c = 70\ kW$. La corrélation d'Oka (2.3.8) est tracée pour différents angles.

de plusieurs centaines de kilowatts d'après §1.3.1. Même si aucune preuve expérimentale existante ne prouve le bien-fondé de la corrélation (2.3.8) pour des puissances plus élevées, cette formule sera utilisée avec prudence pour certaines simulations de la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Les résultats seront donc affectés par une incertitude qu'il faudra quantifier.

Les deux précédentes formules (2.3.7) et (2.3.8) sont des relations adaptées pour des calculs analytiques mais sont plus difficilement applicables à la simulation numérique. En effet, le flux de convection reçu par le plafond est modélisé à l'aide de la loi de Newton, d'une corrélation empirique sur le coefficient h et de la température maximale du jet sous plafond de sorte que

$$q_{conv} = h\,(T_{max} - T_w) \tag{2.3.9}$$

La simulation quant à elle va estimer le flux de la manière suivante

$$q_{conv} = h\,(T_g - T_w) \tag{2.3.10}$$

où T_g est la température au centre de la première cellule. Il faudrait donc que la température au centre de la première cellule soit la température maximale du jet sous plafond. D'une part, cela nécessite une maille suffisamment grande pour que son centre se trouve en dehors de la couche limite. D'autre part, cela nécessite un raffinement important après la première cellule pour simuler correctement l'évolution des propriétés du gaz qui varient fortement sur quelques centimètres. Cet hypothétique maillage est représenté sur la figure 2.15.a. Le profil de température obtenu à partir de ce maillage pourrait de plus ne pas être celui escompté puisque la grande taille de la première maille pourrait entacher la température maximale numérique d'imprécisions.

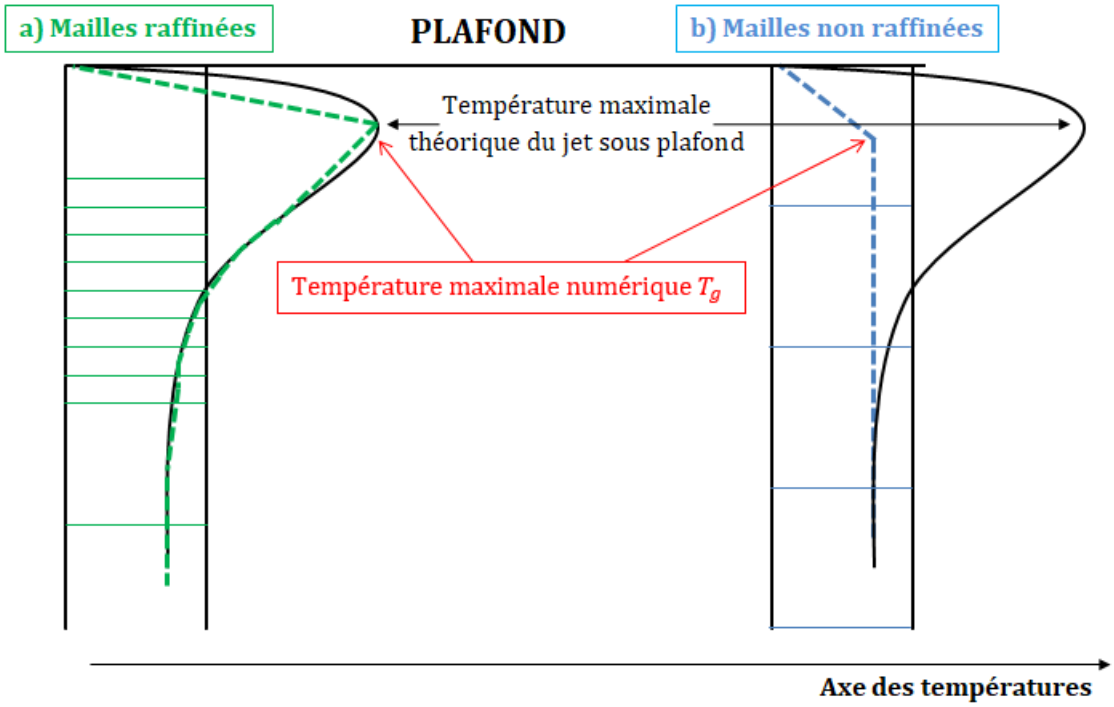

Figure 2.15 – Le profil de température réel est schématisé par les courbes noires. a) Profil numérique de la température du jet sous plafond pour un maillage raffiné sous la première cellule (en vert). b) Profil numérique de la température du jet sous plafond pour un maillage non raffiné (en bleu).

Hormis ce maillage incertain, l'utilisateur a deux autres choix pour simuler convenablement un jet sous plafond. Soit il raffine complètement la zone proche du plafond et utilise ou non des lois de parois pour modéliser la couche limite, soit il ne raffine pas du tout et modifie les corrélations existantes grâce à une phase expérimentale (Fig. 2.15.b). Le premier choix est trop coûteux en temps de calcul puisqu'il utilise un maillage fin. Le dernier choix consiste donc en l'utilisation d'un maillage non raffiné et l'adaptation des corrélations à ce maillage. Cette corrélation devra être capable de simuler un profil de température similaire au tracé en pointillé bleu de la figure 2.15b. Pour ce faire, les corrélations (2.3.7) et (2.3.8) seront appliquées à un facteur de proportionnalité près qui est déterminé empiriquement suite aux expérimentations réalisées dans la carrière de Lugasson (Chap. 3). Le coefficient de proportionnalité empirique vaut 6000. Le paragraphe 2.3.1.3 discute de la valeur élevée de ce coefficient.

2.3.1.2 Transfert aux murs et au sol

D'après la partie 1.3.3, dans une géométrie comparable à un couloir, le jet sous plafond peut continuer sa course le long des parois verticales. Ce phénomène apparait lorsque la distance entre le foyer et le mur est inférieure à la hauteur sous plafond. La carrière ayant accueilli les expérimentations satisfait ce critère tout comme la Galerie des Mégacéros. Les considérations numériques précédentes sur le jet sous plafond s'appliquent ainsi aux parties hautes des parois. Malheureusement, il n'existe aucune corrélation décrivant le flux thermique cédé aux parois dans cette configuration. Une méthode simplifiée

a donc été mise en place afin d'estimer le transfert convectif aux parois. Le transfert est calculé par la loi de Newton et une corrélation du coefficient de convection thermique correspondant au maximum des deux calculs (1.4.13) et (1.4.16). La prise en compte de l'extension du jet sous plafond aux parois verticales est contenue dans la longueur caractéristique intervenant dans les corrélations. Dans la partie basse, une longueur typique d'un mètre est appliquée [86]. Dans la partie haute, la valeur est déterminée empiriquement sur les expérimentations réalisées dans la carrière (Chap. 3). $L = 0,1\ mm$ a été choisi.

La séparation des deux parties est basée sur la température. Dans la couche froide, la longueur caractéristique habituelle est sélectionnée tandis qu'une longueur de 0,1 mm est choisie dans la couche chaude. Une température limite de 400 K permet de séparer les deux couches. Le choix de cette température n'est pas sujet à une grande précision puisque la présence de deux couches distinctes permet l'utilisation d'une large gamme de température limite entre celle de la couche froide et celle de la couche chaude.

2.3.1.3 Commentaires sur les coefficients expérimentaux

Le coefficient de proportionnalité relatif au plafond est de 6000 tandis que celui au mur est de 10000 ($= \frac{1}{L}$). Ces deux valeurs semblent *a priori* extrêmement grandes. Il faut cependant garder à l'esprit qu'une augmentation du coefficient de convection thermique n'induit pas une augmentation proportionnelle du transfert thermique. En effet, d'après la loi de Newton, le flux dépend aussi de la différence de température

$$q_{conv} = h\,(T_\infty - T_w) \tag{2.3.11}$$

Par exemple, lorsque $h \to \infty$, nécessairement $T_w \to T_\infty$ et la température de la paroi tend vers celle du gaz. Ainsi, les valeurs importantes évoquées *supra* impliquent simplement que les températures du plafond et des parois doivent être suffisamment proches. Ainsi, la figure 2.15.b devrait davantage ressembler à la figure 2.16. Ce faible écart est dépendant de beaucoup de paramètres liés à la géométrie, au maillage et à la puissance dégagée par le feu. Toutefois, à maillage identique, l'ordre de grandeur de ces coefficients se conserve.

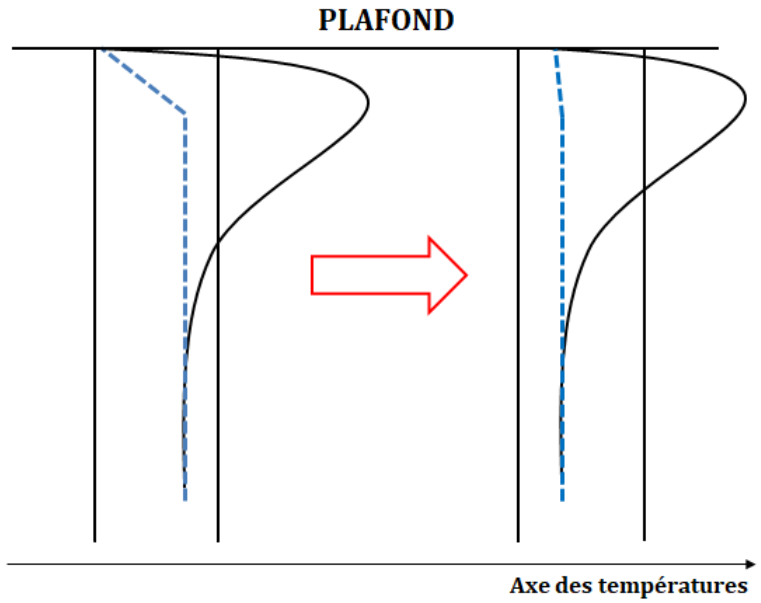

Figure 2.16 – Le profil de température réel est schématisé par les courbes noires. Les profils numériques de la température du jet sous plafond schématisé (à gauche) et plus réaliste (à droite) sont schématisés par les courbes bleues.

2.3.2 Hypothèse de la vitesse exclusivement horizontale

L'objet de ce paragraphe est exposé dans l'article [9] et détaillé ici. Dans un milieu confiné tel que la grotte Chauvet-Pont d'Arc ou la carrière de Lugasson qui abrita les essais, la circulation des gaz entraîne souvent la formation de deux couches de températures totalement différentes. L'établissement de deux couches est possible tant que l'énergie dégagée par le feu n'est pas trop importante par rapport au confinement et à la surface de l'entrée pilotant l'afflux d'air frais. Ce phénomène est connu des ingénieurs incendie puisqu'il est souvent observé lors d'expérimentations. Par exemple, le chapitre 5 du manuel de validation de FDS [86] (*HGL Temperature and Depth*) est dédié à la température de la couche chaude. Plus spécifiquement, la section 5.14 contient des profils de température expérimentaux en fonction de la cote. Ces profils sont schématiquement représentés sur la figure 2.17.

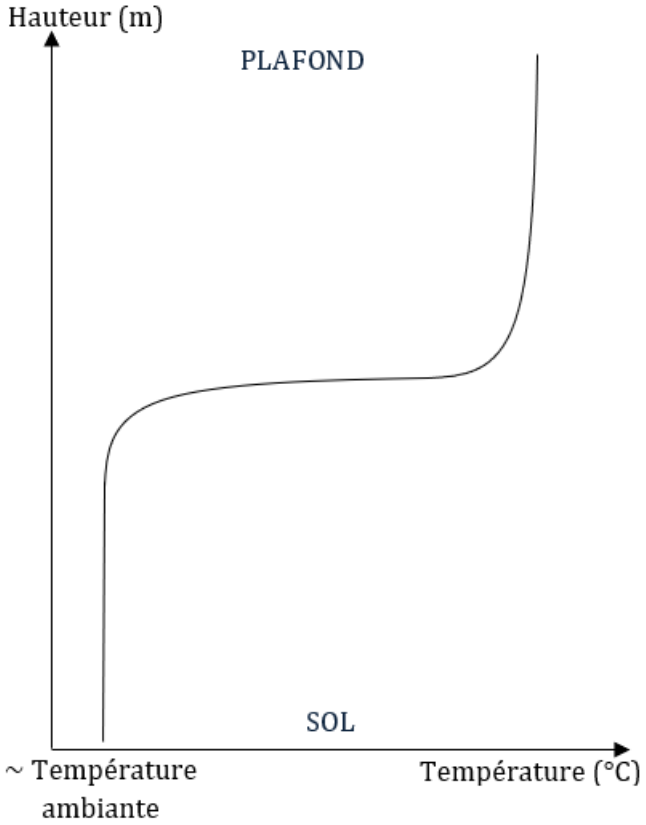

Figure 2.17 – Profil de température typique lors de l'établissement de deux couches de températures distinctes : une couche chaude de température homogène et une couche froide de température presque identique à l'air ambiant.

Les expérimentations menées dans la carrière de Lugasson sont présentées en détail au chapitre suivant. Les mesures de température relatives à ces expérimentations confirment l'établissement de deux couches distinctes (voir par exemple Fig. 3.21). La simulation de ces deux couches est primordiale dans cette étude puisque les conditions de survie proche du feu dépendent de l'établissement de ces deux couches. En effet, grâce à la couche froide, il est peut-être possible de s'approcher du feu même si les dangers du rayonnement (§2.1.3) doivent être évalués afin de conclure. Une mauvaise simulation de ce phénomène et des températures trop élevées proche du sol pourraient fausser les analyses.

Afin de tester l'outil FireFOAM sur ce phénomène, un cas simple, où l'établissement de deux couches distinctes est avéré, est proposé. Le calcul est réalisé dans la géométrie de la carrière détaillée au paragraphe 3.1.1 et visible sur la figure 3.1 qui se compose de deux galeries en forme de "L". La hauteur de la carrière varie de 2 m 50 à l'aplomb du feu (positionné à 80 cm du mur du fond de la galerie 2) à 1 m 70 à l'entrée de la carrière. Un débit calorifique constant de 750 kW est imposé. Cette valeur, tout en étant exigeante, reste inférieure au maximum de la puissance émise lors des expérimentations qui fournit des mesures en accord avec la présence de deux couches distinctes. Les parois de la carrière

sont supposées adiabatiques. Des cellules de 3 cm maillent la région de la flamme tandis que le reste de la carrière est maillé avec des cellules de 6 cm. La constitution du maillage sera discutée dans la partie 3.2 mais le maillage choisi correspond à celui utilisé pour la simulation du chapitre suivant. Après 100 secondes de calcul, le régime transitoire est terminé et le profil de température aux différents points indiqués sur la figure 2.18 est tracé (Fig. 2.19). Notons que l'arbre A est placé proche du feu et l'établissement de deux couches distinctes à cet endroit n'est pas forcément attendu.

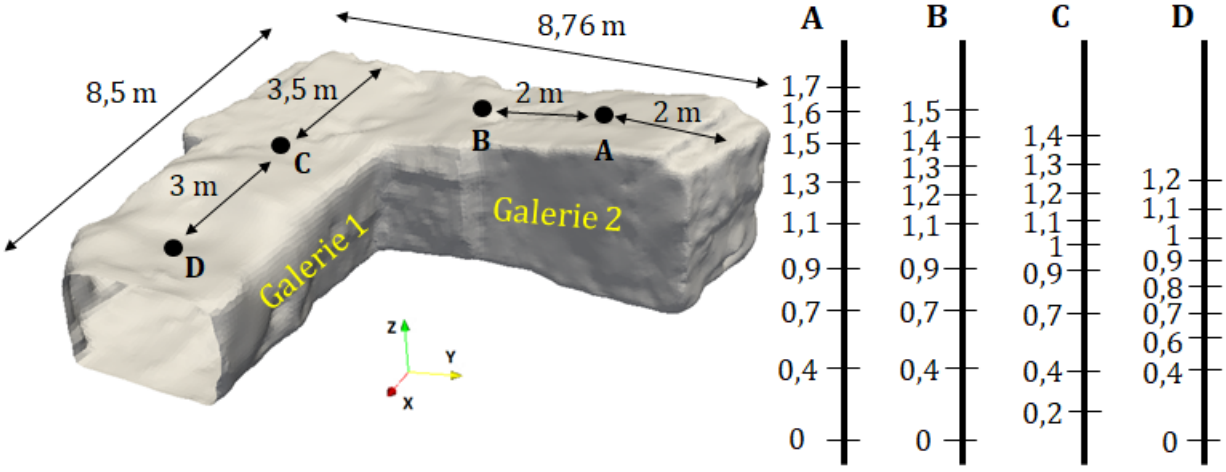

Figure 2.18 – Position des points de comparaison pour le cas test. La figure de gauche indique la localisation spatiale des arbres de points verticaux et la figure de droite détaille la disposition verticale des points de chaque arbre. Les arbres sont systématiquement placés au centre des galeries.

Les résultats sont qualitativement décevants puisque les profils ne ressemblent pas à celui présenté sur la figure 2.17. D'une part, il n'y a pas clairement de distinction entre deux couches de température différentes. Le passage des températures élevées aux températures froides est réalisé de manière quasiment linéaire alors qu'il devrait être relativement brusque. D'autre part, les températures proches du sol sont éloignées de la température ambiante. Puisque la baisse de température est lente et non abrupte, les gaz proches du sol sont à une température trop élevée par rapport à la réalité. Cet aspect est pénalisant dans l'optique de l'application de la modélisation à la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Enfin, les températures proches du plafond ne sont pas homogènes partout. En B, la température est assez homogène mais les arbres C et D ne présentent pas d'homogénéité de la température. De plus, l'épaisseur de la couche présentant une température homogène en B semble très modeste par rapport aux mesures effectuées lors des expérimentations (Chap. 3).

N'ayant trouvé aucuns travaux publiés sur le problème de la simulation de l'établissement de deux couches distinctes par FireFOAM, les sources numériques ou théoriques des erreurs peuvent, *a priori*, être nombreuses. La première raison invocable concernerait le maillage. Un autre essai est donc effectué avec des mailles de 3 cm partout dans la carrière. La comparaison entre les deux maillages est présentée sur la figure 2.20. Les profils sont très similaires et le raffinement ne modifie pas la tendance. Il n'est cependant pas possible d'écarter l'impact d'un raffinement plus important hors d'atteinte dans le cadre de cette étude. La diminution du pas de temps ne change pas non plus la situation. Afin de capter davantage la rudesse du changement de température, un schéma d'ordre 2 en temps a été utilisé (Crank-Nicolson) sans succès. Différents paramètres de résolution ont été modifiés comme le nombre de boucles PISO ou le nombre de boucles PIMPLE (§1.8.5.2) sans donner de résultats probants. Les tolérances numériques présentées dans le tableau 1.8 ont été abaissées et des schémas numériques d'ordre plus élevé pour l'interpolation des termes de surface ont été employés sans succès. Le modèle de Smagorinski (1.5.72) brièvement évoqué plus haut a remplacé le modèle à une équation détaillé §1.5.3.5 pour une simulation. Les résultats sont sensiblement identiques à ceux basés sur le modèle de turbulence utilisé dans ce mémoire. Le nombre de Prandtl turbulent, mal maîtrisé puisqu'il est considéré constant dans tout le domaine, influence peu l'ordre de grandeur des températures simulées, et ne modifie en

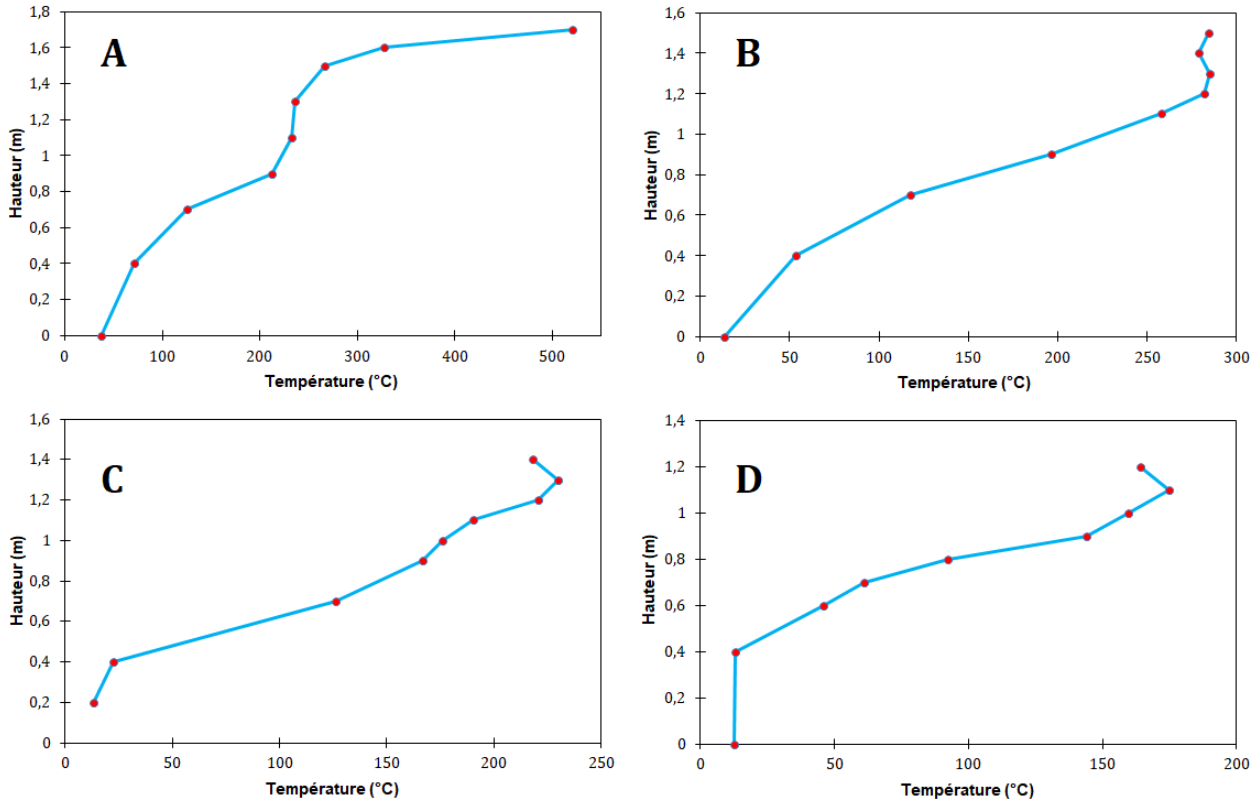

Figure 2.19 – A - Profil de température simulée le long de l'arbre A. B - Profil de température simulée le long de l'arbre B. C - Profil de température simulée le long de l'arbre C. D - Profil de température simulée le long de l'arbre D.

rien les tendances exposées sur la figure 2.19. Aucun paramètre numérique ne semble être à l'origine du problème et aucune solution acceptable n'a pu être obtenue.

Une autre approche est donc nécessaire puisque ce problème ne peut rester irrésolu. Tout d'abord, recherchons physiquement ce qu'une température homogène dans la couche chaude et l'établissement de deux couches séparées requièrent. Dans la couche chaude, une absence de différence de température entre deux points verticalement distants est nécessairement la conséquence d'une absence de transfert thermique entre eux. Si le bilan du transfert thermique était non nul, les deux zones contiendraient une énergie différente ce qui ne peut être le cas. La séparation en deux couches impose l'absence de flux entre les deux couches. En effet, un transfert de la couche chaude vers la couche froide impliquerait une augmentation de la température des gaz proches du sol. Un transfert de la couche froide vers la couche chaude ne pourrait trouver son origine que dans l'inertie des gaz puisque seule une vitesse importante des gaz peut contrer les forces de flottabilité dirigées vers le bas pour des gaz frais. Globalement, il faudrait donc une disparition des transferts thermiques verticaux pour former deux couches homogènes distinctes. Il est évident que la réalité n'est pas aussi stricte et que des transferts existent nécessairement. Cependant, ces transferts sont forcément très faibles.

Cette approche est à l'origine des logiciels à zone qui séparent les compartiments en deux zones comme par exemple CFAST [74]. Deux zones, l'une froide et l'autre chaude, sont supposées exister à chaque instant. Tous les paramètres sont supposés homogènes dans ces deux zones ce qui simplifie grandement les calculs. Le seul transfert thermique s'opérant entre les deux zones s'effectue dans les flammes puisque c'est ici que l'énergie, initialement présente au sol, s'élève pour atteindre le plafond. C'est sur cette base qu'une nouvelle méthode de résolution est développée, liant les avantages de la CFD avec celui des modèles à zones. L'approche détaillée dans la suite peut être considérée comme une modélisation hybride entre CFD et modèle à zones. Pour ce faire, décomposons d'abord le flux

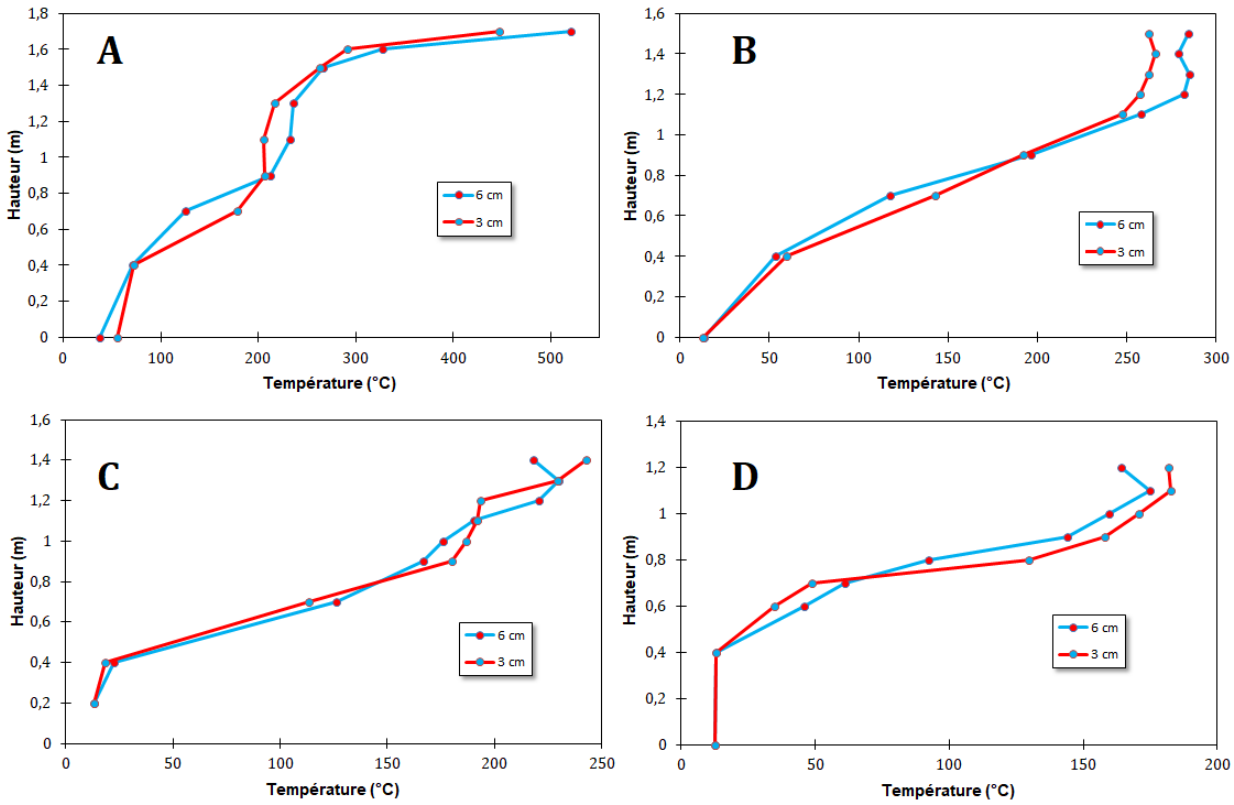

Figure 2.20 – Comparaison des profils de températures des arbres A, B, C et D pour des mailles de 3 cm et 6 cm.

vertical qui pourrait exister entre deux régions de la géométrie

$$\phi_{tot} = \phi_{rad} + \phi_{conv} + \phi_{cond} \sim 0 \tag{2.3.12}$$

Il est la somme des contributions radiatives, convectives et conductives. Le flux conductif est généralement négligeable en comparaison du phénomène de convection. Il peut être négligé dans l'étude des ordres de grandeur que nous menons. Le flux radiatif peut se décomposer en deux contributions, le flux émis et le flux reçu. Le flux émis dépend uniquement de la température. Au sein de la couche chaude, l'homogénéité de la température implique forcément une égalité des flux émis. Les flux reçus par deux points entourés de gaz à la même température peuvent aussi être supposés proches. Dans ce cas, le bilan radiatif entre deux régions verticalement distantes de quelques centimètres est quasiment nul. Finalement, l'absence de flux verticaux entre les deux zones implique forcément que le flux de convection doit être faible. En résumé, pour que la somme des flux soit quasiment nulle, il est nécessaire que chacun de ces flux soit négligeable.

Un flux convectif négligeable signifie que si une vitesse verticale existe, elle doit être nécessairement compensée. Or, il n'y a pas de source de tels mouvements de convection puisqu'aucun gradient de température n'existe au sein de la couche chaude par exemple. Aucune vitesse verticale ne peut donc exister au sein de la couche chaude ni entre les deux couches. Indirectement, c'est donc l'hypothèse sur laquelle se fonde les modèles à zones. Des vitesses verticales conséquentes ne peuvent exister que dans la région de la flamme.

Cette modification a été appliquée au code à travers l'annulation de la vitesse verticale. La résolution est d'abord laissée libre et celle-ci s'effectue par la méthode détaillée au paragraphe 1.8. Puis la vitesse verticale est annulée sauf dans deux cas. Le premier cas correspond à la zone au-dessus du foyer qui est définie ci-après. Le second cas correspond à des mouvements ascendants qui peuvent se produire lorsqu'un gaz chaud se situe en-dessous d'un gaz plus frais. Ce cas de figure apparaît lorsque les gaz

chauds traversent une zone dont le plafond est plus élevé que celui de la provenance des gaz. Les gaz chauds doivent être autorisés à s'élever pour envahir la zone proche du plafond. Lorsque la température de la cellule traitée est supérieure à celle de la cellule située au-dessus, la résolution n'est pas modifiée.

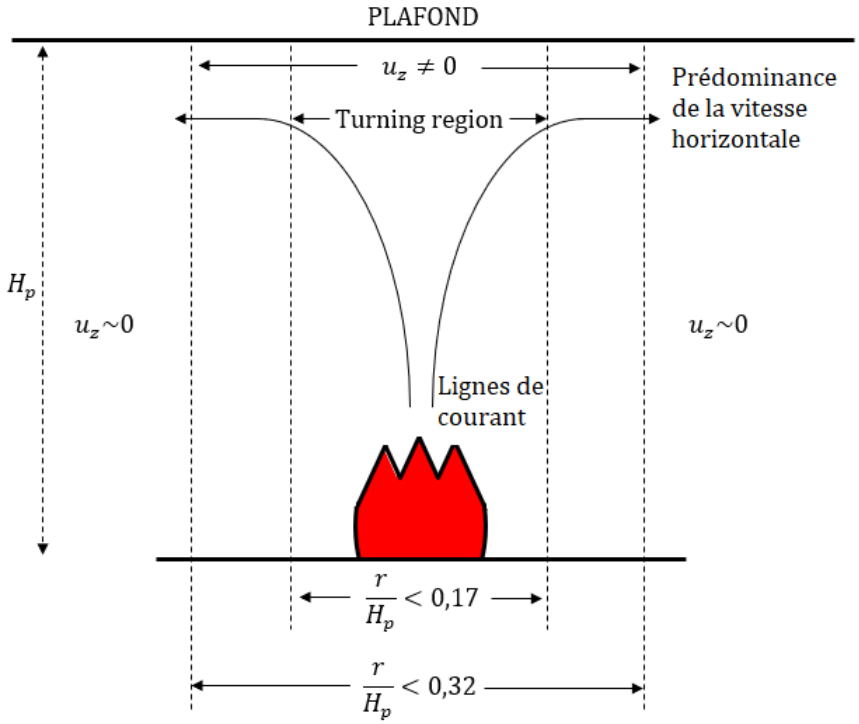

Figure 2.21 – Représentation schématique du passage du mouvement vertical au mouvement horizontal. L'hypothèse de vitesse exclusivement horizontale est seulement appliquée loin du feu.

La zone des flammes doit maintenant être définie. Elle doit contenir au minimum la *turning region* définie tacitement dans la relation (2.3.7) par l'intérieur du cylindre dont le rayon est égal à 0,17 fois la hauteur sous plafond ($r < 0,17\ H_p$). Des essais numériques ont révélé qu'un rayon supérieur à $0,32\ H_p$ dans le cas de la carrière ne modifiait plus la physique dans la *turning region*. Pour le cas de la carrière, ce rayon vaut 80 cm. Cette valeur est adoptée par la suite (Fig. 2.21).

Le cas test précédent est maintenant testé avec cette modélisation. La figure 2.22 compare celle-ci avec la résolution classique. La figure 2.23 présente le champ de température 100 secondes après le début de la simulation dans les deux sections médianes des deux galeries de la carrière.

Globalement, les profils de température montrent plus distinctement deux couches de températures différentes. Le passage de la couche chaude à la couche froide est beaucoup plus rapide avec l'hypothèse. Cet aspect est flagrant sur les arbres B, C et D. Il l'est moins pour l'arbre A car il est affecté en bas par la proximité des flammes (Fig. 2.23). Ainsi, la couche froide est plus épaisse et la température de ses gaz reste à des températures proches de l'air ambiant. L'homogénéité de la couche chaude est très visible sur l'arbre A. Notons que le point le plus élevé est à une température beaucoup plus faible que dans la résolution classique. Cette particularité provient de la description de la flamme qui est différente selon les cas (Fig. 2.23). Dans le cas classique, la couche froide est peu épaisse et l'arrivée d'oxygène est entravée. Ainsi, moins d'oxygène atteint le foyer et le combustible, gazeux dans la simulation, atteint une hauteur plus élevée avant de brûler. Il en découle une sorte de colonne de température très élevée, de l'ordre de 1100^oC. Au contraire, la simulation avec l'hypothèse laisse place à une couche froide suffisamment épaisse pour que le foyer recueille une grande quantité d'oxygène. Ainsi, les réactions chimiques s'opèrent autour du foyer et la température élevée est plus localisée. Des températures plus raisonnables au droit du foyer sont alors constatées ce qui valide l'approche.

L'arbre B présente une couche chaude plus épaisse et plus chaude ce qui permet d'approcher la

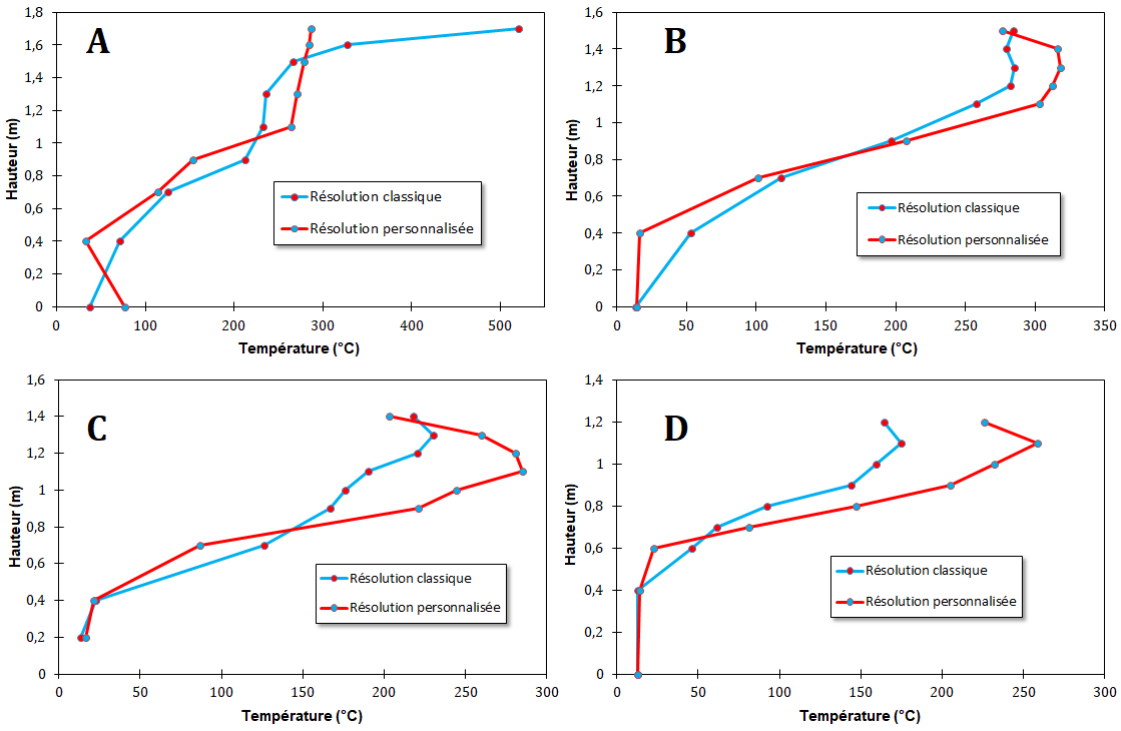

Figure 2.22 – Comparaison des profils de températures des arbres A, B, C et D entre une résolution classique sans l'hypothèse de vitesse exclusivement horizontale et une résolution personnalisée avec l'hypothèse.

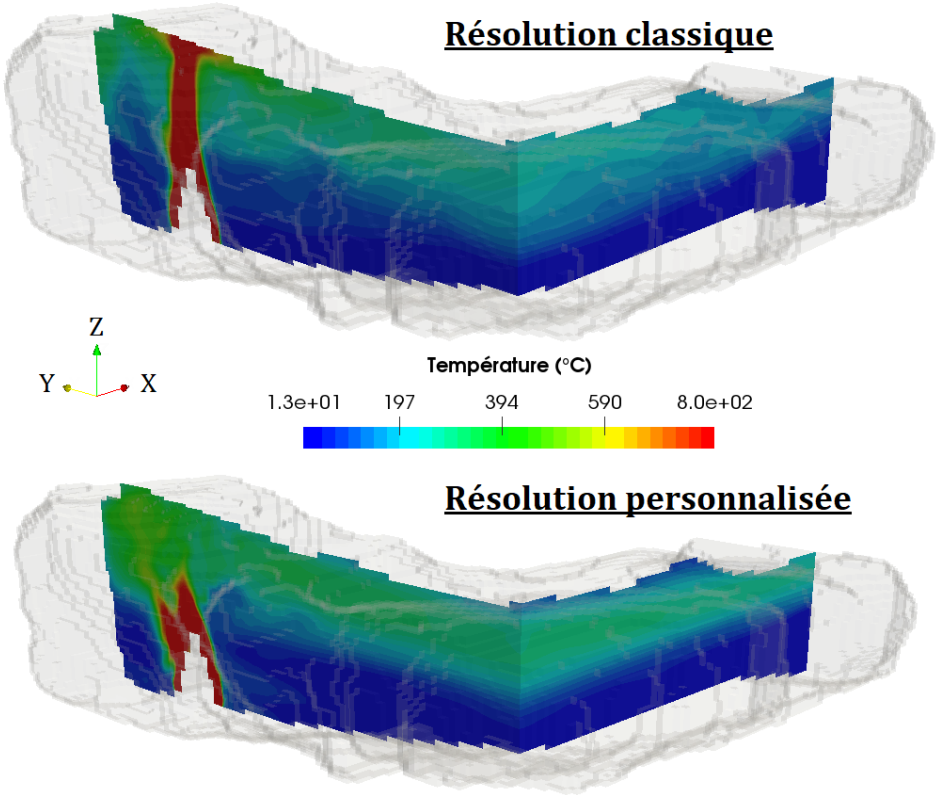

Figure 2.23 – Comparaison des champs de température dans les sections médianes des deux galeries de la carrière à la fin de la simulation (100 s).

réalité car le chapitre 3 montrera que la température est légèrement sous-estimée dans cette zone, malgré l'amélioration conférée par l'hypothèse affectant la vitesse horizontale. La faible température du point proche du plafond provient d'un ressaut constitué d'une seule maille qui est difficilement envahie par les gaz chauds, sans doute à cause de l'hypothèse. Enfin, les arbres C et D n'offrent pas de profil constant de la température dans la couche chaude. La figure 2.23 permet l'observation de cet aspect à travers le champ de température. Cette figure montre aussi la structure de l'écoulement et l'établissement de deux couches de températures distinctes lors de l'application de l'hypothèse. Même si le passage entre les deux couches se produit sur plusieurs dizaines de centimètres ce qui semble beaucoup, la méthode présentée dans ce paragraphe aboutit à des résultats beaucoup plus cohérents que ceux obtenus par la version initiale du logiciel. Nous conservons donc cette hypothèse dans la suite.

2.4 Couplage OpenFOAM-Cast3m

La construction d'un couplage entre les logiciels OpenFOAM et Cast3m est nécessaire afin d'être en capacité de prédire les impacts thermiques sur les parois résultant de combustions. Le couplage entre les deux logiciels est réalisé à l'aide de deux scripts Python téléchargeables (voir l'annexe E). Il s'agit d'un couplage faible dans lequel les températures simulées par OpenFOAM correspondent aux conditions limites du problème résolu par Cast3m. La résolution thermo-mécanique exigeant un maillage très fin proche de l'interface air-roche, la simulation est en deux dimensions. Le couplage doit ainsi permettre le passage $3D \rightarrow 2D$. L'utilisateur doit donc définir le plan de coupe en indiquant la normale au plan et un point contenu dans celui-ci. Puis le premier script Python exécute le processus de coupe dont le résultat est présenté sur la figure 2.24 pour l'exemple de la carrière.

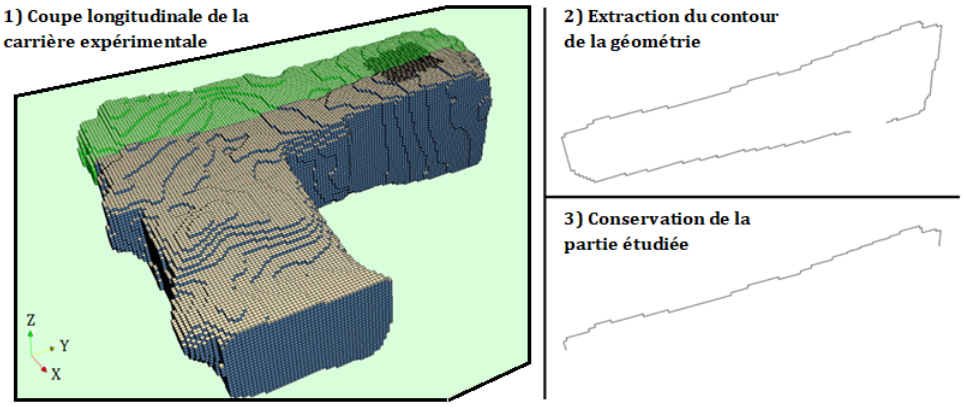

Figure 2.24 – Définition de l'intersection du plan de coupe avec la surface de la géométrie de la carrière. Seule la partie délimitée par l'utilisateur est conservée pour la suite.

Seulement les principales étapes de cette coupe sont proposées ci-après. Premièrement, les points d'intersection entre le plan de coupe et la surface de la géométrie 3D d'OpenFOAM sont récupérés. Ces points concordent avec l'intersection du plan et des arêtes de la géométrie (Fig. 2.25).

La détermination des faces intersectées est basée sur l'équation cartésienne du plan. En notant

$$\mathbf{n}_{\perp} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \tag{2.4.1}$$

le vecteur normal au plan de coupe, l'équation cartésienne de ce plan est donnée par la fonction

$$f(x, y, z) = ax + by + cz + d = 0 \tag{2.4.2}$$

où d est déterminé par les coordonnées du point contenu dans le plan fournis par l'utilisateur. En se basant sur l'exemple donné par la figure 2.26, la fonction f appliquée à chaque point A, B, C et D de la maille va fournir des résultats négatifs et positifs par définition. Ainsi, lorsque l'application de la

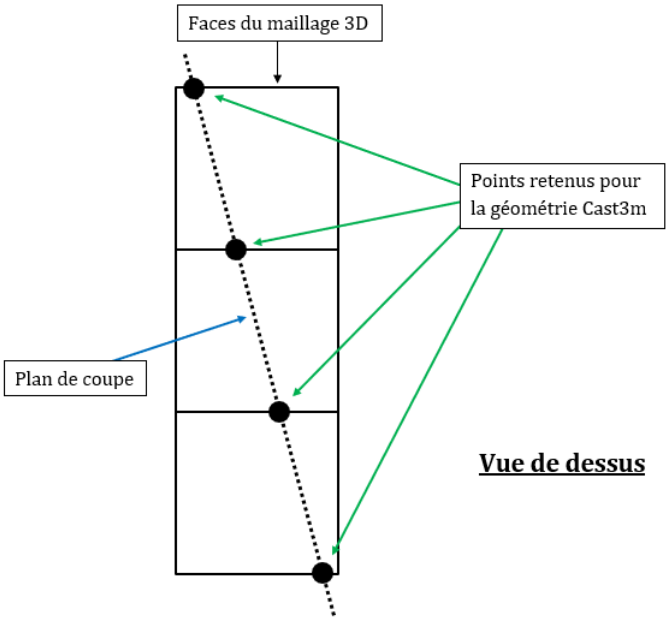

Figure 2.25 – Construction des points qui formeront le contour de la géométrie 2D utilisée par Cast3m.

fonction f fournit des résultats de signes opposés sur une même maille, alors le plan coupe cette maille en deux. Les points d'intersection sont ensuite ceux qui annulent la fonction f.

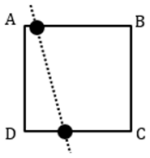

Figure 2.26 – Intersection entre le plan de coupe et une maille.

Notons qu'en plus des points définis par la coupe, quatre autres points sont créés aux quatre coins de la géométrie afin de fermer le contour. Ces points sont encadrés en rouge sur la figure 2.27 qui affiche l'ensemble des points issus de la coupe pour l'exemple de la carrière. Les deux points créés inférieurs possèdent respectivement les mêmes ordonnées que les deux points inférieurs extrémaux de la géométrie. Puis les deux points créés supérieurs possèdent les mêmes abscisses respectives des deux points inférieurs. La distance entre ces points et la géométrie est gérée par des paramètres modifiables.

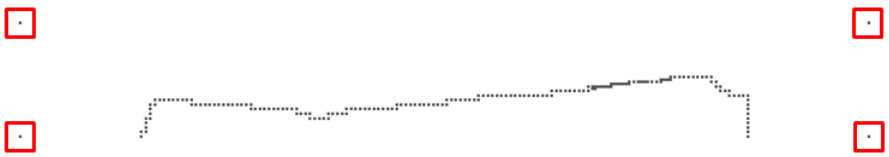

Figure 2.27 – Points résultant de l'intersection du plan de coupe avec la carrière. Les points encadrés en rouge sont des points ajoutés afin de fermer la géométrie.

Deuxièmement, les points constituant le pourtour de la géométrie doivent être reliés entre eux. La méthode qui apporte les meilleurs résultats est simplement basée sur la distance entre les points. Le point de départ cherche le point avec lequel la distance est minimale. Ces deux points sont ensuite reliés. Puis, le point précédemment élu cherche à son tour quel point est le plus proche de lui (hormis le point de départ) afin de se lier à lui. Ce processus est répété jusqu'à ce que tous les points soient

reliés avec deux autres points. La figure 2.28 expose le résultat sur l'exemple de la carrière.

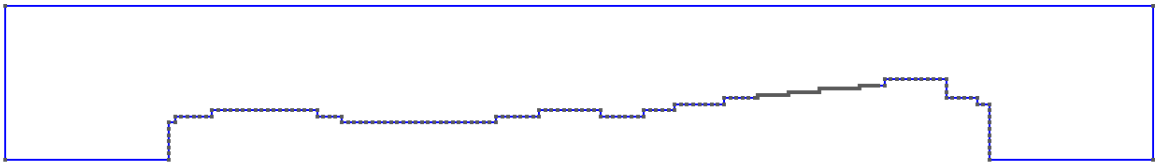

Figure 2.28 – Contour de la géométrie utilisée par Cast3m lors de l'étude thermo-mécanique.

Troisièmement, puisque le maillage réalisé par le mailleur d'OpenFOAM est cartésien, des angles droits apparaissent dans la géométrie. Sans traitement de ces angles droits, des singularités vont naître et la simulation fournira des contraintes mécaniques trop importantes. Une étape de lissage optionnelle est ajoutée au premier script Python pour contourner les problèmes de singularité. Le procédé est décrit sur la figure 2.29 :

— Le lissage est appliqué si l'angle est supérieur à 80^o.
— Deux points D et F sont respectivement créés au milieu des segments AB et BC.
— Un point E est ajouté de sorte que $\alpha = 154^o$ et $\beta = 218^o$ (voir Fig. 2.29).

Suite à ce lissage, le contour ressemble à celui présenté sur la figure 2.30.a. Les zones anguleuses ont été arrondies.

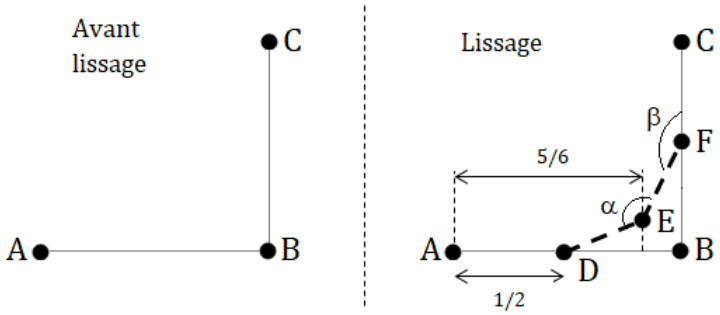

Figure 2.29 – Méthodologie décrivant le procédé de lissage des angles droits.

Quatrièmement, le maillage est effectué automatiquement par le logiciel GMSH [189]. Celui-ci est inclus dans le couplage et est appelé automatiquement par le code. L'utilisateur n'a donc pas besoin d'effectuer la procédure de maillage via l'interface de GMSH. Le raffinement est indiqué par des paramètres utilisateurs. La figure 2.30.b présente le maillage fourni par le logiciel GMSH. Ces quatre étapes sont produites par le premier script Python.

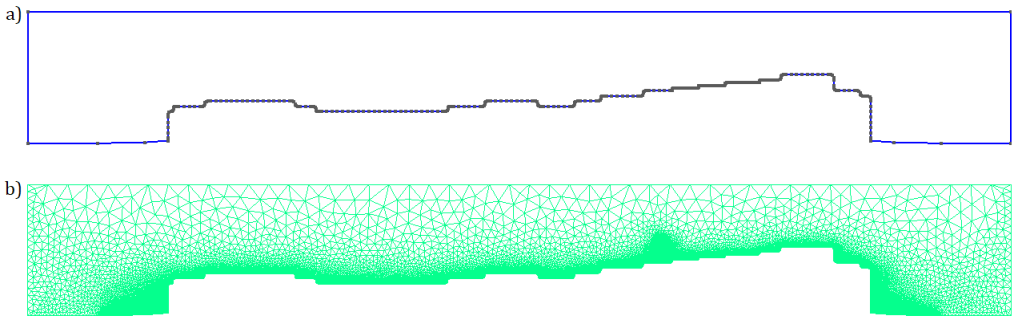

Figure 2.30 – a - Contour de la géométrie lissée utilisée par Cast3m lors de l'étude thermo-mécanique. b - Maillage réalisé grâce à GMSH.

Cinquièmement, il faut maintenant générer le fichier d'entrée de Cast3m au format dgibi. Cette partie est gérée par le second script Python. En plus d'écrire le fichier d'entrée de Cast3m avec le langage approprié (Gibiane), le code affecte les conditions limites en température fournies par les simulations OpenFOAM aux lignes (2D) limites de la géométrie Cast3m. L'association est déterminée par les barycentres des lignes 2D et des surfaces 3D. Pour chaque ligne limite de la géométrie 2D, la condition limite de la face 3D dont le barycentre est le plus proche du centre de la ligne susdite est affectée. Pour les droites provenant des points ajoutés pour fermer la géométrie, aucune condition n'est spécifiée. Ceci induit des conditions adiabatiques.

Chapitre 3

Reproduction expérimentale des thermo-altérations

Dans le cadre du programme CarMoThaP, le premier objectif dans lequel s'inscrit la thèse correspond à la reproduction expérimentale de thermo-altérations similaires à celles de la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Cette partie expérimentale est réalisée dans une ancienne carrière souterraine de calcaire rupélien située à Lugasson à proximité de Bordeaux (Gironde). Le second objectif consiste à valider l'outil numérique sur ces expérimentations afin de l'appliquer ensuite aux feux paléolithiques de la grotte Chauvet-Pont d'Arc.

Dans cette partie, les expérimentations sont tout d'abord décrites. Puis la sélection des paramètres numériques pour simuler ces essais est détaillée. Les résultats issus de la simulation sont ensuite comparés avec les mesures et les observations. Enfin, les dangers résultant des combustions dans la carrière de Lugasson sont estimés.

3.1 Description de l'expérimentation

Cette section décrit l'expérimentation menée dans la carrière de Lugasson. Le protocole expérimental est d'abord détaillé ainsi que les choix ayant conduit à celui-ci. Le plan d'instrumentation de la carrière est ensuite présenté. Enfin, quelques résultats expérimentaux sont proposés.

3.1.1 Protocole

La carrière se compose de deux galeries en forme de "L" (Fig. 3.1) qui mesurent entre 8 m 50 et 9 m de long. La première est directement connectée avec l'extérieur par une ouverture suffisamment large pour assurer la ventilation des feux présentés dans ce chapitre. La largeur des galeries est proche de celle de la Galerie des Mégacéros puisqu'elle est d'environ 2 m 40. La hauteur sous plafond varie selon l'emplacement. Afin de s'approcher des feux qui ont pu se dérouler dans la Galerie des Mégacéros, le combustible est centré vers le fond de la galerie 2. La hauteur sous plafond est d'environ 2 m 50 à cet emplacement et le confinement est plus important que dans la première galerie. Le foyer est positionné à environ 80 cm du mur du fond.

Afin de tester la reproductibilité d'un feu confiné, trois essais similaires ont été effectués. Cet aspect est important puisqu'il conditionne la possibilité d'estimer la quantité de bois nécessaire. En effet, si deux feux réalisés suivant le même protocole n'apportent pas les mêmes conclusions, alors il est impossible de retrouver les conditions initiales menant à ces résultats. Cette possibilité peut se produire puisque la physique de la combustion est chaotique : des conditions initiales proches mais différentes peuvent conduire à des conséquences très éloignées. De plus, la succession de trois feux permet d'observer l'effet de cumul des thermo-altérations (changement de coloration, écaillage). Les trois essais sont répétés quotidiennement sur trois jours. Les braises sont retirées de la carrière afin d'accélérer la remise à température ambiante durant la nuit et de limiter la toxicité dans l'air de la carrière.

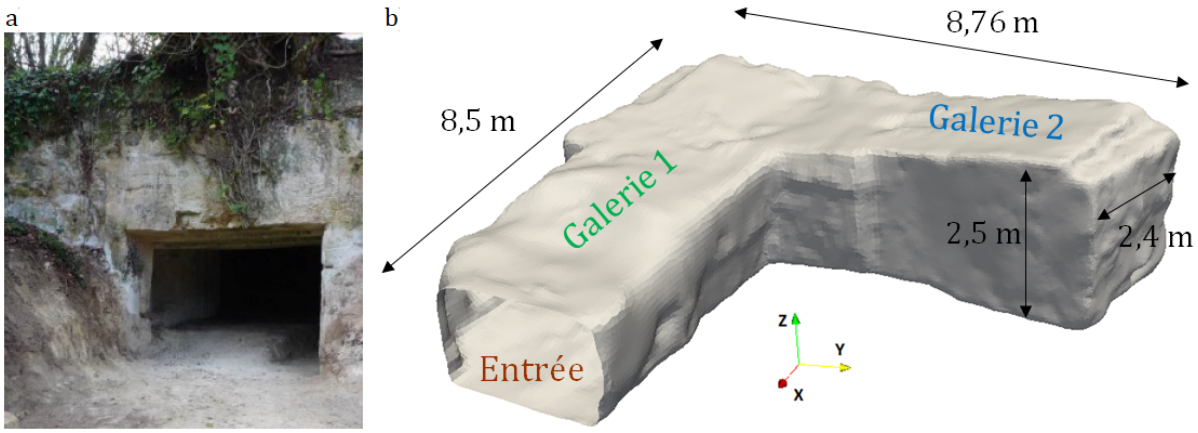

Figure 3.1 – a) Entrée de l'ancienne carrière. b) Géométrie 3D de la carrière réalisée par photogrammétrie avec une résolution de 10 cm (P. Mora, Archéotransfert).

Puisque le pin sylvestre est l'essence de bois dont sont issus les charbons analysés dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc [31], nous avons choisi ce combustible. La récolte de bois a montré que les branches de cette essence sont cassantes. Les Aurignaciens pouvaient, hormis le ramassage au sol, collecter directement les branches sèches situées à hauteur d'homme sur l'arbre (Fig. 3.2). En effet, la rupture de la branche par traction à mains nues se produit assez facilement à un diamètre qui n'excède pas 4 cm environ. Le conditionnement pour un transport efficace du bois nécessite de raccourcir les branches. Cette opération est réalisée en pliant à deux mains le bois sur le genou. La rupture de la branche se produit assez facilement à 80 cm de longueur environ (Fig. 3.2). Nous avons donc choisi de calibrer les branches à cette longueur pour constituer des brassées de bois d'environ 4,5 kg qui ont été liées pour obtenir un fagot facilement transportable. Chaque fagot nécessite environ cinq branches complètes pour atteindre cette masse. Un arbre pourvoit entre 2 et 3 fagots ce qui correspond à une masse souvent supérieure à 10 kg. Les diamètres des branches sont variables et représentent statistiquement la population globale de pin sylvestre (Tab. 3.1). La constitution de fagots pour un Aurignacien était donc facile et rapide. À titre d'exemple, la collecte de 5 kg de bois sur 7 branches est effectuée en 6 minutes. Le taux d'humidité du combustible avant la mise en place des fagots dans le feu est en

Diamètre	$<$ 1 cm	1 à 2 cm	2 à 3 cm	3 à 4 cm
Nombre de branches	20	12	8	1

Tableau 3.1 – Répartition des diamètres des branches dans chaque fagot.

moyenne de 22%. Ce taux est proche de celui du bois utilisé lors de la mesure du pouvoir calorifique du pin sylvestre [54] (voir 1.2.1.2). L'utilisation d'un PCI égal à 12,5 MJ.kg^{-1} est donc justifiée pour ces expérimentations.

Lors de chaque feu, 30 fagots de bois sont brûlés. La masse de bois totale brûlée dans chaque expérimentation est donc environ égale à 135 kg. À l'instant initial, quatre fagots sont placés en tipi sur le site du foyer (Fig. 3.3). Cette disposition favorise la hauteur des flammes qui atteignent le plafond sans nécessiter une trop grande quantité de combustible [54]. *A contrario*, une disposition à plat empêcherait les flammes de prendre de l'ampleur. Puisque l'objectif de l'expérimentation est de reproduire des thermo-altérations et donc d'altérer le plafond, cet arrangement est choisi. De plus, cette configuration est compatible avec les résultats obtenus par la simulation dans le volume de la grotte Chauvet-Pont d'Arc (voir §4.3.1). Afin de garantir un bon étalonnage du début de la combustion, l'allumage du foyer est réalisé avec un chalumeau.

Après l'allumage, des pompiers équipés d'appareils respiratoires isolants (ARI) alimentent le foyer par paire de fagots. Les temps d'alimentation sont définis lors du premier feu. Afin de garder la flamme

Figure 3.2 – À gauche : comparaison entre la taille d'un pin sylvestre (ayant poussé sous des conditions différentes de celles régnant au Paléolithique supérieur) et celle d'un homme (C. Ferrier). En haut à droite : les branches peuvent être brisées manuellement et se cassent à une longueur d'environ 80 cm (C. Ferrier). En bas à droite : fagots issus de la récolte et du calibrage (C. Ferrier).

Figure 3.3 – Structure du foyer juste avant l'allumage composé de quatre fagots positionnés en tipi (environ 18 kg).

la plus puissante possible, les pompiers apportent deux fagots supplémentaires dès que la hauteur de flamme commence à décroître. Ce procédé permet d'éviter autant que possible la perte de puissance. Les temps d'alimentation, fournis dans le tableau 3.2, sont ensuite conservés pour les deux feux suivants. Le tableau 3.2 donne également les masses ajoutées à chaque alimentation pour le feu 2. La simulation porte en effet sur ce feu pour des raisons qui seront explicitées au paragraphe 3.1.3. Les données des deux autres sont détaillées en annexe F.1.

Durée depuis l'allumage (min)	0	6 : 28	10 : 21	14 : 40	17 : 36	22 : 52	25 : 25
Masse (kg)	17,14	9,53	8,51	9,02	8,7	8,42	9,63
Durée depuis l'allumage (min)	28 : 00	31 : 10	34 : 06	37 : 26	39 : 27	41 : 29	42 : 55
Masse (kg)	9,38	9,6	9,27	8,86	8,88	8,65	8,37

Tableau 3.2 – Temps d'alimentation et masses correspondantes des fagots pour le deuxième feu.

La température initiale de la carrière lors du deuxième feu est d'environ 14^oC. L'humidité relative moyenne au sein de la carrière est d'environ 92%.

3.1.2 Instrumentation

Dans le but de comparer les données expérimentales avec la modélisation numérique, la carrière est instrumentée avec des capteurs. Ainsi, des températures, des concentrations de gaz et de particules, des vitesses et des dépôts de suie sont mesurés pendant les trois essais. La position des capteurs est indiquée sur la figure 3.4. Les thermocouples sont placés sur des arbres verticaux afin de mesurer des gradients verticaux. Chaque arbre, portant plusieurs thermocouples verticalement espacés, est repéré par la notation Tx sur la figure. Le positionnement des arbres et des thermocouples permet de cartographier l'ensemble du champ de température dans la carrière. La disposition verticale des thermocouples est progressivement signifiée lors de la comparaison entre l'expérimentation et la simulation (§3.3). Les résultats de 25 thermocouples chemisés de type K et de diamètre 0,5 mm répartis sur sept arbres sont présentés dans ce mémoire. Notons que le chemisage doit empêcher l'échauffement du thermocouple par rayonnement. L'émissivité de l'équation (2.1.16) doit donc être choisie proche de 0 même si un rayonnement résiduel pourrait exister entre la sonde et le chemisage. Des capteurs de concentration de gaz (Servomex) sont positionnés aux points G1 et G2 (Fig. 3.4). Les capteurs sont situés 23 cm en dessous du plafond en G1 et 36 cm en dessous du plafond en G2. Les concentrations de dioxygène, de monoxyde de carbone et de dioxyde de carbone sont ainsi évaluées durant toute la combustion. La concentration en particules est mesurée aux points S1 et S2 par des capteurs PPS (Pegasor Particle Sensor). Ces capteurs ont été calibrés sur des particules de suie issues d'un feu de bois. Ainsi, le calibrage initial [190] est adapté à l'expérimentation [191]. Les capteurs PPS sont respectivement situés à 18 cm et 16 cm en dessous du plafond en S1 et S2. Les particules de suie sont récupérées sur des plaques carrées (7×7 cm^2) en S1 et S2. Aux deux points, trois plaques sont respectivement disposées en moyenne à 11 cm et à 13 cm du plafond. Cette disposition permet d'estimer le dépôt de suie moyen à ces emplacements. Deux capteurs de vitesse sont positionnés sur l'arbre T7. Une sonde de vitesse bi-directionnelle (McCaffrey) est placée à 23 cm du plafond. Un anémomètre bidirectionnel à ultrasons est placé à 68 cm du sol. Une caméra est placée dans le coin de la carrière afin d'observer le déroulement de l'expérience en direct. Enfin, une balance est positionnée sous le foyer afin de mesurer le taux de perte de masse. En supposant que le pouvoir calorifique reste constant (§1.2.1.2), le HRR est fourni par la multiplication du débit massique par le PCI.

3.1.3 Résultats expérimentaux

Ce paragraphe décrit uniquement une partie des résultats expérimentaux car la comparaison numérique qui est effectuée §3.3 inclut toutes les mesures du deuxième feu. L'analyse concernera un feu parmi les trois. En effet, les conditions initiales ne sont pas exactement les mêmes pour les trois feux mais l'écart principal provient des masses d'alimentation et donc du débit massique qui diffère légèrement selon le feu. Les conditions et les résultats variant très peu entre les trois feux (voir dans la suite de cette partie), les résultats numériques d'un seul d'entre eux, le feu 2, sont présentés.

Ce choix repose sur des problèmes techniques inhérents aux expérimentations. L'allumage du troisième feu a connu un retard et le foyer a eu beaucoup de mal à s'embraser. Un recalage des temps d'alimentation a été effectué *a posteriori* afin de comparer les trois feux convenablement. De plus, aucune donnée de l'arbre T7 n'a pu être enregistrée. Lors du premier feu, deux défaillances se sont produites pour le capteur de vitesse proche du plafond et le capteur de concentration de gaz en G1.

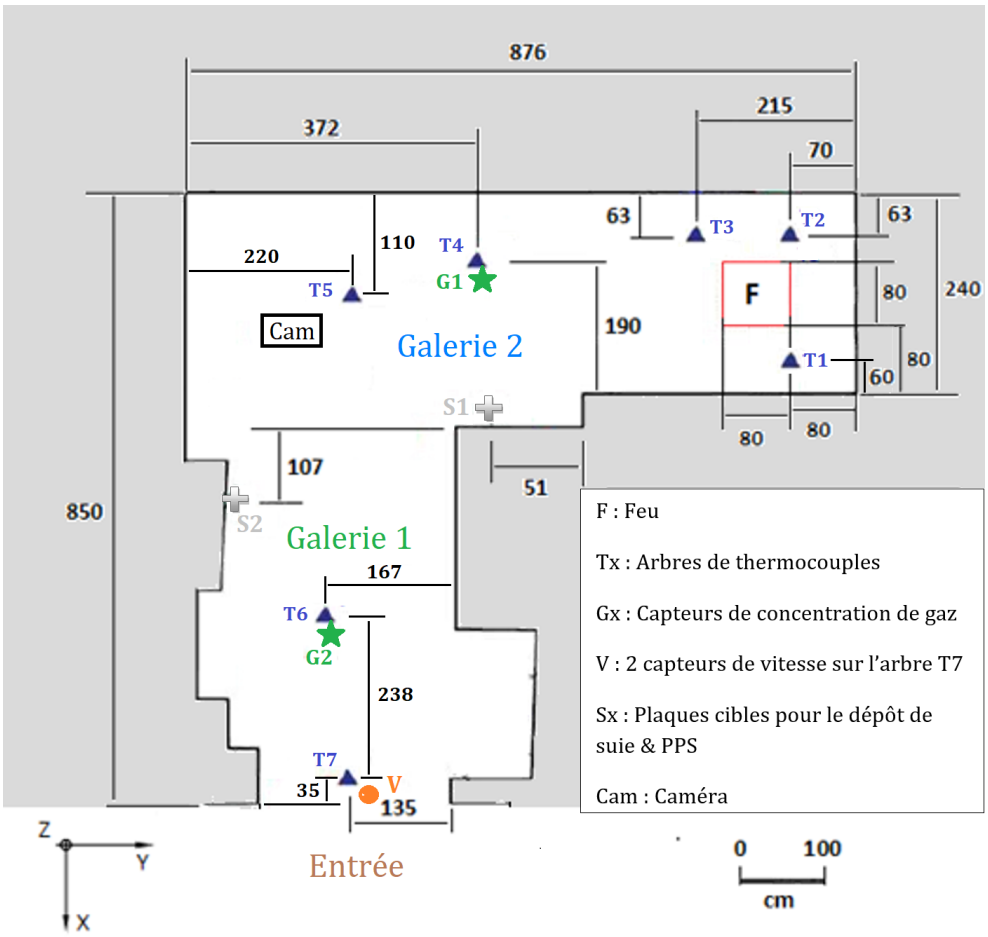

Figure 3.4 – Plan de la carrière indiquant l'emplacement du foyer, des arbres de thermocouples, des capteurs de concentration, des cibles pour les suies, des PPS, des capteurs de vitesse et de la caméra.

Pour le deuxième feu, seuls les thermocouples de l'arbre T2 ont subi un dysfonctionnement. Puisque les résultats des trois feux sont par ailleurs similaires, les températures numériques du feu 2 seront exceptionnellement comparées avec les mesures du feu 1 pour l'arbre T2.

La figure 3.5 montre des captures d'image des vidéos réalisées durant le deuxième feu. Elle présente le développement du feu sur les premières minutes et la sortie des fumées de la carrière. Notons que les fumées opaques au début de la combustion cessent rapidement d'être visibles.

Comme évoqué ci-dessus, les mesures sur les trois feux démontrent la reproductibilité d'un feu confiné dans la carrière. La comparaison des trois feux est détaillée dans l'annexe F.2. Les mesures de température sur l'arbre T1 ainsi que les mesures de concentration de gaz en C2 sont présentées à titre d'exemples (Fig. 3.6 & 3.7).

Globalement, les mesures sur les trois feux sont assez proches. Les tendances sont similaires et les allures des courbes sont analogues. Les cycles d'alimentation étant les mêmes, les pics se produisent aux mêmes instants pour les trois feux. Des écarts intrinsèques à la complexité d'une telle combustion demeurent toutefois. Les mesures relatives au thermocouple T1_1 présentent des écarts d'environ 15% entre les feux. Le thermocouple T1_2 mesure des différences comprises entre 10 et 20% selon les feux. L'oxygène présente des écarts de l'ordre de 3% tandis que la concentration des autres gaz diffère de plus de 30%. Outre les écarts réels entre l'évolution des puissances des trois feux, les différences peuvent aussi provenir des incertitudes de mesure. La position des capteurs et tout particulièrement celle des thermocouples a pu varier légèrement entre les feux. L'orientation des thermocouples, modifiable sous l'effet de fortes vitesses de gaz, a pu changer d'un feu à l'autre voire lors d'un même feu. Concernant les concentrations de gaz, les capteurs Servomex ne souffrent pas d'une grande incertitude ($<$1%). La

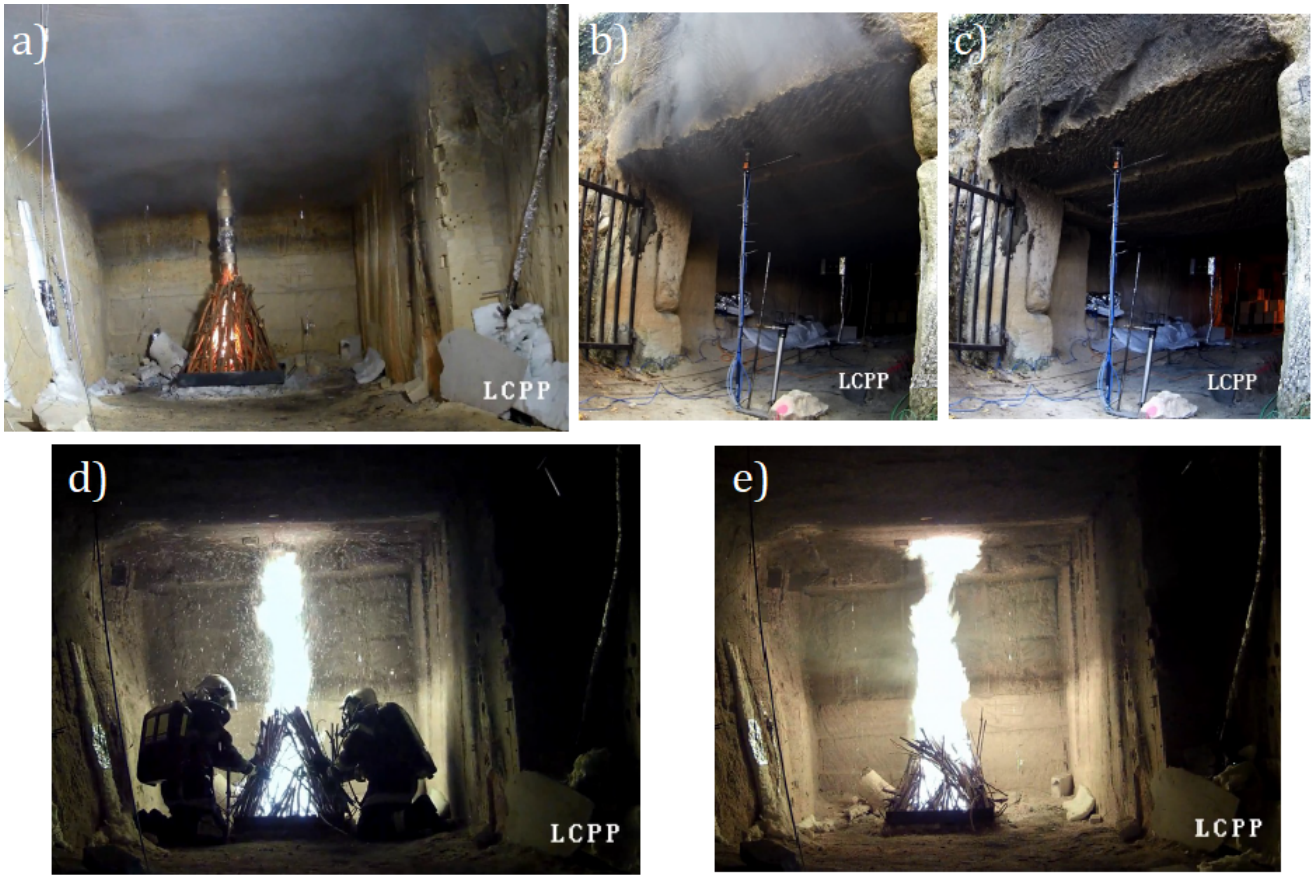

Figure 3.5 – a) Foyer composé des 4 fagots initiaux 70 s après l'allumage. b) Évacuation des fumées par l'entrée de la carrière 152 s après l'allumage. c) Absence de fumées blanches 500 s après l'allumage. d) Alimentation du foyer par les pompiers 6 min 25 s après l'allumage. e) Combustion 7 min 34 après l'allumage.

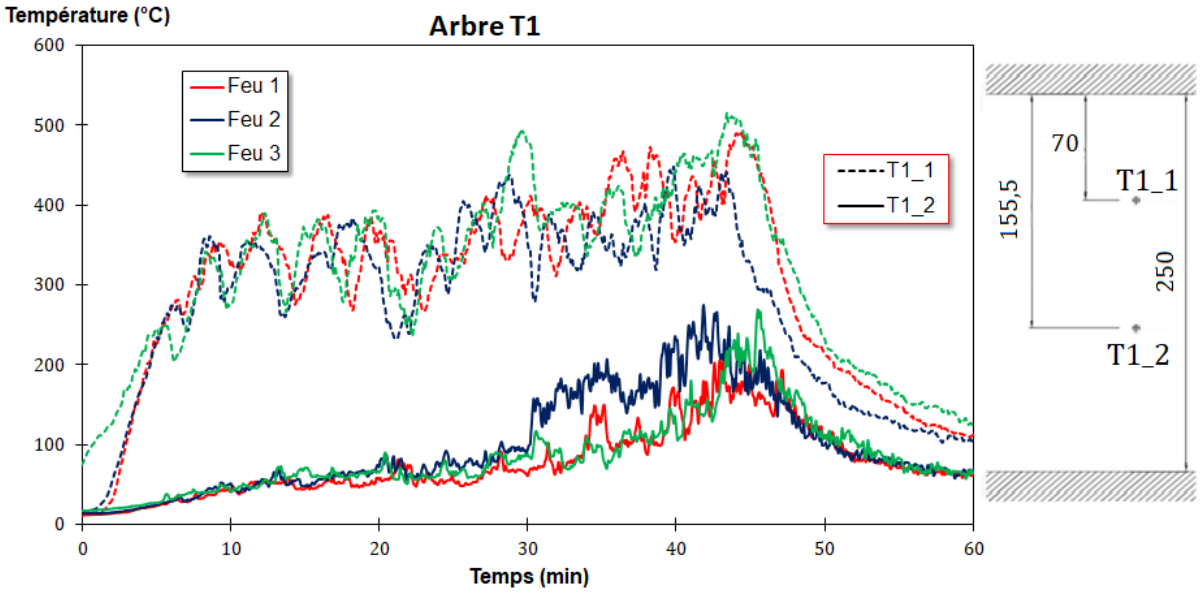

Figure 3.6 – Comparaison des mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T1 pour les trois feux. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

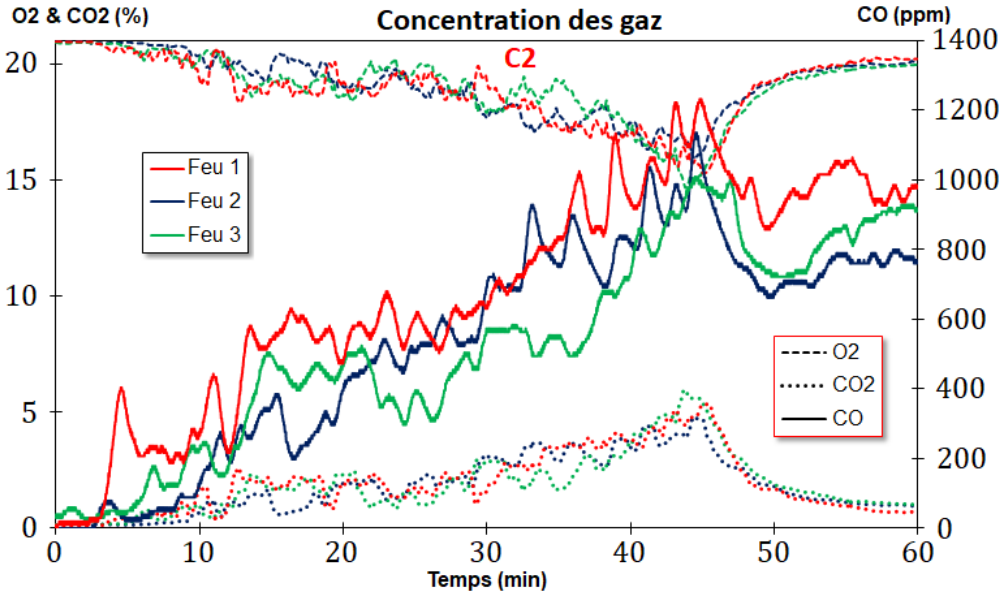

Figure 3.7 – Comparaison des mesures des concentrations de gaz effectuées en C2 pour les trois feux.

quantité d'eau moyenne contenue dans les branchages a aussi pu être différente. Des incertitudes liées au caractère chaotique de la physique mènent aussi nécessairement à certaines différences. Compte-tenu de toutes les sources d'écart, nous pouvons admettre que les mesures expérimentales sont voisines de sorte qu'elles montrent la reproductibilité d'un tel feu.

Les trois feux ont conduit à la reproduction de thermo-altérations similaires à celles observées dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Ainsi, des surfaces rubéfiées, grises et écaillées sont visibles dans la carrière de Lugasson (Fig. 3.8). Les parois rubéfiées sont partiellement recouvertes de particules de suie tandis que la zone grise est visible. Cette observation est possible car les suies à l'aplomb du foyer furent brûlées par les températures élevées de la flamme.

Les chauffes provoquées par les feux ont entraîné des écaillages. La figure 3.9 correspond à la photo d'une cicatrice d'écaillage proche de l'aplomb du foyer. Comme détaillé dans la partie 1.6.2, les écailles sont très fines, de l'ordre du millimètre. Certains écaillages ont eu lieu pendant le régime de combustion puisqu'ils sont visibles sur les vidéos filmées par la caméra située dans la carrière. Le phénomène s'est parfois produit après les feux, des jours voire des mois après la fin de la combustion. Dans ce cas, les fortes contraintes induites par la chauffe ont probablement initié ou accentué localement des fissures trop modestes pour déclencher l'écaillage pendant le feu. La réhydratation du calcaire thermiquement altéré, entraînant un gonflement du matériau, peut alors être à l'origine de la chute différée d'une écaille. Cette observation est classique après une chauffe sur des bétons à base de granulats calcaires. Pour les deux scénarios d'écaillage, durant la phase de combustion ou différé dans le temps, le phénomène reste tout de même directement imputable à la présence d'un feu puissant dans la carrière.

3.2 Choix des paramètres numériques

Cette section traite principalement de la convergence d'OpenFOAM sur une simulation représentative de celles menées dans ce mémoire. Le cas test considéré est celui étudié au paragraphe 2.3.2. L'influence de plusieurs paramètres est évaluée. La convergence en maillage de Cast3m est aussi analysée.

3.2.1 Convergence en maillage

La convergence en maillage est proposée pour les logiciels OpenFOAM et Cast3m.

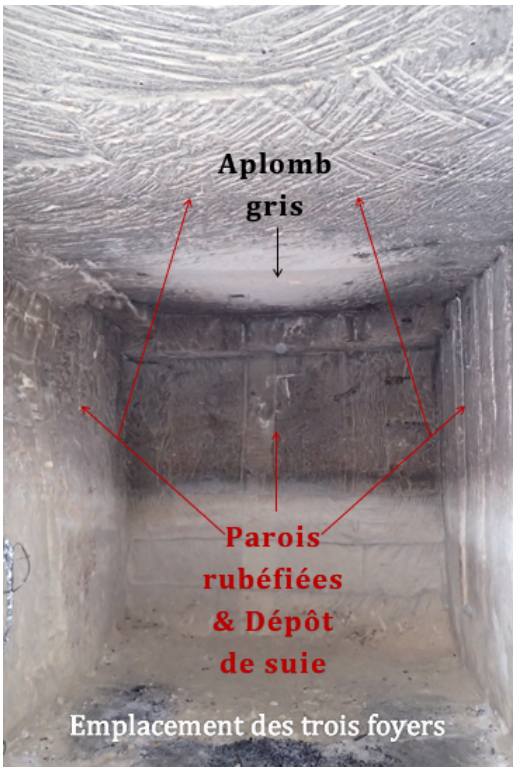

Figure 3.8 – Parois et plafond de la carrière après les trois feux successifs.

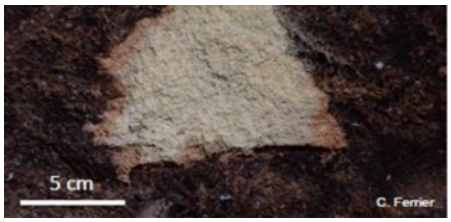

Figure 3.9 – Fine cicatrice d'écaillage survenu au plafond de la carrière.

3.2.1.1 OpenFOAM

Le domaine peut être divisé en deux parties : dans les flammes et hors des flammes. En premier lieu, étudions la convergence du maillage hors des flammes en utilisant des mailles de 3 cm dans le domaine de la flamme qui correspond à un pavé à base carrée de 1 m 30 de côté centré sur le foyer. Quatre maillages constitués de cellules de différentes tailles sont considérés : 3 cm, 6 cm, 12 cm et 24 cm. La figure 3.10 compare les températures aux points (Fig. 3.4) T2_3 (120 cm sous le plafond en T2), T4_1 (23 cm sous le plafond en T4) et T5_2 (72 cm sous le plafond en T5) ainsi que la vitesse au point T7_1 (2 cm sous plafond en T7).

Le graphe relatif à la vitesse montre clairement la différence entre des maillages composés de cellules de tailles inférieures et supérieures à 6 cm. Le maillage permettant un bon compromis entre temps de calcul et précision est donc celui constitué de mailles de 6 cm. À titre indicatif, la simulation correspondant aux mailles de 6 cm (environ 4.10^5 mailles) a duré environ 22 h sur 32 processeurs tandis que celles avec des mailles de 3 cm (environ 2.10^6 mailles) a duré environ 42 h.

En optant maintenant pour un maillage composé de cellules de 6 cm hors de la flamme, il convient d'examiner l'influence du maillage de la zone au-dessus du foyer. La figure 3.11 compare la température à l'aplomb du foyer à 74 cm du plafond.

Le maillage de la zone de la flamme modifie grandement la température de cette zone. Cependant,

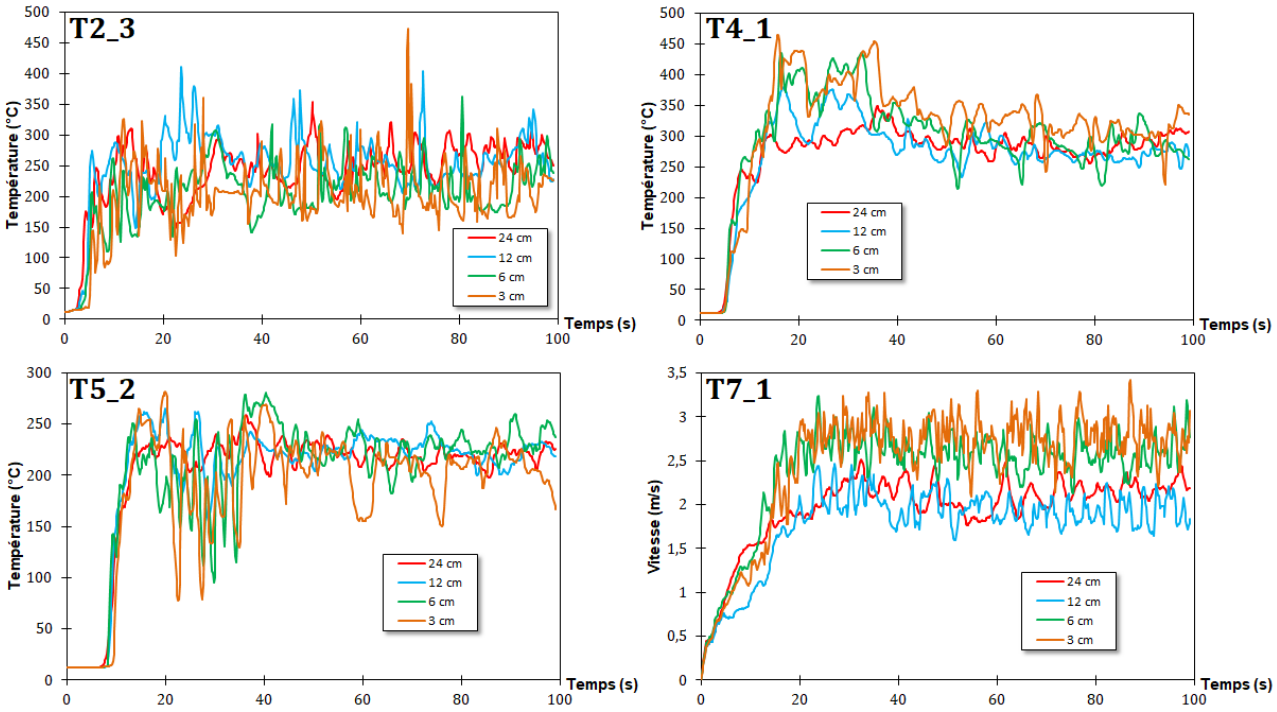

Figure 3.10 – Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 4 maillages (3 cm, 6 cm, 12 cm et 24 cm).

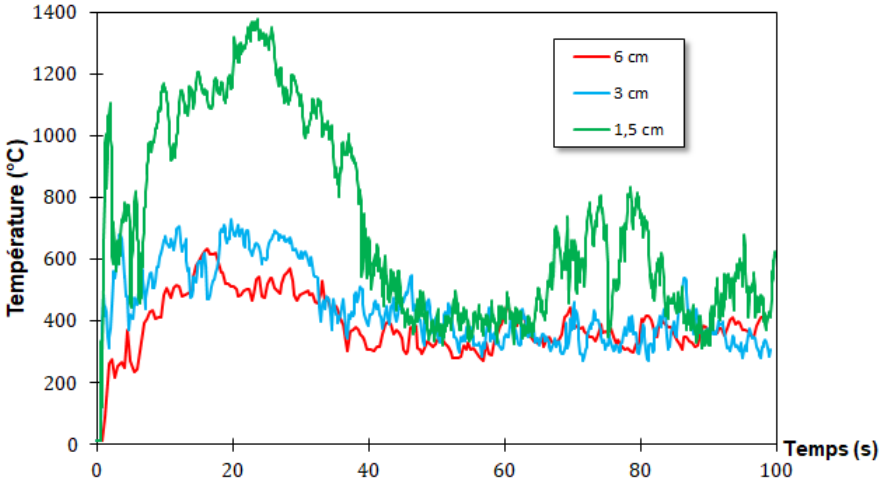

Figure 3.11 – Comparaison des températures dans la flamme pour 3 maillages (1,5 cm, 3 cm et 6 cm).

cette analyse est faussée par l'utilisation de la puissance dégagée par rayonnement E_ϕ dans l'équation de rayonnement (1.4.29). Ce paramètre est employé afin de rendre compte du rayonnement de la flamme qui est sous-estimé à cause de la grossièreté du maillage. Mais en raffinant le maillage, la température n'est plus moyennée sur des mailles "grossières" et la température calculée sur des mailles plus petites est plus élevée. Puisque le rayonnement de la flamme est la somme de la contribution de la température (proportionnelle à T^4) et de la puissance E_ϕ, le rayonnement augmente nécessairement avec le raffinement. La puissance empirique E_ϕ perd donc tout son sens lorsque le maillage est suffisamment fin car elle surestime le rayonnement. Il est donc difficile d'étudier la convergence en maillage dans la zone de combustion à cause du paramètre empirique E_ϕ. Des mailles de 3 cm seront utilisées puisqu'il s'agit d'un bon compromis. D'une part, des mailles de tailles inférieures augmentent fortement le temps de calcul pour une amélioration du résultat qui n'est pas garantie. D'autre part,

des mailles plus grosses, 6 cm par exemple, empêchent des résultats précis, notamment concernant les thermo-altérations au plafond qui peuvent être de l'ordre de quelques dizaines de centimètres carrés dans la Galerie des Mégacéros.

3.2.1.2 Cast3m

La convergence en maillage est effectuée sur un cas 2D (rectangle de 80 cm × 40 cm) dont la température d'un des côtés est imposée à 300^oC à partir de 100 secondes. La croissance se fait linéairement sur les cents premières secondes de 12^oC à 300^oC. Les trois autres côtés sont supposés adiabatiques. Ceux-ci sont mécaniquement bloqués tandis que le côté thermiquement affecté est laissé libre. La construction du maillage est basée sur une raison géométrique et la taille de la première maille. La raison choisie est 1,05. Cela signifie que la taille des mailles de la n-ième ligne ont une hauteur de $\Delta x_{first} \times 1,05^{n-1}$ (Fig. 3.12). L'interpolation au sein des éléments est linéaire.

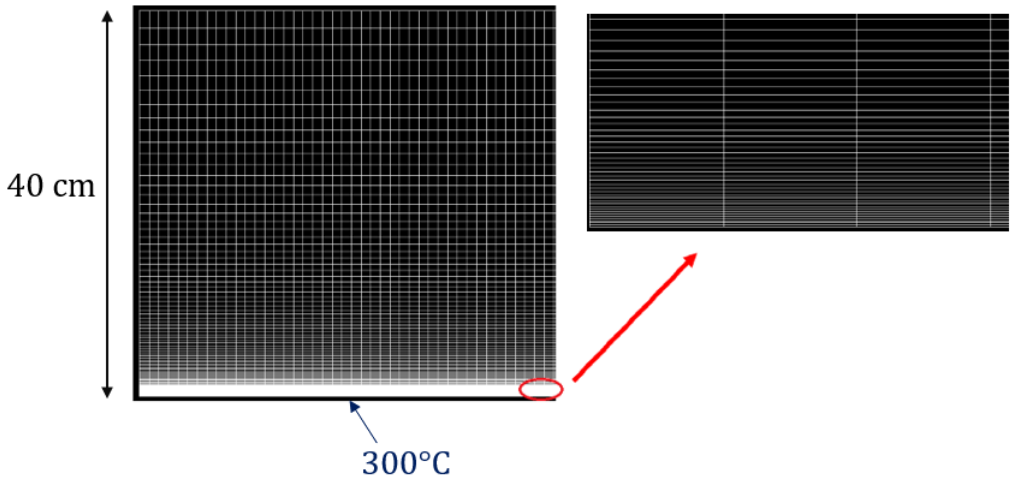

Figure 3.12 – Maillage utilisée pour l'étude de convergence en maillage.

Les propriétés thermiques et mécaniques sont celles du calcaire rupélien détaillées au paragraphe 3.3.2 dans les tableaux 1.3 et 1.4. La chauffe est simulée pendant 500 secondes. La figure 3.13 présente la comparaison des températures et des contraintes en compression à différentes profondeurs. Les points étudiés se situent respectivement à 1 mm, 5 mm, 1 cm et 3 cm de la surface chauffée.

Les températures montrent une convergence rapide à partir d'une première maille d'un millimètre. Un maillage plus fin modifie légèrement la diffusion thermique sans altérer les tendances. La conclusion est similaire pour les contraintes. Les erreurs commises sont négligeables par rapport aux imprécisions inhérentes à la modélisation. Hormis une première maille de 5 mm qui induit un maillage trop grossier, des mailles de l'ordre du millimètre sont suffisantes. Des tests similaires réalisés avec des éléments de degré 2 montrent des écarts inférieurs à 5% avec les simulations effectuées avec les interpolations linéaires lorsque les mailles sont inférieures à 0,5 mm. L'étude thermo-mécanique s'appuiera donc sur des éléments d'ordre un dont la taille est comprise entre 0,1 à 0,5 mm proche des limites.

Le paragraphe suivant traite uniquement de la dépendance en temps des simulations effectuées avec OpenFOAM puisque le pas de temps (jusqu'à une dizaine de secondes) influence peu les résultats issus de Cast3m. Néanmoins, pour assurer la stabilité des schémas numériques et éviter la divergence des calculs, un pas de temps d'une seconde est utilisé dans les simulations thermo-mécaniques.

3.2.2 Convergence en temps

La convergence en temps est étudiée au travers de la condition CFL (Courant-Friedrich-Lewy) qui porte sur le nombre de Courant (la définition (3.2.1) est valable en une dimension)

$$Co = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \tag{3.2.1}$$

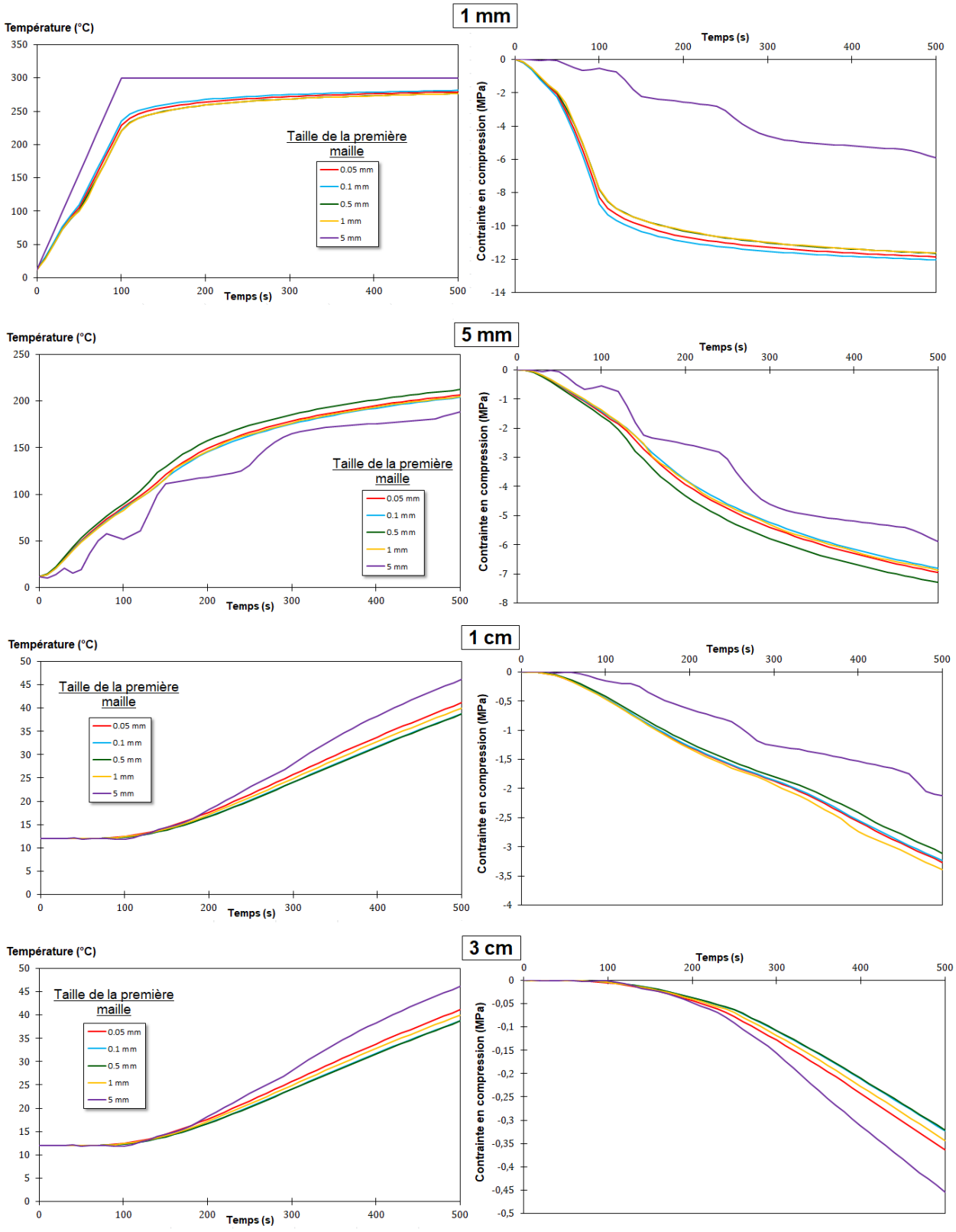

Figure 3.13 – Comparaison des températures et des contraintes en compression à différentes profondeurs pour plusieurs discrétisations. La première colonne correspond aux températures et la seconde aux contraintes. Chaque ligne est associée à une profondeur : 1 mm pour la première, 5 mm pour la deuxième, 1 cm pour la troisième et 3 cm pour la dernière.

Lorsque le pas d'espace Δx est fixé ainsi que le nombre de Courant Co, le pas de temps est déduit de la relation (3.2.1) en choisissant comme vitesse u la vitesse maximale calculée au pas précédent. Ce

nombre permet d'assurer la convergence de schémas explicites lorsqu'il est inférieur à un. Néanmoins, la stabilité des schémas n'induit pas nécessairement une grande précision et un nombre inférieur à un est souvent requis. Ce paramètre est testé sur le maillage précédemment choisi avec quatre valeurs différentes : 0,4, 0,6, 0,8 et 1. La figure 3.14 présente cette comparaison.

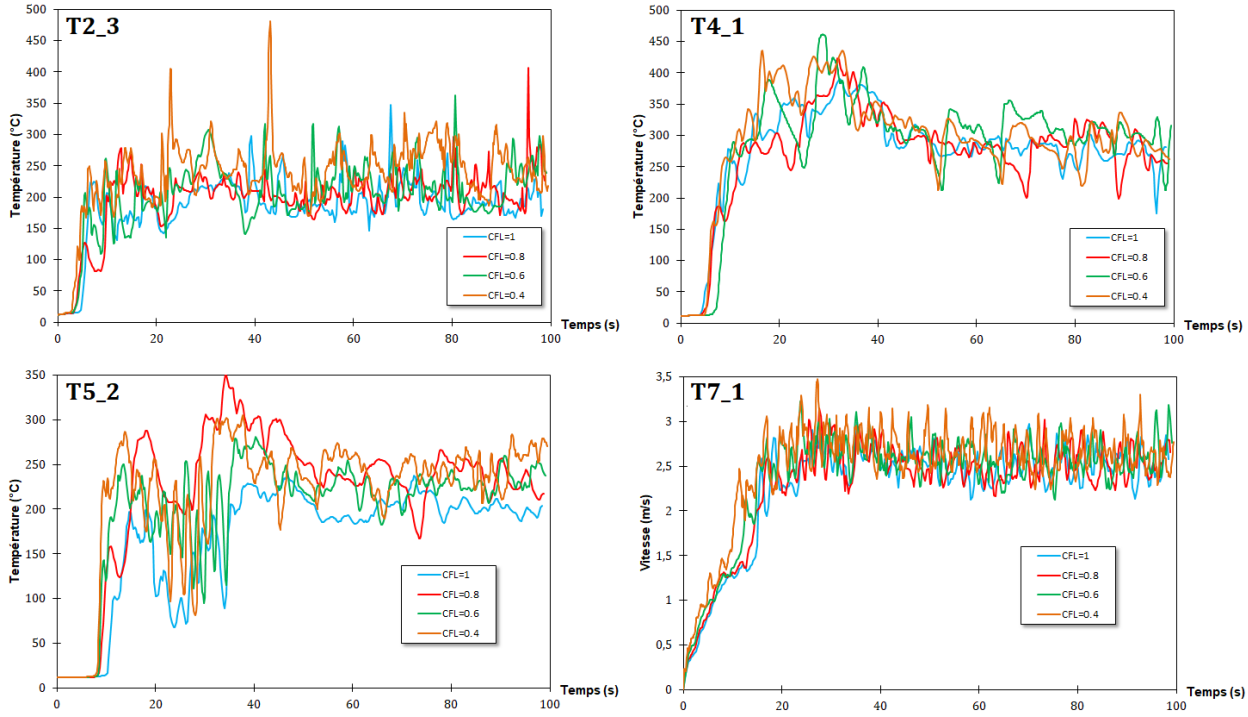

Figure 3.14 – Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 4 conditions CFL différentes (0,4, 0,6, 0,8 et 1).

Le pas de temps influence peu l'écoulement et la simulation des phénomènes. Comme il n'existe pas un grand écart entre les deux nombres de Courant 0,4 et 0,6, les simulations seront effectuées avec une CFL de 0,6.

3.2.3 Convergence de la résolution du rayonnement

La méthode de résolution du rayonnement thermique est dépendante de deux paramètres numériques : la discrétisation angulaire et la fréquence de résolution.

3.2.3.1 Discrétisation angulaire

La discrétisation angulaire évoquée au paragraphe 1.8.4 est analysée. Pour rappel, elle correspond au nombre de directions dans lesquelles l'équation de transfert radiatif est résolue. Avec la condition CFL précédente et le maillage précédent, plusieurs discrétisations angulaires sont considérées : 4 , 32 et 128 rayons. La figure 3.16 compare ces trois discrétisations.

La discrétisation ne semble pas jouer un grand rôle sur le résultat. Néanmoins, il est nécessaire d'être relativement précis sur le rayonnement pour estimer les dangers liés à celui-ci dans la couche froide. Une discrétisation de 32 rayons est donc choisie pour les calculs.

3.2.3.2 Fréquence de résolution

La fréquence de résolution correspond au nombre de pas de temps pendant lesquels le rayonnement n'est pas résolu. Ainsi, une fréquence de 10 signifie que les équations de l'aérothermochimie (1.5.106) sont résolus dix fois pendant que le rayonnement n'est résolu qu'une fois. Les paramètres relatifs au rayonnement sont considérés comme constants sur les dix pas de temps pendant lesquels il n'est pas

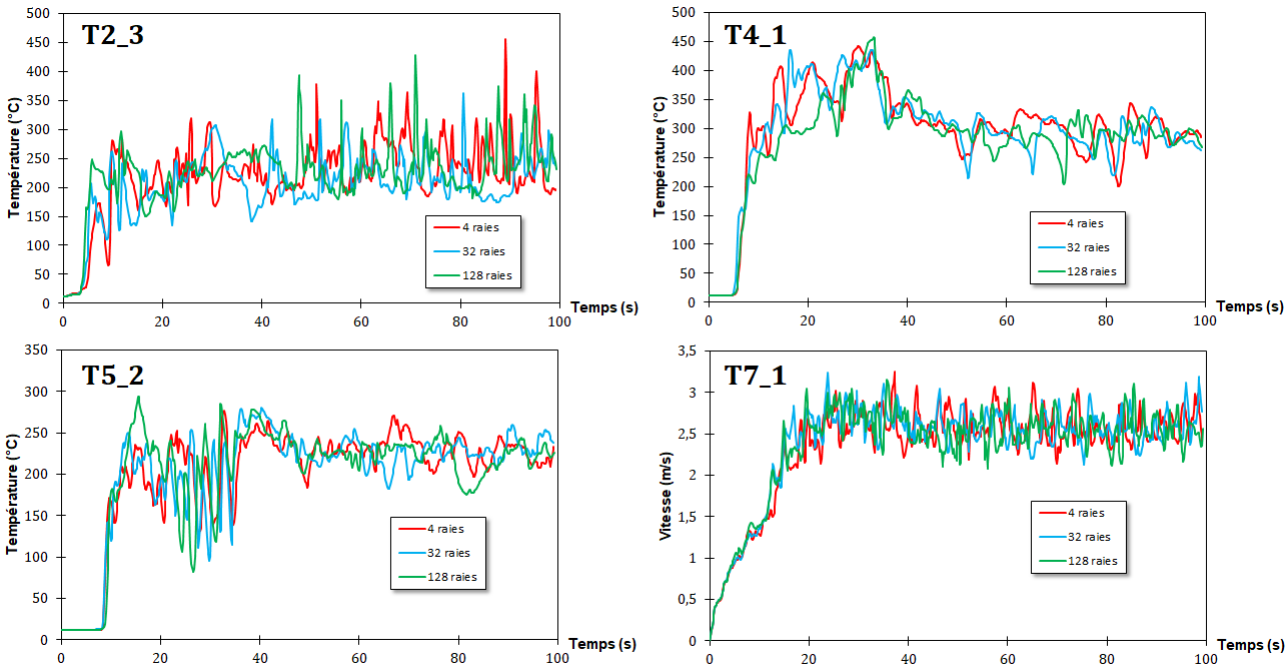

Figure 3.15 – Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 3 discrétisations angulaires différentes (4, 32 et 128).

résolu. La figure 3.16 compare la température à l'aplomb du foyer à 74 cm du plafond pour différentes fréquences.

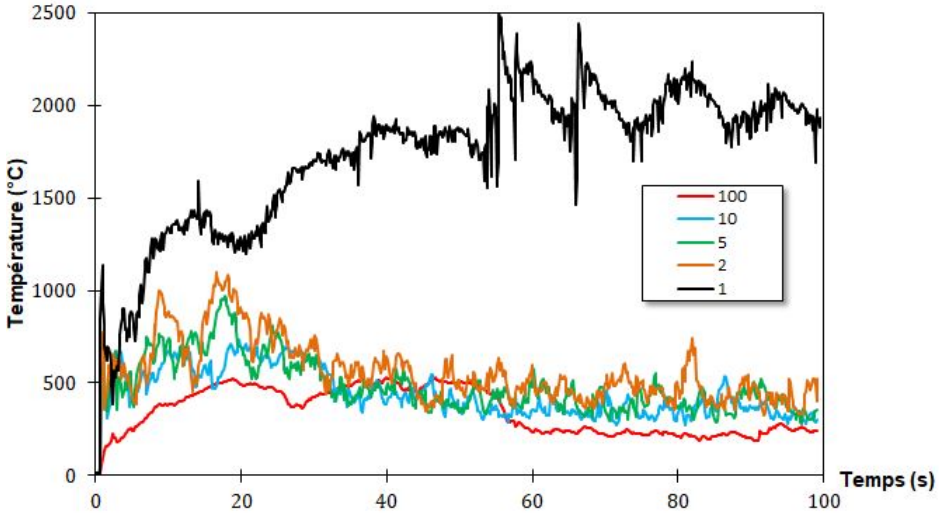

Figure 3.16 – Comparaison des températures dans la flamme pour 5 fréquences (1, 2, 5, 10 et 100).

De manière surprenante, la convergence ne s'effectue pas et une résolution du rayonnement après chaque résolution des équations de l'aérothermochimie (fréquence valant un) entraîne une divergence de la température. Le raffinement du maillage dans cette zone n'empêche pas cette divergence. Cette contradiction ne semble pas présente dans la littérature. Néanmoins, la figure 3.17 montre que des fréquences de 2, 5 ou 10 changent peu les températures aux points T2_3, T4_1 et T5_2 et la vitesse en T7_1. Les simulations seront donc effectuées avec une fréquence de 10.

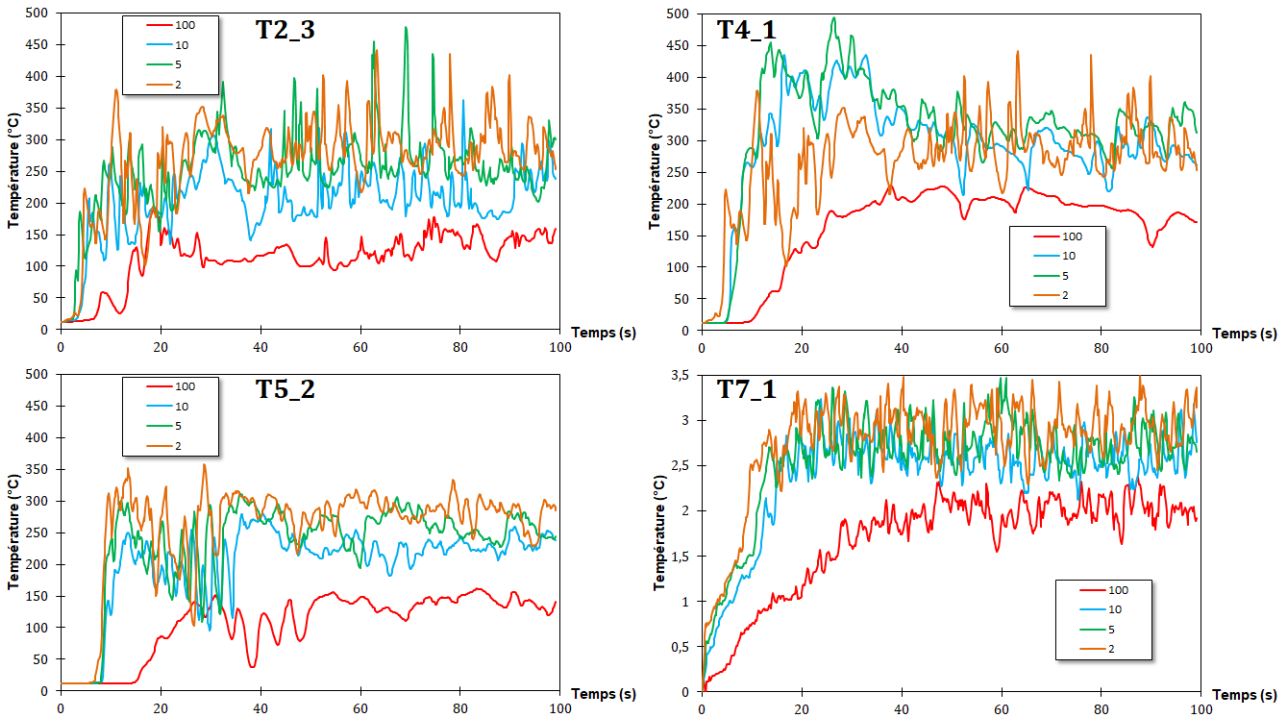

Figure 3.17 – Comparaison des champs de température aux points T2_3, T4_1 et T5_2 ainsi que de la vitesse en T7_1 pour 4 fréquences de résolution (2, 5, 10 et 100).

3.3 Validation du modèle numérique

La validation du modèle numérique se déroule en deux temps. L'ambiance dans la carrière est d'abord comparée avec la simulation. Les températures, les concentrations et les vitesses sont le centre d'intérêt de cette première partie. Les dangers liés aux combustions sont aussi étudiés grâce à la modélisation évoquée au paragraphe 2.1.3. La seconde partie traite des effets des hautes températures sur les parois. Rappelons que seul le deuxième feu est étudié.

3.3.1 Circulation des gaz

La modélisation numérique requiert la connaissance de la réaction simplifiée de la combustion du pin sylvestre. L'équation chimique (1.2.8) qui est théorique, doit être adaptée à l'expérimentation. Des ajustements conduisent à

$$\text{Bois} + 0,4028\ O_2 + 1,516\ N_2 = 0,3609\ CO_2 + 0,8647\ H_2O + 0,0084\ CO + 0,0015\ C + 1,516\ N_2 \quad (3.3.1)$$

Les proportions évoquées §1.2.2 entre les coefficients stœchiométriques ne sont pas respectées par l'équation (3.3.1). Cette différence peut provenir de l'origine discordante du bois (branche, tronc, etc) et du taux d'humidité dont l'équation (1.2.8) ne tient pas compte. Ces deux facteurs modifient en effet la réaction chimique de combustion. De plus, tous les constituants du bois ne brûlent pas aux mêmes températures (§1.2.1.1). Ainsi, simplifier la réaction de combustion à une seule équation est une approximation qui ne peut sans doute pas satisfaire la théorie assez simple du paragraphe 1.2.2.

Afin de comparer les données expérimentales avec la simulation, l'écart relatif suivant est défini

$$e_r = 100 \frac{|v_{exp} - v_{simu}|}{|v_{exp}|} \quad (3.3.2)$$

avec v la variable comparée.

3.3.1.1 Puissance dégagée par la combustion (HRR)

Débutons cette série de comparaison par la donnée d'entrée de la simulation numérique. Comme évoqué au paragraphe 2.2, le HRR (puissance dégagée par combustion) est imposé au travers d'une condition limite. Mais une fois la résolution du système d'équations mathématiques effectuée, le HRR n'est plus identique à celui imposé à la limite. Il convient donc de vérifier qu'avec toutes les précautions prises, le HRR de la simulation est proche de la mesure. Rappelons que la mesure ne fournit que le débit massique et non la puissance. Celle-ci est obtenue en multipliant le débit par l'énergie de combustion supposée constante (§1.2.1.2).

Dans les simulations, la forme du foyer sélectionné approche la géométrie en tipi du foyer expérimental (Fig. 3.3) par une pyramide (Fig. 3.18). La présence de ce foyer est nécessaire puisque sans lui, la base de la flamme serait déviée par l'arrivée d'air frais et serait plaquée vers le mur du fond. Or, l'expérimentation démontre que les branches de bois constituant le foyer obstruent l'arrivée d'air frais. Ainsi, les flammes restent droites pendant toute la combustion.

Mais la surface de la pyramide est beaucoup plus importante que la surface critique déterminée au paragraphe 2.2. La condition limite correspondant au HRR ne peut donc pas être appliquée à l'ensemble du foyer. Elle doit plutôt être appliquée sporadiquement afin de couvrir la totalité de l'espace qu'occupe le foyer (surfaces rouges sur la figure 3.18). Des tests numériques ont montré que cette disposition écartée des brûleurs ne modifiait pas l'ordre de grandeur de la température de la flamme par rapport à une disposition concentrée.

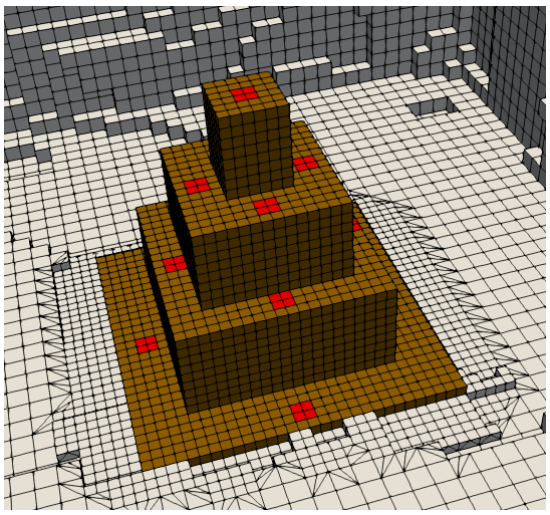

Figure 3.18 – Maillage du foyer au fond de la seconde galerie. Les brûleurs (en rouge) sont parsemés sur toute la surface du foyer (en marron).

La figure 3.19 révèle l'accord entre les mesures et la simulation. L'écart relatif moyen sur le HRR est inférieur à 3% ($e_r < 3\%$). La condition limite est correctement prise en compte par la simulation grâce au maillage précautionneux du foyer. De plus, le coefficient empirique utilisé dans le modèle de combustion est bien choisi (§1.5.3.5) pour une évaluation correcte du HRR.

3.3.1.2 Températures

Pour chaque arbre de thermocouples, un graphique compare la simulation et les mesures pour tous les thermocouples de cet arbre. Sur la droite de chaque figure, la disposition verticale des thermocouples est indiquée. À chaque capteur correspond une couleur. Les traits pleins sont relatifs à la simulation tandis que les pointillés représentent l'expérimentation.

Les résultats de l'arbre T1 sont donnés par la figure 3.20. La séparation en deux couches bien distinctes évoquées au paragraphe 1.3.2 semble s'opérer d'après le graphique. La température à un

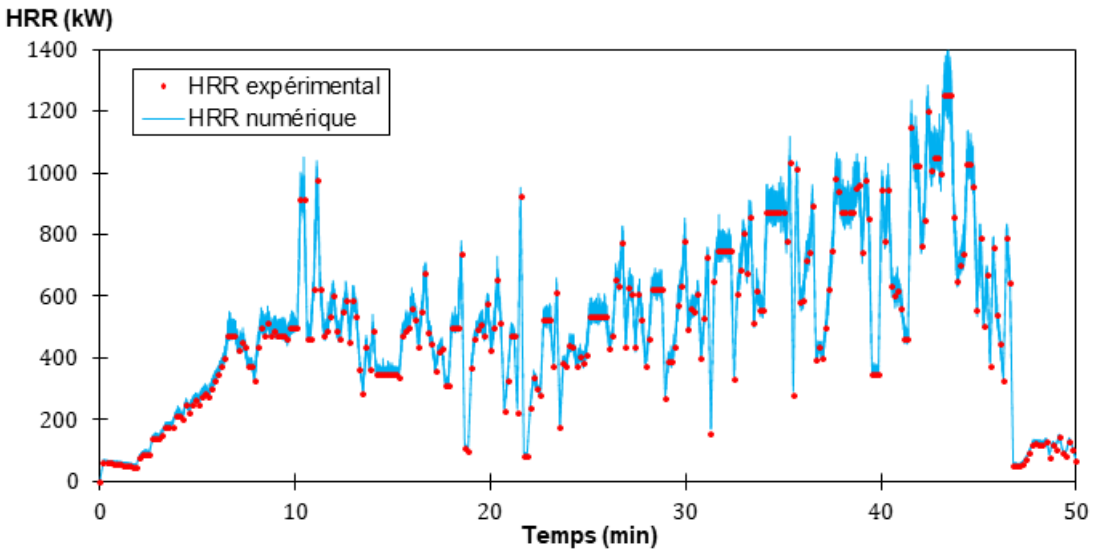

Figure 3.19 – Comparaison entre les HRR simulé et mesuré par la balance en supposant le pouvoir calorifique constant.

mètre du sol reste modeste pendant les 30 premières minutes de combustion. La mesure indique ensuite une augmentation jusqu'à environ 200^oC. La température proche du plafond atteint rapidement les 400^oC et reste au voisinage de cette valeur pendant toute la combustion malgré l'augmentation de la puissance dégagée par le foyer.

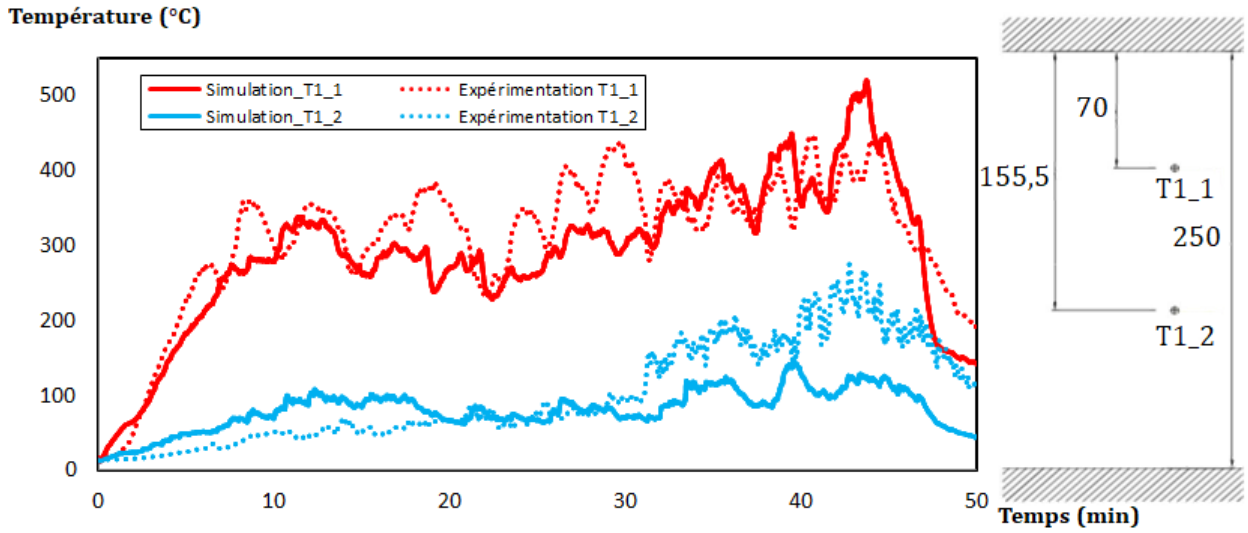

Figure 3.20 – Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T1. La localisation des thermocouples est indiquée à droite.

La simulation est très proche de l'expérimentation pour cet arbre. La température au point T1_1 est du bon ordre de grandeur pendant toute la combustion. L'écart relatif en ce point est de 17%. L'écart principal survient entre 15 et 30 minutes lorsque la différence parvient au maximum à environ 100^oC. Concernant le thermocouple du bas, la simulation calcule la bonne température sur les 30 premières minutes puis le capteur est atteint par les gaz chauds. Dans la simulation, ce thermocouple reste dans la zone plus froide. Puisque le gradient de température est élevé à cette cote, un écart de quelques centimètres de hauteur peut modifier de plusieurs centaines de degrés la mesure. L'écart entre la simulation et l'expérimentation peut provenir de cette caractéristique. En dépit de cette déviation, la simulation est donc pertinente pour l'arbre T1.

Notons que des écarts de plusieurs dizaines de pourcents sont courants dans le domaine de la simulation de feux. Par exemple, les simulations uniquement préoccupées par la simulation de flamme mènent souvent à des erreurs de 20% [163], [162], [192]. L'interaction de flammes avec un mur ou un plafond conduit aussi à des écarts conséquents de l'ordre de 40% [193], [194]. Ainsi, la présente simulation fournit des résultats très proches des mesures pour l'arbre T1 malgré la différence d'échelle avec les cas numériques évoqués. Notons aussi que la reproductibilité du scénario est vérifiée à 20% près pour les températures mesurées d'après le paragraphe 3.1.3. Un écart de cet ordre de grandeur entre la simulation et les mesures reste donc dans un intervalle convenable.

Les mesures effectuées sur l'arbre T2 démontrent la présence de deux couches séparées (Fig. 3.21). La couche chaude possède une température quasiment homogène (sondes T2_1 et T2_2) tandis que la température de la couche froide (sondes T2_4, T2_5 et T2_6) est peu affectée par la présence d'une combustion. Ceci ne reste valable que durant les 30 premières minutes. Comme pour l'arbre T1, la température augmente aussi pour les thermocouples pourtant situés plus bas. Ce constat semble indiquer que la proximité du foyer avec le mur du fond empêche la séparation distincte en deux couches lorsque le débit calorifique devient trop important. Les gaz chauds sont ainsi conduits par l'intermédiaire du mur vers le sol. Ce phénomène est décrit au paragraphe 1.3.3. La couche froide, peu influencée par le feu jusqu'ici, reçoit donc de l'énergie de la part de la couche chaude. L'hypothèse de l'existence de deux couches distinctes est donc mise en défaut à cause de la forte énergie libérée par la combustion et du confinement de la cavité.

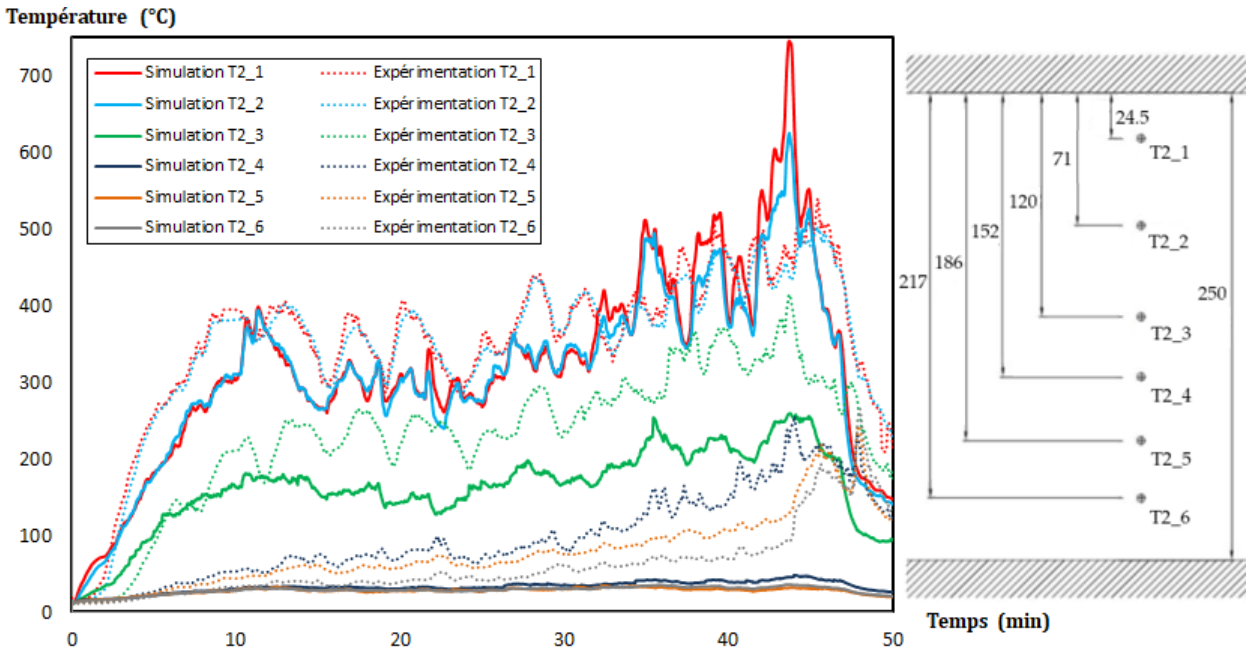

Figure 3.21 – Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T2. La localisation des thermocouples est indiquée à droite.

Numériquement, la température élevée de la couche chaude est bien retranscrite. L'homogénéité de la température est simulée correctement grâce à l'utilisation de l'hypothèse de la vitesse exclusivement horizontale (§2.3.2). Les deux thermocouples les plus hauts renvoient ainsi les mêmes températures à quelques degrés près. L'écart relatif reste inférieur à 22%. Aucune analyse ne peut être tirée du thermocouple T2_3. À l'image de T1_2, il occupe une zone de fort gradient thermique. Quelques centimètres d'écart peuvent ainsi modifier de quelques centaines de degrés la température. Les trois derniers thermocouples subissent les limites de l'hypothèse de la vitesse horizontale. Aucune vitesse verticale n'est tolérée proche des parois alors qu'une circulation descendante se produit pendant toute la combustion. Lorsque la puissance dégagée devient importante, l'inertie des gaz grandit, conduisant

ainsi les gaz chauds en couche froide. Ainsi, la température simulée est très sous-estimée par rapport à la réalité puisque cette circulation descendante aux parois n'existe pas dans la simulation. Lorsque le confinement est trop important comme au fond de la carrière, l'hypothèse de vitesse exclusivement horizontale est pénalisante. Elle est toutefois bénéfique puisqu'elle permet de réduire l'écart moyen par rapport à une simulation classique.

Les précédentes observations sont valables pour l'arbre T3 qui est situé proche du feu (Fig. 3.4). La température de la couche chaude est quasiment homogène tandis que la couche froide est peu influencée par le feu (Fig. 3.22). L'augmentation de l'énergie libérée à partir de 30 minutes fait croître la température aux alentours du thermocouple T3_3. L'épaisseur de la couche chaude mesure ainsi au moins 1 m 20 vers la fin du feu.

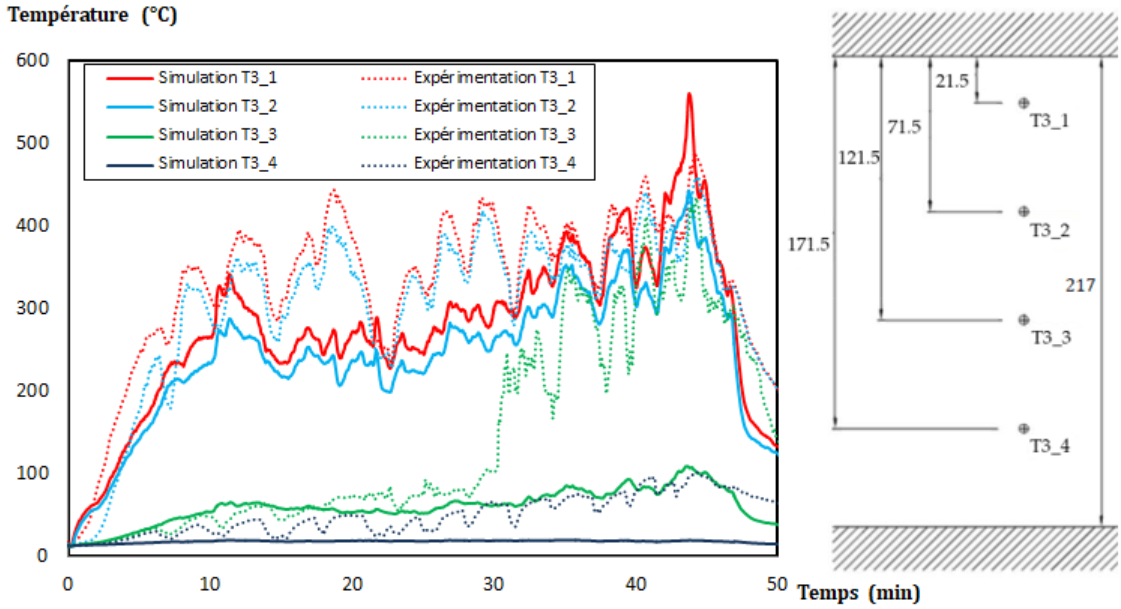

Figure 3.22 – Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T3. La localisation des thermocouples est indiquée à droite.

Numériquement, les tendances sont plutôt respectées puisque l'erreur sur la température de la couche chaude vaut $e_r = 21\%$. L'absence de montée en température vers T3_3 démontre que la simulation sous-estime l'épaisseur de la couche chaude. Cela est en accord avec ce qui précède et provient vraisemblablement de l'extension des jets sous plafond aux parois verticales qui n'est pas simulée (§2.3.2). Notons de plus qu'une erreur sur la géométrie elle-même affecte les résultats de la simulation. La géométrie de la carrière est issue d'une photogrammétrie (Fig. 3.1) dont la résolution est de 10 cm. Puis, le maillage, effectué à l'aide de l'outil SnappyHexMesh, possédant une résolution de 3 cm à l'aplomb du foyer et 6 cm ailleurs, rajoute une incertitude. Les erreurs issues de ces deux procédés peuvent se cumuler ou s'annihiler. Au niveau de l'arbre T3, la géométrie numérique mesure 7 cm de moins que la géométrie réelle (2 m 17). Cette source d'erreur pourrait être à l'origine de l'écart important sur le thermocouple T3_3 ainsi que sur les autres points de comparaison.

Les figures 3.23 et 3.24 exposent toutes deux des conclusions similaires pour les arbres T4 et T5 qui se situent vers le milieu de la carrière (Fig. 3.4). La couche chaude s'épaissit tout au long de la combustion jusqu'à rejoindre les thermocouples T4_2 et T5_2 dans la seconde moitié. À 120 cm du plafond, la température est celle du gaz extérieur pénétrant dans la carrière.

Alors que l'épaisseur de la couche chaude était jusque-là sous-estimée par la simulation, c'est ici l'inverse qui semble se produire. Les deux thermocouples du haut sont, d'après la simulation, dans la couche chaude de température homogène. Or, ce n'est pas le cas expérimentalement puisque les températures mesurées T4_2 et T5_2 restent la plupart du temps inférieures aux températures simulées à

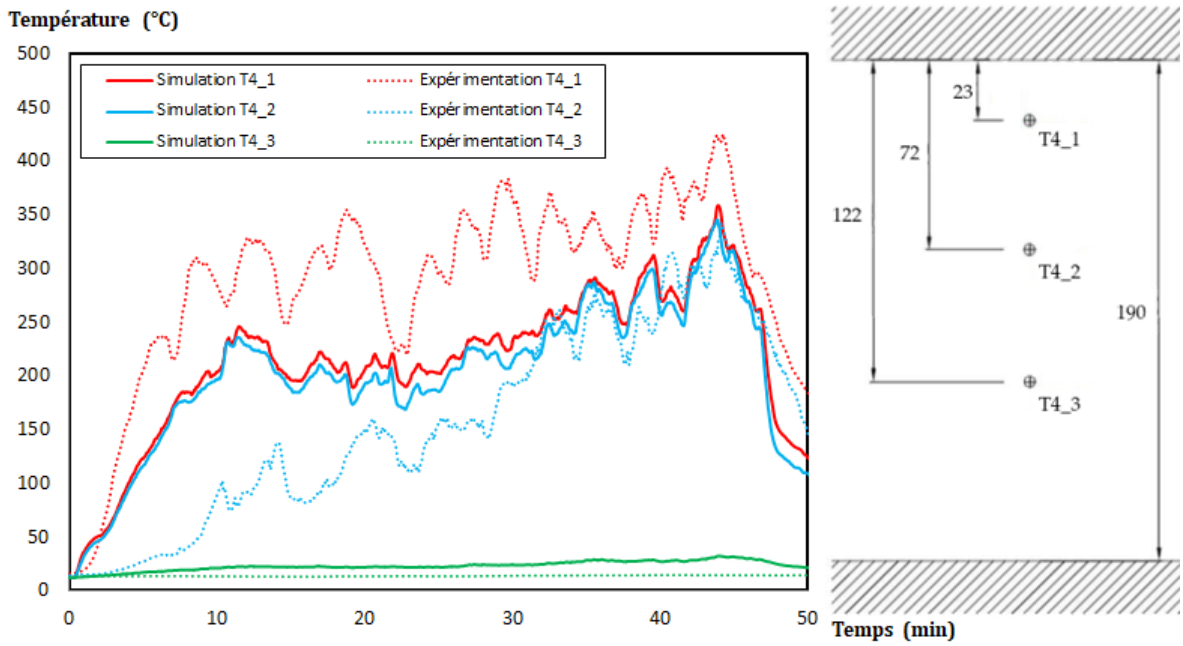

Figure 3.23 – Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T4. La localisation des thermocouples est indiquée à droite.

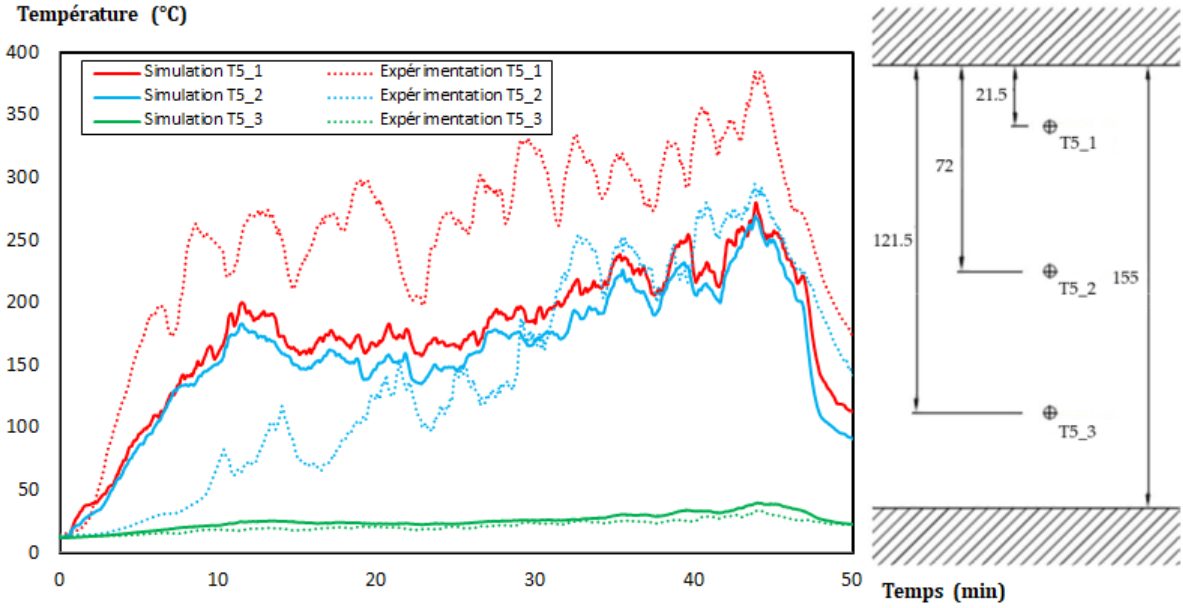

Figure 3.24 – Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T5. La localisation des thermocouples est indiquée à droite.

ces emplacements. Cet écart provient probablement des conditions limites en températures (§2.3.1.2). Les conditions limites en paroi reposent sur l'hypothèse que le jet sous plafond poursuit sa course le long des parois verticales à cause de l'inertie des gaz. Or, loin du feu, cette hypothèse semble de moins en moins juste puisque la propagation des gaz n'est plus radiale mais longitudinale en direction de la sortie. Ainsi, le jet sous plafond n'est presque plus prolongé aux parois et la température des murs est surestimée. Il s'ensuit une couche chaude plus épaisse. Ce constat implique de plus une sous-estimation de la température simulée dans la couche chaude. En effet, puisque la couche chaude numérique est trop épaisse, l'énergie est étalée sur un plus grand volume ce qui diminue forcément la température. Cela explique en partie l'important écart entre la simulation et l'expérimentation. L'écart entre les

15 et 30 premières minutes s'explique sans doute aussi par une seconde constatation. Comme pour les autres arbres, la température simulée de la couche chaude entre 15 et 30 minutes est plus faible que la mesure. À partir de 30 minutes, cette température augmente fortement dans la simulation et rattrape la température mesurée qui oscille autour de valeurs légèrement supérieures. Lorsque le débit calorifique est suffisamment élevé, la simulation fournit donc quasiment les mêmes températures que les mesures. Mais lorsqu'il est plutôt faible, la simulation sous-estime la température. Enfin, l'erreur liée à la géométrie numérique peut aussi jouer un rôle dans les écarts observés. La simulation rend par contre parfaitement compte de la température de la couche froide. La température simulée ne dépasse pas les 35^oC.

La figure 3.25 présente la comparaison concernant l'arbre T6. À mesure que les arbres s'approchent de la sortie, la couche chaude s'affine. Cela est parfaitement visible avec la mesure du thermocouple T6_1 qui rentre progressivement dans les hautes températures durant toute la combustion. Dessous, les gaz n'ont pas eu le temps de se réchauffer et leur température est celle de la réserve extérieure.

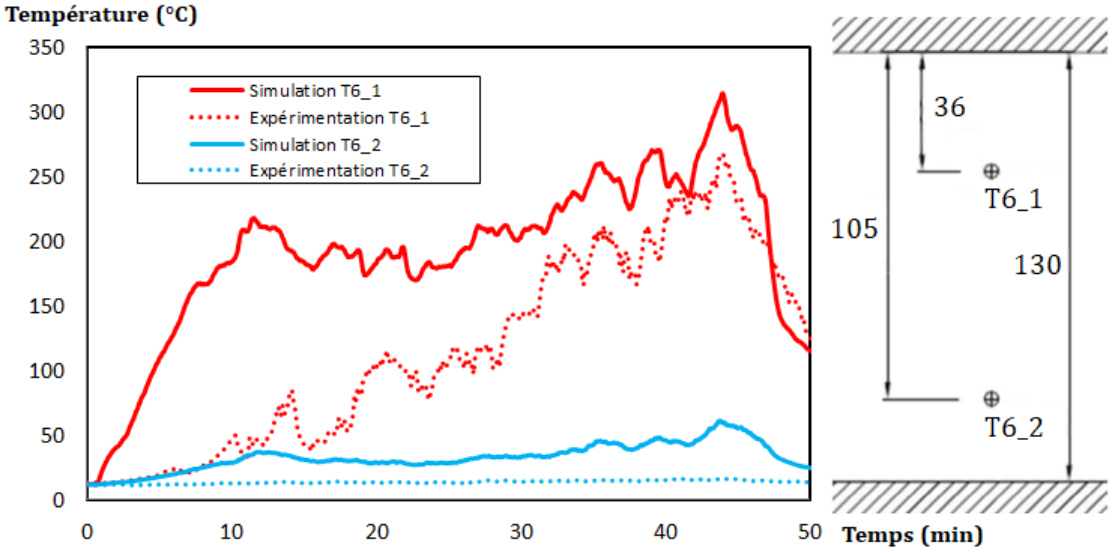

Figure 3.25 – Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T6. La localisation des thermocouples est indiquée à droite.

La simulation souffre toujours de la mauvaise estimation de l'épaisseur de la couche chaude. Ainsi, le capteur se trouve dans la couche chaude dans la simulation alors qu'il n'en est rien en réalité. Après 30 minutes, la simulation et l'expérimentation s'approchent. Néanmoins, d'après les analyses précédentes, la température réelle très proche du plafond devait être supérieure à la température simulée. Dans la couche froide, la température, même si elle augmente, reste raisonnable. L'erreur est convenable puisque la température reste non contraignante pour un humain ($< 50^oC$). Notons néanmoins que malgré l'utilisation de l'hypothèse sur la vitesse verticale nulle, la température de la couche froide est surestimée dans la simulation. Ainsi, le transfert thermique de la couche chaude vers la couche froide est toujours surestimé, sans doute à cause de la mauvaise évaluation de l'épaisseur des couches.

Le dernier arbre se situe au milieu de l'entrée de l'ancienne carrière. Les gaz s'échappent vers le haut (Fig. 3.5.b) puisque leur température est très élevée. Il n'est plus vraiment possible de parler de couche à cet endroit car l'épaisseur des gaz chauds s'est encore rétrécie. Ainsi, un gradient de température se met en place au sein des gaz chauds. À un mètre du plafond, la température reste froide.

La simulation estime correctement l'ordre de grandeur des températures. La température pour la sonde T7_1 s'écarte de 24% de la réalité. En T7_2, l'hypothèse de la vitesse exclusivement horizontale empêche la simulation d'une température découplée de celle en T7_1. Le capteur T7_3 montre que l'épaisseur des gaz chauds est encore surestimée dans la simulation. Les températures des gaz entrants restent fraiches même si le capteur T7_4 montre qu'ils sont affectés par les gaz chauds. Le transfert

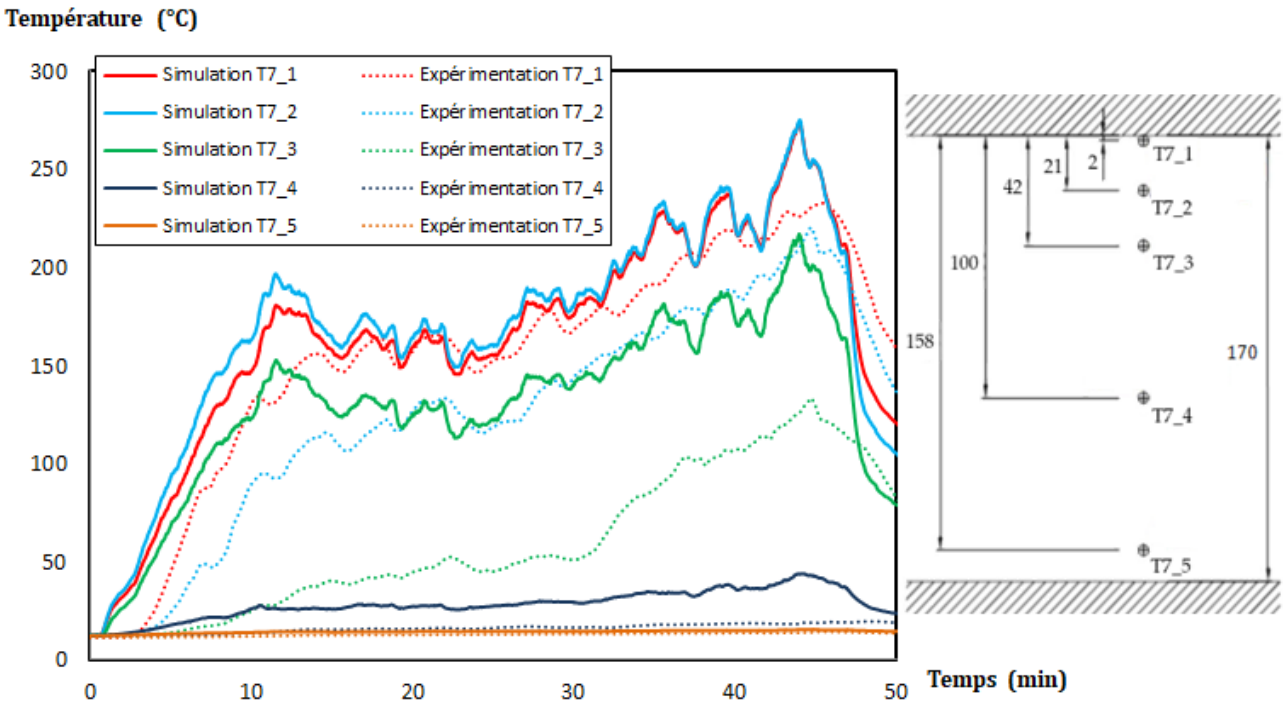

Figure 3.26 – Températures simulées et mesurées par les thermocouples de l'arbre T7. La localisation des thermocouples est indiquée à droite.

thermique est donc encore trop important entre les deux zones.

En résumé, la simulation fournit des températures proches de la réalité près du feu. L'hypothèse de la vitesse exclusivement horizontale permet la simulation de deux couches distinctes. La température proche du sol reste donc relativement froide et proche des mesures dans toute la géométrie. Ce point est essentiel dans l'optique de l'application de la modélisation à la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Savoir si un Aurignacien pouvait s'approcher du foyer peut en effet influencer la fonction des feux effectués dans la Galerie des Mégacéros. L'hypothèse s'éloigne sans doute de la réalité au fond de la carrière à cause de la présence d'un mur. La Galerie des Mégacéros ne possède pas de tel mur puisqu'elle s'ouvre sur deux grandes salles des deux côtés.

La première galerie de la carrière possède un plafond assez bas. Cette forme pénalise les résultats de la simulation puisque l'erreur faite sur l'épaisseur de la couche chaude reste sensiblement la même dans toute la carrière. La couche chaude est donc très épaisse dans la galerie 1 tandis qu'en réalité, cette couche s'amincit à mesure qu'elle s'approche de la sortie. L'amincissement ne peut s'opérer puisqu'aucune vitesse verticale n'est tolérée. Malgré l'aspect imprécis de cette hypothèse, elle permet l'acquisition de résultats plus proches de la réalité qu'une simulation classique sans l'hypothèse.

Les erreurs les plus importantes de la simulation des températures se trouvent dans la couche chaude, "loin" du foyer. Archéologiquement, les éléments nécessaires sont les températures très proches du foyer où les thermo-altérations se produisent (jusqu'à 2 mètres du foyer), et la température de la couche froide. De ce point de vue, la simulation est suffisamment proche des mesures pour valider l'application de ce modèle à la Galerie des Mégacéros.

3.3.1.3 Concentrations en gaz et en particules

Les concentrations en O_2, CO_2 et CO sont mesurées en deux points, C1 et C2 (Fig. 3.4). La figure 3.27 présente la comparaison de ces concentrations en C1. Le taux de dioxygène décroit jusqu'à environ 16% dans la couche chaude tout en oscillant autour de valeurs légèrement supérieures. La concentration en CO_2 augmente jusqu'à 6%. Cette valeur peut entrainer des troubles mais compte tenu des températures élevées, le CO_2 n'est pas l'élément le plus contraignant. Le taux de CO dépasse

les 1000 ppm. D'après la figure 2.5, ce taux n'est pas létal tant que la durée n'est pas très prolongée. Toutefois, les dangers des gaz résultent de leur interaction (§2.1.3). L'étude des dangers toxiques est développée au paragraphe 3.4.

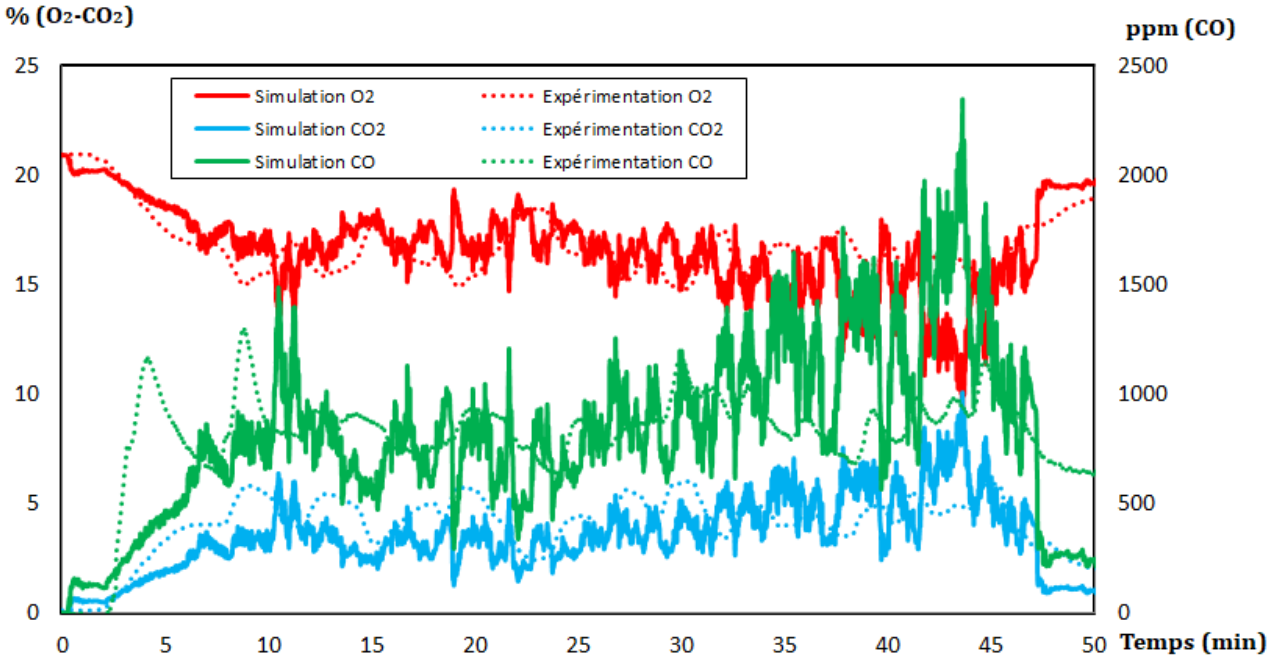

Figure 3.27 – Concentrations simulées et mesurées par les capteurs en C1.

La simulation est très proche des mesures pour tous les gaz. L'écart relatif sur le dioxygène est de 7% tandis que l'écart pour les deux autres est d'environ 30%. Une soudaine diminution d'O_2 après 40 minutes apparait dans la simulation contrairement à la réalité. Cette variation absente des mesures est sans doute à rapprocher des températures n'évoluant pas au point T4_1 alors que la simulation connaissait une forte variation. Le taux de CO_2 est correctement simulé. Légèrement inférieure à la concentration mesurée durant la première moitié de la combustion, la concentration simulée surestime faiblement les mesures sur la seconde moitié. Cette observation a probablement la même explication que pour le dioxygène. Enfin, le monoxyde de carbone est correctement traité pendant les 35 premières minutes. Ensuite, comme pour les deux précédents, le CO est évalué à la hausse.

En C2 (Fig. 3.4), les gaz toxiques sont présents en plus faibles quantités (Fig. 3.28). Puisque la température simulée en T6_1 est erronée, les concentrations simulées sont un peu éloignées des mesures. En effet, n'étant pas réellement dans la couche chaude, les capteurs en T6_1 ne baignent pas dans une forte concentration en gaz toxiques. En surestimant l'épaisseur de la couche chaude, les valeurs des concentrations simulées ne peuvent être très proches de la réalité. Remarquons que l'écart entre expérimentation et simulation s'amenuise progressivement à mesure que la combustion progresse. Cela est en accord avec la conclusion sur le rapprochement des températures simulées et mesurées vers la fin du feu. Les écarts sont donc les plus conséquents durant la première moitié de la combustion. Sans tenir compte des vingt premières minutes, le taux de CO_2 est ainsi environ 40% supérieur aux mesures et l'écart relatif est de 36% pour le CO. L'erreur sur l'O_2 est moins conséquente puisqu'elle est d'environ 10%. Aucune comparaison sur l'erreur avec des travaux publiés n'a pu s'effectuer par manque de littérature à ce sujet.

La figure 3.29 compare les concentrations en particules aux points S1 et S2 (Fig. 3.4). La simulation pour le premier point S1 s'écarte d'environ 27% en moyenne des mesures. Le pic expérimental survenu au début du feu provient probablement du passage de la fumée blanche au démarrage du feu. Cela n'est pas simulé puisque la réaction chimique est supposée constante dans la simulation. Or, la réaction au départ du feu n'est sans doute pas la même qu'une fois que le foyer est complètement embrasé. Le passage de la vapeur d'eau du début n'est donc pas considéré. Le capteur de suie PPS au point S2 est

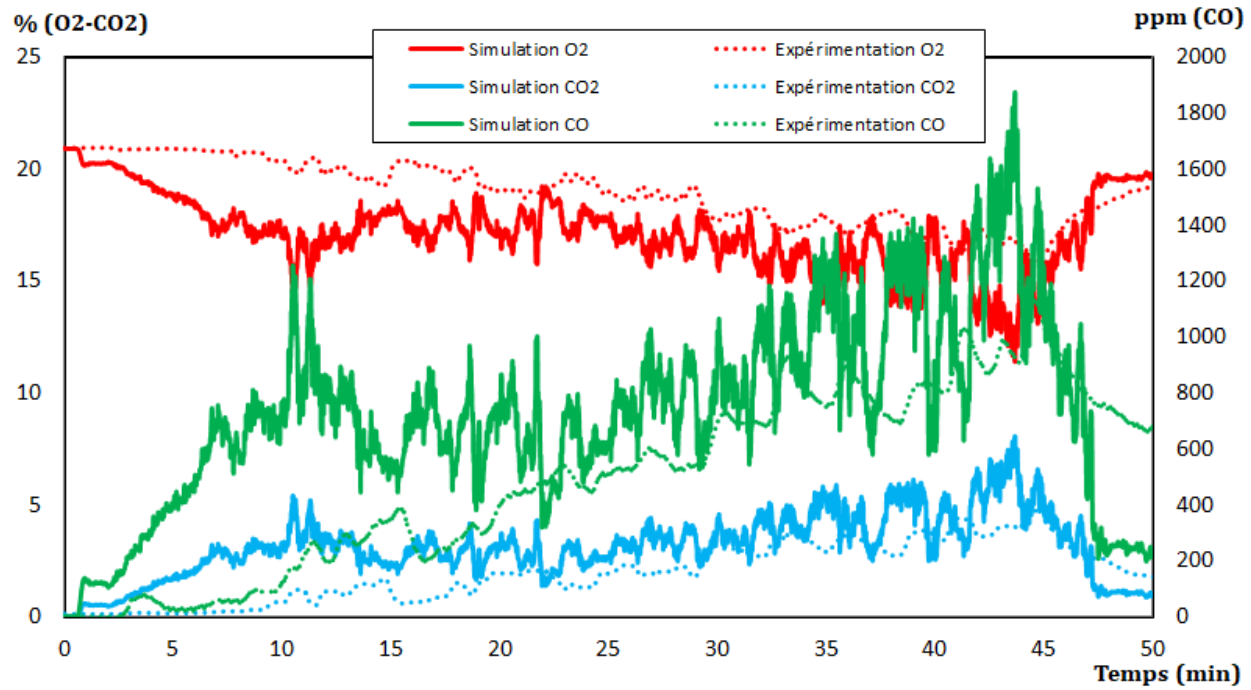

Figure 3.28 – Concentrations simulées et mesurées par les capteurs en C2.

sans doute épargné par cette fumée car il est excentré dans la première galerie. De manière similaire aux gaz, le capteur en S2 (Fig. 3.4) se trouve dans la couche chaude numérique mais pas dans la couche chaude expérimentale. La simulation surestime donc largement le taux de suie en ce point.

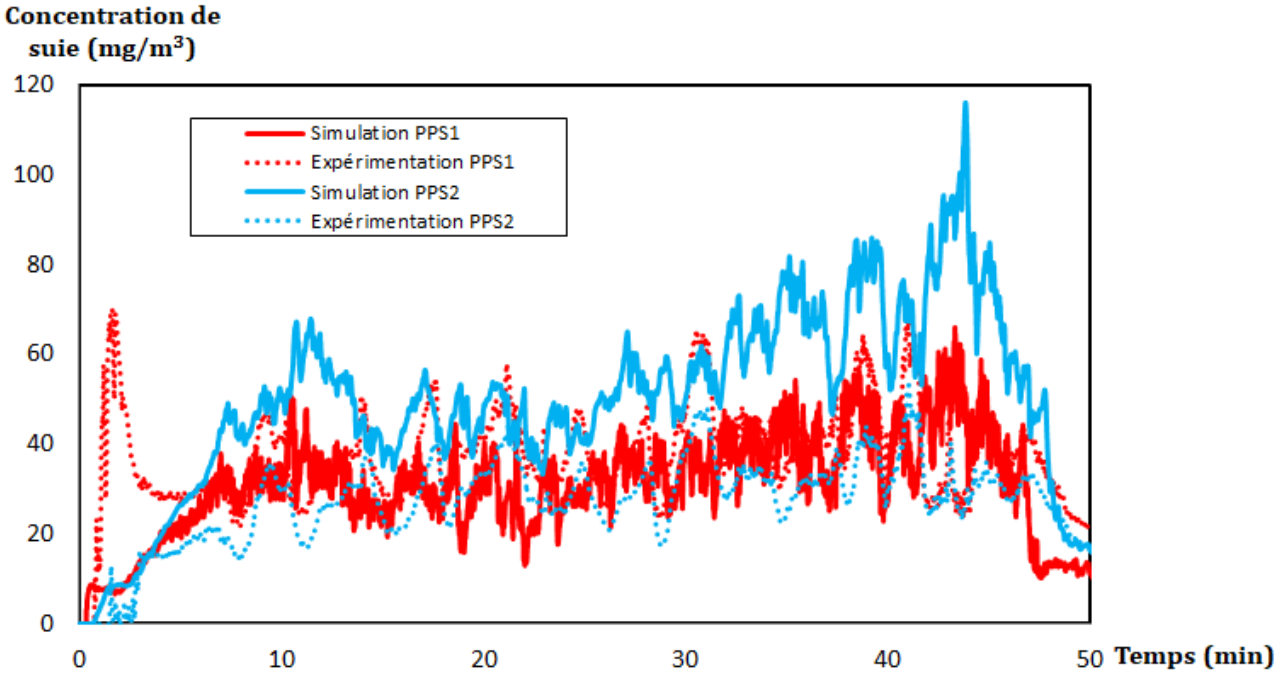

Figure 3.29 – Concentrations des suies simulées et mesurées par les capteurs en S1 et S2.

Malgré la simplicité de la modélisation de la réaction chimique (une équation chimique constante, modèle de Magnussen), la simulation retranscrit bien la composition des gaz dans la galerie 2, proche du feu. À cause de la mauvaise estimation de l'épaisseur de la couche limite, les valeurs dans la première galerie sont éloignées de la réalité.

3.3.1.4 Vitesses des gaz

Les vitesses des couches chaude et froide sont mesurées à l'entrée de la carrière, sur deux emplacements de l'arbre T7 (Fig. 3.30). La vitesse de la couche chaude est légèrement sous-estimée de 29%. De la même manière que les précédentes erreurs, cet écart découle du mauvais calcul de l'épaisseur de la couche chaude. Par conservation du débit, une épaisseur faible implique une vitesse élevée. Puisque la simulation surestime l'épaisseur de la couche chaude, la vitesse numérique est inférieure à la vitesse mesurée. Toutefois, la mesure en V2 est aussi supérieure à la vitesse numérique de la couche froide alors que le contraire aurait pu être attendu selon l'argument précédent. Donc la circulation des gaz dans la simulation est moins importante que dans l'expérimentation. De plus, les conditions climatiques extérieures peuvent influencer les mesures effectuées à l'entrée de la carrière et cette donnée n'est pas prise en compte dans la simulation. L'écart relatif pour la couche froide est de 37%. L'écart entre simulation et expérimentation reste donc assez faible étant donné la complexité des phénomènes en jeu. Il faut de plus considérer les incertitudes de mesure intrinsèques au matériel utilisé. La sonde McCaffrey placée en couche chaude peut souffrir d'une incertitude de 10% liée à son orientation par rapport à la direction de l'écoulement [195]. L'anémomètre à ultrasons placé en couche froide subit une incertitude de $0,05\ m.s^{-1}$. Ces incertitudes de mesure ne permettent pas d'expliquer à elles seules l'écart entre la simulation et l'expérimentation mais elles peuvent y contribuer.

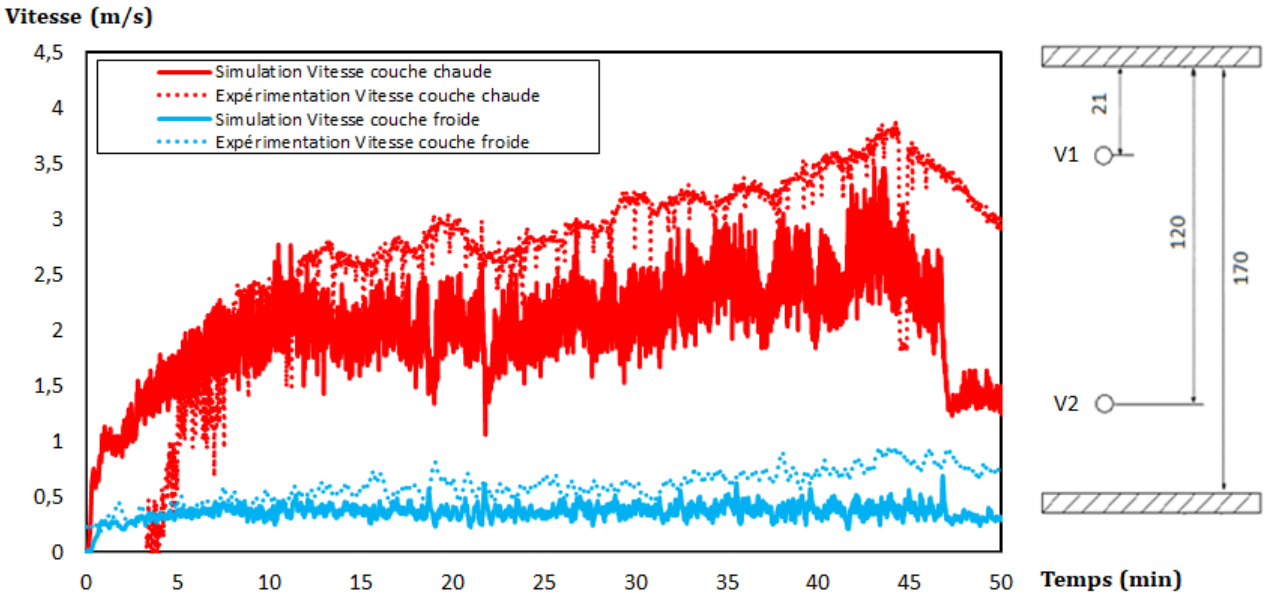

Figure 3.30 – Vitesses des gaz simulées et mesurées par les deux capteurs positionnés sur l'arbre T7.

3.3.2 Impacts thermo-mécaniques

Cette section aborde les effets du feu sur les parois de la carrière. Les propriétés thermiques et mécaniques du calcaire constituant le massif sont consignées dans les tableaux 1.3 et 1.4 du paragraphe 1.6.3.

Dans la suite, les dénominations des parois seront par convention celles définies sur la figure 3.31. Les points étudiés lors de l'analyse mécanique (§3.3.2.2) sont aussi précisés.

3.3.2.1 Changements de couleur et dépôts de suie

Puisque les critères de changement de couleur sont uniquement basés sur la température de la surface des parois, la simulation réalisée par OpenFOAM est suffisante pour estimer l'étendue des altérations. De plus, le dépôt de suie est évalué à partir de la modélisation présentée au paragraphe 2.1.4. Hormis l'écaillage, les traces de feu sont donc directement simulées par le logiciel OpenFOAM.

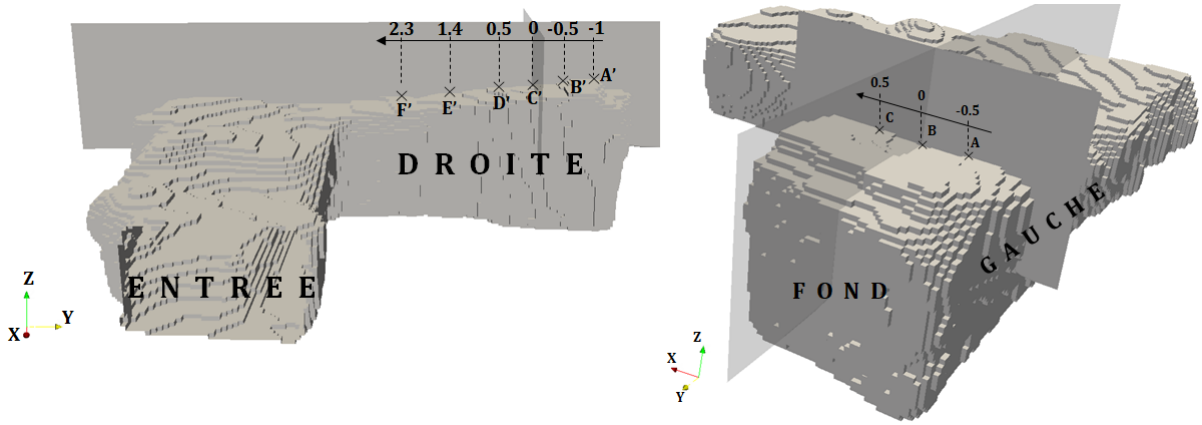

Figure 3.31 – Dénomination de chaque paroi et localisation des points analysés lors de l'étude mécanique.

Cette partie traite de ces indices.

Les figures 3.32 et 3.33 présentent la comparaison relative aux changements de couleurs et au dépôt de suie pour toutes les parois altérées. Le plafond est rubéfié (250^oC pendant 10 minutes) jusqu'à 2 m 60 de l'axe du foyer. La partie haute des parois verticales adjacentes est aussi complètement rubéfiée. Les limites horizontales de la rubéfaction sont très proches de la frontière séparant la présence et l'absence de suies déposées. Ces deux éléments permettent de connaître l'épaisseur de la couche chaude au voisinage du feu. Le dépôt de suie du plafond n'est pas représenté sur la figure 3.33 car le plafond est totalement recouvert de suie jusqu'à l'entrée. La couleur grise, correspondant à une température de 450^oC pendant 10 minutes, n'apparait qu'à l'aplomb du foyer. La zone, approximativement circulaire, possède un diamètre d'environ 1 m 50. Ainsi, la couleur grise apparait difficilement et seulement au-dessus des flammes. Seul un feu plus intense pourrait changer la couleur en gris d'une roche hors de la zone des flammes. Dans l'optique de l'application de cette étude à la grotte Chauvet-Pont d'Arc, les surfaces grises donnent ainsi une information capitale sur la position du foyer. Hormis pour des feux extrêmement intenses, un foyer se trouvera à l'aplomb des zones grises.

La résolution effectuée par OpenFOAM est semblable aux observations expérimentales. En particulier, les différentes limites des thermo-altérations s'accordent avec les relevés. La limite numérique du dépôt de suie est voisine de la limite expérimentale, à quelques centimètres près. L'extension horizontale de la rubéfaction sur les parois verticales possède la même étendue que celle des relevés. La conclusion est similaire pour le plafond avec environ 3,7 m d'extension sur les deux images (Fig. 3.33.a & b). Il existe néanmoins quelques écarts sur la hauteur de l'étendue de la rubéfaction sur les trois parois verticales. Elle est en effet globalement sous-estimée par la simulation vers le fond de la carrière. Ce résultat est cohérent avec les températures simulées présentées dans la partie précédente 3.3.1. L'épaisseur de la couche chaude est en effet légèrement sous-estimée par le modèle (§3.3.1.2). La hauteur de la rubéfaction en pâtit donc. La couleur grise est très bien retranscrite par la modélisation puisqu'un écart de seulement 10 cm existe. Le disque gris est toutefois décentré dans la simulation, contrairement au relevé. D'après les figures 3.20 et 3.21, les gaz sont pourtant plus chauds à gauche qu'à droite. Un décalage des thermo-altérations vers la gauche serait donc cohérent. Il apparait pourtant que la flamme est plutôt restée verticale pendant toute la combustion. Cet attribut pourrait provenir de la forme en tipi du foyer qui aurait une fonction de centrage absente de la simulation.

Enfin, les coins entre les parois et le plafond sont rarement altérés dans la simulation contrairement à la visualisation *in situ*. La taille des mailles empêche vraisemblablement la simulation du transport des gaz chauds vers cette zone. Un maillage plus fin serait nécessaire pour observer de la rubéfaction dans les coins. Cela n'est pas utile pour l'étude menée dans cette thèse qui ne cherche pas à simuler des phénomènes de cette précision.

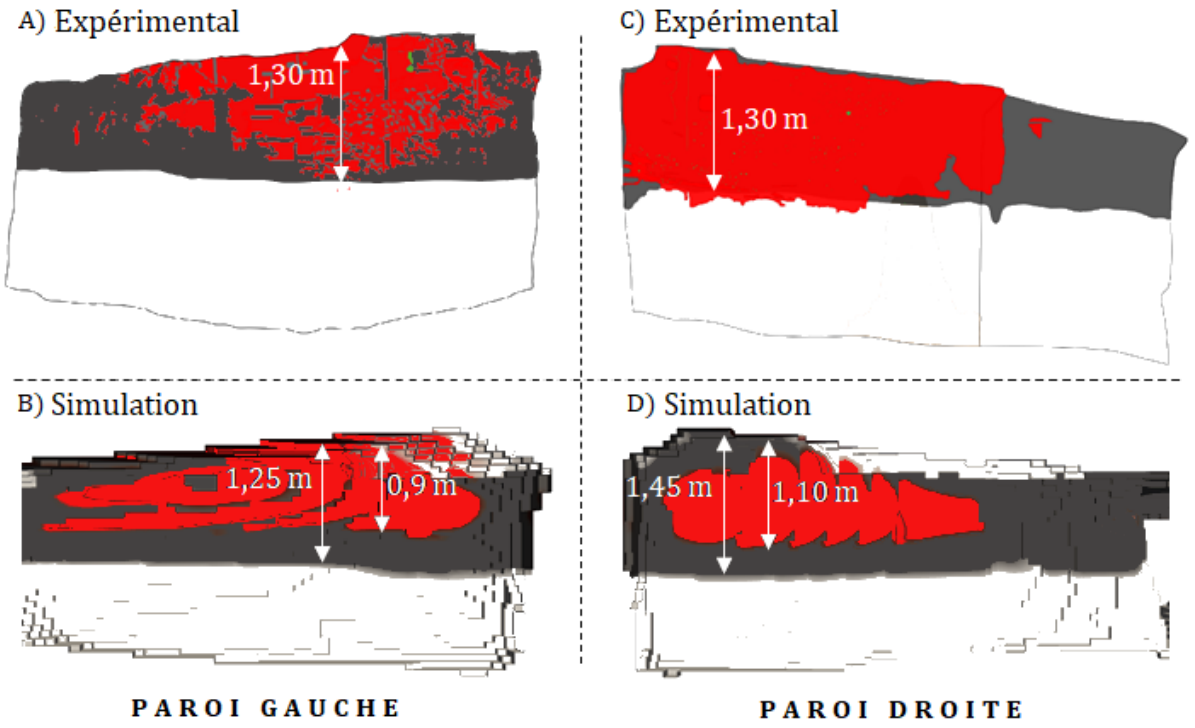

Figure 3.32 – Comparaison des rubéfactions expérimentale et numérique pour les parois droite et gauche. La couleur rouge correspond à la rubéfaction, le gris foncé au dépôt de suie et le vert à l'écaillage. a - Paroi gauche expérimentale. b - Paroi gauche simulée. c - Paroi droite expérimentale. d - Paroi droite simulée.

Les plaques placées aux points S1 et S2 (Fig. 3.4) ont permis d'évaluer l'ordre de grandeur du dépôt de suie sur les parois. Le tableau 3.3 compare la simulation avec la mesure et montre une discordance entre les deux.

Emplacements	Masse mesurée (mg)	Masse simulée (mg)
S1	0,84	0,72
S2	3,09	0,54

Tableau 3.3 – Masse moyenne de suie déposée sur les plaques positionnées en S1 et S2.

En S1, l'écart entre l'expérimentation et la simulation est d'environ 15%. Mais en S2, l'écart est extrêmement important. La valeur simulée en S2 est inférieure à la valeur en S1 alors que l'inverse se produit pour les mesures, la valeur expérimentale en S2 est supérieure à celle en S1. Notons que la mesure peut sembler contradictoire puisque la concentration de suie est pourtant plus faible en S2 qu'en S1. Mais le processus de thermophorèse (§2.1.4) dépend aussi du gradient de température qui a pu être différent aux deux positions. Les mesures effectuées pendant les trois feux attestent de la difficulté à mesurer le dépôt de suie dans de telles conditions. En S1, la moyenne des neuf mesures effectuées est d'environ 1,4 mg tandis que l'écart-type est de 1,05 mg. En S2, la moyenne des masses de particules déposés est d'environ 2,1 mg pour un écart-type d'environ 1 mg. L'écart-type est systématiquement du même ordre de grandeur que la moyenne. La dispersion des mesures étant importante, l'expérimentation permet uniquement l'estimation d'un ordre de grandeur. La masse de suie déposée aux deux points est de l'ordre du milligramme. Ainsi, la simulation est assez proche des expérimentations puisqu'elle fournit également des masses de l'ordre du milligramme. Néanmoins, la simulation semble sous-estimer le dépôt de suie en S2 alors que la concentration en suie en ce point était surestimée par la simulation. L'impossibilité de simuler correctement la quantité de suie en ce point provient sans doute principalement de la mauvaise estimation du gradient de température. La partie

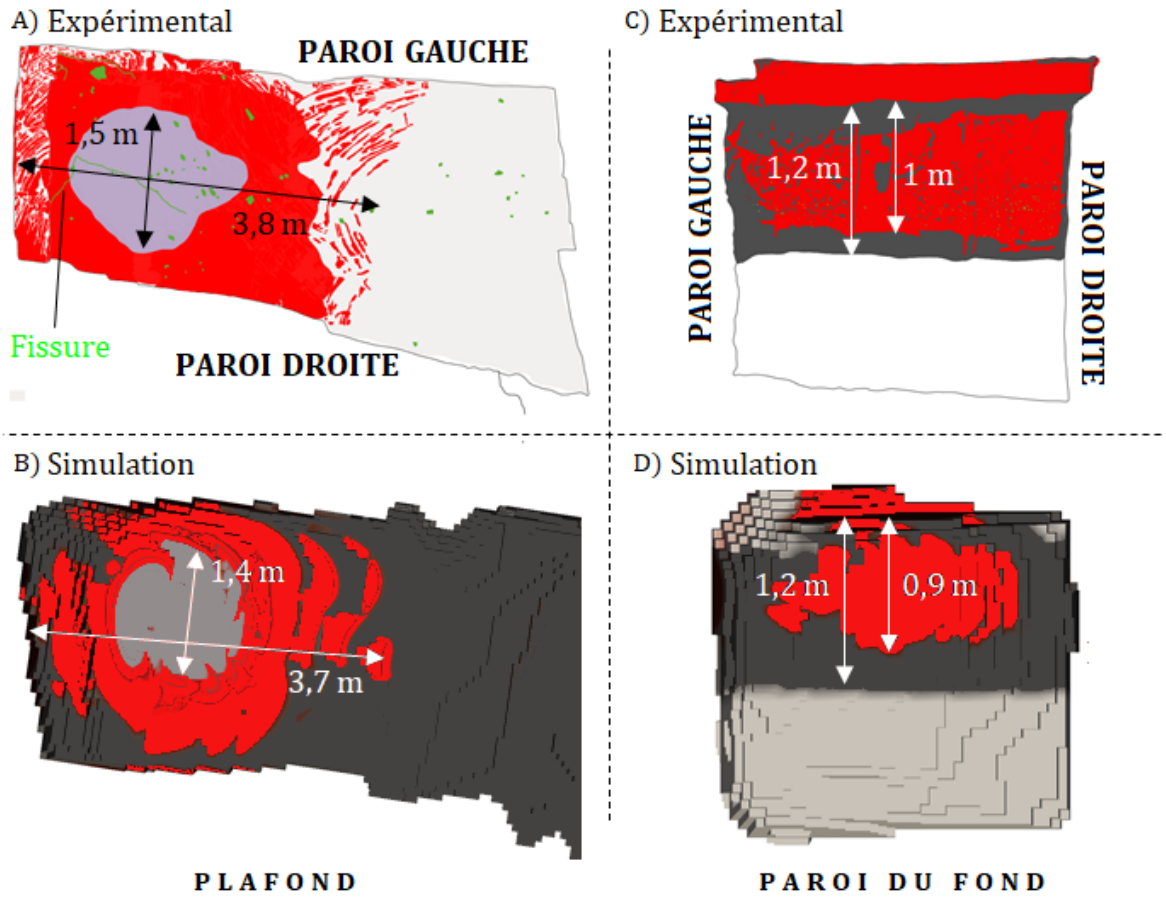

Figure 3.33 – Comparaison des rubéfactions expérimentale et numérique pour la paroi du fond et le plafond. La couleur rouge correspond à la rubéfaction, le gris clair à la coloration grise, le gris foncé au dépôt de suie et le vert à l'écaillage. a - Plafond expérimental. b - Plafond simulé. c - Paroi du fond expérimentale. d - Paroi du fond simulée.

2.3.1 expose la modélisation du transfert thermique aux parois. Cette modélisation, si elle permet de simplifier la simulation et réduire le temps de calcul, ne peut être aussi précise qu'un calcul sur un maillage très raffiné proche des parois. Ainsi, l'estimation grossière du gradient de température empêche la précision de la simulation du dépôt de suie. La distribution spatiale du dépôt de suie est donc bien simulée mais l'estimation quantitative est quant à elle erronée. Ce point n'est pas contraignant dans l'étude puisque la masse des suies déposées sur les parois de la grotte Chauvet-Pont d'Arc est inconnue et a pu décroître au cours du temps. De plus, le temps, qui a sûrement dégradé ces dépôts, empêche toute tentative d'acquisition de cette information. Seules les limites géométriques des dépôts de suie sont donc intéressantes pour ce mémoire.

3.3.2.2 Écaillage

Deux simulations numériques sont menées avec le code Cast3m dans les plans xOz (Fig. 3.34) et yOz (Fig. 3.35) où O est le centre du foyer. L'écaillage étant considéré comme un processus de flambement thermique (§1.6.2), l'étude se concentre uniquement sur les contraintes en compression le long des parois. D'après des mesures sur des échantillons de calcaire rupélien [128], la résistance en compression de cette roche est d'environ 1,96 MPa à température ambiante et de 2,33 MPa vers 300^oC. En considérant que les températures dépassent peu 300^oC dans la roche, toutes les zones bleues foncées sur les figures 3.34 et 3.35 subissent une contrainte supérieure à la résistance en compression. Il est donc probable que le calcaire s'écaille en surface. Le risque d'écaillage reste conséquent jusqu'à l'intersection des deux galeries de la carrière même si la production de fissure est davantage susceptible

de se produire au voisinage du feu.

Notons que les simulations, étant en deux dimensions, ne considèrent qu'un état de contrainte uni-axial. Cependant, le matériau proche de la surface subit des contraintes mécaniques bi-axiales comme le montrent les figures 3.34 et 3.35. De plus, les contraintes sont déduites d'un modèle thermo-élastique. Ce dernier ne prend donc pas en compte l'endommagement du matériau et les redistributions de contraintes associées. Le modèle surestime donc vraisemblablement le niveau de contrainte et ses résultats sont donc qualitatifs.

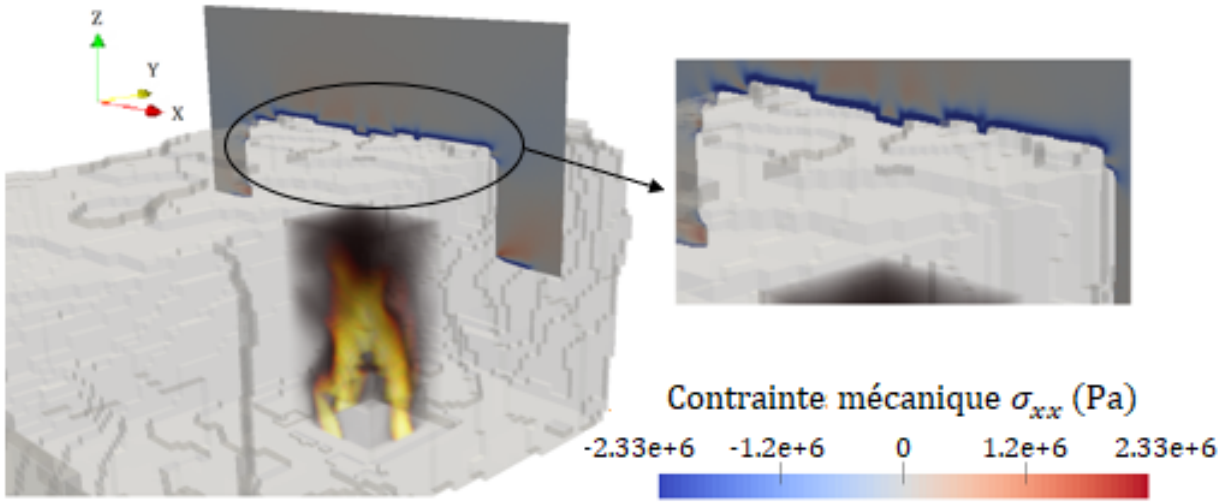

Figure 3.34 – Contrainte mécanique σ_{xx} 45 minutes après le début de la combustion. La simulation est effectuée par Cast3m dans le plan xOz (O étant le centre du foyer).

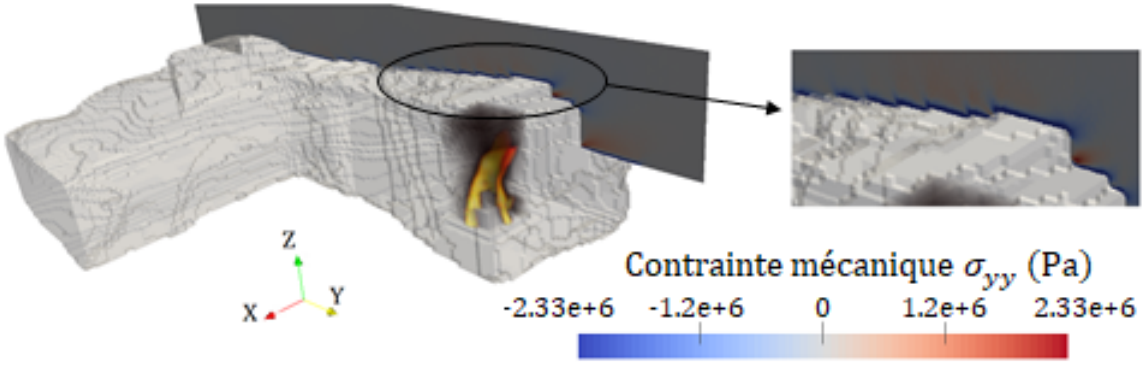

Figure 3.35 – Contrainte mécanique σ_{yy} 45 minutes après le début de la combustion. La simulation est effectuée par Cast3m dans le plan yOz (O étant le centre du foyer).

Une analyse plus fine est menée en différents points du plafond à plusieurs profondeurs dans les deux plans. Les profondeurs étudiées sont 0,2 mm (abrégé en surface sur les figures), 1 cm et 3 cm. La position des points analysés est indiquée sur la figure 3.31. Les contraintes en compression durant toute la durée du feu sont présentées sur les figures 3.36, 3.37 et 3.38.

En surface, le calcaire subit des contraintes en compression supérieures à la résistance en compression pour tous les points étudiés. Ce résultat est en accord avec la grande surface du plafond de la carrière souffrant d'écaillage (Fig. 3.32 & 3.33). Plus en profondeur, à 1 cm de la surface, la contrainte reste élevée et dépasse encore la limite de rupture dans la majorité des points étudiés. Les points E' et F' semblent correspondre à l'extension maximale des contraintes dépassant la résistance en compression. Au-delà, des écaillages superficiels peuvent tout de même se produire d'après l'analyse numérique. À

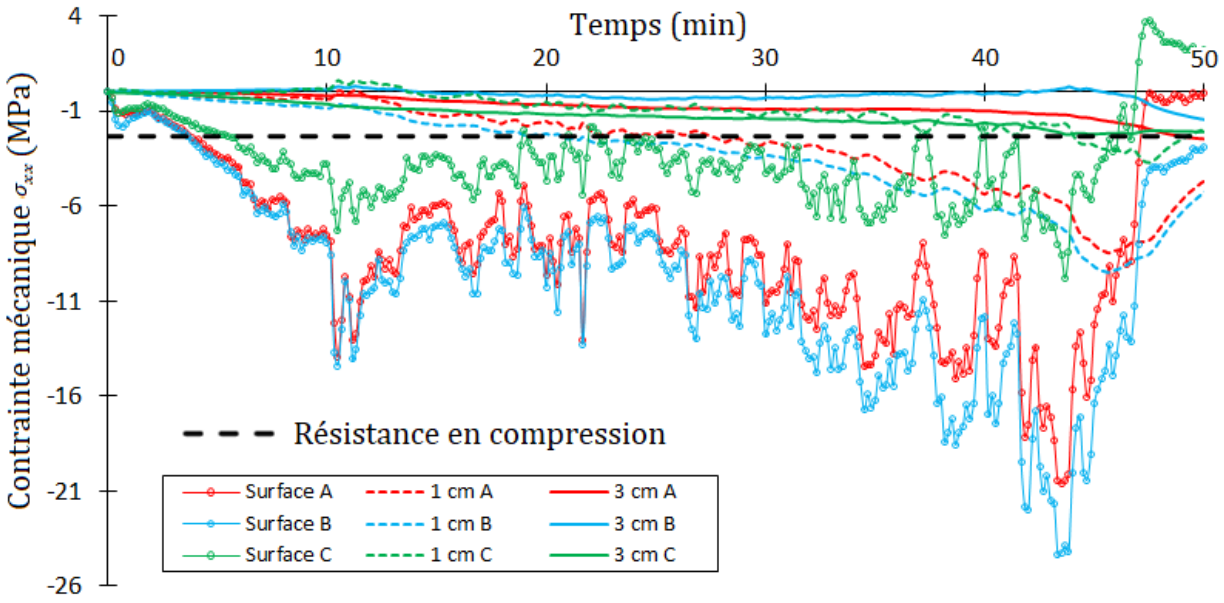

Figure 3.36 – Évolution temporelle de la contrainte mécanique σ_{xx} dans les parois de la carrière pour plusieurs profondeurs (surface, 1 cm et 3 cm). Les emplacements des points A, B et C sont définis sur la figure 3.31.

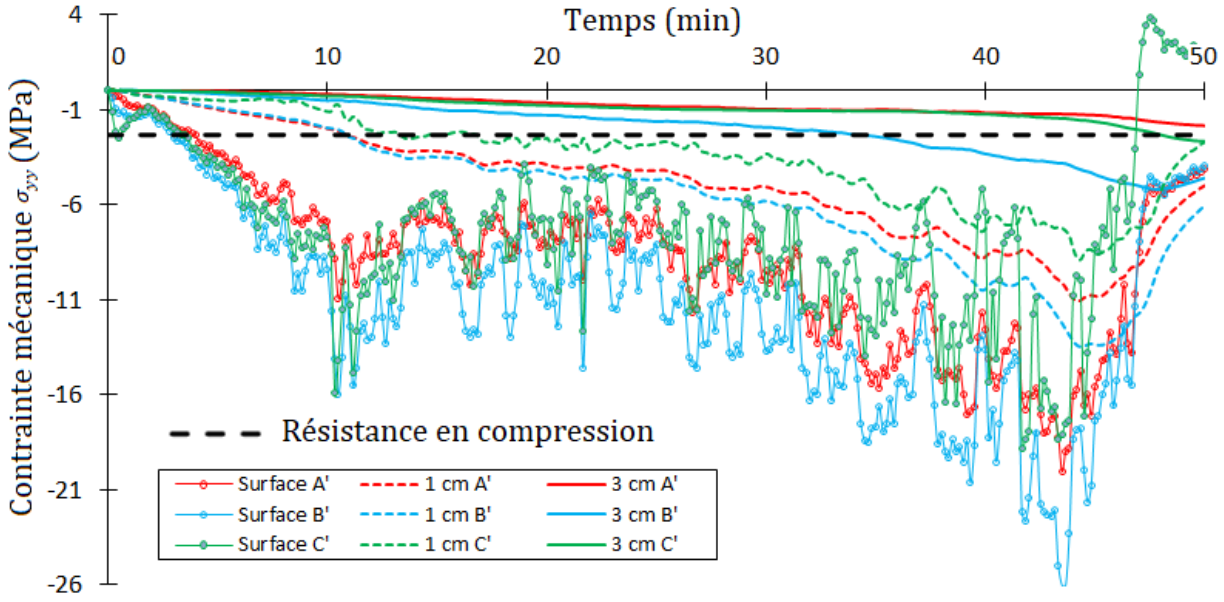

Figure 3.37 – Évolution temporelle de la contrainte mécanique σ_{yy} dans les parois de la carrière pour plusieurs profondeurs (surface, 1 cm et 3 cm). Les emplacements des points A', B' et C' sont définis sur la figure 3.31.

3 cm de profondeur, les contraintes en compression s'amenuisent et deviennent insignifiantes pratiquement partout excepté derrière le feu en B' à la fin de la combustion. En effet, la courbe en B' (Fig. 3.37) excède 4 MPa ce qui est supérieur à la valeur atteinte au droit du foyer. Il semble que le confinement au fond de la carrière joue un rôle d'entrave à la dilatation de la roche. La figure 3.36 démontre que le côté gauche est plus susceptible d'écailler que le côté droit. L'origine de cette dissymétrie est la même que celle affectant le décalage du gris au plafond (Fig. 3.33.b).

Les compressions selon X et Y n'ont pas des comportements symétriques. En effet, la contrainte en compression selon X est maximale à l'aplomb du foyer en B (Fig. 3.36) tandis que celle selon Y est plus

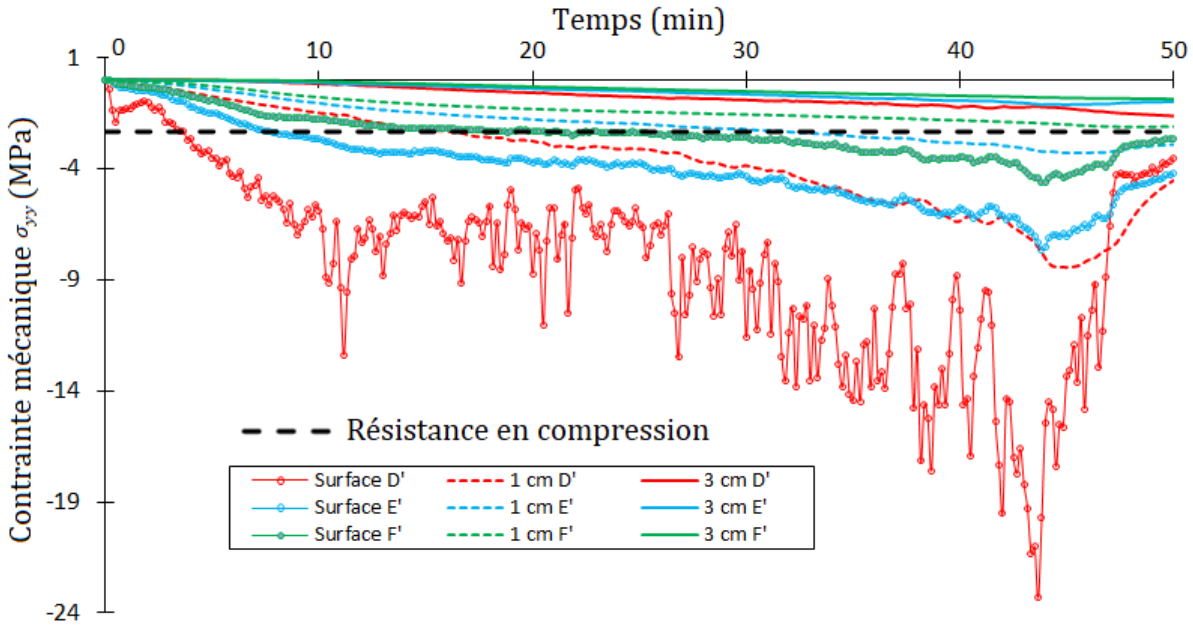

Figure 3.38 – Évolution temporelle de la contrainte mécanique σ_{yy} dans les parois de la carrière pour plusieurs profondeurs (surface, 1 cm et 3 cm). Les emplacements des points D', E' et F' sont définis sur la figure 3.31.

importante autour de l'axe central du foyer en A', B' et D' (Fig. 3.37 & 3.38). Concernant A' et B', l'argument précédent du confinement du fond de la carrière peut s'appliquer. Pour D', la valeur élevée provient des forts gradients de température autour des flammes. En effet, la différence de température entre les gaz dans la flamme et à l'extérieur de celle-ci est conséquente. Ainsi, le calcaire se dilate de manière hétérogène et la roche à l'extérieur des flammes bloque la dilatation importante de la roche léchée par la flamme. Il en résulte à l'interface de fortes contraintes en compression. Cet argument est aussi valable en B' où cet effet et celui du confinement se cumulent.

D'après les simulations, les zones ayant nettement dépassé la résistance en compression se situent à gauche du feu, en B à l'aplomb des flammes, autour des flammes en B' et D' et dans une moindre mesure la zone à droite du foyer. Les écaillages devraient donc être prépondérants à gauche du foyer et autour des flammes. Expérimentalement, l'écaillage s'est produit majoritairement sur la gauche du foyer même si l'écaillage sur la droite du plafond et vers D' n'est pas négligeable. Le modèle est donc globalement en accord avec les observations *in situ*.

La surface écaillée du plafond est assez importante et se prolonge jusqu'à l'intersection entre les deux galeries. Cependant, quasiment aucun écaillage n'est survenu derrière le foyer alors que la contrainte y est maximale. Cela ne met pas en défaut la simulation puisque la roche a dû subir une forte compression dans cette zone. L'écart peut provenir de la présence d'une fissure traversant le plafond (Fig. 3.33.a). Son extension pendant les feux a pu permettre la libération de suffisamment d'énergie pour éviter l'apparition d'écaillage.

La modélisation thermo-mécanique est donc qualitativement correcte et en accord avec les observations expérimentales. Globalement, la modélisation du feu et de ses impacts au voisinage du foyer est cohérente avec les expérimentations menées dans la carrière de Lugasson. De plus, la modélisation de deux couches distinctes autorise l'évaluation des dangers dans l'ensemble de la géométrie. C'est l'objet de la section suivante.

3.4 Évaluation des dangers

Selon la section 2.1.3, les dangers dans un milieu confiné abritant un feu proviennent de trois origines : toxicité, température et rayonnement. Les dangers sont calculés à partir du concept de FED (*Fractional Effective Dose*) détaillé dans la section 2.1.3. Puisque les dangers causés par la forte température et le rayonnement sont liés, leur estimation est réalisée par une même FED. Ces deux FED sont calculées pour deux types d'individu en prévision de l'application de la modélisation à la grotte Chauvet-Pont d'Arc. L'un correspond à un observateur séjournant durant toute la durée du feu dans la carrière et le second est un porteur de fagots alimentant le foyer.

3.4.1 Observateur

La FED relative à la toxicité des gaz pour un observateur restant dans la carrière durant toute la combustion est présentée sur la figure 3.39.

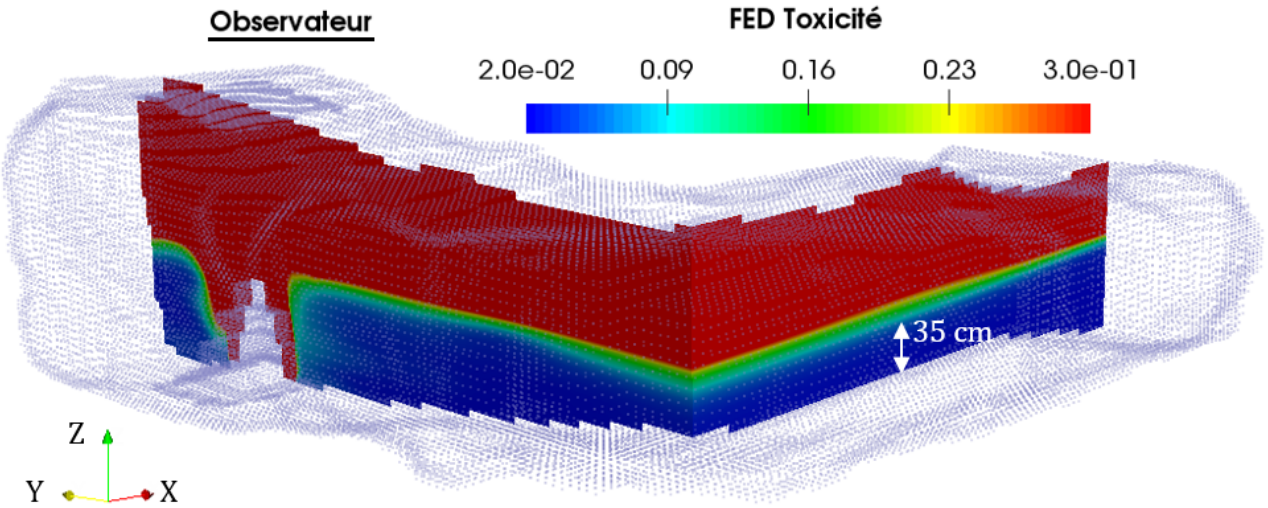

Figure 3.39 – FED relative à la toxicité pour un observateur séjournant dans la carrière pendant toute la combustion.

En rouge, la FED vaut 0,3 ce qui signifie que dans cette zone, le taux de mortalité est d'environ 11%. Le danger n'est absent qu'au ras du sol où la FED reste proche de 0. La seule possibilité pour ne pas s'intoxiquer dans l'environnement de la carrière est donc de s'allonger. Notons que les deux galeries sont aussi hostiles l'une que l'autre du point de vue des gaz toxiques.

La figure 3.40 présente la FED pour un observateur subissant le rayonnement et les fortes températures.

La couleur rouge indique ici une FED supérieure à 1 synonyme d'un taux de mortalité d'au moins 50%. En réalité, la valeur de la FED est bien supérieure à 1 dans la couche chaude et la mort est instantanée. Ici, même au sol la FED est supérieure à 0,3. Cette valeur indique donc que la totalité de la carrière est dangereuse pendant toute la combustion. Une personne allongée risque ainsi des brûlures si elle reste trop longtemps dans cet environnement. L'intervention des pompiers était donc légitime durant l'opération.

Les différents processus influencent la sécurité du milieu selon différents degrés. Le rayonnement et la température sont en effet plus contraignants que la toxicité d'après les deux analyses précédentes. La circulation des gaz dans la géométrie permet l'évacuation des gaz toxiques par la couche chaude vers l'extérieur. Ces gaz n'envahissent donc pas les zones inférieures de la cavité où un humain pourrait se placer. Puisque seule cette zone est *a priori* viable pour un individu, les gaz restent plutôt inoffensifs par rapport aux autres dangers. Le danger principal provient donc exclusivement du rayonnement qui

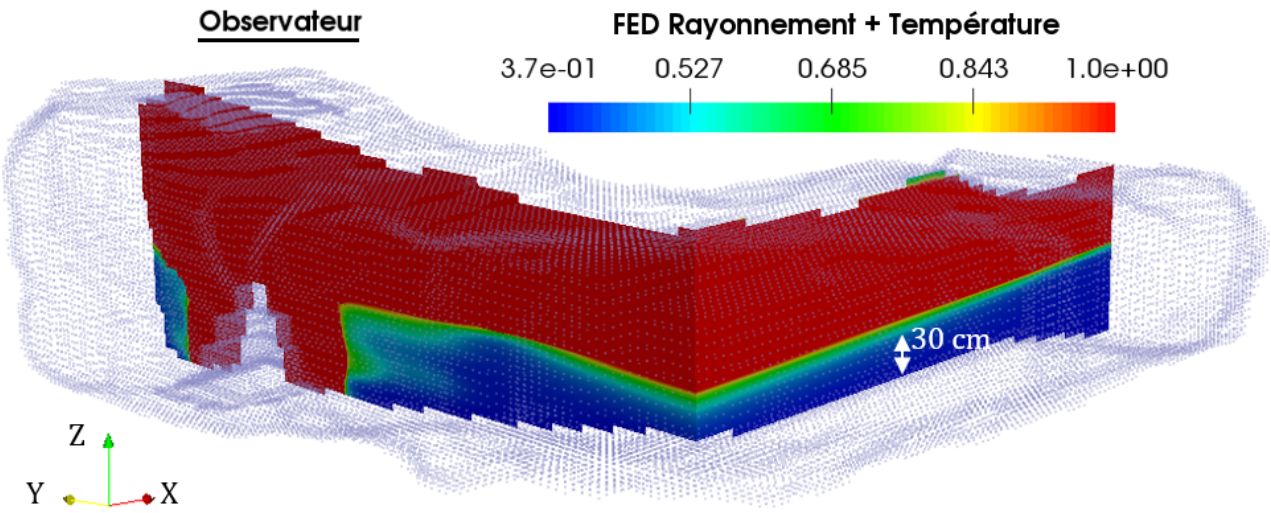

Figure 3.40 – FED relative au rayonnement et à la température pour un observateur séjournant dans la carrière pendant toute la combustion.

atteint aussi les zones froides. Celui-ci empêche aussi le séjour prolongé d'une personne en couche froide. Néanmoins, loin du feu, la toxicité des gaz pourrait redevenir le principal danger dans un lieu confiné dont l'accès à l'extérieur est fortement distant comme la grotte Chauvet-Pont d'Arc.

3.4.2 Porteur de fagots

Le calcul de la FED est effectué pour les porteurs de fagots selon la méthode détaillée au paragraphe 2.1.3.3. Les figures 3.41 et 3.42 présentent respectivement les FED pour la toxicité et le rayonnement ainsi que la température 43 minutes après le début de la combustion. Ce temps est choisi puisqu'il correspond aux températures les plus oppressives.

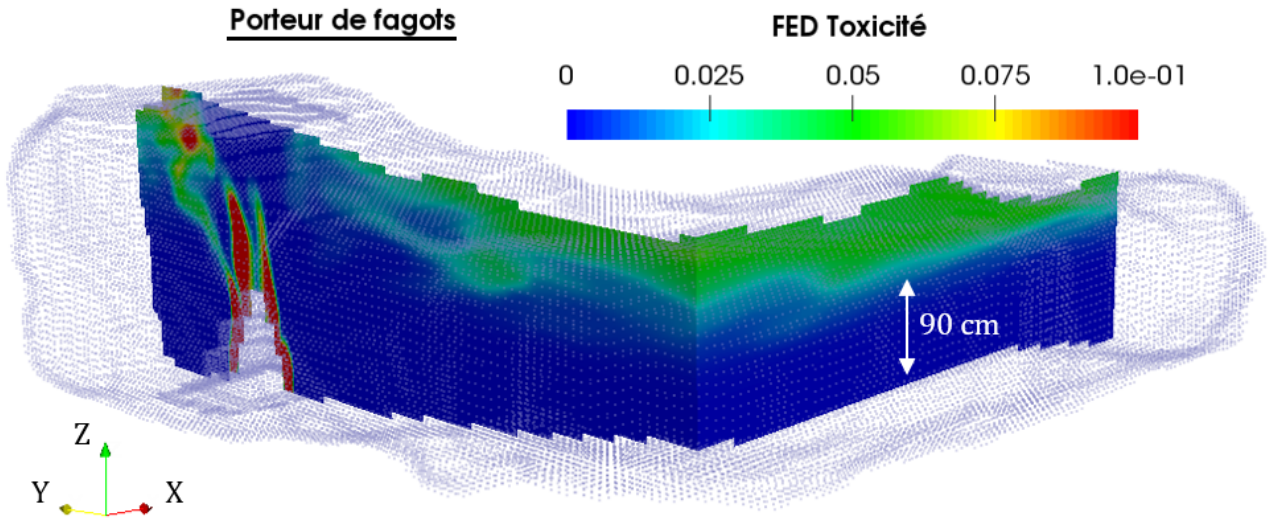

Figure 3.41 – FED relative à la toxicité pour un porteur alimentant le foyer 43 minutes après l'allumage.

La toxicité n'a aucun effet sur le porteur. Seule la couche chaude est affectée et il est évident que les températures élevées de la couche chaude sont rédhibitoires. Le transport en couche froide est donc autorisé par la toxicité des gaz.

Le rayonnement est plus répressif mais comme attendu, la zone permettant l'acheminement est

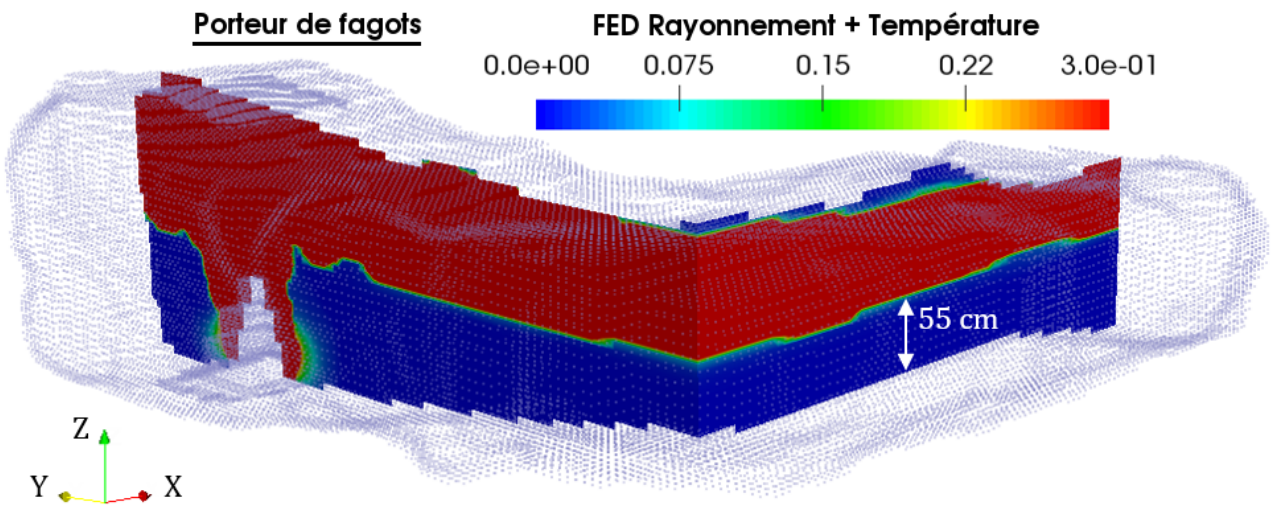

Figure 3.42 – FED relative au rayonnement et à la température pour un porteur alimentant le foyer 43 minutes après l'allumage.

moins restrictive. Il est ainsi possible d'après la simulation d'alimenter le foyer même si le transport doit se faire très proche du sol, sans doute accroupi. Malgré le confinement et les températures élevées, la couche froide est donc suffisamment peu affectée pour permettre le passage furtif d'un individu. Le rayonnement des flammes reste élevé à proximité du foyer donc l'alimentation ne pouvait se faire qu'en projetant les fagots de loin, ne garantissant pas la conservation de la forme en tipi du foyer. L'intervention des pompiers pour le transport des fagots était donc justifiée pour des raisons de sécurité.

Chapitre 4

Application à la grotte Chauvet-Pont d'Arc

La modélisation mise en place à partir des chapitres 1 et 2, puis validée sur les expérimentations du chapitre 3, est appliquée aux thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros. Afin de réaliser cette étude, une modélisation préalable du débit calorifique des foyers de pin sylvestre est d'abord élaborée. Une revue des hypothèses intrinsèques à la modélisation et à la description des phénomènes est aussi proposée. Chaque zone altérée de la Galerie des Mégacéros est ensuite individuellement traitée. Les constatations globales qui découlent de cette étude sont détaillées dans une dernière partie.

4.1 Méthodologie de l'étude

L'étude menée dans ce chapitre, dont l'objectif est de caractériser les feux qui ont été réalisés dans la Galerie des Mégacéros, repose sur une méthodologie qui est exposée ci-après.

Les seules marques encore observables aujourd'hui dans la grotte sont les changements de couleur (rouge et gris), les écaillages et les dépôts de suie. L'analyse présentée dans ce chapitre se fonde sur ces quatre indices. La recherche des caractéristiques des foyers (quantité de combustible, mode d'alimentation, emplacement, nombre) de la Galerie des Mégacéros se base sur la simulation numérique. L'approche consiste à simuler plusieurs scénarios dans les zones altérées jusqu'à reproduire numériquement les thermo-altérations visibles sur le terrain. Le ou les scénarios provoquant les thermo-altérations les plus proches de celles observables sont retenus. Les simulations sont effectuées dans un maillage de la géométrie de la grotte Chauvet-Pont d'Arc (Fig. 4.1).

Le maillage évoluera selon l'emplacement des foyers simulés dû à un raffinement de la zone sensible mais il sera composé systématiquement d'environ 700 000 mailles. Une combustion d'une vingtaine de minutes sur 12×8 cœurs Intel Xeon E5-4640 2.4 GHz (calculateur UV2000 de 2013) requiert environ 5 jours. Le même type de combustion sur 10×24 cœurs Intel Haswell-EP Xeon 12-Cores E5-2690 V3 2.6 GHz (Bullx DLC) demande un peu moins de 3 jours de temps de simulation. L'accès à de telles ressources est nécessairement limité par le coût financier qu'elles représentent. Par exemple, un tel calcul sur les 240 processeurs du supercalculateur Bull - Occigen pendant 3 jours coûte, d'après le CINES, environ 550 €. Ainsi, il n'est pas envisageable d'effectuer un nombre inconsidéré de simulations. Une étude purement statistique consistant à faire varier sans considérations préalables la masse, le diamètre, la hauteur et la position du foyer n'est pas possible.

Dans ce chapitre, parmi les simulations réalisées, seul l'emplacement impliquant les thermo-altérations ressemblant le plus à celles observables *in situ* sera présenté. Une étude sur la masse du foyer correspondant sera ensuite effectuée. Elle portera sur les changements de coloration induits par la combustion des foyers de masses variables. Puis, une analyse des contraintes mécaniques engendrées par la combustion du foyer le plus probable d'après l'étape relative aux changements de coloration sera conduite. Elle permettra de vérifier que la combustion de la quantité retenue pourrait générer un écaillage analogue à celui *in situ*. Enfin, les dépôts de suie reproduits numériquement seront indiqués pour le foyer le plus probable. Les dépôts de suie actuels souffrant d'incertitudes liées à la conservation, aucune étude

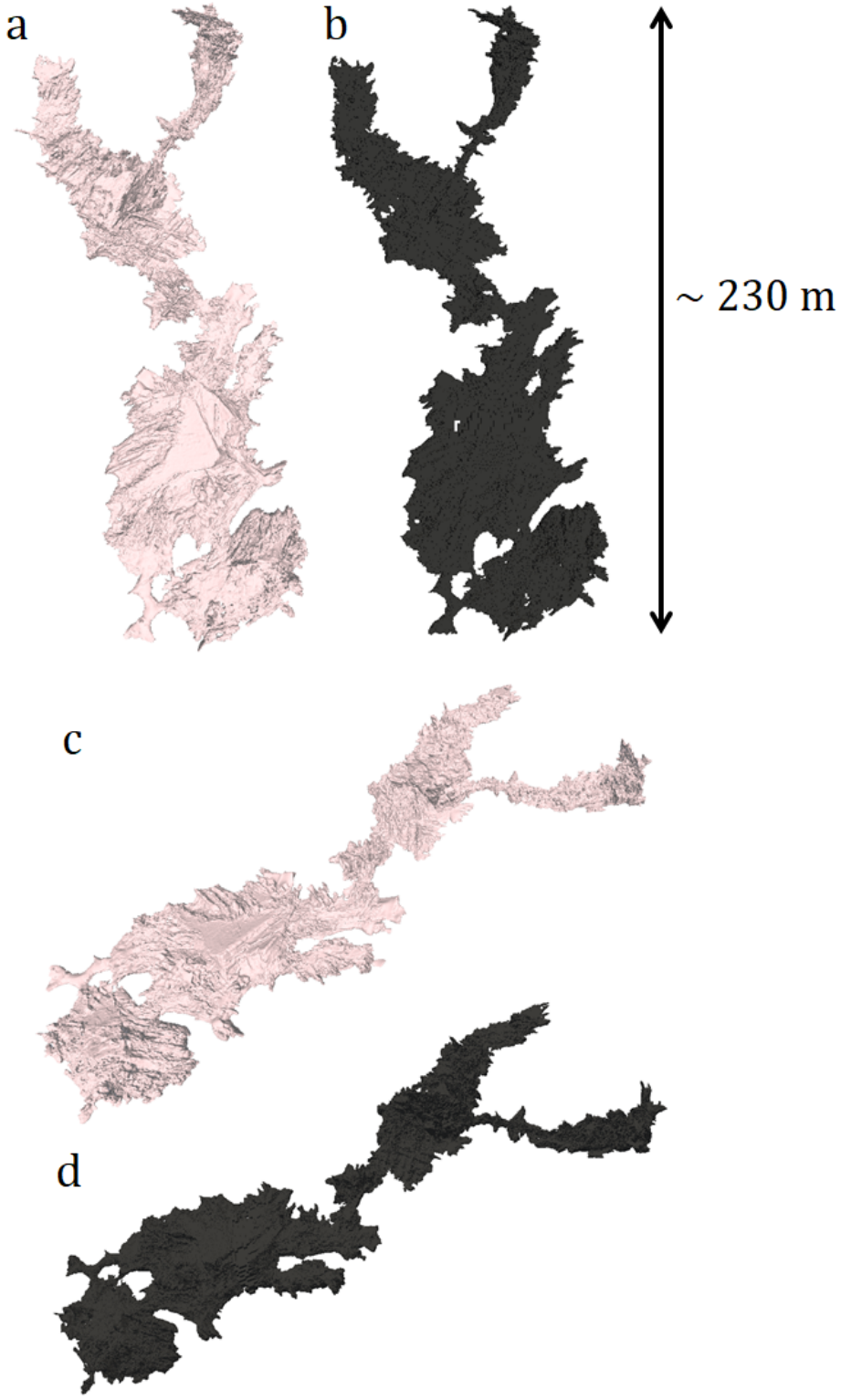

Figure 4.1 – a - Lasergrammétrie de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de dessus (Ministère de la Culture DRAC Auvergne – Rhônes-Alpes & P. Mora, Archéotransfert). b - Maillage de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de dessus réalisée avec la version 1.1.2 de l'outil cfMesh [10]. c - Lasergrammétrie de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de trois-quarts. d - Maillage de la grotte Chauvet-Pont d'Arc vue de trois-quarts.

comparative avec les dépôts observables n'est effectuée.

4.2 Hypothèses de l'étude

Cette section rappelle les hypothèses et les incertitudes affectant d'une part les données relatives aux thermo-altérations et d'autre part la modélisation.

4.2.1 Hypothèses relatives aux thermo-altérations

Les quatre indices sur lesquels se base l'étude ne sont pas exempts d'incertitudes. Les dépôts de suie actuels ne ressemblent vraisemblablement pas aux dépôts observables immédiatement après les feux. En effet, le temps a sûrement dû affecter la quantité de particules couvrant les parois. Pour cette raison, la suie ne sera pas un indice déterminant dans l'analyse. Concernant l'écaillage, celui-ci est un processus toujours mal compris par la communauté scientifique (§1.6.2). Seules les contraintes mécaniques issues des dilatations thermiques du calcaire sont considérées pour en rendre compte. L'étude ne tient pas compte des processus thermo-hydriques. De plus, le modèle mathématique est basé sur l'hypothèse de linéarité du matériau. L'endommagement du matériau n'est donc pas simulé tout comme la répartition des contraintes associées. L'analyse sur l'écaillage sera donc uniquement qualitatif.

Le critère de changement de couleur est aussi affecté par des incertitudes expérimentales. La rubéfaction est supposée se produire après 10 minutes à 250^oC d'après l'étude bibliographique menée au paragraphe 1.6.1.1. Il est établi que la réaction ne peut se produire avant cette température mais la limite d'apparition de la coloration pourrait correspondre à des températures plus élevées. Cette caractéristique a été observée lors d'une expérimentation menée dans la carrière de Lugasson mettant en jeu un échantillon de rupélien pré-séché en laboratoire et le massif rocheux de la cavité. Un panneau radiant, proche de l'échantillon et parallèle à la paroi, a servi à chauffer les deux roches. Un thermocouple au contact de la surface du massif a permis de réguler la consigne en température (Fig. 4.2). Toutes les cinq minutes, le panneau fut retiré brièvement permettant la prise de photo dans le visible et une photo dans l'infrarouge.

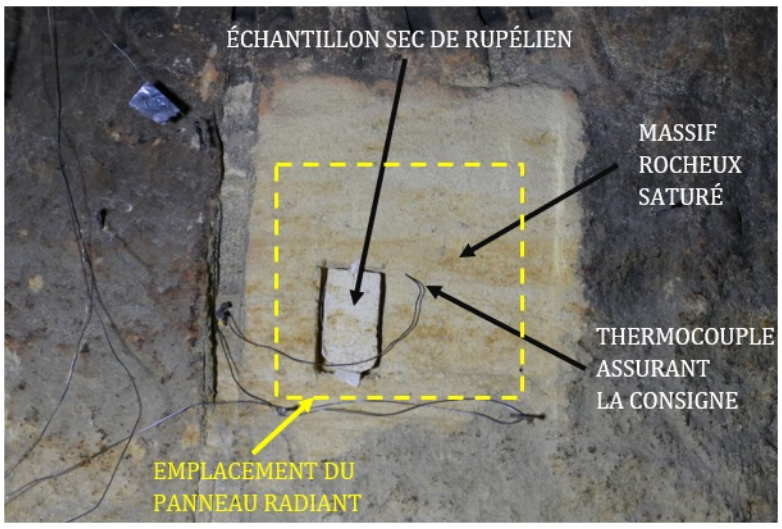

Figure 4.2 – Dispositif expérimental permettant les chauffes isochrones d'un échantillon calcaire sec déconnecté de toute arrivée d'eau et du massif saturé en eau (C. Ferrier).

La consigne fut imposée à 260^oC par l'intermédiaire du thermocouple afin d'empêcher une décroissance de la température en deçà de 245^oC lors des régulations de la température par la machine. La figure 4.3 présente les changements de coloration de la zone chauffée après différentes durées. La figure 4.3.a révèle une rubéfaction d'une partie de l'échantillon sec après 5 minutes de chauffe tandis que la paroi du massif ne présente aucune marque. Cette modification intervient avant les 10 minutes

normalement requises d'après le critère de rubéfaction. Cette particularité s'explique par la mesure de la température effectuée par le capteur placé contre la surface du massif saturé en eau. L'évaporation nécessite une énergie conséquente que l'échantillon sec accumule à travers sa montée en température. L'échantillon sec n'est donc pas à 250^oC malgré la consigne. Ainsi, à une température plus importante, la rubéfaction s'opère plus rapidement. Cela est cohérent avec la recherche bibliographique réalisée au paragraphe 1.6.1.1 qui révèle une cinétique dépendante de la température. Après 10 et 20 minutes, aucune rubéfaction ne marque intensément la paroi de la carrière. Après une vingtaine de minutes, la rubéfaction s'accentue aussi sur la paroi jusqu'à couvrir après 50 minutes la surface observable sur la figure 4.3.d. Cet essai montre sans doute que le critère de 250^oC pendant 10 minutes peut s'avérer trop souple ou que la température de surface n'était pas homogène à 250^oC due aux imprécisions expérimentales.

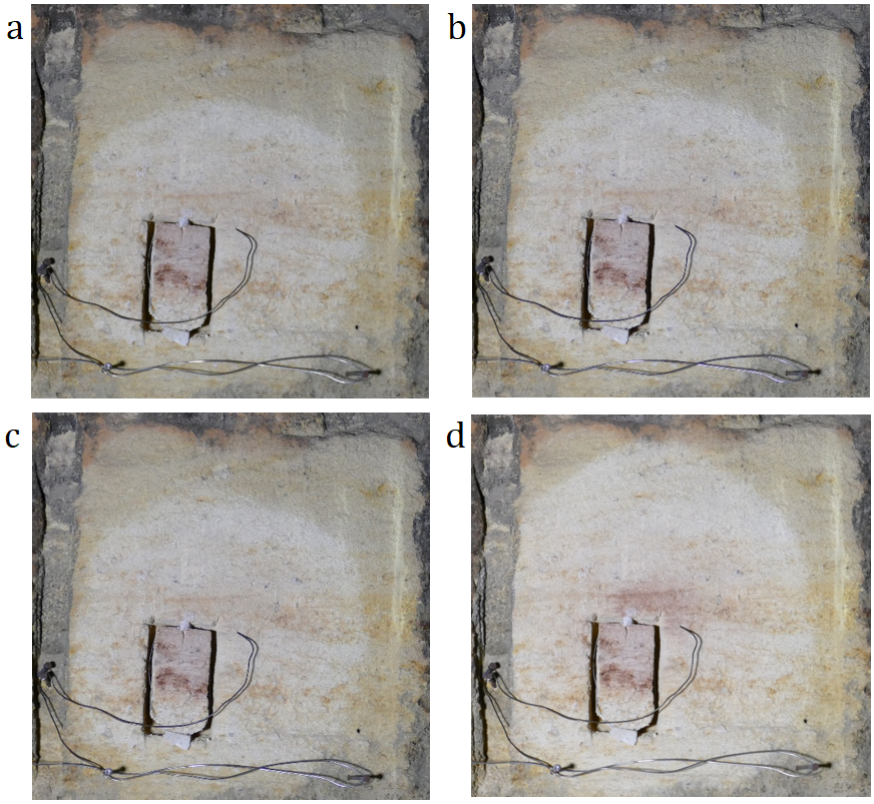

Figure 4.3 – État de la paroi et de l'échantillon ayant subi une chauffe à 260^oC (C. Ferrier). a - Après 5 minutes de chauffe. b - Après 10 minutes de chauffe. c - Après 20 minutes de chauffe. d - Après 50 minutes de chauffe.

Afin de vérifier que la consigne de 260^oC était tangente à la température minimale permettant la transformation goethite $\Rightarrow$ hématite, une seconde consigne de 280^oC fut appliquée. La figure 4.4 montre que les changements de coloration 5 minutes après l'application de la consigne correspondent à une extension de la rubéfaction. La chauffe de 50 minutes correspondant à la première consigne a probablement initié la transformation chimique. Puis, 5 minutes de chauffe à une température plus importante ont suffi à rendre visible la rubéfaction sur des surfaces où elle ne l'était pas.

La figure 4.5 compare le champ de température détecté par la caméra infrarouge pendant la chauffe à 260^oC et celle à 280^oC. Les photographies montrent que la température de surface n'était pas à 250^oC partout.

La température ne dépasse les 250^oC que très localement ce qui pourrait expliquer l'absence ponctuelle de rubéfaction. Les zones rubéfiées correspondent approximativement aux surfaces dont la température excède 250^oC. Cette étude expérimentale montre ainsi que la rubéfaction s'initie à une température proche de 250^oC. Une légère incertitude existe néanmoins autour du critère de 250^oC pendant 10 minutes. Un critère de 280^oC pendant 10 minutes sera donc proposé dans les calculs de la partie

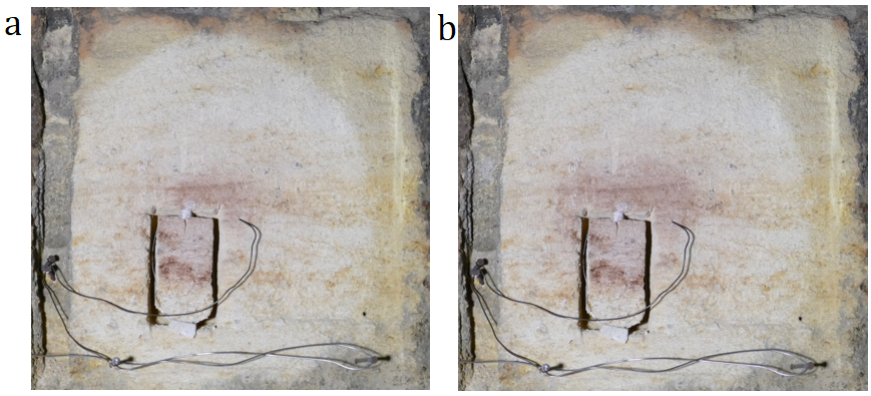

Figure 4.4 – État de la paroi et de l'échantillon (C. Ferrier). a - Après 50 minutes de chauffe sous une consigne de 250^oC. b - Après 50 minutes de chauffe sous une consigne de 250^oC et 5 minutes sous une consigne de 270^oC.

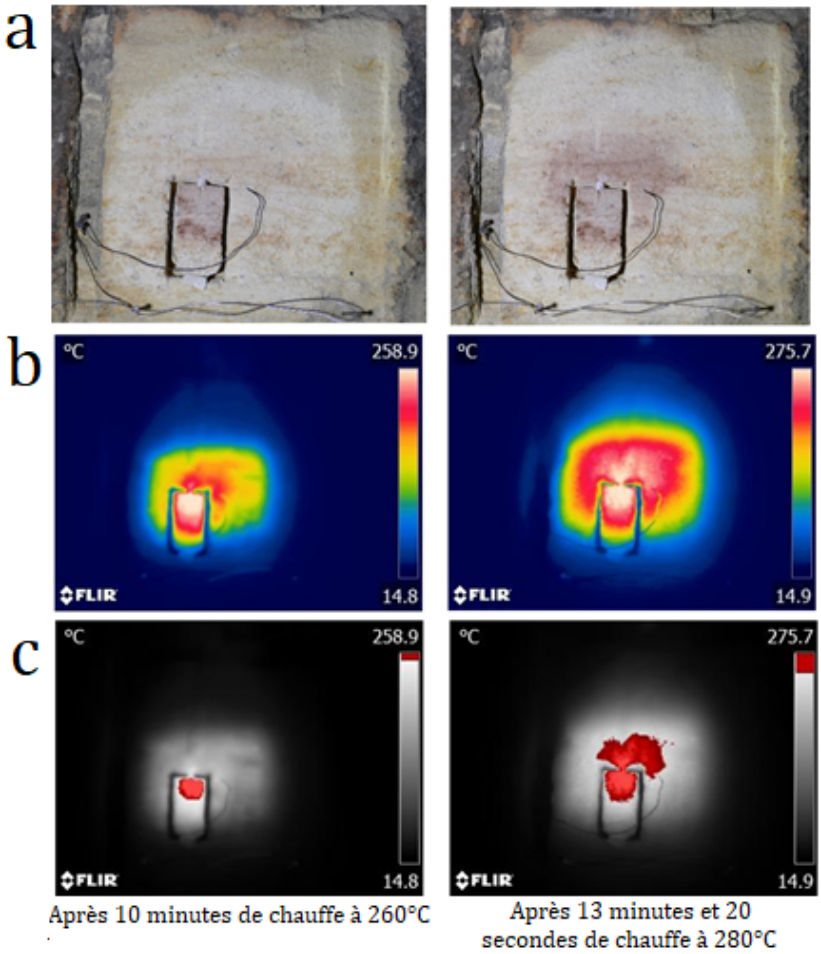

Figure 4.5 – a - Photographies dans le domaine visible (C. Ferrier). b - Photographies dans le domaine infrarouge (J.-C. Mindeguia). c - Champ de température montrant les surfaces dont la température excède 250^oC (en rouge).

suivante afin de tenir compte des incertitudes quant à la cinétique de la réaction. Le changement de couleur grise souffre *a priori* d'une plus grande incertitude puisque les mécanismes conduisant à cette altération sont encore peu connus. Le critère de 350^oC pendant 10 minutes pourrait ne pas être assez contraignant et une température supérieure à 350^oC pourrait être requise. Comme pour la rubéfaction,

le critère est étendu. Deux autres cas de figures sont proposés : 370^oC pendant 10 minutes et 400^oC pendant 10 minutes. Les critères seront numérotés dans l'exposé des résultats de la section suivante tels qu'indiqués dans le tableau 4.1.

Température (^oC)	Rouge	Gris
250^oC	Critère 1	
280^oC	Critère 2	
350^oC		Critère 1
370^oC		Critère 2
400^oC		Critère 3

Tableau 4.1 – Désignations des critères des changements de coloration dans la section des résultats.

Comme évoqué lors de l'analyse des résultats de l'essai, la teneur en eau du massif joue un rôle important dans la montée en température de la surface de la paroi. Ainsi, les changements de coloration sont affectés par la présence d'eau dans le calcaire rupélien. Verdet *et al.* [132] ont montré que les parois de la carrière de Lugasson étaient saturées en eau. Il est hautement probable que le calcaire de la grotte Chauvet-Pont d'Arc le soit également. Ce point est modélisé à travers un pic entre 100^oC et 110^oC ou 120^oC de la valeur de la capacité thermique du calcaire (voir Tab. 1.3 et Tab. 1.5). Toutefois, le massif contenant de l'eau dans la matrice poreuse saturée, de l'eau pourrait abonder à la paroi à la suite de l'évaporation de celle située à quelques centimètres de la surface. Ainsi, de l'énergie supplémentaire serait nécessaire pour évaporer l'eau venue du massif. Cet aspect est trop complexe pour être modélisé mais il est primordial d'estimer l'erreur correspondante. Pour ce faire, reprenons le cas test employé lors de l'étude traitant de la convergence en maillage du logiciel Cast3m (§3.2.1.2). Il s'agit d'une paroi en deux dimensions dont l'un des côtés est soumis à une température augmentant linéairement à 300^oC en 100 secondes puis restant constante jusqu'à 500 secondes. Le maillage est construit sur une première maille de 0,1 mm et une raison de 1,05. Le matériau correspond à du calcaire rupélien. La simulation est cependant effectuée en doublant le pic affectant la capacité thermique. Cette opération revient à imposer l'évaporation d'environ deux fois la quantité d'eau d'un matériau saturé sans alimentation du massif. La comparaison avec le cas classique est présentée sur la figure 4.6.

Les différences sont négligeables à 1 mm et à 3 cm de la surface. À 1 mm, la température est encore très élevée et l'évaporation de l'eau s'opère facilement tant la quantité d'énergie se diffusant dans la roche est conséquente. La quantité d'eau à évaporer influence donc peu la température sur le premier millimètre. À cette profondeur, le principal facteur est la température de surface. À 3 cm, la température n'a pas encore atteint les 100^oC. L'écart provient simplement de l'énergie qui a été perdue dans l'évaporation du surplus d'eau à des profondeurs plus faibles. Les plus gros écarts se rencontrent à des profondeurs de 5 mm et d'un centimètre. Un écart de 10% affecte la température à 5 mm tandis que l'erreur monte à 20% à 1 cm. Il s'agit des profondeurs où la température n'est plus suffisamment élevée pour évaporer facilement l'eau contenue dans les pores. La différence est donc importante entre 5 et 10 mm. L'erreur est toutefois négligeable sur les premiers millimètres. Or, la connaissance des processus s'opérant au sein du massif au-delà des premiers millimètres n'est pas nécessaire dans ce mémoire. Les changements de coloration ainsi que l'écaillage s'effectuent en effet sur les premiers millimètres. L'impact de la saturation du massif est donc bien pris en compte par l'ajout du pic dans la capacité thermique. De plus, le calcaire urgonien constituant la grotte Chauvet-Pont d'Arc est moins poreux que le calcaire rupélien (jusqu'à 40%). Donc les mouvements d'eau sont, *a priori*, plus lents dans le massif de la grotte que dans celui de la carrière. Il y aura donc nécessairement une arrivée d'eau plus faible aux parois de la grotte Chauvet-Pont d'Arc qu'à celles de la carrière. Cet aspect rend moindre l'impact de la circulation d'eau dans la roche.

4.2.2 Hypothèses de modélisation

La simulation de feux et de leurs impacts thermiques mêle différentes difficultés qui furent évoquées dans les chapitres précédents (estimation du HRR, transfert thermique aux parois, surestimation des transferts dans les gaz, etc). Il n'est pas possible d'occulter ces incertitudes qui sont liées aux limites

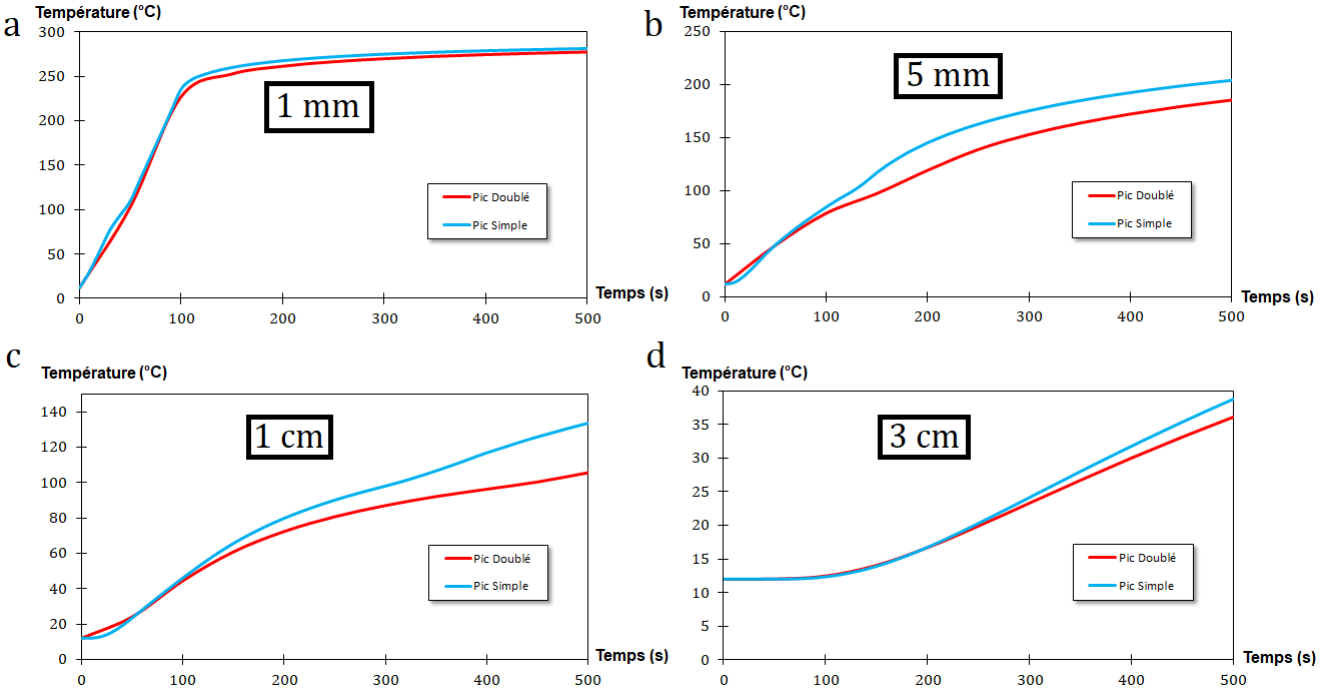

Figure 4.6 – Comparaison des températures simulées avec une capacité thermique prenant en compte le pic théorique et le pic doublé par rapport à la théorie. a - Comparaison à 1 mm de profondeur. b - Comparaison à 5 mm de profondeur. c - Comparaison à 1 cm de profondeur. d - Comparaison à 3 cm de profondeur.

de puissance des ordinateurs contemporains. L'utilisation de la modélisation construite durant cette thèse doit donc s'accompagner d'une évaluation de la marge d'erreur.

Le HRR subit une incertitude purement expérimentale puisque numériquement une précaution suffisante permet une modélisation convenable. En effet, il suffit de vérifier le critère de surface maximale développé au paragraphe 2.2. Cependant, d'autres paramètres liés à la construction du foyer peuvent influencer la puissance dégagée par le feu. De plus, des problèmes expérimentaux tels que ceux rencontrés pour le troisième feu des expérimentations du chapitre 3 (lent embrasement) sont difficilement prévisibles. Il est impossible de tester toutes les éventualités et nous devons supposer que les Aurignaciens maîtrisaient parfaitement leurs foyers. Il est supposé qu'ils n'utilisaient pas de bois humide et que leur structure était suffisamment stable pour ne pas totalement s'effondrer durant la combustion. À partir de cette hypothèse, un modèle permettant le calcul de la puissance dégagée par la combustion d'un foyer de masse donnée est développé dans la partie 4.3.1. Ce modèle reposera sur l'hypothèse supplémentaire d'un pouvoir calorifique constant au cours du temps (§1.2.1.2).

Le transfert thermique à la paroi constitue aussi une source d'imprécisions car la modélisation est basée sur des résultats expérimentaux. Le cas de la carrière (Chap. 3) a été traité par une corrélation empirique pour les plafonds plats (2.3.7) suivie d'un ajustement nécessaire à cause des imprécisions numériques (§2.3.1). Le plafond de la Galerie des Mégacéros est très irrégulier et comprend une multitude de coupoles. De plus, la plupart des feux sont excentrés et situés sous des parois inclinées. La formulation empirique (2.3.8) accompagnée des mêmes ajustements que pour le plafond plat pourra ainsi être utilisée le cas échéant. Enfin, dans le cadre de la simulation des feux dans la carrière de Lugasson, une modélisation du transfert aux parois verticales a aussi été mise en place (§2.3.1.2). Celle-ci correspond à l'extension du jet sous plafond aux parois verticales. Nous avons donc à disposition deux modélisations du transfert thermique au plafond et une pour les parois verticales. La paroi altérée par les flammes sera systématiquement modélisée par les deux modèles (plafonds plat et incliné) pour chaque feu (hormis le feu 6 pour des raisons détaillées dans la partie correspondante). Loin du foyer,

le transfert thermique sera modélisé par le modèle développé pour les parois verticales. Comme pour les critères de changement de couleur, le tableau 4.2 rassemble les désignations utilisées dans la suite pour chaque modélisation.

Modélisation	Désignation
Équation d'Alpert (2.3.7)	Modélisation 1
Équation d'Oka (2.3.8)	Modélisation 2
Paroi (§2.3.1.2)	Modélisation 3

Tableau 4.2 – Désignations des modélisations des transferts thermiques dans la section des résultats.

4.3 Modélisation de la géométrie et de la puissance des feux de pin sylvestre

Dans la simulation, le débit calorifique du feu est une condition limite. Aucun modèle de pyrolyse ne prédit en effet la cinétique et la puissance du feu. Le HRR (*Heat Release Rate* §1.2.1.2) doit donc être connu puisqu'il s'agit d'une donnée d'entrée. Il faut donc connaître *a priori* la manière dont brûle un foyer constitué de pin sylvestre. Or le comportement de la combustion dépend de la disposition du combustible, de la taille et des diamètres des branches, de la masse du foyer, de sa densité (nombre de branches par unité de volume), etc. Il est donc évident que toutes les configurations éventuelles ne pourront être testées. Seuls certains types de foyers cohérents par rapport aux données archéologiques seront considérés.

4.3.1 Caractéristiques du foyer

Certaines conclusions concernant les foyers de la Galerie des Mégacéros ont pu être déduites des marques observables sur ses parois. La figure 4.7 montre des thermo-altérations localisées sur la paroi gauche de l'entrée de la Galerie des Mégacéros, sur le Panneau du Rhinocéros. D'une part, elles sont réparties sur une surface restreinte. D'autre part, puisque le bas de la paroi n'est pas altéré, le foyer ne touchait pas le mur. Un foyer plat et étalé aurait plutôt conduit à des altérations plus étendues et plus présentes en partie basse des parois. Cette constatation, présentée ici pour le premier feu de la galerie, reste valable pour toutes les traces de feux observées dans la galerie. La structure en tipi adoptée lors des expérimentations dans l'ancienne carrière de Lugasson (Chap. 3) semble donc être proche de celle des foyers effectués par les Aurignaciens. Cette forme, qui est la plus naturelle pour maintenir un foyer en place sans qu'il se renverse, a l'avantage de créer une flamme peu volumineuse et précise.

En s'appuyant sur les précédentes remarques, nous supposons donc que les foyers aurignaciens avaient la forme d'un tipi. Afin de s'approcher d'une collecte manuelle, aucun calibrage du diamètre des branches n'a été effectué. Sur chacune d'elle, toutes les parties qui pouvaient se briser à mains nues ont été conservées pour le feu. La longueur des morceaux était d'environ 80 cm.

La dernière caractéristique correspond à la masse de combustible dans le foyer. Pour ce paramètre, plusieurs tests doivent être effectués.

4.3.2 Modèle des *wood cribs*

En se basant sur des expérimentations, l'objectif est de développer un modèle simplifié permettant le calcul du débit calorifique d'un foyer uniquement caractérisé par la masse initiale de bois en fonction du temps. Cette modélisation du HRR s'inspire du modèle des *wood cribs* [11] qui est une configuration de foyer de bois largement utilisée dans la communauté des sciences du feu. Ce modèle empirique se fonde sur des mesures effectuées sur des structures en bois constituées de bâtons à section carrée régulièrement répartis. Chaque niveau est composé de bâtons régulièrement espacés et parallèles entre eux. Ils sont ensuite orientés alternativement ouest-est et nord-sud selon le niveau considéré. Le débit

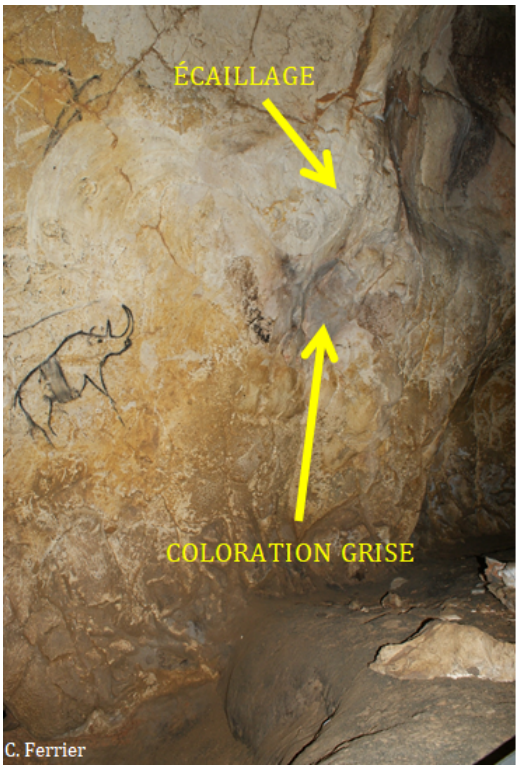

Figure 4.7 – Photographie de la première zone de thermo-altération à l'entrée de la Galerie des Mégacéros, sur la paroi gauche (Panneau du Rhinocéros).

calorifique dépend alors de trois paramètres : l'espace entre chaque bâton noté S_c, la longueur des côtés de la base carrée du bâton notée D_c et la hauteur de la structure notée h_c (Fig. 4.8).

Lorsque le *wood crib* est allumé de manière uniforme, le débit massique de bois brûlé est borné par trois phénomènes. Le débit est alors piloté par le mécanisme limitant. Le premier est lié à la surface maximale de combustible pouvant brûler à chaque instant. Le débit massique correspondant dépend donc principalement de la longueur D_c

$$\dot{m} = \frac{4}{D_c} m_0 v_p \left(\frac{m}{m_0}\right) \tag{4.3.1}$$

où m_0 est la masse initiale et v_p est une vitesse dépendant du matériau combustible. Pour le bois,

$$v_p = 2,2.10^{-6} D_c^{-0,6} \tag{4.3.2}$$

La seconde limite provient du mélange entre le comburant et le combustible. Ce mélange est restreint par les espaces existant entre les bâtons qui accueillent l'air. Plus il y a d'espace entre les éléments, plus l'air rentre facilement en contact avec le combustible pour réagir. Le débit massique correspondant s'écrit

$$\dot{m} = 4,4.10^{-4} \left(\frac{S_c}{h_c}\right) \left(\frac{m_0}{D_c}\right) \tag{4.3.3}$$

La dernière limite est liée à la taille de l'entrée de la géométrie abritant le feu. Le débit massique correspondant dépend donc de l'aire de l'entrée A_e et de la hauteur de l'entrée h_e

$$\dot{m} = 0,12 A_e \sqrt{h_e} \tag{4.3.4}$$

Le débit de perte de masse est ainsi le minimum des trois débits précédents.

Lorsque le *wood crib* est enflammé à partir du centre, le régime est différent tant que les flammes n'ont pas atteint les bords. Le temps au bout duquel les flammes atteignent les bords est supposé être

$$t_0 = 15,7n \tag{4.3.5}$$

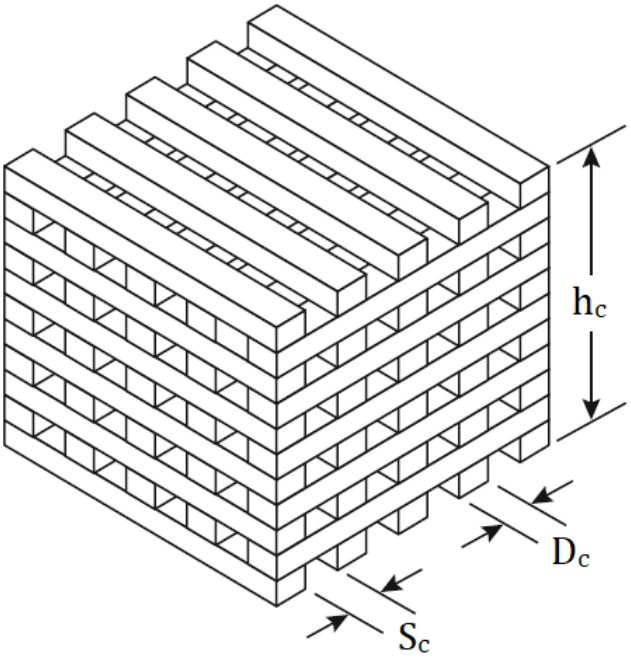

Figure 4.8 – Structure du *wood crib* [11].

où n est le nombre de bâtons par ligne. Tant que $t < t_0$, le débit massique vaut

$$\dot{m} = 0,0254 m_0 \frac{v_p t^2}{n^2 D_c} \tag{4.3.6}$$

La figure 4.9 représente une courbe typique du HRR modélisé. La première partie de la courbe décrit un HRR proportionnel à t^2, la deuxième est une constante et la troisième montre un HRR décroissant linéairement avec le temps.

4.3.3 Adaptation du modèle

Le modèle est adapté à deux situations. La première, nommée "sans alimentation", correspond à la combustion d'une masse présente initialement sur l'emplacement du foyer. La seconde, nommée "avec alimentation", correspond à une combustion qui est régulièrement alimentée en combustible par un individu.

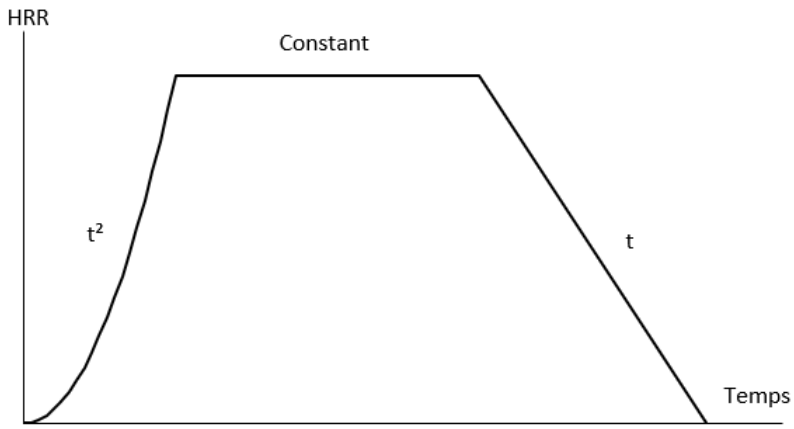

Figure 4.9 – Courbe conventionnelle du HRR selon le modèle des *wood cribs*.

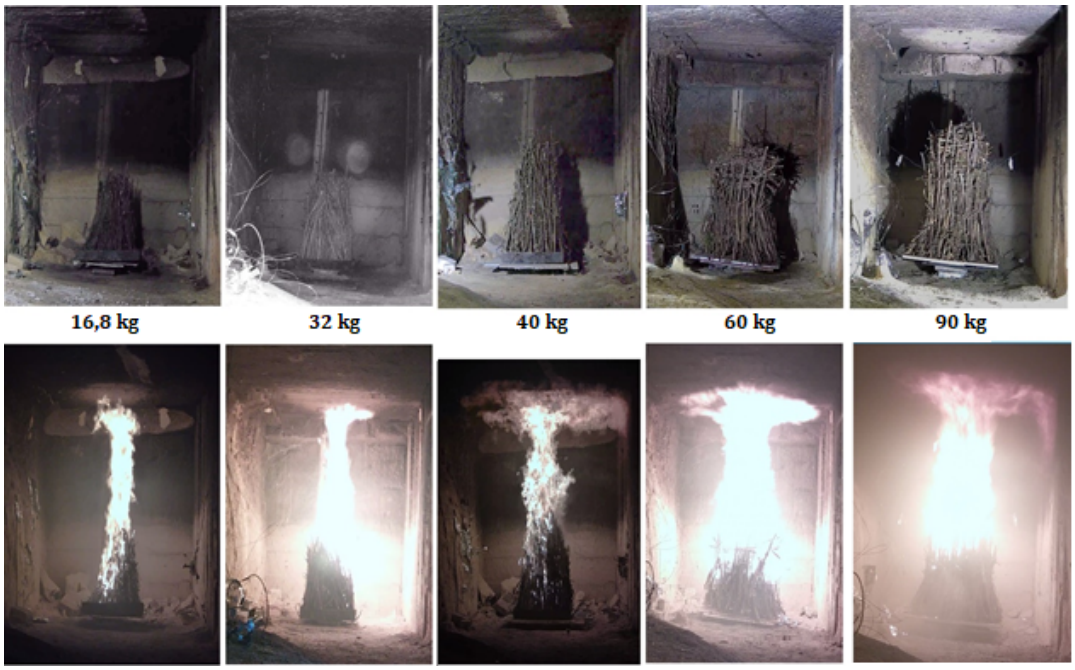

Figure 4.10 – Photographie des foyers constitués de pin sylvestre pour toutes les masses étudiées avant et 5 minutes après l'allumage (J.-C. Mindeguia).

4.3.3.1 Sans alimentation

Le modèle empirique précédent est valable pour des *wood cribs* mais pas pour des foyers en tipi constitués de branches. Afin d'ajuster les paramètres, des essais ont été menés dans l'ancienne carrière de Lugasson. Cette fois, le foyer n'est pas alimenté au cours de l'expérimentation et la totalité du combustible est positionnée initialement sur l'emplacement du foyer. Des liens métalliques maintiennent la cohésion des branches afin de densifier le foyer. Une balance mesure la masse à chaque instant, permettant le calcul du débit massique. Ces expérimentations ont été réalisées pour 5 masses différentes : 16,8 kg, 32 kg, 40 kg, 60 kg et 90 kg (Fig. 4.10).

Les points expérimentaux des HRR sont présentés sur la figure 4.11. Notons que les HRR sont calculés en supposant une chaleur de combustion constante égale à $12,5\ MJ.kg^{-1}$ (§1.2.1.2). L'expérimentation concernant le foyer de 32 kg a connu un problème puisque l'embrasement du foyer demanda un temps beaucoup plus long que pour les autres masses. Il est possible que la cause soit similaire à celle affectant le feu 3 des expérimentations de la carrière (lent embrasement) décrites au chapitre précédent (§3.1.3). Pour la mise en place du modèle, les données relatives à cette masse ne sont donc pas retenues.

Les courbes issues de l'ajustement du modèle des *wood cribs* sont tracées sur le même graphe. Ce nouveau modèle se base sur des paramètres qui ne sont plus constants mais variables en fonction de la masse. De plus, la partie linéaire finale intrinsèque au modèle des *wood cribs* (Fig. 4.9) est modifiée puisque non satisfaisante. Elle est remplacée par une fonction exponentielle plus proche des mesures

$$\dot{m} = \beta e^{-\alpha t} \tag{4.3.7}$$

La dépendance des paramètres avec la masse est fournie dans le tableau 4.3.

4.3.3.2 Avec alimentation

Le cas d'un foyer alimenté au cours de la combustion, comme dans les expérimentations de la carrière (Chap. 3), est traité ci-après. Il dérive de la même approche que celle utilisée précédemment mais avec des paramètres différents, rassemblés dans le tableau 4.4. La courbe exponentielle finale n'est ici pas reprise et la décroissance finale est supposée être linéaire comme dans le modèle des *wood cribs*. Initialement, le modèle des *wood cribs* ne prévoit pas d'alimentation et les courbes de

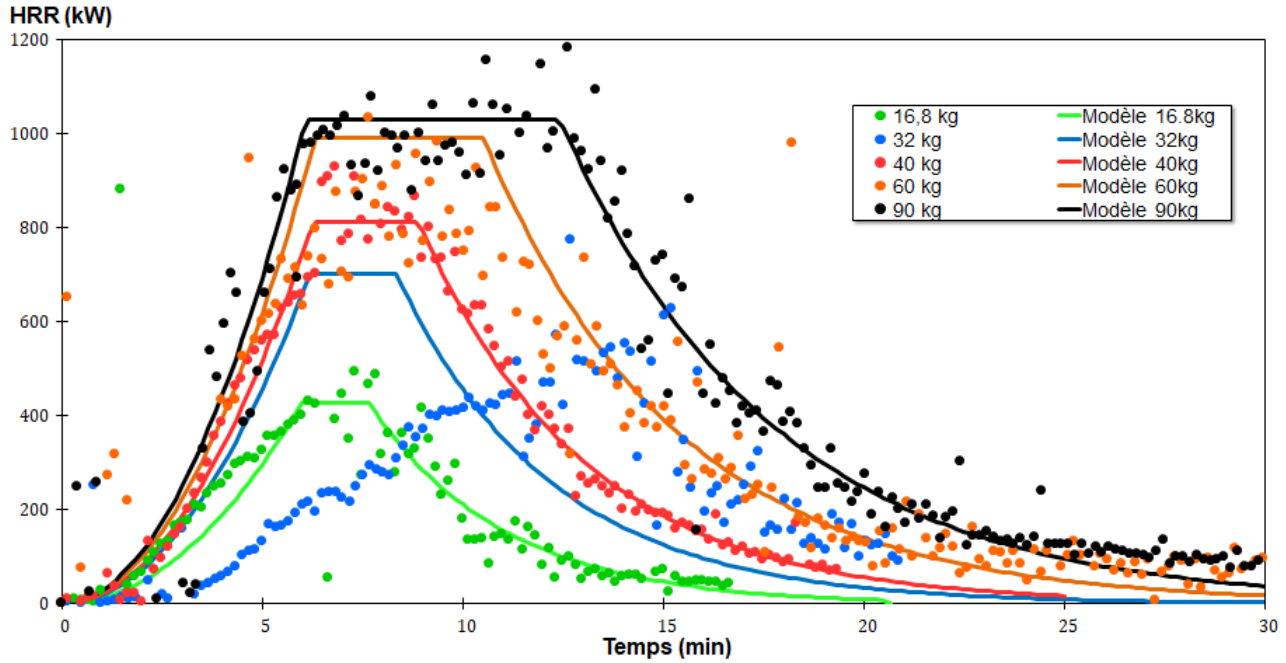

Figure 4.11 – Comparaison expérimentale des HRR pour différentes masses initiales. Les points correspondent aux mesures tandis que les courbes pleines correspondent aux résultats du modèle des *wood cribs* adapté à ce type de foyer.

n	23,9
D_c	$3,853.10^{-4}m_0 + 0,03515$
$\frac{S_c}{h_c}$	$-8,014.10^{-6}m_0^2 + 2,138.10^{-4}m_0 + 0,1912$
α	$3,539.10^{-7}m_0^2 - 6,32.10^{-5}m_0 + 0,00596$
β	$-4,005.10^{-5}m_0^2 + 0,0113\ m_0 + 0,161$

Tableau 4.3 – Variation des paramètres du modèle sans alimentation basé sur celui des *wood cribs* en fonction de la masse initiale du foyer.

débit sont uniquement basées sur quelques paramètres géométriques ainsi que sur la masse initiale m_0. Afin d'adapter le modèle à une alimentation continue, les paramètres géométriques sont conservés pendant toute la combustion mais la masse m_0 n'est plus considérée comme constante. À chaque alimentation, elle est modifiée de sorte qu'elle devient $m_0 + m_{restante}$ avec $m_{restante}$ la masse restant dans le foyer au moment de l'alimentation. Les mêmes équations que dans le modèle des *wood cribs* sont ensuite utilisées jusqu'à la prochaine alimentation. Le modèle avec alimentation correspond donc à une application successive du modèle sans alimentation avec des masses initiales variables.

n	60
D_c	0,0125
$\frac{S_c}{h_c}$	0,048

Tableau 4.4 – Valeurs des paramètres du modèle avec alimentation se basant sur celui des *wood cribs*.

Ce modèle est validé sur les deux premiers feux réalisés dans la carrière de Lugasson décrits au chapitre 3. La comparaison entre les HRR déduits des mesures de masse et les HRR modélisés est présentée sur les figures 4.12 et 4.13.

La modélisation approche de manière simplifiée les courbes de débit calorifique expérimentales. L'écart est conséquent dans la dernière partie de la combustion. L'accumulation d'erreurs semble

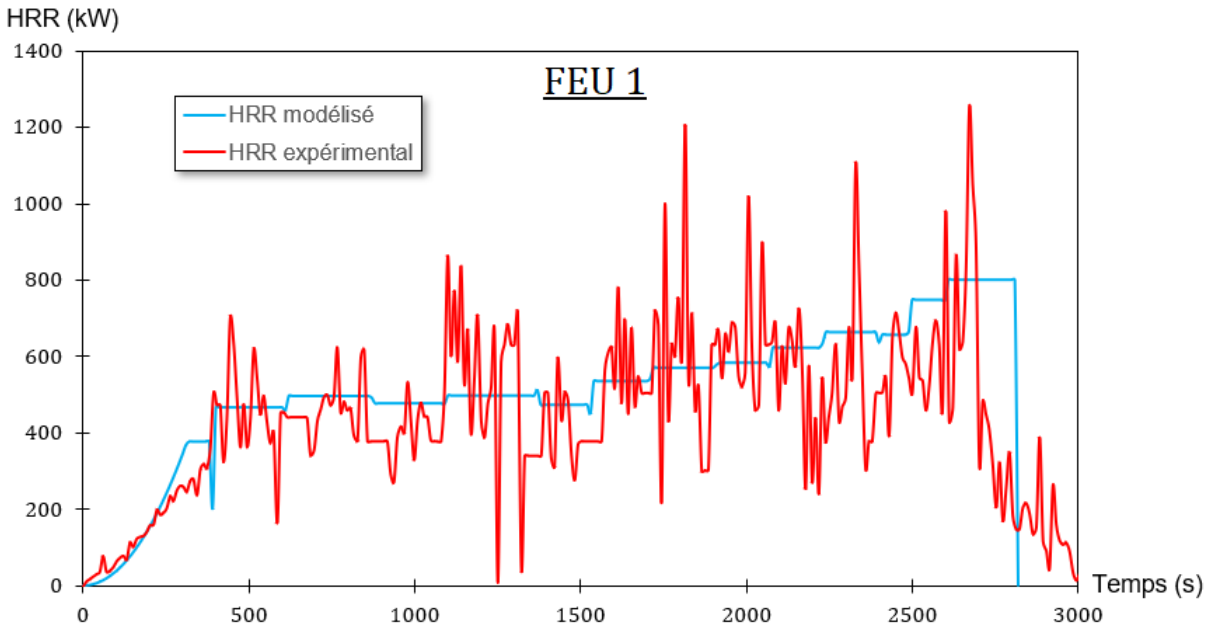

Figure 4.12 – Comparaison des HRR modélisés et expérimentaux pour le premier feu de la carrière de Lugasson.

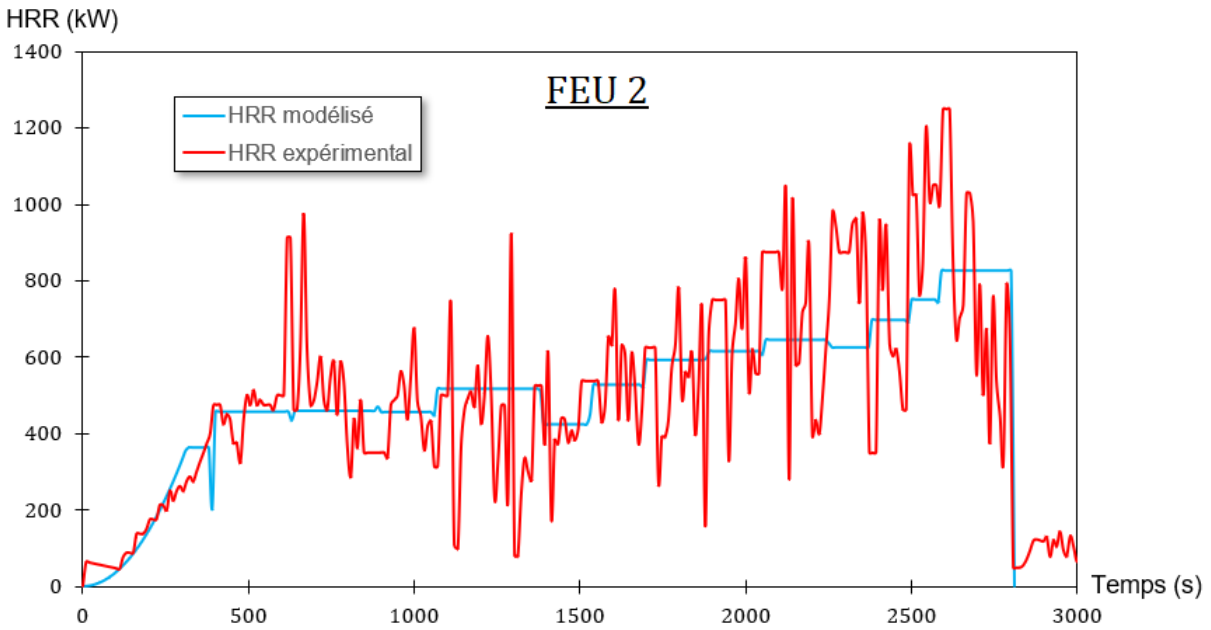

Figure 4.13 – Comparaison des HRR modélisés et expérimentaux pour le deuxième feu de la carrière de Lugasson.

influencer le résultat et implique une sous-estimation de la puissance dégagée. Néanmoins, la première partie de la combustion montre un accord entre l'expérience et le modèle. Or, les feux réalisés dans la Galerie des Mégacéros sont, comme nous le verrons dans la section 4.4, moins importants que ceux des expérimentations de la carrière de Lugasson. Les combustions simulées seront donc inférieures en intensité et moins longues. Les écarts concernant les secondes parties des courbes des figures 4.12 et 4.13 n'apparaîtront donc pas lors de l'application à la grotte Chauvet-Pont d'Arc.

4.4 Les feux de la Galerie des Mégacéros

L'application de la modélisation numérique aux thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros est présentée dans cette section. Des observations *in situ* ont permis de distinguer sept zones distinctes de thermo-altérations. Leur localisation approximative est indiquée sur la figure 4.14. Une description détaillée de chaque emplacement est proposée dans la suite au sein des parties dédiées. Une conclusion globale rassemblant l'ensemble des renseignements issus des observations et des simulations clôture cette partie.

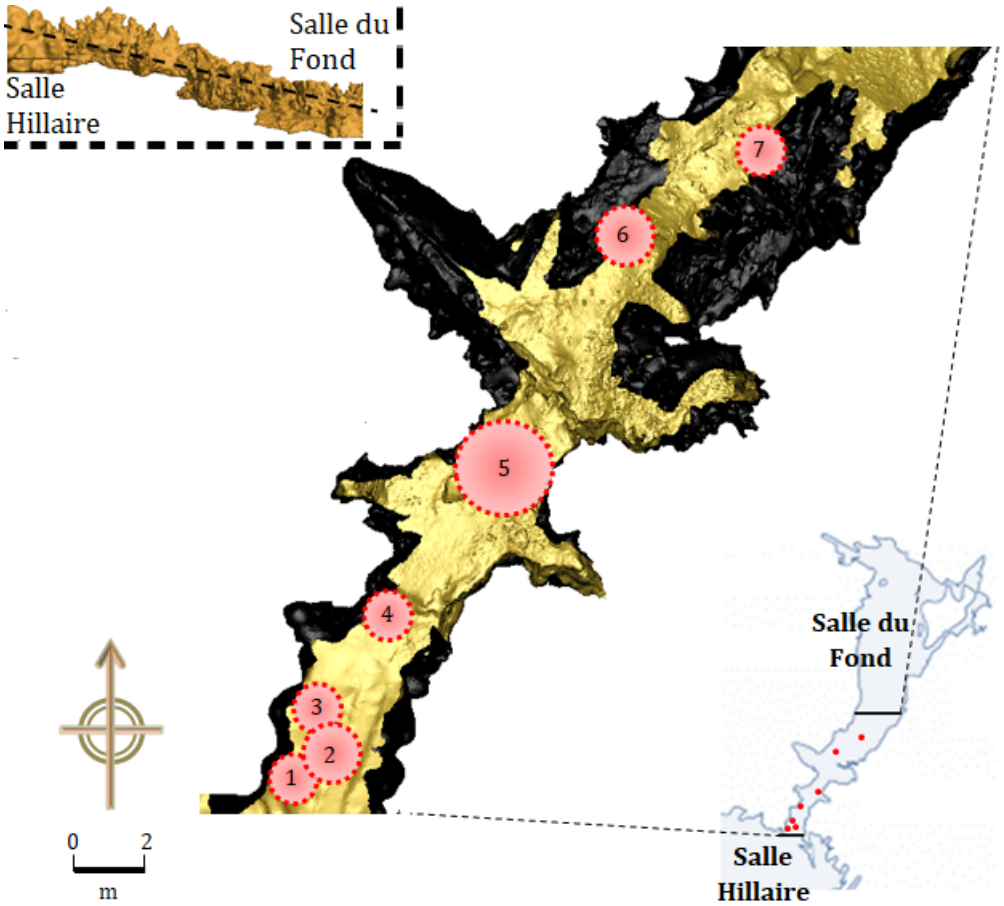

Figure 4.14 – Répartition des sept zones thermo-altérées dans la Galerie des Mégacéros (cercles rouges). L'image centrale est un plan de la galerie, extrait du relevé 3D. Le profil longitudinal est présenté dans le coin supérieur gauche de la figure. Le sol de la galerie est jaune tandis que les parois sont noires.

4.4.1 Quelques considérations préalables

La réalisation de feux importants dans la partie profonde de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pourrait, de prime abord, paraître inenvisageable à cause du confinement. En effet, les réserves d'oxygène sont limitées dans cette cavité dont l'ouverture sur l'extérieur se situe à plusieurs centaines de mètres

des foyers. L'étude des ordres de grandeur sur la quantité d'oxygène, présentée ci-dessous, permet de démontrer la faisabilité de feux de forte puissance dans la Galerie des Mégacéros.

La combustion de solides organiques requiert généralement la même quantité d'oxygène quel que soit le matériau (±5%). Le facteur de Thornton pour les solides organiques vaut environ $13,1\ MJ.kg^{-1}$ [196]. Ainsi, pour chaque kilogramme d'oxygène réagissant avec le combustible, une puissance d'environ 13,1 MJ est libérée. Un kilogramme de combustible libère environ 12,5 MJ (§1.2.1.2). Les deux valeurs étant relativement proches, il faut environ 1 kg d'oxygène pour brûler 1 kg de pin sylvestre. Évaluons maintenant grossièrement la masse d'oxygène contenue dans la Salle Hillaire qui constitue le réservoir de comburant pour les feux de la Galerie des Mégacéros. Le volume de la salle est d'environ $10 \times 10 \times 10 \sim 1000\ m^3 = 10^6\ L$. Un kilogramme d'oxygène occupe un volume $V = \frac{m}{\rho} = \frac{1000}{1,35} \sim 740\ L$. Néanmoins, un volume d'air contient environ 20% d'oxygène. Un volume de $5 \times 740 = 3700\ L$ contient donc un kilogramme d'oxygène. La Salle Hillaire renferme ainsi environ $10^6/3700 \sim 270\ kg$ d'oxygène. Par ailleurs, des gaz frais provenant des salles adjacentes pourraient alimenter la Salle Hillaire pendant la combustion. Tout ce gaz ne pourrait pas contribuer à la combustion du bois puisque celle-ci nécessite un taux d'oxygène minimal (plusieurs pourcents). Malgré cette limitation, des foyers de taille considérable sont tout de même réalisables.

Une propriété notable des combustions est la hauteur des flammes. Cette information est importante puisqu'elle permet d'affiner préalablement les combustions envisageables. Des flammes très petites ne suffiraient pas à chauffer la voûte de la Galerie des Mégacéros. Au contraire, des flammes trop hautes affecteraient fortement le plafond et conduiraient à des altérations trop étendues comme lors des essais dans la carrière de Lugasson (Chap. 3).

L'équation (1.3.7) permet le calcul de la hauteur des flammes. Grâce aux expérimentations détaillées au paragraphe 4.3.3 et à leur modélisation, la puissance maximale dégagée par un foyer d'une masse donnée est maintenant connue. Lors de ces essais, des mesures relatives aux dimensions des foyers furent effectuées. Ainsi, un foyer de 30 kg mesure environ un mètre de diamètre. Mathématiquement, le diamètre varie en fonction de la racine carrée de la masse de combustible en supposant que la hauteur reste constante. En effet, le volume du foyer varie en fonction du carré du diamètre. En supposant que la masse volumique du foyer ne varie pas, le volume est proportionnel à la masse et le diamètre à la racine carrée de la masse. De cette propriété, il découle par exemple qu'un foyer de 15 kg mesure environ 80 cm de diamètre. Il s'agit bien de l'ordre de grandeur du diamètre du foyer initial des expérimentations du chapitre 3 (Fig. 3.3). Avec ce calcul des diamètres, la figure 4.15 présente la hauteur des flammes pour des foyers dont les masses s'étendent de 10 à 35 kg. Des barres d'erreur de ±20% sont appliquées afin de tenir compte des incertitudes concernant le diamètre des foyers.

Pour chaque zone, la hauteur des flammes pour le foyer le plus probable sera indiquée.

Les propriétés thermo-mécaniques des parois de la grotte Chauvet-Pont d'Arc, constituées de calcaire urgonien, sont différentes de celles de la carrière de Lugasson creusée dans le calcaire du Rupélien. Les propriétés du calcaire urgonien sont listées dans les tableaux 1.5 et 1.6 du paragraphe 1.6.3. Rappelons que sa résistance en compression a été mesurée à température ambiante et à 250^oC. Elle évolue d'environ 25 MPa à 20^oC à 21 MPa lorsque la température est de 250^oC. Mentionnons également que le calcaire urgonien de la grotte est plus sensible à l'écaillage que le calcaire rupélien de la carrière de Lugasson (§1.6.3).

Enfin, il est considéré que le sol actuel de la Galerie des Mégacéros correspond au niveau de circulation paléolithique. En effet, des os et des charbons, datés de l'Aurignacien, sont présents en surface. De plus, des écailles provenant des zones altérées jonchent le sol. Si des modifications postérieures à la fréquentation préhistorique ont eu lieu, elles ne peuvent excéder quelques centimètres.

4.4.2 Zone 1

Cette partie traite des thermo-altérations situées à l'entrée de la Galerie des Mégacéros, sur la paroi gauche, à proximité du Panneau du Rhinocéros (Fig. 4.14).

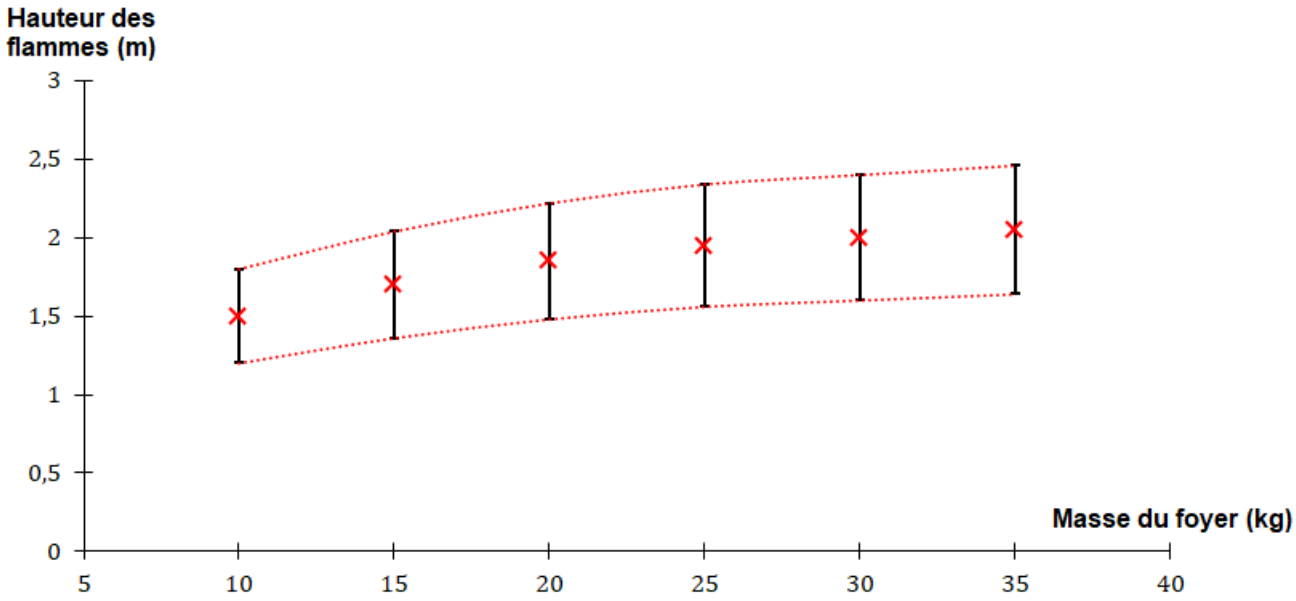

Figure 4.15 – Hauteur calculée des flammes des foyers en tipi de pin sylvestre en fonction de leur masse.

4.4.2.1 Présentation de la zone altérée

Une partie de la paroi a subi un écaillage important, qui recoupe le signe en gerbe visible sur le Panneau du Rhinocéros. Une zone de coloration grise est située en-dessous à partir d'un mètre par rapport au sol (Fig. 4.16). Sa présence indique que la surface sus-jacente doit avoir subi un impact thermique suffisant pour engendrer de la rubéfaction. Celle-ci n'est pas visible en raison de l'écaillage. Une coloration rouge est toutefois visible en périphérie de la zone grise sur les surfaces non écaillées. Notons enfin que le pied de la paroi n'a pas été affecté puisqu'aucune marque thermique n'est visible sur la roche.

4.4.2.2 Localisation du site de combustion

L'emplacement des marques thermiques facilite le positionnement du site de combustion. En effet, puisque les gaz chauds s'élèvent jusqu'à la voûte en épousant la forme de la paroi, le foyer devait se situer obligatoirement à l'aplomb de la surface grise. S'il avait été plus éloigné de la paroi, celle-ci n'aurait pas été altérée de la sorte puisqu'aucune force n'aurait pu entraîner les gaz vers le bas de la paroi. De même, la source d'énergie ne pouvait pas être plus proche de la paroi sinon celle-ci aurait été altérée à une hauteur inférieure à 1 m. Le foyer devait donc être dans une configuration proche de celle indiquée sur la figure 4.17.a. La figure 4.17.b permet la comparaison avec le foyer numérique.

L'emplacement indiqué sur la figure 4.17.b permet la reproduction numérique des thermo-altérations visibles sur le terrain. La figure 4.18 présente la comparaison des changements de coloration observables dans la Galerie des Mégacéros avec les résultats de simulation, pour la combustion d'un foyer de 20 kg de bois.

La surface grise simulée est correctement située ce qui valide l'emplacement. La superficie est supérieure à la surface observable dans la galerie mais reste confinée à la surface écaillée où cette coloration a pu exister. La rubéfaction s'étend légèrement hors de la zone écaillée où aucune coloration rouge n'est observable. Il semble donc que le foyer devait être moins conséquent. Plusieurs masses et deux types de combustion sont testés dans les paragraphes suivants. Le premier type correspond à un feu pour lequel le combustible est initialement présent en totalité tandis que le second correspond à un foyer alimenté pendant la combustion.

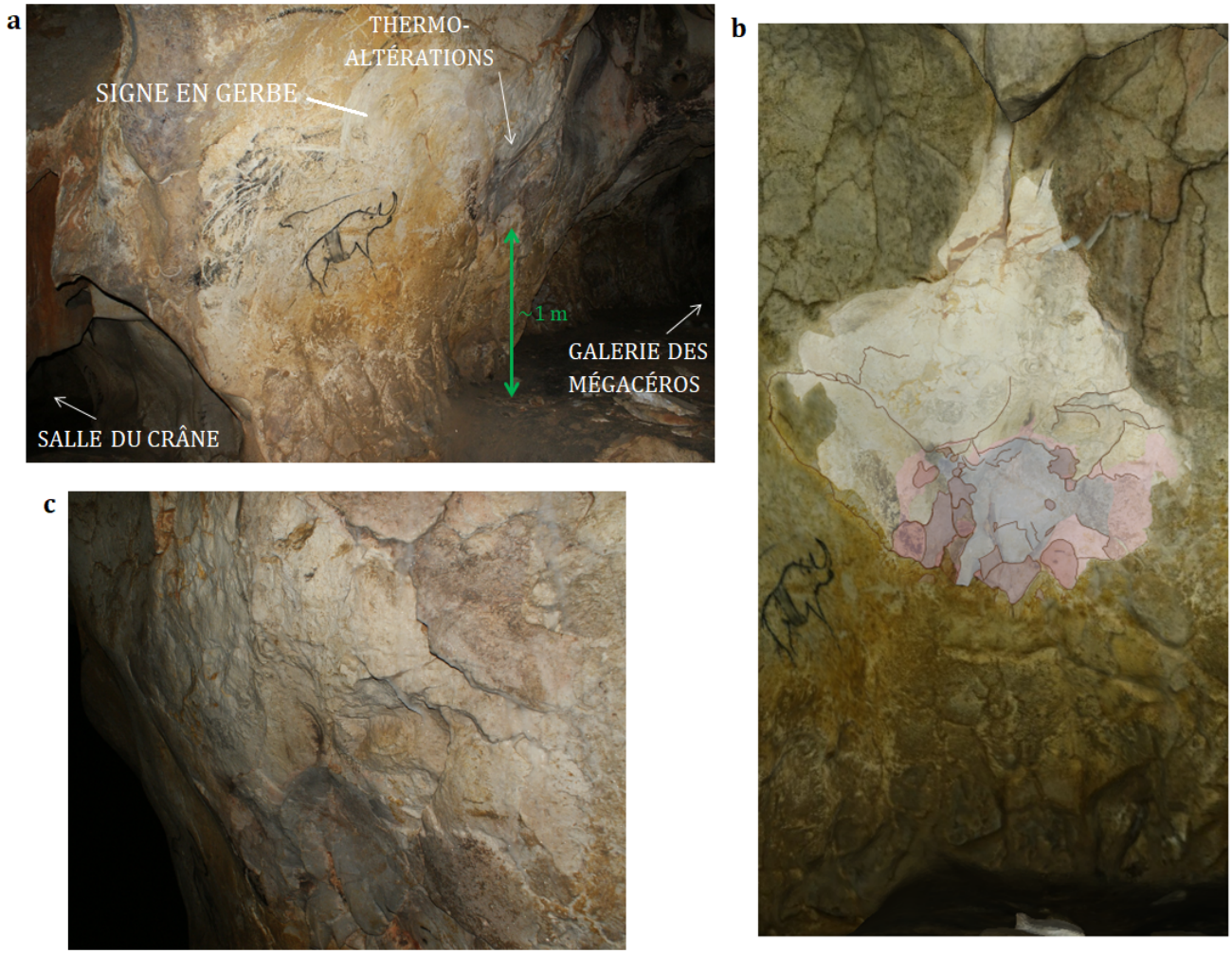

Figure 4.16 – a - Emplacement de la coupole altérée de la zone 1 au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations (D. Lacanette et J.-C. Leblanc). La zone grise correspond à la coloration grise, la zone rose à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. c - Gros plan sur la zone écaillée (C. Ferrier).

4.4.2.3 Combustion sans alimentation

Les résultats sont présentés sur des graphiques donnant le temps d'exposition en fonction des masses des foyers simulés. Le temps d'exposition est défini comme étant la durée pendant laquelle les parois subissent la même répartition des thermo-altérations que celles *in situ*. Par exemple, pour une surface grise de 100 cm^2, le graphique indiquera pendant combien de temps elle a été chauffée à 350^oC (pour le critère 1) pour chaque foyer simulé. Si cette chauffe excède 10 minutes, alors la coloration grise de la paroi sera visible. Au contraire, si la durée est inférieure à 10 minutes, aucune marque visible n'affectera la paroi. Ainsi, lorsque les points sont au-dessus du trait en pointillé noir sur les graphiques (voir par exemple Fig. 4.19), le temps d'exposition dépasse les 10 minutes et les effets de la chauffe deviennent observables. L'objectif est de déterminer les combustions les plus proches de cette limite. En effet, une chauffe plus faible serait insuffisante et une chauffe plus intense mènerait à des thermo-altérations plus étendues que celles observables dans la Galerie des Mégacéros. Les feux envisageables seront donc ceux qui se situent autour de la limite des 10 minutes. Les masses possibles des foyers de chaque zone seront encadrées sur les graphiques par des lignes jaunes verticales.

Le modèle développé dans la section 4.3.3 est validé pour des masses de bois comprises entre 16 et 90 kg. Pour chaque feu, des foyers de 10 kg sont tout de même simulés en supposant que l'écart entre la réalité et le modèle reste convenable. En revanche, aucune simulation ne sera effectuée pour

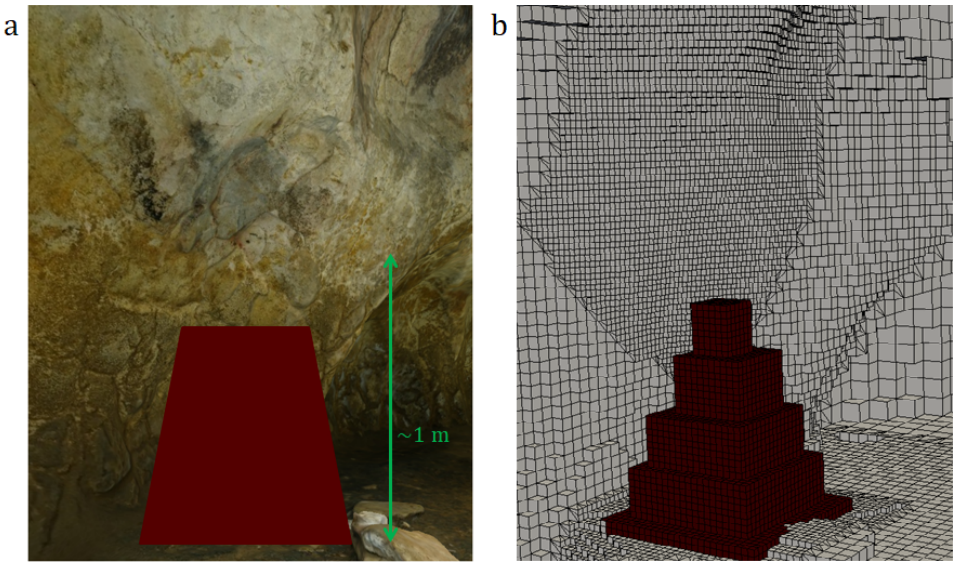

Figure 4.17 – a - Volume supposé du foyer de la zone 1. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 1.

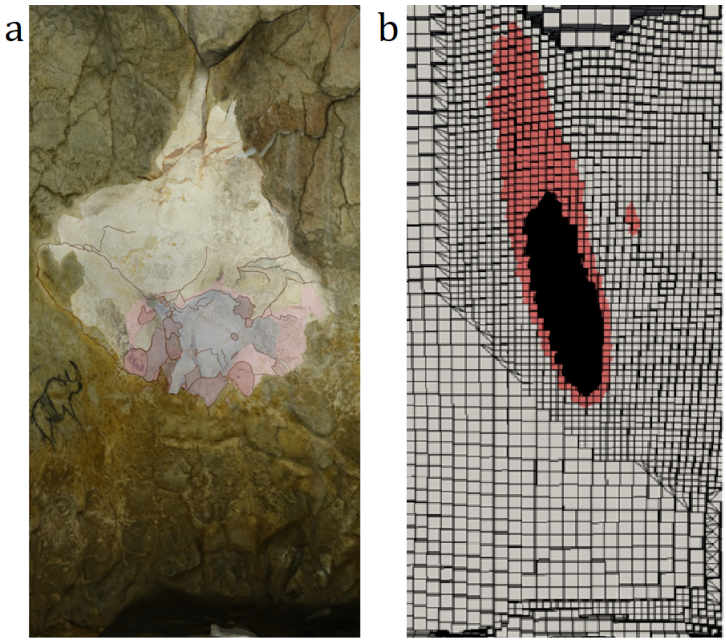

Figure 4.18 – a - Relevé des thermo-altérations (D. Lacanette et J.-C. Leblanc). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 1 pour un foyer de 20 kg de bois.

des masses inférieures à 10 kg puisque le modèle fournit, *a priori*, des courbes éloignées de la réalité dans ce cas.

Les résultats relatifs à la zone 1 sont présentés sur les figures 4.19 (rubéfaction) et 4.20 (coloration grise). La figure 4.19 montre qu'un foyer supérieur à 20 kg impliquerait une rubéfaction trop étendue. La surface de celle-ci serait plus importante que la zone écaillée et elle serait donc encore visible aujourd'hui sur les parois de la grotte. Puisqu'elle ne l'est pas, le foyer devait être moins conséquent. La figure 4.20 montre de même que la combustion de masses supérieures à 25 kg génèreraient une coloration grise trop étendue. Ainsi, les deux changements de coloration semblent indiquer qu'une masse nécessairement inférieure à une vingtaine de kilogrammes a dû produire les thermo-altérations de la paroi. Un tel foyer génèrerait une flamme d'une hauteur d'au moins 1,5 mètres (Fig. 4.15) qui frapperait

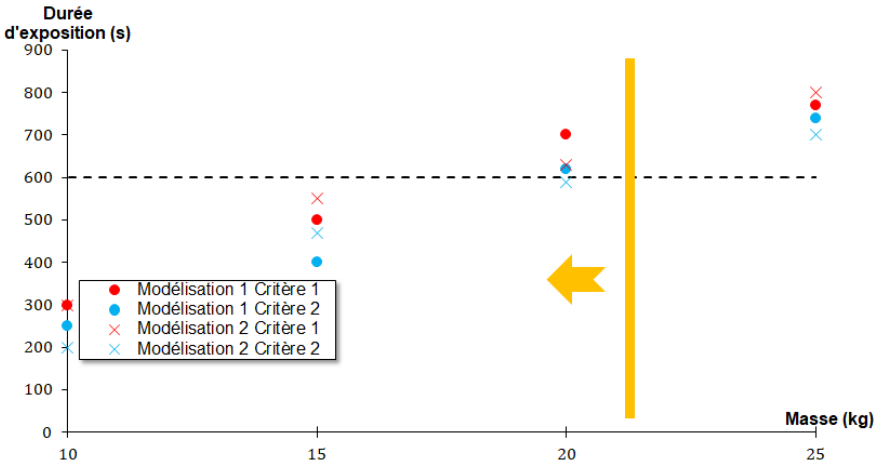

Figure 4.19 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 1 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

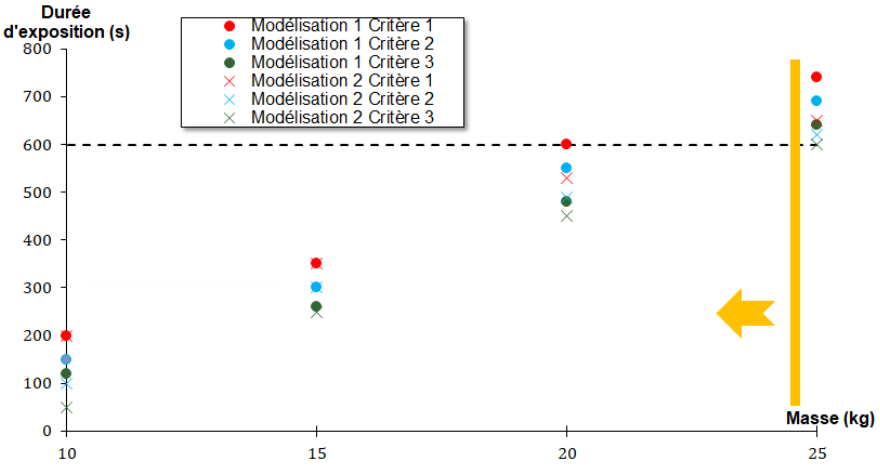

Figure 4.20 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 1 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

donc la zone grise située à 1 mètre du sol. Plusieurs foyers au même emplacement entraîneraient de même une coloration grise suffisamment étendue sans induire une rubéfaction excessive. Par ailleurs, plusieurs foyers successifs d'environ 10 kg chacun produiraient sans doute des changements de coloration comparables à ceux observables dans la Galerie des Mégacéros. Cependant, il n'est pas certain que ces foyers conduiraient à des écaillages similaires à ceux de la paroi.

4.4.2.4 Combustion avec alimentation

Des combustions réalisées avec des alimentations en pin sylvestre sont simulées pour le cas de la zone 1. Il n'est pas possible de considérer toutes les éventualités à cause des durées de simulation (§4.1). Les temps d'alimentation sont choisis afin d'éviter la décroissance de la puissance dégagée. Les protocoles d'alimentation sont présentés dans le tableau 4.5. La masse initiale et les masses d'alimentation correspondent à des choix en lien avec les essais effectués lors du projet (Chap. 3).

Les figures 4.21 et 4.22 présentent respectivement les temps d'exposition relatifs à la rubéfaction et à la coloration grise pour les trois protocoles considérés. La figure 4.21 indique que le protocole C est trop exigeant puisqu'il engendre une rubéfaction trop étendue. Les deux autres protocoles sont

Durée depuis l'allumage	Protocole A	Protocole B	Protocole C
Initial	8 kg	8 kg	8 kg
6 min	4 kg	4 kg	4 kg
9 min	4 kg	4 kg	4 kg
12 min		4 kg	4 kg
15 min			4 kg

Tableau 4.5 – Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 1.

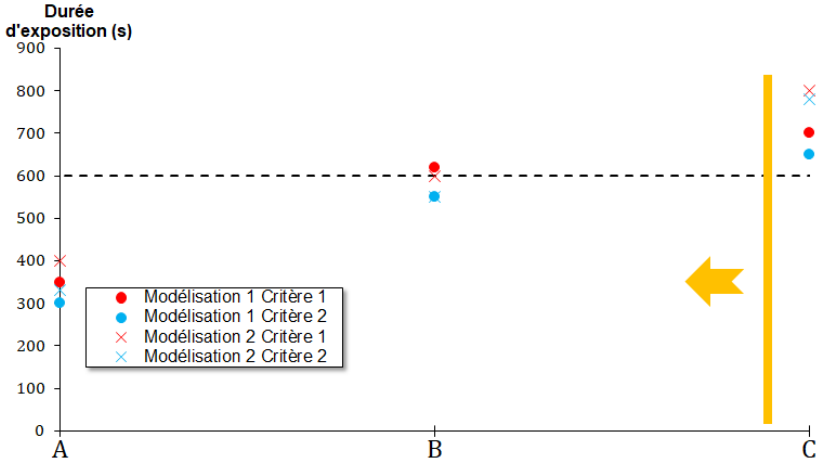

Figure 4.21 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 1 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

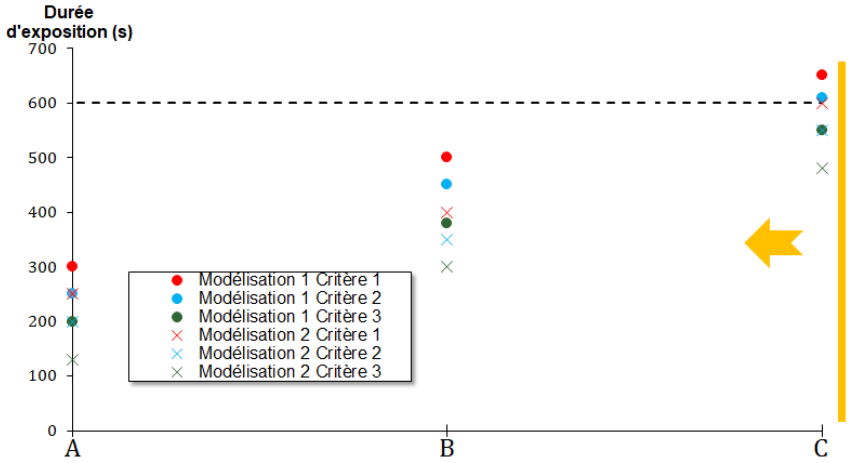

Figure 4.22 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 1 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

envisageables puisque la rubéfaction reste confinée dans la zone écaillée. Par contre, la figure 4.22 montre que le protocole C permet la reproduction des thermo-altérations grises. Les conclusions sont ainsi similaires à celles des combustions non alimentées puisqu'une vingtaine de kilogrammes est une masse plausible.

La figure 4.23 montre l'estimation des dangers dus au rayonnement et à la température juste avant la phase de décroissance d'une combustion respectant le protocole C. La toxicité des gaz n'est pas

dangereuse à proximité du foyer puisque les gaz chauds se situent en hauteur.

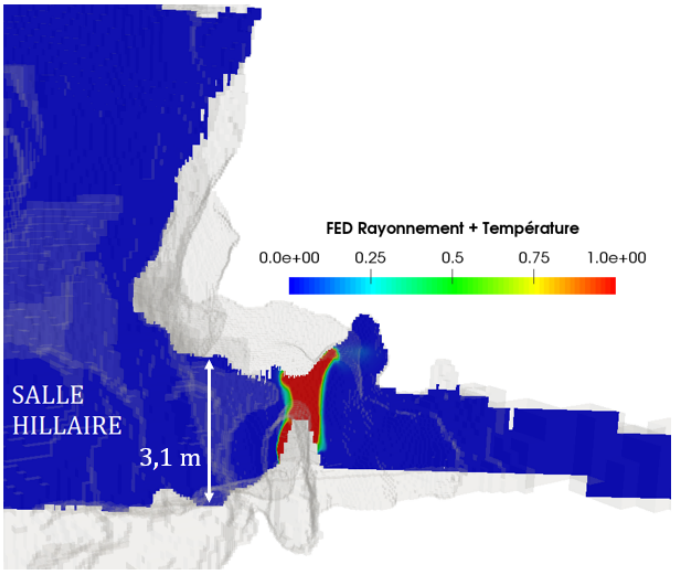

Figure 4.23 – Coupe transversale de la Galerie des Mégacéros correspondant à la FED relative au rayonnement et à la température pour une personne alimentant le foyer 10 minutes après l'allumage, dans le cadre du protocole C.

Rappelons qu'une FED égale à 1 implique statistiquement le décès de 50% des individus (§2.1.3). Hormis la flamme qui est dangereuse, il est possible d'approcher le foyer. La couche chaude n'est pas visible sur la coupe de la figure 4.23 à cause de la morphologie de la grotte dont la voûte est plus haute au centre de la galerie. Il était donc possible d'alimenter la combustion dans cette zone pour l'ensemble des protocoles.

La FED relative aux observateurs des feux (séjour prolongé à l'écart du feu) sera discutée dans la section 4.4.9. En effet, l'estimation de la dangerosité des gaz nécessite un maillage suffisamment fin dans les salles proches de la Galerie des Mégacéros pour acquérir une précision satisfaisante. Les simulations correspondantes requièrent ainsi un temps de calcul considérable et il n'est pas possible de les réaliser pour tous les cas. Seules les combustions plus intenses que celle du protocole C seront donc analysées.

4.4.2.5 Écaillage

L'écaillage est étudié au travers d'une simulation thermo-mécanique conduite sur les cas les plus probables. La figure 4.24.b montre le champ de contrainte en compression σ_{yy} 460 secondes après l'allumage d'un foyer de 20 kg de bois lorsque les contraintes sont maximales. La figure 4.24.a compare les contraintes en compression pour différentes profondeurs : 1 mm, 1 cm et 3 cm. Ces contraintes sont tracées pour les points se situant sur la ligne en pointillé noir de la figure 4.24.b. La résistance en compression du calcaire urgonien à $20°C$ est ajoutée sur la figure 4.24.a. Les zones bleues foncées sur la figure 4.24.b franchissent cette limite.

Le champ de contrainte σ_{yy} dépasse la résistance en compression sur une zone plus étendue que la surface grise observable dans la galerie. Des écaillages superficiels sont donc possibles jusqu'à un mètre au-dessus de la zone grise. Une analyse approfondie des contraintes dans la roche indiquent que la résistance en compression est franchie jusqu'à 1 cm de profondeur au-dessus de la zone grise (Fig. 4.24.a). À partir d'environ un centimètre, la contrainte s'amenuise et le risque de fractures importantes est dissipé. Sur le premier centimètre, la contrainte peut devenir extrêmement élevée puisqu'elle atteint une valeur deux fois supérieure à la résistance en compression. Rappelons que la simulation repose sur l'hypothèse d'élasticité et que cette dernière conduit à une surestimation des contraintes car elle ne permet pas la prise en compte de sa redistribution suite aux endommagements subis par le matériau.

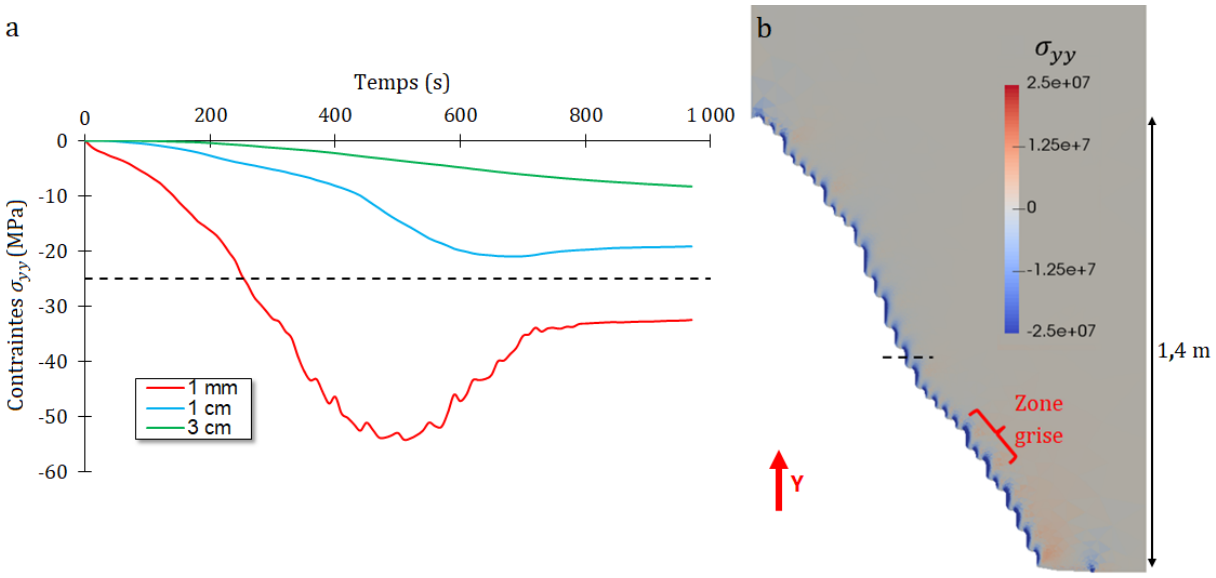

Figure 4.24 – Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 20 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression du calcaire urgonien à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer.

Cependant, le dépassement de la résistance en compression est si conséquent vers 1 mm que cette incertitude ne modifie pas le caractère qualitatif du dépassement. La combustion de 20 kg de bois semble ainsi suffisant pour causer de forts écaillages dans la zone d'impact de la flamme.

Une analyse des contraintes pour le protocole A a aussi été effectuée. Même si ce protocole est le moins exigeant, il génère tout de même des contraintes supérieures à la résistance en compression. Les risques d'écaillage superficiel existent donc, même pour des scénarios plus modestes. L'étude numérique des contraintes en compression corrobore ainsi la présence d'écaillage observable dans cette zone.

4.4.2.6 Dépôt de suie

Le dépôt de suie simulé pour le foyer le plus probable est fourni pour chaque zone thermo-altérée. Dans le cas de la zone 1, le dépôt de suie résultant de la combustion d'un foyer de 20 kg de bois est présenté sur la figure 4.25. Ces résultats numériques sont simplement qualitatifs puisque la quantité n'est pas correctement estimée par le modèle (§3.3.2.1). De plus, la taille des mailles, qui influence fortement le dépôt de suie à travers le calcul du gradient thermique à la paroi, augmente avec la distance par rapport au foyer. Ainsi, seules les conclusions proches du foyer, où la taille des mailles est inférieure à 6 cm, sont exploitables. Ceci n'est pas une contrainte importante puisque pour chaque feu, la zone de dépôt se situe majoritairement au voisinage du foyer.

La figure 4.25.a montre un dépôt de suie numérique assez étendu. De nos jours, il ne reste quasiment plus de suie à cet emplacement. Des traces noires à gauche de la surface grise pourraient correspondre à des carbonisats (Fig. 4.16.b). Il est possible qu'une partie des suies ait été rebrûlée lors de leur dépôt sur la paroi, phénomène observé lors des expérimentations effectuées dans la carrière de Lugasson (Fig. 3.8) mais non simulé. De même, les processus taphonomiques sont probablement responsables de la disparition des carbonisats plus éloignés de l'impact des flammes.

4.4.2.7 Discussion

Les résultats de la simulation numérique permettent de conclure sur les scénarios de feu envisageables. Si un foyer unique a été effectué par les Aurignaciens, il devait être constitué entre une

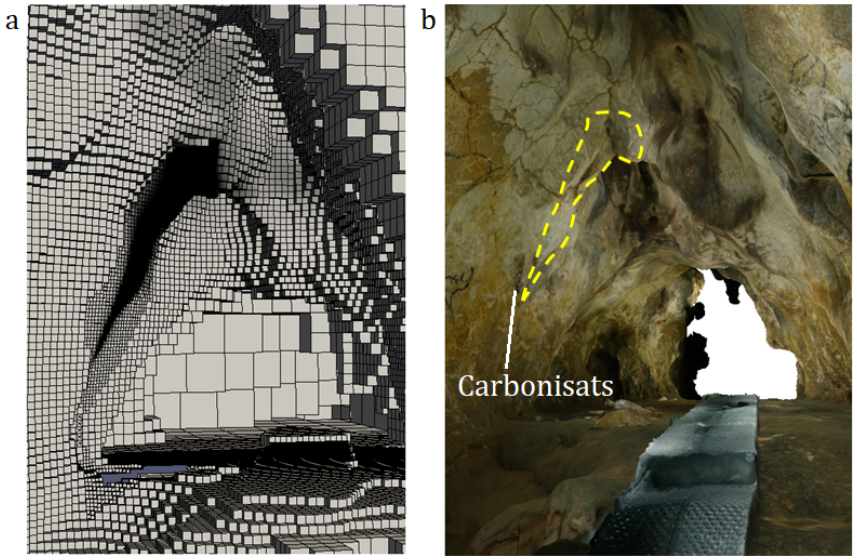

Figure 4.25 – a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 20 kg de bois dans la zone 1. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC).

quinzaine et une vingtaine de kilogrammes de pin sylvestre. Il n'est pas possible d'écarter un procédé en plusieurs étapes comprenant par exemple deux combustions d'une dizaine de kilogrammes. Cette possibilité nécessite cependant le positionnement du second foyer au même endroit que le précédent puisque les thermo-altérations sont très localisées. En effet, d'une part la surface grise requiert un positionnement du combustible à l'aplomb et d'autre part l'absence d'altération en pied de paroi signifie que le foyer était éloigné de celui-ci. L'alimentation du foyer pendant sa combustion n'est pas proscrite par les dangers intrinsèques au feu et il était possible d'approcher le foyer. Néanmoins, la quantité de combustible nécessaire pour reproduire les thermo-altérations de cette zone reste modeste. Une poignée d'individus pouvaient porter 20 kg de pin sylvestre sans difficulté en un seul trajet. Quel aurait été l'intérêt d'alimenter un foyer si petit alors que l'ensemble aurait pu être déposé et brûlé en une seule fois ? Un foyer unique nous parait donc le scénario le plus probable.

4.4.3 Zone 2

Cette partie traite des thermo-altérations correspondant à la zone 2 indiquée sur la figure 4.14.

4.4.3.1 Présentation de la zone altérée

La zone 2 se trouve à l'entrée de la Galerie des Mégacéros, juste après la zone 1 (Fig. 4.14). Une zone grise dans une niche laisse peu de doute quant à l'emplacement d'un foyer qui devait se situer juste en-dessous (Fig. 4.26.a & b). Cette zone est de plus écaillée ce qui indique que la flamme devait lécher le plafond. Des traces de rubéfaction couvrent aussi une partie de la coupole, surtout sur la paroi faisant face à l'altération grise (Fig. 4.26.b & c). Il ne peut cependant être exclu qu'une coloration rouge soit aussi présente au-dessus de la zone grise de la paroi droite. Les observations de cette zone sont délicates et il semble surprenant que la coloration grise s'arrête sans laisser place à de la rubéfaction dans la continuité des altérations.

Ces changements d'état de surface semblent indiquer que les gaz chauds furent piégés dans la niche puis épousèrent la forme de la coupole lors de leur mouvement descendant. Sur leur passage, ils auraient ainsi altéré la paroi opposée. Notons que toute la hauteur de la coupole n'est pas altérée. Ainsi, le feu aurait été suffisamment puissant pour provoquer une coloration grise de la roche et une rubéfaction sur la paroi opposée mais trop faible pour marquer le fond de la coupole.

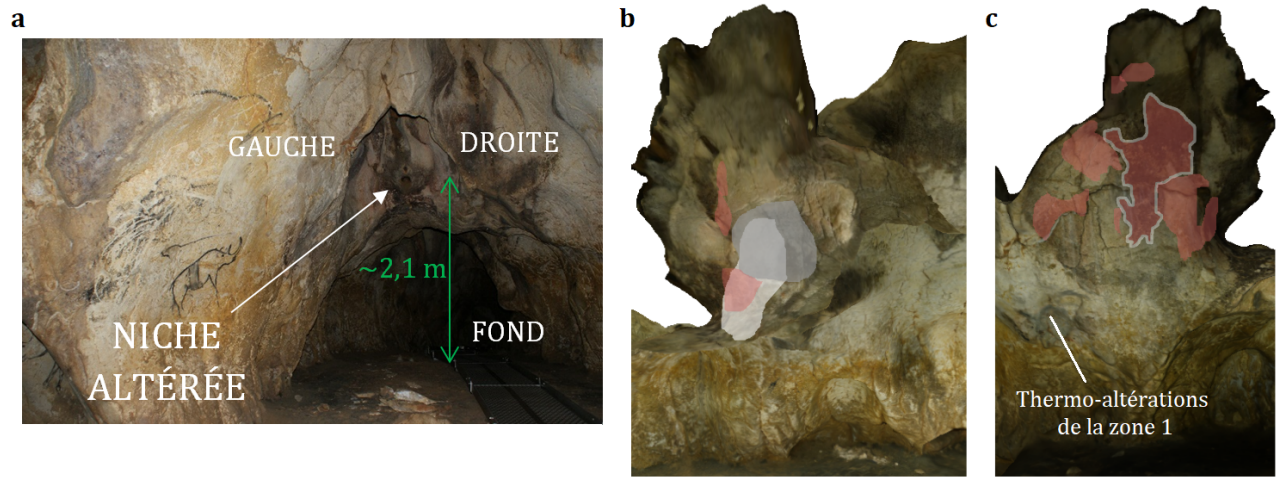

Figure 4.26 – a - Emplacement de la niche altérée de la zone 2 à l'entrée de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la niche de la zone 2 (F. Salmon). La zone grise correspond à la coloration grise, la zone rose à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. c - Relevé des thermo-altérations de la paroi gauche de la niche de la zone 2 (F. Salmon). La zone rose entourée de blanc est probablement rubéfiée sans que les observations puissent l'attester.

4.4.3.2 Localisation du site de combustion

La localisation restreinte de la zone grise et écaillée ainsi que l'absence de rubéfaction dans le fond de la coupole (Fig. 4.26) suggèrent que le foyer était peu volumineux. La flamme semble en effet avoir frappé la voûte de manière très localisée ce qui valide la forme supposée en tipi du foyer. L'emplacement du foyer numérique ainsi que de son pendant réel sont présentés sur la figure 4.27. Il s'agit de la localisation utilisée pour laquelle les simulations mènent aux résultats les plus probants. D'autres configurations ont été évaluées sans fournir de meilleurs résultats. À quelques imprécisions près (de l'ordre de quelques dizaines de centimètres), le foyer devait donc se situer dans la zone proposée sur la figure 4.27.

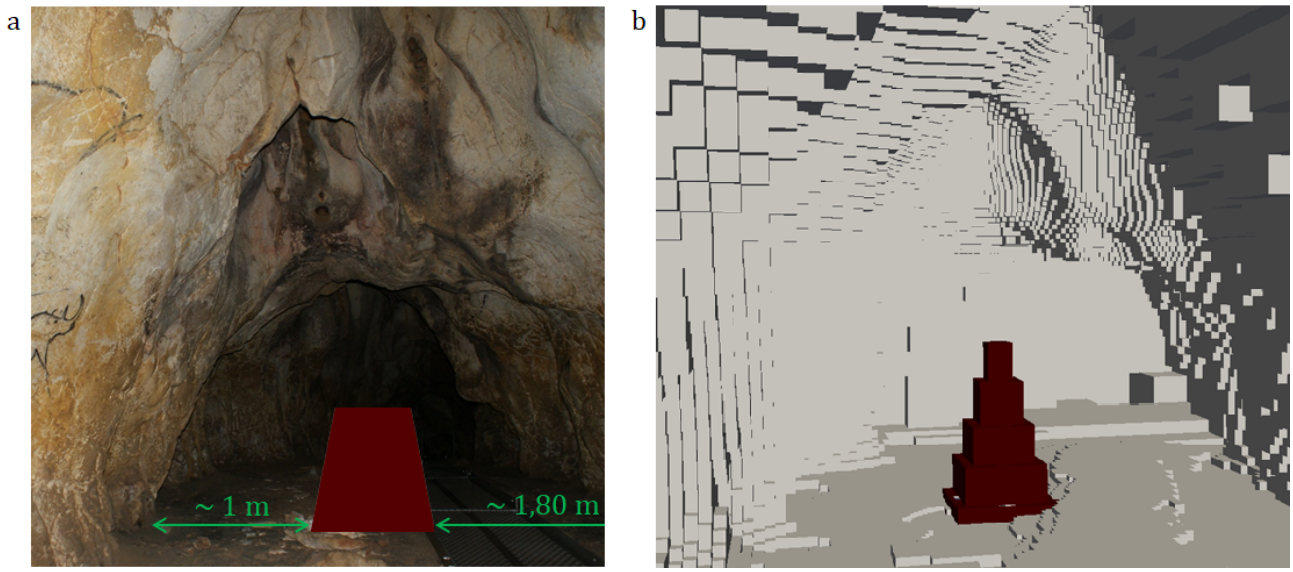

Figure 4.27 – a - Volume supposé du foyer de la zone 2. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 2.

À partir de cet emplacement, plusieurs masses ont été simulées avec le modèle de HRR détaillé au paragraphe 4.3.3. La simulation de la circulation générale des gaz dans la coupole lors de la combustion

de 25 kg de bois est présentée sur la figure 4.28. À gauche, est représenté le champ de température 450 s après l'allumage (lorsque le débit est maximal) tandis que l'image de droite correspond à la vitesse verticale au même instant. Le gaz s'élève dans la coupole puis affecte le côté opposé lors de sa descente. La simulation valide donc l'hypothèse selon laquelle la rubéfaction en face de la zone grise est causée par les gaz chauds piégés dans la coupole.

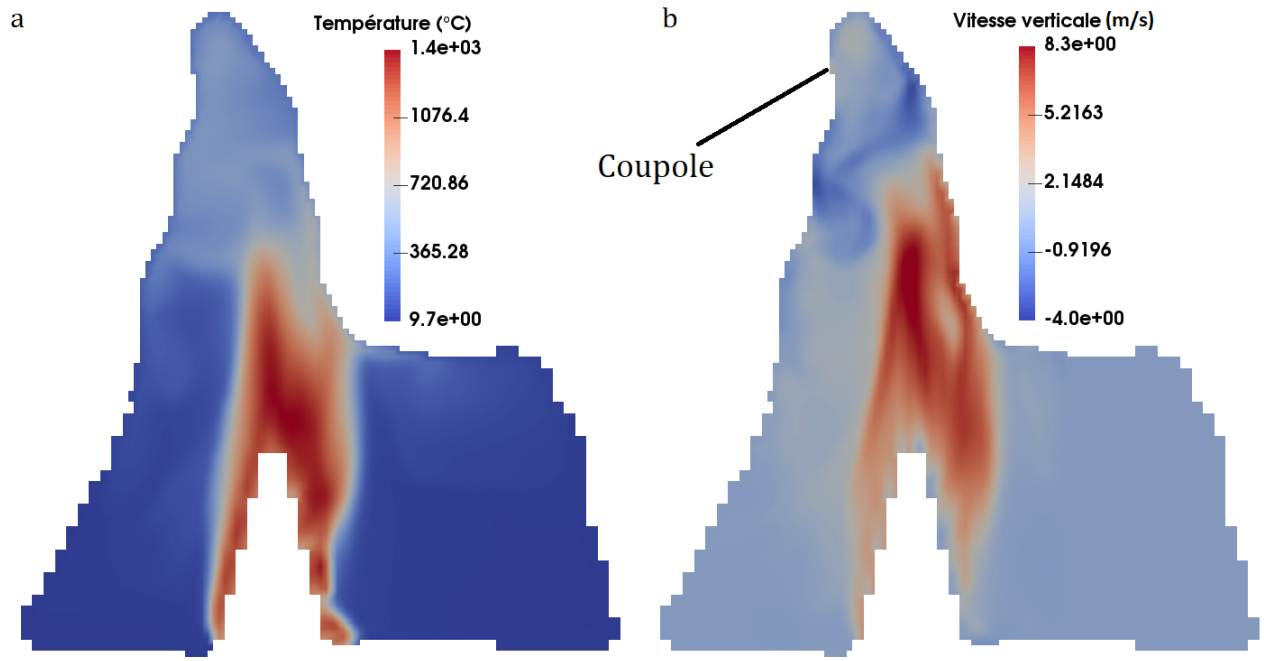

Figure 4.28 – Champs calculé sur une coupe orthogonale à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer 450 s après l'allumage d'un feu de 25 kg de bois. a - Champ de température. b - Champ de vitesse verticale.

La figure 4.29 montre les changements de coloration résultant de la combustion d'un foyer de 28 kg dont la localisation est celle de la figure 4.27.

La simulation fournit des thermo-altérations très proches de celles observables dans cette zone. Il est donc probable que la position du foyer numérique soit voisine du site de combustion dans la galerie. La zone rubéfiée en partie haute sur la paroi droite dans la simulation (Fig. 4.29.b) n'est pas altérée de la sorte d'après les relevés. Les incertitudes sur les relevés existent néanmoins puisqu'il semble en effet plus probable que cette zone fut rubéfiée comme l'indique la simulation. La zone grise dans la simulation est légèrement plus étendue que celle qui a été relevée. La difficulté d'observation de cette zone pourrait ici aussi expliquée l'écart.

4.4.3.3 Combustion sans alimentation

Plusieurs combustions avec des masses différentes ont été simulées. Les résultats des simulations relatifs aux changements de coloration sont consignés sur les figures 4.30 et 4.31 selon la même méthode que pour la zone 1. Les désignations des méthodes et des critères de changement de coloration sont ceux définis respectivement dans les tableaux 4.2 et 4.1.

Un ou plusieurs feux de 10 kg ne permettent pas de reproduire les thermo-altérations présentes dans cette zone. En effet, même si leurs effets étaient visibles, l'étendue des changements de coloration serait plus réduite que celle observable dans la grotte. Un ou des feux provenant de masses plus importantes se sont donc forcément produits à cet emplacement. D'après les simulations, compte tenu des incertitudes, des masses plus élevées de bois sont possibles jusqu'à environ 35 kg. Au-delà, les thermo-altérations sont trop importantes et dépassent celles qui sont observables dans cette zone. La masse la plus probable correspond à environ 28 kg. La hauteur de flamme d'un tel foyer est sans doute proche de 2 m. Cela est en accord avec la hauteur de 2,1 m de la zone grise. Des masses plus faibles

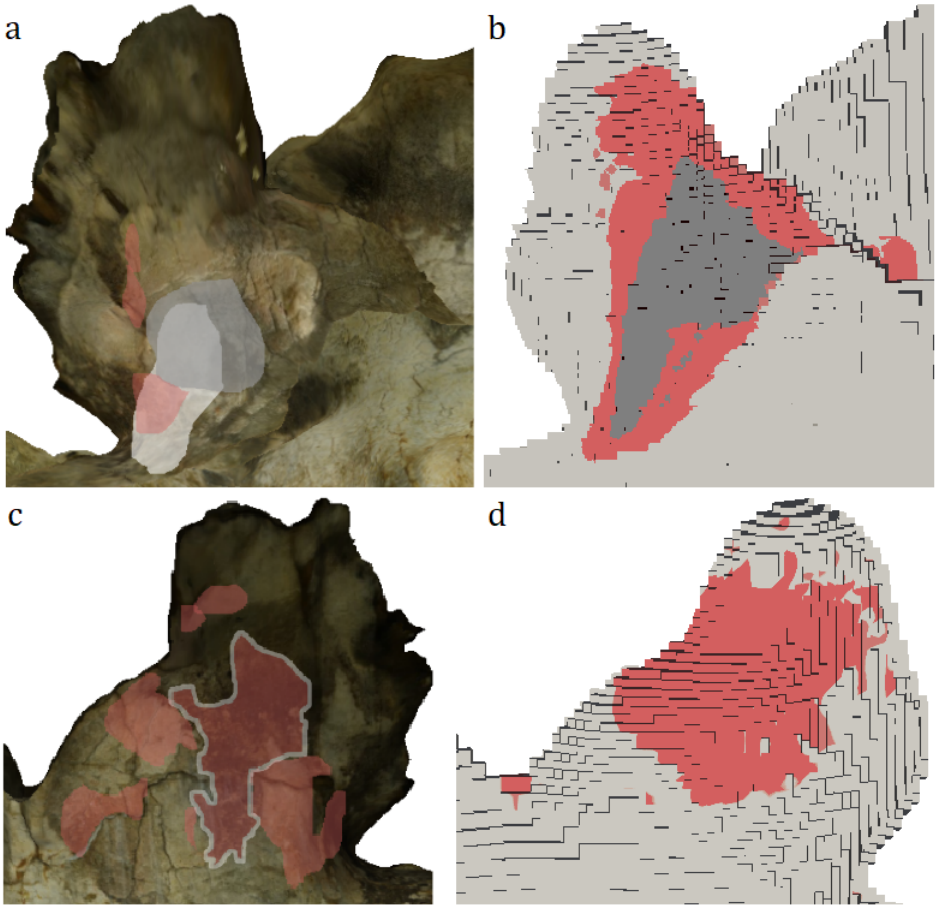

Figure 4.29 – a - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la zone 2 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi droite de la zone 2 pour un foyer de 28 kg de bois. c - Relevé des thermo-altérations de la paroi gauche de la zone 2 (F. Salmon). d - Changements de coloration simulés sur la paroi gauche de la zone 2 pour un foyer de 28 kg de bois.

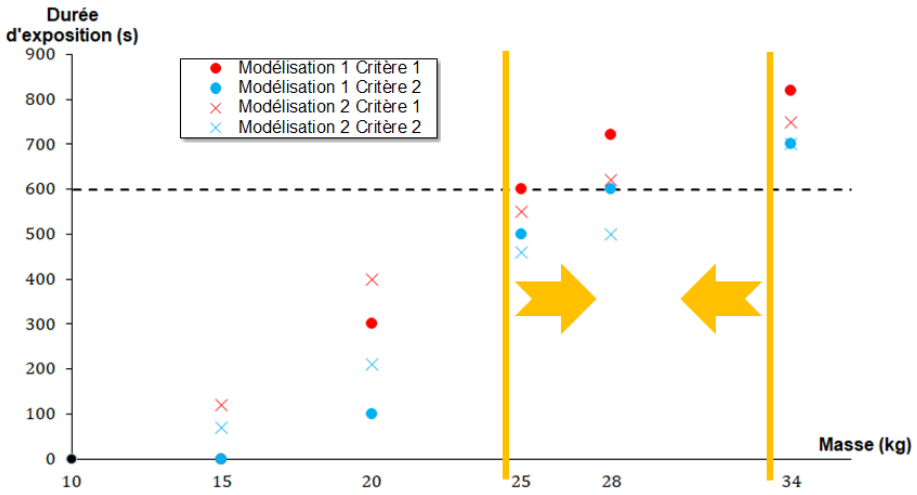

Figure 4.30 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 2 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

sont toutefois possibles si les Aurignaciens ont procédé à plusieurs feux au même endroit. Deux feux d'une vingtaine de kilogrammes sont par exemple envisageables d'après la simulation. En résumé, seuls

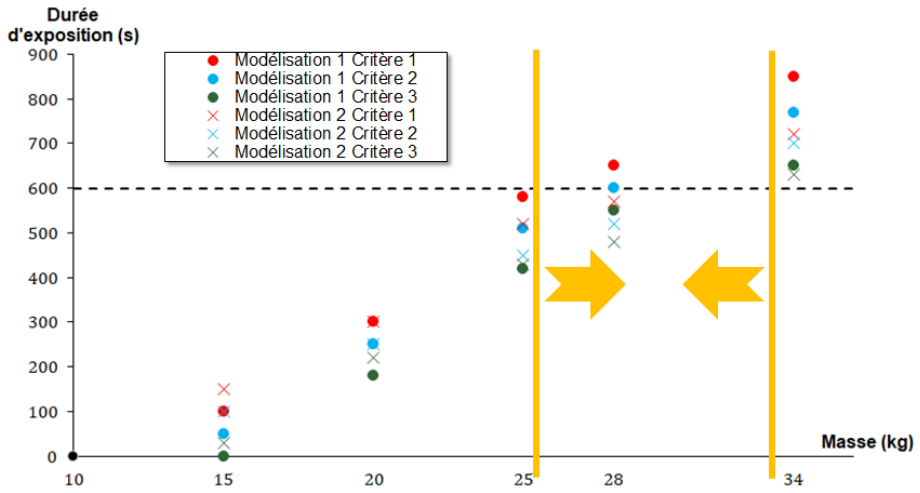

Figure 4.31 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 2 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

des foyers de masse comprise entre une quinzaine et une trentaine de kilogrammes sont plausibles à cet emplacement.

4.4.3.4 Combustion avec alimentation

Le cas d'une alimentation continue durant la combustion est étudié dans cette partie. Le tableau 4.6 rassemble les trois protocoles examinés. Le feu étant *a priori* plus intense que celui du feu 1, la masse initiale est cette fois-ci de 16 kg.

Durée depuis l'allumage	Protocole A	Protocole B	Protocole C
Initial	16 kg	16 kg	16 kg
6 min	4 kg	4 kg	4 kg
10 min	4 kg	4 kg	4 kg
14 min		4 kg	4 kg
18 min			4 kg

Tableau 4.6 – Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 2.

Les figures 4.32 et 4.33 présentent les résultats de simulation correspondant aux changements de coloration selon les modélisations et les critères utilisés (cf tableaux 4.2 et 4.1).

Le protocole A, qui nécessite 24 kg de combustible, ne permet pas de reproduire les thermo-altérations à cet endroit de la grotte. Cette conclusion corrobore les résultats relatifs aux combustions sans alimentation qui montrent aussi qu'une telle masse conduit à une combustion déficiente. La rubéfaction et le changement de couleur grise se produisent pour les protocoles B et C. Le protocole C semble excessif et mène à des altérations trop étendues. Pour une procédure d'alimentation, le protocole B est le plus probable. Il induit la pyrolyse de 28 kg de pin sylvestre ce qui est en accord avec les résultats issus de la combustion sans alimentation (masse voisine).

Les dangers liés à l'alimentation sont relativement restreints. La figure 4.34 présente la FED relative aux dangers du rayonnement et de la température pour un individu qui alimente le foyer 10 minutes après l'allumage, dans le cas du protocole C qui est le plus exigeant. La FED des gaz n'est pas présentée puisque ceux-ci sont inoffensifs. Ils sont en effet absents de la couche froide et n'affecteraient donc pas un individu se déplaçant dans la galerie en étant courbé.

L'alimentation étant possible, tous les protocoles sont donc envisageables du point de vue des

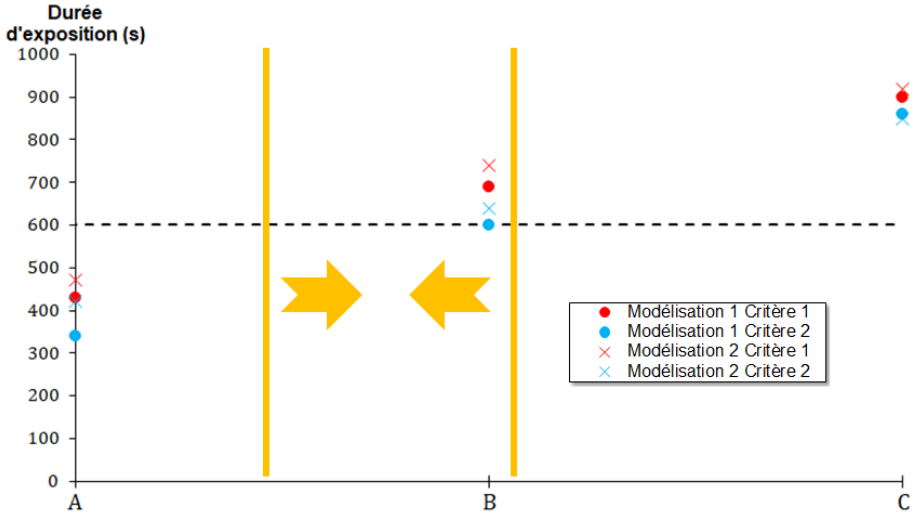

Figure 4.32 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 2 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

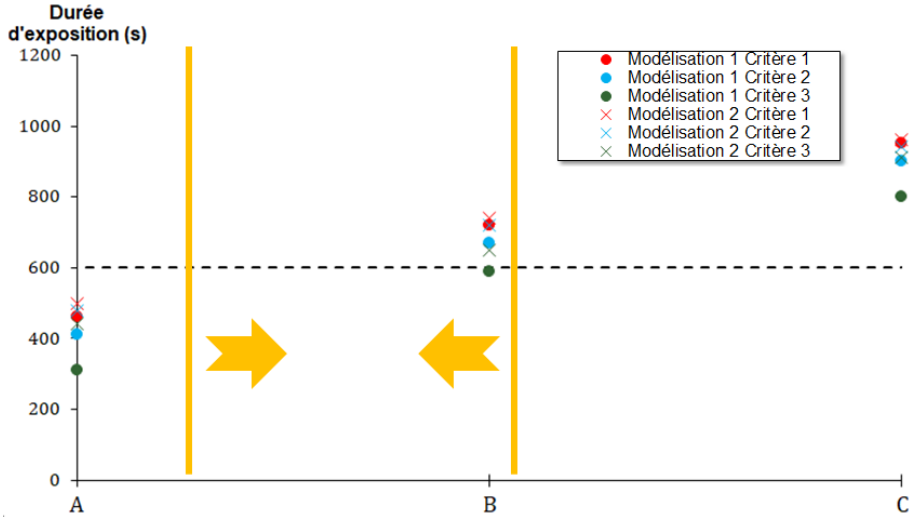

Figure 4.33 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 2 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

dangers. La simulation ne permet pas de trancher quant au mode de combustion employé par les Aurignaciens. Les dangers pour les personnes séjournant dans des zones en retrait du feu seront étudiés dans la section 4.4.9.

4.4.3.5 Écaillage

D'après les résultats concernant les changements de couleur pour les combustions non alimentées (§4.4.3.3), une masse de 25 kg est tangente à la masse requise pour provoquer les thermo-altérations de cette zone. L'étude sur l'écaillage portera donc sur cette masse limite puisque les contraintes mécaniques lors d'une combustion d'une masse supérieure seront forcément plus importantes. La figure 4.35 représente le champ de contrainte σ_{yy} lors de la combustion d'un foyer de 25 kg, 470 secondes après l'allumage lorsque les contraintes sont maximales.

La zone écaillée confondue avec la zone grise est soumise à des contraintes très importantes en

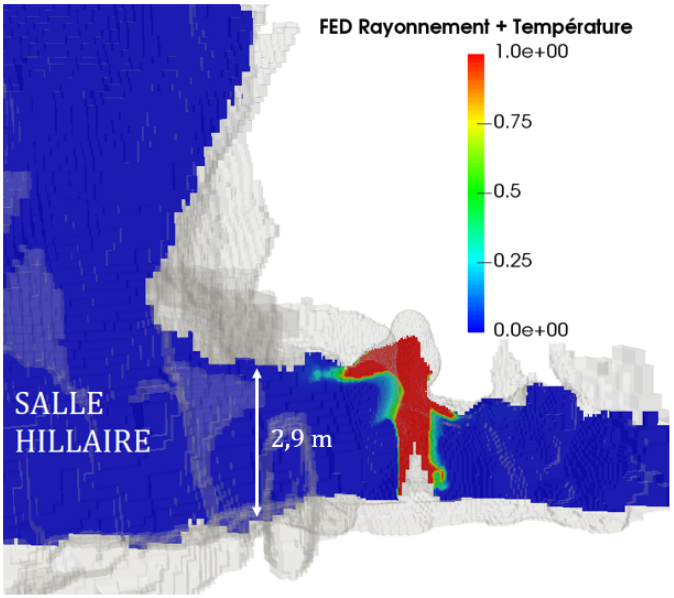

Figure 4.34 – FED relative au rayonnement et à la température pour une personne alimentant le foyer 10 minutes après l'allumage, dans le cadre du protocole C.

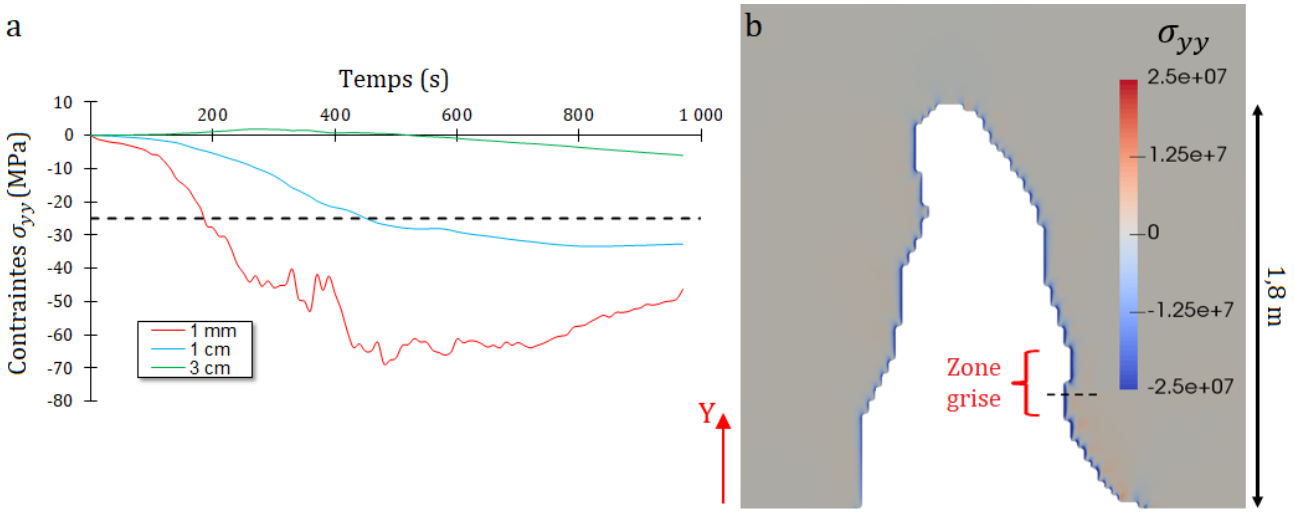

Figure 4.35 – Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 25 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 470 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer.

surface. À 1 mm de la surface, la contrainte dépasse largement la résistance en compression. De même, après environ 400 secondes, la contrainte à 1 cm de profondeur rend probable la fissuration et la production d'écaillage. Les contraintes à 3 cm restent modérées et il n'y a pas de risque de fracturation profonde. Notons que d'autres zones de la coupole sont sujettes à des contraintes supérieures à la résistance en compression mais de manière moins soutenue, ce qui a pu entraver le phénomène d'écaillage. Notons que la couleur grise pour un feu de 25 kg, pénètre la roche jusqu'à 2 mm de profondeur d'après la simulation.

Les simulations relatives aux masses de 15 et 20 kg montrent également une contrainte méca-

nique supérieure à la résistance en compression dans la zone écaillée. L'éventualité de plusieurs foyers n'est donc pas incompatible avec les effets mécaniques des contraintes. Les protocoles d'alimentation conduisent aussi à un dépassement de la résistance en compression.

4.4.3.6 Dépôt de suie

Le dépôt de suie issu de la combustion d'un foyer de 28 kg de bois dans la zone 2 est présenté sur la figure 4.36.

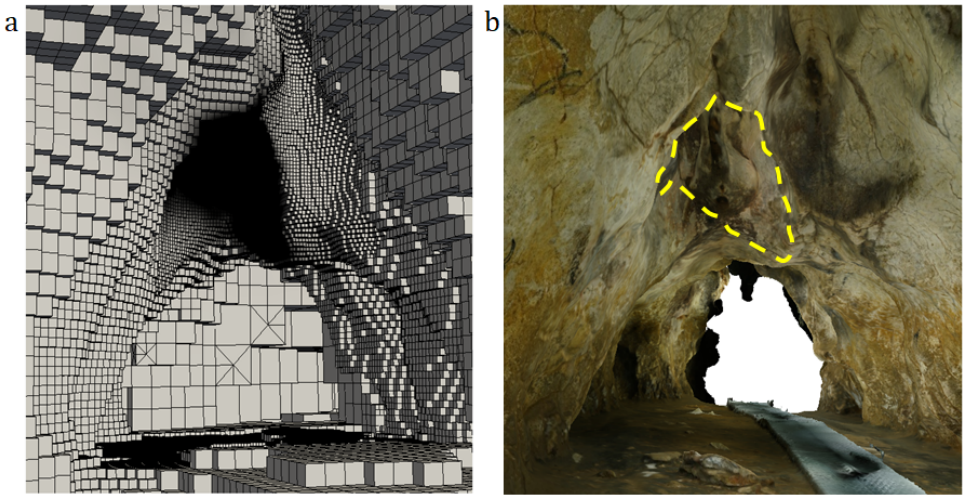

Figure 4.36 – a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 28 kg de bois dans la zone 2. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC).

La majorité des particules de suie est piégée dans la niche et la coupole au-dessus du foyer. Numériquement, le dépôt de suie se poursuit jusqu'au fond de la coupole, ce qui n'est pas visible sur la figure 4.36.a. Une partie d'entre elles semble être encore présente aujourd'hui mais la quantité restante apparaît faible par rapport à la simulation. Les suies déposées sur la surface grise ont pu rebrûler en raison des températures élevées. De plus, comme évoqué pour la zone 1, les processus taphonomiques ont pu contribuer à leur dégradation.

La coupole située à droite de la niche altérée pourrait contenir des dépôts de suie (Fig. 4.36.b). La simulation ne les reproduit pas mais le foyer numérique pourrait être trop décalé vers la gauche de quelques centimètres. Ce décalage pourrait suffire à éviter tout dépôt dans cette coupole. Ainsi, si des suies furent piégées dans cette zone, elles proviennent vraisemblablement de ce feu.

4.4.3.7 Discussion

D'après la simulation numérique, plusieurs scénarios sont plausibles : alimentation, foyer unique ou plusieurs feux. La coloration grise étant très localisée dans la niche, si plusieurs feux furent effectués à cet emplacement, ils l'ont été avec des foyers compacts placés exactement au même endroit. Sans cette caractéristique, une portion plus grande de la voûte aurait été altérée. L'hypothèse d'un foyer unique proche de la trentaine de kilogrammes ou alimenté constitue les scénarios les plus simples. Cependant, l'alimentation parait peu envisageable pour la même raison que celle évoquée pour la zone 1 : la quantité de combustible est faible et un foyer unique semble plus simple à mettre en place que des apports successifs de combustible. Même s'il n'est pas possible d'écarter définitivement le scénario de l'alimentation, le scénario d'un foyer unique paraît le plus probable.

4.4.4 Zone 3

Cette partie présente les résultats des simulations relatives aux thermo-altérations de la zone 3 (Fig. 4.14).

4.4.4.1 Présentation de la zone altérée

La zone 3 se situe à côté de la zone 2, dans une coupole (Fig. 4.14). À l'image du premier feu, sa position au sein de la galerie est cependant plus excentrée que celle du deuxième feu (Fig. 4.37). Les thermo-altérations sont en effet présentes sur la paroi gauche de la galerie comme le feu 1. Aucune surface grise n'est visible mais il est possible qu'elles aient existé au niveau des surfaces écaillées. La rubéfaction affecte une surface conséquente de la paroi ainsi qu'une partie de la zone écaillée.

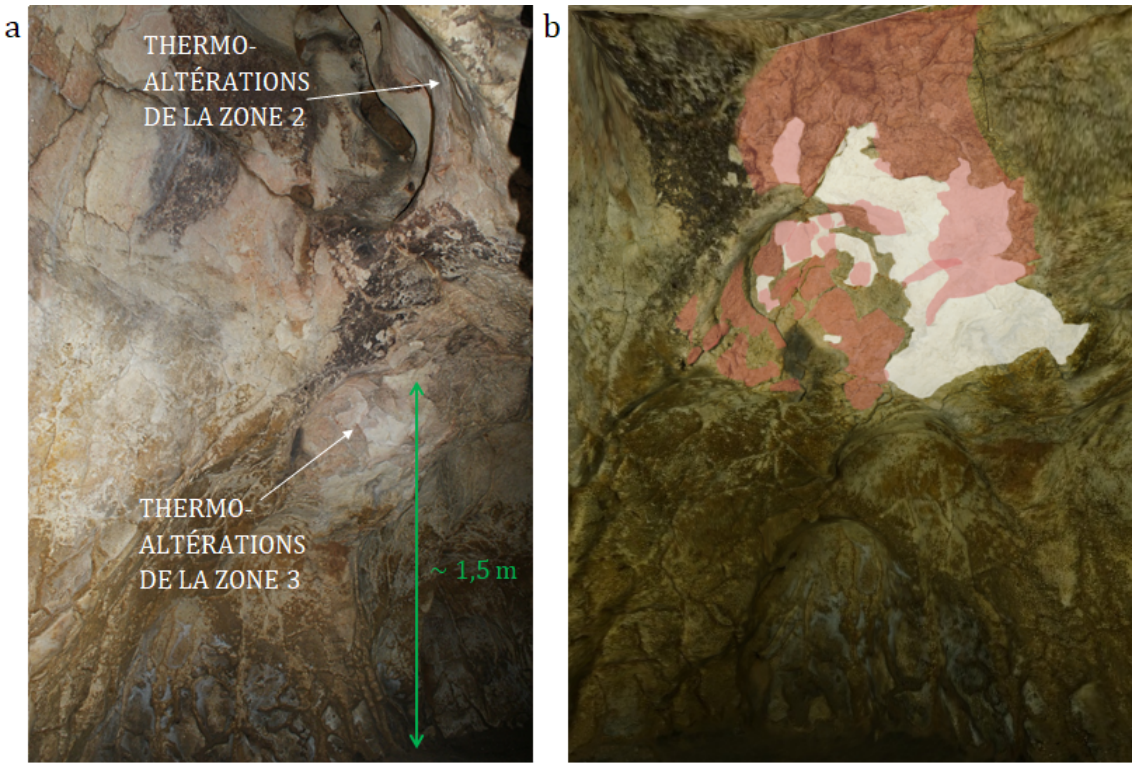

Figure 4.37 – a - Emplacement de la coupole altérée de la zone 3 au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations de la zone 3 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée.

4.4.4.2 Localisation du site de combustion

L'aplomb de la zone écaillée semble *a priori* la zone privilégiée pour positionner le foyer. Notons que comme pour la zone 1, le pied de paroi n'est pas altéré. Le foyer était donc très certainement localisé sous la zone écaillée sans être placé contre la paroi. La position du foyer dans les simulations numériques effectuées ainsi que son volume supposé dans la Galerie des Mégacéros sont présentés sur la figure 4.38.

L'emplacement défini permet de rendre compte des thermo-altérations. La figure 4.39 compare les changements de couleur estimés par la simulation d'une combustion de 20 kg de bois avec les thermo-altérations visibles dans la grotte.

4.4.4.3 Combustion sans alimentation

Selon la même méthode que pour les feux précédents, les résultats des simulations pour les feux sans alimentation sont proposés sur les figures 4.40 et 4.41. La figure 4.40 présente les conclusions

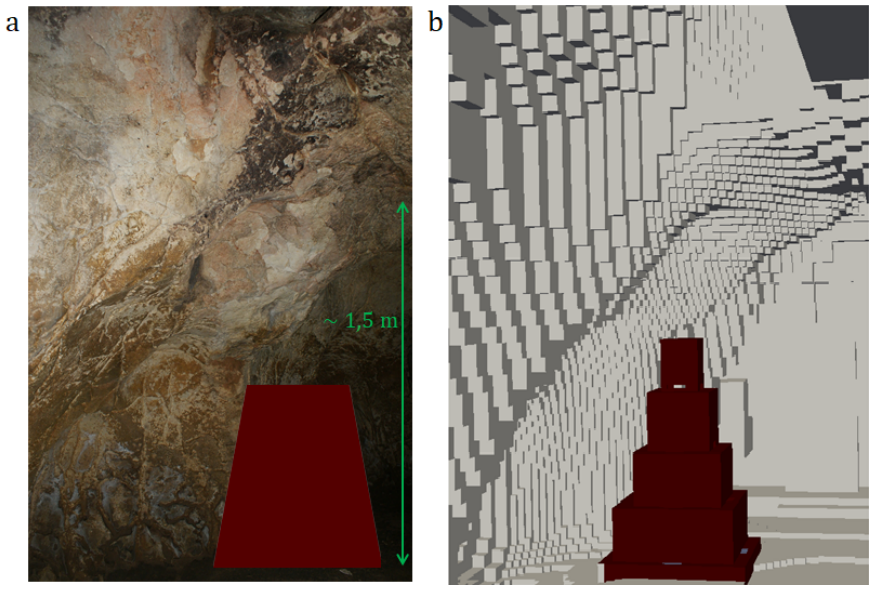

Figure 4.38 – a - Volume supposé du foyer de la zone 3. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations de la zone 3.

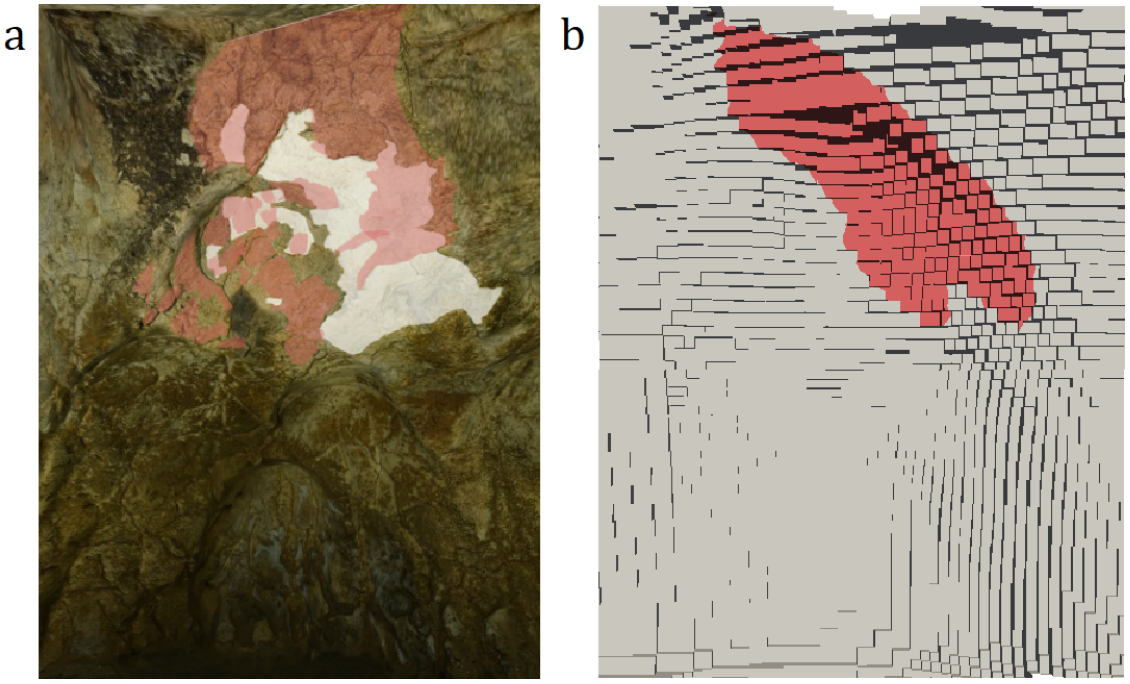

Figure 4.39 – a - Relevé des thermo-altérations de la zone 3 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 3 pour un foyer de 20 kg de bois.

concernant la rubéfaction tandis que la figure 4.41 indique les durées d'exposition qui n'engendrent une altération grise que sur la zone écaillée. Ce traitement est effectué ici car la paroi ne présente pas de zone grise et qu'une thermo-altération de ce type est seulement envisageable sur les écailles. Les désignations des méthodes et des critères de changement de coloration restent les mêmes (cf. tableaux 4.2 et 4.1).

La figure 4.40 montre qu'une masse de bois inférieure à une quinzaine de kilogrammes est insuffisante pour reproduire les thermo-altérations. La quantité de bois nécessaire est probablement d'environ une vingtaine de kilogrammes. Un foyer de cette masse engendrerait une flamme d'au moins 1,4 m (Fig. 4.15) ce qui est suffisant pour atteindre la zone écaillée. Pour des masses supérieures, la paroi de la

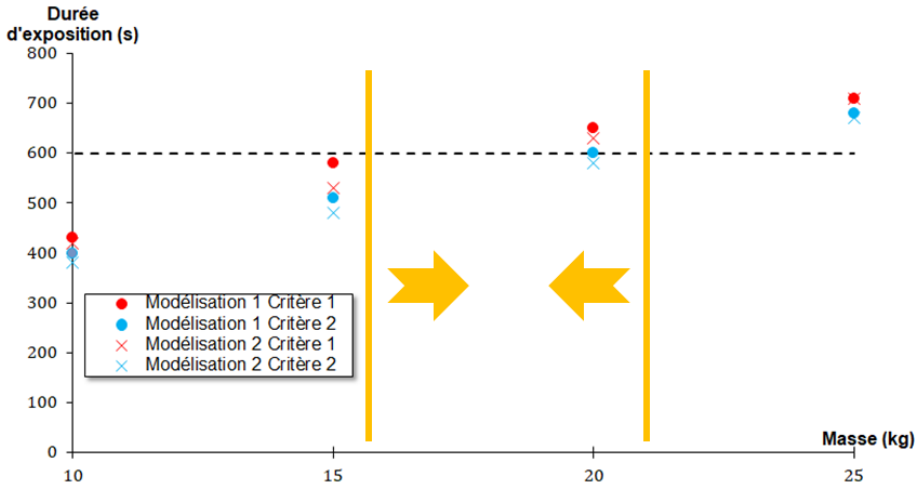

Figure 4.40 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 3 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

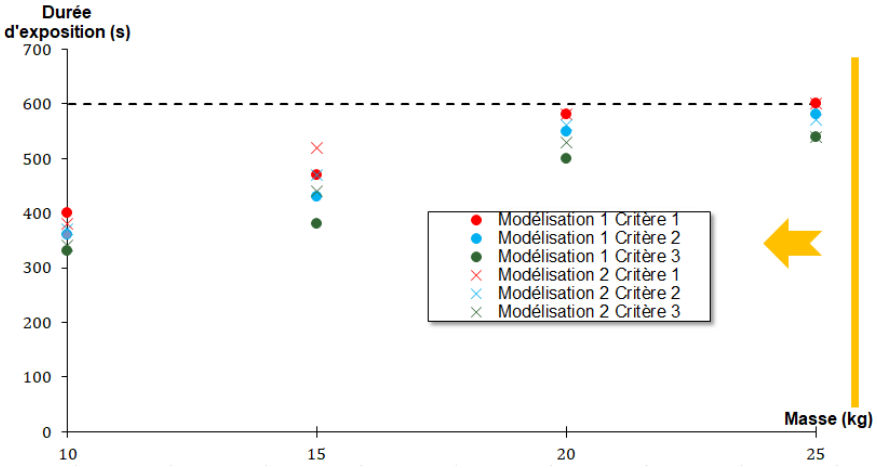

Figure 4.41 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 3 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

galerie aurait été davantage altérée par des températures plus élevées. La figure 4.41 valide la masse d'une vingtaine de kilogrammes puisqu'aucune surface grise n'est produite par ces foyers. Un foyer de 25 kg serait même théoriquement possible du point de vue de la coloration grise mais l'étendue des traces de rubéfaction serait excessive. Notons enfin que deux foyers de masses inférieures à 10 kg pourraient reproduire la rubéfaction de la paroi.

4.4.4.4 Combustion avec alimentation

Trois protocoles sont simulés dans le cadre de la combustion avec alimentation. Ils sont répertoriés dans le tableau 4.7.

Les figures 4.42 et 4.43 donnent les temps d'exposition pour les trois protocoles du tableau 4.7. Une alimentation est possible même si elle doit rester modérée. En effet, même si le protocole A est trop modeste, le protocole B induit des thermo-altérations qui semblent légèrement excessives. L'estimation des dangers induits par la combustion révèle que l'alimentation du foyer était possible comme pour les deux premiers feux étudiés. Il y a concordance entre les résultats des combustions avec et sans alimentation. D'une part, le protocole B, qui implique la pyrolyse de 20 kg de pin sylvestre, est le

Durée depuis l'allumage	Protocole A	Protocole B	Protocole C
Initial	8 kg	8 kg	8 kg
6 min	4 kg	4 kg	4 kg
9 min	4 kg	4 kg	4 kg
12 min		4 kg	4 kg
15 min			4 kg

Tableau 4.7 – Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 3.

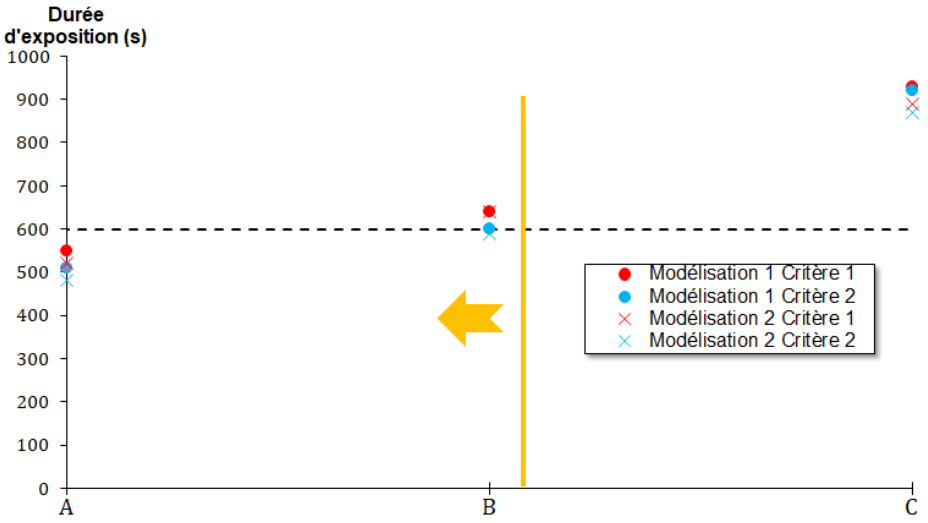

Figure 4.42 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 3 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

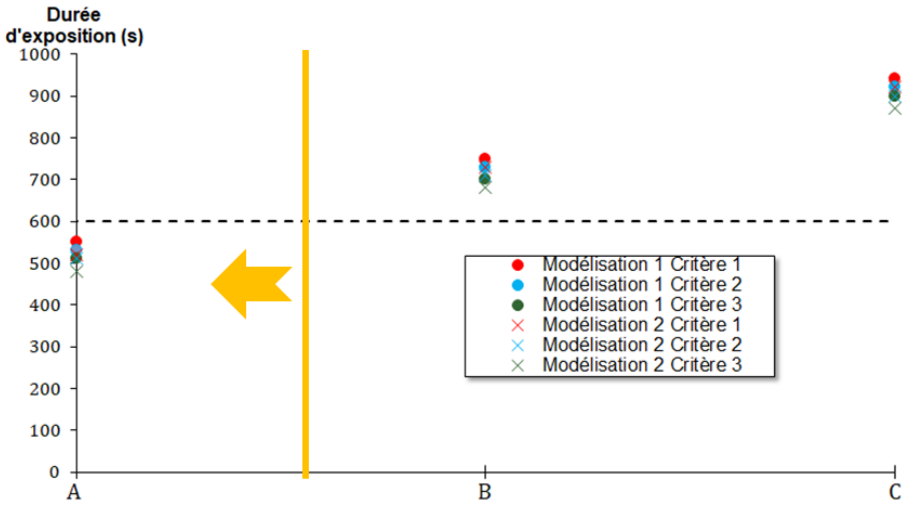

Figure 4.43 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 3 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

scénario qui conduit aux thermo-altérations les plus proches de celles observables *in situ*. D'autre part, il s'agit de la même masse qui fut déterminée lors de l'analyse relative aux combustions sans alimentation. Ainsi, si une combustion alimentée a été mise en œuvre, le foyer n'a connu que de faibles apports de combustibles.

4.4.4.5 Écaillage

Puisque la surface écaillée est subhorizontale, l'analyse sur l'écaillage portera sur les contraintes en compression selon l'axe x contrairement aux deux zones précédentes. La figure 4.44.b indique donc le champ de contraintes en compression σ_{xx} lors de la combustion d'un foyer de 20 kg de bois, 460 secondes après l'allumage lorsque les contraintes sont maximales. La figure 4.44.a présente l'évolution temporelle des contraintes mécaniques à différentes profondeurs dans la roche.

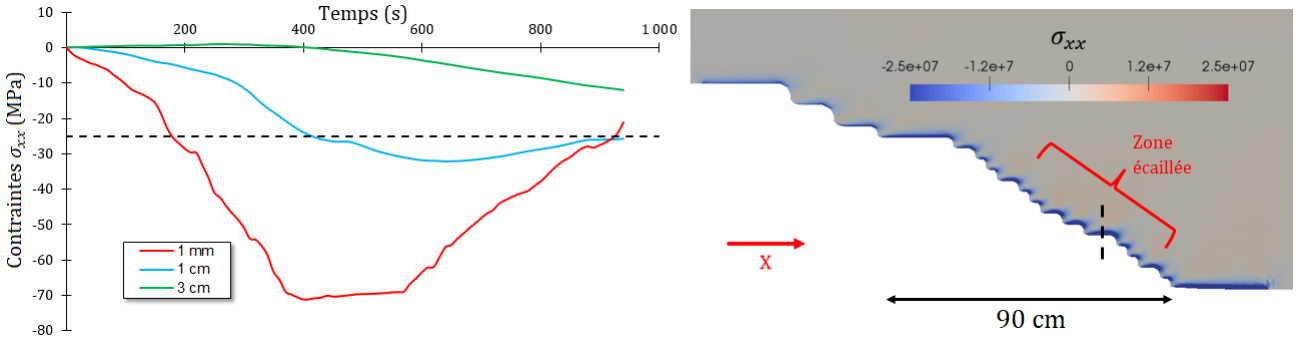

Figure 4.44 – Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 20 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{xx} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{xx} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer.

Les conclusions sont similaires aux feux précédents. Les contraintes dépassent la résistance en compression jusqu'à environ 1 cm d'après la simulation. Plus en profondeur, les contraintes sont affaiblies par la diffusion thermique sur les premiers centimètres. Un feu de 20 kg aurait donc pu causer un écaillage superficiel de la paroi de la grotte. La simulation relative à une masse de 15 kg conduit à la même conclusion. Notons que la figure 4.44.b montre qu'un écaillage plus étendu aurait pu se produire. L'épaisseur de roche rubéfiée lors d'un feu de 20 kg est de l'ordre de 5 mm d'après la simulation menée avec Cast3m. Le calcul des contraintes mécaniques dans la roche lors du protocole d'alimentation A (Tab. 4.7) montre de même un dépassement local de la résistance en compression. Le module de Young du calcaire urgonien étant élevé, la contrainte augmente rapidement avec la déformation. C'est pour cette raison qu'un feu très intense n'est pas indispensable pour écailler la paroi.

4.4.4.6 Dépôt de suie

La figure 4.45 présente le dépôt de suie issu de la simulation d'un feu de 20 kg dont l'emplacement est indiqué sur la figure 4.38.

Les particules de suie de ce foyer couvrent, *a priori*, une zone restreinte voisine de celui-ci. Il reste aujourd'hui peu de trace de dépôt de suie. La zone frontière avec la coupole altérée de la zone 2 (partie supérieure incluse dans le contour jaune) est affectée par le dépôt de suie des feux 2 et 3 (Fig. 4.36 & 4.45).

4.4.4.7 Discussion

Dans le cas d'un foyer unique, la masse de combustible devait se situer autour d'une vingtaine de kilogrammes. Si plusieurs foyers furent effectués, ils étaient nécessairement plus petits ($<$10 kg) et localisés tels que sur la figure 4.38. Les thermo-altérations étant assez étendues, la position du foyer pourrait être légèrement différente de celle proposée sur la figure 4.38. Seul un écart modeste (au plus quelques dizaines de centimètres) est toutefois envisageable puisque la présence d'écaillage impose naturellement la position approximative du foyer sous celui-ci.

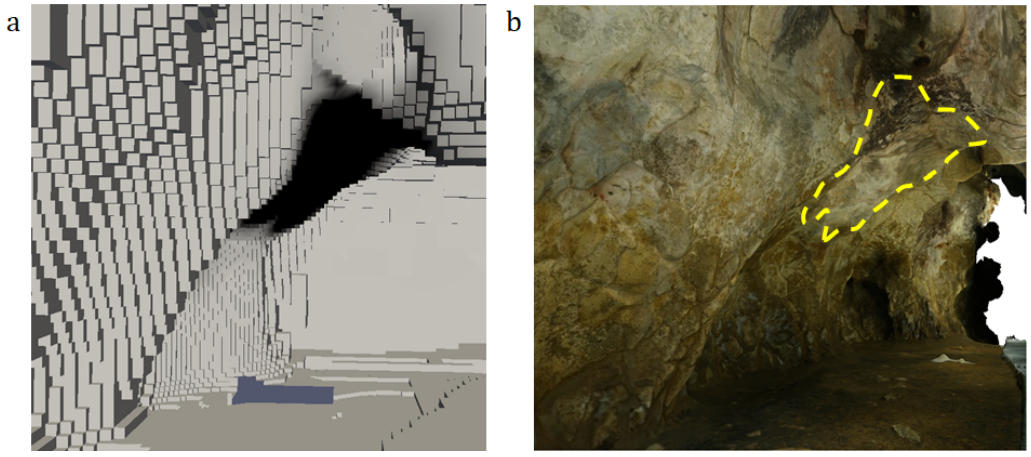

Figure 4.45 – a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 20 kg de bois dans la zone 3. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC).

La faible masse nécessaire pour reproduire les thermo-altérations rend moins probable le scénario d'une alimentation en continu. En effet, moins de trois alimentations sont théoriquement envisageables (protocole B). Il semble ainsi plus simple d'initialiser la combustion avec la totalité du combustible.

Comme pour les foyers précédents, l'hypothèse la plus probable correspond à la combustion d'un foyer unique et non alimenté. La masse de combustible nécessaire est similaire à celle du foyer de la zone 1. Leur localisation étant comparable puisqu'ils sont tous les deux excentrés le long de la paroi gauche de la galerie, les deux feux ne se distinguent que par quelques kilogrammes de combustible.

4.4.5 Zone 4

Cette partie fournit les conclusions quant aux foyers susceptibles d'avoir produit les thermo-altérations de la zone 4 (Fig. 4.14).

4.4.5.1 Présentation de la zone altérée

À quelques mètres de la zone 3, des traces de rubéfaction sont observables sur la paroi gauche de la galerie (Fig. 4.46.a). La zone 4 est peu éloignée du groupe des trois premières zones qui sont plus proches de l'entrée (Fig. 4.14). À l'instar des zones 1 et 3, les thermo-altérations se situent sur la paroi gauche à une hauteur de l'ordre du mètre (Fig. 4.46.b). Un écaillage important situé sous la rubéfaction est observable (Fig. 4.46.c). Aucune coloration grise n'affecte la paroi mais son absence ne peut être attestée sur les écailles éjectées. Notons de nouveau l'absence de rubéfaction en pied de paroi.

Ces thermo-altérations résultent donc, *a priori*, d'un feu peu intense puisque la paroi est seulement rubéfiée et les thermo-altérations se situent assez bas sur la paroi (à environ un mètre de hauteur). Parmi les sept zones altérées décrites dans ce chapitre, celle-ci semble être la moins altérée. Un foyer réduit est donc attendu.

4.4.5.2 Localisation du site de combustion

Comme pour les zones 1 et 3, le foyer devait se trouver au ras de la paroi sans la toucher, en-dessous de la zone altérée. Les thermo-altérations étant très localisées, la flamme devait frapper le bas de la zone rubéfiée, puis provoquer une extension de la rubéfaction en léchant la paroi. La figure 4.47 présente l'emplacement du foyer numérique ainsi que le volume correspondant dans la Galerie des Mégacéros.

L'absence d'altération en bas de paroi indique que le foyer ne touchait pas la paroi. Pourtant, la zone rubéfiée est quasiment verticale de sorte qu'il apparait très difficile d'altérer la paroi seulement à mi-hauteur (voir Fig. 4.46.b). Il y eut à cet emplacement une volonté d'éviter un positionnement

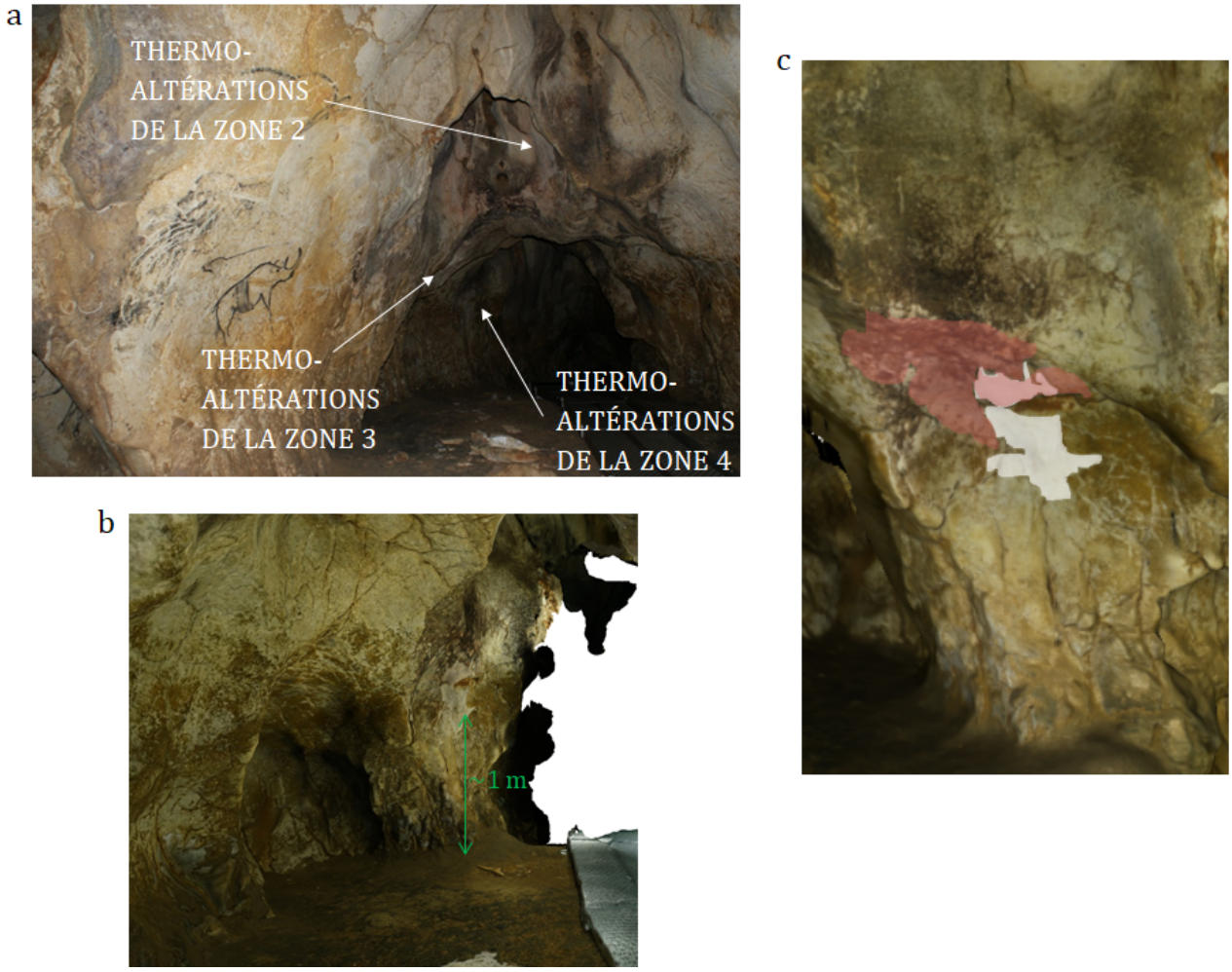

Figure 4.46 – a - Emplacement de la paroi altérée de la zone 4 par rapport aux trois autres zones au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Détail de la paroi altérée (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). c - Relevé des thermo-altérations de la zone 4 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée.

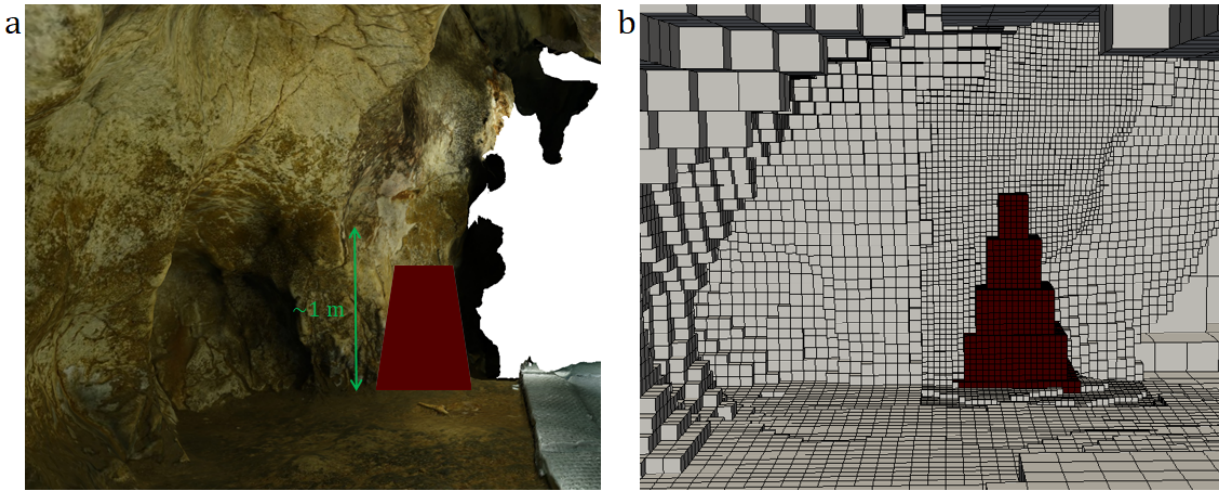

Figure 4.47 – a - Volume supposé du foyer de la zone 4. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 4.

contre la paroi alors que ce choix aurait été plus facile. Par exemple, il n'a pas été possible de placer le foyer numérique (Fig. 4.47.a) sans toucher la paroi. Un ajustement de la position des brûleurs a dû être effectué pour éviter les altérations de la partie basse de la paroi. Avec cet ajustement, la rubéfaction simulée est assez proche de la rubéfaction observable dans la Galerie des Mégacéros. La figure 4.48 compare la simulation avec l'observation pour un feu de 10 kg.

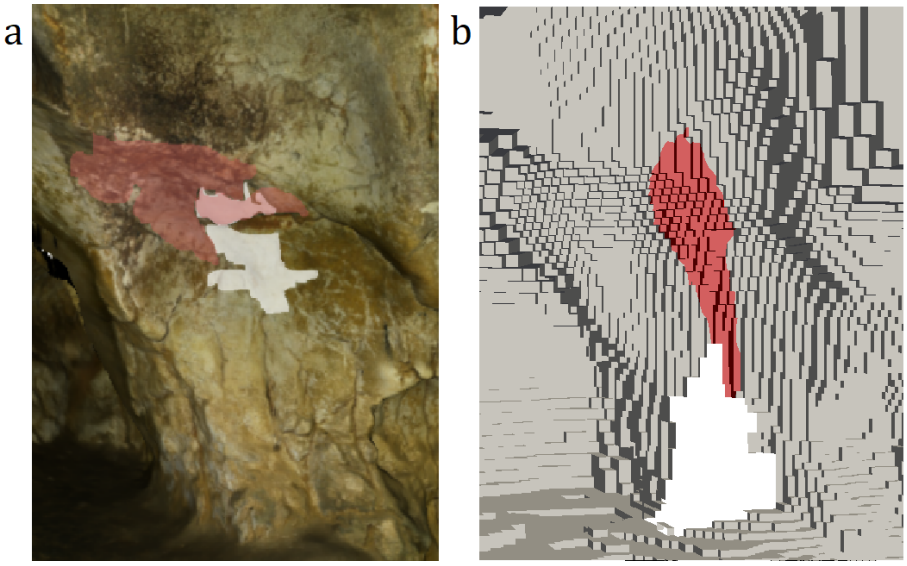

Figure 4.48 – a - Relevé des thermo-altérations de la zone 4 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 4 pour un foyer de 10 kg de bois.

Même si de petits écarts subsistent, la zone altérée dans la simulation est voisine des observations. Cet emplacement est donc sélectionné.

4.4.5.3 Combustion sans alimentation

Comme pour les feux précédents, les résultats sont consignés sur des graphiques. La figure 4.49 donne les temps nécessaires pour générer une rubéfaction visible et la figure 4.50 présente les durées d'exposition qui n'engendrent une coloration grise que sur la zone écaillée. Seuls deux cas sont simulés puisqu'un foyer de 15 kg s'avère déjà excessif. Les désignations des méthodes et des critères de changement de coloration sont respectivement indiqués dans les tableaux 4.2 et 4.1.

D'après la simulation, un foyer de 15 kg est trop important tandis qu'un foyer de 10 kg engendre une rubéfaction similaire à celle de la grotte. Un foyer de 10 kg produit une flamme d'une hauteur minimum d'environ 1,2 m ce qui est supérieur à la hauteur des thermo-altérations. Il faut toutefois nuancer ce résultat car la modélisation se base sur des foyers expérimentaux dont les masses s'étendaient entre 16 kg et 90 kg de bois (§4.3.3). Ainsi, la simulation d'une combustion de 10 kg repose sur une interpolation du modèle à une masse moins importante que les masses testées. Le modèle peut donc souffrir d'imprécision pour une masse de 10 kg et il est par conséquent plus prudent de considérer qu'une masse jusqu'à environ 15 kg est possible. Des quantités supérieures sont néanmoins proscrites d'après la simulation. Les thermo-altérations grises sont absentes des simulations quelle que soit la masse considérée (10 ou 15 kg). De ce point de vue, les combustions jusqu'à 15 kg sont aussi envisageables puisqu'elles respectent les observations. L'évaluation des FED dans la Galerie des Mégacéros démontre l'absence de dangers importants. Un séjour prolongé à proximité du feu de la zone 4 était donc possible.

Puisque la combustion correspond à un foyer de masse inférieure à 15 kg, aucun protocole d'alimentation n'est testé. Il semble en effet peu probable que les Aurignaciens aient usé d'un tel procédé pour une masse aussi faible.

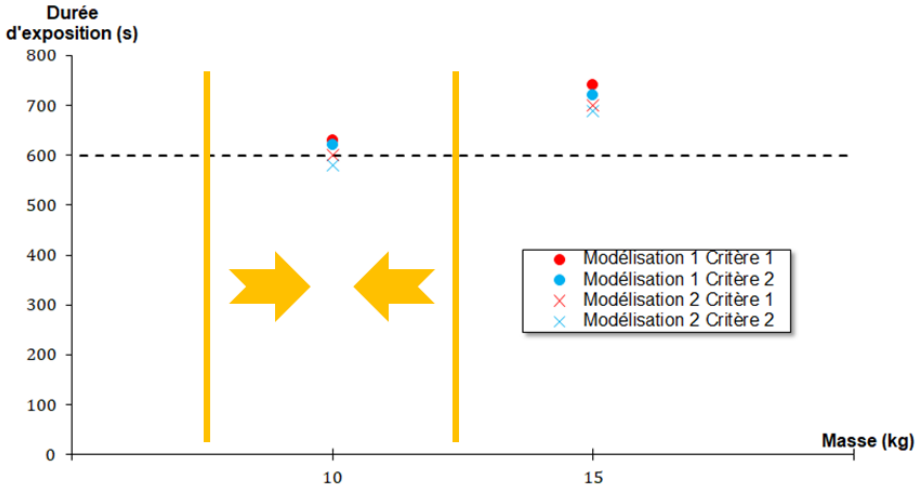

Figure 4.49 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 4 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

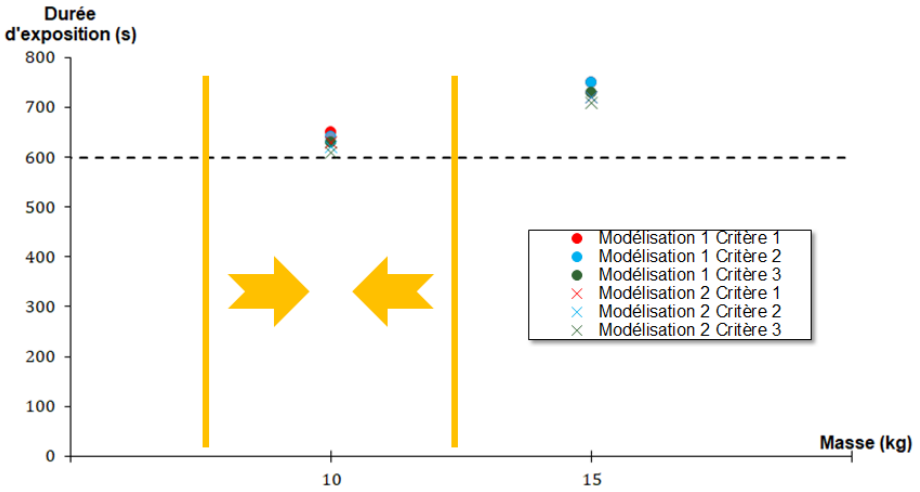

Figure 4.50 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 4 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

4.4.5.4 Écaillage

La figure 4.51.b indique le champ de contraintes en compression σ_{yy} 460 secondes après l'allumage d'un foyer de 10 kg de bois. La figure 4.51.a compare l'évolution des contraintes en compression pour différentes profondeurs dans la roche.

D'après la simulation, l'écaillage est possible puisque la contrainte dépasse la résistance en compression jusqu'à plus d'un centimètre. Toutefois, à cette profondeur, le dépassement est léger et bref. La faible durée d'exposition limite donc la probabilité d'écaillage. La figure 4.51.b montre toutefois que le risque de fracture est important jusqu'à la voûte. Ainsi, la simulation montre que la présence d'écaillage pour un feu de 10 kg est envisageable.

4.4.5.5 Dépôt de suie

La figure 4.52 présente le dépôt de suie issu de la simulation de la combustion d'un foyer de 10 kg de bois. Les vues en contre-plongée permettent de visualiser la couche de suie à l'intérieur des coupoles.

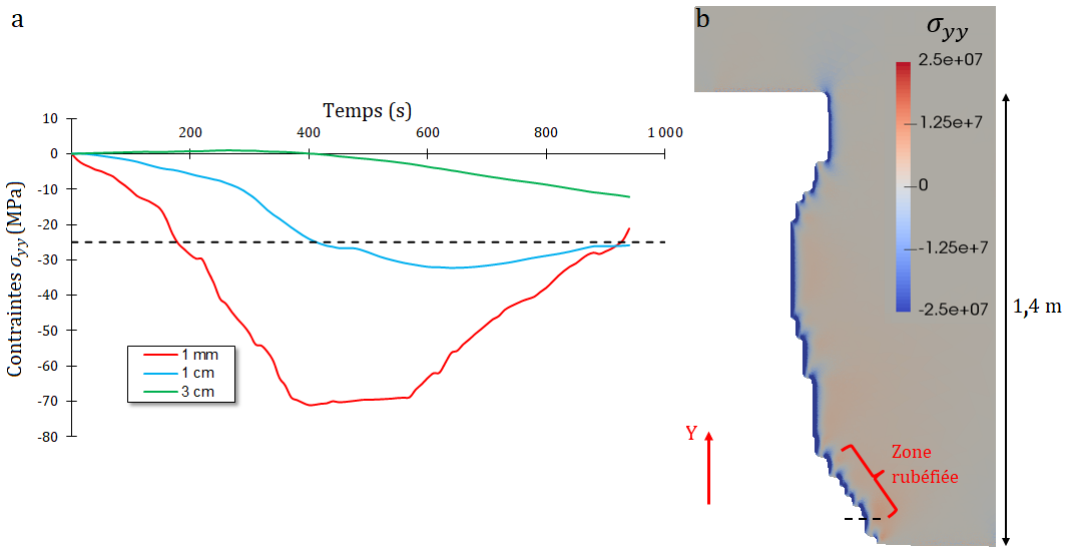

Figure 4.51 – Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 10 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer.

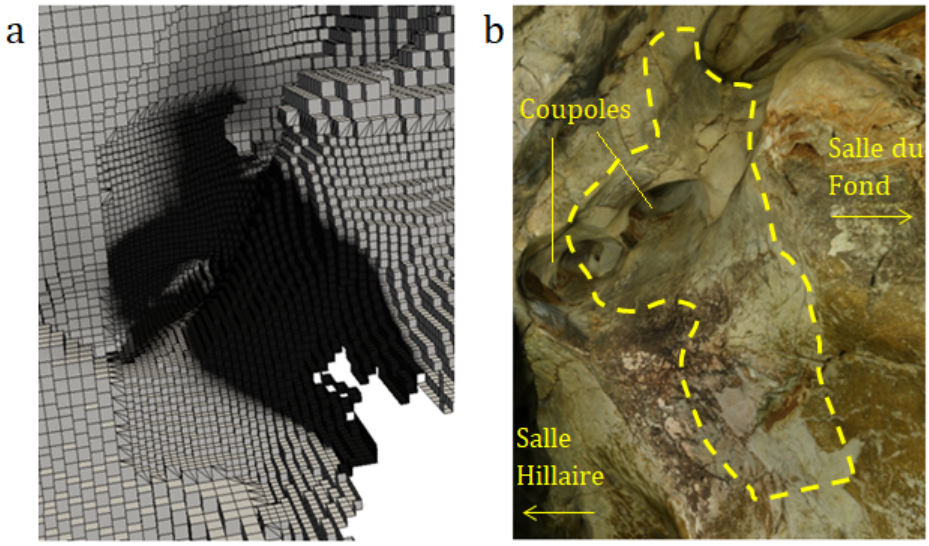

Figure 4.52 – a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 10 kg de bois dans la zone 4. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC).

D'après la simulation, seule une faible proportion de particules fut transportée dans la coupole située en haut de la figure 4.52.a. La plupart des particules a dû se déposer dans les deux coupoles situées dans la direction de la Salle Hillaire (Fig. 4.52.a).

4.4.5.6 Discussion

Le caractère modéré des thermo-altérations de la paroi limite nécessairement l'intensité de la combustion. L'absence de zone grise exclut les combustions assez intenses comme par exemple la pyrolyse

d'une masse de pin sylvestre supérieure à 15 kg. Il y a donc peu de place pour différents scénarios à cet emplacement. Il parait très probable qu'un seul feu d'une dizaine de kilogrammes ait été effectué à cet endroit. Il n'est cependant pas possible d'écarter plusieurs petites combustions successives de quelques kilogrammes.

L'emplacement du feu est particulier car le foyer est à la fois placé au plus près de la paroi mais sans la toucher malgré un sol légèrement en pente à cet endroit (Fig. 4.46.b). Il y a donc une volonté réelle de placer le foyer à cet emplacement puisqu'il aurait été beaucoup plus simple de le placer au milieu de la galerie ou dans le diverticule situé à gauche, où le sol est plat (Fig. 4.47.a). Ainsi, particulièrement pour ce feu, un effondrement du foyer pendant sa combustion est plausible. Peut-être que les Aurignaciens ont conçu un foyer plus important (de quelques kilogrammes) mais que celui-ci s'est affaissé après quelques minutes, limitant l'intensité des thermo-altérations.

4.4.6 Zone 5

Cette partie présente les résultats correspondant aux thermo-altérations de la zone 5 (Fig. 4.14).

4.4.6.1 Présentation de la zone altérée

La zone 5 se situe à environ 5 mètres des thermo-altérations de la zone 4. Elle est, de prime abord, la plus impressionnante puisqu'elle comporte de très nombreuses surfaces altérées. De plus, un bloc de l'ordre du mètre cube s'est détaché de la paroi droite et se trouve actuellement au milieu de la galerie (Fig. 4.53). Cet événement s'est produit vers la fin ou après les combustions puisqu'aucune altération n'affecte la cicatrice du détachement. Au-delà de cet emplacement, en direction de la Salle du Fond, une surface conséquente de la paroi est grise voire noire (probablement en raison d'un dépôt de suie). Au-dessus de la coloration grise, une zone écaillée, dont la surface est rubéfiée, se poursuit jusque dans une coupole. L'éventualité de plusieurs combustions ne peut donc être écartée. Le bas de la coupole surplombant le bloc présente aussi quelques traces de rubéfaction mais pas d'écaillage (Fig. 4.53.b). Le côté gauche est aussi altéré puisque les deux coupoles de cette zone ont subi des écaillages conséquents (Fig. 4.53.c). La paroi présente également des changements de coloration (rouge et gris). Notons qu'aucun changement de coloration ne semble affecter le haut des coupoles. Dans cette partie, seules les caractéristiques du foyer ayant généré les thermo-altérations de la paroi droite sont étudiées.

4.4.6.2 Localisation du site de combustion

La présence de la surface grise sur la paroi droite requiert de positionner le foyer à l'aplomb de celle-ci. Il devait donc se trouver à proximité de la paroi droite, sans la toucher. Cette position rappelle celles des foyers des zones 1, 3 et 4 même si le côté choisi n'est plus le gauche. Avant la ou les combustions, le long de la paroi droite, le bloc était encore rattaché au massif. Aucun feu ne pouvait donc être positionné à l'emplacement du bloc. Le fond des coupoles n'étant pas thermiquement altéré, si des feux furent réalisés au milieu de la galerie, à l'aplomb des coupoles, alors ils devaient être d'une puissance suffisamment faible pour ne laisser aucune trace. Ils ne feront donc pas l'objet de simulation. Du côté gauche de la galerie, une part importante de la paroi est altérée et l'aspect discontinu des thermo-altérations suggère la réalisation de plusieurs combustions distinctes. La grande surface écaillée sur le côté gauche de la première coupole (coupole de gauche sur la figure 4.53.c) ôte des informations qui auraient pu être précieuses. Parmi les écaillages, il reste toutefois une trace de coloration grise à une hauteur similaire à la plus haute zone grise observable sur la paroi droite (Fig. 4.53.b). Un feu intense, analogue à celui ayant affecté la paroi droite, a donc du entraîner localement ce changement de coloration. Seule la position du foyer ayant entraîné les thermo-altérations de la paroi droite est discutée.

Puisqu'un feu a forcément été conduit à l'aplomb de la zone grise observable sur la paroi droite, la suite de l'étude porte sur les conséquences d'un feu à cet emplacement. La figure 4.54 présente l'emplacement du foyer proposé dans ce mémoire. Pour la simulation, il a été nécessaire d'élargir le foyer par rapport à la forme en tipi employée pour les quatre premières zones. Le maillage utilisé pour les simulations prend en compte la restitution du volume du bloc présent au sol à son emplacement

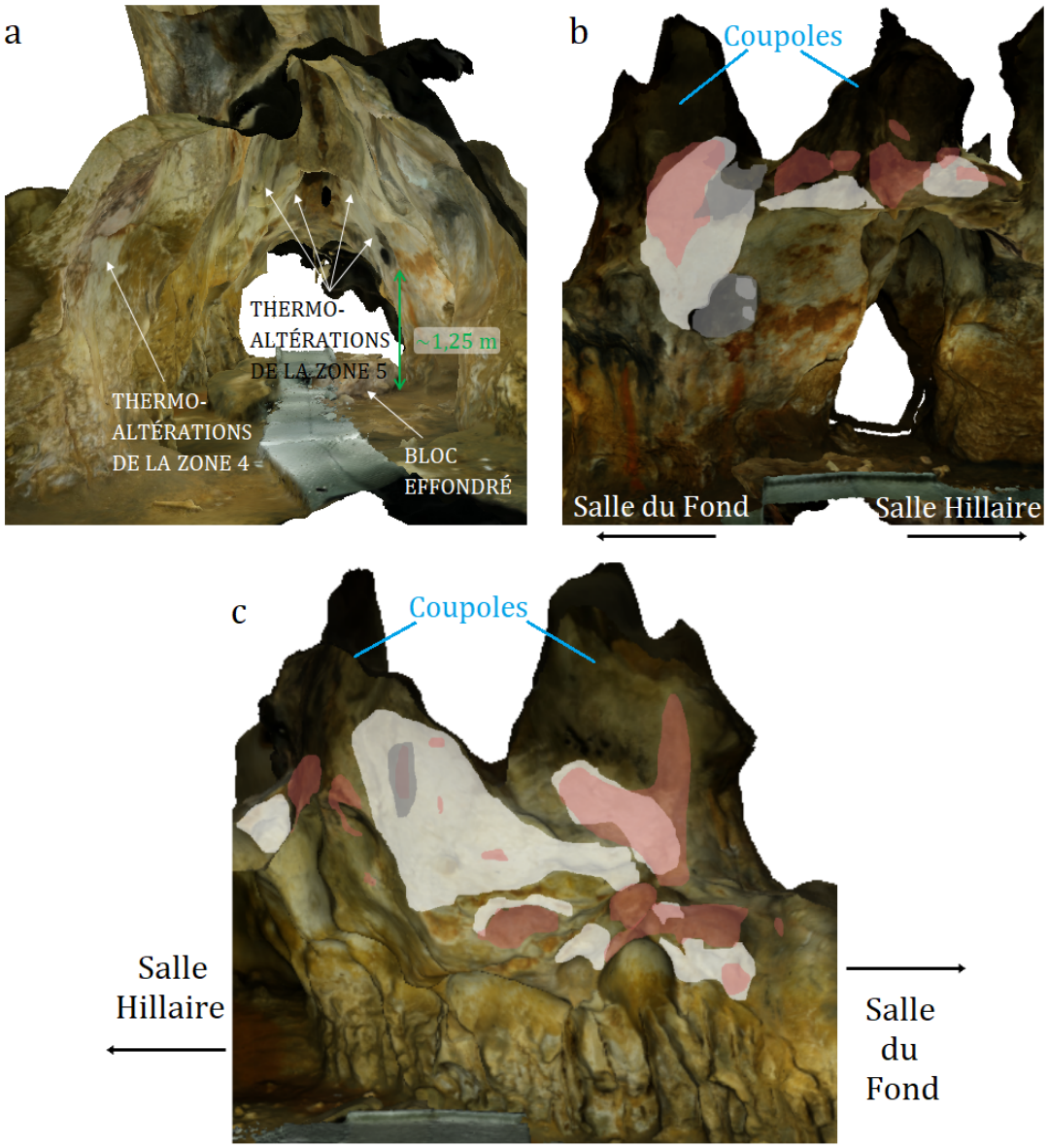

Figure 4.53 – a - Emplacement de la zone 5 au sein de la Galerie des Mégacéros. b - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la zone 5 (F. Salmon). La zone grise correspond à la coloration grise, la zone rose à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée. c - Relevé des thermo-altérations de la paroi gauche de la zone 5 (F. Salmon).

d'origine, sur la paroi. Ce procédé fut nécessaire puisque le bloc joue un rôle de barrage et entrave la progression des gaz chauds vers la Salle Hillaire. Les simulations numériques avec et sans le bloc ne conduisent pas aux mêmes conclusions.

L'exécution d'une combustion à cet emplacement permet la simulation de thermo-altérations plausibles. Une combustion de 25 kg mène aux changements de coloration présentés sur la figure 4.55. La zone grise simulée est voisine des thermo-altérations observables sur le terrain. L'écaillage dans la Galerie des Mégacéros empêche en effet de connaître l'extension exacte de la couleur grise. Elle semble néanmoins légèrement plus haute que l'altération réelle. Approcher de quelques centimètres le foyer de la paroi aurait sans doute était bénéfique pour la comparaison visuelle mais n'aurait pas modifié les conclusions relatives aux caractéristiques du foyer le plus probable. L'étendue de la rubéfaction est probablement un peu excessive mais reste proche de ce qui est possible compte tenu de l'écaillage.

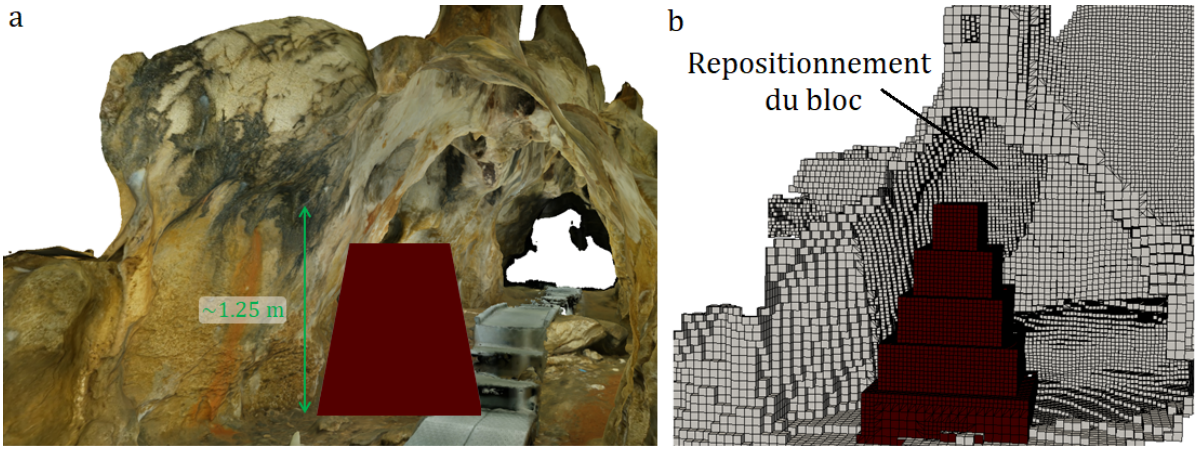

Figure 4.54 – a - Volume supposé du foyer de la zone 5. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 5. Le volume du bloc effondré est repositionné à son emplacement initial (P. Mora, Archéotransfert).

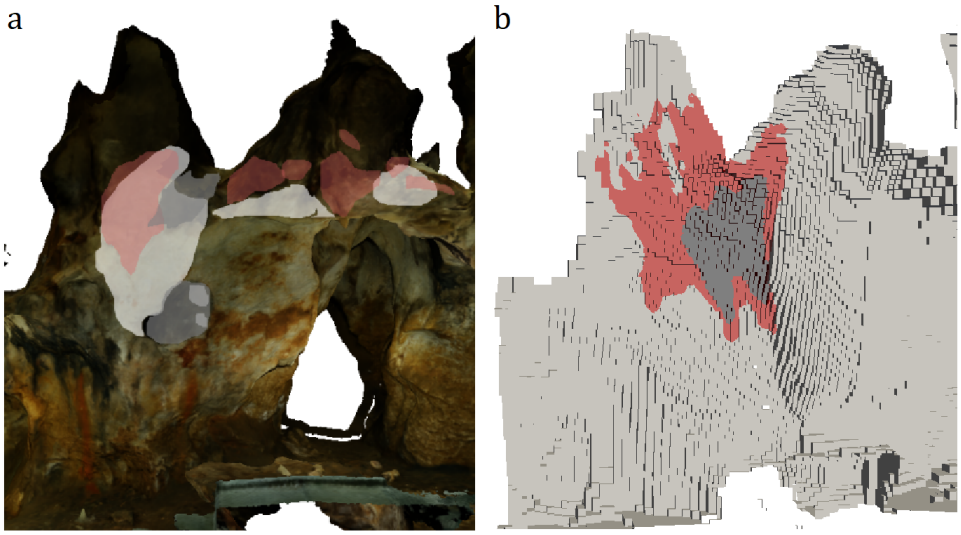

Figure 4.55 – a - Relevé des thermo-altérations de la paroi droite de la zone 5 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi droite de la zone 5 pour un foyer de 25 kg de bois.

4.4.6.3 Combustion sans alimentation

Les durées d'exposition des parois altérées pour différentes combustions non alimentées sont présentées sur les figures 4.56 et 4.57. La lecture de ces graphes a été expliquée lors du traitement de la zone 1 (§4.4.2.3). La figure 4.57 correspond aux durées ne générant une coloration grise que sur les zones correspondantes *in situ* et les parties écaillées. Les désignations des méthodes et des critères sont indiquées dans les tableaux 4.2 et 4.1.

Les deux types de changements de couleur mènent à des conclusions analogues quant à la quantité de pin sylvestre nécessaire pour reproduire les thermo-altérations. Un foyer de masse inférieure ou égale à 20 kg est insuffisant pour reproduire les thermo-altérations de la zone 5. Plusieurs combustions sont néanmoins possibles même si des foyers de 10 kg sont forcément insuffisants d'après les figures 4.56 et 4.57. Une combustion unique de 25 kg de pin sylvestre semble être le scénario le plus probable. Au-delà, la rubéfaction s'étend de manière trop importante tout comme la couleur grise. Ainsi, même si des écaillages conséquents ont affecté les coupoles, l'intensité est limitée par l'absence d'altération dans le fond de celles-ci. Notons que la hauteur des flammes issues d'un foyer de 25 kg est d'environ 2 m en l'absence de plafond. La zone grise ainsi que l'écaillage situé au-dessus était donc sans doute au

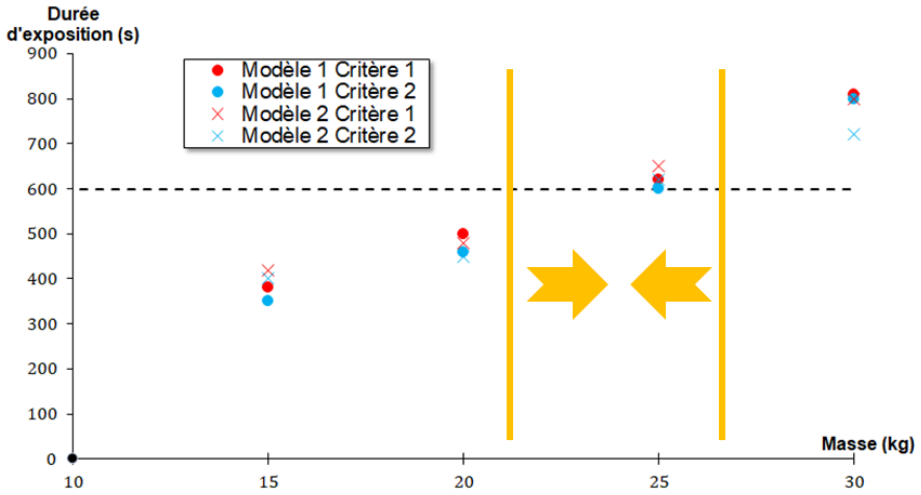

Figure 4.56 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 5 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

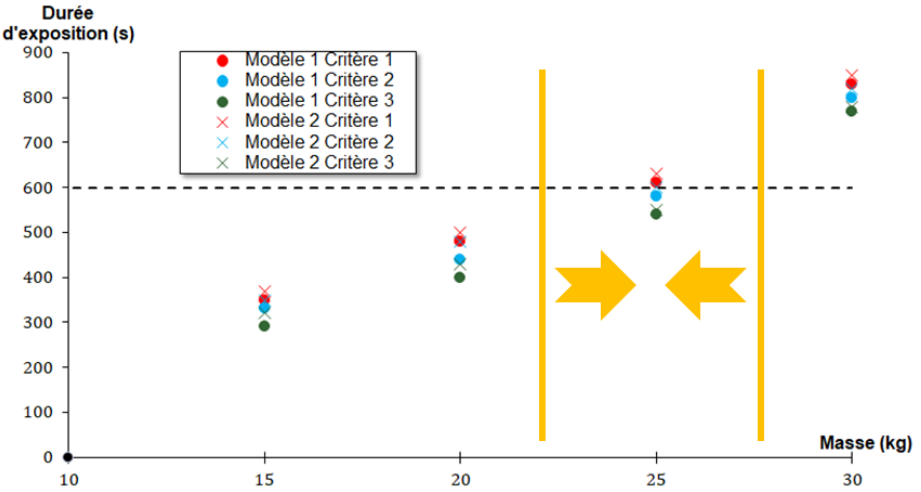

Figure 4.57 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 5 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

contact des flammes.

4.4.6.4 Combustion avec alimentation

Étant donné la masse requise pour une combustion unique, les protocoles simulés pour la zone 5 sont identiques à ceux utilisés pour la zone 2. Ils sont rassemblés dans le tableau 4.8.

Les figures 4.58 et 4.59 présentent les durées d'exposition relatives à la rubéfaction et à la coloration grise pour les protocoles de combustion du tableau 4.8. Comme pour les quatre premières zones, les résultats de simulation pour les combustions alimentées corroborent ceux obtenus pour les combustions non alimentées. Le protocole A, impliquant 24 kg de pin sylvestre, reproduit quasiment les thermo-altérations de cette zone. Les protocoles B et C sont trop exigeants et conduisent à des thermo-altérations trop étendues. En conclusion, une alimentation mettant en jeu 25 kg de pin sylvestre permet de rendre compte des thermo-altérations actuelles.

La figure 4.60 présente la FED pour le rayonnement et la température lorsque la puissance dégagée

Durée depuis l'allumage	Protocole A	Protocole B	Protocole C
Initial	16 kg	16 kg	16 kg
6 min	4 kg	4 kg	4 kg
10 min	4 kg	4 kg	4 kg
14 min		4 kg	4 kg
18 min			4 kg

Tableau 4.8 – Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 5.

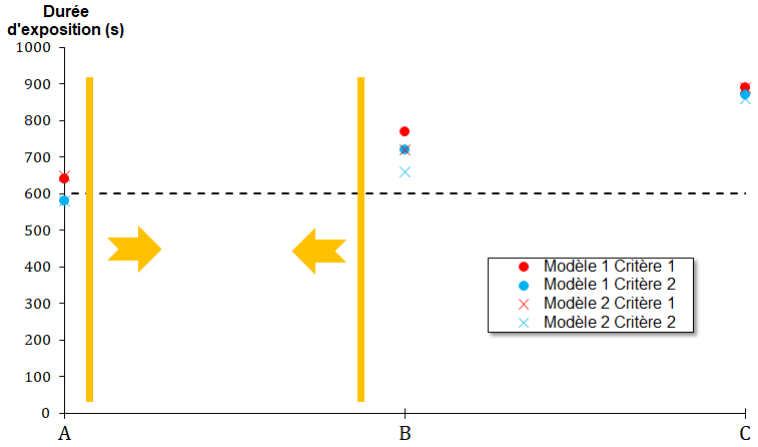

Figure 4.58 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 5 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

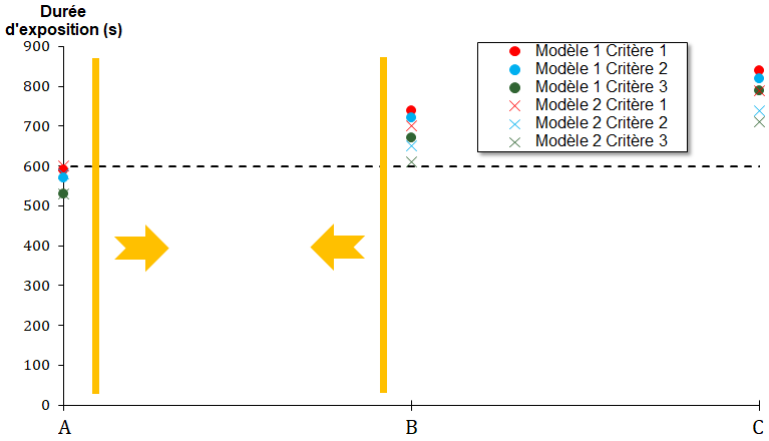

Figure 4.59 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 5 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

par un feu suivant le protocole C est maximale. Les dangers au ras du sol sont inexistants, même au voisinage du foyer, bien que le foyer soit situé au milieu d'une galerie confinée. Il est théoriquement possible de l'alimenter en prenant garde de rester dans la couche froide.

4.4.6.5 Écaillage

La zone 5 se caractérise par l'importance de l'écaillage des deux côtés de la galerie (Fig. 4.53). L'étude thermo-mécanique doit donc le considérer dans son ensemble. L'analyse suivante s'intéresse

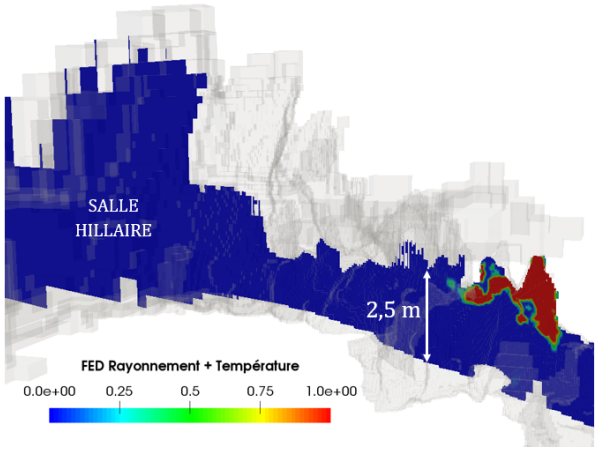

Figure 4.60 – Coupe transversale de la Galerie des Mégacéros correspondant à la FED relative au rayonnement et à la température pour une personne alimentant le foyer 19 minutes après l'allumage dans le cadre du protocole C.

aux contraintes mécaniques générées par un feu de 25 kg de bois positionné à l'emplacement présenté sur la figure 4.54. Quatre zones correspondant aux deux côtés des deux coupoles sont donc examinées (Fig. 4.61).

La figure 4.62 présente le champ de contrainte σ_{yy}, pour les quatre coupes situées sur la figure 4.61, 470 secondes après l'allumage d'un foyer de 25 kg. Les contraintes en compression sont importantes pour les coupes 1 et 3 qui correspondent à la coupole à l'aplomb du foyer. Notons que la coupe 3 révèle de fortes contraintes mécaniques surtout vers le haut de la coupole tandis que la zone écaillée se trouve plutôt en partie inférieure. La coupe 2 présente l'étude sur une zone qui se situe au-dessus du bloc détaché et qui n'est pas écaillée. Le champ de contrainte est assez faible même si les valeurs excèdent légèrement la résistance en compression. Enfin la coupe 4, qui traite pourtant une zone écaillée, présente des contraintes très localisées en surface. Comme pour les quatre premiers feux, une analyse des contraintes en compression à différentes profondeurs est effectuée. La figure 4.63 compare les contraintes mécaniques à 1 mm, 1 cm et 3 cm de profondeur pour les quatre coupes.

Le champ de contrainte associé à la coupe 1 excède la résistance en compression à 1 mm de profondeur. À 1 cm de profondeur, la contrainte mécanique avoisine la résistance en compression. La précision de la modélisation ne permet pas le calcul des contraintes au MPa près et surestime vraisemblablement les valeurs mais il semble que la combustion d'un foyer de 25 kg positionné à l'emplacement sélectionné pour l'étude induise des contraintes mécaniques de l'ordre de la résistance en compression. Les résultats de la simulation sont donc cohérents avec l'écaillage se situant au-dessus de la zone grise. Les courbes relatives à la coupe 2 indiquent qu'un écaillage superficiel est possible à cet endroit alors qu'il n'est pas visible sur le terrain. Des fissures affectant la paroi, non considérées dans l'étude, peuvent résulter de ces contraintes mécaniques. La coupe 3 montre que le côté de la coupole opposé à la couleur grise subit de fortes contraintes mécaniques jusqu'à environ 1 cm de profondeur. La présence d'écaillage dans cette zone n'est donc pas contredit par la simulation. Enfin, la coupe 4 indique que des contraintes mécaniques dépassant la résistance en compression affectent la zone correspondante (Fig. 4.61). Néanmoins, ces dépassements sont superficiels et sont localisés en partie haute de la coupole alors que des écaillages se sont aussi produits en partie basse et en-dessous de la coupole. La position du foyer à l'aplomb de la couleur grise de la paroi droite ne semble donc pas permettre la reproduction de l'ensemble de l'écaillage de la paroi gauche.

Les écaillages en paroi droite présentent une couleur rougeâtre en surface qui peut s'expliquer par la profondeur de rubéfaction qui est de 2 mm d'après la simulation. Il est cependant possible qu'un second feu ait pu être effectué au même endroit, rubéfiant les écailles tombées précédemment. Les écaillages situés sur le côté gauche de la galerie semblent résulter d'autres combustions, positionnées sous la paroi gauche comme évoqué au paragraphe 4.4.6.2.

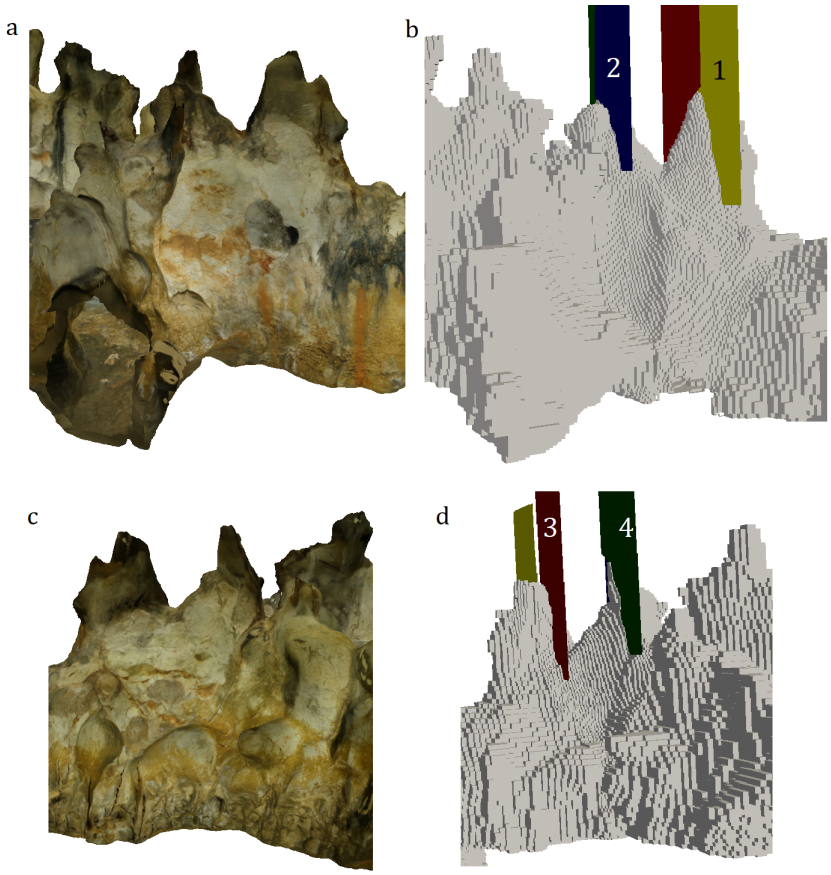

Figure 4.61 – a - Paroi droite de la zone 5 vue de l'extérieur (photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). b - Présentation des deux coupes (coupe 1 en jaune et coupe 2 en bleu) pour lesquelles une étude thermo-mécanique est effectuée. c - Paroi gauche de la zone 5 vue de l'extérieur (photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). d - Présentation des deux coupes (coupe 3 en rouge et coupe 4 en vert) pour lesquelles une étude thermo-mécanique est effectuée.

Enfin, les feux ont sans doute fragilisé le côté exposé du bloc, favorisant sa chute. De plus, une forte contrainte mécanique affectait naturellement la zone de liaison avec le massif car le bloc subissait son propre poids, n'ayant pas de support pour le soutenir. La combinaison des deux sources de contraintes mécaniques doit ainsi être à l'origine du détachement.

4.4.6.6 Dépôt de suie

Le dépôt de suie simulé pour un feu de 25 kg de bois est présenté sur la figure 4.64.

D'après la simulation, les deux coupoles altérées devaient être recouvertes de suie à l'issu de la combustion. Ce revêtement devient plus rare en s'éloignant de la zone. Aujourd'hui, des traces sont encore visibles sur une grande partie des deux coupoles.

4.4.6.7 Discussion

Les très nombreux écaillages de cette zone gênent considérablement la recherche des caractéristiques des combustions envisageables. Néanmoins, il est certain qu'au moins un foyer fut positionné à l'aplomb de la zone grise, à côté de l'emplacement du bloc détaché du massif. L'absence de thermo-altérations dans les parties hautes des coupoles limite l'intensité des feux qui ont pu se produire. À partir de ces limites, la simulation fournit une masse maximale de bois d'environ 25 kg. La zone grise permet de plus de minimiser la quantité de combustible puisqu'il existe une masse minimale pour la produire.

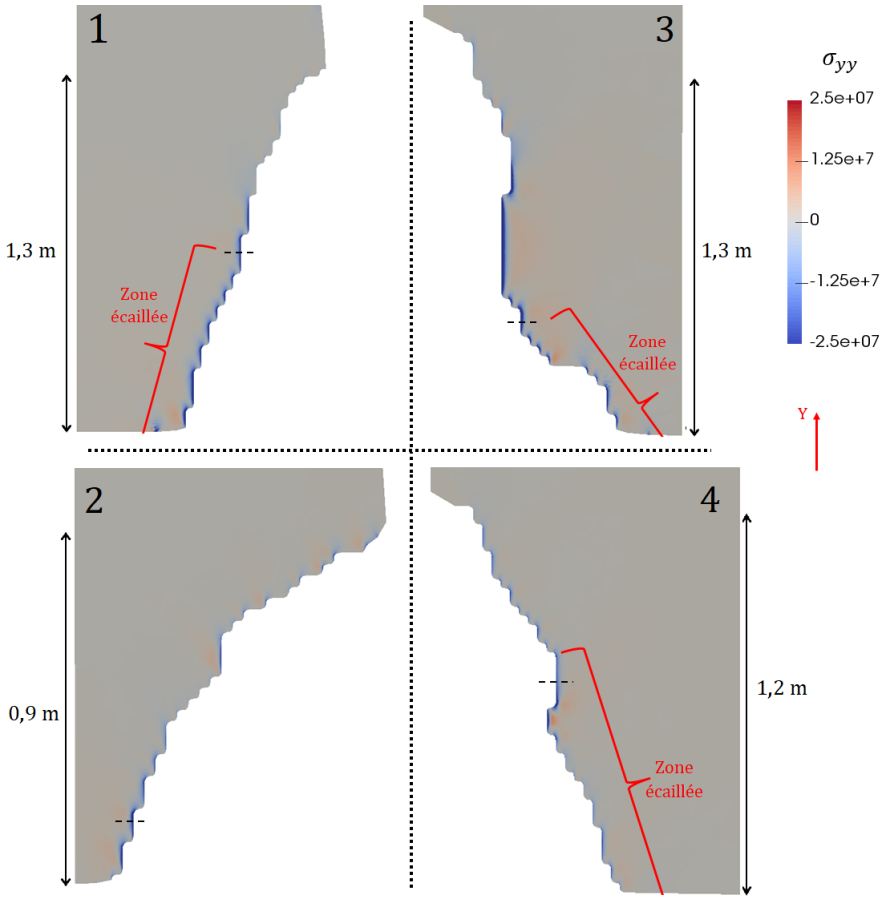

Figure 4.62 – Champ de contrainte σ_{yy} 470 secondes après l'allumage d'un feu de 25 kg de bois. Le numéro des coupes correspond à celles présentées sur la figure 4.61.

Cette coloration est cohérente avec une combustion de 25 kg.

L'étude des contraintes mécaniques montre qu'il est théoriquement impossible qu'une combustion unique de 25 kg cause l'ensemble des écaillages de cette zone. La résistance en compression est franchie pendant une durée assez courte et il est peu probable que cela suffise à écailler la paroi gauche. De plus, celle-ci présente des zones écaillées à des hauteurs faibles (Fig. 4.53.c) qui n'ont pu être engendrées par le foyer de 25 kg placé sur la droite de la galerie. Il est donc probable que d'autres combustions se soient produites du côté gauche de la galerie.

L'importance de l'écaillage des parois droite et gauche semble indiquer que des combustion intenses ont été effectuées. En effet, la seule réalisation de petites combustions aurait sans doute entraîné un écaillage plus modeste voire inexistant en partie haute. Ainsi, le scénario de combustions uniques est privilégié. La combustion d'un foyer de l'ordre de 25 kg a donc vraisemblablement eu lieu sous la zone grise ainsi que d'autres feux sur la gauche de la galerie.

4.4.7 Zone 6

Cette partie traite de la simulation des feux dans la zone 6 de la Galerie des Mégacéros (Fig. 4.14).

4.4.7.1 Présentation de la zone altérée

La figure 4.65.a situe la zone thermo-altérée par rapport à la paroi. La photo est prise en direction de la Salle Hillaire. Les altérations se situent sur la paroi gauche, comme pour les zones 1, 3 et 4, sur le bord d'un ressaut situé à environ 1,4 m du sol. La figure 4.65.b correspond à un relevé de la surface

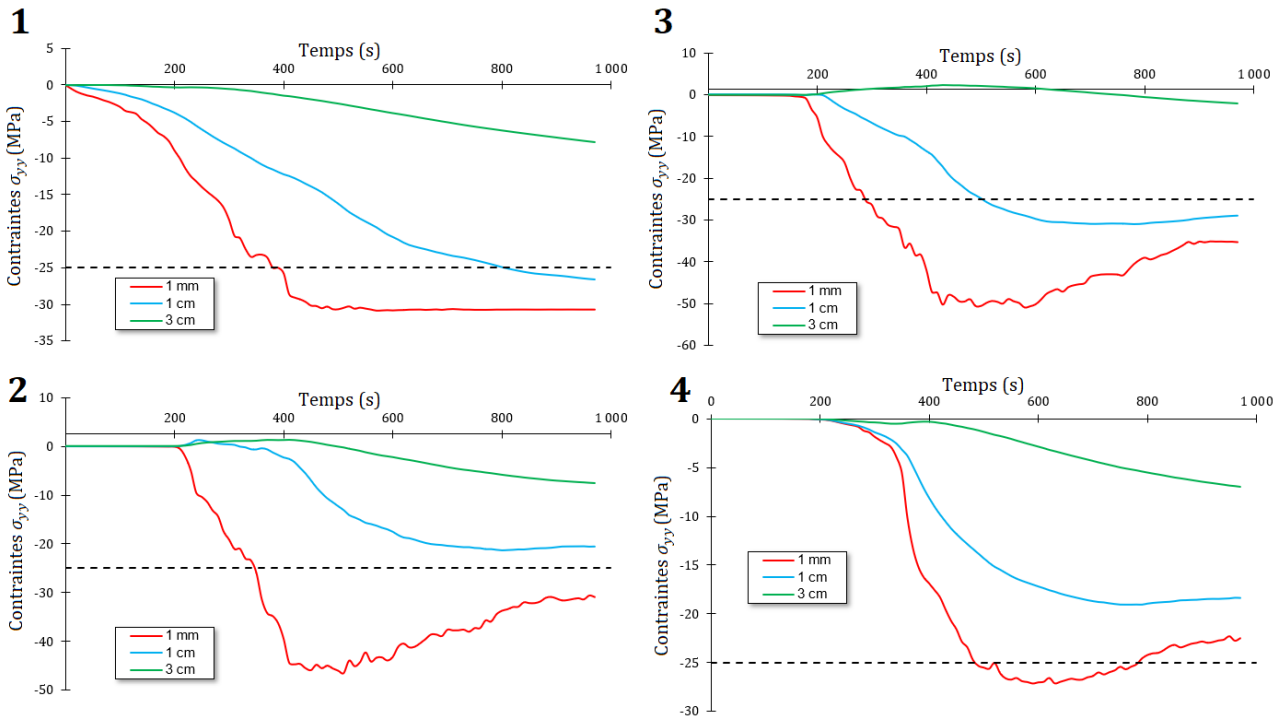

Figure 4.63 – Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). Les graphes sont associés aux numéros des plans de coupes définis sur la figure 4.61. La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par les lignes en pointillé sur la figure 4.62.

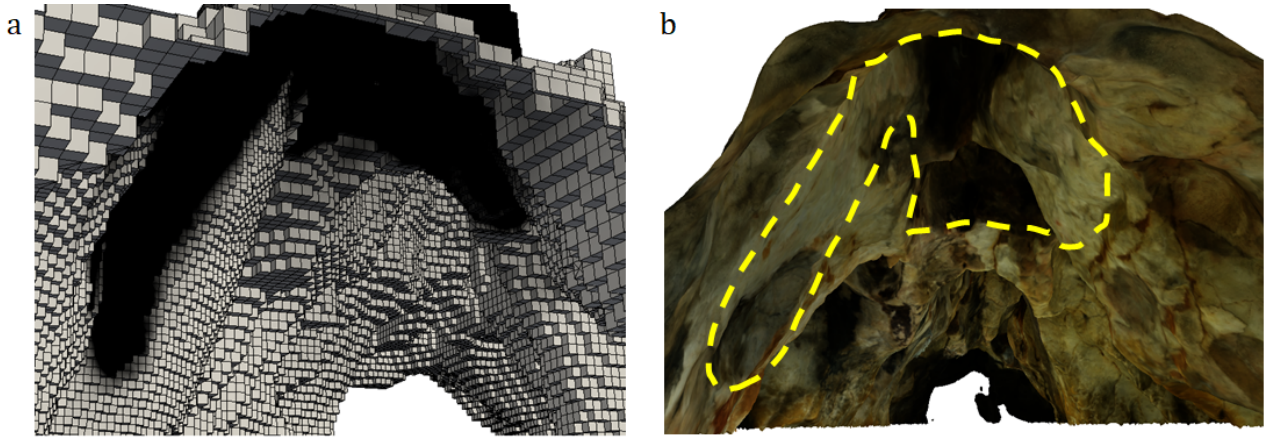

Figure 4.64 – a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 25 kg de bois dans la zone 5. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC). La galerie est orientée de la Salle du Fond vers la Salle Hillaire.

rubéfiée. La paroi ne présente pas de coloration grise et aucun écaillage ne s'est produit. L'absence de ces deux thermo-altérations indique la mise en place d'un foyer modeste. Notons enfin l'existence de tracés digitaux sur ce ressaut.

La zone est assez étalée latéralement ce qui suggère l'élaboration d'un foyer étendu. Contrairement à la majorité des altérations précédentes qui devaient être la conséquence de feux très localisés, celles-ci ne demandent pas nécessairement des foyers très compacts.

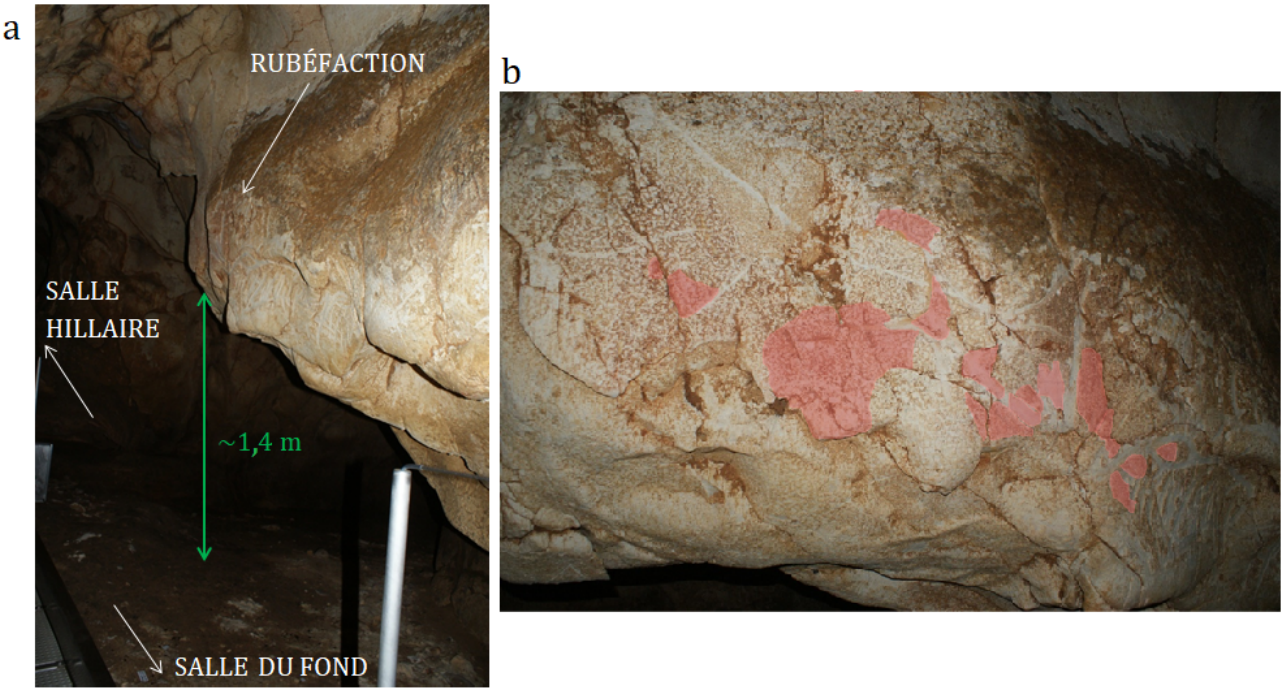

Figure 4.65 – a - Emplacement de la paroi altérée de la zone 6 au sein de la Galerie des Mégacéros (C. Ferrier). b - Relevé des thermo-altérations de la zone 6 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction.

4.4.7.2 Localisation du site de combustion

La localisation supposée du foyer est présentée sur la figure 4.66. Il devait se situer à la verticale de la zone rubéfiée, c'est-à-dire légèrement en retrait du bord du ressaut. Cette implantation est compatible avec l'absence de thermo-altérations sous celui-ci. Ainsi, le foyer fut placé de telle sorte que la flamme et les gaz chauds venaient simplement lécher la paroi, sans la frapper véritablement. La flamme frôlait donc la paroi pendant la majorité de la combustion. Pour illustrer ce phénomène, le champ de température 460 secondes après l'allumage d'un foyer de 15 kg de bois est présenté sur la figure 4.67.

La température de la flamme, encore très élevée à 1,5 m du sol, permet les thermo-altérations de la paroi. Puis, en s'élevant, les gaz chauds frappent le plafond à une température plus faible ce qui explique l'absence de thermo-altération sur la voûte. La figure 4.68 compare la surface rubéfiée observable dans la grotte Chauvet-Pont d'Arc avec celle issue de la simulation.

Le foyer doit être très précisément positionné pour que seule la partie bombée du ressaut soit rubéfiée. La simulation produit dans ce cas une altération localisée au même endroit que la zone 6 mais avec une extension moindre. Il semble, *a priori*, que le foyer aurignacien était plus étendu que celui de la simulation. Néanmoins, le faible écart entre les deux influencera peu la quantité de bois nécessaire pour reproduire ces thermo-altérations.

4.4.7.3 Combustion sans alimentation

La méthodologie décrite lors de l'exposé du premier feu (§4.4.2) est employée pour détailler les résultats de la zone 6. La figure 4.69 indique les durées d'exposition de la zone altérée aux différentes températures correspondant aux critères de rubéfaction. De même, la figure 4.70 présente les durées d'exposition de la zone altérée aux différentes températures correspondant aux critères de coloration grise. Seule une modélisation du transfert thermique est ici employée. Il s'agit de la modélisation détaillée au paragraphe 2.3.1.2 qui concerne les parois verticales. Elle a été mise en place pour décrire le transfert thermique aux parois de la carrière de Lugasson. Puisque la paroi altérée de la zone 6 est précisément verticale, seule cette modélisation peut être utilisée. Les désignations des méthodes et des

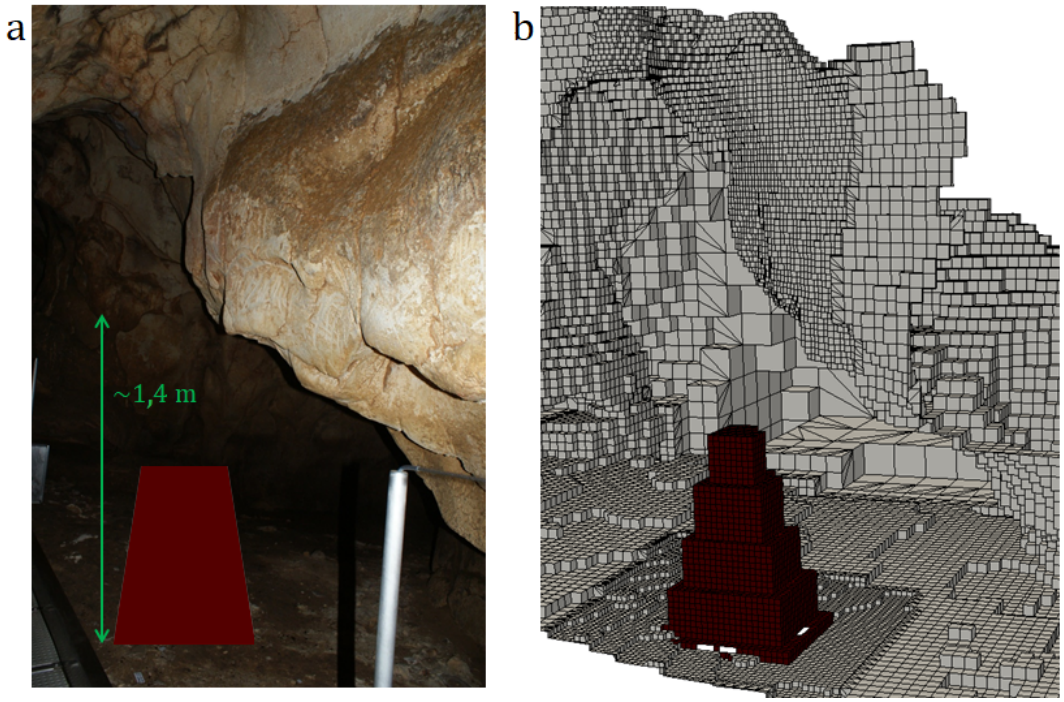

Figure 4.66 – a - Volume supposé du foyer de la zone 6. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 6.

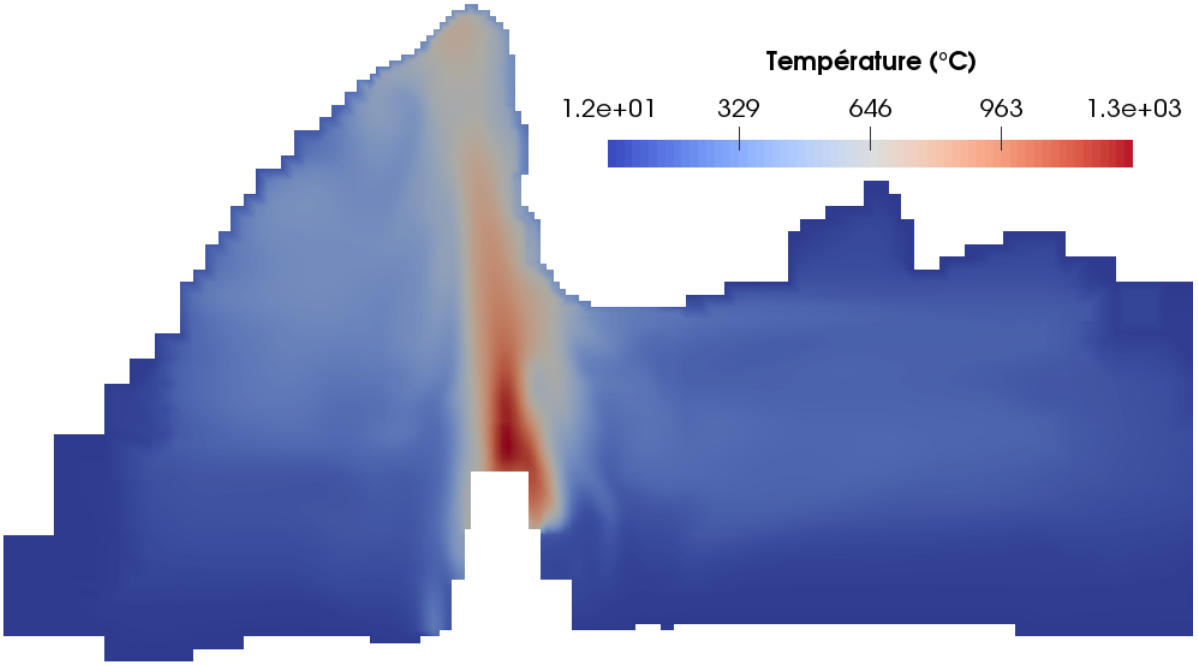

Figure 4.67 – Champ de température dans le plan orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer 460 s après l'allumage d'un foyer de 15 kg de bois.

critères de changement de coloration sont respectivement fournies dans les tableaux 4.2 et 4.1.

La figure 4.69 indique qu'un foyer de 20 kg de bois induirait des altérations trop importantes sur la paroi. De plus, le plafond serait altéré par le feu et des traces de rubéfaction marqueraient sans doute une partie de la voûte. Des feux moins intenses se sont donc nécessairement produits à cet emplacement. Un feu de l'ordre de 10 kg affecterait insuffisamment la paroi et aucune rubéfaction ne serait observable.

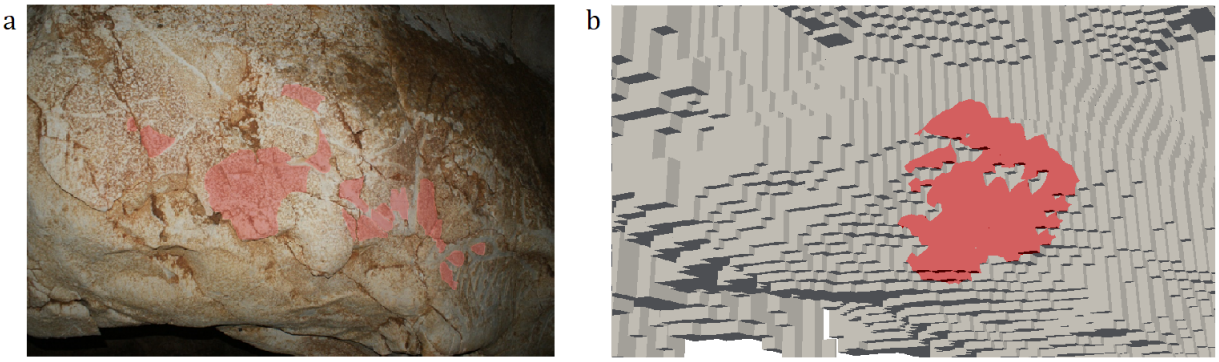

Figure 4.68 – a - Relevé des thermo-altérations de la zone 6 (F. Salmon). b - Changements de coloration simulés sur la paroi de la zone 6 pour un foyer de 15 kg de bois.

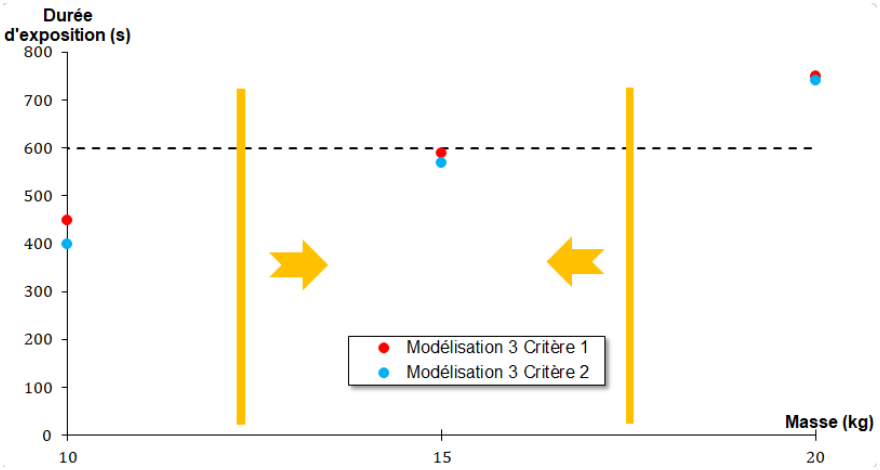

Figure 4.69 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 6 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

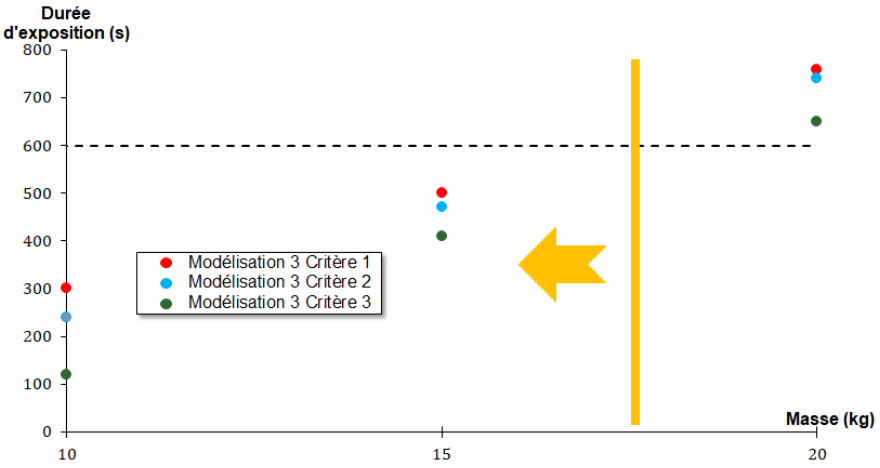

Figure 4.70 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 6 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

Néanmoins, deux feux d'une dizaine de kilogrammes devraient produire des altérations similaires à

celles de cette zone. L'éventualité de plusieurs feux n'est pas mise en défaut par la localisation de l'impact puisque celui-ci est plus étendu que pour les autres zones. L'autre possibilité correspond à un feu unique dont le foyer devait être constitué d'une quinzaine de kilogrammes de branches de pin sylvestre. La hauteur des flammes d'un tel foyer est d'environ 1,7 mètres. Cette quantité de bois permet donc aux flammes d'atteindre la paroi rubéfiée. La figure 4.70 confirme les deux éventualités puisqu'aucune coloration grise n'apparaît tant que la masse du foyer reste inférieure à une vingtaine de kilogrammes.

4.4.7.4 Combustion avec alimentation

Même si la masse du foyer de combustion semble être assez faible, deux protocoles d'alimentation ont été simulés. Ils sont détaillés dans le tableau 4.9.

Durée depuis l'allumage	Protocole A	Protocole B
Initial	8 kg	8 kg
6 min	4 kg	4 kg
9 min		4 kg

Tableau 4.9 – Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 6.

Les résultats qui concernent la rubéfaction et la coloration grise sont respectivement présentés sur les figures 4.71 et 4.72.

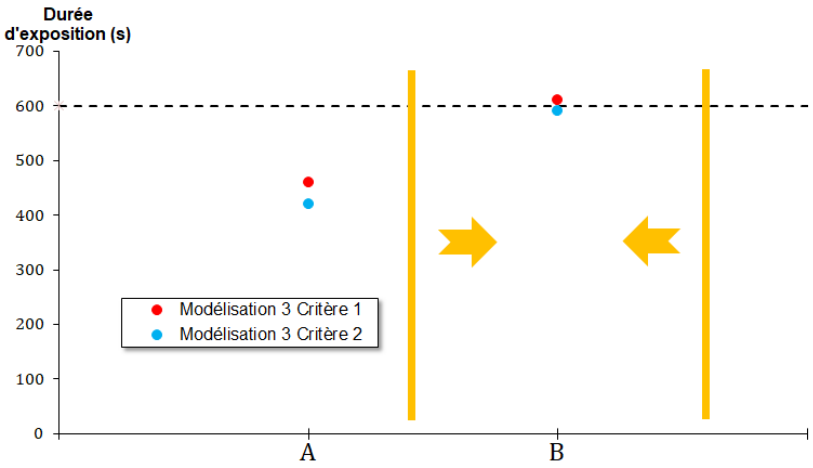

Figure 4.71 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 6 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

Comme attendu, les conclusions correspondant aux combustions avec alimentation rejoignent celles des combustions sans alimentation. Le protocole A, impliquant 12 kg de bois, n'est pas suffisant tandis que le protocole B, nécessitant 16 kg de pin sylvestre, permet la reproduction de la rubéfaction. Une masse plus importante affecterait de manière excessive la paroi de cette zone. Si une alimentation fut mise en place par les Aurignaciens, celle-ci devait être très modeste.

4.4.7.5 Écaillage

La figure 4.73.b indique le champ de contrainte en compression σ_{yy} 460 secondes après l'allumage d'un foyer de 15 kg de bois. La figure 4.73.a présente l'évolution des contraintes en compression à 1 mm, 1 cm et 3 cm de profondeur.

Le champ de contrainte, fourni sur la figure 4.73, implique une faible probabilité d'écaillage. La contrainte en compression à un millimètre dépasse faiblement et brièvement la résistance en compression

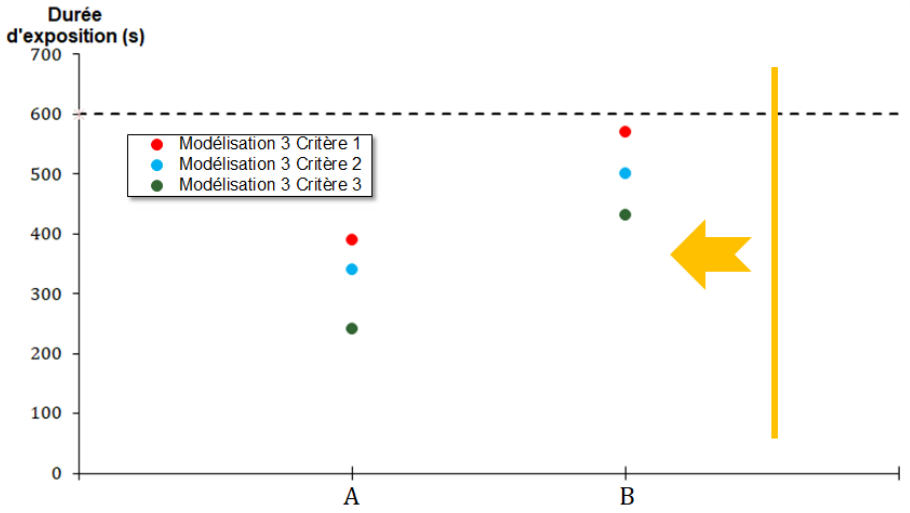

Figure 4.72 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 6 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

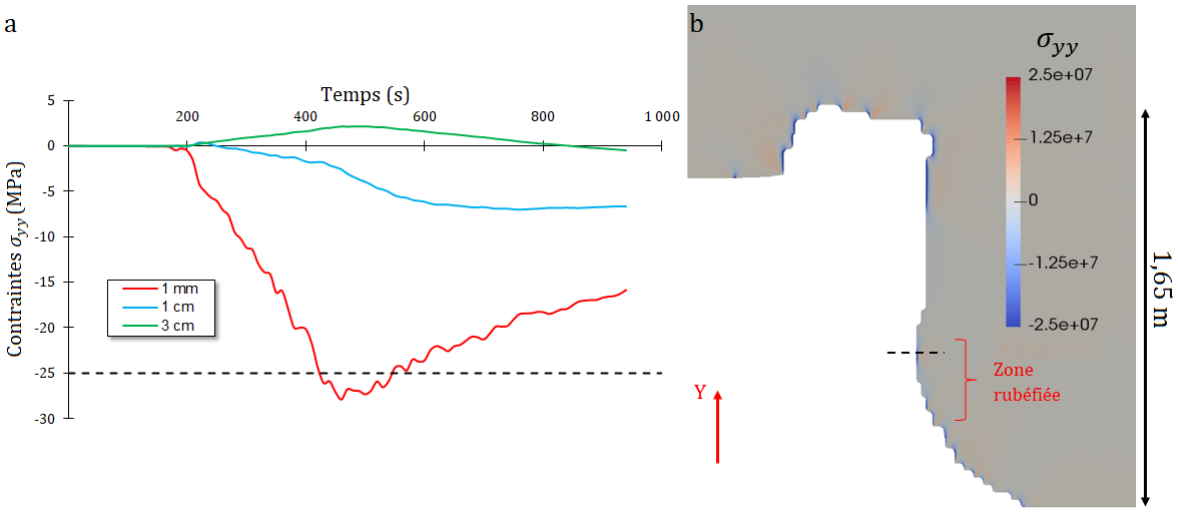

Figure 4.73 – Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 15 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à l'axe de la galerie et passant par le centre du foyer.

sur une centaine de secondes. D'une part, la précision de la simulation ne permet pas d'affirmer que la contrainte numérique dépasse réellement la contrainte subie par la roche, et d'autre part, ce faible excès pourrait ne pas entraîner de fracture. La simulation de l'écaillage s'accorde donc avec l'absence d'altérations de ce type dans cette zone.

4.4.7.6 Dépôt de suie

La figure 4.74 présente le dépôt de suie issu de la simulation de la combustion d'un foyer de 15 kg de bois.

N'étant pas piégées dans une coupole, les suies se répandent davantage dans l'espace que pour les foyers précédents. De plus, le volume de la galerie est plus important proche de la Salle du Fond

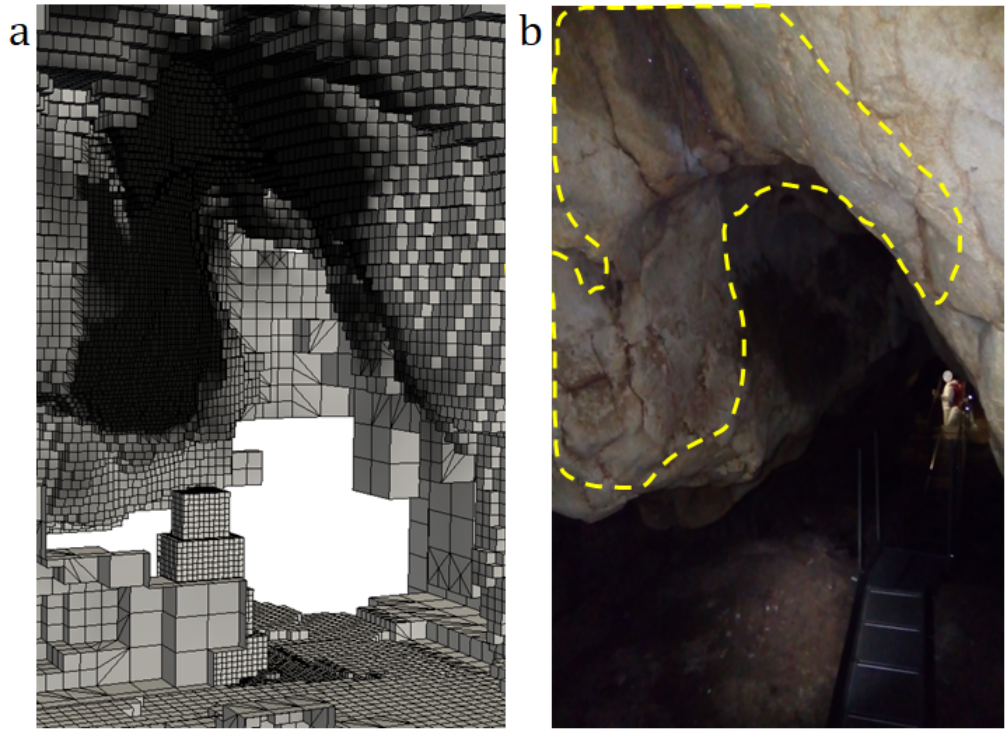

Figure 4.74 – a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 15 kg de bois dans la zone 6. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC).

(Fig. 4.14). Puisque les surfaces couvertes sont plus conséquentes, la concentration de suie déposée est réduite et il semblerait cohérent que ces dépôts ne soient plus visibles de nos jours.

4.4.7.7 Discussion

La configuration du feu 6 est particulière puisque les flammes ne frappent pas fortement les parois de la Galerie des Mégacéros. Le foyer fut placé par les Aurignaciens de telle sorte qu'il n'induit pas de thermo-altérations sous le ressaut rocheux tout en affectant la face bombée de celui-ci. Le foyer fut-il positionné à cet emplacement pour rendre plus visibles les marques de rubéfaction ? La présence de tracés digitaux renforce de plus ce questionnement. Le foyer aurait en effet pu facilement être placé sous le ressaut (Fig. 4.65) afin de ne pas gêner le passage.

Plusieurs scénarios de feux sont plausibles. Une combustion d'une quinzaine de kilogrammes de pin sylvestre permet, d'après la simulation, la reproduction des thermo-altérations de la zone. L'absence de coloration grise limite la masse de combustible brûlée à cet emplacement à moins de vingt kilogrammes. Plusieurs feux moins intenses sont également envisageables. L'étendue de la rubéfaction montre que le foyer n'était sans doute pas aussi compact que la majorité des foyers précédents. L'absence d'écaillage est cohérente avec l'ensemble de ces scénarios. La simulation thermo-mécanique montre en effet que la température reste modeste dans le premier centimètre de la roche ce qui évite la présence de contraintes importantes. Le scénario d'alimentation est, comme pour les autres feux, possible même si la faible quantité de pin sylvestre requise permet de douter de la pertinence de cette hypothèse.

4.4.8 Zone 7

Cette partie présente la simulation des feux de la zone 7 (Fig. 4.14).

4.4.8.1 Présentation de la zone altérée

La figure 4.75 présente la dernière zone altérée de la Galerie des Mégacéros. Elle correspond à un pendant rocheux situé vers la fin de la galerie, dans la partie plus large (Fig. 4.14). Le feu a été réalisé du côté droit du passage, sous le pendant. Sa partie inférieure est fortement écaillée tandis que la partie supérieure est seulement rubéfiée. Il n'y a pas de coloration grise dans cette zone mais des altérations de ce type ont pu exister. En effet, un foyer situé à l'aplomb de l'écaillage aurait induit des températures élevées pouvant mener à ce changement de coloration. La présence d'écailles thermiques grises sur le sol, qui proviennent vraisemblablement de la zone soumise à la flamme, confirme cette hypothèse.

Figure 4.75 – Relevé des thermo-altérations de la zone 7 (F. Salmon). La zone rose correspond à la rubéfaction et la zone blanche à la surface écaillée.

Par ailleurs, le bas du pendant rocheux étant très proche du sol (environ 40 cm), le haut du foyer pouvait quasiment toucher la paroi voire même s'appuyer dessus. La température de la zone écaillée devait donc être très élevée.

4.4.8.2 Localisation du site de combustion

Le foyer se trouvait nécessairement à l'aplomb de la zone écaillée comme indiqué sur la figure 4.76. Il n'y a ici aucune difficulté pour placer le foyer à cet emplacement puisqu'aucune paroi alentour ne peut l'entraver.

Notons une fois encore que le foyer se trouve sur un côté, sous une paroi légèrement inclinée. Cette position permet de simuler une rubéfaction présentée sur la figure 4.77 pour un foyer de 15 kg. La coloration grise reste approximativement confinée dans la zone écaillée.

La simulation conduit à des résultats analogues aux observations de la figure 4.77.a. Il y a peu d'écart mis à part l'arête rubéfiée en haut du pendant (Fig. 4.77.a) que la simulation ne peut reproduire. De manière générale, la rubéfaction de ce type de relief est mal reproduite par la simulation qui exigerait un raffinement prononcé du maillage dans cette zone. Compte tenu de la bonne représentation de la zone inférieure qui est la plus altérée, ce positionnement est retenu.

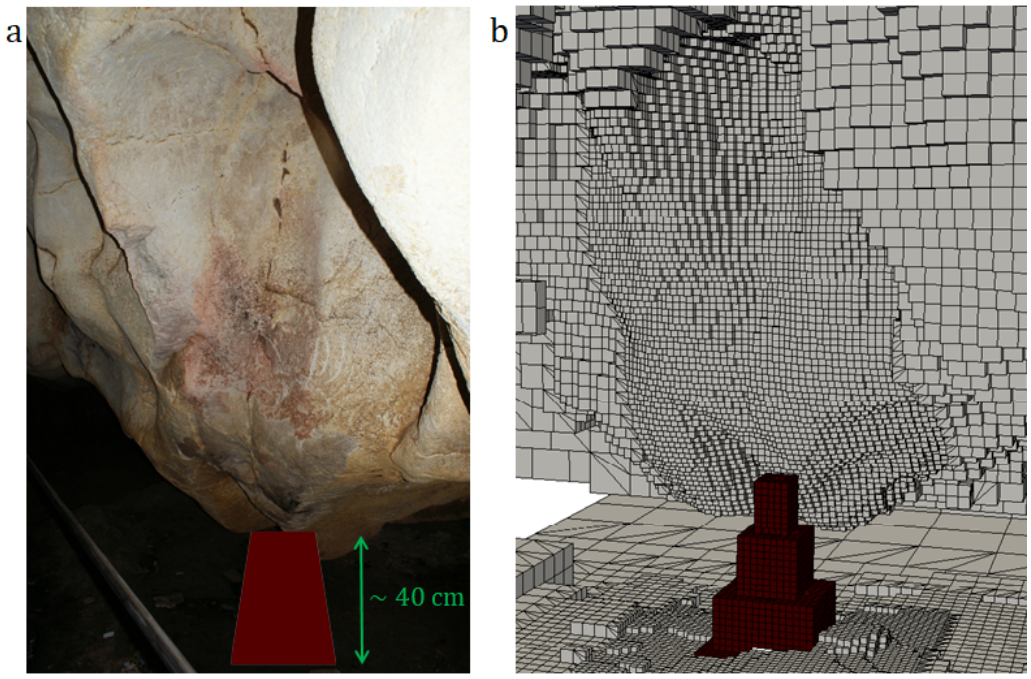

Figure 4.76 – a - Volume supposé du foyer de la zone 7. b - Emplacement du foyer numérique pour les simulations du feu de la zone 7.

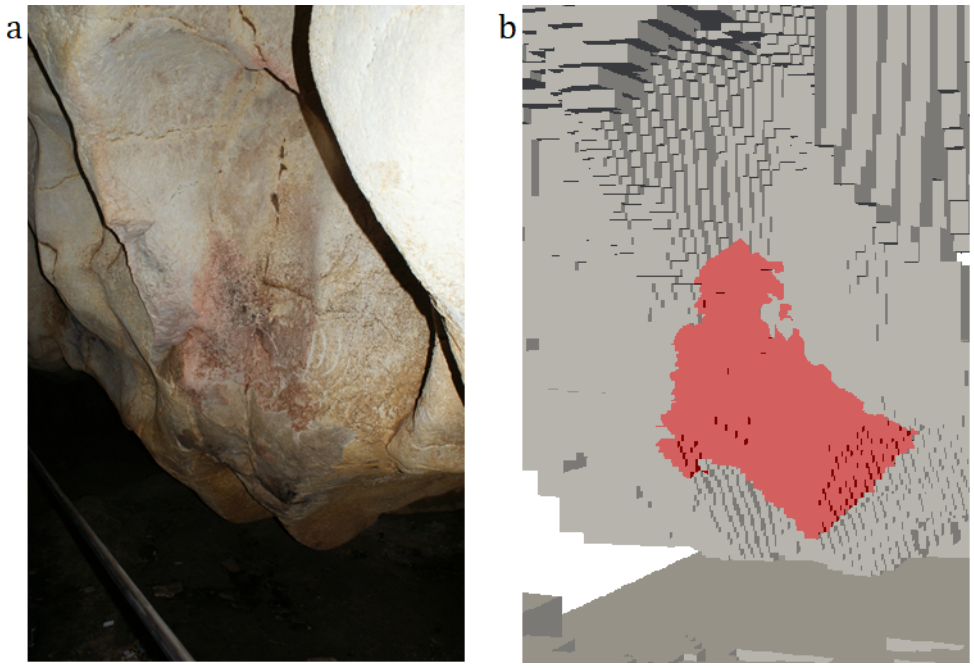

Figure 4.77 – a - Détail de la zone écaillée et rubéfiée du pendant rocheux correspondant à la zone 7 (C. Ferrier). b - Rubéfaction simulée pour un foyer de 15 kg de bois.

4.4.8.3 Combustion sans alimentation

Les figures 4.78 et 4.79 présentent les temps d'exposition pour chaque critère et deux modélisations différentes (cf Tab. 4.2 et 4.1).

La rubéfaction simulée par un foyer d'une quinzaine de kilogrammes (Fig. 4.78) correspond aux observations *in situ*. Au-delà de cette masse, la superficie apparaît excessive. La figure 4.79 indique que la coloration grise s'étend rapidement et même un foyer de 15 kg fournirait une trop grande surface

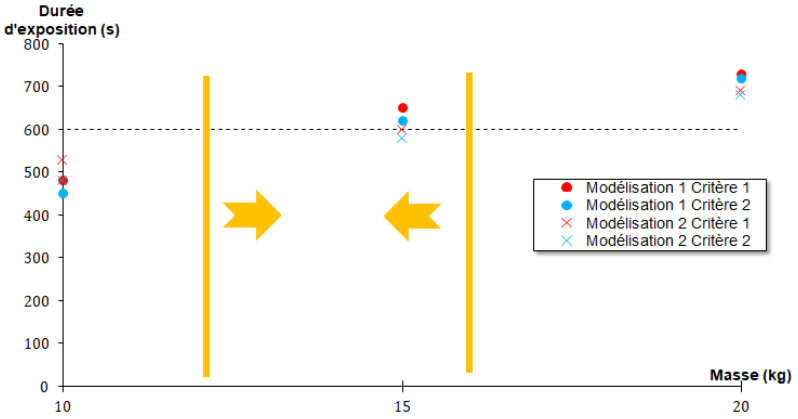

Figure 4.78 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 7 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

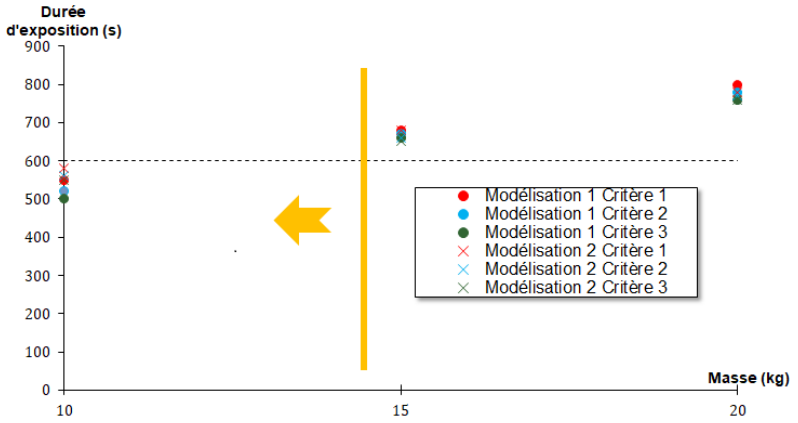

Figure 4.79 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 7 en fonction de la masse du foyer considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

grise. La proximité du foyer avec le pendant explique en grande partie cette conclusion. Seuls des foyers inférieurs à une quinzaine de kilogrammes ont ainsi pu être réalisés. Plusieurs petits foyers de masses inférieures à 10 kg sont également envisageables.

4.4.8.4 Combustion avec alimentation

Des protocoles d'alimentation ont été simulés à l'aide de la modélisation construite durant la thèse. Les protocoles sont précisés dans le tableau 4.10.

Durée depuis l'allumage	Protocole A	Protocole B	Protocole C
Initial	8 kg	8 kg	8 kg
6 min	4 kg	4 kg	4 kg
9 min		4 kg	4 kg
12 min			4 kg

Tableau 4.10 – Protocoles étudiés dans le cadre des combustions alimentées de la zone 7.

Les durées d'exposition de la paroi altérée aux températures relatives aux critères de rubéfaction et de coloration grise sont présentées sur les figures 4.80 et 4.81.

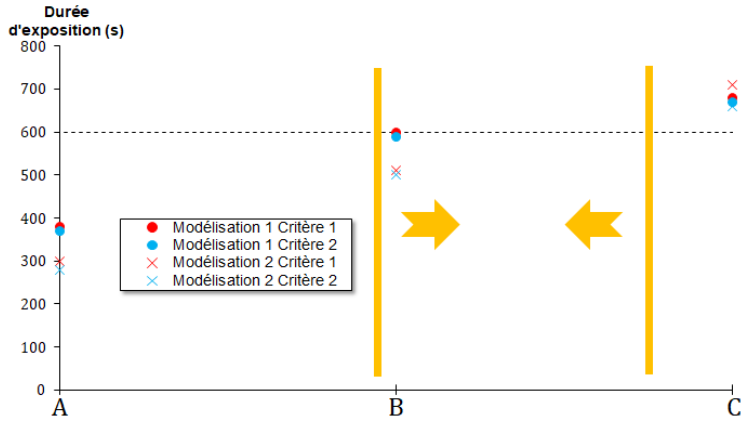

Figure 4.80 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de rubéfaction dans la zone 7 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

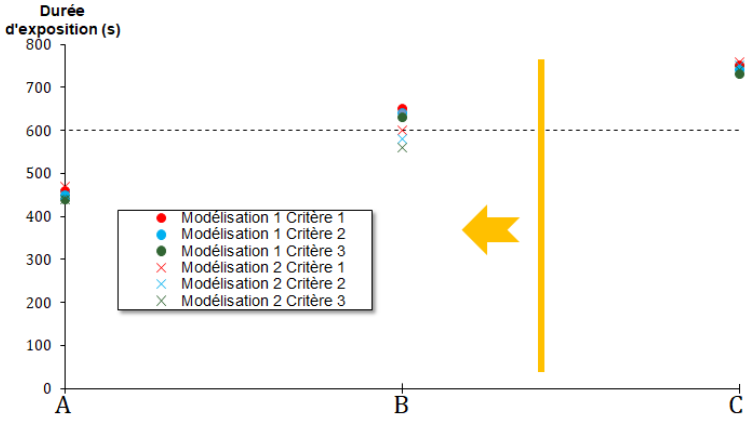

Figure 4.81 – Durée d'exposition de la surface altérée aux températures correspondant aux critères de couleur grise dans la zone 7 en fonction du protocole considéré. La ligne en pointillé correspond à la durée pour laquelle il y a reproduction des thermo-altérations observables *in situ*.

D'après la figure 4.81, le protocole C est exclu car il implique une surface grise trop conséquente. Le protocole A semble insuffisant d'après la figure 4.80. Il serait nécessaire de mener plusieurs fois ce protocole pour altérer le pendant. Le protocole B est compatible avec les thermo-altérations visibles sur le terrain. Une quinzaine de kilogrammes se révèle donc être une masse adaptée à la reproduction de la rubéfaction de la zone 7.

4.4.8.5 Écaillage

Puisque l'étude concernant les combustions sans alimentation a abouti à une masse comprise entre une dizaine et une quinzaine de kilogrammes, l'analyse sur l'écaillage est effectuée sur une masse de 10 kg. En effet, si des écaillages sont possibles avec cette masse, ils le seront également pour une masse supérieure. La figure 4.82.b présente le champ de contrainte en compression σ_{yy} 460 secondes après l'allumage d'un foyer de 10 kg de bois. L'évolution des contraintes en compression à 1 mm, 1 cm et 3 cm de profondeur dans la roche est présentée sur la figure 4.82.a.

La zone écaillée affiche bien des contraintes mécaniques qui dépassent la résistance en compression. Superficiellement, l'écaillage est donc probable d'après la simulation. À un centimètre de profondeur, des fissures peuvent apparaître puisque les contraintes mécaniques franchissent la résistance en compression. Le feu ayant sans doute été un peu plus intense qu'une combustion de 10 kg de pin sylvestre, les contraintes mécaniques étaient encore plus importantes. L'étendue de l'écaillage sur le pendant est

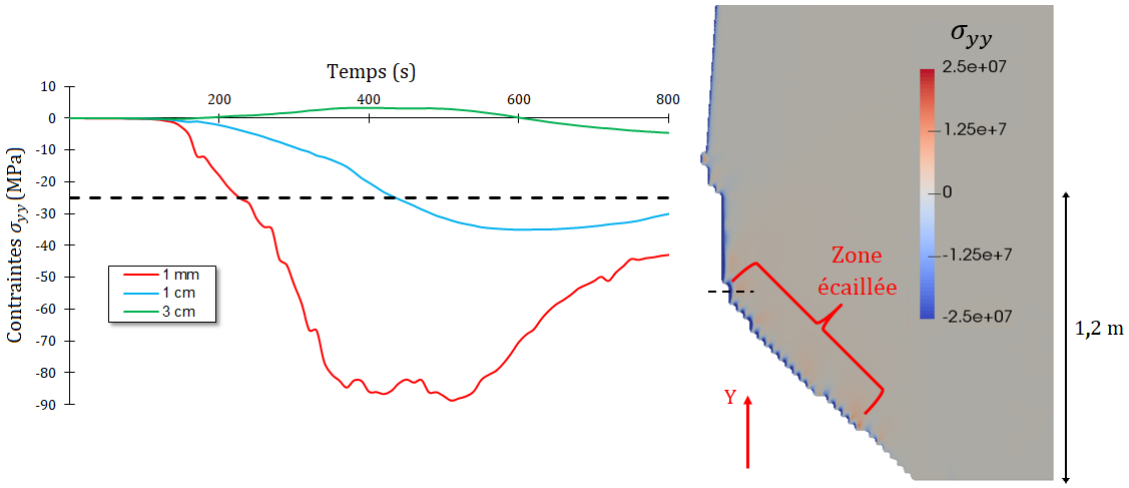

Figure 4.82 – Contraintes mécaniques issues de la simulation de la combustion d'un foyer de 10 kg de bois. a - Courbes temporelles des contraintes mécaniques σ_{yy} à plusieurs profondeurs dans la roche (la droite en pointillé correspond à la résistance en compression à 20^oC). La localisation verticale des points où les contraintes sont calculées est indiquée par la ligne en pointillé sur la figure b. b - Champ de contrainte σ_{yy} 460 secondes après l'allumage dans le plan de coupe orthogonal à la galerie et passant par le centre du foyer.

donc justifiée par les contraintes thermo-mécaniques induites par ce feu.

4.4.8.6 Dépôt de suie

La figure 4.83 présente le dépôt de suie issu de la simulation de la combustion d'un foyer de 15 kg de bois.

D'après la simulation, le pendant situé à l'aplomb du foyer devait être recouvert de suie à la suite de la combustion. Il n'y en a quasiment plus aujourd'hui puisque seules subsistent quelques particules dans la partie supérieure de la zone rubéfiée et sur la zone écaillée. Les processus taphonomiques ont donc pu là encore éliminer ultérieurement la plupart des carbonisats.

4.4.8.7 Discussion

La proximité du pendant avec le sol favorise la production de thermo-altérations induites par un feu. Ainsi, il n'est pas nécessaire de brûler une grande quantité de pin sylvestre pour générer des thermo-altérations sur le pendant. D'après la simulation, si un feu unique fut effectué dans cette zone, le foyer devait être constitué d'une quinzaine de kilogrammes de combustible. Au-delà, la rubéfaction serait plus étendue que celle observable dans la Galerie des Mégacéros. Notons que la simulation fournit même des scénarios moins intenses puisqu'à 15 kg, la coloration grise est légèrement excessive. Plusieurs combustions sont également possibles mais le caractère localisé des thermo-altérations exige des petits foyers situés au même emplacement à quelques dizaines de centimètres près.

Un scénario d'alimentation est plausible puisque seul le protocole C est trop exigeant. D'après la simulation, le protocole B est un scénario envisageable à cet emplacement. Il correspond à 16 kg ce qui est en accord avec les conclusions relatives aux combustions sans alimentation. Ce scénario paraît toutefois peu probable compte tenu de la faible masse nécessaire pour reproduire les thermo-altérations. Il est en effet beaucoup plus simple et pratique de réaliser une combustion d'une quinzaine de kilogrammes plutôt que de mettre en place une alimentation continue.

4.4.9 Évaluation des dangers au voisinage des feux

L'objectif ici est d'estimer la toxicité dans la grotte pendant les feux les plus puissants qui ont pu être effectués. Lors de la combustion des foyers, les produits des réactions chimiques remplissent la

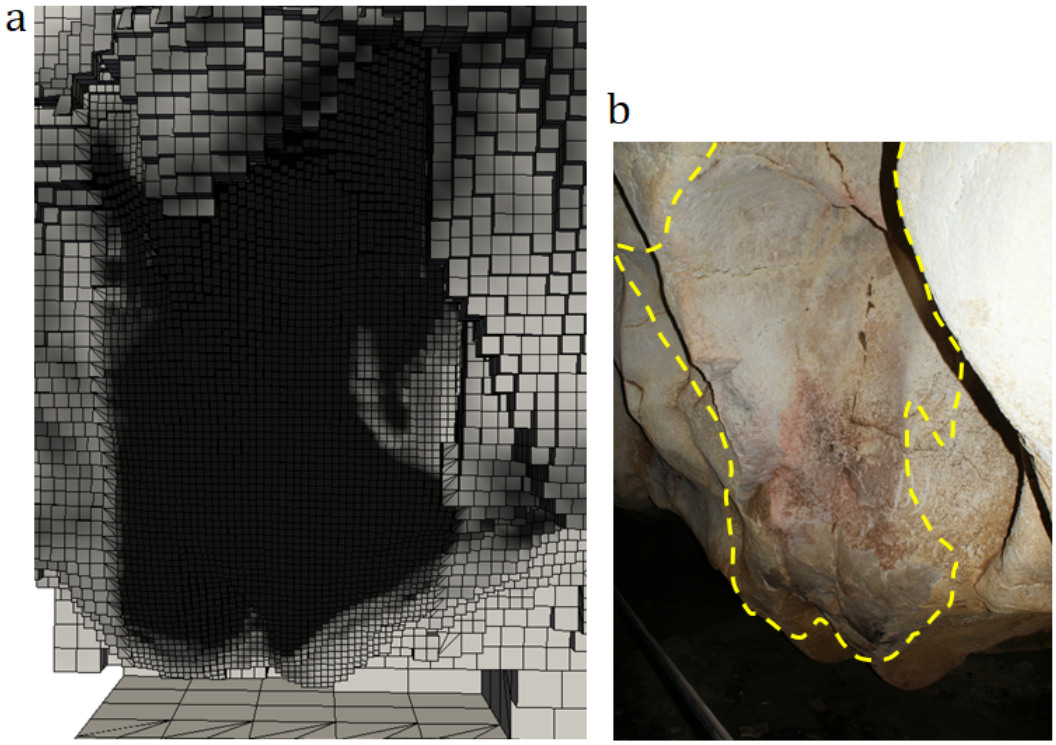

Figure 4.83 – a - Dépôt de suie simulé dans la géométrie numérique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc pour un feu de 15 kg de bois dans la zone 7. b - Dépôt de suie numérique issu de la simulation (délimité en jaune) transposé dans la Galerie des Mégacéros (extrait de la photogrammétrie réalisée par T. Sagory / Équipe grotte Chauvet - MC).

cavité dans le voisinage du foyer. Les gaz chauds étant plus légers, ils circulent en direction d'une salle dont la voûte est plus élevée que la Galerie des Mégacéros. Comme le montrent les figures 4.23 et 4.34, les gaz s'évacuent majoritairement dans la Salle Hillaire plutôt que dans la direction de la Salle du Fond. Cette dernière reste donc vide de tout gaz toxique et demeure inoffensive. Ce paragraphe se concentre donc sur l'estimation de la toxicité dans la Salle Hillaire où les gaz s'accumulent. Parmi les scénarios possibles, les deux feux les plus contraignants seront traités. Le premier correspond à une combustion de 34 kg à l'emplacement du foyer de la zone 2 (Fig. 4.27). D'après la simulation, un tel feu est d'une intensité légèrement supérieure à celles des feux qui ont pu se produire à cet emplacement (Fig. 4.30 & 4.31). Le second feu correspond à une combustion de 30 kg de pin sylvestre à l'emplacement du foyer de la zone 5 (Fig. 4.54). De même, cette combustion est faiblement supérieure à ce qui est possible d'après la simulation (Fig. 4.56 & 4.57). Les résultats issus de ces simulations correspondront donc à des situations correspondant aux pires combustions envisageables. Néanmoins, si plusieurs feux furent effectués en même temps, il se pourrait que la toxicité eut été rédhibitoire. Ce cas n'est pas présenté. La figure 4.84 présente le maillage utilisé afin d'effectuer la simulation des deux feux.

Seuls les dangers de la toxicité vers la fin de la combustion sont présentés. La modélisation est en effet inapte à proposer des résultats lorsque la combustion s'arrête et que seules des braises persistent. D'une part, la réaction chimique se déroulant à la fin du feu, lors de la combustion des braises, est sans doute éloignée de celle qui régit la combustion du pin sylvestre. D'autre part, à la fin de la forte convection dont le feu était le moteur, les mouvements sont gouvernés par des gradients de température beaucoup plus faibles. Or, le maillage (Fig. 4.84) n'est vraisemblablement pas assez raffiné pour espérer une précision satisfaisante sur des phénomènes aussi modestes. Un raffinement plus conséquent, hors de portée à l'heure actuelle, aurait été nécessaire.

De plus, les résultats fournis ci-après requièrent une grande prudence. La présente modélisation numérique n'est en effet pas adaptée à la simulation de la répartition des gaz dans une zone à faible température. Les équations résolues étant basées sur l'hypothèse du mélange parfait, la gravité agit

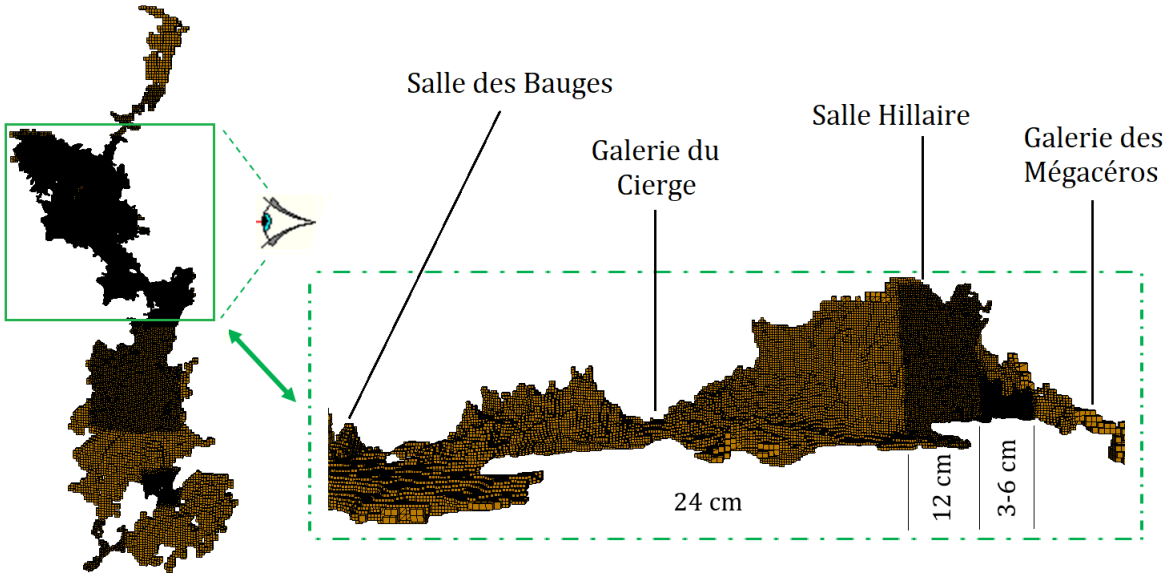

Figure 4.84 – Maillage raffiné de la grotte Chauvet-Pont d'Arc constitué d'environ 1 million de mailles. La géométrie dans le carré vert correspond au maillage vu de côté.

quasiment de manière identique sur tous les gaz. En effet, le modèle prend uniquement en compte la masse volumique du mélange et non celle de chaque espèce séparément. L'équation de quantité de mouvement qui décrit les effets de la gravité sur la circulation des gaz n'est donc résolue que pour le mélange et non pour chaque gaz. Cela ne pose pas de problème tant que les effets de la température dominent les effets des différences de masse entre chaque gaz. Mais lorsque la température devient faible, les masses de chaque gaz interviennent dans la mise à l'équilibre du système. Les gaz lourds comme le CO_2 vont davantage se stocker en partie inférieure que les autres gaz. Toutefois, même si le CO_2 est le gaz le plus lourd, il se répartira sur toute la hauteur de la salle selon des lois physiques représentées par un système d'équations mathématiques complexe. Notons que le monoxyde de carbone possède une masse volumique voisine de l'air. Il se mélange donc avec le dioxygène et le diazote.

La figure 4.85 présente la FED relative à la toxicité à la fin de la combustion d'un foyer de 34 kg à l'emplacement du feu de la zone 2. Rappelons d'une part que la FED est basée sur la notion de dose et qu'elle ne peut donc qu'augmenter. Dans le cas de la toxicité, elle correspond ainsi au risque lié à l'accumulation des gaz inhalés. D'autre part, une FED de 0,3 correspond à un taux de mortalité d'environ 11,4% tandis qu'une FED égale à 1 implique statistiquement la mort de la moitié des sujets.

La FED dans la Salle Hillaire est importante proche du plafond puisque les gaz toxiques pénètrent dans la Salle Hillaire à des températures très élevées. Ils restent ainsi un certain temps dans la partie supérieure de la salle avant de se refroidir. Proche du sol, la FED apparait très faible et correspond à un milieu inoffensif. Les gaz ne s'échappent pas de cette salle et la Galerie du Cierge ainsi que la Salle du Crâne (salles adjacentes) sont épargnées. La répartition des gaz à la fin de la combustion est présentée sur la figure 4.86 qui montre le taux de CO_2. Ce taux est faible dans toute la Salle Hillaire ce qui atteste l'inoffensivité du dioxyde de carbone. Il est en effet comparable à la quantité naturellement présente dans la cavité. Puisque la modélisation est basée sur l'hypothèse du mélange parfait, la répartition du monoxyde de carbone est la même que celle du dioxyde de carbone. Son taux est relativement faible puisqu'il atteint au maximum des valeurs d'environ 100 ppm. Cette concentration n'implique que des légers maux de tête voire des nausées après une exposition de plusieurs heures. Les gaz toxiques ne sont donc pas dangereux d'après la simulation même s'il faut garder à l'esprit que le modèle s'appuie sur l'hypothèse simplificatrice d'un mélange parfait. Ainsi, même si l'absence de gradient vertical ne reflète pas une réalité physique puisque le CO_2 devrait se répartir davantage proche du sol sous l'effet de la gravité, sa faible quantité semble permettre une occupation sommaire voire prolongée.

La figure 4.87 présente la FED dans la Salle Hillaire lors de la combustion de 30 kg de bois à

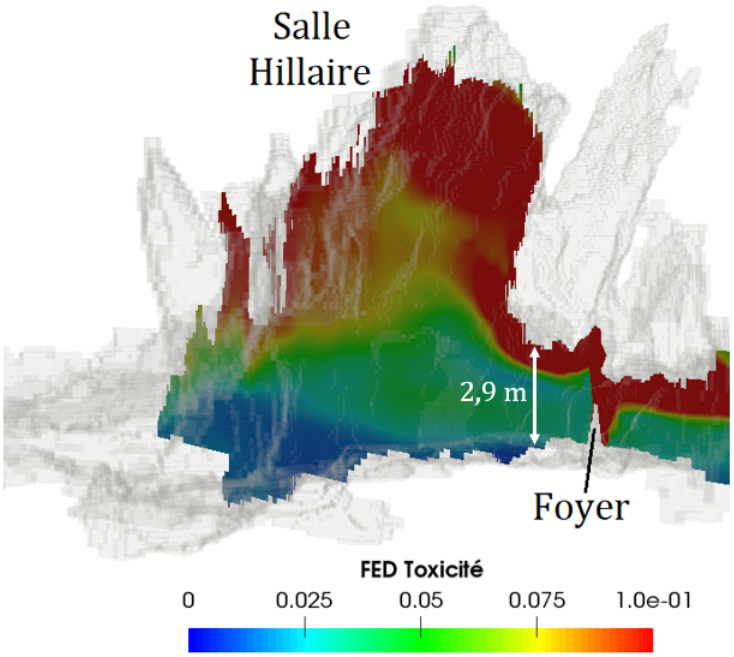

Figure 4.85 – FED relative à la toxicité pour un observateur ayant demeuré dans la Salle Hillaire pendant toute la combustion d'un foyer de 34 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 2.

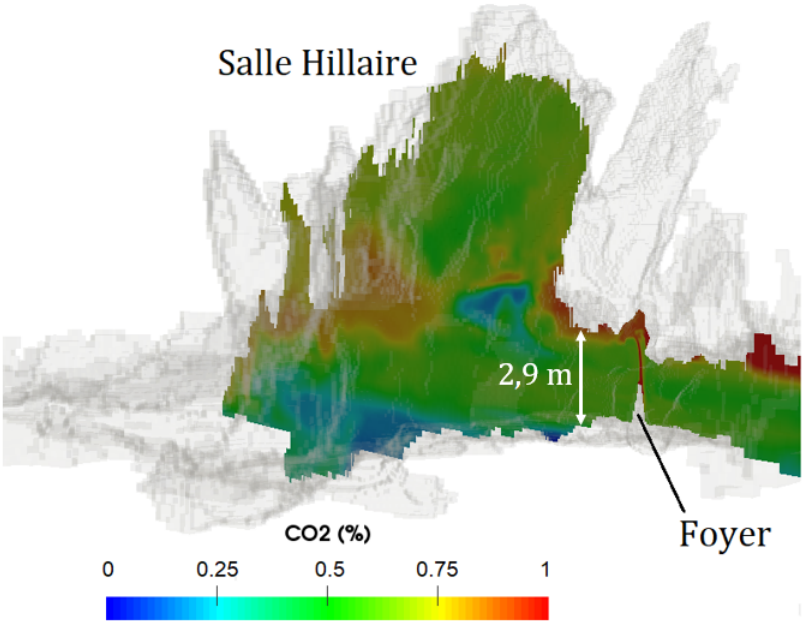

Figure 4.86 – Taux de CO_2 dans la Salle Hillaire à la fin de la combustion d'un foyer de 34 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 2.

l'emplacement du foyer de la zone 5 (Fig. 4.54). De même, le taux de CO_2 dans la salle pour le même feu simulé est fourni sur la figure 4.88.

La FED dépasse la valeur de 0,1 dans la partie supérieure de la Salle Hillaire. Au sol, la toxicité n'est pas dangereuse d'après la simulation. Le taux de CO_2 apparaît très faible puisqu'un taux de 1% de CO_2 reste inoffensif. De même, le monoxyde de carbone n'excède pas la concentration de 100 ppm, ce qui reste modeste. La même conclusion que pour le feu de la zone 2 est donc applicable au feu de la zone 5.

En comparant les résultats entre les deux foyers, il peut sembler étonnant que la FED soit globale-

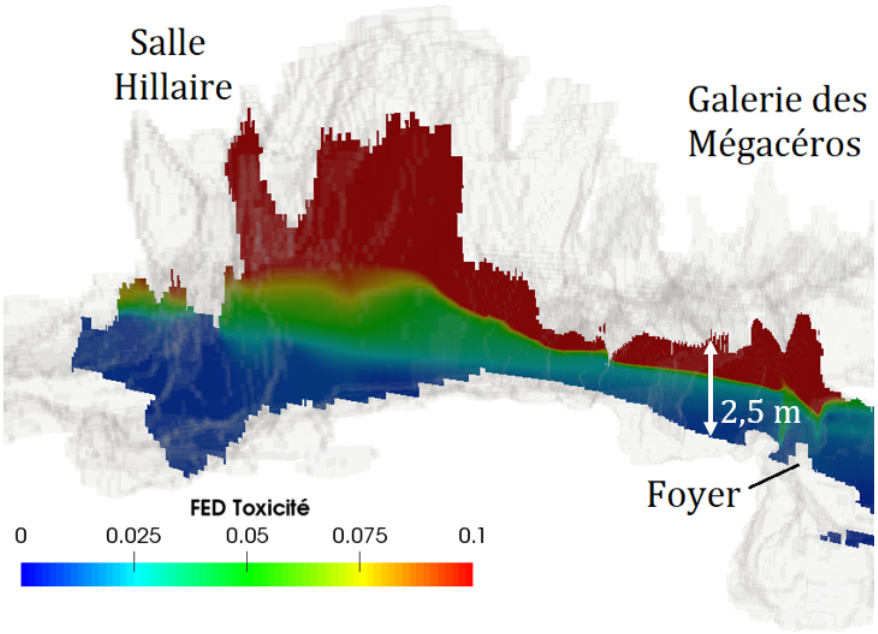

Figure 4.87 – FED relative à la toxicité pour un observateur ayant demeuré dans la Salle Hillaire pendant toute la combustion d'un foyer de 30 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 5.

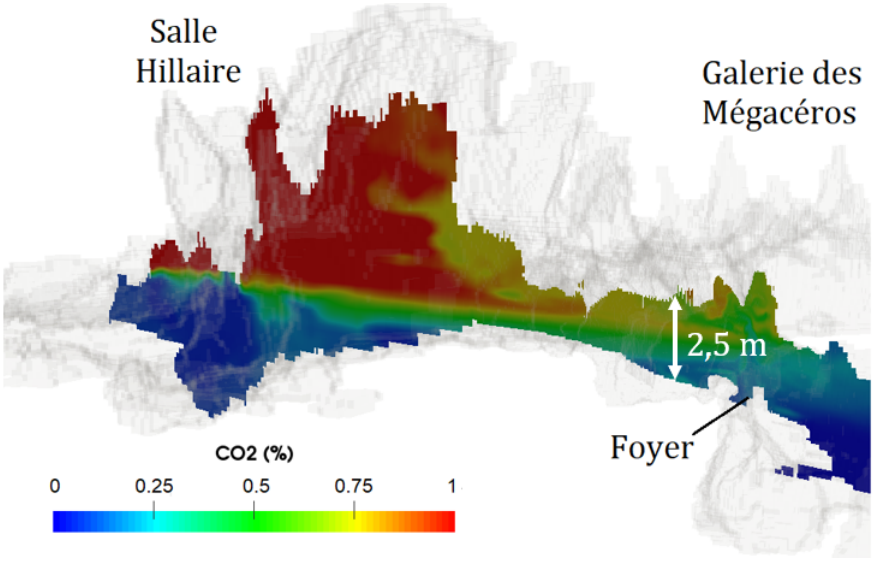

Figure 4.88 – Taux de CO_2 dans la Salle Hillaire à la fin de la combustion d'un foyer de 30 kg situé à l'emplacement du feu de la zone 5.

ment plus élevée pour un foyer de 30 kg que pour un foyer de 34 kg. Cependant, en plus de la masse, l'emplacement des foyers diffère et son influence est importante. En effet, le foyer de 34 kg est situé à l'entrée de la Galerie des Mégacéros. Les gaz toxiques se déversent donc immédiatement dans la Salle Hillaire avec une vitesse élevée. Le foyer de 30 kg est placé vers le milieu de la galerie, de sorte que les gaz doivent parcourir un chemin important avant d'atteindre la Salle Hillaire. Cela a pour conséquence de diminuer la température des gaz qui pénètrent dans la salle ainsi que leur vitesse. Le transport des gaz est ainsi restreint et leur dispersion dans la Salle Hillaire est donc moindre par rapport au premier foyer. La figure 4.89 compare le taux de CO_2 à la fin des deux combustions au plafond de la Salle Hillaire. Cette dernière est donc vue de l'extérieur et de dessus.

Le CO_2 se répartit davantage dans l'espace de la Salle Hillaire pour le foyer situé à l'entrée de la Galerie des Mégacéros (Fig. 4.89.a). À l'inverse, le foyer situé loin de la Salle Hillaire ne permet pas

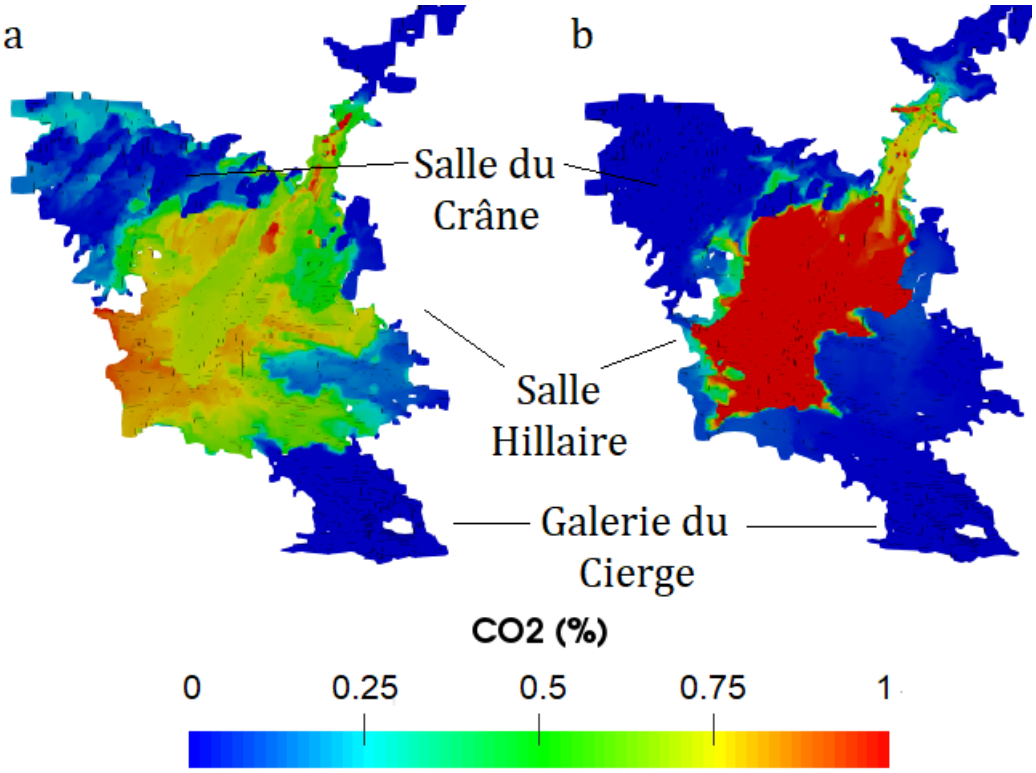

Figure 4.89 – Comparaison de la répartition du CO_2 au plafond de la Salle Hillaire. La géométrie est vue de dessus. a - Pour un foyer de 34 kg à l'emplacement du feu de la zone 2. b - Pour un foyer de 30 kg à l'emplacement du feu de la zone 5.

une bonne dispersion des gaz qui restent concentrés vers le centre de la salle (Fig. 4.89.b). Ainsi, les foyers proches de l'entrée de la galerie conduisent à une répartition des gaz plus importante ce qui diminue la concentration des gaz toxiques. Au contraire, des feux situés plus proches de la Salle du Fond mènent à une concentration localement plus élevée tout en épargnant certaines parties de la cavité. Ces conclusions concernent l'environnement de la grotte immédiatement après la fin de la combustion. Il est certain que par l'intermédiaire d'une faible convection due à de faibles gradients thermiques, les gaz toxiques se répartissent davantage dans toute la Salle Hillaire ainsi que dans la Salle du Crâne et dans la Galerie du Cierge après le feu. De plus, un gradient vertical des concentrations des gaz s'opérera naturellement sous l'effet de la gravité. Ces processus ne sont pas considérés. Il semble néanmoins probable que la quantité de CO_2 ne soit pas rédhibitoire à une fréquentation des lieux dans les deux cas traités.

Pour finir, cette étude à propos de la toxicité montre de manière certaine que les gaz se dirigent principalement en direction de la Salle Hillaire. La Salle du Fond était donc épargnée par la présence de gaz toxiques. Pendant un feu situé dans la Galerie des Mégacéros, il était donc plus sage de se placer soit dans la Salle du Fond, soit hors de la Salle Hillaire. Ces configurations assurent forcément une absence de danger. La toxicité relativement faible d'après les simulations, devait au moins permettre la traversée de la Salle Hillaire.

Dans la Galerie des Mégacéros, il était possible de rester dans la couche froide durant toute la combustion. Le rayonnement empêche simplement un séjour prolongé très proche du foyer (à deux mètres). Cependant, à la fin de la combustion, lorsque la convection devient très faible, les gaz issus de la faible combustion des restes du foyer initial risquent de rester dans la galerie. Ainsi, elle deviendrait infréquentable à l'image de la carrière de Lugasson après les expérimentations (Chap. 3). Néanmoins, l'éparpillement des braises du foyer avant la fin du régime de convection aurait peut-être pu limiter la toxicité.

4.5 Analyse globale des thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros

Cette section récapitule les informations obtenues dans ce chapitre à l'aide des observations *in situ* et de la simulation numérique. La figure 4.90 reprend la figure initiale 4.14 en affinant les positions des foyers dans chaque zone déterminées par la simulation. Le tableau 4.11 résume les masses nécessaires pour des combustions uniques sans alimentation pour chaque zone.

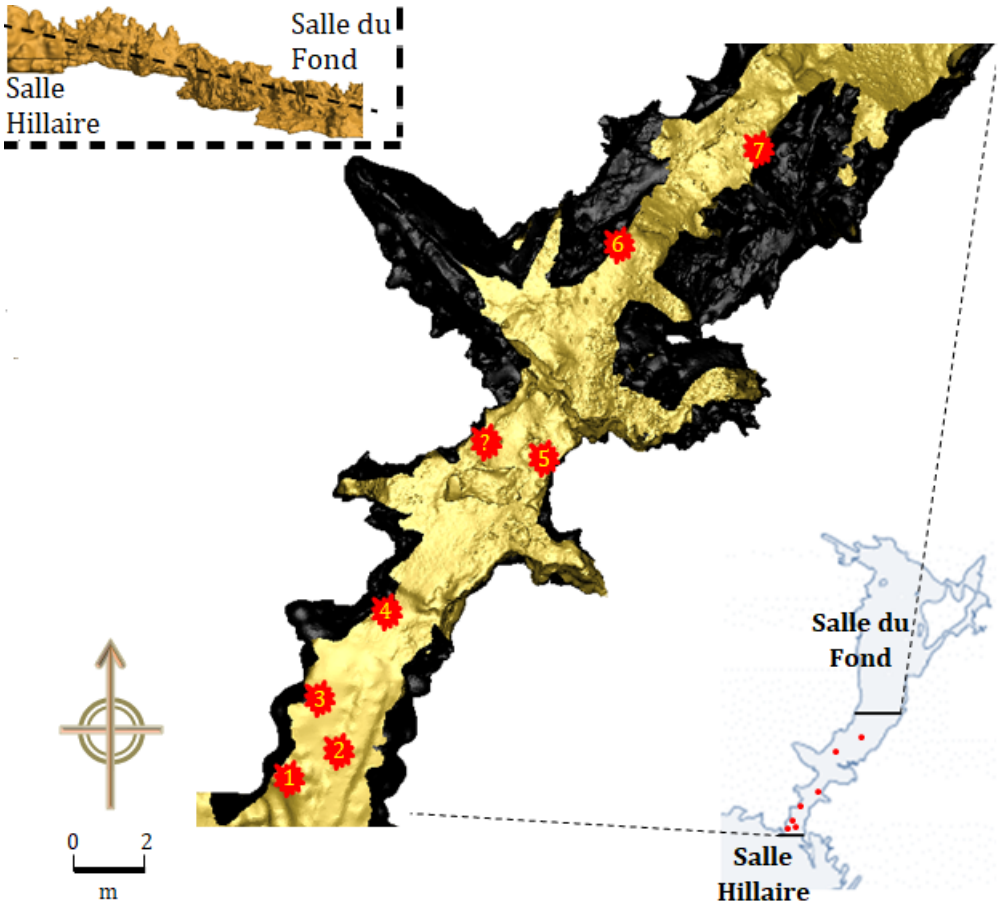

Figure 4.90 – Répartition probable des sites de combustion à l'origine des thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros. L'image centrale est une coupe de la galerie (issue de la photogrammétrie réalisée par Archéotransfert) dont le profil est présenté dans le coin supérieur gauche de la figure. Le sol de la galerie est jaune tandis que les parois sont noires.

Zone thermo-altérée	Masse du foyer
1	15 – 20 kg
2	$\sim$ 30 kg
3	15 – 20 kg
4	$\sim$ 10 kg
5	$\sim$ 25 kg + Autres combustions côté gauche
6	$\sim$ 15 kg
7	10 – 15 kg

Tableau 4.11 – Masse les plus probables pour les foyers de chaque zone.

Premièrement, l'observation des thermo-altérations fournit des renseignements sur la configuration des foyers. Plusieurs zones (1, 3, 4 et 7) sont altérées de manière très localisées et peu étendues (Fig.

4.16, 4.37, 4.46 & 4.75). Elles furent nécessairement causées par des foyers dont le volume était restreint. De plus, la simulation corrobore ce constat pour les trois autres zones où des foyers localisés permettent la reproduction des thermo-altérations visibles pour chaque zone (Fig. 4.29, 4.55 & 4.68). Notons que les foyers numériques des zones 5 et 6 ont tout de même dû être légèrement élargis par rapport à un simple tipi (Fig. 4.54 & 4.66). Malgré ces derniers, les branches de pin sylvestre ne purent être déposées sans soin le long des parois. Une forme totalement différente de celle en tipi semble donc inenvisageable. De plus, pour quatre des foyers présentés (zones 1, 3, 4, 5), le tipi devait être excentré, très proche de la paroi mais sans la toucher. Dans le cas contraire, le bas des parois aurait été altéré. Il y a ici une volonté évidente de ne pas placer le foyer contre la paroi alors qu'elle aurait pu servir d'appui et faciliter la mise en place des branches. Ce constat est particulièrement manifeste pour la zone 4 où le foyer fut placé sur un sol légèrement irrégulier (Fig. 4.46). De plus, d'un point de vue numérique, il a été particulièrement difficile de positionner un foyer capable d'altérer le haut de la paroi sans en altérer le bas. La zone altérée est en effet quasiment verticale à cet endroit et modifier cette surface sans affecter le bas de la paroi est complexe. Pour les zones 2, 6 et 7, aucune paroi alentour ne gêne la construction des foyers. Ainsi, chaque structure de combustion était *a priori* volontairement éloignée des parois tout en étant placée sous une voûte. Sans que cela puisse être attesté, les Aurignaciens pourraient avoir eu l'intention d'oxygéner leurs foyers. L'oxygène pouvait en effet, dans cette configuration, parfaitement alimenter la combustion. Un foyer placé contre la paroi aurait libéré moins de puissance puisque les réactions chimiques entre le combustible et le comburant (oxygène) se seraient produites dans une zone plus restreinte. La partie du bois contre la paroi aurait plus difficilement brûlé. Enfin, de manière pragmatique, la position de certains foyers peut poser question. Comme évoqué ci-dessus, le foyer de la zone 4 est particulièrement difficile à mettre en place alors qu'un diverticule très excentré qui aurait pu l'abriter se trouve à un mètre des thermo-altérations (Fig. 4.46). De même, le site de combustion de la zone 6 se situe à un emplacement particulier (Fig. 4.66). Il n'y a en effet pas d'altération sous le ressaut. Cela signifie que le foyer ne se situait par sous le ressaut mais à l'aplomb de la paroi verticale légèrement bombée et ornée de tracés digitaux. Comme pour le feu de la zone 4, il a été difficile de placer le site de combustion dans la simulation numérique sans rubéfier sous le ressaut.

Deuxièmement, la simulation a permis de quantifier la masse de pin sylvestre requise pour chaque zone. Ces masses s'étalent d'une dizaine à une trentaine de kilogrammes. D'autres feux moins intenses ont pu être effectués sans laisser de marques. Ainsi, les feux effectués dans la Galerie des Mégacéros pouvaient être mis en place par un groupe restreint d'individus voire un seul individu. En effet, d'après les collectes de bois effectuées pour les besoins des expérimentations du chapitre 3, un arbre fournit une masse d'environ 10 kg collectée en une douzaine de minutes (§3.1.1). Ainsi, se procurer une trentaine de kilogrammes nécessitait sans doute moins d'une heure. Puis, le transport de cette masse à l'intérieur de la Galerie des Mégacéros était sans nul doute à la portée d'une poignée de personnes.

Les quantités de bois déterminées à partir de la simulation et des expérimentations laissent penser qu'il y a eu des combustions uniques et non alimentées pour chaque zone altérée. En effet, les masses requises sont assez faibles et la conduite d'un protocole d'alimentation semble inutile puisqu'il est possible d'allumer directement un foyer de cette taille. De plus, même si plusieurs petites combustions sont envisageables, il parait peu probable qu'elles soient toujours pratiquées aux sept mêmes endroits précisément qui, rappelons-le, n'aurait révélé un changement de coloration qu'après plusieurs chauffes. En outre, la réitération de combustion aux emplacements des foyers des zones 2 et 4 semblent difficilement réalisables. En effet, comme évoqué plus haut, il fut sans doute très pénible de positionner le foyer 4. La simulation du feu de la zone 2 fut aussi délicate. La zone grise étant très localisée, seul un foyer peu volumineux a pu altérer cette paroi. La réalisation d'un second foyer au même emplacement est possible mais sa combustion n'a pu dans ce cas n'être effectuée qu'immédiatement après la fin de la première, sur les restes du premier foyer. Dans le cas contraire, affecter la voûte exactement au même endroit sans trace visible est impossible. De plus, les zones 2 et 5 furent nécessairement altérées par des combustions d'au moins une quinzaine de kilogrammes (Fig. 4.30 & 4.31 et Fig. 4.56 & 4.57). Sans cette masse minimale, les thermo-altérations ne pourraient en effet pas être aussi étendues. Ainsi, puisque les emplacements 1, 3, 4, 6 et 7 nécessitent une masse analogue entre 10 et 20 kg de bois, il est probable que les foyers aient été brûlés en une fois dans ces zones. Le scénario le plus probable cor-

respond donc à des combustions uniques à chaque emplacement. Il faut toutefois émettre des réserves pour la zone 5 où plusieurs combustions ont pu être effectuées au même emplacement, sur la droite de la galerie. De plus, cette zone a nécessairement abrité plusieurs combustions à des emplacements différents, notamment sur la gauche de la galerie.

D'après les éléments dont nous disposons maintenant, le scénario le plus probable correspond à l'exécution de combustions de foyers en forme de tipi, éloignés volontairement de la paroi et positionnés à des emplacements parfois peu pratiques. De plus, chaque altération résulte probablement d'une unique combustion.

Dans ce cas, les foyers furent construits rationnellement et il est raisonnable de penser que la quantité de combustible choisie à chaque emplacement a aussi été réfléchie par les Aurignaciens. Les quantités les plus faibles de bois furent déposées dans les zones 4 et 7 (Tab. 4.11). Les parois altérées à ces emplacements sont les moins hautes (environ 1 m pour la zone 4 et 40 cm pour la zone 7). Le foyer de la zone 6 possède une masse légèrement supérieure à celui du feu 7 (une quinzaine de kilogrammes). La zone altérée se trouve à environ 1,4 m du sol. Cette masse est sans doute proche de la masse minimale pour rubéfier la paroi. Les foyers des zones 1 et 3 sont analogues (Tab. 4.11) tout comme les hauteurs sous les thermo-altérations. Enfin, les foyers les plus conséquents furent effectués pour les zones 2 et 5. La hauteur de la surface grise de la zone 5 n'est pas importante (environ 1,25 m) contrairement à celle correspondant à la zone 2. Les thermo-altérations de cette dernière se situent à environ 2,1 m du sol. Même si la masse du foyer n'est pas systématiquement proportionnelle à la hauteur sous la zone altérée, particulièrement pour la zone 5, une certaine tendance ne peut être ignorée. Notons que cet argument n'est valable que si une seule combustion par zone n'a été effectuée.

L'objectif de ces feux reste toujours une question ouverte. Rappelons que les informations en notre connaissance sont peut-être lacunaires puisque d'autres feux modestes ont pu se produire dans la galerie sans laisser de marques. Comme l'absence avérée d'aménagements dans la Galerie des Mégacéros, les quantités de bois attribuées à chaque foyer s'opposent à une fonction domestique. Aussi, il parait peu probable que ces feux n'aient pu avoir pour unique fonction que celle de la production de charbon même si ceux-ci ont pu en produire. En effet, le positionnement des foyers en retrait par rapport aux parois pourrait correspondre à une volonté d'oxygénation de la combustion. Cela irait à l'encontre d'un objectif lié à la production de charbon. De plus, les figurations réalisées au charbon se trouvant principalement dans la Salle du Fond et la Salle Hillaire, il y a d'une part peu d'intérêt à réaliser un foyer si loin de la zone de dessin. D'autre part, la masse importante de combustible paraît excessive pour produire du charbon de bois. La quantité de charbon produit n'est en effet pas proportionnelle à la quantité de bois initiale. Enfin, effectuer de tels feux dans une galerie très confinée alors que deux grandes salles jouxtent celle-ci uniquement pour fournir les artistes en charbon parait irrationnel. Pourtant, comme ce mémoire le montre, les feux résultent de choix rationnels et pragmatiques. Il semble donc qu'une fonction supplémentaire puisse être attribuée à ces feux.

Conclusion

La grotte Chauvet-Pont d'Arc, mondialement connue pour son art pariétal exceptionnel, présente de plus des thermo-altérations uniques sur ses parois. De nombreuses questions entourent les feux qui en sont à l'origine, notamment à propos de leurs fonctions. Ce travail de thèse avait pour objectif principal la caractérisation des feux effectués dans la Galerie des Mégacéros, une partie étroite de la cavité située vers le fond de celle-ci. Ces travaux se sont donc articulés autour de trois axes : construire un couplage numérique capable de simuler l'impact thermique de feux sur des structures, valider la modélisation sur des essais expérimentaux puis appliquer le modèle aux marques thermiques de la Galerie des Mégacéros.

Le contexte archéologique relatif à la grotte Chauvet-Pont d'Arc fut d'abord présenté. À travers le Secteur des Chevaux, l'art pariétal de la grotte fut exposé de manière non exhaustive. Puis, un tour d'horizon des traces de chauffe recensées dans toute la grotte ainsi qu'une description plus détaillée pour la Galerie des Mégacéros ont été effectués.

Une description bibliographique et théorique de l'ensemble des phénomènes physico-chimiques abordés dans le mémoire fut ensuite effectuée. La pyrolyse du bois fut d'abord étudiée du point de vue de la cinétique et de la puissance dégagée. Le comportement des flammes et des gaz issus d'une combustion localisée telle que celles des foyers de pin sylvestre a été évoqué de manière qualitative et quantitative à travers des formulations empiriques. L'impact du confinement fut de même évoqué. Puis les théories mathématiques permettant la résolution des phénomènes se déroulant dans une enceinte confinée accueillant une combustion furent détaillées. Ainsi, les transferts thermiques, la mécanique des fluides, la turbulence ainsi que les thermo-altérations furent décrits. Les processus chimiques menant aux changements de coloration sont partiellement définis dans la littérature. Des essais ont ainsi dû être menés pour déterminer les critères de température et de durée relatifs à ces changements. Le choix du logiciel OpenFOAM fut ensuite étayé par des considérations numériques. Le détail de la structure de ce code est proposé puisqu'elle est relativement peu détaillée dans la littérature. La résolution conduite par Cast3m a enfin été succinctement présentée.

Des domaines relatifs à la combustion n'étaient initialement pas traités par la version 4.0 de FireFOAM. Ceux-ci correspondent à l'estimation des risques encourus dans un milieu confiné accueillant une combustion, au dépôt de suie et à la prise en compte de la conduction dans les parois. De même, la correction de température appliquée aux mesures réalisées à l'aide de thermocouples a été améliorée. Au total, le travail de thèse requit les quatre contributions à OpenFOAM suivantes :

- Implémentation du modèle de FED pour la température, le rayonnement et la toxicité
- Implémentation du modèle de Beresnev-Chernyak pour simuler le dépôt de suie
- Implémentation de la condition limite en température décrivant l'équilibre des flux thermiques
- Mise en place d'une correction de température appliquée aux mesures des thermocouples (post-process)

De plus, des erreurs numériques liées à la condition limite en HRR ont été détectées. Même si l'origine de ces écarts n'est pas fournie, un critère permettant d'éviter l'apparition d'une surestimation du HRR numérique est établi. Deux types de modélisation ont ensuite été mis au point grâce à des mesures expérimentales. La première correspond à une modélisation sous-maille du phénomène de jet sous plafond. Compte tenu du volume des géométries considérées, de la durée des combustions et

du nombre de simulations à effectuer, il a en effet été obligatoire de modéliser le transfert thermique aux parois. L'extension du jet sous plafond aux parois verticales a aussi été modélisée. La seconde modélisation provient d'une insuffisance de la simulation numérique dont l'origine n'a pu être établie. Lors de feux de compartiments, la mise en place de deux couches de températures distinctes est un phénomène courant lors d'une combustion dans un milieu ouvert sur un grand réservoir d'air. Or, la simulation ne permet pas de rendre suffisamment compte de ce processus. Cet erreur n'est pas négligeable puisqu'elle fausse la température de la couche froide et donc des informations concernant la fréquentation de ces zones. Puisque celles-ci sont archéologiquement primordiales dans l'étude, une hypothèse mathématique, basée sur la circulation physique des gaz, a été appliquée sur la vitesse. Dans le cadre des simulations effectuées par FireFOAM, il a donc été nécessaire de mettre en place trois stratégies numériques :

- Mise en place d'un critère de surface maximale affectée par la condition limite en HRR
- Modélisation sous-maille du jet sous plafond
- Hypothèse de vitesse exclusivement horizontale

Le dernier besoin numérique correspond au couplage entre les logiciels OpenFOAM et Cast3m. Ce couplage fluide-structure permet la réalisation de calculs thermo-mécaniques 2D des parois affectées par la chauffe à partir des températures simulées par OpenFOAM. Notons que le cadre d'application de ce couplage peut être beaucoup plus large à l'instar de tout couplage fluide-structure. À ce titre, le code permettant le couplage a été mis en ligne (voir annexe E).

Cette modélisation a ensuite été testée sur des expérimentations menées dans une ancienne carrière dont les dimensions rappellent celles de la Galerie des Mégacéros. Les objectifs de ces essais correspondaient à la vérification de la reproductibilité de tels feux, à la reproduction de thermo-altérations analogues à celles observables dans la Galerie des Mégacéros et à l'acquisition de données grâce à des mesures de températures, de vitesses des gaz, de concentrations et de dépôts de suie. Ces mesures ont permis d'ajuster certaines constantes empiriques provenant de la modélisation du jet sous plafond, de la réaction chimique et du modèle de combustion. Ces expérimentations ont aussi permis de vérifier la pertinence de l'utilisation de l'hypothèse relative à la vitesse. De manière générale, la simulation conduit à des résultats voisins des mesures proches du feu. Plus loin du feu, la modélisation sous-maille du jet sous plafond pourrait affecter négativement les résultats. La modélisation du dépôt de suie ne permet que des comparaisons qualitatives puisque la simulation n'est pas en accord sur les quantités déposées. Une approche plus fine du transfert thermique aux parois semble requise pour estimer ce type de quantité. La simulation des thermo-altérations a fourni des résultats conformes aux observations *in situ*. Les changements de coloration des parois et du plafond sont correctement retranscrits par la simulation. De même, les écaillages observés sur le plafond de la carrière se situent, d'après la simulation, dans une zone où les contraintes mécaniques ont dépassé la résistance en compression de la roche en place.

Afin d'appliquer la modélisation validée sur les expérimentations menées dans la carrière, d'autres essais ont dû être effectués sur le même site expérimental. La combustion de plusieurs masses de bois a été réalisée afin de mesurer le taux de perte de masse à chaque instant. Pour plusieurs masses, ces mesures ont donc permis l'acquisition des courbes de débit massique en fonction du temps. Celles-ci ont pu être reliées aux courbes de débit calorifique moyennant l'hypothèse simplificatrice d'un pouvoir calorifique constant. Puis, un modèle s'appuyant sur celui des *wood cribs* a été construit. Ce modèle étendu des *wood cribs* a permis d'extrapoler les courbes calorifiques quelle que soit la masse initiale du foyer. Ce modèle empirique couplé avec la modélisation numérique a conduit à la caractérisation des feux qui se sont déroulés dans la Galerie des Mégacéros. Chaque zone altérée a été traitée et les scénarios les plus probables d'après la modélisation ont été détaillés. Au total, au moins sept combustions ont laissé des traces sur les parois de la galerie. La zone 5 a dû abriter plus d'une combustion à des emplacements différents. De ces résultats et des observations *in situ*, résultent des arguments qui vont en faveur de combustions uniques à chaque emplacement. La masse des foyers s'étalerait dans ce cas d'une dizaine

à une trentaine de kilogrammes. Malgré le confinement de la cavité, ces combustions ne souffraient pas d'une déficience en oxygène grâce aux grands volumes des salles voisines. De plus, lors d'un feu, les gaz toxiques s'évacuent majoritairement dans la Salle Hillaire. La Salle du Fond était donc épargnée durant les combustions réalisées dans la Galerie des Mégacéros. D'après la modélisation, la libération de gaz toxiques ne semble pas empêcher la fréquentation humaine dans la Salle Hillaire pendant un feu. Néanmoins, la répartition verticale du dioxyde de carbone pourrait être éloignée de la réalité puisque le rôle important joué par sa forte masse n'est pas pris en compte. Ces résultats demandent donc une grande prudence. Ainsi, réaliser de tels feux n'était pas une tâche complexe pour les Aurignaciens. Par exemple, une ou deux personnes auraient pu transporter cette quantité de bois jusque dans la Galerie des Mégacéros en une seule fois. L'emplacement des foyers à proximité des parois sans jamais les toucher, le caractère localisé des thermo-altérations et les quantités de bois majoritairement proches des quantités minimales requises pour altérer les parois semblent correspondre à des choix réfléchis. L'écart entre les foyers et les parois pourrait avoir été laissé volontairement par les Aurignaciens. Un foyer accolé à la paroi aurait connu une oxygénation moins importante et l'intensité de la combustion aurait été limitée par rapport à celle résultant du positionnement choisi par les Aurignaciens. Le choix des structures en tipi semble être volontaire afin d'altérer efficacement les parois. Ces constats semblent proscrire une fonction uniquement axée sur la production de charbon qui ne nécessiterait pas une telle précaution. Une volonté de transformer les parois de la part des Aurignaciens ne peut donc être exclue.

À l'issue de cette étude, des travaux futurs pourraient être envisagés à propos de plusieurs sujets :

- la simulation de résultats cohérents repose sur l'hypothèse de la vitesse exclusivement horizontale. Les limites de cette hypothèse empêchent son utilisation systématique selon le type de combustion. Comprendre la raison pour laquelle OpenFOAM ne peut reproduire la stratification thermique en deux couches constituerait un premier pas dans la résolution de cette problématique. Cette correction rendrait ainsi possible l'emploi de la CFD classique pour simuler la circulation des gaz.

- une modélisation adaptée à la simulation de la répartition des gaz permettrait une simulation plus proche du profil des concentrations de gaz. Pour ce faire, la différence entre les masses de chaque gaz devrait être considérée.

- une meilleure compréhension des thermo-altérations et particulièrement de la couleur grise serait une grande avancée. Des critères de changement de coloration dépendant de la cinétique chimique des réactions permettraient la diminution des incertitudes. Il semble que seules des expérimentations supplémentaires puissent conduire à l'établissement de tels critères.

- des relevés sur le terrain sont nécessaires afin de délimiter de manière plus précise les thermo-altérations de la Galerie des Mégacéros. Ils devraient, entre autres, permettre d'affiner certaines informations relatives aux écaillages. Leur épaisseur ainsi que des traces superficielles de suie ou de rubéfaction pourraient fournir des renseignements quant aux scénarios envisageables.

- la combustion des masses estimées dans cette thèse était-elle propice à la production qualitative et quantitative de charbons ? Des expérimentations pourraient être menées afin de conclure quant aux foyers idéaux pour cette tâche.

- estimer la quantité de charbon nécessaire pour la réalisation de l'ensemble des dessins permettrait d'évaluer le nombre de feux nécessaires pour les produire. Cette information pourrait ensuite être comparée avec les feux effectués dans la Galerie des Mégacéros.

- la luminosité est un point qui n'a pas été évoqué dans le mémoire. Mais de tels feux devaient éclairer la Galerie des Mégacéros, voire la Salle Hillaire. Étudier l'intensité de l'éclairage permettrait de se rendre compte des conditions visuelles liées au feu.

- la grotte Chauvet-Pont d'Arc fut le théâtre de plusieurs feux situés dans d'autres salles ou galeries que la Galerie des Mégacéros. Leur étude conduirait à une vue d'ensemble des feux effectués dans toute la grotte. Plus particulièrement, les feux réalisés dans le Secteur d'Entrée et la Salle des Bauges semblent être plus intenses que ceux de la Galerie des Mégacéros. Une estimation de la taille des foyers fournirait sans doute des informations supplémentaires à propos des activités effectuées dans cette cavité.

Bibliographie

[1] G. Tosello et C. Fritz. Les dessins noirs de la grotte Chauvet-Pont-d'Arc : essai sur leur originalité dans le site et leur place dans l'art aurignacien. *Bulletin de la Société préhistorique française*, 102-1, 159–171, 2005.

[2] C. Ferrier, E. Debard, B. Kervazo, A. Brodard, P. Guibert, D. Baffier, V. Feruglio, B. Gely, J. Geneste, et F. Maksud. Les parois chauffées de la grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche) : caractérisation et chronologie. *PALEO*, 25, 2014.

[3] Dougal Drysdale. *An introduction to fire dynamics (Third edition).* Wiley, 2011.

[4] J. Wang et T. Xu. A new Calculation Model of Detection Time for Heat Detector in Long and Narrow Space. *Procedia Engineering*, 52, 355–362, 2013.

[5] F.H. Clauser. The turbulent boundary layer. *Advances in Applied Mechanics*, 4, 1–51, 1956.

[6] S.D.C. Walsh, I. Lomov, et J.J. Roberts. Geomechanical Modeling for Thermal Spallation Drilling. *GRC Trans.*, 35, 277–282, 2011.

[7] OpenFOAM-Thermocouple. https ://www.openfoam.com/releases/openfoam-v1612+/post-processing.php, 2016.

[8] B.R. Stanmore, J.F. Brilhac, et P. Gilot. The oxidation of soot : a review of experiments, mechanisms and models. *Carbon*, 39, 2247–2268, 2001.

[9] F. Salmon, D. Lacanette, J.-C. Mindeguia, C. Sirieix, A. Bellivier, C. Ferrier, et J.-C. Leblanc. Localized fire in a gallery : model development and validation. *International Journal of Thermal Science*, 139, 144–159, 2019.

[10] cfMesh. http ://cfmesh.com.

[11] V. Babrauskas. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, chapter Heat Release Rates.* Springer, 2016.

[12] C. Ferrier, E. Debard, B. Kervazo, N. Aujoulat, D. Baffier, V. Feruglio, C. Fritz, B. Gély, J.-M. Geneste, S. Konik, D. Lacanette, R. Lastennet, F. Maksud, P. Malaurent, F. Plassard, et G. Tosello. Approche taphonomique des parois des grottes ornées. In : J. Clottes. (dir.), L'art pléistocène dans le monde / Pleistocene art of the world / Arte pleistoceno en el mundo. *Actes du Congrès IFRAO, Tarascon-sur-Ariège, septembre 2010, Symposium « Datation et taphonomie de l'art pléistocène », Préhistoire, Arts et Sociétés, Bulletin de la Société Préhistorique Ariège-Pyrénées, LXV-LXVI, 2010-2011, Livre synthèses : p. 192, CD : p. 1071*, 2012.

[13] J.P. Holman. *Heat Transfer (Tenth edition).* McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering, 2010.

[14] S. Beresnev et V. Chernyak. Thermophoresis of a spherical particle in a rarefied gas : Numerical analysis based on the model kinetic equations. *Physics of Fluids*, 7, 1743–1756, 1995.

[15] J.A.J. Gowlett, J.C. Chambers, J. Hallos, et T.R.J. Pumphrey. Beeches Pit : first views of the archaeology of a Middle Pleistocene site in Suffolk, UK, in European context. *Anthropologie*, 36 (1/2), 91–97, 1998.

[16] M.C. Stahlschmidt, C.E. Miller, B. Ligouis, U. Hambach, P. Goldberg, F. Berna, D. Richter, B. Urban, J. Serangeli, et N.J. Conard. On the evidence for human use and control of fire at Schöningen. *Journal of Human Evolution*, 89, 181–201, 2015.

[17] Y. Yokoyama, C. Falgueres, et J.P. Quaegebeur. ESR dating of quartz from quaternary sediments : First attempt. *Nuclear Tracks and Radiation Measurements (1982)*, 10 (4-6), 921–928, 1985.

[18] J.-L. Monnier. A new regional group of the Lower Palaeolithic in Brittany (France), recently dated by electron spin resonance. *Comptes Rendus - Academie des Sciences, Série II : Sciences de la Terre et des Planètes*, 319 (1), 155–160, 1994.

[19] B. Hallegouët, S. Hinguant, A. Gebhardt, et J.-L. Monnier. Le Gisement paléolithique inférieur de Ménez-Dregan 1 (Plouhinec, Finistère), premiers résultats des fouilles. *Bulletin de la Société préhistorique française*, 89-3, 77–81, 1992.

[20] W. Roebroeks et P. Villa. On the earliest evidence for habitual use of fire in Europe. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108 (13), 5209–5214, 2011.

[21] S. Verheyden J. Jaubert, D. Genty, M. Soulier, C. Hai, D. Blamart, C. Burlet, H. Camus, S. Delaby, D. Deldicque, R.L. Edwards, C. Ferrier, F. Lacrampecruyaubert, F. Leveque, F. Maksud, P. Mora, X. Muth, E. Regnier, J.-N. Rouzaud, et F. Santos. Early Neanderthal constructions deep in Bruniquel Cave in southwestern France. *Nature*, 534, 111–115, 2016.

[22] M.A. Medina-Alcaide, D. Garate-Maidagan, A. Ruiz-Redondo, et J.L. Sanchidrian-Torti. Beyond art : The internal archaeological context in Paleolithic decorated caves. *Journal of Anthropological Archaeology*, 49, 114–128, 2018.

[23] P. Ambert, J.-L. Gendon, P. Galant, Y. Quinif, A. Gruneisen, A. Colomer, D. Dainat, B. Beaumes, et C. Requirand. Attribution des gravures paléolithiques de la grotte d'Aldène (Cesseras, Hérault) à l'Aurignacien par la datation des remplissages géologiques. *Comptes Rendus - Palevol*, 4 (3), 275–284, 2005.

[24] D. Baffier et M. Girard. *Les cavernes d'Arcy-sur-Cure*. Paris, La maison des roches, 1998.

[25] J. Clottes, A. Beltrán, J. Courtin, et H. Cosquer. La Grotte Cosquer (Cap Morgiou, Marseille). *Bulletin de la Société préhistorique française*, 89-4, 98–128, 1992.

[26] R. Begouën, C. Fritz, G. Tosello, J. Clottes, A. Pastoors, F. Faist, F. Bourges, P. Fosse, S. Lacombe, et M. Langlais. *Le sanctuaire secret des bisons. Il y a 14 000 ans, dans la caverne du Tuc d'Audoubert*. Paris, Somogy édition d'art, 2009.

[27] C. Ferrier, A. Bellivier, D. Lacanette, J.-C. Leblanc, J.-C. Mindeguia, et F. Salmon. L'utilisation du feu dans l'endokarst au Paléolithique : approche interdisciplinaire et expérimentale (programme CarMoThaP). *Karstologia*, 70, 23–32, 2017.

[28] OpenFOAM. http ://www.openfoam.org/.

[29] FireFOAM. http ://www.fmglobal.com/modeling.

[30] Cast3m. http ://www-cast3m.cea.fr, 2016.

[31] I. Théry-Parisot et S. Thiébault. Analyses polliniques des sols aurignaciens de la grotte Chauvet (Ardèche). Résultats préliminaires. *Bulletin de la Société préhistorique française*, 102 (1), 2005.

[32] J. Clottes, dir. *La grotte Chauvet. L'art des origines*. Paris, Editions du Seuil, coll. Arts Rupestres, 224 p, 2001.

[33] B. Sadier, J.-J. Delannoy, L. Benedetti, D.L. Bourlès, S. Jaillet, J.-M. Geneste, A.-E. Lebatard, et M. Arnold. Further constraints on the Chauvet cave artwork elaboration. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA*, 109 (21), 8002–8006, 2012.

[34] E. Debard, C. Ferrier, et B. Kervazo. Grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche) : évolution morphosédimentaire de l'entrée. Implication sur les occupations et sur la conservation des vestiges. *Quaternaire*, 27 (1), 3–14, 2016.

[35] H. Valladas, N. Tisnérat-Laborde, H. Cacher, É. Kaltnecker, M. Arnold, C. Oberlin, et J. Évin. Bilan des datations carbone 14 effectuées sur des charbons de bois de la grotte Chauvet. *Bulletin de la Société préhistorique française*, 102-1, 109–113, 2005.

[36] A. Quiles, H. Valladas, J.M. Geneste, J. Clottes, D. Baffer, B. Berthier, F. Brock, C. Bronk Ramsey, E. Delqué-Količ, J.-P. Dumoulin, I. Hajdas, K. Hippe, G.W.L. Hodgins, A. Hogg, A.J.T. Jull, E. Kaltnecker, M. De Martino, C. Oberlin, F. Petchey, P. Steier, H.-A. Synal, J. Van der Plicht, E.M. Wild, et A. Zazzo. Second radiocarbon intercomparison program for the Chauvet-Pont d'Arc cave, Ardèche, France. *Radiocarbon*, 56 (2), 833–850, 2014.

[37] P.J. Reimer, M.G.L. Baillie, E. Bard, A. Bayliss, J.W. Beck, P.G. Blackwell, C. Bronk Ramsey, C.E. Buck, G.S. Burr, R.L. Edwards, M. Friedrich, P. M. Grootes, T.P. Guilderson, I. Hajdas, T.J. Heaton, A.G. Hogg, K.A. Hughen, K.F. Kaiser, B. Kromer, F.G. McCormac, S.W. Manning, R.W. Reimer, D.A. Richards, J.R. Southon, S. Talamo, C.S.M. Turney, J. van der Plicht, et C.E. Weyhenmeyer. Intcal09 and Marine09 Radiocarbon Age Calibration Curves, 0–50,000 Years cal BP. *Radiocarbon*, 51 (4), 1111–1150, 2009.

[38] A. Quiles, H. Valladas, H. Bocherens, E. Delqué-Kolic, J. Van der Plicht, J.-J. Delannoy, V. Feruglio, C. Fritz, J. Monney, P. Malaurent, G. Tosello, J. Clottes, et J.-M. Geneste. A high-precision chronological model for the decorated Upper Paleolithic cave of Chauvet-Pont d'Arc, Ardèche, France. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113 (17), 4670–4675, 2016.

[39] P. Fosse et M. Philippe. La faune de la grotte Chauvet : paléobiologie et anthropozoologie. *Bulletin de la Société préhistorique française*, 102-1, 89–102, 2005.

[40] Site du Ministère de la Culture dédié à la grotte Chauvet-Pont d'Arc. archeologie.culture.fr/chauvet/fr, 2019.

[41] J.-M. Chauvet, E. Brunel-Deschamp, et C. Hillaire. *La grotte Chauvet à Vallon-Pont-d'Arc.* Paris, Éditions du Seuil, coll. Arts Rupestres, 118 p, 1995.

[42] J.-M. Geneste. L'archéologie des vestiges matériels dans la grotte Chauvet-Pont-d'Arc. *Bulletin de la Société préhistorique française*, 102-1, 135–144, 2005.

[43] E. Debard, C. Ferrier, et B. Kervazo. Étude géologique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Bilan des travaux de la triennale 2010-2012. In *Études pluridisciplinaires à la grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche). Rapport d'activité 2010-2012*, volume 1, pages 59–98, 2012.

[44] A. Brodard, P. Guibert, C. Ferrier, E. Debard, B. Kervazo, et J. Geneste. Les rubéfactions des parois de la grotte Chauvet : une histoire de chauffe ? *Les arts de la Préhistoire : micro-analyses, mises en contextes et conservation, Paillet P. (dir)*, 2014.

[45] P. Guibert, A. Brodard, A. Quiles, J.-M. Geneste, D. Baffier, E. Debard, et C. Ferrier. When were the walls of the Chauvet-Pont d'Arc Cave heated ? A chronological approach by thermoluminescence. *Quaternary Geochronology*, 29, 36–47, 2015.

[46] M. Müller-Hagedorn, H. Bockhorn, L. Krebs, et U. Müller. A comparative kinetic study on the pyrolysis of three different wood species. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 68-69, 231–249, 2003.

[47] Y. Wang, P. Chatterjee, et J.L. de Ris. Large eddy simulation of fire plumes. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 (2), 2473–2480, 2011.

[48] Z. Chen, J. Wen, B. Xu, et S. Dembele. Large eddy simulation of a medium-scale methanol pool fire using the extended eddy dissipation concept. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 70, 389–408, 2014.

[49] A. Zaman, R. Alén, et R. Kotilainen. Thermal behavior of scots pine (pinus sylvestris) and silver birch (betula pendula) at $200 - 230^oC$. *Wood Fiber Sci*, 32 (2), 138–143, 2000.

[50] M. Janssens. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, chapter Calorimetry.* Springer, 2016.

[51] M.J. Spearpoint. *Predicting the ignition and burning rate of wood in the cone calorimeter using an integral model.* Thèse de doctorat, Department of Fire Protection Engineering, University of Maryland, 1999.

[52] A.F. Roberts. Calorific values of partially decomposed wood samples. *Combustion and Flame*, 8 (3), 245–246, 1964.

[53] F.L. Browne et J.J. Brenden. Heats of combustion of the volatile pyrolysis products of Ponderosa pine. *US Forest Service Research Paper FPL 19, US Department of Agriculture*, 1964.

[54] V. Dréan, G. Auguin, J-.C. Leblanc, D. Lacanette, J-.C. Mindeguia, A. Bellivier, et C. Ferrier. Numerical modelling of thermal conditions during fires in cave-like geometry. In *Proceedings of the 15th International Conference Fire and Materials*, pages 64–65, San Francisco, USA, 6-8 February 2017.

[55] M. Janssens et B. Douglas. *Handbook of Building Materials for Fire Protection, chapter Wood and wood products.* McGraw-Hill Handbooks, 2004.

[56] V. Tihay, Y. Perez-Ramirez, F. Morandini, P.A. Santoni, et T. Barboni. Heat transfers and energy released in the combustion of fine vegetation fuel beds. *21ème Congrès Français de mécanique*, 2013.

[57] P. Waage et C.M. Guldberg. Studier over Affiniteten. *Forhandlinger i Videnskabs-selskabet i Christiania*, pages 35–45, 1864.

[58] J.H. Van't Hoff, E. Cohen, et T. Ewan. *Studies in Chemical Dynamics.* Amsterdam : F. Muller ; London ; Williams & Norgate, 1896.

[59] D. Veynante et L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28, 193–266, 2002.

[60] McCaffrey B.J. Purely buoyant diffusion flames : some experimental results. *National Bureau of Standards, NBSIR*, 79-1910, 1979.

[61] G. Cox et R. Chitty. A study of the deterministic properties of unbounded fire plumes. *Combustion and Flame*, 39, 191–209, 1980.

[62] E.E Zukoski, T. Kubota, et B. Cetegen. Entrainment in fire plumes. *Fire Safety Journal*, 3, 107–121, 1981.

[63] G.Heskestad. Luminous heights of turbulent diffusion flames. *Fire Safety Journal*, 5, 103–108, 1983.

[64] G. Keskestad. Flame Heights of Fuel Arrays with Combustion in Depth. *Fire Safety Science - Proceedings of the Fifth International Symposium*, pages 427–438, 1997.

[65] H.C .Kung et P. Stravrianides. Buoyant plumes of large scale pool fires. *Proceedings of the Combustion Institute*, 19, 905–912, 1982.

[66] C. L. Beyler. Fire Plumes and Ceiling Jets. *Fire Safety Journal*, 11, 53–75, 1986.

[67] R.L. Alpert. Calculation of response time of ceiling-mounted fire detectors. *Fire Technology*, 8, 181–195, 1972.

[68] R. L. Alpert. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, chapter Ceiling Jet Flows.* Springer, 2016.

[69] G. Heskestad et M. A. Delichatsios. The initial convective flow in fire. *17th International Symposium on Combustion*, Combustion Institute, Pittsburgh, 1113–1123, 1978.

[70] M.A. Delichatsios. The Flow of Fire Gases Under a Beamed Ceiling. *Combustion and Flame*, 43, 1–10, 1981.

[71] E.E. Zukoski et T. Kubota. An Experimental Investigation of the Heat Transfer from Buoyant Plume to a Horizontal Ceiling-Part 2. *National Bureau of Standards, NBS-CGR-77-98*, 1977.

[72] H.Z. You et G.M. Faeth. Ceiling Heat Transfer during Fire Plume and Fire Impingement. *Fire and Materials*, 3 (3), 140–147, 1979.

[73] V. Motevalli et C. Ricciuti. Characterization of the Confined Ceiling Jet in the Presence of an Upper Layer in Transient and Steady-State Conditions. *National Institute of Standards and Technology, NIST-GCR-92-613*, 1992.

[74] R. Peacock, W. Jones, R. Bukowski, et G. Forney. CFAST-Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport (Version 6) Technical Reference Guide. 2005.

[75] W.D. Davis. The Zone Fire Model Jet : A model for the Prediction of Detector Activation and Gas Temperature in the Presence of a Smoke Layer. *NISTIR 6324, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD*, 1999.

[76] Y. Oka, O. Imazeki, et O. Sugawa. Temperature profile of ceiling jet flow along an inclined unconfined ceiling. *Fire Safety Journal*, 45, 221–227, 2010.

[77] Y. Oka et M. Ando. Temperature and velocity properties of a ceiling jet impinging on an unconfined inclined ceiling. *Fire Safety Journal*, 55, 97–105, 2013.

[78] Y. Oka et K. Matsuyama. Scale similarity on ceiling jet flow. *Fire Safety Journal*, 61, 289–297, 2013.

[79] Y. Jaluria et L.Y. Cooper. Negatively buoyant wall flows generated in enclosure fires. *Progress in Energy and Combustion Science*, 15, 159–182, 1989.

[80] L.Y. Cooper. Ceiling Jet-Driven Wall Flows in Compartment Fires. *Combustion Science and Technology*, 62 (4-6), 285–296, 1988.

[81] L.Y. Cooper. Ceiling Jet Properties and Wall Heat Transfer in Compartment Fires Near Regions of Ceiling-Jet Wall Impingement. *National Bureau of Standards NBSIR*, 86-3307, 1986.

[82] A. Brodard, D. Lacanette-Puyo, P. Guibert, F. Lévêque, A. Burens, et L. Carozza. A new process of reconstructing archaeological fires from their impact on sediment : a coupled experimental and numerical approach based on the case study of hearths from the cave of Les Fraux (Dordogne, France). *Archaeological and Anthropological Sciences*, 8 (4), 673–687, 2015.

[83] A. Vaschy. Sur les lois de similitude en physique. *Annales Télégraphiques*, 19, 25–28, 1892.

[84] E. Buckingham. On physically similar systems. Illustrations of the use of dimensional equations. *Physical Review*, 4 (4), 345–376, 1914.

[85] E.R.G. Eckert et E. Soehngen. Interferometric Studies on the Stability and Transition to Turbulence of a Free Convection Boundary Layer. *Proceedings of the General Discussion on Heat Transfer ; London, England*, page 321, 1951.

[86] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, C. Weinschenk, et K. Overholt. Fire Dynamics Simulator User's Guide, Sixth edition 1019. https ://pages.nist.gov/fds-smv/manuals.html, 2013.

[87] Isis. https ://gforge.irsn.fr/gf/project/isis.

[88] Rutherford Aris. *Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover Publications, INC. New York, 1989.

[89] W. Sutherland. The viscosity of gases and molecular force. *Philosophical Magazine*, S. 5, 507–531, 1893.

[90] B.E. Poling, J.M. Prausnitz, et J.P. O'Connell. *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill Education, 1987.

[91] M.W. Chase. NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth edition. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Mongraph No. 9, 1998.

[92] A. Fick. Über Diffusion. *Annalen der Physik und Chemie*, 94, 59–86, 1855.

[93] G. H. Yeoh et K. K. Yuen. *Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering. Theory, Modelling and Practice*. Butterworth-Heinemann, 2009.

[94] A. Favre. Équations des gaz turbulents compressibles. *Journal de Mécanique*, 4 (3), 361–390, 1965.

[95] A. Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *The Physics of Fluids*, 29 (7), 2152–2164, 1986.

[96] B. Magnussen et B. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Proc. Combust. Int*, pages 719–729, 1977.

[97] D.B.Spalding. A Single Formula for the "Law of the Wall". *Journal of Applied Mechanics*, 28, 455–458, 1961.

[98] L. Liedgren, G. Hörnberg, T. Magnusson, et L. Östlund. Heat impact and soil colors beneath hearths in northern Sweden. *Journal of Archaeological Science*, 79, 62–72, 2017.

[99] M.P. Pomiès, M. Menu, et C. Vignaud. TEM Observations of Goethite Dehydration : Application to Archaeological Samples. *Journal of the European Ceramic Society*, 19, 1605–1614, 1999.

[100] V. Aldeias, H.L. Dibble, D. Sandgathe, P. Goldberg, et S.J.P. McPherron. How heat alters underlying deposits and implications for archaeological fire features : A controlled experiment. *Journal of Archaeological Science*, 67, 64–79, 2016.

[101] D. Walter, G. Buxbaum, et W. Laqua. The mechanism of the thermal transformation from goethite to hematite. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 63, 733–748, 2001.

[102] H.D. Ruan, R.L. Frost, J.T. Kloprogge, et L. Duong. Infrared spectroscopy of goethite dehydroxylation : III. FT-IR microscopy of in situ study of the thermal transformation of goethite to hematite. *Spectrochimica Acta Part A*, 58, 967–981, 2002.

[103] A.F. Gualtieri et P. Venturelli. In situ study of the goethite-hematite phase transformation by real time synchrotron powder diffraction. *American Mineralogist*, 84, 895–904, 1999.

[104] S. Gialanella, F. Girardi, G. Ischia, I. Lonardelli, M. Mattarelli, et M. Montagna. On the goethite to hematite phase transformation. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 102 (3), 867–873, 2010.

[105] P.C. Beuria, S.K. Biswal, B.K. Mishra, et G.G. Roy. Study on kinetics of thermal decomposition of low LOI goethetic hematite iron ore. *International Journal of Mining Science and Technology*, 27 (6), 1031–1036, 2017.

[106] M. Avrami. Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III. *The Journal of Chemical Physics*, 9 (177), 1941.

[107] B.V. Erofeev. *Compt. Rend. Acad. Sci. URSS*, 52, 511, 1946.

[108] L. Diamandescu, D. Mihaila-Tarabasanu, S. Calogero, N. Popescu-Pogrion, et M. Feder. Mechanism and reaction kinetics in the solid phase transformation $\alpha - FeOOH \rightarrow \alpha - Fe_2O_3$ studied by Mössbauer spectroscopy. *Solid State Ionics*, 101-103 (PART 1), 591–596, 1997.

[109] J. Murray, L. Kirwan, M. Loan, et B.K. Hodnett. In-situ synchrotron diffraction study of the hydrothermal transformation of goethite to hematite in sodium aluminate solutions. *Hydrometallurgy*, 95 (3-4), 239–246, 2009.

[110] K. Przepiera et A. Przepiera. Kinetics of thermal transformations of precipitated magnetite and goethite. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 65 (2), 497–503, 2001.

[111] M. Pelino, L. Toro, M. Petroni, A. Florindi, et C. Cantalini. Study of the kinetics of decomposition of goethite *in vacuo* and pore structure of product particles. *Journal of Materials Science*, 24 (2), 409–412, 1989.

[112] C.J. Goss. The kinetics and reaction mechanism of the goethite to hematite transformation. *Mineralogical Magazine*, 51 (3), 437–451, 1987.

[113] A. Grenouilleau, P. Guelin, et M.A. Martincica. Cinétique des transformations minéralogiques observables sur les calcaires soumis à une augmentation de température. Mémoire de mission R&D, Ecole Nationale Supérieure des Mines d'Alès, Département CIGA, 2017.

[114] R.P. Borg, M. Hajpal, et A. Török. The fire performance of limestone. *Application of Structural Fire Engineering*, 6, 19-20 April 2013.

[115] B. Chakrabarti, T. Yates, et A. Lewry. Effect of fire damage on natural stonework in buildings. *Construction and Building Materials*, 10 (7), 539–544, 1996.

[116] H. Yavuz, S. Demirdag, et S. Caran. Thermal effect on the physical properties of carbonate rocks. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 47, 94–103, 2010.

[117] F.W. Preston et H.E. White. Observations on spalling. *Journal of the American Ceramic Society*, 17, 137–144, 1938.

[118] R.E. Williams. The thermal spallation drilling process. *Geothermics*, 15 (1), 17–22, 1986.

[119] R.M. Rauenzahn et J.W. Tester. Rock Failure Mechanisms of Flame-Jet Thermal Spallation Drilling-Theory and Experimental Testing. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 26 (5), 381–399, 1989.

[120] R.M. Rauenzahn et J.W. Tester. Numerical simulation and field testing of flame-jet thermal spallation drilling-1. Model development. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34 (3), 795–808, 1991.

[121] J.C. Mindeguia, H. Carré, P. Pimienta, et C. La Borderie. Experimental discussion on the mechanisms behind the fire spalling of concrete. *Fire And Materials*, 39, 619–635, 2015.

[122] G.A. Khoury. Effect of fire on concrete and concrete structures. *Progress in Structural Engineering and Materials*, 2, 429–447, 2000.

[123] A.G. Smith et P.J.N. Pells. Impact of fire on tunnels in Hawkesbury sandstone. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 23, 65–74, 2008.

[124] A.G. Smith et P.J.N. Pells. Discussion of the paper "Impact of fire on tunnels in Hawkesbury sandstone" by Smith and Pells [Tunnelling and Underground Space Technology 23 (2008) 65-74]. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 24, 112–114, 2009.

[125] P. Zhang, E. Nordlund, G. Mainali, et C. Saiang. Experimental study of thermal spalling of rock blocks exposed to fire. January 2010.

[126] N. Khoylou et G.L. England. The effect of moisture on spalling of normal and high strength concretes. 1996.

[127] E. Nordlund, P. Zhang, S. Dineva, D. Saiang, et G. Mainali. Impact of fire on the stability of hard rock tunnels in Sweden. 2015.

[128] D. Lacanette, J.C. Mindeguia, A. Brodard, C. Ferrier, P. Guibert, J.C. Leblanc, P. Malaurent, et C. Sirieix. Simulation of an experimental fire in an underground limestone quarry for the study of Paleolithic fires. *International Journal of Thermal Sciences*, 120, 1–18, 2017.

[129] Z.P Bazant et M.F. Kaplan. *Concrete at high temperature : material properties and mathematical models.* Addison-Wesley, 1996.

[130] H.D. Vosteen et R. Schellschmidt. Influence of temperature on thermal conductivity, thermal capacity and thermal diffusivity for different types of rock. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 28 (9-11), 499–509, 2003.

[131] D. Wang, X. Lu, Y. Song, R. Shao, et T. Qi. Influence of the température dependence of thermal parameters of heat conduction models on the reconstruction of thermal history of igneous-intrusion-bearing basins. *Computers & Geosciences*, 36 (10), 1339–1344, 2010.

[132] C. Verdet, Y. Anguy, C. Sirieix, R. Clément, et C. Gaborieau. On the effect of electrode finitness in small scale electrical resistivity imaging. *Geophysics*, 2018.

[133] C. Bonacina, G. Comini, A. Fasano, et M. Primicerio. Numerical solution of phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16, 1825–1832, 1973.

[134] Z. Kompanikova, M. Gomez-Heras, J. Michnova, T. Durmekova, et J. Vicko. Sandstone alterations triggered by fire-related temperatures. *Envrionmental Earth Sciences*, 72 (7), 2569–2581, 2014.

[135] C.-S. Poon, S. Azhar, M. Anson, et Y.-L. Wong. Performance of metakaolin concrete at elevated temperatures. *Cement and Concrete Composites*, 25 (1), 83–89, 2003.

[136] Patricia Vazquez. *Meso and microscale study of stone decay processes.* Habilitation à Diriger des Recherches (HDR), 6 février 2019.

[137] S.E. Zadeh, G. Maragkos, T. Beji, et B. Merci. Large Eddy Simulation of the Ceiling Jet Induced by the Impingement of a Turbulent Air Plume. *Fire Technology*, 52 (6), 2093–2115, 2016.

[138] A.C.Y. Yuen, G.H. Yeoh, R.K.K. Yuen, et T. Chen. Numerical Simulation of a Ceiling Jet Fire in a Large Compartment. *Procedia Engineering*, 52, 3–12, 2013.

[139] T. Hara et S. Kato. Numerical Simulation of Fire Plumes-Induced Ceiling Jets Using the Standard $k\epsilon$ Model. *Fire Technology*, 42 (2), 131–160, 2006.

[140] C. Caliendo, P. Ciambelli, M.L. De Guglielmo, M.G. Meo, et P. Russo. Simulation of fire scenarios due to different vehicle types with and without traffic in a bi-directional road tunnel. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 37 (1), 22–36, 2013.

[141] W.S. Hsu, Y.H. Huang, T.S. Shen, C.Y. Cheng, et T.Y. Chen. Analysis of the Hsuehshan Tunnel Fire in Taiwan. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 69, 108–115, 2017.

[142] J.S. Roh, H.S. Ryou, D.H. Kim, W.S. Jung, et Y.J. Jang. Critical velocity and burning rate in pool fire during longitudinal ventilation. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 22 (3), 262–271, 2007.

[143] S. Zhao, F. Liu, F. Wang, M. Weng, et Z. Zeng. A numerical study on smoke movement in a metro tunnel with a non-axisymmetric cross-section. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 73, 187–202, 2018.

[144] N. Meng, L. Hu, L. Wu, L. Yang, S. Zhu, L. Chen, et W. Tang. Numerical study on the optimization of smoke ventilation mode at the conjunction area between tunnel track and platform in emergency of a train fire at subway station. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 40, 151–159, 2014.

[145] X.G. Zhang, Y.C. Guo, C.K. Chan, et W.Y. Lin. Numerical simulations on fire spread and smoke movement in an underground car park. *Building and Environment*, 42 (10), 3466–3475, 2007.

[146] X. Deckers, S. Haga, N. Tilley, et B. Merci. Smoke control in case of fire in a large car park : CFD simulations of full-scale configurations. *Fire Safety Journal*, 57, 22–34, 2013.

[147] P. Weisenpacher, J. Glasa, et L. Halada. Parallel Computation of smoke movement during a car park fire. *Computing and Informatics*, 35, 1416–1437, 2016.

[148] J. Stenis et W. Hogland. Fire in waste-fuel stores : risk management and estimation of real cost. *Journal of Material Cycles and Waste Management*, 13 (3), 247–258, 2011.

[149] B. Zhao et J. Kruppa. Structural behaviour of an open car park under real fire scenarios. *Fire and Materials*, 28, 269–280, 2002.

[150] T.D Nguyen, F. Meftah, R. Chammas, et A. Mebarki. The behaviour of masonry walls subjected to fire : Modelling and parametrical studies in the case of hollow burnt-clay bricks. *Fire Safety Journal*, 44 (4), 629–641, 2009.

[151] A. Nadjai, M. O'Garra, F.A. Ali, et D. Laverty. A numerical model for the behaviour of masonry under elevated temperature. *Fire And Materials*, 27, 163–182, 2003.

[152] A.Y. Nassif, I. Yoshitake, et A. Allam. Full-scale fire testing and numerical modelling of the transient thermo-mechanical behaviour of steel-stud gypsum board partition walls. *Construction and Building Materials*, 59, 51–61, 2014.

[153] G.A. Khoury, C.E. Majorana, F. Pesavento, et B.A. Schrefler. Modelling of heated concrete. *Magazine of Concrete Research*, 54 (2), 77–101, 2002.

[154] A. Santiago, L.S. da Silva, P.V. Real, et M. Veljkovic. Numerical study of a steel sub-frame in fire. *Computers & Structures*, 86 (15-16), 1619–1632, 2008.

[155] C. Luo, W. Xie, et P.E. DesJardin. Fluid-Structure Simulations of Composite Material Response for Fire Environments. *Fire Technology*, 47 (4), 887–912, 2011.

[156] F. Pesavento, M. Pachera, B.A. Schrefler, D. Gawin, et A. Witek. Coupled Numerical Simulation of Fire in Tunnel. *AIP Conference Proceedings 1922,090003*, 2018.

[157] D. Lacanette, J.-C. Mindeguia, C. Ferrier, E. Debard, et B. Kervazo. Three-dimensional simulation of a fire in a simplified gallery of the Chauvet-Pont d'Arc cave. In *Proceedings of the XVII UISPP World Congress*, volume 7, Sessions A4b and A12, pages 49–60, Burgos, Spain, 1-7 September 2014 2015.

[158] Fluent. https ://www.ansys.com/fr-fr/products/fluids/ansys-fluent.

[159] PyroSim. http ://www.pyrosim-simulation.com.

[160] G. Maragkos et B. Merci. Large Eddy Simulations of CH_4 Fire Plumes. *Flow, Turbulence and Combustion*, 99 (1), 239–278, 2017.

[161] G. Maragkos, T. Beji, et B. Merci. Towards predictive simulations of gaseous pool fires. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37 (3), 3927–3934, 2019.

[162] G. Maragkos, T. Beji, et B. Merci. Advances in modelling in CFD simulations of turbulent gaseous pool fires. *Combustion and Flame*, 181, 22–38, 2017.

[163] S. Vilfayeau, N. Ren, Y. Wang, et A. Trouvé. Numerical simulation of under-ventilated liquid-fueled compartment fires with flame extinction and thermally-driven fuel evaporation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 (3), 2563–2571, 2015.

[164] D. Le, J. Labahn, T. Beji, C.B. Devaud, E.J. Weckman, et A. Bounagui. Assessment of the capabilities of FireFOAM to model large-scale fires in a well-confined and mechanically ventilated multi-cimpartment structure. *Journal of Fire Sciences*, 36 (1), 3–29, 2018.

[165] A. Trouvé et Y. Wan. Large eddy simulation of compartment fires. *Intl. J. Comput. Fluid Dyn.*, 24, 449–466, 2010.

[166] J.H. Ferziger et M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics.* Springer, 2002.

[167] F. Moukalled, L. Mangani, et M. Darwish. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics. An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab.* Springer, 2016.

[168] H.K. Versteeg et W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method (Second Edition).* Prentice Hall, 2007.

[169] Hrvoje Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows.* Thèse de doctorat, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1996.

[170] P.L. Roe. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 18, 337–365, 1986.

[171] Z. Tukovic et H. Jasak. A moving mesh finite volume interface tracking method for surface tension dominated interfacial fluid flow. *Computers & Fluids*, 55, 70–84, 2012.

[172] C.M. Rhie et W.L. Chow. A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation. *AIAA*, 21, 1525–1532, 1983.

[173] V. Vuorinen, J.P. Keskinen, C. Duwig, et B.J. Boersma. On the implementation of low-dissipative Runge-Kutta projection methods for time dependent flow using OpenFOAM. *Computers & Fluids*, 93, 153–163, 2014.

[174] R.I. Issa. Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 62, 40–65, 1985.

[175] C. Pommerell. Solution of Large Unsymmetric Systems of Linear Equations. *Series in Microelectronics - Hartung-Gorre Verlag*, 17, 1992.

[176] R. Barrett. *Templates for the Solution of Linear Systems : Building Blocks for Iterative Methods.* Society for Industrial and Applied Mathematics, 1994.

[177] H.A. Van der Vorst. Bi-CGSTAB : A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13 (2), 631–644, 1992.

[178] F. Salmon, D. Lacanette, J.-C. Mindeguia, C. Sirieix, C. Ferrier, et J.-C. Leblanc. Firefoam simulation of a localised fire in a gallery. *Journal of Physics : Conference Series*, 107 (042017), 2018.

[179] A.B. De Vriendt. *La transmission de la chaleur. Volume 2. Introduction au rayonnement thermique.* Gaëtan Morin éditeur, 1984.

[180] D.A. Purser et Jamie L.McAllister. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, chapter Assessment of Hazards to Occupants from Smoke, Toxic Gases, and Heat.* Springer, 2016.

[181] Louise C. Speitel. Fractional effective dose model for post-crash aircraft survivability. *Toxicology*, 115, 167–177, 1996.

[182] David A.Purser. Physiological effects of combustion products and fire hazard assessment. *Europacable Seminar "Safety during Fire", Brussels*, 6 May 2009.

[183] W.V. Blockley. Temperature Tolerance : Man. Part I. Heat and cold tolerance with and without protective clothing. In *Biology Data Book* 2^{nd} *edition*, volume II. Federation of American Societies for Experimental, 1973.

[184] David A. Purser. Modelling Toxic and Physical Hazard in Fire. *Fire Safety Science*, 2, 391–400, 1989.

[185] Edouard Brugiere. *Le spectromètre thermophorétique circulaire, un nouvel instrument pour mesurer la thermophorèse : application aux agrégats de suies de morphologie fractale.* Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2012.

[186] B. Sagot, G. Antonini, et F. Buron. Annular flow configuration with high deposition efficiency for the experimental determination of thermophoretic diffusion coefficients. *Journal of Aerosol Science*, 40, 1039–1049, 2009.

[187] L. Y. Cooper. Heat transfer from a buoyant plume to an unconfined ceiling. *Journal of Heat Transfer*, 104 (3), 446–451, 1982.

[188] R. L. Alpert. Fire Induced Turbulent Ceiling-Jet. *FMRC Technical Report 19722-2*, Factory Mutual Research Corporation, 35, 1971.

[189] C. Geuzaine et J.F. Remacle. Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79 (11), 1309–1331, 2009.

[190] T. Lanki, J. Tikkanen, K. Janka, P. Taimisto, et M. Lehtimäki. An electrical sensor for long-term monitoring of ultrafine particles in workplaces. *Journal of Physics : Conference Series*, 304 (1), 2011.

[191] A. Bellivier, A. Coppalle, A.S. Loo, J. Yon, L. Decoster, S. Dupont, et H. Bazin. Comparison and Assessment of Particle Mass Concentrations Measurements in Fire Smokes with a Microbalance, Opacimeter and PPS Devices. In *10th AOSFST*, 5-7 October 2015.

[192] V.M. Le, A. Marchand, S. Verma, J. White, A. Marshall, T. Rogaume, F. Richard, J. Luche, et A. Trouvé. Simulations of a Turbulent Line Fire with a Steady Flamelet Combustion Model and Non-Gray Gas Radiation Models. *Journal of Physics : Conference Series*, 1107 (042009), 2018.

[193] P. Chatterjee, K.V. Meredith, et Y. Wang. Temperature and velocity distributions from numerical simulations of ceiling jets under unconfined, inclined ceilings. *Fire Safety Journal*, 91, 461–470, 2017.

[194] N. Ren, Y. Wang, S. Vilfayeau, et A. Trouvé. Large eddy simulation of turbulent vertical wall fires supplied with gaseous fuel through porous burners. *Combustion and Flame*, 169, 194–208, 2016.

[195] B.J. McCaffrey et G. Heskestad. A robust bidirectional low-velocity probe for flame and fire application. *Combustion and Flame*, 26, 125–127, 1976.

[196] C. Huggett. Estimation of the rate of heat release by means of oxygen consumption. *Journal of fire and materials* $n^o 4$, pages 61–65, 1980.

[197] William L. Grosshandler. A Narrow-Band Model for Radiation Calculations in a Combustion Environment. *NIST Technical Note 1402*, 1993.

[198] S. S. Sazhin. An Approximation for the Absorption Coefficient of Soot in a Radiating Gas. *Manuscript, Fluent Europe*, 1994.

[199] C.L.V. Jayatilleke. The influence of Prandtl number and surface roughness on the resistance of the laminar sub-layer to momentum and heat transfer. *Progress in heat and mass transfer*, 1, 193–329, 1969.

Annexes

A Un aperçu de l'art pariétal de la grotte Chauvet-Pont d'Arc

Quelques panneaux qui ornent les parois de la grotte Chauvet-Pont d'Arc sont succinctement présentés dans la suite. Le premier correspond au Panneau de l'Entrée qui se situe proche de l'entrée paléolithique dans la Salle Brunel. S'étendant sur plus de 20 m^2, il se compose d'une part d'une multitude de ponctuations rouges sur la gauche du panneau (Fig. A.1). Chaque point est effectué par la paume d'une main couverte d'ocre. De fines gravures se mélangent également à ces gros points. Sur la droite se trouve une gerbe rouge surmontée d'un signe en croix (Fig. A.1.b). Ce signe en gerbe est aussi présent à l'entrée de la Galerie des Mégacéros et à l'entrée du Belvédère.

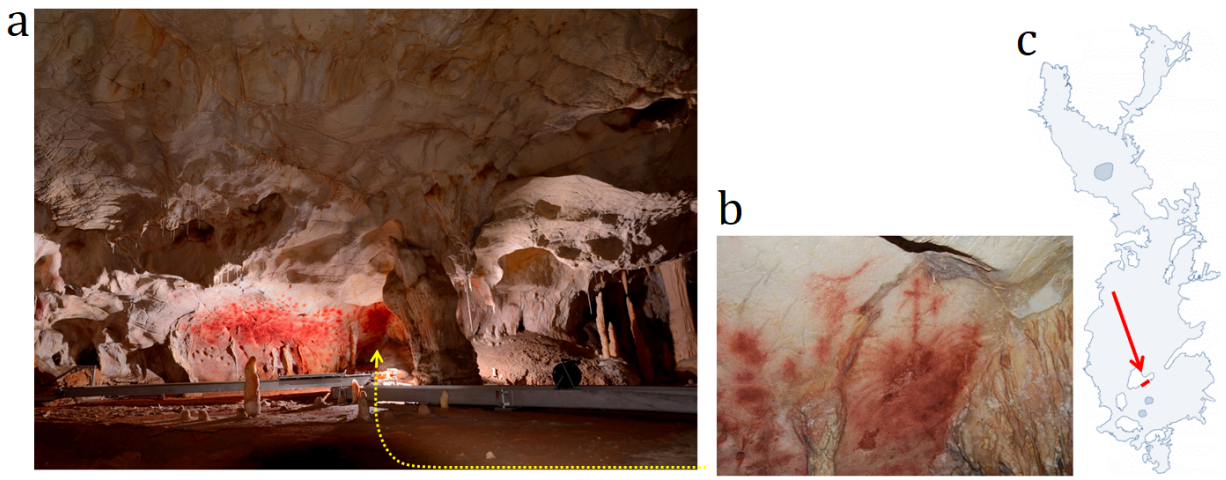

Figure A.1 – a - Photographie générale du Panneau de l'Entrée dans la Salle Brunel (Ministère de la Culture). b - Agrandissement sur le signe en gerbe surmonté d'une croix (D. Genty/MCC). c - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte.

Une peinture jaune est aussi utilisée dans la même salle sur le panneau des Chevaux jaunes (Fig. A.2). Les paléolithiques dessinèrent trois têtes de chevaux dont deux en jaune et une en rouge. Le colorant jaune correspond à de la goethite tandis que le rouge est associé à l'hématite. La coloration jaune est peu utilisée dans la grotte et ces animaux sont les seules représentations figuratives de cette couleur. Elles sont accompagnées d'une série de points et de bâtonnets verticaux rouges. La réalisation de ces peintures apparait toutefois précipitée puisque le colorant utilisé semblait trop liquide et coulant [32].

Dans la galerie des Panneaux rouges, se trouvent une dizaine d'animaux dessinés à l'aide d'hématite. Même si les ours dominent en terme quantitatif, les félins et tout particulièrement une panthère interpellent. La figure A.3 expose une partie de ce panneau. Les mouchetures remplissant le plus petit animal rappellent le pelage d'un félin ; il s'agit de la panthère. La figuration supérieure contient aussi des mouchetures mais seul un remplissage partiel du corps est proposé par l'artiste. Or, cette lacune marque une différence avec un pelage de hyène par exemple [32]. Une analyse du tracé du corps permet en réalité d'associer cette représentation à un ours des cavernes. L'originalité de ce panneau réside dans la présence d'une panthère puisque cet animal est absent de toutes les figurations paléolithiques

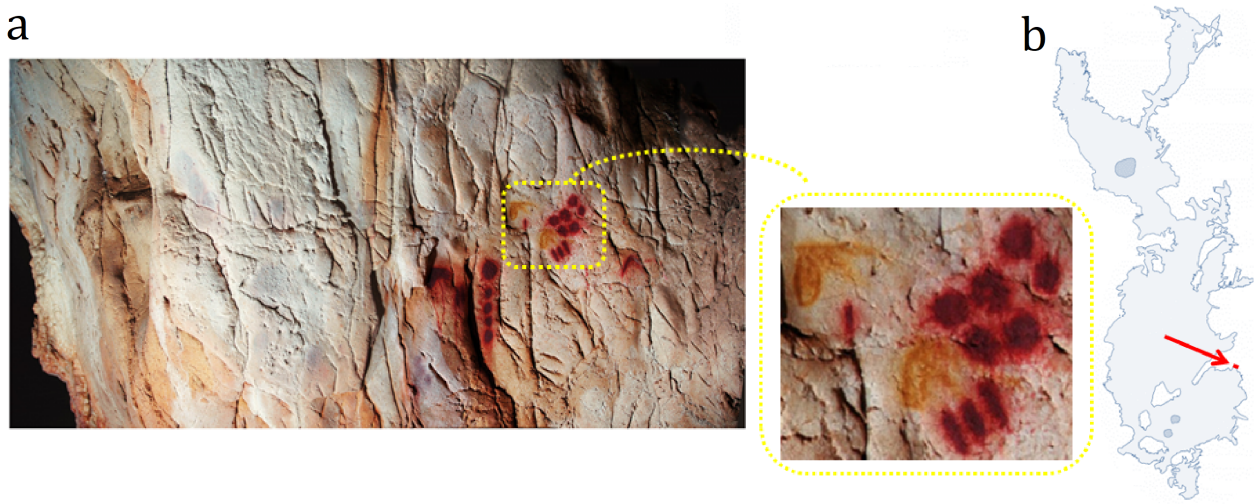

Figure A.2 – a - Photographie de deux têtes de chevaux jaunes accompagnées de signes rouges appartenant au Panneau des Chevaux jaunes dans la Salle Brunel (Ministère de la Culture). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte.

européennes découvertes jusqu'à aujourd'hui.

Figure A.3 – a - Photographie du Panneau de la Panthère dans la Galerie des Panneaux rouges (D. Lacanette). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte.

Cette première partie de la grotte expose principalement des peintures exécutées au colorant rouge. La partie centrale fournit plutôt des œuvres de couleur blanche à travers d'autres méthodes. Le panneau du Grand Cheval gravé sur la paroi sud de la Salle Hillaire en est un exemple (Fig. A.4). Ces figurations sont réalisées par gravure et par tracé digital. La fine couche d'argile recouvrant localement la paroi calcaire a en effet permis un tracé au doigt qui s'est conservé durant des milliers d'années. Le cheval est en partie tracé au doigt (ventre, queue et museau) et en partie par gravure à l'aide d'os ou de bâtons. Ce panneau d'une longueur de 6 m contient aussi deux mammouths à droite du cheval ainsi que deux bisons

et une figuration indéterminée à gauche qui se superposent aux griffades d'ours. Vraisemblablement, des tracés verticaux ont aussi été ajoutés afin d'imiter ces griffades.

Figure A.4 – a - Photographie du Panneau du Grand Cheval gravé dans la Salle Hillaire (Ministère de la Culture). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte.

Plusieurs pendants de la Salle Hillaire sont gravés de divers animaux dont un cheval, un bouquetin et des mammouths. Un hibou moyen-duc est aussi tracé sur un pendant de la Salle Hillaire (Fig. A.5). Il est aujourd'hui au-dessus du vide puisqu'un effondrement se produisit après le passage des Hommes au centre de la salle. Le pendant pouvait donc, à l'époque, être gravé d'un hibou sans aucun biais. L'animal est représenté avec la tête de face tandis que le plumage indique un corps de dos. La tête du hibou est donc pivotée à 180^o par rapport au reste du corps.

Figure A.5 – a - Photographie du tracé digital d'un hibou sur un pendant de la Salle Hillaire (T. Sagoury - Ministère de la Culture). b - Localisation du hibou dans la géométrie de la grotte.

Le dernier panneau présenté correspond au plus imposant par la taille et se situe au fond de la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Mis à part quelques figurations sur la paroi droite de la salle correspondante, les artistes ont majoritairement exécuté leurs œuvres sur la paroi gauche (Fig. A.6). Trois félins disproportionnés par rapport au reste du panneau accompagnés d'un renne constituent le début de la fresque. Le panneau des Rhinocéros poursuit ensuite la scène avec douze rhinocéros faisant *a priori* office de troupeau. Au centre du Grand Panneau, une alcôve renferme un cheval noir recouvrant un raclage préalable. La dernière partie de la fresque, à droite de l'alcôve, correspond au Grand Panneau des Lions. Cette représentation semble décrire une scène de chasse dans laquelle les lions à droite poursuivent quatre bisons à gauche.

Il existe dans la grotte de nombreux autres panneaux qui ne sont pas évoqués ici. Des informations

Figure A.6 – a - Photographie du Grand Panneau de la Salle du Fond (C. Ferrier [12]). b - Localisation du panneau dans la géométrie de la grotte.

supplémentaires relatives aux œuvres de la grotte Chauvet-Pont d'Arc sont accessibles dans le livre [32] ou sur le site internet dédié du Ministère de la Culture [40] qui propose une visite virtuelle de la grotte.

B Absorptivités des gaz et des suies

L'absorptivité des gaz est calculée par le modèle RADCAL [197]. Ce modèle fournit les coefficients d'absorption moyens de Planck (en $atm^{-1}.m^{-1}$). Le coefficient d'absorption en découle par la formule

$$a_i = a_{p,i} p_i \tag{B.1}$$

avec $a_{p,i}$ le coefficient d'absorption moyen de Planck de l'espèce i et p_i la pression partielle de l'espèce i. Parmi les gaz présents lors d'une combustion, le dioxyde de carbone, le monoxyde de carbone et les vapeurs d'eau ne peuvent pas être considérés comme transparents. Les autres gaz constituant l'air ne rayonnent pas ou de manière négligeable. Pour un gaz supposé gris, en notant T_r la température réduite $T_r = \frac{T}{1000}$, le modèle RADCAL fournit les corrélations suivantes

$$a_{p,H_2O} = -0,23093 - 1,12390 T_r^{-1} + 9,41530 T_r^{-2} - 2,99880 T_r^{-3} + 0,51382 T_r^{-4} - 1,86840.10^{-5} T_r^{-5} \tag{B.2}$$

$$a_{p,CO_2} = 18,741 - 121,310 T_r^{-1} + 273,500 T_r^{-2} - 194,050 T_r^{-3} + 56,310 T_r^{-4} - 5,8169 T_r^{-5} \tag{B.3}$$

$$a_{p,CO} = \begin{cases} 4,7869 - 0,06953 T + 2,95775.10^{-4} T^2 - 4,25732.10^{-7} T^3 + 2,02894.10^{-10} T^4 \text{ si } T < 750K \\ 10,09 - 0,01183 T + 4,7753.10^{-6} T^2 - 5,87209.10^{-10} T^3 - 2,5334.10^{-14} T^4 \text{ sinon} \end{cases} \tag{B.4}$$

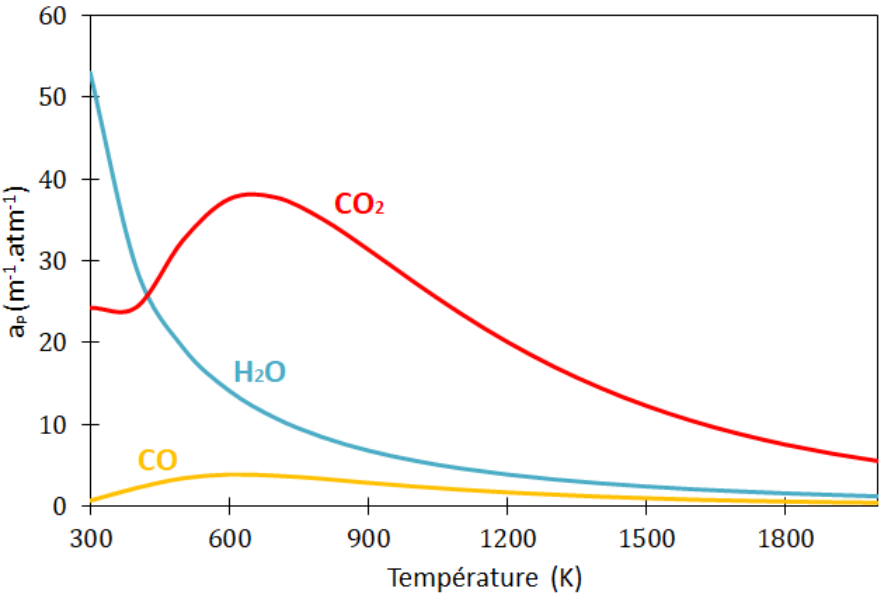

Figure B.1 – Coefficient d'absorption moyen de Planck du dioxyde de carbone, du monoxyde de carbone et de la vapeur d'eau.

Pour obtenir le coefficient d'absorption des gaz, il suffit de sommer toutes les contributions

$$a = \sum_{Gaz\ i} a_i \tag{B.5}$$

Le rayonnement des suies peut aussi intervenir. Les suies sont des particules solides dont le rayonnement approche celui d'un corps noir. Dans ce cas, le flux est proportionnel à la puissance 4 de la température. Pour modéliser le rayonnement des suies, la somme précédente sur tous les coefficients d'absorption des gaz est étendue en ajoutant le coefficient d'absorption des suies. Ce coefficient est calcué par la formule [198]

$$a_{suie} = B \rho_{suie} X_{suie} \left[1 + C(T - 2000)\right] \tag{B.6}$$

avec $B = 1232,4\ m^2.kg^{-1}$ et $C = 4,8.10^{-4}\ K^{-1}$. Puisque les équations de la combustion sont basées sur des fractions massiques plutôt que sur des fractions molaires, il faut réécrire la fraction molaire de suie en fonction des fractions massiques. La masse molaire du mélange s'exprime par

$$M_{tot} = \sum_i X_i M_i \tag{B.7}$$

Or,

$$X_j = \frac{M_{tot}}{M_j} Y_j \tag{B.8}$$

$$\Rightarrow \sum_j X_j = M_{tot} \sum_j \frac{1}{M_j} Y_j \tag{B.9}$$

$$\Rightarrow 1 = M_{tot} \sum_j \frac{1}{M_j} Y_j \tag{B.10}$$

$$\Rightarrow M_{tot} = \frac{1}{\sum_j \frac{1}{M_j} Y_j} \tag{B.11}$$

Donc

$$X_{suie} = \frac{M_{tot}}{M_{suie}} Y_{suie} = \frac{1}{M_{suie} \sum_j \frac{1}{M_j} Y_j} Y_{suie} \tag{B.12}$$

Par suite

$$a_{suie} = B \rho_{suie} \frac{1}{M_{suie} \sum_j \frac{1}{M_j} Y_j} Y_{suie} \left[1 + C(T - 2000)\right] \tag{B.13}$$

L'absorptivité du milieu sera la somme des contributions gazeuses et des suies

$$a = a_{gaz} + a_{suie} \tag{B.14}$$

C Loi de paroi pour la couche limite thermique

Cette section fait suite aux discussions évoquées dans la partie 1.5.4. Les différentes notations utilisées dans cette annexe y sont définies.
Notons

$$T_\tau = \frac{\kappa q_w}{\lambda u^*} \tag{C.1}$$

qui est une échelle de température (en Kelvin). Adimensionnons cette température de la même manière que la vitesse

$$T^* = \frac{T_w - T}{T_\tau} \tag{C.2}$$

La couche limite thermique est seulement divisée en deux zones

$$T^* = \begin{cases} y^+ Pr + \frac{1}{2}\frac{\rho u^* u^2 Pr}{q} & \text{si } y^+ < y_T^+ \\ Pr_t \left[\frac{1}{\mathscr{K}} ln(Ey^+) + P\right] + \frac{1}{2}\frac{\rho u^*}{q}\left\{Pr_t u^2 + (Pr - Pr_t)u_c^2\right\} & \text{si } y^+ > y_T^+ \end{cases} \tag{C.3}$$

avec Pr le nombre de Prandtl, $Pr_t = \frac{\nu_t}{\kappa_t}$ le nombre de Prandtl turbulent, q est le flux convectif à la paroi et u_c est la vitesse pour $y^+ = y_T^+$. y_T^+ est la valeur de y^+ à laquelle la loi linéaire et la loi logarithmique s'intersectent. Ainsi, y_T^+ est donnée par

$$y_T^+ = \frac{Pr_t}{Pr}\left(\frac{1}{\mathscr{K}} ln(Ey_T^+) + P\right) \tag{C.4}$$

Cette formulation doit être résolue par calculs itératifs. Puis, grâce à la valeur de y_T^+, u_c est déterminé en supposant que l'épaisseur de la couche limite thermique adimensionnée se place dans la couche logarithmique

$$u_c = \frac{u^*}{\mathscr{K}} ln(Ey_T^+) \tag{C.5}$$

Enfin, une formulation de la fonction P est donnée par Jayatilleke [199]

$$P = 9,24\left[\left(\frac{Pr}{Pr_t}\right)^{\frac{3}{4}} - 1\right]\left[1 + 0,28e^{-0,007Pr/Pr_t}\right] \tag{C.6}$$

Le nombre de Prandtl turbulent est fixé à $0,85$. En réalité, il évolue parmi des valeurs comprises entre $0,7$ et $0,9$ mais des travaux expérimentaux ont établi une moyenne autour de $0,85$.

Par suite, connaissant T^+, il est possible d'obtenir la valeur du coefficient de convection thermique

$$h = \frac{q_w}{T_w - T} = \frac{\rho C p u^*}{T^*} \tag{C.7}$$

D Coefficients du modèle de Beresnev-Chernyak

R	f_{11}	f_{12}	f_{21}	f_{22}	f_{31}	f_{32}	f_{41}	f_{42}
1000	$-1,324.10^{-5}$	$1,317.10^{-5}$	$1,366.10^{-9}$	$4,924.10^{-8}$	1	-0,9947	-1,004	0,991
800	$-2,067.10^{-5}$	$2,055.10^{-5}$	$2,677.10^{-9}$	$9,601.10^{-8}$	1	-0,9934	-1,006	0,9989
600	$-3,673.10^{-5}$	$3,645.10^{-5}$	$6,379.10^{-9}$	$2,270.10^{-7}$	1	-0,9912	-1,007	0,9985
400	$-8,256.10^{-5}$	$8,159.10^{-5}$	$2,175.10^{-8}$	$7,619.10^{-7}$	1	-0,9868	-1,011	0,9978
200	$-3,291.10^{-4}$	$3,215.10^{-4}$	$1,791.10^{-7}$	$5,997.10^{-6}$	1	-0,9739	-1,022	0,9955
100	$-1,307.10^{-3}$	$1,248.10^{-3}$	$1,502.10^{-6}$	$4,643.10^{-5}$	1	-0,9489	-1,044	0,9909
80	$-2,036.10^{-3}$	$1,921.10^{-3}$	$2,987.10^{-6}$	$8,917.10^{-5}$	1	-0,9367	-1,055	0,9885
60	$-3,598.10^{-3}$	$3,331.10^{-3}$	$7,225.10^{-6}$	$2,055.10^{-4}$	1	-0,9169	-1,074	0,9846
40	$-8,004.10^{-3}$	$7,139.10^{-3}$	$2,439.10^{-5}$	$6,551.10^{-4}$	1	-0,8794	-1,110	0,9765
20	$-3,115.10^{-2}$	$2,505.10^{-2}$	$1,066.10^{-4}$	$4,417.10^{-3}$	1	-0,7812	-1,218	0,9512
10	-0,1109	$7,525.10^{-2}$	$-1,852.10^{-3}$	$2,639.10^{-2}$	1	-0,6360	-1,415	0,8994
8	-0,1636	0,1039	$-6,174.10^{-3}$	$4,513.10^{-2}$	1	-0,5819	-1,504	0,8737
6	-0,2626	0,1524	$-2,244.10^{-2}$	$8,749.10^{-2}$	1	-0,5101	-1,635	0,8319
4	-0,4780	0,2443	-0,1013	0,2089	1	-0,4098	-1,847	0,7535
2	-1,058	0,4507	-0,7320	0,7674	1	-0,2570	-2,226	0,5676
1	-1,749	0,6623	-3,077	2,247	1	-0,1421	-2,533	0,3574
0,8	-1,952	0,7205	-4,501	3,051	1	-0,1142	-2,609	0,2962
0,6	-2,181	0,7851	-7,034	4,424	1	$-8,453.10^{-2}$	-2,691	0,2265
0,4	-2,439	0,8559	-12,37	7,214	1	$-5,344.10^{-2}$	-2,781	0,1482
0,2	-2,717	0,9310	-28,89	15,62	1	$-2,237.10^{-2}$	-2,881	$6,437.10^{-2}$
0,1	-2,857	0,9678	-62,20	32,38	1	$-8,413.10^{-3}$	-2,937	$2,470.10^{-2}$
0,08	-2,884	0,9748	-78,85	40,73	1	$-5,993.10^{-3}$	-2,945	$1,767.10^{-2}$
0,06	-2,910	0,9816	-106,6	54,63	1	$-3,793.10^{-3}$	-2,961	$1,123.10^{-2}$
0,04	-2,935	0,9881	-162,0	82,39	1	$-1,900.10^{-3}$	-2,973	$5,648.10^{-3}$

Tableau D.1 – Coefficients $f_{k,1}$ et $f_{k,2}$ du modèle de Beresnev-Chernyak [14].

R	φ_{11}	φ_{12}	φ_{21}	φ_{22}	φ_{31}	φ_{32}	φ_{41}	φ_{42}
1000	$1,430.10^{-3}$	$-1,425.10^{-3}$	$-1,421.10^{-3}$	$1,416.10^{-3}$	1	-0,9947	-0,9934	0,9881
800	$1,787.10^{-3}$	$-1,780.10^{-3}$	$-1,773.10^{-3}$	$1,765.10^{-3}$	1	-0,9934	-0,9917	0,9852
600	$2,382.10^{-3}$	$-2,368.10^{-3}$	$-2,356.10^{-3}$	$2,342.10^{-3}$	1	-0,9912	-0,9890	0,9803
400	$3,574.10^{-3}$	$-3,539.10^{-3}$	$-3,512.10^{-3}$	$3,481.10^{-3}$	1	-0,9868	-0,9836	0,9706
200	$7,123.10^{-3}$	$-6,999.10^{-3}$	$-6,891.10^{-3}$	$6,771.10^{-3}$	1	-0,9739	-0,9675	0,9423
100	$1,417.10^{-2}$	$-1,369.10^{-2}$	$-1,327.10^{-2}$	$1,282.10^{-2}$	1	-0,9489	-0,9364	0,8885
80	$1,767.10^{-2}$	$-1,692.10^{-2}$	$-1,628.10^{-2}$	$1,559.10^{-2}$	1	-0,9367	-0,9213	0,8630
60	$2,347.10^{-2}$	$-2,216.10^{-2}$	$-2,105.10^{-2}$	$1,987.10^{-2}$	1	-0,9169	-0,8970	0,8225
40	$3,490.10^{-2}$	$-3,206.10^{-2}$	$-2,970.10^{-2}$	$2,728.10^{-2}$	1	-0,8794	-0,8509	0,7483
20	$6,808.10^{-2}$	$-5,793.10^{-2}$	$-4,981.10^{-2}$	$4,239.10^{-2}$	1	-0,7811	-0,7317	0,5716
10	0,1296	$-9,714.10^{-2}$	$-7,248.10^{-2}$	$5,444.10^{-2}$	1	-0,6355	-0,5599	0,3563
8	0,1582	-0,1125	$-7,850.10^{-2}$	$5,612.10^{-2}$	1	-0,5811	-0,4977	0,2900
6	0,2028	-0,1341	$-8,408.10^{-2}$	$5,621.10^{-2}$	1	-0,5088	-0,4174	0,2135
4	0,2817	-0,1672	$-8,625.10^{-2}$	$5,268.10^{-2}$	1	-0,4079	-0,3120	0,1289
2	0,4562	-0,2272	$-7,268.10^{-2}$	$4,044.10^{-2}$	1	-0,2550	-0,1740	$4,572.10^{-2}$
1	0,6480	-0,2822	$-4,422.10^{-2}$	$2,676.10^{-2}$	1	-0,1411	$-9,216.10^{-2}$	$1,357.10^{-2}$
0,8	0,7045	-0,2970	$-3,425.10^{-2}$	$2,286.10^{-2}$	1	-0,1135	$-7,491.10^{-2}$	$8,880.10^{-3}$
0,6	0,7698	-0,3133	$-2,197.10^{-2}$	$1,840.10^{-2}$	1	$-8,415.10^{-2}$	$-5,735.10^{-2}$	$5,034.10^{-3}$
0,4	0,8447	-0,3309	$-6,783.10^{-3}$	$1,324.10^{-2}$	1	$-5,329.10^{-2}$	$-3,937.10^{-2}$	$2,178.10^{-2}$
0,2	0,9281	-0,3488	$1,204.10^{-2}$	$7,231.10^{-3}$	1	$-2,234.10^{-2}$	$-2,065.10^{-2}$	$4,738.10^{-4}$
0,1	0,9698	-0,3565	$2,305.10^{-2}$	$3,825.10^{-3}$	1	$-8,410.10^{-3}$	$-1,076.10^{-2}$	$9,206.10^{-5}$
0,08	0,9776	-0,3577	$2,540.10^{-2}$	$3,104.10^{-3}$	1	$-5,992.10^{-3}$	$-8,708.10^{-3}$	$5,294.10^{-5}$
0,06	0,9849	-0,3587	$2,779.10^{-2}$	$2,366.10^{-3}$	1	$-3,793.10^{-3}$	$-6,618.10^{-3}$	$2,540.10^{-5}$
0,04	0,9915	-0,3594	$3,022.10^{-2}$	$1,608.10^{-3}$	1	$-1,900.10^{-3}$	$-4,483.10^{-3}$	$8,596.10^{-6}$

Tableau D.2 – Coefficients $\varphi_{k,1}$ et $\varphi_{k,2}$ du modèle de Beresnev-Chernyak [14].

E Scripts Python du couplage OpenFOAM-Cast3m

Le code du couplage entre les logiciels OpenFOAM et Cast3m se compose de deux scripts Python. Cet algorithme est proposé en libre accès à l'adresse

https ://github.com/FabienSalmon/Couplage.git

Rappelons que le couplage nécessite le logiciel GMSH [189] pour la réalisation du maillage. De plus, l'application du premier des deux scripts peut mener à des erreurs qu'il n'a pas été possible de supprimer systématiquement. Malgré ces problèmes, il est possible pour l'utilisateur d'opérer quelques corrections à la main.

Le premier obstacle au couplage concerne la construction des points à partir de la coupe de la géométrie 3D. Ce procédé est décrit dans la partie 2.4. La figure 2.25 est reprise ici (Fig. E.1) pour accompagner l'explication. La coupe présentée sur cette figure correspond au cas général. Cependant, un

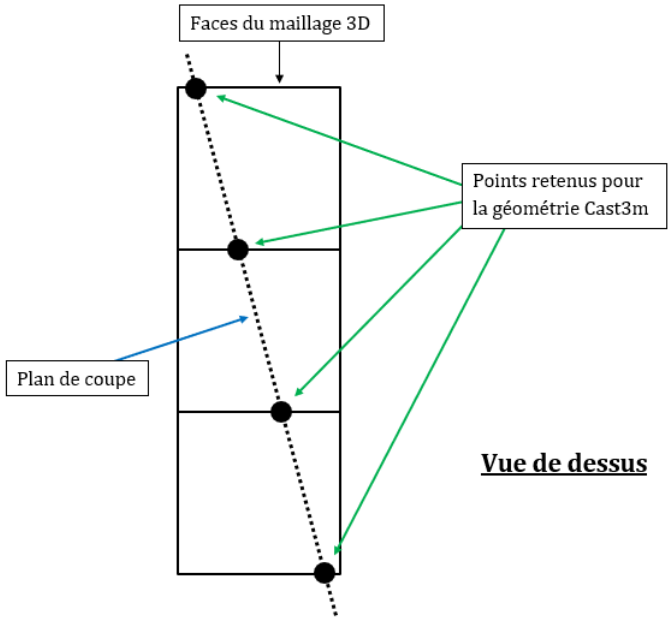

Figure E.1 – Construction des points qui formeront le contour de la géométrie 2D utilisée par Cast3m.

cas particulier conduit à l'avortement du calcul en cours (Fig. E.2). Dans ce cas, le plan de coupe passe exactement entre toutes les mailles. L'argument basé sur l'équation cartésienne du plan ne permet donc plus de trancher et le code aboutit à une géométrie 2D vide. Un décalage du plan de coupe d'un millimètre remédie à ce problème. Le second problème provient de la procédure qui relie les points obtenus

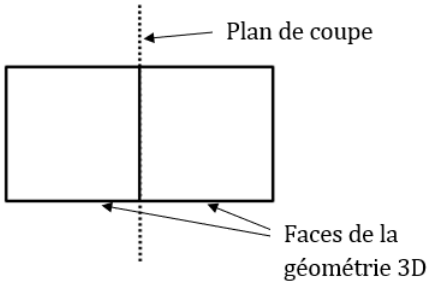

Figure E.2 – Coupe entre deux cellules du maillage 3D.

entre eux. Elle est fondée sur la distance entre les points. À chaque pas, le point sélectionné est relié au

point le plus proche. Même si cette méthode aboutit la plupart du temps à la bonne géométrie, elle peut s'achever sur une géométrie inexploitable. Un exemple est proposé sur la figure E.3. Dans ce cas, il suffit

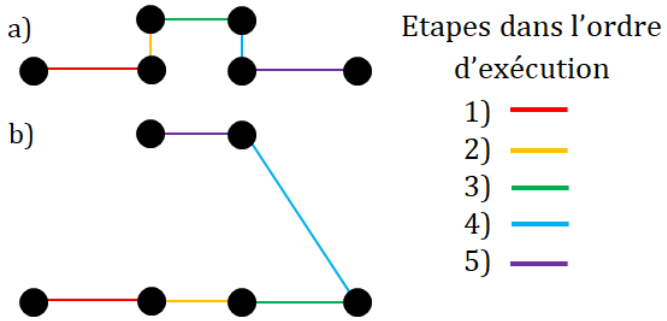

Figure E.3 – La géométrie réelle correspond à un créneau. a) Cas présentant un succès de la méthode. b) Cas présentant un échec de la méthode.

de modifier directement le fichier "Maillage.geo" en passant par un éditeur de texte en modifiant la définition des lignes qui posent problème. Il est ensuite possible de poursuivre l'algorithme jusqu'au bout.

Il est donc conseillé d'effectuer individuellement les procédures et de vérifier à chaque étape le résultat fourni par le procédé.

F Résultats expérimentaux des trois feux effectués dans la carrière de Lugasson

F.1 Conditions initiales des trois feux

Cette partie de l'annexe fournit les temps d'alimentation et les masses ajoutées. Les temps du troisième feu sont décalés de 7 min 50 à cause du retard pris à l'allumage. Ce recalage permet la comparaison entre les trois feux.

La température initiale et l'humidité relative au sein de la carrière lors des trois feux sont précisées. Le taux d'humidité du bois est de même indiqué.

	Feu1						
Instant (min)	0	6 : 22	10 : 03	14 : 20	18 : 07	22 : 44	25 : 20
Masse (kg)	17,79	9,53	9,235	9,01	8,96	9,585	8,605
Instant (min)	28 : 20	31 : 45	34 : 20	37 : 08	39 : 53	41 : 25	43 : 10
Masse (kg)	8,92	9,28	8,845	9,39	8,15	8,52	8,46

Tableau F.1.1 – Temps d'alimentation et masse des fagots correspondante pour le premier feu.

	Feu2						
Instant (min)	0	6 : 28	10 : 21	14 : 40	17 : 36	22 : 52	25 : 25
Masse (kg)	17,14	9,53	8,51	9,02	8,7	8,42	9,63
Instant (min)	28 : 00	31 : 10	34 : 06	37 : 26	39 : 27	41 : 29	42 : 55
Masse (kg)	9,38	9,6	9,27	8,86	8,88	8,65	8,37

Tableau F.1.2 – Temps d'alimentation et masse des fagots correspondante pour le deuxième feu.

	Feu3						
Instant (min)	0	6 : 25	10 : 05	14 : 00	17 : 35	22 : 30	24 : 55
Masse (kg)	17,16	8,61	9,37	8,41	8,85	8,95	8,55
Instant (min)	27 : 50	31 : 20	34 : 15	36 : 15	39 : 05	40 : 50	42 : 25
Masse (kg)	9,02	9,2	9,46	8,29	9,4	9,91	9,22

Tableau F.1.3 – Temps d'alimentation et masse des fagots correspondante pour le troisième feu.

	Feu 1	Feu 2	Feu 3
Température initiale (^oC)	12,4	14,2	16
Humidité relative moyenne (%)	88,5	92	86,5
Teneur en eau moyenne des branches (%)	22,2	21,9	23,4

Tableau F.1.4 – Températures initiales et humidités relatives moyennes dans la carrière. Teneur en eau moyenne mesurée dans les branches brûlées le jour de l'essai.

F.2 Mesures expérimentales lors des trois feux

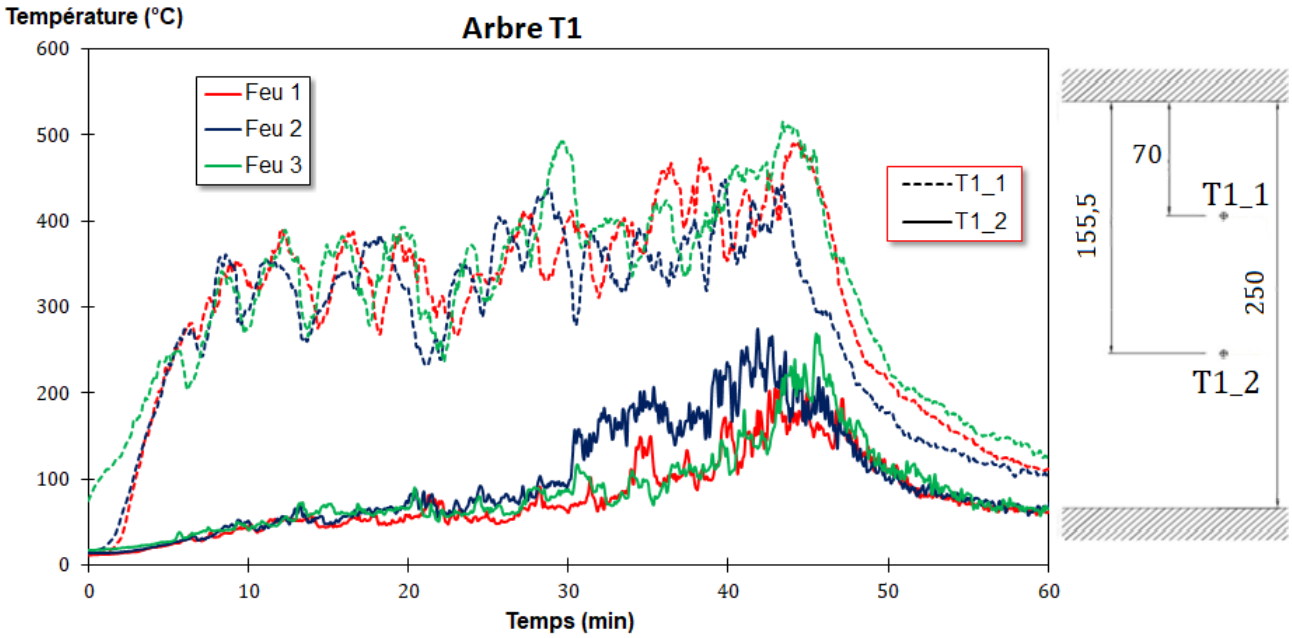

Figure F.2.1 – Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T1. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

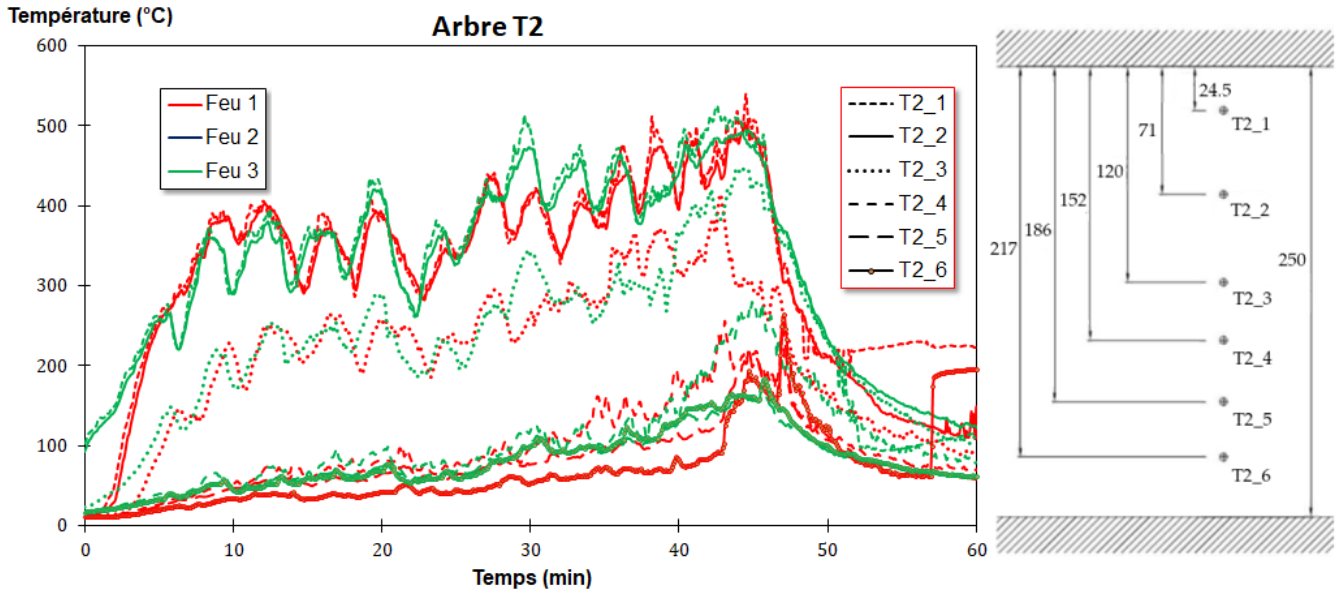

Figure F.2.2 – Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T2. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

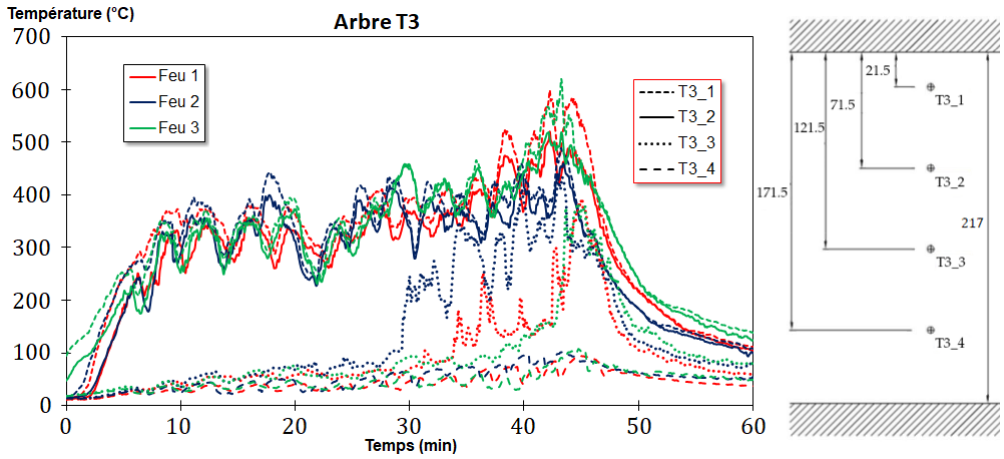

Figure F.2.3 – Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T3. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

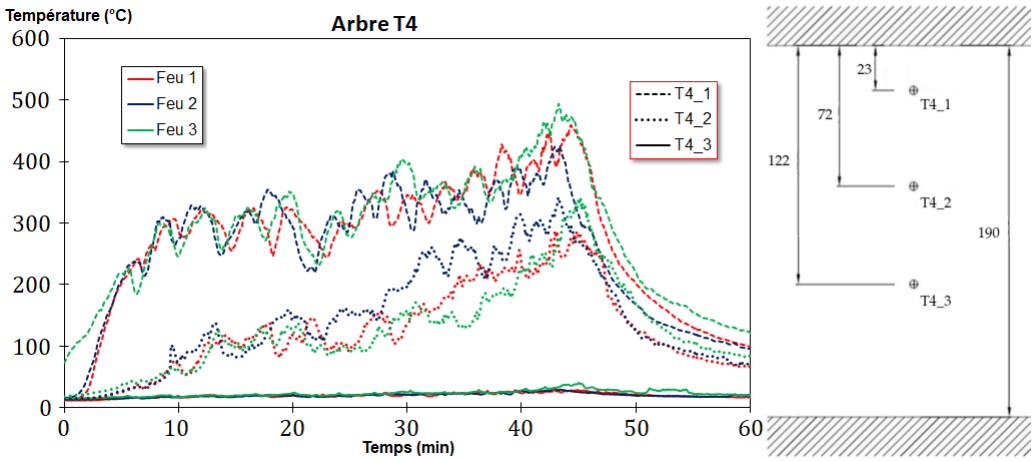

Figure F.2.4 – Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T4. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

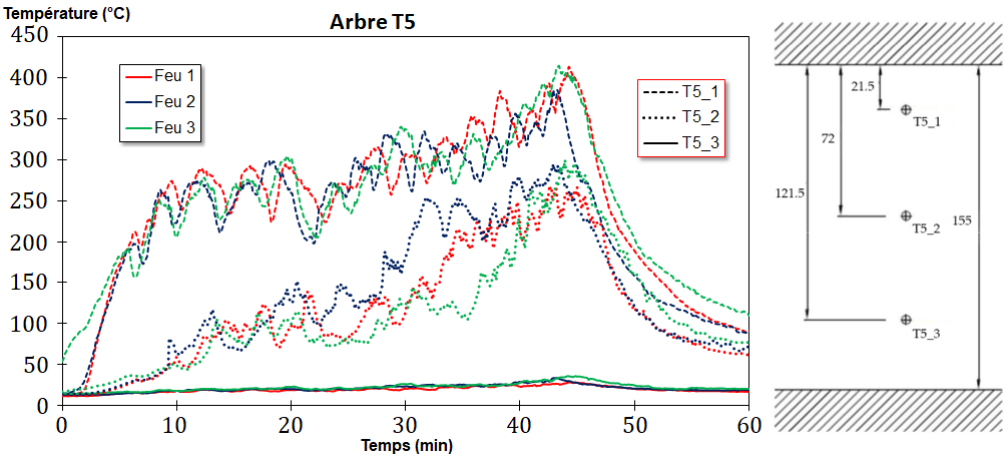

Figure F.2.5 – Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T5. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

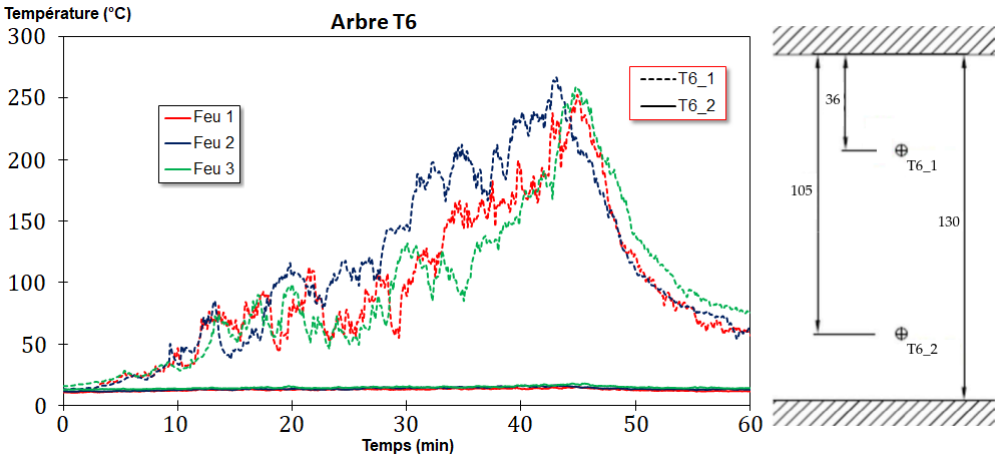

Figure F.2.6 – Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T6. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

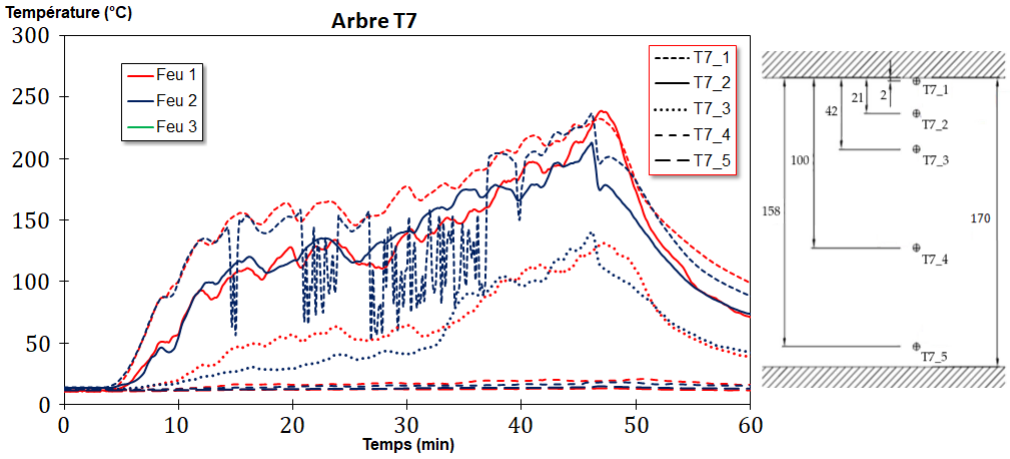

Figure F.2.7 – Mesures de température effectuées par les thermocouples de l'arbre T7. La localisation verticale des thermocouples est indiquée en cm.

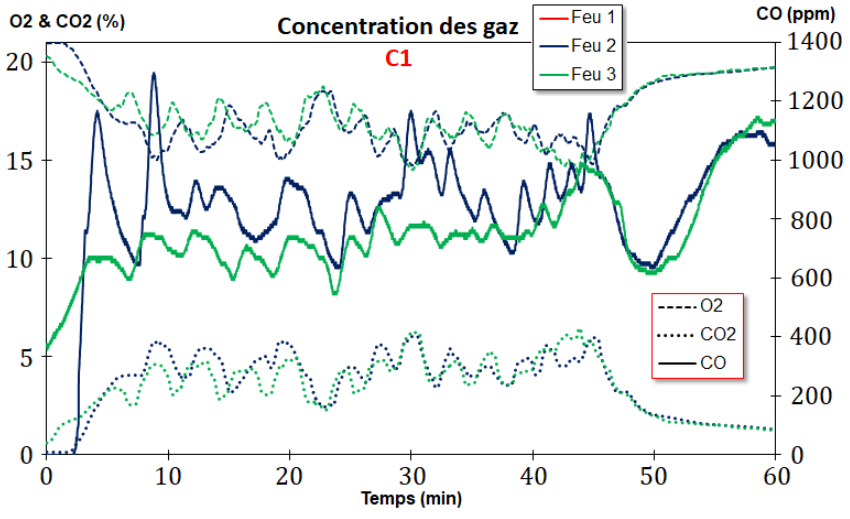

Figure F.2.8 – Mesures des concentrations de gaz effectuées en C1.

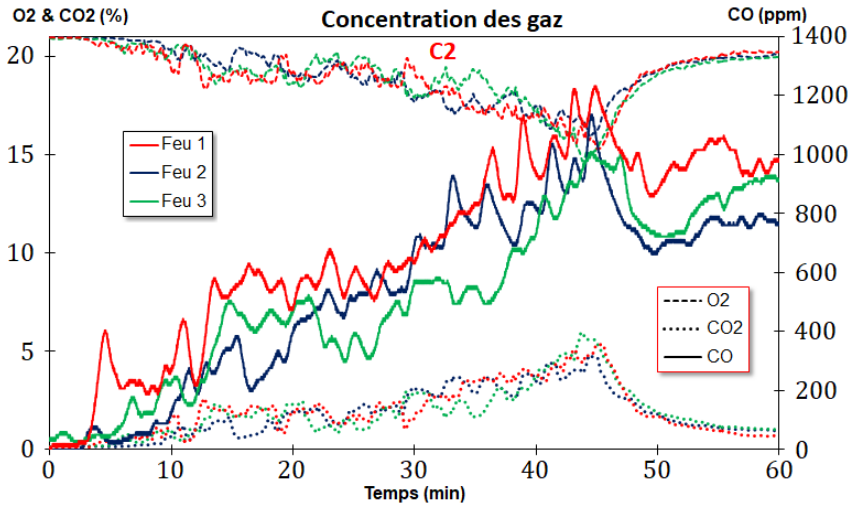

Figure F.2.9 – Mesures des concentrations de gaz effectuées en C2.

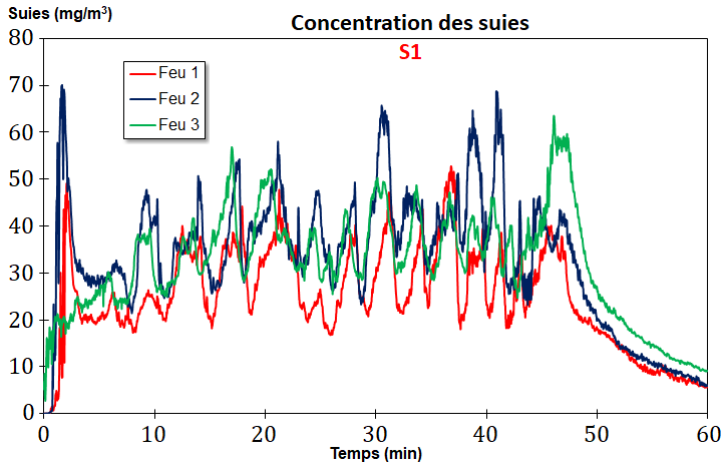

Figure F.2.10 – Mesures des concentrations en particules effectuées en S1.

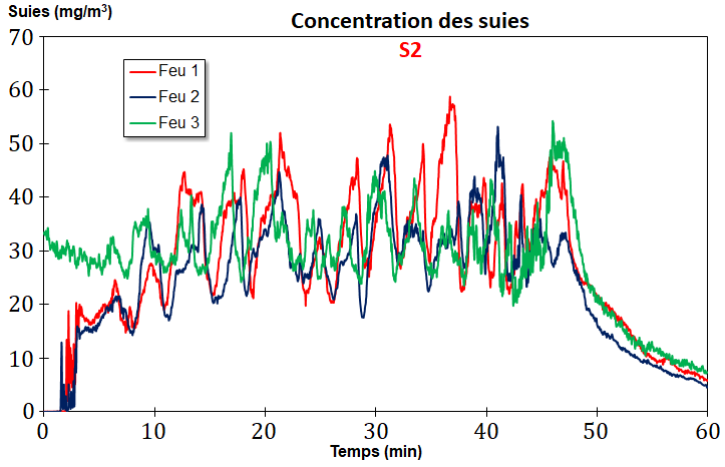

Figure F.2.11 – Mesures des concentrations en particules effectuées en S2.

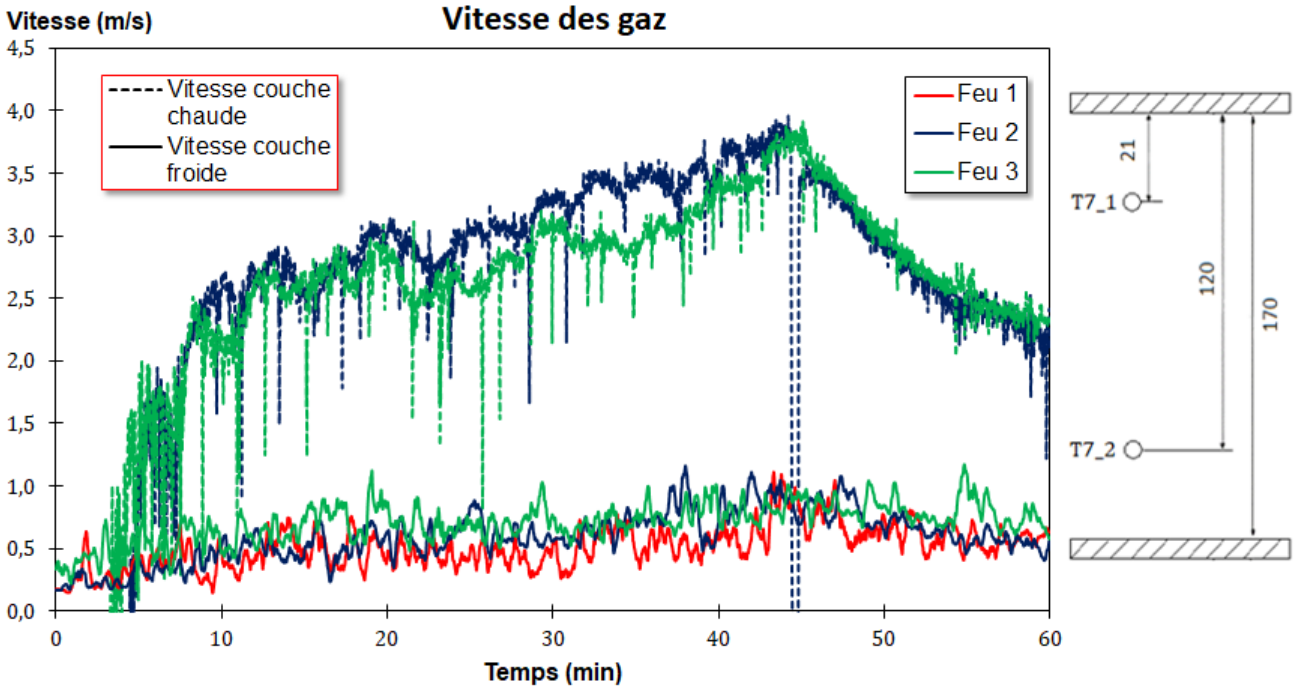

Figure F.2.12 – Mesures des vitesses effectuées sur l'arbre T7. La localisation verticale des sondes est indiquée en cm.

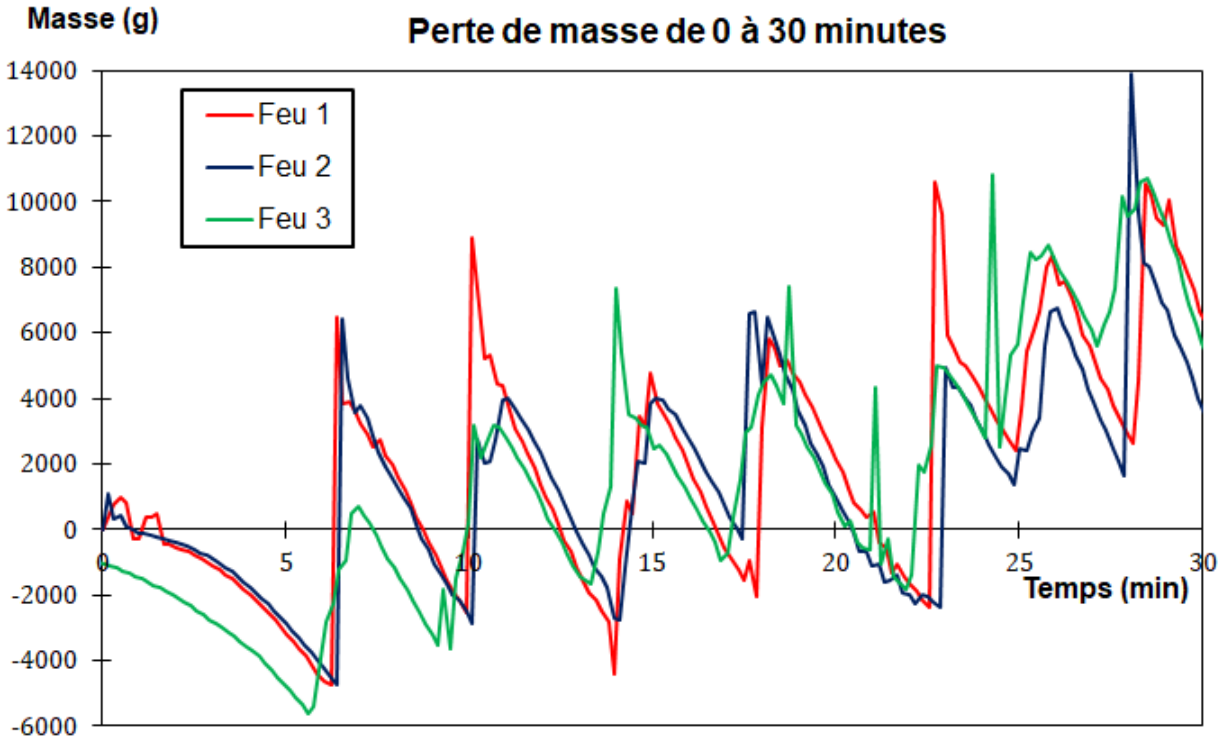

Figure F.2.13 – Perte de masse mesurée sur les 30 premières minutes des feux.

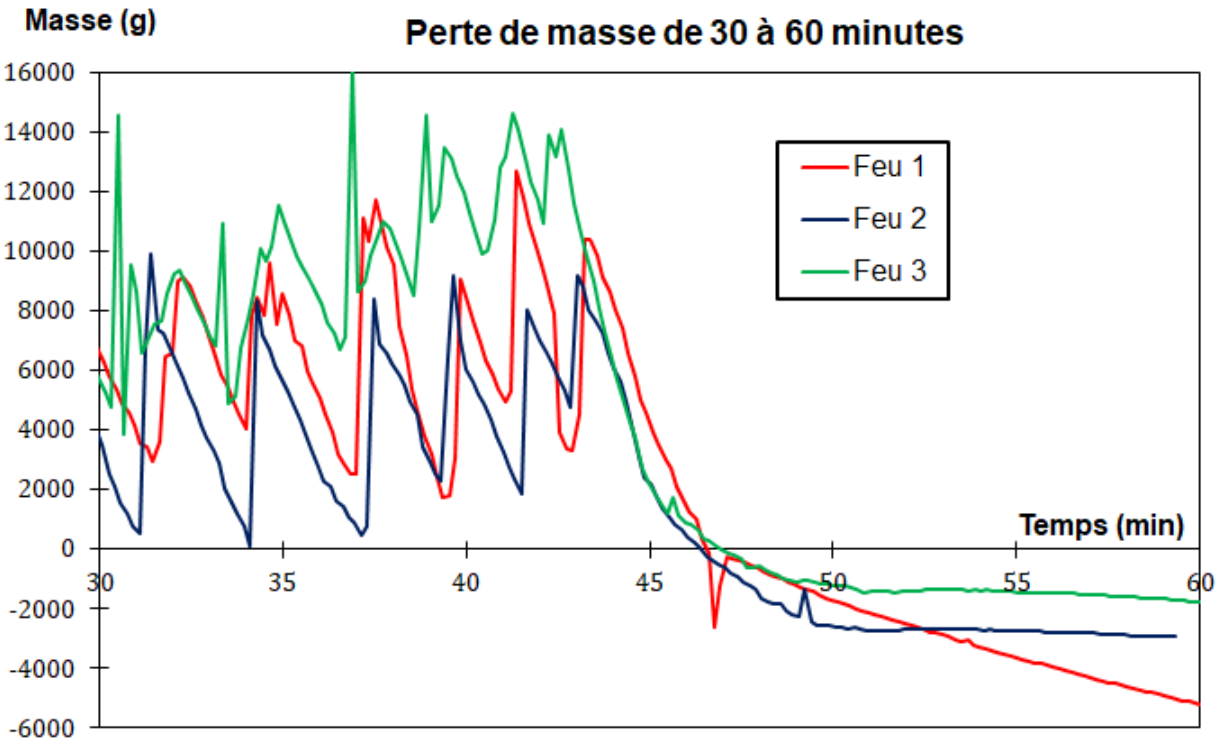

Figure F.2.14 – Perte de masse mesurée sur les 30 dernières minutes des feux.

	Masse des particules déposées (mg)			
Cibles	Feu 1	Feu 2	Feu 3	Moyenne
S1.a	1,17	1,46	1,76	1,46
S1.b	2,31	0,63	0,80	1,25
S1.c	3,73	0,44	0,14	1,44
S2.a	1,24	2,91	1,85	2,00
S2.b	0,80	3,38	3,15	2,44
S2.c	0,42	2,98	2,38	1,93

Tableau F.2.1 – Dépôt de suie lors des trois feux. Les lettres a, b et c correspondent à une des trois plaques placées pour chaque emplacement.

G Article publié

LOCALIZED FIRE IN A GALLERY: MODEL DEVELOPMENT AND VALIDATION

*Salmon Fabien[1], Lacanette Delphine[1], Mindeguia Jean-Christophe[1], Sirieix Colette[1], Bellivier Axel[2], Leblanc Jean-Claude[3], Ferrier Catherine[4]
[1] Université de Bordeaux, UMR CNRS 5295 I2M (16 avenue Pey Berland, Pessac, France)
[2] Laboratoire Central de la Préfecture de Police (rue de Dantzig, 75075 Paris, France)
[3]Université de Toulouse, UMR CNRS 5608 TRACES (Allées Antonio Machado 31058 Toulouse, France)
[4]Université de Bordeaux, UMR CNRS 5199 PACEA (Bâtiment B8 Allée Geoffroy Saint Hilaire Pessac, France)
*Fabien.Salmon@u-bordeaux.fr - 0540002706

Keywords: Localized wood fire; Large eddy simulation; FireFOAM; Underground; Toxicity; Rock art cave

ABSTRACT

A numerical simulation of a wood fire in a natural gallery is compared with experimental data. Temperatures, velocities, gases and particles concentrations as well as soot deposits are the measured quantities of the experiment. We expose in this article the comparison with a simulation performed by the open-source solver FireFOAM. In order to improve the accuracy of the modeling, the initial numerical tool has been modified. A boundary condition for temperature based on energy conservation has been added to better estimate thermal losses at the walls. A hypothesis regarding vertical velocity in a confined geometry containing a localized fire is also made. By assuming that the velocity is exclusively horizontal, the error between simulation and experiment is reduced. With the aim of comparing the temperature measurements with the simulation accurately, the thermocouple model commonly used in FireFOAM has been changed. The limitations of the previous models are also discussed. Then, two combustion side issues are presented. First, the model of Beresnev-Chernyak computes soot deposit on walls. Second, the fractional effective doses (FED) for toxicity, radiation and heat hazards have been implemented to evaluate the safety of the environment during the fire.

Nomenclature

a	Absorption coefficient (m^{-1})
C	Concentration (% or ppm)
c_p	Specific heat at constant pressure ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)
c_v	Specific heat at constant volume ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)
dQ	Power released by the chemical reaction (W)
D	Distance between the fire and the closest wall (m)
F	External force (N)
f	Friction factor
G	Incident radiation ($W.m^{-2}$)

H	Specific enthalpy ($J.kg^{-1}$)
H_t	Total specific enthalpy ($J.kg^{-1}$)
H'	Height of the ceiling (m)
h	Heat convection coefficient ($W.m^{-2}.K^{-1}$)
I	Radiative intensity ($W.m^{-2}$)
k	Subgrid-scale kinetic energy ($m^2.s^{-2}$)
L	Characteristic length (m)
$\dot{m}$	Mass loss rate ($kg.s^{-1}$)
p	Pressure (Pa)
$\dot{Q}$	Heat of combustion ($J.kg^{-1}$)
Q_c	Convective heat release rate (kW)
q_{in}	Incident radiative flux ($W.m^{-2}$)
q_r	Radiative heat flux ($W.m^{-2}$)
R	Ideal gas constant ($J.mol^{-1}.K^{-1}$)
r	Specific gas constant ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)
s	Ray direction
S	Source term ($W.m^{-3}$)
S_{ij}	Strain rate (s^{-1})
sr	Stoichiometric coefficient of the oxidizer
T	Temperature (K)
u	Velocity ($m.s^{-1}$)
X	Molar fraction
Y	Mass fraction

Greek terms

Δ	Filter size (m)
ϵ	Emissivity
ϵ_t	Turbulent kinetic energy dissipation ($m^2.s^{-3}$)
ε	Error between simulation and experiment
κ_{eff}	Effective thermal diffusity ($m^2.s^{-1}$)
λ	Thermal conductivity ($W.K^{-1}.m^{-1}$)

μ	Dynamic viscosity ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)
μ_{eff}	Effective dynamic viscosity ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)
ν	Stoichiometric coefficient
ν_t	Eddy viscosity ($m^2.s^{-1}$)
ρ	Density ($kg.m^{-3}$)
σ	Stefan-Boltzmann constant ($W.m^{-2}.K^{-4}$)
ϕ	Flux ($W.m^{-2}$)
$\dot{\omega}_k$	Chemical reaction rate ($kg.m^{-3}.s^{-1}$)

Subscripts

f	Fuel
g	Gas
k	Specie
o	Oxidizer
x	First cell within the wall
w	Wall
∞	Surrounding

1 Introduction

The fire research has known important changes with the beginning of CFD (Computational Fluid Dynamics) simulation. Nowadays, the advances of numerical simulation with the increasing computing capacities allow the reproduction of real fires. The quality of the numerical representation can be discussed and the complexity of combustion problems is still an important obstacle. The mixing of several physics is the main difficulty for CFD simulation. Turbulence, chemistry and radiation make combustion hardly predictable. CFD tools are currently used in different subjects within the general topic of combustion. For instance, a lot of investigations about LES (Large Eddy Simulation) simulation of compartment fires were conducted [1], [2], [3]. The authors managed to predict the behavior of fires thanks to numerical simulation. Close to these researches, this study handles the large eddy simulation of fires inside confined geometries. More particularly, this investigation concerns localized fires in gallery-like geometries. Basically, this matter falls within various fire fields such as fire safety in specific confined places like parking lot, underground mining or tunnels. Spread of fire as well as smoke circulation in parking lot is an important issue for people security and the risk of death for people in such public areas has to be estimated. This question was treated by numerical simulations in [4], [5]. The general problem of fires in tunnels is also prominently featured. The safety matter is obviously an old topic [6], [7], that CFD renewed [8], [9]. The storage of hazardous waste in confined places necessitates also caution because of fire risks [10]. This investigation has also links with flames beneath confined ceilings which are broadly studied experimentally and numerically [11],

[12], [13]. Besides these contemporary matters, fires in gallery-like geometries can also be a prehistorical issue. For instance, the Paleolithic Chauvet-Pont d'Arc cave [14], [15] contains three kinds of witnesses of prehistorical fires: red colorations of stone areas [16], spallings and soot deposits. These evidence suggest that fires were carried out deep inside this cave between 37,000 and 33,500 years ago [17], [18]. Standard explanations can be suggested such as lighting, ignition source for torches or pigment production [19]. But the unusual scale of the fires in the confined Megaloceros gallery whereas the big Hillaire Chamber could have hosted them leads to other assumptions such as protection from animals or more symbolic functions. For conservation reasons, only numerical simulation can answer to this question. Simulation aims at providing information about the fires function by estimating the amounts of wood, the fire numbers and the ability to supply the hearths despite temperature and toxicity. More broadly, this modeling takes part in the study of the prehistoric Man's appropriation of the underground environment.

First, an experiment was carried out for the purposes of reproducing similar thermal alterations to the ones in the Chauvet-Pont d'Arc cave. A hearth was placed within a former limestone quarry described in the next section. Three fires (one per day) were made in order to test the reproducibility of this kind of combustion. The fire remained localized and no propagation occurred during the combustion. The experimental protocol is detailed in the following section. It should be noted that the quarry, like whichever caves, has an irregular geometry involving unusual difficulties in the numerical resolution. Because we are interested in the reproduction and the simulation of thermal marks, we must use the exact geometry of the quarry with all irregularities.

From this perspective, a previous study [20], linked to the Chauvet-Pont d'Arc fires, was performed with the software FDS [21]. The geometry was simplified for the simulation of weak fires close to a flat wall. The approximation did not impact the numerical results for this kind of fire. However, since the final application of this investigation is the Chauvet-Pont d'Arc cave, the preliminary results of this article aim at validating the model on the exact quarry geometry. Among free open-source software, FireFOAM [22], a tool developed by FM Global, can simulate combustion in any geometry. This solver is then selected to simulate the experimental fire.

Second, the numerical model of FireFOAM is described. It is an OpenFOAM [23] solver dedicated to fire simulations. This open-source software is a very promising tool allowing LES simulations and resolution of aerothermochemistry equations as well as radiation. The flames field is broadly studied with FireFOAM [24], [25], [26]. FireFOAM manages the simulation of fires in confined geometries as demonstrated in [27], [28]. OpenFOAM can also perform calculations in complex geometries which is a key point in this study. Its useful framework for personal C++ programming gives the possibility of implementing additional code. In particular, some general theoretical hypotheses have already been tested in other articles like [29] thanks to the modification of a former version of FireFOAM.

Third, several unavailable features in the version 4.0 of FireFOAM have been added to improve the physical description of fires. We present modifications concerning thermocouple correction, resolution of temperature boundary condition in the case of convection along a wall, and an assumption of an exclusively horizontal velocity far enough from the fire. The latter is a hypothesis that allows FireFOAM to reach better results for this study. Additionally, the deposition of soot during a wood fire and the hazard assessment due to toxicity, temperature and radiation are modeled.

Fourth, details about the numerical simulations are given. Especially, the reconstructed 3D geometry of the experimental cave is presented. Careful choices required for simulation with FireFOAM are also discussed. Lastly, the simulated results are faced with the experimental measures (temperature,

velocity, gases and particles concentration). A validation of the numerical heat release rate (HRR) is also achieved in a dedicated section.

2 Description of the fire experiments

2.1 Compartment geometry and fire characteristics

The experiments took place in a former rupelian limestone quarry, located in Lugasson (France). The L-shaped quarry is composed of two right-angle galleries of 9 meters. The entrance in the first gallery leads to the outside (Fig. 1). Because the quarried limestone was used in the Bordeaux building construction, the quarry has the typical dimensions of mine galleries. Keeping in mind the archeological matters [30], a major factor in the choice of the location was the dimensions which are similar to the Megaloceros Gallery in the Chauvet-Pont d'Arc cave. Even if the fire was designed for archeological applications, the combustion consists in a general localized fire.

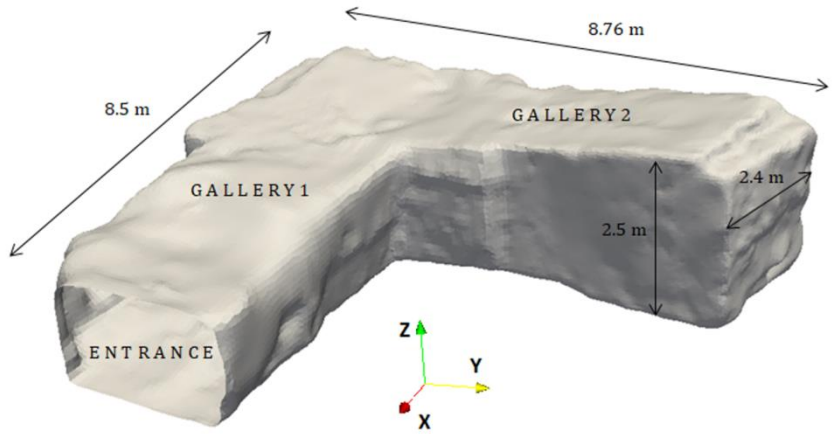

Fig. 1. 3D geometry of the quarry acquired by photogrammetry (P. Mora, Archéotransfert).

The objective of the experiment was the reproducibility of one localized fire. One fire per day was made over three days at the back of the gallery 2. The fireplace was located at 80 cm from the back of the second gallery and centered between both walls. Its diameter was about 80 cm throughout the combustion of the three fires (Fig. 2). The entrance was large enough to ensure the ventilation of the fire.

As regards the fuel, scots pine (pinus sylvestris) was burned. We chose to shape bundles in order to quantify the amount of wood precisely. Each bundle weighted about 4.5 kg. The initial moisture content of the bundles was measured before the tests by a humidity sensor and estimated to be about 22%. The bundles were all composed of branches with typical diameters of the population of scots pine. Each branch had a length of about 80 cm. So, the bundles were all similar and well characterized.

At the beginning of each fire, 4 bundles were put on the burning site to initiate combustion (Fig. 2). According to tests achieved before the experiments [31], a tepee configuration produces a tall flame and optimizes the ceiling jet flow. To maximize the ceiling impact and produce thermo-alterations similar to the thermal marks visible in the Chauvet-Pont d'Arc cave [19], [14], the tepee arrangement was adopted (Fig. 2). The ignition of the 4 first bundles was done with a blowtorch. Then, the bundles were progressively added in pairs to the fire. In total, 30 wood bundles were burned per fire, representing about 135 kg of pinus sylvestris. Because of the extreme conditions, the firewood was

brought to the hearth by firemen with security equipment at regular intervals (Fig. 2). The moment of each supply was chosen during the first fire, in order to prevent as good as possible any decay of the heat release rate (Tab. 1). The same supply times were used for the two other fires to have the same protocol.

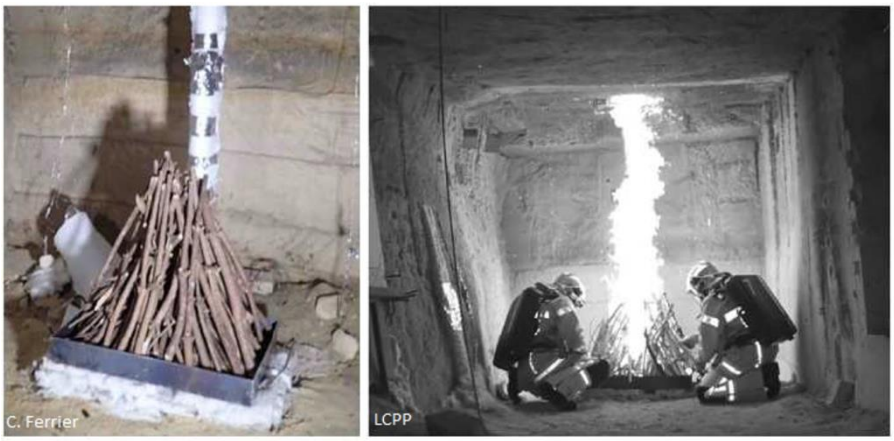

Fig. 2. On the left: Initial hearth in a tepee configuration at the back of the gallery 2. The wood is placed on a weighing scale. On the right: Wood supply by firemen with security equipment.

Moment (min)	0	6 :28	10 :21	14 :40	17 :36	22 :52	25 :25
Mass (kg)	17.14	9.53	8.51	9.02	8.7	8.42	9.63
Moment (min)	28 :00	31 :10	34 :06	37 :26	39 :27	41 :29	42 :55
Mass (kg)	9.38	9.6	9.27	8.86	8.88	8.65	8.37

Tab. 1. Moments of supply and corresponding added masses.

2.2 Instrumentation

The galleries were instrumented with thermocouples trees, gas concentration sensors (oxygen, carbon monoxide and carbon dioxide), velocity sensors, pegasor particle sensors (soot concentration) and a weighing scale under the hearth. The locations of all the sensors are specified on the figure 3. The weighing scale permited to know the mass of wood burned during the experiment. The mass loss rate is therefore known and the heat realease rate (HRR) is deduced from the heat of combustion. The heating value was estimated to be about 12.5 MJ/kg from a previous calorimeter hood test [31] and is supposed to remain constant during the experiment.

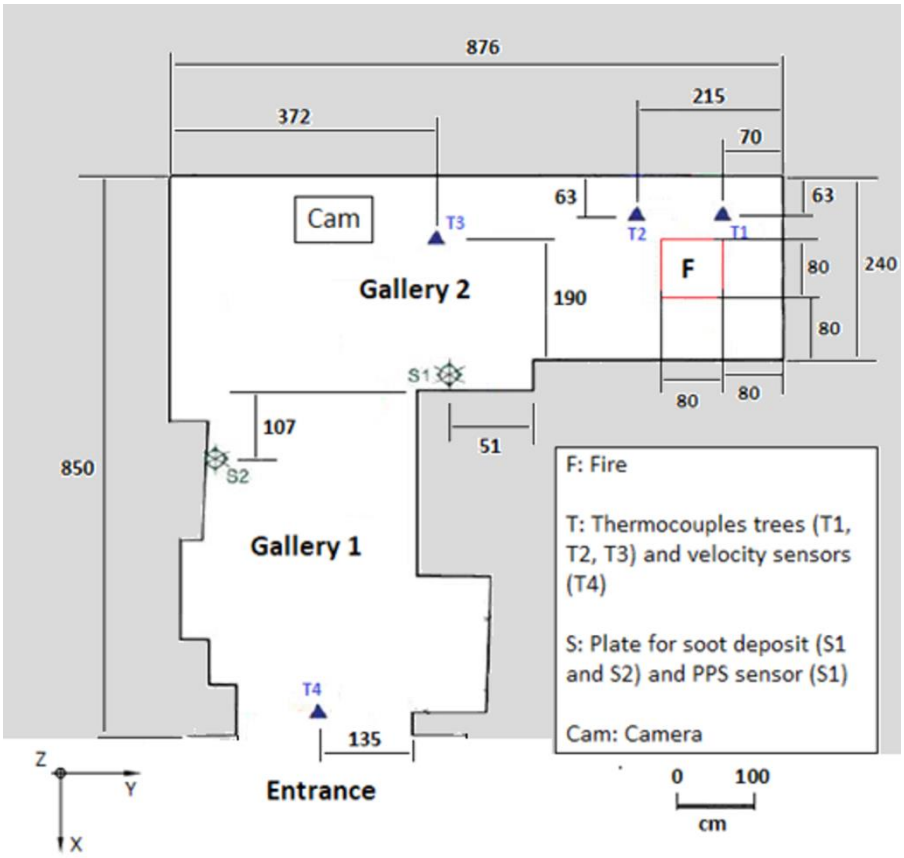

Fig. 3. Cut-away view of the quarry with the locations of the hearth, the thermocouples trees and the soot deposit measures. A camera was placed on the floor, near the corner. Dimensions are in cm.

The thermocouples were positioned in order to have a homogeneous spatial distribution in the fire gallery (trees T1, T2 and T3) and also a uniform vertical dispatching to measure temperature within the cold and hot layers (the exact vertical position of the thermocouples is given in the section 6). Eight 0.5 mm diameter type-K thermocouples were used for the experiment. As they are shielded thermocouples, they are sparsely affected by radiation. The gas sensors measure the concentration of the three gases (oxygen, carbon monoxide and carbon dioxide) at the tree T3, 23 cm under the ceiling. A pegasor particle sensor (PPS) was situated in the smoke at the point S1, 18 cm under the ceiling. It is based on an electrical measure linked to the particle concentrations (supposed soot). The standard calibration [32] is corrected for this kind of soot [33]. We set up the velocity sensors at the entrance of the quarry (T4). An ultrasonic anemometer was fixed at 70 cm above the floor and a McCaffrey probe was fixed at 21 cm under the ceiling. Finally, some aluminum plates were fixed on the walls (points S1 and S2) to collect soot particles and estimate the mass of soot deposited by the thermophoresis phenomena. Located in the corner of the cavity, a camera filmed the experimental fires.

3 Numerical description

In this section, the mathematical equations implemented in FireFOAM-4.0 are detailed. The governing equations are first explained. Then, the turbulence, combustion and radiation models are described.

3.1 Governing equations

FireFOAM solves the Favre averaged Navier-Stokes equations in addition to the Favre averaged transport equations for species mass fraction:

$$\begin{cases} \partial\,\bar{\rho}/\partial t + \partial\bar{\rho}\,\widetilde{u_\iota}/\partial x_i = 0 \\ \partial\bar{\rho}\,\widetilde{u_\iota}/\partial t + \partial/\partial x_j\left(\bar{\rho}\widetilde{u_\iota}\widetilde{u_j}\right) = -\partial\,\bar{p}/\partial x_i + \partial/\partial x_j\,\mu_{eff}\left(2\overline{S_{\iota J}} - 2/3\,\overline{S_{kk}}\delta_{ij}\right) + \bar{F}_\iota \\ \partial\bar{\rho}\,\widetilde{H_t}/\partial t + \partial/\partial x_j\left(\bar{\rho}\widetilde{u_j}\widetilde{H_t}\right) = \partial/\partial x_j\,\bar{\rho}\kappa_{eff}\partial\,\widetilde{H}/\partial x_j + \partial\,\bar{p}/\partial t + \partial\,\overline{q_{rJ}}/\partial x_j + \overline{F_j u_j} + \bar{S} \\ \partial\bar{\rho}\,\widetilde{Y_k}/\partial t + \partial/\partial x_j\left(\bar{\rho}\widetilde{u_j}\widetilde{Y_k}\right) = \partial/\partial x_j\,\bar{\rho}\kappa_{eff}\partial\,\widetilde{Y_k}/\partial x_j + \bar{\omega_k} \\ \bar{P} = \bar{\rho}r\tilde{T} \end{cases} \quad (1)$$

where $\bar{}$ is the Reynolds average symbol, $\tilde{}$ is the Favre average symbol, ρ is the fluid density, u is the velocity, p is the pressure, μ_{eff} is the effective dynamic viscosity, $\overline{S_{\iota J}} = 1/2\left(\partial\,\widetilde{u_\iota}/\partial x_j + \partial\,\widetilde{u_j}/\partial x_i\right)$ is the strain rate, F is the gravity force, H_t is the total specific enthalpy, H is the specific enthalpy, κ_{eff} is the effective thermal diffusivity, q_r is the radiative heat transfer, S is a source term, Y_k is the mass fraction of the specie k, $\dot{\omega_k}$ is the chemical reaction rate, r is the universal gas constant divided by molar mass and T is the temperature.

The unity Lewis number assumption is made. The mass diffusion coefficient is supposed to be equal to the thermal diffusion coefficient. This approximation is a current hypothesis in fire numerical simulation that comes close to the mass transfer reality [21]. The turbulent fluxes of species and total enthalpy are simplified and assumed to be gradients. For instance, regarding the species: $\bar{\rho}\widetilde{u_\iota''Y_k''} \approx -\bar{\rho}\kappa_{eff}\partial\,\widetilde{Y_k}/\partial x_i$.

The specific heat capacities are estimated thanks to the Janaf thermochemical tables corresponding to polynomial approximations [34]. The thermal conductivities are calculated by the modified Eucken correlation [35]: $\lambda = \mu c_v(1.32 + 1.77\,R/c_v)$ with c_v the specific heat capacities at constant volume. The dynamic viscosities are calculated by the Sutherland's law [36]: $\mu = A_s\,(1 + T_s/T)/\sqrt{T}$, with A_s and T_s two Sutherland's law coefficients.

Then, the fluid properties are calculated for the mixture as molar averages of all species.

3.2 Turbulence modeling

The numerical simulation is based on the Large Eddy Simulation (LES) model. A one-equation turbulence model [37] is used to close the previous set of equations (1). FireFOAM determines the subgrid-scale kinetic energy k by solving:

$$\begin{gathered} \partial\rho\,k/\partial t + \partial\rho\widetilde{u_j}\,k/\partial x_j - \partial/\partial x_j\left[\mu_{eff}\partial\,k/\partial x_j\right] = \\ -2/3\,\rho k\partial\,\widetilde{u_k}/\partial x_k + \mu_{eff}\partial\,\widetilde{u_\iota}/\partial x_j\left(2\overline{S_{\iota J}} - 2/3\,\overline{S_{kk}}\delta_{ij}\right) - C_\epsilon\rho\,k^{3/2}/\Delta \end{gathered} \quad (2)$$

where Δ is the filter size directly linked to the cell size and $C_\epsilon = 1.048$. Then, the calculation of the eddy viscosity is computed by $\nu_t = C_k\sqrt{k}\Delta$ with $C_k = 0.094$.

To estimate the eddy thermal diffusivity, we assume that the turbulent Prandtl number is constant and is worth 0.85 (value usually used and deduced from experimental data).

3.3 Radiation Modeling

FireFOAM assumes that turbulence does not affect radiation. Therefore, the radiative transfer equation (RTE) is solved without turbulence interaction. Moreover, the gases are supposed to be a grey medium and scattering is neglected because of the low experimental soot concentration (Fig. 19). The solved radiation equation is not dependent on the spectral properties of gases. With these hypotheses, the radiation equation is:

$$s.\nabla I(r,s) = a(r)\left(\sigma T^4(r)/\pi - I(r,s)\right) + S(r) \quad (3)$$

where I is the radiative intensity, s is the ray direction, a is the absorption coefficient of the medium and $\sigma = 5.67.10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}$ is the Stefan-Boltzmann constant. The term S corresponds to the radiative emission from combustion which cannot be simulated directly because the grid cells are too coarse to estimate correctly local temperatures in the flames. Since the emission term is proportional to the fourth power of temperature, the simulation yields poor results in the flame region. To fix this issue, a source term depending on the heat release rate is usually added in simulations: $S = 0.3dQ$ where dQ is the released chemical reaction power in OpenFOAM. We consider that 30% of the combustion energy is released by radiation for scots pine [38]. The absorption coefficient is estimated by the RADCAL model [39]. Soot radiation is embedded in the absorption coefficient through an additional term [40]: $a_{soot} = B\rho_{soot}X_{soot}[1 + C_{soot}(T - 2000)]$ where ρ_{soot} is the soot density, X_{soot} is the molar fraction of soot, $B = 1232.4 m^2.kg^{-1}$ and $C_{soot} = 4.8.10^{-4} K^{-1}$.

Radiation is solved by the finite volume discrete ordinary method (fvDOM in FireFOAM). The radiative equation is solved in N directions in order to scan all the space (N is given in §5.4).

Concerning boundary conditions, walls are considered as grey diffusive with an emissivity $\epsilon = 0.95$. The radiative intensity is computed as follows: $I_w = \epsilon\sigma T^4 + (1 - \epsilon)/\pi \int_{s.n<0} I\, s.n d\Omega$ with n the normal to the face.

3.4 Combustion modeling

It is necessary to model the chemical reaction rate appearing in the species equations and the energy equation. Because we are interested in the global results rather than an accurate flame description, the Magnussen model (Eddy-Dissipation Concept) [41] is sufficient:

$$\dot{\omega} = -\rho C_c\, \epsilon_t/k\, min\left(Y_f, Y_o/sr\right) \quad (4)$$

where the indices f and o denote the fuel and oxidizer respectively, sr is the stoichiometric coefficient of the oxidizer, ϵ_t is the subgrid-scale kinetic energy dissipation, k is the subgrid-scale kinetic energy and C_c is a model constant. To ensure a correct heat release rate, numerical tests end up at $C_c = 20$. Then, the chemical reaction rate for each specie is $\dot{\omega}_k = \nu_k\dot{\omega}$ with ν_k the stoichiometric coefficient of the specie k.

The chemical reaction of wood combustion is very difficult to figure out. Pragmatically, we choose a reaction that gives coherent results in comparison with the experiment:

$$Wood + 0.4028\, O_2 + 1.516\, N_2 = 0.3609\, CO_2 + 0.8647\, H_2O + 0.0084\, CO + 1.516\, N_2$$

This equation is constant during the combustion. In OpenFOAM, the stoichiometric coefficient of soot is separated from the others and neglected in the calculations of the gases mass fractions. The soot modeling description is detailed in the following section.

3.5 Soot modeling

The soot mass fraction is not computed like the other species. Instead of solving a transport equation, FireFOAM assumes that the amount of soot is proportional to the carbon dioxide quantity. To specify the proportional constant, it uses the following relation: $Y_{soot}/Y_{soot,max} = Y_{CO2}/Y_{CO2,max}$ where $Y_{soot,max}$ and $Y_{CO2,max}$ are both calculated under the assumption that all the fuel is burned in stoichiometric proportions. This simple equation is not time-consuming and is efficient enough for the

study. Like gases, the stoichiometric coefficient is chosen to deliver consistent results: $v_{soot} = 0.0015$.

4 Numerical contributions

This section introduces additional models implemented in OpenFOAM-4.0 to carry out the simulation of the experiments (§2.1).

4.1 1-D heat conduction in a virtual wall

The fire is located within a gallery and a sizeable part of the energy is lost through the walls. In order to consider this phenomenon, we implement in OpenFOAM-4.0 a boundary condition which requires the resolution of the 1-D heat conduction equation for each boundary face. The interface temperature derives from the heat flux balance:

$$q_r + h\left(T_g - T_w\right) = \lambda\,(T_w - T_x)/dx \tag{5}$$

with h the convective heat transfer coefficient, λ the thermal conductivity of the rock and dx the first spatial step discretization in the wall. The indices g,w and x correspond to the gas, wall surface and first discretization in the wall respectively. The model must account for the water in walls because they were saturated [42]. The evaporation of water is modeled through a high value of the specific heat capacity at 100°C [43], [20].

The convective tranfer corresponds to the loss due to boundary layers. Modeling them requires millimeter-sized cells in the parallel direction of the wall to catch the little irregularities. Then, because of the large geometry, the mesh of boundary layers necessary for wall-resolved LES would demand time-consuming computations. Moreover, the input geometry file (built by photogrammetry) is not precise enough to include such irregularities. Therefore, wall-resolved LES is not feasible in this study.

So, the convective heat transfer must be modeled by empirical formulations. It is usually used in CFD simulations, for instance in FDS [21]. However, this approach highly depends on the first discretization at boundaries. The convective heat transfer coefficient should be estimated with the properties of the gas outside the boundary layer. In the simulation, we assume that the temperature of the first cell center approximates the gas temperature outside the layer. Then, this method is grid-dependent but a finer discretization would not necessarily provide more reliable results because the needed temperature must stay outside the boundary layer. Therefore, the safer approach in this specific case is the use of empirical formulations adapted to the experimental data.

The ceiling jet phenomenon prevents the application of Nusselt number correlations to the ceiling. Instead, the Alpert correlation $h = 0.246 f (Q_c/H')^{1/3} \cdot (\mathrm{r}/H')^{-0.69}$ is used [44]. r is the radial distance from the fire, H' is the height of the ceiling above the fireplace, Q_c is the convective heat release rate and f is an empirical friction factor. This formulation is only valid while $0.17 < r/H' < 4$. In the turning region ($r/H' < 0.17$), the convective heat transfer remains constant. For smooth plate unconfined ceilings, $f = 0.03$ gives satisfying experimental results but the simulation requires another value. The figure 4 displays qualitatively the differences between simulated and theoretical gas temperatures along the first cells near the ceiling [44]. The grid cells are too coarse to capture the increase of temperature a few centimeters under the ceiling. Then, the temperature T_g in (5) is underestimated by the simulation as shown on Fig. 4. Therefore, the convective heat transfer coefficient must compensate for this underestimation. Considering these explanations, the best fit to

the data leads to a subgrid-scale friction factor $f_{sgs} = 825$. This correlation is applied to the ceiling until 2.7 m from the fire centerline, respecting the validity range.

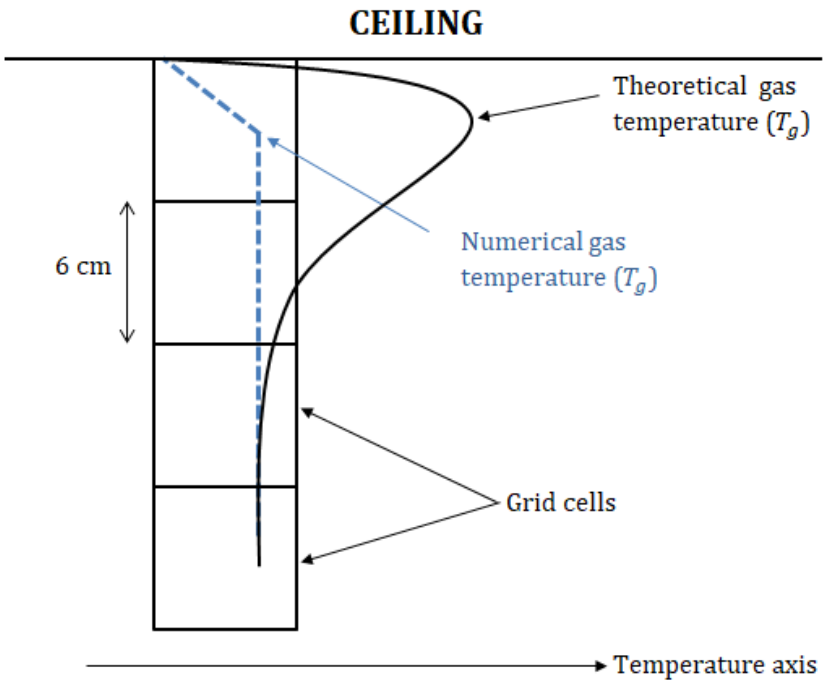

Fig. 4. Comparison between theoretical and simulated temperature profiles close to the ceiling.

The convective heat transfer coefficient for walls is usually estimated from the Nusselt number correlations for planes [45]. Then, $h = Nu\,\lambda/L$ with Nu the Nusselt number and L a characteristic length corresponding to the boundary layer length. A characteristic length of 1 m is often applied in fire simulators (FDS for instance [21]). However, for enclosure fires, negative buoyant wall flows can happen [46]. This physical process (Fig. 5) occurs when walls are close enough to the fire ($D < H'$). Then, inertial forces can be stronger than buoyancy forces and downward wall flows can appear. The quarry is 2.4 meters wide ($D = 1.2$ m) and 2.5 meters high at the fireplace so this gases circulation took place during the experiment.

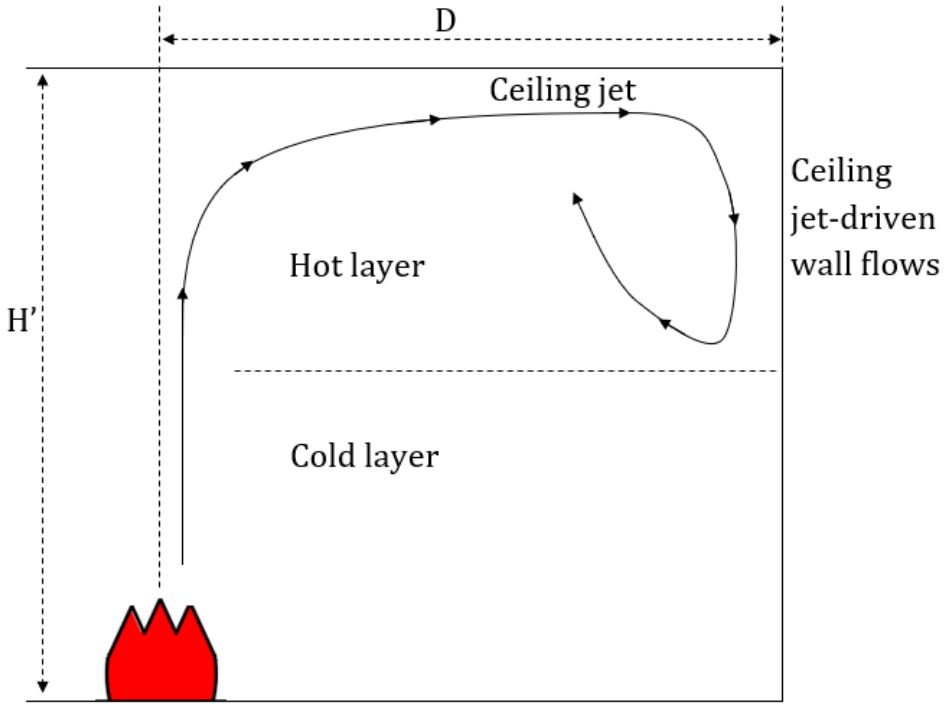

Fig. 5. Schematic representation of the ceiling jet-driven wall flows phenomenon (without penetration in the cold layer).

Cooper in [47] and [48] showed that the ceiling jet-driven wall flows can go down up to 80% of the ceiling height. Therefore, the temperature close to walls is higher than in the hot layer. Again, the coarse grid does not allow accurate calculations of the temperature near walls. A subgrid-scale modeling has to be set up for the characteristic length.

The characteristic length must depend on layers. In the cold layer, the same characteristic length as FDS is chosen: 1 m. In the hot layer, the value of the subgrid-scale characteristic length is taken at 0.1 mm to make the simulation values fit the experimental ones.

A critical temperature of 400 K is chosen to distinguish the hot layer from the cold layer because this value gives consistent results. Nevertheless, it seems that the precision of this temperature is not very important when the hot layer temperature is far higher than the cold layer temperature.

4.2 Soot deposit

A thermophoresis model has been added to compare the experimental and numerical soot deposits. Thermophoresis is usually considered as the dominant process responsible for the deposition of soot particles on vertical walls when the temperature gradient between gases and solids is important. The motion source of particles is then the temperature gradient in the mixture of gases. In a hot surrounding gas, collisions are more important than in a colder gas. As a result, soot particles migrate to the colder surroundings, so partly to the walls. The thermophoretic velocity is defined by: $V_{th} = -K_{th}\,\mu_g/\rho_g\,\nabla T/T_g$.

The thermophoretic diffusion coefficient K_{th} has to be modeled. In this study, K_{th} is estimated by the Beresnev and Chernyak model [49] because some studies showed its good agreement with experimental data [50], [51].

4.3 Fractional effective dose (FED)

An essential issue is the toxicity assessment in a confined place. The capability for prehistorical men to stand near a fire in a cave is an important matter as well as the intoxication of trapped people in tunnels or mines. Hence, we set up a living condition modeling with the so-called fractional effective dose (FED). This model evaluates the severity of toxic effects, temperature and radiative hazards. In the simulation, two kinds of FED are calculated. The first one is dedicated to gas toxicity whereas the other one is focused on temperature and radiation hazards. The FED is based on the dose notion, so the more you are exposed to hazard, the more your dose increases without ever reducing. This dose is a time integration: $FED = \int dt/t_{50\%}$, where $t_{50\%}$ defines the required time to kill half of people. Thus, when the FED is worth one, the mortality rate is 50%. The FED of radiation and heat is the sum of both parts. The radiative incapacitation time [52] is $t_{50\%,rad} = 10 q_r^{-1.33}$ when $q_r > 2.5\ kW/m^2$ and tends to infinity in the other case ($FED = 0$). The following formula gives the heat incapacitation time [52]: $t_{50\%,heat} = 5.10^{22} T^{-11.783} + 3.10^{7} T^{-2.9636}$. If the temperature is higher than 200°C, the incapacitation time is 0 (anyone dies).

As regards gas concentrations, there are interactions between gases toxicities. The fractional effective dose is as follows [52] [53] [54]: $FED = HV_{CO_2} FED_{CO} + FED_{O_2} + FED_{CO_2}$ with

$$t_{50\%,O_2} = exp\left(8.13 - 0.54\left(20.9 - C_{O_2}\right)\right)$$

$$t_{50\%,CO} = 10^5\, C_{CO}^{-1.036}/2.764$$

$$t_{50\%,CO_2} = \begin{cases} 0 \text{ if } C_{CO_2} < 5.5\% \\ 2193.8 - 311.6 C_{CO} - 311.6 C_{CO_2} \text{ if } 5.5\% < C_{CO_2} < 7 \\ exp\left(6.1623 - 0.5189 C_{CO_2}\right) \text{ if } C_{CO_2} > 7\% \end{cases} \quad (6)$$

$$HV_{CO_2} = exp\left(0.1903 C_{CO_2} + 2.0004\right)/7.1$$

where C_k is the concentration of the specie k in % except for carbon monoxide in ppm (parts per million).

4.4 An accurate thermocouple correction

On the one hand, the experimental temperatures correspond to the temperatures given by the measuring sensors (thermocouples). On the other hand, simulation supplies the gas temperatures. But a gap necessarily exists between the gas temperatures and the measures. First, the sensor is solid and can be more affected by radiation than the surrounding gas. Second, a boundary layer occurs at the thermocouple surface and losses by convective heat transfer happen. Thus, a temperature correction is required to compare experimental measures with the simulation accurately. The following discussion handles temperature corrections applicable to general thermocouples.

OpenFOAM already contains a thermocouple correction model [55]. However, we modify it to enhance the correction accuracy. The OpenFOAM model and our modifications are detailed below.

First, the thermocouple is assumed to be thermally thin because its diameter is small enough (0.5 mm in this study). Consequently, the conduction in the sensor is neglected and the temperature in the thermocouple is homogeneous. The energy balance leads to:

$$\rho c_p V \partial T/\partial t = q_r A + h\left(T_g - T\right)A \quad (7)$$

where c_p is the specific heat at constant pressure of the thermocouple, V is the thermocouple volume and A is its area. The radiative heat transfer may be expressed as $q_r = \epsilon(q_{\text{in}} - \sigma T^4)$ with ϵ the thermocouple emissivity.

The key point is the calculation of the incident radiative flux q_{in}. In the existing OpenFOAM model, the incident radiative flux is replaced by the incident radiation $G = \int I\,(r,s)d\Omega$ and the equation (8) is then solved:

$$\rho c_p V \partial T/\partial t = \epsilon(G - \sigma T^4)A + h_{conv}(T_g - T)A \qquad (8)$$

Contrary to this formulation, we decide to compute the incident radiative flux by the exact formula $q_{\text{in}} = \int_{s.n<0} I\,(r,s)s.n d\Omega$ (with n the normal of the thermocouple). Without any information about the thermocouple normal, the incident radiative flux is averaged over the 6 main directions.

To check the efficiency of the implemented model, a simple test case with an analytical solution has been run. Physically, we want to describe the increase in temperature of a cylindrical thermocouple ($\epsilon = 0.9$) located within an empty cubic geometry whose the walls temperature remains at 500 K. The black body assumption for the walls is made. Because the area of the thermocouple is negligible against the box area, the thermocouple temperature is governed by $\rho \frac{d}{4} c_p\, dT/dt = \epsilon\sigma(T_\infty^4 - T^4)$ with $T_\infty = 500\ K$ the surronding temperature, ρ the thermocouple density, d the thermocouple diameter and c_p the thermocouple specific heat capacity. The existing OpenFOAM model, the implemented one and the analytical solution are compared on the figure 6. The equations are solved with $\rho = 8800\ kg.m^{-3}$, $d = 1\ mm$, and $c_p = 440\ J.kg^{-1}.K^{-1}$.

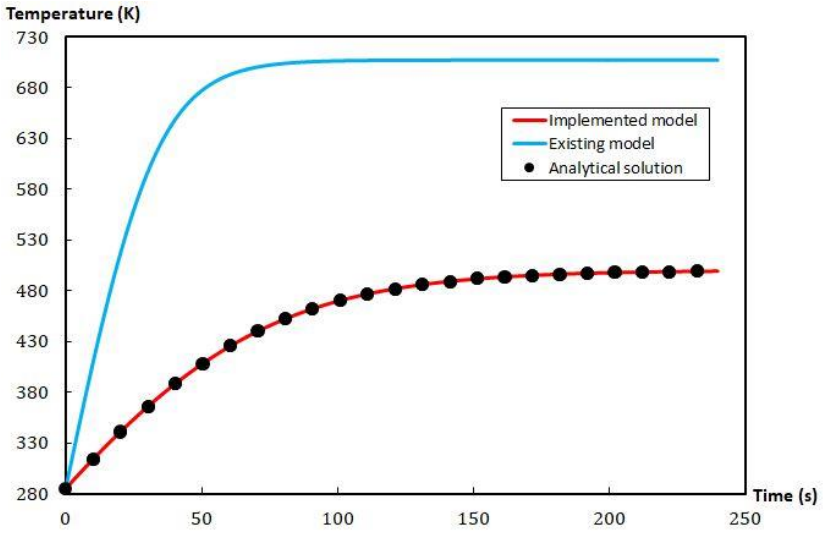

Fig. 6. Evolution of a thermocouple response in a simple test case, calculated with the existing model and the new implemented one. Both models are compared to the analytical solution.

Because the computed value of q_{in} is 3544 W.m^{-2} which is equal to σT_∞^4, the new model solves the same equation as the analytical theory. The existing model does not give satisfactory results. The value of G given by OpenFOAM is 14175 W.m^{-2}. It is worth noting that in this case, we have the equality $G/4 = q_{\text{in}} = \sigma T_\infty^4$. This equality can be demonstrated in this simple case but it is not true in general. Nevertheless, some numerical tests have systematically given the approximation $q_{\text{in}} \approx G/4$ with a good precision. Besides, the software FDS uses this approximation to provide thermocouple corrections. Therefore, the existing model could be extended to the one in FDS by replacing G by $G/4$

in the equation (8). Nonetheless, the new model gives more satisfactory and safer results because it is based on mathematical considerations.

All the considerations about the computation of the incident radiation are not applied to the simulation of the experiment because the thermocouples are shielded ($\epsilon = 0$). This assumption means that no radiation occurs between the measuring point and the sheath even if residual radiative fluxes can sometimes exist.

4.5 The horizontal velocity hypothesis

The measurements show that temperature is homogeneous in the hot layer. For instance, the figure 7 displays the temperatures measured in the hot layer at the tree T1. It is worth noting that the temperatures at the points T1_1 and T1_2 are similar despite a 50 cm vertical distance between both thermocouples. This well-known phenomenon has been observed for the three experimental fires.

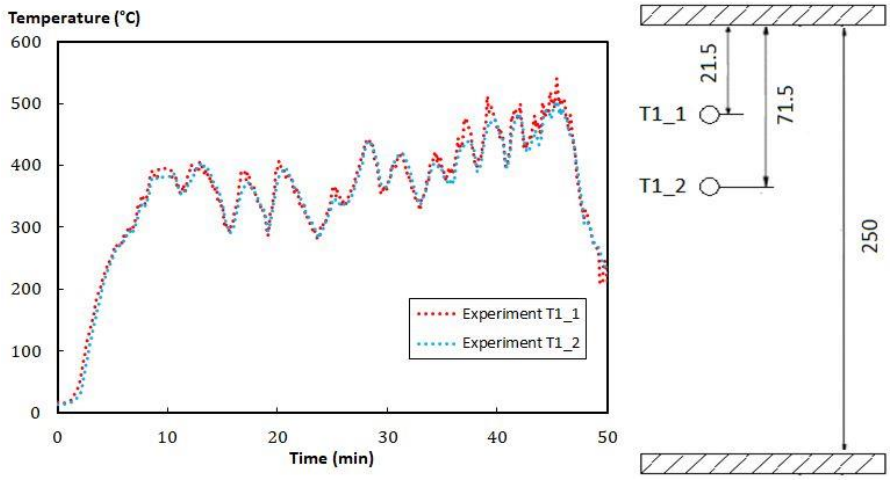

Fig. 7. On the left: measured temperature at the tree T1 at the points T1_1 and T1_2. On the right: cross section of the gallery near the tree T1, showing the vertical location (in cm) of the thermocouples.

Physically, this observation necessarily involves the absence of any energy flux between both points. Therefore, by dividing the flux into the three usual heat transfers (conduction, convection and radiation), we reach the equation: $\phi_{cond} + \phi_{conv} + \phi_{rad} \sim 0$.

There is no difference of temperature between both points so the conduction heat transfer is almost nil. The radiative transfer can be separated into two contributions for each point: the incident and the emitted radiative heat fluxes. We note A and B the two points. So, $\phi_{rad} = \phi_{in,A} - \phi_{em,A} - \phi_{in,B} + \phi_{em,B}$ with $\phi_{em} = \sigma T^4$. Since the temperatures are the same, $\phi_{em,A} \sim \phi_{em,B}$. Furthermore, the incident fluxes cannot be very different from one point to another as long as the distance between them stays relatively small. Consequently, $\phi_{in,A} \sim \phi_{in,B}$. We deduce that the radiative heat flux is worth about zero: $\phi_{rad} \sim 0$. Therefore, the absence of global heat transfer leads to $\phi_{conv} \sim 0$. The subsequent result of this property is the absence of vertical convective transfer between both points. Then, if a vertical velocity exists, a counter velocity is required to balance the flux. But, without any temperature gradient, there is no source of vertical motion because the effects of gravity on the layer are the same at every point. Consequently, only negligible vertical velocities can exist in a homogenous layer.

We point out that the absence of convective heat transfer within hot layers is already used in fire zone models (homogeneous layer temperature assumption), for instance in CFAST [56]. Moreover, there is no convective heat transfer between both layers. In the fire compartment, the only transfer between the layers occurs in the turning region (above the fire) in CFAST.

A simulation of the experiment with FireFOAM-4.0 cannot forecast this behavior. The vertical velocity is not low enough to prevent an excessive convective heat transfer. For little heat release rates (HRR), FireFOAM computes approximately two layers. But in such a confined geometry, the software does not simulate two layers correctly. Instead, a regular temperature gradient takes place as showed on the figure 8.

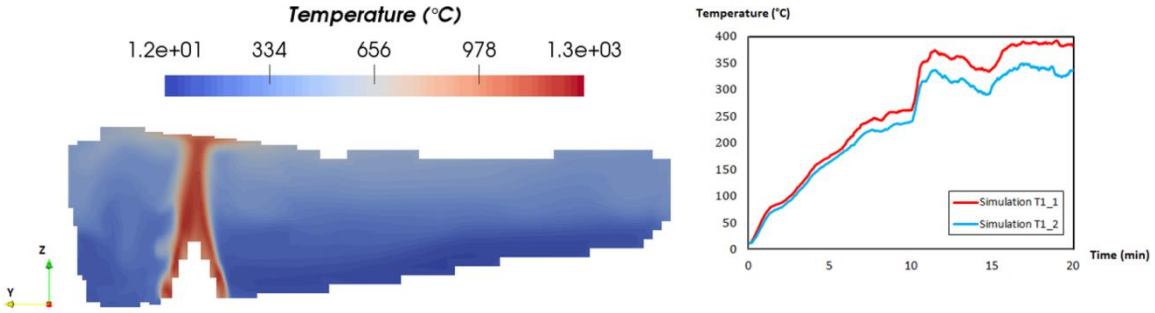

Fig. 8. On the left: numerical temperature field in the median section of the second gallery 20 minutes after the ignition of the combustion. On the right: simulated temperature at the tree T1 at the points T1_1 and T1_2.

Therefore, without enforcing velocity, the temperature profiles do not represent two distinct layers which is not acceptable in this study because it is not the reality. To avoid this major problem, we neglect the vertical convective heat transfer which FireFOAM overestimates. In order to keep the code architecture, we simply force the value of the z-velocity to 0 after each calculation of the velocity. This enforcement is not made in a zone ($r < 0{,}8$) a little greater than the turning region ($r < 0{,}4$). This assumption is schematically represented on Fig. 9.

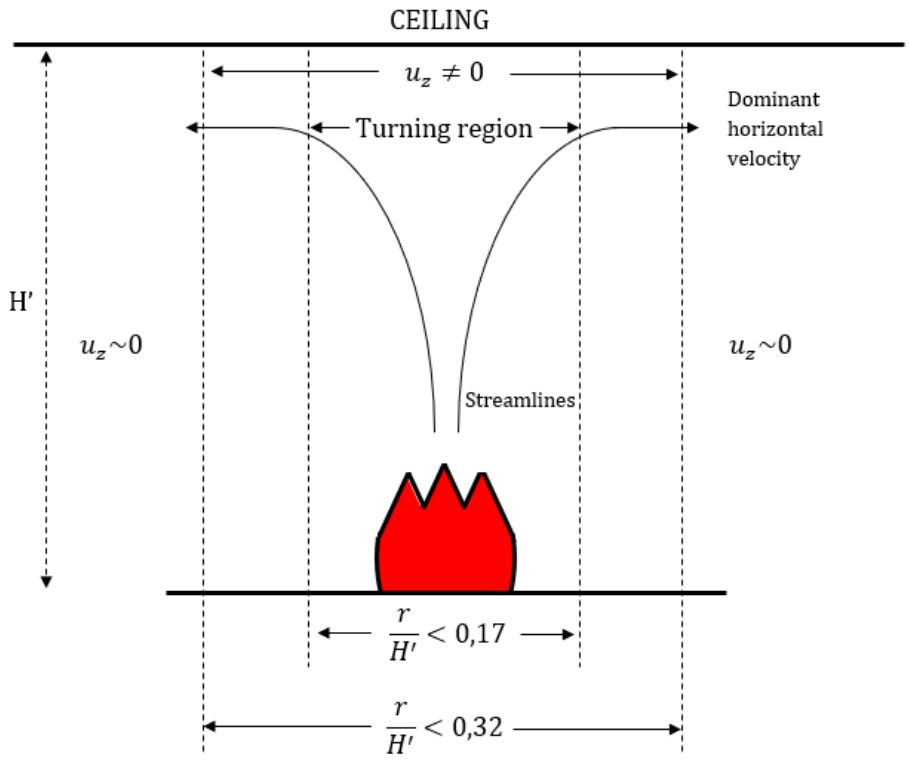

Fig. 9. Schematic representation of the horizontal velocity hypothesis. The enforcement is only applied far enough from the fire.

Moreover, we want to keep simulating the upward convection due to temperature gradient because it is necessary with an irregular ceiling which may have some recesses. Therefore, in each cell, if the temperature of the cell above is lower, we keep the calculated velocity without enforcing $u_z = 0$. By this way, we authorize the gases to rise in higher recesses.

Now, the gradient is not regular anymore and two layers are simulated by this modified FireFOAM version (Fig. 10). Consequently, the temperature remains almost homogeneous in the hot layer.

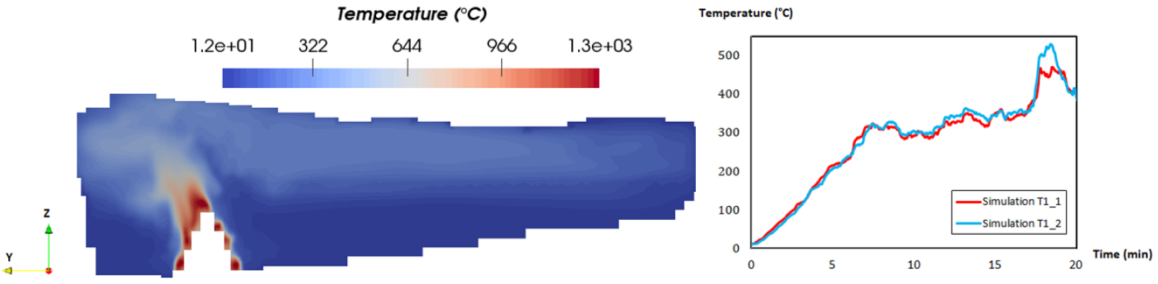

Fig. 10. On the left: numerical temperature field in the median section of the second gallery 20 minutes after the ignition of the combustion. On the right: simulated temperature at the tree T1 at the points T1_1 and T1_2. Both are performed without z-velocity outside the turning region.

The global comparison between experiment and simulation is presented with this assumption in the section 6.

5 Numerical setup

5.1 Geometry mesh

Thanks to photogrammetry techniques, a 3D survey of the quarry has been achieved (Fig. 1). The input file of the simulation thus consists in a CAD file of the quarry. Then, the meshing tool "snappyHexMesh" [57] meshes the geometry with specified size cells. Because of the domain scale and the duration of the fire (50 minutes), choices must be made to mesh the geometry. In this study, we are not interested in describing accurately the flame but rather having an acceptable description of the global environment. The computational domain is meshed with cells of 3 cm above the hearth, 6 cm cells in the hot layer and 12 cm cells in the remainder of the quarry (Fig. 11). The mesh includes about 290,000 cells. A cartesian mesh has been chosen because snappyHexMesh cannot properly manage unstructured meshes with centimeter-sized cells. Moreover, for the purpose of applying this modeling to the more complex Chauvet-Pont d'Arc cave geometry, structured meshes appear safer.

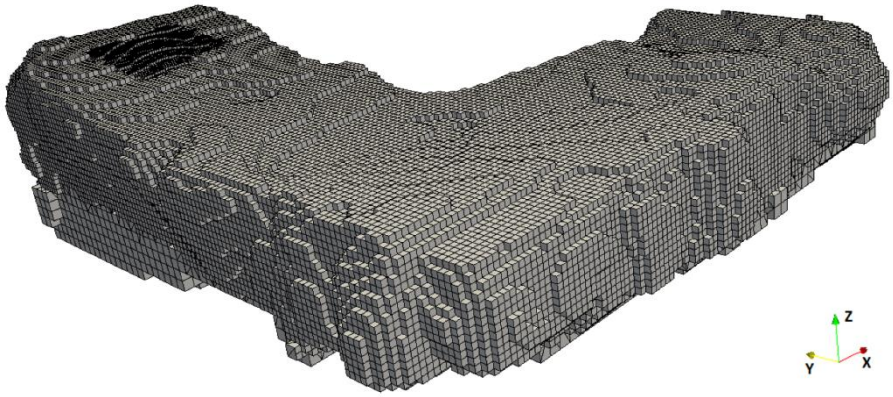

Fig. 11. 3D mesh of the quarry performed by the tool snappyHexMesh [57].

The hearth needs to be present and meshed as a wall in the simulation. Without it, the gases circulation would press the flame against the back of the gallery 2. Because of the sensitivity of FireFOAM, the hearth must be carefully meshed. The real teepee looks like a pyramid (Fig. 12) in the simulation in order to have plate burners numerically more stable.

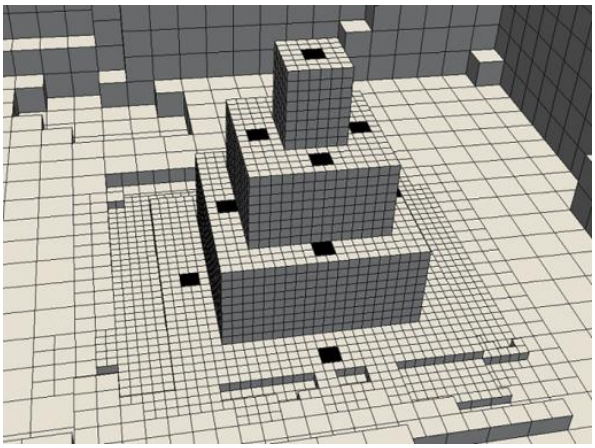

Fig. 12. 3D mesh of the hearth at the back of the gallery 2 with plate burners (black color).

5.2 Heat release rate boundary condition

The HRR is linked to the mass flow rate through the heat of combustion $HRR = \dot{m}\dot{Q}$**.** The mass flow rate boundary condition at the burners corresponds to the measures of the weighing scale. Plate burners are sporadically placed on the hearth (in black on Fig. 12). The mass flow rate boundary condition is only applied to the plate burners. On the rest of the pyramid, the velocity is fixed at 0 (as a wall).

Basically, the heat release rate (HRR) corresponds to the sum of the released chemical powers of all cells. So, a gap can exist between the prescribed boundary condition and the HRR calculated after the resolutions of the set of equations (1) if numerical errors happen. Some numerical tests show that the burner surface has a not expected great influence on the HRR. The surface appears in the computation of the mass flow rate through $\dot{m} = \rho U A_{Burner}$. Because the user specifies the value of the mass flow rate at the boundary, the surface should not affect the value of the HRR. To demonstrate that the contrary happens, a test case consisting in a square plate burner (in black on Fig. 13) within a cube is run. The mesh only includes cells of 3 centimeters.

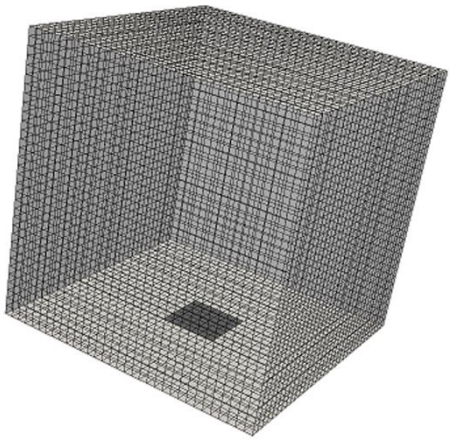

Fig. 13. 3D geometry of the test case corresponding to a cube. The plate burner is the black square (variable size depending on the configuration).

The mass flow rate is fixed at 0.02 kg/s at the burner and the cube walls are adiabatic. The heat of combustion being 12.5MJ/kg, the HRR must be 250 kW. 4 configurations with various areas are inspected (Table 2):

	Configuration 1	Configuration 2	Configuration 3	Configuration 4
Area (cm²)	9 x 9 cm²	21 x 21 cm²	39 x 39 cm²	57 x 57 cm²

Tab. 2. Plate burner areas for each configuration.

The results of all configurations are showed on Fig. 14. The expected HRR should fluctuate around 250 kW for all configurations. This is true for the first two configurations but not for the third and fourth one. To get a consistent numerical HRR, we must use a little area. The larger the area is, the more the numerical HRR is overestimated. Under a critical area, the HRR does not decrease anymore. 21 x 21 cm² configuration seems to be just under this critical area for 3 cm cells and this combustion. This area is chosen in the simulation of the experiment (Fig. 12). For other discretizations and combustions, a critical area still exists but might be different from the configuration 2.

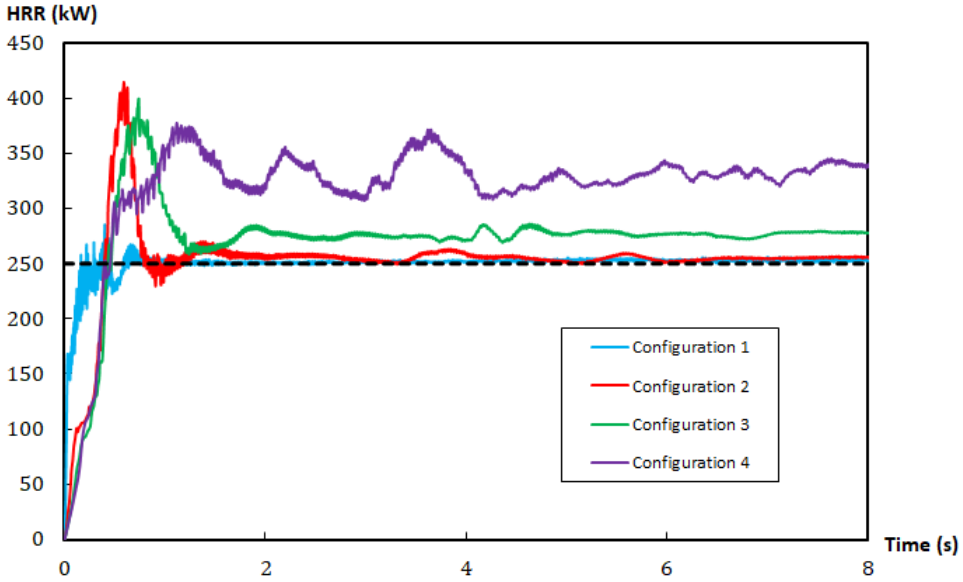

Fig. 14. Comparison between the numerical heat release rates of the four configurations. The dashed line corresponds to the theoretical HRR.

The comparison between the experimental and the numerical HRR is presented in the section 6.1.

5.3 Initial and boundary conditions

The hearth is considered as adiabatic. At the quarry walls, the temperature is calculated by the equation (5). The velocity is fixed at 0 everywhere except at the burners where the HRR is imposed through a velocity boundary condition (§5.2). All mass fractions satisfy zero Neumann boundary conditions at every wall. Outside the gallery, a big volume (20 x 20 x 80 m^3) is added to the quarry geometry to keep a stock of ambient air. At the walls of this volume, the temperature is fixed at 12°C like the initial condition.

5.4 Numerical considerations

Radiation requires the discretization of the space in 32 solid angles. Moreover, the radiative transfer equation (3) is solved once every 10 flow resolutions. Some tests were conducted with more solid angles and more frequent RTE resolutions (equation 3). In this study, both parameters do not have any influence beyond these values.

Finite volumes are used to solve the governing equations (1). The Courant number is limited to 0.6. A more restricted CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) condition does not improve the results but a higher Courant number reduce precision.

A decomposition of the domain is carried out in order to parallelize the calculation. 96 cores (8 processors) are used to perform the simulation on a Bullx DLC server with 4 x 24 cores Intel Haswell-EP Xeon 12-Cores E5-2690 V3 2.6 GHz. About 72 hours are needed to compute 50 minutes of combustion.

6 Results and discussion

This section presents the comparison between the experimental measures and the numerical results of the second fire. The comparison is made with this fire for measurement quality reasons. Temperatures,

velocities, gas concentrations, soot concentrations, fractional effective doses and soot deposits are the investigated parameters. When it is significant, the average error $\varepsilon = \frac{|v_{exp} - v_{simu}|}{v_{exp}}$ is provided.

6.1 Numerical Heat Release Rate

The numerical HRR is calculated at every time step as the sum of the parameter dQ which corresponds in OpenFOAM to the power released by chemical reactions. The experimental HRR is estimated from the mass flow rate and the assumption that the heat of combustion stays constant with a value of 12.5 MJ/kg. The figure 15 displays the comparison between both.

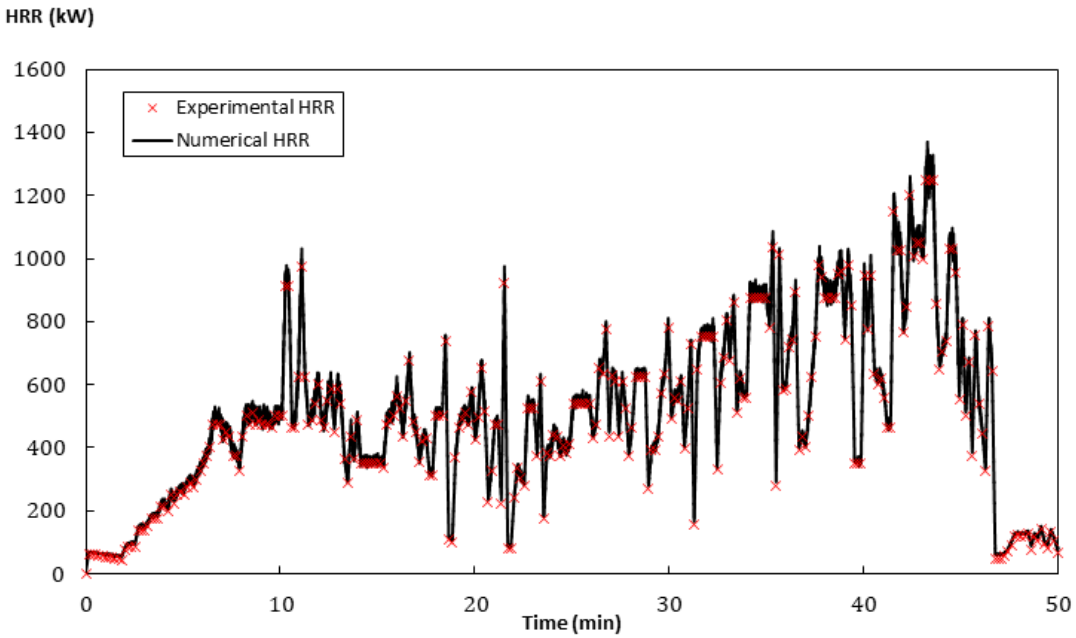

Fig. 15. Comparison between the numerical and the experimental HRR (Heat Release Rates).

Excepting for expected fluctuations, the numerical simulation is totally in accordance with the experimentation. The average error is $\varepsilon < 3\%$. It should be pointed out that we ensured this agreement with the value of the constant model C_c (equation 4) and the decrease of the numerical burner area. But the good trend with all the variations does not only stem from these careful choices. So, it validates the combustion modeling of the simulation.

6.2 Temperature

The simulated temperatures, corrected by the thermocouple model presented in §4.4, are compared to the measured ones for the thermocouples trees T1, T2 and T3 (Fig. 3). As expected, a strong thermal gradient takes place between the hot and cold layers during the main part of the experiment. After the establishment of the convection inside the quarry, the limit between both depends on the location in the quarry but remains around 1 m from the floor.

The first studied tree is T1. It is close to the fire at the back of the second gallery (Fig. 3). As described in §4.5, the thermocouples T1_1 and T1_2 desmonstrate that the temperature does not change on 50 cm (Fig. 16). Near the ceiling, the temperature exceeds 300°C during more than 40 minutes. The temperature sensor T1_3 is in the cold layer during the main part of the combustion excepting at the end when the existence of two layers can be challenged.

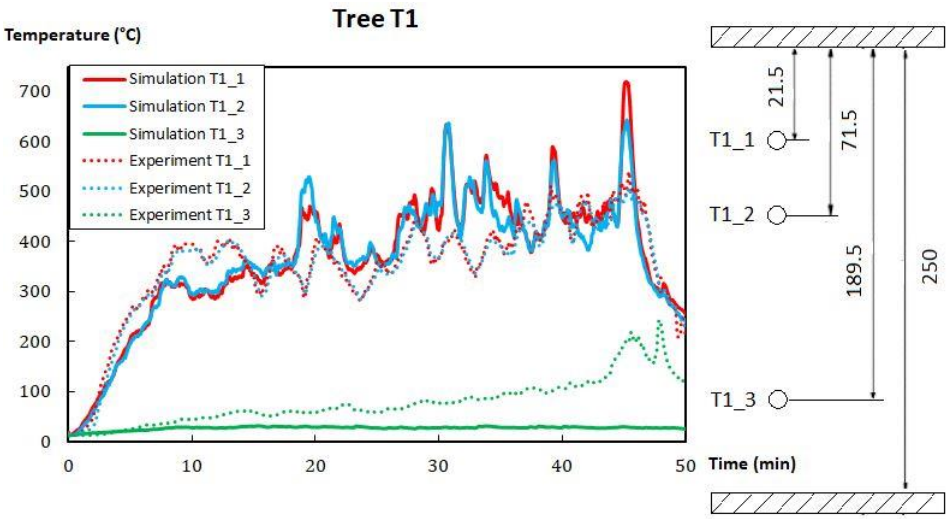

Fig. 16. On the left: comparison between the numerical and experimental temperatures at the tree T1. On the right: cross section of the gallery near the tree T1, showing the vertical locations (in cm) of the thermocouples.

In the simulation, thanks to the hypothesis of an exclusively horizontal velocity (§4.5), the temperature is almost homogeneous in the whole hot layer. Without it, the FireFOAM simulation of this experiment would have given quite higher temperatures in T1_1 than in T1_2. Moreover, the simulated temperature in the hot layer remains very close to the experimental one during the whole time of the fire. The average error for both points is less than 17%. The simulated temperature near the floor (T1_3) is colder than the experimental results, especially at the end of the experiment. It may be essentially due to the horizontal velocity assumption. Close to the fire, the heat transfer from the hot layer to the cold one could be important and the two layers might not be distinctly separated. Thereby, a vertical velocity could be not nil at the boundary between layers. Moreover, as we move away from the fire, the velocity becomes almost exclusively horizontal (Fig. 9). But, the tree T1 might be too close to the fire to consider that the assumption is entirely correct at T1. However, despite the likely excessive aspect of this assumption next to the fire, it yields better results than without it, even for the cold layer.

The tree T2 is also near the fire and the distance from the fire is similar to the tree T1 (Fig. 3). However, this tree is closer to the entrance of the gallery than T1. The experimental temperatures look like those of the first tree but T2_1 is colder than T1_1 (Fig. 17). Because the first tree is trapped between the fire and the back of the gallery 2, the gases are hotter around the tree T1. The sensor T2_2 comes in the hot layer about 30 minutes after the ignition. The last thermocouple stays in the cold layer and is slightly affected by the fire.

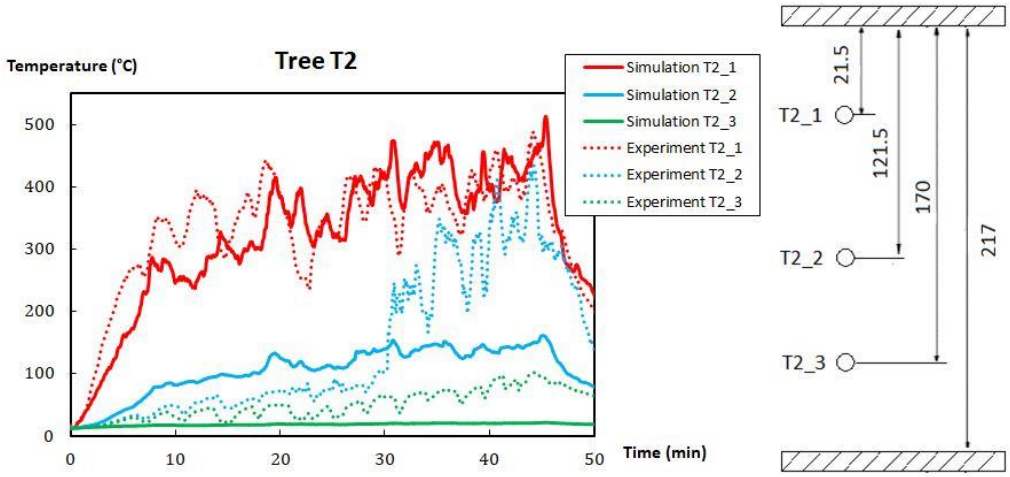

Fig. 17. On the left: comparison between the numerical and experimental temperatures at the tree T2. On the right: cross section of the gallery near the tree T2, showing the vertical locations (in cm) of the thermocouples.

Like the tree T1, the simulated temperature near the ceiling (T2_1) is reliable (average error inferior to 16%). Concerning the two others, the simulation globally underestimates the temperatures. The medium temperature (T2_2) is tough to analyze because this point is somehow between both layers. So, the measured temperature is very different over a few centimeters. The difference of temperature can come only from a little gap between both locations. Nevertheless, like the coldest one, the simulation gives a lower temperature than expected. The previous conclusions about the proximity to the fire can be transposed to this tree. There is not enough heat transfer to the cold layer.

Eventually, the tree T3, which is the farthest from the fire, is analyzed. The comparison is presented on the figure 18.

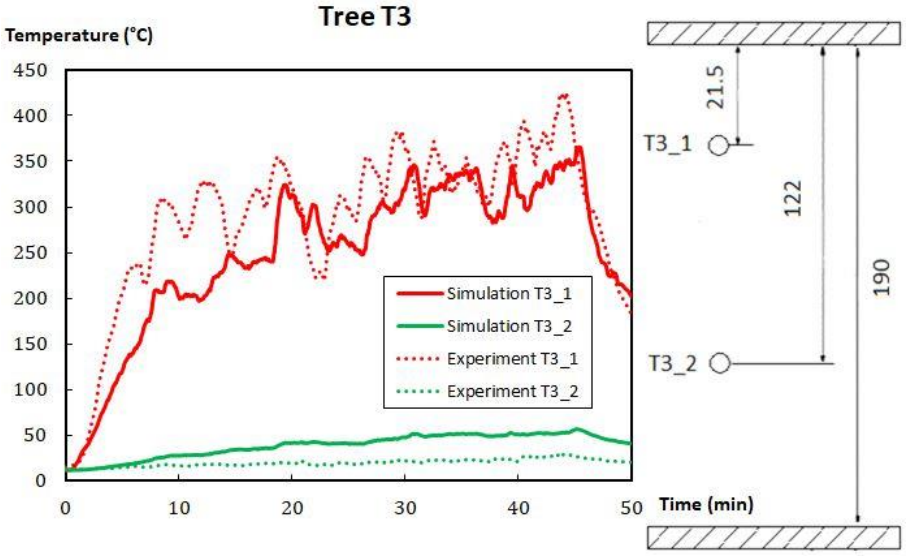

Fig. 18. On the left: comparison between the numerical and experimental temperatures at the tree T3. On the right: cross section of the gallery near the tree T3, showing the vertical locations (in cm) of the thermocouples.

In the cold layer (T3_2), the temperature is not affected by the fire. The simulation is then in accordance with the reality even though a temperature increase dwells until the end of the combustion. But, the error remains acceptable considering that the deviation does not exceed 30°C. In the hot layer, the trend is well described by the simulation and the temperature is very comparable to the experiment. The average error is inferior to 17%. But, the simulated hot layer is slightly colder than the measure, especially during the beginning. The hot layer seems to be too thick in the simulation. The energy is spread out on a larger volume and because it is less concentrated, the upper temperature is too low and the bottom temperature is too high. Even with the assumption of an exclusively horizontal velocity, it turns out to be difficult to compute the thickness of both layers as we move away from the fire. These troubles can be the expression of the accumulation of inaccuracies due to coarse discretization. FireFOAM being very costly, we are limited in the number of cells. And even if some tests were made with finer discretizations without major changes, we cannot rule out this source of error.

6.3 Gases and particles concentration

The gases concentration was measured at the point T3_1 (Fig. 3). Sensors measured the concentration of three gases: dioxygen, carbon dioxide and carbon monoxide (Fig. 19). The dioxygen decreases until about 16% and then oscillates around this value with the wood supply. The carbon dioxide (CO_2) increases until a value of about 5% and stays at this order of magnitude during the fire. This value can cause pathologies if the residence time is too important. The carbon monoxide (CO) increases sharply and reaches a 1000 ppm concentration, which is not fatal for a human. The toxicity evaluation of the gases mixture within the whole quarry will be treated in the section 6.5.

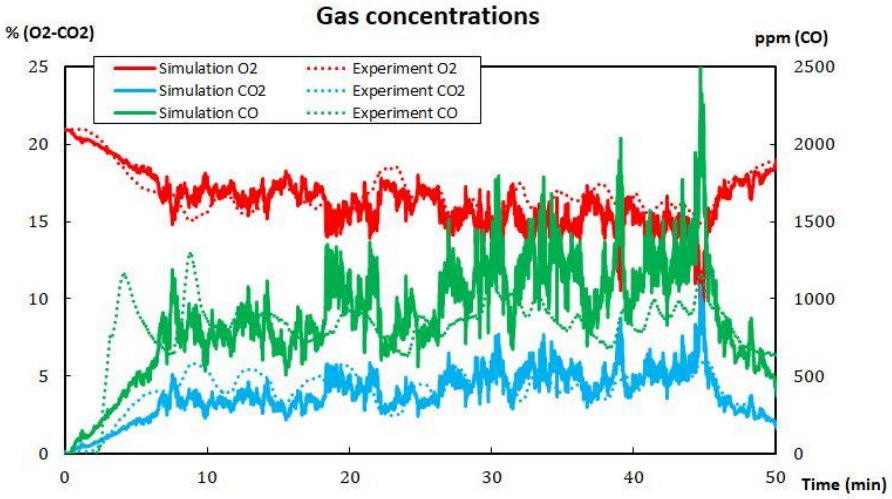

Fig. 19. Comparison between the numerical and experimental gases concentration at the point T2_1.

The simulation of the gases concentrations gives very satisfactory results. The dioxygen and the CO_2 are very well described and the average errors are 6% and 21% respectively. The experimental curves follow the numerical concentrations. The carbon monoxide is also similar to the experiment even if the gap between experiment and simulation is higher than the two others ($\varepsilon = 27\%$). It should be noted that the numerical results highly depend on the chemical reaction and the stoichiometric coefficients which were chosen to fit with the experimental results (section 3.4). Therefore, the range of the concentrations cannot be fully inaccurate. But the simulated trends are comparable with the measures and this point does not only stem from the stoichiometric coefficients. Indeed, the good description of the temperature at this point allows precise gases concentrations computations. A bad description of gases circulation would be a crippling handicap.

In the same way, we measured the soot concentration 18 cm below the ceiling at the point S1 (Fig. 3). Similarly, the simulated soot concentration is very accurate during all the combustion except at the beginning (Fig.20). It can be explained by the crossing of water vapor stemming from wood drying at the ignition. The amount of aerosols is large at the ignition of such wood fires. The establishment of the combustion takes time and the soot production is higher than for the rest of the fire. The simulation does not take this effect into account because the stoichiometric coefficient of soot remains constant. Excepting this spike, the simulation is conformed with the measures. Without considering the first five minutes, the average gap between simulation and experiment is 22%.

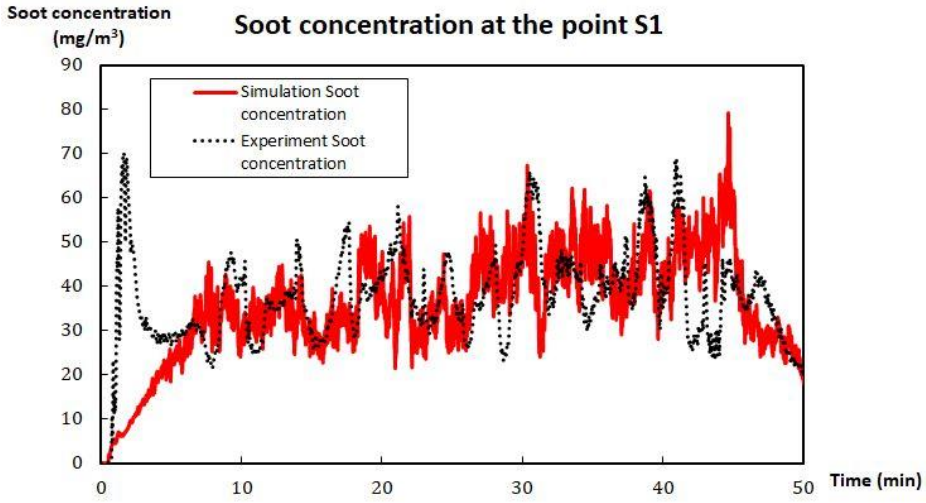

Fig. 20. Comparison between the numerical and experimental soot concentrations at the point S1.

The soot deposit comparison at two points (S1 and S2) reveals that simulation and experiment are not in the same order of magnitude, especially for the point S1 (Table 3):

Point	Experiment	Simulation
S1	0.84 mg	0.72 mg
S2	3.09 mg	0.54 mg

Tab. 3. Soot deposits at the points S1 and S2.

Several issues may explain the difference. First, the temperature gradient is very small near the wall. Therefore, the main processus of soot deposition could be another one than thermophoresis which is based on temperature gradient. Furthermore, the convective heat transfer is modeled from empirical formulations (see §4.1). The grid size is important in such a method as demonstrated in [58]. More generally, the inaccuracies could stem from the treatment of convective heat transfer to the walls. Estimating soot deposit on walls seems to require a precise method such as wall-resolved LES. As a result, we think that empirical formulations are not advanced enough to work out the soot deposition issue.

Nonetheless, this model informs about the smoke path during the combustion because of the borderline of the deposition (Fig. 21). It is an important matter for prehistorical fires because only the observation of soot deposit is possible. The numerical limit of deposition matches very well with the visual observation achieved after the end of the combustion.

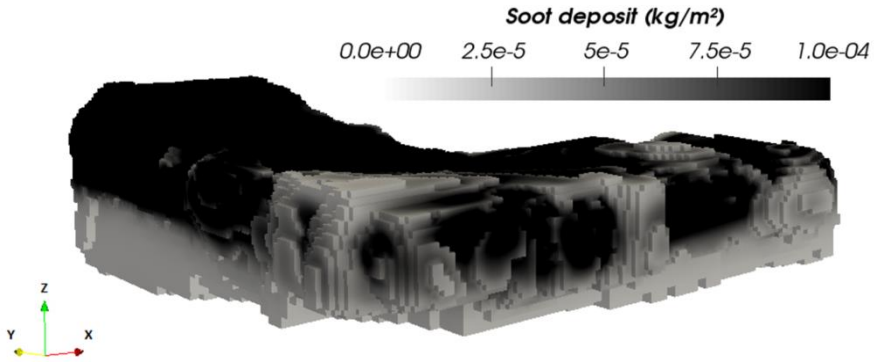

Fig. 21. Simulated soot deposit on the walls of the galleries.

6.4 Velocity

As previously mentioned in the section 2.2, two velocity sensors were placed at the entrance of the first gallery in order to measure the velocity in both layers. As expected, the velocity in the hot layer was higher than in the cold layer considering that the cold layer is larger with denser gases. The comparison with the numerical simulation is described on the figure 22.

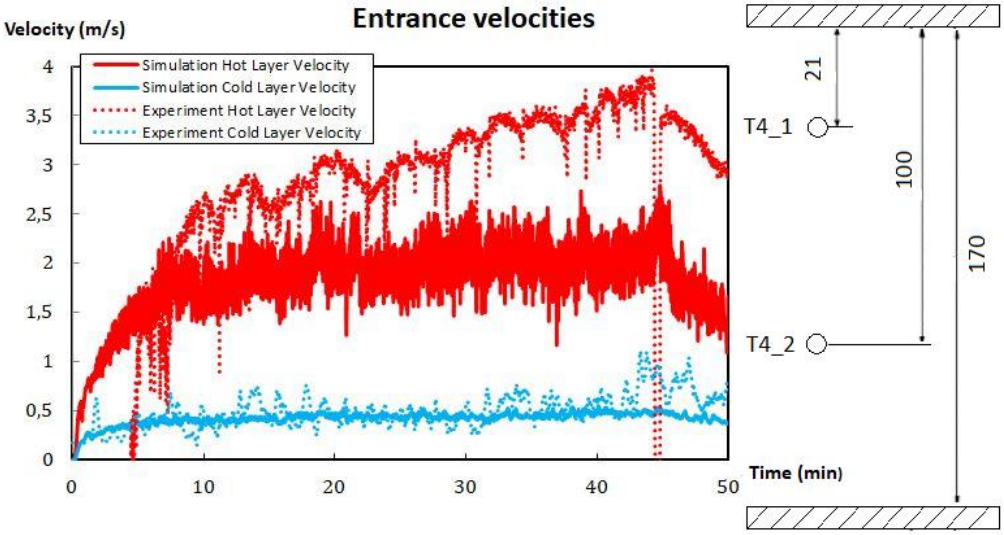

Fig. 22. On the left: comparison between the numerical and experimental velocities at the tree T4. On the right: cross section of the gallery near the tree T4, showing the vertical locations (in cm) of the velocity sensors.

The speed of outgoing flow is well simulated and the average is in the good range. Overall, the simulated cold layer velocity is in accordance with the experiments ($\varepsilon = 24\%$). However, at the end, a little error exists. Because of the HRR increase, the experimental velocity reaches a higher value. In the simulation, the upper velocity does not exceed 2.5 m/s. The experiment shows an increase until about 4 m/s at 45 minutes. This big gap ($\varepsilon = 36\%$) could be explained by the accumulation of inaccuracies from the fire to the entrance. The tree T4 is the farthest removed from the fire and consequently, it is the least accurate. This error could also be explained by the ceiling jet phenomenon. The sensor could be at the height of the maximum velocity. But the cells size in the hot layer is 6 cm. Hence, the simulation only gives an average of the hot layer velocity without being able to describe the velocity variation (see §4.1). The numerical velocity is then lower than the experimental one.

6.5 Fractional effective dose (FED)

The fractional effective dose for gases 50 minutes after the ignition is displayed on the figure 23.

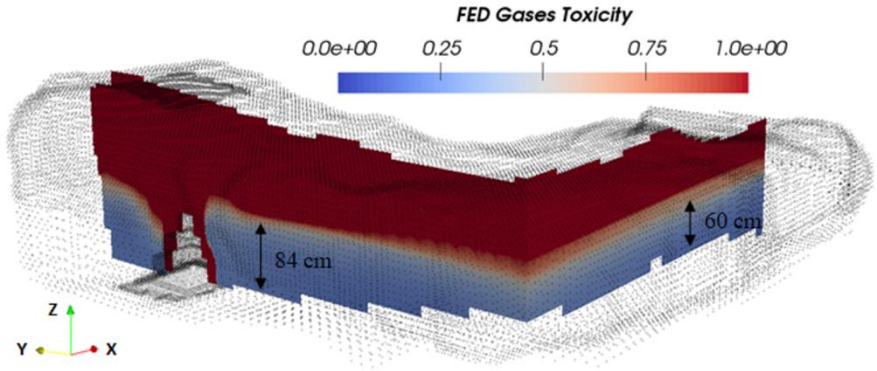

Fig. 23. Numerical estimation of the fractional effective dose for gases 50 minutes after the ignition in the median sections of both galleries.

As a reminder, half of people subjected to a FED of 1 are in the incapacity of leaving by themselves. So, the red color means that the location is very dangerous and may be lethal. But when the FED is worth 0.3, 11.4% of people cannot leave by themselves. Therefore, a great hazard is still present while the color is not clearly blue. The figure 23 shows the toxicity danger in the quarry during the experiment. Even close to the ground, everybody could risk serious trouble, fatal or not. This observation was expected because staying 50 minutes in such an environment is obviously unsafe.

The fractional effective dose for radiation and temperature 50 minutes after the ignition is displayed on the figure 24.

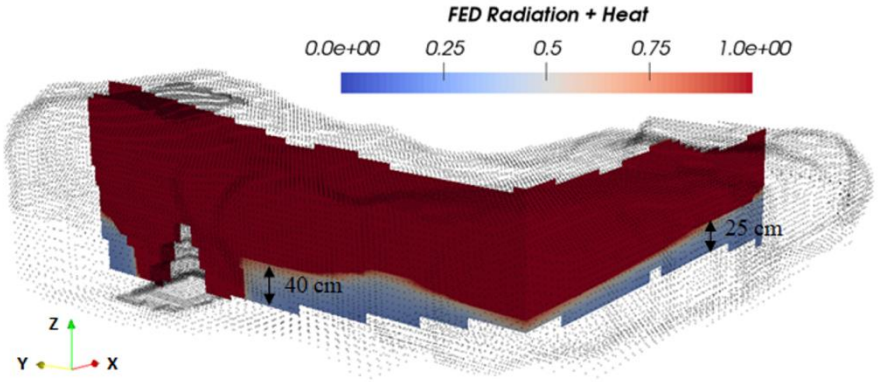

Fig. 24. Numerical estimation of the fractional effective dose for radiation and heat 50 minutes after the ignition in the median sections of both galleries.

Once again, the red color indicates a death rate of at least 50%. However, near the ceiling, the FED is far higher than 1. Being in this area definitely implies the death. In the gallery 1, even a person lying on the floor would be in the critical red area. Besides, within the whole quarry, the minimal value for this FED is 0.2. In any locations, the human presence is very unsafe and the intervention of the fire department to supply the hearth was absolutely legitimate.

An interesting point is the comparison between both FED. The radiation and the temperature in this experiment are more constraining than the toxicity. The gases are dangerous but for intense fires like

these ones, the gases circulation is important and the toxic gases escape. In the cold area, the hazard exclusively stems from radiation because the temperature is cold enough to be bearable. Yet, the cold area is the safer location in such a fire. Therefore, radiation is the main threat that avoids human beings to remain in the galleries, close to the ground. The hot layer gases radiate too much energy to dwell on the floor without burning injuries. However, in confined caves, toxicity could be the main risk factor far enough from the fire, where prehistorical men could stay during the combustion.

7 Conclusion

Driven by archeological questions, an experiment is carried out in a former underground quarry. Three identical wood hearths are burned in order to test the reproducibility of such a combustion. The typical dimensions of the quarry make the results applicable to most of galleries, tunnels and mines. Various sensors are positioned throughout the gallery to measure gases and particles concentrations, temperatures and velocities. Some plates are fixed to the walls in order to collect the deposited soot. Then, the experimental measures are compared with the simulation performed by the numerical tool FireFOAM [22].

Three contributions have to be added to the program to get consistent results. First, a thermal boundary condition is needed to estimate the losses through the walls correctly. The ceiling jet phenomenon is modeled by an appropriate convective heat transfer estimation. Secondly, a thermocouple correction is implemented to compare measures with simulation aptly. A test case reveals a significant gap between the existing model and the implemented one which exactly gives the analytical solution. Finally, in light of the experimental results, an assumption on the vertical velocity is required to simulate a meaningful solution. The velocity is considered exclusively horizontal outside the fire region except in the cells where the upper temperature is lower than the cell temperature. This enforcement suitably allows the simulation of two levels of stratification. This hypothesis seems to be valuable for the FireFOAM simulations of localized fires in confined geometries with opening.

The simulation of the experimental fire with FireFOAM is satisfactory. The comparison reveals a good agreement with the measures of temperatures, gases and particles concentrations. The velocity range of the cold layer also fits to the experiment. These results validate the modeling with FireFOAM and allow its application to the Chauvet-Pont d'Arc cave. The gap between simulation and experiment is small enough to characterize the fires of the Chauvet-Pont d'Arc cave efficiently.

In the purpose of improving the information about the environment, the soot deposition is estimated by the Beresnev-Chernyak model [49]. Even though the simulation does not successfully assess the amount of particles deposited on the quarry walls, the limits match with the visual observations. The hazard due to toxicity, radiation and temperature is calculated by means of the fractional effective dose (FED). In this study, the convection is efficient enough to evacuate gases and the greatest hazard turns out to be radiation. Therefore, the main hazard in a cavity such as the Chauvet-Pont d'Arc cave is likely radiation. This observation is of great importance for the supply of the hearth. Radiation is the more constraining danger in a gallery to supply the fireplace.

Great care should be given to the numerical heat release rate (HRR) in FireFOAM. The burner area has an important impact on the numerical HRR value. The mass flow rate imposed on the burner is not sufficient to ensure the same flow rate after the calculation of the species transport. In this simulation, we carefully design the hearth to provide the same HRR as the experimental one.

In the future, this modified version of FireFOAM will be used to simulate several fire scenarios in the Chauvet-Pont d'Arc cave. It should allow the discussion about the possible characteristics of these Paleolithic hearths. Afterwards, this modeling will be used in other archeological cavities with similar matters. Then, it could be used in more general contexts such as galleries, tunnels, mines or whichever comparable places.

8 Acknowledgements

We wish to thank the Regional Council of Aquitaine and Nouvelle-Aquitaine for providing funding for the CarMoThap project and for their investment in a 432-processor cluster located in the I2M laboratory. The researches in the Chauvet-Pont d'Arc cave have received specific financial help from the Ministry of Culture and Communication. We thank the LCPP (Laboratoire Centrale de la Préfecture de Police) for their help in the experiment instrumentation (velocity sensors, thermocouples, gases and particles concentrations). Furthermore, the following institutions have given support: CNRS, Bordeaux University, Bordeaux-Montaigne University. We thank C. Bouchet, the owner of the quarry in Fauroux (Lugasson) and M. Vidal for having made available scots pine, as well as SDIS 33 staff for the participation in the experiments of the CarMoThaP program. We also express our gratitude to M. Corbé, L. Bassel, M. Bosq, E. Florensan, J. Sabidussi and C. Verdet for their precious help for wood packaging and their involvement in November 2016 experiments.

This work was also performed using HPC resources from GENCI-CINES (Grant 2017-A0032B10268).

9 References

[1] A. Trouvé and Y. Wan, Large eddy simulation of compartment fires, *Intl. J. Comput. Fluid Dyn.*, vol. 24, pp. 449-466, 2010.

[2] S. Yuan et J. Zhang, Large eddy simulation of compartment fire with solid combustibles, *Fire Safety Journal*, vol. 44, n° 13, pp. 349-362, 2009.

[3] W. Zhang, A. Hamer, M. Klassen, D. Carpenter et R. Roby, Turbulence statistics in a fire room model by large eddy simulation, *Fire Safety Journal*, vol. 37, n° 18, pp. 721-752, November 2002.

[4] X. Zhang, Y. Guo, C. Chan et W. Lin, Numerical simulations on fire spread and smoke movement in an underground car park, *Building and Environment*, vol. 42, n° 110, pp. 3466-3475, 2007.

[5] X. Deckers, S. Haga, N. Tilley et B. Merci, Smoke control in case of fire in a large car park : CFD simulations of full-scale configurations, *Fire Safety Journal*, vol. 57, pp. 22-34, 2013.

[6] C. Hwang et J. D. Wargo, Experimental study of thermally generated reverse stratified layers in a fire tunnel, *Combustion and Flame*, vol. 66, n° 12, pp. 171-180, November 1986.

[7] J. S. Newman et A. Tewarson, Propagation in Ducts, *Combustion and Flame*, vol. 51, pp. 347-

355, 1983.

[8] C. Caliendo, P. Ciambelli, M. D. Guglielmo, M. Meo et P. Russo, Simulation of fire scenarios due to different vehicle types with and without traffic in a bi-directional road tunnel, *Tunnelling and Underground Space Technology*, vol. 37, n° 11, pp. 22-36, 2013.

[9] W. Hsu, Y. Huang, T. Shen, C. Cheng et T. Chen, Analysis of the Hsuehshan Tunnel Fire in Taiwan, *Tunnelling and Underground Space Technology*, vol. 69, pp. 108-115, October 2017.

[10] J. Stenis et W. Hogland, Fire in waste-fuel stores: risk management and estimation of real cost, *Journal of Material Cycles and Waste Management*, vol. 13, n° 13, pp. 247-258, 2011.

[11] H. Wan, Z. Gao, J. Ji, Y. Zhang et K. Li, Experimental and theoretical study on flame front temperatures within ceiling jets from turbulent diffusion flames of n-heptane fuel, *Energy*, vol. 164, pp. 79-86, 2018.

[12] S. E. Zadeh, G. Maragkos, T. Beji et B. Merci, Large Eddy Simulations of the Ceiling Jet Induced by the Impingement of a Turbulent Air Plume, *Fire Technology*, vol. 52, n° 16, pp. 2093-2115, 2016.

[13] C.-S. Ahn, B.-H. Bang, M.-W. Kim, T.-G. Kim, S. C. James, A. L. Yarin et S. S. Yoon, Numerical investigation of smoke dynamics in unconfined and confined environments, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 127, n° 1 Part B, pp. 571-582, 2018.

[14] A. Bordard, P. Guibert, C. Ferrier, E. Debard, B. Kervazo et J. Geneste, Les rubéfactions des parois de la grotte Chauvet : une histoire de chauffe ?, chez *Les arts de la Préhistoire : micro-analyses, mises en contextes et conservation, Paillet P. (dir)*, 2014.

[15] E. Debard, C. Ferrier et B. Kervazo, Etude géologique de la grotte Chauvet-Pont d'Arc. Bilan des travaux de la triennale 2010-2012, *Etudes pluridisciplinaires à la grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche). Rapport d'activité 2010-2012*, vol. 1, pp. 59-98, 2012.

[16] L. Liedgren, G. Hörnberg, T. Magnusson et L. Östlund, Heat impact and soil colors beneath hearths in northern Sweden, *Journal of Archaeological Science*, vol. 79, pp. 62-72, 2017.

[17] A. Quiles, H. Valladas, H. Bocherens, E. Delque-Kolic, E. Kaltnecker, J. v. d. Plicht, J.-J. Delannoy, V. Feruglio, C. Fritz, J. Monney, M. Philippe, G. Tosello, J. Clottes et J.-M. Geneste, A high-precision chronological model for the decorate Upper Paleolithic cave of Chauvet-Pont d'Arc, Ardèche, France, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 113, n° 117, pp. 4670-4675, 2016.

[18] P. Guibert, A. Brodard, A. Quilès, J.-M. Geneste, D. Baffier, E. Debard et C. Ferrier, When were the walls of the Chauvet Pont-d'Arc Cave heated ? A chronological approach by thermoluminescence, *Quaternary Geochronology*, vol. 29, pp. 36-47, 2015.

[19] C. Ferrier, E. Debard, B. Kervazo, A. Brodard, P. Guibert, D. Baffier, V. Feruglio, B. Gely, J. Geneste et F. Maksud, Les parois chauffées de la grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche): caractérisation et chronologie, *Paléo*, vol. 25, pp. 59-78, 2014.

[20] D. Lacanette, J. Mindeguia, A. Brodard, C. Ferrier, P. Guibert, J. Leblanc, P. Malaurent et C. Sirieix, Simulation of an experimental fire in an underground limestone quarry for the study of Paleolithic fires, *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 120, pp. 1-18, 2017.

[21] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, C. Weinschenk et K. Overholt, Fire Dynamics Simulator User's Guide, Sixth edition 1019, NIST Special Publication, 2013. Available: https://pages.nist.gov/fds-smv/manuals.html.

[22] FireFOAM. Available: http://www.fmglobal.com/modeling.

[23] OpenFOAM. Available: http://www.openfoam.org/.

[24] G. Maragkos et B. Merci, Large Eddy Simulations of CH4 Fire Plumes, *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 99, n° 11, pp. 239-278, 2017.

[25] G. Maragkos, T. Beji et B. Merci, Towards predictive simulations of gaseous pool fires, *Proceedings of the Combustion Institute*, 2018 (in press).

[26] Y. Wang, P. Chatterjee et J. L. d. Ris, Large eddy simulation of fire plumes, *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, n° 12, pp. 2473-2480, 2011.

[27] S. Vilfayeau, N. Ren, Y. Wang et A. Trouvé, Numerical simulation of under-ventilated liquid-fueled compartment fires with flame extinction and thermally-driven fuel evaporation, *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 35, n° 13, pp. 2563-2571, 2015.

[28] D. Le, J. Labahn, T. Beji, C. B. Devaud, E. Weckman et A. Bounagui, Assessment of the capabilities of FireFOAM to model large-scale fires in a well-confined and mechanically ventilated multi-cimpartment structure, *Journal of Fire Sciences*, vol. 36, n° 11, pp. 3-29, 2018.

[29] G. Maragkos, T. Beji et B. Merci, Advances in modelling in CFD simulations of turbulent gaseous pool fires, *Combustion and Flame*, vol. 181, pp. 22-38, 2017.

[30] F. Salmon, C. Ferrier, D. Lacanette, J. Leblanc, J. Mindeguia et C. Sirieix, Simulation numérique des feux et des thermo-altérations de la grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche), chez *GMPCA*, Rennes, 2017.

[31] V. Dréan, G. Auguin, J.-C. Leblanc, D. Lacanette, J.-C. Mindeguia, A. Bellivier and C. Ferrier, Numerical modelling of thermal conditions during fires in cave-like geometry, *Proceedings of the 15th International Conference Fire and Materials*, pp. 64-65, 2017.

[32] T. Lanki, J. Tikkanen, K. Janka, P. Taimisto et M. Lehtimäki, An electrical sensor for long-term monitoring of ultrafine particles in workplaces, *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 304, n° 11, 2011.

[33] A. Bellivier, A. Coppalle, A. Loo, J. Yon, L. Decoster, S. Dupont et H. Bazin, Comparison and Assessment of Particle Mass Concentrations Measurements in Fire Smokes with a Microbalance, Opacimeter and PPS Devices, *10th AOSFST, October 5-7, 2015, Tsukuba, Japan.*

[34] M. Chase, NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth edition, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, n° 1Mongraph No. 9, 1998.

[35] B. Poling, J. Prausnitz et J. O'Connell, The properties of gases and liquids, McGraw-Hill Education, 1987.

[36] W. Sutherland, The viscosity of gases and molecular force, *Philosophical Magazine*, vol. S. 5, pp. 507-531, 1893.

[37] A. Yoshizawa, Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling, *Physics of Fluids*, vol. 29, n° 17, pp. 2152-2164, 1986.

[38] V. Tihay, Y. Perez-Ramirez, F. Morandini, P. Santoni et T. Barboni, Heat transfers and energy released in the combustion of fine vegetation fuel beds, *21ème Congrès Français de mécanique*, 2013.

[39] W. Grosshandler, A Narrow-Band Model for Radiation Calculations in a Combustion Environment, *NIST Technical Note 1402*, 1993.

[40] S. Sazhin, An Approximation for the Absorption Coefficient of Soot in a Radiating Gas, *Manuscript, Fluent Europe*, 1994.

[41] B. Magnussen et B. Hjertager, On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, *Proc. Combust. Int*, pp. 719-729, 1977.

[42] C. Verdet, Y. Anguy, C. Sirieix, R. Clément et C. Gaborieau, On the effect of electrode finitnessin small scale electrical resistivity imaging, *Geophysics*, 2018.

[43] C. Bonacina, G. Comini, A. Fasano et M. Primicerio, Numerical solution of phase-change problems, *Int J Heat Mass Transf*, vol. 16, pp. 1825-1832, 1973.

[44] R. Alpert, SPFE Handbook of Fire Protection Engineering, Chapter Ceiling Jet Flows, National Fire Protection Association, Quincy, Massachusetts, fourth edition, 2008.

[45] J. Holman, Heat Transfer, New York: McGraw-Hill, 7th edition, 1990.

[46] Y. Jaluria et L. Cooper, Negatively buoyant wall flows generated in enclosure fires, *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 15, pp. 159-182, 1989.

[47] L. Cooper, Ceiling Jet-Driven Wall Flows in Compartment Fires, *Combustion Science and Technology*, vol. 62, n° 14-6, pp. 285-296, 1988.

[48] L. Cooper, Ceiling Jet Properties and Wall Heat Transfer in Compartment Fires Near Regions of Ceiling-Jet Wall Impingement, *National Bureau of Standards NBSIR*, Vols. 1 sur 286-3307, 1986.

[49] S. Beresnev et V. Chernyak, Thermophoresis of s spherical particle in a rarefied gas: Numerical analysis based on the model kinetic equations, *Physics of Fluids*, vol. 7, pp. 1743-1756, 1995.

[50] B. Sagot, G. Antonini et F. Buron, Annular flow configuration with high deposition efficiency for the experimental determination of thermophoretic diffusion coefficients, *Journal of Aerosol Science,* vol. 40, n° 112, pp. 1030-1049, 2009.

[51] E. Brugière, *PhD thesis,* INSA (Rouen), 2012.

[52] D. Purser et J. McAllister, SPFE Handbook of Fire Protection Engineering, chapter Assessment of Hazards to Occupants from Smoke, Toxic Gases, and Heat, Springer, 2016.

[53] L. Speitel, Fractional effective dose model for post-crash aircraft survivability, *Toxicology,* vol. 115, pp. 167-177, 1996.

[54] D. Purser, Physiological effects of combustion products and fire hazard assessment, *Europacable Seminar "Safety during Fire",* 6 May 2009.

[55] OpenFOAM-Thermocouple. Available: https://www.openfoam.com/releases/openfoam-v1612+/post-processing.php.

[56] R. Peacock, W. Jones, R. Bukowski et G. Forney, CFAST-Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport (Version 6) Technical Reference Guide, 2005.

[57] SnappyHexMesh. Available: https://openfoam.org/?s=snappyhexmesh.

[58] K. Overholt, J. Floyd et O. Ezekoye, Computational Modeling and Validation of Aerosol Deposition in Ventilation Ducts, *Fire Technology,* vol. 52, pp. 149-166, 2016.

Simulation aéro-thermo-mécanique des effets du feu sur les parois d'un milieu confiné. Application à l'étude des thermo-altérations de la grotte Chauvet-Pont d'Arc

Résumé
La grotte Chauvet-Pont d'Arc (Ardèche, France) renferme des œuvres pariétales parmi les plus anciennes découvertes. Elles sont de plus accompagnées par des traces de chauffes sur les parois. Ces marques résultent de feux d'une intensité unique absents des autres grottes ornées. Les archéologues s'interrogent ainsi sur la ou les fonctions de tels feux situés pour certains dans une zone très étroite, la Galerie des Mégacéros. La première étape dans la compréhension de ces feux est leur caractérisation. Pour des raisons de conservation, la simulation numérique est l'outil le plus simple permettant la réalisation de scénarios de feux dans la géométrie de la grotte. Basée sur des expérimentations dans une ancienne carrière, une modélisation numérique est donc élaborée. Puis, à partir des marques observables aujourd'hui sur les parois, cette modélisation permet de déterminer les scénarios plausibles.

Mots clés
Grottes ornées, Chauvet-Pont d'Arc, Combustion, Feu, Dépôt de suie, Simulation numérique, CFD, OpenFOAM, Thermo-mécanique, Écaillage, Rubéfaction, Cast3m.

Aero-thermo-mechanical simulation of fire effects on the walls of a confined space. Application to the study of the thermo-alterations of the Chauvet-Pont d'Arc cave

Abstract
The Chauvet-Pont d'Arc cave (Ardèche, France) contains some of the oldest Palaeolithic rock art. In addition to the cave paintings, some walls were thermally altered. The marks result from unparalleled fires in other ornate caves. The archaeologists wonder about the function(s) of such fires, some of which are located in a very narrow area, the Megaloceros Gallery. The first step to understand the fires is to characterize them. For conservation reasons, numerical simulation is the easiest tool which can perform fire scenarios in the geometry of the cave. Based on experimentations in a former quarry, a numerical modelling is first set up. Then, from the wall marks, this modelling allows the identification of the scenarios that may have occurred.

Keywords
Painted caves, Chauvet-Pont d'Arc, Combustion, Fire, Soot deposit, Numerical simulation, CFD, OpenFOAM, Thermo-mechanics, Spalling, Rubification, Cast3m.