



HAL
open science

Etude numérique de la dynamique des transferts couplés au sein d'un milieu poreux

Bajil Quartassi

► **To cite this version:**

Bajil Quartassi. Etude numérique de la dynamique des transferts couplés au sein d'un milieu poreux. Autre. Université Henri Poincaré - Nancy 1, 2009. Français. NNT : 2009NAN10039 . tel-01748458

HAL Id: tel-01748458

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01748458>

Submitted on 29 Mar 2018

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.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

THESE

Pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université Henri Poincaré
Nancy I
Spécialité : Génie des Procédés

Présenté Par :

Bajil OUARTASSI

Titre :

Etude numérique de la dynamique des transferts couplés au sein d'un milieu poreux

Date de soutenance : Mardi 09 juin 2009

Rapporteurs : Michel CABASSUD : Professeur, Université Paul Sabatier de Toulouse
Philippe LE MASSON : Professeur, Université de Bretagne Sud

Examineurs : André ZOULALIAN : Professeur, Emérite Université Henri Poincaré Nancy I
Mathieu PETRISSANS : Professeur, Université Nancy II
Anélie PETRISSANS : Maître de conférences, Université Henri Poincaré Nancy I
Jean Louis DIRION : Maître Assistant, Ecole des Mines d'Albi-Carmaux

Dédicaces

A la mémoire de ma grand-mère

Puisse DIEU l'avoir en sa sainte miséricorde et sa bienveillante pitié

A mes parents et A mon frère Quartassi Abderrahim

En témoignage de ma reconnaissance et de mes remerciements pour la compréhension et la patience dont ils ont fait preuve tout au long de mes études. Puisse DIEU les garder, et leur procurer bonheur et bonne santé.

A ma femme YANG Min

Ma reconnaissance pour sa compréhension et sa patience tout au long de ces quatre dernières années. Puisse DIEU la garder, et lui procurer bonheur et bonne santé.

A mes tantes et mes oncles.

A mes beaux-parents.

A toute ma grande famille.

A tous mes amis.

A tous ceux qui me sont chers et qui me témoignent leur sympathie et leur amitié durables

Aux lecteurs

Remerciements

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers Monsieur A. Zoulalian, sans lui ce travail n'aurait pu aboutir. Sa très grande disponibilité alliée à sa grande connaissance et à sa gentillesse naturelle m'ont permis de surmonter toutes les difficultés.

Je tiens à exprimer mes remerciements envers Madame A. Pétrissans, sa disponibilité, sa rigueur, ses judicieux conseils et son aide.

Je suis reconnaissant envers Monsieur M. Pétrissans qui m'a accueilli dès les premiers jours de mon arrivée au LERMAB, m'a aidé à m'installer, et pour sa disponibilité.

Je tiens à remercier aussi mon ami M. Chaouch pour sa collaboration fructueuse à ce mémoire au point de vue expérimental ainsi que pour sa gentillesse.

Mes remerciements vont également envers le directeur de LERMAB A. Merlin pour son accueil et son aide quant à mon intégration au sein de laboratoire.

Je remercie le jury rapporteur et examinateur d'avoir accepté de juger ma thèse.

Enfin, je suis très reconnaissant envers mes amis A. Dufour, A. Abbassi, B. Benamar, M. Iguernane, Y. Irmouli, S. Benhadi, S. Drissi Bakhkhat, R. Bouhdadi, K. Iyach, A. Mouhareb, B. Poaty Poaty, S. Makraoui, M. Ragoubi, Y. She, Y. Hamini et R. El Hage. Je les remercie sincèrement.

Je tiens à remercier tous ceux qui m'ont aidé de près et de loin : Laurent Chrusciel, Riad Benelemir, Corine Courtehoux, Christine Canal et tous les membres de LERMAB.

Sommaire

INTRODUCTION :10

**Chapitre I : Le calcul numérique. Une science à part
entière13**

I.1 Historique du calcul numérique14

I.2 Problématiques du calcul numérique:17

I.3 Temps de calcul et précision18

I.3.1 Précision : 18

I.3.2 Temps : 18

I.4 Erreurs du calcul numérique.19

I.4.1 Le schéma 19

I.4.2 La représentation machine 20

I.4.3 La perte d'information..... 20

I.5 Conditionnement et sensibilité20

I.5.1 Propagation des erreurs..... 20

I.5.2 Nombre de conditionnement..... 21

I.6 Du modèle physique au modèle numérique.....22

I.6.1 Adimensionnement des équations..... 22

I.6.2 Choix des variables 22

I.7 Méthodes de discrétisation.....	23
I.7.1 Différences finies	23
I.7.1.1 L'approche différences finies en dimension un	23
I.7.1.2 Quelques formules simples d'approximation des dérivées par des différences finies.....	24
I.7.1.3 Applications en dimension un.....	26
I.7.1.4 Approximation par différences finies en dimension supérieure	28
I.7.2 Eléments finis.....	31
I.7.2.1 L'approche éléments finis en 1-D.....	32
I.7.3 Volumes finis	37
I.7.3.1 L'approche volumes finis	38
I.7.3.2 En dimension un	38
I.7.3.3 En dimension deux.....	39

I.8 Bibliothèques numériques	41
---	-----------

Chapitre II : Modélisation des phénomènes et Méthodes d'optimisation	43
---	-----------

II.1 Introduction :	44
----------------------------------	-----------

II.2 Choix du modèle	45
-----------------------------------	-----------

II.3 Utilisation du modèle.....	46
--	-----------

II.4 Optimisation d'un modèle	47
--	-----------

II.4.1 Essai et erreur	47
------------------------------	----

II.5 Méthodes d'optimisation	51
---	-----------

II.5.1 Méthodes déterministes	51
-------------------------------------	----

II.5.1.1 Calcul de la direction de descente:	52
--	----

II.5.1.2 Recherche linéaire :	53
II.5.1.3 Calcul du gradient.....	55
II.5.2 Méthodes non-déterministes.....	56
II.5.3 Algorithmes Evolutionnaires et Algorithmes Génétiques	57
II.5.3.1 Introduction	57
II.5.3.2 Historique	63
II.5.3.3 Algorithme Génétique Simple AGS :	64
II.5.3.4 Le Choix d'un Algorithme Génétique(AG).....	64
II.5.3.5 Stratégies d'Evolution (ES)	69
II.5.3.6 Algorithmes Hybrides (AG-GC)	72
II.5.3.7 La programmation génétique.....	72
II.6 Conclusion	77
Applications.....	78
Chapitre III : Première Application : Modélisation des transferts diffusionnels d'eau dans le domaine hygroscopique du bois de hêtre.....	
	79
III.1 Introduction et objectif de l'étude.....	80
III.2 Mise en équation des modèles.....	84
III.2.1 Bilans du premier modèle (Modèle I)	84
III.2.2 Bilans du deuxième modèle (Modèle II).....	86
III.2.3 Bilans du troisième modèle (Modèle III)	86
III.2.4 Bilans du quatrième modèle (Modèle IV).....	87
III.3 Expression mathématique de la relation d'équilibre	88

III.4 Méthode numérique de résolution des équations aux dérivées partielles de bilan89

III.4.1 Etude Générale : 89
III.4.1.1 Discrétisation selon l'espace 90
III.4.1.2 Discrétisation selon le temps 91
III.4.1.1 Discrétisation du Modèle I 94
III.4.1.2 Discrétisation du Modèle II 94
III.4.1.3 Discrétisation du Modèle III 95
III.4.1.4 Discrétisation du Modèle IV 97

III.5. Résultats des modélisations97

III.5.1 Courbes expérimentales modélisées 97
III.5.2 Etude de Modèle I et Modèle I bis 98
III.5.3 Etude du Modèle II 101
III.5.4 Etude du Modèle III 102
III.5.5 Etude du Modèle IV 104

VI Conclusion105

Chapitre IV : Seconde Application :106

Traitement thermique du bois par conduction (Pyrolyse douce)106

IV.1 Introduction107

IV.2 Ecriture des bilans111

IV.3 Etude des paramètres thermiques111

IV.3.1. Humidité du bois :.....	112
IV.3.2. Conductivité thermique :.....	112
IV.3.3. Chaleur Spécifique.....	114
IV.3.4 Détermination de la diffusivité thermique α à partir des données expérimentales:	117
IV.3.3.1 Comparaison des valeurs de la diffusivité thermique estimée avec les valeurs de la littérature.	119

IV.4 Modélisation du transfert thermique dans une planche du bois.....120

IV.4.1 Modélisation du traitement thermique.	121
IV.4.1.2 Hypothèses.....	121
IV.4.3 Formulation mathématique de la pyrolyse.....	122
VI.4.4. Etat de l'art de la modélisation de la pyrolyse de bois.....	123
IV.4.4.1. La première approche :	124
IV.4.4.2 La deuxième approche.....	125
IV.4.4.3. La troisième approche :.....	128
IV.4.5 Le choix d'un modèle cinétique de pyrolyse pour la présente étude :.....	128
IV.4.5.1. Le modèle cinétique :.....	129
IV.4.5.2 Formulation mathématique du modèle cinétique :.....	129

IV. 5 Modélisation complète du traitement thermique en deux étapes.131

IV.5.1 Equations du modèle.....	131
IV.5.1.1 Les paramètres du modèle :	133
IV.5.1.2 Détermination des paramètres.....	133
IV.5.1.3 Détermination des paramètres à l'aide de l'Algorithme génétique.....	134
IV.5.1.4 Résolution numérique.....	135

CONCLUSION ET PERSPECTIVE148

ANNEXE 1 : L'existence et l'unicité de la solution.....149

ANNEXE 2 : Définitions.....159

ANNEXE 3 : Nomenclature	162
ANNEXE 4 : Algorithme Génétique	165
BIBLIOGRAPHIE	180

INTRODUCTION :

L'utilisation de plus en plus courante des ordinateurs et les progrès réalisés sur leur puissance permettent des développements dans le domaine de la modélisation mathématique et de la simulation numérique d'un champ de problèmes multi- disciplinaires. La performance des calculs, et leur coût relativement faible rendent possible le développement des modèles mathématiques compliqués, capables d'analyser de réels procédés industriels en prenant en compte les phénomènes de transfert de chaleur et de matière, ainsi que le mouvement des fluides. Le développement de codes de calculs capables de décrire un procédé industriel est un enjeu très important pour le monde de la production aussi bien pour rechercher les conditions optimales de fonctionnement que pour développer de nouvelles technologies. A l'heure actuelle, l'utilisation libre des codes de calcul par des opérateurs non-initiés n'est pas encore envisageable. Une étroite collaboration entre la communauté scientifique d'une part et le monde industriel de l'autre est souvent nécessaire afin de pouvoir associer l'expérience (ou le savoir faire) et la prédiction.

La modélisation mathématique et la simulation numérique permettent d'éviter la réalisation d'un certain nombre d'expériences souvent coûteuses et répétitives. Néanmoins la recherche expérimentale et la simulation numérique ne s'excluent pas mutuellement. Au contraire, les voies expérimentale et numérique sont fort complémentaires. Les études expérimentales sont un élément essentiel pour tout programme de recherche. Elles fournissent des observations sur un procédé particulier et permettent de comprendre la physique fondamentale qui leur est associée. Ces connaissances servent de base dans le développement de modèles mathématiques réalistes, décrivant ces phénomènes. En revanche, les résultats de la simulation peuvent donner une direction autrement réfléchie pour le plan expérimental et guider dans le choix de paramètres-clé à analyser, en améliorant ainsi l'exactitude du modèle mathématique. Ainsi la simulation numérique contribue à valider les lois de la physique fondamentale associées aux procédés.

Le développement des modèles mathématiques des procédés de transferts de matière et d'énergie dans un milieu poreux (dans notre cas le bois), nécessite de connaître aussi les lois réactionnelles des éléments chimiques qui se forment et se décomposent en cours des procédés

La formulation mathématique est généralement de la forme :

$$\frac{du}{dt} = -\nabla(D\nabla u) + S \quad (1)$$

u : Grandeur physique (température, humidité, masse volumique...), caractéristique de l'évolution du système,

D : Coefficient de diffusion de la grandeur physique u ,

S : Source de matière ou d'énergie liée aux schémas réactionnels qui se produisent au cours du procédé.

Dans le cas d'un milieu naturel comme le bois une difficulté de la modélisation apparaît dans la définition des schémas réactionnels c'est-à-dire dans le parcours suivi par un composé chimique du bois lors de son évolution en fonction des grandeurs opératoires, ce qui nécessite la détermination de paramètres cinétiques obtenus numériquement par optimisation ou directement à partir d'expériences analytiques spécifiques.

Le mémoire de thèse est bâti sur des exemples de transfert d'un soluté adsorbable et le transfert couplé matière-chaleur au sein d'un matériau poreux : le bois. Ces exemples permettront de mettre l'accent sur les différentes étapes constituant le développement d'un programme de simulation, à savoir le modèle mathématique, la description de la méthode de résolution, l'analyse des résultats, l'optimisation de la stratégie de calcul afin d'avoir des temps de calculs raisonnables avec des outils informatiques courants.

Avant de détailler ces exemples, on aborde dans le premier chapitre un rapide historique et certaines généralités sur l'analyse numérique, en détaillant les méthodes de discrétisation existant dans la littérature.

Dans le deuxième chapitre nous présentons le concept de la modélisation, son histoire et son évolution en citant les différentes méthodes d'optimisation, en détaillant la méthode génétique et les méthodes d'optimisation utilisées pendant la thèse.

Le troisième et le quatrième chapitre constituent les deux exemples d'applications des méthodes numériques citées dans le premier et le deuxième chapitre :

Dans le troisième chapitre nous décrivons les différents modèles permettant de rapporter le phénomène de transport de l'eau au sein de bois de hêtre et leur résolution numérique permettant d'aboutir à certaines caractéristiques de transfert déterminées par l'expérience.

Le quatrième chapitre aborde la modélisation du traitement thermique du bois à température modérée avec la recherche par optimisation des paramètres cinétiques du modèle présentée par Grioui (2006) par l'algorithme génétique et la validation des paramètres thermiques mesurés par ailleurs.

Les deux exemples permettent de caractériser les interactions entre expérience et simulation numérique.

La conclusion du mémoire rappelle les résultats acquis en montrant qu'expériences et simulations sont deux outils nécessaires pour un fonctionnement optimal ou une extrapolation d'un procédé industriel. (Passage d'une unité pilote à une unité industrielle)

Chapitre I : Le calcul numérique. Une science à part entière

I.1 Historique du calcul numérique

Le calcul numérique est une branche des mathématiques et un domaine de recherche vaste et riche de nouveauté qui s'applique à plusieurs disciplines : biologie, chimie, physique, informatique, génie des procédés.. etc. Une grande littérature lui est dédiée: des livres, des revues périodiques et des bibliothèques de programmes. La pratique est un élément essentiel pour la maîtrise de cette discipline.

Le calcul numérique est un art difficile et complexe qui résulte d'un beau mélange entre les mathématiques et l'informatique, la beauté se trouvant dans la transformation des méthodes théoriques algébriques et analytiques en codes informatiques. Cela permet de voir l'aspect pratique de l'interférence entre la théorie mathématique et les autres domaines des sciences en utilisant l'art de la programmation informatique.

Cet art numérique comme toutes les sciences a une histoire qui remonte d'après les historiens mille ans avant Jésus Christ. Le besoin quotidien d'effectuer des mesures dans différents domaines de la vie courante, notamment en agriculture, commerce, architecture, géographie et navigation ainsi qu'en astronomie est à l'origine de sa naissance. Il semble que les Babyloniens (qui peuplaient l'actuelle Syrie/Iraq) sont parmi les premiers à réaliser des calculs algébriques et géométriques complexes à haute précision. Ainsi, ils introduisent la notion de base de dénombrement. Ils se distinguent des autres civilisations, bien plus récentes, qui développeront des méthodes plus lourdes, en introduisant une pléthore de symboles. Il y a environ 3500 ans, les populations de la vallée de l'Indus (régions de l'Inde et du Pakistan) introduisent les notions de zéro et emploient les nombres négatifs. Ils adaptent également le système de comptage Babylonien au système décimal qui est le nôtre aujourd'hui. Ces premiers outils de calcul sont largement développés par la suite par les Grecs et par des civilisations musulmanes peuplant le bassin méditerranéen ; ces dernières les ont transmis en Europe.

Le calcul numérique que nous connaissons aujourd'hui a fait ces premiers pas à partir du XVIIème siècle avec les progrès des Mathématiques et de la Physique et l'invention de plusieurs machines de calcul comme « la Pascaline » inventée par B. Pascal en 1643, la DENO (Différence Engine Number One; voir la figure 1.2) de C. Babbage en 1834, ou encore le tabulateur de H.Hollerith, vers 1890. Il s'agit de machines mécaniques d'utilisation assez limitée.

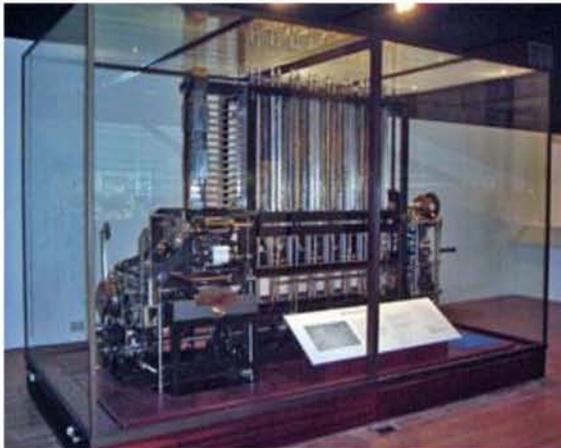


Figure I.1: Charles Babbage l'une des grandes figures de l'histoire de l'ordinateur. Il fut l'inventeur de la DENO (Difference Engine Number One) dont une copie est exposée dans un musée de Londres (à droite).

La Seconde Guerre Mondiale a provoqué des progrès technologiques et scientifiques qui vont permettre au calcul numérique de trouver un nouvel aspect révolutionnaire par l'apparition du premier ordinateur inventé en 1939 par un anglais, Colossus, dont la mission était de déchiffrer les messages codés envoyés par l'émetteur Enigma de l'Allemagne nazie. Cette machine introduit les concepts de l'automatique émis par A. Turing en 1936. Une autre machine qui fait date dans l'histoire, l'ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer) construit en 1946.

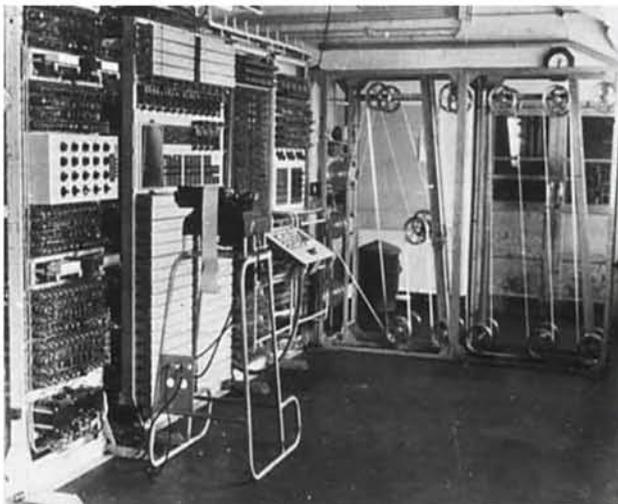


Figure I.2: Photo d'Alan Turing (à droite) qui a inventé le calcul automatique et la machine de Turing qui constitue la pièce essentielle du premier ordinateur Colossus. Photo du premier ordinateur Colossus (à gauche).

En 1946, J. von Neumann refait l'architecture des ordinateurs et introduit les mémoires permettant de sauvegarder les programmes et les concepts de matériel et de

logiciel. La première machine de calcul incluant les concepts de von Neumann (et ceux de Turing) est ainsi produite par l'entreprise américaine IBM; elle s'appelle Mark I et pèse 5 tonnes. Les premières applications concernent tous les domaines scientifiques et techniques. Le Fortran I, un langage de programmation destiné aux scientifiques, est conçu dès 1954.

Vers la fin des années 1960, l'apparition des transistors et de leur assemblage massif sur des surfaces de plus en plus réduites augmente considérablement la performance des machines. Cet effort de miniaturisation est d'ailleurs imposé par la course à la conquête de l'espace. En 1970 l'apparition des fameux microprocesseurs mis au point par les firmes Intel et Motorola transforme le calcul numérique en une science à part entière. Les années 1970 marquent aussi le tournant pour les langages de programmation: certains sont définitivement produits à des fins scientifiques et d'autres seront pensés pour la gestion. Au début des années 1980, l'ordinateur le plus puissant du monde s'appelle Cray I (voir la figure 1.3). Sa forme est spécialement choisie pour optimiser la rapidité des calculs. C'est aussi le début de l'informatique familiale avec la mise sur le marché des Personal Computers d'IBM.

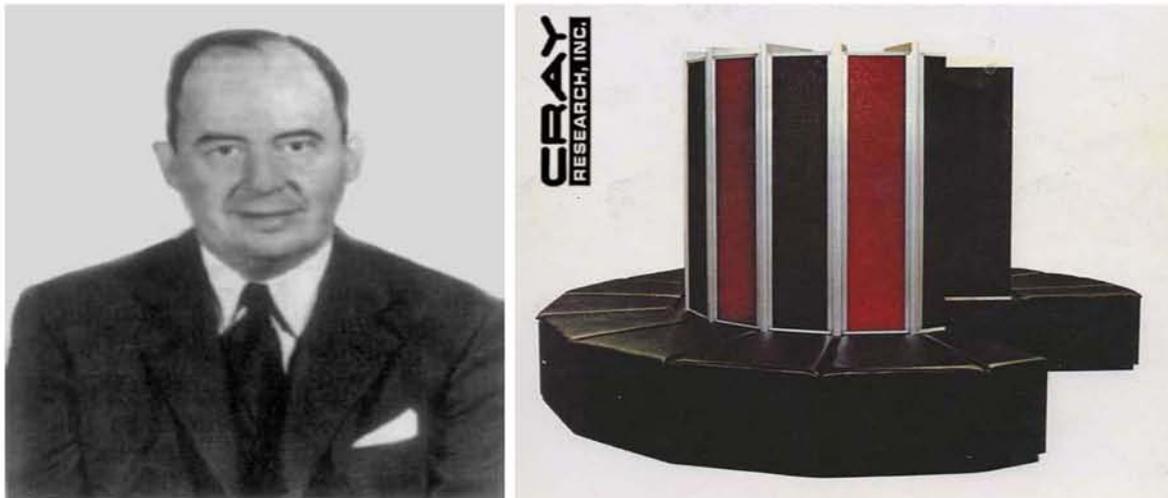


Figure 1-3 ; J. Von Neumann l'un des prodiges d'informatique. Le Cray I (à droite) construit dans les années 1980 dispose d'une puissance de calcul de 160 millions d'opérations à la seconde. Sa conception en forme de cylindre devait assurer une transmission optimale de l'information

I.2 Problématiques du calcul numérique:

Le terme « méthodes numériques » désigne toutes les techniques de calcul permettant de résoudre un problème donné d'une manière exacte ou approchée. Le calcul est un concept assez vaste. Il peut s'agir de déterminer l'inconnue d'une équation, de calculer la valeur d'une fonction en un point ou sur un intervalle, d'intégrer une fonction, d'inverser une matrice, etc. Bien que la mise en équation d'un problème et sa résolution passent naturellement par les mathématiques, les problématiques sous-jacentes concernent des disciplines aussi variées que la Physique, le Génie des Procédés, la Chimie, l'Astrophysique, la Biologie, la Médecine, l'Economie, etc. Il existe ainsi une grande variété de problèmes possibles avec pour chacun d'eux, des méthodes très spécifiques. Par suite, le nombre total de méthodes numériques à notre disposition à l'heure actuelle est gigantesque.

Une méthode numérique met en œuvre une certaine procédure, une suite d'opérations, que l'on transcrita ensuite dans un langage de programmation. Bien qu'une méthode numérique puisse s'effectuer mentalement (du moins avec un crayon et un papier) comme inverser une matrice 2×2 , résoudre $\cos(x) - 1 = 0$, ou calculer $\sqrt{2}$, elle nécessite dans la majorité des cas un ordinateur qui a l'avantage de la rapidité (mais pas de la précision). Il convient à ce niveau de bien différencier la partie méthode numérique, souvent indépendante du calculateur et du langage, et la partie programmation qui met en œuvre d'une part l'algorithme et d'autre part une suite d'instructions écrites dans un langage de programmation. Bien-sûr, une méthode numérique pourra dépendre de l'architecture d'un ordinateur et du langage utilisé. Toutefois, l'un des soucis majeurs de l'utilisateur et du programmeur est d'assurer à son programme une certaine universalité, c'est-à-dire de pouvoir l'exécuter sur des machines différentes sans avoir besoin d'adaptations spécifiques.

L'état d'esprit dans lequel travaille le numéricien est davantage celui que l'on connaît en Physique, avec ses multiples approximations (parfois difficilement justifiables) et hypothèses simplificatrices, plutôt que celui que l'on doit développer en Mathématiques. Une certaine rigueur est toutefois indispensable. Ainsi serons-nous le plus souvent amenés à changer assez significativement le problème initial, à le simplifier dans une certaine mesure, à le rendre linéaire, plus académique aussi. Une étape majeure sera alors de critiquer les solutions obtenues et de les interpréter par rapport au problème initialement posé.

I.3 Temps de calcul et précision

Lors de l'utilisation ou de la mise en place de toute méthode numérique deux aspects fondamentaux doivent être pris en compte: la précision souhaitée (ou disponible) d'une part, et le temps de calcul d'autre part. Disposer de beaucoup de précision est confortable voire indispensable lorsque l'on étudie certains phénomènes. Mais lorsque l'on est trop gourmand sur cet aspect, le temps de calcul se trouve accru, parfois de manière prohibitive.

I.3.1 Précision :

La précision est limitée par les machines. Inévitablement, elle se trouve détériorée au fil des calculs. Sans entrer dans le détail, il faut savoir qu'un ordinateur fonctionne en effet avec un nombre limité de chiffres significatifs, au maximum 14, 15 voire 16 pour les plus performants, ces chiffres étant rangés en mémoire dans des boîtes virtuelles ou bits, après transcription en base 2. Certains bits sont réservés pour affecter un signe (+ ou -) au nombre et d'autres pour l'exposant. En ce sens, les machines classiques ne pourront généralement pas distinguer 3.1415926535897931 de 3.1415926535897932, à moins d'un traitement spécifique de la mantisse à la charge de l'utilisateur. Dans la mémoire, seuls les premiers chiffres d'un nombre seront enregistrés, les autres seront définitivement perdus. La plupart des langages permettent de choisir le nombre de décimales au niveau de la procédure déclarative, comme les anciennes instructions REAL*4 ou REAL*8 du langage Fortran 77, dont les équivalents sont respectivement REAL (KIND=1) et REAL (KIND=2) en Fortran 90.

I.3.2 Temps :

Le temps de calcul est limité par la capacité des ordinateurs, par la durée de vie du matériel, par des facteurs extérieurs (comme les coupures d'électricité), et par l'utilisation que l'on souhaite classiquement faire des programmes de simulation. La plupart du temps, il s'agit d'une utilisation intensive où l'on balaye l'espace des paramètres d'un modèle. Ceci impose de rechercher toujours les méthodes les plus rapides. Il est de plus en plus fréquent de travailler sur des problèmes complexes dont la résolution nécessite des heures, des jours, parfois même des semaines de calculs sans interruption. Le choix s'orientera alors vers une méthode numérique rapide. Mais la rapidité se fera forcément au détriment de la précision. Quand les calculs sont intrinsèquement rapides et que le temps de calcul n'est pas un facteur déterminant, on aura tout loisir de (et peut-être intérêt à) choisir une méthode plus

lente mais plus précise. Notons également un fait souvent oublié: les accès aux périphériques sont très coûteux en temps, en particulier les accès aux disques durs et les impressions à l'écran.

Pour une méthode numérique donnée, on peut toujours estimer le temps de calcul en comptant le nombre total N d'opérations qu'effectue la machine. On peut ensuite éventuellement multiplier ce nombre par le temps de calcul t_e relatif à une opération élémentaire, mais cela n'a de valeur qu'à titre comparatif (car ce temps t_e varie d'une machine à l'autre et dépend aussi de la nature des opérations).

I.4 Erreurs du calcul numérique.

Outre les erreurs de programmation (celles que le compilateur détectera et que vous corrigerez, et celles que vous ne trouverez jamais), il existe trois sources d'erreur qu'il convient d'avoir présent à l'esprit: l'erreur de schéma, l'erreur de représentation et l'erreur par perte d'information.

I.4.1 Le schéma

L'erreur de schéma est générée lorsque l'on remplace une relation exacte par une autre, plus simple ou plus facilement manipulable. C'est par exemple le cas d'une série de Taylor tronquée (on parle ici plus précisément d'erreur de troncature), comme

$$(1 + x)^n = 1 + n(n - 1)x \quad (\text{I. 1})$$

Ou le cas de l'approximation d'une dérivée par une différence finie comme

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} \quad (\text{I. 2})$$

Ou encore de l'estimation d'une quadrature

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b - a)f(a) \quad (\text{I. 3})$$

L'erreur de schéma est généralement l'erreur dominante. Elle est en principe incontournable car toutes les méthodes numériques sont basées sur des schémas. Il est important qu'elle soit connue ou appréciable. Notons que tous les schémas ne génèrent pas les mêmes erreurs. On choisira donc, quand c'est possible, les schémas les plus précis.

1.4.2 La représentation machine

L'erreur de représentation est liée aux modes de représentation, de stockage et de calcul des ordinateurs. Par exemple, supposons que l'on veuille effectuer l'opération $\frac{2}{3} - \frac{1}{3}$

$$0.6667 - 0.3333 = 0.3334 \quad (I.4)$$

Ici $\frac{2}{3}$ est remplacé par 0.6667 c'est une erreur de représentation (erreur d'arrondi)

L'erreur de représentation est généralement négligeable devant les autres, sauf dans certains cas particuliers où, sans précaution, l'on manipule des nombres très différents ou très proches.

1.4.3 La perte d'information

La perte d'information est une conséquence de la représentation machine. Elle se produit lorsque l'on soustrait deux nombres très proches, le résultat est alors un nombre comportant peu de chiffres significatifs. L'erreur par perte d'information peut être dévastatrice (par exemple lorsque l'on veut calculer numériquement une dérivée). Souvent, on ne la soupçonne pas. Elle survient aussi lorsque l'on effectue une suite d'additions et soustractions mettant en jeu des termes de même amplitude (c'est le cas par exemple du calcul de séries alternées).

1.5 Conditionnement et sensibilité

1.5.1 Propagation des erreurs

Dans toute méthode numérique, il y a au moins un paramètre permettant de régler (c'est-à-dire d'imposer) ou de contrôler le bon déroulement du processus et la précision du résultat. Il s'agit généralement d'un critère faisant appel à l'erreur absolue ou à l'erreur relative sur une quantité y par rapport à une quantité de référence y^* . Ces erreurs sont définies respectivement par :

$$\Delta y = y - y^* \quad (I.5)$$

Et par

$$\varepsilon(y) = \frac{y - y^*}{y^*} \quad y^* \neq 0 \quad (I.6)$$

Un fait est incontournable: les erreurs, quelle que soit leur origine, se propagent et s'amplifient. On peut le comprendre sur un exemple simple. Si une quantité x est connue avec une précision relative $\varepsilon(x) \ll 1$ alors son image par une fonction f est aussi entachée d'une erreur :

$$f(x + \varepsilon(x)x) \approx f(x) + \varepsilon(x)xf'(x) \quad (I.7)$$

Et l'erreur relative sur f vaut :

$$\varepsilon(f) = \frac{f(x + \varepsilon(x)x) - f(x)}{f(x)} \approx x\varepsilon(x) \frac{f'(x)}{f(x)} \quad (I.8)$$

On voit donc que si $f'(x)$ est important et $f(x)$ faible, à la fois $\varepsilon(f)$ et $\Delta(f)$ peuvent être grands.

Ajoutons qu'il faudrait en toute rigueur être capable de mettre une barre d'erreur sur les résultats issus d'une méthode ou plus généralement d'une simulation, en tenant compte de toutes les sources d'erreur possibles. Il est navrant de constater que la notion de barre d'erreur ne semble concerner que les physiciens expérimentateurs. C'est un tort, car une simulation numérique est une expérience comme une autre.

1.5.2 Nombre de conditionnement

Une méthode numérique travaille généralement avec un certain nombre de paramètres, les paramètres d'entrée, et renvoie des résultats, que l'on peut assimiler à des paramètres de sortie. Un objectif (souvent difficile à atteindre) que recherchera le Physicien est de produire des résultats qui ne dépendent pas (ou peu) de la méthode choisie. L'aspect qui guidera son choix sur une méthode plutôt qu'une autre est la stabilité, c'est-à-dire une certaine garantie que la procédure n'aura pas la fâcheuse propriété d'amplifier et/ou de générer sans limites les erreurs. La sensibilité (ou la stabilité) peut être quantifiée grâce au nombre de conditionnement (ou nombre de condition). Prenons le cas où d'une méthode qui, pour une quantité x donnée fournit une quantité y . On définit ce nombre pour deux couples (x, y) et (x', y') par

$$\eta = \frac{\frac{y' - y}{y}}{\frac{x' - x}{x}} \equiv \eta(x) \quad (I.9)$$

Ce nombre rend compte du pouvoir amplificateur d'une méthode. Ainsi une méthode numérique est très sensible (ou instable) si $\eta \gg 1$, peu sensible (stable) si $\eta \leq 1$ et est insensible si $\eta \ll 1$.

I.6 Du modèle physique au modèle numérique

Lorsque l'on met un système physique ou un modèle en équations et que l'on aborde l'étape numérique, plusieurs questions simples mais indispensables doivent être posées et résolues. Parmi ces questions/réponses, qui peuvent plus ou moins conditionner le choix d'une méthode particulière, on trouve: mon voisin de palier aurait-il déjà travaillé sur un problème similaire ? Les inconnues du problème physique sont-elles bien identiques ? Quel est le domaine de variation des variables (temps, espace, . . .) ? Les variables physiques sont-elles aussi les bonnes variables numériques ? Quelle est la précision souhaitée sur la solution cherchée ? Quelle est l'échelle de temps d'exécution de mon programme ? La précision est-elle déterminante ? Le temps de calcul est-il un facteur critique ? etc. Deux aspects généralement absents des manuels (ou implicitement évoqués) mais qui constituent une étape-clé dans le passage du modèle physique au modèle numérique sont l'adimensionnement des équations et le choix des variables numériques.

1.6.1 Adimensionnement des équations

L'adimensionnement des équations est une étape qui permet de réduire la dynamique des variables numériques. Il est en effet préférable de travailler sur un domaine numérique raisonnablement restreint et de manipuler des nombres de l'ordre de l'unité. Toutefois, une dynamique trop faible peut engendrer une perte d'information. Cette procédure vise donc à transformer les équations du problème en des équations souvent plus « lisibles » d'un point de vue mathématique (et donc numérique) où les nouvelles variables (les variables adimensionnées) apparaissent alors comme des corrections. Comme sous-produit de l'adimensionnement, on aboutira naturellement à partir des équations aux échelles caractéristiques du problème (par exemple une ou des échelles de longueur, des échelles de vitesses, des échelles de temps, etc..).

1.6.2 Choix des variables

Concernant le choix des variables numériques maintenant, il faut rappeler que, dans beaucoup de problèmes, les variables possèdent des dynamiques complètement différents. Même adimensionnées, des variables peuvent beaucoup varier. Ces variables obéissent forcément à une certaine loi en fonction des paramètres ou d'autres variables et il peut être

astucieux d'inclure ces lois dans les variables numériques. Cela rendra la partie numérique beaucoup plus stable.

I.7 Méthodes de discrétisation

En vue du passage d'un problème exact (continu) au problème approché (discret), on dispose de plusieurs techniques concurrentes et complémentaires : les différences finies, les éléments finis et les volumes finis. Chacune de ces trois méthodes correspond à une formulation différente des équations de la physique :

- équilibre des forces en chaque point pour les différences finies
- minimisation de l'énergie ou principe des travaux virtuels pour les éléments finis
- loi de conservation et calcul des flux pour la méthode des volumes finis.

I.7.1 Différences finies

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées apparaissant dans le problème continu par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage.

Avantages : grande simplicité d'écriture et faible coût de calcul.

Inconvénients : Limitation de la géométrie des domaines de calculs, difficultés de prise en compte des conditions aux limites portant sur les dérivées ou les gradients de l'inconnue et en général absence de résultats de majoration d'erreurs.

I.7.1.1 L'approche différences finies en dimension un

Toutes les méthodes numériques présupposent la discrétisation du domaine géométrique afin de passer d'un problème continu à une infinité d'inconnues à un problème discret ne comptant qu'un nombre fini d'inconnues. Dans le cas des différences finies en dimension un, on discrétise l'intervalle continu $[a, b]$ en un nombre fini de points x_i .

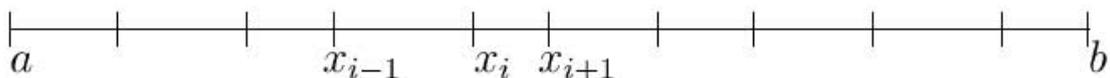


Figure I.4. Discrétisation en différences finies d'un segment $[a, b]$.

On remplace ainsi le problème continu par celui de la recherche des valeurs approchées u_i des solutions exactes $u(x_i)$ aux points x_i de la discrétisation. Mais on ne peut

plus, dans ce cas, conserver les opérateurs de dérivation qui s'appliquent à des fonctions continues. On les remplace par des analogues discrets, les différences divisées ou différences finies. Le type de conditions aux limites conditionne le nombre d'inconnues du problème discret. Dans le cas de conditions de Dirichlet, la solution est fixée, et donc en ces points, les valeurs sont connues. Dans tous les autres cas de conditions aux limites, la valeur de la solution reste inconnue et fait donc partie du vecteur inconnu.

1.7.1.2 Quelques formules simples d'approximation des dérivées par des différences finies.

Pour la dérivée première :

– différence finie progressive d'ordre un :

Pour des pas réguliers de longueur h , le développement limité :

$$u'(x_i) = \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h} - \frac{h}{2} u''(\zeta_i) \quad (\text{I. 10})$$

conduit à l'approximation suivante :

$$u'(x_i) = \frac{du(x_i)}{dx} = \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (\text{I. 11})$$

–différence finie progressive d'ordre deux :

Pour des pas réguliers de longueur h , le développement limité :

$$u'(x_i) = \frac{-u(x_i + 2h) + 4u(x_i + h) - 3u(x_i)}{2h} + 2\frac{h^2}{3} u'''(\zeta_i) \quad (\text{I. 12})$$

donne la formule d'ordre deux progressive suivante :

$$u'(x_i) = \frac{du(x_i)}{dx} = \frac{-u_{i+2} + 4u_{i+1} - 3u_i}{2(x_{i+1} - x_i)} \quad (\text{I. 13})$$

–différence finie régressive d'ordre un :

$$u'(x_i) = \frac{u(x_i) - u(x_i - h)}{h} + \frac{h}{2} u''(\zeta_i) \quad (\text{I. 14})$$

donne :

$$u'(x_i) = \frac{du(x_i)}{dx} = \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad (\text{I. 15})$$

– différence finie régressive d'ordre deux :

On obtient également une formule régressive d'ordre deux :

$$u'(x_i) = \frac{du(x_i)}{dx} = \frac{u_{i-2} - 4u_{i-1} + 3u_i}{2(x_i - x_{i-1})} \quad (\text{I. 16})$$

– différence finie centrée:

$$u'(x_i) = \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h} + \frac{h^2}{6} u'''(\zeta_i) \quad (\text{I. 17})$$

ou également

$$u'(x_i) = \frac{u\left(x_i + \frac{h}{2}\right) - u\left(x_i - \frac{h}{2}\right)}{h} + \frac{h^2}{24} u'''(\zeta_i) \quad (\text{I. 18})$$

Ce qui conduit, dans le cas de discrétisations uniformes de pas constant h :

$$u'(x_i) = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \quad (\text{I. 19})$$

ou

$$u'(x_i) = \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{h} \quad (\text{I. 20})$$

On note $u_{i+\frac{1}{2}}$ et $u_{i-\frac{1}{2}}$ les valeurs approchées de u aux points $x_{i+h/2}$ et $x_{i-h/2}$ respectivement.

Pour la dérivée seconde :

– Différence finie centrée :

Dans le cas particulier de points x_i régulièrement espacés d'un pas h uniforme, on retrouve en utilisant :

$$u''(x_i) = \frac{u'(x_i + \frac{h}{2}) - u'(x_i - \frac{h}{2})}{h} - \frac{h^2}{24} u^{(4)}(\zeta_i) \quad (\text{I. 21})$$

et (I.17) :

$$u''(x_i) = \frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} u^{(4)}(\zeta_i) \quad (\text{I. 22})$$

d'où la discrétisation centrée classique de la dérivée seconde

$$u''(x_i) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad (\text{I. 23})$$

Pour la dérivée troisième :

– différence finie progressive

Dans le cas particulier de points x_i régulièrement espacés d'un pas h uniforme, on obtient la formule décentrée progressive (d'ordre un) :

$$u'''(x_i) = \frac{d^3u(x_i)}{dx^3} \approx \frac{u_{i+3} - 3u_{i+2} + 3u_{i+1} - u_i}{h^3} \quad (I.24)$$

L'autre utilisant les nœuds du maillage.

$$u'''(x_i) = \frac{d^3u(x_i)}{dx^3} \approx \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + 2u_{i-1} - u_{i-2}}{h^3} \quad (I.25)$$

Ces deux formules centrées sont d'ordre deux.

Pour la dérivée quatrième :

– différence finie centrée

Dans le cas particulier de points x_i régulièrement espacés d'un pas h uniforme, on retrouve en utilisant l'équation (I.23) et deux fois la discrétisation centrée classique d'ordre deux de la dérivée quatrième :

$$u^{(4)}(x_i) = \frac{d^4u(x_i)}{dx^4} \approx \frac{u_{i+2} - 4u_{i+1} + 6u_i + 4u_{i-1} - u_{i-2}}{h^3} \quad (I.26)$$

On peut observer que l'on retrouve dans ces formules les coefficients du développement du binôme. Il existe un grand nombre de formules de différences finies et le bon choix n'est pas toujours évident.

1.7.1.3 Applications en dimension un

Problème de Dirichlet

$$\begin{cases} -u''(x) = f(x) & a \leq x \leq b \\ u(a) = \alpha, u(b) = \beta \end{cases} \quad (I.27)$$

Interprétations physiques :

- barre élastique sous un chargement axial.
- corde élastique soumise à un chargement transverse.
- conduction thermique dans une barre.

On utilise la discrétisation centrée classique de la dérivée seconde :

$$u''(x_i) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad (I.28)$$

On obtient ainsi le système d'équations linéaires suivant dont la résolution donne les valeurs u_i de la solution approchée du problème (I.27)

$$\begin{cases} -\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = f_i & \text{pour } i = 1..N-1 \\ u_0 = \alpha, u_N = \beta \end{cases} \quad (I.29)$$

Ce qui s'écrit sous forme matricielle :

$$\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ & \vdots & & \ddots & -1 \\ & 0 & & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_i \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 + \frac{\alpha}{h^2} \\ f_2 \\ f_i \\ f_{N-1} \\ f_N + \frac{\beta}{h^2} \end{pmatrix} \quad (\text{I. 30})$$

Il ne reste alors plus qu'à résoudre ce système linéaire par des techniques standard de factorisation (méthodes de Gauss *LU* ou méthode de Choleski *LLT*, ou méthode de relaxation)

Problème mixte Dirichlet-Neumann

$$\begin{cases} -u''(x) = f(x) & a \leq x \leq b \\ u(a) = \alpha, \quad u'(b) = \beta \end{cases} \quad (\text{I. 31})$$

Où l'on a, cette fois, une condition de Neumann en b .

Les modifications du problème discrétisé sont les suivantes. Tout d'abord, le nombre d'inconnues a changé. Il y a une inconnue au point b . En effet, la donnée de $u'(b)$ ne dit rien de la valeur de $u(b)$. C'est donc une nouvelle inconnue du problème. Le problème discret a donc maintenant, sur la base du même maillage, N inconnues u_i pour $i = 1$ à N . D'autre part, il faut proposer une formule discrétisée de la condition de Neumann $u'(b) = \beta$. On l'a vu, plusieurs choix sont possibles pour approcher une dérivée première. C'est un des écueils des méthodes de différences finies qui ne donnent pas de façon naturelle une bonne approximation des conditions de Neumann. Ici, il y a deux choix possibles :

On peut remplacer au point b la dérivée $u'(b)$ par :

$$u'(b) \approx \frac{u_{N+1} - u_N}{h} \quad (\text{I. 32})$$

formule qui, bien que seulement d'ordre un, est cohérente avec la modélisation d'un flux ou d'un effort externe, et qui maintient la symétrie du système matriciel. C'est en particulier la bonne modélisation par différences finies de l'effet d'un effort concentré au point L .

On peut remplacer au point b la dérivée $u'(b)$ par :

$$u'(b) \approx \frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2h} \quad (\text{I. 33})$$

Cette formule est d'ordre 2. Elle permet donc de conserver globalement l'ordre 2 de l'approximation. Elle est cohérente avec la modélisation d'une condition de symétrie par une condition de Neumann. Pour retrouver la symétrie de la matrice, il faudra diviser la dernière ligne du système par 2. Ceci conduit d'ailleurs précisément à la formule que l'on obtiendra par une méthode d'éléments finis P1.

$$\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ & \vdots & & \ddots & -1 \\ & 0 & & \cdots & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_i \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 + \frac{\alpha}{h^2} \\ f_2 \\ f_i \\ f_{N-1} \\ \frac{f_N}{2} + \frac{\beta}{h^2} \end{pmatrix} \quad (\text{I. 34})$$

1.7.1.4 Approximation par différences finies en dimension supérieure

Comme en dimension un, la première étape consiste à discrétiser le domaine. C'est dans l'application aux problèmes bidimensionnels et tridimensionnels que la méthode des différences finies présente sa plus sévère limitation. En effet elle n'est bien adaptée qu'à la discrétisation de domaines rectangulaires ou parallélépipédiques par des maillages formés de grilles perpendiculaires. Les dérivées partielles dans chaque direction d'axe sont approchées comme les dérivées en dimension un.

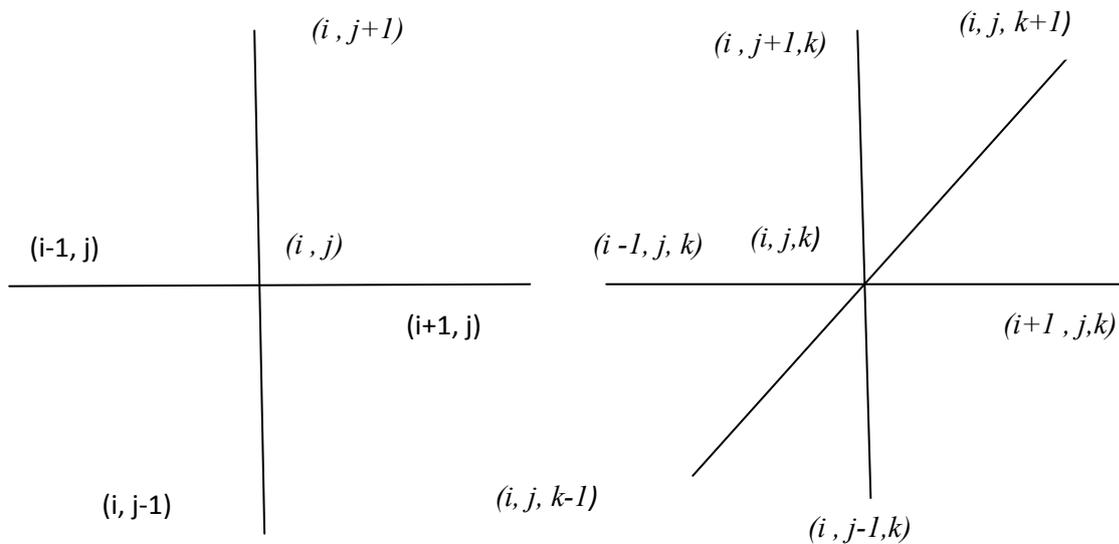


Figure 1.5 Grilles différences finies bidimensionnelles et tridimensionnelles.

Discrétisation géométrique

Dans le cas de domaines rectangulaires (ou parallélépipédiques en dimension 3) de cotés parallèles aux axes, on construit une grille de discrétisation en différences finies par quadrillage selon les deux (ou trois) directions d’axes. On notera Δx le pas de discrétisation selon x et de même Δy et Δz les pas de discrétisation en y et z . On obtient ainsi aux intersections des lignes du quadrillage les nœuds de coordonnées (x_i, y_j, z_k) du maillage en différences finies. Cette technique de maillage est généralisable aux assemblages de rectangles (ou de parallélépipèdes) ainsi qu’aux domaines se ramenant par bijection régulière à un rectangle (ou un parallélépipède). En revanche, dans le cas de géométries complexes les discrétisations par éléments finis sont mieux adaptées.

Quelques formules simples d’approximation des dérivées partielles par différences finies

Notons, en dimension deux, $u_{i,j}$ l’approximation de la valeur exacte $u(x_i, y_j)$ pour le point d’indice i, j de la grille.

Pour les dérivées partielles premières :

–Différences divisées progressives : on a les approximations suivantes :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y} \quad (I. 35)$$

–Différences divisées régressives : on considère cette fois les approximations :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y} \quad (I. 36)$$

–Différences divisées centrées : on obtient (comme en dimension un) une approximation du second ordre :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2 \Delta x} \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2 \Delta y} \quad (I. 37)$$

et avec un demi-pas :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \quad (I. 38)$$

On en déduit, par double différentiation, l'approximation centrée d'ordre deux du Laplacien :

$$-\Delta u(x_i, y_j) \approx \frac{-u_{i+1,j} + 2u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{-u_{i,j+1} + 2u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \quad (I. 39)$$

Et plus généralement l'approximation de l'équation l'opérateur $div(\sigma grad)$ pour σ variable

$$\begin{aligned} & -div(\sigma grad(u))(x_i, y_j) \\ & \approx - \frac{\sigma(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)(u_{i+1,j} - u_{i,j}) + \sigma(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)(u_{i,j} - u_{i-1,j})}{\Delta x^2} \\ & \quad - \frac{\sigma(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})(u_{i,j+1} - u_{i,j}) + \sigma(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})(u_{i,j} - u_{i,j-1})}{\Delta y^2} \end{aligned} \quad (I. 40)$$

Conditions aux limites de Neumann

On doit ajouter la prise en compte des conditions aux limites. Pour les conditions de Dirichlet, il suffit de fixer les valeurs de $u_{i,j}$ correspondant aux valeurs données sur la frontière Γ_d . Pour les conditions de Neumann, on doit discrétiser

$$\frac{\partial u}{\partial n_{|\Gamma_n}} = g \quad (I. 41)$$

Il y a comme pour la dérivée en dimension un, plusieurs choix possibles pour approcher la dérivée normale en différences finies.

- Le choix décentré d'ordre un conserve la symétrie de la matrice du système linéaire global, et s'interprète de manière naturelle en terme de flux. Il consiste à remplacer,

selon le côté de frontière concerné, la dérivée normale $\frac{\partial u}{\partial n|_{\Gamma_n}} = g$ par l'une des quatre expressions

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}, \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}, \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}, \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y} \quad (I.42)$$

- Le choix centré du second ordre conservera globalement l'ordre 2 de l'approximation. Ce choix est cohérent avec la modélisation d'une condition de symétrie par une condition de Neumann. Il consiste à remplacer, selon le côté de frontière concerné, la dérivée normale $\frac{\partial u}{\partial n|_{\Gamma_n}} = g$ par l'une des quatre expressions

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}, \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y} \quad (I.43)$$

Il est ensuite nécessaire de numéroter les u_{ij} pour qu'elles constituent les composantes U_I d'un vecteur inconnu U . La numérotation influe sur la structure de la matrice. On utilise des algorithmes de numérotation optimale afin de minimiser le stockage (profil) de la matrice. Il ne reste alors plus qu'à résoudre le système linéaire obtenu par des méthodes directes de factorisation (méthodes de Gauss LU ou méthode de Choleski LL^T) ou par des méthodes itératives.

Remarque :

Les formules proposées ci-dessus ne représentent qu'une petite partie des formules possibles. Ce sont les plus fréquemment utilisées. Il existe un grand nombre de formules associées aux divers ordres de précision.

1.7.2 Eléments finis

La méthode des éléments finis consiste à approcher, dans un sous-espace de dimension finie, un problème écrit sous forme variationnelle (comme minimisation de l'énergie, en général) dans un espace de dimension infinie. La solution approchée est dans ce cas une fonction déterminée par un nombre fini de paramètres comme, par exemple, ses valeurs en certains points (les nœuds du maillage).

Avantages : Traitement possible de géométries complexes, détermination plus naturelle des conditions aux limites, possibilité de démonstrations mathématiques de convergence et de majoration d'erreurs.

Inconvénients : Complexité de mise en œuvre.

1.7.2.1 L'approche éléments finis en 1-D

La présentation très succincte faite ici n'est qu'une première introduction à la méthode des éléments finis. Elle a pour but de donner les idées de base dans un cas extrêmement simple.

Remarquons tout d'abord que la formulation différentielle présentée par la formule (I.27) du problème suppose l'existence de dérivées secondes de la solution u . Physiquement, on peut trouver des exemples très simples de problèmes pour lesquels u' est discontinue et donc u'' n'a pas de sens classique (il faut alors considérer u'' au sens des distributions). Prenons, par exemple, une corde soumise à un chargement discontinu. La solution prendra la forme d'une ligne brisée.



Figure. I.6 – Corde élastique sous chargement discontinu

En réalité, la bonne formulation mathématique du problème consiste à écrire que la déformée de la corde réalise le minimum de l'énergie à sa position d'équilibre. L'énergie de ce problème s'écrit

$$J(u) = \frac{1}{2} \int_a^b [u'(x)]^2 dx - \int_a^b f(x)u(x) dx \quad (\text{I. 44})$$

C'est à partir de cette formulation en minimisation d'énergie que se déduit la formulation variationnelle (ou principe des puissances virtuelles) qui est à la base de la méthode des éléments finis. On comprend que les éléments finis soient particulièrement adaptés aux problèmes d'équilibre.

On introduit tout d'abord un produit scalaire de 2 fonctions selon :

$$(v, w) = \int_a^b v(x)w(x) dx \quad (\text{I. 45})$$

et l'espace $L^2[a, b]$ des fonctions de carré sommable sur $[a, b]$, c'est-à-dire telles que l'intégrale suivante existe :

$$\int_a^b v^2(x) dx \quad (I.46)$$

L'espace $L^2[a, b]$, muni du produit scalaire ci-dessus est un espace de Hilbert. Soit $H^1[a, b]$ l'espace de Hilbert des fonctions v , de carré sommable et dont la dérivée est également de carré sommable

$$v \in L^2[a, b], \quad v' \in L^2[a, b], \quad v(a) = v(b) = 0 \quad (I.47)$$

Et soit $H_0^1[a, b]$ l'espace de Hilbert des fonctions v de $H^1[a, b]$ nulles en a et b .

$$a(u, v) = \int_a^b u'(x)v'(x) dx \quad (I.48)$$

Il est facile de vérifier que la forme est bilinéaire, qui est un produit scalaire sur $H_0^1[a, b]$. (Voir l'annexe 2 pour la définition de ces espaces fonctionnels). Considérons donc le problème de minimisation de la forme quadratique représentant l'énergie du système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher la fonction } u \text{ vérifiant } u(a) = \alpha \quad u(b) = \beta \\ \text{qui réalise le minimum de la forme } J \text{ définie par} \\ J(v) = \frac{1}{2} \int_a^b v'^2 dx - \int_a^b f v dx \end{array} \right. \quad (I.49)$$

Ce problème de minimisation est équivalent au problème variationnel suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher la fonction } u \text{ vérifiant } u(a) = \alpha \quad u(b) = \beta \\ \int_a^b u'(x)v'(x) dx - \int_a^b f(x)v(x) dx = 0 \quad \forall v \in H_0^1[a, b] \end{array} \right. \quad (I.50)$$

Pour s'en convaincre, il suffit de calculer $J(u + \lambda v)$ avec u solution du problème variationnel, λ réel quelconque et $v \in H_0^1[a, b]$ quelconque. Ainsi la fonction $u + \lambda v$ est une fonction quelconque de $H_0^1[a, b]$ vérifiant les conditions aux limites imposées en a et b . Remarquons que ce sont ces conditions aux limites de Dirichlet qui imposent le choix de fonctions v nulles en a et b .

$$J(u + \lambda v) = J(u) + \lambda \left[\int_a^b u'(x)v'(x) dx - \int_a^b f(x)v(x) dx \right] + \frac{\lambda^2}{2} \int_a^b [v'(x)]^2 dx \quad (I.51)$$

Si u minimise J , l'expression

$$\lambda \left[\int_a^b u'(x)v'(x) dx - \int_a^b f(x)v(x) dx \right] + \frac{\lambda^2}{2} \int_a^b [v'(x)]^2 dx \quad (I.52)$$

doit être positive pour tout λ réel et tout $v \in H_0^1[a, b]$ ce qui nécessite que

$$\left[\int_a^b u'(x)v'(x) dx - \int_a^b f(x)v(x) dx \right] = 0 \quad \forall v \in H_0^1[a, b] \quad (I.53)$$

Inversement si le crochet

$$\left[\int_a^b u'(x)v'(x) dx - \int_a^b f(x)v(x) dx \right] \quad (I.54)$$

est nul, on voit que $J(u) \leq J(u + \lambda v) \quad \forall \lambda$ et $\forall v$. On obtient donc, pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$, et pour tout $v \in H_0^1[a, b]$, l'équivalence

$$J(u + \lambda v) \geq J(u) \Leftrightarrow \left[\int_a^b u'(x)v'(x)dx = \int_a^b f(x)v(x)dx \right] \quad (I.55)$$

Remarque: Observons que la formulation variationnelle revient à écrire qu'à l'équilibre, donc au minimum de l'énergie, les dérivées de J au point u dans toutes les directions v sont nulles. En effet on a, par définition de la dérivée directionnelle :

$$J'(u, v) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{J(u + \lambda v) - J(u)}{\lambda} = \int_a^b u'(x)v'(x)dx - \int_a^b f(x)v(x)dx \quad (I.56)$$

Une fois la formulation variationnelle obtenue, on peut retrouver l'équation différentielle initiale (I.21) de la façon suivante :

On intègre par parties le terme

$$\int_a^b u'(x)v'(x)dx = - \int_a^b u''(x)v(x)dx + u'(b)v(b) - u'(a)v(a) \quad (I.57)$$

En prenant en compte les conditions sur v ($v(a) = v(b) = 0$), on en déduit

$$- \int_a^b u''(x)v(x)dx - \int_a^b f(x)v(x)dx = 0 \quad \forall v \in H_0^1[a, b] \quad (I.58)$$

D'où l'égalité

$$-u''(x) = f(x) \quad (I.59)$$

Au sens de $L^2(a, b)$.

On peut faire la démarche inverse. C'est celle que l'on rencontre dans la plupart des ouvrages. Le point de départ est alors le problème différentiel (I.27). On multiplie l'équation par $v(x)$ et on intègre sur $[a, b]$:

$$- \int_a^b u''(x)v(x)dx = \int_a^b f(x)v(x)dx \quad (I.60)$$

Par intégration par parties :

$$- \int_a^b u''(x)v(x)dx = \int_a^b u'(x)v'(x)dx + u'(a)v(a) - u'(b)v(b) \quad (I.61)$$

On obtient la formulation variationnelle, qui, en prenant en compte les conditions sur les fonctions v appartenant à l'espace $H_0^1[a, b]$

$$v(a) = v(b) = 0 \quad (I.62)$$

S'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher la fonction } u \in H_0^1[a, b] \text{ vérifiant } u(a) = \alpha \quad u(b) = \beta \text{ telle que} \\ \int_a^b u'(x)v'(x)dx = \int_a^b f(x)v(x)dx \quad \forall v \in H_0^1[a, b] \end{array} \right\} \quad (I.63)$$

Cette formulation est équivalente à la minimisation d'une forme quadratique représentant du système qui s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher la fonction } u \text{ vérifiant } u(a) = \alpha \quad u(b) = \beta \\ \text{qui réalise le minimum de la forme } J \text{ définie par} \\ J(v) = \frac{1}{2} \int_a^b v'^2 dx - \int_a^b f v dx \end{array} \right\} \quad (I.64)$$

On obtient ainsi 3 formes équivalentes du problème

- une forme différentielle
- une forme variationnelle (principe des travaux virtuels)
- une forme de minimisation de l'énergie

Un premier exemple simple : les éléments P1

Considérons le problème de Dirichlet homogène :

$$\left\{ \begin{array}{l} -u''(x) = f(x) \quad a < x < b \\ u(a) = 0 \quad u(b) = 0 \end{array} \right\} \quad (I.65)$$

Dont on écrira la formulation variationnelle dans l'espace $H_0^1[a, b]$. On approche l'espace $H_0^1[a, b]$ par l'espace $V_{0,h} \subset H_0^1[a, b]$ construit de la manière suivante.

On choisit une discrétisation de l'intervalle $[a, b]$ en N sous-intervalles ou éléments $K_i = [x_{i-1}, x_i]$. Les éléments K_i n'ont pas forcément même longueur. $V_{0,h}$ est alors

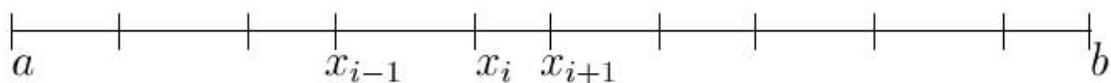


Figure I.7 – Discrétisation (maillage) du segment $[a, b]$ en éléments finis.

L'espace des fonctions continues affines par morceaux (c'est-à-dire affines sur les segments K_i) et nulles aux extrémités a et b .

L'utilisation de fonctions affines, fonctions polynomiales de degré un, justifie la dénomination d'éléments P1. Chaque fonction $v_h \in V_{0,h}$ est déterminée de manière unique par la donnée de ses valeurs aux points x_i pour $i = 1, \dots, N - 1$. L'espace $V_{0,h}$ est de dimension $N - 1$.

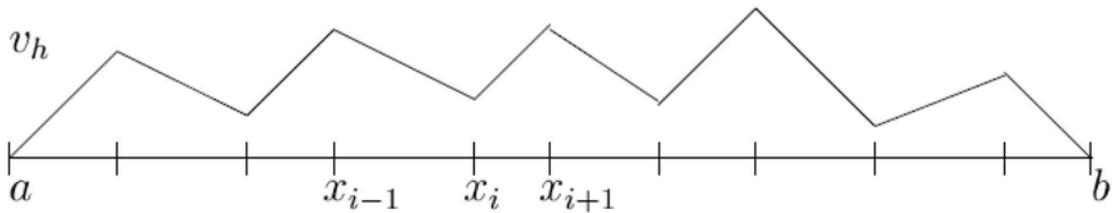


Figure I.8 – Une fonction affine par morceaux.

Base de Lagrange

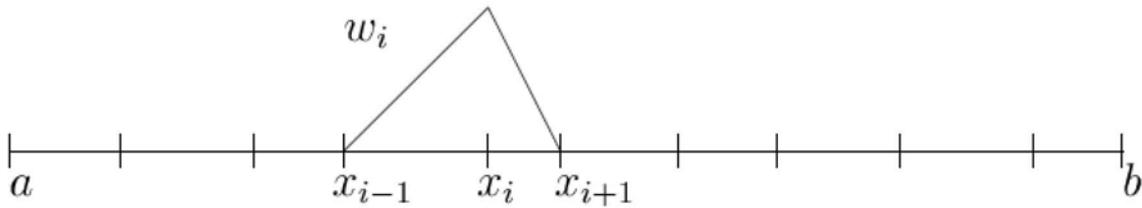


Figure I.9 – Fonction de base de Lagrange

Considérons les $N - 1$ fonctions $w_i \in V_{0,h}$ définies par les $N-1$ conditions suivantes :

$$w_i(x_j) = \delta_{ij} \quad \forall i = 1, \dots, N - 1 \text{ et } \forall j = 1, N - 1 \quad (I.66)$$

Ces $N-1$ fonctions forment une base de $V_{0,h}$ et une fonction v_h quelconque s’écrit dans cette base :

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^{i=N-1} v_i w_i(x) \quad (I.67)$$

Avec $v_i = v_h(x_i)$. Les coefficients v_i sont donc les valeurs de v_h aux points (x_i)

Ecriture du problème approché

Ecrivons le problème approché dans $V_{0,h}$

$$\int_a^b u'_h(x)v'_h(x)dx = \int_a^b f(x)v_h(x)dx \quad \forall v_h \in v_{0,h} \quad (I.68)$$

Le problème étant linéaire, l’égalité est vraie pour tout v_h si elle est vraie pour une base de l’espace vectoriel $V_{0,h}$

On peut donc remplacer dans l’équation (I.66) $\forall v_h \in V_{0,h}$ par $\forall w_i$ pour $i = 1, \dots, N - 1$.

D’autre part, écrivons u_h , solution du problème approché dans $V_{0,h}$, dans la base des w_i

$$v_h(x) = \sum_{j=1}^{j=N-1} u_j w_j(x) \quad (I.69)$$

Avec $u_j = u_h(x_j)$ valeur approchée de la solution exacte au point (x_j) , on obtient l’écriture suivante du problème approché :

Trouver u_1, u_2, \dots, u_{N-1} tels que

$$\int_a^b \left(\sum_{j=1}^{j=N-1} u_j w'_j(x) \right) w'_i(x) dx = \int_a^b f(x) w_i(x) dx \quad \forall i = 1, \dots, N-1 \quad (I.70)$$

ce que l'on peut récrire

$$\sum_{j=1}^{j=N-1} \int_a^b w'_j(x) w'_i(x) dx u_j = \int_a^b f(x) w_i(x) dx \quad \forall i = 1, \dots, N-1 \quad (I.71)$$

Soit en posant :

$$\int_a^b f(x) w_i(x) dx = F_i \quad (I.72)$$

et

$$\int_a^b w'_j(x) w'_i(x) dx = A_{ij} \quad (I.73)$$

$$\sum_{j=1}^{j=N-1} A_{ij} u_j = F_i \quad \forall i = 1, \dots, N-1 \quad (I.74)$$

On a ainsi obtenu un système linéaire de $N-1$ équations à $N-1$ inconnues, qui peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$A U = F \quad (I.75)$$

Chaque ligne d'indice i du système linéaire correspond au choix d'une fonction de base d'indice i de l'espace des fonctions tests $V_{0,h}$. Il y a autant d'équations que d'inconnues puisque la partie inconnue de la solution approchée s'exprime elle aussi dans la base des w_i .

1.7.3 Volumes finis

La méthode des volumes finis intègre, sur des volumes élémentaires de forme simple, les équations écrites sous forme de loi de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives et est donc particulièrement bien adaptée aux équations de la mécanique des fluides :

Equation de conservation de la masse, équation de conservation de la quantité de mouvement, équation de conservation de l'énergie.

Sa mise en œuvre est simple si les volumes élémentaires sont des rectangles (ou des parallélépipèdes rectangles en dimension 3). Cependant la méthode des volumes finis

permet d'utiliser des volumes élémentaires de forme quelconque, donc de traiter des géométries complexes, ce qui est un avantage sur les différences finies.

Il existe une grande variété de méthodes selon le choix de la géométrie des volumes élémentaires et des formules de calcul des flux. En revanche, on dispose de peu de résultats théoriques de convergence.

1.7.3.1 L'approche volumes finis

La méthode des volumes finis, comme celle des éléments finis utilise une formulation intégrale des équations. Mais au lieu d'utiliser un produit scalaire de L^2 par des fonctions tests, on se contente d'intégrer les équations différentielles sur des volumes élémentaires ou volumes de contrôle. Ceci peut s'interpréter comme l'utilisation de fonctions tests, fonctions indicatrices des volumes élémentaires.

1.7.3.2 En dimension un

A partir d'un maillage en volumes finis, où l'on prend les inconnues au centre x_i des volumes de contrôles qui sont dans ce cas monodimensionnel, les segments $\left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\right]$, on passe ainsi de

$$-u''(x) = f(x) \Leftrightarrow -(u'(x))' = f(x) \quad (I.76)$$

à

$$-\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (u'(x))' dx = u' \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) - u' \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x) dx \quad (I.77)$$

Les $u'(x_{i-\frac{1}{2}})$ et $u'(x_{i+\frac{1}{2}})$ apparaissent comme des flux aux interfaces des volumes élémentaires, les segments $\left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\right]$.

Remarque Ceci explique, qu'à l'inverse des différences finies, ce sont, dans le cas des volumes finis, les conditions de Neumann qui sont faciles à prendre en compte et les conditions de Dirichlet qui sont plus délicates.

Si on approche les dérivées selon :

$$u'(x_{i+1/2}) = \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h} \quad \text{et} \quad u'(x_{i-1/2}) = \frac{u(x_i) - u(x_{i-h})}{h} \quad (I.78)$$

Dans le cas particulier de points x_i régulièrement espacés d'un pas h uniforme, on retrouve la discrétisation centrée classique de la dérivée seconde

$$u''(x_i) = \frac{d^2u}{dx^2}(x_i) \simeq \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad (\text{I. 79})$$

L'intérêt de cette technique de volumes finis n'apparaît que dans les applications aux problèmes en dimension 2 et 3. De nombreuses variantes existent, selon la géométrie des volumes élémentaires, le choix du positionnement des inconnues aux centres ou aux sommets des volumes de contrôle, et les diverses formules de calcul des flux aux interfaces.

1.7.3.3 En dimension deux

La méthode des volumes finis, conservative par essence, est particulièrement bien adaptée à la résolution numérique de problèmes conservatifs. On l'utilise donc avec succès pour modéliser des phénomènes de transport. Il existe un grand nombre de techniques de type volumes finis qui se distinguent :

- par la situation des inconnues : aux nœuds du maillage ou au centre des mailles
- par la forme des volumes de contrôle : carrés, quadrilatères quelconques, polygones quelconques, réunions de triangles, etc
- par le choix des formules de calcul approché des flux et en particulier leur ordre de précision.

Nous choisissons ici de nous limiter au choix originel historiquement de mailles carrées ou quadrangulaires avec les inconnues représentées au centre des mailles.

Considérons l'équation de convection :

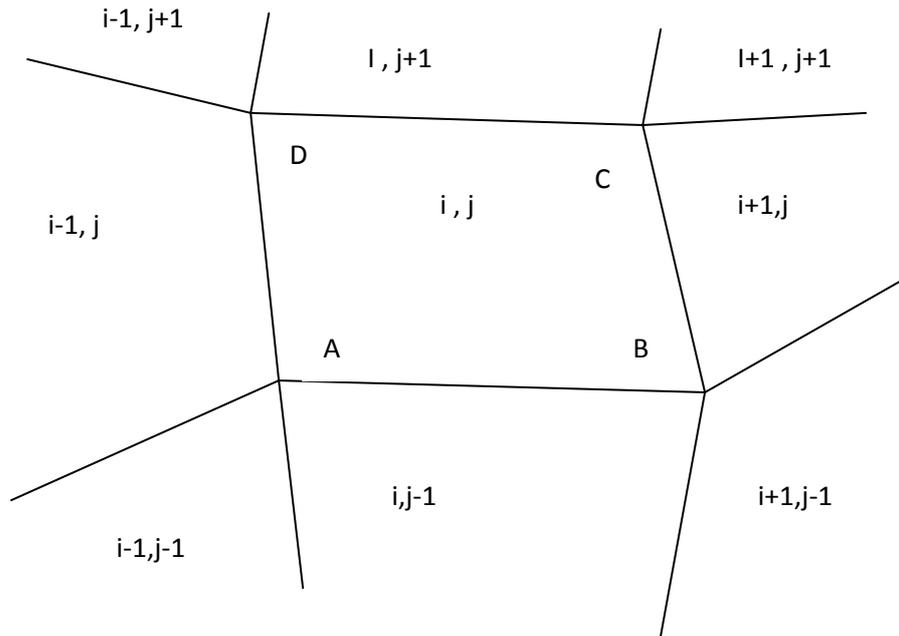


Figure I.10 Grille volumes finis.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}(F(u)) = Q \quad (\text{I. 80})$$

En intégrant l'équation dans le volume de contrôle ABCD on obtient

$$\text{mes}(ABCD) \frac{du_{ij}}{dt} + \int_{ABCD} F(u) \cdot n \, ds = \text{mes}(ABCD) Q_{ij} \quad (\text{I. 81})$$

L'intégrale $\int_{ABCD} F(u) \cdot n \, ds$ représente la somme des flux sortants de F à travers les faces AB, BC, CD et DA.

Les flux doivent être calculés par des formules indépendantes de la cellule, afin d'assurer la conservation globale. En particulier, le flux sortant du volume élémentaire $\Omega_{i,j}$ à travers la face AB doit être équilibré par celui sortant de $\Omega_{i,j-1}$ à travers la même face AB.

Schémas centrés

Toujours en se plaçant dans le cas d'inconnues au centre des mailles on a les choix suivants :

1.

$$F_{AB} = \frac{1}{2} [F_{ij} + F_{i,j-1}] \text{ avec } F_{ij} = F(u_{i,j})$$

2.

$$F_{AB} = F\left(\frac{u_{ij} + u_{i,j-1}}{2}\right)$$

3.

$$F_{AB} = \frac{1}{2} [F_A + F_B]$$

Avec $F_A = \frac{1}{4} [F(u_{i,j}) + F(u_{i-1,j}) + F(u_{i,j-1}) + F(u_{i-1,j-1})]$

Et $F_B = \frac{1}{4} [F(u_{i,j}) + F(u_{i+1,j}) + F(u_{i,j-1}) + F(u_{i+1,j-1})]$

4.

$$F_{AB} = \frac{1}{2} [F_A + F_B]$$

Avec $F_A = F\left(\frac{u_{i,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j-1}}{4}\right)$

Et $F_B = F\left(\frac{u_{i,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}}{4}\right)$

Schémas décentrés

Prenons le cas d'un flux dirigé comme sur la figure 1-10. Dans le cas de schémas décentrés, on calcule le flux à travers AB en prenant la valeur $F(u_{i,j-1})$ et ainsi de suite pour les flux à travers les faces BC, CD, et DA. On prend donc

$$F_{AB} = F(u_{i,j-1}), F_{BC} = F(u_{i+1,j}), F_{CD} = F(u_{i,j+1}), F_{DA} = F(u_{i-1,j})$$

Ce choix conduit à des approximations du premier ordre. D'autres formules plus complexes permettent d'obtenir des flux décentrés au second ordre.

I.8 Bibliothèques numériques

Nous disposons à l'heure actuelle d'une capacité de stockage incroyable, En effet il a été possible de construire de véritables bibliothèques virtuelles réunissant un grand nombre de programmes de base que l'on peut maintenant facilement consulter via Internet. Ces programmes sont généralement écrits en Fortran 77, Fortran 90 et C. Dans la majorité des cas, ils sont écrits et maintenus par des numériciens et mathématiciens. L'utilisation de ces programmes est de la responsabilité de l'utilisateur. Il est donc nécessaire d'être vigilant et de garder un esprit critique quant aux résultats obtenus avec ces programmes. Voir par exemple le serveur GAMS <http://gams.nist.gov/>. Ces programmes sont disponibles aussi sur de nombreux sites associés aux laboratoires de recherche.

Conclusion :

Dans ce chapitre, on a présenté les différents types d'erreurs commises par un numéricien pendant la programmation d'un modèle numérique, ainsi que les avantages et les inconvénients de chaque méthode de discrétisation. Dans les cas de problèmes d'écoulement et de transfert, la méthode des volumes finis doit être préférée.

Chapitre II : Modélisation des phénomènes et Méthodes d'optimisation

II.1 Introduction :

Les hommes ont observé le monde depuis des millénaires. L'observation les a mené à établir des théories permettant d'expliquer les régularités de la nature. Parmi les premières observations et théories, on compte certainement celles concernant le ciel. Il s'agissait alors de répondre à des questions telles que : pourquoi le soleil se lève tous les jours, quand reviennent les saisons, les astres ont-ils une influence sur le destin des êtres humains? Avec l'avènement de l'agriculture il a fallu mettre au point des calendriers pour savoir quand il fallait planter et récolter. Au cours du temps les théories se sont complexifiées mais elles restaient fondées sur l'observation.

On considère traditionnellement que c'est avec Galilée que la science occidentale est entrée dans l'ère de la science expérimentale, où l'homme interroge la Nature et la force à répondre à l'aide d'expériences conçues dans ce but, ce qui n'était pas concevable antérieurement. Il s'est ainsi mis en place un cycle incessant d'allers et venues entre théorie et expérience. Par exemple, si l'on sait qu'un modèle à une dimension (1D) suffit, il est inutile pour les théories d'expliquer ou de prévoir de plus en plus de faits expérimentaux. Il s'agissait donc par l'expérience d'interroger la Nature de façon de plus en plus approfondie et de pousser les théories dans leurs derniers retranchements.

Puis à l'observation, la théorie et l'expérience est venu s'ajouter un nouvel outil scientifique: La modélisation Celle-ci a pleinement acquis ses lettres de noblesse avec l'avènement de l'informatique.

La simulation numérique a malheureusement commencé sa brillante carrière avec la mise au point de la première bombe atomique pendant la Seconde Guerre Mondiale. Elle s'est depuis imposée comme un outil indispensable à la pratique de la science, trouvant sa place entre l'observation, la théorie et l'expérience, et interagissant avec elles.

Loin d'être un substitut à l'expérience, la simulation numérique se révèle précieuse pour choisir quelle expérience il convient de réaliser pour obtenir le résultat voulu. Dans certains domaines, les expériences ont en effet la fâcheuse tendance à devenir de plus en plus coûteuses. La simulation permet un gain de temps et une économie substantielle en réduisant le nombre d'expériences à mener. On peut parler désormais d'expérimentation

virtuelle. La simulation s'est d'ailleurs émancipée vis-à-vis de la science en pénétrant dans les années 80 le monde des jeux vidéo, puis dans les années 90 celui de la réalité virtuelle.

L'utilisation de plus en plus courante des ordinateurs, ainsi que les progrès sur leur puissance ont permis des développements dans le domaine de la modélisation mathématique et de la simulation numérique de nombreux problèmes multidisciplinaires. La performance des calculs, ainsi que leur coût relativement faible rend possible le développement de modèles mathématiques compliqués, capables d'analyser de réels procédés industriels et de décrire les phénomènes physiques. Le développement de codes de calculs capables de décrire un procédé industriel est un enjeu très important pour le monde de la production aussi bien pour rechercher les conditions optimales pour mener un procédé, que pour le développement et l'innovation de nouvelles technologies. A l'heure actuelle, l'utilisation libre des codes de calcul par des opérateurs non-initiés n'est pas encore envisageable. Une étroite collaboration entre la communauté scientifique d'une part et le monde industriel d'autre part est souvent nécessaire afin de pouvoir associer l'intuition physique et la prédiction.

II.2 Choix du modèle

Un modèle est une représentation d'une classe de phénomènes et on essaie d'en rendre compte à l'aide d'un certain nombre d'hypothèses et de règles. A ce titre, une théorie est une forme de modèle. Un modèle n'est pas toujours parfait car il ne donne pas toujours une bonne représentation du phénomène étudié. Par exemple la théorie de Newton est un très beau modèle de la gravitation mais il ne permet pas de rendre compte de façon satisfaisante de certains phénomènes dont la théorie de la Relativité Générale rend compte aisément. Aucun modèle, aucune théorie ne peut rendre compte de la totalité du phénomène modélisé. Etant une simplification, tout modèle a ses limites, son domaine de validité. Il est indispensable que l'utilisateur d'un modèle soit conscient de cela, qu'il connaisse ce domaine de validité et qu'il reste critique vis-à-vis des résultats. Sinon, c'est la porte ouverte à tous les abus. Le modèle n'est pas la réalité : en dehors de ses limites ses résultats peuvent ne plus être proches de la réalité ; ils ne traduisent alors que les propriétés du modèle.

On ne peut pas affirmer qu'un modèle est vrai ou faux. Un outil qu'on utilise dans la vie quotidienne n'est ni vrai ni faux, c'est un outil qui peut servir à nous aider dans certain domaine, mais pas d'autre. Un modèle est un outil qui fournit simplement des résultats plus ou moins valables dans un domaine plus ou moins étendu: il peut être utilisé à bon ou à mauvais escient. La responsabilité en incombe à l'utilisateur.

Un bon modèle doit prédire et prévoir dans une certaine mesure le résultat d'une expérience. Cette prédictibilité peut avoir un caractère qualitatif ou quantitatif selon que le modèle se contente de prévoir un certain comportement ou qu'il permet de prédire la valeur de telle ou telle grandeur mesurable.

II.3 Utilisation du modèle

Les moyens disponibles et la précision souhaitée nous poussent à choisir avec pertinence certains modèles en fonction de leur adéquation, de leur complexité etc. Par exemple, on n'a pas besoin de commencer avec un modèle 2D ou 3D qui sera beaucoup plus gourmand en temps et à mettre en œuvre si un modèle à une dimension (1D) est suffisant.

Quelquefois, il est intéressant d'utiliser des modèles différents, correspondant à différents points de vue. De plus, la comparaison des résultats fournis par différents modèles est généralement très instructive sur les modèles et les phénomènes modélisés.

Si la comparaison entre les résultats de la théorie (le modèle) et l'expérience, conduit à un désaccord alors on peut mettre en cause la validité des paramètres introduits (paramètres physiques, conditions initiales) ou la validité du modèle, (le domaine de validité, la prise en compte de tous les phénomènes nécessaires), mais peut-être aussi la façon dont a été menée l'expérience!

Cette comparaison pourra amener l'utilisateur à adapter les paramètres du modèle afin d'améliorer les résultats des futures modélisations. Il s'instaure donc un système d'aller-retour entre la simulation et l'expérience.

Actuellement les modèles deviennent de plus en plus complexes et globaux, ce qui est rendu possible d'une part par les avancées théoriques et algorithmiques, et d'autre part par la montée en puissance exponentielle des ordinateurs (loi de Moore). Le développement d'algorithmes d'optimisation complexes (algorithmes génétiques, algorithme de recuit

simulé...) permet d'aller encore plus loin dans l'utilisation de la modélisation. Ils permettent de répondre à ce que l'on appelle le problème inverse : voulant obtenir telle ou telle propriété, quelles valeurs donner aux paramètres de mon problème ?

II.4 Optimisation d'un modèle

Parmi les problèmes rencontrés par le chercheur et l'ingénieur, les problèmes d'optimisation occupent à notre époque une place de choix. Ici le terme modèle, désigne l'objet, matériel ou non, que nous voulons étudier et optimiser: une molécule, un composant électronique, un processus industriel, un système complexe, un programme informatique, etc.

II.4.1 Essai et erreur

La méthode de base pour optimiser un modèle est la méthode d'essai et erreur: il s'agit de tester un certain nombre de solutions potentielles jusqu'à l'obtention d'une solution adéquate. C'est ce qu'on fait quand nous donnons à un paramètre plusieurs valeurs successives et que nous observons le résultat. C'est également le cas quand nous faisons varier ce paramètre de façon quasi-continue à l'aide d'un ordinateur et que nous traçons la courbe correspondante.

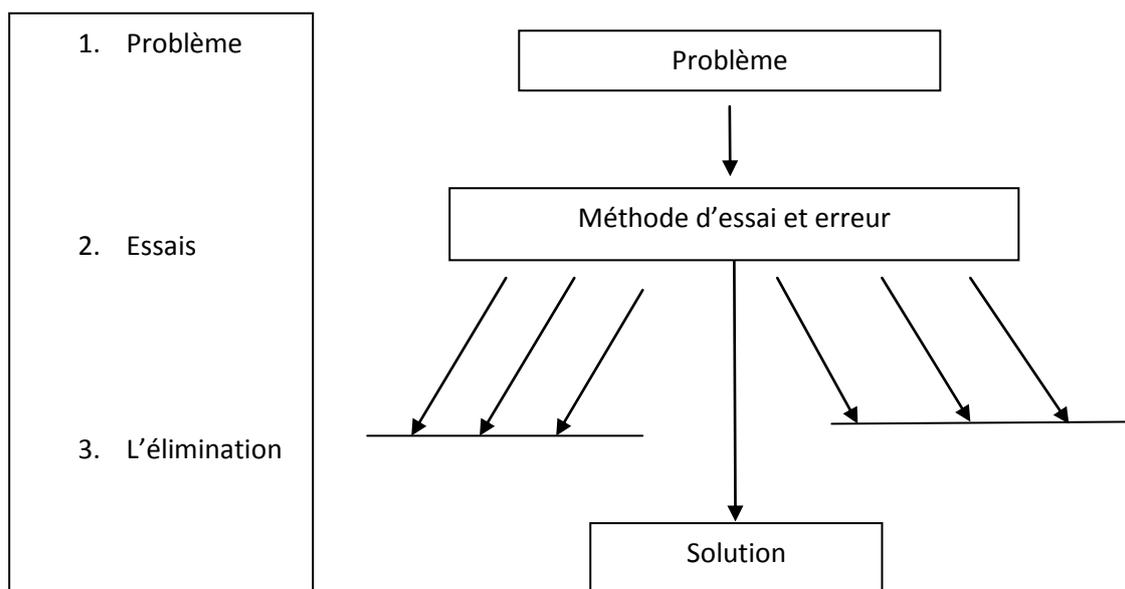


Figure II.1: Décrire l'apprentissage par essai et erreur par un schéma à trois niveaux (K.Popper,1994).

Considérons la figure II.1. Une situation nouvelle se présente et nécessite une solution qui n'est a priori pas connue. La méthode d'essai et erreur est alors employée: un grand nombre de solutions potentielles sont mises à l'essai. Les solutions inadéquates sont éliminées, jusqu'à ce qu'un essai se révèle satisfaisant. Ce schéma est très général. On peut l'appliquer au comportement des organismes vivants, à l'évolution des espèces, à l'évolution des sciences ou au processus d'optimisation : " Dans le fond, ce procédé semble être le seul qui soit logiquement possible. " (Popper, 1994) Les algorithmes informatiques constituent un puissant outil pour l'automatisation de ce processus.

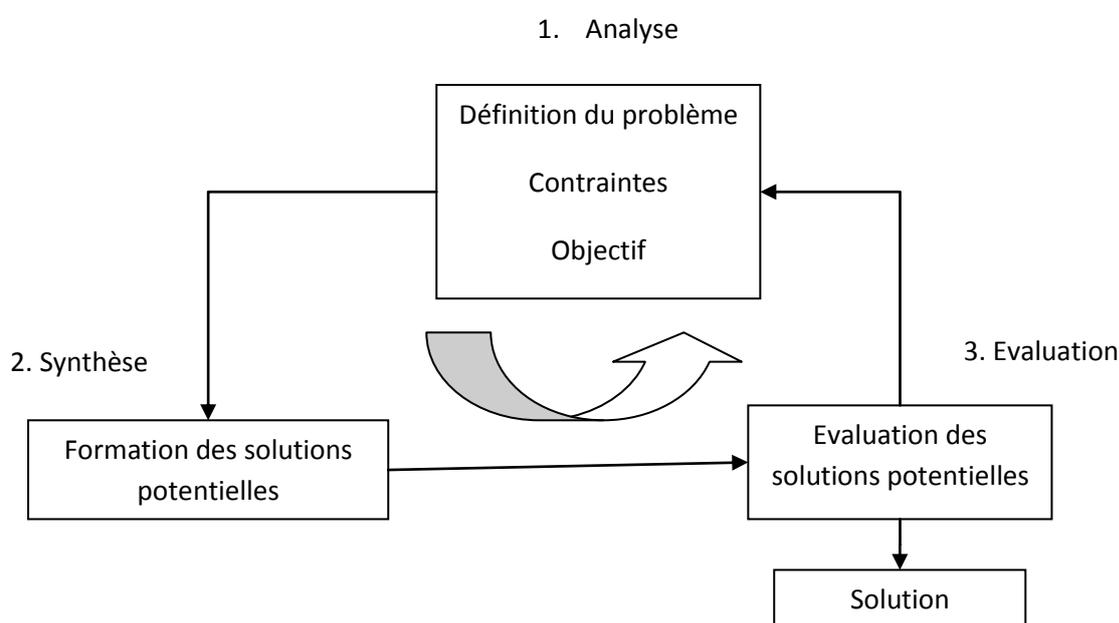


Figure II.2: Processus d'optimisation selon Asimow (Balachandran, 1993)

La figure II.2 présente le processus d'optimisation en trois étapes: analyse, synthèse et évaluation (Balachandran, 1993). Tout d'abord, il convient d'analyser le modèle et d'opérer un certain nombre de choix préalables:

- **Variables du modèle.** Quels sont les paramètres intéressants à faire varier ?
- **Espace de recherche.** Dans quelles limites faire varier ces paramètres ?
- **Fonction objectif.** Quels sont les objectifs à atteindre ? Comment les exprimer mathématiquement ?
- **Méthode d'optimisation.** Quelle méthode choisir ?

Après cette phase d'analyse, la méthode choisie *synthétise* des solutions potentielles qui sont *évaluées*, puis éventuellement éliminées jusqu'à obtention d'une solution acceptable. Si nécessaire, le modèle peut être alors redéfini à partir des solutions déjà obtenues.

Variables du modèle

On peut avoir intérêt de varier un grand nombre de paramètres pour augmenter les degrés de liberté de l'algorithme afin de découvrir des solutions potentielles. Ou bien, si on a une vue suffisamment précise de ce qu'on veut obtenir, on peut limiter le nombre de variables à l'essentiel, les variables pouvant être de natures diverses selon le modèle choisie.

Espace de recherche

L'espace de recherche peut changer d'un algorithme à l'autre. Par exemple pour les algorithmes de type Monte Carlo et génétique, il est généralement nécessaire de définir un espace de recherche fini. En revanche, d'autres algorithmes dépendent seulement des variables initiales et leur espace est infini. Cette limitation de l'espace de recherche n'est généralement pas problématique. En effet, ne serait-ce que pour des raisons technologiques ou informatiques, les intervalles de définition des variables sont en général naturellement limités. De plus, on a souvent une idée des ordres de grandeur des variables du problème.

Nous désignerons par $x_{i \min}$ et $x_{i \max}$ les bornes de chaque variable x_i :

$$x_{i \min} \leq x_i \leq x_{i \max} \quad \forall i \in [1, n]$$

Fonction objectif et fonction d'adaptation

La ou les grandeurs à optimiser peuvent être par exemple une consommation, un rendement, un facteur de transmission, un profit, la faisabilité technologique, un coût, une durée de développement une fonction d'erreur, etc. Un algorithme d'optimisation nécessite généralement la définition d'une fonction rendant compte de la pertinence des solutions potentielles, à partir des grandeurs à optimiser. Nous la nommerons *fonction d'adaptation* f . L'algorithme convergera vers un optimum de cette fonction, quelle que soit sa définition. La pertinence de la solution dépendra donc de la pertinence de la " question " posée à l'ordinateur. La fonction f doit donc exprimer le plus fidèlement possible le désir de l'utilisateur sous forme mathématique. C'est une fonction des variables x_1, \dots, x_n . Sa

définition peut être simplement analytique, ou elle peut faire appel à un modèle numérique du dispositif étudié... etc.

Objectif unique

Dans le cas d'un objectif unique, la définition de f ne pose généralement pas de problème. Par exemple, si l'on se fixe l'objectif de trouver un dispositif dont le rendement est maximum, f sera égale au rendement. Dans le cas où l'on utilise un modèle numérique, on commence par évaluer les caractéristiques des solutions potentielles en utilisant le modèle. Puis on calcule la fonction d'adaptation à partir de ces caractéristiques.

Objectifs multiples

Certains problèmes d'optimisation doivent satisfaire des *objectifs multiples*, souvent concurrents, ce qui implique un compromis. La méthode classique consiste à définir plusieurs fonctions objectives, traduisant chaque objectif à atteindre, et à les combiner au sein de la fonction d'adaptation. La combinaison la plus simple est une somme pondérée des fonctions objectif (Fonseca, 1993):

$$f = \sum_i a_i f_i \quad (\text{II. 1})$$

où les poids a_i doivent être tels que la fonction d'adaptation reste bornée dans l'intervalle $[0,1]$.

Remarquons qu'un poids peut être négatif afin de tenir compte de certaines contraintes du problème. C'est à nous de fixer convenablement les poids. On peut généralement classer les objectifs par importance mais les poids devront souvent être adaptés par tâtonnement. Le processus d'optimisation a beau être automatisé, l'utilisateur doit donc quand même optimiser " à la main " la définition de la fonction d'adaptation. Dans la littérature, ce problème délicat est souvent laissé dans l'ombre.

A la place d'une somme, on peut également utiliser un produit du type:

$$f = \prod_i f_i^{\beta_i} \quad (\text{II. 2})$$

ou des expressions plus complexes telles qu'une combinaison de sommes et de produits.

Il faut néanmoins être conscient des effets d'une combinaison des objectifs. Deux solutions potentielles dont les fonctions objectives n'ont pas les mêmes valeurs peuvent mener à une même valeur de la fonction d'adaptation. De plus, un algorithme utilisant une telle approche ne convergera à chaque fois que vers une seule solution alors qu'il existe peut-être toute une famille de solutions. Cette famille correspond alors à un sous-ensemble de l'espace de recherche, que l'on peut par exemple représenter sous forme d'une nappe dans un espace à trois dimensions. L'optimisation à objectifs multiples est un domaine de recherche très actif car les enjeux économiques et industriels sont énormes.

II.5 Méthodes d'optimisation

Une fois définie la fonction à optimiser, il s'agit de choisir une méthode adaptée au problème posé.

Les méthodes d'optimisation peuvent être classées de différentes manières : nous les classerons en *méthodes déterministes* et *méthodes non-déterministes*. Les méthodes déterministes sont généralement efficaces quand l'évaluation de la fonction est très rapide, ou quand la forme de la fonction est connue a priori. Les cas plus complexes (temps de calcul important, nombreux optima locaux, fonctions non-dérivables, fonctions fractales, fonctions bruitées...) seront souvent traités plus efficacement par des méthodes non-déterministes.

II.5.1 Méthodes déterministes

La recherche des extrema d'une fonction f revient à résoudre un système de n équations à n inconnues, linéaire ou non:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1; \dots; x_n) = 0 \quad (\text{II.3})$$

On peut donc utiliser des méthodes classiques telles que la méthode du gradient ou la méthode de Gauss-Seidel (Ciarlet, 1990 et Nougier, 1987) En général, l'utilisation de ces méthodes nécessite comme étape préliminaire la localisation des extrema. Celle-ci peut être faite, par exemple sur un graphique ou par une discrétisation fine de l'espace de recherche. La fonction à optimiser est évaluée en chacun des points de discrétisation. La valeur

maximale est alors considérée comme une bonne approximation de l'optimum de la fonction. Cette méthode est brutale et le temps de calcul augmentera exponentiellement en fonction du nombre de variables. En effet, considérons une optimisation sur huit variables. Si on discrétise l'intervalle de définition de chaque variable en seulement 3 points, une exploration systématique nécessite $3^8 = 6561$ exécutions du modèle. Dans le cas d'un modèle physique nécessitant 10 secondes de calcul sur un PC standard, cela représente 18 heures de calcul, pour un résultat inutilisable!

On rappelle ci-après le principe des méthodes déterministes de type gradient. Pour une présentation détaillée de ces méthodes en particulier et des méthodes déterministes en général on pourra consulter l'ouvrage de Bonnans (1997).

Pour minimiser une fonction $f(x)$ avec $x \in \mathbb{R}^n$, les algorithmes d'optimisation de type gradient cherchent un point \bar{x} tel que $\nabla f(\bar{x}) = 0$ en construisant une suite minimisant $\{x_k\}$ tel que $\lim_{\inf} \nabla f(x_k) = 0$.

Le schéma général de ces algorithmes est le suivant :

1. Etape 0: choisir un point initial x_0
2. Etape 1: test d'arrêt : $|\nabla f(x_k)| \leq \varepsilon$
3. Etape 2: calcul d'une direction de descente en cherchant une direction d_k minimisant un problème approché du type

$$(P_k) : \min_{\{d, \|d\| < a\}} \left\{ f(x_k) + (g(x_k), d) \left[\frac{1}{2} (M_k^{-1} d, d) \right] \right\} \quad [10]$$

4. Etape 3: calcul d'un pas (Recherche linéaire) : trouver un pas t_k qui fait décroître f suffisamment en cherchant à minimiser $q(t) = f(x_k + t d_k)$,
5. Etape 4: faire $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$ et $k=k+1$ puis revenir à l'étape 1

II.5.1.1 Calcul de la direction de descente:

La première idée pour calculer la direction de descente est de prendre la direction donnée par plus forte pente: $d_k = -\nabla f(x_k)$ Cette idée est lente quand on s'approche de la solution, elle est à la base des autres méthodes.

L'algorithme de *gradient conjugué linéaire* construit les directions de descente de la façon suivante :

$$\begin{cases} d_1 = -g_1 \\ d_{k+1} = -g_{k+1} + c_k d_k \text{ avec } c_k = \left(\frac{|g_{k+1}|}{|g_k|} \right)^2 \end{cases} \quad (\text{II. 4})$$

Dans le cas d'une fonction quadratique cet algorithme converge en au plus n itérations pour le pas $t_k = -\frac{(g_k, d_k)}{(Ad_k, d_k)}$ L'extension de cet algorithme au cas non linéaire permet la construction des directions de descente comme suit :

$$\begin{cases} d_1 = -g_1 \\ d_{k+1} = -g_{k+1} + c_{k-1} d_{k-1} \text{ et si } (d_k, g_k) \geq 0 \text{ prendre } d_k = g_k \\ \text{avec } c_{k-1} = \left(\frac{|g_k|}{|g_{k-1}|} \right)^2 \text{ pour l'algorithme de Fletcher Reeves} \\ \text{avec } c_{k-1} = \frac{|(g_k - g_{k-1}, g_k)|}{|g_{k-1}|^2} \text{ pour l'algorithme de Polaque - Ribière} \end{cases} \quad (\text{II. 5})$$

L'algorithme de *Newton* utilise le hessien pour la construction de la direction de descente :

$$d_k = -M_k \nabla f(x_k) \text{ avec } M_k = \nabla^2 f(x_k)^{-1} \quad (\text{II. 6})$$

Quand on ne dispose pas du hessien on peut utiliser les algorithmes de *Quasi-Newton* dont le principe consiste à approcher l'inverse du hessien en construisant une suite de matrices M_k symétriques, de préférence définies positives et vérifiant $y_k = M_k s_k$ avec $y_k = g_{k+1} - g_k$ et $s_k = x_{k+1} - x_k$. L'exemple le plus utilisé des algorithmes de Quasi-Newton est l'algorithme *BFGS* qui construit la matrice M_k de la manière suivante:

$$\begin{cases} M_0 = Id \\ M_{k+1} = M_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T \delta_k} - \frac{M_k S_k S_k^T M_k}{S_k^T M_k M_k} \nabla^2 f(x_k) \end{cases} \quad (\text{II. 7})$$

II.5.1.2 Recherche linéaire :

Le but de la recherche linéaire est de trouver un pas t_k (le long de la direction de descente d_k) qui permet de diminuer suffisamment la fonction f . Etant donné que la recherche linéaire est une boucle exécutée à chaque itération, il est donc essentiel qu'elle soit très rapide. Pour cela les recherches linéaires utilisées ne sont pas exactes.

Elles cherchent dans un intervalle $[t_g, t_d]$ une valeur t_k jugée acceptable en utilisant le schéma suivant:

1. Etape 0: $t_{\text{initial}} > 0$ (initialisation par la boucle extérieure)

$$t_g = 0 \text{ et } t_d = \infty$$

2. Etape 1: test de t

(a) t acceptable. Stop

(b) t trop grand, faire $t_d = t$ et aller en Etape 2

(c) t trop petit, faire $t_g = t$ et aller en Etape 2

3. Etape 2 : choix d'un nouveau t

Si aucun $t_d \neq \infty$ n'a été trouvé : prendre un t plus grand (*extrapolation*)

Si $t_d \neq \infty$: prendre $t \in]t_g; t_d [$ (*interpolation*)

L'extrapolation se fait en prenant par exemple, $t = at$ avec $a > 1$ et l'interpolation se fait en prenant $t = (t_g + t_d)/2$. Dans l'Etape 1 : le test t acceptable, se fait à l'aide d'une règle garantissant la convergence de l'algorithme. Les règles les plus connues sont la règle d'Armijo, la règle de Wolfe et la règle de Goldstein et Price données ci dessous. On note que la règle d'Armijo n'est pas très efficace car elle n'exclut pas de prendre des pas "trop petits" ce qui ralentit l'algorithme.

Règle d'Armijo

$$a) \frac{q(t)-q(0)}{t} \leq m_1 q'(0)$$

$$b) m_1 q'(0) \leq \frac{q(t)-q(0)}{t}$$

c) Jamais

Règle de Wolfe

$$a) q(t) \leq q(0) + m_1 t q'(0) \text{ et } q'(t) \geq m_2 q'(0) \quad t \text{ acceptable}$$

$$b) q(t) > q(0) + m_1 t q'(0) \quad td = t$$

$$c) q(t) \leq q(0) + m_1 t q'(0) \text{ et } q'(t) < m_2 q'(0) \quad tg = t$$

Règle de Goldstein et Price

$$a) m_2 q'(0) \leq \frac{q(t)-q(0)}{t} \leq m_1 q'(0)$$

$$b) m_1 q'(0) \leq \frac{q(t)-q(0)}{t}$$

$$c) \frac{q(t)-q(0)}{t} < m_2 q'(0)$$

II.5.1.3 Calcul du gradient

Une première approche simple pour calculer le gradient d'une fonction f définie par :

$$f: x \in \mathbb{R}^n \rightarrow f(x) \in \mathbb{R} \quad (\text{II. 8})$$

est d'utiliser la méthode des différences finies :

$$\nabla J(x) = \frac{J(x + \partial x) - J(x)}{\partial x} \quad (\text{II. 9})$$

Cette méthode présente deux inconvénients majeurs. D'une part, elle est très sensible au pas de discrétisation et donc aux erreurs numériques. D'autre part, elle devient très lente quand la taille de la variable x est grande car elle requiert $(n+1)$ évaluations de la fonction. La méthode de l'adjoint permet de s'affranchir de ces deux inconvénients. La méthode de l'adjoint peut être implémentée de plusieurs manières. On peut soit écrire les équations de l'état adjoint du problème continu et discrétiser les équations obtenues, soit discrétiser les équations directes et calculer l'état adjoint du problème discret. Dans le deuxième cas, la discrétisation peut se faire à deux niveaux. Une façon de faire consiste à

discrétiser les équations en temps, à calculer l'état adjoint puis à discrétiser en espace (on parlera de semi-discrétisation).

II.5.2 Méthodes non-déterministes

Ces méthodes font appel à des tirages de nombres aléatoires. Elles permettent d'explorer l'espace de recherche plus efficacement. Citons entre autres (Beasley, 1993a) :

- **Les méthodes Monte Carlo** : La fonction est évaluée en un grand nombre de points choisis aléatoirement.

- **Les méthodes hybrides** : On peut par exemple utiliser la méthode des gradients en partant d'un grand nombre de points choisis aléatoirement. On peut ainsi espérer déterminer au fur et à mesure tous les optima locaux de la fonction.

- **Le recuit simulé** : On effectue des déplacements aléatoires à partir d'un point initial. Si un déplacement mène à une valeur plus grande de la fonction f , il est accepté. Sinon, il est accepté avec une probabilité :

$$P = e^{-\frac{|\Delta f|}{kT}} \quad (\text{II. 10})$$

où " Δf " est la variation de la fonction, T est assimilé à une température qui décroît au cours du temps et k est une constante. Cette méthode est basée sur une analogie avec les processus de recuit utilisés en métallurgie et qui visent à atteindre une configuration d'énergie minimale ($-f$ est alors assimilée à une énergie).

- **Les Algorithmes Evolutionnaires**: le principe est de simuler l'évolution d'une population de divers individus auxquels on applique différents opérateurs génétiques et que l'on soumet à chaque génération à une sélection. Ces algorithmes sont de plus en plus utilisés dans l'industrie car ils sont particulièrement adaptés aux problèmes d'optimisation comportant de nombreux paramètres.

Si nous opposons exploration et exploitation de l'espace de recherche, nous pouvons dire que les méthodes Monte Carlo permettent une bonne exploration puisque tout point a une probabilité identique d'être atteint, mais qu'il n'y a pas d'exploitation des résultats déjà obtenus. Avec la méthode des gradients, l'exploration est moindre mais l'exploitation des

données précédentes par l'intermédiaire des gradients permet une bonne recherche locale. Enfin, les Algorithmes Evolutionnaires offrent un bon compromis entre exploration et exploitation (Beasley, 1993a). Nous allons nous y intéresser de plus près.

II.5.3 Algorithmes Evolutionnaires et Algorithmes Génétiques

II.5.3.1 Introduction

Le but d'un algorithme évolutionnaire est d'optimiser une fonction f dite *fonction objectif* sur un espace de recherche. Pour cela, une population d'individus, typiquement un P-uplet de points de l'espace de recherche, évolue selon un darwinisme artificiel (reproduction, mutation, sélection naturelle) basé sur la fitness F de chaque individu. La fitness est directement liée à la valeur de la fonction objectif f de cet individu (exemple, la fonction f elle-même). Des opérateurs appliqués à la population permettent de créer de nouveaux individus (croisement et mutation) et de sélectionner les individus de la population qui vont survivre (sélection et remplacement).

Les opérateurs appliqués à un individu ne sont pas en général définis sur le même espace que celui sur lequel est défini la fonction fitness, appelé espace des phénotypes, mais sur un espace de *représentation* appelé *l'espace des génotypes*. Par exemple pour un codage binaire les algorithmes génétiques simples utilisent un espace de génotypes de la forme $\{0,1\}^n$ La Figure II.10 illustre le schéma général d'un algorithme évolutionnaire : après l'initialisation de la population (généralement d'un façon aléatoire) l'algorithme évalue la fitness de chaque individu. La boucle de l'algorithme suit les étapes suivantes :

-critère d'arrêt : un des critères simples souvent utilisé est lorsque le nombre maximum de générations, fixé par l'utilisateur, est atteint.

-codage des variables : La première étape est de définir et de coder convenablement le problème. A chaque variable d'optimisation x_i (à chaque paramètre du dispositif), nous faisons correspondre un *gène*. Nous appelons *chromosome* un ensemble de gènes. Chaque dispositif est représenté par un *individu* doté d'un génotype constitué d'un ou plusieurs chromosomes. Nous appelons *population* un ensemble de N individus que nous allons faire évoluer. D'un point de vue informatique, nous utilisons dans notre algorithme un codage binaire. C'est-à-dire qu'un gène est un entier long (32 bits). Un chromosome est un tableau de gènes (figure II. 4 et figure II. 5). Un individu est un tableau de chromosomes. La population est un tableau d'individus. Notons qu'on pourrait aussi utiliser d'autres formes de

codage (réel, codage de Gray...) (Davis, 1991). On aboutit à une structure présentant cinq niveaux d'organisation (figure II.3), ce qui conclut à un comportement complexe des Algorithmes génétiques (en abrégé AG) :

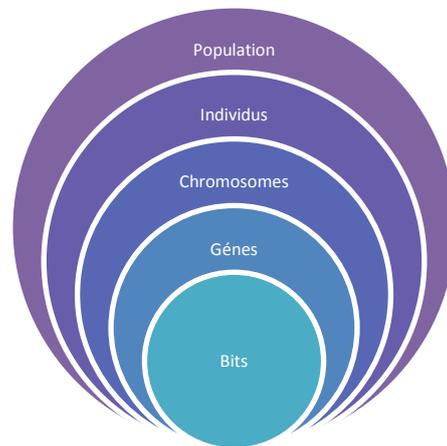


Figure II.3 : Les cinq niveaux d'organisation de codage des Algorithmes Génétiques.

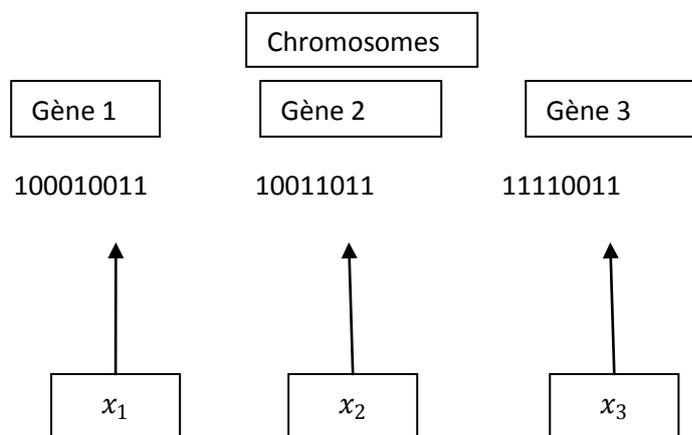


Figure II. 4 : Illustration schématisée des variables d'optimisation x_i .

Un des avantages du codage binaire est que l'on peut ainsi facilement coder toutes sortes d'objets : des réels, des entiers, des valeurs booléennes, des chaînes de caractères. Cela nécessite simplement l'usage de fonctions de codage et décodage pour passer d'une représentation à l'autre.

Rappelons que dans cette étude les n variables sont supposées réelles. Nous considérons un espace de recherche fini :

$$x_{i \min} \leq x_i \leq x_{i \max} \quad \forall i \in [1; n]$$

Afin de coder nos variables réelles en binaire, nous discrétisons l'espace de recherche. Ainsi 32 codages sur 32 bits impliquent une discrétisation des intervalles en $g_{\max} = 2^{32} - 1$ d'où $g_{\max} = 4294967295$ valeurs discrètes. Notons au passage que si cette discrétisation est plus fine que celle du modèle physique utilisé, la fonction est assimilable à une fonction escalier, si on la considère à une échelle suffisamment petite.

Entier long (32 bits)

$$g_i = \sum_{j=0}^{31} b_j \cdot 2^j \tag{II.11}$$



Figure II.5 : Chaque gène (chaque paramètre du dispositif) est codé par un entier long (32 bits).

A chaque variable réelle x_i on associe donc un entier long g_i :

$$0 \leq g_i \leq g_{\max} \quad \forall i \in [1, n] \tag{II.12}$$

Les formules de codage et décodage sont alors les suivantes :

$$g_i = \frac{x_i - x_{i \min}}{x_{i \max} - x_{i \min}} g_{\max} \tag{II.13}$$

$$x_i = x_{i \max} + (x_{i \max} - x_{i \min}) \cdot \frac{g_i}{g_{\max}} \tag{II.14}$$

-Genèse de la population : La première étape de l'algorithme est la genèse de la population, c'est-à-dire le choix des dispositifs de départ que nous allons faire évoluer. On pourrait prendre des individus régulièrement répartis dans l'espace. Néanmoins, une initialisation aléatoire est plus simple à réaliser : les valeurs g_j des gènes sont tirées au hasard selon une distribution uniforme. Notons qu'on peut, si nécessaire, introduire des individus déjà calculés. Nous discuterons plus loin de la taille N de cette population, mais nous pouvons déjà dire qu'elle résultera d'un compromis entre temps de calcul et qualité de la solution.

– **Sélection-Elimination:** cet opérateur sélectionne parmi les parents ceux qui vont générer des enfants. Plusieurs opérateurs sont possibles qui peuvent être soit déterministes soit stochastiques. La sélection est basée sur la fitness des individus.

– **Création de nouveaux individus:** la création de nouveaux individus se fait essentiellement à l'aide des opérateurs de *croisement* et de *mutation*. L'opérateur de croisement est un opérateur stochastique qui combine k parents pour créer un ou plusieurs enfants. L'opérateur de mutation est un opérateur stochastique qui modifie un individu pour en créer un autre qui lui est généralement proche (ce qui dépend énormément de la représentation choisie).

L'opérateur croisement favorise l'exploration de l'espace de recherche. Considérons deux gènes A et B pouvant être améliorés par mutation. Il est peu probable que les deux gènes améliorés A' et B' apparaissent par mutation dans un même individu. Mais l'opérateur de croisement permettra de combiner rapidement A' et B' dans la descendance de deux parents portant chacun un des gènes mutants. Il est alors possible que la présence simultanée des deux gènes produise un individu encore plus adapté (Dessales, 1996). L'opérateur de croisement assure donc le brassage du matériel génétique et l'accumulation des mutations favorables. En termes plus concrets, cet opérateur permet de créer de nouvelles combinaisons des paramètres des composants.

Le phénomène de croisement est une propriété naturelle de l'ADN. C'est par analogie qu'ont été conçus les opérateurs de croisement dans les AG. Nous avons testé deux méthodes de croisement classiques.

- " **croisement en un point** " : on choisit au hasard un point de croisement, pour chaque couple (Figure II.7). Notons que le croisement s'effectue directement au niveau binaire, et non pas au niveau des gènes. Un chromosome peut donc être coupé au milieu d'un gène.

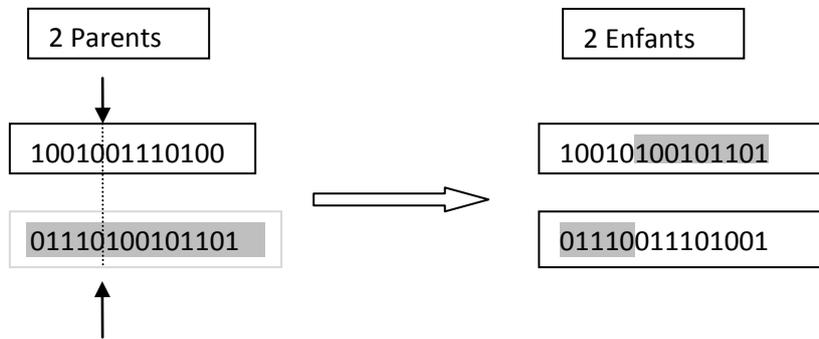


Figure II.7 : Représentation schématique du croisement en 1 point. Les chromosomes sont bien sûr généralement beaucoup plus longs.

- " **croisement en deux points** " : on choisit au hasard deux points de croisement (Figure II.8). Par la suite, nous avons utilisé cet opérateur car il est généralement considéré comme plus efficace que le précédent (Beasley, 1993b). Néanmoins nous n'avons pas constaté de différence notable dans la convergence de l'algorithme.

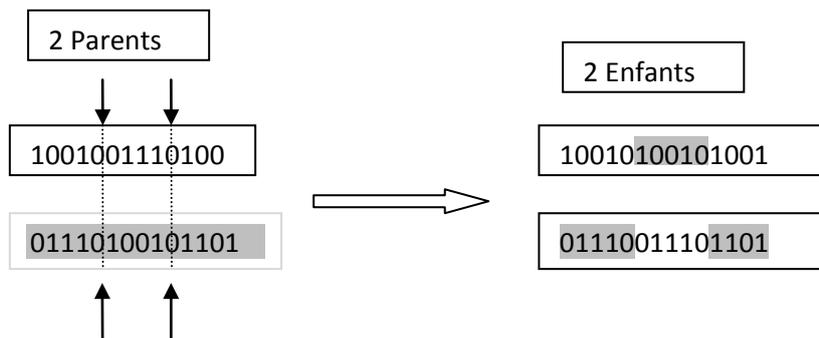


Figure II. 8 : Représentation schématique du croisement en 2 points.

Notons que d'autres formes de croisement existent, du croisement en k points jusqu'au cas limite du croisement uniforme.

Nous définissons une *mutation* comme étant l'inversion d'un bit dans un chromosome (Figure II.9). Cela revient à modifier aléatoirement la valeur d'un paramètre du dispositif. Les mutations jouent le rôle de bruit et empêchent l'évolution de se figer. Elles permettent d'assurer une recherche aussi bien globale que locale, selon le poids et le nombre des bits mutés. De plus, elles garantissent mathématiquement que l'optimum global peut être atteint.

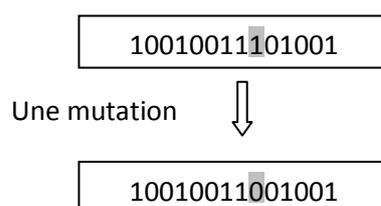


Figure II.9 : Représentation schématique d'une mutation dans un chromosome.

Enfin, une population trop petite peut s'homogénéiser à cause des erreurs stochastiques : les gènes favorisés par le hasard peuvent se répandre au détriment des autres. Cet autre mécanisme de l'évolution, qui existe même en l'absence de sélection, est connu sous le nom de *dérive génétique*. Du point de vue du modèle, cela signifie que l'on risque alors d'aboutir à des modèles qui ne seront pas forcément optimaux. Les mutations permettent de contrebalancer cet effet en introduisant constamment de nouveaux gènes dans la population (Beasley, 1993b).

– *Evaluation*: L'évaluation de chaque modèle est réalisée par le modèle utilisé. Si le modèle possède plusieurs états de fonctionnement, le modèle peut être lancé plusieurs fois. Les résultats obtenus sont alors utilisés pour calculer la fonction objective et la fonction d'adaptation.

Notons que dans le cas d'un modèle physique, la majeure partie du temps de calcul sera probablement due à l'exécution de ce modèle. En effet, le reste de l'AG est essentiellement composé de manipulation d'entiers et de bits, donc très rapide.

– *Remplacement* : on détermine qui parmi la population courante fera partie des parents de la génération suivante. Cet opérateur est basé, comme l'opérateur de sélection, sur la fitness des individus.

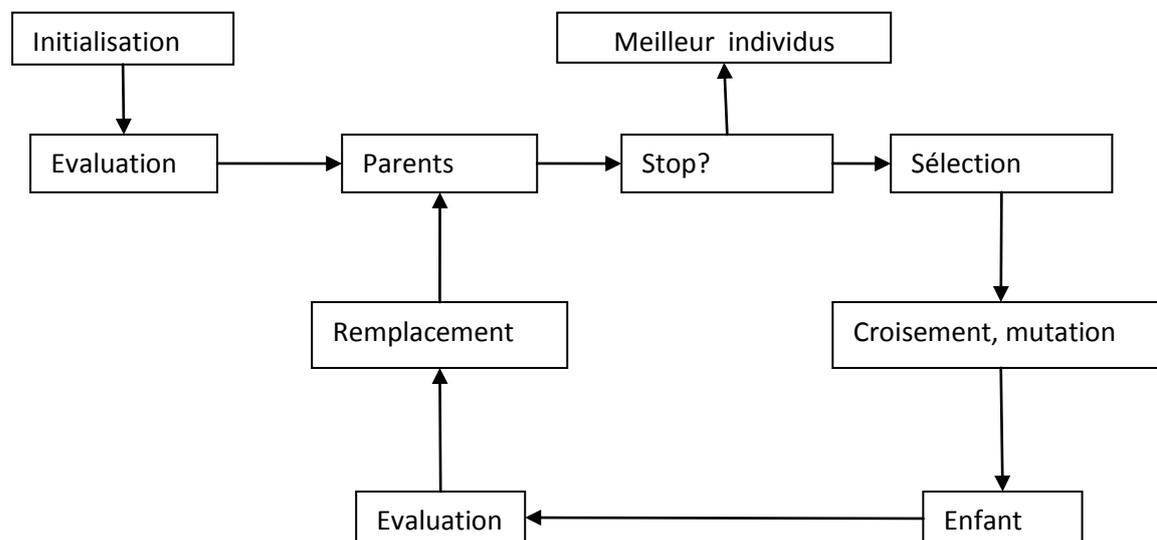


Figure II .10 Schéma général d'un algorithme évolutionnaire.

II.5.3.2 Historique

Les Algorithmes Evolutionnaires font partie du champ de l'Intelligence Artificielle (IA). Il s'agit d'IA de bas niveau, inspirée par " l'intelligence " de la Nature. Intelligence que l'on peut définir de la façon suivante : " *the capability of a system to adapt its behaviour to meet its goals in a range of environments* " (Fogel, 1995). Tous ces algorithmes ont en commun de faire évoluer des populations d'individus. La différence entre eux est principalement d'ordre historique. On peut classer ces algorithmes en 4 grandes familles.

– Algorithmes Génétiques (AG) : Holland (1975) et Goldberg (1989).

Les plus connus et les plus populaires des algorithmes évolutionnaires. Ils ont été développés pour modéliser l'adaptation des populations en biologie.

– Stratégies d'Evolution (ES) : Rechenberg (1972) et Schwefel (1995-1981).

Développés par des ingénieurs pour résoudre des problèmes d'optimisation paramétriques. Ces algorithmes sont les plus efficaces pour ce type de problèmes.

– Programmation Evolutionnaire (EP): Fogel (1966).

Développée à l'origine pour la découverte d'automates à états finis.

– Programmation Génétique (GP): Koza (1992, 1994,1999).

Apparue initialement comme un sous-domaine des AG, la programmation génétique est devenue une branche à part entière. La spécificité de ces algorithmes est de représenter des individus par des arbres.

II .5.3.3 Algorithme Génétique Simple AGS :

Les premiers AGS utilisaient un codage binaire avec un espace de génotype de la $\{0,1\}^n$. Les opérateurs de sélection sont la roulette et la roulette stochastique où la probabilité P_{Xp} de sélectionner un individu Xp est proportionnelle à sa fitness $F(Xp)$. Pour la roulette, P_{Xp} est donnée par :

$$P_{Xp} = \frac{F(Xp)}{\sum_{i \in \text{populations}} F(X_i)} \quad (\text{II. 16})$$

L'opérateur de croisement le plus simple consiste à remplacer une partie des chromosomes de l'un des parents par ceux de l'autre parent. Par exemple, deux parents

$$X_1(x_1^1, x_1^2, \dots, x_1^n) \quad \text{et} \quad X_2(x_2^1, x_2^2, \dots, x_2^n)$$

Permettent de générer deux enfants

$$Y_1(x_1^1, x_1^2, \dots, x_2^q, x_2^{q+1}, \dots, x_2^n) \quad \text{et} \quad Y_2(x_2^1, x_2^2, \dots, x_1^q, x_1^{q+1}, \dots, x_1^n)$$

où l'entier q est choisi aléatoirement dans $[1, n]$. L'un des points faibles du codage binaire est qu'un tel croisement peut "mélanger" des variables de type différent. La mutation dans le cas d'un codage binaire consiste à changer un 0 par 1 ou inversement. Dans le cas d'un codage réel, la mutation peut se faire en remplaçant une variable x_i par $x_i + \delta x_i$ où δx_i est une "petite" variation de la variable x_i . Le remplacement se fait par un remplacement générationnel: les enfants d'une génération n deviennent les parents de la génération $n + 1$.

II.5.3.4 Le Choix d'un Algorithme Génétique(AG)

On a utilisé un AG pour trouver les paramètres physique et chimique d'un modèle représentant la pyrolyse douce des bois présenté dans le chapitre IV. Cet algorithme utilise un codage réel écrit en fortran 90.

Dans notre AG comme tous les algorithmes génétiques il y a un choix entre les méthodes de sélection des parents, les différentes sortes de croisement et les différents types disponibles dans la littérature.

Méthodes de sélection utilisées dans nos applications:

La partie darwinienne de l'algorithme comprend les deux étapes de **sélection** et de **remplacement**. Répétons que ces étapes sont totalement indépendantes de l'espace de recherche. On distingue deux catégories de procédures de sélection ou de remplacement (par abus de langage, nous appellerons sélection les deux types de procédures) : les procédures déterministes et les procédures stochastiques : *Sélection déterministes* : On sélectionne les meilleurs individus (au sens de la fonction performance). Si plus de quelques individus doivent être sélectionnés, cela suppose un tri de l'ensemble de la population -- mais cela ne pose un problème de temps calcul que pour des très grosses tailles de population.

Les individus les moins performants sont totalement éliminés de la population, et le meilleur individu est toujours sélectionné on parle alors d'*élitisme*. *Sélection stochastiques* : Il s'agit toujours de favoriser les meilleurs individus, mais ici de manière stochastique, ce qui laisse une chance aux individus moins performants. En revanche, il peut arriver que le meilleur individu ne soit pas sélectionné, et qu'aucun des enfants n'atteigne une performance aussi bonne que celle du meilleur parent. **Le tirage par roulette** est la plus célèbre des sélections stochastiques. Supposant un problème de maximisation avec uniquement des performances positives, elle consiste à donner à chaque individu une probabilité d'être sélectionné proportionnelle à sa performance ?

Le tirage par roulette présente toutefois de nombreux inconvénients, en particulier reliés à l'échelle de la fonction performance : alors qu'il est théoriquement équivalent d'optimiser $\alpha F + \beta$ et F pour tout $\alpha > 0$, il est clair que le comportement de la sélection par roulette va fortement dépendre de α dans ce cas. C'est pourquoi cette sélection est presque totalement abandonnée aujourd'hui.

La sélection par le rang consiste à faire une sélection en utilisant une roulette dont les secteurs sont proportionnels aux rangs des individus. La variante linéaire utilise directement le rang (P pour le meilleur, 1 pour le moins bon, pour une population de taille P), les variantes polynomiales remplaçant ces valeurs par i/P^α $\alpha > 0$. Seuls comptent alors les positions relatives des individus entre eux, et non les valeurs arbitraires de la fonction F .

La sélection par tournoi n'utilise aussi que des comparaisons entre individus -- et ne nécessite même pas de tri de la population. Elle possède un paramètre T , taille du tournoi. Pour sélectionner un individu, on en tire T uniformément dans la population, et on sélectionne le meilleur de ces T individus. Le choix de T permet de faire varier la *pression*

sélective, c'est-à-dire les chances de sélection des plus performants par rapport aux plus faibles. A noter que le cas $T = 2$ correspond, en espérance et au premier ordre en fonction de P , à la sélection par le rang linéaire.

Sélection par roulette stochastique: Le nombre de copies d'un individu est égal à la partie entière du rapport entre sa fitness et la fitness moyenne de la population. Cette méthode est surtout utilisée pour des populations de petite taille car elle est moins biaisée que la roulette dans ce cas.

Dans notre étude on a choisie une sélection par roulettes stochastiques et par élitisme pour assurer les meilleurs individus.

Une fois les meilleurs individus sélectionnés, on utilise des opérateurs de recombinaison travaillant sur leur génome, ceci afin de faire évoluer la population vers une meilleure solution:

Le croisement a pour but d'assurer le brassage des caractères génétiques des individus.

La mutation qui permet de maintenir la diversité génétique au sein de la population d'individus.

Pour arriver à la meilleure solution, on reproduit le cycle évaluation \ sélection \ modification jusqu'à obtenir la convergence de l'algorithme.

Opérateurs de croisement utilisés dans nos applications:

Plusieurs opérateurs de croisement ont été proposés, qui tous échangent des bits (à position fixée) entre les parents.

Les croisements choisis sont le croisement multipoints et le croisement barycentrique. Dans

le cas d'un croisement multipoints avec deux points, le croisement se fait de la manière définie sur la figure II.8. Avec un croisement barycentrique les enfants créés sont donnés par

$$Y_1 = (y_1^1, \dots, y_1^n) \text{ et } Y_2 = (y_2^1, \dots, y_2^n)$$

avec pour tout i :

$$y_1^i = \alpha y_1^i + (1 - \alpha) y_2^i \text{ et } y_2^i = \alpha y_2^i + (1 - \alpha) y_1^i$$

où α est un réel dans $[0,1]$. Ce nombre α est soit choisi par nous même, soit choisi aléatoirement dans le cas d'un croisement barycentrique aléatoire. Il existe d'autres types de croisement. Parmi eux, le croisement uniforme, consiste à choisir avec une probabilité de 0.5 les parents à l'origine du bit correspondant chez chaque enfant.

Type de mutation utilisé dans nos applications:

Deux types de mutations sont possibles. Le premier est la mutation gaussienne avec une variance constante ou une variance décroissante au cours des itérations (la plus utilisée dans le cas d'optimisation paramétrique). Le second est une mutation non-uniforme (Michalewicz,1999) (Sefrioui ,1998) où une variable $x_i \in [(x_{min})_i ; (x_{max})_i]$ prend la nouvelle valeur x'_i :

$$x'_i = \begin{cases} x_i + \Delta(t, (x_{max})_i - x_i) & \text{si } s \leq 0.5 \\ x_i + \Delta(t, x_i - (x_{min})_i) & \text{si } s \geq 0.5 \end{cases} \quad (\text{II. 17})$$

où t représente le nombre de génération, où s est un nombre aléatoire dans $[0,1]$ et où la fonction $\Delta(t,x)$ est définie comme suit :

$$\Delta(t, x) = y \cdot r \cdot \left(1 - \frac{t}{T}\right)^b \quad (\text{II. 18})$$

Avec r un nombre aléatoire dans $[0, 1]$, T le nombre maximal de générations et b est un paramètre de raffinement. L'allure de la fonction $\Delta(t; x)$ est représentée sur la figure II.11. Ainsi, au début l'amplitude maximale de la mutation est grande alors qu'elle très petite vers la fin de l'algorithme : on passe d'une recherche globale à une recherche locale au cours de l'algorithme. Le paramètre b permet d'ajuster l'amplitude de la mutation. Le choix de b détermine la stratégie de compromis entre l'exploration et l'exploitation. Pour une grande valeur de b (Figure II.12 (a)) on favorise l'exploration de l'espace et pour une petite valeur de b (Figure II.12 (b)) on favorise la phase d'exploitation et de recherche locale.

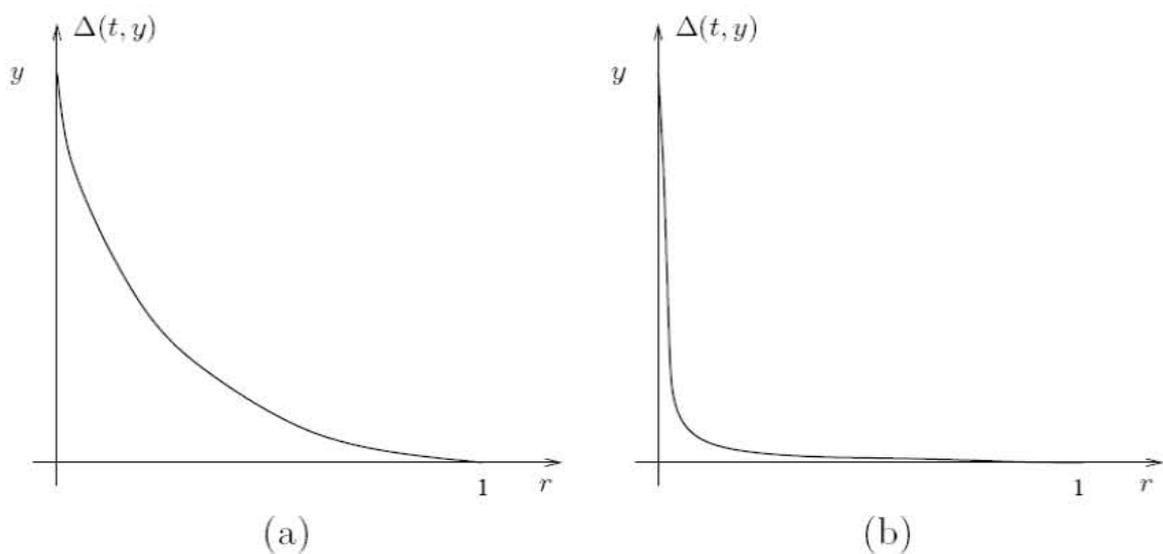


Figure II.11 – La fonction $\Delta(t,x)$ à deux instants t_1 et t_2 (resp. (a) et (b)) avec $t_1 < t_2$.

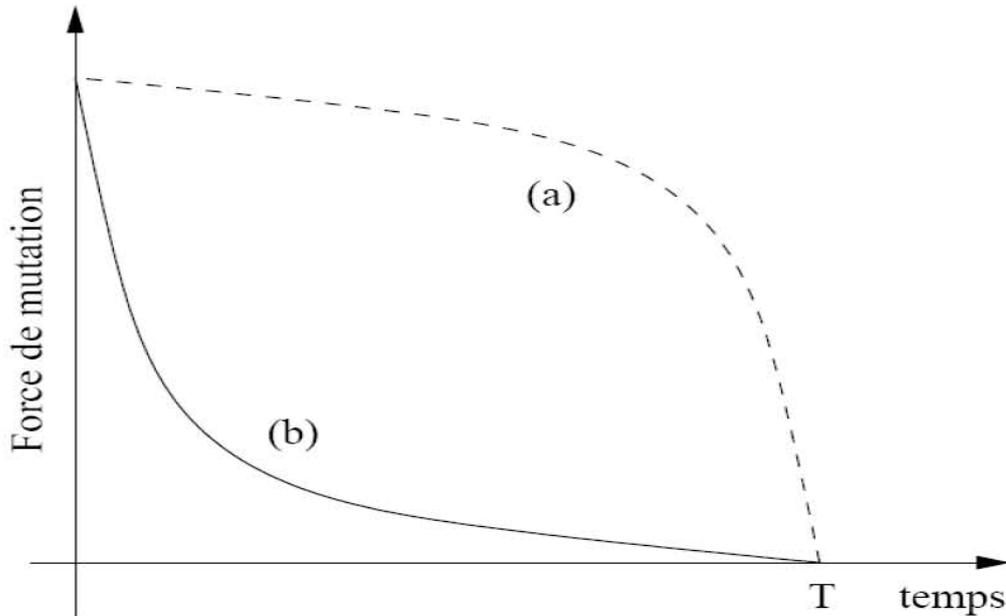


Figure. II.12 – Evolution de l'amplitude de la mutation en fonction du temps.

L'algorithme utilise aussi la mutation dépendant de la distance (MDD) proposée dans (Sefrioui, 1998). L'idée est que deux parents qui sont proches vont générer des enfants qui "ressemblent" à leurs parents, ce qui va limiter la diversité de la population et favoriser l'apparition de l'individu idéal qui peut attirer le reste de la population vers lui et engendrer une convergence prématurée. La MDD augmente la probabilité de mutation des enfants lorsque la distance entre les parents est petite. Afin de favoriser l'exploration de l'espace de recherche la technique de nichage (niching) est utilisée. Cette technique consiste à favoriser les individus qui sont éloignés des autres individus de la population (ils explorent de nouvelles zones de l'espace de recherche) en augmentant leur fitness. L'élitisme a également été utilisé par l'algorithme. Il assure la décroissance de la meilleure valeur trouvée au cours des générations. Ainsi, si aucun enfant généré n'améliore le meilleur résultat déjà trouvé, le meilleur parent est automatiquement sélectionné pour la génération suivante.

Une autre technique, importante pour le bon fonctionnement de l'algorithme, est la mise à l'échelle (rescaling). Cette technique est imposée par le choix de la méthode de sélection basée sur la méthode de la roulette. Pour cette méthode, la probabilité P_{x_p} de sélectionner un individu X_p est proportionnelle à sa fitness $F(X_p)$:

$$P_{x_p} = \frac{F(X_p)}{\sum_{i \in Population} F(X_i)} \quad (II.19)$$

Cette formule oblige à avoir une fitness positive pour tous les individus, d'où une première idée d'évaluation qui consiste à prendre pour fitness

$$F(X_p) = f(X_p) - \min_{i \in \text{Population}} f(X_i) \quad (\text{II. 20})$$

Ce choix est insuffisant car si on considère la fonction $g = f + C$ où C est une constante grande devant les valeurs de f , les individus ne sont plus réellement différents au vue de leur fitness donnée avec la fonction g . La sélection se fait alors différemment pour les fonctions f et g et devient sensible aux translations. Le choix du scaling doit satisfaire une autre condition dont le but est d'éviter qu'un super-individu (un individu très bon comparé au reste de la population) soit le seul sélectionné pour la génération suivante. Plusieurs stratégies de scaling satisfaisant à ces exigences ont été testées. La meilleure pour nos tests est le sigma scaling tronqué :

$$F(X_p) = f(X_p) + (\bar{f} - c \cdot \sigma) \quad (\text{II. 21})$$

où \bar{f} et σ représentent respectivement la moyenne et la variance de la fonction f sur la population et où c est une constante généralement prise entre 1 et 5. Les valeurs négatives éventuelles de $F(X_p)$ sont tronquées et ramenées à zéro. L'ensemble des techniques présentées ci-dessus ont permis d'accroître les performances de l'algorithme. Le désavantage est que le nombre de paramètres à ajuster a augmenté ce qui induit un réglage plus lent. Le temps de calcul requis par l'algorithme est essentiellement dû au temps d'évaluation d'une fonction (voir Figure II.10).

II.5.3.5 Stratégies d'Evolution (ES)

Dans le cadre de l'optimisation paramétrique, la mutation la plus employée est la mutation gaussienne, qui consiste à rajouter un bruit gaussien au vecteur des variables. La forme la plus générale est alors :

$$X := X + \sigma N(0, C) \quad (\text{II. 22})$$

où σ est un paramètre positif, appelé le pas de la mutation (step-size en anglais), et $N(0, C)$ représente un tirage de loi normale centrée de matrice de covariance C (symétrique définie positive).

Tout l'art est alors bien sûr dans le choix des paramètres σ et C . L'influence de σ est intuitive. A de grandes valeurs résulteront une exploration importante. On peut fixer la valeur de σ mais des études théoriques sur des fonctions simples ont démontré que cette

valeur devrait décroître au fil des générations en fonction de l'avancement de la recherche, et il est impossible de fixer a priori un schéma de décroissance qui soit synchrone avec l'éventuelle convergence de l'algorithme, pour une fonction quelconque.

L'état de l'art a longtemps été la mutation auto-adaptative. Due aux pères des stratégies d'évolution (Rechenberg, 1972 et Schwefel, 1995), ce type de mutation considère en fait les paramètres de la mutation eux-mêmes comme des variables supplémentaires, et les font également évoluer via croisement et mutation.

L'idée sous-jacente est que, bien que la sélection soit faite sur les valeurs de la fonction objectif J et non pas directement sur les paramètres de la mutation, un individu ne peut pas survivre longtemps s'il n'a pas les paramètres de mutation adaptés à la "topographie" de la portion de la surface définie par J où il se trouve : Schématiquement par exemple, les valeurs de σ doivent être petites lorsque le gradient de J est important, afin d'avoir plus de chance de faire des "petits pas". On distingue trois cas suivant la complexité du modèle de matrice de covariance :

- Le cas isotrope: il y a un σ par individu (soit $C = Id$). La mutation consiste alors à muter tout d'abord σ selon une loi log-normale (afin de respecter la positivité de σ , et d'avoir des variations symétriques par rapport à 1), puis à muter les variables à l'aide de la nouvelle valeur de σ :

$$\begin{cases} \sigma := \sigma e^{\tau N_0(0,1)} \\ X_i = X_i + \sigma N_i(0,1) \quad i = 1, \dots, d \end{cases} \quad (\text{II. 23})$$

Les $N_i(0, 1)$ sont des réalisations indépendantes de variables aléatoires scalaires gaussiennes centrées de variance 1.

- Le cas non-isotrope: il y a un σ par individu (soit $C = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_d)$). A noter que la mutation des σ_i comporte deux termes de forme log-normale, un terme commun à tous les σ_i et un terme par direction :

$$\begin{cases} k = \tau N_0(0,1) \\ \sigma_i = \sigma_i e^{k + \tau' N_i(0,1)} \quad i = 1, \dots, d \\ X_i = X_i + \sigma_i N_i'(0,1) \quad i = 1, \dots, d \end{cases} \quad (\text{II. 24})$$

Les $N_i(0,1)$ et $N_i'(0,1)$ sont des réalisations indépendantes de variables aléatoires scalaires gaussiennes centrées de variance 1.

- Le cas général, dit corrélé, dans lequel C est une matrice symétrique définie positive quelconque. On utilise alors pour pouvoir transformer C par mutation tout en gardant sa

positivité une représentation canonique en produit de $d(d-1)/2$ rotations par une matrice diagonale. La mutation s'effectue alors en mutant d'une part la matrice diagonale, comme dans le cas non-isotrope ci-dessus, puis en mutant les angles des rotations :

$$\vec{N}(0, C(\vec{\sigma}, \vec{\alpha})) = \prod_{i=1}^{d-1} \prod_{j=i+1}^d R(\alpha_{ij}) \vec{N}(0, \vec{\sigma}) \quad (\text{II. 25})$$

$$\begin{cases} \sigma_i = \sigma_i e^{\tau' N_0(0,1) + \tau N_i(0,1)} & i = 1, \dots, d \\ \alpha_j \alpha_j + \beta N_j(0,1) & j = 1, \dots, \frac{d(d-1)}{2} \\ \vec{X} = \vec{X} + \vec{N}(0, C(\vec{\sigma}, \vec{\alpha})) \end{cases} \quad (\text{II. 26})$$

Ici encore, les divers $N_i(0,1)$ apparaissant dans les formules ci-dessus sont des réalisations indépendantes de variables aléatoires scalaires gaussiennes centrées de variance 1.

Mais l'état de l'art aujourd'hui en matière d'optimisation paramétrique évolutionnaire est sans conteste la récente méthode Covariance Matrix Adaptation (CMA). Partant du constat que d'une part l'adaptation de la matrice C dans les méthodes auto-adaptatives ci-dessus est très lente, et d'autre part les pas successifs de l'algorithme contiennent de l'information sur la fonction objectif, Hansen(1996,2001,2003) a mis au point une adaptation déterministe de la matrice de covariance C (la mutation est donnée par la formule (II.23)).

Tout d'abord, il a été expérimentalement constaté qu'il était préférable de tirer tous les enfants d'un unique parent, la moyenne des μ individus de la population à l'étape n :

$$\langle X \rangle^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{\mu} X_i^n \quad (\text{II. 27})$$

L'algorithme consiste alors à tirer λ enfants à partir de $\langle X \rangle^n$, et à sélectionner les μ meilleurs pour la génération suivante.

Une deuxième constatation concerne ensuite le pas de mutation: si deux mutations successives ont eu lieu dans la même direction, alors il faudrait sans doute augmenter le pas.

De manière formelle, cela donne :

$$\begin{cases} p_{\sigma}^{n+1} = (1 - c_{\sigma}) p_{\sigma}^n + \sqrt{\mu} \sqrt{c_{\sigma}(2 - c_{\sigma})} (C^n)^{\frac{1 - \langle X \rangle_{\mu}^{n+1} - \langle X \rangle_{\mu}^n}{\sigma^n}} \\ \sigma^{n+1} = \sigma^n \exp\left(\frac{1}{d_{\sigma}} \left(\frac{\|p_{\sigma}^{n+1}\|}{E(\|N(0, I_d)\|)} - 1\right)\right) \end{cases} \quad (\text{II. 28})$$

II.5.3.6 Algorithmes Hybrides (AG-GC)

Les méthodes hybrides combinent plusieurs méthodes d'optimisation afin d'améliorer leur efficacité à trouver l'optimum et d'accélérer leur convergence. L'approche la plus simple consiste à utiliser le résultat obtenu par une méthode stochastique comme point de départ d'un algorithme déterministe. Cette approche permet de compléter la recherche locale mais ne permet pas d'améliorer réellement le résultat final si l'algorithme stochastique a bien convergé. Une autre approche, dite basin hopping (Wales,1997), consiste à inclure à l'intérieur de la boucle d'optimisation stochastique une boucle d'optimisation déterministe. Plus précisément, l'algorithme stochastique utilisé est un recuit simulé qui minimise une fonction \tilde{f} obtenue à partir de la fonction f en lançant en chaque point x un algorithme de gradient : $\tilde{f}(x) = f(\bar{x})$ où \bar{x} est le résultat de l'algorithme de gradient lancé à partir du point x . Ceci a pour effet de réduire les barrières de potentiel que l'algorithme de recuit simulé doit franchir pour passer d'un minimum local à un autre. La méthode est utilisée pour optimiser des problèmes assez complexes. Une variante de cette méthode, qui utilise un algorithme génétique au lieu du recuit simulé, a été implémentée. L'approche adoptée dans l'algorithme AG-GC consiste à utiliser l'algorithme génétique, présenté dans la section précédente, en y ajoutant un opérateur de mutation par gradient. Cet opérateur remplace un individu x par le résultat de l'optimisation par un algorithme de gradient conjugué après un certain nombre d'itérations N_{iter} . Le choix de l'individu x peut se faire en prenant le meilleur individu de la population ou en choisissant un individu d'une manière aléatoire. Le deuxième choix s'est avéré plus efficace dans la plupart des tests effectués. En effet, le meilleur individu attire autour de lui d'autres individus de la population et donc, au cours des itérations une forme de recherche locale s'effectue déjà dans sa région. On note aussi que le nombre d'itérations N_{iter} ne doit pas être très grand pour ne pas ralentir le programme. De plus, au début du processus lorsque les individus sont loin de l'optimum il est inutile de raffiner la recherche locale.

II.5.3.7 La programmation génétique

La programmation génétique (GP, pour Genetic Programming en anglais) peut être vue comme l'évolution artificielle de "programmes", ces programmes étant représentés sous forme d'arbres (il existe des variantes de GP qui utilisent une représentation linéaire des programmes).

Elle constitue aujourd'hui une des branches les plus actives des algorithmes évolutionnaires.

On suppose que le langage dans lequel on décrit les programmes parmi lesquels on cherche un programme optimal est constitué d'opérateurs et d'opérandes de base, tout opérateur pouvant opérer sur un nombre fixe d'opérandes, et donnant lui-même un résultat pouvant à son tour être l'opérande d'un des opérateurs.

L'idée de base consiste à représenter de tels programmes sous forme d'arbres. L'ensemble des nœuds de l'arbre N est l'ensemble des opérateurs, et l'ensemble des terminaux de l'arbre T est l'ensemble des opérandes de bases.

L'intérêt d'une telle représentation, qui permet d'utiliser les principes évolutionnaires sur ce type d'espace de recherche, est la fermeture syntaxique de l'opérateur de croisement : en effet, alors qu'il est difficile d'imaginer croiser deux programmes séquentiels écrits dans un langage de haut niveau (pensez à du C ou du Java) en obtenant un programme valable comme résultat du croisement, le croisement d'arbres ne pose aucun problème, et donne toujours un arbre représentant un programme valide, comme nous allons le voir ci-dessous.

Les premiers travaux en GP optimisaient des programmes écrits dans un sous-ensemble du langage LISP travaillant sur des variables booléennes. Les nœuds étaient constitués d'opérations logiques (e.g., AND, OR, . . .) et de tests (e.g. l'opérateur ternaire IF Arg1 THEN Arg2 ELSE Arg3), les opérandes des variables du problème.

De nombreux autres langages ont été utilisés dans le cadre de GP, mais nous nous contenterons ici de donner l'exemple trivial du cas de programmes opérant sur des valeurs réelles, avec pour terminaux soit des valeurs constantes soit l'un des symboles X et Y ($T = \{X, Y, R\}$) et pour noeuds les opérations d'addition et de multiplication ($N = \{+, * \}$). L'ensemble des programmes que décrivent de tels arbres est alors l'ensemble des polynômes réels à 2 variables X et Y (voir Figure II.13).

Signalons enfin qu'en programmation génétique comme en programmation manuelle, il est possible et même souhaitable d'utiliser les concepts de programmation structurée : la notion de subroutine par exemple a été introduite rapidement dans les programmes-arbres sous la forme des ADF – Automatically Defined Functions (Koza, 1994), de même que des structures de contrôles au sein des opérateurs élémentaires (boucles, récursion,).

Examinons maintenant les composantes spécifiques d'un algorithme évolutionnaire manipulant des arbres.

Initialisation

L'idée la plus immédiate pour initialiser un arbre consiste à donner à chacun des nœuds et des terminaux une probabilité d'être choisi, et à tirer au sort à chaque étape un symbole parmi l'ensemble des nœuds et des terminaux. Si c'est un nœud, on renouvelle la procédure pour chacun des arguments dont l'opérateur a besoin.

On voit tout de suite qu'une telle procédure peut ne jamais se terminer, et qu'il faut imposer une profondeur maximale aux arbres, profondeur à partir de laquelle on n'autorise plus que les terminaux.

Le problème devient alors le choix des probabilités des différents symboles : si le poids global des nœuds est plus grand que celui des opérateurs, la plupart des arbres auront pour profondeur la profondeur maximale. Au contraire, si le poids des terminaux l'emporte sur celui des nœuds, les arbres seront très rarement profonds. Dans les deux cas, la diversité de la population initiale de l'algorithme sera très réduite.

C'est pourquoi la procédure la plus utilisée aujourd'hui initialise la population en plusieurs étapes, chaque étape utilisant des profondeurs maximales différentes, et appliquant soit la procédure décrite ci-dessus, soit générant systématiquement des arbres de profondeur égale à la profondeur en cours. Cette initialisation s'appelle *ramped half-and-half* et est décrite en détail dans l'ouvrage de référence en GP (Banzhaf 1998)

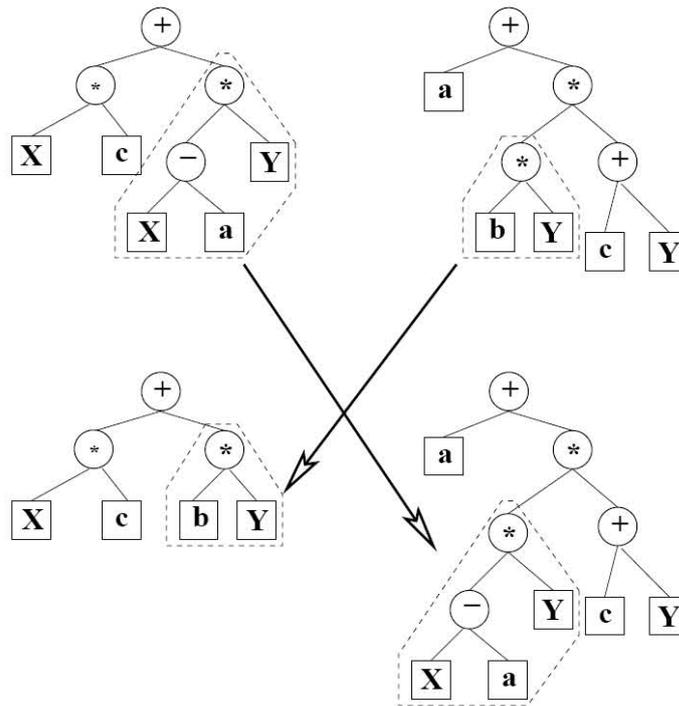


Figure II.13: Exemple de croisement en programmation génétique, dans le cadre de la représentation des polynômes à 2 variables réelles : l'échange des sous-arbres délimités par les pointillés entre les polynômes $c * X + X * Y - a * Y$ et $a + b * Y^2 + b * c * Y$ donne ici :

$$c * X + b * Y \text{ et } X * Y^2 + c * X * Y - a * Y^2 - a * c * Y + a$$

Croisement

Définir une procédure de croisement n'offre a priori aucune difficulté : on choisit aléatoirement un sous-arbre dans chacun des parents, et on échange les deux sous-arbres en question (voir Figure II.13). Du fait de l'homogénéité des types, le résultat est toujours un programme valide – l'ensemble des programmes est fermé pour l'opérateur de croisement. On remarquera cependant que le croisement de deux parents de même taille (nombre de nœuds) a tendance à générer un parent long et un parent court.

De plus, les arbres longs ont en moyenne une plus grande expressivité que les arbres courts. La conjonction de ces deux phénomènes entraîne une croissance continue et incontrôlable de la taille des programmes, dénommée bloat. C'est un des problèmes majeurs de la programmation génétique en pratique, que de nombreux travaux tentent de comprendre (l'explication ci-dessus est loin d'être la seule à avoir été proposée), et de contrôler. Mais une des difficultés est qu'il est a été constaté expérimentalement qu'un minimum de bloat est nécessaire pour espérer obtenir des arbres performants

Initiation

Les travaux originaux de Koza n'utilisaient comme opérateur de variation que le croisement. Mais il utilisait des populations de très grande taille (plusieurs milliers), et pouvait ainsi espérer que la plupart des "morceaux de programme" intéressants étaient présents dans la population initiale et qu'il suffisait de les assembler par croisement.

Aujourd'hui, la plupart des travaux utilisent des opérateurs de mutation, et ce d'autant plus que la taille de la population est petite. De très nombreux opérateurs de mutation ont été imaginés, le plus simple (et le plus destructeur et moins performant) étant de remplacer un sous-arbre aléatoirement choisi par un sous-arbre aléatoirement construit à l'aide de la procédure d'initialisation.

Signalons les mutations par changement de nœud (on remplace un nœud choisi aléatoirement par un nœud de même parité), par insertion de sous-arbre (plutôt que de remplacer totalement un sous-arbre, on insère à un emplacement donné un opérateur dont l'un des opérands est le sous-arbre qui était présent à cet endroit), et son inverse (qui supprime un nœud et tous ses arguments sauf un, qui prend sa place).

Les terminaux réels

Les valeurs numériques réelles utilisées comme terminaux d'arbres de type réel tiennent une place particulière dans la programmation génétique. D'une part, elles ont été longtemps absentes des travaux publiés (Koza n'utilisait que des valeurs entières choisies parmi les 10 premiers entiers par exemple). D'autre part, elles requièrent un traitement particulier, tant en terme d'initialisation (on ne choisit pas une valeur parmi un nombre fini de possibles) qu'en terme de variation.

L'initialisation se fait généralement uniformément sur un intervalle donné. Le croisement se contente d'échanger des sous-arbres, et les valeurs numériques n'y jouent aucun rôle particulier. En revanche, la mutation des constantes est un élément crucial pour le succès d'une optimisation par programmation génétique mettant en jeu des valeurs numériques. On utilise généralement des mutations gaussiennes, éventuellement augmentées de paramètres autoadaptatifs (mais limités à une variance par terminal). Il est même fréquent, si le coût CPU le permet, d'optimiser localement les valeurs numériques pour une structure d'arbre donnée, soit par algorithme déterministe si le problème le permet (Schoenauer, 1996) soit même en utilisant un algorithme évolutionnaire imbriqué (Ebner, 2003).

La programmation génétique est un formidable outil de créativité et John Koza ne désespère pas d'obtenir un jour des résultats brevetables (Koza, 1994)

II.6 Conclusion

Ce chapitre a présenté les algorithmes évolutionnaires dans leurs généralités. Il faut en retenir d'une part leur robustesse vis-à-vis des optima locaux, et d'autre part leur souplesse d'utilisation, particulièrement en termes de champ d'application (choix de l'espace de recherche). Dans notre cas d'étude, on a utilisé la méthode de sélection par roulette stochastique, le croisement barycentrique et une mutation non uniforme en introduisant des différentes techniques comme la technique de nichage, rescaling et la Méthode de MDD (Sefrioui ,1998), (voir le paragraphe : II.5.3.4 Le Choix d'un Algorithme Génétique(AG))

Applications

Chapitre III : Première Application : Modélisation des transferts diffusionnels d'eau dans le domaine hygroscopique du bois de hêtre.

III.1 Introduction et objectif de l'étude

Le bois est un matériau poreux hygroscopique où l'eau peut apparaître sous trois formes principales :

- eau libre ou capillaire,
- eau adsorbée ou liée,
- eau vapeur.

L'eau libre que contient le bois dans l'arbre est éliminée rapidement lors d'un séchage naturel (à l'air libre) ou artificiel (dans un séchoir). Au cours de cette étape les variations dimensionnelles du bois sont faibles et on peut admettre que le volume du bois reste constant. A l'issue de cette élimination de l'eau libre, l'eau résiduelle se trouve sous forme d'eau adsorbée et d'eau vapeur. C'est le domaine hygroscopique du bois où l'élimination de l'eau par séchage sera accompagnée d'un retrait volumique. De plus, à une température fixée, il peut exister entre l'eau adsorbée et l'eau en phase vapeur un équilibre thermodynamique qui se traduit par une isotherme d'adsorption.

Ainsi, dans le domaine hygroscopique, le séchage ou l'humidification du bois va refaire apparaître des transferts d'eau liée et d'eau vapeur au sein du matériau, transfert de matière généralement accompagné de transfert d'énergie si le matériau ne peut être supposé isotherme. Dans ce qui suit nous supposons que les transferts de matière seront réalisés dans des conditions isothermes.

Le transfert de l'eau en phase adsorbée se fait uniquement par diffusion (existence d'un gradient de concentration). Quant au transfert de l'eau vapeur il se fait également par diffusion, mais un transfert convectif de la vapeur d'eau peut se superposer au transfert diffusif en présence d'un gradient de pression totale. En l'absence d'un gradient thermique le transfert convectif d'eau vapeur est faible et dans la suite de l'étude nous allons admettre que les transferts d'eau liée et d'eau vapeur dans le bois sont purement diffusifs.

Le bois n'étant pas un matériau isotrope, les transferts diffusifs sont différents dans les trois directions orthotropiques du bois que sont : la direction axiale, la direction radiale et la direction tangentielle. Les échantillons sur lesquels sont réalisés les essais d'humidification

et de séchage sont choisis pour limiter les transferts diffusionnels à une seule direction orthotropique. Des expériences de séchage d'échantillons de bois de hêtre ont été réalisées par Mouchot (2002) en plaçant les échantillons en équilibre thermodynamique avec un air humide d'humidité relative $HR1$ à la température $T = 35^{\circ}C$ dans une enceinte isotherme à $35^{\circ}C$ où l'humidité relative de l'air maintenue constante est $HR2 < HR1$. Il en résulte un transfert diffusionnel d'eau de l'échantillon vers la phase gazeuse de l'enceinte se traduisant par une diminution de la masse de l'échantillon au cours du temps jusqu'à l'atteinte d'un nouvel équilibre thermodynamique correspondant à l'humidité $HR2$.

L'objectif de l'étude est une modélisation de la variation de masse de l'échantillon. Pour ce faire, nous allons tester quatre modèles basés sur les hypothèses respectives suivantes :

- Premier modèle (Modèle I): la masse d'eau vapeur dans le bois étant très négligeable devant la masse d'eau adsorbée, le transfert de l'eau dans le bois se limite au transfert diffusionnel de l'eau adsorbée, le coefficient de diffusion de l'eau adsorbée D^* étant obtenu par optimisation.
- Deuxième modèle (Modèle II): la masse d'eau vapeur dans le bois étant très négligeable devant la masse d'eau adsorbée, le transfert de l'eau dans le bois se limite au transfert diffusionnel de l'eau adsorbée, le coefficient de diffusion de l'eau adsorbée D_A étant celui déterminé expérimentalement (Mouchot,2002) sur un autre dispositif. Comme nous le constaterons ci-après, D_A est généralement différent de D^* .
- Troisième modèle (Modèle III): on ne néglige pas la masse d'eau vapeur et les transferts diffusionnels ont lieu simultanément en phase vapeur et en phase adsorbée, avec les coefficients de diffusion respectifs D_V et D_A mesurés indépendamment. Toutefois, dans ce modèle nous supposerons que localement l'équilibre thermodynamique entre la phase gazeuse et la phase adsorbée est réalisé.
- Quatrième modèle (Modèle IV): comme dans le troisième modèle les transferts diffusionnels se font simultanément en phase gazeuse et adsorbée mais l'équilibre

- thermodynamique local entre l'eau vapeur et l'eau adsorbée n'est pas réalisé. Pour traduire ce non équilibre, nous introduisons une résistance telle que le flux massique d'eau transférée par unité de volume entre l'eau vapeur et l'eau adsorbée est tel que :

$$\varphi = \rho_B ka (f(\rho_e) - x) \quad (\text{III.1})$$

où x est l'humidité absolue du bois (kg d'eau / kg bois sec)

ρ_e est la masse volumique de l'eau vapeur ($kg m^{-3}$)

$f(\rho_e)$ est l'humidité absolue du bois en équilibre thermodynamique avec l'eau vapeur de masse volumique ρ_e

ka est une conductance volumique de transfert (s^{-1})

ρ_B est la masse volumique du bois anhydre ($kg m^{-3}$)

φ est homogène à des $kg s^{-1} m^{-3}$.

III.2 Le procédure expérimentale :

III.2.1 Les directions du bois :

Le bois est un matériau hétérogène ce qui explique son caractère anisotrope. Il a donc une direction privilégiée de résistance maximale.

Ses propriétés mécaniques et physiques varient selon le plan de coupe considéré : axial radial ou tangentiel.

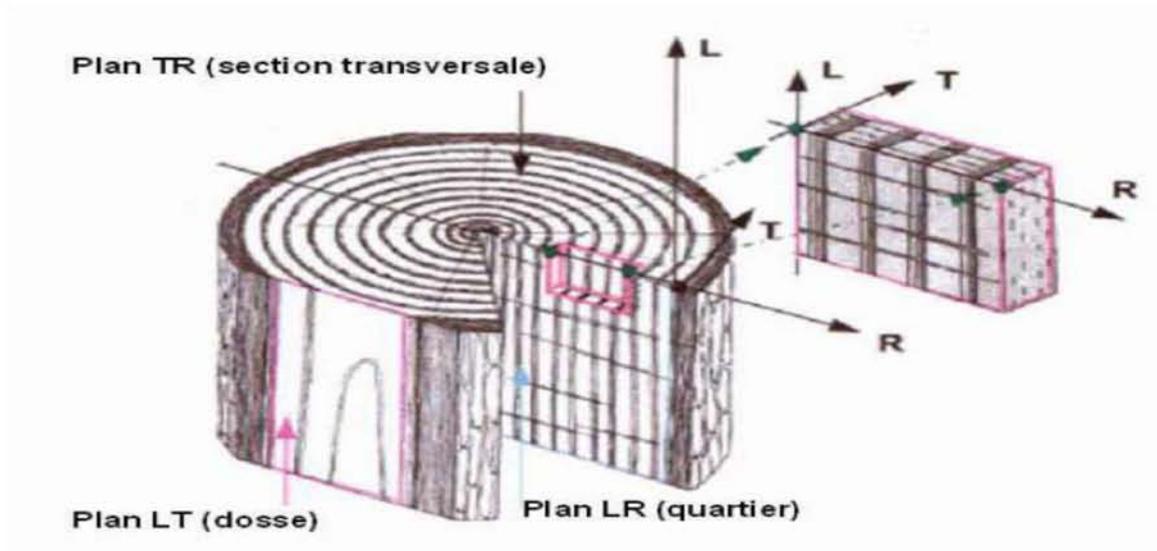


Figure III.1 : Présentation les différentes coupe du bois selon les directions axiale radiale et tangentielle

III.2.1 Protocole expérimental (Mouchot, 2002) :

Nous avons deux enceintes climatiques reliées entre elles par un sas à deux vantaux fermés hermétiquement. Le sas permet de faire passer un échantillon de la première enceinte vers la deuxième enceinte.

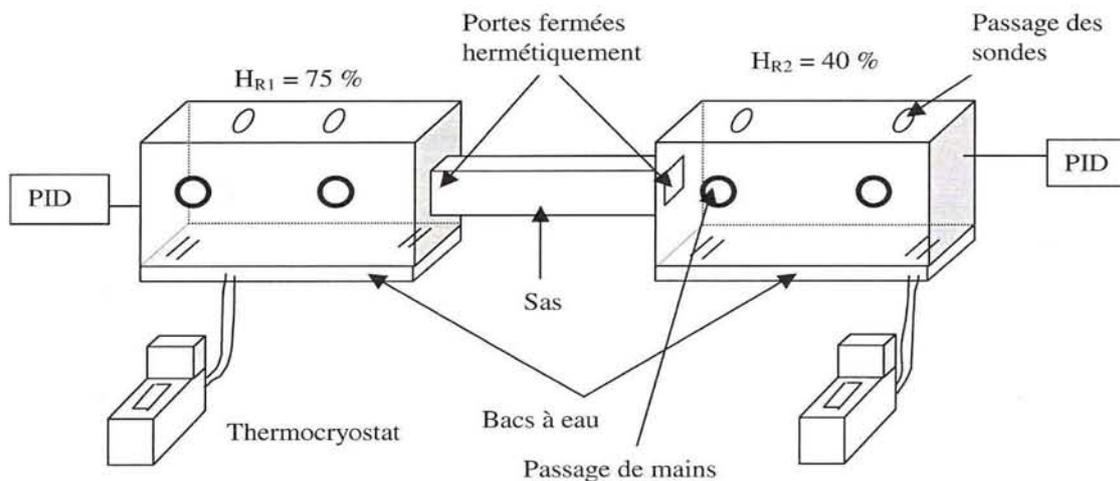


Figure III.2 : Schéma simplifié des deux enceintes climatiques

Dans la première enceinte, l'eau du bac est à $19,4^{\circ}\text{C}$ et la température sèche est de 35°C , ce qui correspond à une humidité relative de l'air de 40%.

Dans la deuxième enceinte, l'eau du bac est à 30°C et la température sèche est de 35°C , ce qui correspond à une humidité relative de l'air de 75%.

Dans les expériences d'adsorption, les échantillons de bois, stabilisés à 40% d'humidité relative, sont transférés par le sas dans l'enceinte à 75% d'humidité relative. Les pesées des échantillons sont réalisées tout d'abord toutes les 10 secondes (30 points), puis toutes les 30 secondes (30 points), puis toutes les 2 minutes (30 points), puis toutes les 5 minutes (110 points) puis 10 minutes pour tous les autres points. Après 24 heures, les masses sont mesurées chaque jours jusqu'à l'obtention d'une masse constante correspondant à l'équilibre thermodynamique de la deuxième enceinte.

Pour une bonne accessibilité des deux surfaces d'échange, les échantillons sont déposés sur des glissières constituées de deux rails parallèles. La grandeur mesurée est donc la masse en fonction du temps.

Pour les expériences de désorption, le déroulement opératoire est inversé. Les échantillons stabilisés dans la deuxième enceinte sont introduits dans la première enceinte à l'humidité relative plus faible. Nous observons une diminution de la masse des échantillons en fonction du temps.

III.3 Mise en équation des modèles

Les échantillons du bois se présentent sous forme de disques circulaires de diamètre D , d'épaisseur e , les transferts d'eau étant limités aux transferts dans les directions de l'épaisseur. Par la suite, les équations de bilan ne dépendent que d'une variable d'espace.

III.3.1 Bilans du premier modèle (Modèle I)

Le bilan de matière de l'eau adsorbée dans l'épaisseur comprise entre y et $y + dy$, s'écrit :

$$-D^* \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} + \frac{\partial x}{\partial t} = 0 \quad (\text{III.2})$$

avec comme condition initiale :

$$\text{à } t = 0 \quad x = x_1 = f(\rho_1) \quad (\text{III.3})$$

et comme conditions aux limites :

$$\text{à } y = 0 \quad \frac{\partial x}{\partial y} = 0 \quad (III.4)$$

$$\text{à } y = e/2 \quad x = x_2 = f(\rho_2) \quad (III.5)$$

La condition aux limites (III.5), suppose qu'il n'y a pas de résistance de transfert de la matière à la surface du disque. En présence d'une résistance de transfert de la matière, la condition aux limites (III.5) doit être remplacée par :

$$\text{à } y = e/2 \quad -D * \frac{\partial x}{\partial y} = k_c (x - f(\rho_2)) = k_c (x - x_2) \quad (III.5 \text{ bis})$$

x_1 :est l'humidité absolue du bois (kg d'eau / kg bois sec) à l'instant $t=0$

ρ_1 :est la masse volumique de l'eau vapeur ($kg m^{-3}$) à l'instant $t = 0$

$f(\rho_1)$:est l'humidité absolue du bois en équilibre thermodynamique avec l'eau vapeur de masse volumique ρ_1

x_2 :est l'humidité absolue du bois (kg d'eau / kg bois sec) en $y = e/2$

ρ_2 :est la masse volumique de l'eau vapeur ($kg m^{-3}$) en $y = e/2$

$f(\rho_2)$:est l'humidité absolue du bois en équilibre thermodynamique avec l'eau vapeur de masse volumique ρ_2

k_c :est coefficient de transfert de matière convectif ($m s^{-1}$)

En présence de cette condition nous appelons ce modèle « Modèle I bis ». Nous verrons que l'influence de la résistance externe est négligeable et dans les autres modèles nous n'en tiendrons pas compte.

Connaissant la distribution de x en fonction de y , la masse de l'échantillon sera évaluée par la relation :

$$m = m_B + 2S \int_0^{e/2} \rho_B x dy \quad (III.6)$$

où m_B est la masse de l'échantillon anhydre (kg),

S est la section droite de l'échantillon (m^2).

III.3.2 Bilans du deuxième modèle (Modèle II)

Le bilan de matière du deuxième modèle est similaire à celui du premier modèle. Seule la diffusivité D^* obtenue pour optimisation est remplacée par la valeur expérimentale D_A . Le bilan de l'eau adsorbée s'écrit donc :

$$-D_A \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} + \frac{\partial x}{\partial t} = 0 \quad (III.7)$$

avec comme condition initiale :

$$\text{à } t = 0 \quad x = x_1 = f(\rho_1) \quad (III.3)$$

et comme condition aux limites :

$$\text{à } y = 0 \quad \frac{\partial x}{\partial y} = 0 \quad (III.4)$$

$$\text{à } y = e/2 \quad x = x_2 = f(\rho_2) \quad (III.5)$$

La masse de l'échantillon à l'instant t est évaluée par la relation (III.6).

La confrontation entre D^* et D_A permettra de dire si le deuxième modèle est justifié ou non.

III.3.3 Bilans du troisième modèle (Modèle III)

Le bilan de matière de l'eau adsorbée et de l'eau vapeur dans l'épaisseur comprise entre y et $y + dy$, s'écrit :

$$-D_A \rho_B \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} - D_V \frac{\partial^2 \rho_e}{\partial y^2} + \rho_B \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0 \quad (III.8)$$

avec

$$x = f(\rho_e) \quad (III.9)$$

L'équation (III.9) exprime que l'eau adsorbée et l'eau vapeur sont en équilibre thermodynamique.

Les conditions initiales sont données par :

$$\begin{aligned} \text{à } t = 0 \quad x = x_1 \quad \rho_e = \rho_1 \\ (III.10) \end{aligned}$$

et les conditions aux limites sont :

$$\text{à } y = 0 \quad \frac{\partial x}{\partial y} = \frac{\partial \rho_e}{\partial y} = 0 \quad (III.11)$$

$$\text{à } y = e/2 \quad x = x_2 = f(\rho_2) \quad \text{et} \quad \rho_e = \rho_2 \quad (III.12)$$

La masse de l'échantillon à l'instant t est évaluée par la relation :

$$m = m_B + 2S \int_0^{e/2} \rho_B x \, dy + 2S \int_0^{e/2} \rho_e \, dy \quad (III.13)$$

La contribution du troisième terme de la relation (III.13) sera toujours faible devant les deux autres termes.

III.3.4 Bilans du quatrième modèle (Modèle IV)

Les bilans de matière de l'eau adsorbée et de l'eau vapeur dans l'épaisseur comprise entre y et $y + dy$, s'écrivent respectivement :

$$-D_A \rho_B \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} + \varepsilon \rho_B \frac{\partial x}{\partial t} + \rho_B ka (x - f(\rho_e)) = 0 \quad (III.14)$$

$$-D_V \frac{\partial^2 \rho_e}{\partial y^2} + \varepsilon \frac{\partial \rho_e}{\partial t} - \rho_B ka (x - f(\rho_e)) = 0 \quad (III.15)$$

Les conditions initiales des équations (III.14) et (III.15) sont :

$$\text{à } t = 0 \quad x = x_1 \quad \text{et} \quad \rho_e = \rho_1 \quad (III.10)$$

Les conditions aux limites des équations (III.14) et (III.15) sont :

$$\text{à } y = 0 \quad \frac{\partial x}{\partial y} = \frac{\partial \rho_e}{\partial y} = 0 \quad (\text{III.11})$$

$$\text{à } y = e/2 \quad x = x_2 = f(\rho_2) \quad \text{et} \quad \rho_e = \rho_2 \quad (\text{III.12})$$

La masse de l'échantillon à l'instant t est évaluée par la relation (III.13).

ε : La porosité du bois.

III.4 Expression mathématique de la relation d'équilibre

A partir d'une abaque donnant la valeur de x en fonction de l'humidité relative de l'air extérieur (Siau,1995) et la relation (III.16), on a tracé la relation d'équilibre $x = f(\rho_e)$ obtenue à 35°C, présenté par la figure III.1:

$$\rho_e = \frac{Me Ps}{R T} Hr \quad (\text{III.16})$$

Avec

Me : masse molaire d'eau en kg/mol

Ps : la pression saturante de vapeur d'eau en Pa à la température 35 °C (5514 Pa)

T : la température en K

R : La constante des gaz parfaits ($8,314 J K^{-1} mol^{-1}$)

Hr : l'humidité relative de l'air à l'extérieur

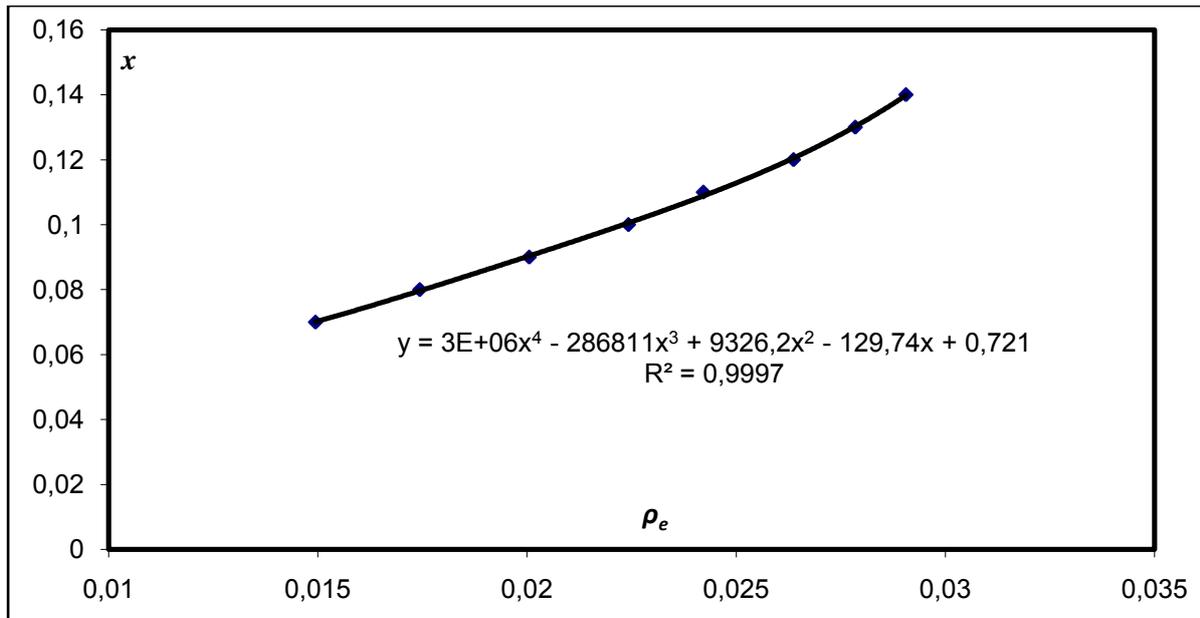


Figure III.3 : représentation graphique de l'humidité absolue du bois en fonction de la masse volumique de vapeur d'eau à l'équilibre.

Donc la relation d'équilibre $x = f(\rho_e)$ est exprimée sous la forme polynomiale suivante :

$$x = 3 \cdot 10^6 \rho_e^4 - 286811 \rho_e^3 + 9326,2 \rho_e^2 - 129,74 \rho_e + 0,721 \quad (\text{III.17})$$

III.5 Méthode numérique de résolution des équations aux dérivées partielles de bilan

III.5.1 Etude Générale :

Les quatre modèles se représentent sous la forme d'une équation parabolique, représentée par l'équation (III.18) :

$$-\alpha \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} + \frac{\partial x}{\partial t} = f \quad (\text{III.18})$$

Les conditions initiale et limites de ce problème sont données par les équations (III.3-III.5). L'équation (III.18) fait intervenir des dérivées par rapport à l'espace ($\partial(\)/\partial y$) et par rapport au temps ($\partial(\)/\partial t$). Les équations aux dérivées partielles sont résolues avec la méthode des différences finies. La discrétisation des modèles, réalisée en utilisant les développements de Taylor, est détaillée dans les paragraphes qui suivent.

III.5.1.1 Discrétisation selon l'espace

La symétrie de l'échantillon par rapport au plan médian perpendiculaire à la direction y permet d'étudier le problème sur une demie- épaisseur de l'échantillon, comprise entre le cœur du feuillet ($y = 0$) et sa surface ($y = e/2$). Le domaine d'intégration est recouvert d'un maillage régulier dont l'espace entre deux nœuds est défini comme $dy = \frac{e}{2(M+1)}$, M étant le nombre de points du maillage.

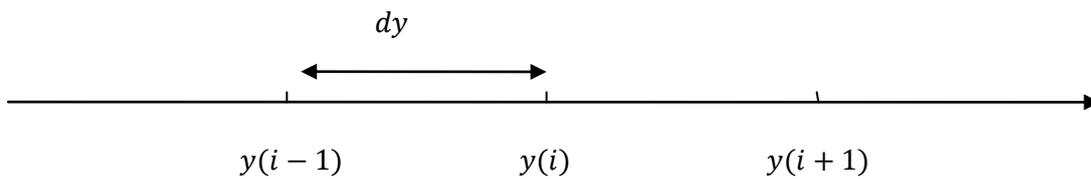


Figure III.4. Schéma numérique

Soit la fonction x continue et dérivable deux fois et l'espace entre deux nœuds $dy \rightarrow 0$. En utilisant le développement de Taylor la fonction x peut être écrite comme suit :

$$x(y + dy) = x(y) + \frac{\partial x(y)}{\partial y} dy + \frac{\partial^2 x(y)}{\partial y^2} \frac{dy^2}{2} + \varepsilon(dy^2) \quad (\text{III.19})$$

$$x(y - dy) = x(y) - \frac{\partial x(y)}{\partial y} dy + \frac{\partial^2 x(y)}{\partial y^2} \frac{dy^2}{2} + \varepsilon(dy^2) \quad (\text{III.20})$$

avec $\varepsilon(dy^2) \rightarrow 0$. La somme des relations (III.19) et (III.20) aboutit à l'expression :

$$x(y + dy) + x(y - dy) = 2 x(y) + \frac{\partial^2 x(y)}{\partial y^2} dy^2 + 2 \varepsilon(dy^2) \quad (\text{III.21})$$

III.5.1.2 Discrétisation selon le temps

L'intégration des équations des bilans dans le temps se fait suivant des pas de temps dt réguliers. La forme discrétisée du temps est alors donnée par la relation

$$t(n) = n dt \quad (III.22)$$

La notation discrétisée de la fonction de l'humidité du bois x devient :

$$x_n^i = x(y(i), t(n)) \quad (III.23)$$

i et n sont des nombres entiers qui désignent respectivement le point de maillage et le nombre de pas de temps après l'instant initial. Les dérivées partielles de x selon le temps et l'espace prennent la forme :

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{x_{n+1}^i - x_n^i}{dt} \quad (III.24)$$

$$\frac{\partial^2 x}{\partial y^2} = \frac{x_n^{i+1} - 2x_n^i + x_n^{i-1}}{dy^2} = g(x, n, i) \quad (III.25)$$

Si la fonction f de l'équation (III.17) est indépendante du temps, la solution x tend vers une solution stationnaire x^{stat} quand $t \rightarrow \infty$, x^{stat} est la solution du problème elliptique suivant :

$$\frac{\partial^2 x^{stat}}{\partial y^2} = f$$

$$\text{à } i=1 \quad \frac{\partial x_n^{stat1}}{\partial y} = 0 \quad \forall n \in IN \quad (III.26)$$

$$\text{à } i=M \quad x_n^{statM} = x_2 \quad \forall n \in IN$$

Pour le problème elliptique (III.26), l'écriture des dérivées selon l'espace qui permet de rester consistant avec l'équation stationnaire, est la suivante :

$$x_{n+1}^{j+1} = f_n^j dt + x_n^j + \alpha g(x, n+1, j) dt \quad \forall j \in [1, M], j \in IN \quad (III.27)$$

Le schéma s'écrit sous la forme condensée :

$$(\mathbf{I} + \alpha \mathbf{A} dt) X^{n+1} = X^n + f^n dt \quad (\text{III.28})$$

où \mathbf{I} est la matrice identité de dimension $M \times M$

\mathbf{A} est une matrice de dimension $M \times M$ qui contient les coefficients des dérivées selon l'espace à l'instant $t = (n + 1)dt$ (équations III.29-III.32)

$$\mathbf{A}(\mathbf{1}, \mathbf{1}) = \left(\frac{1}{dy^2} \right) \quad (\text{III.29})$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{j}, \mathbf{j}) = \left(\frac{2}{dy^2} \right) \quad \forall j \in [2, M], \quad j \in IN \quad (\text{III.30})$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{j}, \mathbf{j}+1) = \left(-\frac{1}{dy^2} \right) \quad \forall j \in [2, M-1], \quad j \in IN \quad (\text{III.31})$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{j}+1, \mathbf{j}) = \left(-\frac{1}{dy^2} \right) \quad \forall j \in [2, M-1], \quad j \in IN \quad (\text{III.32})$$

X est un vecteur de dimension M . C'est le vecteur solution à l'instant $t = (n + 1) dt$, décrit par l'équation (III.33) :

$$X^n = \begin{pmatrix} x_n^1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n^M \end{pmatrix} \quad (\text{III.33})$$

Le vecteur F^n est défini par l'équation (III.34)

$$F^n = \begin{pmatrix} f_n^1 \\ \cdot \\ \cdot \\ f_n^M + x_2 \frac{\alpha}{dy^2} \end{pmatrix} \quad (\text{III.34})$$

Le schéma défini par les équations (III.29-III.34) peut être résolu par la décomposition de LU, l'algorithme de Gauss ou l'algorithme de Thomas. Notre choix s'est porté sur l'algorithme de Thomas : la matrice **A** est une matrice triangulaire et dans ce cas l'algorithme de Thomas est bien adapté. Cette méthode a pour avantage de nécessiter peu de mémoire machine pour les calculs.

La matrice **A** est définie positive c'est-à-dire :

$${}^t X \mathbf{A} X \geq 0 \quad (\text{III.35})$$

où ${}^t X$ est le transposé du vecteur X . Le terme $(\mathbf{I} + \alpha \mathbf{A} dt)$ est alors également défini positif. Le système est linéaire et il a une solution unique. Ce schéma permet de calculer à nouveau la solution approchée en avançant d'un pas de temps (équation III.35).

$$X^{n+1} = (\mathbf{I} + \alpha \mathbf{A} dt)^{-1} (X^n + f^n dt) \quad (\text{III.36})$$

Le schéma obtenu pour $f^n = 0$ prend la forme suivante :

$$X^{n+1} = (\mathbf{I} + \alpha \mathbf{A} dt)^{-(n+1)} (X^0) \quad (\text{III.37})$$

Pour que le dernier schéma soit stable et consistant, il est nécessaire que la condition (III.37) soit satisfaite :

$$\|(\mathbf{I} + \alpha \mathbf{A} dt)^{-1}\| < 1 \quad (\text{III.38})$$

où le symbole $\| \cdot \|$ désigne le module. Lorsque $\alpha > 0$ le schéma est inconditionnellement stable.

III.5.1.1 Discrétisation du Modèle I

Selon la méthode de discrétisation décrite dans l'étude générale (équations III.21, III.24, III.25) le bilan du Modèle I (équation III.2) est traduit comme suit :

$$x_{n+1}^i = x_n^i + D^* g(x, n+1, i) dt \quad \forall i, n \in \mathbb{N} \quad (\text{III.39})$$

Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\text{à } i = 1 \quad \frac{\partial x_n^1}{\partial t} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (\text{III.40})$$

$$\text{à } i = M \quad x_n^M = x_2 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (\text{III.41})$$

La condition initiale prend la forme :

$$\text{à } n = 0 \quad x_0^i = x_1 \quad \forall i \in \mathbb{N} \quad (\text{III.42})$$

L'écriture discrétisée des conditions aux limites (équations III.43, III.44) et la condition initiale (équation III.45) du Modèle 1 Bis est donnée ci-dessous :

$$\text{à } i = 1 \quad \frac{\partial x_n^1}{\partial y} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (\text{III.43})$$

$$\text{à } i = M \quad x_n^M = x_n^{M-1} - \frac{k_c}{D^*} (x_n^M - x_2) dy \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (\text{III.44})$$

La condition initiale prend la forme :

$$\text{à } n = 0 \quad x_0^i = x_1 \quad \forall i \in \mathbb{N} \quad (\text{III.45})$$

III.5.1.2 Discrétisation du Modèle II

La discrétisation du Modèle II est la même que la discrétisation du Modèle I. Seul le coefficient de diffusion D^* est remplacé par le coefficient de diffusion en phase adsorbée D_A .

III.5.1.3 Discrétisation du Modèle III

Lors de la discrétisation du Modèle III (équation III.8) nous avons utilisé un changement de variable. On pose $u = x + \frac{\rho_e}{\rho_B}$, la variable x est alors exprimé par la relation :

$$x = u - \frac{\rho_e}{\rho_B} \quad (III.46)$$

L'équation (III.8) prend la forme suivante :

$$(D_V - D_A) \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} - D_V \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (III.47)$$

Pour chaque humidité absolue, on peut trouver une masse volumique de vapeur selon Siau (1995) et la relation (III.16) à l'équilibre, donc on peut trouver la valeur du variable u en faisant la somme de l'humidité absolue et le rapport de la masse volumique de vapeur d'eau, qui correspond à cet humidité absolue à l'équilibre, avec la masse volumique du bois de Hêtre.

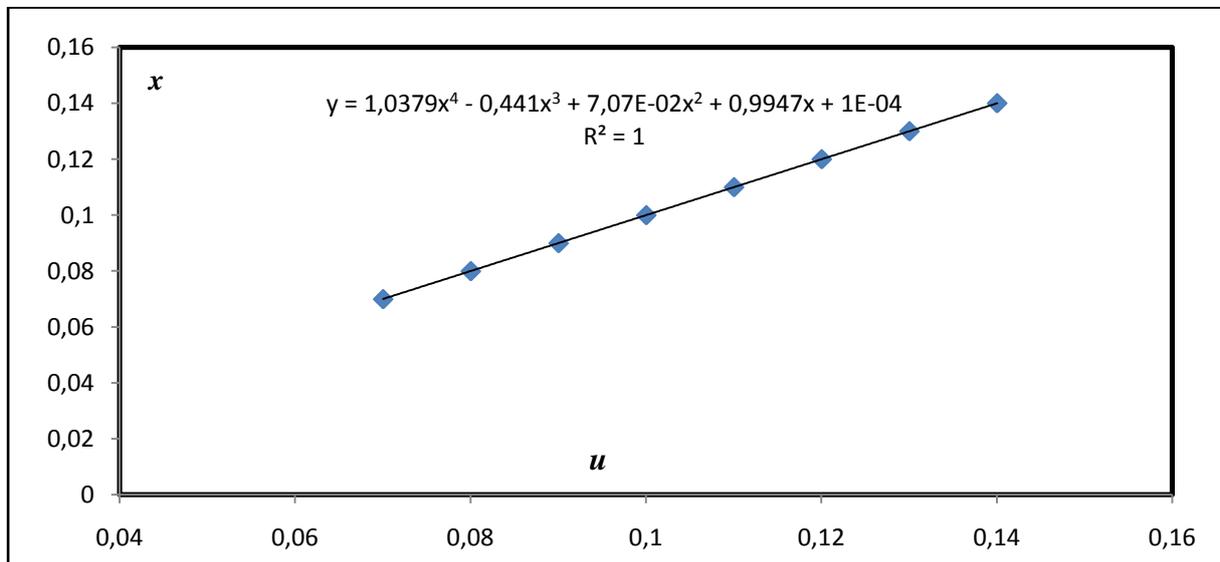


Figure III.5: la présentation de l'humidité absolue en fonction du variable u

On remarque qu'on a une relation linéaire, on a choisie le polynôme de l'ordre 4 pour rester sur le même aspect de la relation (III.17) ainsi pour garder l'information de la relation entre x et u lors des calculs des dérivées x par rapport à y :

La forme polynomiale de la relation d'équilibre $x = f(u)$ obtenue à 35°C est exprimée sous la forme suivante :

$$x = 1,0379 u^4 - 0,441 u^3 + 0,0707 u^2 + 0,9947 u + 0,0001 \quad (III.48)$$

Ce changement de variable a comme avantage de garder l'information des constantes du polynôme lors des calculs des dérivées de x par rapport à y . L'écriture des conditions aux limites (III.51, III.52) est donnée ci-dessous :

$$\text{à } i = 1 \quad \frac{\partial x_n^1}{\partial y} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \rho_{e_n}^1}{\partial y} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.49)$$

$$\text{à } i = M \quad x_n^M = x_2 \quad \text{et} \quad \rho_{e_n}^M = \rho_2 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.50)$$

Avec le changement de variable les conditions aux limites deviennent :

$$\text{à } i = 1 \quad \frac{\partial u_n^1}{\partial y} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.51)$$

$$\text{à } i = M \quad u_n^M = x_2 + \frac{\rho_2}{\rho_B} \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.52)$$

En utilisant la relation (III.23), le problème discrétisé est donné par l'équation (III.53) :

$$(D_V - D_A) \frac{x_{i+1}^{n+1} - 2x_i^{n+1} + x_{i-1}^{n+1}}{dy^2} - D_V \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{dy^2} + \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{dt} = 0 \quad (III.53)$$

avec :

$$x_i^n = 1,0379 (u_i^n)^4 - 0,441 (u_i^n)^3 + 0,0707 (u_i^n)^2 + 0,9947 u_i^n + 0,0001 \quad (III.54)$$

Les conditions aux limites sont notées comme suit :

$$\text{à } i = 1 \quad \frac{\partial x_n^1}{\partial y} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial u_n^1}{\partial y} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.55)$$

$$\text{à } i = M \quad x_n^M = x_2 \quad \text{et} \quad u_n^M = x_2 + \frac{\rho_2}{\rho_B} \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.56)$$

III.5.1.4 Discrétisation du Modèle IV

La forme discrétisée du Modèle IV est décrite dans les lignes qui suivent :

$$D_A \frac{x_n^{i+1} - 2x_n^i + x_n^{i-1}}{dy^2} = g(x, n, i) \quad \forall i, n \in \mathbb{N} \quad (III.57)$$

$$D_V \frac{\rho_{e_n}^{i+1} - 2\rho_{e_n}^i + \rho_{e_n}^{i-1}}{dy^2} = h(\rho_e, n, i) \quad \forall i, n \in \mathbb{N} \quad (III.58)$$

avec :

$$x_{n+1}^i = x_n^i + g(x, n+1, i) \frac{dt}{\varepsilon} + ka \left[f(\rho_{e_n}^i) - x_n^i \right] \frac{dt}{\varepsilon} \quad (III.59)$$

$$\rho_{n+1}^i = \rho_n^i + h(\rho_e, n+1, i) \frac{dt}{\varepsilon} + \rho_B ka \left[x_n^i - f(\rho_{e_n}^i) \right] \frac{dt}{\varepsilon} \quad (III.60)$$

Les conditions aux limites sont écrites de la façon suivante :

$$\text{à } i = 1 \quad \frac{\partial x_n^1}{\partial y} = 0 \text{ et } \frac{\partial \rho_{e_n}^1}{\partial y} = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.61)$$

$$\text{à } i = M \quad x_n^M = x_2 \quad \text{et} \quad \rho_{e_n}^M = \rho_2 \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (III.62)$$

Et la condition initiale prend la forme :

$$\text{à } n = 0 \quad x_0^i = x_1 \quad \text{et} \quad \rho_{e_0}^i = \rho_1 \quad \forall i \in \mathbb{N} \quad (III.63)$$

III.6. Résultats des modélisations

III.6.1 Courbes expérimentales modélisées

Nous avons cherché à modéliser deux courbes expérimentales de désorption (séchage) obtenues par Mouchot (2002). Il s'agit des courbes rapportées sur les figures III.3 et III.4 qui correspondent à deux échantillons de hêtre dont les caractéristiques géométriques et les diffusivités de l'eau adsorbée et l'eau vapeur mesurées sont donnés dans le **Tableau 1** : Caractéristiques géométriques et diffusivités des échantillons.

Tableau III.1 : Caractéristiques géométriques et diffusivités des échantillons

échantillon	e (mm)	ρ_B (kg m ⁻³)	S (mm ²)	ε	D_V (m ² s ⁻¹)	D_A (m ² s ⁻¹)	D^* (m ² s ⁻¹)
HL11	19.0	786.1	4043.2	0.46	$3.3 \cdot 10^{-6}$	$3.38 \cdot 10^{-10}$	$1.05 \cdot 10^{-9}$
H7T	12.6	736.0	4128.1	0.49	$3.7 \cdot 10^{-8}$	$1.64 \cdot 10^{-11}$	$8.13 \cdot 10^{-11}$

HL11 est un échantillon où les transports s'effectuent dans la direction axiale. Pour H7T les transferts ont lieu dans la direction tangentielle.

L'évolution de la masse de l'échantillon, obtenue expérimentalement et calculée avec les Modèles I à IV est présentée sous la forme adimensionnelle :

$$E = \frac{m - m_{finale}}{m_{initiale} - m_{finale}} \quad (\text{III.61})$$

où : m_{finale} est la masse de l'échantillon à l'équilibre avec l'humidité x_2

$m_{initiale}$ est la masse de l'échantillon à l'équilibre avec l'humidité x_1

m est la masse de l'échantillon à l'instant t .

III.6.2 Etude de Modèle I et Modèle I bis

Pour le modèle 1, nous avons estimé la valeur de D^* en cherchant par optimisation la valeur de D^* qui permet de minimiser la fonction d'écart :

$$e = \frac{1}{N} \sum_N 2 \left| \frac{m_{exp} - m_{cal}}{m_{exp} + m_{cal}} \right| \quad (\text{III.62})$$

où N est le nombre de points expérimentaux choisis.

La méthode d'optimisation utilisée est la méthode d'essais et erreur, son algorithme est détaillé dans le deuxième chapitre et est rappelé sur la figure III.2.

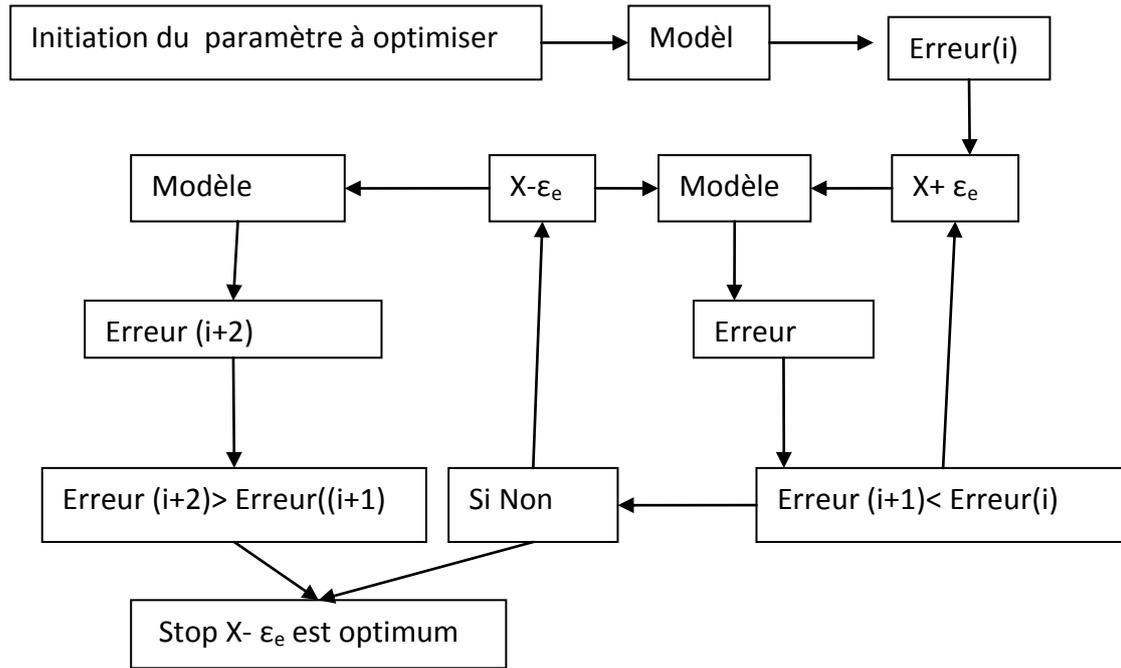


Figure III.6 : Algorithme d'optimisation utilisé dans le chapitre

ϵ_e : La valeur qu'on peut ajouter ou soustraire à un paramètre X pour trouver son optimum

Remarque : L'optimum dépend de la valeur initiale et on ne peut pas dire dans cet algorithme que la valeur optimale est globale.

Les valeurs trouvées pour D^* sont données dans le **Tableau III.1** et les courbes calculées et expérimentale sont représentées sur les Figures III.3 et III.4.

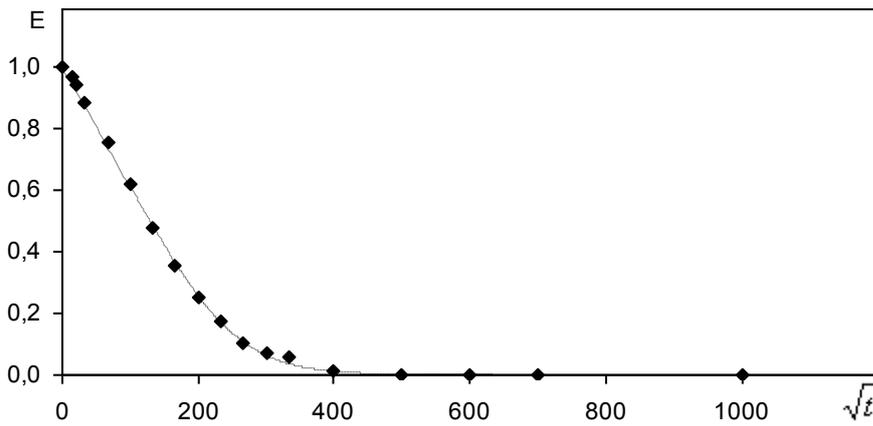


Figure III.7. Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle I et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon HL11. (♦ points expérimentaux)

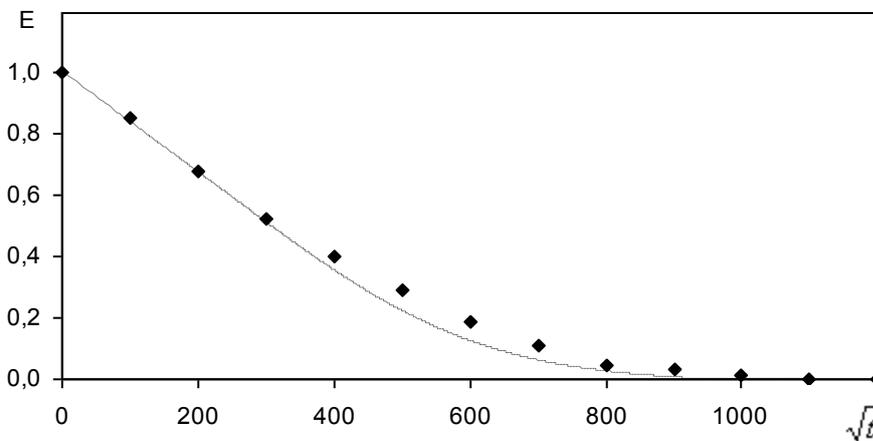


Figure III.8 Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle I et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon H7T. (♦ points expérimentaux)

La représentation des courbes peut être considérée comme satisfaisante. Toutefois les valeurs de D^* sont très différentes de D_A . Les valeurs de D^* sont supérieures à D_A ce qui montre que le transfert de l'eau au sein du bois ne se limite pas seulement au transfert diffusionnel en phase adsorbée.

Pour étudier l'influence éventuelle de la résistance de transfert à la surface des échantillons, D^* étant fixé nous avons cherché les valeurs de k_c pour lesquelles la courbe calculée devient différente de celle du premier modèle. La Figure III.5 donne les courbes théoriques du Modèle I et du Modèle I bis pour différentes valeurs de k_c .

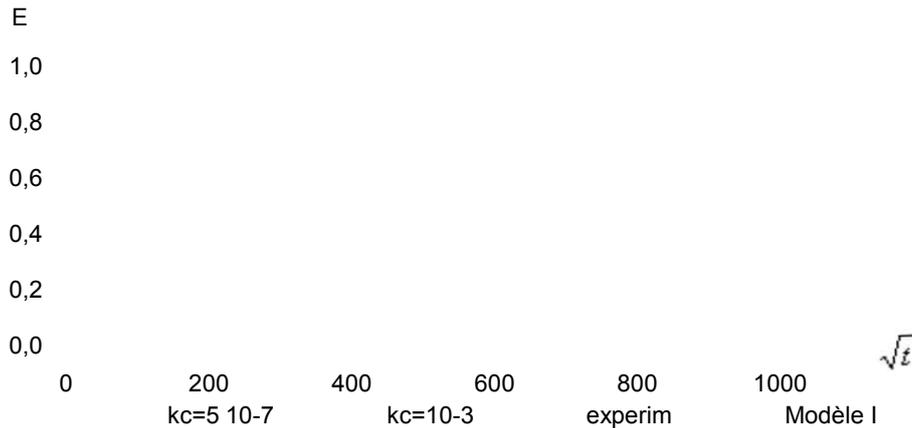


Figure III.9. Comparaison des courbes de désorption calculées numériquement par le Modèle I bis avec des différentes valeurs de k_c et les valeurs expérimentales de l'échantillon H7T.

La différence entre les courbes commence à être observée pour des valeurs de k_c inférieures à $5 \cdot 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$. Une estimation du coefficient de transfert de la matière convectif k_c aboutit à des valeurs supérieures à 10^{-3} m s^{-1} . Par suite, pour les expériences réalisées, la résistance de transfert de matière externe pourra être négligée.

III.6.3 Etude du Modèle II

La courbe de désorption obtenue avec la valeur expérimentale de D_A ne permet pas de représenter les courbes expérimentales de désorption (Figures III.6 et III.7). Nous confirmons que le flux diffusionnel ne se limite pas uniquement au flux en phase adsorbée.

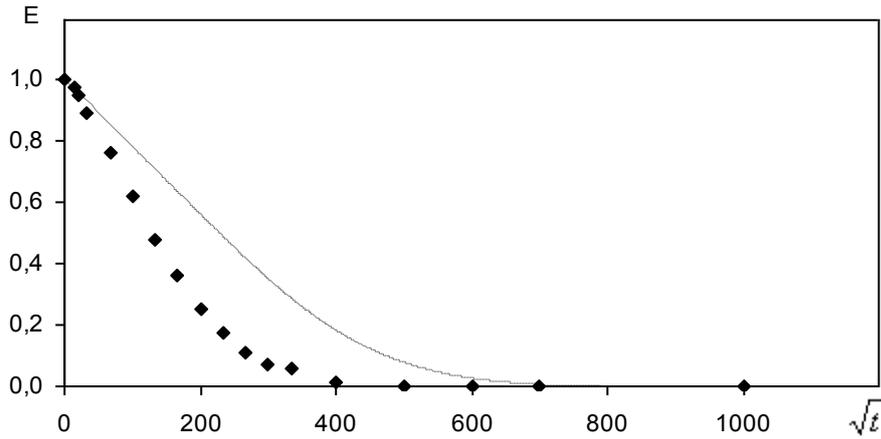


Figure III.10. Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle II et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon HL11. (♦ points expérimentaux)

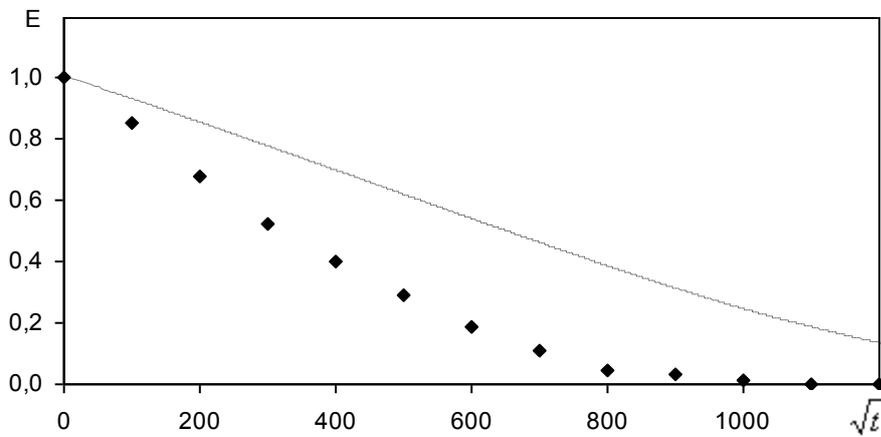


Figure III.11. Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle II et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon H7T. (♦ points expérimentaux)

III.6.4 Etude du Modèle III

En tenant compte des flux diffusionnels en phase adsorbée et en phase vapeur supposées en équilibre thermodynamique, les courbes calculées de désorption avec les

valeurs de D_A et D_V sont plus proches des courbes expérimentales, mais on observe encore des différences (Figures III.8 et III.9) qui sous-entendent que pour les deux échantillons étudiés, l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique entre l'eau vapeur et l'eau adsorbée n'est probablement pas justifiée.

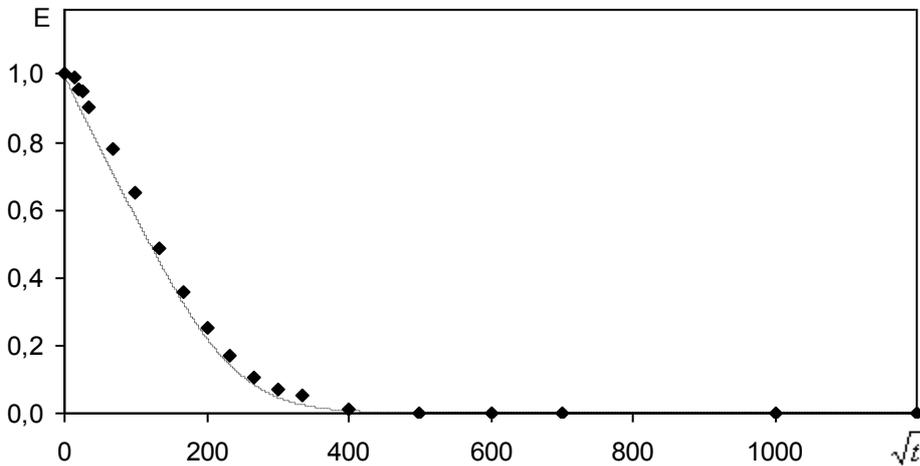


Figure III.12 Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle III et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon HL11. (♦ points expérimentaux)

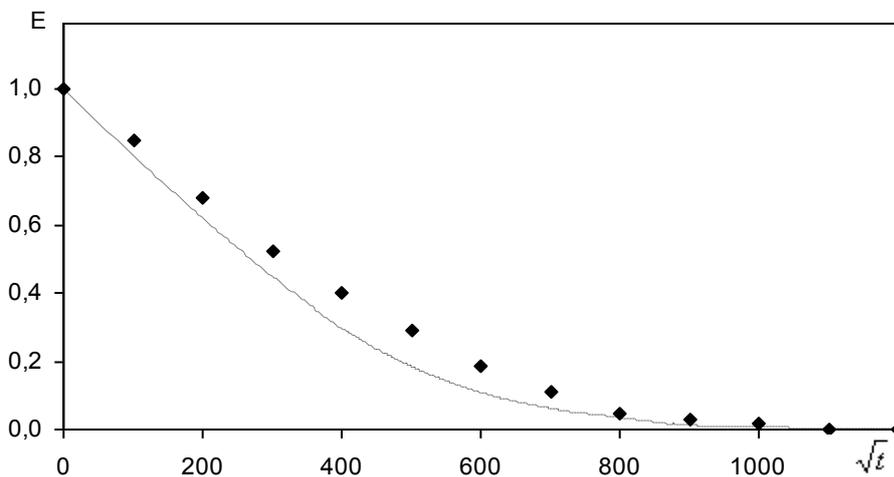


Figure III.13. Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle III et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon H7T. (♦ points expérimentaux)

III.6.5 Etude du Modèle IV

En utilisant les valeurs expérimentales de D_A et D_V , nous avons cherché par optimisation la valeur du coefficient de transfert volumique ka qui minimise la fonction d'erreur e (équation III.62) entre les valeurs expérimentales et calculées de la masse de l'échantillon. Les valeurs trouvées pour ka sont :

- pour l'échantillon HL11 : $ka = 2,7 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$

- pour l'échantillon H7T : $ka = 2,3 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$

Les courbes calculées sont représentées en continu sur les figures III.10 et III.11.

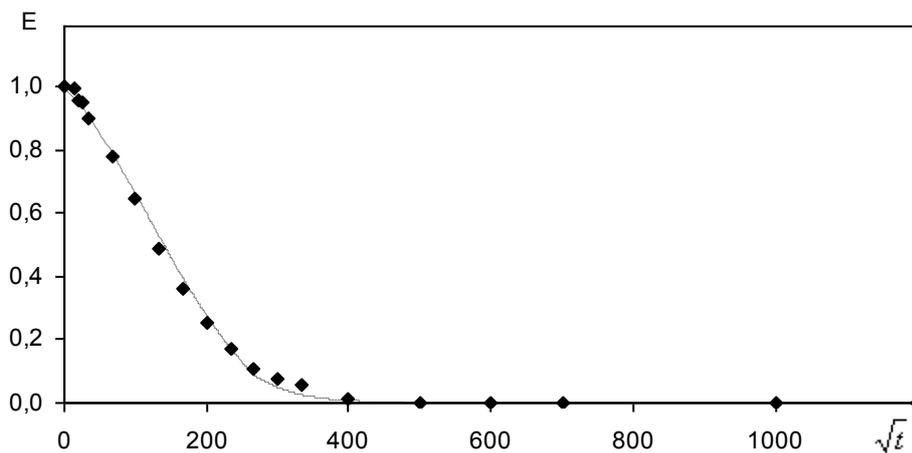


Figure III.14. Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle IV et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon HL11. (♦ points expérimentaux)

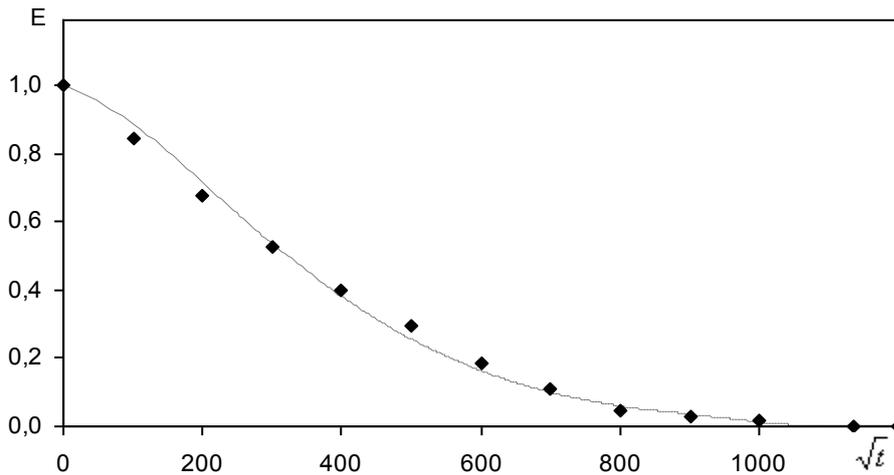


Figure III.15. Comparaison de la courbe de désorption calculée numériquement par le Modèle IV et les valeurs expérimentales obtenues pour l'échantillon H7T. (♦ points expérimentaux)

La représentation est tout à fait satisfaisante. Certes avec un seul coefficient de diffusion on peut aussi représenter correctement les courbes expérimentales mais comme nous l'avons montré la valeur du coefficient de diffusion optimisée reste très différente de celle mesurée expérimentalement. De plus elle ne permet pas de représenter la réalité des phénomènes de transfert qui dans les cas étudiés font apparaître les deux types de transfert diffusionnel dans des conditions où l'équilibre thermodynamique entre l'eau adsorbée et l'eau vapeur n'est pas toujours réalisé.

VI Conclusion

La modélisation des courbes de désorption de l'eau dans le domaine hygroscopique des deux échantillons de bois de hêtre montre la nécessité de prendre en compte les deux types de transferts diffusionnels au sein du bois à savoir transferts en phase adsorbée et en phase vapeur. De plus pour les échantillons étudiés l'hypothèse d'équilibre thermodynamique entre l'eau adsorbée et l'eau vapeur n'est pas toujours vérifiée. Cette hypothèse est généralement admise dans le cas des adsorbants utilisés industriellement (charbon actif, zéolites,...).

Chapitre IV : Seconde Application : Traitement thermique du bois par conduction (Pyrolyse douce)

IV.1 Introduction

De nombreux modèles dans la littérature visent à représenter la pyrolyse d'une particule de bois. Faisant appel à deux disciplines, le transfert de chaleur et de masse en milieu poreux et la cinétique chimique, la plupart des auteurs ont développé des modèles dans le but d'étudier le comportement du bois et plus généralement de la biomasse en fonction de la température. Pour comprendre plus précisément les événements se déroulant lors de la pyrolyse, trois approches ont été proposées : la première considère la biomasse comme un seul élément homogène (Wagenaar et al. 1994, Di Blasi et al. 2001, Rath 2003, Sadhukhan 2008), la deuxième prend en compte la contribution de chacun des composés du bois : cellulose, hémicellulose et lignine (Rousset, 2004), la troisième consiste à considérer l'existence de trois fractions qui se dégradent différemment (Grioui et al. 2006). De façon générale, les mécanismes de décomposition thermique des matériaux polymériques à longue chaîne sont très compliqués.

Une analyse thermique, en ce sens, devrait permettre de quantifier les changements des propriétés physico-chimiques du bois au cours du traitement thermique en commençant par la montée en température pour la mise en régime de la planche et en analysant les modifications au cours de la durée de traitement.

Le modèle proposé dans ce travail vise à représenter le transfert thermique et la perte de masse dans une planche de bois d'une épaisseur qui varie entre 3 cm et 4 cm. La littérature classique modélise souvent le transfert thermique dans une particule de faible dimension (Yeasmin et al. 1999, Di Blasi. 2008, Morten et al. 1999). Dans cette étude, le choix de travailler avec une macro- particule nous permet d'obtenir un gradient de la température sur l'épaisseur de la planche. Ce cas de figure est plus proche de la réalité industrielle.

Deux études doctorales au sein du laboratoire sont consacrées à l'étude de la pyrolyse douce où la température opératoire du traitement du bois se limite à 240°C. La plage de température des travaux disponibles dans la littérature est généralement plus élevée, elle se situe entre 250°C et 800°C. (Grioui et al. 2006, Yeasmin et al. 1998, Sadhukhan et al. 2008, Larfeldt et al. 2000). De plus, le transfert de chaleur vers la planche de bois est fait par conduction et non pas par convection comme dans l'étude de Rousset (2004). Ces

différentes conditions expérimentales donnent à notre étude dans sa partie expérimentale et dans sa modélisation une richesse et une nouveauté.

Les équations de transfert de chaleur et de matière utilisent des paramètres thermiques et cinétiques. Est ce qu'on peut utiliser les valeurs des paramètres proposées dans la littérature dans nos modèles ? Ou bien faut-il les déterminer et comment peut-on les déterminer? Les réponses à ces interrogations sont données dans les paragraphes suivants.

IV.2 PILOTE MACRO-THERMOBALANCE

Ce pilote s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre le LERMAB et la société suisse PRODEO. En effet, PRODEO utilise un four conducteur sous-vide pour traiter le bois thermiquement. Dans le cadre de La thèse de Monsieur Mounir Chaouch sous la direction du professeur Mathieu Pétrissans, Le doctorant a mis au point un pilote de type macro-thermobalance qui doit répondre au objectif suivant :

- traiter thermiquement par conduction, sous azote, des échantillons de bois de grande dimensions (20 x 30 x 3 cm) ou (10 x 20 x 3 cm).
- enregistrer la perte de masse durant la phase de séchage et de traitement (précision : 0,2g)
- enregistrer les température à cœur et en surface de la planche (précision : 0,1 °C)
- programmer des montées en température très variables de 0,1 à 8 °C min⁻¹, et des plateaux de température.

IV.2.1 Descriptif du pilote

Deux plaques métalliques chauffées électriquement (cordon chauffant) sont disposées en dessous et au dessus d'une planche de bois échantillon. La répartition géométrique du cordon chauffant est présentée sur figure IV.1. Cette disposition permet d'assurer une homogénéité thermique de surface inférieure à 0,5°C. L'ensemble composé des deux plaques et de la planche est disposé dans un caisson isolé thermiquement (laine de roche, feillard d'aluminium) et balayé par de l'azote. Les plaques et la planche sont reliées directement au plateau d'une balance à l'aide de 4 tiges métalliques. La balance se situe à l'extérieur du caisson isolé.

La macro-thermbalance permet d'enregistrer le gradient thermique entre la surface de la planche et son cœur pour pouvoir développer des modèles de transfert basés sur non homogénéité thermique du bois durant son traitement.

L'enregistrement de la Température se fait à la surface comme au cœur de la planche du bois à traité, à laide des thermo-couples types k.

Les thermocouples sont disposés l'un en surface du bois (entre la face inférieur de la plaque supérieur et à la face supérieur du bois) et l'autre au cœur du bois (trou de 1 mm, longueur 4 cm, situé à demi épaisseur et demi largeur).

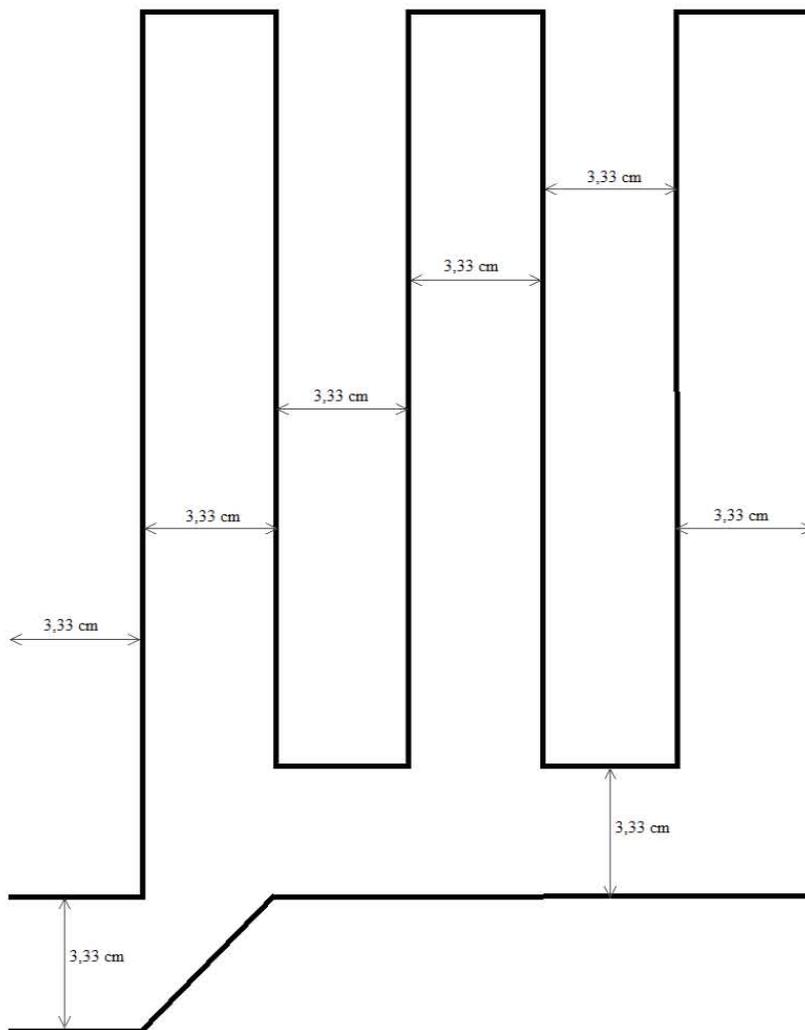


Figure IV.1 .Disposition réelle des résistances sur les deux plaques

Chapitre IV : traitement thermique du bois par conduction (Pyrolyse douce)

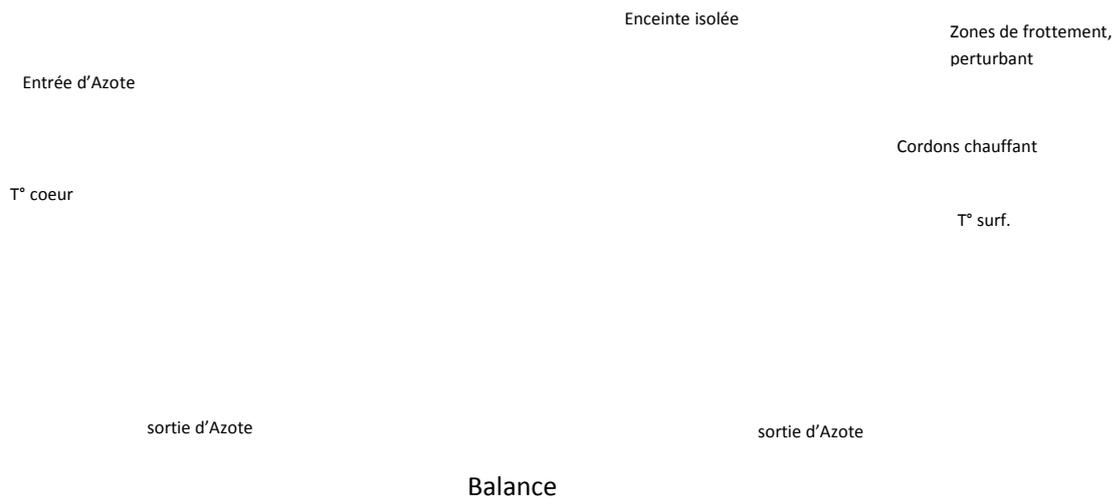


Figure IV.2. Dispositif expérimental

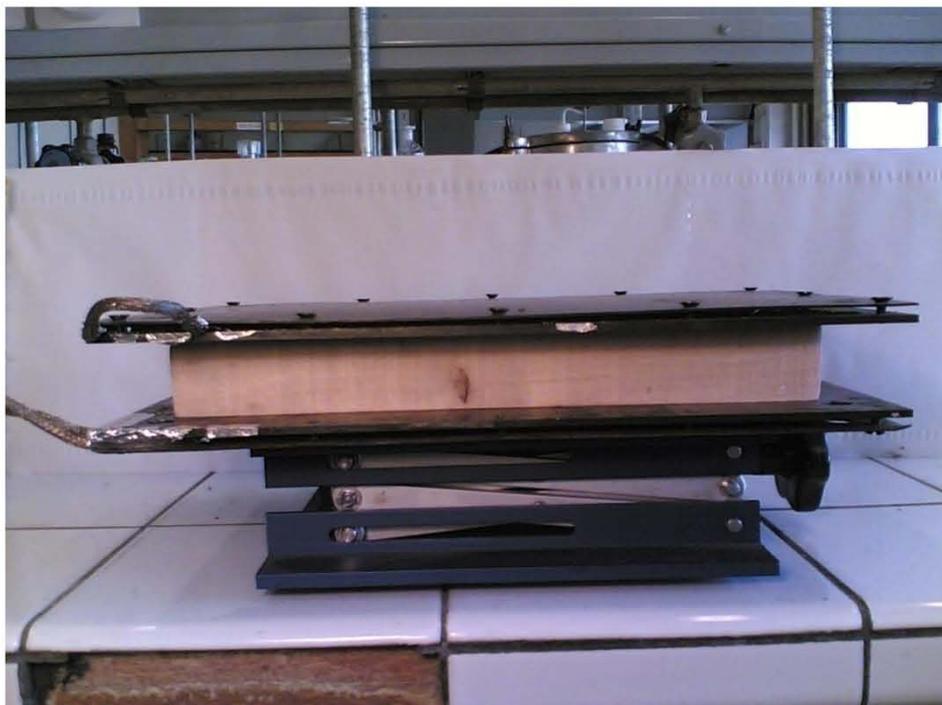


Figure IV.3 : Détail de l'ensemble plaques-planche

IV.3 Ecriture des bilans

La mise en équation du bilan de conservation de la chaleur dans une planche de bois sec, insérée entre deux surfaces chauffées à la même température, et dans une seule direction comprend trois termes :

- un terme d'accumulation de la chaleur
- un terme de transfert de la chaleur par conduction
- un terme source qui introduit l'enthalpie de la réaction chimique de thermodégradation du bois.

Ce bilan s'écrit de la façon suivante (équation IV.1) :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + H_p \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (\text{IV. 1})$$

ρ : la masse volumique du bois (kg m^{-3}),

C_p : la chaleur spécifique ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$),

λ : la conductivité thermique ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$),

H_p : l'enthalpie massique de la réaction (J Kg^{-1}),

T : la température (K).

IV.4 Etude des paramètres thermiques.

On s'est intéressé dans un premier temps dans la plage de traitement thermique du bois, dans laquelle l'enthalpie de la réaction de thermodégradation est négligeable. Seuls les termes d'accumulation et de transfert de chaleur par conduction de l'équation (IV.1) sont à prendre en compte.

Le bois est un matériau complexe, non homogène et anisotrope. Les valeurs et les variations des paramètres thermiques tels que la conductivité thermique λ et la chaleur

spécifique C_p sont étudiées pour du bois anhydre dans la plage de températures de 100°C à 240°C .

IV.4.1. Humidité du bois :

La mesure de l'humidité d'un bois est définie comme le rapport de la masse d'eau qu'il contient sur sa masse anhydre. Elle s'exprime par la relation suivante :

$$\text{Humidité}(\%) = \frac{\text{masse}_{\text{eau}}}{\text{masse}_{\text{anhydre}}} * 100$$

Au moment de l'abattage, le bois peut contenir plus d'eau que de matière-bois, parfois deux fois plus dans certains peupliers. L'humidité est alors supérieure à 100 %. Les vides cellulaires d'un bois vert sont remplis d'eau libre. Elle s'évacuera progressivement par évaporation, sans que le bois ne subisse de retrait ou de déformation : c'est la phase dite de "ressuyage".

Lorsque l'eau libre a entièrement disparu (point de saturation), il ne reste que l'eau liée qui imprègne les membranes des cellules. Le départ de cette eau liée entraîne des phénomènes de retrait et de déformation. Le point de saturation des fibres, en dessous duquel se manifeste le "jeu du bois", est de l'ordre de 30 % pour toutes les essences.

Dans notre cas le bois est anhydre, donc l'humidité est nulle ce qui implique qu'elle n'intervient pas dans notre modèle.

IV.4.2. Conductivité thermique :

La conductivité thermique est la grandeur introduite pour quantifier l'aptitude d'un corps à conduire de la chaleur. Elle représente la quantité de chaleur transférée par unité de surface et par unité de temps sous l'action d'une différence de température entre les deux extrémités d'un échantillon de ce corps, donc en présence d'un gradient de température.

La conductivité thermique du bois comparée à celle des matériaux de construction comme le béton et l'acier est plus faible. Suivant la loi de Fourier, le flux thermique ($\vec{J} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}}(T)$) à travers la surface d'échange du bois dépend de la conductivité thermique λ . Cette grandeur augmente avec la masse volumique (Stamm, 1964). La

conductivité thermique est anisotrope et varie avec les directions longitudinale, radiale et tangentielle. D'après la littérature (Ragland et al. 1991) la conductivité thermique dans la direction longitudinale est plus grande que dans la direction radiale et tangentielle. Stamm (1964) et Maclean (1941) estiment que les différences de la conductivité thermique entre les deux directions radiale et tangentielle sont négligeables.

Certains auteurs ont montré une relation linéaire entre la conductivité thermique et la température (Wenzel, 1970). Vérifiée expérimentalement par Koufopoulos (1991) la relation de λ ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) est la suivante

$$\lambda = 0,13 + 0,0003(T - 273) \quad (\text{IV. 2})$$

où T , est exprimée en K .

D'autres auteurs ont montré une relation linéaire entre la conductivité thermique et la masse volumique du matériau bois. Utilisée par l'équipe du Forest Product Laboratory (Wood Handbook, 1987) la relation λ ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) proposée par Bryden (2002) est la suivante :

$$\lambda = 0,2 \frac{\rho}{\rho_{eau}} + 0,0238 \quad (\text{IV. 3})$$

La relation (VI.3) a été vérifiée avec les données disponibles dans la littérature (Handbook of Wood). Dans ce but, on a tracé la conductivité thermique λ en fonction de la masse volumique ρ du bois anhydre (Figure IV.1). La relation entre les deux caractéristiques λ et ρ est donnée par l'équation :

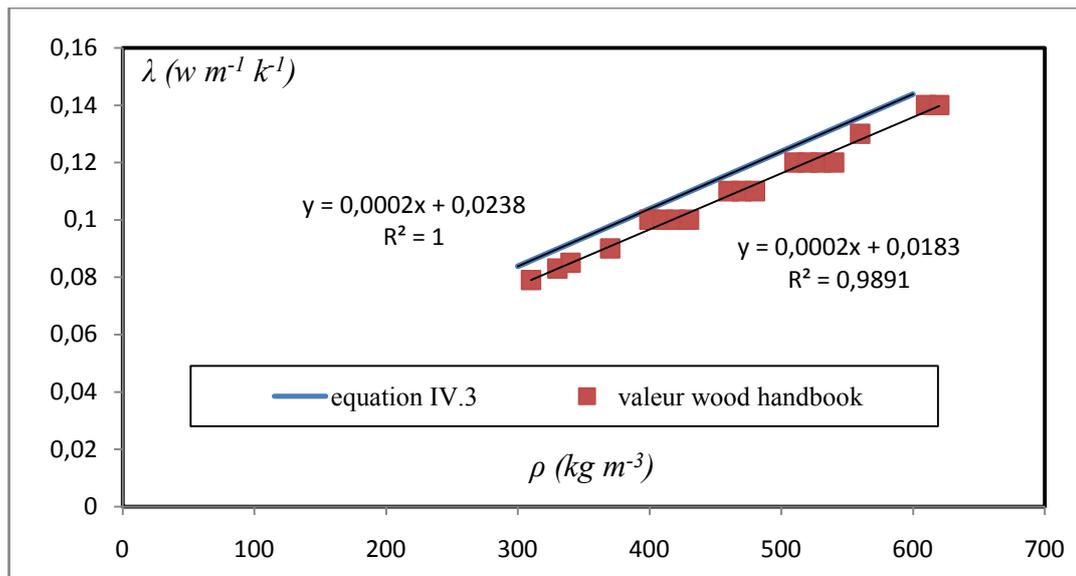


Figure IV.4 : Représentation de la conductivité en fonction de la masse volumique du bois anhydre.

$$\lambda = 0,0002\rho + 0,0183 \quad (IV.4)$$

En prenant pour la masse volumique de l'eau 1000 kg.m^{-3} , on peut constater que les deux relations (IV.3) et (IV.4) sont très proche, il y a une différence de $5,5 \cdot 10^{-3}$

IV.4.3. Chaleur Spécifique

La chaleur spécifique d'un matériau est la quantité de chaleur (énergie) nécessaire pour élever d'un degré centigrade (ou Kelvin) une masse d'1 kg de ce matériau. Elle s'exprime dans le système d'unités MKSA en Joules par Kg et par degré Celsius ($^{\circ}C$) (ou Kelvin, rappel: $0^{\circ}C = 273,15 \text{ K}$).

La chaleur spécifique C_p du bois dépend de plusieurs paramètres physiques. Ragland (1991), Dunlap (1912) et Salazar (1988) montrent que la chaleur spécifique dépend de la température et de l'humidité du bois, mais elle est indépendante de sa masse volumique anhydre.

La chaleur spécifique massique du bois anhydre $C_p (J.kg^{-1}.K^{-1})$ est une fonction linéaire qui d'après Koufopoulos et al. (1991), Ten wold (1988) et le département américain de l'agriculture (Forest product, 1974) peut être déterminée respectivement par les relations suivantes :

$$C_p = 1112 + 4,85(T - 273) \quad (IV.5)$$

$$Cp = 1031 + 3,867(T - 273) \quad (IV. 6)$$

$$Cp = 1125,3 + 4,514(T - 273) \quad (IV. 7)$$

Pour des températures de traitement inférieures à 200°C, l'enthalpie de la réaction de thermodégradation du bois est négligeable. L'équation de conservation de la chaleur (équ. IV.1) n'introduit que le terme d'accumulation et de transfert par conduction (équation IV.8) :

$$\rho Cp \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (IV. 8)$$

Afin de choisir les relations les plus appropriées pour la détermination de la conductivité thermique λ , ainsi que de la chaleur spécifique Cp , les résultats de la simulation numérique de l'équation (IV.8) avec les deux expressions de λ (équations. IV.2, IV.4) et les trois expressions de Cp (équations. IV.5-IV.7) sont comparés aux résultats expérimentaux obtenus au sein du laboratoire. Ces comparaisons sont présentées sur les Figures IV.2 à IV.4. La température mesurée et calculée au cœur de la planche est représentée en fonction du temps pour une montée en température de 8°C.min⁻¹. Les résultats de la simulation sont peu satisfaisants. Nous avons conclu, qu'une détermination indépendante de la conductivité thermique et de la chaleur spécifique par les relations de la littérature n'est pas précise. Par ailleurs, les relations précédentes citées pour la détermination de λ et Cp ne prennent pas en considération l'essence de bois utilisée. Enfin on peut constater que la variation de la chaleur spécifique a peu d'influence sur le profil de température. En revanche, celle de la conductivité thermique est plus sensible. Pour ces raisons, nous avons cherché à résoudre le bilan thermique (IV.8) en introduisant la diffusivité thermique a , telle que

$$a = \frac{\lambda}{\rho Cp} \quad (IV. 9)$$

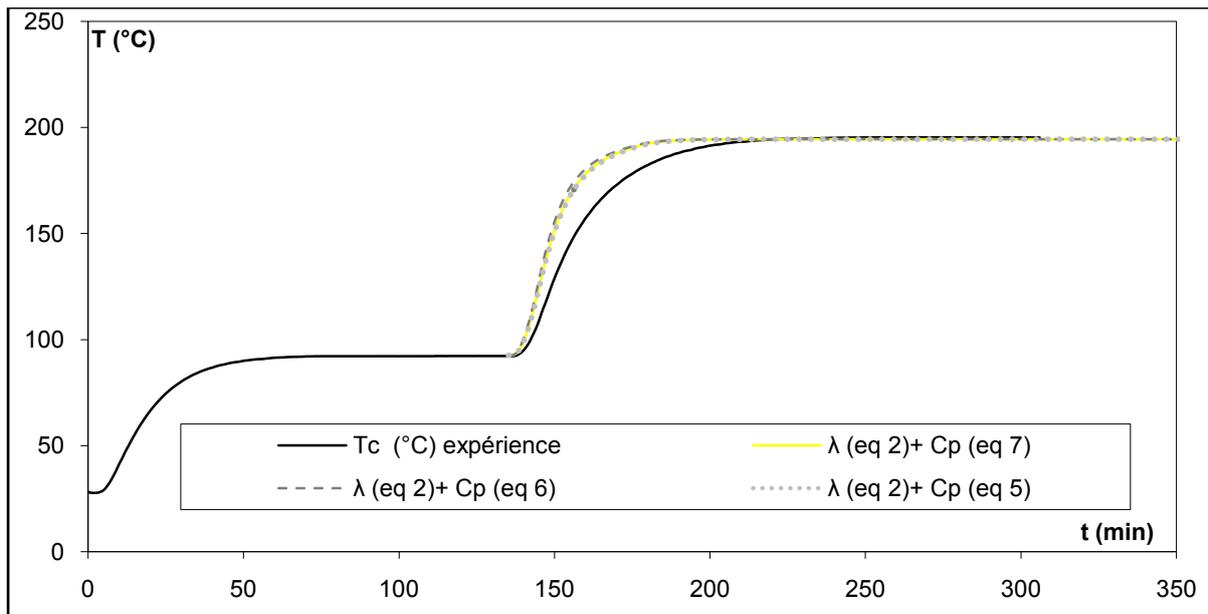


Figure IV. 5 : Résultats expérimentaux et numériques de la montée en température au cœur de la planche. λ déterminée par l'eq (IV.2)

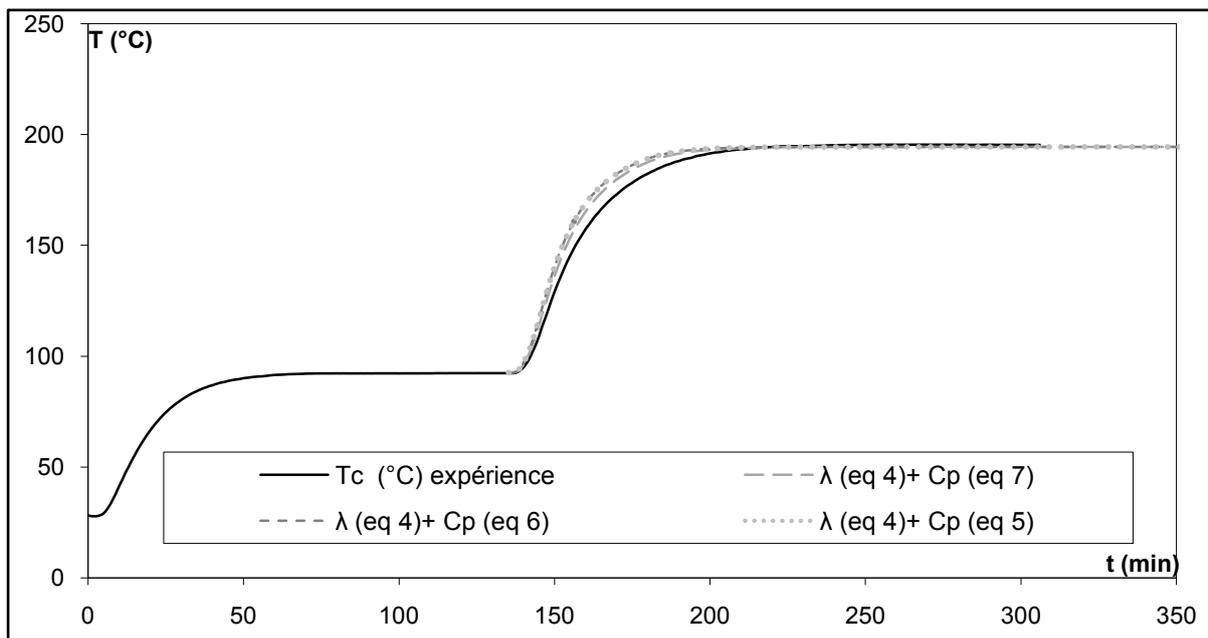


Figure IV.7 : Résultats expérimentaux et numériques de la montée en température au cœur de la planche. λ déterminée par l'eq.(IV.4).

Nous proposons donc de déterminer la diffusivité thermique $\alpha(T)$ numériquement. Nous examinerons le cas où la température de traitement est inférieure à 473,15 K. Dans ces

conditions l'enthalpie de la réaction de pyrolyse reste négligeable et le bilan d'énergie se limite à

$$a \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{dT}{dt} \quad (\text{IV. 10})$$

IV.4.4 Détermination de la diffusivité thermique α à partir des données expérimentales:

La diffusivité thermique est un paramètre qui dépend de la conductivité thermique et la chaleur spécifique. D'après la littérature ces deux grandeurs dépendent de la température et de la masse volumique. Pour la chaleur spécifique, la loi est du type :

$$Cp = eT + f \quad (\text{IV. 11})$$

Pour la conductivité thermique les lois sont du type :

$$\lambda = a_1T + b_1 \quad (\text{IV. 12})$$

ou

$$\lambda = a_2\rho + b_2 \quad (\text{IV. 13})$$

A partir des relations précédentes, on peut faire un développement limité de la diffusivité thermique en fonction de la température.

A partir des relations (IV.11) et (IV.12), on obtient :

$$a = \frac{\lambda}{\rho Cp} = \frac{a_1T + b_1}{\rho(eT + f)} \simeq \frac{a_1T + b_1}{\rho f} \left(1 - \frac{e}{f}T \right) \quad (\text{IV. 14})$$

$$a = \frac{\lambda}{\rho Cp} \simeq \frac{b_1}{\rho f} + \left(\frac{e}{\rho f} - \frac{ab_1}{\rho f^2} \right) T \quad (\text{IV. 15})$$

A partir des relations (IV.12) et (IV.13), on obtient

$$a = \frac{\lambda}{\rho Cp} = \frac{a_2\rho + b_2}{\rho(eT + f)} \simeq \frac{a_2\rho + b_2}{\rho f} \left(1 - \frac{e}{f}T \right) \quad (\text{IV. 16})$$

$$a = \frac{\lambda}{\rho Cp} \simeq \frac{a_2\rho + b_2}{\rho f} - \left(\frac{a_2\rho + b_2}{\rho f^2} \right) eT \quad (\text{IV. 17})$$

D'après les relations (IV.15) et (IV.17) dans un domaine limité de température, la diffusivité thermique peut être écrite en fonction de la température sous la forme:

$$a = cT + d \quad (\text{IV. 18})$$

Les valeurs des paramètres c et d de l'équation (IV.18) sont déterminées par minimisation de la fonction erreur (équation IV.18) en utilisant "L'algorithme génétique" entre les valeurs de la température expérimentale et celles obtenues par l'équation (IV.10) :

$$erreur = 2 \frac{|T_{exp} - T_{model}|}{T_{exp} + T_{model}} \quad (IV.19)$$

où T_{exp} : température mesurée, T_{model} : température obtenue numériquement. Les valeurs de c et d obtenues par optimisation sont égales respectivement à $-8 \cdot 10^{-11}$ et $1.48 \cdot 10^{-7}$. La relation donnant la diffusivité thermique en fonction de la température s'écrit donc :

$$a = -8 \cdot 10^{-11} T + 1,48 \cdot 10^{-7} \quad (IV.20)$$

Avec a en $m^2 \cdot s^{-1}$ et T en K

Ainsi la diffusivité thermique diminue avec l'augmentation de température. La relation étant établie pour des température comprises entre 373 et 473 K, On peut remarquer que la diffusivité thermique varie faiblement dans cette intervalle de température, elle est comprise entre $1,1 \cdot 10^{-7} m^2 \cdot s^{-1}$ et $1,18 \cdot 10^{-7} m^2 \cdot s^{-1}$.

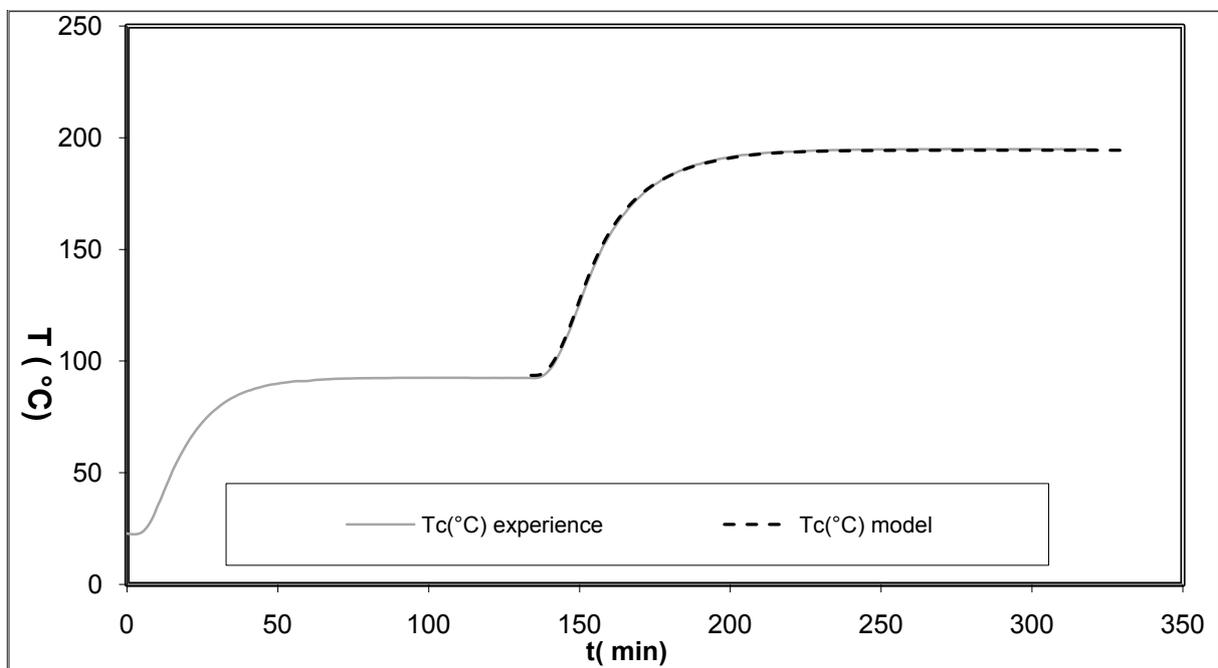


Figure IV 8: Comparaison entre les valeurs de la température expérimentale et celle calculée par l'équation (IV.10) avec la relation optimisée de la diffusivité thermique (IV.19).

La relation optimisée trouvée pour la diffusivité thermique permet de représenter de manière très satisfaisante la variation de température au centre de l'échantillon de bois. (Figure IV.4)

IV.4.3.1 Comparaison des valeurs de la diffusivité thermique estimée avec les valeurs de la littérature.

Les valeurs de la littérature sont déduites à partir des valeurs de la conductivité thermique donnée par Koufopoulos (1991), (équation IV.2) et par le Forest Product, 1974 (équation IV.4) et les valeurs de la chaleur spécifique données par les relations (IV.5 à IV.7). Il faut noter que le bois est considéré anhydre et on a pris deux échantillons de bois leur masse volumique est égale à 433 kg.m^{-3} - 785 kg m^{-3} . Les résultats obtenus pour la diffusivité thermique dans le domaine de températures comprises entre 373 K et 473 K sont reportés sur les figures IV.9 et IV.10 :

Les valeurs déduites des relations de la littérature confirment que la diffusivité thermique diminue en fonction de la température et la masse volumique anhydre du bois. Toutefois les variations restent faibles et en première approximation la diffusivité thermique peut être supposée indépendante de la température entre 373 et 473 K. De plus les valeurs optimisées sont sensiblement inférieures à celles déduites des relations de la littérature.

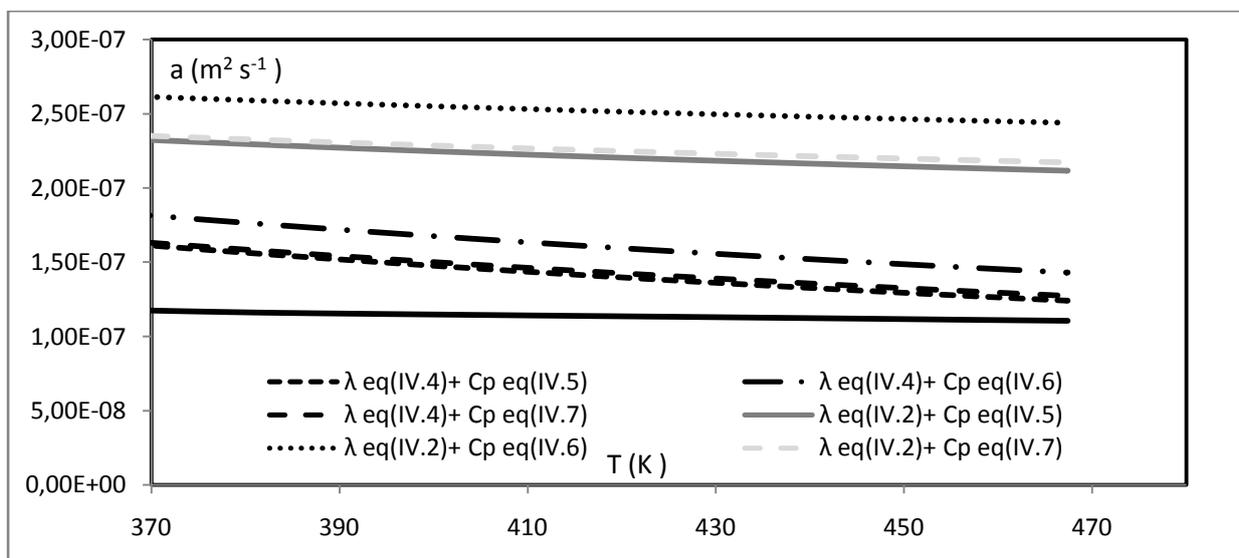


Figure IV.9 : Représentation de la variation de la diffusivité thermique pour les différentes méthodes de détermination. Pour une masse volumique 433 kg m^{-3}

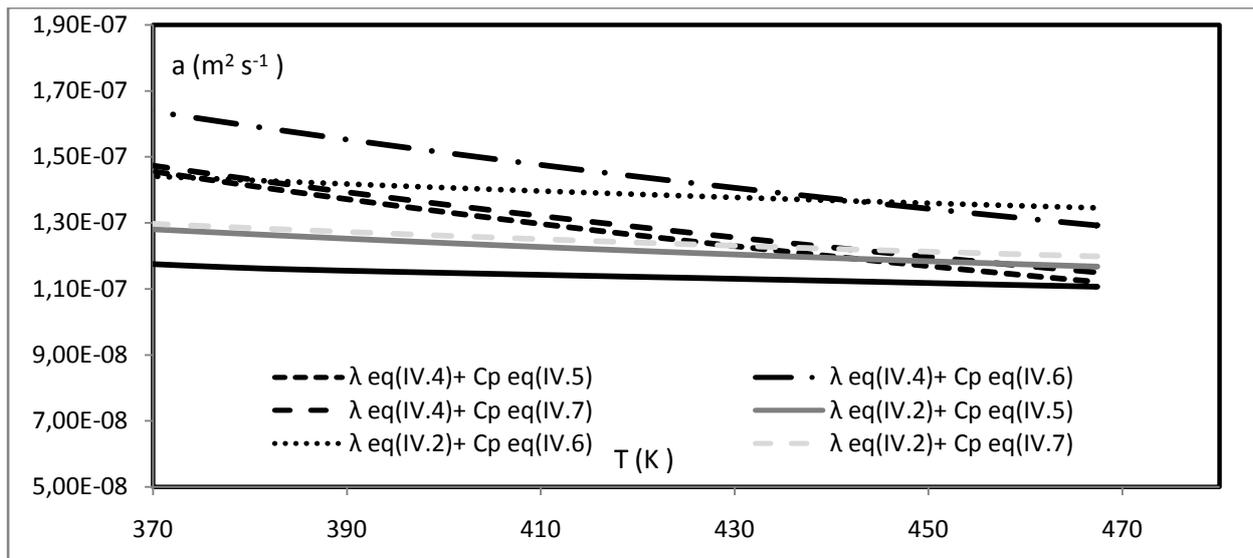


Figure IV.10: Représentation de la variation de la diffusivité thermique pour les différentes méthodes de détermination. Pour une masse volumique 785 kg m^{-3}

Conclusion :

À la suite de notre étude, la diffusivité thermique a obtenue numériquement à partir de nos résultats expérimentaux, étant inférieure aux valeurs déduites à partir des relations de la littérature, nous pouvons affirmer que ces dernières ne peuvent pas être utilisées pour simuler les variations de température lors d'un traitement thermique du bois entre 373 et 473 K. La mesure directe de la diffusivité thermique d'un échantillon représentatif du bois s'avère nécessaire.

IV.4 Modélisation du transfert thermique dans une planche du bois

Le bois est un matériau complexe qui présente une grande hétérogénéité. Le bois est constitué essentiellement par des substances de faible poids moléculaire et de trois types de polymères (cellulose, hémicellulose et lignine). Pendant la pyrolyse du bois, des réactions chimiques activées par la température provoquent des modifications chimiques dans la structure du bois. Les transformations sont accompagnées par un dégagement gazeux, la formation des nouveaux composés et une perte de masse. Il est nécessaire d'introduire dans l'équation de la conservation de la chaleur le terme source correspondant à la variation l'enthalpie résultant des réactions de thermodégradation afin d'être le plus proche de la réalité physique.

IV.4.1 Modélisation du traitement thermique.

La géométrie de l'échantillon est présentée sur la Figure IV.7. L'échantillon de bois de forme parallélépipède est placé entre deux plaques chauffantes en acier dans un four de traitement thermique. Le transfert de chaleur à la surface de l'échantillon s'effectue alors par conduction. Au fur et à mesure que la température à la surface $T_s(t)$ augmente, la chaleur se propage à l'intérieur du solide par conduction. Dans un premier temps, le bois sec, absorbe de la chaleur et sa température augmente. C'est la phase de chauffage. La réaction de pyrolyse commence tout d'abord à la surface puis progresse vers l'axe de l'échantillon.

Les dimensions géométriques des échantillons sont : $L = 20$ cm, $l = 10$ cm, $e = 3$ cm.

IV.4.1.2 Hypothèses

L'analyse et la modélisation de la pyrolyse du bois, sont effectuées avec les hypothèses simplificatrices suivantes :

- 1- L'échantillon de bois est supposé de forme parallélépipédique d'une épaisseur e , d'une longueur L et une largeur l .
- 2- Les transferts thermiques par convection qui peuvent avoir lieu entre les gaz et la matrice solide à l'intérieur du bois au cours de la pyrolyse sont négligeables.
- 3- Les dimensions et la forme de l'échantillon de bois restent pratiquement invariables et les fissures et les craquelures sont négligeables.
- 4- Les propriétés physico-thermiques (λ , ρ , Cp) du bois varient d'une façon linéaire en fonction de la température $T(y, t)$.
- 5- Les températures du gaz et du solide au sein de l'échantillon sont égales. Dans ces conditions, le transfert de chaleur au sein de l'échantillon se fait uniquement par conduction.

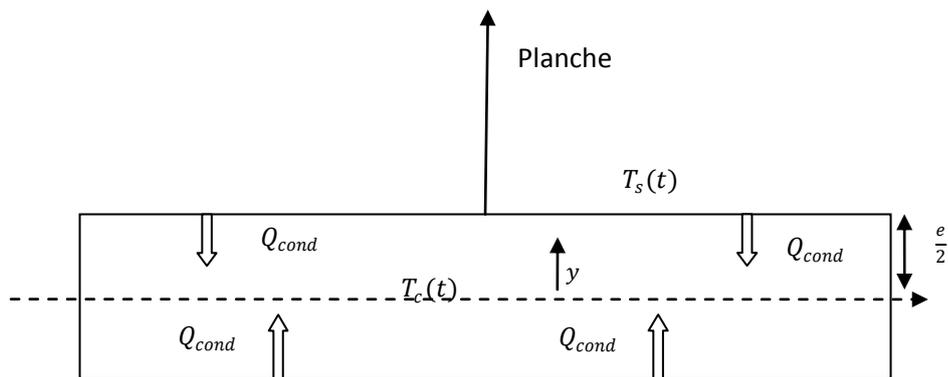


Figure IV. 11 : Représentation schématique de l'échantillon de bois.

Les expériences de pyrolyse par conduction sont réalisées sur cinq espèces de bois différents : Frêne, Hêtre, Peuplier, Pin et Sapin. Après 120 minutes de séchage des échantillons à la température 375 K, la masse anhydre et la masse volumique de chaque échantillon ont été déterminées. Les valeurs obtenues sont données dans le tableau IV.1.

Echantillons	Frêne	Hêtre	Peuplier	Pin	Sapin
Masse Anhydre (g)	289.19	217.46	153.59	151.36	155.64
Volume du bois anhydre (m ³)	368 10 ⁻⁶	343 10 ⁻⁶	354 10 ⁻⁶	348 10 ⁻⁶	348 10 ⁻⁶
Masse Volumique (Kg/m ³)	785	634	433	435	447

Tableau VI.1 : Valeurs de la masse anhydre, du volume et de la masse volumique des cinq espèces de bois

IV.4.3 Formulation mathématique de la pyrolyse.

Dans la littérature, Rajohnson et al., (1994) établissent un modèle mathématique à deux directions d'espace (radiale et tangentielle) basé sur la combinaison d'un modèle de séchage haute température (Basilico, 1984) et du modèle de pyrolyse proposé par Alves et Figueiredo(1989). Les auteurs négligent la diffusion de la vapeur d'eau dans la phase gazeuse et considèrent que la pression totale est égale à la vapeur d'eau uniquement, c'est-à-dire que la pression issue des gaz de réactions n'est pas prise en compte. Dans l'hypothèse d'un équilibre thermodynamique local entre la matrice solide et le mélange gazeux, la

conservation de l'énergie inclut les phénomènes de conduction thermique (loi de Fourier), de vaporisation de l'eau et de chaleur de réaction produite par les réactions exothermiques.

$$\underbrace{\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{capacité thermique moyenne du milieu}} = \underbrace{\lambda \nabla^2 T}_{\substack{\text{conduction thermique} \\ \text{loi de Fourier}}} - \underbrace{(H_v + H_s) \frac{k_{rg} k_g}{Vg} \nabla^2 T}_{\text{Vaporisation de l'eau}} + \underbrace{H_p \frac{d\rho_r}{dt}}_{\text{chaleur de réaction de la pyrolyse}} \quad (IV.21)$$

Dans notre cas, la pyrolyse à basse température est menée sur du bois anhydre. Le terme de vaporisation de l'eau ne sera donc pas présent dans le bilan. Le modèle se réduit à l'équation suivante :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + H_p \frac{\partial \rho_r}{\partial t} \quad (IV.22)$$

Si le traitement est limité à une température de l'ordre de 200°C, l'enthalpie de la réaction chimique est négligeable et l'équation du bilan énergétique devient :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (IV.23)$$

avec :

ρ : la masse volumique du bois anhydre (kg.m^{-3})

C_p : la chaleur spécifique du bois. ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)

λ : la conductivité thermique du bois ($\text{Wm}^{-1} \text{K}^{-1}$).

T : la température en (K).

H_p : la variation d'enthalpie massique de la réaction (Jkg^{-1}).

ρ_r : la masse volumique des composants chimiques réactifs (kg.m^{-3}).

La prise en compte de la transformation chimique nécessite la connaissance d'une cinétique de dégradation lors de la pyrolyse du bois. Dans le paragraphe suivant nous rappelons brièvement les principaux modèles de cinétique de pyrolyse du bois.

IV.4.4. Etat de l'art de la modélisation de la pyrolyse de bois.

Les modèles cinétiques disponibles dans la littérature visant à représenter la pyrolyse du bois prennent deux orientations différentes. La plupart des modèles présentent le traitement du bois à haute température, c'est-à-dire aboutissant à la carbonisation (températures supérieures à 300°C). Dans notre étude on s'intéresse seulement à l'état de

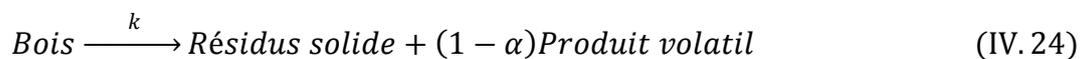
torréfaction c'est-à-dire à une pyrolyse à basse température. Dans la littérature, on peut distinguer trois approches pour la modélisation de la cinétique de pyrolyse :

- la première approche considère la biomasse comme un seul élément homogène ;
- la deuxième approche prend en compte chacun des composés du bois (cellulose, hémicellulose et lignine)
- dans la troisième approche on suppose que le bois est divisé en trois fractions (Grioui et al., 2006) dont les stœchiométries et les cinétiques de dégradation sont différentes.

IV.4.4.1. La première approche :

Cette approche consiste à assimiler le bois comme un seul composé pendant la pyrolyse. Dans ce contexte les auteurs ont donné plusieurs mécanismes réactionnels. Parmi ces mécanismes, notre attention s'est portée sur les trois cas, décrits ci-après :

- **le schéma réactionnel de Wagenaar et al. (1994), Di Blasi et al., (2001) qui considère l'existence d'une seule réaction irréversible :**



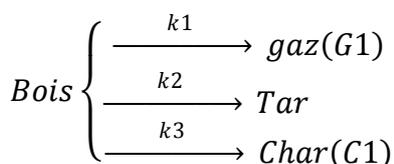
La cinétique de dégradation du bois s'exprime couramment en fonction de taux d'avancement α , donnée par l'équation différentielle :

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha) \quad (\text{IV. 25})$$

Avec

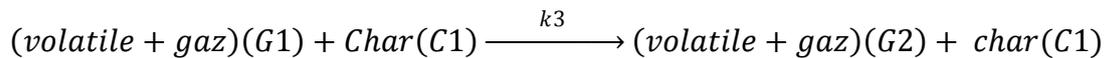
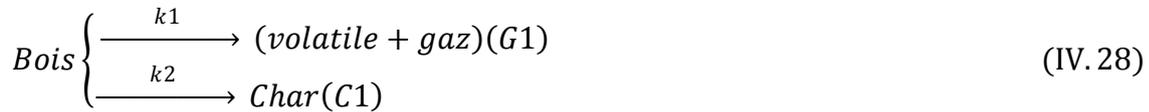
$$\alpha = 1 - \frac{m}{m_0} \quad (\text{IV. 26})$$

- **Le schéma de Chan (1983) introduit deux étapes réactionnelles à partir du bois initial :**





- **le schéma de Sadukhan (2008) propose un mécanisme décrit par trois réactions : la troisième réaction mettant en jeu les produits des deux réactions parallèles de transformation du bois initial.**



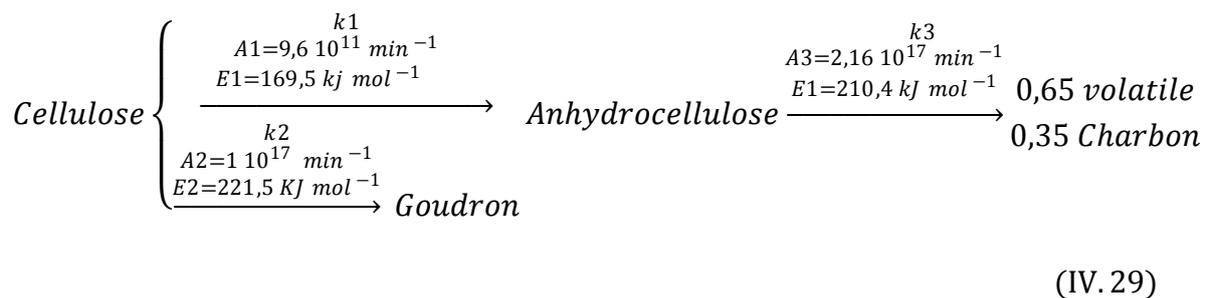
IV.4.4.2 La deuxième approche.

La deuxième approche considère les composés principaux du bois (cellulose, hémicellulose, lignine), en attribuant aux trois polymères des chemins réactionnels de dégradation spécifiques permettant d'aboutir à un modèle représentatif de la pyrolyse.

Certains de ces schémas réactionnels sont donnés ci-après :

IV.4.4.2.1 Les modèles cinétiques de la dégradation thermique de la cellulose.

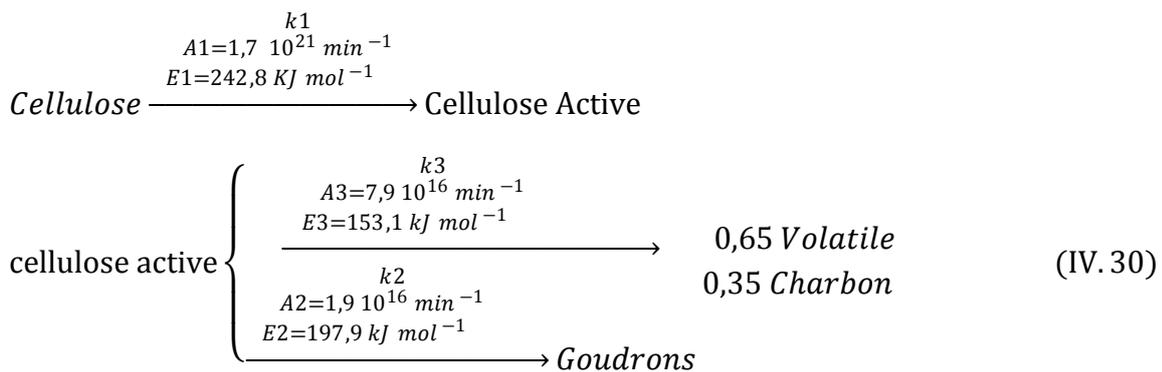
La cellulose est le principal composé de la plupart des matériaux ligno-cellulosiques. Cette molécule a une structure chimique relativement simple et elle est en fait un constituant idéal pour aborder la pyrolyse de la biomasse. C'est pour cette raison que Broido et Weinstein (1971) ont proposé le modèle suivant :



Shafizadeh et al. (1979) confirmeront les fondements décrits dans le modèle de Broido et Weinstein (1971) et proposeront un mécanisme légèrement modifié. La période d'initiation, caractérisée à basse température par une accélération de la perte de masse, se traduit par la présence d'une réaction initiale aboutissant à la formation d'une cellulose active. La vitesse de formation de cette cellulose est supposée proportionnelle à $1/t_i$ où t_i

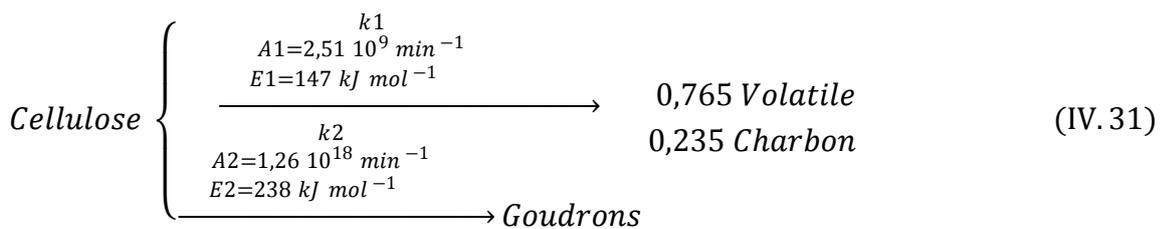
est le temps nécessaire pour atteindre la vitesse maximale de perte de masse de la cellulose. Cette cellulose active présenterait un degré de polymérisation environ 10 fois plus faible que la cellulose initiale. Différentes études menées sur ce glucide montrent effectivement qu'à partir de 200°C, des modifications intrinsèques peuvent intervenir, mais comme le souligne Di Blasi (1998), les appareils utilisés dans l'étude cinétique de la pyrolyse de la cellulose ne peuvent donner aucune information sur les changements moléculaires.

Le modèle réactionnel proposé par Shafizadeh et al (1979) est le suivant :

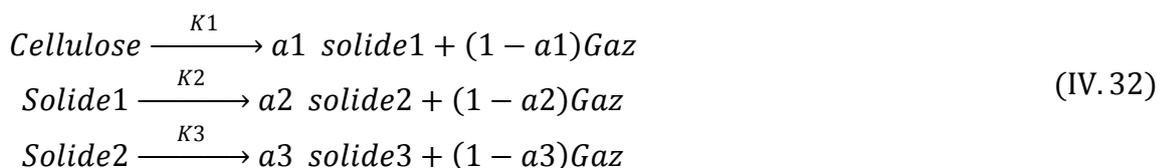


Il existe d'autres modèles cinétiques de dégradation de la cellulose comme le modèle réactionnel de Broido-Shafizadeh modifié par Varhegyi et al. (1994) et le modèle à trois réactions consécutives proposé par Alves et Figueiredo (1989)

Le modèle réactionnel de Broido-Shafizadeh modifié par Varhegyi et al (1994) est le suivant :

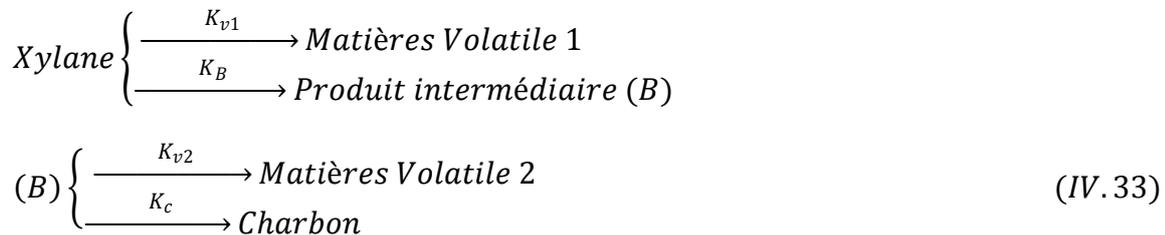


Le modèle à trois réactions consécutives proposé par Alves et Figueiredo (1989) est le suivant :



IV.4.4.2.2 Les modèles cinétiques de la dégradation thermique des hémicelluloses.

Le modèle réactionnel de la dégradation du xylane proposé par (Di Blasi et al,1997) est le suivant :



Le modèle réactionnel de la dégradation du xylane proposé par Sefain et al. (1985) est le suivant :



VI.4.4.2.3 Les modèles cinétiques de la dégradation thermique de la lignine.

L'association des lignines avec d'autres composés dans les parois cellulaires, rend leur séparation difficile et compliquée. Les lignines sont dans la plupart du temps dégradées ou modifiées.

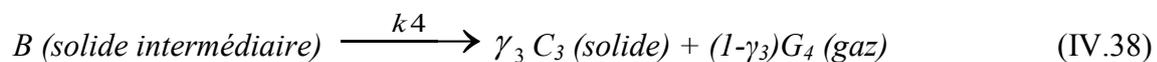
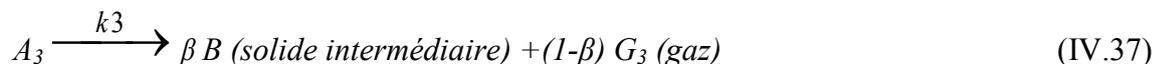
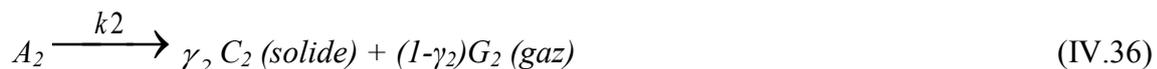
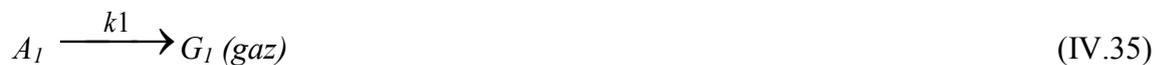
Les lignines extractibles sont souvent différentes des lignines protolignines. Leurs cinétiques ne sont certainement pas tout à fait celles qui se déroulent dans le matériau. Les grandeurs cinétiques de la littérature sont déterminées à partir de lignines isolées (lignine de Klason, lignine dioxane, ...) ou à partir du bois. Dans les deux cas, le mécanisme de dégradation de la lignine est souvent décrit par une réaction unique irréversible d'ordre 1.

Pour décrire la pyrolyse à partir des trois composés (cellulose, hémicellulose et lignine) un mécanisme est proposé pour chaque composé. Ce concept n'est pas bien représentatif car dans la réalité les trois composés réagissent simultanément (Bilbao *et al.* 1989). Dans un premier temps c'est la thermodégradation des hémicelluloses qui domine, la dégradation de la cellulose s'enclenche par la suite, suivie de celle de la lignine. Néanmoins, dans certaines plages de température les réactions sont simultanées. Des réactions entre les composés peuvent également se produire. Cette complexité a amené à la proposition d'une troisième approche décrite ci-après.

IV.4.4.3. La troisième approche :

Grioui et al. (2006) proposent un modèle cinétique comportant quatre étapes stœchiométriques. Plus précisément, le bois initial est réparti en trois fractions A_1 , A_2 et A_3 avec les fractions massiques respectives α_1 , α_2 et α_3 . Les trois fractions ont des stœchiométries réactionnelles et des lois cinétiques spécifiques. A basse température

($T \leq 250^\circ\text{C}$), la dégradation de la fraction A_1 est prédominante et le produit de la dégradation est gazeux (G_1). A haute température ($T > 320^\circ\text{C}$), la dégradation des fractions A_1 et A_2 est complète et pour A_3 , la transformation se déroule en deux étapes réactionnelles le produit condensable de la première étape (B) étant converti en charbon (C_3) et gaz (G_4). Dans la deuxième étape. Les stœchiométries des étapes réactionnelles sont respectivement :



IV.4.5 Le choix d'un modèle cinétique de pyrolyse pour la présente étude :

La faible connaissance des mécanismes de thermodégradation des composés du bois (cellulose, hémicellulose et lignine) a guidé notre choix vers les schémas cinétiques proposés par la première et la troisième approche.

C'est la troisième approche qui a été retenue pour cette étude. Cette approche a été appliquée pour décrire la carbonisation de petites particules. La présente étude est consacrée à la pyrolyse basse température ($T < 250^\circ\text{C}$). La chaleur est transférée par conduction sur une planche du bois. Dans cette plage de température, seules les étapes (IV.35) et (IV.36) ont lieu. Le modèle initialement appliqué pour le bois d'olivier (Grioui et al, 2006) sera testé pour différents types de bois (hêtre, peuplier, sapin, frêne, pin).

IV.4.5.1. Le modèle cinétique :

Pour des températures de traitement inférieures à 250°C, seules les deux fractions A_1 et A_2 se dégradent (équation. IV.35 et IV.36). On suppose que les cinétiques de dégradation des deux étapes réactionnelles sont d'ordre cinétique 1 par rapport aux deux fractions A_1 et A_2 . Dans ces conditions les vitesses des réactions par unité de volume de solide sont respectivement :

pour l'étape (IV.35): $V_1 = k_1 \rho_{A1}$ (IV.39)

pour l'étape (IV.36): $V_2 = k_2 \rho_{A2}$ (IV.40)

ρ_{A1} et ρ_{A2} représentent les masses volumiques des fractions A_1 et A_2

-Les constantes de vitesse k_1 et k_2 dépendent de la température selon des lois de type Arrhenius, soit :

$$k_1 = k_{01} e^{-\frac{E_{a1}}{RT}} \quad (IV.41)$$

$$k_2 = k_{02} e^{-\frac{E_{a2}}{RT}} \quad (IV.42)$$

avec :

k_{01} : le facteur pré-exponentiel pour k_1

k_{02} : le facteur pré-exponentiel pour k_2

E_{a1} : l'énergie d'activation pour k_1

E_{a2} : l'énergie d'activation pour k_2

IV.4.5.2 Formulation mathématique du modèle cinétique :

Pour les constituants solides A_1, A_2, C_2 les bilans de matière sont respectivement :

$$\frac{dm_{A1}}{dt} = -k_1 m_{A1} \quad (IV.43)$$

$$\frac{dm_{A2}}{dt} = -k_2 m_{A2} \quad (IV.44)$$

$$\frac{dm_{C2}}{dt} = k_2 \gamma_2 m_{A2} \quad (\text{IV. 45})$$

A l'instant initial t_0 :

$$\begin{aligned} m_{\text{bois}} &= m_0 \\ m_{A1} &= \alpha_1 m_0 \\ m_{A2} &= \alpha_2 m_0 \\ m_{A3} &= (1 - \alpha_1 - \alpha_2) m_0 \end{aligned} \quad (\text{IV. 46})$$

Ici, m_{A1} , m_{A2} , et m_{A3} sont respectivement les masses des trois fractions A_1 , A_2 et A_3 .

Les expériences que nous voulons représenter se déroulent en deux étapes. Dans la première étape la température à la surface de l'échantillon varie entre 102°C et 200°C. Dans cette étape nous supposons que seule la réaction de thermodégradation de la fraction A_1 a lieu. Dans la deuxième étape pour des températures comprises entre 200 et 240°C, les dégradations des fractions A_1 et A_2 ont lieu simultanément. Dans ces conditions opératoires la fraction A_3 n'est pas dégradée.

Soit t_m le temps nécessaire pour que la température de la surface T_s atteigne 200°C

Soit t_f le temps final nécessaire pour que la température de la surface T_s atteigne 240°C

Les bilans de matière sont respectivement :

- pour le première étape : $0 < t < t_m$ tel que $102^\circ\text{C} < T_s < 200^\circ\text{C}$

$$\begin{aligned} \frac{dm_{A1}}{dt} &= -k_1 m_{A1} \\ m_{A2} &= \alpha_2 m_0 \\ m_{C2} &= 0 \\ m_{A3} &= (1 - \alpha_1 - \alpha_2) m_0 \end{aligned} \quad (\text{IV. 47})$$

La masse totale m_t est telle que :

$$m_t = m_{A1} + \alpha_2 m_0 + (1 - \alpha_1 - \alpha_2) m_0 \quad (\text{IV. 48})$$

d'ou

$$m_t = m_{A1} + (1 - \alpha_1)m_0 \quad (\text{IV. 49})$$

- pour la deuxième étape : $t_m < t < t_f$ tel que, $200^\circ\text{C} < T_s < 240^\circ\text{C}$

$$\frac{dm_{A1}}{dt} = -k_1 m_{A1} \quad (\text{IV. 50})$$

$$\frac{dm_{A2}}{dt} = -k_2 m_{A2} \quad (\text{IV. 51})$$

$$\frac{dm_{C2}}{dt} = k_2 \gamma_2 m_{A2} \quad (\text{IV. 52})$$

$$m_{A3} = (1 - \alpha_1 - \alpha_2)m_0 \quad (\text{IV. 53})$$

La masse totale m_t est telle que :

$$m_t = m_{A1} + m_{A2} + m_{C2} + (1 - \alpha_1 - \alpha_2)m_0 \quad (\text{IV. 54})$$

IV. 5 Modélisation complète du traitement thermique en deux étapes.

IV.5.1 Equations du modèle

Aux équations traduisant les bilans de matière, il faut adjoindre celle relative au bilan thermique.

N'ayant pas observé d'effet thermique du à la transformation lors de la première étape, nous admettons que l'étape de dégradation de la fraction A_1 est athermique. Par suite les équations à résoudre dans la première étape sont :

$$\frac{d\rho_{A1}(t)}{dt} = -k_1(t)\rho_{A1}(t) \quad (\text{IV. 55})$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (\text{IV. 56})$$

$$m_t = \rho_{A1} V (1 - \alpha_1) m_0 \quad (\text{IV. 57})$$

V est le volume de la planche supposé constant lors des réactions de dégradation.

La deuxième étape faisant apparaître dans certains cas un effet thermique exothermique, nous supposons que la dégradation de la fraction A_2 est exothermique avec la variation d'enthalpie ΔH_2 négative. Par suite les équations à résoudre sont :

$$\frac{d\rho_{A1}}{dt} = -k_1\rho_{A1} \quad (IV. 58)$$

$$\frac{d\rho_{A2}}{dt} = -k_2\rho_{A2} \quad (IV. 59)$$

$$\frac{d\rho_{C2}}{dt} = k_2\gamma_2\rho_{A2} \quad (IV. 60)$$

$$m_{A3} = (1 - \alpha_1 - \alpha_2)m_0 \quad (IV. 61)$$

$$a \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\Delta H_2}{\rho C_p} \frac{\partial \rho_{A2}}{\partial t} \quad (IV. 62)$$

$$m_t = (\rho_{A1} + \rho_{A2} + \rho_{C2})V + (1 - \alpha_1 - \alpha_2)m_0 \quad (IV. 63)$$

Les équations de bilans sont à résoudre avec les conditions suivantes :

- *Condition aux limites*

$$T\left(\frac{e}{2}, t\right) = T_{plaque} \quad \text{tel que } t_0 \leq t \leq t_f \quad (IV. 64)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(0, t) = 0 \quad \text{tel que } t_0 \leq t \leq t_f \quad (IV. 65)$$

- *Condition initiales*

A l'instant $t=t_0$

$$T(y, t_0) = T_{plaque} \quad \text{tel que } 0 \leq y \leq \frac{e}{2} \quad (IV. 66)$$

$$m_t = m_0 \quad (IV. 67)$$

$$\rho_{A1} = \alpha_1\rho_0 \quad (IV. 68)$$

$$\rho_{A2} = \alpha_2\rho_0 \quad (IV. 69)$$

$$\rho_{A3} = (1 - \alpha_1 - \alpha_2) \rho_0 \quad (IV. 70)$$

$$\rho_{c2} = 0 \quad (IV.71)$$

Avec t_0 le temps initiale de traitement, t_f le temps finale de traitement.

IV.5.1.1 Les paramètres du modèle :

Les paramètres du modèle à déterminer sont :

- les paramètres cinétiques : les facteurs pré-exponentiels k_{01} , k_{02} , et les énergies d'activations E_{a1} , E_{a2} .
- les paramètres caractérisant la stœchiométrie des réactions de pyrolyse : la fraction massique γ_2 et les fractions α_1 et α_2 *relative à la description initiale du bois*.
- La variation d'enthalpie : ΔH_2 .

IV.5.1.2 Détermination des paramètres.

A partir des mesures de température au sein de l'échantillon de bois et de l'évolution de sa masse totale nous devons estimer les paramètres du modèle permettant de représenter au mieux les résultats expérimentaux.

Dans les études de Grioui et al. (2006) les paramètres cinétiques ont été obtenus à partir des mesures de pertes de masse en thermobalance et en fonctionnement isotherme. Par la suite, les auteurs ont pu représenter des expériences de carbonisation non isotherme en optimisant uniquement les variations d'enthalpie supposées identiques pour les quatre étapes réactionnelles.

Dans notre cas, la pyrolyse est effectuée en deux étapes non isothermes avec un échantillon de bois dont l'épaisseur est de 3 cm. Dans ces conditions les équations de bilans de matière et d'énergie doivent être résolues simultanément dans les deux étapes afin d'estimer l'ensemble des paramètres au nombre de 8 à savoir : α_1 , α_2 , k_{01} , k_{02} , E_{a1} , E_{a2} , γ_2 , ΔH_2 .

L'ensemble des paramètres va être obtenu par minimisation d'une fonction d'erreur entre les valeurs expérimentales et les valeurs du modèle. Le nombre élevé de paramètres rend difficile l'optimisation. Il est donc nécessaire de trouver une bonne méthode permettant d'obtenir une optimisation efficace. L'utilisation des méthodes de type Gradient

conjugué, Lagrange...etc.. Ces méthodes sont appelées « méthodes déterministes », sont plus généralement efficace quand l'évolution de la fonction est très rapide. Dans notre cas la complexité du modèle, la dépendance entre les paramètres, l'existence de plusieurs optimums locaux, nous impose l'utilisation d'autres méthodes appelées « méthodes non déterministes ». Dans ces méthodes, on peut citer les méthodes de Monté –Carlo, l'algorithme de révolution ou génétique, l'algorithme hybride, l'algorithme de recuit simulé, etc. Ces méthodes consistent à un tirage aléatoire de nombres. Elles permettent d'explorer l'espace de recherche plus efficacement.

Nous disposons d'un grand choix de méthodes. Dans notre cas c'est la méthode génétique ou de la révolution qui a été retenue. (voir chapitre II)

IV.5.1.3 Détermination des paramètres à l'aide de l'Algorithme génétique

L'algorithme génétique est programmé dans le langage Fortran 90, ainsi la discrétisation des équations de bilans. La fonction d'erreur à minimiser tient compte à la fois des mesures thermiques et de masse, soit :

$$erreur_{globale} = \left(\frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} \frac{2|T_{exp}(i) - T_{model}(i)|}{(T_{exp}(i) + T_{model}(i))} + \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} \frac{2|Pm_{exp}(j) - Pm_{model}(j)|}{(Pm_{exp}(j) + Pm_{model}(j))} \right) \quad (IV.27)$$

où

n_1 : est le nombre de points expérimentaux de température qui seront comparés aux température calculées.

n_2 : le nombre de points expérimentaux de perte de masse qui seront comparés aux pertes de masse calculées.

$Pm_{exp}(j)$: perte de masse expérimentale à l'instant t_j .

$Pm_{model}(j)_1$: perte de masse du modèle à l'instant t_j

$T_{exp}(i)$: perte de masse expérimentale à l'instant t_i .

$T_{model}(i)_1$: perte de masse du modèle à l'instant t_i

$erreur_{globale}$: erreur globale.

Dans la première étape, les paramètres à déterminer sont la fraction α_1 et la constante de la vitesse de la réaction k_1 qui est liée au facteur pré-exponentiel k_{01} , et à l'énergie d'activation E_{A1} . Dans la première étape ces trois paramètres seront déterminés à l'aide de l'algorithme génétique.

Dans la deuxième étape, les paramètres à déterminer sont la fraction α_2 , la constante de vitesse k_2 , la fraction γ_2 et la variation d'enthalpie ΔH_2 . Cinq paramètres doivent être déterminés à savoir, la fraction α_2 ; la constante de vitesse k_2 qui dépend du facteur de pré-exponentiel k_{02} , et de l'énergie d'activation E_{A2} , la fraction γ_2 de conversion de A_2 en solide C_2 et l'enthalpie de la réaction ΔH_2 . Ces paramètres seront déterminés par l'algorithme génétique.

IV.5.1.4 Résolution numérique

Le modèle est basé sur le couplage du transfert de chaleur à la surface et à l'intérieur du morceau de bois avec la cinétique chimique de la pyrolyse. Ce couplage entre ces deux phénomènes nous permet de bien décrire le phénomène de la pyrolyse.

Le bilan thermique se présente sous la forme d'une équation différentielle non linéaire :

$$a \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial T}{\partial t} + \beta \quad (\text{IV.73})$$

Dans la Première étape :

$$\beta = 0 \quad (\text{IV.74})$$

et le bilan de matière se limite à :

$$\frac{d\rho_{A1}}{dt} = -k_1 \rho_{A1} \quad (\text{IV.75})$$

Dans la deuxième étape :

$$\beta = -\frac{\Delta H_2}{\rho C_p} k_2 \rho_{A2} \quad (\text{IV.76})$$

et les bilans de matière à résoudre sont :

$$\frac{d\rho_{A1}}{dt} = -k_1 \rho_{A1} \quad (\text{IV.77})$$

$$\frac{d\rho_{A2}}{dt} = -k_2 \rho_{A2} \quad (\text{IV.78})$$

$$\frac{d\rho_{C2}}{dt} = k_2 \gamma_2 \rho_{A2} \quad (\text{IV.79})$$

Condition aux limites

$$T\left(\frac{e}{2}, t\right) = T_{plaque} \quad \forall t \in [t_0, t_f] \quad (\text{IV.80})$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(0, t) = 0 \quad \forall t \in [t_0, t_f] \quad (\text{IV.81})$$

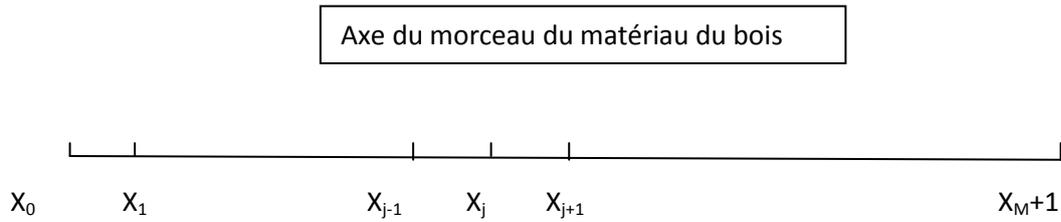
Conditions initiales

A l'instant $t=t_0$

$$m_t = m_0 \quad (\text{IV.82})$$

$$\rho = \rho_0 \quad (\text{IV.83})$$

La résolution de l'équation du bilan thermique est effectuée par la méthode du volume fini. Cette méthode consiste à définir un réseau dont les mailles correspondent à des valeurs finies de la variable espace (y) et de la variable temps (t). Le maillage d'espace utilisé pour la résolution numérique est défini avec un pas Δy constant entre les points à l'extérieur du maillage $y = 0$ et $y = \frac{e}{2}$. Pour la résolution selon le temps on a utilisé une méthode itérative.



Avec : $X_{j+1} = X_j + \Delta y$ et $0 \leq j \leq M$. Le point en $j = M+1$ est un point fictif pour le système.

Avec : $\Delta y = \frac{e}{2(M+1)}$

e: épaisseur de la planche.

La discrétisation des équations relatives aux conditions aux limites est la suivante :

- Au centre de la planche, c'est-à-dire en $y = 0$ correspondant à $j = 0$ et en tenant compte de la symétrie axiale, la relation (IV.81) s'écrit sous la forme discrétisée :

$$\frac{T_1 - T_{-1}}{\Delta y} = 0 \quad (IV.84)$$

d'où

$$T_1 = T_{-1} \quad (IV.85)$$

- A la surface du morceau de bois à $y = \frac{e}{2}$ correspondant à $j = M$ l'équation (IV.80)

reste la même :

$$T\left(\frac{e}{2}, t\right) = T_{plaque} \quad \forall t \in [t_0, t_f] \quad (IV.86)$$

IV.5.1.3.1 Discrétisation des équations.

L'équation (IV.73), après une discrétisation finie des dérivées partielles de la température dans l'espace et dans le temps, s'écrit alors :

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} = \alpha_j^{n+1} \left(\frac{T_{j+1}^{n+1} - 2T_j^{n+1} + T_{j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) + \beta_j^{n+1} \quad (IV.87)$$

Première étape

De $j=1$ jusqu'au $j=M+1$

$$\beta_j = 0 \quad (IV.88)$$

$$\frac{d\rho_{A1j}(t)}{dt} = -k_{1j}(t)\rho_{A1j}(t) \quad (\text{IV. 89})$$

$$\rho_j(t) = \rho_{A1j}(t) + (1 - \alpha_1)\rho_0 \quad (\text{IV. 90})$$

Deuxième étape

De $j= 1$ jusqu'au $j=M+ 1$

$$\beta_j = -\frac{\Delta H_2}{\rho_j C_{pj}} k_{2j} \rho_{A2j} \quad (\text{IV. 91})$$

et les bilans de matière à résoudre sont :

$$\frac{d\rho_{A1j}(t)}{dt} = -k_{1j}(t)\rho_{A1j}(t) \quad (\text{IV. 92})$$

$$\frac{d\rho_{A2j}(t)}{dt} = -k_{2j}(t)\rho_{A2j}(t) \quad (\text{IV. 93})$$

$$\frac{d\rho_{C2j}(t)}{dt} = k_{2j}\gamma_2\rho_{A2j}(t) \quad (\text{IV. 94})$$

$$\rho_j(t) = \rho_{A1j}(t) + \rho_{A2j}(t) + \rho_{C2j}(t) + (1 - \alpha_1 - \alpha_2)\rho_0 \quad (\text{IV. 95})$$

L'équation de conservation de la chaleur à l'axe ($y = 0 \Leftrightarrow j = 0$) devient alors :

$$\frac{T_0^{n+1} - T_0^n}{\Delta t} = \alpha_0^{n+1} \left(\frac{2T_1^{n+1} - 2T_0^{n+1}}{\Delta y^2} \right) + \beta_0^{n+1} \quad (\text{IV. 96})$$

Et à la paroi $y = \frac{e}{2}$

$$\frac{T_M^{n+1} - T_M^n}{\Delta t} = \alpha_M^{n+1} \left(\frac{T_{M+1}^{n+1} - 2T_M^{n+1} + T_{M-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) + \beta_M^{n+1} \quad (\text{IV. 97})$$

IV.5.1.3.2 Conclusion

Dans l'axe de l'échantillon de bois c'est-à-dire $y = 0$, l'équation devient :

$$\left(1 + \frac{2\alpha_0^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2} \right) T_0^{n+1} - \frac{2\alpha_0^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2} T_1^{n+1} = T_0^n + \Delta t\beta_0^{n+1} \quad (\text{IV. 98})$$

et à l'intérieur du morceau du bois avec $1 \leq j \leq M - 1$

$$-\frac{\alpha_j^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2} T_{j-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\alpha_j^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2} \right) T_j^{n+1} - \frac{\alpha_j^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2} T_{j+1}^{n+1} = T_j^n + \Delta t\beta_j^{n+1} \quad (\text{IV. 99})$$

Enfin à la paroi $y = \frac{e}{2} \Leftrightarrow j = M$,

$$-\frac{\alpha_M^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2}T_{M-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\alpha_M^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2}\right)T_M^{n+1} - \frac{\alpha_M^{n+1}\Delta t}{\Delta y^2}T_{M+1}^{n+1} = T_M^n + \Delta t\beta_M^{n+1} \quad (IV.100)$$

Sous forme matricielle, on obtient alors :

$$M^{n+1}T^{n+1} = T^n + \Delta t \beta^{n+1} \quad (IV.101)$$

avec: X^n C'est la matrice X à l'instant $n\Delta t$.

$[M]$ est la matrice carrée de taille $M + 1$

$$\begin{bmatrix} 1 + \frac{2\alpha_0\Delta t}{\Delta y^2} & -\frac{2\alpha_0\Delta t}{\Delta y^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\alpha_1\Delta t}{\Delta y^2} & 1 + \frac{2\alpha_1\Delta t}{\Delta y^2} & -\frac{\alpha_1\Delta t}{\Delta y^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\alpha_2\Delta t}{\Delta y^2} & 1 + \frac{2\alpha_2\Delta t}{\Delta y^2} & -\frac{\alpha_2\Delta t}{\Delta y^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\alpha_3\Delta t}{\Delta y^2} & 1 + \frac{2\alpha_3\Delta t}{\Delta y^2} & -\frac{\alpha_3\Delta t}{\Delta y^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \circ & \circ & \circ & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \circ & \circ & \circ & \circ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \circ & \circ & \circ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\alpha_{M-1}\Delta t}{\Delta y^2} & 1 + \frac{2\alpha_{M-1}\Delta t}{\Delta y^2} & -\frac{\alpha_{M-1}\Delta t}{\Delta y^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\alpha_M\Delta t}{\Delta y^2} & 1 + \frac{2\alpha_M\Delta t}{\Delta y^2} & -\frac{\alpha_M\Delta t}{\Delta y^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

En posant :

$$A = M^{n+1} , \quad B = T^n + \Delta t \beta^{n+1} \quad X = T^{n+1}$$

L'équation matricielle devient :

$$AX = B \quad (IV.102)$$

On résout l'équation (IV.102) à l'aide de l'algorithme de Thomas

$$X = A^{-1}B \quad (IV.103)$$

Les masses volumiques de chaque constituant A_1, A_2, C_2 sont calculées par les relations :

$$\rho = \frac{1}{M + 1} \sum_{i=1}^{M+1} \rho_i \quad (IV.104)$$

IV.5.1.3.3 Résultats et discussion :

En opérant comme nous l'avons précédemment indiqué, nous avons pour les 5 essences de bois étudiées estimé à partir des courbes expérimentales les valeurs des 8 paramètres. Les valeurs obtenues sont résumées dans le tableau IV.2

	α_1 (g/g)	α_2 (g/g)	K_{01} (S^{-1})	Ea_1 (KJ/mol)	K_{02} (S^{-1})	Ea_2 (KJ/mol)	γ_2 (g/g)	$-\Delta H_2$ (J/Kg)	$K1$ à $200^\circ C$ (S^{-1})	$K2$ à $200^\circ C$ (S^{-1})
Frêne	0,082	0,15	$5,7 \cdot 10^9$	123	$6,6 \cdot 10^9$	133	0,077	103	$1,5 \cdot 10^{-4}$	$1,35 \cdot 10^{-5}$
Hêtre	0,042	0,16	$6,2 \cdot 10^9$	124	$3,2 \cdot 10^9$	130	0,072	101	$1,25 \cdot 10^{-4}$	$1,41 \cdot 10^{-5}$
Peuplier	0,044	0,14	$5,8 \cdot 10^9$	121	$4,3 \cdot 10^9$	132	0,082	108	$2,52 \cdot 10^{-4}$	$1,14 \cdot 10^{-5}$
Pin	0,052	0,13	$3,0 \cdot 10^9$	116	$1,3 \cdot 10^9$	128	0,084	103	$4,64 \cdot 10^{-4}$	$9,51 \cdot 10^{-6}$
Sapin	0,047	0,14	$2,5 \cdot 10^9$	118	$1,3 \cdot 10^9$	129	0,087	100	$2,32 \cdot 10^{-4}$	$7,37 \cdot 10^{-6}$

Tableau IV.2 : Valeurs des paramètres cinétiques et thermiques obtenues par optimisation avec les valeurs trouvées, les courbes expérimentales reportées respectivement sur les figures IV.10 à IV.14 sont bien représentées.

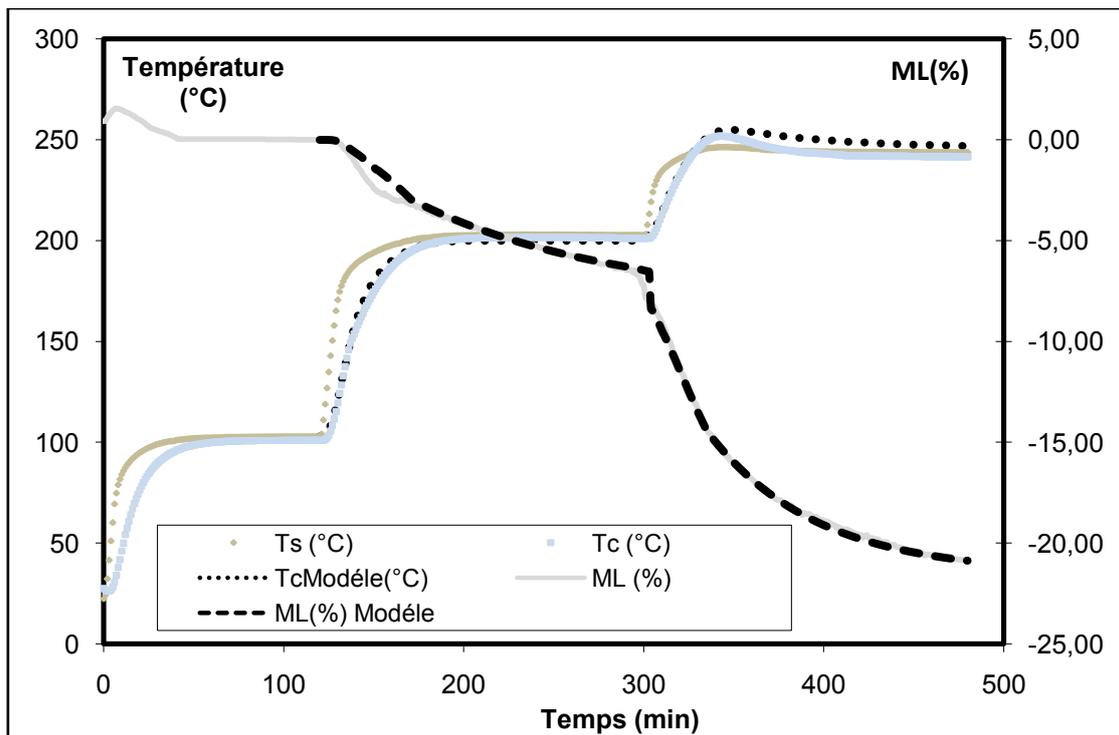


Figure IV. 10 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le frêne avec une montée de température 8°C/min

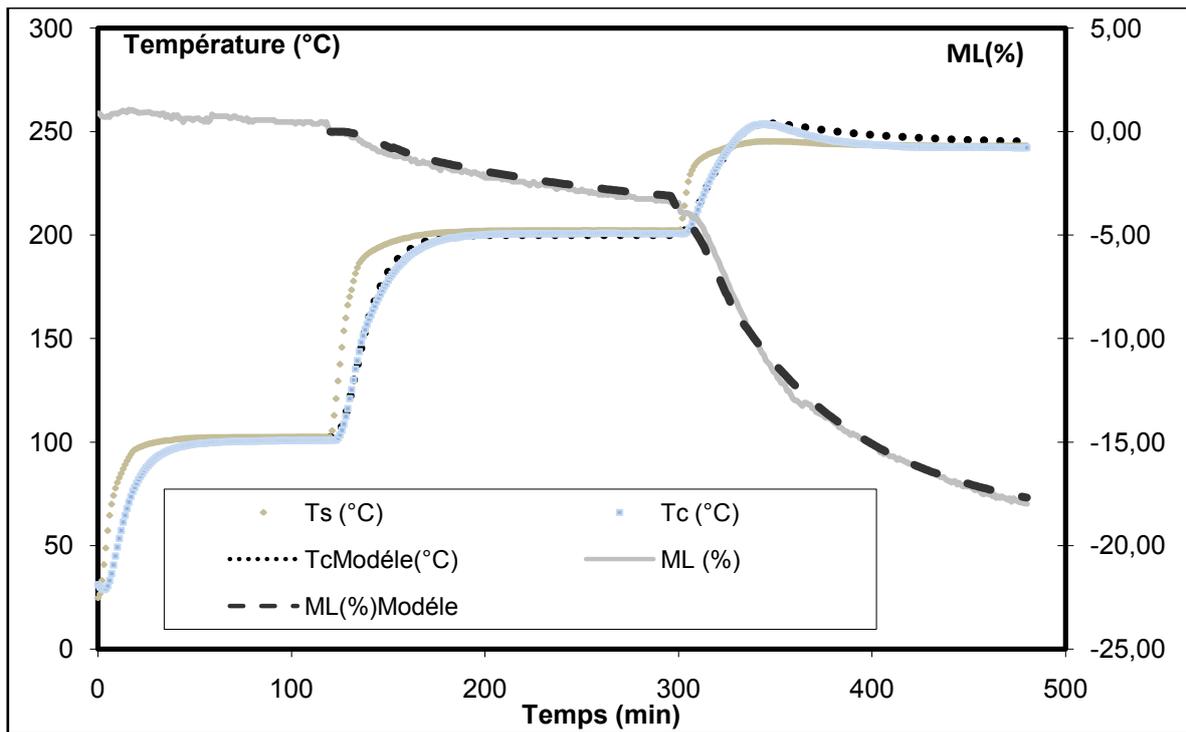


Figure IV. 11 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Hêtre avec une montée de température 8°C/min

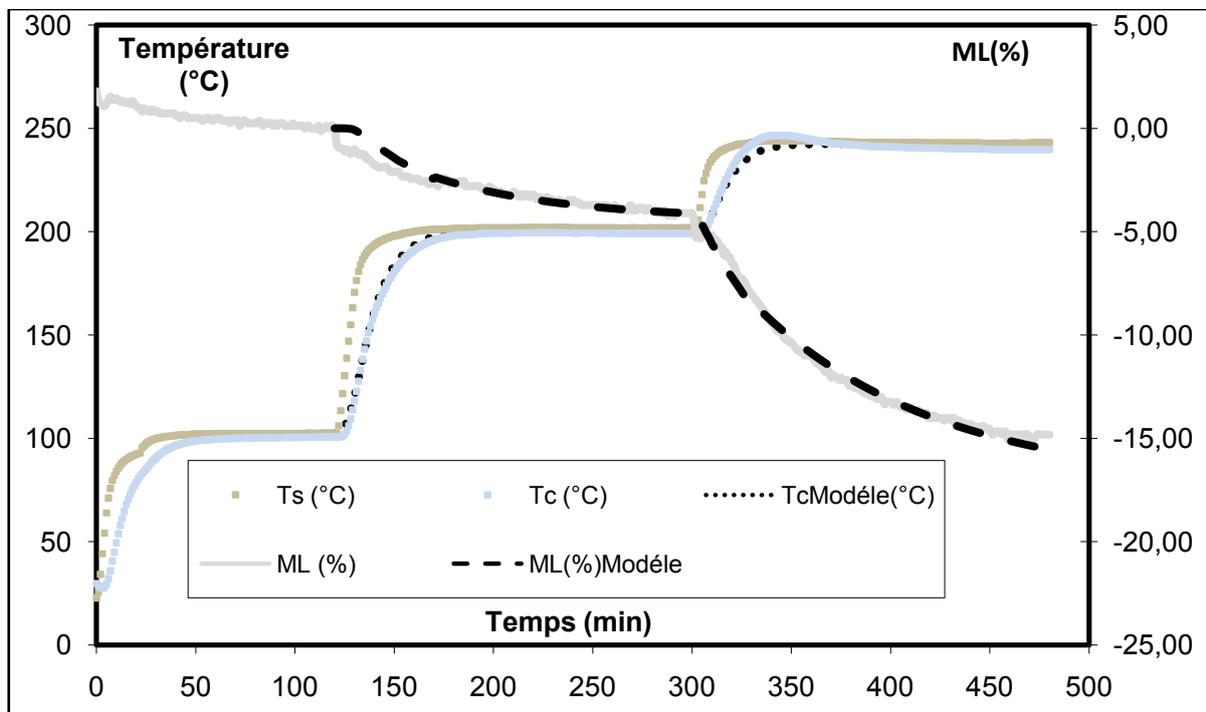


Figure IV. 12 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Peuplier avec une montée de température 8°C/min.

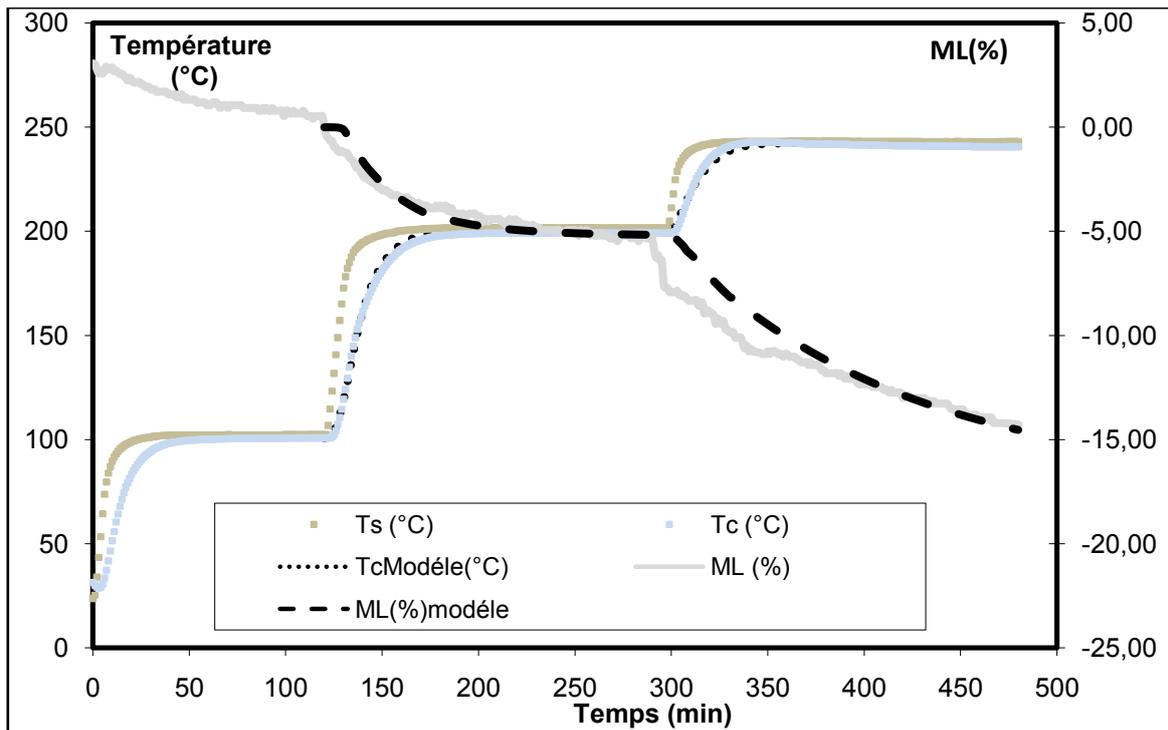


Figure IV.13 Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Pin avec une montée de température 8°C/min

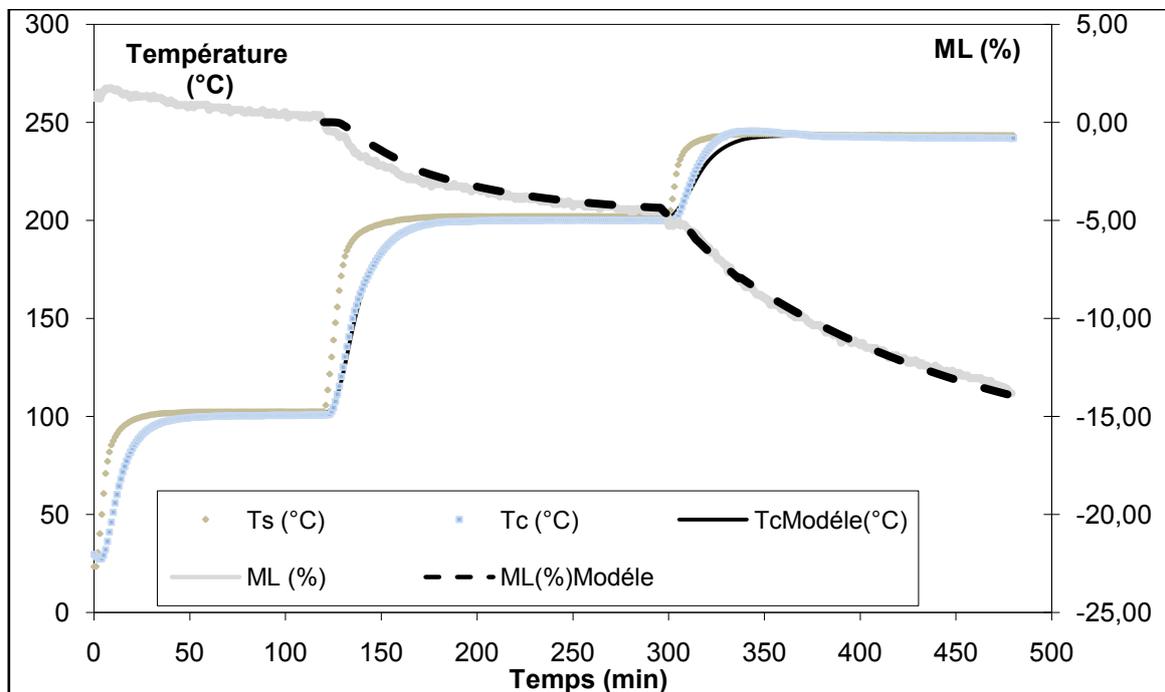


Figure IV. 14 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Sapin avec une montée de température 8°C/min

L'analyse du tableau IV.2 nous permet de faire les observations suivantes :

- on remarque que la constante de vitesse k_1 de la première réaction est supérieure à la constante de vitesse k_2 de la deuxième réaction ce qui justifie notre hypothèse.
- la variation d'enthalpie liée à la dégradation de la fraction A_2 est faible et dépend peu de l'essence. Elle est de l'ordre de 100 KJ/mol.
- l'énergie d'activation E_{a1} lié à la constante k_1 est voisine de 120 KJ/mol
- l'énergie d'activation E_{a2} lié à la constante k_2 est voisine de 130 KJ/mol
- la fraction A_1 dans le bois est faible et de l'ordre de 5%.
- la fraction A_2 semble dépendre légèrement de l'essence. Toutefois on observe une relation étroite entre les variations de α_2 et γ_2 . Plus précisément à une diminution de A_2 il correspond une diminution du composé C_2 d'où le peu de variation de la masse totale. L'écart à minimiser est par suite peu influencé par le choix du couple α_2, γ_2 . En moyenne la valeur de α_2 est voisine de 15 % est celle de γ_2 est voisine de 8%.

En fixant α_1, α_2 et γ_2 à ces valeurs moyennes, nous avons cherché à représenter au mieux la première et la deuxième étape de la pyrolyse en cherchant les valeurs optimales des paramètres $k_{01}, E_{a1}, k_{02}, E_{a2}$ et ΔH_2 .

Remarque :

On ne peut pas fixer α_1 à 5% pour le frêne car le frêne perd expérimentalement plus de 6% dans la première étape. Aussi pour le frêne nous avons conservé la valeur de α_1 obtenue l'ordre de l'analyse précédente.

	α_1 (g/g)	α_2 (g/g)	K_{01} (S^{-1})	Ea_1 (kJ/mol)	K_{02} (S^{-1})	Ea_2 (kJ/mol)	γ_2 (g/g)	$-\Delta H_2$ (J/kg)	$K1$ à 200°C (S^{-1})	$\dot{\alpha}$ à 200°C (S^{-1})	$K2$ à 200°C (S^{-1})	$\dot{\alpha}$
Frêne	0,082	0,15	$5,7 \cdot 10^9$	123	$6,6 \cdot 10^9$	133	0,08	104	$1,49 \cdot 10^{-4}$		$1,35 \cdot 10^{-5}$	
Hêtre	0,05	0,15	$6,5 \cdot 10^9$	125	$2,5 \cdot 10^9$	129	0,08	101	$1,02 \cdot 10^{-4}$		$1,42 \cdot 10^{-5}$	
Peuplier	0,05	0,15	$5,6 \cdot 10^9$	122	$4,5 \cdot 10^9$	133	0,08	108	$1,88 \cdot 10^{-4}$		$9,23 \cdot 10^{-6}$	
Pin	0,05	0,15	$3,0 \cdot 10^9$	116	$1,9 \cdot 10^9$	131	0,08	103	$4,64 \cdot 10^{-4}$		$6,48 \cdot 10^{-6}$	
Sapin	0,05	0,15	$2,5 \cdot 10^9$	118	$1,5 \cdot 10^9$	130	0,08	100	$2,32 \cdot 10^{-4}$		$6,58 \cdot 10^{-6}$	

Tableau IV.3 : Valeurs des paramètres cinétiques et thermique obtenues par optimisation

Les valeurs optimisées des paramètres sont données dans le tableau IV.3. Avec les valeurs trouvées les comparaisons entre courbes expérimentales et calculées sont représentées sur les figures IV.15 à IV.19.

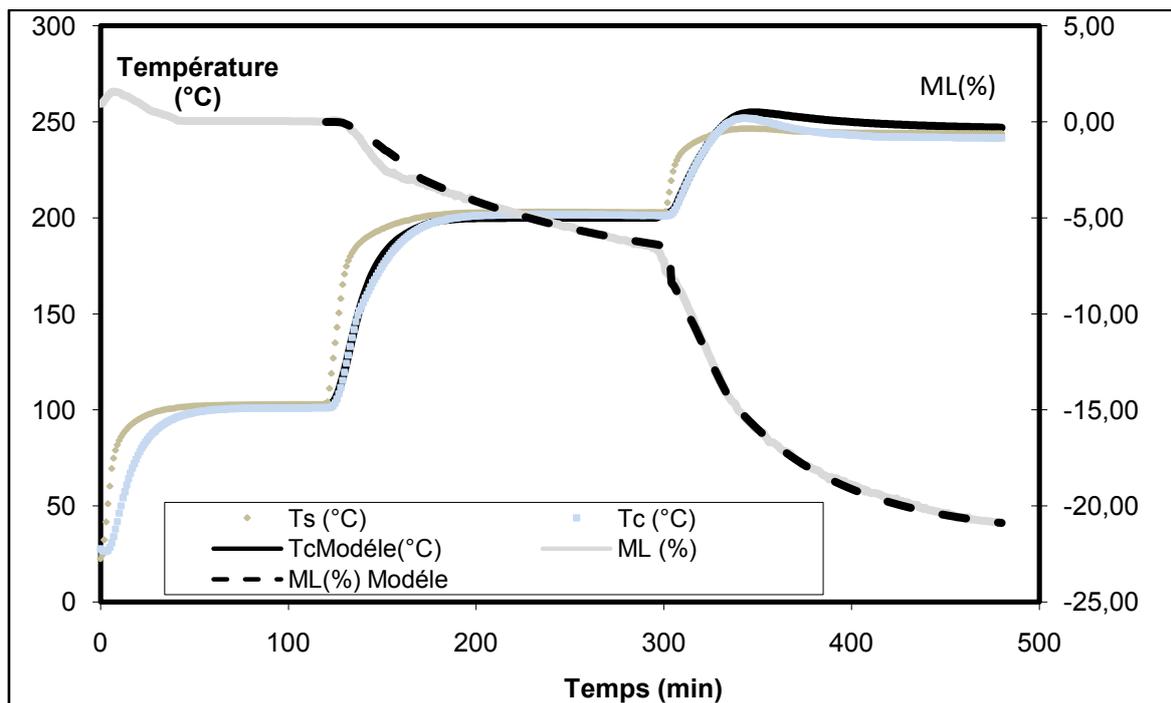


Figure IV. 15 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le frêne avec une montée de température 8°C/min.

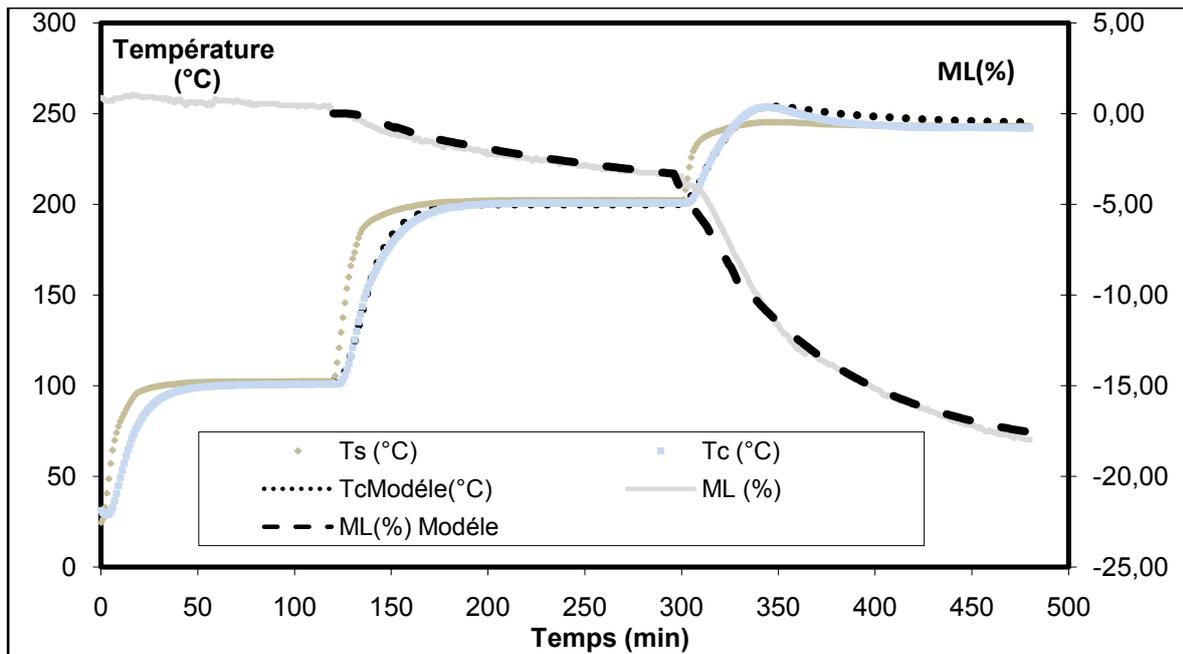


Figure IV. 16 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Hêtre avec une montée de température 8°C/min

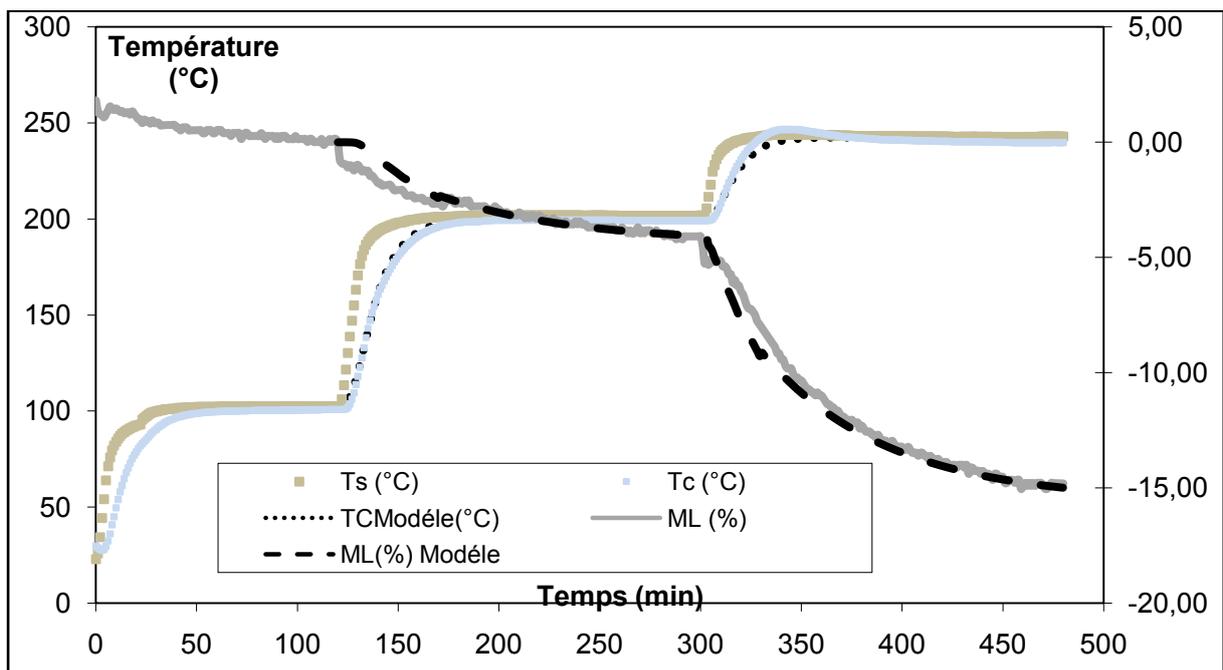


Figure IV. 17 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Peuplier avec une montée de température 8°C/min

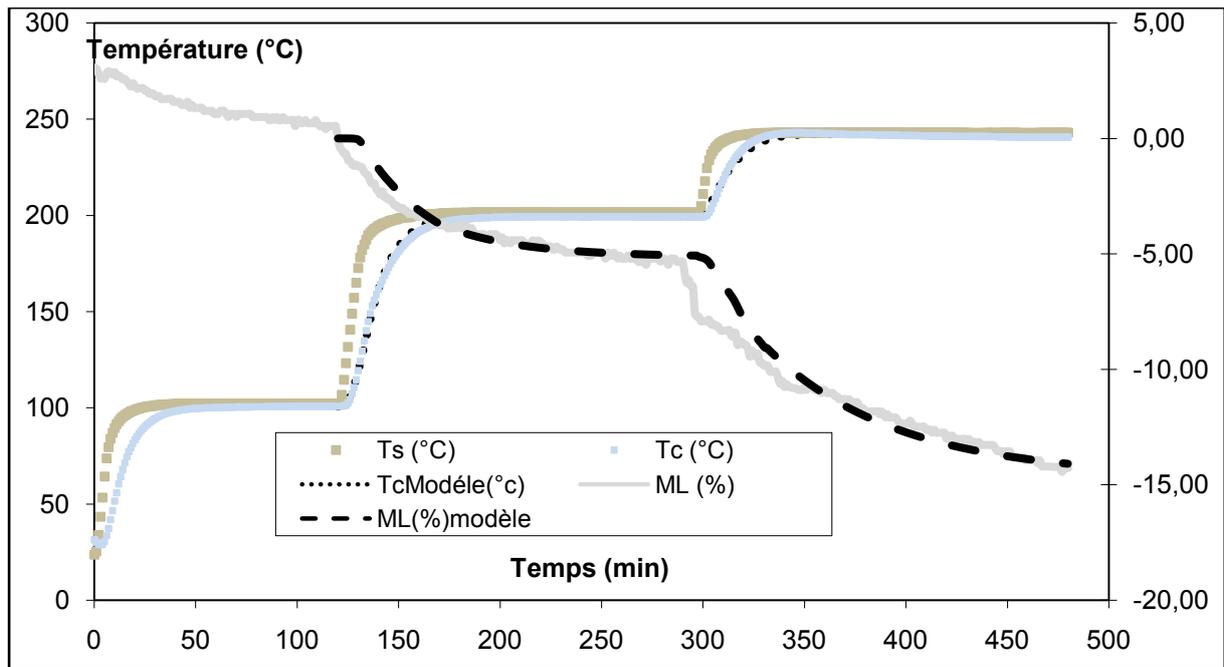


Figure IV.18 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Pin avec une montée de température 8°C/min

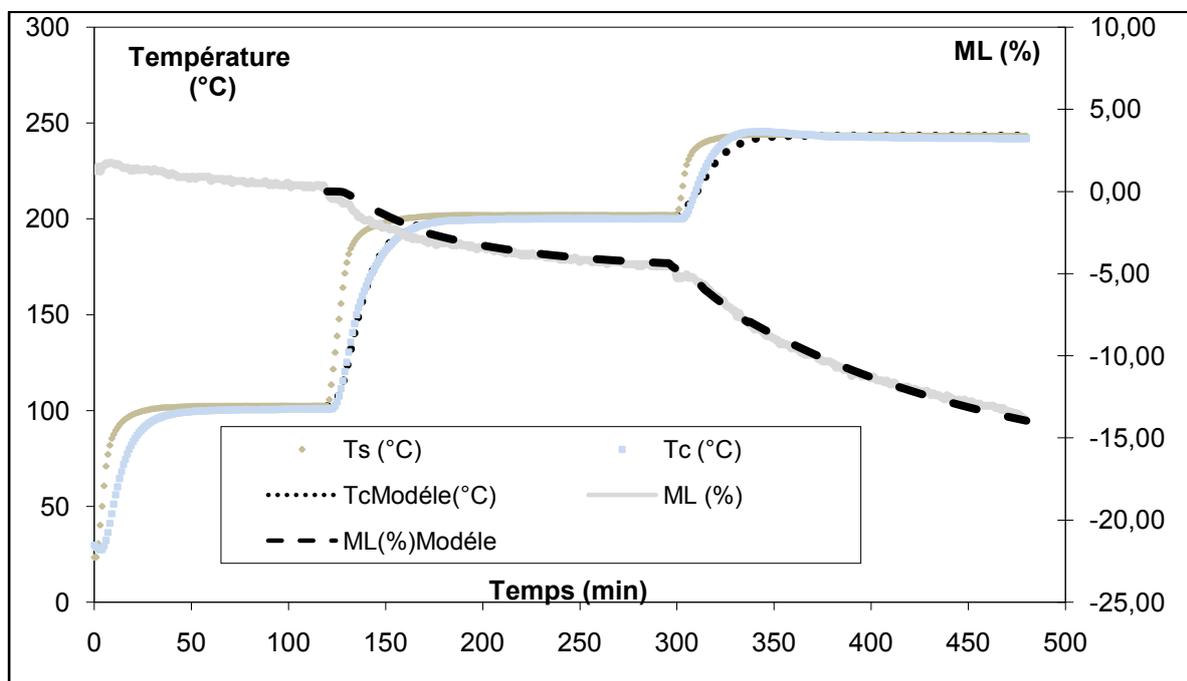


Figure IV. 19 : Représentation graphique du modèle et de l'expérience de l'évolution de la température et la perte de masse en fonction du temps pour le Sapin avec une montée de température 8°C/min

L'analyse du tableau IV.3 nous permet de faire les observations suivantes :

- on remarque que la constante de vitesse k_1 (à 200°C) de la première réaction est supérieure à la constante de vitesse k_2 (à 200°C) de la deuxième réaction ce qui justifie notre hypothèse.
- Les valeurs des constantes de vitesse et des énergies de l'activation sont peu modifiées.

Dans les deux analyses on observe une augmentation de la constante de vitesse k_1 avec la masse volumique de l'essence, compensée par une diminution de la constante de vitesse k_2 avec la masse volumique. Par suite, la perte de masse totale au cours des deux étapes de montée de température dépend peu de l'essence. Il serait donc possible de poursuivre la recherche des paramètres en fixant par exemple les valeurs des énergies d'activation.

- **Conclusion :**

L'application du modèle proposé par Grioui et al, (2006) et l'utilisation d'algorithmes génétiques pour évaluer les paramètres du modèle ont permis de représenter de manière satisfaisante les courbes de température et de perte de masse observées lors de la pyrolyse douce de planches de bois insérées entre deux plaques chauffées.

En appliquant la démarche à différentes essences, nous avons confirmé la difficulté de trouver un système unique de paramètres par optimisation en présence d'un nombre élevé de paramètres suite à l'aspect linéairement dépendant entre ces paramètres. Ainsi lorsque le nombre d'informations expérimentales est faible devant le nombre de paramètres à identifier, le non unicité de la solution optimale devra toujours être prise en compte et conduire à la recherche de nouvelles informations expérimentales et, en cas d'impossibilité, à la fixation de certains paramètres suite aux optimisations initiales.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

La difficulté de la modélisation des transferts d'énergie et de matière dans un milieu poreux comme le bois est dû d'une part à l'interaction complexe de plusieurs phénomènes (réaction chimique, transfert de la chaleur, déformation mécanique, transfert d'eau...) et d'autre part, à l'absence d'information précise sur les propriétés physiques et chimiques du bois au cours des transferts. L'étude présentée dans ce mémoire a porté sur les aspects fondamentaux de modélisation de la pyrolyse et de l'adsorption, en montrant les difficultés rencontrées : détermination des paramètres physico-chimiques, choix du modèle, choix de la méthode de discrétisation, et choix de la méthode de l'optimisation.

Les méthodes numériques et les méthodes d'optimisation mises en œuvre nous ont permis de bien répondre aux deux applications traitées.

Dans la première application, la modélisation a permis de montrer que dans certains cas les transports diffusionnels d'eau vapeur et d'eau liée au sein du bois ne se faisaient pas dans des conditions d'équilibre thermodynamique entre les phases gazeuse et adsorbée.

Dans la deuxième application nous avons pu vérifier la difficulté de trouver par optimisation un système optimal de paramètres décrivant un phénomène physico-chimique en présence d'un nombre élevé de paramètres et de couplage entre ces paramètres.

Le couplage entre paramètres opératoires étant fréquents dans les transferts simultanés de masse et d'énergie en présence de transformations chimiques, il s'avèrerait intéressant dans les méthodes d'optimisation une analyse de sensibilité à fin de prendre en compte ces couplages et donc de réduire le nombre de paramètres à identifier. C'est une direction de recherche que nous proposons d'engager et de valider sur d'autres applications expérimentales de transferts simultanés de masse et d'énergie.

ANNEXE 1 : L'existence et l'unicité de la solution

Dans cette annexe on va étudier l'existence et l'unicité de la solution en prenant le modèle de l'adsorption développé au cours de la thèse :

$$(1) \begin{cases} -D_a \rho_B \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} + \rho_B \frac{\partial x}{\partial t} + \rho_B k_a (x - f(\rho_e)) = 0 & \forall (y, t) \in [0, e/2] \times [0, +\infty] \\ -D_v \frac{\partial^2 \rho_e}{\partial y^2} + \varepsilon \frac{\partial \rho_e}{\partial t} - \rho_B k_a (x - f(\rho_e)) = 0 & \forall (y, t) \in [0, e/2] \times [0, +\infty] \\ \frac{\partial \rho_e}{\partial y}(0, t) = 0 & \frac{\partial x}{\partial y}(0, t) = 0 & \forall t \in [0, +\infty] \\ \rho_e\left(\frac{e}{2}, t\right) = \rho_2 & x\left(\frac{e}{2}, t\right) = x_2 & \forall t \in [0, +\infty] \\ \rho_e(y, 0) = \rho_1 & x(y, 0) = x_1 & \forall y \in [0, e/2] \end{cases}$$

Notation :

On note

$$x(y, t) = u(y, t), \quad \rho_e(y, t) = v(y, t), \quad \rho_B = \rho, \quad D_a = \alpha, \quad D_v = \beta$$

$$(2) \begin{cases} -\alpha u_{yy} + u_t = -k_a(u - f(v)) & \forall (y, t) \in [0, e/2] \times [0, +\infty] \\ -\beta v_{yy} + \varepsilon v_t = \rho k_a(u - f(v)) & \forall (y, t) \in [0, e/2] \times [0, +\infty] \\ v_y(0, t) = 0 & u_y(0, t) = 0 & \forall t \in [0, +\infty] \\ v\left(\frac{e}{2}, t\right) = \rho_2 & u\left(\frac{e}{2}, t\right) = x_2 & \forall t \in [0, +\infty] \\ v(y, 0) = \rho_1 & u(y, 0) = x_1 & \forall y \in [0, e/2] \end{cases}$$

Soit $T > 0$

Notation :

$$F(u, v) = -ka(u - f(v)) \quad , \quad G(u, v) = \frac{\rho ka}{\varepsilon} (u - f(v)) \quad \text{défini sur } Q_T =]0, e/2[\times]0, T[$$

Donc notre problème peut s'écrire de la manière suivante :

$$(3) \begin{cases} -\alpha u_{yy} + u_t = F(u, v) & \forall (y, t) \in Q_T \\ -\gamma v_{yy} + \varepsilon v_t = G(u, v) & \forall (y, t) \in Q_T \quad \text{avec } \gamma = \frac{\beta}{\varepsilon} \\ v_y(0, t) = 0 & u_y(0, t) = 0 & \forall t \in [0, T] \\ v\left(\frac{e}{2}, t\right) = \rho_2 & u\left(\frac{e}{2}, t\right) = x_2 & \forall t \in [0, T] \\ v(y, 0) = \rho_1 & u(y, 0) = x_1 & \forall y \in [0, e/2] \end{cases}$$

I. Démonstration de l'Existence Local :

Pour la démonstration on va utiliser la théorie de la semi-groupe A.Pazy (1983)

On considère le système associé à (3) :

$$(4) \begin{cases} u(t) = S(t)x_1 + \int_0^t S(t-s)F(u(s), v(s))ds \equiv \phi_1(u, v) \\ v(t) = S(t)\rho_1 + \int_0^t S(t-s)G(u(s), v(s))ds \equiv \phi_2(u, v) \end{cases}$$

Ou pour toute fonction $f \in L^1\left(]0, \frac{e}{2}[\right)$; $s(t)f$ et la solution de

$$(5) \begin{cases} w_t - w_{yy} = 0 & \text{dans }]0, e/2[\times]0, +\infty[\\ w(x, 0) = f(x) & \text{dans }]0, e/2[\end{cases}$$

On pose : $\bar{u} = u - x_2$ et $\bar{v} = v - \rho_2$ d'où le système (3) devient :

$$(6) \begin{cases} -\alpha \bar{u}_{yy} + \bar{u}_t = F(\bar{u} + x_2, \bar{v} + \rho_2) & \forall (y, t) \in Q_T \\ -\gamma \bar{v}_{yy} + \varepsilon \bar{v}_t = G(\bar{u} + x_2, \bar{v} + \rho_2) & \forall (y, t) \in Q_T \text{ avec } \gamma = \frac{\beta}{\varepsilon} \\ \bar{v}_y(0, t) = 0 & \bar{u}_y(0, t) = 0 & \forall t \in [0, T] \\ \bar{v}\left(\frac{e}{2}, t\right) = 0 & \bar{u}\left(\frac{e}{2}, t\right) = 0 & \forall t \in [0, T] \\ \bar{v}(y, 0) = \rho_1 - \rho_2 & \bar{u}(y, 0) = x_1 - x_2 & \forall y \in [0, e/2] \end{cases}$$

Dans la suite on résout le système suivant :

$$(7) \begin{cases} -\alpha u_{yy} + u_t = F(u + x_2, v + \rho_2) & \forall (y, t) \in Q_T \\ -\gamma v_{yy} + \varepsilon v_t = G(u + x_2, v + \rho_2) & \forall (y, t) \in Q_T \text{ avec } \gamma = \frac{\beta}{\varepsilon} \\ v_y(0, t) = 0 & u_y(0, t) = 0 & \forall t \in [0, T] \\ v\left(\frac{e}{2}, t\right) = 0 & u\left(\frac{e}{2}, t\right) = 0 & \forall t \in [0, T] \\ v(y, 0) = \rho_1 - \rho_2 & u(y, 0) = x_1 - x_2 & \forall y \in [0, e/2] \end{cases}$$

Attention la solution physique est $(u + x_2, v + \rho_2)$

On considère le système intégral associé à (7) :

$$(8) \begin{cases} U(t) = S(t)(x_1 - x_2) + \int_0^t S(t-s)F(u(s) + x_2, v(s) + \rho_2)ds \equiv \phi_1(u, v) \\ V(t) = S(t)(\rho_1 - \rho_2) + \int_0^t S(t-s)G(u(s) + x_2, v(s) + \rho_2)ds \equiv \phi_2(u, v) \end{cases}$$

Ou pour toute fonction $f \in L^1\left(]0, \frac{e}{2}[\right)$; $s(t)f$ est la solution de

$$(9) \quad \begin{cases} w_t - w_{yy} = 0 & \text{dans } Q_T \\ w(x, 0) = f(x) & \text{dans }]0, e/2[\end{cases}$$

On a alors

$$S(t)f \equiv S(t)f(x) = (4\pi t)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{(x-\zeta)^2}{4t}\right] f(\zeta) d\zeta$$

$$U(t) = \phi_1(u, v) \quad V(t) = \phi_2(u, v)$$

Soit :

$$E_T = \left\{ (u, v) : [0, T] \rightarrow L^\infty\left(\left[0, \frac{e}{2}\right]\right) \times L^\infty\left(\left[0, \frac{e}{2}\right]\right) \quad |||(u, v)||| < +\infty \right\}$$

Avec $|||(u, v)||| = \sup_{0 < t < T} [\|u(t)\|_\infty + \|v(t)\|_\infty]$

E_T est un espace de Banach, on cherche $\bar{U} = u - x_2, \bar{V} = v - \rho_2$

On pose

$$P_T = \{(u, v) \in E_T, : u \geq 0 \text{ et } v \geq 0\}$$

P_T est un sous ensemble fermé de E_T .

On pose un autre ensemble :

Soit

$$B_R = \{(u, v) \in E_T; |||(u, v)||| < R\}$$

On pose

$$\psi(u, v) = (\phi_1(u, v), \phi_2(u, v))$$

On va montrer que T assez petit et pour R assez grand ψ admet un point fixe dans la boule B_R .

Montrons que ψ est strictement contractante de $B_R \cap P_T$ dans $B_R \cap P_T$

$$I1 = |||\psi(u_1, v_1) - \psi(u_2, v_2)||| = |||(\phi_1(u_1, v_1) - \phi_1(u_2, v_2), \phi_2(u_1, v_1) - \phi_2(u_2, v_2))||| \quad (9)$$

On calcule terme à terme de l'équation I1,

$$\begin{cases} \phi_1(u_1, v_1) - \phi_1(u_2, v_2) = \int_0^t S(t-s)[F(u_1(s) + x_2, v_1(s) + \rho_2) - F(u_2(s) + x_2, v_2(s) + \rho_2)]ds \\ \phi_2(u_1, v_1) - \phi_2(u_2, v_2) = \int_0^t S(t-s)[G(u_1(s) + x_2, v_1(s) + \rho_2) - G(u_2(s) + x_2, v_2(s) + \rho_2)]ds \end{cases}$$

Puisque:

$$(9.a) \quad F(u,v) = -ka(u-f(v)) \quad \text{et} \quad (9.b) \quad G(u,v) = \frac{\rho ka}{\varepsilon}(u-f(v))$$

$$\begin{cases} \phi_1(u_1, v_1) - \phi_1(u_2, v_2) = \int_0^t S(t-s)[-ka(u_1(s) + x_2 - f(v_1(s) + \rho_2)) + ka(u_2(s) + x_2 - f(v_2(s) + \rho_2))]ds \\ \phi_2(u_1, v_1) - \phi_2(u_2, v_2) = \int_0^t S(t-s)\left[\frac{\rho ka}{\varepsilon}(u_1(s) + x_2 - f(v_1(s) + \rho_2)) - \frac{\rho ka}{\varepsilon}(u_2(s) + x_2 - f(v_2(s) + \rho_2))\right]ds \end{cases}$$

$$(10) \quad \begin{cases} \phi_1(u_1, v_1) - \phi_1(u_2, v_2) = ka \int_0^t S(t-s)[(u_2(s) - u_1(s)) + (f(v_1(s) + \rho_2) - f(v_2(s) + \rho_2))]ds \\ \phi_2(u_1, v_1) - \phi_2(u_2, v_2) = \frac{\rho ka}{\varepsilon} \int_0^t S(t-s)[(u_1(s) - u_2(s)) + (f(v_2(s) + \rho_2) - f(v_1(s) + \rho_2))]ds \end{cases}$$

Donc d'après (9) et (10)

$$I1 = \left\| \left(-ka, \frac{\rho ka}{\varepsilon} \right) \int_0^t S(t-s)[(u_1(s) - u_2(s)) + (f(v_2(s) + \rho_2) - f(v_1(s) + \rho_2))]ds \right\|$$

D'après les données on a $0 \leq \varepsilon \leq 1$ et $\rho \geq 1$ alors $\frac{\rho}{\varepsilon} \geq 1$ d'où $\frac{\rho}{\varepsilon} ka \geq ka$

$$\text{Donc } I1 \leq \left\| \left(\frac{\rho ka}{\varepsilon}, \frac{\rho ka}{\varepsilon} \right) \int_0^t S(t-s)[(u_1(s) - u_2(s)) + (f(v_2(s) + \rho_2) - f(v_1(s) + \rho_2))]ds \right\|$$

$$I1 \leq 2 \frac{\rho ka}{\varepsilon} \sup_{0 \leq t \leq T} \left[\int_0^t S(t-s)[(u_1(s) - u_2(s)) + (f(v_2(s) + \rho_2) - f(v_1(s) + \rho_2))]ds \right]$$

S est un semi-groupe de contraction, donc :

$$I1 \leq 2 \frac{\rho ka}{\varepsilon} \sup_{0 \leq t \leq T} [T|u_1 - u_2| + TC_0|v_1 - v_2|]$$

D'où

$$I1 \leq 2 \frac{\rho ka}{\varepsilon} T \text{Max}(1, C_0) \|(u_1, u_2) - (v_1, v_2)\|$$

Pour T assez petit ψ est une contraction stricte tel que

$$\frac{2 \rho ka}{\varepsilon} T \text{Max}(1, C_0) \leq \frac{1}{4}$$

Soit $(u, v) \in B_R \cap P_T$ Montrons que $\psi(u, v) \in B_R \cap P_T$

Théorème de la moyenne :

Soit $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ intégrables sur $[a, b]$ donc

$$\exists c \in [a, b] \quad f(c) = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(t) dt$$

On applique sur ϕ_1 et ϕ_2 :

$$\exists c_t \in [0, t] \quad f(c_t) = \frac{1}{t} \int_0^t f(s) ds$$

$$(11) \quad \begin{cases} \phi_1(u(t), v(t)) = S(t)(x_1 - x_2) + tS(t - c_t)F(u(c_t) + x_2, v(c_t) + \rho_2) \\ \phi_2(u(t), v(t)) = S(t)(\rho_1 - \rho_2) + tS(t - c_t)G(u(c_t) + x_2, v(c_t) + \rho_2) \end{cases}$$

D'où (11) devient :

$$(12) \quad \begin{cases} \phi_1(u(t), v(t)) = S(t)(x_1 - x_2) + tS(t - c_t)F(u(c_t) + x_2, v(c_t) + \rho_2) \\ \phi_2(u(t), v(t)) = S(t)(\rho_1 - \rho_2) + tS(t - c_t)G(u(c_t) + x_2, v(c_t) + \rho_2) \end{cases}$$

D'après (9.a) et (9.b) le (12) devient :

$$(13) \quad \begin{cases} \phi_1(u(t), v(t)) = S(t)(x_1 - x_2) - ka \int_0^t s(t - c_t)(u(c_t) + x_2 - f(v(c_t) + \rho_2)) \\ \phi_2(u(t), v(t)) = S(t)(\rho_1 - \rho_2) + \frac{ka \rho}{\varepsilon} tS(t - c_t) (u(c_t) + x_2 - f(v(c_t) + \rho_2)) \end{cases}$$

Alors on obtient :

$$|||\psi(u, v)||| \leq |x_1 - x_2| + Tka\{|u| + |f(v)|\} + |\rho_1 - \rho_2| + \frac{T\rho ka}{\varepsilon}\{|u| + |f(v)|\}$$

D'après les données on a $0 \leq \varepsilon \leq 1$ et $\rho \geq 1$ alors $\frac{\rho}{\varepsilon} \geq 1$ d'où $\frac{\rho}{\varepsilon}ka \geq ka$

$$|||\psi(u, v)||| \leq \{|x_1 - x_2| + |\rho_1 - \rho_2|\} + 2\frac{T\rho ka}{\varepsilon}\{|u| + |f(v)|\}$$

$$|||\psi(u, v)||| \leq \{|x_1 - x_2| + |\rho_1 - \rho_2|\} + 2\frac{T\rho ka}{\varepsilon}\{|u| + c_0|v| + c_0|f(0)|\}$$

$$|||\psi(u, v)||| \leq \{|x_1 - x_2| + |\rho_1 - \rho_2|\} + 2\frac{T\rho ka}{\varepsilon}Max(1, c_0)\{|u| + |v|\} + 2\frac{T\rho ka}{\varepsilon}c_0|f(0)|$$

On choisie R tel que :

$$\{|x_1 - x_2| + |\rho_1 - \rho_2|\} + 2\frac{T\rho ka}{\varepsilon}c_0|f(0)| < \frac{R}{2}$$

Ainsi :

$$\frac{2 T\rho ka}{\varepsilon}Max(1, c_0) \leq \frac{1}{4}$$

Donc

$$|||\psi(u, v)||| \leq \frac{1}{4}\{|u| + |v|\} + \frac{R}{2} \leq \frac{1}{4}\{R + R\} + \frac{R}{2}$$

On conclut que

$$|||\psi(u, v)||| \leq R \quad (14)$$

D'autre part d'après (12) on a

$$(15) \quad \begin{cases} \lim_{t \rightarrow 0} \phi_1(u(t), v(t)) = \lim_{t \rightarrow 0} S(t)(x_1 - x_2) + tS(t - c_t)F(u(c_t) + x_2, v(c_t) + \rho_2) = x_1 - x_2 \\ \lim_{t \rightarrow 0} \phi_2(u(t), v(t)) = \lim_{t \rightarrow 0} S(t)(\rho_1 - \rho_2) + tS(t - c_t)G(u(c_t) + x_2, v(c_t) + \rho_2) = \rho_1 - \rho_2 \end{cases}$$

Donc

$$\lim_{t \rightarrow 0} \psi(u(t), v(t)) = (x_1 - x_2, \rho_1 - \rho_2) \geq 0 \quad (16)$$

Alors d'après (14) et (16) :

$$\psi(u, v) \in B_R \cap P_T$$

D'après les semi groupe :

$$(17) \begin{cases} (U_1 - U_2)(t) = -ka \int_0^t S(t-s)((u_1 - u_2)(s) - (f(v_1(s) + \rho_2) - f(v_2(s) + \rho_2)))ds \\ (V_1 - V_2)(t) = \frac{\rho ka}{\varepsilon} \int_0^t S(t-s)((u_1 - u_2)(s) - (f(v_1(s) + \rho_2) - f(v_2(s) + \rho_2)))ds \end{cases}$$

f est continue donc il est C1-Lipchitz donc 17 devient

$$(18) \begin{cases} |U_1 - U_2|(t) \leq ka C[|u_1 - u_2|(t_0) + C_1|v_1 - v_2|(t_0)]t \\ |V_1 - V_2|(t) \leq \frac{\rho ka}{\varepsilon} C[|u_1 - u_2|(t_0) + C_1|v_1 - v_2|(t_0)]t \\ \text{avec } t_0 \in [0, t] \end{cases}$$

Soit

$$T_1^* = \{T > 0 / U_1 = U_2 \text{ sur } [0, T]\}$$

$$T_2^* = \{T > 0 / V_1 = V_2 \text{ sur } [0, T]\}$$

$$T^* = \min(T_1^*, T_2^*)$$

$(\bar{u}, \bar{v}) = (x_1 - x_2, \rho_1 - \rho_2)$ est une sur solution du système (8) avec

$$(x_1 = f(\rho_1), x_2 = f(\rho_2), \rho_1 > \rho_2, x_1 > x_2)$$

(\bar{u}, \bar{v}) définit sur $[0, \frac{\varepsilon}{2}] \times [0, +\infty[$

Donc la solution (u, v) est globale

Montrons l'unicité de la solution

Soient (u_1, u_2) deux solution de (7) donc on va avoir le système suivant :

$$(19) \left\{ \begin{array}{l} -\alpha (u_1 - u_2)_{yy} + (u_1 - u_2)_t = -ka((u_1 - u_2) - (f(v_1) - f(v_2))) \quad \forall (y, t) \in \left[0, \frac{e}{2}\right] \times [0, +\infty[\\ -\gamma (v_1 - v_2)_{yy} + (v_1 - v_2)_t = \frac{\rho ka}{\varepsilon}((u_1 - u_2) - (f(v_1) - f(v_2))) \quad \forall (y, t) \in \left[0, \frac{e}{2}\right] \times [0, +\infty[\\ \text{avec } \gamma = \frac{\beta}{\varepsilon} \\ (v_1 - v_2)_y(0, t) = 0 \quad (u_1 - u_2)_y(0, t) = 0 \quad \forall t \in [0, +\infty[\\ (v_1 - v_2)\left(\frac{e}{2}, t\right) = 0 \quad (u_1 - u_2)\left(\frac{e}{2}, t\right) = 0 \quad \forall t \in [0, +\infty[\\ (v_1 - v_2)(y, 0) = 0 \quad (u_1 - u_2)(y, 0) = 0 \quad \forall y \in [0, e/2] \end{array} \right.$$

Pour $t > T^*$ et $B(t - T^*) < 1$

$$(20) \left\{ \begin{array}{l} |u_1 - u_2|(t) \leq ka C[|u_1 - u_2|(t_0) + C_1|v_1 - v_2|(t_0)](t - T^*) \\ |v_1 - v_2|(t) \leq \frac{\rho ka}{\varepsilon} C[|u_1 - u_2|(t_0) + C_1|v_1 - v_2|(t_0)](t - T^*) \\ \text{avec } t_0 \in [t - T^*, t] \end{array} \right.$$

On fait la sommes des deux inéquations du système (20) On obtient alors :

Avec $A(t) = |v_1 - v_2|(t) + |u_1 - u_2|(t)$

$$A(t) \leq \frac{2\rho ka}{\varepsilon} C[A(t)](t - T^*) \text{Max}(1, C1)$$

Posons

$$B = \frac{2\rho ka}{\varepsilon} C \text{Max}(1, C1)$$

Alors :

$$A(t) \leq B[A(t)](t - T^*)$$

Par récurrence on a

$$A(t) \leq B[A(t)](t - T^*) \leq B^2[A(t)](t - T^*)^2 \leq B^n[A(t)](t - T^*)^n \quad \forall n \in \mathbb{N}^*$$

Alors

$$A(t) \leq B[A(t)](t - T^*) \leq B^2[A(t)](t - T^*)^2 \leq (B(t - T^*))^n [A(t)] \quad \forall n \in \mathbb{N}^*$$

Puisque $B(t - T^*) < 1$ d'où $\lim_{n \rightarrow +\infty} (B(t - T^*))^n [A(t)] = 0$ et $A(t) \geq 0$

Alors $A(t) = 0$

D'où l'unicité de la solution

ANNEXE 2 : Définitions

Définition espace d'Hilbert :

Un espace de Hilbert est un espace de Banach (donc complet) dont la norme $\|\cdot\|$ découle d'un produit scalaire ou hermitien $\langle \cdot, \cdot \rangle$. C'est la généralisation en dimension quelconque d'un espace euclidien ou hermitien.

Théorème de M. Fréchet-J. von Neumann-P. Jordan]

Un espace de Banach (respectivement espace vectoriel normé) est un espace de Hilbert (respectivement espace préhilbertien) si et seulement si sa norme vérifie l'égalité

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2(\|x\|^2 + \|y\|^2)$$

Qui signifie que la somme des carrés des côtés d'un parallélogramme est égale à la somme des carrés des diagonales (règle du parallélogramme).

Dans le cas réel le produit scalaire est défini par :

$$\langle x, y \rangle = \frac{1}{4}(\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2)$$

Dans le cas complexe le produit hermitien est défini par

$$\langle x, y \rangle = \langle x, y \rangle_1 + i\langle x, iy \rangle_1$$

où

$$\langle x, y \rangle = \frac{1}{4}(\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2)$$

et i est l'unité imaginaire (le nombre complexe identifié au couple de réels (0,1)).

Dans un espace de Hilbert de dimension infinie, le concept habituel de base est remplacé par celui de base de Hilbert qui permet, non plus de décrire un vecteur par ses coordonnées, mais de l'approcher par une suite infinie de vecteurs ayant chacun des coordonnées finies. On est donc au confluent de l'algèbre linéaire et de la topologie. C'est dans le cadre des espaces de Hilbert qu'est développée la théorie de la formulation variationnelle, utilisée dans de nombreux domaines de la physique.

Espaces de Sobolev standards

Si U est un ouvert de \mathbb{R}^n , on note habituellement $W^{k,p}(U)$ l'espace des fonctions :

$$f: U \rightarrow \mathbb{R}$$

qui sont mesurables, k fois dérivables au sens des distributions, et telles que les dérivées successives soient dans $L^p(U)$. ($f \in L^p(U)$ c'est à dire que $(\int_U f^p d\mu)^{1/p} < \infty$)

On appelle espace de Sobolev d'ordre m le sous-espace vectoriel de $L^2(\Omega)$ défini par:

$$H^m(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega), \forall q \leq m, \frac{\partial^q v}{\partial x_1 \dots \partial x_q} \right\}$$

ANNEXE 3 : Nomenclature

HR1, HR2 est Humidité relative

x est l'humidité absolue du bois (kg d'eau / kg bois sec)

ρ_e est la masse volumique de l'eau vapeur ($kg\ m^{-3}$)

$f(\rho_e)$ est l'humidité absolue du bois en équilibre thermodynamique avec l'eau vapeur de masse volumique ρ_e

ka est une conductance volumique de transfert (s^{-1})

ρ_B est la masse volumique du bois anhydre ($kg\ m^{-3}$)

φ est le flux massique volumique d'eau transférée ($kg\ s^{-1}\ m^{-3}$)

m_B est la masse de l'échantillon anhydre (kg)

S est la section droite de l'échantillon (m^2)

D_A est le coefficient de diffusion de l'eau adsorbée ($m^2\ s^{-1}$)

D_v est le coefficient de diffusion de l'eau vapeur ($m^2\ s^{-1}$)

D^* est le coefficient de diffusion de l'eau adsorbée ($m^2\ s^{-1}$)

e est l'épaisseur en (mm)

ρ est la masse volumique du bois anhydre ($kg.m^{-3}$)

C_p est la chaleur spécifique ($JKg^{-1}K^{-1}$).

λ est la conductivité thermique ($Wm^{-1}K^{-1}$).

T est La température en (K).

H_p est L'enthalpie massique de la réaction (JKg^{-1}).

ρ_r est La masse volumique des composants chimiques réactifs ($kg.m^{-3}$)

α est le coefficient de diffusion thermique ($m^2\ s^{-1}$)

m_{A1} est la masse de la fraction A_1 (kg)

m_{A2} est la masse de la fraction A_2 (kg)

m_{A3} est la masse de la fraction A_3 (kg)

m_{C2} est la masse du solide C_2 (kg)

ρ_{A1} est la masse volumique de la fraction A_1 (kg m^{-3})

ρ_{A2} est la masse volumique de la fraction A_2 (kg m^{-3})

ρ_{A3} est la masse volumique de la fraction A_3 (kg m^{-3})

ρ_{C2} est la masse volumique du solide C_2 (kg m^{-3})

α_1 est la fraction massique de A_1 (kg/kg)

α_2 est la fraction massique de A_2 (kg/kg)

α_3 est la fraction massique de A_3 (kg/kg)

γ_2 est la fraction massique de C_2 (kg/kg)

ΔH_1 est l'enthalpie de la réaction 1 (KJ/mol)

ΔH_2 est l'enthalpie de la réaction 2 (KJ/mol)

$K1$ est la constante de la réaction 1 (s^{-1})

$K2$ est la constante de la réaction 2 (s^{-1})

$K01$ est le facteur pré-exponentiel de la constante de la réaction 1 (s^{-1})

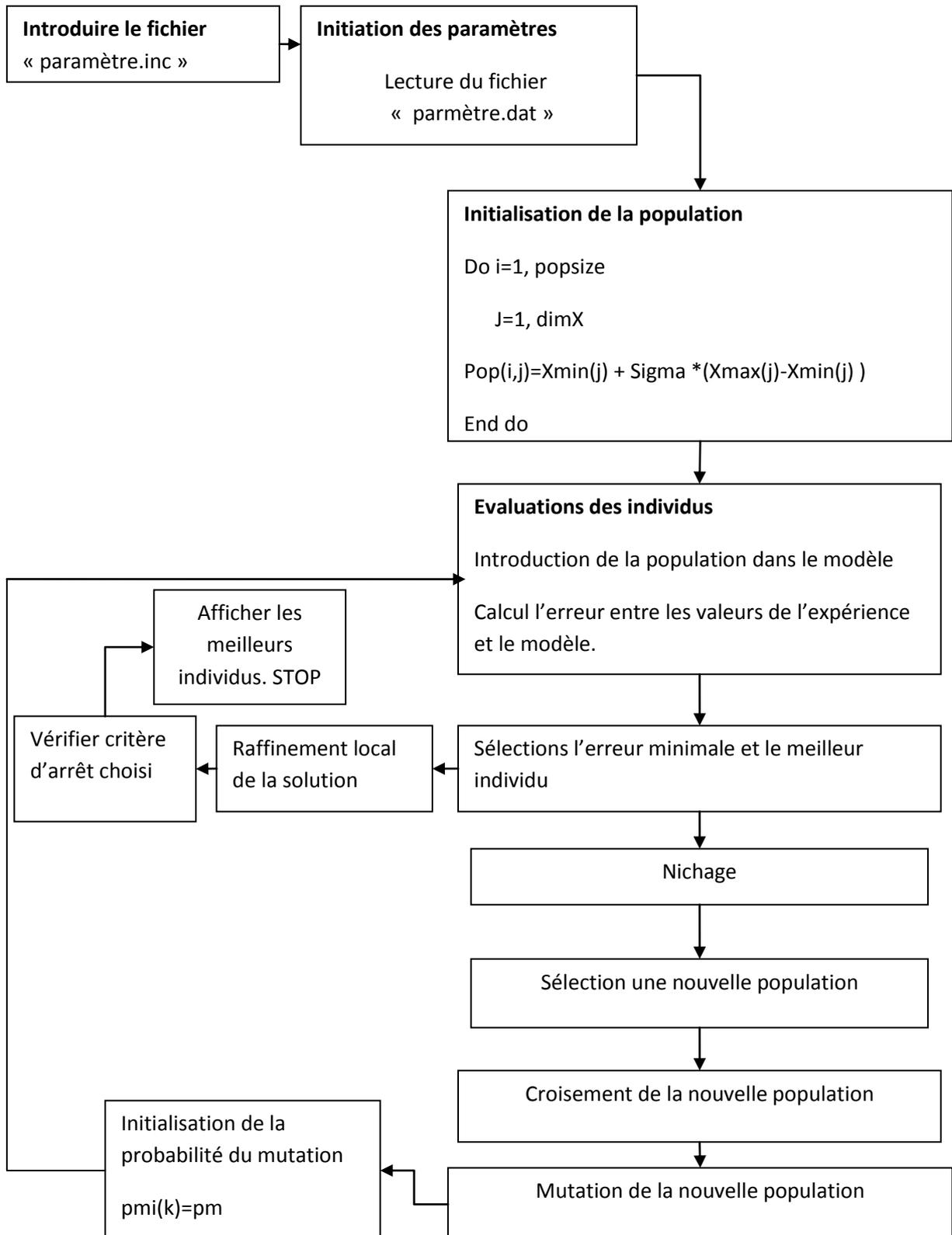
$K02$ est le facteur pré-exponentiel de la constante de la réaction 2 (s^{-1})

$Ea1$ est l'énergie d'activation de la constante de la réaction 1 (KJ/mol)

$Ea2$ est l'énergie d'activation de la constante de la réaction 2 (KJ/mol)

ANNEXE 4 : Algorithme Génétique

Dans cette annexe on va décrire le diagramme de l'algorithme génétique utilisé et données quelques explications :



Nichage : le but est de calculer le coefficient $mx(k)$ pour utiliser dans la sélection de la population

Do $k=1, \text{popsize}$; $J=1, \text{dimX}$

$$X(j)=\text{pop}(k,j)$$

End do

$$dxy=0.0$$

Do $i=k+1, \text{popsize}$

Do $j=1, \text{dimx}$

$$Y(j)=\text{pop}(i,j)$$

$$q1=1/q$$

$$d=\frac{1}{\text{dimX}} \sum_{i=1}^{\text{dimX}} \left| \frac{X(i)-Y(i)}{X_{\max}(i)-X_{\min}(i)} \right|^{q1}$$

si $d < \text{sigmaniche}$ alors

$$sh=1-(d/\text{sigmaniche})^{\text{alphaniche}} \quad \text{si non}$$

$$sh=0.0$$

$$dxy(k,i)=dxy(i,k)=sh$$

end do

end do

do $i=1, \text{popsize}$

$$mx(k)=mx(k)+dxy(k,i) \quad \text{end do si } mx(k)=0 \text{ alors on pose } mx(k)=1 \text{ enddo}$$

fin de la fonction de nichage

La Sélection

Do $k=1, \text{popsize}$

$$\text{fitnesspop}(k) = \text{fitnesspop1}(k) / \text{mx}(k) \quad (1)$$

fitnesspop1 c'est la meilleure fitness pour la population précédente,

repérage du meilleur individu dans la population précédente pour une meilleure fitness,

$$z = \text{fitnesspop1}(1)$$

si $\text{fitnesspop}(k) < z$ alors $k = k_{\text{best}}$, $z = \text{fitnesspop}(k_{\text{best}})$ et de $i=1, \text{dim}X$, $\text{solution}(i) = \text{pop}(k_{\text{best}}, i)$

repérage du meilleur individu dans la population précédente pour une fitness minimum par rapport à la nouvelle fitness voir (1),

$$z = \text{fitnesspop}(1)$$

$$k = 1$$

si $\text{fitnesspop}(k) < z$ alors $k = k_{\text{min}}$, $z = \text{fitnesspop}(k_{\text{min}})$, $z_{\text{min}} = \text{fitnesspop}(k_{\text{min}})$

repérage du meilleur individu dans la population précédente pour une fitness maximum par rapport à la nouvelle fitness voir (1),

$$z = \text{fitnesspop}(1)$$

$$k = 1$$

si $\text{fitnesspop}(k) > z$ alors $k = k_{\text{max}}$, $z = \text{fitnesspop}(k_{\text{max}})$, $z_{\text{max}} = \text{fitnesspop}(k_{\text{max}})$

Calcul le coefficient a

Si $z_{\text{max}} - z_{\text{min}} \neq 0$ alors $a = 1 / (z_{\text{max}} - z_{\text{min}})$ sinon $a = 1$

Fitness varie entre la population précédente et la nouvelle par la formule suivante :

Do $k=1, \text{popsize}$; $\text{fitnesspop}(k) = 2 - (\text{fitnesspop}(k) - z_{\text{min}}) * a$

On a fait un scaling constant avec un 'scaling = 'xexp' donc on a :

$$\text{fitnesspop}(k) = \text{fitnesspop}(k) * \text{dexp}(\text{scal} * \text{fitnesspop}(k))$$

$$\text{sumfitness} = \sum_{k=1}^{\text{popsize}} \text{fitnesspop}(k)$$

$$\text{probpop}(k) = \text{fitnesspop}(k) / \text{sumfitness}$$

La Sélection suite :

on a choisi la sélection par la roulette stochastique:

*do k=1, popsize ; probpop(k)=probpop(k)*dfloat(popsiz)*

ni(k)=INT(probpop(k)) ; probpop(k)=probpop(k)-ni(k)

end do

nrs=0

do k=1, popsize

do i=1,ni(k)

nrs=nrs+1

indic(nrs)=k

end do

end do

si nrs= popsize alors la selection de la nouvelle population

do k=1, popsize ; do i=1,dimx

newpop(k,i)= pop(indic(k),i)

enddo

newfitness=fitnespopl(indic(k))

enddo

sinon

proba= $\sum_{k=1}^{popsiz}$ probpop(k)/(dfloat(popsiz - nrs))

La sélection suite :

Do $k = nrs + 1, \text{popsize}$

vérification de la proba est ce qu'il est entre 0 et 1 si oui

$j = j + 1$

$i = 1$

si probpop < proba alors $i = i + 1$ end do

$nrs = nrs + 1$

$\text{indic}(nrs) = i$

enddo

do $k = 1, \text{popsize}$; *do* $i = 1, \text{dimx}$

$\text{newpop}(k, i) = \text{pop}(\text{indic}(k), i)$

enddo

$\text{newfitness}(k) = \text{fitnesspop1}(k)$

enddo

vérification qu'on a toujours le meilleur individu:

$z = \text{newfitness}(1)$

si $\text{newfitness}(k) < z$ alors $k = k_{\text{best}}$ et $z = \text{newfitness}(k_{\text{best}})$

si ce n'est pas le cas, on tire un individu au hasard :

$i = \text{INT}(x * \text{dfloor}(\text{popsize}) + 1)$ avec $0 < x < 1$ choisie arbitrairement

do $j = 1, \text{dimX}$

$\text{newpop}(i, j) = \text{pop}(k_{\text{best}}, j)$

$\text{newfitness}(i) = \text{fitnesspop1}(k_{\text{best}})$

on passe de la génération courante à la nouvelle génération

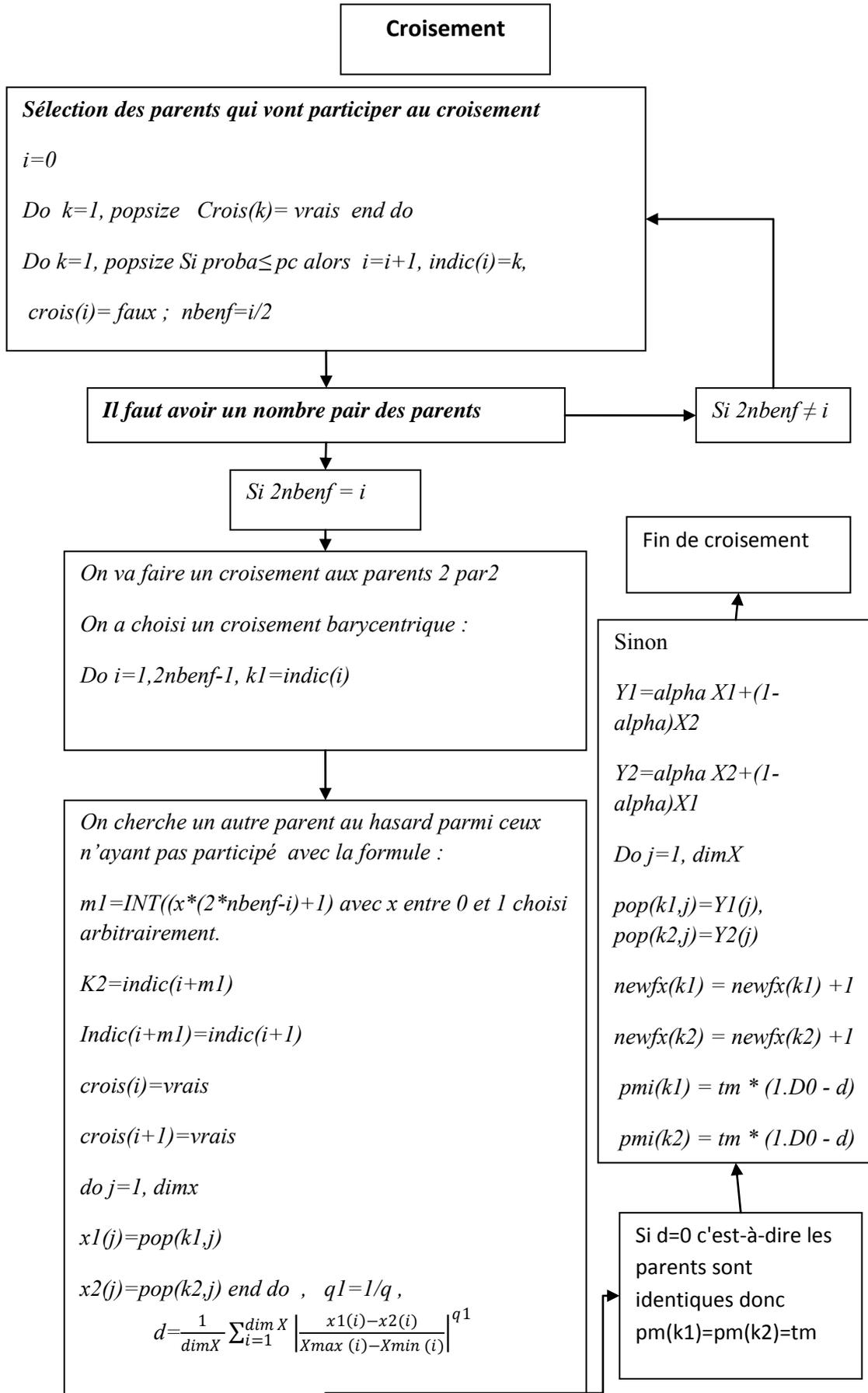
do $k = 1, \text{popsize}$

do $i = 1, \text{dimx}$

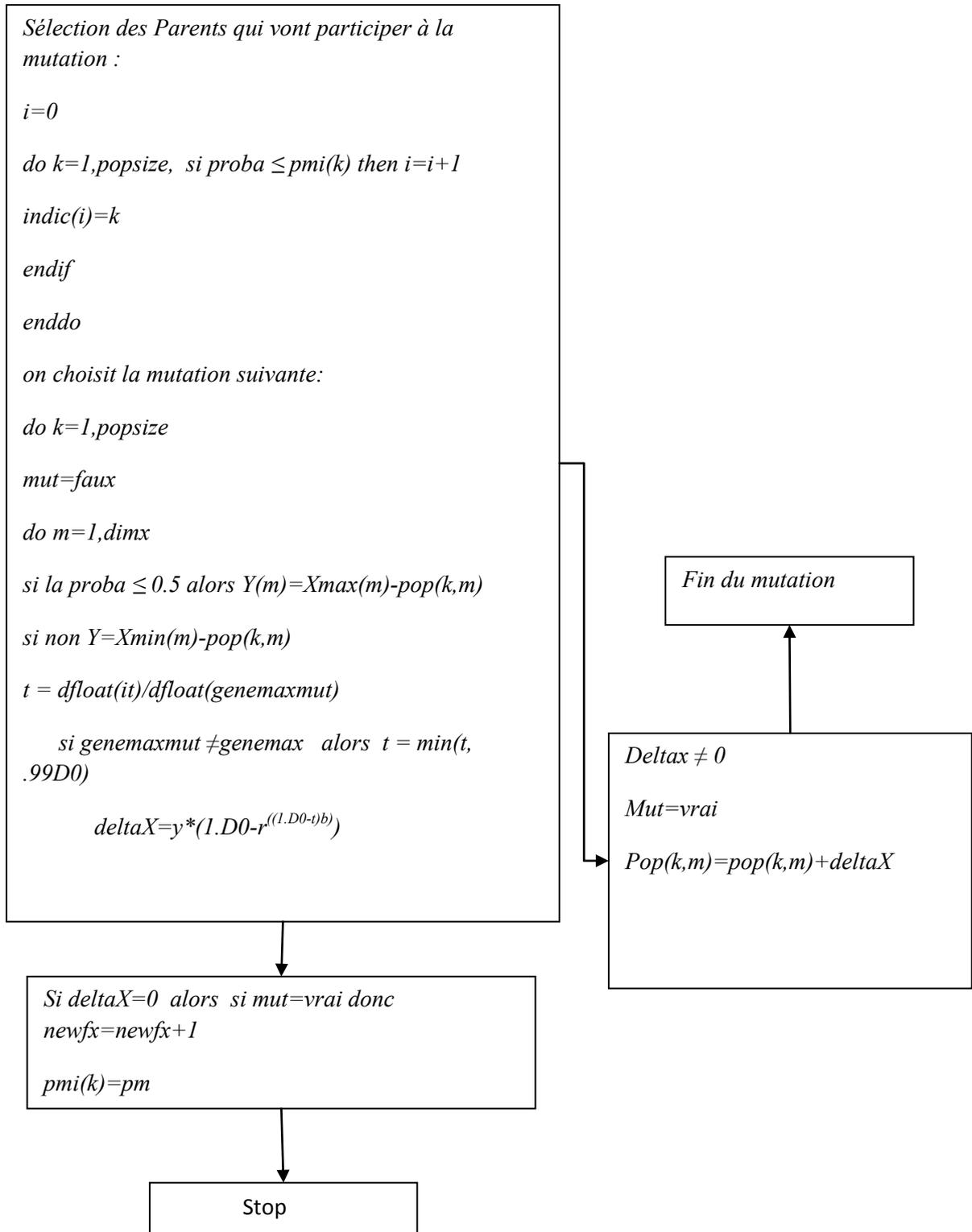
$\text{pop}(k, j) = \text{newpop}(k, i)$

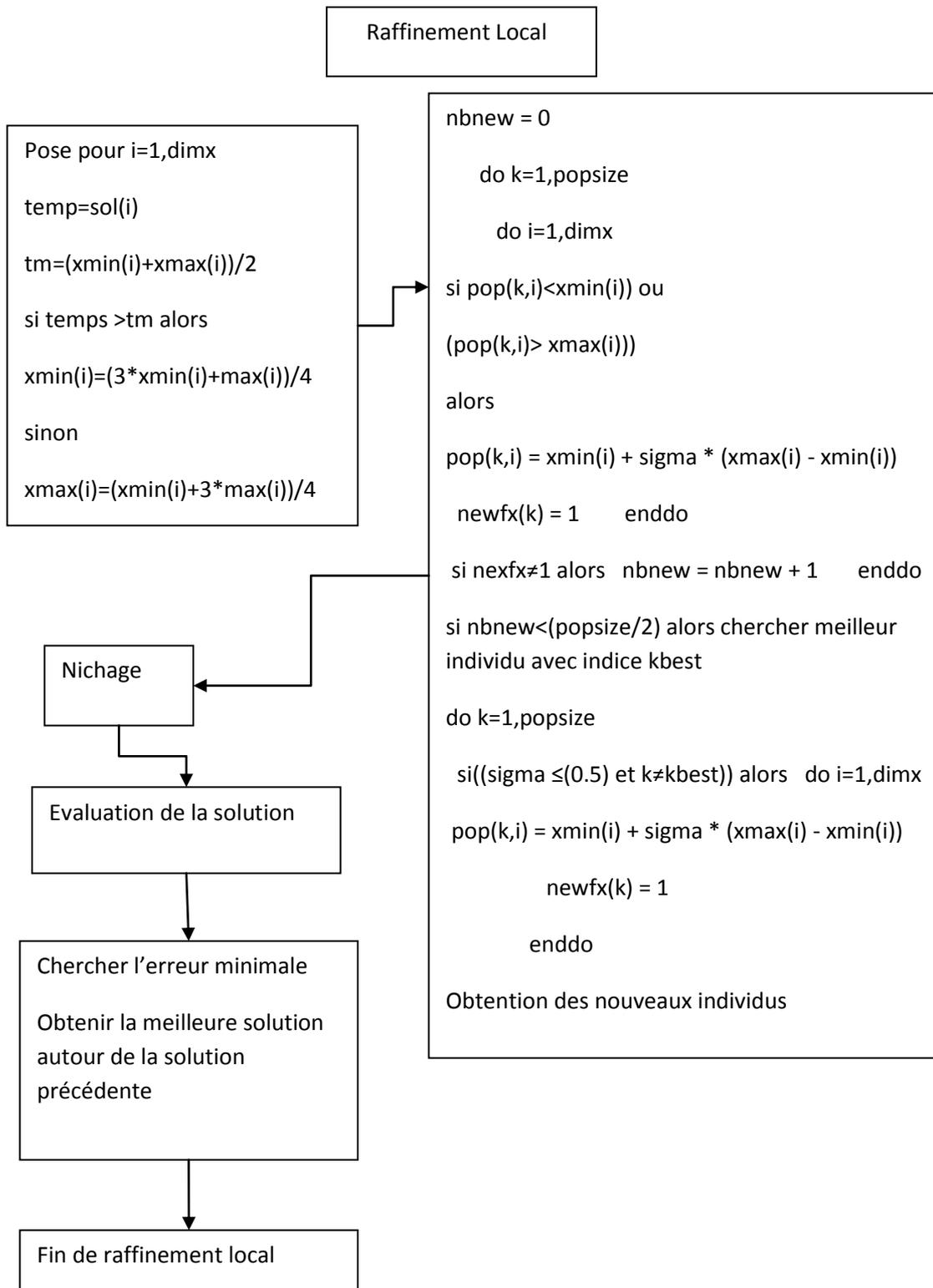
enddo

$\text{fitnesspop1}(k) = \text{newfitness}(k)$ *endo fin de la procédure de la sélection*



Mutation





Le fichier parameter.inc

integer popsize, dimx, genemax,genemaxmut

parameter(popsiz=10,dimx=2,genemax=5000,genemaxmut=6500)

Dans ce fichier il y a 4 paramètres à régler :

popsiz : La taille de la population de chaque génération.

dimx : La dimension de l'espace de recherche.

genemax : Le nombre maximum de générations avant l'arrêt du programme.

genemaxmut : C'est un paramètre qui règle la décroissance de la force de mutation.

Le fichier param.dat

```
&param
affichecran=1,
savefich=2,
typeconv='solfx',
solx=1d-1,77
solfx=1D-5,
eps=1.D-40,
xmin=15d-2,50
xmax=3d-1,180
pc = .6D0,
typec='baryal',
alpha= 0.3D0,
nbmultip=2,
pm =.005D0,
tm=.95D0,
q=5,
typem='nonun2',
b=25.D0,
nbstag=20,

RafLoc='NOrafloc',
nbtot=50,
kb=.04D0,
types='rs',
elit=1,
niche=1,

sigmaniche=.95D0,
alphaniche=1.D0,
scaling = 'sigma',
scal = 1.,
scalingvar =
'xexp',
scalvar1 = 1.,
scalvar2 = 2.,
scalvarp = .5,
restartini=1,
restartfin=5000,
initpop=3,
&end
```

Affichage : Le paramètre `affichecran` peut prendre les valeurs 0, 1, 2 et 3. A chaque niveau des informations supplémentaires sont ajoutées.

- 0 : aucun affichage
- 1 : affichage de la dernière génération et de la meilleure solution.
- 2 : on affiche la valeur de la meilleure solution trouvée chaque génération.
- 3 : la génération initiale est affichée.

Sauvegarde : Le paramètre `savefich` peut prendre les valeurs 0, 1 et 2.

- 0 : aucune sauvegarde. Sans intérêt si en plus vous utilisez `affichecran=0`
- 1 : sauvegarde de la meilleure solution (fichier `resultat.dat`) et de l'état des calculs (fichier `restart.dat`) pour une reprise éventuelle des calculs.
- 2 : sauvegarde de la meilleure solution à chaque génération (fichier `bestx.dat`) et de la valeur de la fonction correspondante (fichier `bestfx.dat`).

Tests d'arrêt : Deux types de tests d'arrêt sont possibles. Quand vous voulez faire des tests le programme peut s'arrêter soit lorsque la solution (`solx`) est atteinte soit lorsque la valeur du minimum de f (`solfx`) est atteinte. Dans le cas général le programme s'arrête quand le nombre d'itérations maximal (`restartfin`) est atteint.

- Solution atteinte : mettre le paramètre `typeconv='solx'`, , `solx=x1; ... ; xdimx`, et `eps=ε`, où (`x1; ... ; xdimx`) sont les coordonnées de la solution et où ε définit la précision.
- Valeur du minimum atteinte : mettre le paramètre `typeconv='solfx'`, `solfx=minimum`, et `eps=ε`, où `minimum` est la valeur du minimum de la fonction f .
- Cas général : mettre le paramètre `typeconv=""`, et `restartfin=iterfin`, où `iterfin` est la génération à laquelle le programme doit s'arrêter qui doit être `iterfin = genemax`.

Plus précisément `restartini=iterdebut`, et `restartfin=iterfin`, définissent la génération du début et la génération de la fin du programme. Pour un premier calcul on doit avoir `restartini=1`, . Dans ce cas la population initiale est générée aléatoirement dans l'espace de recherche $E = [x_{min1}; x_{max1}] \times \dots \times [x_{mindimx}; x_{maxdimx}]$.

Pour reprendre un ancien calcul arrêté à une génération $gen1 < genemax$ utilisez `restartini=gen1`, et `restartfin=iterfin`, avec $gen1 < iterfin \cdot genemax$.

Dans ce cas le calcul sera repris avec la population qui sera relue dans le fichier `restart.dat` créée après le premier calcul. On note qu'un calcul fait en deux temps n'est pas toujours le même qu'un calcul fait en une seule étape vu que le fichier `restart.dat` contient uniquement la population à laquelle le calcul doit reprendre mais ne contient pas d'autres informations.

Ce détail n'a pas beaucoup d'importance sauf dans le cas où on fait des tests de performances ou dans le cas où on cherche à reproduire parfaitement un ancien calcul.

Initialisation de la population : La population initiale est générée aléatoirement dans le cas général. Quand le paramètre $initpop=m$, avec $0 < m < dimx$, le programme va lire m individus dans le fichier `initx.dat` qui vont remplacer m individus de la population aléatoire.

Dans ce cas vous devez introduire ces m individus dans le fichier `initx.dat` en y ajoutant une coordonnée par ligne. Ceci peut être utile si on a introduit des individus qui semblent proches de la solution. Mais attention à la convergence prématurée qui peut être provoquée par un individu très bon (celui que vous ajoutez) par rapport aux autres.

Espace de recherche : l'espace de recherche est défini par les bornes $xmin=xmin1, \dots, xmindimx$, et $xmax=xmax1, \dots, xmaxdimx$. Le programme ne prend en compte aucun autre type de contraintes. Une façon simple de les prendre en compte est de pénaliser fortement une violation des contraintes dans la fonction coût f .

C'est loin d'être la meilleure façon de prendre en compte les contraintes mais, faute de mieux, c'est une façon qui marche dans beaucoup de cas de contraintes simples.

Croisement : Les paramètres correspondant à l'opérateur de croisement sont pc , $typec$, $alpha$, $nbmultip$ et tm .

La probabilité d'appliquer un croisement à un parent est donnée par pc .

Quatre types de croisement sont possibles :

- $typec='bary'$, : croisement barycentrique avec le paramètre $alpha=\alpha$, définissant les poids α et $(1 - \alpha)$.
- $typec='baryal'$, : croisement barycentrique où le coefficient α est choisi aléatoirement dans l'intervalle $[0; 1]$.
- $typec='multip'$, : croisement multi-points avec le nombre de points de coupure donné par $nbmultip=m$, où m est un entier $0 < m < dimx$.
- $typec='sbx'$, : croisement dit SBX avec le paramètre $alpha=\alpha$ définissant la forme de la loi de probabilité utilisée. Prendre $\alpha = 1$ ou 2 par exemple.

Dans le cas où les deux parents sont très proches, la probabilité de leur mutation (voir partie mutation ci-dessous) est augmentée et devient égale à tm . Le but est de muter les deux enfants générés qui ressemblent beaucoup à leur parents.

Mutation : Les paramètres de cet opérateur sont pm , $typem$, b , $nbstag$ et kb .

La probabilité d'appliquer une mutation à un individu est donnée par pm .

Trois types de croisement sont possibles :

- `typem='varnor'`, : mutation gaussienne avec un écart type $\frac{3}{4}$ qui décroît vers zéro au cours des générations.
- `typem='nonuni'`, : mutation non-uniforme (voir [1, (Section 1.3.2.4)] et [3] pour la définition de cette mutation). Cette mutation est réglée par le paramètre `b`. Une petite valeur de `b` (»1.) favorise l'exploration et une valeur élevée accélère la recherche locale.
- `typem='nonun2'`, : c'est une variante de la mutation non-uniforme qui souvent donne de meilleurs résultats.

Echapper aux minima locaux : dans le cas des mutations de type `nonuni` et `nonun2` les deux paramètres `nbstag` et `kb` permettent de sortir dans certains cas des minima locaux dans lesquels le programme peut se trouver piégé. En effet, si aucune amélioration de la meilleure solution n'est réalisée après `nbstag` générations, la valeur du paramètre `b` devient, à cette génération, $kb \cdot b$ avec $kb < 1$. Ceci a pour effet d'augmenter la force de mutation et de favoriser une exploration de l'espace de recherche.

Recherche locale : définie par les paramètres `RafLoc` et `nbtot`. Cette procédure est peu efficace

et déclenche souvent une convergence prématurée. A éviter en laissant `RafLoc='NOrafloc'`, .

Sélection : deux types de sélections sont possibles.

- `types='roulet'`, : sélection par roulette.
- `types='rs'`, : sélection par roulette stochastique.

Elitisme : activé si `elit=1`, et désactivé si `elit=0`, . L'élitisme consiste à assurer la décroissance de la meilleure solution à chaque génération. En pratique, si à une génération n donnée aucun individu n'est meilleur que la solution de la génération précédente $n - 1$, celle-ci est transférée à la génération n .

Nichage : cette technique permet de favoriser l'exploration spatiale en pénalisant les individus qui se trouvent dans la même région de l'espace. Les paramètres sont `niche`, `q`, `sigmaniche` et `alpha`.

- `niche=1`, : pour activer cette technique et 0 pour la désactiver.
- `q=p`, : pour utiliser la norme $jj \zeta jjp$ dans le calcul de la distance.
- `sigmaniche= σ` : doit être < 1 .
- `alpha= α` , : pour régler l'intensité du nichage. Avec α petit ($\alpha < 1$) le nichage est peu intense et avec α grand le nichage est très intense.

Scaling : Les paramètres sont `scaling`, `scal`, `scalingvar`, `scalvar1`, `scalvar2` et `scalvarp`. Les deux premiers paramètres pour le premier scaling (5 possibilités) et 4 derniers pour un second scaling variable (facultatif) en fonction du temps (5 possibilités). Le scaling qui donne les meilleurs résultats est le σ -scaling que l'on peut choisir par `scaling='sigma'`, . Les autres scaling possibles sont `exp` (en `ex`), `xexp` (en `xex`), `log` (en `log(1+x)`) et `puiss` (en `xscal`). Ces mêmes scaling sont adaptés pour le scaling variable.

BIBLIOGRAPHIE

- Alves, S. S. and Figueiredo J. L.**, A model for pyrolysis of wet wood. *Chemical Engineering Science* 44 (12), pages: 2861-2869. 1989
- Babu V.B. and Chaurasia A.S.**, modelling, simulation and estimation of optimum parameters in pyrolysis of biomass, energy conversion and management, vol 44, pages:2135-2458. 2003
- Bäck T.**, Evolutionary Algorithms in Theory and Practice. New-York:Oxford University Press. 1995
- Bäck Th., Fogel D.B. and Michalewicz Z.**, editors. Handbook of Evolution- ary Computation. , Oxford University Press. 1997
- Bäck T., Hammel U. et Schwefel H.P.** , Evolutionary Computation: Comments on the History and Current State, *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* , vol. 1, n 1, pages: 3-17. avril 1997
- Balachandran M.**, *Knowledge-Based Optimum Design, Topics in Engineering Vol. 10* Southampton: Computational Mechanics Publications, 1993
- Bamford C.H., Crank J. et Malan D.H.**, The combustion of wood Part 1. proc. Of the Cambridge philosophical, pages: 116-182. 1946
- Banzhaf W., Nordin P., Keller R.E., and Francone F.D.**, Genetic Programming — An Introduction On the Automatic Evolution of Computer Programs and Its Applications. Morgan Kaufmann. 1998
- Basilico C., and Martin M.**, Approche experimentale des mecanismes de transfert au cours du sechage convectif a haute temperature d'un bois resineux, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 27, Issue 5, pages : 657-668. May 1984
- Beasley.D., Bull. D.R. et Martin R.R.**, An Overview of Genetic Algorithms: Part 1, Fundamentals *University Computing* , vol. 15, n 2, pages. 58-59, 1993a
- Beasley D., Bull. D.R. et Martin R.R.**, An Overview of Genetic Algorithms: Part 2, Fundamentals *University Computing*, vol. 15, n 4, pages: 170-191. 1993b
- Bilbao R. et Anal J.**, Modelling of the pyrolysis of wet wood, *Appi. Pyrolysis* 36, pages: 81-97. 1996
- Bilbao, R., Millera A.**, Kinetics of weight loss by thermal decomposition of xylan and lignin. Influence of experimental conditions, *Thermochimica Acta* 143, pages: 137-148. 1989
- Bonnans J. F., Gilbert J. C., Lemaréchal C., and Sagastizabal. C.** *Optimisation Numérique : aspects théoriques et pratiques.* , Springer, Berlin. 1997
- Broido A. and Weinstein M.** Low temperature isothermal pyrolysis of cellulose. *Combustion Science and Technology* 3, pages. 285-296. 1971
- Bryden K.M. and Hagge M.J.**, Modeling the impact of shrinkage on the pyrolysis of dry biomass, *Chemical Engineering Science* 57, pages: 2811-2823. 2002
- Bryden K.M., Ragland K.W. and Rutland C.J.**, Modeling thermally thick pyrolysis wood, biomasse and bioenergy, pages: 41-55. 2002

- Chan W.C.R.**, Analysis of chemical and physical process during the pyrolysis of large biomass pellets, PhD thesis, University of Washington. 1983
- Chen.Y., Choong.E.T. et Wetzel.D.M.**, A Numerical Analysis technique to Evaluate the Moisture-Dependent Diffusion Coefficient on Moisture Movement During Drying, *Wood and Fiber science*, 28 (3), pages 338-345. 1996
- Ciarlet P.G. and Lions J.L.**, Hand Book of Numerical Analysis, volume 1 North- Holland. 1990
- Ciarlet, P.G.** *Introduction à l'analyse numérique matricielle et l'optimisation* Paris : Masson. 1990
- Coello C. A., Van Veldhuizen D. A., and Lamont G. B.**, Evolution-ary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems. Kluwer Academic Publishers. 2002
- Cramer. N.J.**, A representation for the adaptive generation of simple sequential programs. In J. J. Grefenstette, editor, Proceedings of the 1st International Conference on Genetic Algorithms, pages: 183–187. Laurence Erlbaum Associates. 1985
- Dautray R. et Lions J.L.**, Analyse Mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques, Masson. 1985
- Davis L. Ed.**, *Handbook of Genetic Algorithms*, New York: Van Nostrand, Reinhold. 1991
- Deb K.**, Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms. JohnWiley. 2001
- DeJong K. A.**, Are genetic algorithms function optimizers ? In R. Manner and B. Manderick, editors, Proceedings of the 2nd Conference on Parallel Problems Solving from Nature, pages 3–13. North Holland, 1992.
- Dessaies J.L.**, *L'ordinateur génétique*, Paris: Hermès, 1996
- Desrosiers R.E. et Lin R.J.**, A moving boundary model of biomass pyrolysis, solar energy, vol 33, N°2, pages : 187-196. 1984
- Di Blasi, C.**, Comparison of semi-global mechanisms for primary pyrolysis of lignocellulosic fuels, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 47(1), pages: 43-64.1998
- Di Blasi C.**, A transient, Two-dimensional model of biomasse pyrolysis, In proc "Developments in thermochemical biomass conversion", Bridgwater A.V, Boocock D.G.B, Blackie academic and professional pub, Glasgow, UK, pages: 147-160. 1997
- Di Blasi C.**, Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis,progress in Energy and Combustion Science,vol 34, pages: 47-90. 2008
- Di Blasi C. et Branca C.**, Kinetics of primary product formation from wood pyrolysis, *Industrial.&Engineering Chemistry Research*, vol 40, pages: 5547-5556. 2001
- Dunlap F.**, US Dept. Agr. Forest, Serv. Bill. n° 110 , in Stamm A. J. 1964, 1912.
- Ebeling W., Rechenberg I., and Schwefel H.P.**, editors, Proceedings of the 4th Conference on Parallel Problems Solving from Nature, number 1141 in LNCS, 1996, pages: 366–375. Springer Verlag.

Comment l'ordinateur transforme les sciences, Les Cahiers de Science et Vie, n°53. octobre 1999

Ebner M., Evolutionary design of objects using scene graphs. In C. Ryan et al., editor, Proc. EuroGP. 2003

Eiben A.E. and Smith J.E., Introduction to Evolutionary Computing. Springer Verlag. 2003

Fogel. D. B., Evolutionary Computation. Toward a New Philosophy of Machine Intelligence. IEEE Press, Piscataway, NJ. 1995

Figueiredo J.L., Valenzuela C, Bernalte., AEncinar., J.M., Pyrolysis of holm-oak wood: influence of temperature and particle size *Fuel, Volume 68, Issue 8, Pages 1012-1016, 1989*

Fogel D.B., Evolutionary Computing: The Fossile Record. IEEE Press. 1998

Fogel L. J., Owens A. J. and Walsh M. J., Artificial Intelligence through Simulated Evolution. New York: John Wiley. 1966

Fonseca C.M. et Fleming P.G., Genetic Algorithms for Multiobjective Optimization Formulation, Discussion and Generalization, in *Genetic Algorithms : Proceedings of the Fifth International Conference* , S. Forrest, editeur, San Mateo, CA : Morgan Kaufmann. juillet 1993

Fonseca C.M. et Fleming P.J., An Overview of Evolutionary Algorithms in Multiobjective Optimization, *Evolutionary Computation*, vol. 3, n 1, pages. 1-16. 1995

Forest Products Laboratory, Forest Service, U. S. Departement of agriculture, Wood Hand book:wood as an engineering material, Handbook n°72, Washington DC-USA, 1974

Goldberg D., The Design of Innovation: Lessons from and for Genetic and Evolutionary Algorithms. MIT Press. 2002

Goldberg D. E., Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. Addison Wesley. 1989

Goldberg D.E., Algorithme génétique, exploration optimisation et apprentissage automatique. Paris Addison-Wesley. 1994

Grioui N., modélisation de la carbonisation d'une particule cylindrique de bois- application au bois d'olivier, Chapitre quatre dans la thèse. 2004

Grioui N., thermogravimetric analysis and kinetics modeling of isothermal carbonization of olive wood in inert atmosphere, / *thermochimica Acta*, pages: 23-30. 2006

Grønli M. et Melaaen M.C., mathematical model for wood pyrolysis-comparison of experimental measurements with model predictions, energy and fuel, vol 14, pages: 791-800. 2000

Hansen N., Müller S., and Koumoutsakos P., Reducing the Time Complexity of the Derandomized Evolution Strategy with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES). *Evolution Computation*, 11(1). 2003

- Hansen N. and Ostermeier A.**, Adapting arbitrary normal mutation distributions in evolution strategies: The covariance matrix adaption. In Proceedings of the Third IEEE International Conference on Evolutionary Computation, pages: 312–317. IEEE Press. 1996
- Hansen N. and Ostermeier A.**, Completely derandomized self-adaptation in evolution strategies. *Evolutionary Computation*, 9(2):159–195. 2001
- Holland J. H.** *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, Ann Arbor. 1975
- Kansa E.J., Perlee H.E. et Chaiken R.F.**, Mathematical Model of wood pyrolysis including internal forced convection, combustion and flame, vol 29, pages: 311-324. 1977
- Kifani-Sahban K., Belkbir L. et Zoulalian A.**, Détermination des paramètres cinétiques de la pyrolyse lente de l'eucalyptus Marocain, pages : 33-40. Mai 1996
- Klose W. and Schinkel A.**, Measurement and modeling of the development of pore size distribution of wood during pyrolysis, / *Fuel Processing Technology* 77–78, pages: 459–466. 2002
- Koufopoulos C.A., Maschio G. and Lucchesi A.**, Kinetic modelling of the pyrolysis of biomasse and components, *Canadian Journal of chemical Engineering*, vol 67, pages: 75-84. 1989
- Koufopoulos C.A., Papayannakos N., Maschio G. et Lucchesi A.**, Modelling of the pyrolysis of biomass particles :studies on kinetics, thermal and heat transfer effects, *Canadian journal of Chimical Engineering*, 69 , pages: 907-915. 1991
- Kung H.C.**, A mathematical model of wood pyrolysis, *Combution and flame* vol. 18, pages : 185-195. 1972
- Koza J. R.**, *Genetic Programming: On the Programming of Computers by means of Natural Evolution*. MIT Press, Massachusetts. 1992
- Koza J. R.**, *Genetic Programming II: Automatic Discovery of Reusable Programs*. MIT Press, Massachussets. 1994
- Koza J. R.**, Human-competitive machine intelligence by means of genetic algorithms. In L. Booker, S. Forrest, M. Mitchell, and R. Riolo, editors, *Festschrift in honor of John H. Holland*, pages: 15–22. Ann Arbor, MI:Center for the Study of Complex Systems. 1999
- Larfeldt J., Leckner B. et Melaaen M.C.**, Modelling and measurements of pyrolysis of large wood particles, *fuel*, vol 79, pages: 1637-1643. 2000
- Legay M.**, *L'expérience et le modèle, un discours sur la méthode*, INRA Editions, Paris. 1997
- Maa P.S. et Bailie R.C.**, influence of particle sizes and environmental conditions on high temperature pyrolysis of cellulosic material-I(theoretical), *combustion science and technology*, vol 7, pages: 257-269. 1973
- Maclean J.D.**, Heating, Piping and air conditioning, 13, pp.380. In: Stamm, 1964,1941

- Martin G.**, Pyrolyse- gazéification du bois- Aspects physico-chimique. Thèses de doctorat, Institut National Polytechnique de lorraine. 1984
- Menozzi R. et Piazzi A.**, HEMT and HBT Small-Signal Model Optimization Using a Genetic Algorithm, *EDMO'97*, Londres, pages : 13-18, 24. 25 novembre 1997
- Méchi R.**, Modélisation des transferts radiatifs dans un incinérateur des émissions polluantes de la pyrolyse du bois, pages: 697–708. 2004
- Michalewicz. Z.**, *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs* Berlin: Springer-Verlag, seconde édition. 1994
- Michalewicz Z.**, *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*. Springer Verlag, New-York, 1st-3rd édition. 1992-1996
- Michalewicz Z.** *Genetic algorithms + data structure = evolution programs*. Springer. 1999
- Mitchell M.** An Introduction to Genetic Algorithms. MIT Press. 1996
- Moosburger R., Kostrzewa C., Fischbeck G. et Petermann K.**, Shaping the Digital Optical Switch Using Evolution Strategies and BPM, *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 9, n°11, pages: 1484-1486. novembre 1997
- Morten G.Gronli, Morten C. Melaaen** Mathematical Model for wood Pyrolysis-Comparison Experimental Measurements with Model prediction, *Energy and fuel*, vol 14, pages:791-800. 2000
- Mouchot N. et Zoulalian A.**, Détermination des caractéristiques diffusionnelles de transfert de masse d'un soluté gazeux adsorbable dans un milieu poreux, 9^{ème} Congrès de la SFGP ; St Nazaire, France, pages : 307-314. 9-11 septembre 2002
- Nougier J.P.**, *Méthodes de calcul numérique*. Paris: Masson. 1987
- Pazy A.**, *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*, Springer-Verlag, New York. 1983
- Perre P. et Degiovanni A.**, Simulation par volumes finis des transferts couplés en milieux poreux anisotropes :séchage du bois à basse et à haute température, *Heat Mass Transfer*, Vol.33 ,No.11, pages : 2463-2478. 1990
- Peters B. et Bruch Ch.**, Drying and of pyrolysis of wood particles: experiments and simulation, *Journal of analytical and applied pyrolysis*, pages: 1-18. 2002
- Petrissans A., Pétrissans M. and Zoulalian A.**, Modeling of a gas catalytic chemical reaction, taking into account the diffusion in the adsorbed phase, *117, 1*, pages: 31-38. 2006
- Piguet C. et Hügli H.**, *Du zéro à l'ordinateur*, presse polytechnique et universitaire romande, ISBN-10: 2880744695, ISBN-13: 978-2880744694. Mars 2004
- Popper K.** Toute vie est résolution de problèmes, actes sud, 1997

- Radcliffe N. J.** Forma analysis and random respectful recombination. In R. K. Belew and L. B. Booker, editors, Proceedings of the 4th International Conference on Genetic Algorithms, pages: 222–229. Morgan Kaufmann. 1991
- Ragland K.W., Aerts D.J. and Baker A.J.**, properties of wood for combustion Analysis, Bioresource Technology, 37, pages: 161-168, 1991
- Rahjohson J. R. and Guyonnet R.**, Experimental study and modelling of the wood retification process. Automatic Control of Food and Biological Process. J. J. Bimbenet, E. Dumoulin and G. Trystam, Elsevier science B.V., pp. 227-235. 1994
- Rath J., Wolfinger M. G., Steiner G., Krammer G., Barontini F. and Cozzani V.**, Heat of wood pyrolysis *Fuel*, Volume 82, Issue 1, pages: 81-9,1 January 2003
- Rechenberg I.**, Evolutionstrategie: Optimierung Technischer Systeme nach Prinzipien des Biologischen Evolution. Fromman-Hozlboog Verlag Stuttgart, 1972
- Reineix A, Eclercy D, Jecko etB**, FDTD/genetic algorithm coupling for antennas optimization , Annales de Télécommunications, vol. 52, n°9-10. 1997
- Renders J.M.**, Algorithmes génétiques et réseaux de neurones. Paris: Hermès. 1995
- Robert A.F. and Clough G.**, Thermal decomposition of wood in an inert atmosphere. 9 Intl; Symposium on combustion, the combustion institute, pages: 158-166. 1963
- Rosen.N.H.**, The influence of External Resistance on moisture Adsorbtion Rates In Wood, Wood and Fiber science, 10(3), pages: 218-228. 1978
- Rousset P.**, Choix et validation expérimentale d'une modèle de pyrolyse le bois traité par haute température: de la micro-particule au bois massif. Thèse de doctorat, ENGREF UHP Nancy1, 2004
- Sadhukhan A.K., Gupta P. et Saha R.K.**, Modelling and experimental studies on pyrolysis of biomass particles, Journal of Analytical and Applied pyrolysis. Vol 81, pages: 183–192. 2008
- Salazar C.M. and Connor M.A.**, Factors influencing the decomposition processes in wood particles during low temperature pyrolysis, in Proc "Research in thermochemical biomass conversion" Bridgwater A.V, Kuester J.L, Elsevier applied science pub, Londres, pages: 164-178. UK 1988
- Sefain, M. Z., S. F. El-Kalyoubi.** Thermal behavior of holo and hemicelluloses obtained from rice straw and bagasse. *Journal of Polymer Science* 23(5), pages. 1569-1577. 1985
- Sefrioui M.**, *Algorithmes Evolutionnaires pour le calcul scientifique. Application la mécanique des fluides et l'électromagnétisme.* PhD theses, Université Pierre et Marie Curie. Avril 1998
- Schoenauer M., Sebag M., Jouve F., Lamy B., and Maitournam H.**, Evolutionary identification of macro-mechanical models. In P. J. Angeline and Jr K. E. Kinnear, editors, Advances in Genetic Programming II, pages: 467–488, Cambridge, MA. MIT Press. 1996

- Schwefel H.P.**, Numerical Optimization of Computer Models. John Wiley & Sons, New-York, 2nd edition. 1995 – 1981
- Shafizadeh F. and Bradbury A. G. W.**, Thermal degradation of cellulose in Air and Nitrogen at low temperature. *pages: 1431-1441. Journal of Applied Polymer Science* 23, 1979
- Siau J.F.**, Wood : influence of moisture on physical properties., Department of Wood Science and Forest Products, Virginia Polytechnic Institute and State University. 1995
- Stamm A.J.**, Wood and cellulose Science. The Ronald press Company, New York, USA, pages: 549. 1964
- Ten Wold .A., Mcnatt.J.D. et Krahn L.**, Thermal properties of wood and wood Panel Products for Use in Buildings. Does/USDA-21697, Oak Ridger National laboratory, USA. In: Ragland et Col. 1991, 1988
- Yeasmin H., Mathews J.F. and Ouyang S.**, rapid devolatilisation of yallourn brown coal at high pressures and temperatures, *Fuel*, vol 78, pages: 11-24. 1999
- Varhegyi, G., E. Jakab**, Is the Broido-Shafizadeh model for cellulose pyrolysis is true? *Energy & Fuel* 8, *pages: 1335-1352.* 1994
- Wales D. J. and Doye J. P. K.**, Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structures of lennard-jones clusters containing up to 110 atoms. *J. Phys. Chem. A*, 101 :5111–5116, 1997
- Wagenaar.B.M., Prins.W. et Van Swaaij W.P.M.**, Flash pyrolysis kinetics of pine wood, *Fuel processing technology*, vol 36, pages: 291-298. 1994
- Wenzel H.**, The chemical technology of wood, Academics Press, New York. 1970
- Whitley D.**, A Genetic Algorithm Tutorial, Technical Report CS-93-103, Sefrioui.M Algorithmes Evolutionnaires pour le calcul scientifique. Application la mécanique des fluides et l'électromagnétisme. PhD theses, Université Pierre et Marie Curie. Avril 1998
- Whitley D.** "A Genetic Algorithm Tutorial" technical Report CS-93-103, Colorado state university, Departement of computer science. 1993
- Zaror C.A. et Pyle D.L.**, Heat transfer and kinetics in the low temperature pyrolysis if solids, *chemical engineering science*, vol 39, pages: 147-158. 1984
- La production de charbon dans le monde en 1973 et 2001**, Extrait des chiffres clés de l'énergie d'après AIE/OCDE, Edition 2004

Résumé : Le mémoire constitue un développement de méthodes numériques de résolution d'équations différentielles de bilans et d'optimisation de paramètres appliqué à des problèmes de transferts simultanés de matière et / ou de chaleur au sein d'un milieu poreux naturel, le bois. En dehors d'une présentation générale des méthodes numériques de résolution d'équations différentielles, d'équations aux dérivées partielles et d'optimisation à n paramètres, certaines de ces méthodes sont développées au niveau de deux procédés physico-chimiques étudiés expérimentalement au sein du LERMAB. La première application porte sur la dynamique du transfert isotherme de l'eau lors du séchage du bois dans son domaine hygroscopique. Les modélisations envisagées permettent de montrer que pour certaines essences de bois, les transferts diffusionnels de l'eau en phase gazeuse et en phase adsorbée ne se font pas nécessairement dans des conditions où l'équilibre thermodynamique entre les deux phases est assuré. La deuxième application porte sur la modélisation de la pyrolyse douce d'avivés du bois chauffés par conduction entre deux plaques dont les températures varient entre 150°C et 240°C. Les courbes donnant la température au sein de l'avivé et la perte de masse sont bien représentées à l'aide des modèles cinétiques et de transfert proposés. Toutefois cette application permet de mettre en évidence les limites des méthodes d'optimisation en présence d'un nombre élevé de paramètres à déterminer dont certains sont couplés.

Mots clés : Modélisation numérique, adsorption, pyrolyse douce, transferts diffusionnels, transfert thermique, optimisation.

Abstract: This thesis is a development of numerical methods for solving differential equations of balance sheets and optimization settings applied to problems of simultaneous transfers of mass and / or heat in a porous medium such as natural wood material. Based on the overview of numerical methods for solving differential equations, and partial differential equations for n parameters optimization, some of these methods are developed for two physical and chemical processes and examined for different practical experiments carried out in LERMAB laboratory. The first application focuses on the dynamics of isothermal transfer of water during the wood frying in the hygroscopic field. In this case the proposed modeling can show that for certain wood species, diffusion transfers of water in the gas phase and adsorbed phase are not necessarily realized under conditions where thermodynamic equilibrium between the two phases is provided. The second application focuses on modeling the slow pyrolysis of wood spices heated by conduction between two plates which temperatures varies between 150 ° C and 240 ° C. The curves giving the temperature in the heightened and the loss of mass are well represented by the proposed kinetic and transfer models. However, this application allows highlighting the limits of optimization methods in the presence of a large number of parameters to determine some of them are coupled.

Keywords: Numerical modeling, adsorption, slow pyrolysis, diffusion transfers, Thermal Transfer, optimization.