

## Chapitre 3

# Implémentation du code de gonflement des fûts d'enrobés bitumineux

### Sommaire

---

3.1	Architecture du programme principal . . . . .	74
3.2	Déclaration des variables - Adimensionnement . . . . .	76
3.3	Intégration du terme source par Rabbi . . . . .	76
3.4	Discretisation du problème . . . . .	77
3.5	Adaptation du maillage en $\tilde{R}$ . . . . .	78
3.6	Adaptation du maillage en $z$ . . . . .	82
3.7	Calcul du terme source et de la dose intégrée . . . . .	83
3.8	Résolution des équations d'évolution . . . . .	84
3.8.1	Croissance . . . . .	85
3.8.2	Mise à jour de la sursaturation . . . . .	86
3.8.3	Diffusion de gaz en hauteur . . . . .	87
3.8.4	Germination . . . . .	88
3.8.5	Migration . . . . .	90
3.9	Adaptation du pas de temps . . . . .	92
3.10	Évolution de la viscosité - Loi de vieillissement . . . . .	94
3.11	Calcul du gonflement . . . . .	95
3.12	Calcul de l'évacuation de gaz par migration des bulles . . . . .	96

---

Ce chapitre est consacré à l'implémentation numérique du modèle présenté au chapitre précédent, ainsi qu'à la présentation des méthodes numériques de résolution. Dans un premier temps, l'architecture générale du programme sera présentée, puis les étapes successives de résolution seront détaillées. Aucun résultat ne sera présenté dans ce chapitre, l'étude de sensibilité du code ainsi que les discussions qui en découlent feront, entre autres, l'objet du chapitre 4. En l'état actuel, le programme doit être ouvert et lancé à l'aide du logiciel Matlab et les paramètres physiques et numériques sont rentrés directement dans le code source par l'utilisateur. Suite à cette thèse, il est envisagé de compiler ce code et d'en faire une application indépendante et transportable, ne nécessitant plus l'utilisation du logiciel Matlab. Une interface homme-machine (IHM) sera également développée pour rendre le code plus commode d'utilisation.

### 3.1 Architecture du programme principal

Le code principal consiste en un enchaînement de plusieurs étapes (détaillées dans les sections suivantes) qui peuvent être rassemblées en trois groupes. Pour certaines de ces étapes, le programme principal fait appel à des fonctions définies dans d'autres fichiers, c'est notamment le cas de la résolution de l'évolution de la population de bulles et des adaptations de maillage décrites ci-après.

Le premier groupe (représenté par le cadre vert sur la figure 3.1) correspond à la mise en place des environnements mathématique et numérique nécessaires à la résolution du problème. Il est composé de la déclaration des variables, de l'entrée des paramètres matériaux et de leur adimensionnement, du calcul du terme source via l'appel du code RABBI, de la discrétisation spatiale de l'échantillon et de l'initialisation de la solution.

Le second groupe est une boucle itérative (représentée par le cadre rouge sur la figure 3.1) : elle va être répétée autant de fois que nécessaire pour atteindre le temps de simulation pré-défini par l'utilisateur. Dans celle-ci, le temps est incrémenté (l'incrément de temps entre deux itérations est également appelé pas de temps), les représentations numériques du fût et de la population de bulles sont adaptées si besoin, les paramètres matériaux qui évoluent au cours du temps sont mis à jour (viscosité, dose intégrée), puis le système d'équations régissant l'évolution de la population est résolu. Après cette résolution, un test est réalisé pour vérifier que l'incrément de temps choisi était adapté à l'évolution. Si tel n'est pas le cas, ce dernier est modifié, la résolution précédente est effacée et une nouvelle est refaite en considérant la nouvelle valeur du pas de temps (cela correspond à la petite boucle représentée par le cadre bleu sur la figure 3.1). Lorsque le pas de temps est jugé adapté, la résolution est validée. On procède alors au calcul de la quantité de gaz évacué et du gonflement macroscopique du fût, ainsi qu'à l'affichage de l'évolution des variables.

Un troisième groupe (représenté par le cadre orange sur la figure 3.1) est imbriqué dans le second : il est constitué des étapes de la résolution des équations d'évolution de la population de bulles. C'est le cœur du programme. Ces étapes constituent une fonction codée dans un fichier indépendant, elle est appelée par le programme principal à chaque itération.

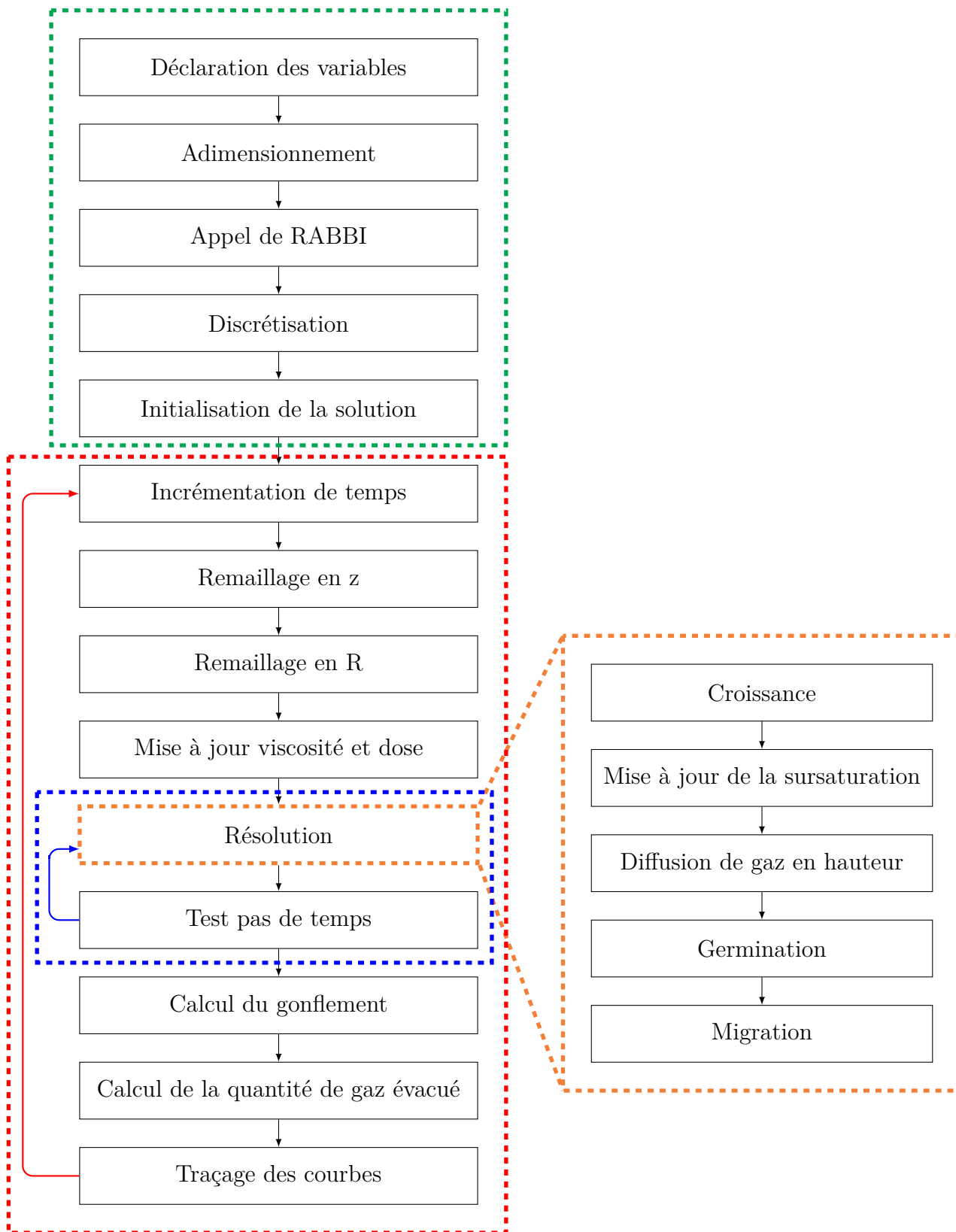


FIGURE 3.1 – Architecture du code de gonflement développé dans ce travail

## 3.2 Déclaration des variables - Adimensionnement

La première étape du programme consiste à déclarer l'ensemble des variables nécessaires à la résolution du problème. On leur alloue de la mémoire. L'utilisateur renseigne ici les paramètres physiques du problème (loi de viscosité de l'enrobé, géométrie du fût, masse volumique de l'enrobé, coefficient de diffusion de l'hydrogène...) ainsi que les paramètres numériques. Dans le développement de ce programme, un effort a été porté sur la minimisation du nombre de paramètres numériques à rentrer par l'utilisateur. Le but est d'avoir un code qui s'adapte automatiquement aux données du problème, avec une grande facilité de prise en main. Néanmoins, un certain nombre de paramètres numériques sont inévitablement à renseigner, tels que la finesse du maillage désirée.

Après avoir renseigné l'ensemble des paramètres numériques et physiques, les grandeurs physiques du problème sont adimensionnées, conformément à ce qui a été présenté précédemment dans la section "Adimensionnement du problème" du chapitre 2. Ce choix assure un meilleur conditionnement des systèmes à résoudre.

## 3.3 Intégration du terme source par Rabbi

Le calcul de la quantité de dihydrogène produite par radiolyse du bitume a fait l'objet d'une étude au CEA. Les nombreuses filiations des radionucléides lors de leur désintégration rendent ce calcul complexe. Pour déterminer le terme source, un code de calcul a donc été développé : RABBI [8]. Ce programme a été développé dans le langage C++, ce qui ne permet pas son intégration directe dans le code développé au cours de cette thèse sur Matlab. Adapter et réécrire ce code pour en faire une fonction appelée par notre programme aurait été chronophage. Il a donc été jugé plus judicieux d'enregistrer les résultats fournis par RABBI puis de les réouvrir avec le code de gonflement. Cependant, le calcul de terme source effectué par RABBI n'est pas complètement indépendant de notre programme (figure 3.2). L'utilisateur n'a besoin que de lancer notre programme (1), c'est ce dernier qui va ensuite commander le lancement de RABBI (2). L'utilisateur doit alors renseigner le spectre radiologique de référence ainsi que la durée de simulation de la radiolyse via l'interface graphique ouverte par RABBI (3). RABBI intègre ensuite les données renseignées par l'utilisateur (5) puis effectue le calcul de terme source et enregistre les résultats dans un fichier au format .xls (6), avec un nom spécifié par l'utilisateur. Ce même nom étant donné en paramètre d'entrée du code de gonflement, ce dernier est capable de l'ouvrir (7) pour en extraire les données de terme source et de dose intégrée en fonction du temps.

Une conversion des données est nécessaire lors de l'intégration du terme source fourni par RABBI. Ce dernier fournit en effet une production de gaz en litres par unité de masse d'enrobé, tandis que nous avons besoin pour notre modèle d'un terme source exprimé en kg de gaz par unité de volume d'enrobé. Cette conversion fait appel au volume molaire du dihydrogène ( $V_m = 22,4 \text{ L mol}^{-1}$ ), à la masse volumique de l'enrobé  $\rho_e$  (renseignée par l'utilisateur dans le code de gonflement), ainsi qu'à la masse molaire du dihydrogène ( $M=2 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}$ ).

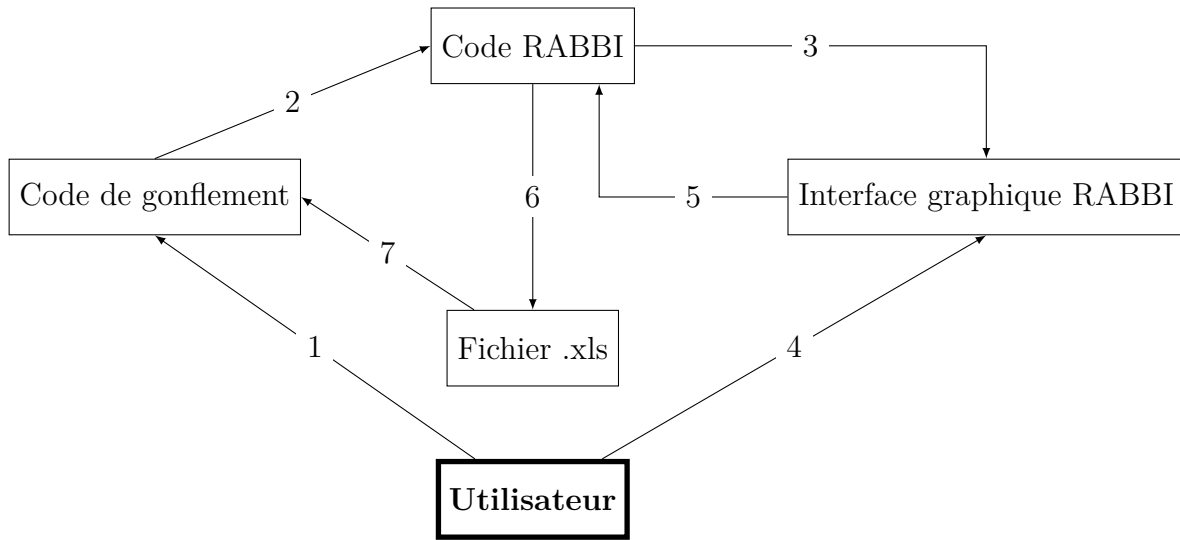


FIGURE 3.2 – Schéma du principe d'intégration du terme source calculé par le code RABBI

### 3.4 Discrétisation du problème

Pour résoudre un problème numériquement, il faut représenter des grandeurs physiques continues par des objets mathématiques discrets : c'est la discrétisation. Dans le code développé au cours de cette thèse, nous avons effectué cette opération dans deux dimensions ( $\tilde{R}$  et  $z$ ). La première consiste à passer d'une distribution continue de tailles de bulles à une distribution discrète par discrétisation aux différences finies, les bulles étant alors rangées par classe. Les valeurs de  $\tilde{R}$  pour lesquelles la distribution discrète est définie sont appelés des nœuds et l'ensemble de ces nœuds constitue ce que nous appelons le maillage en  $\tilde{R}$ ,  $\tilde{R}$  faisant référence à la variable représentant le rayon adimensionné des bulles. Ce sera l'objet de la section suivante : adaptation du maillage en  $\tilde{R}$ .

La fonction  $f(\tilde{R}, z, t)$  représente la densité de distribution de tailles de bulles par unité de volume. Pour connaître le nombre de bulles contenues dans une classe par unité de volume, il faut calculer l'intégrale de cette fonction entre les bornes de la classe, ce qui revient dans le cas d'une population discrète à :

$$\text{Nb}_{\text{bulles}}^i = \left( \tilde{R}_{\text{sup}}^i - \tilde{R}_{\text{inf}}^i \right) f^i(z, t) \quad (3.1)$$

$\text{Nb}_{\text{bulles}}^i$  étant le nombre de bulles contenues dans la classe d'indice  $i$  par unité de volume.

La deuxième discrétisation concerne la hauteur du fût. Numériquement, celui-ci sera représenté par un empilement de tranches horizontales de hauteurs variables (figure 3.3). Ces

tranches sont délimitées par des bornes verticales qui constituent ce que nous appellerons le maillage en  $z$  ( $z$  désignant la variable d'espace suivant l'axe du fût). L'adaptation de ce maillage au cours du temps sera présenté dans la section 3.6.

La hauteur sera la seule dimension spatiale discrétisée dans le code. La dimension géométrique radiale n'est pas prise en compte. Seule la surface des tranches du fût est considérée pour quantifier la quantité de gaz évacué par migration et diffusion.

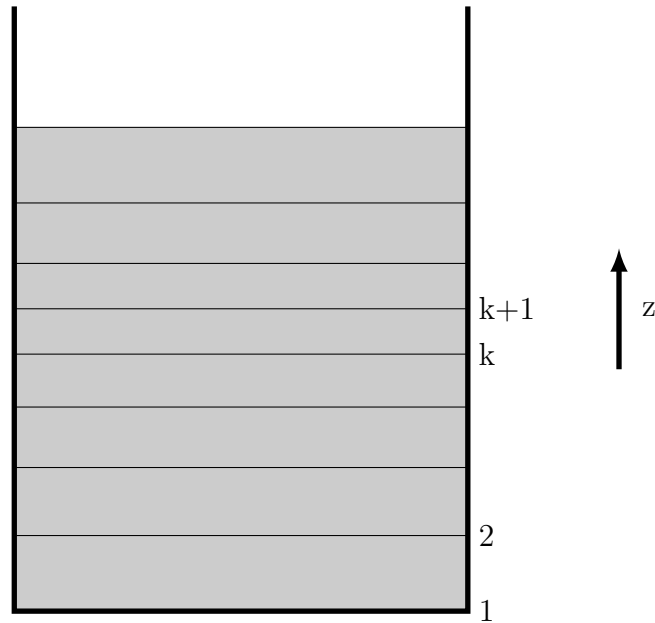


FIGURE 3.3 – Représentation des tranches d'un fût

Dans la suite des équations et méthodes numériques présentées dans ce chapitre, l'indice  $j$  fera référence à la variable de temps ( $j$  et  $j + 1$  sont alors les numéros de deux itérations consécutives),  $i$  fera référence à la variable taille de bulle  $\tilde{R}$  ( $i$  désignant l'indice des classes de bulles, avec  $i$  croissant en augmentant la taille des bulles) et  $k$  fera référence à la variable d'espace  $z$  ( $k$  désignant l'indice des tranches, avec  $k$  croissant en remontant dans le fût).

La finesse des maillages est un paramètre ajustable par l'utilisateur. A titre indicatif, pour les simulations numériques présentées dans ce travail, le nombre de nœuds sera de 150 pour le maillage en  $\tilde{R}$  et 20 pour le maillage en  $z$ .

### 3.5 Adaptation du maillage en $\tilde{R}$

Par définition, la population de bulles présente dans le fût va évoluer au cours du temps (à cause de la migration et de la croissance notamment). Pour avoir une bonne précision des résultats, il va être utile d'avoir un maillage en  $\tilde{R}$  qui s'adapte à la population [52].

On va en quelque sorte focaliser les nœuds du maillage sur des zones de la population qui nécessitent une attention particulière. Ces zones de focalisation vont être déterminées au moyen d'une fonction critère, choisie selon le type d'évolution à résoudre [53]. Cette fonction, définie sur le même maillage que la population, indiquera la densité de nœuds (et donc la finesse du maillage) en chaque endroit de la population. La taille de maille (amplitude des classes) dans les zones de focalisation sera alors plus faible qu'ailleurs (figure 3.4).

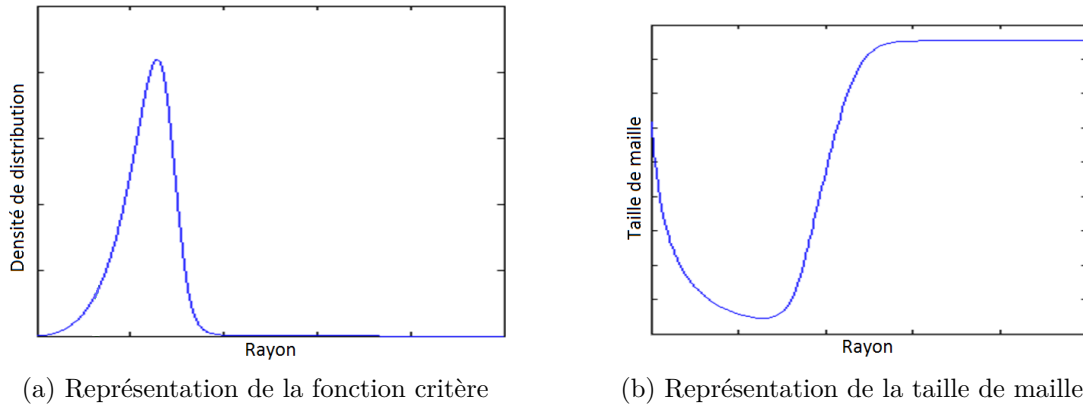


FIGURE 3.4 – Illustration de l'adaptation de la taille de maille basée sur une fonction critère

Dans le code développé dans ce travail, le nombre de nœuds constituant le maillage en  $\tilde{R}$  est fixe. Ainsi, avoir un maillage adaptable signifie que les nœuds vont pouvoir être répartis différemment d'une itération à l'autre, en gardant pour conditions aux limites les extrémités de la gamme totale de rayons à couvrir. Les classes de bulles n'auront donc pas toutes la même amplitude, comme illustré sur la figure 3.5 (l'amplitude est définie par la différence entre les deux bornes de la classe, les bornes étant en l'occurrence les nœuds du maillage). L'amplitude des classes sera inversement proportionnelle à la densité de nœuds définie par la fonction critère :

$$fc^i \cdot w^i = \text{constante} \quad \forall i \quad (3.2)$$

où  $fc^i$  désigne la valeur de la fonction critère au nœud  $i$ , et  $w_i = \tilde{R}_{i+1} - \tilde{R}_i$  est l'amplitude de la classe d'indice  $i$ .

Numériquement, on va résoudre l'équation (3.3) pour définir le nouveau maillage, où l'inconnue est la fonction taille de maille (amplitude des classes)  $w$ . Elle impliquera par la suite la répartition des nœuds dans la gamme de rayons à couvrir. Les conditions aux limites sont que les points extrémités du maillage ne bougent pas.

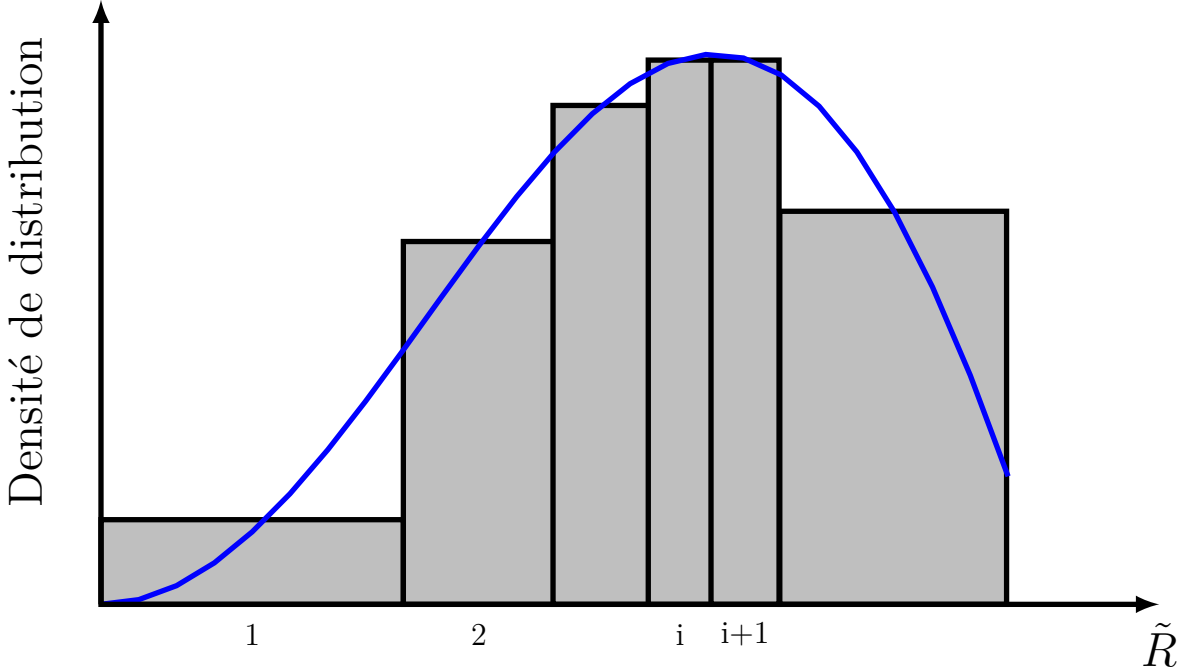


FIGURE 3.5 – Discretisation de la population de bulles

$$\frac{\partial}{\partial i} (fc^i \cdot w^i) = 0 \quad \forall i \quad (3.3)$$

où  $\frac{\partial}{\partial i}$  est la dérivée suivant l'indice des classes.

Pour illustrer la relation entre la fonction critère, la densité de nœuds et le maillage correspondant, nous allons considérer une fonction critère dont la valeur est égale en chaque point du maillage à la densité de distribution de bulles. Cette finesse de maillage proportionnelle à la densité de bulles implique que l'amplitude des classes sera petite là où la densité de bulles est élevée et inversement. Après avoir adapté le maillage selon ce critère, on aura des classes d'amplitudes différentes mais contenant toutes le même nombre de bulles. En effet, dans ce cas,  $fc_i = f_i$ ,  $f$  étant la densité de distribution de tailles. L'équation (3.2) peut alors être réécrite comme cela :

$$f^i (\tilde{R}^{i+1} - \tilde{R}^i) = \text{constante} \quad \forall i \quad (3.4)$$

Or, l'équation (3.4) est équivalente à l'équation (3.1), ce qui nous indique bien que chaque classe contient le même nombre de bulles.



Le remaillage suit un algorithme itératif : pour un même incrément de temps, plusieurs itérations de remaillage peuvent être réalisées jusqu'à ce que la densité de maille soit suffisamment proche de la densité de maille idéale. Néanmoins, une seule itération est faite dans notre cas car elle est suffisante et permet un gain de temps de calcul.

Après avoir déterminé la répartition optimale des nœuds et avoir défini le nouveau maillage en  $\tilde{R}$ , il faut calculer les valeurs de la densité de distribution aux nœuds du nouveau maillage. Pour cela, la densité de bulles initiale (qui est une fonction discrète) est interpolée linéairement, c'est-à-dire qu'on recrée une fonction continue représentant la densité de bulles, en reliant les points de la fonction discrète par des droites. La figure 3.6 illustre l'interpolation linéaire, où les points bleus représentent les valeurs de la fonction discrète de densité de distribution et la courbe noire la fonction d'interpolation linéaire correspondante. Cette fonction continue est ensuite projetée sur le nouveau maillage, de manière à obtenir une fonction discrète représentant la densité de distribution de bulles aux nœuds du nouveau maillage.

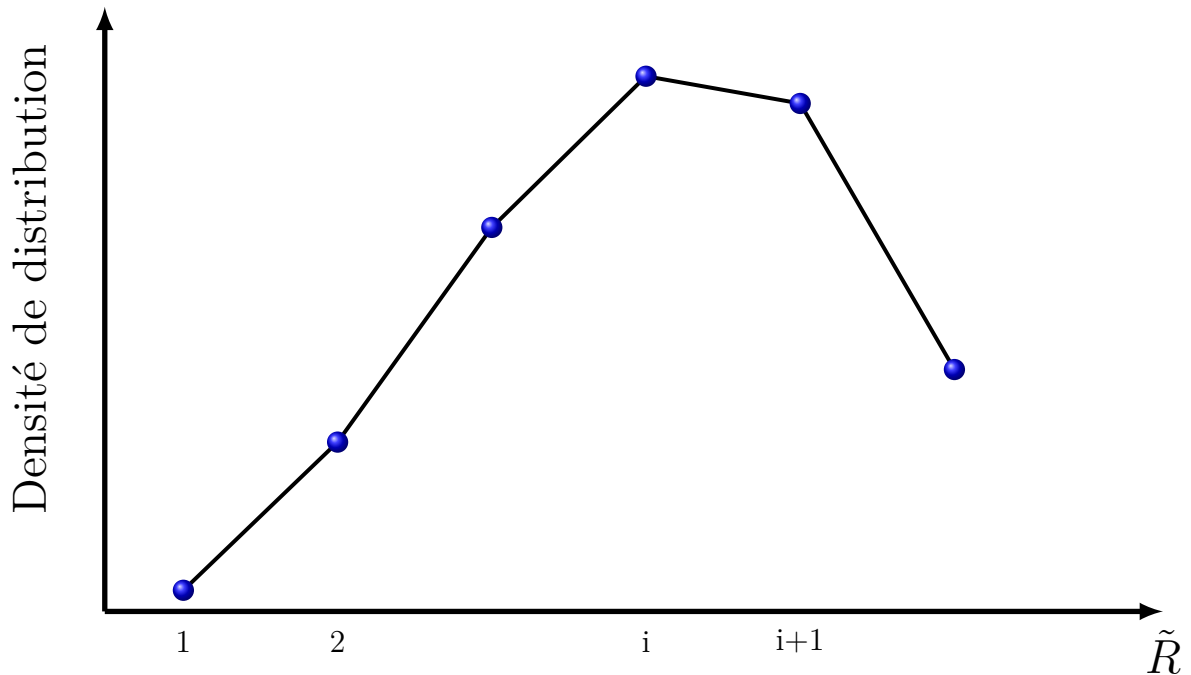


FIGURE 3.6 – Principe d'interpolation linéaire

Il est important de noter que la densité de nœuds représentée par la fonction critère  $f_c$  n'est nulle en aucun point. En effet, après avoir défini sa forme, on lui rajoute une constante en chaque point. Cela permet de garder un densité minimale de nœuds sur toute la gamme qui doit être couverte. On laisse en quelque sorte des nœuds en veille, cela permet d'améliorer la précision des résultats, notamment dans le cas où de brusques évolutions de la population auraient lieu. Dans notre cas d'étude, la fonction critère est définie par  $f_c = \text{grad}(\dot{\tilde{R}}f)$ , car elle apporte une grande finesse de maillage dans les zones où nous avons une forte évolution de la population de bulles [53].

Toute la démarche présentée ci-dessus pour l'adaptation de maillage est répétée pour chaque tranche du fût. En effet, les tranches ne présentant pas les mêmes populations de bulles, il a été jugé préférable que l'adaptation du maillage en  $\tilde{R}$  puisse être menée indépendamment sur chaque tranche, de manière à optimiser la précision du code. Cela ne présente qu'un léger inconvénient lors du calcul de la migration des bulles, car les nœuds des maillages en  $\tilde{R}$  de deux tranches s'échangeant des bulles ne correspondent pas. Le contournement de cet obstacle numérique est présenté plus loin dans ce chapitre, dans la section 3.8.5.

Dans un souci de conservation de la masse, une étape supplémentaire est nécessaire après le remaillage en  $\tilde{R}$ . Le volume de la population définie sur l'ancien maillage ainsi que celui de la population définie sur le nouveau maillage après interpolation sont calculés. La nouvelle population après remaillage est multipliée par le rapport des deux volumes pré-cités pour s'assurer qu'il n'y a pas eu de gain ou de perte numérique de masse de gaz. En pratique, la perte est de l'ordre du millionième mais la correction est tout de même réalisée pour avoir une conservation de masse parfaite.

### 3.6 Adaptation du maillage en $z$

La méthode d'adaptation du maillage en  $z$  est sensiblement la même que celle décrite précédemment pour le remaillage en  $\tilde{R}$ . La principale différence réside dans le fait qu'ici un seul remaillage est effectué pour toutes les classes de bulles (contrairement au cas précédent où un remaillage était effectué pour chaque tranche). En clair, cela signifie que les tranches resteront des sections horizontales non déformées.

La fonction critère est ici définie par le gradient vertical de concentration en gaz dissous. L'objectif est ainsi de limiter les sauts de concentration d'une tranche à une autre et d'avoir une évolution régulière de la concentration entre deux tranches consécutives, cela limite la diffusion inhérente à la méthode VOF (Volume Of Fluids) [54, 55] :

$$\frac{\partial}{\partial k} \left( \text{grad}(s(z)) (z^{k+1} - z^k) \right) = 0 \quad \forall k \quad (3.5)$$

où  $k$  représente l'indice des tranches et  $\text{grad}(s(z))$  est la fonction définie par le gradient de concentration suivant l'axe du fût.

La difficulté rencontrée lors de l'adaptation du maillage en  $z$  est que les maillages en  $\tilde{R}$  sont différents d'une tranche à une autre. Ainsi, après détermination de la position des nœuds du nouveau maillage vertical, il faut déterminer la nouvelle localisation des nœuds du maillage en  $\tilde{R}$  pour chaque tranche. L'emplacement sur l'axe des  $\tilde{R}$  d'un nœud  $(i, k_{\text{new}})$  pourra par exemple être à cheval entre les positions, sur l'axe des  $\tilde{R}$ , des nœuds  $(i, k)$  et  $(i, k + 1)$ , comme illustré sur la figure 3.7. Pour déterminer ces emplacements, il va

falloir interpoler la fonction  $\tilde{R}^i(k)$  définie sur l'ancien maillage en  $z$ , puis la projeter sur le nouveau maillage en  $z$ .

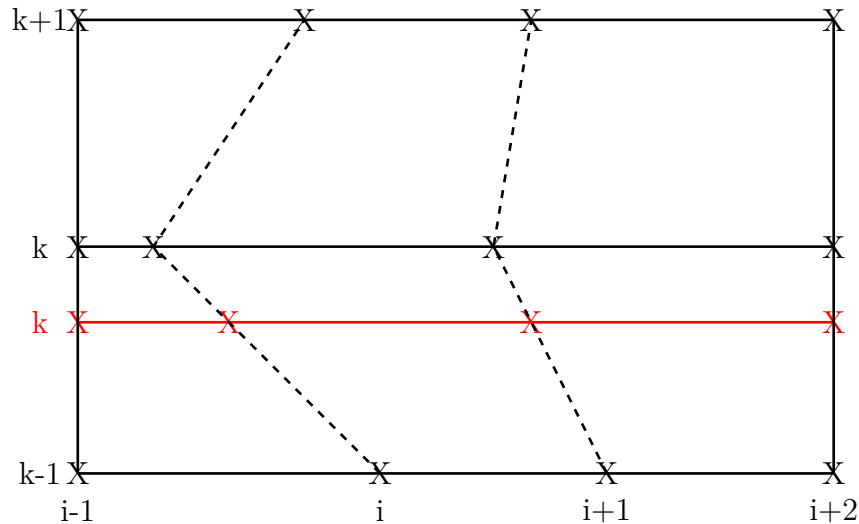


FIGURE 3.7 – Localisation des nœuds du maillage en  $\tilde{R}$  après remaillage en  $z$

Sur la figure 3.7, la couleur noire fait référence à l'ancien maillage (avant remaillage en  $z$ ), et la couleur rouge au nouveau maillage. On constate que le maillage n'est pas modifié sur les bords, car les bornes du maillage sont fixes. Les traits en pointillés illustrent la méthode d'interpolation pour déterminer l'emplacement des nouveaux nœuds du maillage en  $\tilde{R}$ .

Après avoir déterminé les nouveaux emplacements des nœuds du maillage complet, il va falloir calculer les valeurs de la densité de distribution de bulles à ces nouveaux nœuds. Pour cela, on va repérer sur quelles anciennes tranches du fût empiètent les nouvelles tranches. On va ensuite attribuer à une nouvelle tranche une proportion de bulles de l'ancienne tranche qu'elle recouvre, cette proportion étant égale au ratio de la hauteur de l'ancienne tranche recouverte par la nouvelle sur la hauteur totale de l'ancienne tranche. Après avoir déterminé la proportion de la population de bulles d'une ancienne tranche assignée à une nouvelle tranche, il nous faut interpoler cette population puis la projeter sur le maillage en  $\tilde{R}$  de la nouvelle tranche qui va accueillir les bulles. Une étape de conservation de masse est rajoutée après la projection de la population, de manière analogue à ce qui a été présenté précédemment dans la section consacrée à l'adaptation du maillage en  $\tilde{R}$ .

### 3.7 Calcul du terme source et de la dose intégrée

Le terme source et la dose intégrée en fonction du temps fournies par le code RABBI sont des données discrètes : on ne connaît leurs valeurs que pour des instants donnés (par exemple tous les ans, tous les mois ou toutes les heures). Cette finesse de discrétisation

temporelle du calcul de RABBI est renseignée par l'utilisateur en même temps que le spectre radiologique initial. Néanmoins, quelle que soit cette finesse, les instants pour lesquels RABBI a fourni les valeurs ne correspondent pas forcément aux instants de calcul du code de gonflement. De plus, le pas de temps de ce dernier est variable et imprévisible (cf. section 3.9 sur l'adaptation du pas de temps), ce qui ne nous permet pas d'anticiper les instants pour lesquels il faudrait connaître le terme source et la dose intégrée. Ainsi, pour connaître ces valeurs à n'importe quel instant, on effectue une interpolation linéaire à partir des deux instants consécutifs du calcul de RABBI qui encadrent l'instant où les valeurs sont désirées. Pour une bonne finesse de discrétisation temporelle de RABBI (1 mois), l'interpolation linéaire n'induit que très peu d'erreur. En effet dans le cas des enrobés bitumineux, la décroissance radioactive moyenne (et donc la décroissance du terme source associé) a lieu sur plusieurs centaines d'années.

### 3.8 Résolution des équations d'évolution d'une population de bulles

La résolution du système d'équations régissant l'évolution de la population de bulles est réalisée en plusieurs étapes (décomposition de l'opérateur). L'équation de continuité est notamment résolue en deux étapes, la croissance et la migration ayant été découplées pour une question de gain de temps de calcul. En effet, résoudre ces deux mécanismes indépendamment nécessite l'utilisation d'opérateurs mathématiques (matrices) beaucoup moins gros, ce qui implique des temps de calcul plus faibles. Néanmoins, une résolution découplée peut induire une moins bonne précision des résultats. Un code avec résolution couplée a donc été développé et les résultats des deux méthodes ont été comparés pour un cas test représentant un fût réel. Les résultats étant identiques, nous avons pris la décision de ne développer par la suite que le code avec la résolution découplée de la croissance et de la migration.

Nous avons choisi de résoudre la croissance des bulles avant leur migration. Cet ordre est justifié par la facilité numérique de calcul du bilan de masse qu'il procure. Cet aspect sera présenté dans la section 3.8.2 consacrée à la mise à jour de la sursaturation.

La résolution s'articule en cinq étapes. Dans un premier temps, l'évolution de la population de bulles par simple croissance est calculée, on fait ici abstraction de la migration des bulles et de la germination. Mathématiquement, cela revient à résoudre l'équation :

$$\frac{\partial f(\tilde{R}, z, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \tilde{R}} \left( \dot{\tilde{R}}(t) f(\tilde{R}, z, t) \right) = 0, \quad (3.6)$$

où  $f$  est la densité de distribution des bulles,  $\tilde{R}$  représente le rayon des bulles,  $z$  la hauteur dans le fût et  $t$  le temps.

Dans un second temps, on répercute l'effet de la croissance des bulles sur la quantité de gaz dissous dans la matrice. Ensuite, la diffusion du gaz dissous suivant l'axe vertical dans le fût est prise en compte. A ce moment, un critère sur la concentration de gaz va être appliqué dans chaque tranche pour savoir si la germination de nouvelles bulles doit avoir lieu, et elle est effectuée si nécessaire. Enfin, la dernière étape de la résolution du système consiste à prendre en compte la migration des bulles par poussée d'Archimède. Cette étape correspond mathématiquement à la résolution de l'équation de continuité, en faisant abstraction de la croissance des bulles et de la germination :

$$\frac{\partial f(\tilde{R}, z, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_z(\tilde{R}, t) f(\tilde{R}, z, t) \right) = 0 \quad (3.7)$$

où  $v_z$  est la vitesse de migration des bulles.

La résolution présentée ci-dessus est simplifiée dans le cas où aucune bulle n'est encore présente dans le fût. En effet, s'il n'y a pas de bulles, il n'y a pas besoin de résoudre ni la croissance, ni la migration. Un simple bilan de masse en prenant en compte le terme source et la diffusion du gaz est effectué, puis le critère pour savoir si la germination doit avoir lieu est appliqué.

### 3.8.1 Croissance

La première étape de la résolution concerne la croissance des bulles. Cela consiste à résoudre l'équation (3.6) :

$$\frac{\partial f(\tilde{R}, z, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \tilde{R}} \left( \dot{\tilde{R}}(t) f(\tilde{R}, z, t) \right) = 0$$

dont l'équivalent numérique est :

$$\frac{f^{j+1} - f^j}{\Delta t} = -D_1 \left( \dot{\tilde{R}} f^{j+1} \right) \quad (3.8)$$

où  $f$  est un vecteur contenant les valeurs de la densité de distribution aux nœuds du maillage en  $\tilde{R}$ ,  $\Delta t$  est un scalaire représentant le pas de temps,  $D_1$  est une matrice représentant l'opérateur de dérivée d'ordre 1 selon la dimension  $\tilde{R}$  et  $\dot{\tilde{R}}$  est un vecteur contenant les valeurs des vitesses de croissance des bulles aux nœuds du maillage en  $\tilde{R}$ . Notons ici que le choix de résolution par schéma d'Euler implicite implique la présence de  $f^{j+1}$  et non de  $f^j$  (qui aurait alors été un schéma explicite) dans le membre de droite. Cette méthode présente l'avantage d'être stable dans notre cas. La condition de stabilité découle

de l'équation 3.8, en notant le choix d'un opérateur  $D_1$  décentré amont :

$$\frac{f^{j+1} - f^j}{\Delta t} = -D_1(\dot{\tilde{R}} f^{j+1}) \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow \frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} = -\frac{\dot{\tilde{R}}_i f_i^{j+1} - \dot{\tilde{R}}_{i-1} f_{i-1}^{j+1}}{\Delta \tilde{R}} \quad (3.10)$$

$$\Rightarrow f_i^{j+1} \left(1 + \dot{\tilde{R}}_i \frac{\Delta t}{\Delta \tilde{R}}\right) - \frac{\Delta t}{\Delta \tilde{R}} \dot{\tilde{R}}_{i-1} f_{i-1}^{j+1} = f_i^j \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow \text{Critère de stabilité : } \dot{\tilde{R}}_i \frac{\Delta t}{\Delta \tilde{R}} > -1 \quad (3.12)$$

Ce schéma est inconditionnellement stable pour des bulles en croissance ( $\dot{\tilde{R}} > 0$ ). La condition n'est pas automatique dans le cas de bulles en décroissance, néanmoins ce schéma a été conservé car aucune instabilité n'a été constatée. Si tel avait été le cas, un schéma de Crank-Nicolson aurait pu être envisagé [56].

On peut ensuite réécrire cette équation de la sorte :

$$\left(I + \Delta t D_1 \dot{\tilde{R}}\right) f^{j+1} = f^j \quad (3.13)$$

$$\Rightarrow M_c f^{j+1} = N_c f^j \quad (3.14)$$

$I$  étant la matrice identité,  $M_c = I + \Delta t D_1 \dot{\tilde{R}}$  et  $N_c = I$ . L'équation de résolution de la croissance implémentée dans le code est alors :

$$f^{j+1} = M_c^{-1} (N_c f^j) \quad (3.15)$$

### 3.8.2 Mise à jour de la sursaturation

Comme décrit dans l'introduction de cette section sur la résolution des équations du système, le bilan de masse est calculé directement après avoir pris en compte la croissance des bulles. Nous devons néanmoins faire un bilan de masse dans chaque tranche du fût car celles-ci s'échangent du gaz par migration de bulles et diffusion de gaz, ce qui fait qu'il n'y a pas conservation de la masse de gaz dans chaque tranche.

Le bilan de masse correspond en réalité au calcul de l'évolution de la concentration en gaz dissous. La méthode développée pour cela est de calculer la variation de concentration imputable à la croissance des bulles et à l'apport de gaz par terme source uniquement. La concentration à un instant donné est donc calculée à partir de la concentration à l'itération précédente en rajoutant le gaz créé par radiolyse et en enlevant la quantité de gaz prélevée par les bulles pour leur croissance. Les variations de concentration dues à la diffusion du gaz et à la germination (si elle a lieu d'être) sont prises en compte indépendamment juste après ce bilan de masse (cf. sections suivantes). L'évolution de la concentration pour chaque tranche après prise en compte de la croissance et du terme source est alors décrite par :

$$s^{j+1,k} = s^{j,k} + \dot{S} - \int_0^\infty \frac{4\pi}{3} \tilde{R}^3 \left( f^{j+1,k}(\tilde{R}) - f^{j,k}(\tilde{R}) \right) s_i(\tilde{R}) d\tilde{R} \quad (3.16)$$

où  $\dot{S}$  représente le terme source,  $s^{j,k}$  la concentration en gaz dissous à l'instant  $j$  dans la tranche  $k$  et  $V^k$  le volume de la tranche  $k$ . Il est à noter que l'indice  $i$  ici présent dans  $s_i$  ne désigne pas un nœud du maillage en  $\tilde{R}$  mais fait référence à la notation définie au chapitre 2 de la concentration adimensionnée de gaz à l'intérieur d'une bulle.

### 3.8.3 Diffusion de gaz en hauteur

La résolution de la diffusion de gaz dans le fût suivant la direction verticale est analogue à la résolution de la croissance, c'est-à-dire par schéma d'Euler implicite (schéma aux différences finies). Les valeurs sont prises à la base de la cellule. On rajoute seulement ici une condition de Dirichlet en haut du fût : on impose une concentration en gaz dissous nulle à la surface du bitume. L'équation de diffusion selon l'axe vertical s'écrit :

$$\frac{\partial s(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 s(z, t)}{\partial z^2} \quad (3.17)$$

dont l'équivalent numérique est :

$$\frac{s^{j+1} - s^j}{\Delta t} = DD_2 s^{j+1} \quad (3.18)$$

où  $s^j$  est un vecteur contenant les valeurs de concentration en gaz dissous pour chaque tranche à l'instant  $j$ ,  $D$  est le coefficient de diffusion du dihydrogène dans la matrice,  $D_2$  est une matrice représentant l'opérateur de dérivée centrée d'ordre 2 selon la dimension  $z$  et  $z$  la hauteur dans le fût. Ce schéma présente l'avantage d'être inconditionnellement stable. Dans le cas où un schéma explicite aurait été choisi, la condition de stabilité serait

donnée par une condition sur le nombre de Fourier ( $D\Delta t/(\Delta z)^2$ ) :

$$0 \leq D \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \leq \frac{1}{2} \quad (3.19)$$

Ainsi, une condition devrait être appliquée sur la valeur maximale que peut prendre le pas de temps pour que le schéma soit stable et la vitesse du code serait limitée. Le choix du schéma implicite permet donc d'avoir des temps de calcul plus courts.

On peut ensuite réécrire l'équation (3.18) comme suit :

$$(I - \Delta t DD_2) s^{j+1} = s^j \quad (3.20)$$

$$\Rightarrow M_d s^{j+1} = N_d s^j \quad (3.21)$$

$I$  étant la matrice identité,  $M_d = I - \Delta t DD_2$  et  $N_d = I$ . La condition de Dirichlet est intégrée en modifiant la première ligne de la matrice  $M_d$  pour conserver une concentration nulle en surface du bitume durant toute la simulation. L'équation de résolution de la diffusion implémentée dans le code est alors :

$$s^{j+1} = M_d^{-1} (N_d s^j) \quad (3.22)$$

### 3.8.4 Germination

La germination est effectuée juste après avoir pris en considération les variations de concentration liées à la croissance des bulles, à l'apport de gaz par terme source et la diffusion du gaz. Elle consiste à ajouter de nouveaux germes à la population de bulles existantes. Pour savoir si la germination doit avoir lieu, un critère est appliqué à la sursaturation de chaque tranche. La germination est donc indépendante dans chacune des tranches du fût, ce qui est une conséquence de la dépendance de la concentration en fonction de la hauteur.

Deux méthodes ont été développées pour modéliser la germination, avec chacune un critère différent. Elles ont cependant un point commun : la forme de la distribution de germes qui va être insérée. Celle-ci est définie par l'utilisateur au début de la simulation : ce peut être une gaussienne, un créneau, un dirac (population monodisperse) ou encore des distributions multi-modales (plusieurs pics comme les bosses d'un chameau).



### Germination seuil

La première méthode de germination consiste à regarder, pour chaque tranche, si la concentration obtenue précédemment dépasse la valeur seuil imposée par l'utilisateur. Si tel n'est pas le cas, on ne crée pas de germe. En revanche, si l'on dépasse le seuil autorisé, la différence entre la valeur actuelle de sursaturation et la valeur seuil correspond à la quantité de gaz qui va être convertie en germes (equation (3.23)). La sursaturation est ainsi plafonnée au niveau de la valeur seuil.

Cet excès de concentration dans une tranche est converti suivant l'équation suivante en volume de nouveaux germes à insérer :

$$V_{\text{germes}} = (s^k - s_{\text{seuil}}) V^k \quad (3.23)$$

$V^k$  étant le volume de la tranche considérée,  $s^k$  la concentration en gaz dissous dans la tranche avant germination,  $V_{\text{germes}}$  le volume de germes total à insérer dans la tranche et  $s_{\text{seuil}}$  la concentration seuil.

Le paramètre clé dans la germination est le volume total de gaz que la distribution de germes introduits représente. Comme la forme de la distribution de bulles est imposée par l'utilisateur (via la limite de concentration au-delà de laquelle on rajoute des germes), le seul moyen pour introduire un volume défini de gaz est de jouer sur le nombre de germes insérés. Pour cela, la distribution de germes est normée : on divise le nombre de bulles de chaque classe par le volume total que représente la distribution (equation (3.24)), ce qui nous donne une population de volume unitaire  $\tilde{f}g$  :

$$\tilde{f}g(\tilde{R}) = \frac{\text{fg}(\tilde{R})}{\int_0^\infty (\tilde{R}^3 \text{fg}(\tilde{R})) d\tilde{R}} \quad (3.24)$$

et la population de germes insérés est ensuite obtenue en faisant le produit de la population normée par le volume de gaz désiré (equation (3.25)). Elle est par la suite simplement ajoutée à la population existante  $f(\tilde{R}, z, t)$ .

$$\text{fg}_{\text{insérée}}(\tilde{R}) = V_{\text{germes}} \cdot \tilde{f}g(\tilde{R}) \quad (3.25)$$

### Germination continue

Le critère de germination de cette deuxième méthode est basé sur le calcul de la différence entre la concentration à l'itération actuelle et la concentration à l'itération précédente. Si

cette différence est négative, aucune germination n'a lieu car la matrice est déjà en train de s'appauvrir en gaz consécutivement à la croissance des bulles. Si la différence est nulle, la germination n'a pas lieu non plus car le système est dans un état d'équilibre. En revanche, si cette différence est positive, la sursaturation est en train d'augmenter et l'on estime alors qu'il y a un déficit de bulles. Elles ne pompent pas assez de gaz pour contrebalancer le terme source et on va donc insérer de nouvelles bulles pour rétablir l'équilibre.

Le calcul du volume de germes à insérer est basé sur l'augmentation de concentration entre les deux itérations. Un paramètre  $a$ , défini par l'utilisateur (compris entre 0 et 1), donne le pourcentage de l'augmentation de concentration qui va être ôtée à la matrice et convertie en nouveaux germes (conformément à l'équation (3.26)). De cette manière, on limite l'augmentation de concentration et l'on augmente le pompage des bulles (puisqu'elles sont plus nombreuses). On essaie ainsi de ramener le système vers un état d'équilibre entre création de gaz et pompage par les bulles.

$$V_{\text{germes}} = a \left( s^{j+1,k} - s^{j,k} \right) V^k \quad (3.26)$$

Une différence à noter entre cette méthode et celle de germination seuil est le fait qu'ici la taille des germes insérés est variable en fonction du temps. En effet, avec cette méthode, les bornes de la distribution de germes varient car elles sont définies par la valeur de la concentration en gaz dissous au moment de la germination. Contrairement au cas de la germination seuil, la concentration n'est ici pas plafonnée : la germination peut survenir pour n'importe quelle valeur de concentration. Néanmoins, la distribution de germes est normée de la même manière que pour la méthode précédente, conformément à l'équation (3.24) et la distribution de germes insérés est également calculée suivant l'équation (3.25).

### 3.8.5 Migration

Contrairement à la croissance et à la diffusion du gaz, la migration n'est pas résolue à l'aide d'un schéma d'Euler, mais par calcul direct du flux de bulles d'une tranche à une autre. Cette méthode présente l'avantage d'être parfaitement conservative et nécessite un temps de calcul plus court. Dans le code actuel, à partir de la taille des bulles et de la hauteur des tranches, une condition est imposée sur le pas de temps pour que les bulles ne puissent pas parcourir une distance supérieure à la hauteur d'une tranche entre deux itérations. En un pas de temps, les bulles ne peuvent donc passer que dans la tranche immédiatement supérieure à celle où elles se trouvaient précédemment.

Le calcul de la quantité de bulles qui vont migrer d'une tranche vers la tranche supérieure est effectué indépendamment pour chaque classe de taille. Pour chacune d'elles, on détermine la distance que les bulles ont parcouru dans l'intervalle de temps égal au pas de temps du code. Elle est calculée en multipliant le pas de temps par la vitesse des bulles (équation (3.27)). Cette dernière est donnée par l'équation de Hadamard-Rybczynski ((1.9) donnée

au chapitre 1 [51, 6], en tenant compte de la dépendance de la viscosité en fonction de la dose reçue.

$$d^i = v_z^i \Delta t \quad (3.27)$$

où  $d^i$  représente la distance parcourue par les bulles de la classe  $i$  pendant l'incrément de temps  $\Delta t$  et  $v_z^i$  la vitesse des bulles de la classe  $i$ .

Cette distance est ensuite rapportée à la hauteur de la tranche considérée. Ce rapport nous donne la proportion de bulles de cette classe qui vont migrer vers la tranche supérieure (équation (3.28)).

$$\text{PropMig}^{i,k} = \frac{d^i}{\text{TailleTranche}^k} \quad (3.28)$$

où  $\text{PropMig}^{i,k}$  désigne la proportion de bulles de la classe  $i$  de la tranche  $k$  qui vont migrer vers la tranche  $k + 1$  et  $\text{TailleTranche}^k$  la hauteur de la tranche  $k$  où se trouvent les bulles avant migration.

En recombinaison les nombres de bulles de chaque classe qui vont migrer, on recrée une distribution migrant vers la tranche supérieure. Cette distribution est dans un premier temps retirée à la population de la tranche considérée. Elle sera ensuite ajoutée à la population de la tranche supérieure (figure 3.8).

Par conséquence de l'indépendance sur chaque tranche de l'adaptation de maillage en  $\tilde{R}$ , ce maillage peut être différent pour la tranche de départ des bulles et la tranche d'accueil. Nous devons pour cela interpoler cette distribution puis la projeter sur le maillage de la seconde tranche. Par souci de conservation de masse, nous calculons le volume total de la distribution définie sur le premier maillage ainsi que le volume de la distribution projetée sur le second maillage. La distribution projetée est alors multipliée par le rapport des deux volumes, de sorte qu'il y ait conservation de volume lors de l'étape de projection.

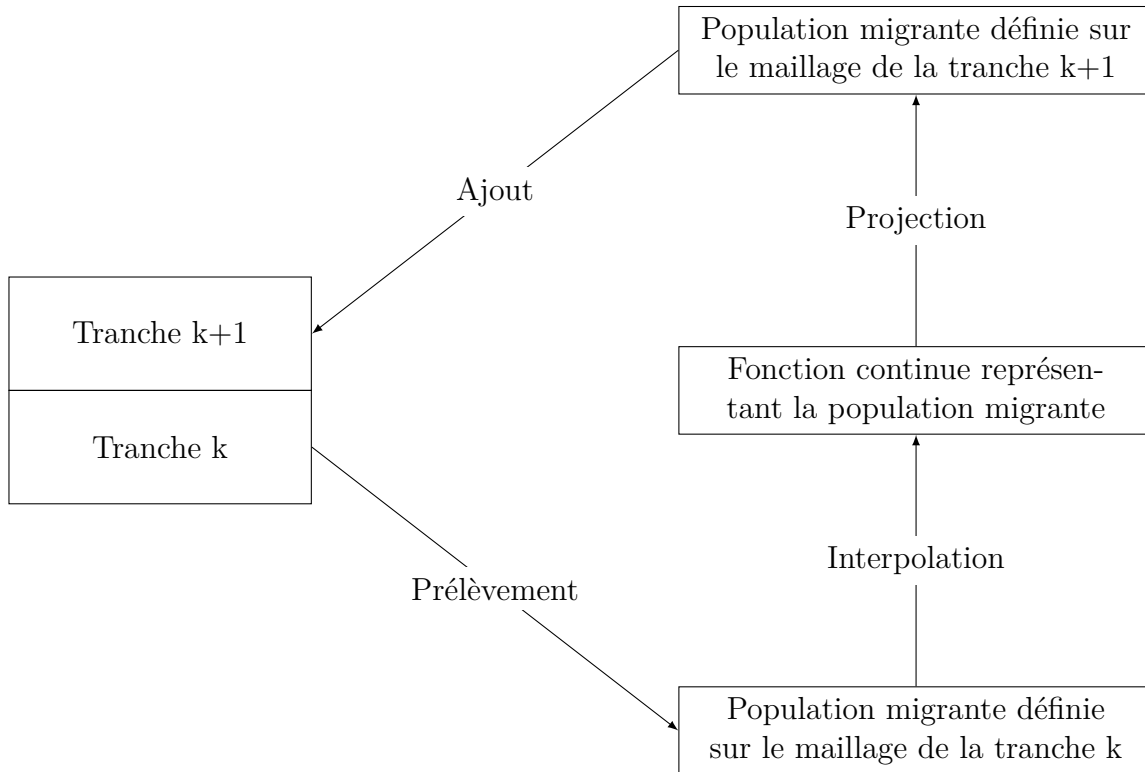


FIGURE 3.8 – Schéma de la méthode numérique de migration

### 3.9 Adaptation du pas de temps

Le code de gonflement développé dans ce travail est un code incrémental en temps. Il effectue la résolution d'un système d'équations à un instant donné, puis à un instant ultérieur et ainsi de suite. C'est une résolution de proche en proche. Dans ce type de programme, la valeur du pas de temps est une donnée de première importance. Si le pas de temps est trop grand, l'approximation d'Euler n'est plus valable et l'on s'écarte fortement de la solution. En revanche, si le pas de temps est trop petit, le résultat sera très proche de la solution mais les temps de calcul peuvent être déraisonnables, rendant le code inexploitable. Il est donc important de choisir une valeur du pas de temps adaptée au problème.

Les phénomènes modélisés dans ce travail s'effectuent à des échelles de temps variées. La germination implique par exemple des échelles de temps très courtes tandis que la migration des bulles implique des échelles de temps beaucoup plus longues. Il est alors nécessaire d'avoir un pas de temps évolutif, c'est-à-dire qui peut s'adapter au cours de la simulation selon les mécanismes mis en jeu. Cela permettra de décrire avec une bonne précision les phénomènes courts (le code diminuant le pas de temps au moment où ceux-ci ont lieu), tout en permettant d'explorer des échelles de temps longues (le code augmentant le pas de temps lorsqu'aucun mécanisme rapide n'a lieu).

Dans le code présenté ici, le critère d'adaptation du pas de temps est basé sur l'évolution de deux grandeurs modélisées : la population de bulles et la concentration en gaz dissous.

Schématiquement, avant une nouvelle résolution des équations, le temps est incrémenté. Puis, après celle-ci, on regarde si l'évolution des deux grandeurs pré-citées, entre les deux incréments de temps successifs, a été trop faible (auquel cas on choisira d'augmenter le pas de temps), ou trop importante (auquel cas le pas de temps sera diminué).

En ce qui concerne la concentration, nous considérons son évolution relative pour chaque tranche, notée DiffEps(k), définie par :

$$\text{DiffEps}(k) = \frac{|\varepsilon^{j,k} - \varepsilon^{j-1,k}|}{\varepsilon^{j,k}} \quad (3.29)$$

Pour ce qui est de la population de bulles, nous considérons son évolution relative de manière globale (c'est-à-dire en prenant le volume total des bulles) pour chaque tranche. Elle est notée DiffPhi(k) et est définie comme suit :

$$\text{DiffPhi}(k) = \frac{\left| \int_0^\infty (f^j(\tilde{R}, z) - f^{j-1}(\tilde{R}, z)) \tilde{R}^3 d\tilde{R} \right|}{\int_0^\infty f^{j-1}(\tilde{R}, z) \tilde{R}^3 d\tilde{R}} \quad (3.30)$$

Nous avons fait le choix dans ce code d'avoir une ligne temporelle unique pour l'ensemble du fût. Nous ne permettons pas à une tranche d'être simulée plus vite qu'une autre, car elles communiquent et s'échangent du gaz (par diffusion) et des bulles (par migration). Cela nous impose de n'avoir qu'un marqueur global d'évolution de concentration (DiffEps<sub>g</sub>) et un marqueur global d'évolution de population (DiffPhi<sub>g</sub>) pour tout le fût, pour l'adaptation du pas de temps. Ces deux marqueurs globaux sont pris comme étant la moyenne des marqueurs de chaque tranche.

Deux critères sont ensuite appliqués à ces marqueurs (schématisés sur la figure 3.9) : un critère pour savoir si il faut augmenter le pas de temps et un critère pour savoir si il faut le diminuer. Le premier critère consiste à comparer la valeur maximum des deux marqueurs DiffPhi<sub>g</sub> et DiffEps<sub>g</sub> à une valeur critique définie par l'utilisateur (0,001 par exemple). Si ce maximum est inférieur à la valeur critique, il est jugé que l'évolution du système est lente et qu'il faut augmenter le pas de temps (il est multiplié par 2). Le second critère consiste à comparer la valeur maximum des deux marqueurs DiffPhi<sub>g</sub> et DiffEps<sub>g</sub> à une seconde valeur critique définie par l'utilisateur (0,01 par exemple). Si ce maximum est supérieur à cette valeur critique, l'évolution du système est jugée rapide et le pas de temps est diminué (il est divisé par 2). Ces deux critères permettent donc d'adapter le pas de temps en privilégiant la précision à la rapidité (par exemple si DiffPhi<sub>g</sub> est inférieur à la première valeur critique mais que DiffEps<sub>g</sub> est supérieure à la deuxième valeur critique, le pas de temps sera diminué). Dans le cas où le maximum des deux marqueurs est compris entre les deux valeurs critiques, le pas de temps reste inchangé.

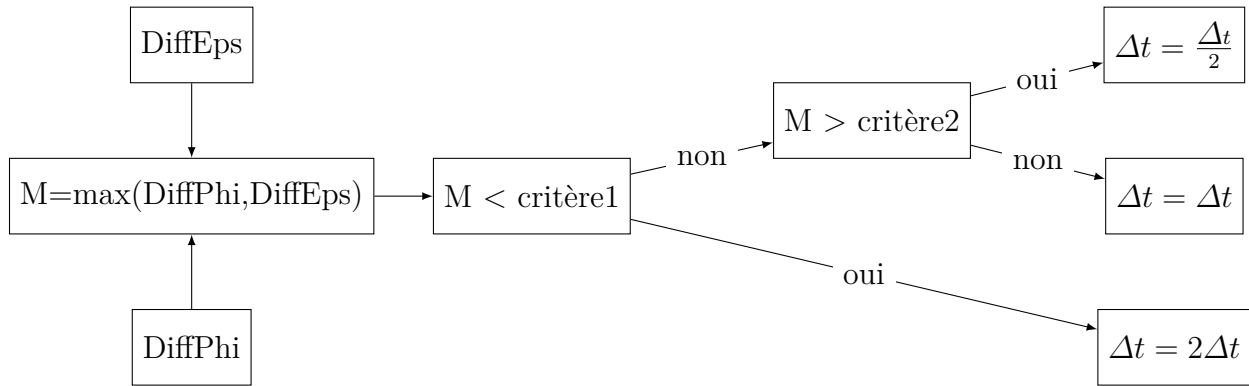


FIGURE 3.9 – Schéma du principe d’adaptation du pas de temps

### 3.10 Évolution de la viscosité - Loi de vieillissement

Le bitume est sensible aux rayonnements émis par les radionucléides qu’il contient et ses propriétés rhéologiques évoluent en fonction de la dose intégrée. Mouazen [5] a déterminé une loi de vieillissement des enrobés bitumineux de type STE3 soumis au rayonnement  $\gamma$  à un débit de dose de 4500 Gy/h. Dans ce code, nous allons utiliser la loi qu’il a obtenue lors de ses travaux de thèse pour calculer la viscosité de l’enrobé. Pour cela, il nous est nécessaire de connaître la dose totale reçue par le matériau à chaque incrément de temps. Elle est calculée à partir des données fournies par le code RABBI. La viscosité est donc mise à jour à chaque incrément de temps du code. La loi de vieillissement des enrobés bitumineux déterminée par Mouazen est :

$$\eta_{\text{Bitume pur}} = 8,9 \cdot 10^4 \exp\left(\frac{D_i}{2,023}\right) + 3,49 \cdot 10^5$$

où  $D_i$  représente la dose intégrée en MGy, la viscosité étant en Pa.s.

L’enrobé est un matériau chargé et sa viscosité peut être décrite par une loi de Krieger Dougherty [57], le bitume étant la matrice et les sels jouant le rôle de charges :

$$\eta_{\text{Enrobé bitumineux}} = \eta_{\text{Bitume pur}}(D_i) \cdot \left(1 - \frac{\varphi_{\text{eff}}(D_i)}{\varphi_{\text{max}}}\right)^{-2}$$

où  $\varphi_{\text{max}}$  est la fraction d’empilement maximal, et  $\varphi_{\text{eff}}$  est la fraction volumique effective des sels qui dépend de la dose reçue.

### 3.11 Calcul du gonflement

Le gonflement est défini comme étant le rapport entre le volume total de bulles présentes dans le fût et le volume total d'enrobé dans le fût (qui est constant au cours du temps). Ainsi, lorsque l'on n'a aucune bulle, le gonflement est nul et il atteint 100% lorsqu'on a autant de volume de bulles que de volume d'enrobé. Un gonflement de 100% correspond donc à un volume total de matériau égal au double du volume initial.

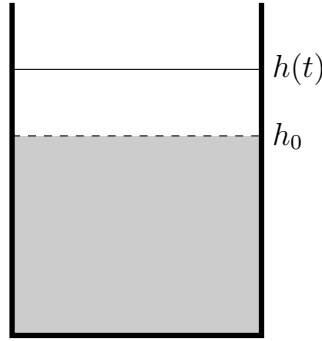


FIGURE 3.10 – Illustration du gonflement d'un fût

Numériquement, le gonflement est calculé en faisant la somme des volumes de toutes les bulles de toutes les classes de toutes les tranches du fût, puis en divisant ce résultat par le volume initial d'enrobé (somme des volumes initiaux de toutes les tranches) :

$$G(t) = \frac{\int_0^{h(t)} \left( \int_0^\infty \frac{4\pi}{3} \tilde{R}^3 f(\tilde{R}, z, t) d\tilde{R} \right) dz}{V_{\text{InitEnrobé}}} \quad (3.31)$$

où  $G(t)$  désigne le gonflement,  $h(t)$  la hauteur totale de matériau et  $V_{\text{InitEnrobé}}$  le volume initial d'enrobé dans le fût.

Macroscopiquement, cela revient au même que l'équation (3.32), illustrée par la figure 3.10.

$$G(t) = \frac{h(t) - h_0}{h_0} \quad (3.32)$$

### 3.12 Calcul de l'évacuation de gaz par migration des bulles

La quantité totale de gaz évacué est déterminée via le calcul du débit de gaz sortant de la tranche supérieure du fût. Pour chaque incrément de temps, la migration des bulles présentes dans cette dernière tranche entraîne une évacuation de gaz. La méthode pour déterminer cette quantité évacuée est la même que celle qui nous permet de faire passer des bulles d'une tranche à une autre par migration (cf. section 3.8.5 de ce chapitre, équations (3.27) et (3.28)). La quantité de gaz évacué pour chaque classe correspond au volume représenté par l'ensemble des bulles de la classe qui sont sorties. Ainsi, la quantité de gaz évacué par migration pendant le pas de temps considéré correspond à la somme des quantités évacuées de toutes les classes :

$$\text{GazEvacue}^j = \int_0^\infty \left( \frac{4\pi}{3} \tilde{R}^3 f^{k_f, j}(\tilde{R}) s_i(\tilde{R}) \frac{v_z(\tilde{R}) \Delta t}{\text{TailleTranche}^{k_f}} \right) d\tilde{R} \quad (3.33)$$

où  $\text{GazEvacue}^j$  correspond à la quantité de gaz évacué lors de l'itération  $j$ ,  $k_f$  désigne l'indice de la dernière tranche du fût,  $v_z(\tilde{R})$  la vitesse des bulles en fonction de leur taille,  $\Delta t$  le pas de temps et  $\text{TailleTranche}^{k_f}$  l'épaisseur de la dernière tranche du fût.

L'évacuation totale de gaz est calculée en sommant les quantités évacuées pour chaque pas de temps depuis le début de la simulation, ce qui revient à intégrer le débit sortant de gaz sur la période simulée :

$$\text{GazEvacueTotal}^j = \sum_{x=1}^j \text{GazEvacue}^x \quad (3.34)$$

où  $\text{GazEvacueTotal}^j$  représente la quantité totale de gaz évacué jusqu'à l'itération  $j$ .