

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

DÉTERMINATION DE SOURCES DE CHALEUR ET DE TAUX DE
CROISSANCE BIOCHIMIQUES AVEC CONVECTION NATURELLE
EN MILIEU POREUX À L'AIDE D'UNE MÉTHODE INVERSE

SIMON JASMIN
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIAE DOCTOR (Ph.D.)
(GÉNIE MÉCANIQUE)

JUIN 2006



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-20830-4

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-20830-4

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

DÉTERMINATION DE SOURCES DE CHALEUR ET DE TAUX DE
CROISSANCE BIOCHIMIQUES AVEC CONVECTION NATURELLE
EN MILIEU POREUX À L'AIDE D'UNE MÉTHODE INVERSE

présentée par : JASMIN Simon

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiae Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. VASSEUR Patrick, Ph.D., président

M. PRUD'HOMME Michel, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. STUART Paul, Ph.D., membre

M. GOSSELIN Louis, Ph.D., membre externe

Dédicace

À mes parents, Jocelyne et Christian, pour m'avoir transmis l'amour de l'éducation.

À mes frères, Éric et François, pour leur goût du débat scientifique.

À ma femme, Andrée, pour son support continu.

À mon fils à naître, pour m'avoir apporté le goût du dépassement et celui de terminer!

«Pour accéder au sens de la vie, il faut une décision, consciente et active.»

*«Si nous avons un rôle à jouer dans l'univers, c'est bien celui d'aider la nature à
accoucher d'elle-même.»*

«Il revient à l'être humain de donner un sens à la réalité.»

- Hubert Reeves, L'heure de s'enivrer, 1986

Remerciements

Je tiens, en premier lieu, à remercier mon directeur de recherche, le professeur Michel Prud'homme, pour m'avoir permis de découvrir ce sujet passionnant des problèmes inverses. J'ai particulièrement apprécié l'occasion qui m'a été offerte de présenter le fruit de nos travaux dans plusieurs conférences internationales qui ont eu lieu à travers le monde.

J'adresse également mes remerciements au professeur Patrick Vasseur pour avoir accepté la présidence de mon jury d'examen ainsi, qu'aux professeurs Paul Stuart et Louis Gosselin d'avoir accepté, malgré leur horaire chargé, d'évaluer ce travail.

Un travail de si longue haleine nécessite bien des sacrifices et beaucoup de soutien. À ce titre, ceux et celles qui composent ma famille ont su m'épauler, me distraire et m'encourager. Je leur en saurai gré toute ma vie.

Par leur soutien financier, le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) et le Fonds pour la formation des chercheurs et l'aide à la recherche FCAR (maintenant le Fonds québécois de la recherche sur la nature et les technologies, FQRNT), qui m'ont tous les deux octroyé des bourses de doctorat, m'ont permis de me concentrer, sans souci monétaire, sur mes travaux de recherche.

Je tiens également à exprimer mes remerciements à mes collègues et amis de Soconag, Marc-Antoine Pelletier, Charles Tremblay, Jacques Désilets et André Larose qui par leur compréhension et leur support m'ont aidé à compléter ce travail.

Par ailleurs, les expériences que j'ai acquises dans le mouvement étudiant à l'Association des étudiants des cycles supérieurs de Polytechnique (AÉCSP), au Conseil

national des cycles supérieurs de la Fédération étudiante universitaire du Québec (CNCS-FEUQ), au Comité consultatif sur l'accessibilité financière aux études (CCAFE) et au Conseil d'administration de l'École Polytechnique m'ont permis de compléter ma formation doctorale par des apprentissages uniques dont je profiterai toute ma vie.

Finalement, mon séjour à Polytechnique n'aurait pas été aussi enrichissant, stimulant et amusant sans les cafés matinaux, les dîners, les marches santé et les pauses syndicales avec mes amis Dominic D'Amours, Gontran Bage, Nick Virgilio, Valérie Bécaert, Sofiane Achiche, Lévis Thériault, Hélène Lafortune, etc.

Résumé

La gestion environnementale des résidus comportant de la biomasse est à la source de nouvelles approches pour la transformer en produits moins nocifs pour l'environnement et utiles pour la société tel que le compostage, la production d'énergie propre, la dégradation ou la filtration des polluants, etc. Les connaissances sur les procédés biologiques demeurent souvent le fruit d'approches expérimentales. On constate le besoin de développer, pour le design et le contrôle efficaces des réacteurs biologiques, une méthode permettant une modélisation adéquate de la génération de chaleur et des différents paramètres biochimiques intervenant dans les modèles de croissance microbienne, qui peuvent dépendre de réactions biochimiques parallèles et séquentielles très complexes. À titre d'exemple, on pourrait prescrire les dimensions minimales de sites d'enfouissement afin d'optimiser l'activité des bactéries mésophiles, principales responsables de la dégradation et particulièrement sensibles aux températures.

L'approche du problème inverse se révèle donc intéressante pour déterminer la distribution et l'intensité de la source de chaleur, ainsi que les paramètres biochimiques à l'intérieur d'un réacteur biologique à partir de senseurs de température. Cette approche a été conçue dans le but de déterminer les conditions limites ou bien les propriétés thermophysiques d'un système dans lequel on ne peut pas mesurer directement ces paramètres. Par contre, les problèmes inverses sont mathématiquement mal posés, c'est-à-dire que de légères variations dans les données fournies par les senseurs ont la propriété de générer des changements d'une amplitude beaucoup plus considérable dans les solutions.

La méthode inverse sélectionnée est celle du gradient conjugué avec les équations adjointes qui a permis de développer un outil servant à déterminer la source de chaleur Q et le taux de croissance spécifique μ à l'intérieur d'un milieu poreux à partir de mesures

provenant de senseurs de température. Dans ce problème, les phénomènes de transport sont accentués par la convection naturelle générée par la chaleur provenant d'une réaction de dégradation. Les équations adjointes sont dérivées dans le cas général pour les problèmes de convection naturelle en milieu poreux avec diffusion de masse pour une source de chaleur proportionnelle à la consommation de substrat par de la biomasse régie par le modèle de Monod. La modélisation de la source de chaleur est compatible avec plusieurs situations réelles telles que le compostage, la dégradation des matières organiques, la dispersion des contaminants, la biofiltration ou les réacteurs à lit granulaire.

En premier lieu, afin d'évaluer la performance numérique de la méthode de résolution des équations basée sur les volumes de contrôle avec un schéma de puissance pour les termes d'advection, on résout un cas simplifié du problème inverse de convection naturelle où l'on doit déterminer la source de chaleur inconnue en milieu poreux avec une seule équation de diffusion de masse sans terme source. On démontre par comparaison avec une solution analytique que cette méthode permet de prédire adéquatement, pour différents nombres de Rayleigh et de Lewis, une source de chaleur qui est égale à la concentration moyenne verticale. En second lieu, on étudie un cas plus complexe faisant intervenir tous les paramètres, dans lequel le modèle de Monod est intégré. Sans information préalable sur la source de chaleur $Q(r,t)$, proportionnelle à la consommation de substrat, il ressort qu'on peut prédire celle-ci avec justesse jusqu'à des nombres de Rayleigh de l'ordre de 10^5 . Les solutions, tant directes qu'inverses, sont extrêmement sensibles aux variations des rapports de forces volumiques. De ce fait, les solutions convergent plus difficilement, mais donnent d'excellents résultats.

Par la suite, on étudie un problème avec un modèle biochimique et des conditions limites qui fait intervenir des valeurs de paramètres plus réalistes. On emploie à nouveau la méthode du gradient conjugué pour déterminer l'intensité et la distribution de la source de chaleur. Le cas où les paramètres du modèle de Monod dépendent de la température

et engendrent des phénomènes de transport plus importants est également traité. On prédit avec succès la source de chaleur, même lorsque celle-ci évolue rapidement par rapport à la diffusion thermique. Toutefois, un pas de temps relativement petit est alors requis. Pour ce cas, il faut des senseurs à tous les nœuds du maillage afin d'obtenir des solutions inverses précises, car même avec un nombre de Rayleigh égal à 0,25, soit près d'un régime de conduction, la source de chaleur obtenue avec des paramètres qui varient exponentiellement avec la température est clairement bidimensionnelle. Toutefois, on constate qu'à des nombres de Rayleigh de l'ordre de 2,5 ou de 25, des couches limites apparaissent qui conduisent à une certaine uniformisation des variables ainsi que de la source de chaleur à l'intérieur de la cavité. Il est alors possible d'obtenir de bonnes solutions inverses en n'utilisant qu'un seul senseur. Dans tous les cas, lorsque du bruit est introduit dans les données fournies par les senseurs de température, la stabilisation des solutions inverses peut être réalisée en arrêtant la simulation quelques itérations avant que le critère d'arrêt ne soit atteint. Par conséquent, les composantes indésirables à plus hautes fréquences de la solution, essentiellement attribuables au bruit, ne sont pas reproduites.

On étudie également la capacité de la méthode à déterminer les paramètres intervenant dans le modèle utilisé pour décrire l'activité microbienne. On a généralement recours à la mesure directe des concentrations pour ce faire. Toutefois, on utilise ici des senseurs de température pour déterminer le taux de croissance μ , puisque l'on connaît à présent la source de chaleur. Cette approche présente plusieurs avantages, dont un moindre coût financier, la simplicité de ne requérir que des relevés de température, la possibilité de les réaliser in situ et l'utilisation de méthodes qui ne perturbent pas les réactions. On démontre ainsi que la chaleur générée par une réaction de dégradation est suffisante pour permettre la détermination de l'évolution de μ à partir de mesures de température. Malgré les nombres de Rayleigh relativement modestes que l'on retrouve dans les problèmes typiques, les cas étudiés présentent des variations significatives des

différentes variables, autant pour des paramètres biochimiques constants que pour ceux qui varient en fonction de la température.

Le manque de sensibilité du problème impose toutefois une subdivision du domaine temporel dans le but d'assurer la convergence des solutions. Cette nécessité devient particulièrement apparente lorsque du bruit est introduit dans les données fournies par les senseurs de température. La solution inverse devient alors inutilisable en appliquant le critère de convergence à la lettre. Néanmoins, on peut optimiser la solution en arrêtant les simulations lorsque le niveau d'erreur se stabilise. Finalement, il suffit encore une fois d'un seul senseur de température pour déterminer, avec précision, le taux de croissance lorsque le nombre de Rayleigh est assez grand pour uniformiser les différentes variables à travers la cavité.

Abstract

Over the last few years, a tendency has emerged regarding the environmental management of organic waste. Indeed, several options are now available to transform it into products at the same time less harmful to the environment and reusable to some extent as for instance in composting processes, clean energy production, pollutant degradation and filtration, etc. The understanding of biological processes is in constant evolution and most often relies on experimental methods. Any efficient design of biological reactors requires adequate modeling of the internal heat generation and biokinetic parameters that can depend upon very complex parallel and sequential reactions. In this context, it is important to develop predictive as well as monitoring tools of the physical, chemical and biological phenomena involved. For instance, the design of vessel sizes could be provided to maintain critical temperatures for microbial activity. Determining heat generation in anaerobic environments is especially important to specify minimum landfill sizes to maintain mesophilic core temperatures.

In this context, the inverse problem approach, designed to estimate the boundary conditions or thermophysical properties of a system when direct measurements are impracticable, stands out as a valuable technique to determine the heat source distributions and biokinetic parameters, through the use of remote temperature measurements taken within the reactor itself. However, inverse problems are in mathematical terms classified as ill-posed problems, for which simple solution procedures are prone to instability with inaccurate data.

The conjugate gradient method with adjoint equations is chosen here to solve the inverse natural convection problem for the determination, from temperature measurements within a porous medium, of the unknown heat source Q and the specific growth rate constant μ . In this problem, the transport phenomena originate from the heat release that

occurs in the degradation process giving rise to free convection. A general formulation of the adjoint equations is given for the natural convection problem in a porous medium with mass diffusion and a heat source which is proportional to the rate of consumption of a substrate by a biomass, as described by a Monod model. This heat generation model is consistent with many typical situations encountered in composting, organic matter degradation, pollutant dispersion, biofiltration or packed bed filters.

Initially, a simplified case for the inverse convection problem in a porous medium with only one diffusion equation without source term is treated to evaluate the performance of the numerical method. Control volumes with a power-law scheme for the advection terms are used to solve the equations in order to determine the unknown heat source. By comparison with an analytical solution, the method is proven to be efficient to determine, over significant ranges of Rayleigh and Lewis numbers, an arbitrary source term assumed equal to the average solute concentration. Furthermore, a more complex case with all Monod model parameters is studied. Without any a priori information, the method is shown to be able to predict a volumetric source $Q(\mathbf{r},t)$ which is proportional to the rate of substrate depletion rate by the biomass. Reasonably accurate solutions are obtained at least up to Rayleigh number equal to 10^5 . Both direct and inverse solutions are very sensitive to small variations of concentration driven convection versus buoyancy, slowing down convergence. Nevertheless, excellent results are obtained.

A problem with a representative biochemical reaction under typical boundary conditions is examined next. The conjugate gradient method is then used to determine the intensity and distribution of a heat source. The variation of the Monod model parameters with temperature where transport phenomena is more predominant is also taken into account. It is found that good solutions can be obtained even when the heat release occurs very rapidly compared with the diffusion of heat, provided that sufficiently fine time steps are employed for the computations. The solutions reveal that in the near conduction regime, when the Rayleigh number is equal to 0,25, the source is not uniform when the Monod

model parameters vary exponentially with temperature. Sensors are the required at every computational point. It is observed that even for a small Rayleigh number value such as 2,5 or 25, significant convective boundary layers are present. When convection is important, variables do not show significant spatial variations and the heat source release occurs nearly uniformly. A good solution can then be achieved using just one sensor, no matter if the model parameters are constant or not. In all cases, stable solutions may be obtained from noisy data by stopping the iteration process before the high frequency components of the random noises start to significantly impair the inverse solution.

The performance of the method is then evaluated to determine the biokinetic parameters that would be involved in a Monod model describing the evolution of the biomass, for instance. This is generally achieved by direct concentration measurements. Nevertheless, since the heat source is now known from previous computations, temperature sensors may be used to determine the specific growth rate constant μ . This approach has several advantages, including lower financial cost, the simplicity of requiring only temperature data, the possibility of carrying them out in situ and the use of methods which do not disturb the reactions. The heat generated by a reaction of degradation is shown to be sufficient to allow the determination of the evolution of μ from temperature measurements. Despite the relatively modest Rayleigh numbers involved in typical problems, significant variations of the variables are present, for constant and temperature-dependant biochemical parameters as well.

It is shown that the lack of sensitivity of this problem requires subdividing the time domain to achieve convergence. This becomes especially important when noise is present in the input data; the inverse solution obtained from strict compliance with the stopping criterion is unusable. Nevertheless, optimisation of the solution can still be achieved by stopping the iterations when the error level stabilizes. Finally, once again, only one sensor is required to determine the growth rate with precision when the

Rayleigh number is sufficiently high to provide uniform field variable distributions throughout the cavity.

Table des matières

Dédicace.....	iv
Remerciements.....	v
Résumé.....	vii
Abstract	xi
Table des matières.....	xv
Liste des tableaux.....	xviii
Liste des figures	xix
Liste des sigles et abréviations.....	xxvii
Liste des annexes.....	xxix
Chapitre I : Introduction.....	1
1.1 Revue bibliographique	4
1.1.1 Problèmes inverses.....	4
1.1.2 Modèle biochimique	8
1.1.3 Génération de chaleur	17
1.2 Objectifs et contenu de la thèse.....	21
Chapitre II : Définition du problème et formulation mathématique	23
2.1 Description du problème	23
2.2 Hypothèses simplificatrices générales	24
2.3 Détermination de la source de chaleur	25
2.3.1 Équations de base.....	25
2.3.2 Problème direct	30
2.3.3 Problème de sensibilité	32
2.3.4 Problème adjoint	35
2.3.5 Cas particuliers de dépendance de la source de chaleur	37
2.4 Détermination du taux de croissance	39
2.4.1 Équations de base et problème direct.....	39

2.4.2 Problème de sensibilité	39
2.4.3 Problème adjoint	41
Chapitre III : Méthode de solution	43
3.1 Méthode du gradient conjugué.....	43
3.2 Méthode du gradient conjugué modifiée.....	46
3.3 Méthode numérique	48
3.4 Algorithme de solution numérique	53
Chapitre IV : Évaluation numérique de la méthode.....	56
4.1 Validation préliminaire	56
4.1.1 Description du problème	56
4.1.2 Régime de conduction et de diffusion.....	58
4.1.3 Régime de convection	62
4.2 Double diffusion	70
4.2.1 Description du problème	70
4.2.2 Régime de conduction et de diffusion.....	72
4.2.3 Régime de convection thermique.....	90
4.2.4 Régime de convection thermique et solutale	94
4.3 Conclusion	104
Chapitre V : Résultats pour la détermination d'une source de chaleur biochimique.....	106
5.1 Définition du problème	106
5.2 Analyse d'échelles	109
5.3 Convection dans une cavité de petites dimensions	111
5.4 Convection dans une cavité de plus grandes dimensions.....	118
5.5 Effet du bruit	129
5.6 Conclusion	133
Chapitre VI : Résultats pour la détermination du taux de croissance	134
6.1 Définition du problème	134
6.2 Analyse de sensibilité.....	139
6.3 Convection dans une cavité de petites dimensions	142

6.4 Convection dans une cavité de plus grandes dimensions.....	153
6.5 Effet du bruit	167
6.6 Conclusion	176
Chapitre VII : Conclusion.....	177
7.1 Conclusions générales.....	177
7.2 Recommandations.....	181
Références	183
ANNEXES	193

Liste des tableaux

Tableau 1.1 : Valeurs de $\mu_{\max}$ et K_S pour différents organismes et substrats.....	12
Tableau 1.2 : Valeurs typiques des paramètres du modèle de Monod.....	13
Tableau 4.1 : Paramètres de références utilisés	71
Tableau 5.1 : Valeurs des paramètres adimensionnels en fonction de l'échelle de dimension L de la figure 5.1	110
Tableau 5.2 : Valeurs extrêmes des températures et des paramètres dimensionnels pour $Ra = 0,25$	117
Tableau 5.3 : Valeurs extrêmes des températures et des paramètres dimensionnels pour $Ra = 25$	125
Tableau 6.1 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$ et paramètres constants	143
Tableau 6.2 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$, paramètres variables.....	148
Tableau 6.3 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 2,5$ et 25, paramètres constants	154
Tableau 6.4 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 2,5$ et 25, paramètres variables.....	160
Tableau 6.5 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$, 2,5 et 25, paramètres constants, bruit $\sigma = 0,04$	168
Tableau 6.6 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$, 2,5 et 25, paramètres variables, bruit $\sigma = 0,04$	172

Liste des figures

Figure 1.1 : Méthodes de solution du problème inverse	5
Figure 1.2 : Fermentation microbienne.....	8
Figure 1.3 : Phases typiques de croissance microbienne dans un réacteur à fonctionnement discontinu.....	9
Figure 2.1 : Domaine de solution arbitraire en milieu poreux	23
Figure 3.1 : Volume de contrôle	48
Figure 3.2 : Algorithme de solution numérique pour les systèmes d'équations	55
Figure 4.1 : Géométrie et conditions limites du problème.....	57
Figure 4.2 : Profil de la source de chaleur à t_f , $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 0$	60
Figure 4.3 : Profil de la source de chaleur en fonction du temps à $x = 0,5$, bruit sur les données, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 0$, $\sigma = 0,04$	61
Figure 4.4 : Profil de la source de chaleur en fonction du temps à $x = 0,5$, influence du produit ϵLe , $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 0$	62
Figure 4.5 : Isothermes, ligne de courant et de concentration en régime permanent, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$	63
Figure 4.6 : Concentration à t_f pour $Le = 1$ et 10 , $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 10^5$	64
Figure 4.7 : Profils de la source de chaleur à t_f pour différents nombres de Lewis, $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 10^5$	64
Figure 4.8 : Profils de la source de chaleur à t_f , influence de la position des senseurs, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$	65
Figure 4.9 : Profil de la source de chaleur en fonction du temps à $x = 0,5$, bruit sur les données d'entrée, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$, $\sigma = 0,04$	66
Figure 4.10 : Source de chaleur Q en fonction du temps, solution directe pour un flux de concentration de forme triangulaire, $Le = 1$, $Ra = 10^5$	68
Figure 4.11 : Source de chaleur Q en fonction du temps, solution inverse pour un flux de concentration de forme triangulaire, $Le = 1$, $Ra = 10^5$	68

Figure 4.12 : Profil de la source de chaleur à t_f , modèle de source non linéaire, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$	69
Figure 4.13 : Géométrie et conditions limites du problème.....	70
Figure 4.14 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, solution directe pour $Ra = 0$	73
Figure 4.15 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, solution inverse pour $Ra = 0$	74
Figure 4.16 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, influence de ε , $Ra = 0$..	75
Figure 4.17 : Influence de ε , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$	76
Figure 4.18 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, influence de Le_s , $Ra = 0$	77
Figure 4.19 : Influence de Le_s , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$	78
Figure 4.20 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, influence de Le_x , $Ra = 0$	79
Figure 4.21 : Influence de Le_x , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$	80
Figure 4.22 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, influence de μ , $Ra = 0$..	81
Figure 4.23 : Influence de μ , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$	82
Figure 4.24 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, influence de K_s , $Ra = 0$..	83
Figure 4.25 : Influence de K_s , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$	84
Figure 4.26 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, influence de K_D , $Ra = 0$	85
Figure 4.27 : Influence de K_D , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$	86
Figure 4.28 : Évolution de Q en fonction de t à $x = 0,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, rangée de senseurs à $y = 0,5$, $Ra = 0$	88
Figure 4.29 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, avec bruit sur les données $\sigma = 0,04$, rangée de senseurs à $y = 0,5$, $Ra = 0$	88
Figure 4.30 : Évolution de Q en fonction de t à $x = 0,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, senseurs en tous points, $Ra = 0$	89

Figure 4.31 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, senseurs en tous points, $Ra = 0$	89
Figure 4.32 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $Ra = 10^2, 10^3$	91
Figure 4.33 : Isolignes de Q à $t = 0,1$, $Ra = 10, 10^2, 10^3$	91
Figure 4.34 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à $t = 0,1$, $Ra = 10, 10^2, 10^3$	92
Figure 4.35 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $Ra = 10^5$	93
Figure 4.36 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à t_{MAX} , $N_X = 0$, $N_S = -0,1, 0, 0,1$, $Ra = 10^4$	95
Figure 4.37 : Isolignes de Q à t_{MAX} , $N_X = 0$, $N_S = -0,1, 0, 0,1$, $Ra = 10^4$	96
Figure 4.38 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $N_X = 0$, $N_S = -0,1, 0, 0,1$, $Ra = 10^4$	96
Figure 4.39 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à t_{MAX} , $N_S = 0$, $N_X = -0,05, 0, 0,05$, $Ra = 10^4$	97
Figure 4.40 : Isolignes de Q à t_{MAX} , $N_S = 0$, $N_X = -0,05, 0, 0,05$, $Ra = 10^4$	98
Figure 4.41 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $N_S = 0$, $N_X = -0,05, 0, 0,05$, $Ra = 10^4$	98
Figure 4.42 : Évolution de Q en fonction de t au centre, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, $N_S = 0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$	100
Figure 4.43 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, $N_S = 0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$	100
Figure 4.44 : Évolution de Q en fonction de t au centre, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, $N_S = -0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$	101
Figure 4.45 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, $N_S = -0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$	101
Figure 4.46 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à $t = 0,04$, $N_S = 0,5$, $N_X = 0,5$, $Ra = 10^3$	102
Figure 4.47 : Isolignes de Q à $t = 0,04$, $N_S = 0,5$, $N_X = 0,5$, $Ra = 10^3$	103

Figure 4.48 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $N_s = 0,5$, $N_x = 0,5$, $Ra = 10^3$	103
Figure 5.1 : Géométrie et conditions limites du problème	107
Figure 5.2 : Évolution de Q en fonction du temps au centre, N senseurs, $Ra = 0,25$	111
Figure 5.3 : Lignes de courant et isothermes à $t = 0,25$, $Ra = 0,25$, paramètres constants	112
Figure 5.4 : Évolution de Q en fonction de t au centre, paramètres constants, 1 senseur, $Ra = 0,25$	113
Figure 5.5 : Évolution de S et X en fonction de t au centre, $Ra = 0,25$	114
Figure 5.6 : Évolution de T en fonction de t au centre, $Ra = 0,25$	115
Figure 5.7 : Courbes de niveau de Q à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$	115
Figure 5.8 : Courbes de niveau de T , S , X et ψ à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$	116
Figure 5.9 : Lignes de courant, paramètres constants et variables, $Ra = 2,5$	119
Figure 5.10 : Lignes de courant, paramètres constants et variables, $Ra = 25$	119
Figure 5.11 : Courbes de niveau de Q , T , S et X à $t = 7,5 \times 10^{-3}$, paramètres variables, $Ra = 2,5$	120
Figure 5.12 : Évolution de Q en fonction du temps au centre, N senseurs, $Ra = 2,5$	121
Figure 5.13 : Évolution de Q en fonction du temps au centre, N senseurs, $Ra = 25$	121
Figure 5.14 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres constants, $Ra = 2,5$	122
Figure 5.15 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres constants, $Ra = 25$	123
Figure 5.16 : Évolution de S et X en fonction de t au centre, $Ra = 2,5$	124
Figure 5.17 : Évolution de S et X en fonction de t au centre, $Ra = 25$	124
Figure 5.18 : Évolution de T en fonction de t au centre, $Ra = 2,5$	126
Figure 5.19 : Évolution de T en fonction de t au centre, $Ra = 25$	126
Figure 5.20 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres variables, $Ra = 2,5$	127

Figure 5.21 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres variables, $Ra = 25$	127
Figure 5.22 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres variables, $Ra = 0,25$	128
Figure 5.23 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres constants, $Ra = 0,25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$	130
Figure 5.24 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres variables, $Ra = 0,25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$	130
Figure 5.25 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres constants, $Ra = 2,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$	131
Figure 5.26 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres variables, $Ra = 2,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$	131
Figure 5.27 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres constants, $Ra = 25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$	132
Figure 5.28 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres variables, $Ra = 25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$	132
Figure 6.1 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,125$, $\mu_0(t) = 90\% \mu(t)$..	137
Figure 6.2 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,125$, $\mu_0(t) = 95\% \mu(t)$..	137
Figure 6.3 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,100$, $\mu_0(t) = 0$	138
Figure 6.4 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,025$, $\mu_0(t) = 0$	138
Figure 6.5 : Taux de croissance μ en fonction du temps, variations de 5% de μ	140
Figure 6.6 : Température en fonction du temps, variations de 5% de μ	140
Figure 6.7 : Concentrations de S et X en fonction du temps, variations de 5% de μ	141
Figure 6.8 : Source de chaleur en fonction du temps, variations de 5% de μ	141
Figure 6.9 : Taux de croissance μ en fonction de temps, paramètres constants, $Ra = 0,25$	145
Figure 6.10 : Température en fonction de t au centre, paramètres constants, $Ra = 0,25$	145

Figure 6.11 : Concentrations de S et X en fonction de t, paramètres constants, $Ra = 0,25$	146
Figure 6.12 : Source de chaleur en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 0,25$	146
Figure 6.14 : Taux de croissance μ et de mortalité K_D à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$	149
Figure 6.15 : Isothermes et lignes de courant à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$	150
Figure 6.16 : Isoconcentrations de S et de X à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$	150
Figure 6.17 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 0,25$	151
Figure 6.18 : Température en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 0,25$	151
Figure 6.19 : Concentrations de S et de X en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 0,25$	152
Figure 6.20 : Source de chaleur en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 0,25$	152
Figure 6.21 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 2,5$	155
Figure 6.22 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 25$	155
Figure 6.23 : Température en fonction du temps au centre, paramètres constants, $Ra = 2,5$	156
Figure 6.24 : Température en fonction du temps au centre, paramètres constants, $Ra = 25$	156
Figure 6.25 : Concentration de S et de X en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 2,5$	157

Figure 6.26 : Concentration de S et de X en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 25$	157
Figure 6.27 : Source de chaleur en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 2,5$	158
Figure 6.28 : Source de chaleur en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 25$.	158
Figure 6.29 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 2,5$	161
Figure 6.30 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 25$	161
Figure 6.31 : Température en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 2,5$	162
Figure 6.32 : Température en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 25$	162
Figure 6.33 : Concentrations de S et de X en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 2,5$	163
Figure 6.34 : Concentrations de S et de X en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 25$	163
Figure 6.35 : Source de chaleur en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 2,5$	164
Figure 6.36 : Source de chaleur en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 25$	164
Figure 6.37 : Courbes de niveau de μ , K_D et Q à $t = 7,8 \times 10^{-3}$, paramètres variables, $Ra = 2,5$	165
Figure 6.38 : Isothermes, isoconcentration de S et X et lignes de courant à $t = 7,8 \times 10^{-3}$, paramètres variables, $Ra = 2,5$	166
Figure 6.39 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	169
Figure 6.40 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres constants, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	169

Figure 6.41 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	170
Figure 6.42 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres constants, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	170
Figure 6.43 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	171
Figure 6.44 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres constants, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	171
Figure 6.45 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre de la cavité, paramètres variables, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	173
Figure 6.46 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres variables, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	173
Figure 6.47 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre de la cavité, paramètres variables, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	174
Figure 6.48 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres variables, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	174
Figure 6.49 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre de la cavité, paramètres variables, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	175
Figure 6.50 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres variables, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$	175

Liste des sigles et abréviations

A	Aire
dA	Élément de la surface du domaine
E	Erreur
f	Fonction arbitraire
g	Fonction arbitraire et gravité
H	Hauteur
H _S	Enthalpie de réaction
J	Jacobien
K _D	taux de mortalité
K _S	constante de saturation
L	Longueur
Le	Nombre de Lewis
M	masse molaire
n	Direction normale
p	Direction de descente
Q	Source de chaleur
r	Position
Ra	Nombre de Rayleigh
S	Concentration du substrat
t	Temps
T	Température
u	Vitesse
X	Concentration de la biomasse
x,y	Coordonnées
Y	coefficient de rendement

Symboles grecs

α	Pas optimal ou diffusivité thermique
β	Coefficient de dilatation thermique
δ	Fonction de Dirac
Δ	Accroissement
ε	Critère d'arrêt ou porosité normalisée
μ	Taux de croissance
σ	Écart type ou rapport des chaleurs massiques
ψ	Fonction courant

Exposants

k	Itération
$\sim$	Variable de sensibilité
-	Variable adjointe
$\wedge$	Vecteur unitaire
*	Variable dimensionnelle

Indices

max	Valeur maximale
moy	Valeur moyenne
m	Valeur mesurée
0	Valeur initiale ou de référence
f	Valeur finale

Liste des annexes

Annexe I : Dérivation des équations adjointes.....	194
I.1 Formulation générale	194
I.2 Détermination de la source de chaleur.....	201
I.3 Détermination du taux de croissance	203
Annexe II : Dérivation des équations de l'algorithme du gradient conjugué	205

Chapitre I : Introduction

Depuis quelques années, une tendance émerge quant à la gestion environnementale des résidus comportant de la biomasse. En effet, que ce soit par l'instauration de cadres législatifs ou par intérêts financiers, il existe de plus en plus de mesures visant à encourager une meilleure gestion de cette biomasse. Plusieurs options s'offrent alors pour la transformer en produits moins nocifs pour l'environnement et utiles pour la société tel que le compostage, la production d'énergie propre, la dégradation ou la filtration des polluants, etc. Le développement des connaissances des procédés biologiques est en constante évolution et demeure souvent le fruit d'approches expérimentales. Peu importe la méthode de gestion préconisée, il importe de développer des outils permettant d'affiner nos méthodes d'analyse des phénomènes physiques, chimiques et biologiques qui y sont associés.

À titre d'exemple, le compostage est un procédé qui aide à préserver les ressources environnementales puisque ses produits peuvent être réutilisés à des fins agricoles. La relation étroite qui existe entre l'efficacité de dégradation de matières organiques et la génération de chaleur attribuable à l'activité biologique a été maintes fois démontrée et confirmée une fois de plus par les expériences récentes de Larsen et McCartney (2000) sur le compostage de boues provenant de l'industrie papetière. Ils ont entre autres identifié précisément la relation entre l'activité microbiologique et les ratios de concentrations carbone/azote. Gostomski et al. (1997), dans le domaine de la biofiltration, ainsi que Weppen (2001), dans le compostage des déchets municipaux, ont obtenu des résultats similaires et ont démontré l'importance de l'humidité et de la génération de chaleur sur l'activité microbiologique.

Dans le domaine des sites d'enfouissement sanitaire, El-Fadel et al. (1991, 1996a, 1996b, 1997) ont développé un modèle numérique complet pour décrire la génération et

le transport des gaz et de la chaleur. Le modèle inclut également des équations permettant de modéliser la biocinétique résultant de l'activité microbienne dans les sites d'enfouissement ainsi que la génération de gaz et de chaleur. Ce modèle est basé sur les principes fondamentaux régissant les processus physiques, chimiques et biologiques dans un milieu poreux.

Une modélisation adéquate de la génération de chaleur et des différents paramètres biochimiques, qui peuvent dépendre de réactions chimiques très complexes, est donc requise pour le design et le contrôle efficaces des réacteurs biologiques. Le dimensionnement des réacteurs biologiques, particulièrement dans un environnement anaérobie, est essentiel afin d'y maintenir les températures critiques pour l'activité biologique. À titre d'exemple, on pourrait prescrire les dimensions minimales de sites d'enfouissement afin d'optimiser l'activité des bactéries mésophiles, principales responsables de la dégradation et particulièrement sensibles aux températures.

Dans ce contexte, il est pertinent d'explorer des méthodes efficaces en vue de déterminer la distribution de la concentration ou de la génération de chaleur dans un système utilisant de la biomasse. De même, l'identification des paramètres biochimiques est essentielle. On peut alors modéliser ce phénomène comme un problème de convection avec diffusion de masse dans un milieu poreux avec source de chaleur. L'équation de diffusion de masse peut alors être reliée à la migration des différentes concentrations de nutriments ou de substrats, de bactéries et de l'humidité. La source de chaleur dépendra alors de ces différentes concentrations. Peu d'études ont été entreprises sur ce sujet. Parmi celles qui sont disponibles, Chamka (2002) a récemment traité du problème de double diffusion pour un mélange gazeux contenu dans une cavité rectangulaire. Les gradients de température et de masse étaient imposés sur les parois verticales et une source de chaleur variait linéairement avec la température.

L'approche du problème inverse se révèle donc intéressante pour déterminer à partir de senseurs de température la distribution et l'intensité de la source de chaleur, ainsi que les paramètres biochimiques à l'intérieur d'un réacteur biologique. Cette approche a été conçue au départ dans le but de déterminer les conditions limites ou bien les propriétés thermophysiques d'un système dans lequel on ne peut pas mesurer directement ces paramètres. Dans la plupart des problèmes inverses en transfert de chaleur, on cherche généralement à évaluer la température ou le flux de chaleur sur une partie de la frontière de la cavité considérée, en utilisant la mesure directe de température à l'intérieur, ou sur une partie de la surface de la cavité.

On se propose donc d'utiliser la méthode du gradient conjugué avec les équations adjointes adaptées afin de résoudre le problème inverse de convection naturelle dans un milieu poreux, avec diffusion de masse, pour une source de chaleur qui est fonction de la concentration et des paramètres biochimiques, comme on en retrouve dans les systèmes de biomasse.

1.1 Revue bibliographique

1.1.1 Problèmes inverses

La première solution au problème inverse fût celle obtenue par Stefan en 1890 (Alifanov 1994). En voulant déterminer l'historique du climat et de la conductivité thermique de la croûte terrestre, il a obtenu des solutions sous forme de séries infinies. Il s'agissait là de la première solution au problème inverse de conduction en une dimension.

Cependant, les solutions aux problèmes inverses ne se sont réellement développées que vers les années 1960, grâce à l'avènement d'outils informatiques plus puissants. On peut trouver une revue bibliographique très complète des travaux réalisés dans les ouvrages d'Alifanov (1994) et de Beck (1985).

Les problèmes inverses sont caractérisés par le fait qu'ils sont mathématiquement mal posés, c'est-à-dire que de légères variations dans les données fournies par les senseurs ont la propriété de générer des changements d'une amplitude beaucoup plus considérable dans les solutions. Cette difficulté intrinsèque du problème inverse amène les algorithmes de résolution simples à être instables. En effet, l'emploi d'algorithmes tels que l'adéquation directe des résultats des températures calculées avec les valeurs mesurées ou bien une méthode simple de minimisation des carrés de l'erreur telle que présentée par Taler et Zima (1999) ainsi que par Yang (1998), conduisent à une instabilité des solutions lorsqu'il y a du bruit sur les données.

Par conséquent, plusieurs approches ont été développées au cours des deux dernières décennies afin de proposer des techniques de résolution qui permettraient de stabiliser les solutions. Parmi les techniques de régularisation, deux grandes familles ont émergé : les méthodes séquentielles, telle que celle développée par Beck (1985), et les méthodes

itératives sur tout le domaine de minimisation de l'erreur, tel que schématisé à la figure 1.1.

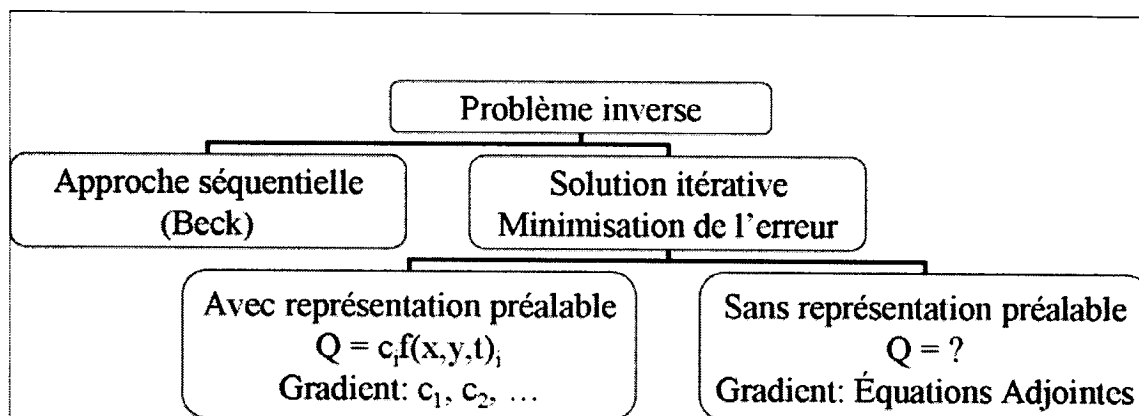


Figure 1.1 : Méthodes de solution du problème inverse

Parmi les méthodes de régularisation séquentielle, la méthode de spécification de fonctions, développée par Beck (1970, 1982, 1985), pour les problèmes inverses de conduction a été largement popularisée. Dans cette méthode, la solution est subdivisée en plusieurs sous-domaines et un problème des moindres carrés est résolu en séquence sur chacun de ceux-ci. Afin d'assurer la stabilité de cette méthode, on doit utiliser des hypothèses sur les données futures ou des filtres qui permettent leur régularisation.

Du côté des méthodes de solutions itératives sur tout le domaine, plusieurs scientifiques russes ont proposé de traiter les problèmes inverses comme des problèmes d'optimisation de l'erreur avec une fonctionnelle à minimiser et/ou un algorithme de résolution qui régularise la solution. Ces algorithmes de solution permettent de déterminer les conditions limites, les propriétés ou le terme source inconnu pour tous les pas de temps et toutes les positions à la fois à chaque itération. Tikhonov et Arsenin (1977) ont proposé de modifier la méthode des moindres carrés en y ajoutant un terme de relaxation multiplié par un paramètre de régularisation approprié. Une autre approche est celle qu'ont développée Alifanov et al. (1994, 1996) qui ont conçu une

méthode de régularisation itérative basée sur la méthode du gradient conjugué. Ces méthodes sont développées à partir de solides principes mathématiques, ce qui leur permet de s'appliquer à une très large gamme de problèmes inverses.

Dans la littérature, on retrouve beaucoup de références qui traitent des problèmes inverses en conduction dans le design, le contrôle et l'identification des systèmes thermiques. Cependant, on en retrouve beaucoup moins en ce qui concerne les problèmes inverses avec convection. Ceci est particulièrement vrai pour les problèmes inverses en convection naturelle, où l'écoulement et la température sont toujours couplés par des équations non linéaires. En ce sens, ces problèmes sont plus difficiles à résoudre que les problèmes en convection forcée.

Moutsoglou (1989) étudia le problème inverse de convection d'un écoulement laminaire permanent entre deux plaques planes verticales. Le problème consistait à déterminer le flux de chaleur inconnu de la paroi gauche avec des senseurs de température placés sur la paroi droite, considérée adiabatique. La méthode séquentielle de fonctions spécifiques développée par Beck (1985), pour le problème inverse de conduction, fut adaptée au problème inverse de convection. Les résultats obtenus démontrèrent qu'une méthode simple d'inversion directe divergeait de façon importante, lorsque du bruit était introduit sur les données des senseurs de température de la paroi droite. La méthode séquentielle, quant à elle, donne de bons résultats et stabilise la solution malgré l'erreur introduite dans les données. Le désavantage de cette méthode est la quantité importante de solutions des points en aval que l'on doit utiliser afin de stabiliser la solution. Plus l'erreur introduite est importante, plus le nombre de solutions en aval de la position considérée doit être élevé. D'autre part, un algorithme de régularisation des données utilisé avec la méthode d'inversion directe a été comparé avec la méthode séquentielle de fonctions spécifiques. L'algorithme régularisait les données erronées en introduisant une spline cubique reliant ces points et en prenant les nouvelles données filtrées. Les résultats avec la méthode d'inversion directe et les données filtrées sont comparables à

ceux obtenus avec la méthode séquentielle de fonctions spécifiques. Il faut cependant être prudent, car le manque de senseurs et la distance entre ceux-ci peuvent nuire considérablement au filtrage des données. Une combinaison des algorithmes d'inversion avec des filtres a permis d'obtenir d'excellents résultats.

Plus récemment, Park et Chung (1999) et plus tard Park et Jung (2001), ont résolu le problème inverse de convection naturelle pour une source de chaleur inconnue dépendant du temps à l'intérieur d'une cavité carrée. Ils ont respectivement utilisé la méthode pseudospectrale de Chebyshev ainsi que la méthode Karhunen-Loève Galerkin pour résoudre les systèmes d'équations directs, adjoints et de sensibilité. Une approximation initiale réaliste de la source de chaleur au temps final de simulation est nécessaire afin de faciliter la convergence de la méthode du gradient conjugué (voir le chapitre 3). Les auteurs ont alors utilisé la méthode modifiée du gradient conjugué, développée par Alifanov (1978), afin de ne plus dépendre de l'approximation initiale de cette source de chaleur. En combinant les deux méthodes, la difficulté a été contournée et les résultats obtenus démontrent que le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence est nettement moins élevé.

Zabaras et Yang (1997) et Yang et Zabaras (1998) se sont intéressés au problème inverse dans le but de déterminer des paramètres de design pour un processus de solidification avec convection naturelle. Le problème consiste à déterminer le flux de chaleur nécessaire sur une paroi du moule afin d'obtenir le flux de chaleur de l'interface solide-liquide correspondant à la vitesse du front de solidification requise. La convection naturelle en phase liquide engendre des zones de solidification non uniforme. Il est donc souhaitable de fixer le flux de chaleur pour contrôler le développement du front de solidification. La méthode du gradient conjugué a été utilisée pour résoudre le problème inverse de convection naturelle, tandis que les équations directes, adjointes et de sensibilité ont été résolues par éléments finis. Les résultats ont démontré la précision de la méthode employée pour des nombres de Ra de l'ordre de 10^4 .

Prud'homme et Nguyen (2001a) ont également choisi la méthode du gradient conjugué, à l'intérieur d'une cavité carrée avec un flux de chaleur inconnu sur une des parois verticales, en utilisant les équations adjointes. Prud'homme et Nguyen (2001b) et Prud'homme et Jasmin (2001) ont employé la même méthode pour traiter le même problème, mais cette fois dans un milieu poreux. La dérivation des différentes équations de sensibilité et adjointes y est présentée. La méthode s'est encore une fois montrée très efficace pour des nombres de Rayleigh compris entre 0 et 10^4 . L'impact du bruit sur la solution y a également été examiné. De plus, une analyse de perturbation par décomposition en série de Fourier de la première itération a été menée afin d'analyser l'effet de la convection sur la solution inverse. Les résultats ont démontré que le problème engendrait des composantes de solution ayant des échelles de grandeur totalement différentes, ce qui a pour effet de ralentir la convergence lorsque la convection se développe.

1.1.2 Modèle biochimique

La fermentation microbienne est la transformation par des microorganismes d'un substrat organique en des sous-produits moins complexes. Dans le cas général, on peut exprimer cette dégradation par la relation présentée à la figure 1.2 (Levenspiel 1999).

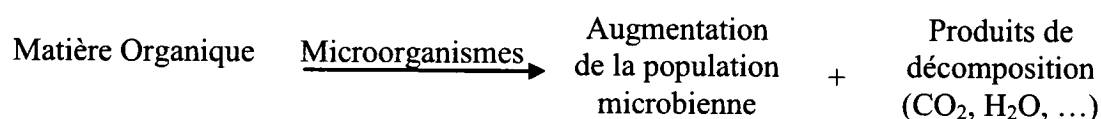


Figure 1.2 : Fermentation microbienne

Plusieurs modèles peuvent être utilisés afin de décrire les phénomènes biologiques intervenant dans les réacteurs biologiques (Nielsen et Villadsen 1992, Blanch et Clark 1997, Fogler 1999, Shuler et Kargi 2002). Dans un premier temps, il importe de bien décrire les différentes phases de la croissance microbienne. Un réacteur à

fonctionnement discontinu, le type le plus employé en microbiologie industrielle, est un récipient dans lequel le mélange des matières premières et du catalyseur biologique est effectué dans un environnement optimal permettant la réaction biologique. Dans un tel environnement, la biomasse est soumise aux phases de croissance illustrées à la figure 1.3.

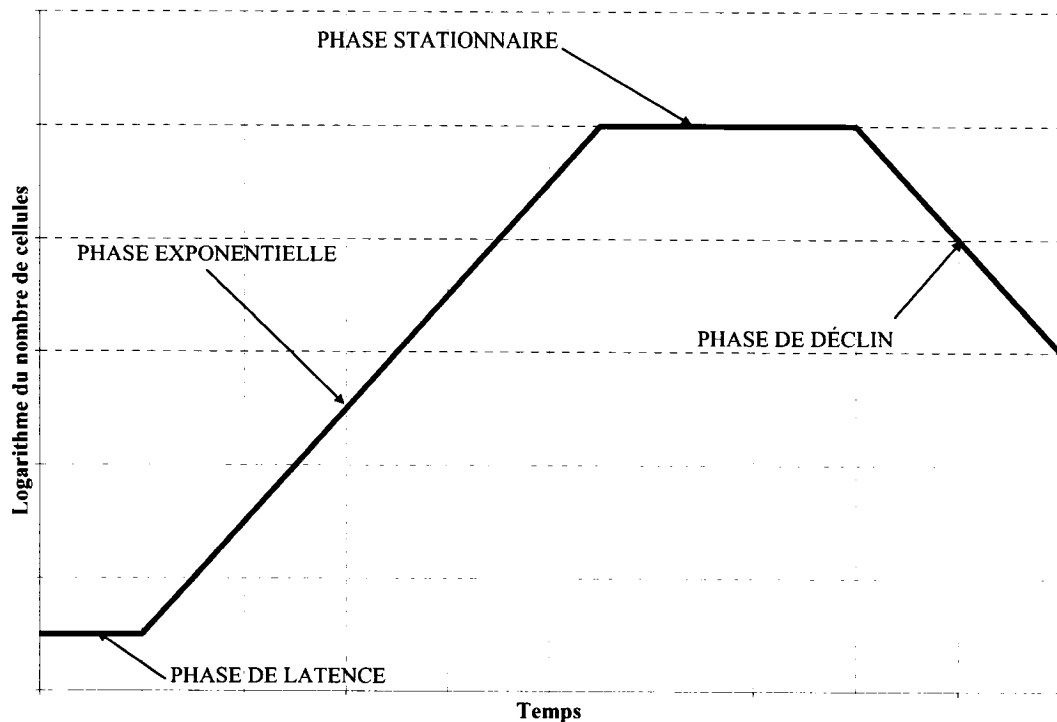


Figure 1.3 : Phases typiques de croissance microbienne dans un réacteur à fonctionnement discontinu.

La durée de la phase de latence dépend de plusieurs facteurs, dont le temps d'adaptation des microorganismes suite à leur inoculation dans le réacteur, la disponibilité des nutriments ou des substrats, etc. La croissance exponentielle correspond à la phase durant laquelle le taux de croissance de la biomasse atteint son maximum. Les cellules se divisent alors de façon exponentielle et la relation suivante s'applique pour estimer les concentrations de biomasse :

$$\frac{dX}{dt} = \mu X \quad (1.1)$$

dans laquelle X représente la concentration de biomasse et μ le taux de croissance spécifique. Le taux de croissance diminue ensuite pour aboutir à la phase stationnaire durant laquelle certaines cellules peuvent mourir et ainsi fournir à d'autres les nutriments nécessaires à leur croissance de façon à ce que la population totale de cellules se maintienne. Finalement, la phase de déclin (de décroissance ou de mortalité) correspond à la diminution du nombre de cellules viables et, parallèlement, de la concentration en biomasse. Cette phase peut être caractérisée par l'accumulation de substances toxiques et de manque de nutriments dans le réacteur. Le taux de décroissance qui y est associé est également exponentiel et peut s'exprimer selon la relation suivante, dans laquelle K_D représente le taux de mortalité :

$$\frac{dX}{dt} = -K_D X \quad (1.2)$$

La cinétique décrite précédemment, bien que développée pour des cultures effectuées dans un réacteur à fonctionnement discontinu, s'applique également aux autres types de réacteurs. Nielsen et Villadsen (1992) ont effectué une revue très complète des modèles disponibles pour quantifier la croissance microbienne. La composition des cellules peut changer afin qu'elles s'adaptent à leur environnement. Lorsque cette adaptation se produit et que le nombre de cellules ne varie pas proportionnellement à la masse des cellules, c'est que leur composition est altérée. Ce phénomène est appelé croissance non équilibrée (*unbalanced growth*). Pour tenir compte de ce phénomène, les modèles dits structurés divisent les cellules en plusieurs composantes en fonction de leur nature dont les réponses diffèrent en fonction de leur environnement. Lorsque la ségrégation de la masse de ces cellules est effectuée en cellules distinctes, dont la composition et les propriétés peuvent varier indépendamment les unes des autres, le modèle est dit

ségrégué. Un modèle structuré et ségrégué peut représenter de façon réaliste les différentes cultures. Cependant, de tels modèles sont très complexes, nécessitent la connaissance de nombreux paramètres et sont difficiles à intégrer dans les modèles numériques.

Lorsque l'on pose l'hypothèse que la composition des cellules demeure inchangée, les modèles non structurés sont adéquats. La croissance est alors équilibrée (*balanced growth*), ce qui est le cas lors de cultures en réacteur continu qui fonctionnent en régime permanent, ainsi que dans les réacteurs à fonctionnement discontinu. Lorsque les changements qui surviennent dans les cellules face aux conditions extérieures sont relativement petits, les modèles non structurés sont souvent de mise. De plus, plusieurs expériences ont démontré que, généralement, la présence ou l'absence de ségrégation n'entraîne pas de modifications significatives des résultats sur la croissance dans la plupart des cas.

Le modèle de Monod (1949), un modèle non structuré, est l'un des plus simples qui soient pour décrire adéquatement la cinétique de croissance microbienne en présence de substrat. Ce modèle semi empirique a été élaboré suite aux observations effectuées sur la croissance de la bactérie *E. coli* en présence de diverses concentrations de glucose. L'hypothèse principale de ce modèle est que la croissance n'est limitée que par la présence d'un seul substrat S . La forme de l'équation de Monod est basée sur celle du modèle des réactions enzymatiques de Michaelis-Menten. Elle est donnée par la relation suivante :

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_s + S} \quad (1.3)$$

Des équations (1.1) et (1.3), on déduit que pour la croissance microbienne d'un réacteur à fonctionnement discontinu :

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{\max} \frac{S}{K_S + S} X \quad (1.4)$$

dans laquelle $\mu_{\max}$ est le taux de croissance maximum des cellules et K_S la constante de saturation. Les valeurs de $\mu_{\max}$ sont généralement fonction du type de biomasse alors que les valeurs de K_S dépendent principalement de la nature du substrat. Lorsque la concentration de substrat est grande comparativement à la constante de saturation, le modèle agit comme un modèle d'ordre zéro, alors qu'inversement, lorsque les niveaux de concentration de substrat sont relativement faibles, la dépendance à la concentration de substrat est du premier ordre.

$$S \gg K_S \Rightarrow \mu = \mu_{\max} \quad \text{et} \quad S \ll K_S \Rightarrow \mu = \frac{\mu_{\max}}{K_S} S \quad (1.5)$$

Le tableau 1.1 (Blanch et Clark 1997) présente certaines valeurs de $\mu_{\max}$ et K_S en fonction de divers organismes et substrats aux températures optimales de croissance.

Tableau 1.1 : Valeurs de $\mu_{\max}$ et K_S pour différents organismes et substrats

Organisme (température de croissance)	Substrat	$\mu_{\max}$ (1/hr)	K_S (mg/l)
Eschrichia coli (37°C)	Glucose	0,8-1,4	2-4
Eschrichia coli (37°C)	Glycérol	0,87	2
Eschrichia coli (37°C)	Lactose	0,8	20
Saccharomyces cerevisiae (30°C)	Glucose	0,5-0,6	25
Candida tropicalis (30°C)	Glucose	0,5	25-75
Candida sp.	Oxygène	0,5	0,045-0,45
Klebsiella aerogenes	Glycérol	0,85	9
Aerobacter aerogenes	Glucose	1,22	1-10

Puisque le modèle de Monod est dérivé de la cinétique de Michaelis-Menten, stipulant qu'une seule enzyme est responsable de la consommation du substrat, qui est le facteur limitant, il a de solides bases fondamentales et décrit bien la croissance lorsqu'elle est relativement lente et que la concentration de biomasse est relativement faible. Toutefois, même si cette hypothèse est rarement satisfaite en conditions réelles, les résultats expérimentaux démontrent clairement que l'équation de Monod décrit adéquatement plusieurs situations et ce modèle demeure le plus largement utilisé (Shuler et Kargi 2002). Pour un réacteur à fonctionnement discontinu, la consommation de substrat par la biomasse peut être décrite en fonction de la croissance microbienne, de la concentration de substrat et du coefficient de rendement Y , par la relation suivante :

$$\frac{dX}{dt} = \mu X = -Y \frac{dS}{dt} \quad (1.6)$$

Le coefficient de rendement varie en fonction du couple substrat-biomasse et de l'environnement. Pour les procédés aérobies, ce coefficient est, dans la plupart des cas, situé entre 0,4 et 0,6 g-biomasse / g-substrat alors que les procédés anaérobies sont généralement moins efficaces et disposent d'un coefficient de rendement situé entre 0,6 et 1,0 g-biomasse / g-substrat.

Tableau 1.2 : Valeurs typiques des paramètres du modèle de Monod

Paramètre	Échelle molaire	Échelle massique
Y	0,010 – 0,7 C-mol X/(C)-mol D	0,2 – 1 kg X/kg S
m_D ou K_D	$m_D = 0,01 – 3$ (C)-mol D/C-mol X/h	
$\mu_{\max}$	0,005 – 2 /hr	0,5 – 1,4 /hr
K_S	$10^{-6} – 10^{-3}$ mol D/l	0,045 – 100 mg/l

Tel que mentionné précédemment, les valeurs des différents paramètres impliqués dans ces modèles peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur en fonction du substrat et de la biomasse présente ainsi que des facteurs environnementaux. Le tableau 1.2 présente des valeurs typiques de ces paramètres basées sur les concentrations molaires de carbone (Heijnen 1999) et massiques (Blanch et Clark 1997, Shuler et Kargi 2002).

Parmi les facteurs environnementaux qui ont une influence prépondérante sur les paramètres des modèles de croissance, on retient principalement la température, le niveau d'acidité, la quantité d'oxygène dissous et la disponibilité des nutriments. La croissance biologique est affectée par le niveau d'acidité selon les différentes plages de pH. Tous les paramètres biochimiques réagissent de façon plus ou moins importante à la température. Plusieurs observations expérimentales permettent de conclure que le taux de croissance maximum $\mu_{\max}$ et le taux de mortalité K_D augmente avec la température alors que le coefficient de rendement Y demeure relativement inchangé. Toutefois la constante de saturation K_S diminue lorsque la température augmente. La loi d'Arrhenius, basée sur l'hypothèse de l'énergie d'activation constante, décrit généralement bien le phénomène et demeure la relation la plus utilisée (El-Fadel et al. 1996a). Par exemple, pour le taux de croissance maximum, la relation de dépendance à la température s'exprime ainsi :

$$\mu_{\max} = A \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (1.7)$$

dans laquelle A est une constante de proportionnalité, E_A l'énergie d'activation et R la constante des gaz parfaits. Le taux de mortalité est beaucoup plus sensible à l'effet de la température que le taux de croissance, avec une énergie d'activation variant entre 250 et 350 kJ/mol, tandis que l'énergie d'activation du taux de croissance maximum varie entre 20 et 105 kJ/mol (Blanch et Clark 1997, Fogler 1999, Heijnen 1999, Shuler et Kargi 2002).

Des variations extrêmement importantes existent dans la littérature à propos des valeurs des paramètres des modèles biologiques. Grady et al. (1996) ont trouvé plusieurs facteurs pouvant expliquer ces écarts et en ont retenu trois principaux : les antécédents de la culture, l'identifiabilité des paramètres et la procédure employée afin de déterminer les paramètres en question. Les antécédents de la culture sont particulièrement déterminants pour trois raisons. Premièrement, lorsqu'il y a des cultures mixtes, la façon dont s'est déroulée la croissance détermine la ou les espèces qui seront présentes. Deuxièmement, même en présence d'une culture pure, le développement de cette culture détermine souvent quels systèmes enzymatiques seront prépondérants. Finalement, les antécédents affectent de façon importante l'état physiologique de la culture, c'est-à-dire la composition des macromolécules de ses cellules, leur capacité à synthétiser des enzymes ainsi que leur vitesse de réaction. L'identifiabilité représente la capacité de la méthode mathématique à estimer correctement ces paramètres. Par exemple, si deux paramètres sont couplés, il devient impossible d'obtenir des résultats indépendants pour chacun de ces paramètres, peu importe la technique employée. Évidemment, la procédure employée afin de déterminer les paramètres est primordiale, parce qu'elle peut, elle-même, interférer avec ces paramètres et, par conséquent, leur identification.

Robinson (1985) a étudié l'estimation des paramètres des modèles de cinétique microbienne en utilisant l'analyse de régression non linéaire et en se basant sur des algorithmes séquentiels tels que ceux développés par Beck et Arnold (1977). En effet, les problèmes d'estimation des paramètres sont généralement non linéaires et les méthodes de solution employant des techniques de linéarisations couplées, par exemple à la méthode des moindres carrés, sont courantes. Cependant, ces méthodes linéaires, quoique simples d'utilisation, entraînent des biais importants, notamment en ce qui concerne le traitement des erreurs. Les méthodes inverses d'estimation non linéaire des paramètres (*nonlinear parameter estimation*, *nonlinear regression analysis* ou *nonlinear optimization*) sont donc à privilégier.

Bien que la méthode du gradient conjugué ait donné de très bons résultats dans plusieurs domaines différents (Orlande et Ozisik 1994, Huang et Chen 2000, Huang 2001, Louahlia-Gualous et al. 2003, Loulou et Scott 2003, Huang et Huang 2004), peu de problèmes ont toutefois été résolus avec elle pour l'estimation de paramètres biologiques ou chimiques. Récemment, Huang et Kim (2005) ont été les premiers à l'utiliser, avec une formulation d'équations adjointes, afin de déterminer le coefficient de réaction, variant temporellement, d'une réaction autocatalytique. Le problème considéré consistait à déterminer le coefficient de réaction $k(t)$, à partir de mesures de concentrations, d'une réaction autocatalytique bien connue (Robertson 1967) qui consiste en trois réactions consécutives réalisées dans un réacteur à fonctionnement discontinu (sans variations spatiales). La méthode réussit à estimer le paramètre $k(t)$ avec succès, toutefois le nombre de pas de temps nécessaires (1000) est assez considérable.

En ce qui a trait à l'évaluation des paramètres du modèle de Monod, certains auteurs (Smith et al. 1998) ont tenté de les déterminer à l'aide d'une méthode des moindres carré à partir de mesures de concentration. Toutefois, aucune variation spatiale n'était considérée. Kiranmai et al. (2005) ont, quant à eux, adapté une méthode inverse pour la détermination des paramètres du modèle de Monod dans un bioréacteur à culture microbienne fixée à partir de mesures de concentration. Il en ressort que la robustesse de l'algorithme est primordiale pour évaluer ces paramètres avec justesse, l'emploi d'algorithmes plus simples menant à des erreurs considérables. De plus, l'épaisseur du réacteur se révèle d'une importance capitale lorsque les effets de diffusion sont pris en compte.

1.1.3 Génération de chaleur

La génération de chaleur intervient naturellement dans plusieurs procédés biologiques : compostage, dégradation anaérobie des déchets, fermentation, biofiltration, etc. La production totale de chaleur d'une réaction impliquant une croissance microbienne peut s'exprimer ainsi (Blanch et Clark 1997) :

$$\Delta Q = (-\Delta H_s)(-\Delta S) + (-\Delta H_N)(-\Delta N) - (-\Delta H_C)(\Delta X) - \sum_j (-\Delta H_{P_j})(\Delta P_j) \quad (1.8)$$

dans laquelle ΔH_s , ΔH_N , ΔH_C et ΔH_{P_j} représentent respectivement les chaleurs de combustion du carbone présent dans le substrat, de la source d'azote, des cellules microbiennes et des différents produits, tandis que ΔS , ΔN , ΔX et ΔP sont les quantités de matières utilisées ou produites. Alors qu'il est aisé de trouver les valeurs des chaleurs de combustion du carbone et de l'azote dans les tables de références, celle de la biomasse peut être calculée à partir de l'équation empirique de Dulong basée sur les fractions massiques d'oxygène (O) et d'hydrogène (H) :

$$(-\Delta H_C) = 8,076 + 34,462 \left(H - \frac{O}{8} \right) \quad [\text{kcal/g-cellule}] \quad (1.9)$$

Les valeurs, sur une base massique sèche, varient entre 20 et 25 kJ/g-cellule. Pour les évolutions aérobies, plusieurs relations ont été établies afin d'estimer la quantité totale de chaleur générée en se basant sur la quantité d'oxygène consommée (ΔO_2).

$$\Delta Q = \omega(-\Delta O_2) \quad (1.10)$$

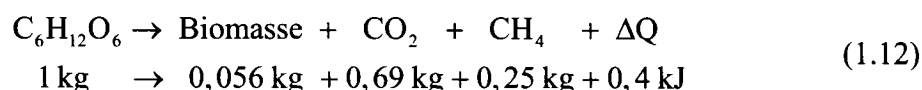
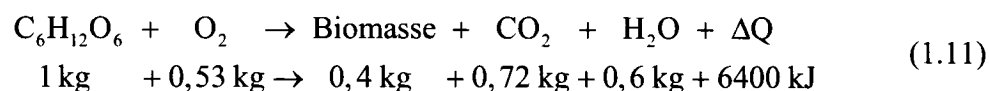
La constante de proportionnalité ω prend ici différentes valeurs selon les études : 452 kJ/mol (Mayberry 1967), 520 kJ/mol (Cooney et al. 1968) et 461 kJ/mol (Luong et Volesky 1980).

La dégradation de matières organiques en présence d'oxygène (aérobie) est le principe de base du compostage. La consommation d'oxygène, qui stimule les microorganismes, varie en fonction de la nature du matériel dégradé et de la température. La plage de consommation va de 0,8 à 8,0 mg-O₂ / gm-SV-hre (Haug 1993). Lors de la respiration aérobie, la cellule produit de l'énergie biologique sous forme de molécules d'ATP dont environ 40% à 50% est utilisée par la cellule pour son maintien et sa croissance alors que le reste est relâché sous forme de chaleur (Prescott et al. 2005). Lorsque la masse microbienne est en phase de croissance, l'évolution de la source de chaleur est directement reliée à cette croissance, les besoins de maintenance étant très faibles (Prescott et al. 2005).

Les types de réacteur qui génèrent de la chaleur grâce à leur propre activité sont qualifiés d'autochauffants. En effet, l'apport de chaleur provient uniquement de la masse microbienne et de la dégradation, qui permet d'obtenir et de maintenir les températures nécessaires au bon fonctionnement du procédé. Plusieurs études ont tenté de quantifier ces productions maximales d'énergie biologique et les situent entre 20 et 40 W / kg de matière sèche (Masson et Milke 2005).

Afin de distinguer les différences entre les évolutions aérobie et anaérobie, prenons le cas très simple de la dégradation du glucose. L'équation 1.11 présente la dégradation de 1 kg de glucose en condition aérobie, cette réaction produit environ 6400 kJ / kg-glucose de chaleur, tandis que sa décomposition en condition anaérobie, présentée à l'équation 1.12, ne produit qu'environ 0,4 kJ / kg-glucose (Pirt 1978). On remarque que, en condition anaérobie, une plus petite quantité de chaleur est produite. Ce phénomène s'explique par le fait que 89% de l'énergie disponible est utilisée pour former le méthane

n'en libérant qu'environ 3% sous forme de chaleur, alors qu'en condition aérobie 41% de cette énergie est produite sous forme de chaleur.



Lorsque les phénomènes se complexifient, comme par exemple dans le cas de la dégradation anaérobie des déchets, la quantité de chaleur générée demeure la résultante de la somme des enthalpies de réactions et des chaleurs de combustion. Cependant, la complexité des chaînes de réactions parallèles et séquentielles qui s'y retrouvent rend difficile l'établissement d'un modèle de génération de chaleur sur cette base. Toutefois, dans plusieurs cas, il est raisonnable de poser l'hypothèse que la source de chaleur est proportionnelle au taux de réaction de la réaction dominante (El-Fadel et al. 1996a). Cette approche permet de situer la constante de proportionnalité de chaleur (ω), dans ce contexte, à approximativement 1020 kJ / mol de matière organique dégradée (S_{ORG}).

$$\Delta Q = \omega(-\Delta S_{\text{ORG}}) \quad (1.13)$$

De nombreuses études sont également disponibles en ce qui concerne les fluides avec réactions chimiques que l'on retrouve dans les domaines du compostage, de la dégradation des matières organiques, de la dispersion des contaminants, de la biofiltration ou des réacteurs à lit granulaire. Kordylewski et Krajewski (1984) ont été parmi les premiers à entreprendre une étude sur l'interaction du fluide soumis à des réactions chimiques et la convection naturelle en milieu poreux. Vafai et al. (1993) et d'autres (Chao et al. 1996) ont étudié les transferts de chaleur impliqués dans les réacteurs à lit granulaire. Malashetty et al. (1994) ont utilisé l'analyse de stabilité

linéaire afin d'étudier la convection d'un fluide dans un milieu poreux inerte soumis à une réaction chimique d'ordre zéro. Toutefois, les problèmes inverses avec transport de chaleur et de masse visant à déterminer les sources de chaleur et massiques, variant en fonction de la température et des concentrations, sont quasiment absents de la littérature. À ce jour, seule l'étude de Huang et al. (2003), en milieu fluide et convection forcée, traite de la détermination simultanée des termes sources de chaleur et de masse variant en fonction de la température et des concentrations avec la méthode du gradient conjugué.

1.2 Objectifs et contenu de la thèse

Cette thèse cherche à déterminer une source de chaleur ainsi que le taux de croissance spécifique maximum dans un milieu poreux avec diffusion de masse à l'aide d'une méthode inverse. La méthode inverse sélectionnée est celle du gradient conjugué avec les équations adjointes. Ces équations sont adaptées aux problèmes de convection naturelle en milieu poreux avec diffusion de masse pour une source de chaleur proportionnelle à la consommation de substrat par de la biomasse régie par le modèle de Monod. La modélisation de la source de chaleur est cohérente avec plusieurs applications réelles telles que le compostage, la dégradation des matières organiques, la dispersion des contaminants, la biofiltration ou les réacteurs à lit granulaire. Les effets du transport du substrat et de la biomasse, bien que plus importants dans le domaine de la dispersion des contaminants ou des réacteurs à lit granulaire, s'appliquent aussi bien aux cas plus simples où ces substances sont fixes.

Cette recherche a donc permis de développer un outil qui, à l'aide de mesures provenant de senseurs de température, détermine la source de chaleur ou le taux de croissance spécifique maximum à l'intérieur d'un milieu poreux dans lequel un fluide transporte les concentrations en présence de convection naturelle.

Cette thèse comporte sept chapitres. La formulation mathématique du problème étudié ainsi que les équations de base régissant le phénomène sont présentées au deuxième chapitre. Le troisième chapitre expose les méthodes de solution utilisées. Dans le quatrième chapitre, quelques problèmes de base sont abordés afin de valider les résultats obtenus et de comprendre en détail les phénomènes étudiés. Le cinquième chapitre est consacré à certains cas plus réalistes de la détermination de la distribution et de l'intensité d'une source de chaleur. Le sixième chapitre traite de la détermination du taux de croissance spécifique maximum pour les mêmes cas. Finalement, le dernier

chapitre établit les conclusions générales et identifie de nouvelles voies de recherche à poursuivre.

Plusieurs résultats de cette thèse ont fait l'objet de publication dans des revues scientifiques (chapitre IV : Prud'homme et Jasmin 2003 ; chapitre II et IV : Jasmin et Prud'homme 2005 ; chapitre V : Prud'homme et Jasmin 2006 ; chapitre VI : à paraître) et diverses conférences (chapitre IV : Jasmin et Prud'homme 2004 ; chapitre V : Jasmin et Prud'homme 2005, Prud'homme et Jasmin 2005), le lecteur intéressé est invité à consulter la liste des références situées à la fin de ce document.

Chapitre II : Définition du problème et formulation mathématique

2.1 Description du problème

Considérons, en premier lieu, le problème de convection avec diffusion de masse et termes sources, dans un contexte général, à l'intérieur du domaine de solution arbitraire (A) présenté à la figure 2.1. Notre objectif est de déterminer soit la source de chaleur Q , soit le taux de croissance spécifique maximum $\mu_{\max}$ à l'intérieur de la cavité. Les valeurs recherchées sont considérées a priori inconnues, tandis que les conditions initiales sont connues en ce qui a trait aux champs de vitesse, de température et de concentration. Les conditions limites, spécifiées par des fonctions ou leur dérivées normales sur la frontière (dA), sont également connues.

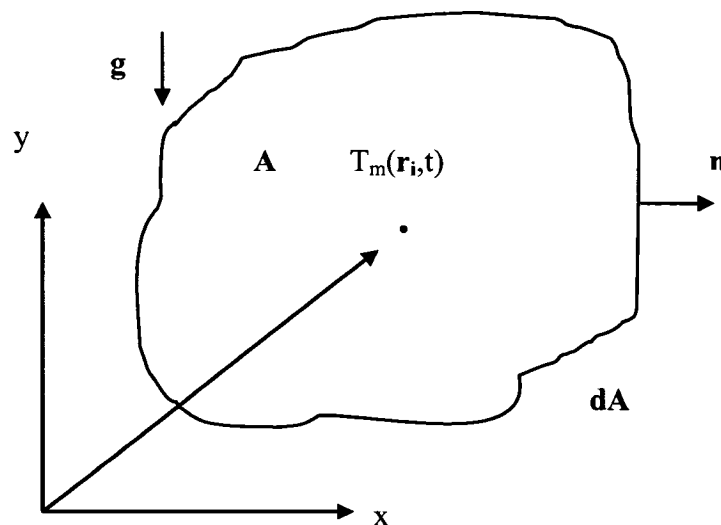


Figure 2.1 : Domaine de solution arbitraire en milieu poreux

2.2 Hypothèses simplificatrices générales

Afin d'obtenir une formulation mathématique générale simple du problème, les hypothèses simplificatrices suivantes sont considérées :

- La géométrie et les conditions limites sont telles que les variations des diverses quantités sont négligeables selon l'axe «z». Le problème considéré est alors bidimensionnel.
- Le fluide est newtonien et incompressible.
- Toutes les propriétés du fluide sont constantes et sont évaluées aux conditions de références. Toutefois, la masse volumique du fluide varie linéairement avec la température et les concentrations de biomasse et de substrat selon l'approximation de Boussinesq (Oberbeck 1879, Boussinesq 1903) :

$$\rho_f = \rho_0 [1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_S (S - S_0) - \beta_X (X - X_0)] \quad (2.1)$$

dans laquelle β_T , β_S et β_X sont respectivement les coefficients de dilatation volumique thermique, solutale par rapport au substrat S et solutale par rapport à la biomasse X.

- La dissipation visqueuse et le travail effectué par la pression sont négligés.
- Le transfert de chaleur par rayonnement est négligé.
- Les propriétés du milieu poreux sont considérées constantes et uniformes. Le milieu est alors qualifié d'homogène et d'isotrope. De plus, la matrice est supposée solide et imperméable.

2.3 Détermination de la source de chaleur

Notre premier objectif est donc de dériver les équations nécessaires afin de déterminer la source de chaleur Q sur l'intervalle de temps $0 \leq t \leq t_f$, à partir des données fournies par les senseurs de température T_m .

2.3.1 Équations de base

Rappelons premièrement qu'afin de construire un modèle continu adéquat en milieu poreux, un volume représentatif du milieu doit être considéré. Ce volume permet de définir la vitesse moyenne du fluide selon la relation de Dupuit-Forchheimer $\mathbf{u} = \varepsilon \mathbf{U}$, dans laquelle $\mathbf{U}$ est la vitesse moyenne du fluide par rapport au volume occupé par le fluide, ε , la porosité et $\mathbf{u}$, la vitesse moyenne du fluide par rapport au volume total de l'élément représentatif ou plus simplement la vitesse de Darcy. L'équation suivante, en tenant compte des hypothèses simplificatrices, représente donc la conservation de la masse ou la continuité :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.2)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement utilisée est la loi de Darcy. Cette loi est valide lorsque les forces d'inertie et visqueuses sont négligeables. On considère que cette loi est applicable lorsque le nombre de Reynolds, basé sur le diamètre des pores et la vitesse moyenne du fluide ($\mathbf{u}$), est plus petit que l'unité. En considérant les hypothèses simplificatrices, l'équation de Darcy s'exprime ainsi :

$$\frac{\mu}{\kappa} \mathbf{u} = -\nabla p - \rho_0 g [\beta_T (T - T_0) + \beta_S (S - S_0) + \beta_X (X - X_0)] \hat{\mathbf{g}} \quad (2.3)$$

où p est la pression dynamique, μ , la viscosité du dynamique du fluide et κ , la perméabilité du milieu poreux.

L'équation de conservation de l'énergie, basée sur un élément représentatif, s'exprime respectivement comme suit pour la matrice poreuse solide et pour le fluide :

$$(1-\varepsilon)(\rho c)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = (1-\varepsilon) \nabla \cdot (k_s \nabla T_s) + (1-\varepsilon) \dot{q}_s - h(T_s - T_f) \quad (2.4)$$

$$\varepsilon(\rho c_p)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} + (\rho c_p)_f \mathbf{u} \cdot \nabla T_f = \varepsilon \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) + \varepsilon \dot{q}_f - h(T_f - T_s) \quad (2.5)$$

En combinant ces deux équations et en posant l'hypothèse que le fluide et le milieu poreux sont localement en équilibre thermique ($T_f = T_s = T$), on obtient :

$$\left[(1-\varepsilon)(\rho c)_s + \varepsilon(\rho c_p)_f \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \left[(\rho c_p)_f \mathbf{u} T - ((1-\varepsilon)k_s + \varepsilon k_f) \nabla T \right] = (1-\varepsilon) \dot{q}_s + \varepsilon \dot{q}_f \quad (2.6)$$

En posant les variables suivantes pour le rapport des chaleurs massiques, la diffusivité thermique et la source de chaleur :

$$\sigma_0 = \frac{(\rho c)_s}{(\rho c)_f} \quad \text{et} \quad \sigma = \varepsilon + (1-\varepsilon)\sigma_0 \quad (2.7)$$

$$k = (1-\varepsilon)k_s + \varepsilon k_f \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{k}{(\rho c_p)_f} \quad (2.8)$$

$$\dot{q} = (1-\varepsilon)\dot{q}_s + \varepsilon \dot{q}_f \quad \text{et} \quad Q = \frac{\dot{q}}{(\rho c_p)_f} \quad (2.9)$$

on obtient finalement la forme de l'équation d'énergie suivante :

$$\sigma \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T - \alpha \nabla T) = Q \quad (2.10)$$

Les équations de conservation de la masse pour le substrat et la biomasse se dérivent de façon analogue. Il en découle les expressions suivantes :

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}S - D_s \nabla S) = \varepsilon \dot{S}_f + (1 - \varepsilon) \dot{S}_s = \dot{S} \quad (2.11)$$

$$\varepsilon \frac{\partial X}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}X - D_x \nabla X) = \varepsilon \dot{X}_f + (1 - \varepsilon) \dot{X}_s = \dot{X} \quad (2.12)$$

On note que les diffusivités solutales, en milieu poreux, s'expriment telles que : $D = \varepsilon D_f + (1 - \varepsilon) D_s$. En ce qui concerne la génération de masse, si la réaction se produit dans le fluide on doit multiplier le terme source par la porosité, alors que, si elle se produit sur la surface de la matrice poreuse, il s'agit de le multiplier par un autre facteur qui représenterait la surface de réaction. En utilisant le modèle de Monod, décrit au chapitre 1, pour les réactions avec microorganismes ainsi que la conservation de la masse, on peut écrire, avec $\mu = \mu_{\max}$, afin d'alléger l'écriture des équations :

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -\frac{1}{Y} \left(\frac{\mu S}{K_s + S} \right) X \\ \dot{X} &= \left(\frac{\mu S}{K_s + S} \right) X - K_d X \end{aligned} \quad (2.13)$$

Nous exprimons la source de chaleur inconnue en fonction du taux de consommation du substrat en posant :

$$Q = \left(\frac{-\Delta H_s}{M_s (\rho c_p)_f} \right) \dot{S} \quad (2.14)$$

où ΔH_s est l'enthalpie de réaction par rapport au substrat, tandis que M_s est la masse molaire du substrat.

Afin de poursuivre l'analyse de ce problème, il est préférable d'utiliser une forme adimensionnelle des équations. Les variables sans dimension (*) suivantes sont donc utilisées :

$$\begin{aligned} (x^*, y^*) &= \frac{(x, y)}{L}, \quad (u^*, v^*) = \frac{(u, v)}{\left(\frac{\alpha}{L}\right)}, \quad p^* = \frac{p}{\left(\frac{\mu\alpha}{\kappa}\right)}, \quad t^* = \frac{t}{\left(\frac{\sigma L^2}{\alpha}\right)}, \\ T^* &= \frac{T - T_0}{\Delta T}, \quad S^* = \frac{S - S_0}{\Delta S}, \quad X^* = \frac{X - X_0}{\Delta X}, \\ Q^* &= \frac{Q}{\left(\frac{\alpha\Delta T}{L^2}\right)}, \quad \dot{S}^* = \frac{\dot{S}}{\left(\frac{\alpha\Delta S}{L^2}\right)}, \quad \dot{X}^* = \frac{\dot{X}}{\left(\frac{\alpha\Delta X}{L^2}\right)}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Ceci permet d'obtenir les équations (2.2), (2.3), (2.10), (2.11) et (2.12) sous forme adimensionnelle. En abandonnant l'astérisque, il vient :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.16)$$

$$\mathbf{u} = -\nabla p - Ra(T + N_s S + N_x X) \hat{\mathbf{g}} \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} T - \nabla T) = Q \quad (2.18)$$

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u} S - \frac{1}{Le_s} \nabla S \right) = \dot{S} \quad (2.19)$$

$$\varepsilon \frac{\partial X}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u} X - \frac{1}{Le_x} \nabla X \right) = \dot{X} \quad (2.20)$$

Six paramètres adimensionnels découlent de cette formulation, soit Ra , le nombre de Rayleigh, N_S et N_X , les rapports des forces de volume du substrat et de la biomasse, Le_S et Le_X , les nombres de Lewis du substrat et de la biomasse et ε , la porosité normalisée qui sont respectivement :

$$Ra = \frac{\beta_T g \kappa L \Delta T}{\nu \alpha}, N_S = \frac{\beta_S \Delta S}{\beta_T \Delta T}, N_X = \frac{\beta_X \Delta X}{\beta_T \Delta T}, Le_S = \frac{\alpha}{D_S}, Le_X = \frac{\alpha}{D_X}, \varepsilon = \frac{\varepsilon}{\sigma} \quad (2.21)$$

La forme adimensionnelle conséquente du système d'équations des paramètres des termes sources (2.13) est basée sur les échelles suivantes :

$$Y^* = \frac{Y}{\left(\frac{\Delta X}{\Delta S}\right)}, \mu^* = \frac{\mu}{\left(\frac{\alpha}{L^2 \varepsilon}\right)}, K_S^* = \frac{K_S}{\Delta S}, K_D^* = \frac{K_D}{\left(\frac{\alpha}{L^2 \varepsilon}\right)}, \quad (2.22)$$

Sans perte de généralité, et pour permettre une forme simple des équations, posons les valeurs de référence pour les concentrations $S_0 = X_0 = 0$, ce qui permet d'écrire les équations suivantes en abandonnant l'astérisque :

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -\frac{1}{Y} \left(\frac{\mu S}{K_S + S} \right) X \\ \dot{X} &= \left(\frac{\mu S}{K_S + S} - K_D \right) X \end{aligned} \quad (2.23)$$

De plus, les échelles de température et de concentration de substrat peuvent être reliées dès maintenant afin d'obtenir la simple égalité $Q = -\dot{S}$, en posant :

$$\Delta T = \left(\frac{-\Delta H_{R/S}}{M_s (\rho c_p)_f} \right) \Delta S \quad (2.24)$$

Afin de fixer l'échelle pour le substrat, on peut utiliser la concentration initiale $S(t = 0)$. Dans ce cas, il est possible de définir l'échelle pour la biomasse de façon à ce que S et X soient d'un même ordre de grandeur en prenant $\Delta X = -Y\Delta S$.

Avec la notation ∇_n qui représente la composante normale du rotationnel, introduisons la fonction de courant telle que :

$$\mathbf{u} = \nabla_n \times \psi \Rightarrow u = \frac{\partial \psi}{\partial y} \text{ et } v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (2.25)$$

En adoptant cette formulation, il est alors possible d'éliminer la pression du système d'équation tout en vérifiant l'équation de la continuité. On a :

$$\nabla \times \nabla p = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot (\nabla_n \times \psi) \equiv 0 \quad \text{et} \quad \nabla_n \times \mathbf{u} = -\nabla^2 \psi \quad (2.26)$$

2.3.2 Problème direct

Les équations de base du problème direct utilisées pour modéliser l'écoulement, la conservation d'énergie ainsi que le transport de masse, peuvent être présentées dans leur forme conservative et adimensionnelle telles que :

$$\nabla^2 \psi = Ra \nabla_n \times (T + N_s S + N_x X) \hat{\mathbf{g}} \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} T - \nabla T) = Q \quad (2.28)$$

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u}S - \frac{1}{Le_s} \nabla S \right) = \dot{S} \quad (2.29)$$

$$\varepsilon \frac{\partial X}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u}X - \frac{1}{Le_x} \nabla X \right) = \dot{X} \quad (2.30)$$

avec les termes sources :

$$Q = -\dot{S} \quad (2.31)$$

$$\dot{S} = -\frac{1}{Y} \left(\frac{\mu S}{K_s + S} \right) X \quad (2.32)$$

$$\dot{X} = \left(\frac{\mu S}{K_s + S} - K_d \right) X \quad (2.33)$$

Les conditions limites à vérifier sont :

$$\psi = 0 \quad (2.34)$$

$$T = f_T \quad \text{ou} \quad \frac{\partial T}{\partial n} = g_T \quad (2.35)$$

$$S = f_s \quad \text{ou} \quad \frac{\partial S}{\partial n} = g_s \quad (2.36)$$

$$X = f_x \quad \text{ou} \quad \frac{\partial X}{\partial n} = g_x \quad (2.37)$$

où les fonctions f_T , f_s , f_x , g_T , g_s et g_x peuvent être dépendantes du temps et de la position. Les conditions imposées peuvent être simultanément des conditions de Dirichlet ou de Neumann sur différentes parties de la frontière.

Le processus pour déterminer la source de chaleur inconnue Q est itératif. Il est basé sur une séquence d'approximations $Q^0, Q^1, \dots, Q^k$, et ainsi de suite, permettant de minimiser la fonction d'erreur suivante :

$$E(Q) = \frac{1}{2} \|T - T_m\|^2 = \frac{1}{2} \int_0^{t_f} \sum_{i=1}^n (T - T_m)_i^2 dt \quad (2.38)$$

dans laquelle T et T_m sont respectivement les températures prédites en fonction de la source de chaleur estimée et les températures mesurées aux senseurs.

La séquence d'approximations peut être construite selon la méthode du gradient conjugué (Fletcher 1987). Cette méthode permet de déterminer l'approximation courante de la source de chaleur en fonction de l'approximation précédente, selon la relation $Q^{k+1} = Q^k + \alpha^k p^k$, dans laquelle α est le pas et p la direction conjuguée. La direction conjuguée se calcule à partir du gradient de l'erreur (E) par rapport à la source de chaleur (Q). Lorsque l'on dispose d'une représentation préalable de cette source, comme une combinaison linéaire de fonctions connues, on peut alors calculer ce gradient de la façon habituelle, c'est-à-dire en prenant les dérivées. Dans le cas général, on ne dispose pas de telles informations, le gradient de l'erreur ainsi que le pas sont alors obtenus respectivement en résolvant les équations adjointes et de sensibilité.

2.3.3 Problème de sensibilité

En définissant la sensibilité d'une variable $\tilde{f}$ comme étant la dérivée directionnelle de f au point Q dans la direction ΔQ , on obtient :

$$\tilde{f} \equiv D_{\Delta Q} f = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(Q + \varepsilon \Delta Q) - f(Q)}{\varepsilon} \quad (2.39)$$

En appliquant cette définition au système d'équations du problème direct, on obtient les équations du problème de sensibilité :

$$\nabla^2 \tilde{\psi} - \text{Ra} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} = 0 \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} T + \mathbf{u} \tilde{T}) - \nabla^2 \tilde{T} - \Delta Q = 0 \quad (2.41)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} S + \mathbf{u} \tilde{S}) - \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla^2 \tilde{S} - \tilde{S} = 0 \quad (2.42)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} X + \mathbf{u} \tilde{X}) - \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla^2 \tilde{X} - \tilde{X} = 0 \quad (2.43)$$

Dans les équations précédentes, les termes sources sont définis comme suit :

$$\tilde{S} = -\frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S} X + S \tilde{X} \right] \quad (2.44)$$

$$\tilde{X} = \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S} X + S \tilde{X} \right] - K_D \tilde{X} \quad (2.45)$$

Les variables de sensibilité doivent satisfaire les conditions initiales et les conditions limites homogènes du problème direct :

$$\tilde{\psi} = 0 \quad (2.46)$$

$$\tilde{T} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \tilde{T}}{\partial n} = 0 \quad (2.47)$$

$$\tilde{S} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \tilde{S}}{\partial n} = 0 \quad (2.48)$$

$$\tilde{X} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \tilde{X}}{\partial n} = 0 \quad (2.49)$$

Définissons le vecteur $\tilde{\mathbf{U}} = (\tilde{\psi}, \tilde{T}, \tilde{S}, \tilde{X})^T$ pour représenter l'ensemble des variables de sensibilité. Le système d'équations de sensibilité (2.40), (2.41), (2.42) et (2.43) peut alors s'exprimer sous forme compacte :

$$\mathbf{D}(\tilde{\mathbf{U}}) = 0 \quad (2.50)$$

où $\mathbf{D}$ représente un opérateur.

Tel que mentionné précédemment, lorsque l'on dispose d'une représentation préalable de cette source, on peut alors calculer le gradient en utilisant les équations de sensibilité. Toutefois, lorsque la fonction est inconnue, on peut contourner ce problème en utilisant les équations adjointes qui permettront d'obtenir une expression pour le gradient. Pour ce faire, on doit résoudre le problème adjoint, présenté à la prochaine section.

2.3.4 Problème adjoint

La dérivée directionnelle de l'erreur E de l'équation (2.38) peut être utilisée afin de définir le gradient de l'erreur ∇E en fonction de Q à l'aide de l'expression :

$$D_{\Delta Q} E(Q) = \langle \nabla E | \Delta Q \rangle = \langle T - T_m | \tilde{T} \rangle = \int_0^{t_r} \sum_{i=1}^n (T - T_m)_i \tilde{T}_i dt \quad (2.51)$$

où les températures sont évaluées aux senseurs. La fonction de Dirac permet d'exprimer le dernier terme de droite, en intégrant sur tout le domaine, sous la forme :

$$D_{\Delta Q} E(Q) = \int_0^{t_r} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \quad (2.52)$$

où $\mathbf{r}_i$ désigne la position des senseurs. En introduisant le vecteur des variables adjointes $\bar{\mathbf{U}} = (\bar{\psi}, \bar{T}, \bar{S}, \bar{X})^T$ comme multiplicateur de Lagrange du système d'équations de sensibilité (2.50), l'équation (2.52) peut être réécrite de façon équivalente :

$$D_{\Delta Q} E(Q) = \int_0^{t_r} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt + \langle \mathbf{D}(\tilde{\mathbf{U}}) | \bar{\mathbf{U}} \rangle \quad (2.53)$$

Après plusieurs manipulations, présentées à l'annexe I, il est possible d'écrire l'équation (2.53) de la façon suivante :

$$D_{\Delta Q} E(Q) = \int_0^{t_r} \int_A -\bar{T} \Delta Q dA dt + \langle \tilde{\mathbf{U}} | \mathbf{D}^*(\bar{\mathbf{U}}) \rangle \quad (2.54)$$

dans laquelle $\mathbf{D}^\dagger$ est l'opérateur adjoint de $\mathbf{D}$. En posant $\mathbf{D}^\dagger(\bar{\mathbf{U}}) = 0$, on obtient le système d'équations suivant pour les variables adjointes :

$$\nabla^2 \bar{\psi} = J(T, \bar{T}) + J(S, \bar{S}) + J(X, \bar{X}) \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) = \text{Ra} \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + (T - T_m) \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.56)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla \bar{S} \right) = \text{Ra} N_s \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + \bar{S} \quad (2.57)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \bar{X}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla \bar{X} \right) = \text{Ra} N_x \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + \bar{X} \quad (2.58)$$

Les termes sources sont définis comme suit :

$$\bar{S} = \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \left(\frac{1}{Y} \bar{S} - \bar{X} \right) X \quad (2.59)$$

$$\bar{X} = \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu S}{K_s + S} \right) \bar{S} - \left(\frac{\mu S}{K_s + S} - K_D \right) \bar{X} \quad (2.60)$$

Comme on le montre à l'annexe I, le système d'équations adjoint doit également respecter les mêmes conditions limites homogènes que le problème de sensibilité, soit :

$$\bar{\psi} = 0 \quad (2.61)$$

$$\bar{T} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \bar{T}}{\partial n} = 0 \quad (2.62)$$

$$\bar{S} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \bar{S}}{\partial n} = 0 \quad (2.63)$$

$$\bar{X} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \bar{X}}{\partial n} = 0 \quad (2.64)$$

De plus, les variables adjointes s'annulent obligatoirement à $t = t_f$. Il faut mentionner que le changement de variable $\tau = t_f - t$ est requis pour résoudre le système d'équations adjoint. Le changement de variables permet de transformer le problème adjoint en un problème de valeurs initiales en τ avec un coefficient de diffusion positif, ce qui en assure la stabilité numérique.

De la définition générale de la dérivée directionnelle de l'erreur, équation (2.51), et de l'équation transformée (2.54), on peut conclure, par identification, que l'expression du gradient de l'erreur est donnée par :

$$\nabla E = -\bar{T} \quad (2.65)$$

Cette solution est valide pour l'ensemble des problèmes où une source arbitraire est fonction de la position et du temps $Q = Q(\mathbf{r}, t)$, quelque soit la forme du domaine de résolution et pour n'importe quelles conditions limites linéaires. Cette solution exige alors, en principe, des senseurs de température en tous points du domaine. Toutefois, pour certains cas particuliers, il est possible de poser certaines hypothèses simplificatrices.

2.3.5 Cas particuliers de dépendance de la source de chaleur

Posons l'hypothèse que la source de chaleur ne varie qu'en fonction de la position horizontale et du temps, i.e. $Q = Q(x, t)$. S'il n'y a pas de variation en «y», alors, l'expression du gradient de l'erreur est la suivante :

$$\nabla E(Q(x, t)) = -\bar{T}(x, t)_{\text{moy}Y} = \int_0^1 -\bar{T}(x, y, t) dy \quad (2.66)$$

Le nombre de senseurs théoriquement nécessaire à la résolution du problème se limite donc à une rangée de senseurs positionnée parallèlement à l'axe «x». Maintenant, si la source de chaleur ne varie pas spatialement, mais uniquement temporellement, l'expression du gradient de l'erreur devient :

$$\nabla E(Q(t)) = -\bar{T}(t)_{\text{moyA}} = \int_A -\bar{T}(x, y, t) dA \quad (2.67)$$

Un seul senseur est alors requis, en principe, pour déterminer la source de chaleur inconnue sur le domaine.

2.4 Détermination du taux de croissance

La présente section a pour but de dériver les équations nécessaires afin de déterminer le taux de croissance spécifique maximum $\mu_{\max}$ d'une réaction exothermique, sur l'intervalle de temps $0 \leq t \leq t_f$, à partir des données fournies par les senseurs de température T_m .

2.4.1 Équations de base et problème direct

Les équations de base décrivant le problème direct demeurent exactement les mêmes que dans la section précédente. Les conditions limites générales énoncées précédemment sont également conservées.

Le processus itératif pour déterminer le taux de croissance spécifique μ , basé sur la séquence d'approximations $\mu^0, \mu^1, \dots, \mu^k$, et ainsi de suite, permet de minimiser la fonction d'erreur suivante :

$$E(\mu) = \frac{1}{2} \|T - T_m\|^2 = \frac{1}{2} \int_0^{t_f} \sum_{i=1}^n (T - T_m)_i^2 dt \quad (2.68)$$

2.4.2 Problème de sensibilité

La dérivation des équations de sensibilité diffère, car la sensibilité de la variable $\tilde{f}$ est maintenant définie comme la dérivée directionnelle de f au point μ dans la direction $\Delta\mu$. L'expression mathématique de cette définition devient donc :

$$\tilde{f} \equiv D_{\Delta\mu} f = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(\mu + \varepsilon \Delta\mu) - f(\mu)}{\varepsilon} \quad (2.69)$$

Le système d'équations du problème de sensibilité devient :

$$\nabla^2 \tilde{\psi} - \text{Ra} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} = 0 \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} T + \mathbf{u} \tilde{T}) - \nabla^2 \tilde{T} - \tilde{Q} = 0 \quad (2.71)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} S + \mathbf{u} \tilde{S}) - \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla^2 \tilde{S} - \tilde{S} = 0 \quad (2.72)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} X + \mathbf{u} \tilde{X}) - \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla^2 \tilde{X} - \tilde{X} = 0 \quad (2.73)$$

Dans les équations précédentes, les termes sources sont définis comme suit :

$$\tilde{Q} = \Delta\mu \frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X + \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S} X + S \tilde{X} \right] \quad (2.74)$$

$$\tilde{S} = \Delta\mu \frac{-1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X - \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S} X + S \tilde{X} \right] \quad (2.75)$$

$$\tilde{X} = \Delta\mu \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X + \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S} X + S \tilde{X} \right] - K_D \tilde{X} \quad (2.76)$$

Les variables de sensibilité doivent satisfaire les mêmes conditions initiales et les mêmes conditions limites homogènes que celles du problème direct exprimées par les équations (2.46), (2.47), (2.48) et (2.49).

2.4.3 Problème adjoint

La dérivée directionnelle de l'erreur E dans l'équation (2.68) peut être utilisée afin de définir le gradient de l'erreur ∇E en fonction de μ à l'aide de l'expression :

$$D_{\Delta\mu} E(\mu) = \langle \nabla E | \Delta\mu \rangle = \langle T - T_m | \tilde{T} \rangle = \int_0^{t_f} \sum_{i=1}^n (T - T_m)_i \tilde{T}_i dt \quad (2.77)$$

On démontre après plusieurs manipulations, présentées à l'annexe I, que les variables adjointes vérifient le système d'équations suivant :

$$\nabla^2 \bar{\psi} = J(T, \bar{T}) + J(S, \bar{S}) + J(X, \bar{X}) \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) = Ra \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + (T - T_m) \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.79)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{Le_s} \nabla \bar{S} \right) = Ra N_s \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + \bar{S} \quad (2.80)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \bar{X}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{Le_x} \nabla \bar{X} \right) = Ra N_x \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + \bar{X} \quad (2.81)$$

Pour ces systèmes, les termes sources sont définis comme suit :

$$\bar{S} = -\frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) X (\bar{T} - \bar{S} + Y \bar{X}) \quad (2.82)$$

$$\bar{X} = -\frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) S (\bar{T} - \bar{S} + Y \bar{X}) + K_d \bar{X} \quad (2.83)$$

Comme le problème de sensibilité, le système d'équations adjoint doit également satisfaire les conditions limites homogènes des équations (2.61), (2.62), (2.63) et (2.64).

La dérivée directionnelle de l'erreur, dans l'équation (2.77), s'exprime alors comme suit :

$$\begin{aligned} D_{\Delta\mu} E(\mu) &= \int_0^{t_f} \int_A -\frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X (\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) \Delta\mu \, dA dt \\ &= \left\langle -\frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) (\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) X \middle| \Delta\mu \right\rangle \end{aligned} \quad (2.84)$$

En conclusion, l'expression du gradient de l'erreur est donnée par :

$$\nabla E = -\frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) (\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) X \quad (2.85)$$

Encore une fois, ce résultat est valide pour l'ensemble des problèmes où le taux de croissance spécifique μ est fonction de la position et du temps tel que $\mu = \mu(\mathbf{r}, t)$, quelque soit la forme du domaine de résolution et pour n'importe quelles conditions limites linéaires.

Chapitre III : Méthode de solution

La solution du problème de minimisation exposé au chapitre 2 requiert, dans un premier temps, un algorithme de solution afin de déterminer la suite d'approximations pour les valeurs inconnues : source de chaleur et taux de croissance spécifique. La méthode du gradient conjugué est choisie et la première partie de ce chapitre décrit cet algorithme. Par la suite, la méthode de volumes de contrôle, utilisée pour la résolution numérique des équations, est présentée.

3.1 Méthode du gradient conjugué

Tel qu'exposé au premier chapitre, plusieurs travaux de recherche ont porté sur l'identification d'une méthode apte à résoudre les problèmes inverses, leur caractère mal posé rendant toutefois l'entreprise difficile. Néanmoins, la stabilité de l'algorithme du gradient conjugué en a fait l'un des plus polyvalents et il est utilisé pour résoudre plusieurs problèmes (Fletcher 1987, Alifanov 1994). Au chapitre II, on a également présenté le problème inverse comme étant un problème d'optimisation, dont l'objectif consiste à minimiser la fonction de l'erreur E , exprimée par l'équation (2.38), dans l'espace du domaine A pour l'intervalle $0 \leq t \leq t_f$. Dans ce but, l'algorithme du gradient conjugué permet de construire la séquence d'approximations Q^k ou μ^k à partir de la relation (3.4) dans laquelle la direction conjuguée p s'obtient à partir du gradient de l'erreur et de la méthode de Polak-Ribiere, tandis que le pas α se calcule en résolvant les équations de sensibilité. Les démonstrations de ces différentes relations sont présentées à l'annexe II. L'algorithme de solution peut alors se résumer ainsi :

1. Poser les conditions initiales pour les problèmes direct, adjoint et de sensibilité et choisir un estimé Q^0 ou μ^0 . Initialiser le compteur à $k = 0$.

2. Résoudre le problème direct avec Q^k ou μ^k pour obtenir les champs des variables directes T^k, S^k, X^k et ψ^k .

3. Évaluer l'erreur $T^k - T_m$ aux senseurs.

4. Résoudre le problème adjoint pour obtenir les variables adjointes $\bar{T}^k, \bar{S}^k, \bar{X}^k$ et $\bar{\psi}^k$.

5. Évaluer le gradient ∇E à partir de l'équation (2.65) ou (2.85), selon le cas.

6. Calculer la direction de descente p^k pour la correction du terme inconnu.

$$\text{Si } k = 0, p^k = -\nabla E^k, \text{ autrement, } p^k = -\nabla E^k + \gamma^k p^{k-1} \quad (3.1)$$

avec

$$\gamma^k = \frac{\langle \nabla E^k - \nabla E^{k-1} | \nabla E^k \rangle}{\|\nabla E^{k-1}\|^2} \quad (3.2)$$

7. Résoudre le problème de sensibilité avec $\Delta Q = p^k$ ou $\Delta \mu = p^k$ sur le domaine A pour obtenir $\tilde{T}^k$ aux senseurs.

8. Calculer le pas

$$\alpha^k = -\frac{\langle \nabla E^k | p^k \rangle}{\|\tilde{T}^k\|^2} = -\frac{\langle T^k - T_m | \tilde{T}^k \rangle}{\|\tilde{T}^k\|^2} \quad (3.3)$$

9. Effectuer la correction du terme inconnu :

$$Q^{k+1} = Q^k + \alpha^k p^k \text{ ou } \mu^{k+1} = \mu^k + \alpha^k p^k. \quad (3.4)$$

10. Poser $k = k + 1$, retourner à l'étape 2 ; répéter jusqu'à ce que la condition de convergence ($E^k < \varepsilon$) soit vérifiée, ou que le nombre d'itérations maximum ($k > k_{\max}$) soit atteint.

Le calcul des erreurs $E^0, E^1, \dots, E^n$ est réalisé à partir des valeurs estimées des températures $T^0, T^1, \dots, T^n$ découlant des valeurs inconnues estimées $Q^0, Q^1, \dots, Q^n$ ou $\mu^0, \mu^1, \dots, \mu^n$.

3.2 Méthode du gradient conjugué modifiée

Étant donné que les variables adjointes s'annulent à $t = t_f$, aucune correction n'est alors effectuée sur le terme inconnu par la méthode régulière du gradient conjugué, ce qui entraîne inévitablement que la solution au temps final demeure celle de l'estimation initiale $Q^k(t_f) = Q^0(t_f)$ ou $\mu^k(t_f) = \mu^0(t_f)$. À moins de disposer au départ d'une approximation initiale réaliste, la convergence est alors ralentie. La méthode du gradient conjugué modifiée (Alifanov 1978, Park et Chung 1999) permet de palier à cette difficulté. La méthode consiste à définir la variable inconnue, en supposant qu'il s'agit d'une fonction dérivable en tout point de l'intervalle $0 \leq t \leq t_f$, à partir de sa dérivée temporelle de façon telle que (pour la source de chaleur) :

$$Q(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \frac{\partial Q(\mathbf{r}, t')}{\partial t'} dt' \quad (3.5)$$

À partir des équations (2.54) et (3.5), en intégrant par parties, on obtient la relation suivante pour le calcul du gradient de l'erreur par rapport à la dérivée du terme source.

$$\nabla E \left(\frac{\partial \Delta Q(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right) = - \int_t^{t_f} \bar{T}(\mathbf{r}, t') dt' \quad (3.6)$$

Lorsque l'équation (3.6) est utilisée pour calculer le gradient de l'erreur dans l'algorithme de solution, la direction de descente de l'équation (3.1) doit maintenant être calculée au moyen de l'expression :

$$\mathbf{p}^k = \int_0^t \mathbf{P}^k dt' \quad (3.7)$$

dans laquelle P^k est défini comme :

$$P^k = -\nabla E \left(\frac{\partial \Delta Q}{\partial t} \right)^k + \gamma^k P^{k-1} \quad (3.8)$$

On peut dériver les mêmes relations pour le taux de croissance spécifique μ en remplaçant l'expression du gradient de l'équation (3.6) par celle de l'équation (3.9).

$$\nabla E \left(\frac{\partial \Delta \mu(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right) = - \int_0^{t_f} \frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) (\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) X dt' \quad (3.9)$$

Les solutions ainsi obtenues sont non nulles au temps final, puisque l'expression (3.7) fait intervenir une intégration de 0 à t_f . Toutefois, une telle formulation implique que c'est maintenant la dérivée de la fonction inconnue qui est nulle. De plus, l'équation (3.7) démontre qu'aucune correction n'est effectuée à $t = 0$. La méthode modifiée ne permet donc pas d'obtenir une bonne solution à $t = 0$ sans une bonne approximation initiale de cette dernière. Les deux méthodes peuvent donc être combinées afin d'utiliser, dans un premier temps, la méthode modifiée afin d'obtenir une solution satisfaisante à $t = t_f$. Sur ce point, cette solution au temps final est jugée satisfaisante lorsqu'elle ne varie plus significativement. Le critère d'arrêt (ϵ_{MOD}) correspondant à cette définition peut alors s'exprimer ainsi :

$$\epsilon_{MOD} = \sum_{i=1}^3 \int_A \frac{|Q^k(x, t_f) - Q^{k-i}(x, t_f)|}{|Q^k(x, t_f)|} dA < 0,10 \quad (3.10)$$

Puis, dans un deuxième temps, il suffit d'appliquer la méthode régulière jusqu'à ce que la solution converge. Une approximation initiale quelconque de la solution peut alors être utilisée.

3.3 Méthode numérique

La discrétisation des systèmes d'équations gouvernantes présentés au chapitre 2 pour les problèmes direct, adjoint et de sensibilité est nécessaire afin de les résoudre numériquement. On sélectionne pour cette tâche une méthode des volumes de contrôle (Patankar 1980) basée sur un schéma de puissance (*power-law*) et une formulation implicite d'ordre un dans le temps. Cette méthode, combinée avec ce schéma, se révèle particulièrement efficace pour l'évaluation des termes non linéaires lorsque de la convection est présente, alors qu'une formulation implicite permet d'assurer la stabilité numérique. Le principe de cette méthode est d'abaisser l'ordre des équations en divisant le domaine de solution en plusieurs volumes ($\Delta x \Delta y$) et en y intégrer les équations de base dans leur forme conservative. On réalise alors, sur chacun de ces volumes de contrôle, un bilan des flux aux différentes faces (e, w, n, s), ce qui permet de travailler avec les flux moyens. La figure 3.1 représente un tel volume de contrôle.

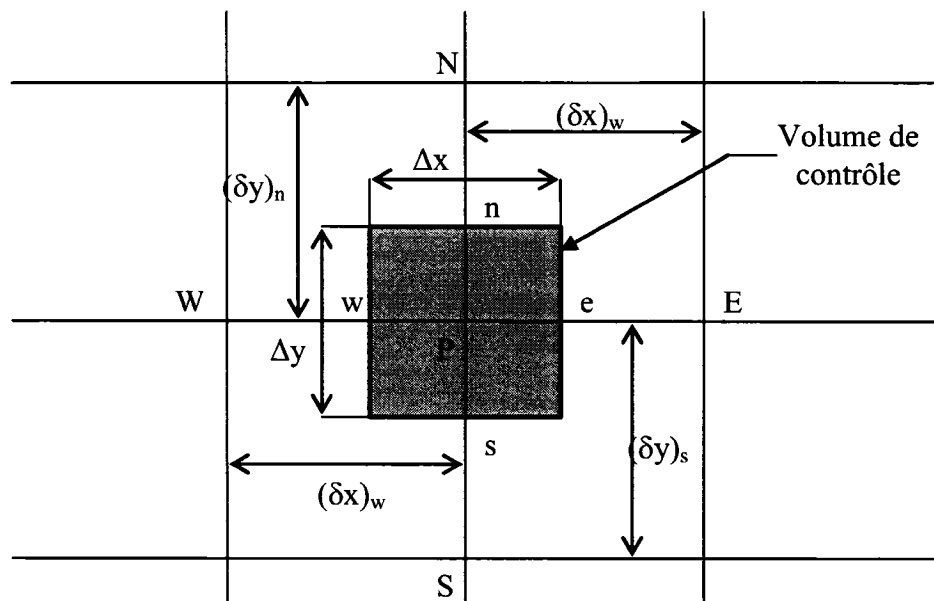


Figure 3.1 : Volume de contrôle

L'équation de transport générale pour une variable arbitraire ϕ est de la forme :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi - \Gamma \nabla \phi) = B \quad (3.11)$$

La discrétisation de l'équation (3.11), une fois intégrée sur un volume de contrôle, permet d'établir la relation algébrique suivante pour tous les nœuds du maillage :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (3.12)$$

Tel que présenté par Patankar (1980), le schéma de puissance, comparativement aux autres schémas (centré, en amont et mixte), permet l'obtention de solutions très précises même pour des convections de très forte intensité. Les coefficients de l'équation (3.12) sont donc calculés avec ce schéma comme suit :

$$a_E = D_e \max \left[0, \left(1 - 0,1 |P_e|^5 \right) \right] + \max [-F_e, 0] \quad (3.13)$$

$$a_W = D_w \max \left[0, \left(1 - 0,1 |P_w|^5 \right) \right] + \max [F_w, 0] \quad (3.14)$$

$$a_N = D_n \max \left[0, \left(1 - 0,1 |P_n|^5 \right) \right] + \max [-F_n, 0] \quad (3.15)$$

$$a_S = D_s \max \left[0, \left(1 - 0,1 |P_s|^5 \right) \right] + \max [F_s, 0] \quad (3.16)$$

$$a_P^0 = \rho_P^0 \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (3.17)$$

$$b = B_C \Delta x \Delta y + a_P^0 \phi_P^0 \quad (3.18)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - B_P \Delta x \Delta y \quad (3.19)$$

$$B = B_C + B_P \phi_P, \text{ avec } B_P \leq 0 \quad (3.20)$$

Les quantités F, D, P ci-dessus sont définies par les expressions suivantes :

$$F_e = (\rho u)_e \Delta y, F_w = (\rho u)_w \Delta y, F_n = (\rho v)_n \Delta x, F_s = (\rho v)_s \Delta x \quad (3.21)$$

$$D_e = \frac{\Gamma_e \Delta y}{(\delta x)_e}, D_w = \frac{\Gamma_w \Delta y}{(\delta x)_w}, D_n = \frac{\Gamma_n \Delta x}{(\delta y)_n}, D_s = \frac{\Gamma_s \Delta x}{(\delta y)_s} \quad (3.22)$$

$$P_e = \frac{F_e}{D_e}, P_w = \frac{F_w}{D_w}, P_n = \frac{F_n}{D_n}, P_s = \frac{F_s}{D_s} \quad (3.23)$$

Lorsqu'un exposant 0 est présent, il faut comprendre que la variable est évaluée au temps t alors que toutes les autres sont évaluées au temps $t + \Delta t$ selon les règles de la formulation implicite. Le lecteur intéressé par les détails de cette formulation peut se référer à l'ouvrage de Prud'homme et Nguyen (1996).

Cette discrétisation de l'équation de transport, dans sa forme générale, se précise ainsi pour les équations du problème direct :

$$\text{pour la conservation d'énergie : } \rho = 1, \phi = T, \Gamma = 1 \text{ et } B = Q \quad (3.24)$$

$$\text{pour le transport du substrat : } \rho = 1, \phi = S, \Gamma = \frac{1}{Le_s} \text{ et } B = \dot{S} \quad (3.25)$$

$$\text{pour le transport de la biomasse : } \rho = 1, \phi = X, \Gamma = \frac{1}{Le_x} \text{ et } B = \dot{X} \quad (3.26)$$

Il faut porter une attention particulière aux équations de transport de masse, pour lesquelles le pas de temps doit être divisé par la porosité normalisée : $\Delta t \rightarrow \frac{\Delta t}{\varepsilon}$.

Il n'est pas indiqué d'utiliser le schéma de puissance pour la discrétisation de l'équation de courant qui ne comporte pas de terme de convection. L'évaluation des coefficients de l'équation (3.12) se réalise alors par différences centrées. On obtient en résumé :

$$\phi = \psi \quad (3.27)$$

$$a_E = \frac{\Delta y}{(\delta x)_e}, a_W = \frac{\Delta y}{(\delta x)_w}, a_N = \frac{\Delta x}{(\delta y)_n}, a_S = \frac{\Delta x}{(\delta y)_s} \quad (3.28)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (3.29)$$

$$b = Ra \left[\left(\frac{T_E - T_W}{2} + N_S \frac{S_E - S_W}{2} + N_x \frac{X_E - X_W}{2} \right) \cos \theta \Delta y \right. \\ \left. + \left(\frac{T_S - T_N}{2} + N_S \frac{S_S - S_N}{2} + N_x \frac{X_S - X_N}{2} \right) \sin \theta \Delta x \right] \quad (3.30)$$

La discrétisation des équations du problème de sensibilité est réalisée de façon analogue. Une particularité réside dans l'évaluation des termes de convection avec la vitesse sensible ($\tilde{u}\phi$) dans les équations de transport. La solution retenue consiste à les traiter comme des termes sources que l'on intègre sur le volume de contrôle. Avec cette modification, les équations (2.41), (2.42) et (2.43) prennent alors la même forme que l'équation (3.11). L'équation de la fonction courant du problème de sensibilité (2.40) est exactement de la même forme que celle du problème direct, les coefficients sont donc évalués avec les mêmes expressions, mais en utilisant les variables sensibles.

Les équations de transport (2.56), (2.57) et (2.58) du problème adjoint présentent des coefficients de diffusion négatifs ($\Gamma \leq 0$), lorsqu'on les compare à l'équation générale (3.11). Cette particularité entraîne l'instabilité de la solution numérique, car les coefficients doivent tous être positifs. Le changement de variable $\tau = t_f - t$, permet de corriger cette situation et de réécrire les équations avec des coefficients de diffusion positifs. La forme de l'équation de la fonction courant du problème adjoint (2.55) justifie l'utilisation des mêmes coefficients que pour le problème direct (3.28) et (3.29), sauf en ce qui a trait au terme source (3.30), pour lequel il faut évaluer les jacobiens par différences centrées comme suit :

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} -\frac{\bar{T}_E - \bar{T}_W}{2\Delta x} \frac{T_N - T_S}{2\Delta y} + \frac{\bar{T}_N - \bar{T}_S}{2\Delta y} \frac{T_E - T_W}{2\Delta x} \\ -\frac{\bar{S}_E - \bar{S}_W}{2\Delta x} \frac{S_N - S_S}{2\Delta y} + \frac{\bar{S}_N - \bar{S}_S}{2\Delta y} \frac{S_E - S_W}{2\Delta x} \\ -\frac{\bar{X}_E - \bar{X}_W}{2\Delta x} \frac{X_N - X_S}{2\Delta y} + \frac{\bar{X}_N - \bar{X}_S}{2\Delta y} \frac{X_E - X_W}{2\Delta x} \end{pmatrix} \Delta x \Delta y \quad (3.31)$$

3.4 Algorithme de solution numérique

Une fois la discrétisation des équations réalisée pour chaque nœud du maillage, celles-ci sont résolues à chaque pas de temps par des balayages alternés ligne par ligne et colonne par colonne avec la méthode de Gauss-Seidel. La figure 3.2 présente l'algorithme utilisé pour résoudre les systèmes d'équations des problèmes direct, adjoint et de sensibilité. De plus, à chaque itération, les nouvelles valeurs obtenues sont corrigées avec une méthode de sous relaxation afin d'éviter la divergence, en posant :

$$\phi_p = (1 - w) \phi_p^{\text{ancienne valeur}} + w \phi_p^{\text{nouvelle valeur}} \quad (3.32)$$

où w est le facteur de sous relaxation.

Les expressions de l'algorithme du gradient conjugué qui font intervenir des intégrales sont évaluées numériquement par la méthode de Simpson.

Dans un cas particulier, au chapitre 6, le schéma utilisé est explicite d'ordre un. Il s'agit alors d'évaluer les variables au pas de temps précédent dans les coefficients, sauf pour les dérivées temporelles qui sont évaluées au temps t . Aucune itération n'est alors requise et les nouvelles valeurs sont calculées de façon explicite.

Lorsque les relevés de température proviennent de résultats expérimentaux, ils sont généralement entachés de bruits et ne présentent pas la valeur exacte. L'étude de ce phénomène s'avère d'une importance primordiale pour les solutions inverses, puisque celles-ci y sont très sensibles et peuvent diverger aisément tel que mentionné au premier chapitre. En utilisant le principe de divergence d'Alifanov, on peut déterminer le critère de convergence ε à appliquer lorsqu'il y a du bruit dans les données d'entrée avec une distribution de probabilité correspondant à une distribution aléatoire uniforme. Le

critère de convergence s'exprime alors tel que $\varepsilon = \sigma^2$, en posant l'hypothèse que $T^n - T_m \approx \sigma T_m$ où σ représente l'écart type des valeurs mesurées, que l'on considère constant et connu. Toutefois, ce critère demeure une indication et il est intéressant d'arrêter les simulations quelques itérations avant qu'il ne soit satisfait.

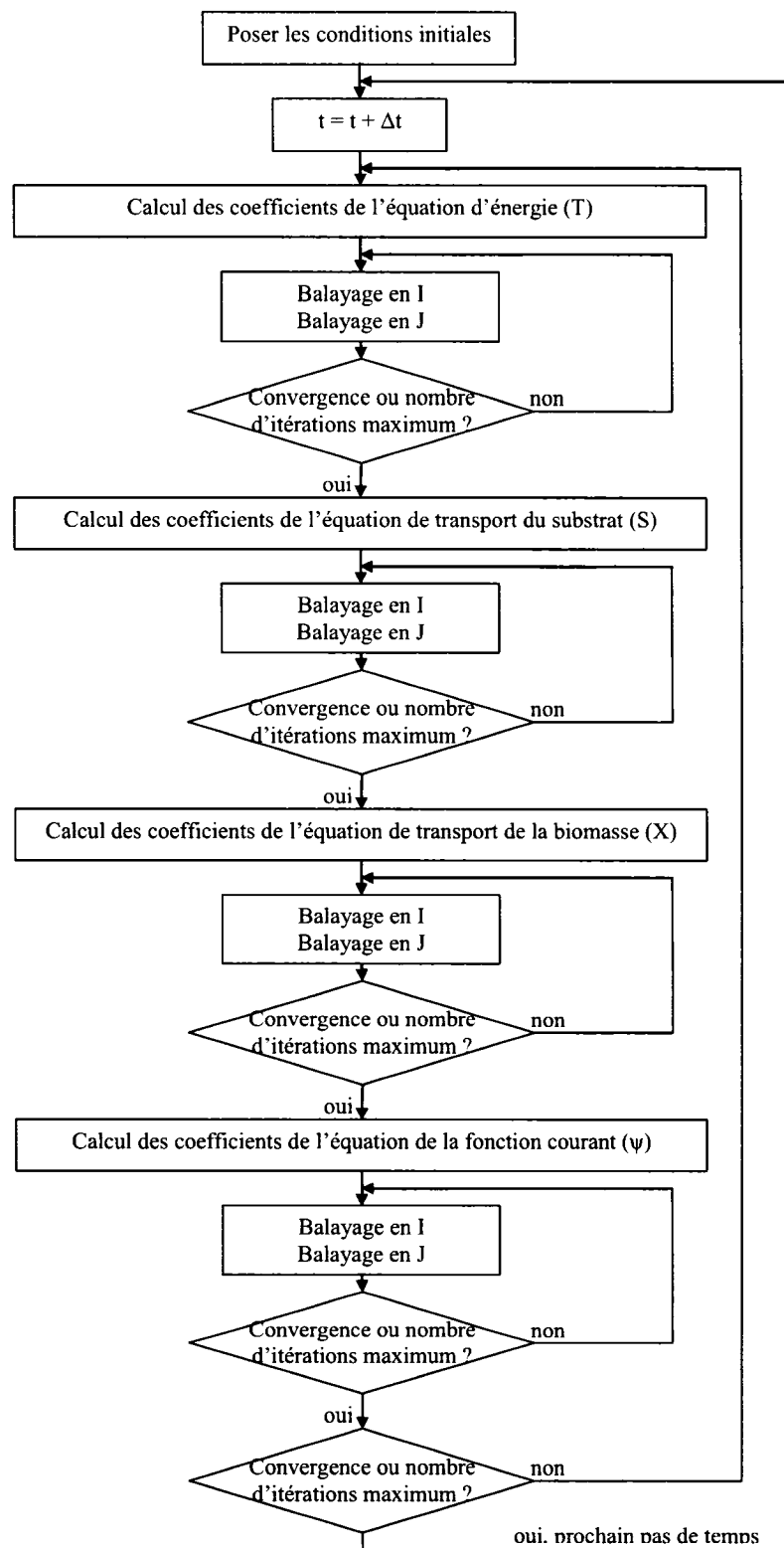


Figure 3.2 : Algorithme de solution numérique pour les systèmes d'équations

Chapitre IV : Évaluation numérique de la méthode

Ce chapitre est consacré à l'évaluation de la performance numérique de la méthode présentée aux chapitres précédents pour la détermination de la source de chaleur inconnue. La première partie de ce chapitre traite d'un cas simplifié, avec une équation de diffusion de masse sans terme source, permettant d'effectuer la comparaison avec une solution analytique. En second lieu, un cas complexe, faisant intervenir tous les paramètres, est exploré dans le but d'étudier la performance, de même que les limites, de la méthode inverse retenue.

4.1 Validation préliminaire

4.1.1 Description du problème

Dans cette section, on détermine la distribution et l'intensité d'une source de chaleur Q sur l'intervalle de temps $0 \leq t \leq t_f$ pour le domaine de solution et les conditions limites illustrés à la figure 4.1. Dans un premier temps, afin d'obtenir une solution analytique simplifiée, on utilise le modèle linéaire de la source de chaleur décrit à l'équation (4.1). Dans ce cas, la source de chaleur est égale à la concentration verticale moyenne.

$$Q = Q(x, t) = S_{\text{moy}}(x, t) = \int_0^1 S(x, y, t) dy \quad (4.1)$$

L'équation de transport de la biomasse, les termes de génération du substrat ainsi que les phénomènes de double diffusion sont négligés, par conséquent : $X = 0$, $\dot{S} = 0$ et $N_s = N_x = 0$. L'équation de transport du substrat est alors découplée pour les problèmes adjoint et de sensibilité. En fait, il suffit de résoudre l'équation de

mouvement et de conservation d'énergie pour ces problèmes. Pour tous les résultats présentés dans cette section, on utilise un maillage uniforme de 41 nœuds par 41 nœuds avec un pas de temps variant entre 5×10^{-3} et $1,5 \times 10^{-2}$ selon la valeur du nombre de Lewis. Puisque le terme source considéré est fonction du temps et de la position horizontale, une seule rangée de senseurs, répartis le long de l'axe horizontal, est nécessaire. Cette rangée est située, à moins d'indications contraires, à $y = 0,5$. Les conditions initiales considérées sont $\psi = T = S = 0$, tandis que le temps final de simulation est posé de façon à atteindre le régime permanent. Par ailleurs, lorsque les données des senseurs de température sont exactes, le critère de convergence ϵ est fixé à 5×10^{-3} .

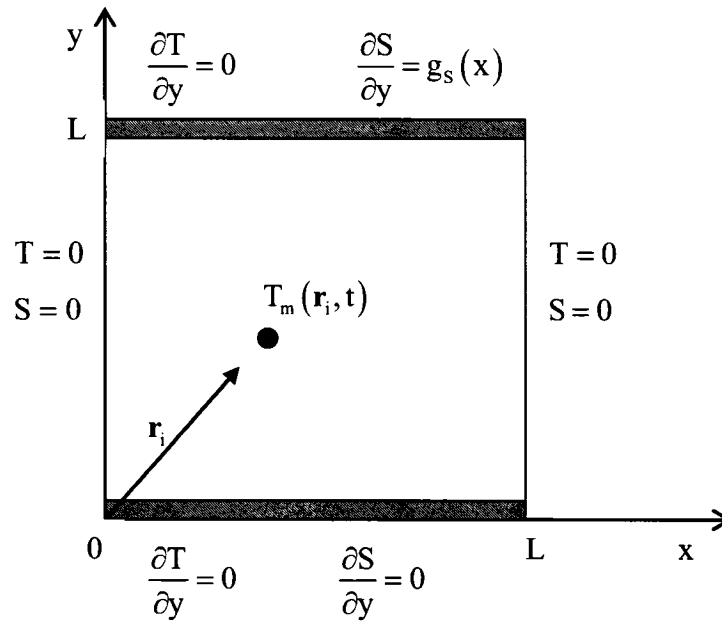


Figure 4.1 : Géométrie et conditions limites du problème

Les résultats présentés dans cette section sont obtenus par la méthode du gradient conjugué régulier, sans modification. Lorsque la solution recherchée est en régime permanent, l'approximation initiale de la source de chaleur est simplement $Q^0 = 0$. Toutefois, afin de contourner le problème de la détermination de la variable au temps

final de simulation exposé au chapitre précédent, les résultats en régime transitoire ont été obtenus en prenant, comme approximation initiale, le profil de la source de chaleur au temps final. Cette approximation n'affecte en rien la généralité des solutions obtenues, puisque la correction de l'approximation initiale est réalisée selon la même méthode.

4.1.2 Régime de conduction et de diffusion

Dans le but de vérifier la précision de la solution du problème inverse pour une source de chaleur inconnue variant en fonction de la concentration, on compare celle-ci avec la solution analytique exacte du cas où le nombre de Rayleigh (Ra) est égal à zéro. Les problèmes direct et inverse deviennent alors linéaires et le principe de superposition de solutions s'applique.

L'équation de diffusion de masse en régime permanent se réduit à l'équation de Laplace pour la concentration : $\nabla^2 S = 0$, quand $Ra = 0$. En imposant un flux de concentration $g_s(x) = \sin(n\pi x)$ à $y = 1$, on peut alors déduire, avec les autres conditions limites, la solution exacte de la distribution de concentration suivante :

$$S(x, y) = \frac{\cosh(n\pi y)}{n\pi \sinh(n\pi)} \sin(n\pi x) \quad (4.2)$$

Dans ce cas, en utilisant le modèle linéaire de l'équation (4.1), reliant la concentration et la source de chaleur, on obtient la distribution de la source de chaleur suivante :

$$Q(x) = \frac{\sin(n\pi x)}{(n\pi)^2} \quad (4.3)$$

En considérant les conditions limites et la géométrie présentée à la figure 4.1, la distribution de température ne dépend plus de la position verticale, mais devient simplement proportionnelle au terme source en régime permanent :

$$T(x) = \frac{\sin(n\pi x)}{(n\pi)^4} \quad (4.4)$$

Considérons, tout d'abord, la solution obtenue en régime permanent pour un flux de concentration $g_s(x) = \sin(\pi x)$ imposé à $y = 1$. Dans ce cas, puisque le champ de température est indépendant de la position verticale, la position de la rangée de senseurs n'affecte pas la solution. De surcroît, en régime permanent, la solution devient également indépendante de la porosité normalisée (ϵ) ainsi que du nombre de Lewis (Le).

La figure 4.2 présente le profil de la source de chaleur en régime permanent pour le problème direct et pour la solution analytique avec $n = 1$. La différence entre les solutions numérique et analytique s'explique par l'erreur de discrétisation et peut être réduite en utilisant un maillage plus fin. On peut également remarquer que la solution inverse obtenue en régime permanent prédit correctement le profil sinusoïdal de la source. Étant donné que le problème inverse est linéaire pour $Ra = 0$ en régime permanent, la méthode du gradient conjugué converge après une seule itération lorsque l'approximation initiale est $Q^0 = 0$.

Observons maintenant l'effet, sur les solutions du problème inverse, du bruit introduit dans les données fournies par les senseurs de température. Pour ce faire, considérons la solution en régime transitoire obtenue pour les mêmes conditions limites que le problème précédent avec $Ra = 0$ et un bruit aléatoire sur les données d'une distribution de probabilité uniforme avec un écart type de $\sigma = 0,04$. La figure 4.3 montre l'évolution du profil du terme source dans le temps de même que l'évolution de l'erreur

selon le nombre d'itérations. L'approximation initiale de la source de chaleur inconnue est alors donnée par la solution en régime permanent produite au temps final de simulation ($Q^0 = Q(t_f)$). La solution du problème inverse semble plus précise après trois itérations qu'après 11 itérations. La différence entre ces deux solutions illustre bien l'effet de régularisation de la méthode itérative du gradient conjugué. À cet égard, l'algorithme ne reproduit pas toutes les fréquences au même rythme, mais plutôt en commençant par les basses fréquences pour ensuite recouvrir les plus hautes. La convergence séquentielle est à l'origine du pouvoir de régularisation. Il est alors possible d'optimiser la solution en arrêtant les itérations avant que les composantes nuisibles de hautes fréquences, engendrées par le bruit, ne soient reproduites. Ce phénomène a été démontré à quelques reprises notamment en conduction (Prud'homme et Nguyen 1999) et en convection (Prud'homme et Jasmin 2001).

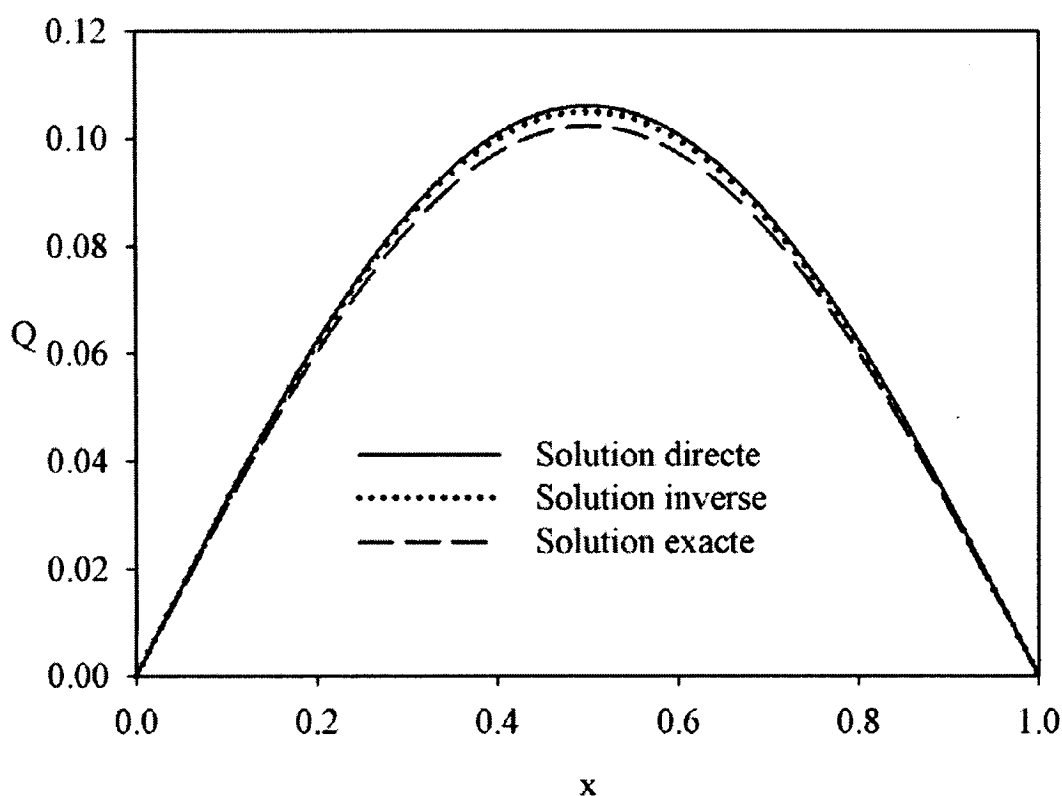


Figure 4.2 : Profil de la source de chaleur à t_f , $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 0$

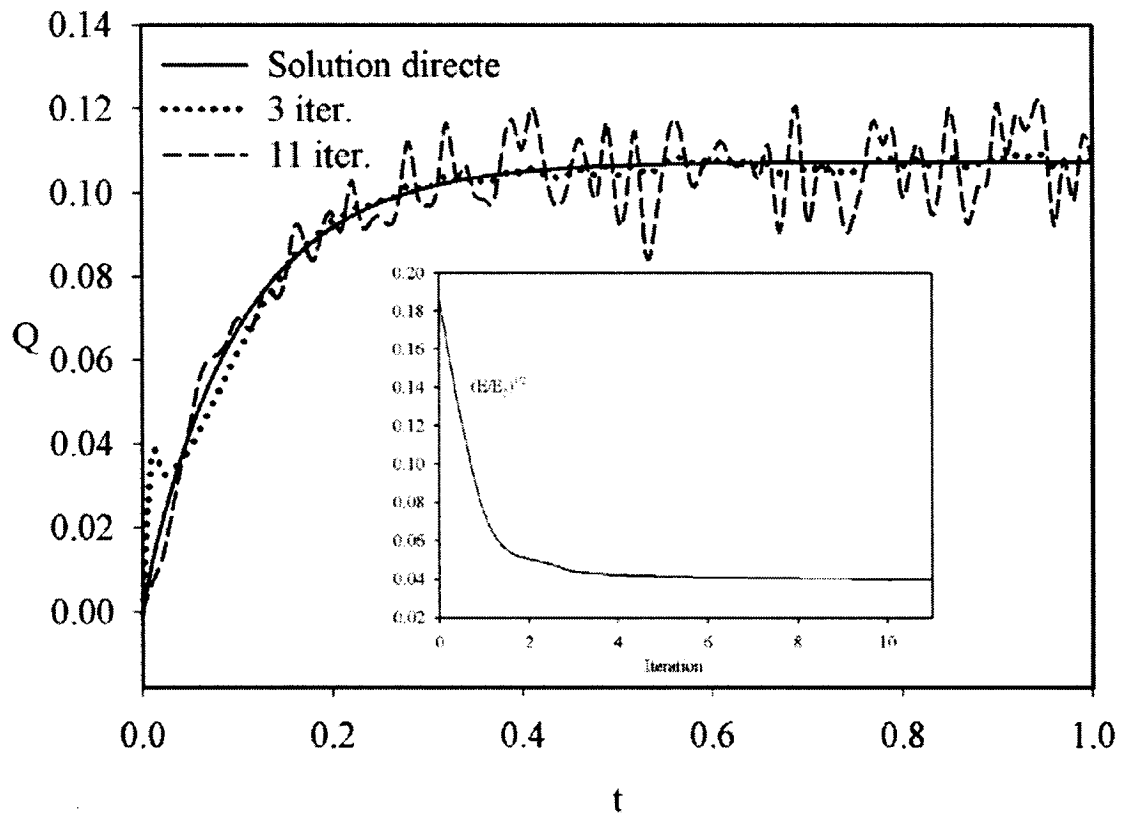


Figure 4.3 : Profil de la source de chaleur en fonction du temps à $x = 0,5$, bruit sur les données, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 0$, $\sigma = 0,04$

La figure 4.4 décrit les solutions des problèmes direct et inverse en régime transitoire pour différentes valeurs du produit ϵLe . On remarque que ce produit détermine le temps nécessaire pour atteindre le régime permanent. Lorsque ce produit augmente, le temps requis pour atteindre le régime permanent augmente lui aussi. Son influence se répercute également sur le nombre d'itérations nécessaires à la convergence, qui est de 1 pour $\epsilon Le = 0,5$ et 1, tandis qu'il est de 8 pour $\epsilon Le = 2$. Néanmoins, les solutions des problèmes direct et inverse concordent dans tous les cas étudiés.

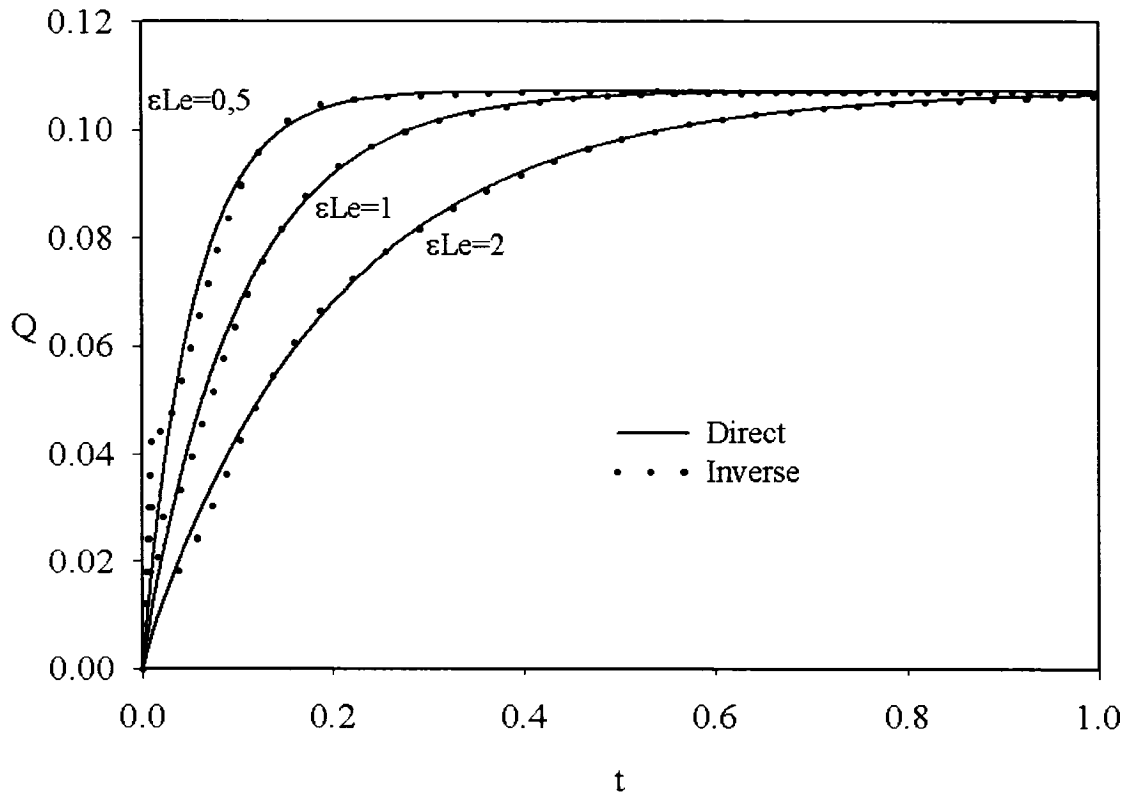


Figure 4.4 : Profil de la source de chaleur en fonction du temps à $x = 0,5$, influence du produit εLe , $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 0$

4.1.3 Régime de convection

L'intensité de la convection devient très importante lorsque le nombre de Rayleigh atteint 10^5 . La figure 4.5 présente, pour le problème direct, les isothermes, les lignes de courant ainsi que les isoconcentrations obtenues en régime permanent pour un flux de concentration $g_s(x) = \sin(\pi x)$ imposé à $y = 1$ et pour $Le = 1$. Les isothermes, pour ce nombre de Rayleigh, révèlent une distribution non uniforme des températures dans toute la cavité. Par conséquent, la position des senseurs de température devrait influencer la

solution inverse. Les lignes de courant représentent deux cellules de convection tournant en sens opposés. Celles-ci apparaissent d'ailleurs pour différents nombres de Rayleigh et Lewis, mais avec des intensités différentes. Les lignes de concentrations sont particulièrement concentrées le long de la paroi supérieure de la cavité, formant ainsi une couche limite.

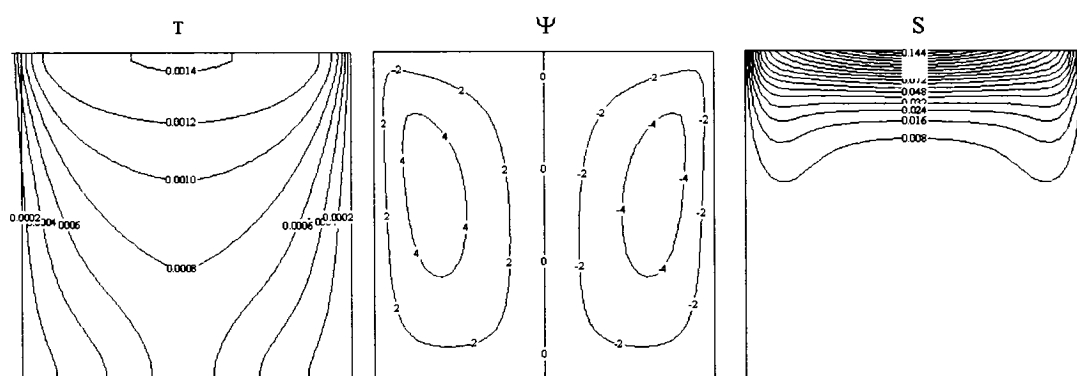


Figure 4.5 : Isothermes, ligne de courant et de concentration en régime permanent,
 $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$

La figure 4.6 illustre l'influence du nombre de Lewis sur la distribution des concentrations dans la cavité. On remarque que, même à des nombres de Rayleigh relativement élevés, le nombre de Lewis affecte grandement les valeurs et la distribution des concentrations. Lorsque le nombre de Lewis augmente, la concentration diminue au voisinage de la paroi supérieure et se distribue davantage dans la cavité. La source de chaleur Q devient alors moins importante. Quand le nombre de Lewis est suffisamment grand, une couche limite apparaît à la paroi supérieure de la cavité. Toutefois, même si l'intensité des lignes de courant et des isothermes est influencée par le nombre de Lewis, leur distribution demeure semblable.

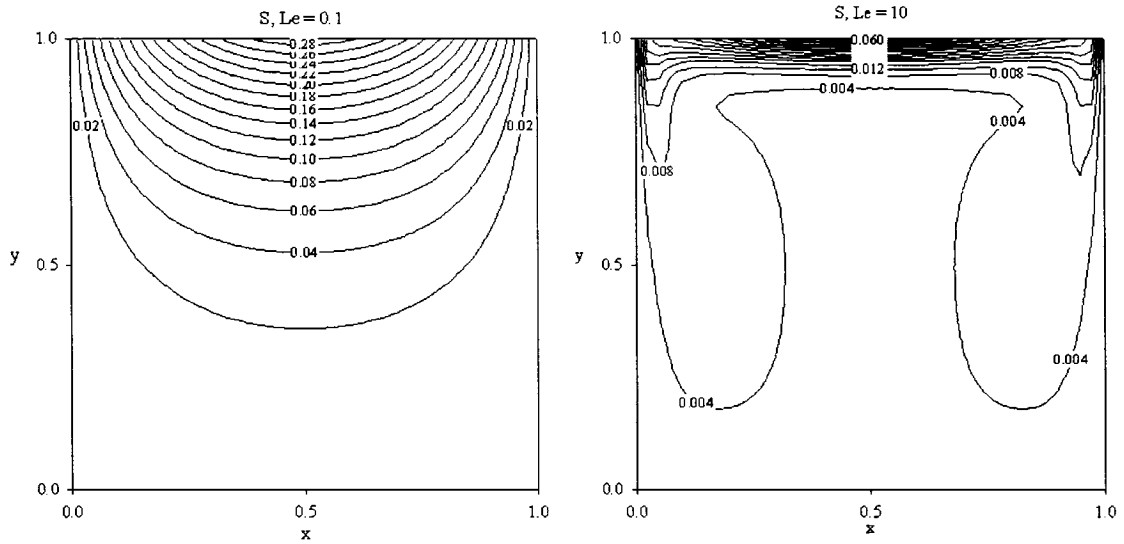


Figure 4.6 : Concentration à t_f pour $Le = 1$ et 10 , $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 10^5$

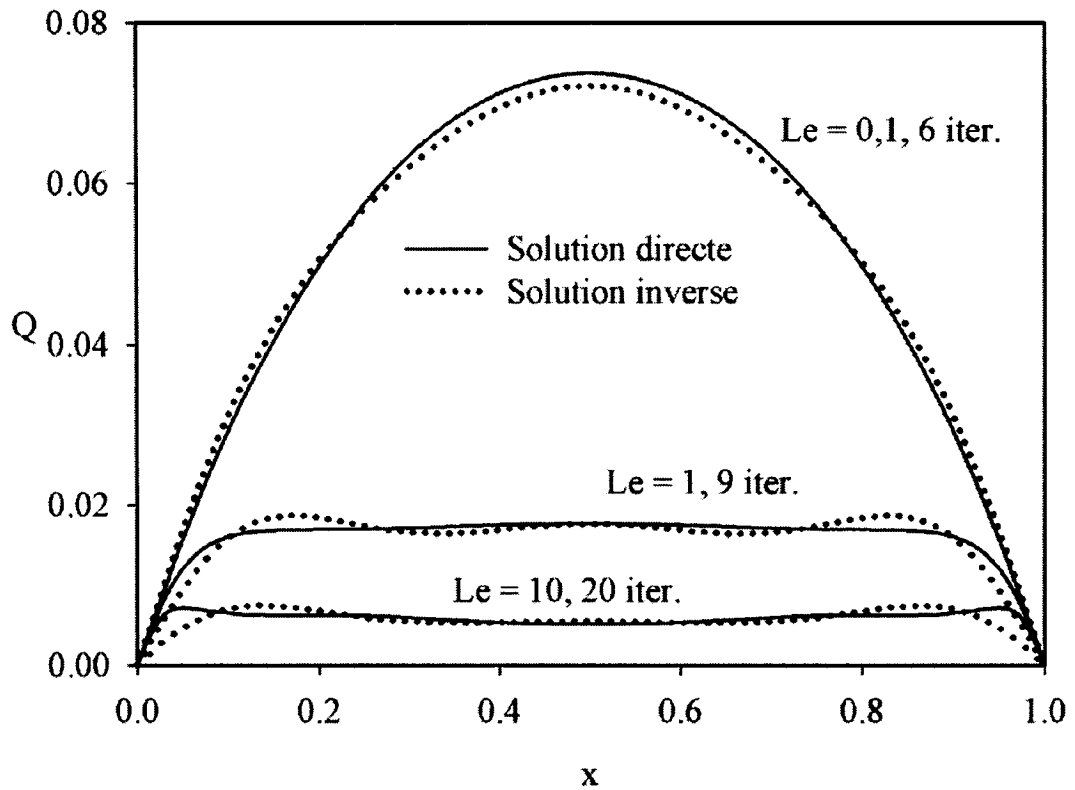


Figure 4.7 : Profils de la source de chaleur à t_f pour différents nombres de Lewis, $g_s = \sin(\pi x)$, $Ra = 10^5$

Les solutions inverses obtenues pour un nombre de Rayleigh de 10^5 concordent avec les solutions directes comme le démontre la figure 4.7. Le profil de la source de chaleur, en régime permanent, est représenté en fonction de x au point $y = 0,5$ pour différents nombres de Lewis. La source de chaleur diminue d'intensité lorsque Le augmente, comme on peut s'y attendre, puisque l'intensité des concentrations devient elle-même plus faible. C'est pourquoi un plus grand nombre d'itérations devient nécessaire pour converger, tandis que la solution inverse se révèle plus imprécise près des parois latérales.

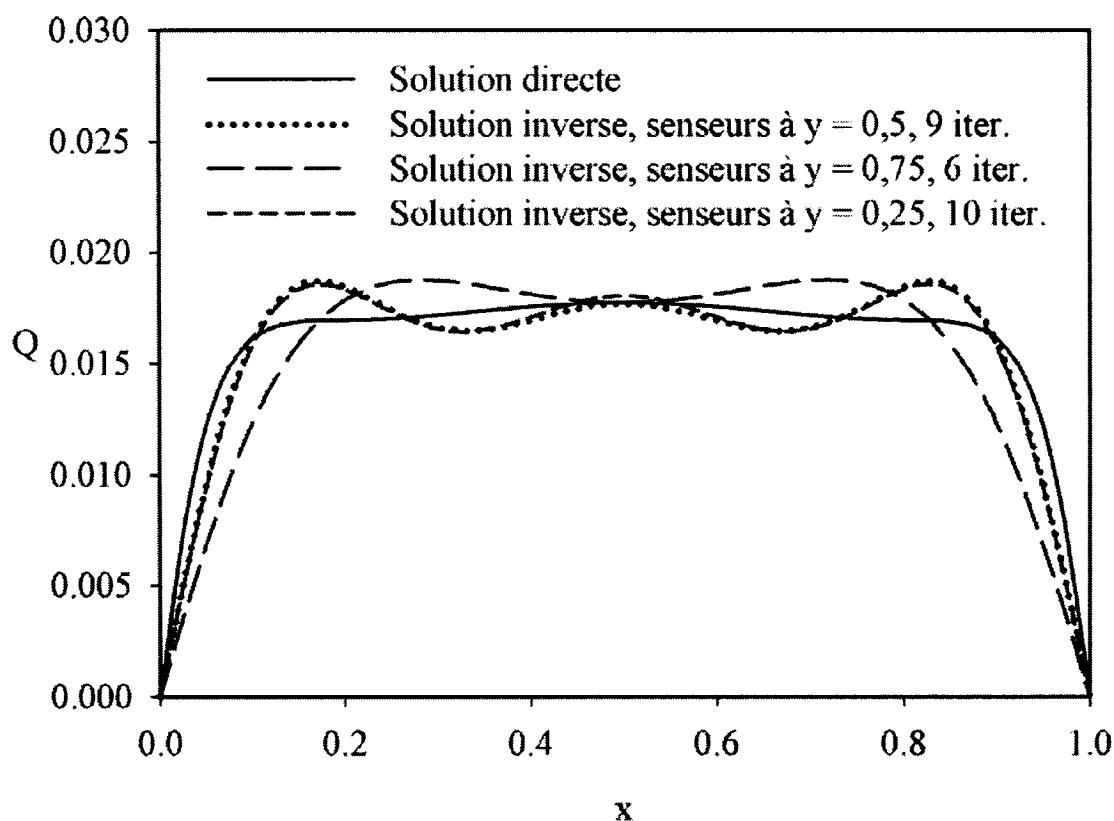


Figure 4.8 : Profils de la source de chaleur à t_f , influence de la position des senseurs, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$

Ainsi qu'on l'a démontré à maintes reprises jusqu'ici (Prud'homme et Nguyen 2001), la position des senseurs affecte les solutions des problèmes inverses qui visent à déterminer une condition limite sur une frontière du domaine. En effet, plus les senseurs sont proches de cette frontière, plus les résultats sont précis. En ce qui a trait à la source de chaleur, la figure 4.8 illustre les solutions obtenues en régime permanent avec $Le = 1$ pour différentes positions des senseurs. La convergence est atteinte plus rapidement à partir des senseurs placés à $y = 0,75$, près du flux de concentration imposé, qu'avec ceux placés à $y = 0,5$ et $0,25$. Pourtant, les différentes solutions présentées n'apparaissent pas plus précises.

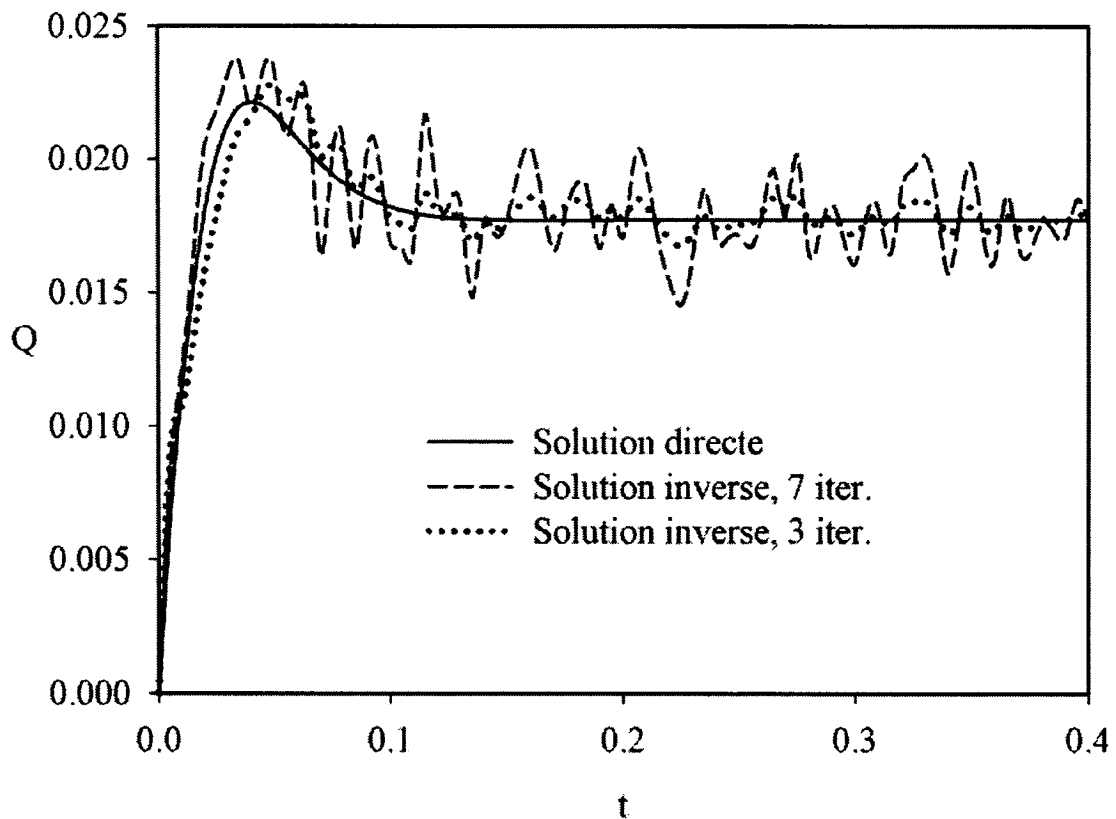


Figure 4.9 : Profil de la source de chaleur en fonction du temps à $x = 0,5$, bruit sur les données d'entrée, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$, $\sigma = 0,04$

La figure 4.9 montre les solutions obtenues en régime de convection lorsque l'on introduit du bruit dans les données. Les profils de la source de chaleur en fonction du temps, au centre de la cavité à $x = y = 0,5$, sont présentés après 3 et 7 itérations. En comparant ces résultats avec la solution directe, on remarque les mêmes effets régulateurs de la méthode itérative du gradient conjugué que pour le régime en conduction. Il est donc possible d'arrêter les itérations pour obtenir une solution optimale au problème inverse.

Le flux sinusoïdal de concentration imposé jusqu'alors se résumait à une simple composante d'une série de Fourier. En prenant maintenant un flux de concentration de forme triangulaire, l'algorithme de solution pourra être validé pour un flux comportant plusieurs composantes de Fourier. Le flux de concentration, imposé à $y = 1$, devient alors :

$$g_s(x) = \begin{cases} 2x, & 0 < x < 1/2 \\ 2 - 2x, & 1/2 < x < 1 \end{cases} \quad (4.5)$$

Les figures 4.10 et 4.11 présentent les profils du terme source en fonction du temps pour $Ra = 10^5$ et $Le = 1$ pour le problème direct et inverse, respectivement. La comparaison entre ces deux solutions permet de conclure que la solution inverse prédit adéquatement le terme source.

Finalement, afin de valider la méthode pour un modèle de source non linéaire, une simulation a été effectuée pour des senseurs positionnés à $y = 0,5$ avec $Le = 1$, $Ra = 10^5$ et le flux de concentration $g_s = \sin(\pi x)$ à $y = 1$. Le modèle de source sélectionné pour assurer un fort niveau de non linéarité est le suivant :

$$Q = Q(x, t) = \text{erf} \left[100 \cdot S_{\text{moyY}}(x, t) \right] \quad (4.6)$$

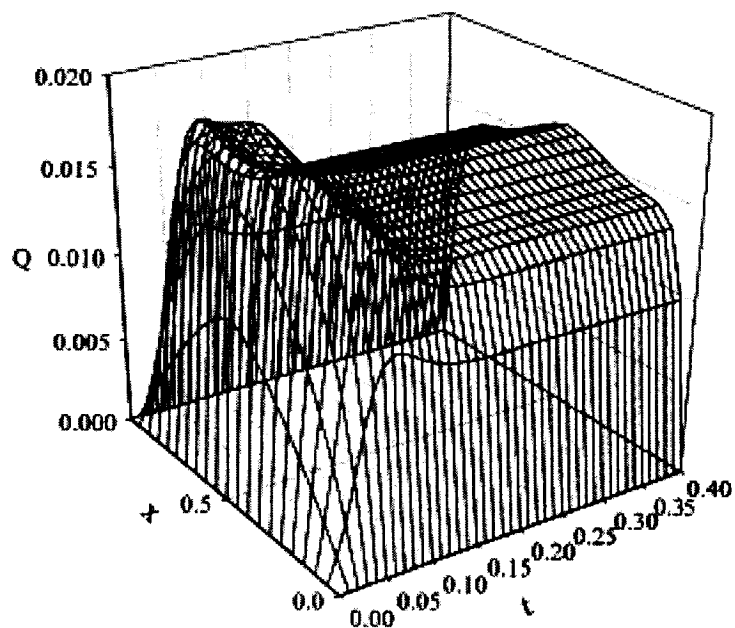


Figure 4.10 : Source de chaleur Q en fonction du temps, solution directe pour un flux de concentration de forme triangulaire, $Le = 1$, $Ra = 10^5$

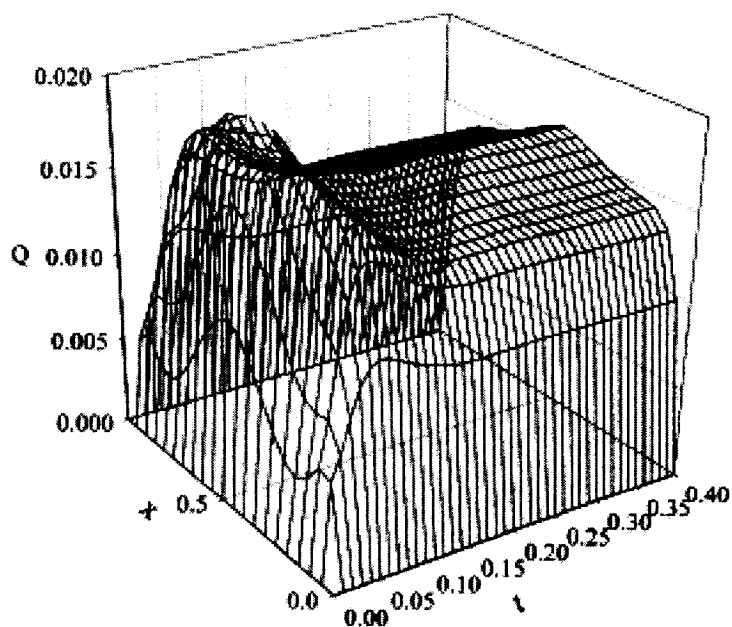


Figure 4.11 : Source de chaleur Q en fonction du temps, solution inverse pour un flux de concentration de forme triangulaire, $Le = 1$, $Ra = 10^5$

La figure 4.12 présente, en régime permanent, le profil du terme source des solutions directe et inverse en fonction de x . La solution inverse présente des valeurs plus élevées, mais comparables à celles de la solution directe. On remarque que les variations des couches limites le long des parois verticales ne sont pas bien captées par la solution inverse. Néanmoins, la solution inverse produit de bons résultats pour un modèle non linéaire en régime de convection.

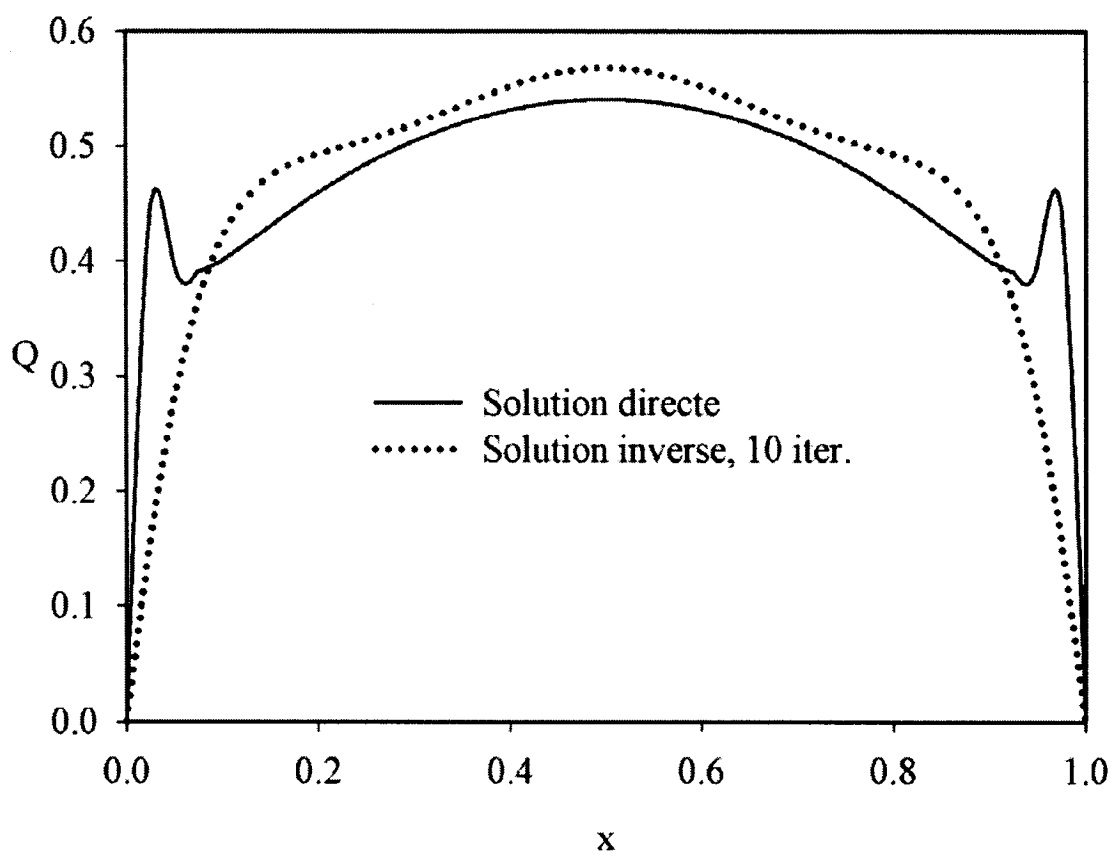


Figure 4.12 : Profil de la source de chaleur à t_f , modèle de source non linéaire, $g_s = \sin(\pi x)$, $Le = 1$, $Ra = 10^5$

4.2 Double diffusion

4.2.1 Description du problème

On passe maintenant à l'étape suivante du problème précédent en y intégrant l'équation de transport de la biomasse ainsi que les termes sources décrivant l'activité microbiologique. En supposant que les concentrations de substrat et de biomasse influencent la masse volumique du fluide, les équations deviennent entièrement couplées. Par conséquent, toutes les équations décrivant le phénomène doivent être résolues pour les problèmes direct, adjoint et de sensibilité. Les nouvelles conditions limites, résumées à la figure 4.13, engendrent un niveau de convection permettant l'obtention de solutions intéressantes pour valider les capacités de la méthode inverse.

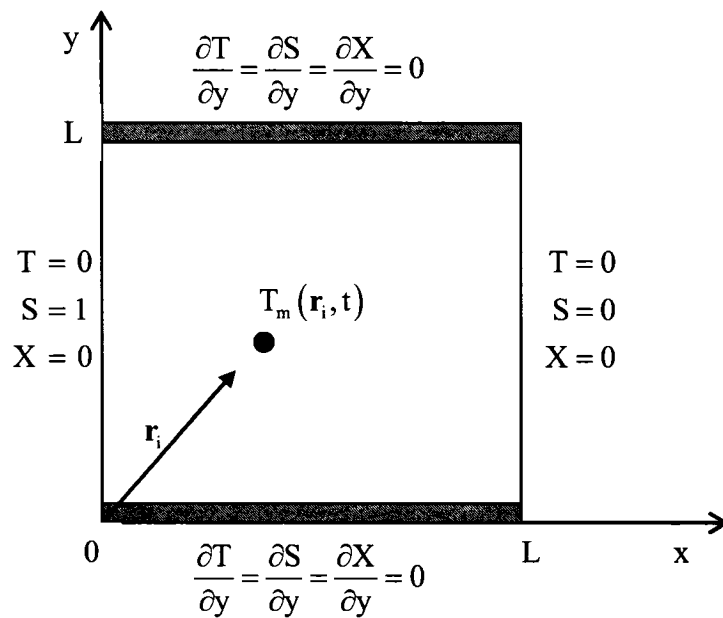


Figure 4.13 : Géométrie et conditions limites du problème

En ce sens, précisons que le but de cette section n'est pas de réaliser une étude paramétrique exhaustive, mais plutôt d'analyser la capacité de la méthode à générer de

bonnes solutions inverses en fonction des divers paramètres impliqués dans le modèle complet. Les conditions limites posées, quoique plus ou moins réalistes, permettent de constater la capacité de l'algorithme à traiter simultanément les différentes conditions de Dirichlet et de Neumann. Pour ce faire, les paramètres de référence du modèle ont été déterminés intentionnellement, après plusieurs tests préliminaires, pour générer une intensité et une distribution spatiale significatives de la source de chaleur. Les valeurs de ces paramètres sont présentés au tableau 4.1.

Tableau 4.1 : Paramètres de références utilisés

Paramètres adimensionnels	ε	Le_S	Le_X	μ	Y	K_S	K_D
Valeurs de référence	1	1	1	10	1	1	1

Les conditions initiales considérées sont $\psi = T = S = 0$, tandis que la concentration de biomasse initiale est de $X=1$. L'approximation initiale utilisée est $Q^0 = 0$ en tout temps.

4.2.2 Régime de conduction et de diffusion

De même que précédemment, lorsque l'on étudie le problème avec les conditions limites présentées à la figure 4.13, les solutions sont indépendantes de la position verticale pour $Ra = 0$. Cette propriété permet de résoudre les équations en n'utilisant qu'une seule rangée de senseurs répartis horizontalement. Pour commencer, cette rangée est située à $y = 0,5$.

On examine, en premier lieu, la solution pour les paramètres de référence avec $Ra = 0$. La figure 4.14 décrit pour la solution directe les isolignes de la source de chaleur, de la température, de la concentration de substrat et de la concentration de biomasse en fonction de la position horizontale et du temps. La source de chaleur débute de façon importante à $x = 0$, suivant en ce sens, la diffusion du substrat de cette paroi vers l'intérieur de la cavité. En ce qui a trait aux profils de concentration du substrat et de biomasse, ils sont influencés de façon plus marquée par les conditions limites. D'ailleurs, en régime permanent, la biomasse présente est entièrement éliminée. Il n'y a donc plus de consommation du substrat et la source de chaleur s'épuise. À partir de ce moment, le problème se résume à résoudre les équations de Laplace. On remarque également que le profil de température est bien distribué à travers tout le domaine. La solution inverse correspondante, obtenue après 23 itérations, est présentée à la figure 4.15 et apparaît en parfait accord avec la solution directe.

On étudie maintenant l'influence des différents paramètres sur la solution pour un nombre de Rayleigh égal à zéro en examinant les différentes courbes de niveau tracées en fonction de x et de t . De plus, pour une meilleure comparaison, les profils de la source en fonction du temps à $x = 0,5$, pour les solutions directes et inverses sont également tracés.

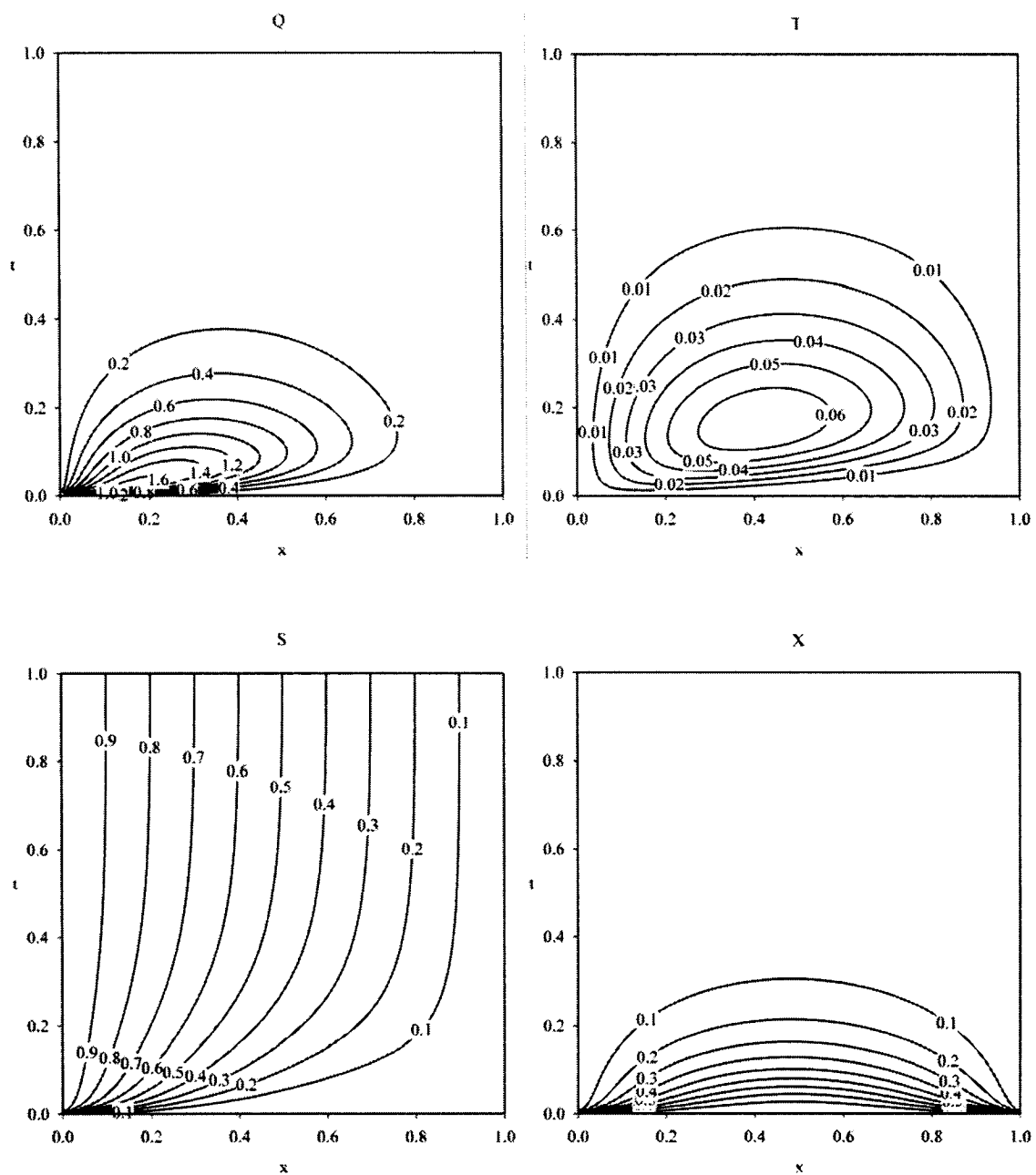


Figure 4.14 : Isolignes de Q , T , S et X en fonction de x et de t , solution directe pour $Ra = 0$

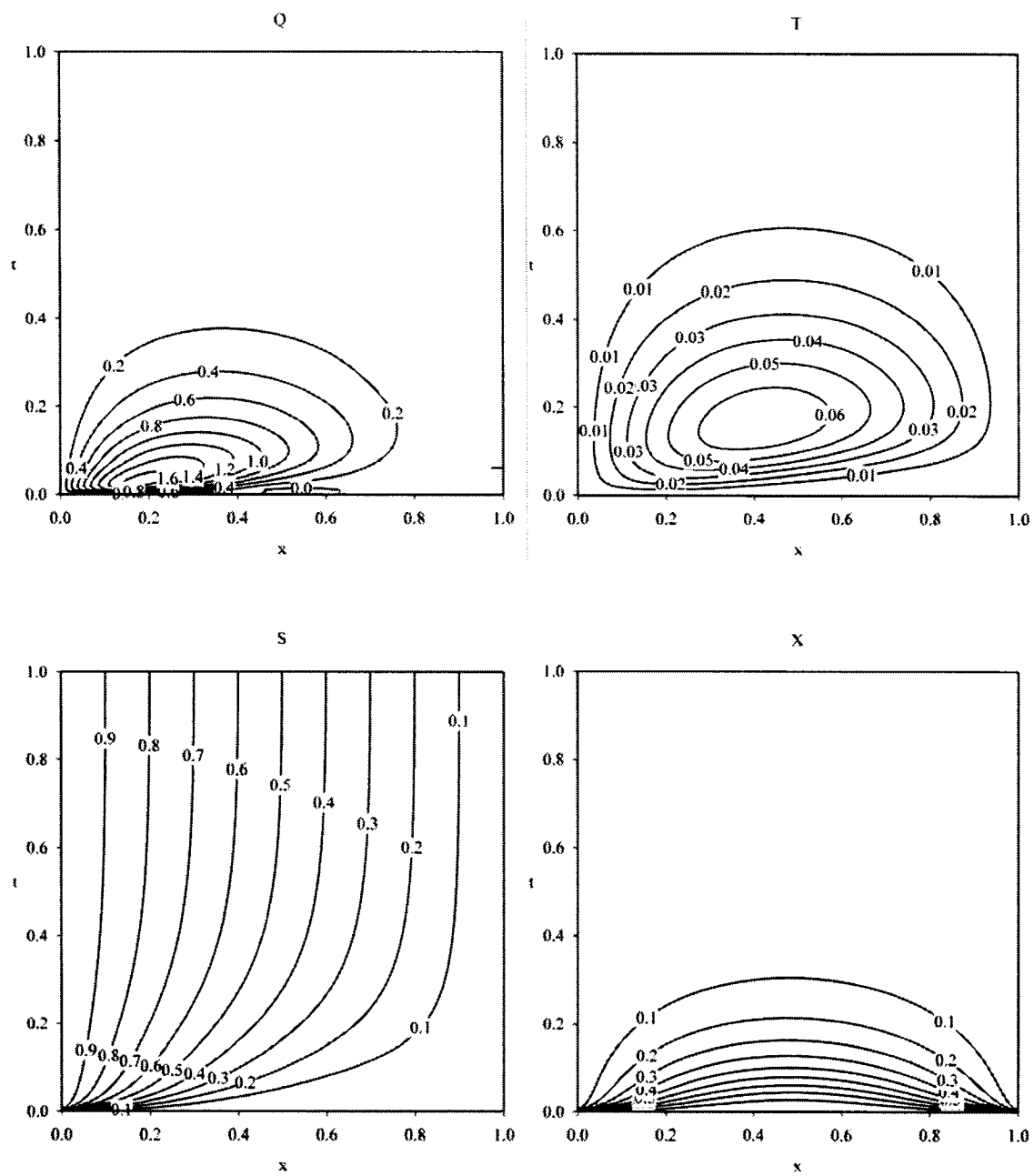


Figure 4.15 : Isolignes de Q , T , S et X en fonction de x et de t , solution inverse pour $Ra = 0$

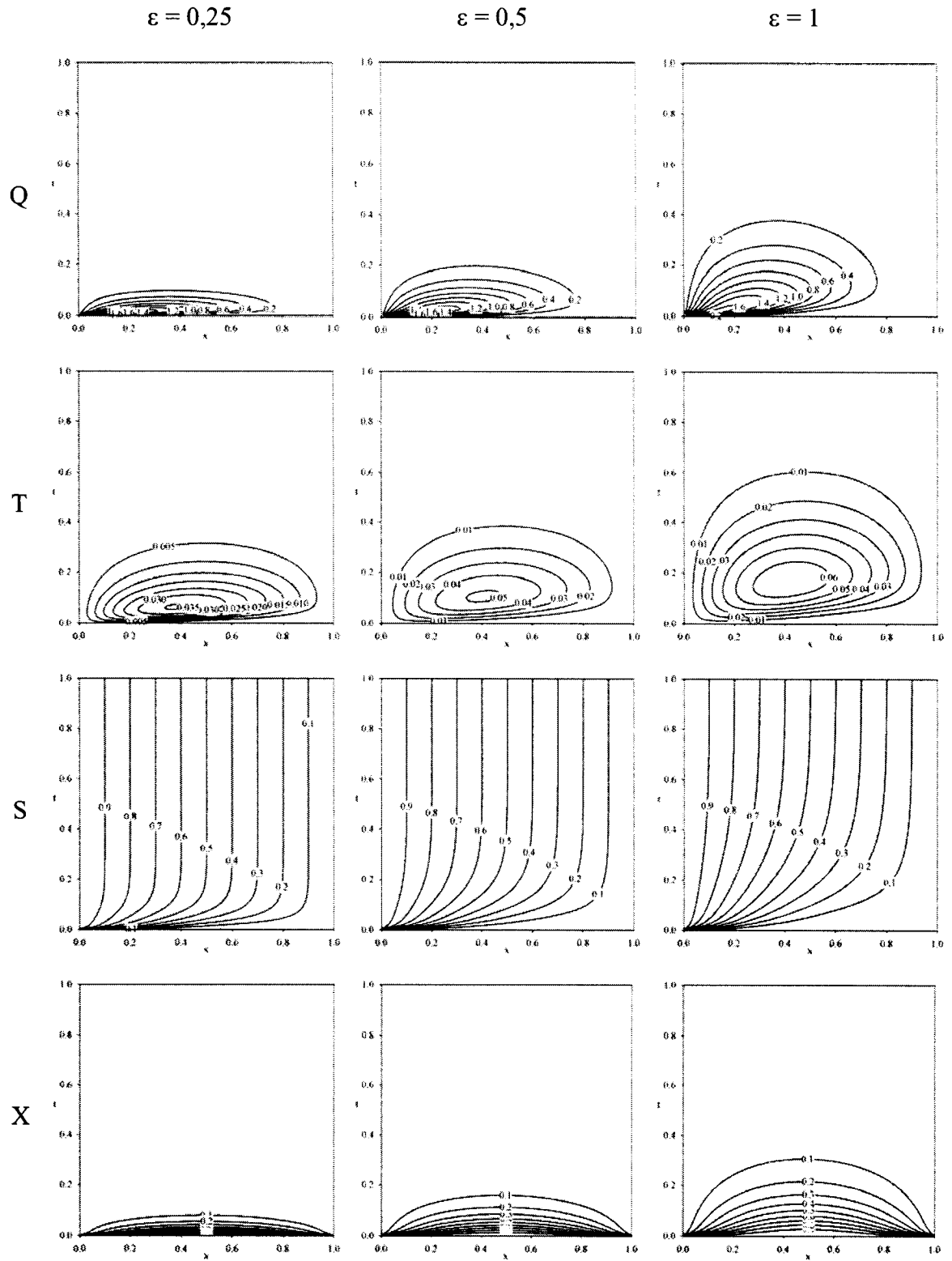


Figure 4.16 : Isolignes de Q , T , S et X en fonction de x et de t , influence de ε , $Ra = 0$

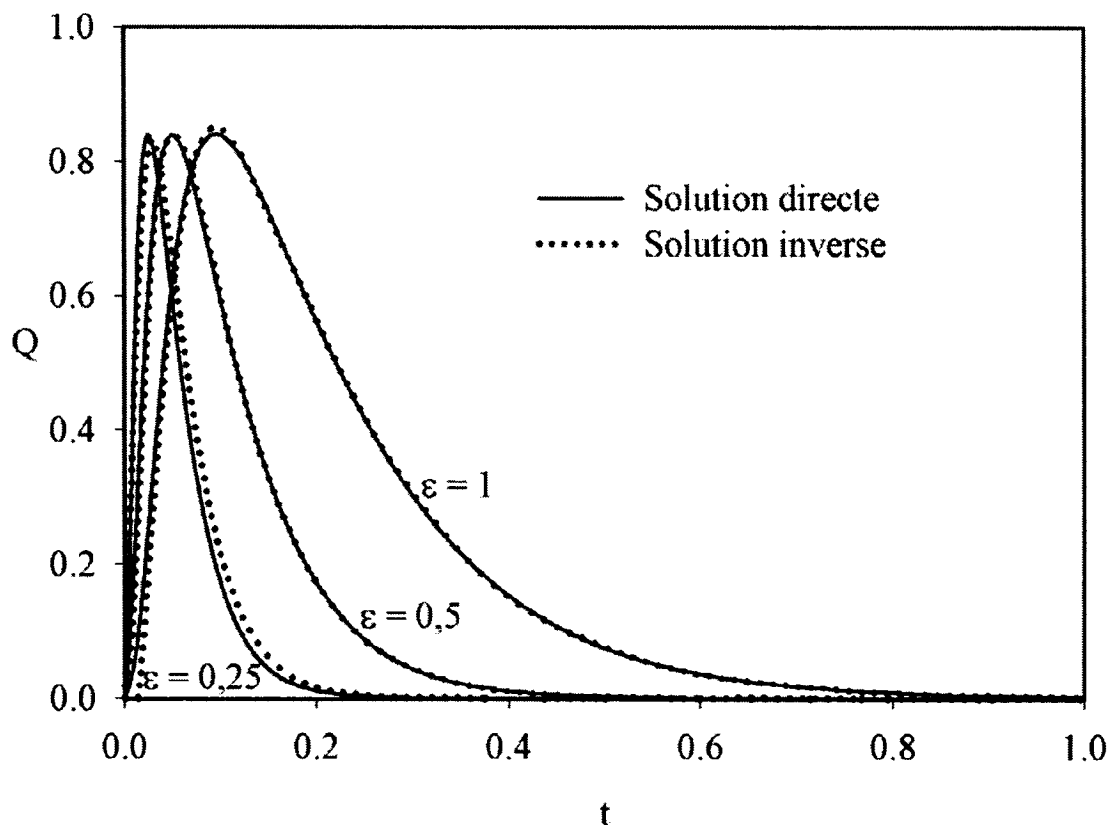


Figure 4.17 : Influence de ε , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$

La figure 4.16 illustre l'évolution des solutions lorsque la porosité normalisée ε prend successivement une valeur de 0,25, 0,5 et 1, alors que les autres paramètres demeurent constants aux valeurs indiquées au tableau 4.1. La diminution de ε influence les équations de transport de masse de façon telle que la dispersion s'accélère entraînant ainsi des temps plus courts pour atteindre l'intensité maximale de la source de chaleur. La période de déclin est également plus brève. Toutefois, cette intensité maximale demeure relativement constante. Notons que le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence est de 30, 27 et 23 respectivement pour les valeurs de ε de 0,25, 0,5 et 1. Dans tous les cas, la figure 4.17 démontre que les profils de la source en fonction du temps à $x = 0,5$ pour les solutions directes et inverses concordent.

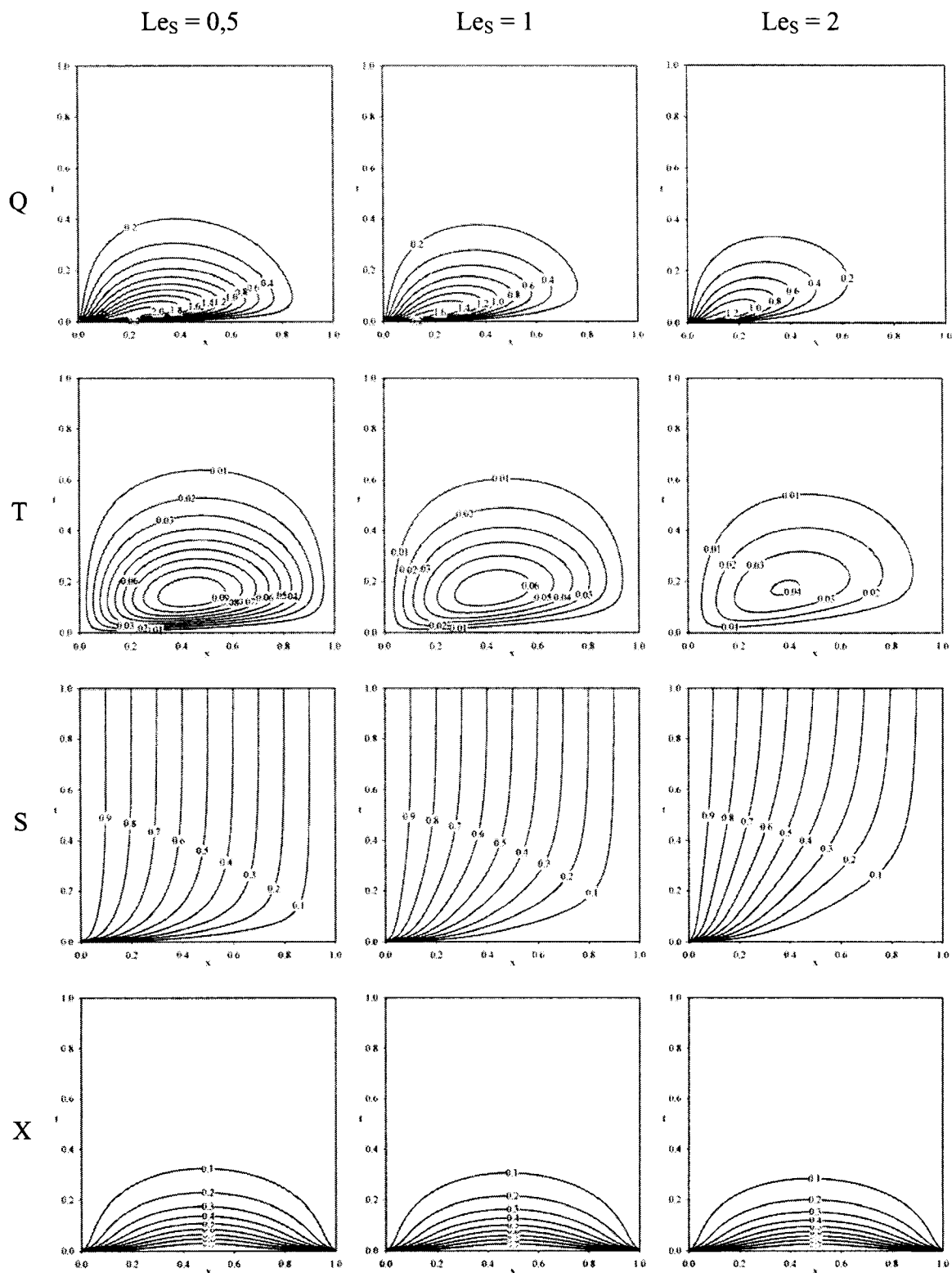


Figure 4.18 : Isolignes de Q, T, S et X en fonction de x et de t, influence de Le_S , $Ra = 0$

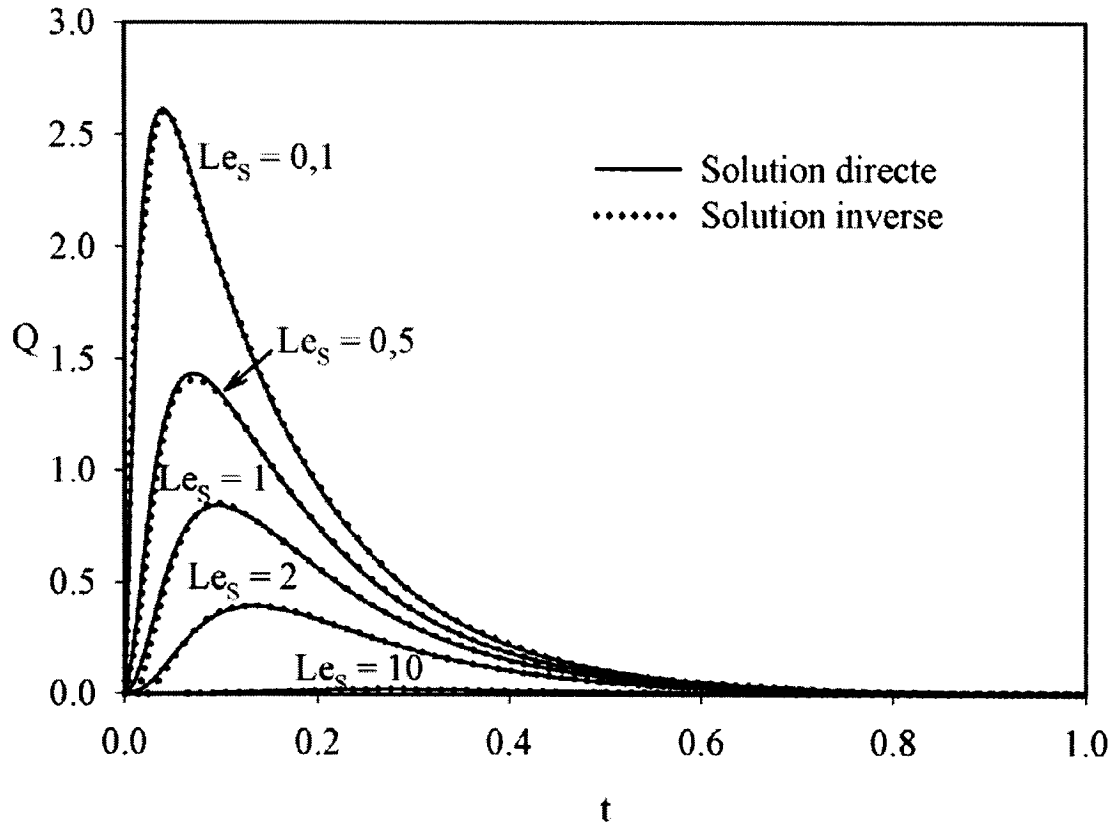


Figure 4.19 : Influence de Le_s , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$

L'influence de Le_s est illustrée à la figure 4.18. Lorsque le nombre de Lewis croît, le temps requis pour la diffusion du substrat augmente, alors que la distribution de biomasse n'est pas affectée. L'influence est également marquée en ce qui a trait à l'intensité de la source de chaleur ainsi que sur la distribution de température, comme on le remarque également à la figure 4.19. Alors que la valeur de Le_s augmente, l'intensité de la source de chaleur diminue. À titre d'exemple, pour $Le_s = 10$, l'intensité maximale de la source de chaleur est de deux ordres de grandeur inférieure à celle qu'on retrouve à $Le_s = 1$. Les solutions inverses reproduisent avec succès les solutions directes, alors que le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence est de 17, 18, 23, 27 et 64 respectivement pour les valeurs de $Le_s = 0,1, 0,5, 1, 2$ et 10.

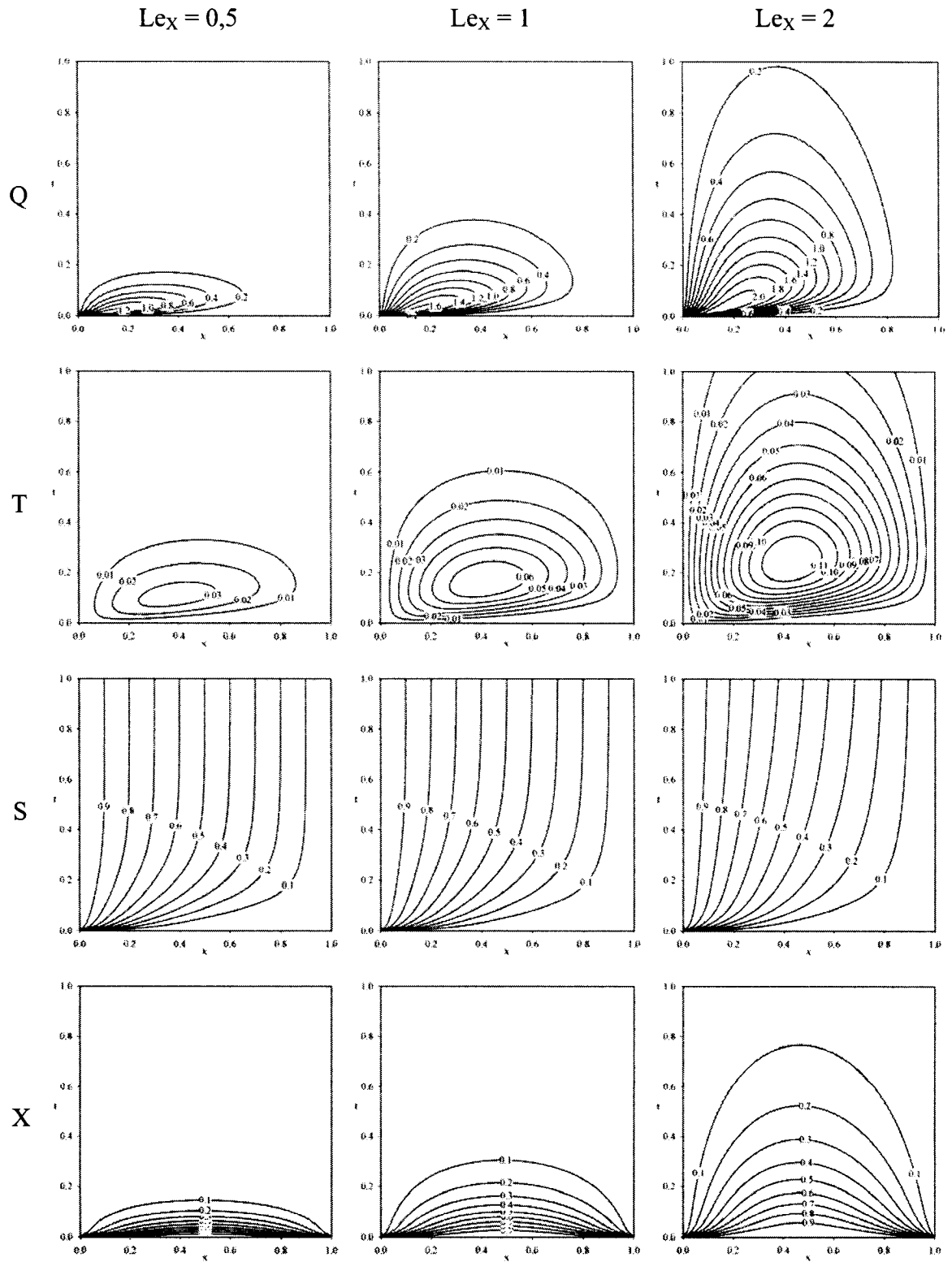


Figure 4.20 : Isolignes de Q , T , S et X en fonction de x et de t , influence de Le_X , $Ra = 0$

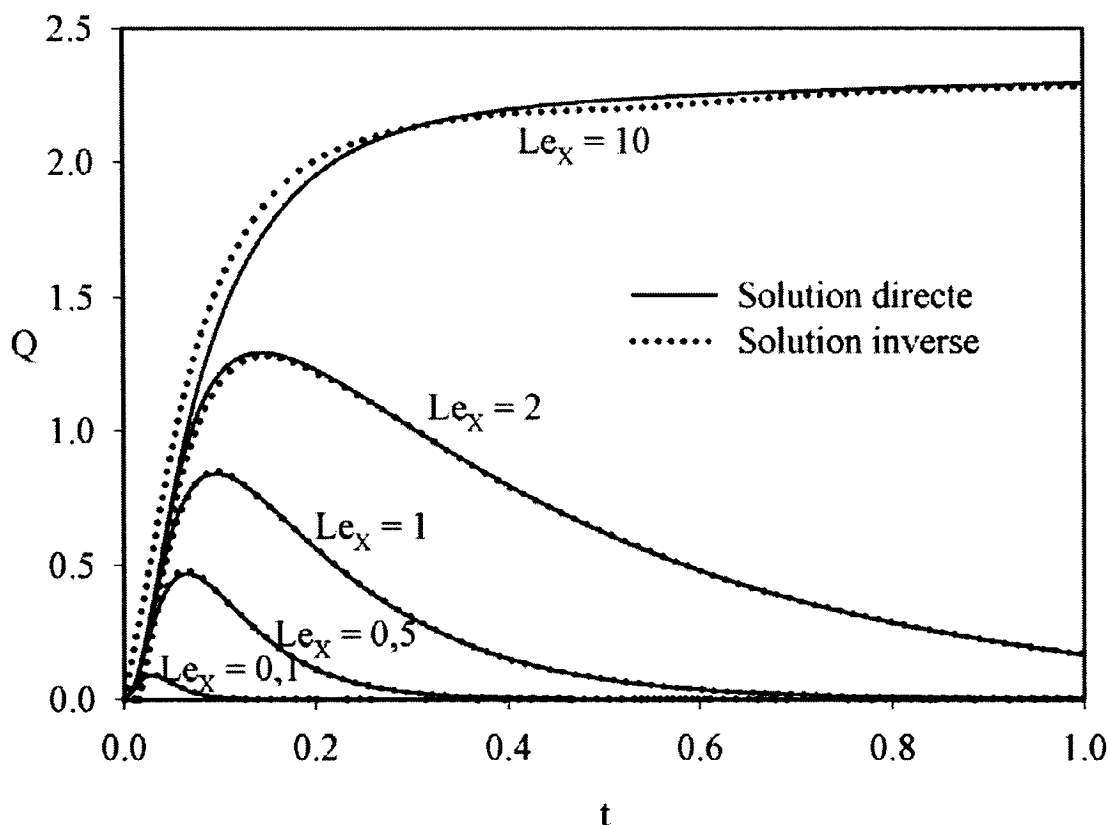


Figure 4.21 : Influence de Le_x , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$

L'influence du nombre de Lewis de la biomasse est encore plus importante. La figure 4.20, sur laquelle les isolignes de Q , T , S et X sont tracées en fonction du temps et de la position pour $Le_x = 0,5$, 1 et 2, démontre que, lorsque Le_x augmente, la biomasse reste présente plus longtemps à l'intérieur de la cavité, ce qui se traduit par une génération de chaleur plus importante. Les concentrations de substrat ne sont pas affectées toutefois. Les solutions inverses et directes pour l'évolution de la source de chaleur à $x = 0,5$ sont présentées à la figure 4.21. La convergence est atteinte après 60, 31, 23, et 18 itérations respectivement pour $Le_x = 0,1$, 0,5, 1 et 2. Pour, $Le_x = 10$, on emploie la méthode modifiée du gradient conjugué et la convergence est atteinte en 58 itérations. La méthode inverse réussit, dans tous les cas, à reproduire la source de chaleur avec succès.

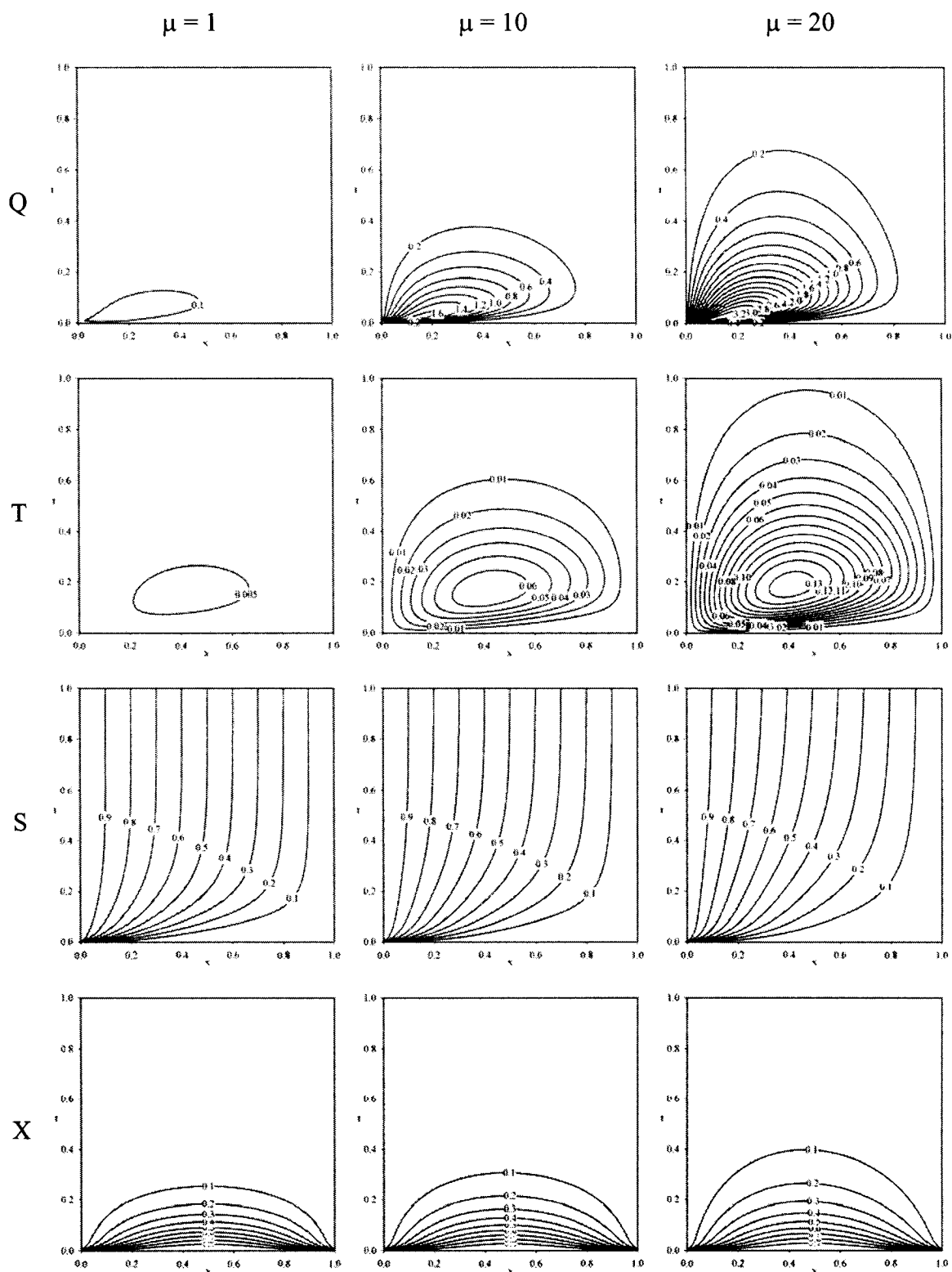


Figure 4.22 : Isolignes de Q , T , S et X en fonction de x et de t , influence de μ , $Ra = 0$

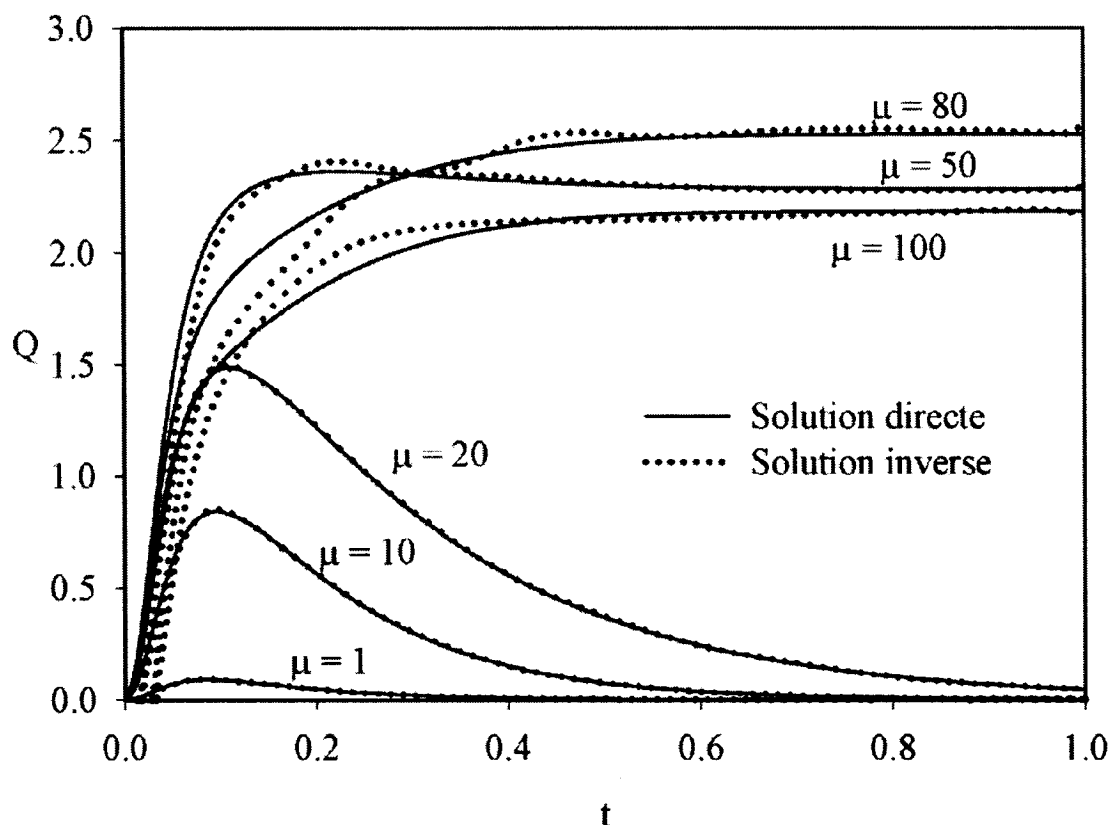


Figure 4.23 : Influence de μ , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$

La figure 4.22 décrit l'évolution des solutions soumises à différents taux spécifiques de croissance. Lorsque ce taux augmente, la génération de biomasse augmente ce qui entraîne évidemment une génération de chaleur plus importante. Néanmoins, la concentration de substrat n'est pas affectée outre mesure. En conséquence, lorsque cette croissance devient plus importante, elle contrebalance les effets des conditions limites et la source de chaleur atteint une valeur permanente qui n'est pas nécessairement d'une plus grande intensité, tel qu'indiqué à la figure 4.23. Les solutions inverses convergent après 23 itérations, pour des valeurs de $\mu = 1, 10$ et 20 . La méthode modifiée, employée pour $\mu = 50, 80$ et 100 , nécessite respectivement 123, 50 et 195 itérations. Malgré une bonne concordance générale, ces solutions sont moins précises.

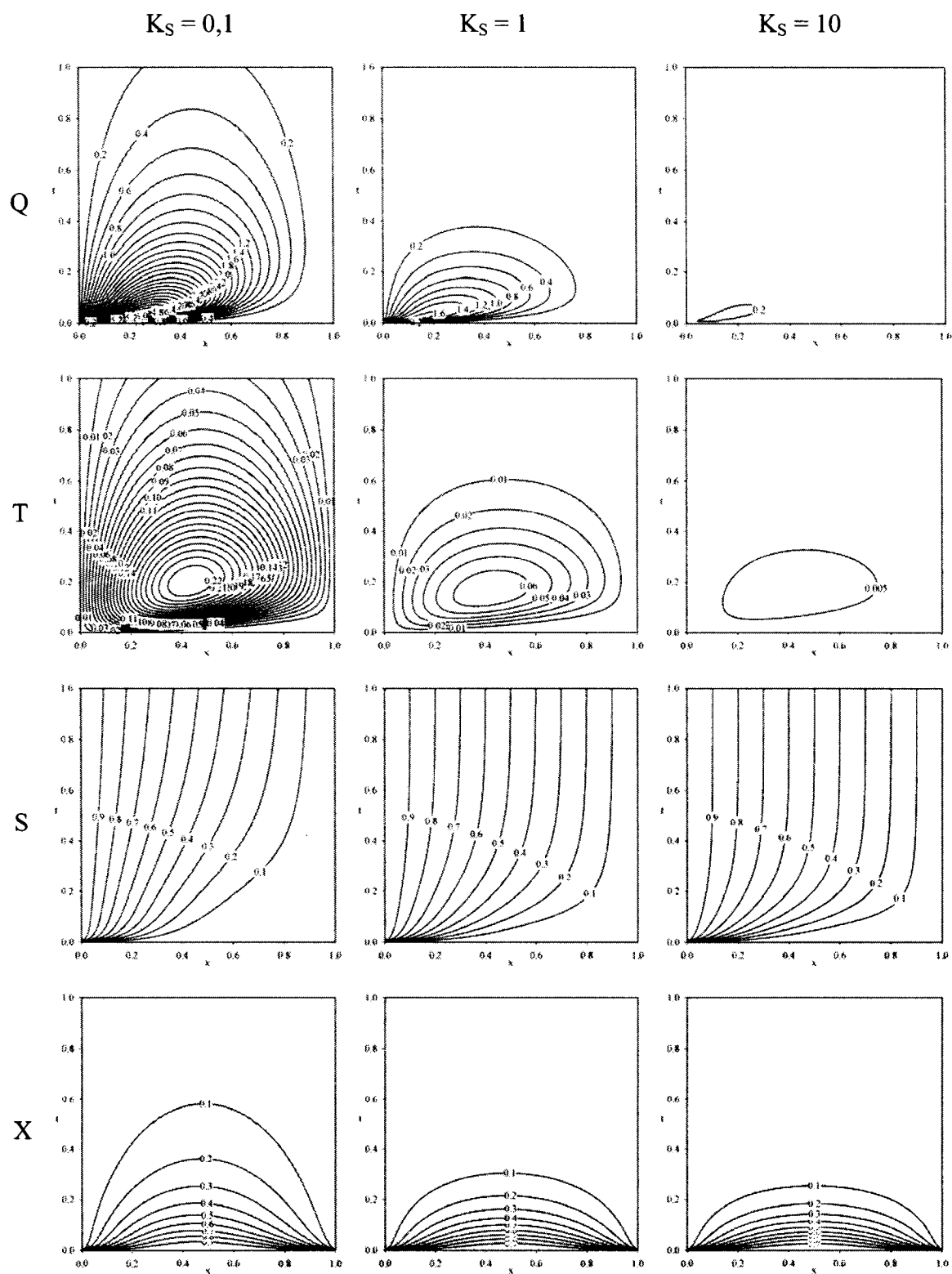


Figure 4.24 : Isolignes de Q , T , S et X en fonction de x et de t , influence de K_S , $Ra = 0$

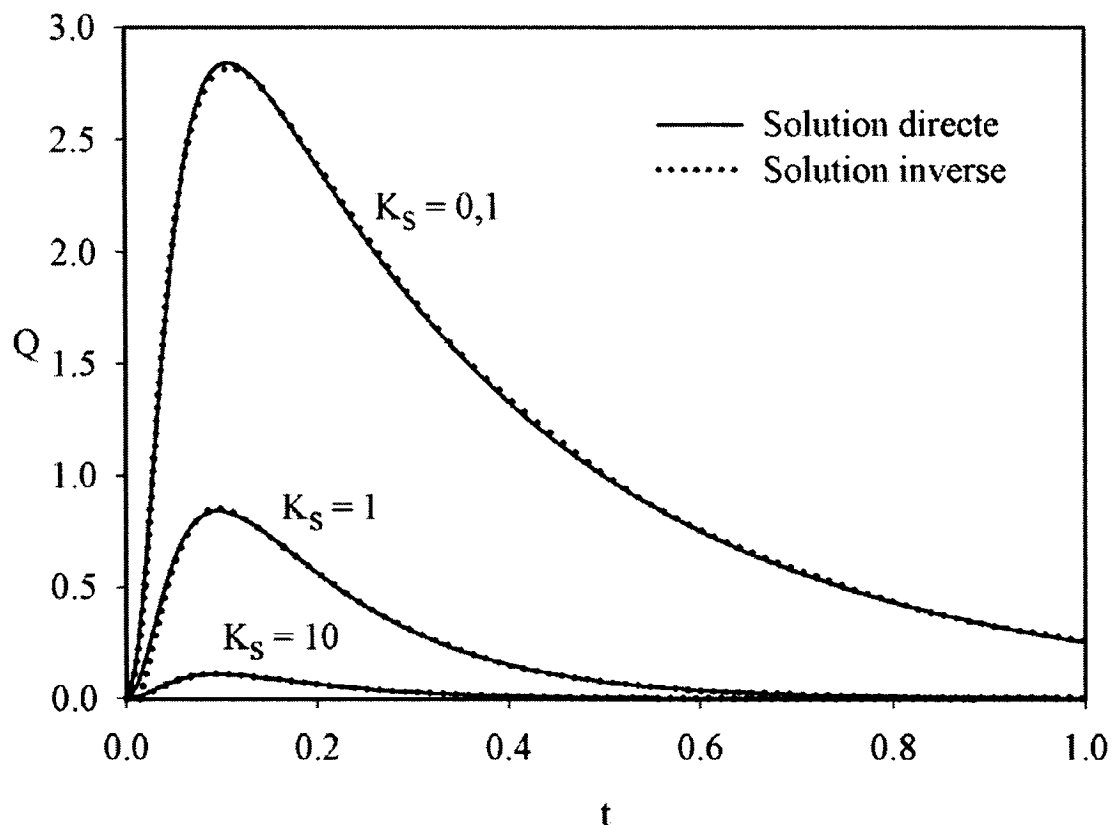


Figure 4.25 : Influence de K_S , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$

De toute évidence, l'influence de la constante de saturation K_S s'avère prépondérante sur toutes les variables représentées à la figure 4.24. Rappelons que, lorsque K_S est significativement inférieur à la concentration de substrat, le modèle est d'ordre zéro. Les concentrations en biomasse deviennent plus importantes et la génération de chaleur s'accroît. La figure 4.25 montre que les profils temporels de la source de chaleur demeurent semblables, malgré l'intensité qui varie. Les solutions inverses convergent en 18, 23 et 25 itérations et sont toutes en accord avec les solutions directes.

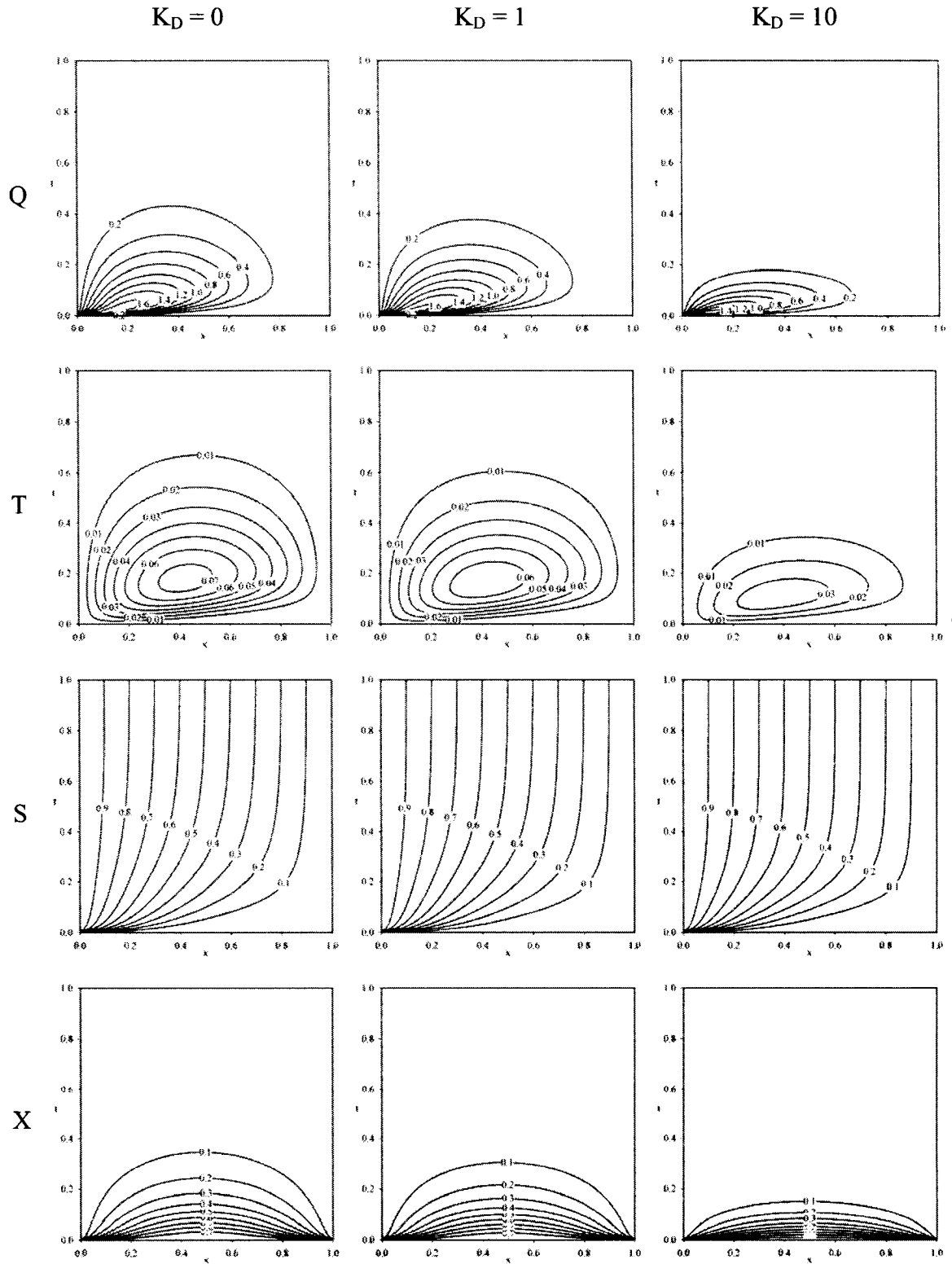


Figure 4.26 : Isolignes de Q , T , S et X en fonction de x et de t , influence de K_D , $Ra = 0$

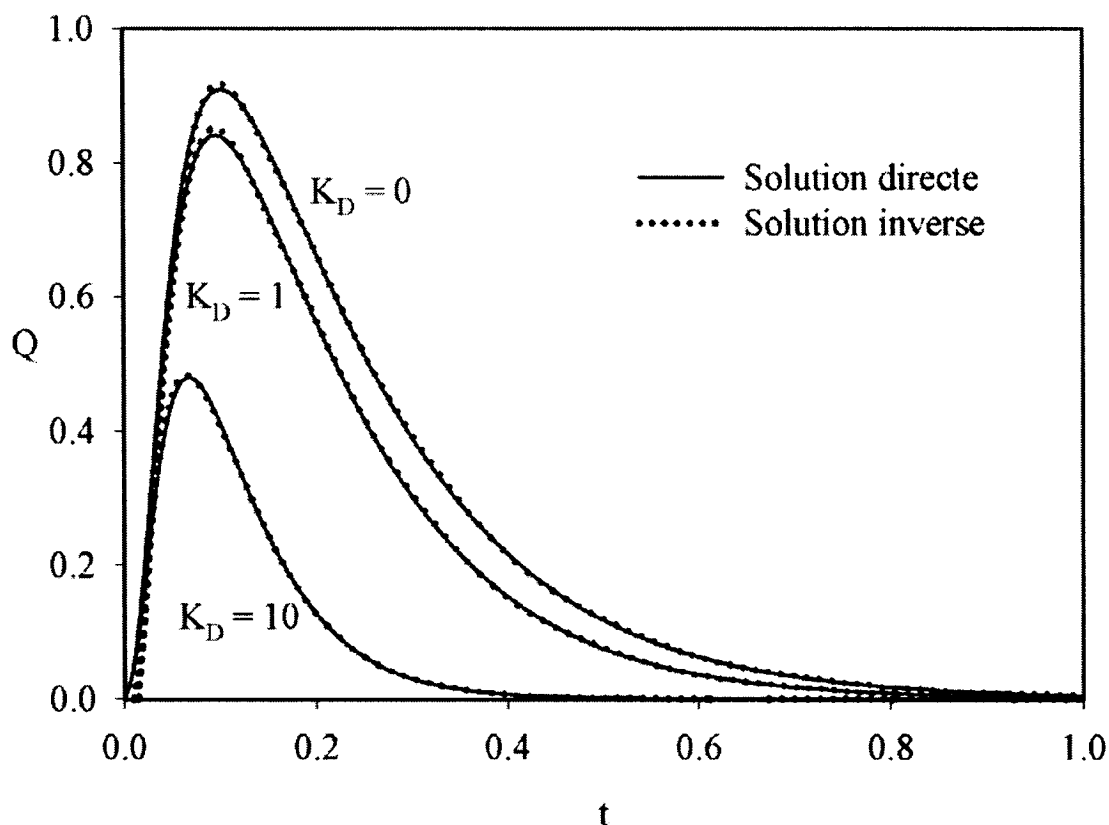


Figure 4.27 : Influence de K_D , Q en fonction de t à $x = 0,5$, $Ra = 0$

Finalement, comme on peut le constater à la figure 4.26, plus le taux de mortalité K_D est élevé, moins la biomasse survit à l'intérieur de la cavité. Par ce fait même, les concentrations de biomasse sont moins élevées et l'activité microbienne est plus faible. La source de chaleur engendrée est donc de moindre intensité. Les profils temporels de Q , à $x = 0,5$, sont présentés à la figure 4.27 avec les solutions inverses correspondantes. Quoi qu'il en soit, les solutions inverses coïncident avec les solutions directes, et ce, après 22, 23 et 33 itérations respectivement pour $K_D = 0$, 1 et 10.

On étudie maintenant les solutions lorsque du bruit est introduit dans les données transmises par les senseurs de température. La solution inverse pour la source de chaleur en fonction du temps est présentée à la figure 4.28 à $x = 0,5$. La racine carrée de l'erreur normalisée $(E/E_0)^{1/2}$ correspondante est tracée en fonction du nombre d'itérations à la figure 4.29. Puisque le champ de température est indépendant de la position verticale à $Ra = 0$, la position de la rangée de senseurs n'est pas pertinente et n'affecte pas la convergence. Tel que mentionné précédemment, la solution inverse, sans bruit, converge en 23 itérations pour les paramètres de référence du tableau 4.1.

Lorsque le bruit est présent, la solution obtenue après seulement 9 itérations s'avère plus précise que celle obtenue après 16 itérations (lorsque le critère d'arrêt $(E/E_0)^{1/2} = 4\%$ est satisfait). Cette différence illustre, encore une fois, le pouvoir de régularisation de la méthode du gradient conjugué. L'optimisation est réalisée en arrêtant la simulation quelques itérations avant que le critère d'arrêt ne soit atteint afin d'éviter les effets des composantes de hautes fréquences, essentiellement attribuables au bruit.

Les figures 4.30 et 4.31 décrivent les solutions inverses, ainsi que l'évolution de l'erreur, pour le même problème en plaçant toutefois des senseurs à tous les nœuds du maillage. La solution inverse, sans bruit, obtenue de cette façon concorde avec celle qu'on trouve en n'utilisant qu'une seule rangée de senseurs. La convergence nécessite également 23 itérations. Toutefois, avec du bruit, la convergence ralentit grandement et le nombre d'itérations, pour obtenir un niveau d'erreur équivalent, est presque doublé. Néanmoins, les solutions inverses ainsi obtenues semblent plus précises.

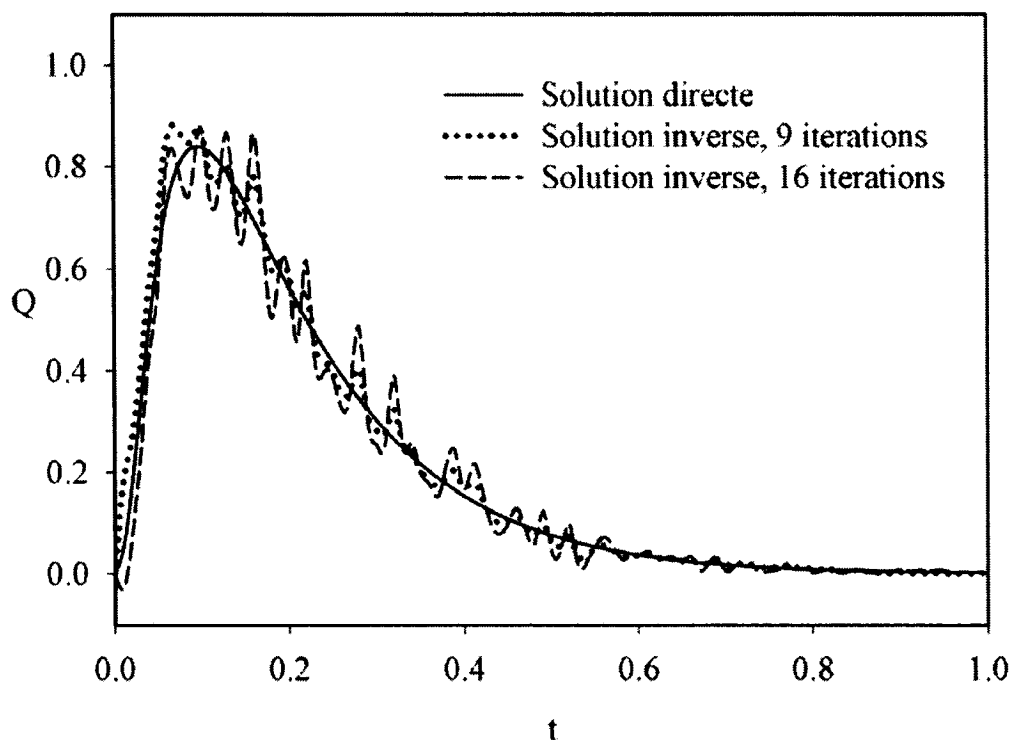


Figure 4.28 : Évolution de Q en fonction de t à $x = 0,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$,
rangée de senseurs à $y = 0,5$, $Ra = 0$

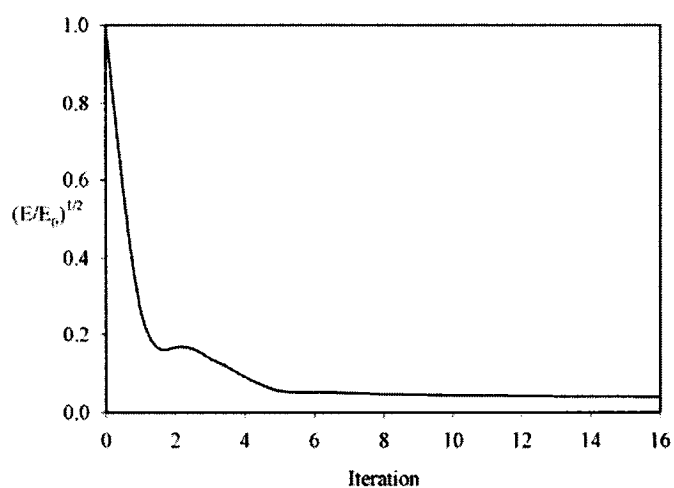


Figure 4.29 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, avec bruit sur les
données $\sigma = 0,04$, rangée de senseurs à $y = 0,5$, $Ra = 0$

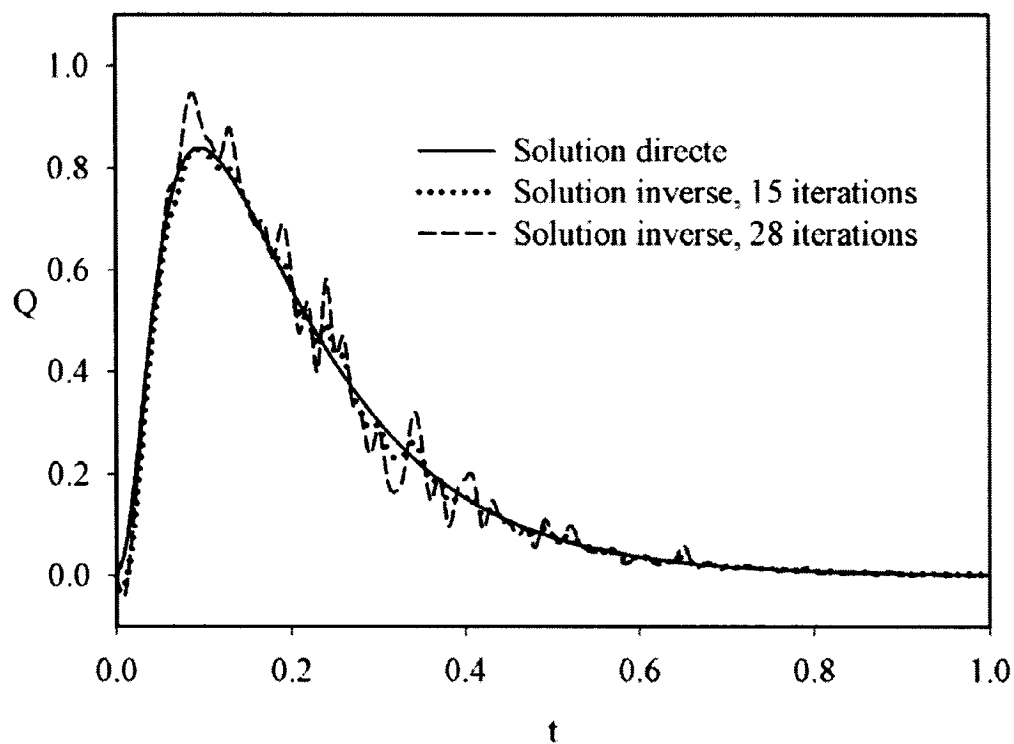


Figure 4.30 : Évolution de Q en fonction de t à $x = 0,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, senseurs en tous points, $Ra = 0$

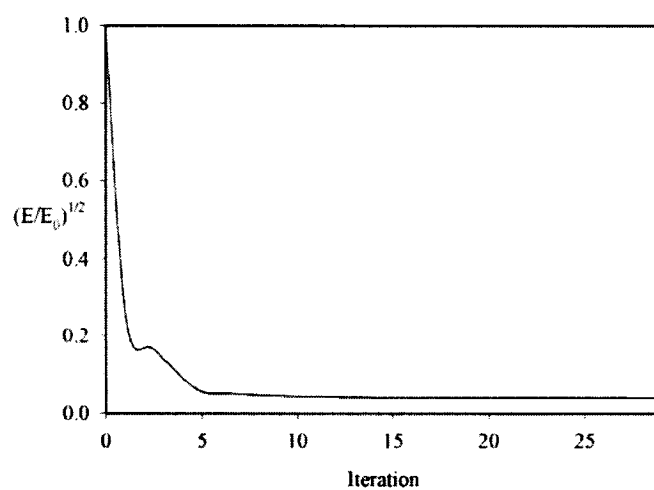


Figure 4.31 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, senseurs en tous points, $Ra = 0$

4.2.3 Régime de convection thermique

On obtient de la convection naturelle engendrée uniquement sous l'effet des gradients de température en posant $N_S = N_X = 0$, tandis que le nombre de Rayleigh varie. D'un régime unidimensionnel strictement basé sur la conduction et la diffusion à $Ra = 0$, le problème passe progressivement à l'état bidimensionnel lorsque le nombre de Rayleigh augmente à 10 , 10^2 et 10^3 . La figure 4.32 compare les solutions directes et inverses pour la source de chaleur au centre de la cavité obtenues d'une part avec des senseurs placés à tous les nœuds du maillage, tel que requis dans le cas général, et d'autre part avec une seule rangée de senseurs positionnée à $y = 0,5$. À $Ra = 10$, les deux approches convergent exactement vers la solution directe, toutefois, 30 itérations sont nécessaires pour une seule rangée de senseurs alors que 23 itérations sont suffisantes lorsque les senseurs sont placés à tous les nœuds. Pour $Ra = 10^2$, les mêmes constats s'appliquent alors que 25 itérations sont requises pour les senseurs placés à tous les nœuds. Cependant, après 45 itérations, pour une seule rangée de senseurs, la racine carrée de l'erreur normalisée stagne à 3,6%. Par ailleurs, quand $Ra = 10^3$, il devient évident que la solution inverse, obtenue à partir d'une seule rangée de senseurs après 63 itérations alors que l'erreur se stabilise 9,6%, ne convient plus. Néanmoins, la solution inverse pour des senseurs placés à tous les nœuds, convergeant après 36 itérations, reproduit adéquatement la solution directe.

Les courbes de niveau de la source de chaleur à $t = 0,1$ sont illustrées à la figure 4.33. On peut constater que la source est pratiquement indépendante de la position verticale pour des nombres de Rayleigh de l'ordre de la dizaine, tout comme pour $Ra = 0$. Toutefois, lorsque la convection devient plus forte, à $Ra = 10^2$, une légère dépendance en y apparaît. Par contre, lorsque $Ra = 10^3$, la source de chaleur est clairement bidimensionnelle. Afin d'apprécier cette influence de Ra , les isothermes, les isoconcentrations du substrat, de la biomasse et les lignes de courant à $Ra = 10$, 10^2 et 10^3 sont présentées à la figure 4.34. Les lignes de courant correspondent à deux cellules de convection circulant en sens opposés et d'intensités différentes.

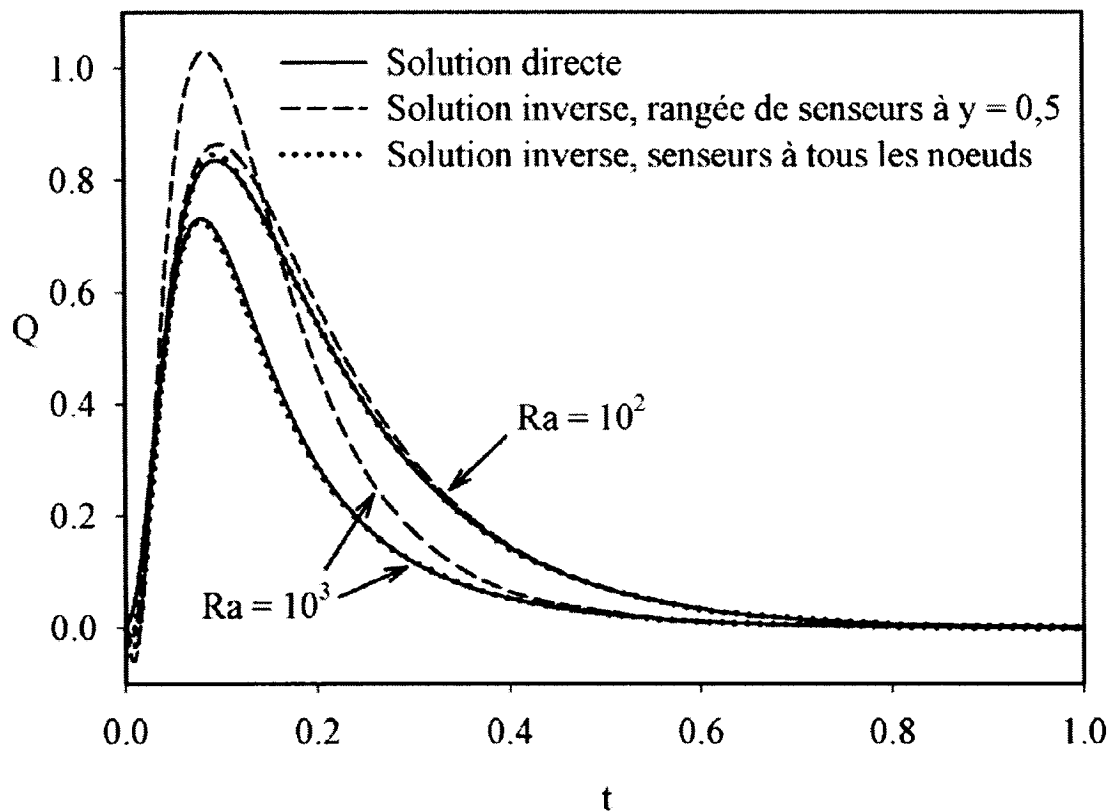


Figure 4.32 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $Ra = 10^2, 10^3$

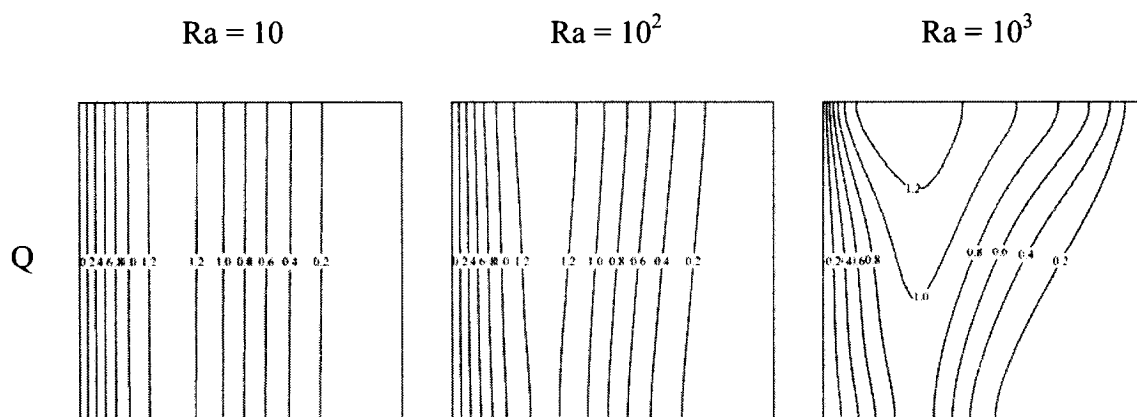


Figure 4.33 : Isolignes de Q à $t = 0.1$, $Ra = 10, 10^2, 10^3$

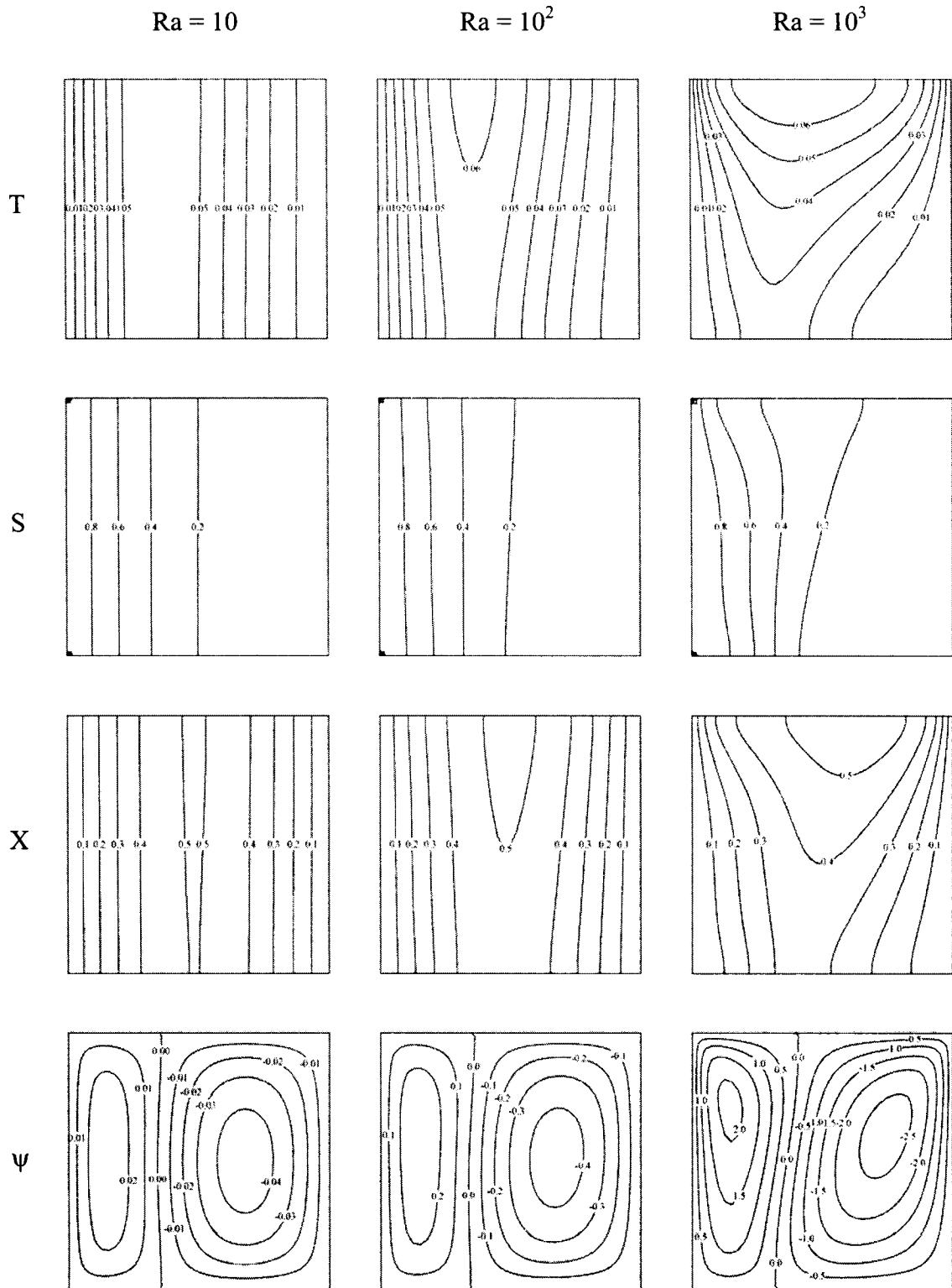


Figure 4.34 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à $t = 0,1$, $Ra = 10, 10^2, 10^3$

La figure 4.35 démontre qu'il est possible de déterminer la source de chaleur même à un nombre de Rayleigh aussi élevé que 10^5 . La solution inverse obtenue après 133 itérations est en accord avec celle du problème direct. À de telles valeurs de Ra , l'évolution de la source de chaleur est beaucoup plus rapide, alors que son intensité diminue. Par conséquent, les valeurs des températures sont de plus petite amplitude. C'est ainsi qu'avec des nombres de Rayleigh supérieurs, l'amplitude des variations de température devient si petite que la méthode du gradient conjugué perd de sa sensibilité. La convergence est alors plus laborieuse et devient finalement impossible pour des nombres de Rayleigh plus élevés.

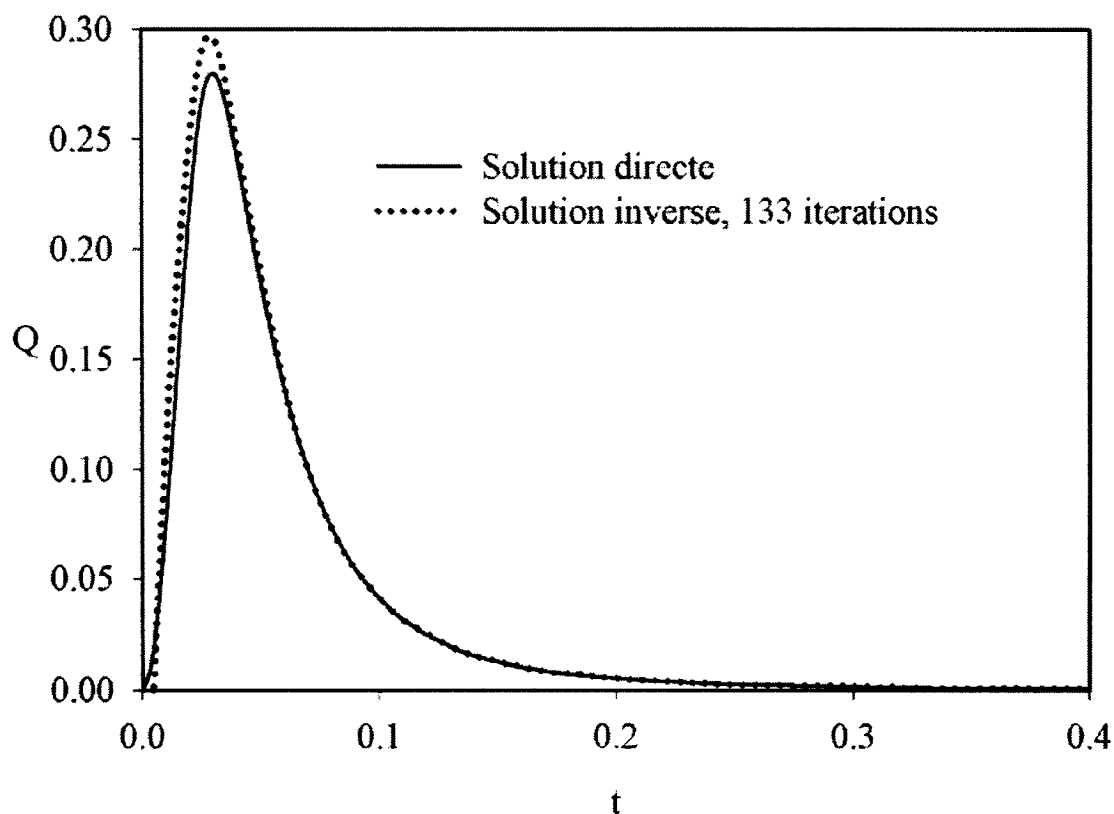


Figure 4.35 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $Ra = 10^5$

4.2.4 Régime de convection thermique et solutale

L'écoulement engendré par la double diffusion est radicalement différent de celui qui est généré par la convection thermique uniquement. En effet, tel qu'on peut le constater à la figure 4.36, sur laquelle sont représentées les variables T , S , X et ψ lorsque la source de chaleur est près de sa valeur maximale ($t_{MAX} = 0,05$ pour $N_S = 0$ et $0,03$ pour $N_S = -0,1$ et $0,1$), même pour de petites valeurs de N_S à $Ra = 10^4$ et avec $N_X = 0$, l'écoulement ne contient plus qu'une seule cellule de convection. L'intensité de la convection devient alors très forte et des couches limites apparaissent près des parois verticales. La figure 4.37 montre la distribution de la source de chaleur dans la cavité au même instant. La figure 4.38 permet de distinguer son évolution dans le temps au centre. Les solutions inverses correspondantes y sont aussi représentées et paraissent satisfaisantes dans tous les cas. Elles convergent respectivement en 28, 59 et 29 itérations pour $N_S = -0,1$, 0 et $0,1$.

L'influence de N_X sur la physique du problème est également très importante. Un rapport négatif génère trois cellules de convection, comme on peut le constater à la figure 4.39. Les variables T , S , X et ψ y sont présentées, encore une fois, au temps correspondant à l'intensité maximale de la source de chaleur ($t_{MAX} = 0,05$ pour $N_X = 0$ et $0,03$ pour $N_X = -0,05$ et $0,05$). Mentionnons que le champ de température à $Ra = 10^4$ est très faible, ce qui ne permet pas l'obtention d'une solution inverse lorsque le rapport N_X est plus considérable. La distribution de la source de chaleur au même moment est présentée à la figure 4.40. On remarque une variation importante de la distribution de celle-ci. Le profil de la source de chaleur en fonction du temps au centre de la cavité est ensuite illustré à la figure 4.41. Les solutions inverses sont nettement plus difficiles à obtenir alors qu'elles convergent en 129, 59 et 196 itérations respectivement pour $N_X = -0,05$, 0 et $0,05$. Toutefois, elles concordent parfaitement avec leurs homologues directes, sauf dans le cas de $N_X = -0,05$ où une légère divergence apparaît.



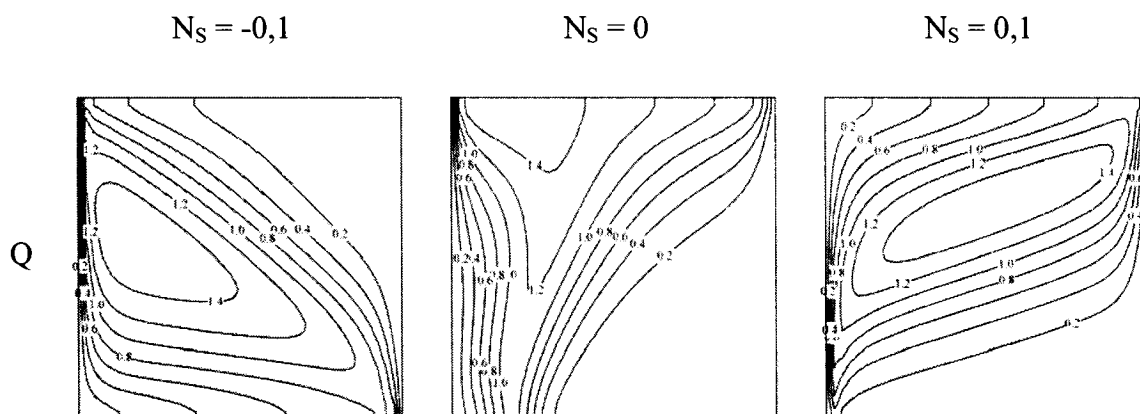


Figure 4.37 : Isolignes de Q à t_{MAX} , $N_X = 0$, $N_S = -0,1, 0, 0,1$, $Ra = 10^4$

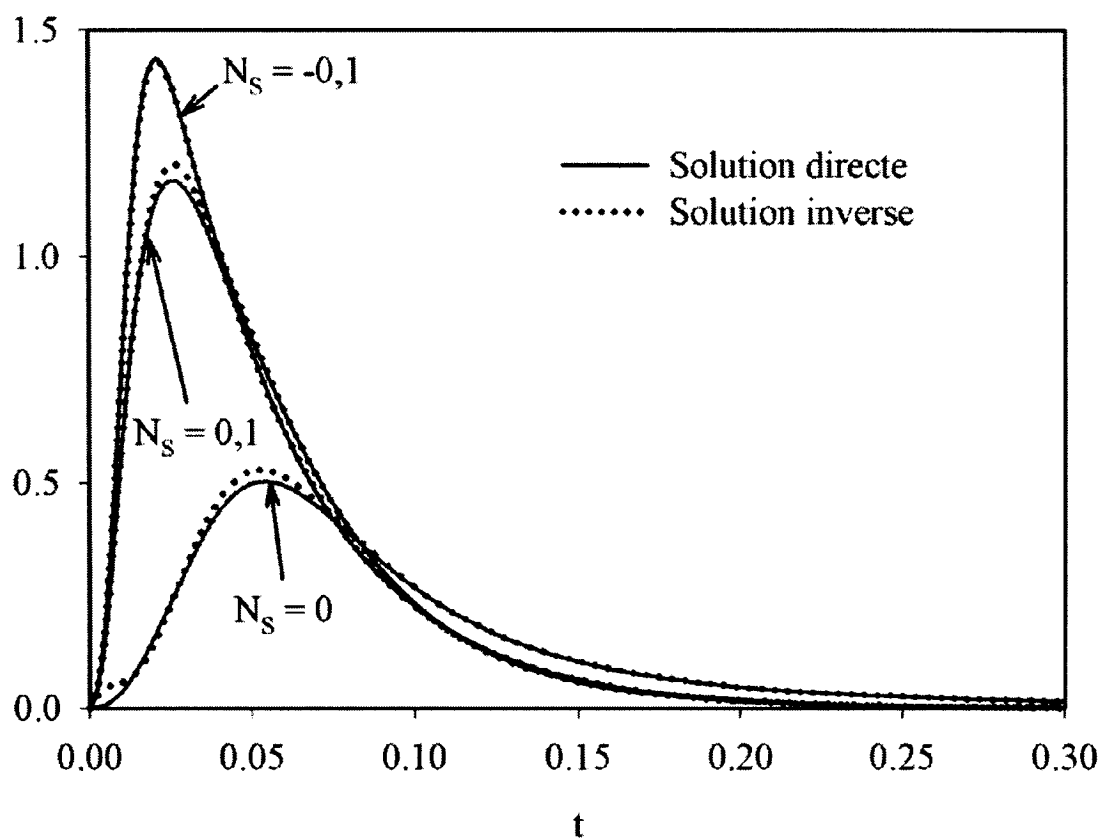


Figure 4.38 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $N_X = 0$,
 $N_S = -0,1, 0, 0,1$, $Ra = 10^4$

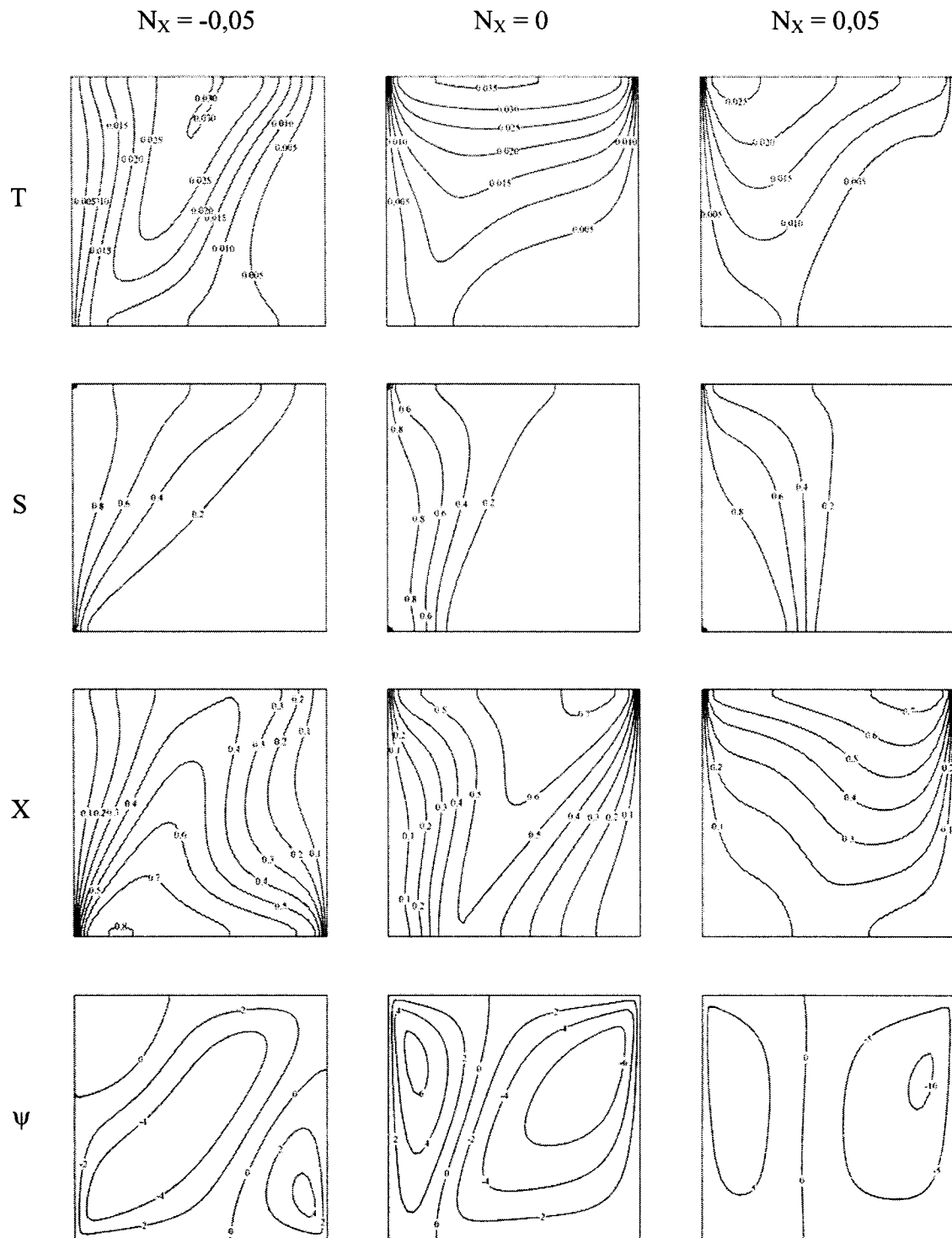


Figure 4.39 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à t_{MAX} , $N_S = 0$, $N_X = -0,05, 0, 0,05$,
 $Ra = 10^4$

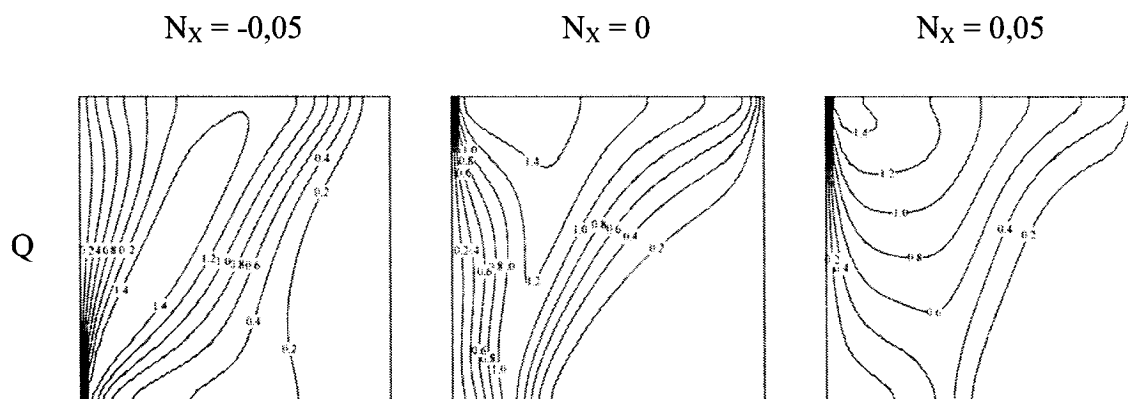


Figure 4.40 : Isolignes de Q à t_{MAX} , $N_S = 0$, $N_X = -0,05, 0, 0,05$, $Ra = 10^4$

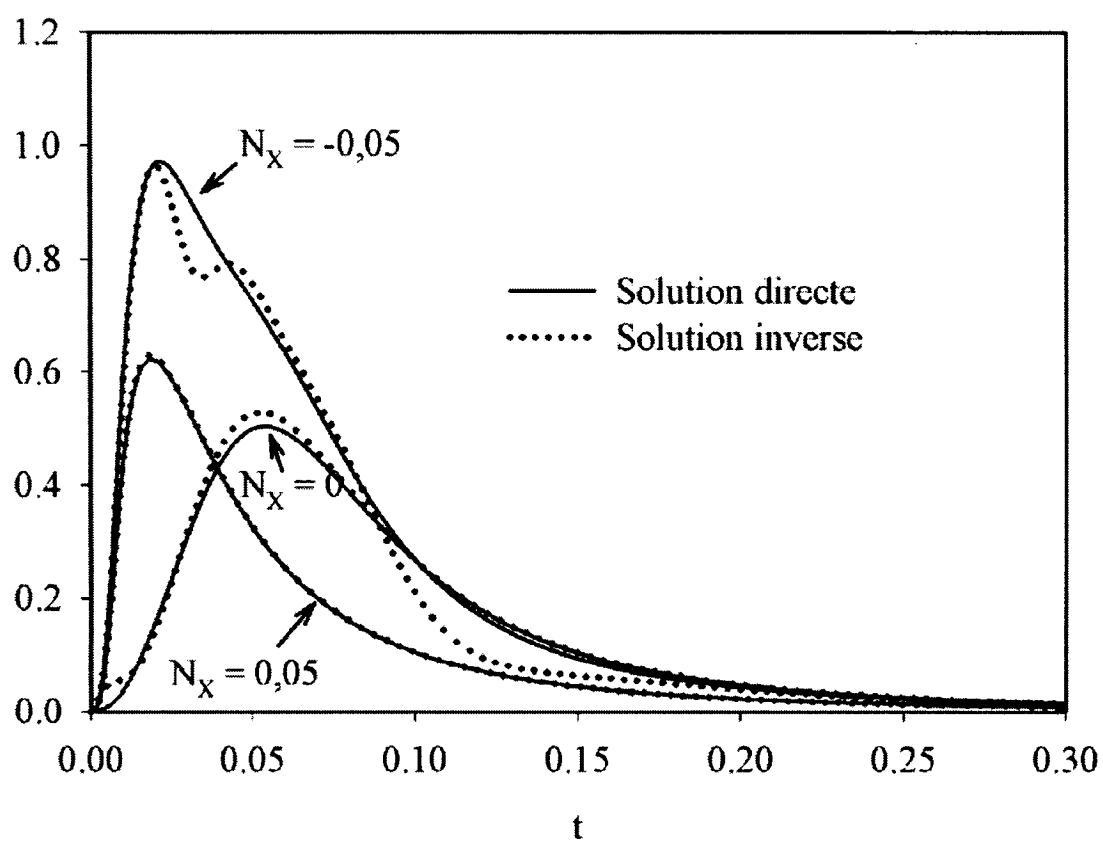


Figure 4.41 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $N_S = 0$,
 $N_X = -0,05, 0, 0,05$, $Ra = 10^4$

L'effet du bruit sur les données fournies par les senseurs de température est également étudié pour le cas d'une convection thermique et solutale aux figures 4.42 et 4.44. L'évolution de la source de chaleur au centre de la cavité y est présentée pour $N_S = 0,1$ et $-0,1$ avec $Ra = 10^4$ lorsqu'on introduit un bruit avec une distribution de probabilité uniforme d'un écart type de 4%. L'évolution de la racine carrée de l'erreur correspondant à ces cas est également présentée en fonction du nombre d'itérations aux figures 4.43 et 4.45. Quand $N_S = 0,1$, la solution inverse obtenue après 13 itérations semble meilleure que celle obtenue après 22 itérations lorsque le critère d'arrêt est satisfait. Cette conclusion s'applique également au cas où $N_S = -0,1$, alors que la solution après 13 itérations est plus satisfaisante que celle après 23 itérations. Ces résultats démontrent que les propriétés de régularisation de l'algorithme du gradient conjugué permettent également l'optimisation des solutions inverses lorsque les convections thermique et solutale sont présentes.

Finalement, lorsque la convection est générée simultanément par des gradients de température, de concentration de substrat et de concentration de biomasse, la solution diffère encore. Les isothermes, les courbes de niveau de concentration du substrat et de la biomasse ainsi que les lignes de courant, pour les problèmes direct et inverse, sont illustrées à la figure 4.46 à $t = 0,04$ et pour $Ra = 10^3$, $N_S = 0,5$ et $N_X = 0,5$. Une cellule de convection très prononcée, circulant en sens horaire, apparaît, tandis que des couches limites de concentration pour le substrat et la biomasse se développent à proximité des parois verticales. De surcroît, les isothermes se concentrent dans le coin supérieur droit de la cavité et sont d'intensité relativement faible. La source de chaleur, au même instant, est présentée à la figure 4.47. On constate que la méthode est également efficace pour déterminer la source de chaleur dans ce cas. Du fait des températures plus faibles et de la complexité accrue du problème, la solution inverse pour la source de chaleur converge beaucoup plus lentement. Plus précisément, tel que le démontre la figure 4.48, la solution inverse converge en 109 itérations. Elle reproduit néanmoins exactement la solution directe.

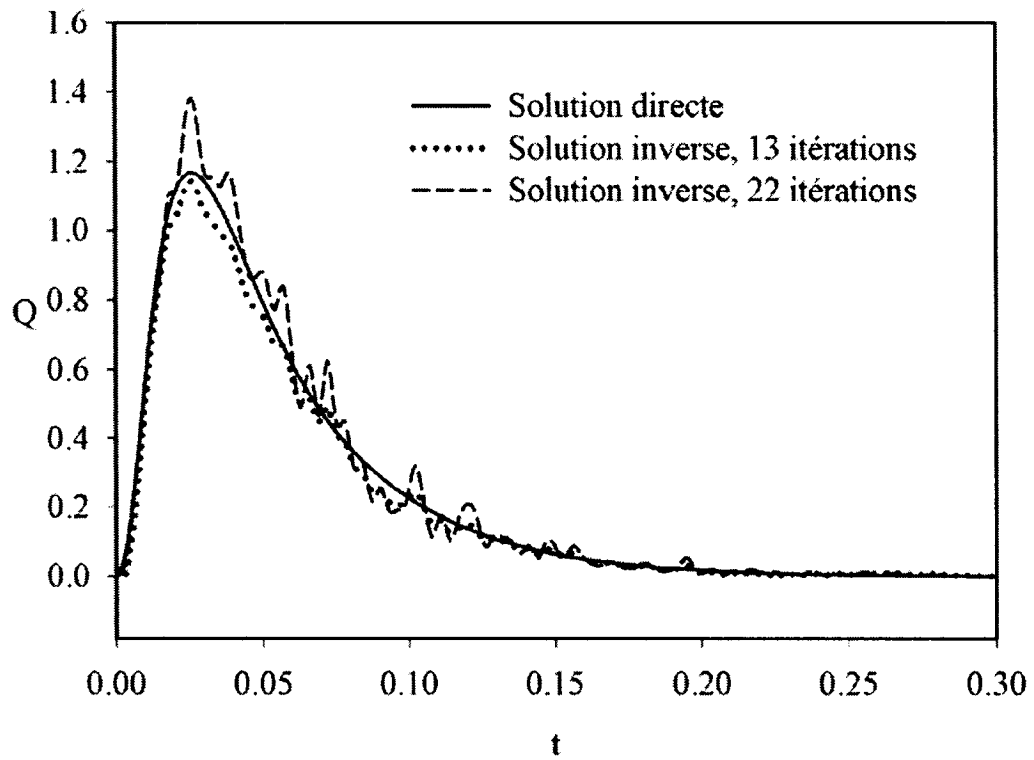


Figure 4.42 : Évolution de Q en fonction de t au centre, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, $N_S = 0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$

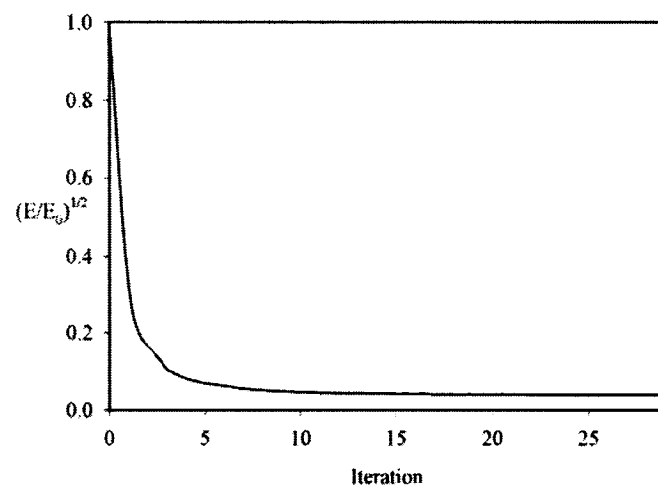


Figure 4.43 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, bruit sur les données $\sigma = 0,04$, $N_S = 0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$

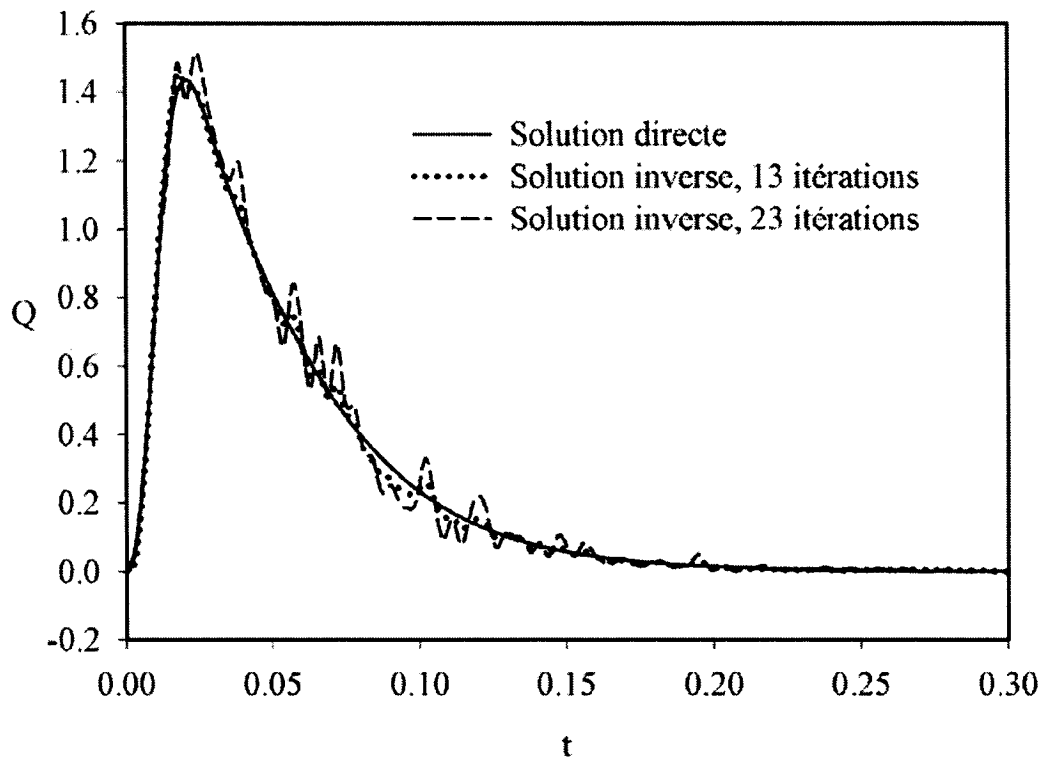


Figure 4.44 : Évolution de Q en fonction de t au centre, bruit sur les données $\sigma = 0,04$,
 $N_S = -0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$

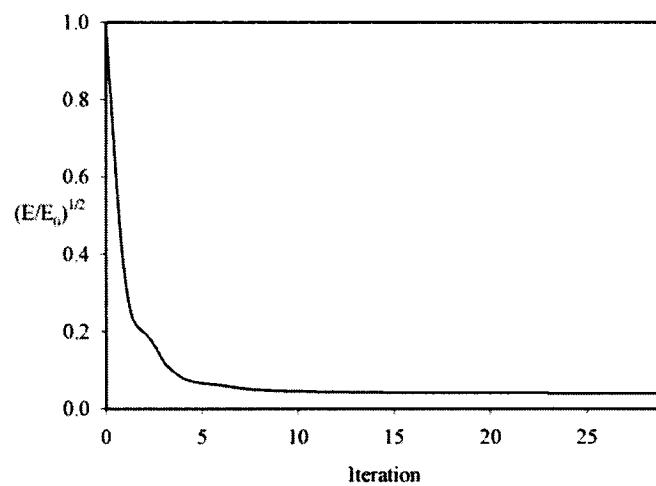


Figure 4.45 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ en fonction du nombre d'itérations, bruit sur les
données $\sigma = 0,04$, $N_S = -0,1$, $N_X = 0$, $Ra = 10^4$

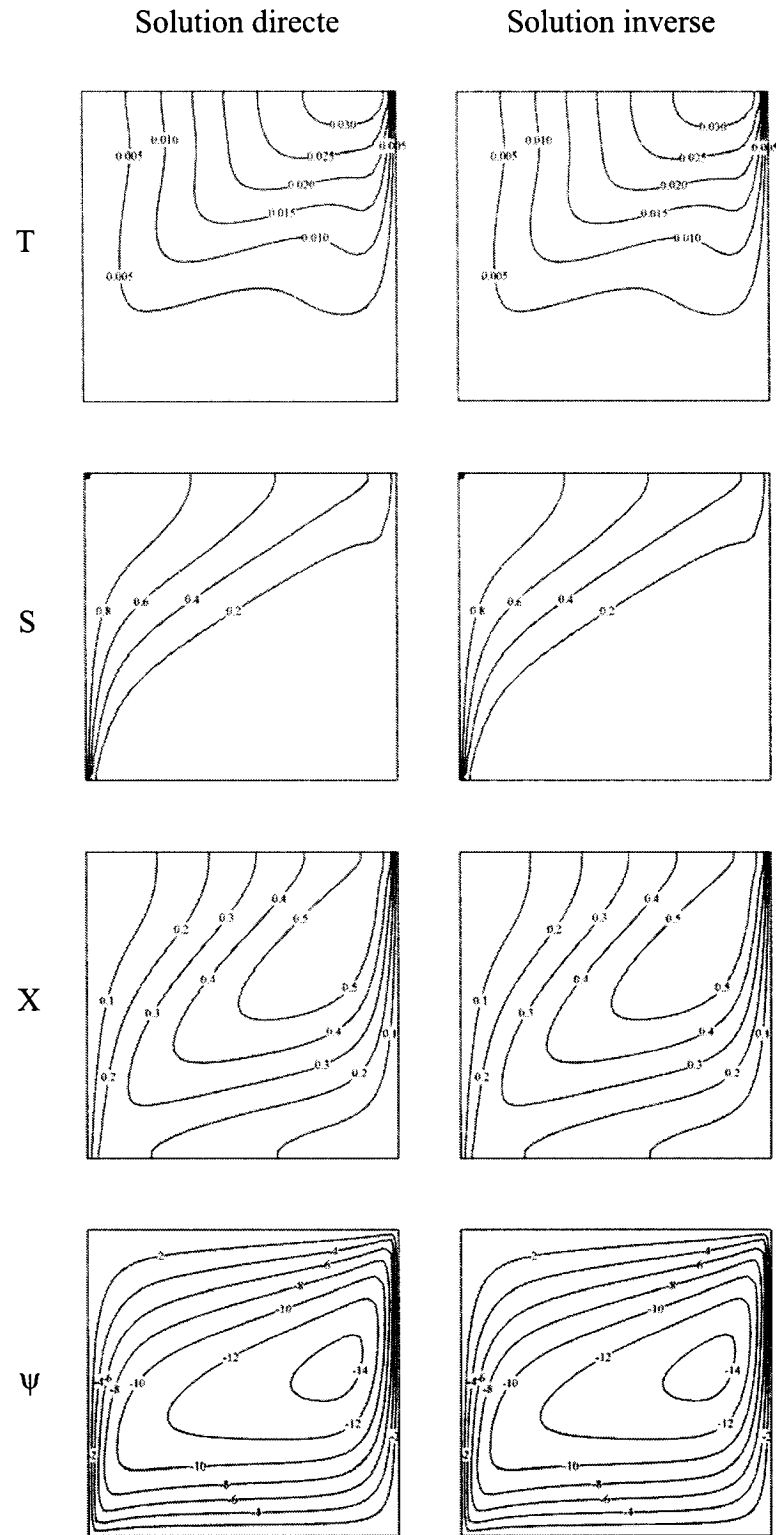


Figure 4.46 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à $t = 0,04$, $N_S = 0,5$, $N_X = 0,5$, $Ra = 10^3$

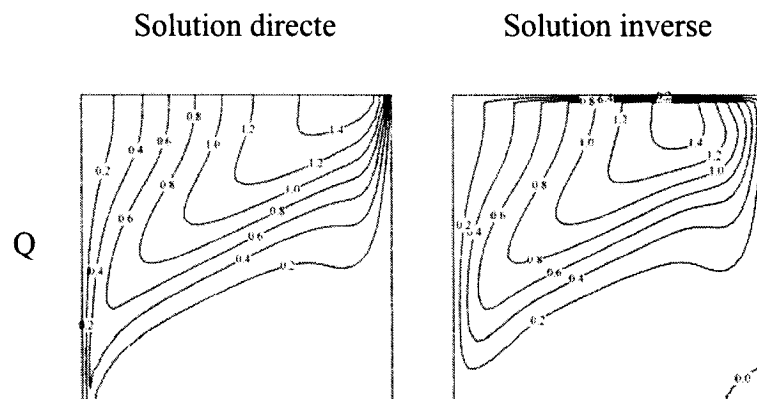


Figure 4.47 : Isolignes de Q à $t = 0,04$, $N_S = 0,5$, $N_X = 0,5$, $Ra = 10^3$

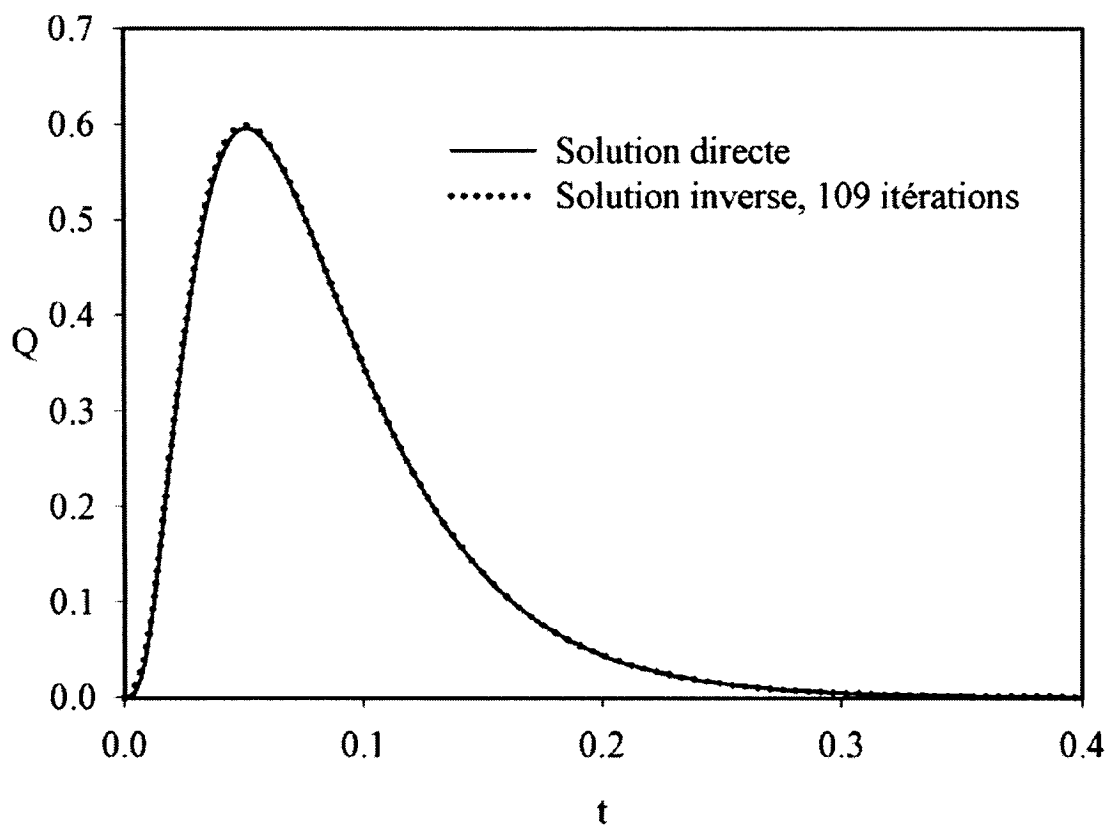


Figure 4.48 : Évolution de Q en fonction du temps au centre de la cavité, $N_S = 0,5$,
 $N_X = 0,5$, $Ra = 10^3$

4.3 Conclusion

Dans la première partie de ce chapitre, l'évaluation du problème inverse de convection naturelle en milieu poreux avec une seule équation de diffusion de masse pour une source de chaleur inconnue, a été présentée pour la méthode itérative du gradient conjugué avec les équations adjointes. Cette formulation a été validée pour des modèles simples de source de chaleur et comparée avec une solution analytique. On démontre que cette méthode permet de prédire adéquatement, pour différents nombres de Rayleigh et de Lewis, une source de chaleur $Q(x,t)$ qui est égale à la concentration moyenne verticale, à partir des températures mesurées par des senseurs placés à l'intérieur de la matrice poreuse. Le flux de concentration de la paroi supérieure étant soit de forme sinusoïdale, soit de forme triangulaire. De plus, un modèle non linéaire de la source de chaleur a été testé.

D'autre part, dans la seconde partie de ce chapitre, un cas plus complexe a été abordé, faisant intervenir tous les paramètres, dans lequel le modèle de Monod, décrit la consommation de substrat par de la biomasse et générant ainsi de la chaleur. La performance, de même que les limites de la méthode inverse retenue, ont été étudiées. Sans information préalable, la méthode inverse permet de prédire adéquatement la source de chaleur $Q(r,t)$, proportionnelle à la consommation de substrat, et ce, jusqu'à des nombres de Rayleigh de l'ordre de 10^5 . Les solutions, tant directes qu'inverses, sont extrêmement sensibles aux variations, mêmes faibles, des rapports de forces volumiques. De ce fait, la méthode permet d'obtenir d'excellentes solutions jusqu'à $Ra = 10^4$, lorsque $N_S = 0,1$ et $N_X = 0,05$, tandis que, lorsque l'écoulement est induit par les gradients de température, de concentration de substrat et de biomasse simultanément, les solutions satisfaisantes convergent plus difficilement, même à $Ra = 10^3$ pour $N_S = N_X = 0,5$.

Lorsque le nombre de Ra est inférieur à 10^3 , la source de chaleur est quasi-unidimensionnelle, une seule rangée de senseurs suffit alors pour obtenir une solution inverse qui la prédit adéquatement. Cependant, pour des niveaux de convection plus élevés, la source de chaleur passe à l'état bidimensionnel et des senseurs à tous les nœuds sont nécessaires afin d'assurer la convergence.

Dans tous les cas, lorsque du bruit est introduit dans les données fournies par les senseurs de température, la stabilisation des solutions inverses peut être réalisée en arrêtant la simulation quelques itérations avant que le critère d'arrêt ne soit respecté. En conséquence, les plus hautes fréquences, essentiellement attribuables au bruit, ne sont pas reproduites dans la solution inverse.

La méthode, ainsi validée, permettra de traiter des problèmes plus réalistes qui seront examinés au prochain chapitre.

Chapitre V : Résultats pour la détermination d'une source de chaleur biochimique

La méthode inverse ayant été validée numériquement au chapitre IV, on étudie, dans le présent chapitre, un problème avec un modèle biochimique et des conditions limites comportant des valeurs de paramètres plus réalistes. La méthode du gradient conjugué est mise à l'épreuve pour déterminer l'intensité et la distribution de la source de chaleur dans ces conditions.

5.1 Définition du problème

Dans le cas d'un réacteur biologique fermé, dont les parois sont maintenues à une température constante $T = 0$, la biomasse et le substrat sont confinés à l'intérieur d'une cavité. Les conditions limites peuvent alors s'exprimer telles qu'illustrées à la figure 5.1. On considère également que les concentrations initiales de substrat et de biomasse, $S_0 = 1$ et $X_0 = 2,5 \times 10^{-2}$, sont uniformément distribuées dans la matrice poreuse. Initialement le fluide est au repos et la fonction de courant est nulle $\psi = 0$. La température du réacteur est uniforme et égale à celle des parois, c'est-à-dire $T_0 = 0$.

En considérant que les effets de dilatation du fluide sous l'effet des concentrations de substrat et de biomasse sont négligeables par rapport à la dilatation provoquée par la température, on pose $N_S = N_X = 0$. On justifie cette hypothèse par le fait que les études expérimentales dans le domaine ne considèrent jamais ce phénomène, la dilatation thermique étant généralement de plusieurs ordres de grandeurs supérieures à la dilatation solutale. Les équations de transport de masse sont dès lors découplées en ce qui a trait aux problèmes adjoint et de sensibilité. Il suffit alors de résoudre les équations de mouvement et d'énergie pour ces problèmes. Cette simplification est rendue possible

par le fait que la source de chaleur $Q(S, X)$, proportionnelle au taux de consommation du substrat, peut être déduite exclusivement en fonction de la position et du temps une fois le champ de température connu. Dans le problème direct, on doit résoudre les équations de transport de X et S afin d'obtenir le taux de consommation du substrat et conséquemment la génération de chaleur. Toutefois, pour le problème inverse, puisque la distribution de température $T(\mathbf{r}, t)$ est disponible, soit à partir des résultats expérimentaux, soit à partir des simulations numériques, la source de chaleur peut donc s'exprimer en fonction de la position et du temps $Q(\mathbf{r}, t)$ et doit satisfaire l'ensemble des équations fondamentales du problème direct pour reproduire le champ de température $T(\mathbf{r}, t)$ correspondant. Par conséquent, on pose dès le départ :

$$Q(S, X) \equiv Q(\mathbf{r}, t) \quad (5.1)$$

pour résoudre le problème inverse.

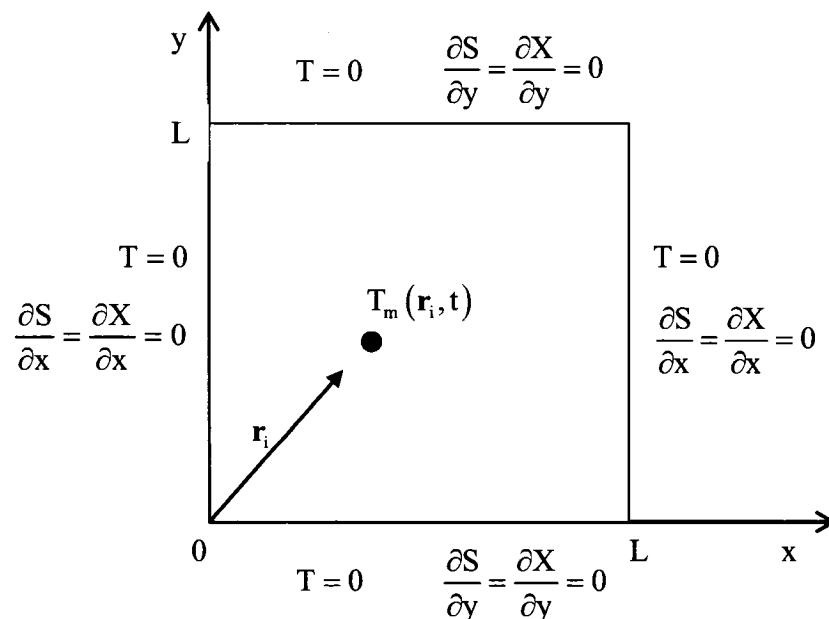


Figure 5.1 : Géométrie et conditions limites du problème

De plus, conformément à ce que l'on retrouve dans plusieurs situations, on néglige le transport de la biomasse par le fluide, car elle est souvent fixée sur la partie solide du milieu poreux. Néanmoins, le substrat demeure entraîné par le fluide porteur.

On utilise un maillage uniforme de 51 nœuds par 51 nœuds pour la résolution numérique, alors que le pas de temps varie entre $2,5 \times 10^{-7}$ et $7,5 \times 10^{-3}$. Le temps final de simulation est toutefois posé de façon à atteindre le régime permanent. Par ailleurs, lorsque les données des senseurs de température sont exactes, la valeur du critère de convergence ε est fixée à 5×10^{-3} , tandis que l'approximation initiale pour la source de chaleur est simplement $Q^0 = 0$.

5.2 Analyse d'échelles

Le tableau 5.1 présente une comparaison entre les valeurs de divers paramètres adimensionnels intervenant dans le problème considéré en fonction de la dimension caractéristique du réacteur biologique, en prenant, à titre d'exemple, la réaction impliquant la transformation du glucose par des bactéries de type *aerobacter aerogenes*. Dans ce tableau, l'astérisque (*) désigne les variables dimensionnelles. Celles-ci correspondent (voir le chapitre premier) aux coefficients : $Y = 0,4 \text{ kg X/kg S}$, $K_D = 0,001 \text{ /h}$, $\mu_{MAX} = 1,22 \text{ /h}$ et $K_S = 100 \text{ mg/l}$.

Le nombre de Rayleigh est, bien évidemment, proportionnel à L , mais on remarque que les paramètres biochimiques ainsi que les échelles de temps sont particulièrement sensibles aux changements d'échelle de dimension. La vitesse de réaction et l'échelle de temps de la convection diffèrent alors de façon plus ou moins importante selon que la réaction se déroule en laboratoire dans un petit réacteur, ou bien à l'intérieur d'un site de plusieurs mètres de long. En effet, pour de grandes dimensions, la réaction biochimique est alors très rapide et l'écoulement survient beaucoup plus tard. Dans ce cas, la convection naturelle se développe comme si la chaleur était relâchée instantanément. Pour cette raison, on considère en premier lieu les cas où le nombre de Rayleigh est relativement faible et pour lesquels les échelles de temps de la réaction et de l'écoulement sont semblables. On considère également la variation des paramètres du modèle en fonction de la température suivant la loi d'Arrhenius.

Tableau 5.1 : Valeurs des paramètres adimensionnels en fonction de l'échelle de dimension L de la figure 5.1

Paramètres adimensionnels	L = 10 m	L = 1 m	L = 0,1 m
$Ra = \frac{\beta g \kappa L \Delta T}{\nu \alpha}$ $= \frac{\beta g \kappa L^3 Q_{REF}}{\nu \alpha^2}$ $= \frac{\beta g \kappa L}{\nu \alpha} \left(\frac{\Delta H_{R/S}}{M_s (\rho c_p)_f} \right) \Delta S$	25	2,5	0,25
$Le_s = \frac{\alpha}{D_s}$	400	400	400
$\varepsilon = \frac{\varepsilon^*}{\sigma}$ $= \frac{\varepsilon^*}{\varepsilon^* + (1 - \varepsilon^*) \sigma_0}$	0,75	0,75	0,75
$Y = Y^* \frac{\Delta S}{\Delta X}$ $= Y^* \frac{\Delta S}{Y^* \Delta S} = 1$	1	1	1
$\mu = \mu^* \frac{L^2 \varepsilon^*}{\alpha}$	88 500	885	8,85
$K_s = \frac{K_s^*}{\Delta S}$	0,001	0,001	0,001
$K_D = K_D^* \frac{L^2 \varepsilon^*}{\alpha}$	72,6	0,726	0,00726
Échelle de temps : $t = t^* \frac{\alpha}{\sigma L^2}$	5×10^{-5}	0,005	0,5

5.3 Convection dans une cavité de petites dimensions

La figure 5.2 présente l'évolution de la source de chaleur au centre de la cavité en fonction du temps pour $Ra = 0,25$. Tout d'abord, on remarque que la croissance de l'intensité de la source de chaleur est de type exponentiel jusqu'à ce qu'elle atteigne un maximum, qui est suivi d'une baisse soudaine. Cette baisse peut paraître comme une discontinuité, toutefois, si l'on raffine le pas de temps, on remarque que la source de chaleur demeure continue en réalité. Conformément au modèle biochimique utilisé, la génération de chaleur cesse abruptement lorsque la biomasse a entièrement consommé le substrat.

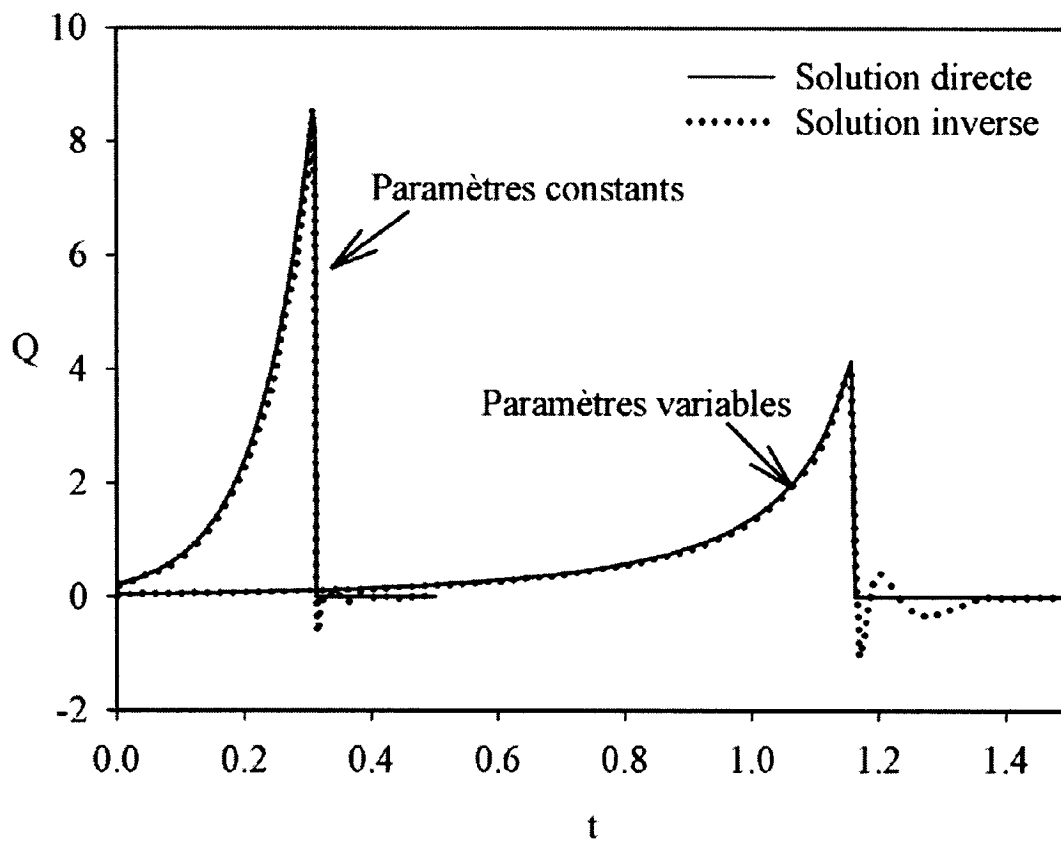


Figure 5.2 : Évolution de Q en fonction du temps au centre, N senseurs, $Ra = 0,25$

À ce très faible nombre de Rayleigh, deux cellules de convection, circulant en sens opposé, sont présentes dans la cavité, entraînant le fluide du centre de la cavité vers le haut pour le faire redescendre le long des parois verticales. La figure 5.3 montre les lignes de courant et les isothermes à $t = 0,25$ au moment où l'intensité de la source de chaleur est près de son maximum.

Puisque les distributions initiales des concentrations de X et S sont uniformes et que les flux de celles-ci sont nuls aux frontières, les distributions de X et de S ainsi que de la source de chaleur demeurent uniformes à l'intérieur de la cavité et ne varient qu'en fonction du temps lorsque les paramètres sont constants. En revanche, lorsque les paramètres biochimiques dépendent également de la température, les distributions de toutes les variables X, S, T et Q sont alors non uniformes au cours de la réaction comme l'illustre la figure 5.8. La source de chaleur est alors moins intense et varie plus lentement que pour des paramètres constants. Dans les deux cas, la réaction biochimique se produit selon une échelle de temps comparable à celle de la diffusion ($\sigma L^2/\alpha$) de l'équation d'énergie.

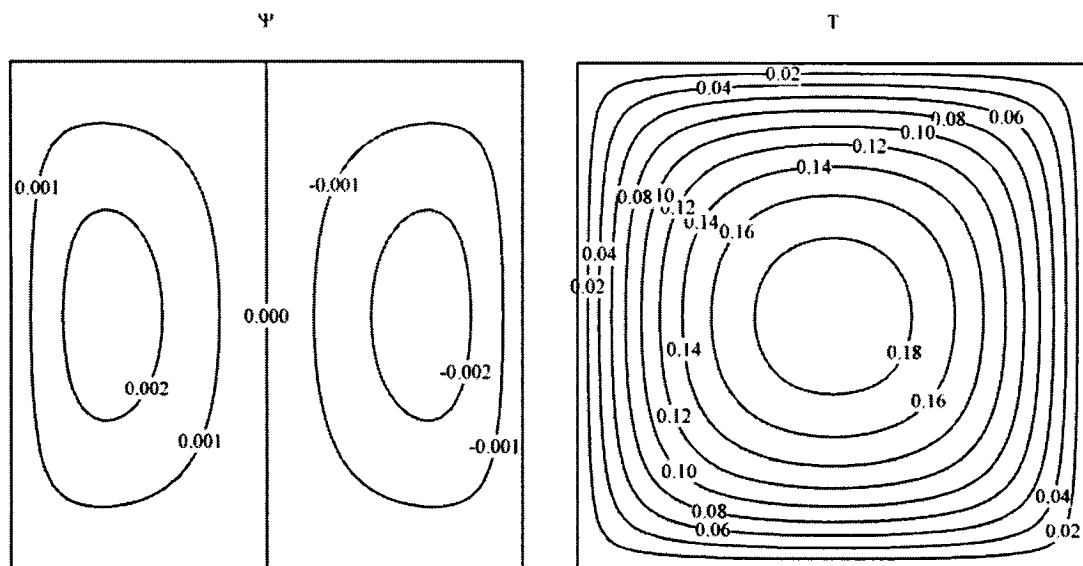


Figure 5.3 : Lignes de courant et isothermes à $t = 0,25$, $Ra = 0,25$, paramètres constants

On constate à la figure 5.2 que les solutions inverses concordent en tous points avec les solutions directes, sauf immédiatement après la baisse subite de la source de chaleur, où certaines oscillations sont présentes. Ce dernier phénomène constitue un résultat normal pour les problèmes inverses. Tel que mentionné précédemment, la source de chaleur est uniforme pour les paramètres constants. Il en résulte qu'un seul senseur est alors requis, en principe, pour déterminer $Q(t)$. La figure 5.4 présente le résultat, obtenu après seulement 22 itérations pour un senseur placé au centre, alors que la solution pour les senseurs placés à tous les nœuds du maillage, à la figure 5.2, converge en 39 itérations. La position du senseur à l'intérieur de la cavité n'affecte pas la solution, comme l'illustre à la figure 5.4 la courbe obtenue pour un senseur placé à $x = 0,2$ et $y = 0,5$ après 19 itérations. D'autre part, pour les paramètres variables, la solution inverse, avec des senseurs placés à tous les nœuds, converge en 37 itérations.

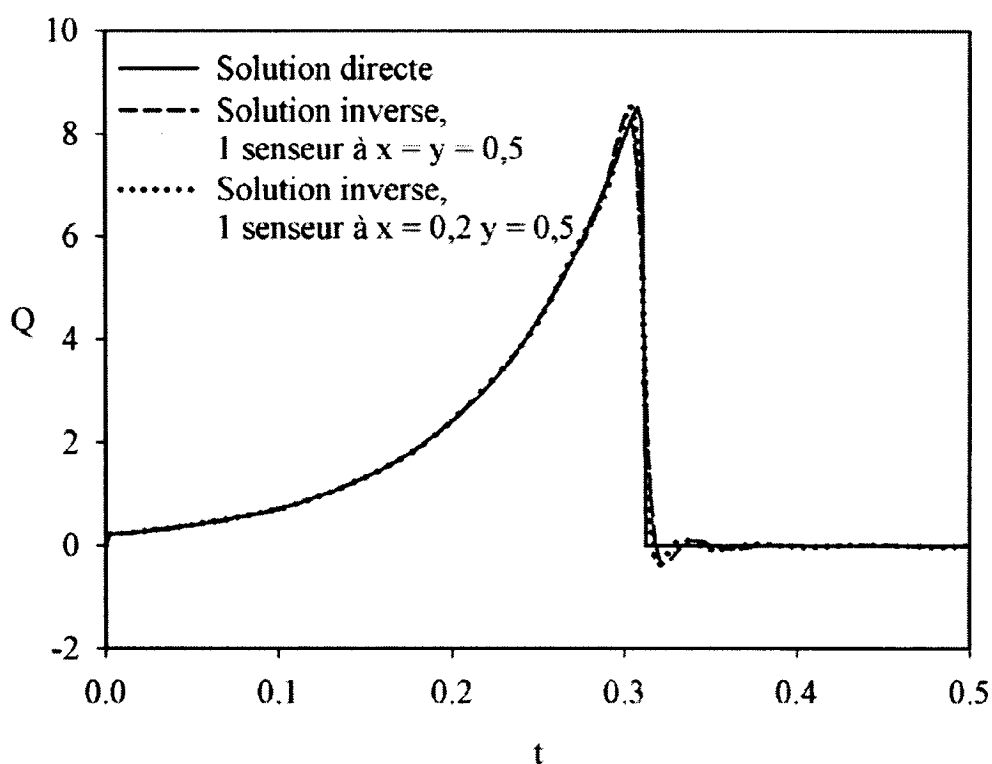


Figure 5.4 : Évolution de Q en fonction de t au centre, paramètres constants, 1 senseur, $Ra = 0,25$

La figure 5.5 décrit l'évolution des concentrations de substrat et de biomasse en fonction du temps au centre de la cavité, à la fois pour les paramètres constants et les paramètres variables. Les solutions inverses, qui ne sont pas représentées sur cette figure, coïncident parfaitement avec les solutions directes. La concentration de biomasse X semble demeurer constante lorsque le substrat est entièrement consommé, mais en réalité, on peut constater qu'elle décline avec le taux de mortalité K_D si l'on considère une plus longue période de temps.

L'évolution de la température correspondante est présentée à la figure 5.6. L'augmentation de la température est plus rapide dans le cas de paramètres constants et son intensité est plus importante, ce qui est cohérent avec le profil de la source de chaleur examiné précédemment à la figure 5.2.

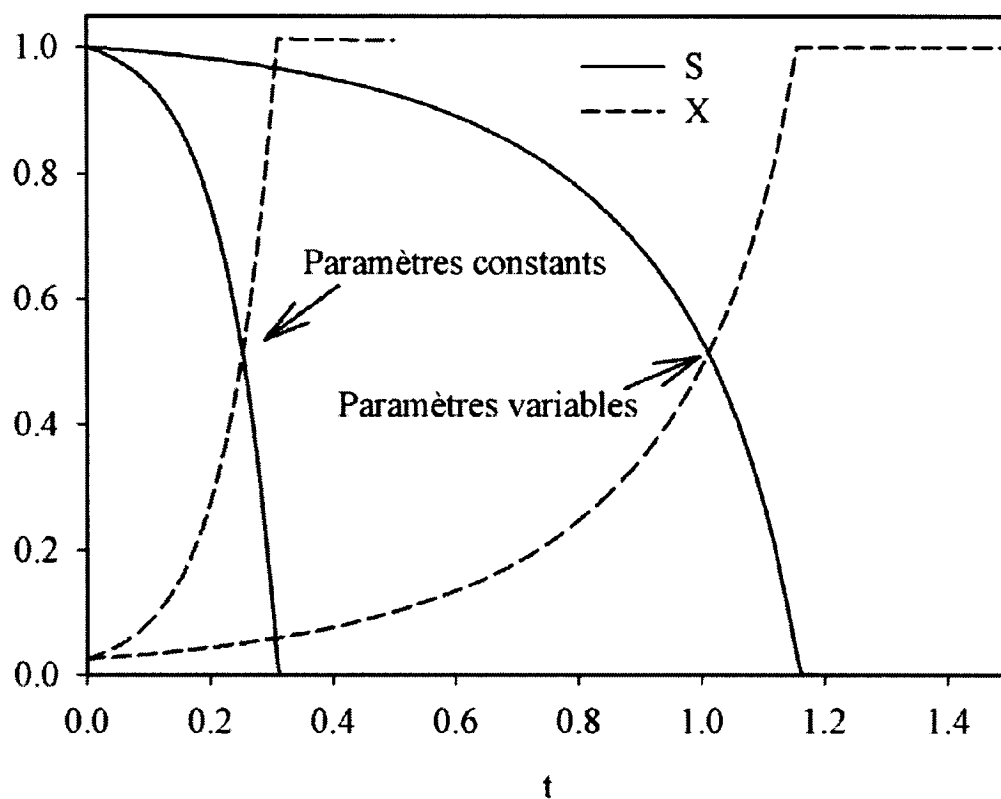


Figure 5.5 : Évolution de S et X en fonction de t au centre, $Ra = 0,25$

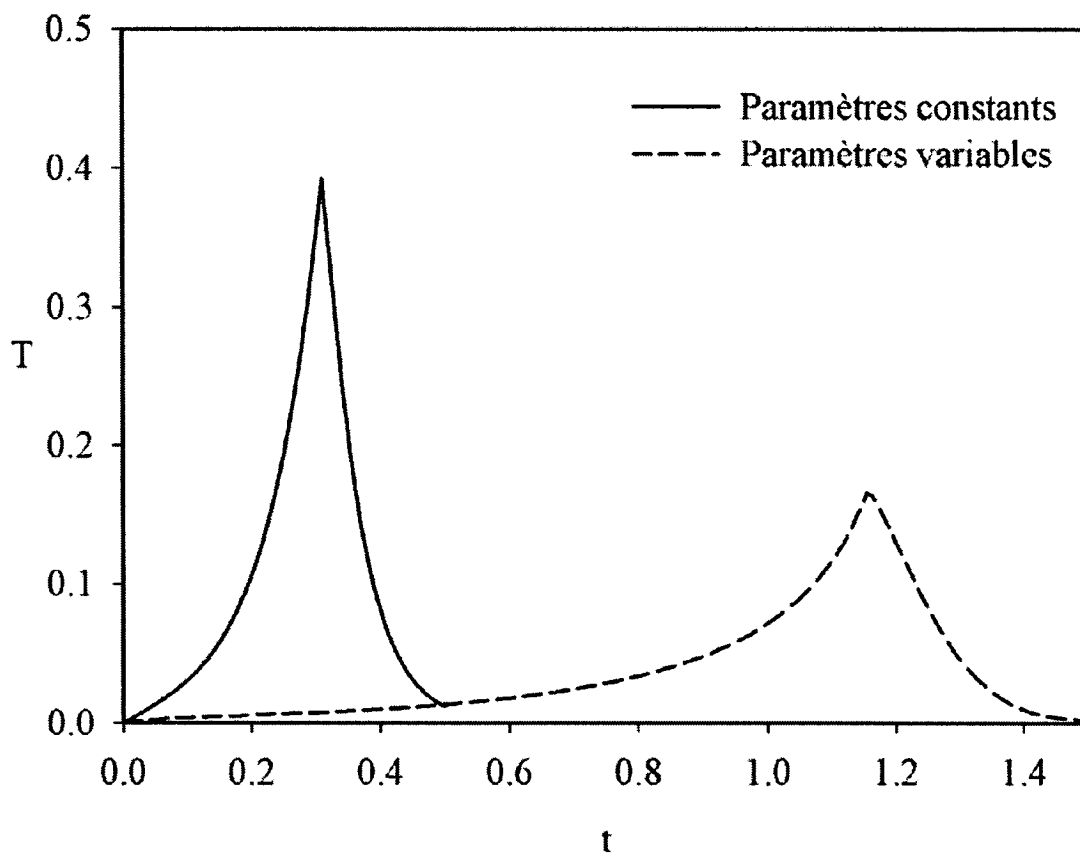


Figure 5.6 : Évolution de T en fonction de t au centre, $Ra = 0,25$

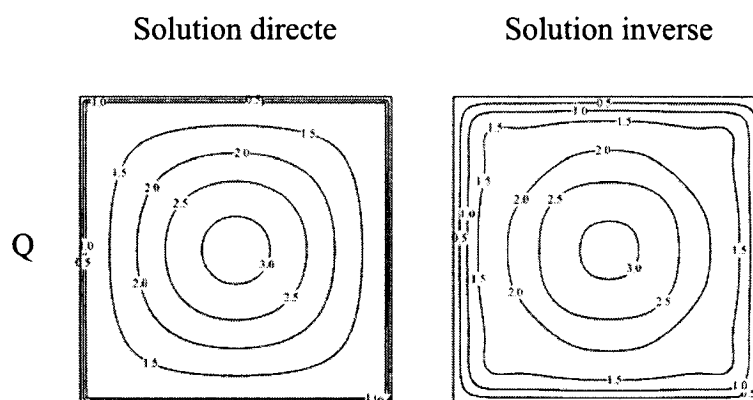


Figure 5.7 : Courbes de niveau de Q à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$

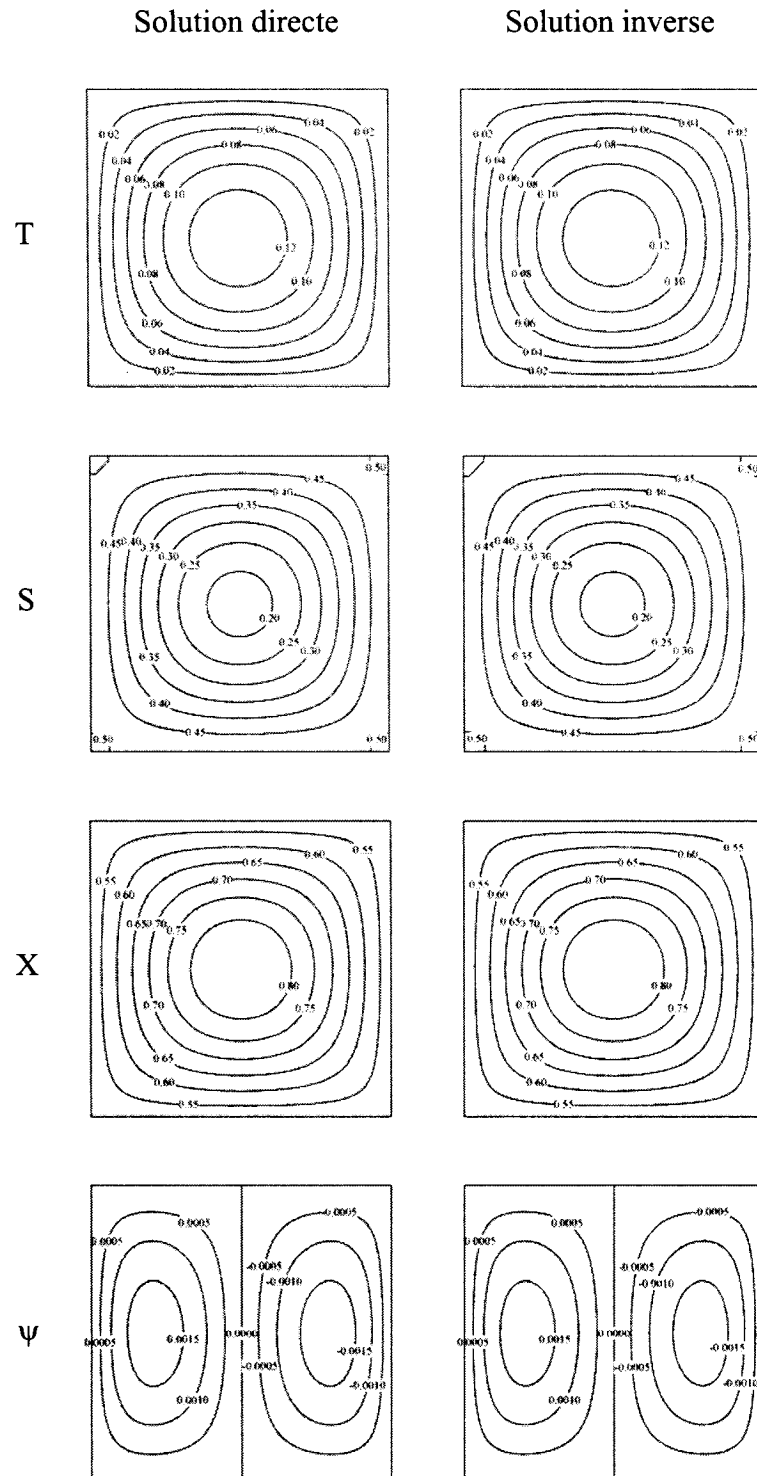


Figure 5.8 : Courbes de niveau de T, S, X et ψ à $t = 1,125$, paramètres variables,
 $Ra = 0,25$

On peut constater la non uniformité de la source de chaleur à la figure 5.7 qui illustre les solutions directe et inverse pour des paramètres variables et $Ra = 0,25$ à $t = 1,125$ au moment où Q est à son intensité maximale. La solution inverse concorde bien en général, sauf près des frontières sur lesquelles une discontinuité apparaît du fait des variations rapides des variables qui entraînent d'importantes corrections pour le problème inverse à ces points. Néanmoins, on remarque à la figure 5.8 que les autres variables de la solution inverse, obtenues avec cette représentation de Q , concordent parfaitement avec celles de la solution directe. Plus précisément, la distribution des isothermes apparaît similaire à celle obtenue à la figure 5.3 pour des paramètres constants, malgré la distribution différente de la source de chaleur et des concentrations de substrat et de biomasse.

Le tableau 5.2 démontre que les paramètres varient considérablement avec la température, le taux de mortalité en particulier y est très sensible. Le taux de croissance est en effet plus faible lorsqu'il est évalué à la température réelle plutôt qu'à la température constante permettant la croissance optimale. Il est donc tout à fait normal par conséquent que la génération de chaleur s'effectue plus lentement et qu'elle survienne plus tard lorsque l'on considère l'effet de la température sur la réaction.

Tableau 5.2 : Valeurs extrêmes des températures et des paramètres dimensionnels pour
 $Ra = 0,25$

	Paramètres constants	Paramètres variables
Température minimale	0 (290 K)	0 (290 K)
Température maximale	0,39 (356 K)	0,17 (319 K)
μ (h^{-1})	1,22	0,28 à 0,61
K_D (h^{-1})	10^{-3}	$1,33 \times 10^{-7}$ à $1,55 \times 10^{-5}$

5.4 Convection dans une cavité de plus grandes dimensions

Les prochaines simulations, réalisées pour des nombres de Rayleigh de 2,5 et de 25, démontrent que la convection devient beaucoup plus forte pour ces valeurs. Des couches limites apparaissent rapidement près des parois verticales, comme celles qui sont représentées aux figures figure 5.9 et 5.10. Ce phénomène se manifeste autant pour les paramètres constants que lorsque les paramètres varient en fonction de la température.

Une conséquence très importante de la présence d'une convection plus forte est d'uniformiser la répartition de substrat dans la cavité et par le fait même de diminuer les variations spatiales des différentes variables, y compris la source de chaleur. Déjà à $Ra = 2,5$, pour des paramètres variables, les valeurs de Q , T , S et X sont quasi-uniformes, sauf près des parois, comme on le constate à la figure 5.11. Les effets sont encore plus marqués pour $Ra = 25$, alors que ces mêmes variables sont uniformes à travers la cavité à l'exception d'une très petite région le long des parois.

D'autre part, lorsque la dimension du réacteur passe de 1 m pour $Ra = 2,5$ à 10 m pour $Ra = 25$, l'échelle de temps de la diffusion de chaleur devient beaucoup plus importante que celle de la réaction biochimique et de la génération de chaleur. De surcroît, la source de chaleur paraît alors un phénomène instantané à $Ra = 25$. L'évolution des solutions directes et inverses de Q en fonction du temps au centre de la cavité sont présentées pour $Ra = 2,5$ et 25 aux figures 5.12 et 5.13 respectivement. Quelques oscillations sont également présentes dans la solution inverse à la suite de la baisse abrupte de la source de chaleur. La solution inverse représente toutefois adéquatement la solution directe. Pour des paramètres constants, la convergence est atteinte en 46 et 52 itérations respectivement pour $Ra = 2,5$ et 25 lorsque des senseurs sont placés à tous les noeuds, alors qu'elle est atteinte en 224 et 204 itérations pour des paramètres qui

dépendent de la température. Cette convergence plus lente s'explique par les variations beaucoup plus rapides de l'intensité de la source de chaleur imposées par le problème.

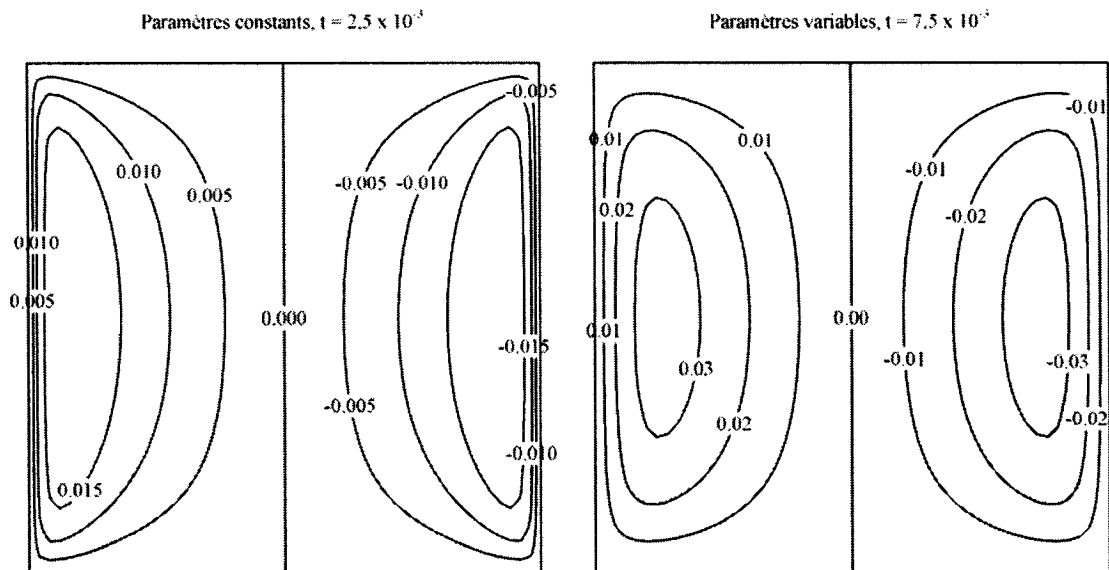


Figure 5.9 : Lignes de courant, paramètres constants et variables, $Ra = 2,5$

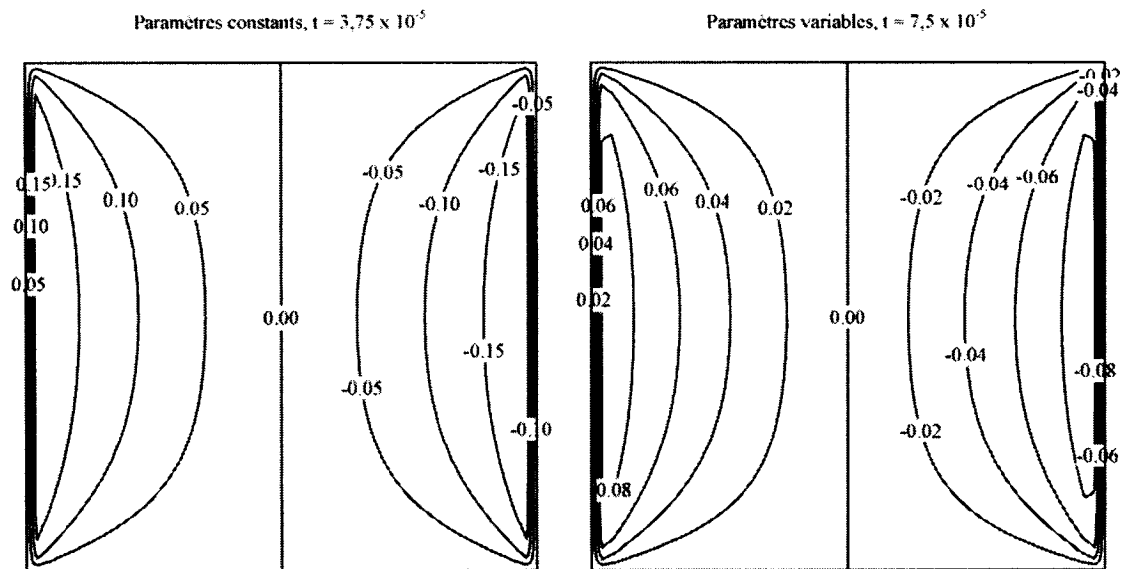


Figure 5.10 : Lignes de courant, paramètres constants et variables, $Ra = 25$

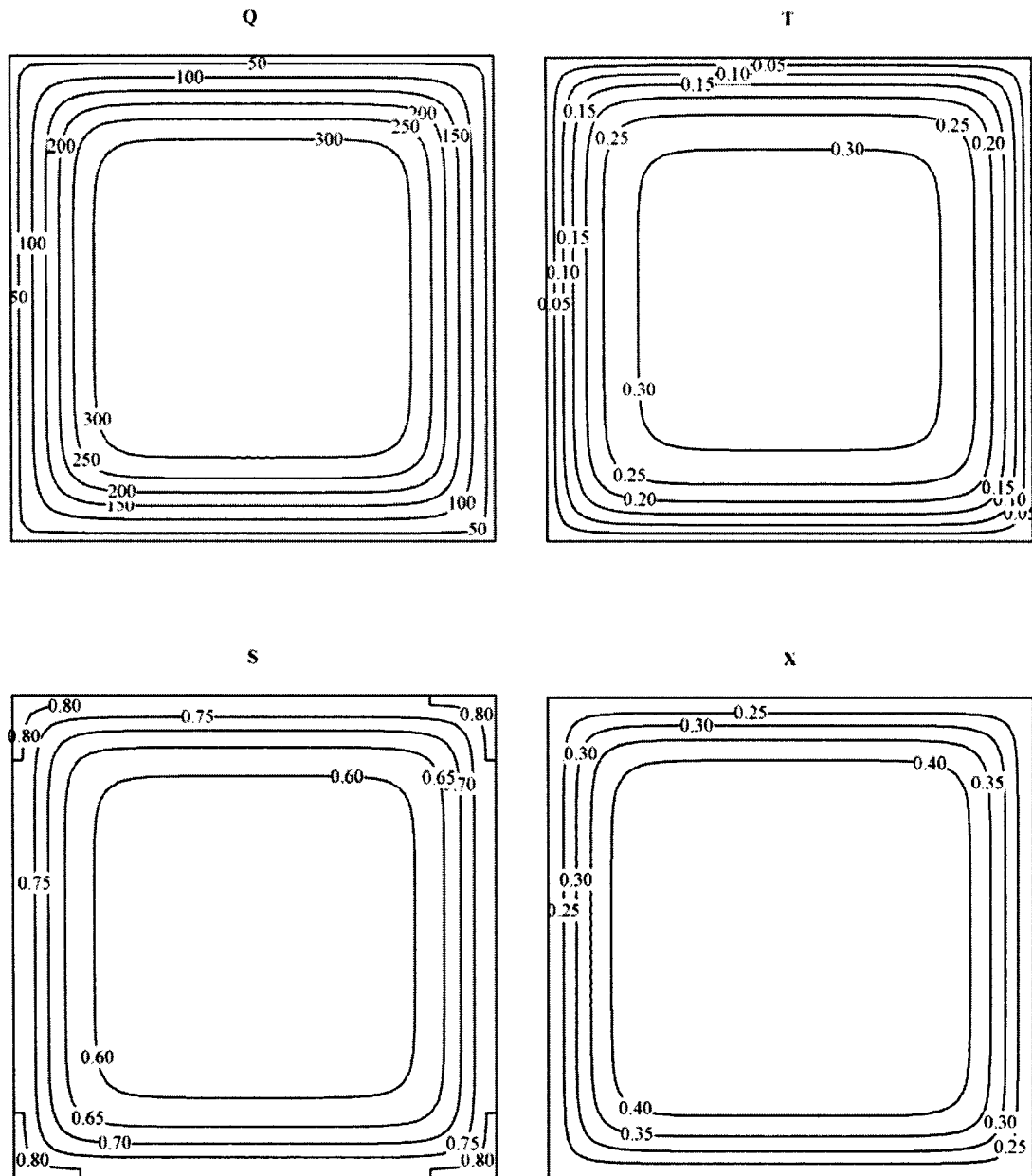


Figure 5.11 : Courbes de niveau de Q, T, S et X à $t = 7,5 \times 10^{-3}$, paramètres variables,
 $Ra = 2,5$

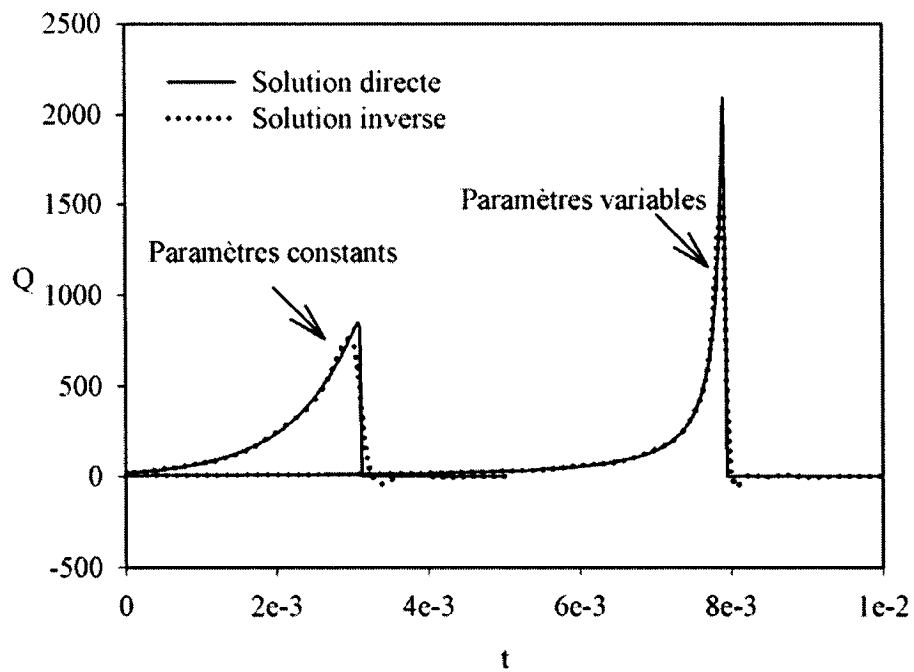


Figure 5.12 : Évolution de Q en fonction du temps au centre, N senseurs, $Ra = 2,5$

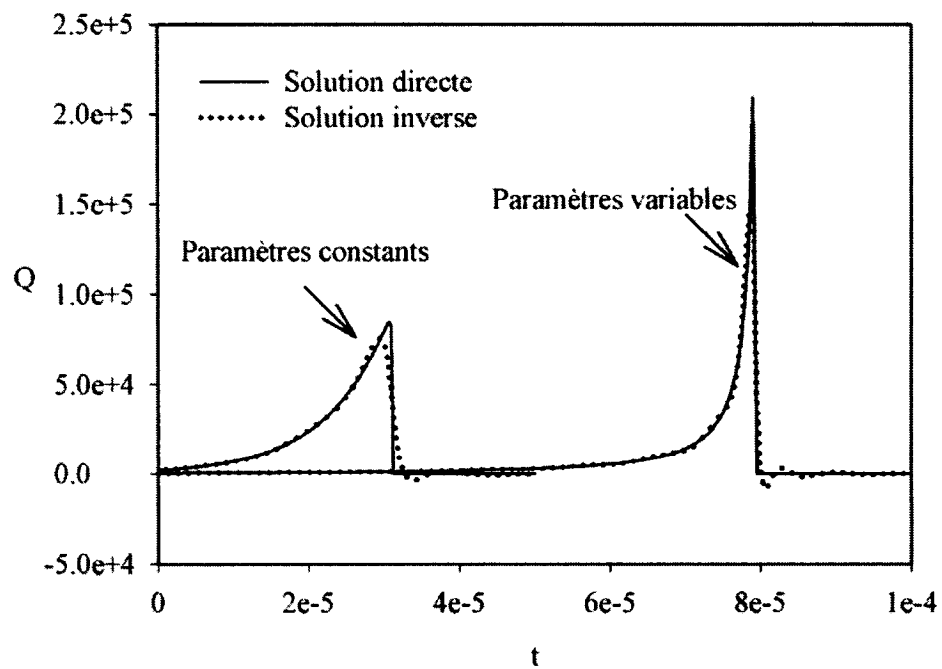


Figure 5.13 : Évolution de Q en fonction du temps au centre, N senseurs, $Ra = 25$

Tel que décrit pour $Ra = 0,25$, lorsque les paramètres sont constants, il suffit d'un seul capteur pour déterminer adéquatement la source de chaleur $Q(t)$. Les figures 5.14 et 5.15 présentent les solutions directes et inverses obtenues avec un seul capteur, lorsque $Ra = 2,5$ et 25. Les deux solutions pour le capteur au centre de la cavité convergent en 24 itérations, soit plus de deux fois plus rapidement que lorsque les capteurs sont disposés à tous les nœuds. Toutefois, la précision semble se détériorer légèrement. Il est également très intéressant de noter que la position du capteur n'affecte en rien la précision de la solution inverse, ni le processus de convergence dont le nombre d'itérations demeure identique.

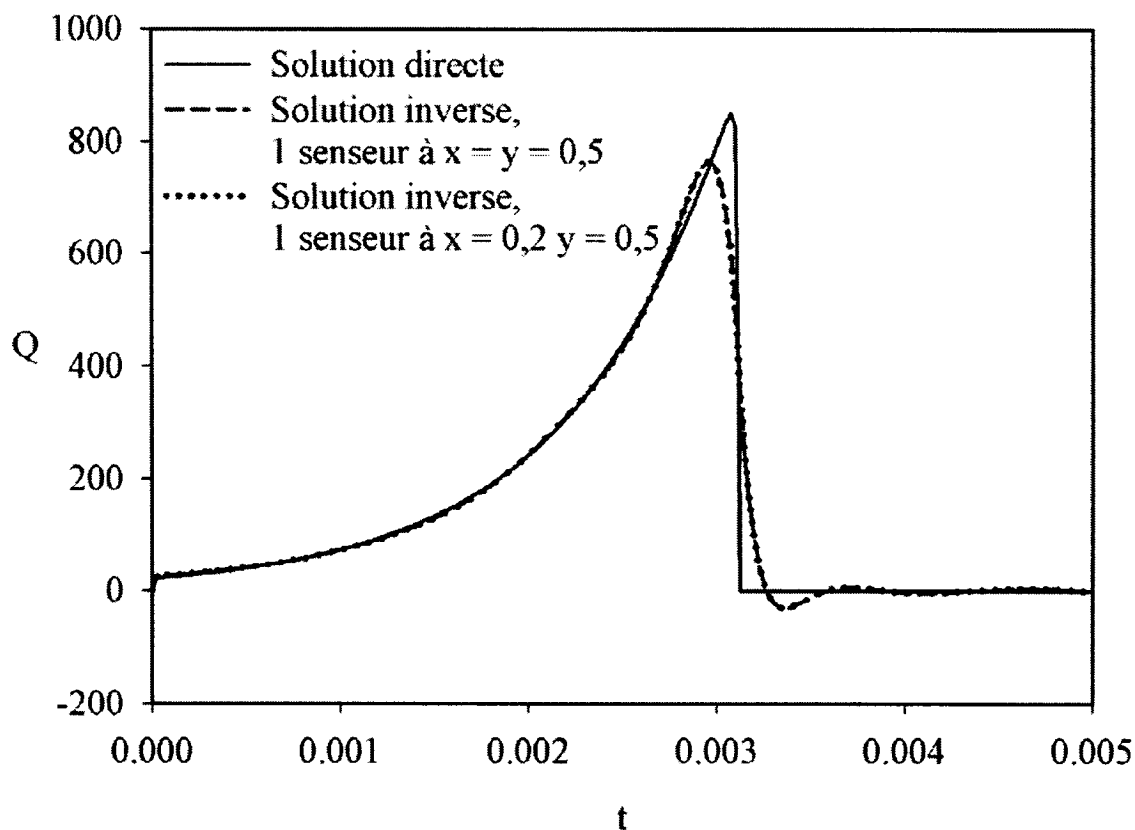


Figure 5.14 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 capteur, paramètres constants, $Ra = 2,5$

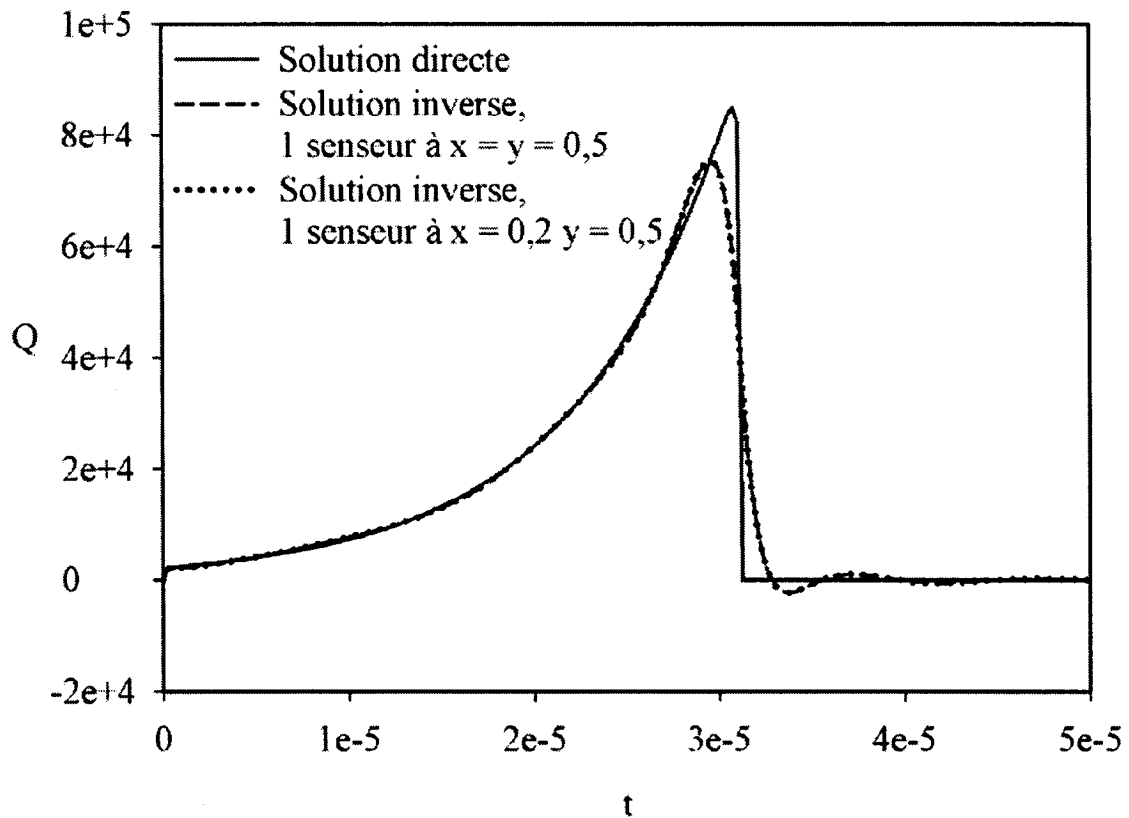


Figure 5.15 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres constants, $Ra = 25$

L'évolution temporelle des concentrations de substrat et de biomasse au centre de la cavité est présentée aux figures 5.16 et 5.17 pour $Ra = 2,5$ et 25 . Les résultats obtenus à ces deux échelles sont très similaires. La réaction biochimique avec les paramètres constants demeure plus rapide que celle dont la température affecte les paramètres. Pour ces derniers, le déclin de la concentration de biomasse est particulièrement important après l'épuisement du substrat car, contrairement au cas des paramètres constants, la haute température au temps final affecte de façon importante le taux de mortalité. Le tableau 5.3 permet de constater l'ampleur de ces variations.

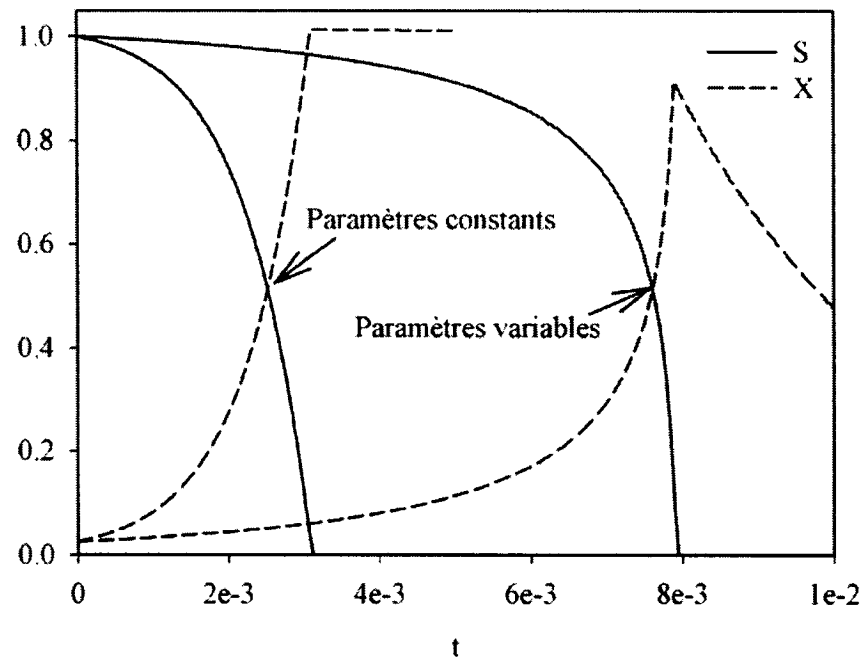


Figure 5.16 : Évolution de S et X en fonction de t au centre, $Ra = 2,5$

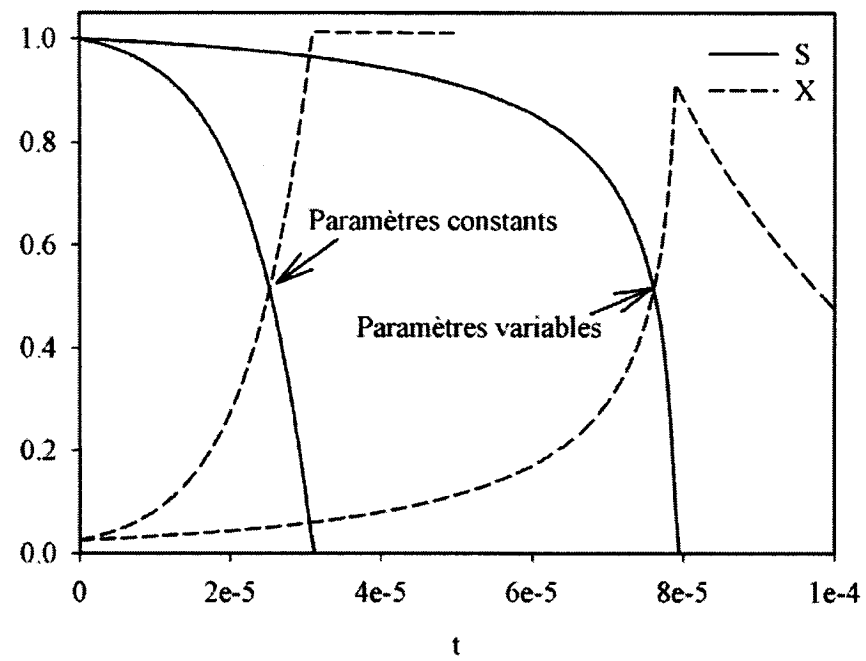


Figure 5.17 : Évolution de S et X en fonction de t au centre, $Ra = 25$

Tableau 5.3 : Valeurs extrêmes des températures et des paramètres dimensionnels pour
 $Ra = 25$

	Paramètres constants	Paramètres variables
Température minimale	0 (290 K)	0 (290 K)
Température maximale	0,74 (414 K)	0,68 (404 K)
μ (h^{-1})	1,22	0,28 à 3,19
K_D (h^{-1})	10^{-3}	$1,33 \times 10^{-7}$ à $3,19 \times 10^{-1}$

Les figures 5.18 et 5.19 décrivent les évolutions des températures au centre de la cavité pour des paramètres constants et variables à $Ra = 2,5$ et 25. Puisque la durée de la réaction est beaucoup plus rapide que celle de la diffusion de la température, celle-ci décroît beaucoup plus tard, ce qui n'est pas visible sur les figures.

Tel que discuté précédemment, les variables du problème deviennent rapidement uniformes pour les paramètres variables lorsque la convection devient plus importante. Il devient alors possible de tirer profit de ce phénomène et de tenter de déterminer la source de chaleur et les autres variables du problème inverse à travers la cavité en n'utilisant qu'un seul senseur. Les figures 5.20 et 5.21 présentent les résultats obtenus par cette approche pour la source de chaleur au centre. La racine carrée de l'erreur normalisée $(E/E_0)^{1/2}$ y est également représentée en fonction du nombre d'itérations. Les solutions inverses, pour $Ra = 2,5$ et 25 respectivement, restent alors inchangées après 159 et 126 itérations alors que la racine de l'erreur correspond à $9,11 \times 10^{-3}$ et $7,28 \times 10^{-3}$. Toutefois, ces solutions correspondent bien à la réalité et l'on peut conclure que plus l'uniformité de la source est grande, moins l'erreur est importante et plus la convergence est rapide. De plus, la position du senseur n'a aucune influence sur la solution inverse. Par ailleurs, la solution qui converge après 11 itérations pour $Ra = 0,25$ diffère de façon importante de la solution directe, comme l'illustre la figure 5.22. L'importance des effets bidimensionnels ne permet donc pas d'obtenir de bonnes solutions en dessous de $Ra = 2,5$.

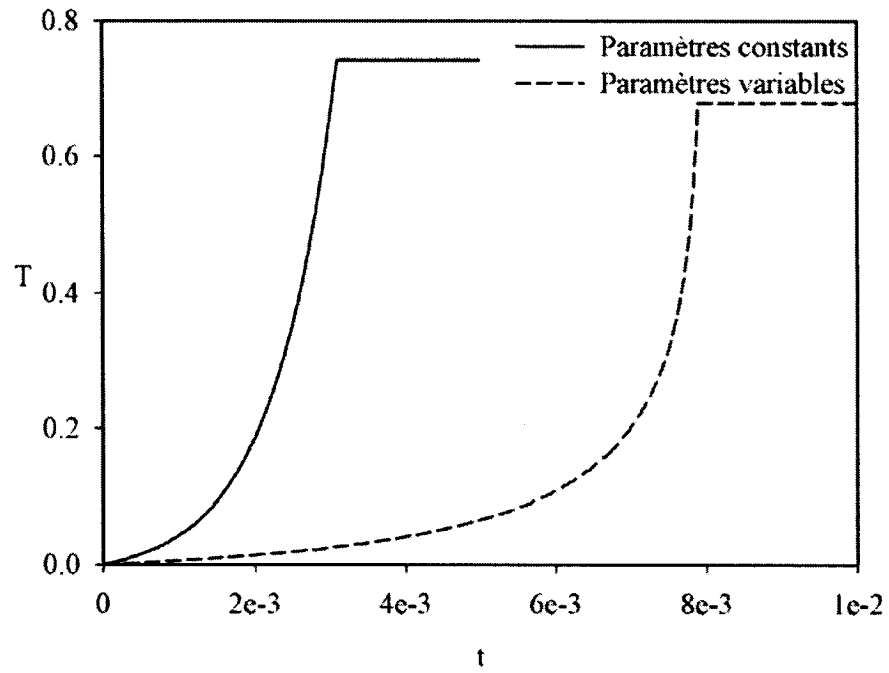


Figure 5.18 : Évolution de T en fonction de t au centre, $Ra = 2,5$

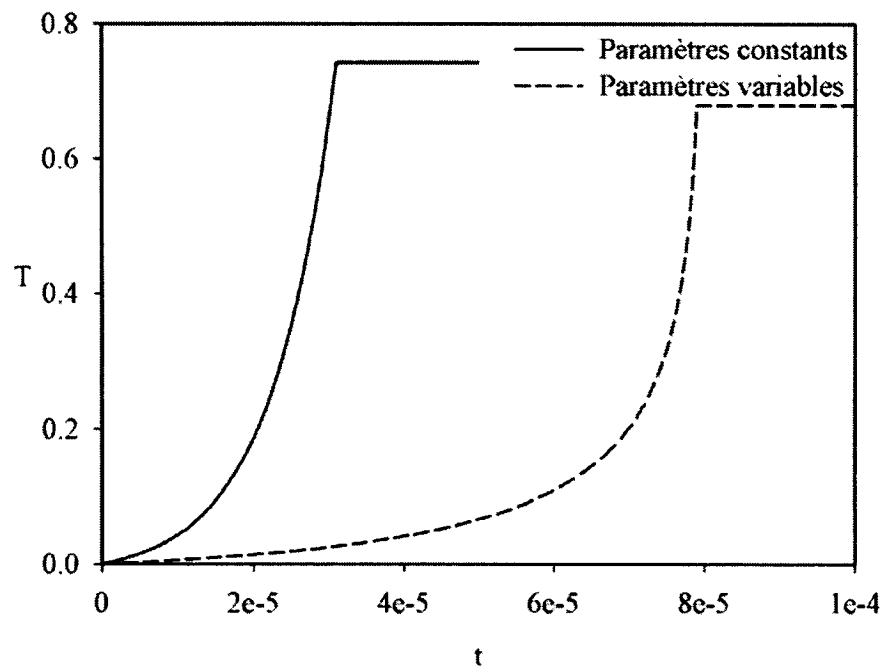


Figure 5.19 : Évolution de T en fonction de t au centre, $Ra = 25$

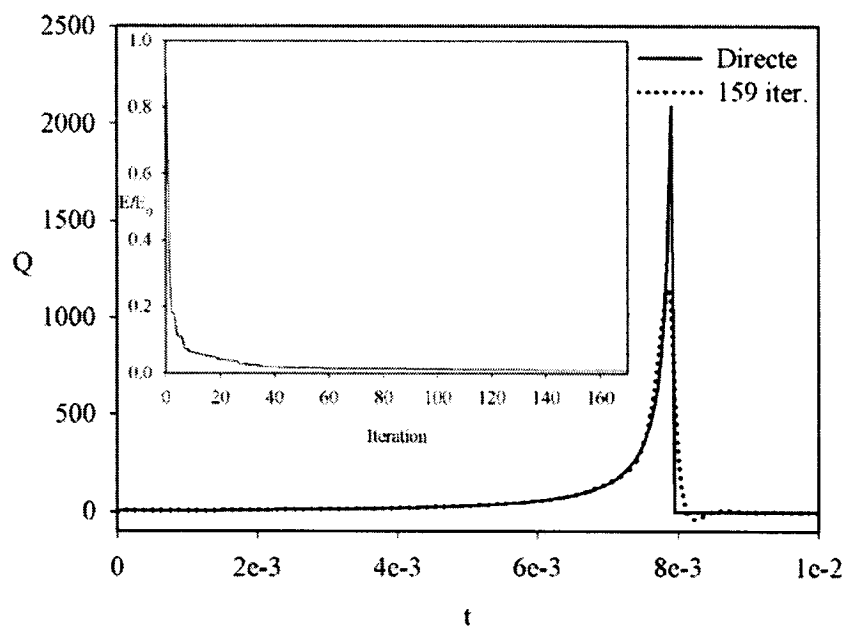


Figure 5.20 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres variables,
 $Ra = 2,5$

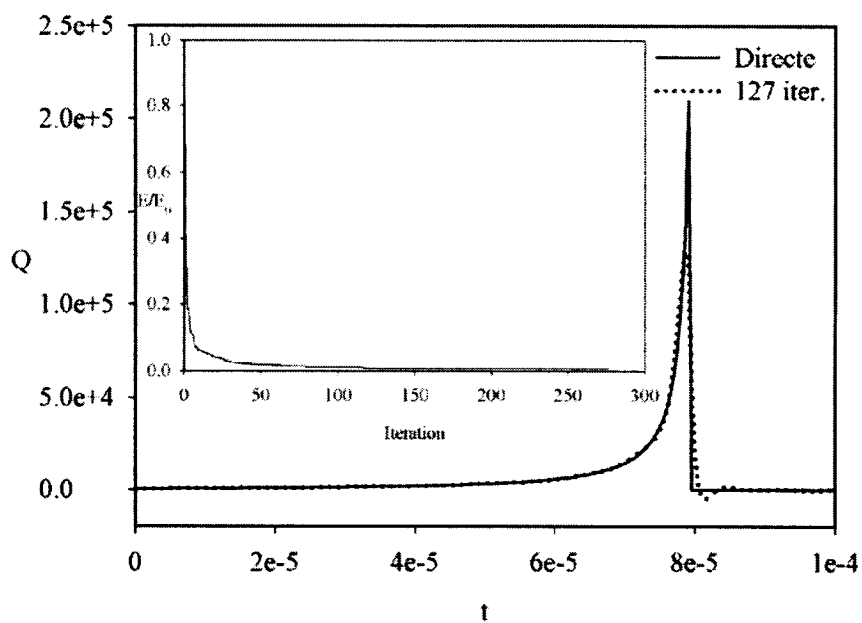


Figure 5.21 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres variables,
 $Ra = 25$

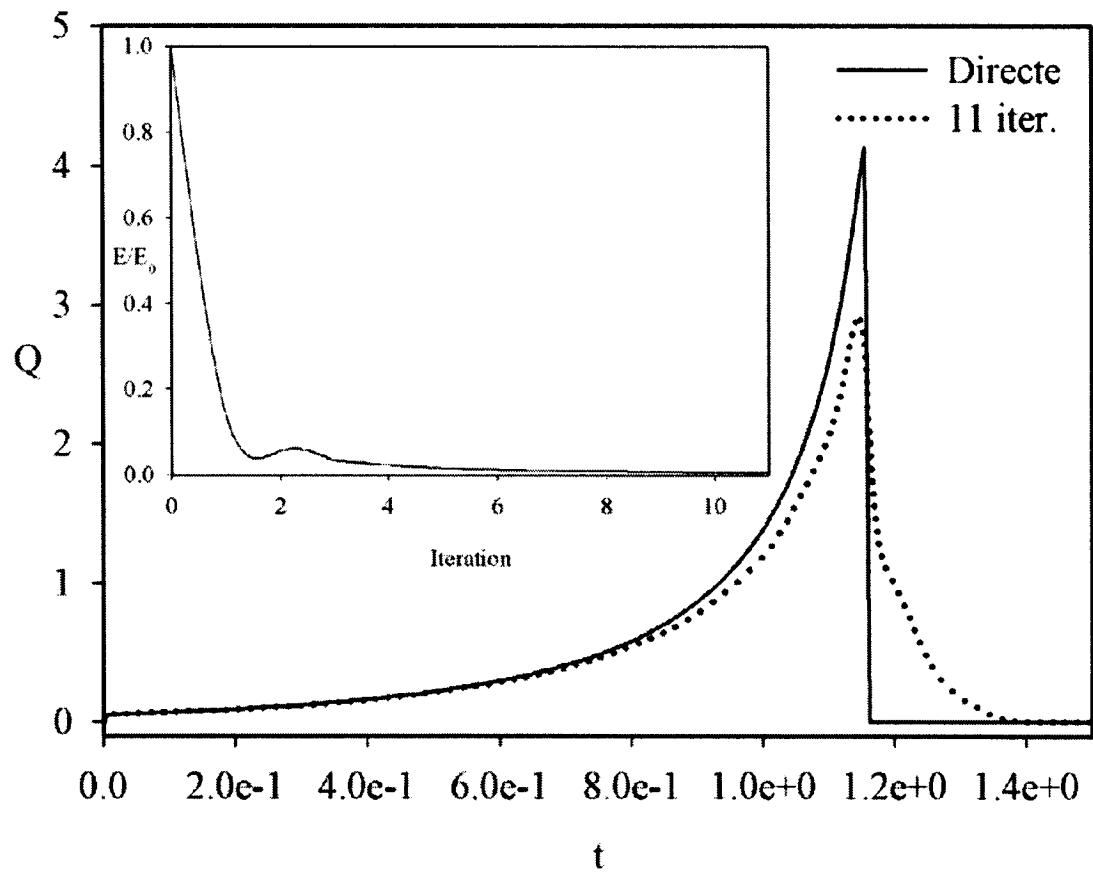


Figure 5.22 : Évolution de Q en fonction de t au centre, 1 senseur, paramètres variables,
 $Ra = 0,25$

5.5 Effet du bruit

En situation réelle, les relevés de températures comportent habituellement un certain niveau d'erreur qui influence les données utilisées par l'algorithme et conséquemment les solutions inverses subséquentes. On considère ici un bruit avec une distribution de probabilité uniforme d'un écart type $\sigma = 4\%$. Les figures 5.23 et 5.24 présentent les solutions directes et inverses obtenues au centre de la cavité pour $Ra = 0,25$ pour des paramètres constants et variables. Lorsque le bruit entache les données et que les paramètres sont constants, la solution présentée après 15 itérations apparaît plus précise que celle obtenue quand le critère d'arrêt est atteint après 35 itérations. Le même constat est établi avec les paramètres variables après 34 et 19 itérations. Ce phénomène illustre encore les effets régulateurs de la méthode itérative du gradient conjugué exposés au quatrième chapitre. L'optimisation de la solution inverse est une fois de plus réalisée en arrêtant la simulation quelques itérations avant que le critère de convergence ne soit atteint, afin d'éviter l'effet des plus hautes fréquences, attribuable essentiellement au bruit.

Aux figures 5.25, 5.26, 5.27 et 5.28, on retrouve les solutions directes et inverses avec le même niveau de bruit sur les données pour $Ra = 2,5$ et 25 . La racine carrée de l'erreur normalisée $(E/E_0)^{1/2}$ y est également tracée en fonction du nombre d'itérations. À $Ra = 2,5$, les solutions inverses sont représentées après 20 et 27 itérations pour des paramètres constants et après 45 et 61 itérations lorsque la température affecte ces paramètres. Pour $Ra = 25$, ces solutions sont illustrées respectivement après 19 et 27 itérations et 44 et 65 itérations. On remarque premièrement que les solutions deviennent plus imprécises pour des paramètres variables lorsque la convection s'intensifie et que la convergence devient plus laborieuse. Toutefois, la comparaison entre les solutions directes et inverses révèle que la méthode itérative conserve toujours ses propriétés de régularisation. L'optimisation des solutions demeure alors possible. Finalement, l'utilisation de senseurs à tous les nœuds permet d'améliorer la précision, mais requiert près de deux fois plus d'itérations pour converger correctement.

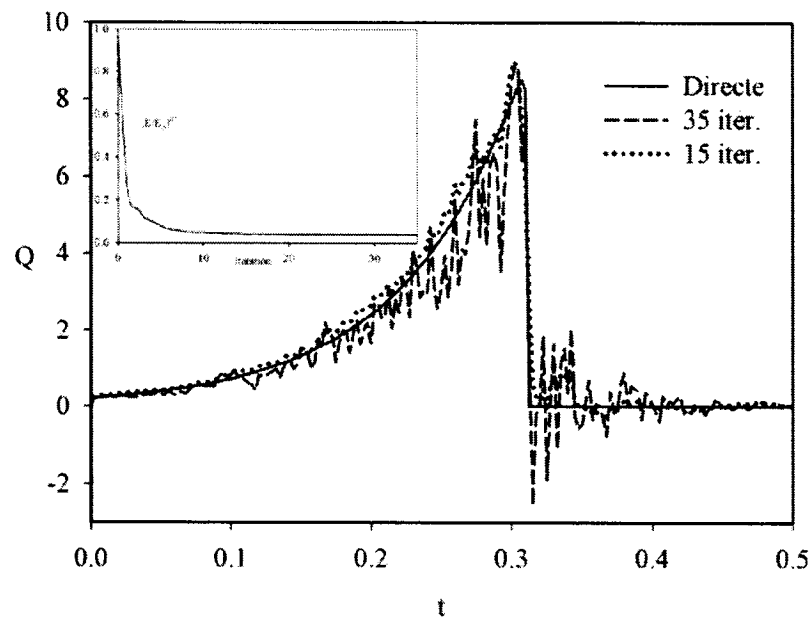


Figure 5.23 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres constants, $Ra = 0,25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$

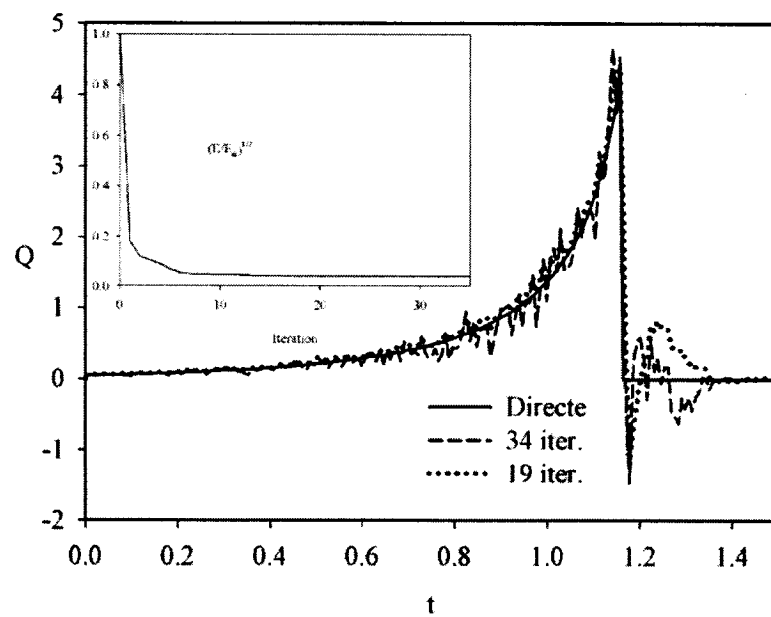


Figure 5.24 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres variables, $Ra = 0,25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$

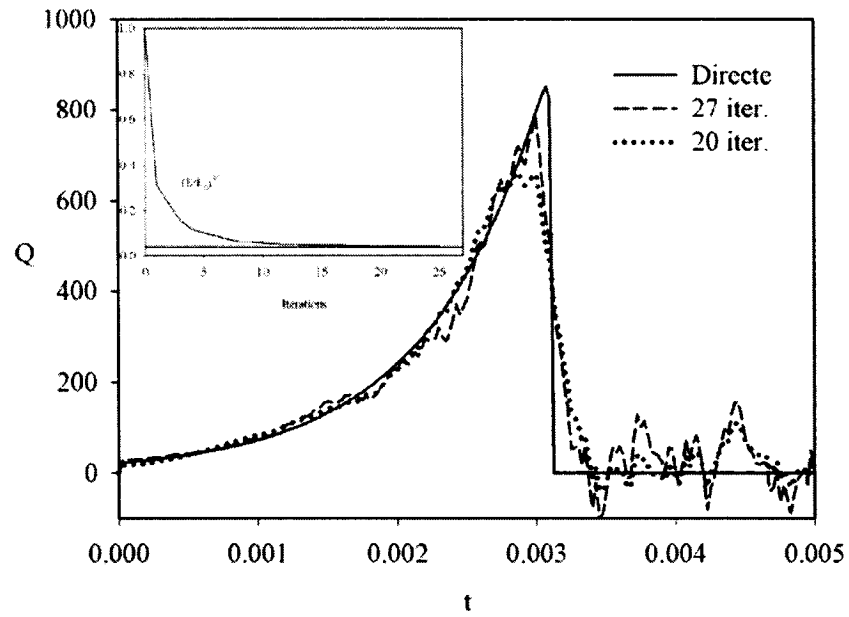


Figure 5.25 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres constants, $Ra = 2,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$

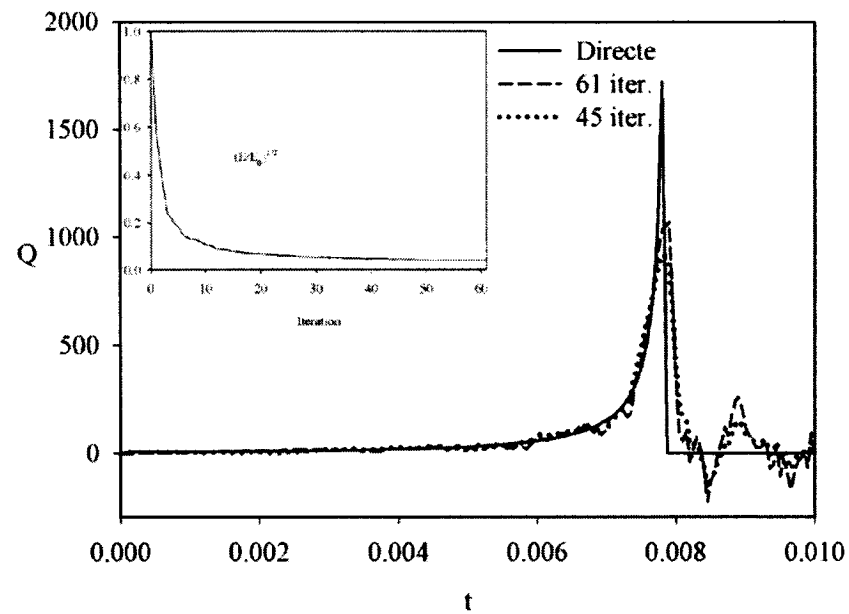


Figure 5.26 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres variables, $Ra = 2,5$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$

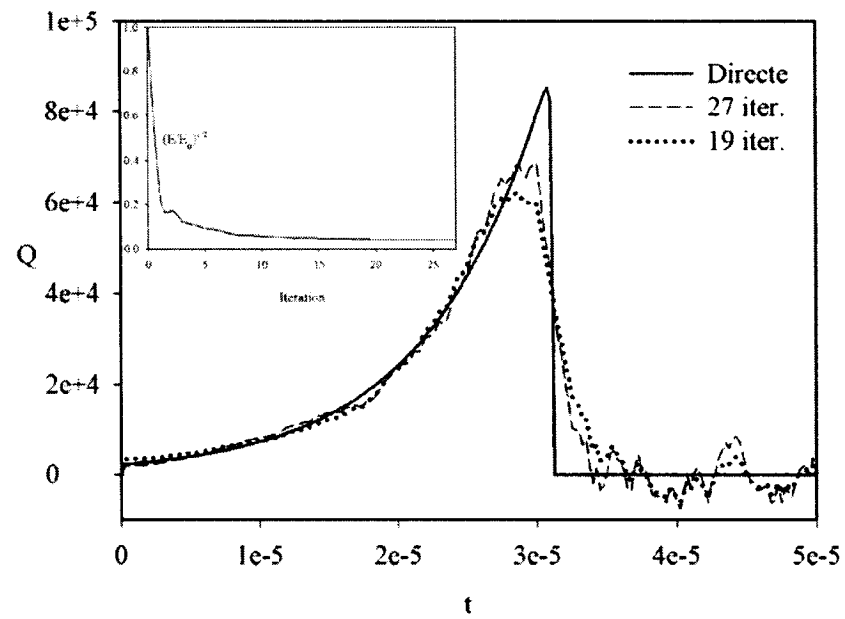


Figure 5.27 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres constants, $Ra = 25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$

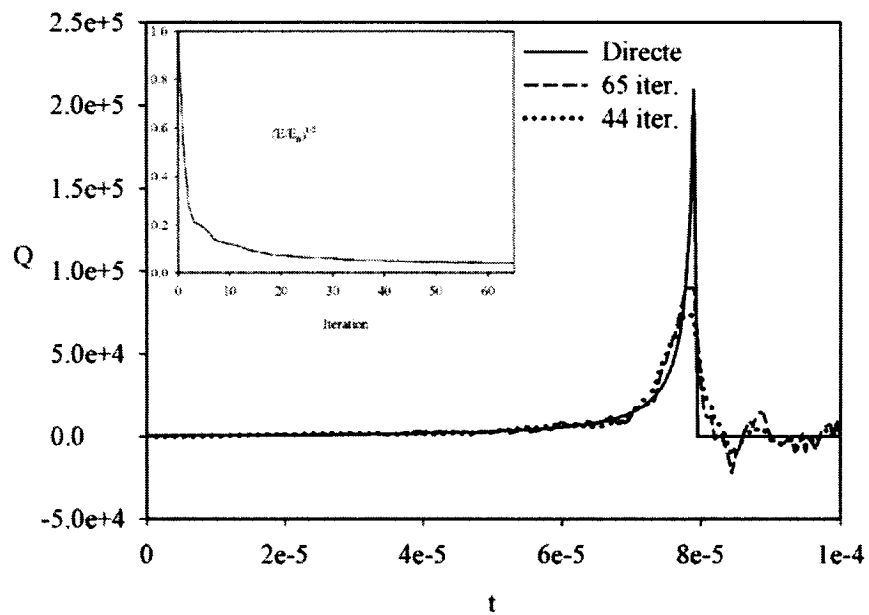


Figure 5.28 : Évolution de Q en fonction de t , paramètres variables, $Ra = 25$, bruit sur les données $\sigma = 0,04$

5.6 Conclusion

La méthode inverse du gradient conjugué avec équations adjointes a permis de déterminer adéquatement une source de chaleur générée à partir d'une activité biochimique décrite par un modèle de Monod avec les paramètres typiques considérés. La représentation des phénomènes de dégradation du substrat par la biomasse a pu être accomplie en intégrant ce modèle de Monod. Le cas où les paramètres de ce modèle dépendent de la température et engendrent des phénomènes de transport plus importants a également été traité.

La présente méthode a également permis de déterminer avec succès la source de chaleur, même lorsque celle-ci évolue rapidement par rapport à la diffusion. Toutefois, un pas de temps relativement petit est alors requis. Les solutions directes démontrent que, même avec un nombre de Rayleigh égal à 0,25, soit près d'un régime de conduction, la source de chaleur obtenue avec des paramètres qui varient exponentiellement avec la température est clairement bidimensionnelle et que les variations spatiales des différentes quantités sont importantes. Pour ce cas, il faut des senseurs à tous les nœuds du maillage afin d'obtenir des solutions inverses précises.

Toutefois, il a été démontré que, lorsque les dimensions considérées deviennent plus importantes, à des nombres de Rayleigh de l'ordre de 2,5 ou de 25, des couches limites apparaissent. Une conséquence importante de la convection est d'uniformiser les variables à l'intérieur de la cavité ainsi que la source de chaleur. Il est alors possible de tirer profit de ces conditions et d'obtenir de bonnes solutions inverses en n'utilisant qu'un seul senseur.

Finalement, pour ce problème type, l'optimisation du nombre d'itérations demeure possible lorsqu'il y a du bruit dans les données fournies par les senseurs de température.

Chapitre VI : Résultats pour la détermination du taux de croissance

La méthode du gradient conjugué avec équations adjointes employée au chapitre V permet de déterminer avec succès une source de chaleur résultant de l'activité microbienne. La connaissance de cette génération thermique permet ensuite de la relier aux différentes concentrations de substrat et de biomasse ainsi qu'aux variations de celles-ci. Il devient maintenant intéressant d'étudier la capacité de cette même méthode à déterminer les paramètres intervenant dans le modèle utilisé pour décrire cette activité microbienne. Une mesure directe des concentrations est généralement employée pour ce faire, toutefois, la relation obtenue à partir des résultats du chapitre précédent, pour des réactions générant de la chaleur, permet l'utilisation de senseurs de température. Cette approche présente plusieurs avantages dont un coût financier plus faible, la simplicité de ne requérir que des relevés de température, la possibilité de les réaliser in situ et l'utilisation de méthodes qui ne perturbent pas les réactions. L'objectif de ce chapitre consiste donc à déterminer le taux de croissance spécifique μ à partir des données fournies par des senseurs de température.

6.1 Définition du problème

On étudie à nouveau les mêmes cas qu'on a traité au chapitre V, mais cette fois-ci pour déterminer μ . Rappelons que le réacteur biologique est fermé et soumis aux conditions limites représentées à la figure 5.1. Les conditions initiales uniformes sont : $T = \psi = 0$, $S = 1$ et $X = 2,5 \times 10^{-2}$. Les effets de dilatation du fluide sous l'effet des concentrations de substrat et de biomasse sont négligeables, d'où l'hypothèse $N_S = N_X = 0$. Toutefois, contrairement au problème précédent, les équations de transport de masse des problèmes adjoint et de sensibilité demeurent couplées. Il est alors nécessaire de résoudre toutes les

équations. La simplification effectuée au chapitre V n'est plus valable du fait des relations entre les concentrations du substrat et de la biomasse présentes dans les termes sources ainsi que des termes de convection des équations de transports.

Dans un premier temps, des simulations préliminaires ont été réalisées en utilisant les mêmes paramètres de résolution numérique que ceux du chapitre V. Ces tests ont révélé que les relevés de température n'étaient pas très sensibles aux petites variations de μ , ce qui sera discuté en détail dans les prochaines sections. Toutefois, deux constatations importantes s'imposent : la convergence nécessite de très petits pas de temps, mais surtout la sélection d'une durée de simulation relativement courte. Pour illustrer ce dernier phénomène, la figure 6.1 présente les solutions inverses obtenues pour des paramètres constants à $Ra = 0,25$. Le taux de croissance est donc constant et l'approximation initiale correspond à 90% de la valeur recherchée ($\mu^0 = 90\% \mu$), alors qu'on utilise la valeur exacte au temps final ($\mu(t_f)^0 = \mu(t_f)$), ce qui permet l'emploi de l'algorithme du gradient conjugué régulier. Avec un pas de temps de 5×10^{-5} et un temps final de simulation de 0,125, les solutions oscillent très rapidement après seulement 7 itérations. Les solutions présentées après 33 et 34 itérations représentent ces oscillations et leur divergence par rapport à la solution exacte. De même, l'approximation initiale ne permet pas d'améliorer cette convergence comme le démontre la figure 6.2 sur laquelle les solutions obtenues après 24 et 25 itérations avec les mêmes paramètres sont présentées pour une approximation initiale équivalente à 95% de la valeur exacte. En réduisant le temps final de simulation, on améliore sensiblement les résultats. En effet, la figure 6.3 illustre la solution obtenue pour le même problème à partir d'une approximation initiale nulle et en utilisant la combinaison de 100 itérations de chacun des algorithmes régulier et modifié. Cette fois, le temps final de simulation est fixé à 0,10. L'évolution de l'erreur, également tracée sur la figure, illustre que la convergence avec l'algorithme modifié ne peut être atteinte et que la solution avec l'algorithme régulier diverge franchement après 60 itérations. Finalement, la solution converge pour ce problème en 65 itérations avec l'algorithme modifié suivies de 14 itération avec

l'algorithme régulier lorsque le temps final est réduit à 0,025 tel que le démontre la figure 6.4.

Par conséquent, on continue d'utiliser un maillage uniforme de 51 nœuds par 51 nœuds pour la résolution numérique en fixant le pas de temps à 5×10^{-5} . Le domaine temporel $t = 0$ à t_f pour la simulation est alors divisé en plusieurs intervalles de temps afin d'obtenir la convergence. Pour minimiser le temps de calcul global, un schéma explicite d'ordre un dans le temps est utilisé. Cet emploi ne compromet aucunement la convergence, car le pas de temps est relativement très petit. Puisqu'aucune information préalable n'est disponible en ce qui a trait à la valeur du taux de croissance pour le premier intervalle, l'approximation initiale est simplement $\mu^0 = 0$. Toutefois, la valeur finale de la simulation est utilisée comme approximation initiale pour le prochain intervalle. Finalement, lorsque les données des senseurs de température sont exactes, le critère de convergence est fixé à 5×10^{-3} .

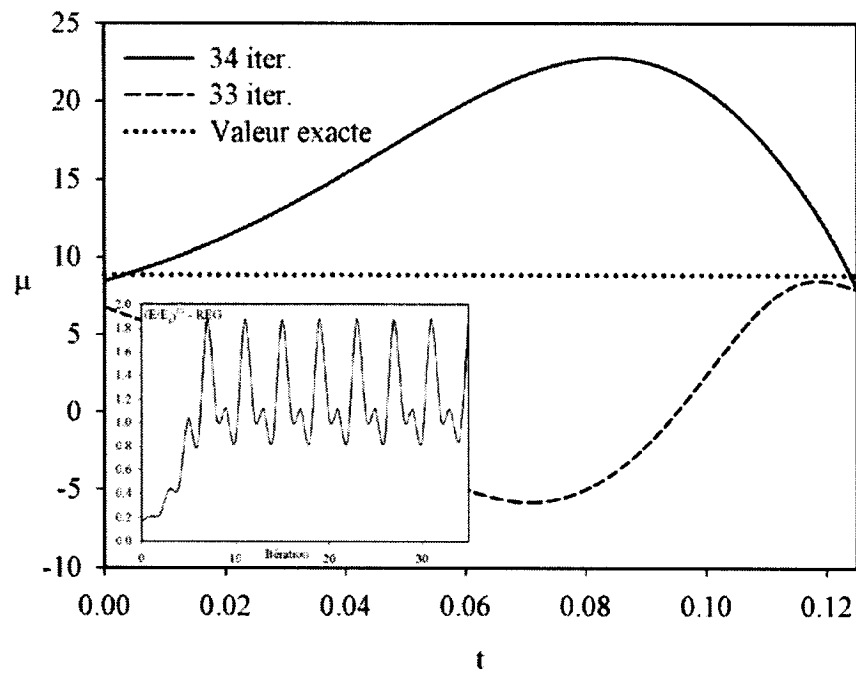


Figure 6.1 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,125$, $\mu_0(t) = 90\% \mu(t)$

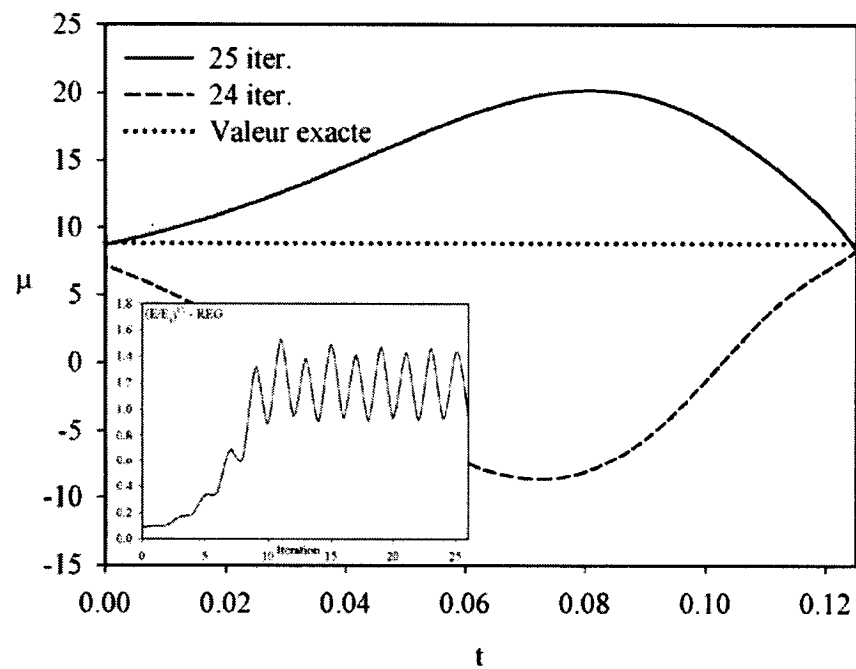


Figure 6.2 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,125$, $\mu_0(t) = 95\% \mu(t)$

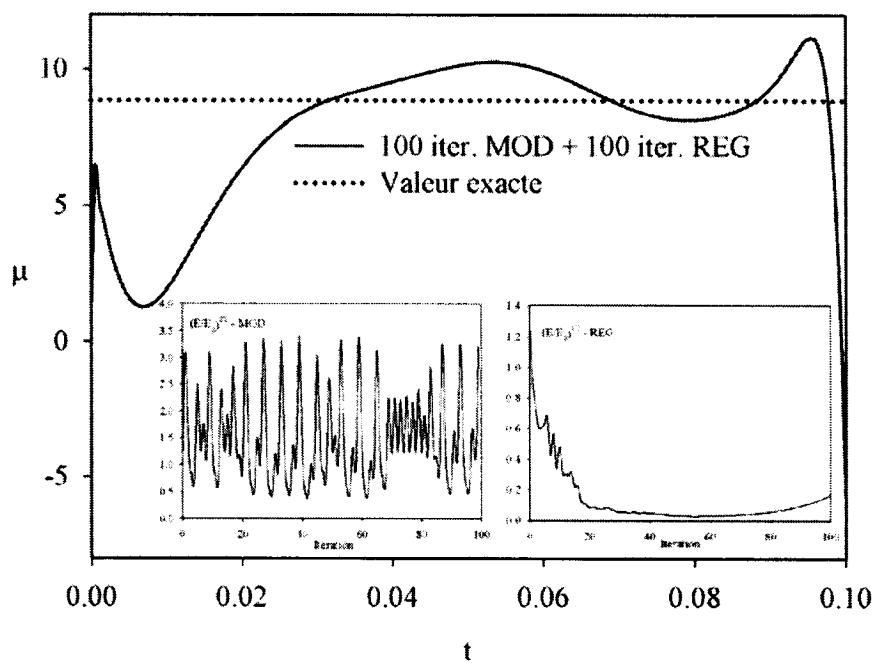


Figure 6.3 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,100$, $\mu_0(t) = 0$

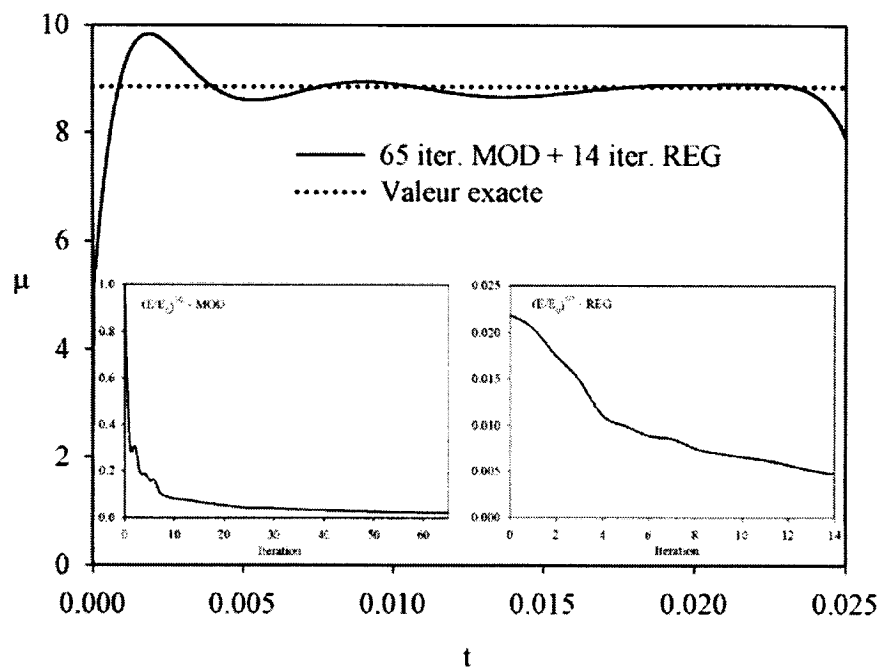


Figure 6.4 : Taux de croissance μ en fonction du temps, $t_f = 0,025$, $\mu_0(t) = 0$

6.2 Analyse de sensibilité

Les résultats présentés précédemment qui illustrent la difficulté de l'algorithme à converger s'expliquent d'une part par la faible sensibilité des températures au taux de croissance et d'autre part, par la complexité de l'expression du gradient. En effet, l'équation 2.85 du gradient de l'erreur pour la détermination du taux de croissance fait intervenir les concentrations de substrat et de biomasse directes et adjointes en plus du champ de température adjointe. Cette expression, nettement plus complexe que celle employée pour la détermination de la source de chaleur, est beaucoup plus affectée par le manque de sensibilité des températures. En effet, on peut envisager physiquement que l'utilisation des relevés de température pour évaluer le taux de croissance apparaît comme une approche très indirecte. De plus, le taux de croissance affecte, de façon plus ou moins importante toutes les équations.

En ce qui concerne la sensibilité des relevés de température au taux de croissance μ , l'exemple suivant est éloquent. Des simulations sont effectuées à $Ra = 0,25$ lorsque les paramètres sont maintenus constants avec les taux de croissances présentés à la figure 6.5, qui correspondent à la valeur de base utilisée à $\pm 5\%$ près. Les températures correspondantes sont illustrées à la figure 6.6. On remarque que cette variation de 5% n'affecte pas significativement les températures avant $t = 0,1$. Autrement dit, quelle que soit la valeur du taux de croissance, le champ de température correspondant demeure pratiquement identique quand la réaction débute. Ce phénomène correspond également à la faible consommation de substrat et de croissance microbienne observées à la figure 6.7. Cette figure révèle également que les solutions qui seraient obtenues par des senseurs de concentration à la place des senseurs de température seraient également similaires et ne permettraient pas de déterminer avec plus de précision le taux de croissance. La sensibilité correspondante de la source de chaleur, présentée à la figure 6.8, permet d'effectuer le même constat.

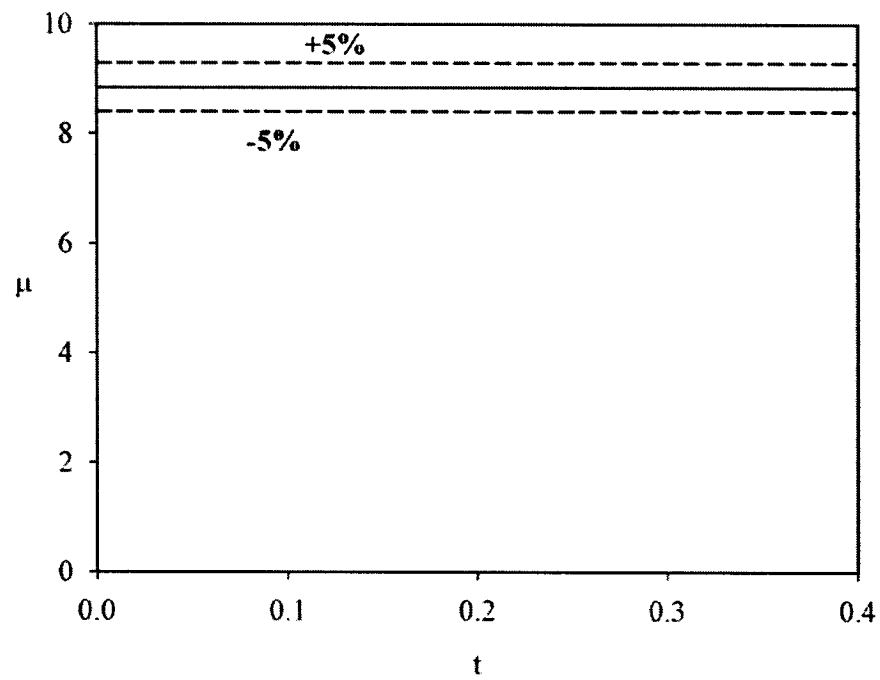


Figure 6.5 : Taux de croissance μ en fonction du temps, variations de 5% de μ

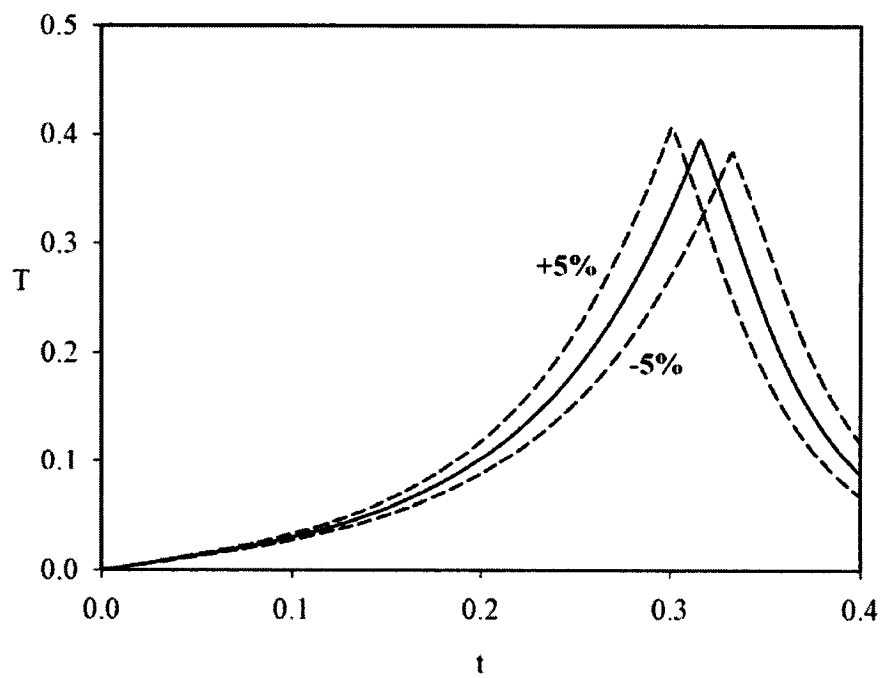


Figure 6.6 : Température en fonction du temps, variations de 5% de μ

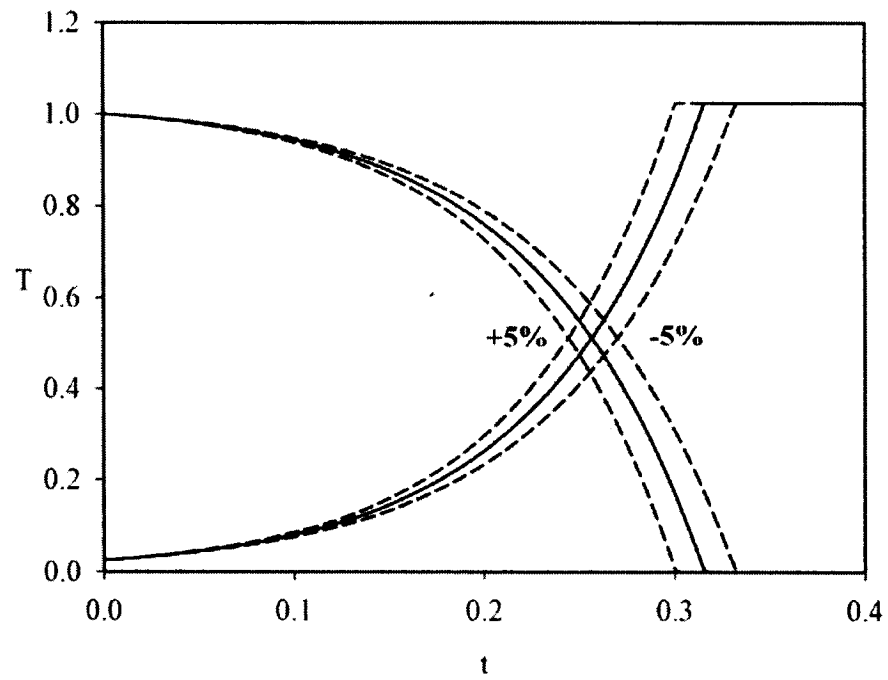


Figure 6.7 : Concentrations de S et X en fonction du temps, variations de 5% de μ

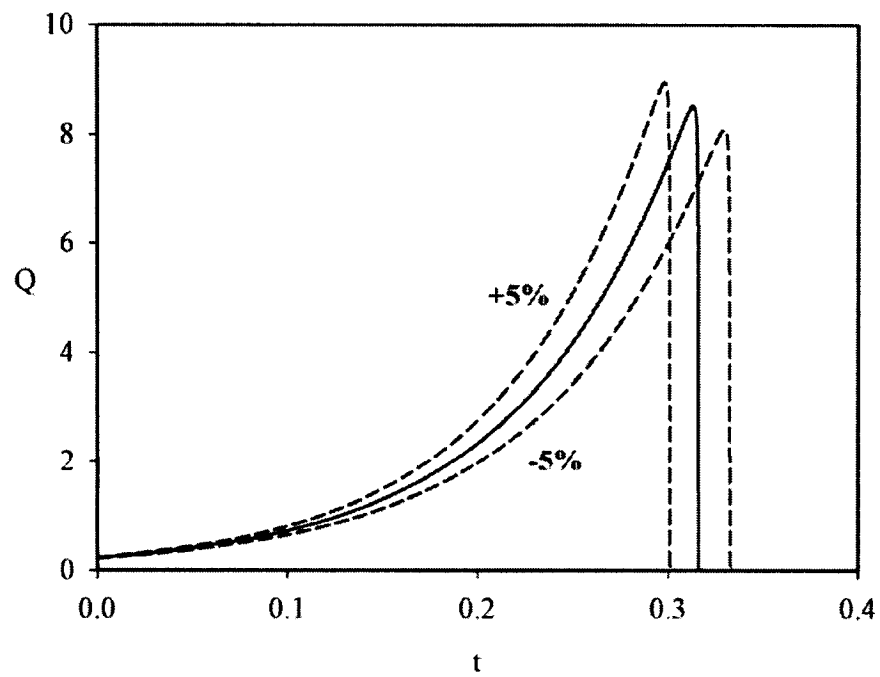


Figure 6.8 : Source de chaleur en fonction du temps, variations de 5% de μ

6.3 Convection dans une cavité de petites dimensions

On étudie en premier lieu le problème pour un nombre de Rayleigh égal à 0,25 avec les paramètres présentés au tableau 5.1. Tel qu'exposé au chapitre précédent, pour des paramètres constants, la source de chaleur ainsi que les champs de concentrations de substrat et de biomasse sont uniformes et ne varient qu'avec le temps. La génération de chaleur engendre une convection naturelle caractérisée par la formation de deux cellules de convection circulant en sens inverse. La figure 6.9 montre la valeur exacte et les solutions inverses obtenues pour μ avec des senseurs placés à tous les nœuds ainsi qu'avec un seul senseur. Sept subdivisions du domaine temporel sont nécessaires afin d'assurer la convergence. Le premier intervalle de temps de la solution, correspondant à des senseurs à tous les nœuds, nécessite 44 itérations de l'algorithme du gradient conjugué modifié, suivies de 71 itérations de l'algorithme régulier, afin de satisfaire le critère d'arrêt. Les solutions obtenues au début et à la fin du premier intervalle apparaissent diverger légèrement de la valeur exacte alors que le reste de la solution paraît concorder relativement bien. Ce phénomène illustre bien la discussion sur la sensibilité présentée précédemment. Pour les paramètres constants, le nombre d'itérations, présenté au tableau 6.1, décroît rapidement pour les intervalles subséquents, alors que l'approximation initiale s'approche de la valeur exacte de μ .

Puisque la valeur du taux de croissance est constante, un seul senseur suffit en principe pour son évaluation. Cette solution inverse, également tracée à la figure 6.9, converge plus rapidement, en seulement 6 itérations de l'algorithme du gradient conjugué modifié, suivies de 26 itérations de l'algorithme régulier pour le premier intervalle. Toutefois, elle paraît moins précise et oscille de façon plus importante que la solution inverse avec des senseurs placés à tous les nœuds du maillage.

Tableau 6.1 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$ et paramètres constants

Intervalle	Senseurs à tous les nœuds		1 senseur	
	Modifié	Régulier	Modifié	Régulier
1	44	71	6	26
2	9	22	8	15
3	2	7	4	7
4	5	0	3	5
5	1	0	3	7
6	0	0	3	3
7	0	0	1	0

Les solutions directe et inverses correspondantes pour le profil de température au centre de la cavité sont présentées à la figure 6.10. Lorsque la réaction se déroule dans le réacteur, la température augmente jusqu'à l'atteinte d'un maximum et diminue ensuite lorsque la réaction cesse. On remarque que les écarts de la solution inverse pour le taux de croissance n'affectent aucunement les profils de température qui concordent parfaitement avec ceux de la solution directe. Ce manque de sensibilité illustre bien la rigidité du problème traité.

La figure 6.11 décrit l'évolution temporelle des concentrations de substrat et de biomasse. Comme pour les profils de température, les solutions inverses concordent avec les solutions directes. La biomasse croît en consommant le substrat et lorsque celui-ci disparaît entièrement, la population de biomasse décroît proportionnellement au taux de mortalité K_D . Par conséquent, la solution inverse ne converge plus lorsqu'il n'y a plus de substrat puisque la température à l'intérieur de la cavité ne dépend plus de μ , mais uniquement des conditions imposées aux parois. Par contre, la source de chaleur, présentée à la figure 6.12, semble plus sensible aux variations de μ , mais seulement vers la fin de la simulation. En effet, les variations plus importantes, présentes au début de la

réaction, n'affectent que peu les profils de Q , qui sont autrement en accord avec la solution directe.

La figure 6.13 présente les lignes de courant et les isothermes pour les solutions directe et inverse à $t = 0,25$. On constate, une fois de plus, que les distributions inverses représentent parfaitement celles des solutions directes.

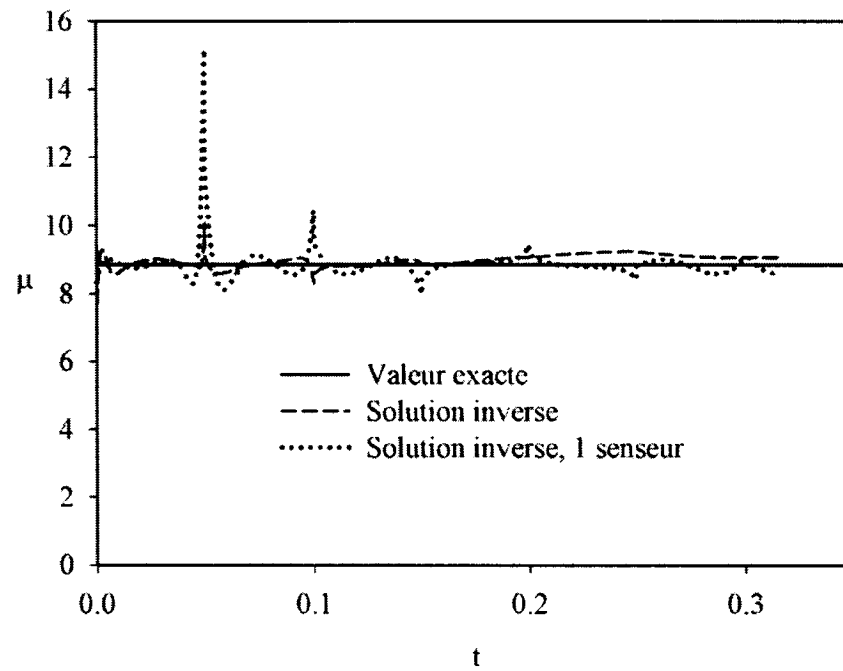


Figure 6.9 : Taux de croissance μ en fonction de temps, paramètres constants, $Ra = 0,25$

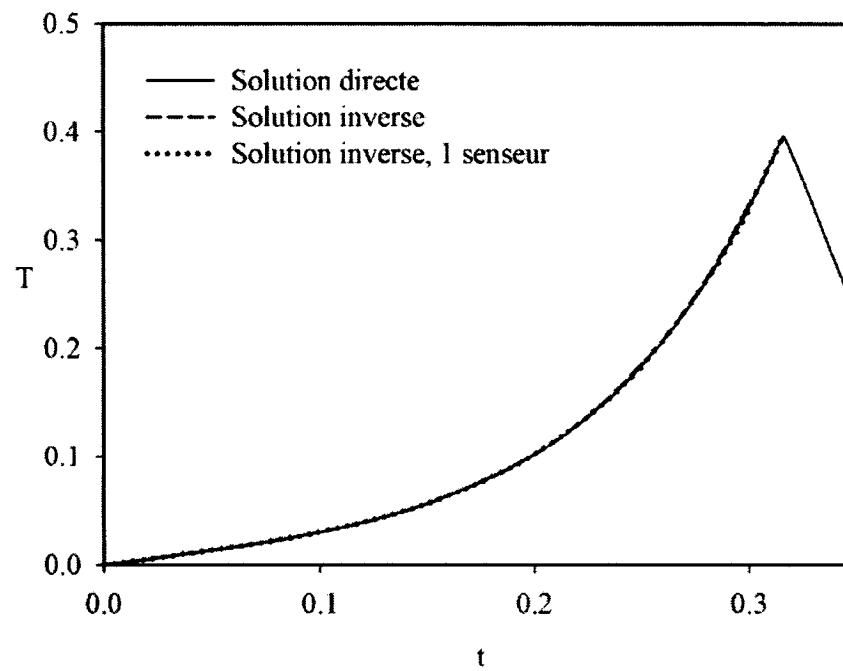


Figure 6.10 : Température en fonction de t au centre, paramètres constants, $Ra = 0,25$

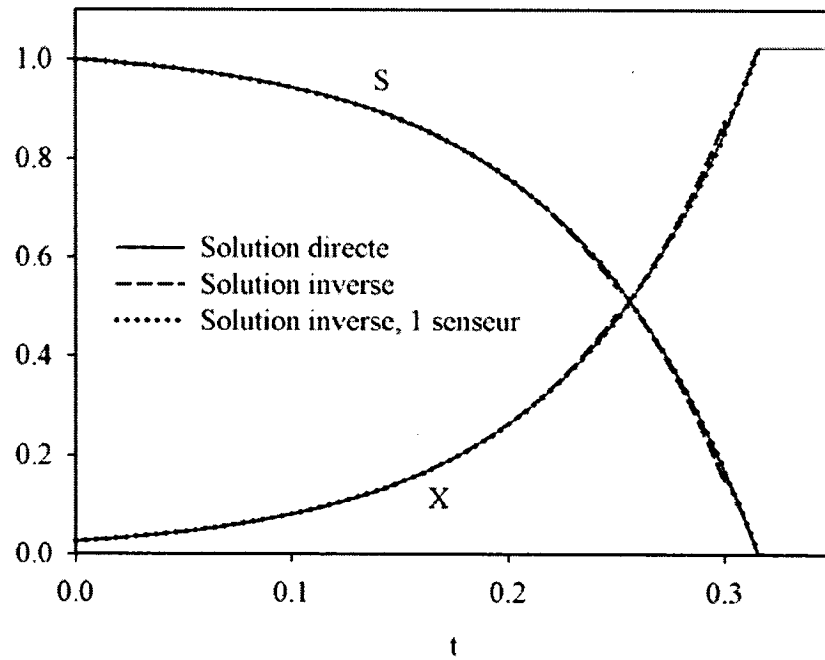


Figure 6.11 : Concentrations de S et X en fonction de t, paramètres constants, $Ra = 0,25$

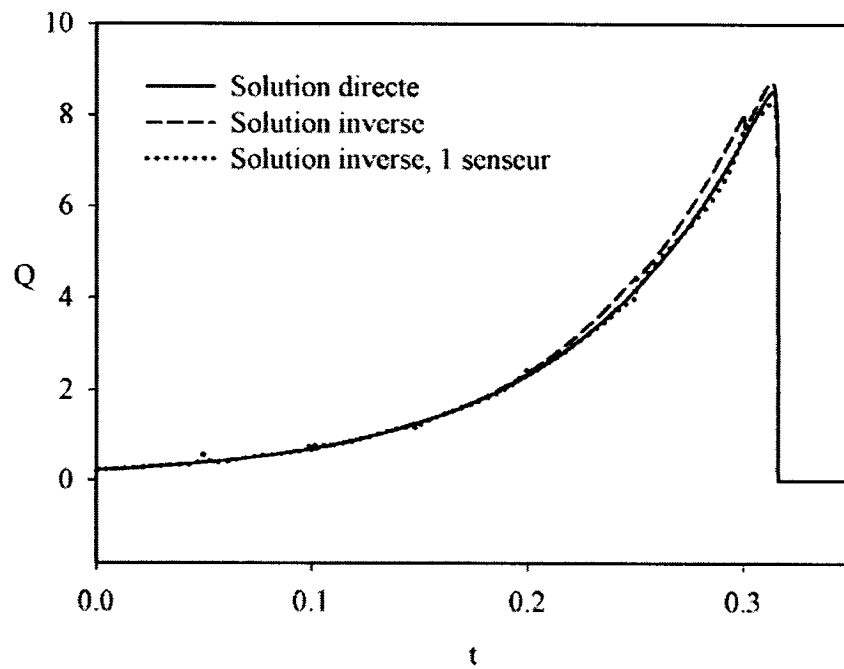


Figure 6.12 : Source de chaleur en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 0,25$

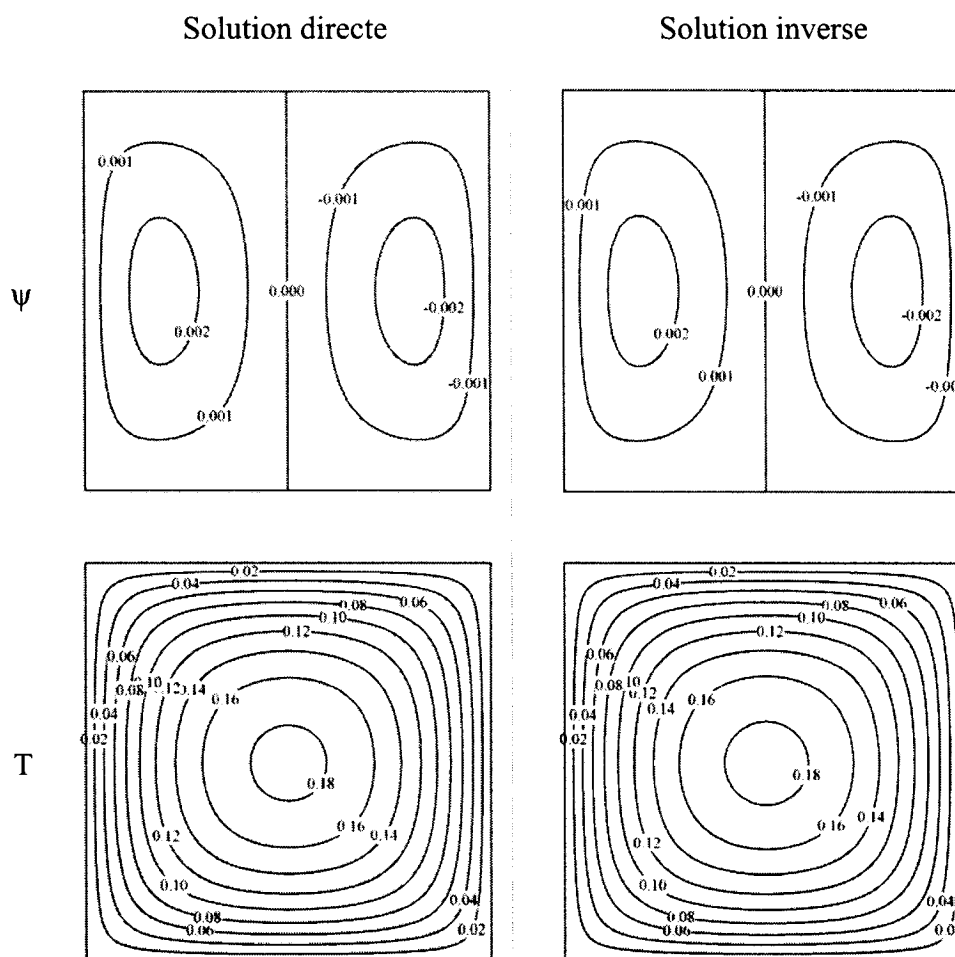


Figure 6.13 : Lignes de courant et isothermes à $t = 0,25$, paramètres constants, $Ra = 0,25$

Lorsque les paramètres varient en fonction de la température, les distributions des variables Q , T , S , et X sont alors non uniformes au cours de la réaction, comme le démontrent les résultats du chapitre V. Le taux de croissance à $t = 1,125$, lorsque les variations de température sont les plus importantes, est illustré à la figure 6.14. On remarque que les solutions directe et inverse qui y sont présentées divergent près des parois, reproduisant ainsi la même discontinuité observée au chapitre V pour la source de chaleur. De surcroît, ce phénomène se reproduit de façon marquée dans les coins de la cavité lors de la détermination de μ . Toutefois, le reste de la distribution correspond à celle de la solution directe. Le taux de mortalité, qui varie également avec la

température suivant la loi d'Arrhenius, également présenté à la figure 6.14 est par ailleurs très bien reproduit par la solution inverse. Les isothermes et les lignes de courant correspondantes pour les problèmes direct et inverse sont illustrées à la figure 6.15, tandis que les isoconcentrations de S et de X sont représentées à la figure 6.16. Ces dernières solutions inverses concordent en tout points avec les solutions directes.

Tableau 6.2 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$, paramètres variables

Intervalle	Modifié	Régulier	Intervalle	Modifié	Régulier
1	68	12	13	0	0
2	4	0	14	0	0
3	0	0	15	0	0
4	0	0	16	0	0
5	0	0	17	1	0
6	0	0	18	1	0
7	0	0	19	1	0
8	0	0	20	1	0
9	0	0	21	1	0
10	0	0	22	1	0
11	0	0	23	2	0
12	0	0	24	1	0

L'évolution du taux de croissance au centre de la cavité est décrite à la figure 6.17. On remarque que le tracé de la solution inverse correspond à celui de la solution directe, sauf au tout début de la réaction. De petits écarts sont également présents dans la zone de forte croissance, mais l'ensemble de la solution inverse correspond de façon très satisfaisante au taux de croissance recherché. Toutefois, 24 subdivisions temporelles sont nécessaires afin d'atteindre la convergence. La première solution converge après 68 itérations de l'algorithme du gradient conjugué modifié, suivies de 12 itérations de

l'algorithme régulier. Le nombre d'itérations nécessaires à la convergence pour les différents intervalles de temps est fourni au tableau 6.2.

On remarque à la figure 6.18 que les profils de température au centre de la cavité des solutions directe et inverse coïncident parfaitement durant toute la réaction, ce qu'on constate également à la figure 6.19 pour les profils des concentrations de substrat et de biomasse. On note également sur la figure 6.20 que dans le cas des paramètres variables, la source de chaleur (ou la consommation de substrat) est encore mieux reproduite par la solution inverse qu'elle ne l'était avec des paramètres constants, même lorsque son intensité est à son maximum.

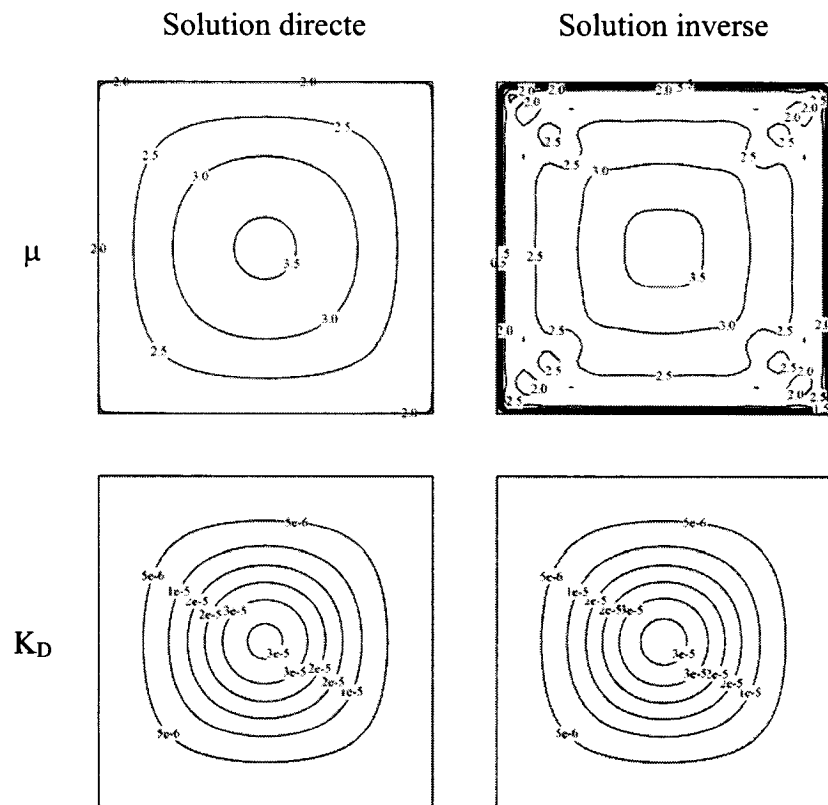


Figure 6.14 : Taux de croissance μ et de mortalité K_D à $t = 1,125$, paramètres variables,

$$Ra = 0,25$$

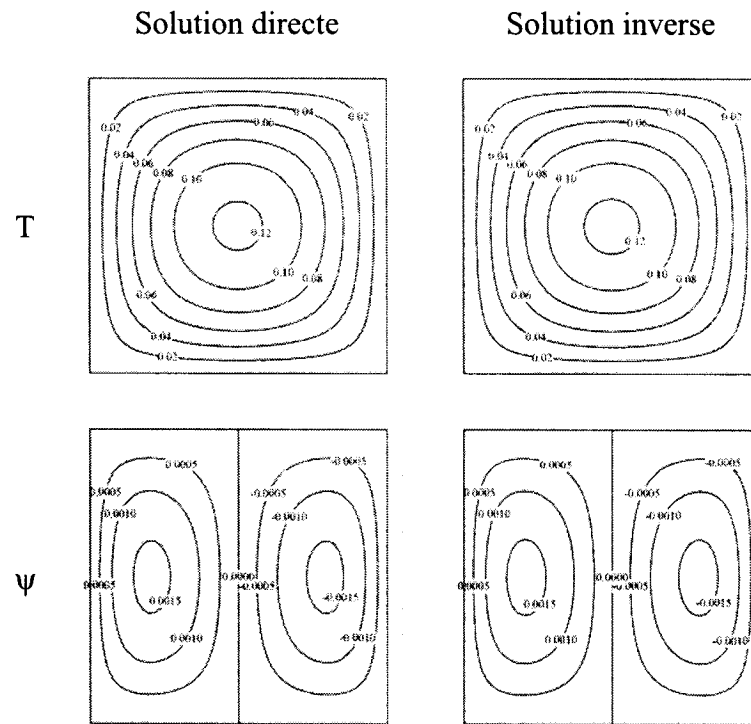


Figure 6.15 : Isothermes et lignes de courant à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$

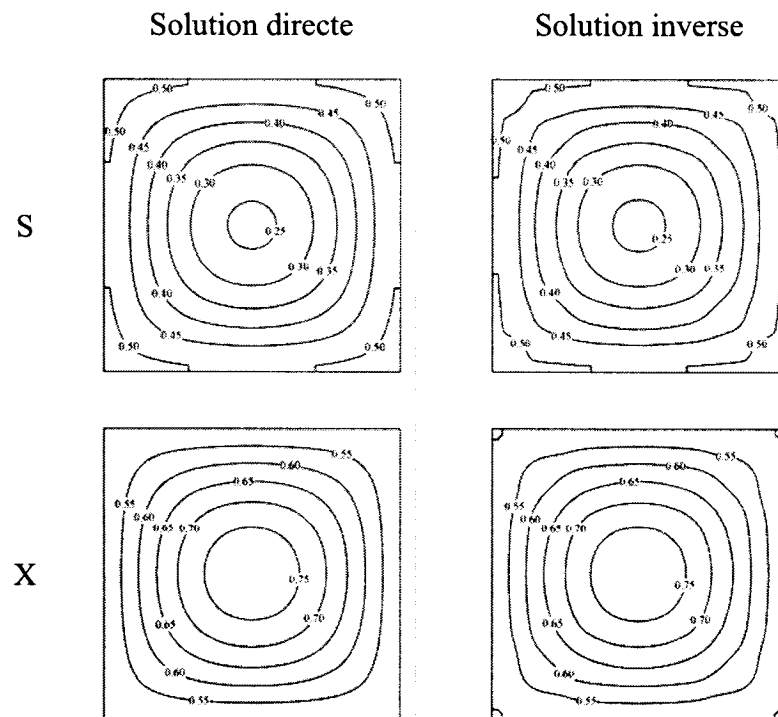


Figure 6.16 : Isoconcentrations de S et de X à $t = 1,125$, paramètres variables, $Ra = 0,25$

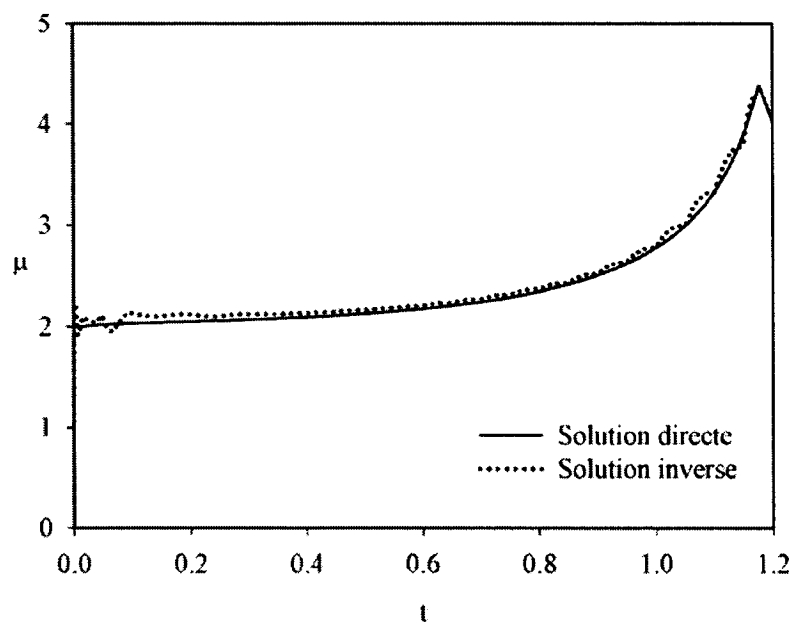


Figure 6.17 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre, paramètres variables,
 $Ra = 0,25$

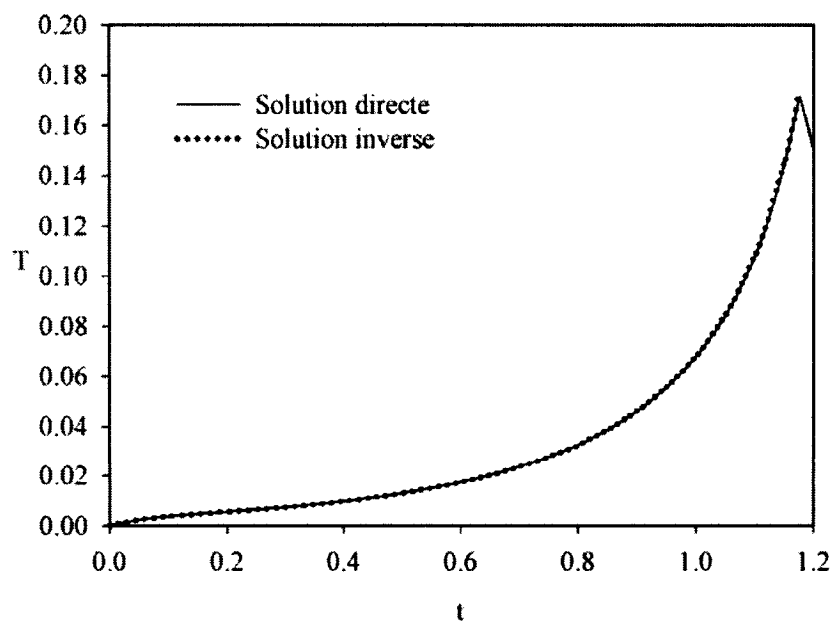


Figure 6.18 : Température en fonction du temps au centre, paramètres variables,
 $Ra = 0,25$

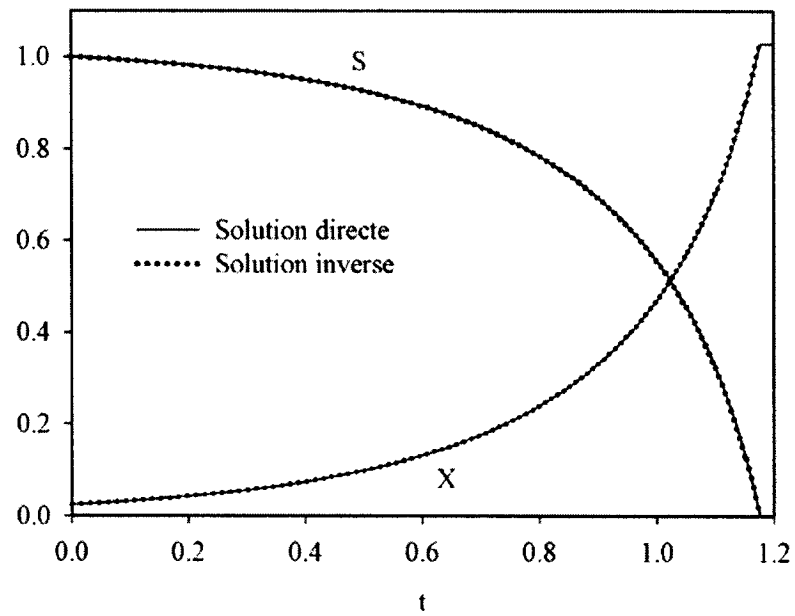


Figure 6.19 : Concentrations de S et de X en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 0,25$

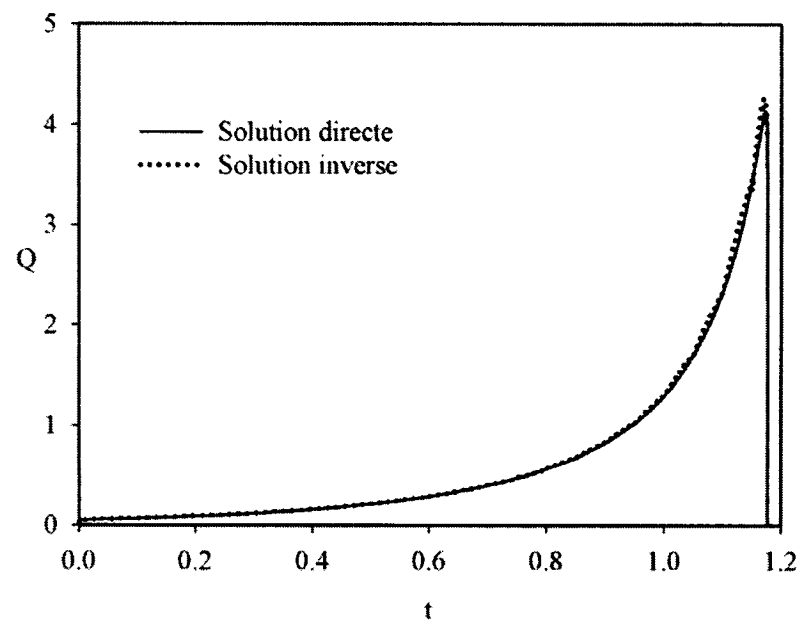


Figure 6.20 : Source de chaleur en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 0,25$

6.4 Convection dans une cavité de plus grandes dimensions

Lorsque la dimension caractéristique de la cavité est portée à 1 m pour obtenir $Ra = 2,5$ et à 10 m pour obtenir $Ra = 25$, le taux de croissance avec les paramètres constants peut encore être déterminé avec un seul senseur. Les figures 6.21 et 6.22 présentent la valeur exacte de μ pour $Ra = 2,5$ et 25 respectivement ainsi que les solutions inverses obtenues avec des senseurs à tous les nœuds du maillage et également un seul senseur placé au centre de la cavité. On remarque au tableau 6.3 que les solutions inverses obtenues avec des senseurs placés en tous points de calcul sont nettement plus précises. Elles nécessitent toutefois plus d'itérations de l'algorithme modifié, ce qui augmente significativement le temps de calcul. Alors que la solution inverse pour $Ra = 2,5$ coïncide très bien avec la solution exacte malgré les légères oscillations présentes au début de la réaction, la solution avec un seul senseur montre des oscillations d'amplitude plus importante au cours des 4 premiers intervalles de la solution. À $Ra = 25$, la précision des solutions inverses diminue alors que les oscillations perdurent durant toute la réaction. Il est également intéressant de noter que, pour les deux échelles, les solutions inverses générées avec un seul senseur présentent des profils similaires dont la convergence est identique.

Les figures 6.23 et 6.24 décrivent l'évolution de la température au centre de la cavité. On remarque qu'encore une fois, toutes les solutions inverses concordent parfaitement avec les solutions directes, malgré les divergences plus ou moins importantes des taux de croissance. La même concordance se manifeste pour les concentrations de substrat et de biomasse exposées aux figures 6.25 et 6.26. De surcroît, l'évolution de la source de chaleur, tracée aux figures 6.27 et 6.28, est également reproduite avec plus de précision et d'exactitude que pour $Ra = 0,25$, et ce, jusqu'à l'épuisement du substrat, après la baisse abrupte de la source de chaleur.

Tableau 6.3 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 2,5$ et 25 , paramètres constants

Intervalle	$Ra = 2,5$				$Ra = 25$			
	N senseurs		1 senseur		N senseurs		1 senseur	
	MOD	REG	MOD	REG	MOD	REG	MOD	REG
1	42	34	6	37	19	19	6	37
2	12	3	8	15	4	2	8	15
3	0	0	8	3	3	3	8	3
4	0	0	5	0	3	0	5	0
5	0	0	1	0	2	0	1	0
6	0	0	0	0	2	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0

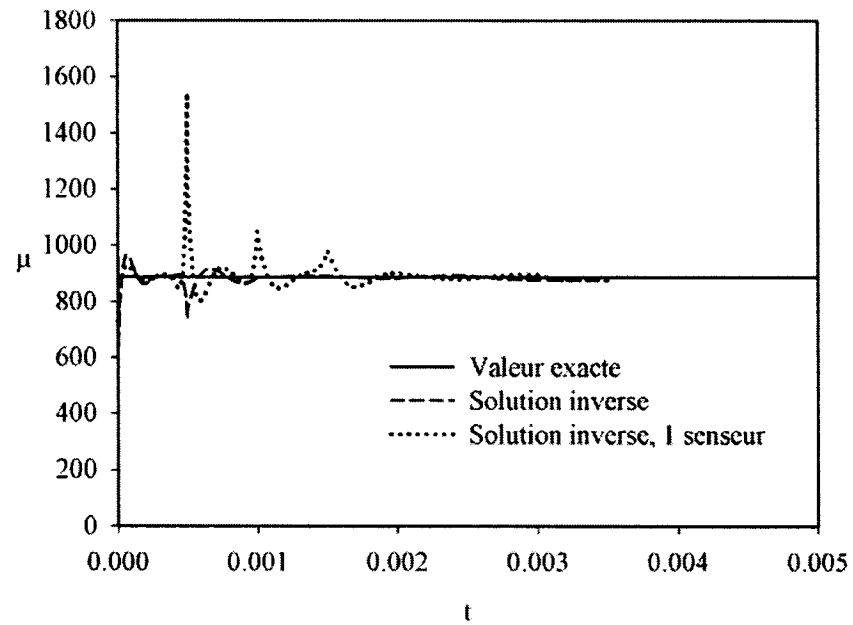


Figure 6.21 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 2,5$

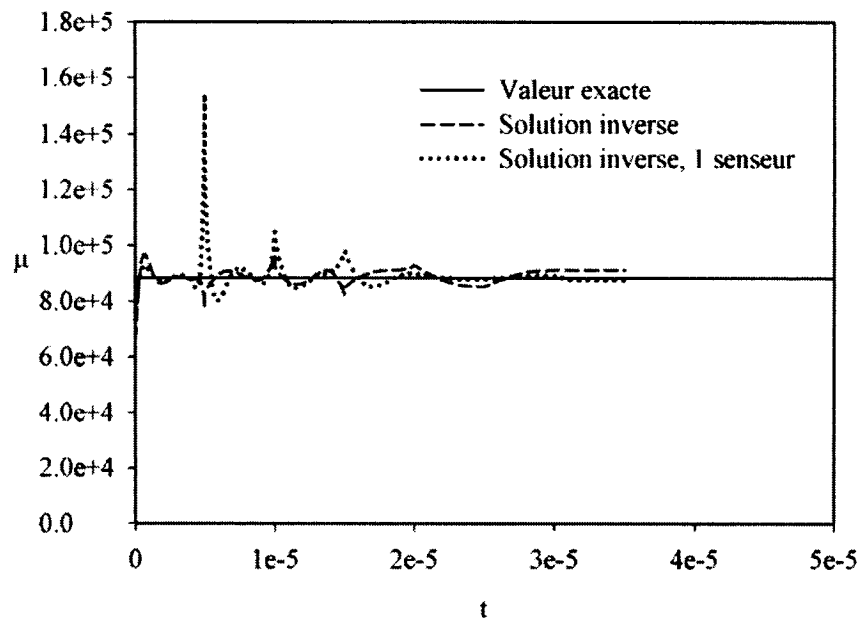


Figure 6.22 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 25$

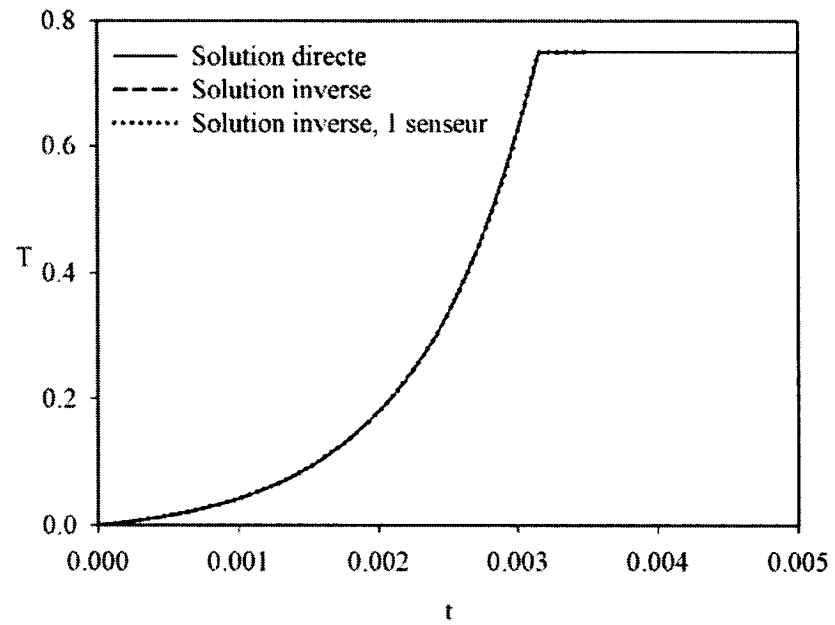


Figure 6.23 : Température en fonction du temps au centre, paramètres constants,
 $Ra = 2,5$

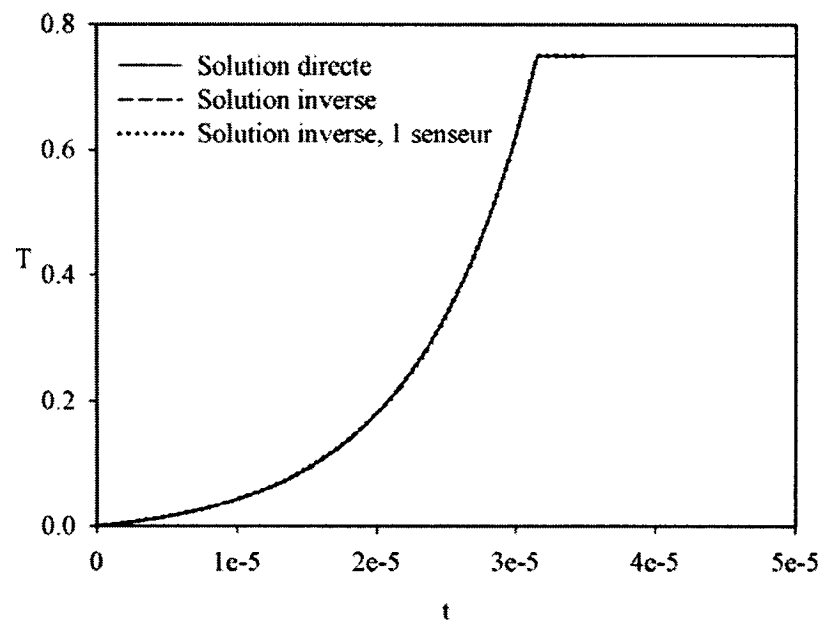


Figure 6.24 : Température en fonction du temps au centre, paramètres constants, $Ra = 25$

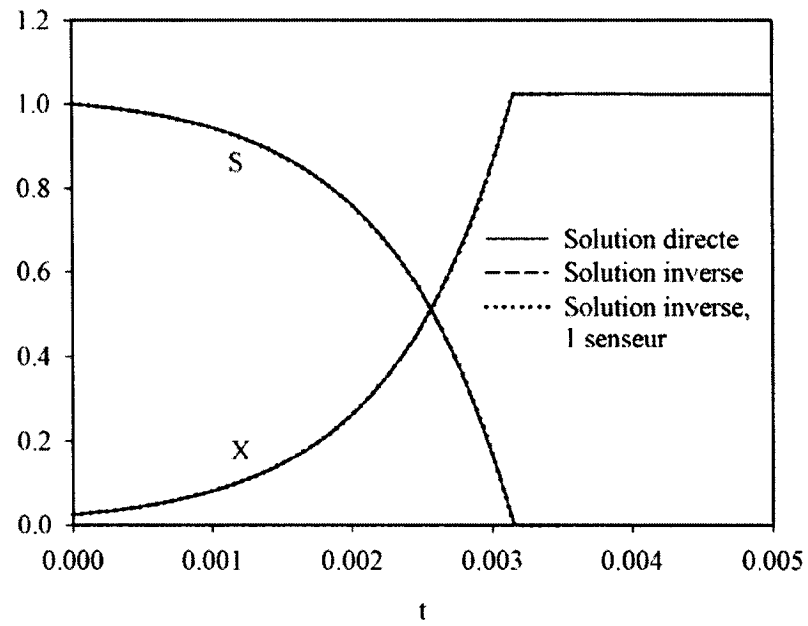


Figure 6.25 : Concentration de S et de X en fonction du temps, paramètres constants,
 $Ra = 2,5$

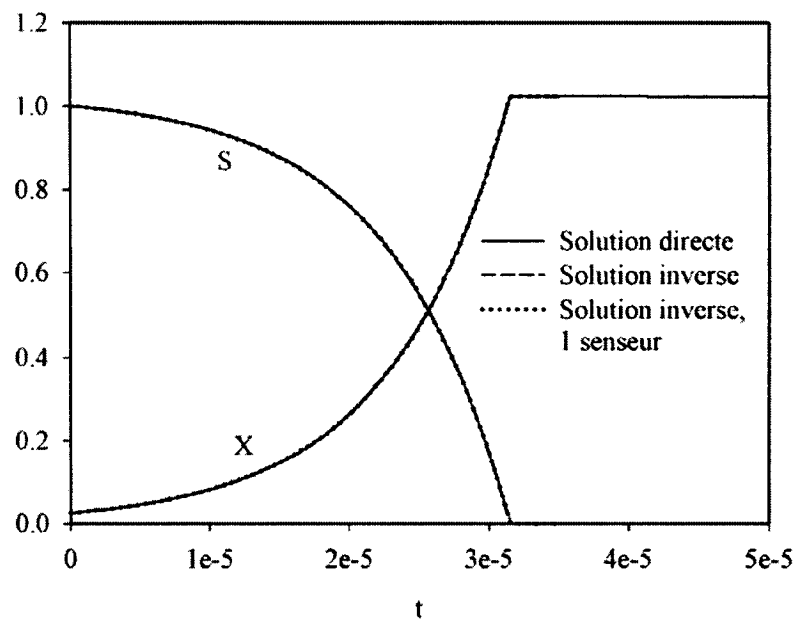


Figure 6.26 : Concentration de S et de X en fonction du temps, paramètres constants,
 $Ra = 25$

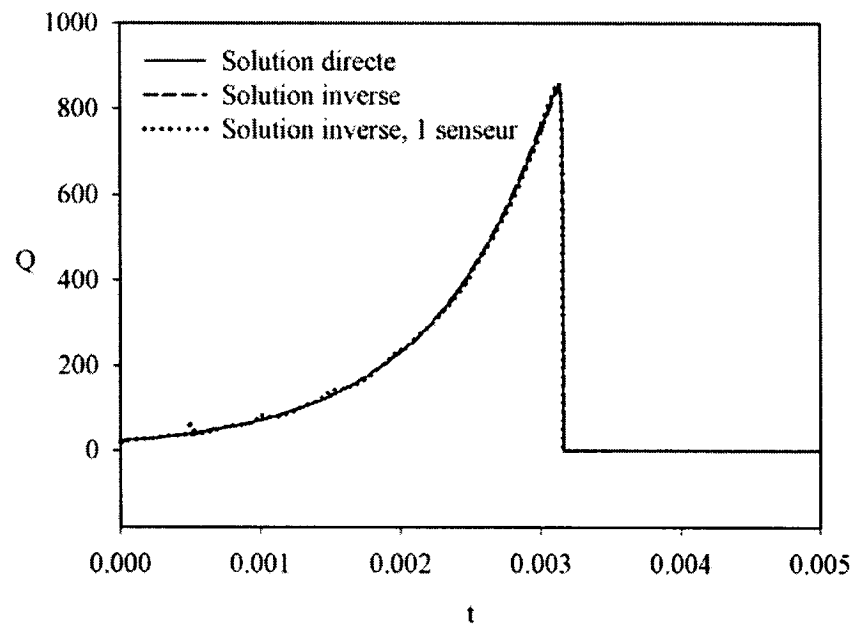


Figure 6.27 : Source de chaleur en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 2,5$

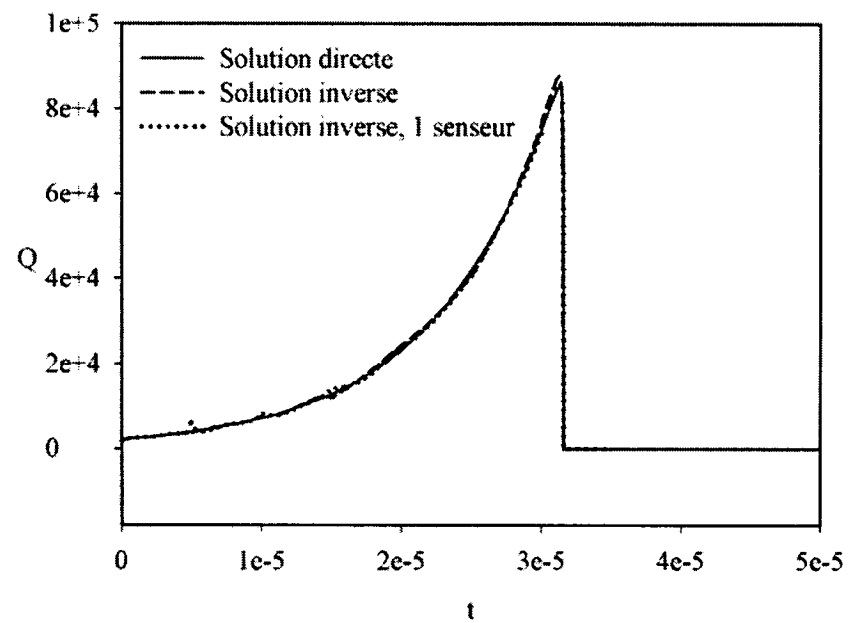


Figure 6.28 : Source de chaleur en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 25$

Lorsque la dimension caractéristique de la cavité est plus importante, la convection devient plus intense et l'influence des conditions limites au cours de la réaction est moins prépondérante. Par conséquent, la répartition des différentes quantités dans la région centrale du réacteur devient uniforme et ce, même si les paramètres varient en fonction de la température. Ce phénomène, traité en détail au chapitre V, a permis de déterminer le profil de la source de chaleur en n'utilisant qu'un seul senseur. Les solutions directes et inverses pour μ au centre de la cavité pour des paramètres variables sont présentées aux figures 6.29 et 6.30, tandis que le nombre d'itérations nécessaires à la convergence est colligé à l'intérieur du tableau 6.4. Tant les solutions inverses obtenues avec des senseurs placés à tous les nœuds du maillage que celles produites avec un seul senseur concordent très bien avec la solution directe. Toutefois, les solutions inverses à plusieurs senseurs nécessitent plus d'itérations pour satisfaire le critère de convergence que celles produites à partir d'un seul senseur. Ces dernières solutions se révèlent similaires pour $Ra = 2,5$ et 25 et convergent avec le même nombre d'itérations.

Pour toutes les solutions inverses obtenues pour les paramètres variables à $Ra = 2,5$ et 25 , quel que soit le nombre de senseurs utilisés et leur position, les profils de température au centre de la cavité, illustrés aux figures 6.31 et 6.32, de même que les concentrations de substrat et de biomasse, présentées aux figures 6.33 et 6.34, concordent exactement avec les solutions directes. Les évolutions temporelles de la génération de chaleur au centre de la cavité sont également tracées aux figures 6.35 et 6.36 et coïncident de façon similaire à μ avec leurs homologues directes.

La figure 6.37 révèle de façon éloquentte cette concordance entre les solutions directe et inverse obtenues avec des senseurs à tous les nœuds du maillage pour $Ra = 2,5$ à $t = 7,8 \times 10^{-3}$. Les courbes de niveau de μ , K_D et Q_y sont représentées. Les isothermes, les isoconcentrations et les lignes de courant au même moment sont représentées à la figure

6.38 et correspondent également aux solutions directes. On remarque que même les forts gradients aux frontières sont correctement captés par les solutions inverses.

Tableau 6.4 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 2,5$ et 25, paramètres variables

Intervalle	$Ra = 2,5$				$Ra = 25$			
	N senseurs		1 senseur		N senseurs		1 senseur	
	MOD	REG	MOD	REG	MOD	REG	MOD	REG
1	95	9	13	8	13	12	13	8
2	1	0	4	0	1	0	4	0
3	1	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	1	0	1	0	1	0
5	1	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0
11	1	0	1	0	1	0	1	0
12	1	0	1	0	1	0	1	0
13	1	0	1	0	1	0	1	0
14	1	0	1	0	1	0	1	0
15	3	0	2	0	3	0	2	0
16	11	9	5	11	13	3	5	11
17	3	4	4	3	2	1	4	3

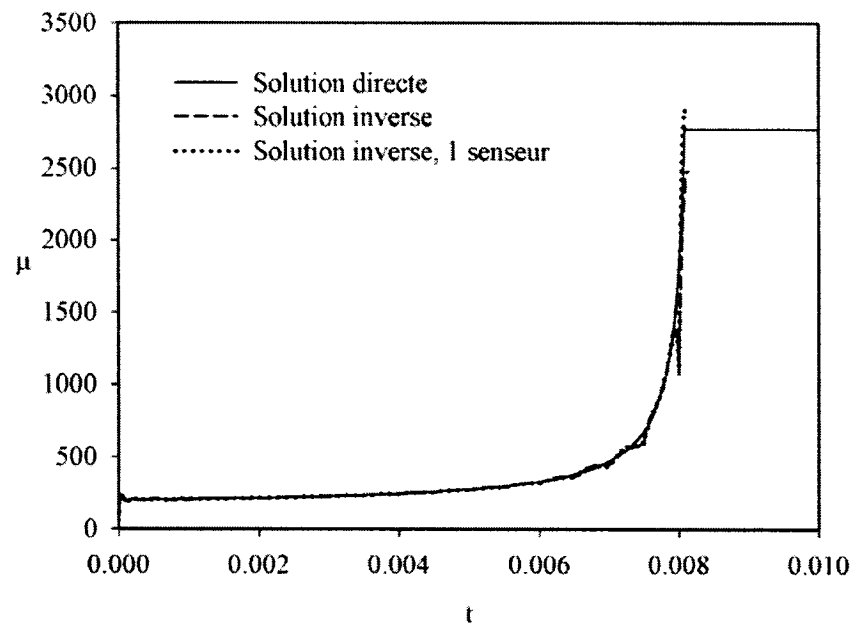


Figure 6.29 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre, paramètres variables,
 $Ra = 2,5$

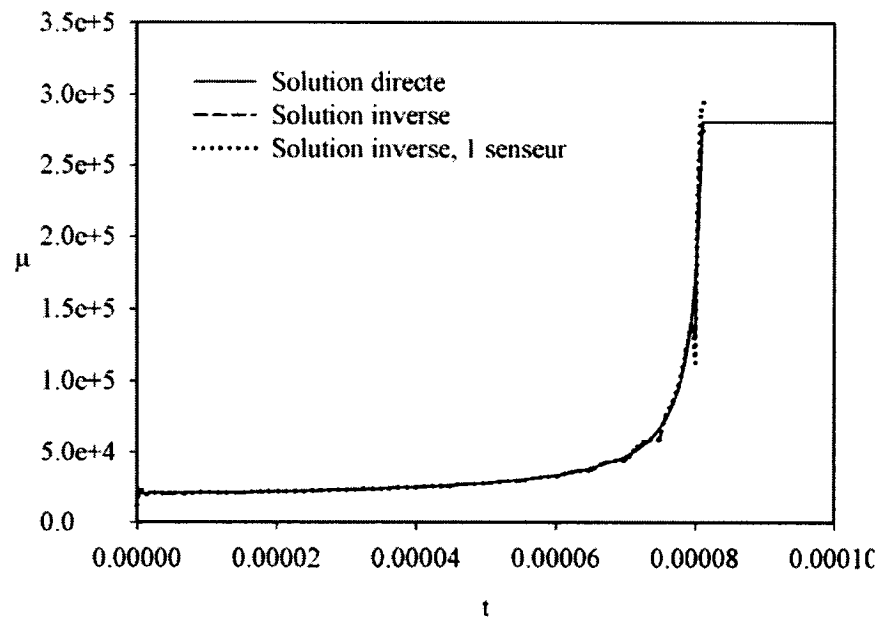


Figure 6.30 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre, paramètres variables,
 $Ra = 25$

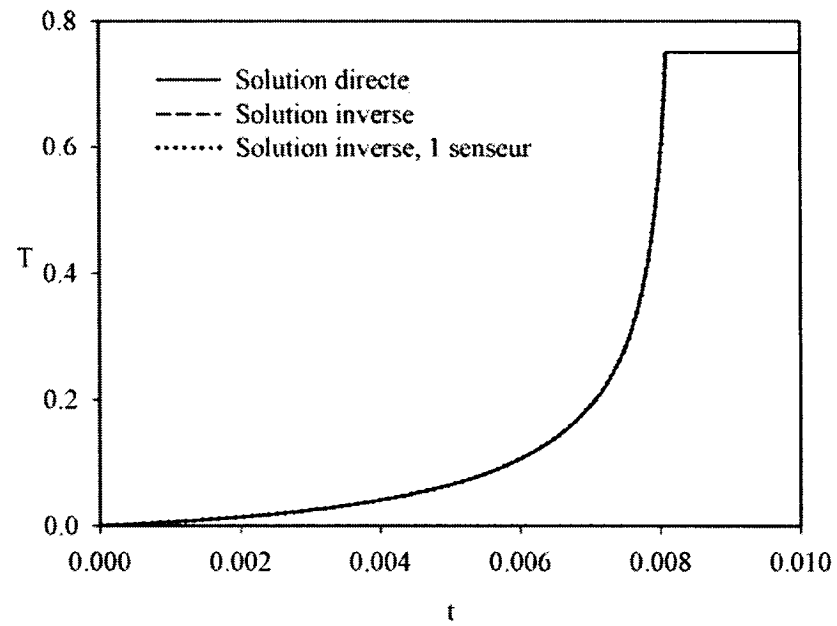


Figure 6.31 : Température en fonction du temps au centre, paramètres variables,
 $Ra = 2,5$

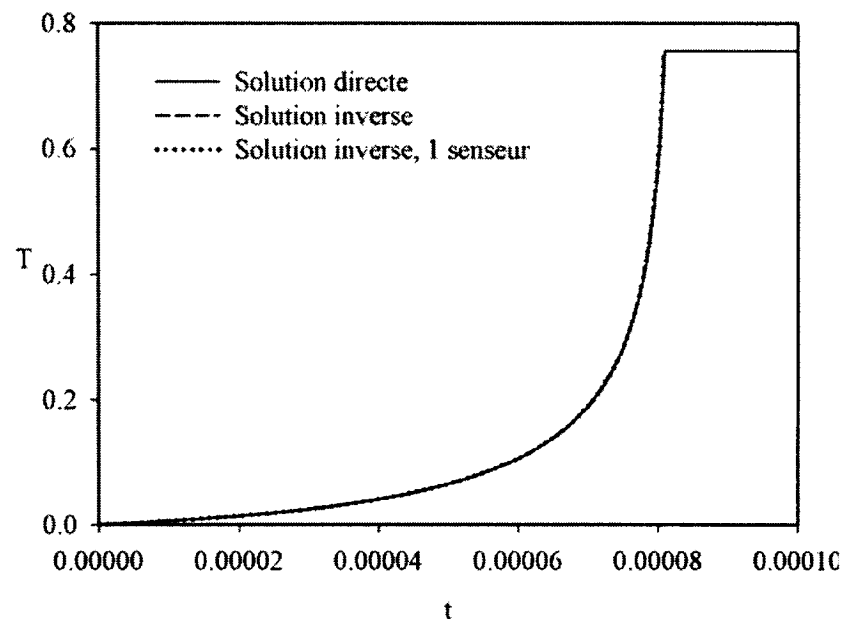


Figure 6.32 : Température en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 25$

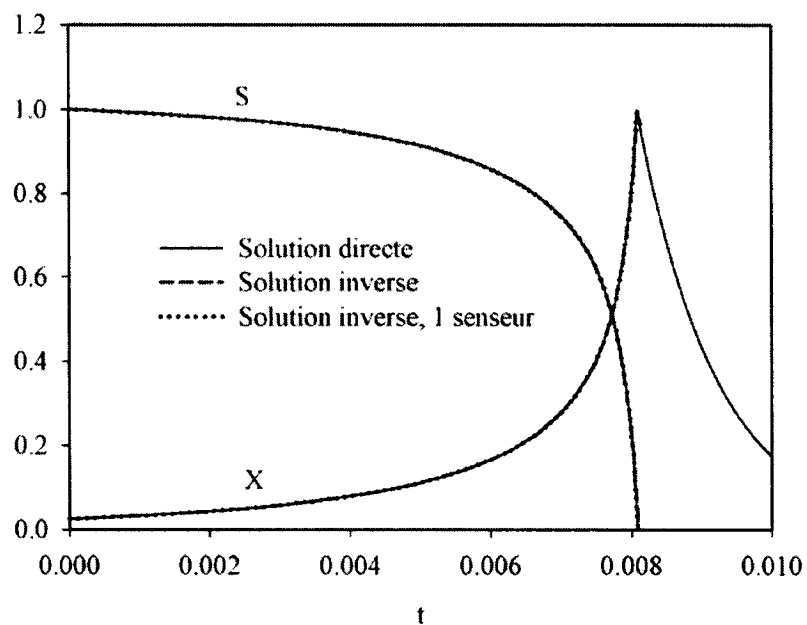


Figure 6.33 : Concentrations de S et de X en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 2,5$

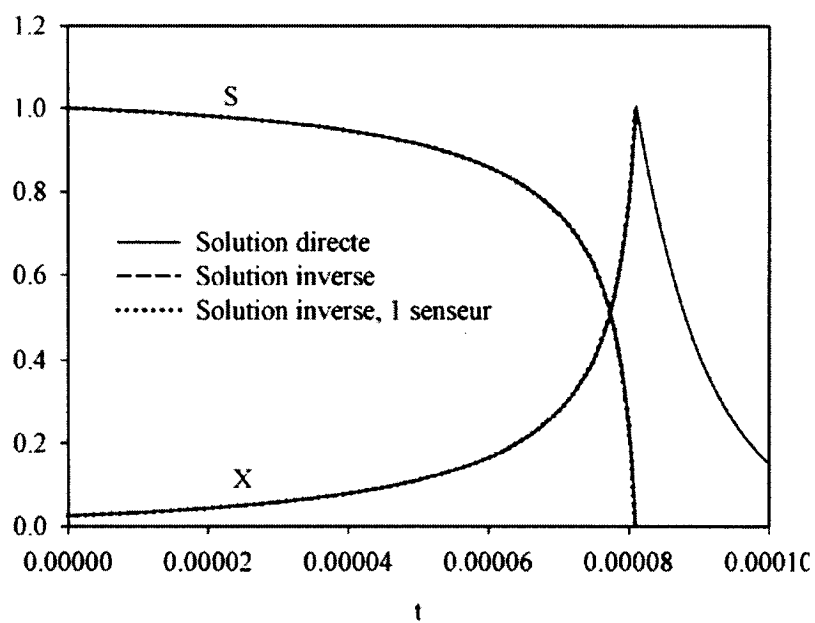


Figure 6.34 : Concentrations de S et de X en fonction du temps au centre, paramètres variables, $Ra = 25$

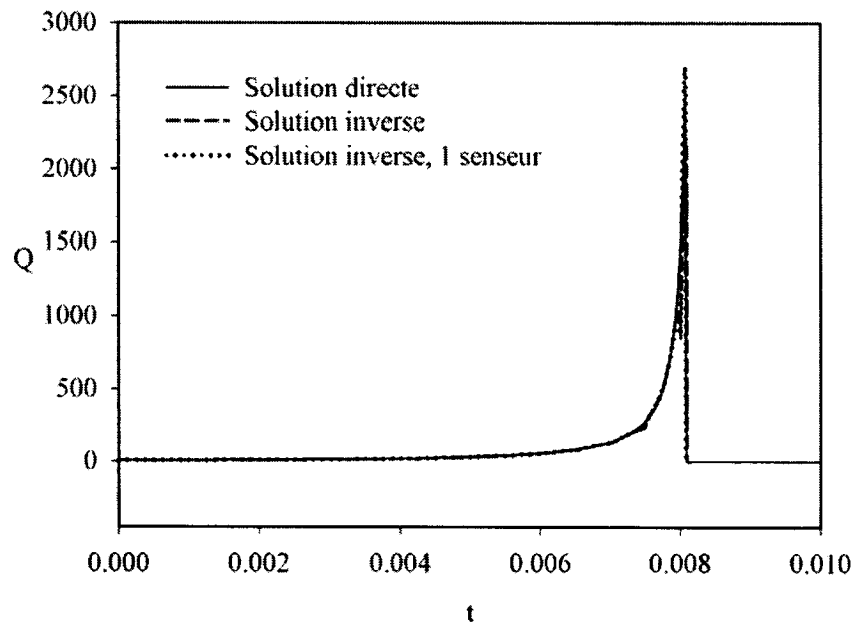


Figure 6.35 : Source de chaleur en fonction du temps au centre, paramètres variables,
 $Ra = 2,5$

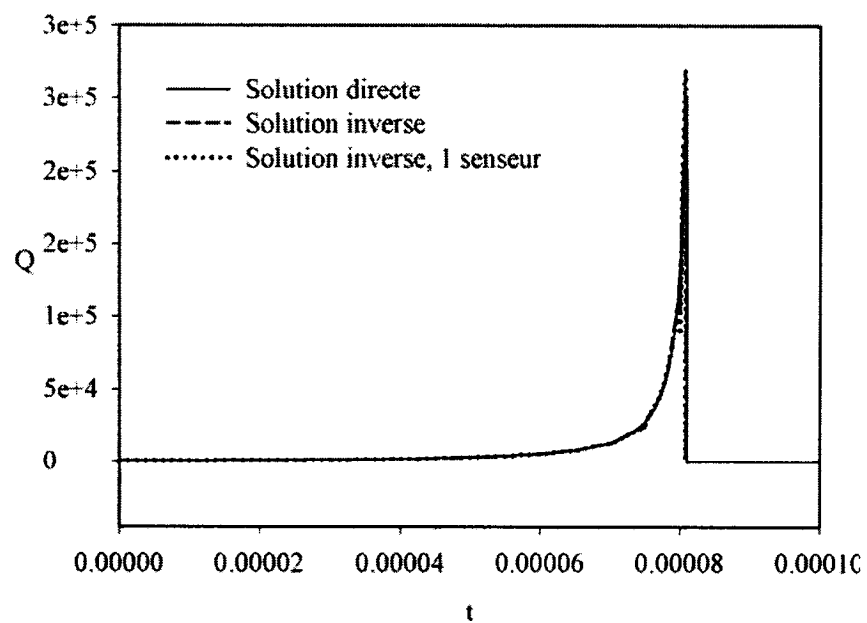


Figure 6.36 : Source de chaleur en fonction du temps au centre, paramètres variables,
 $Ra = 25$

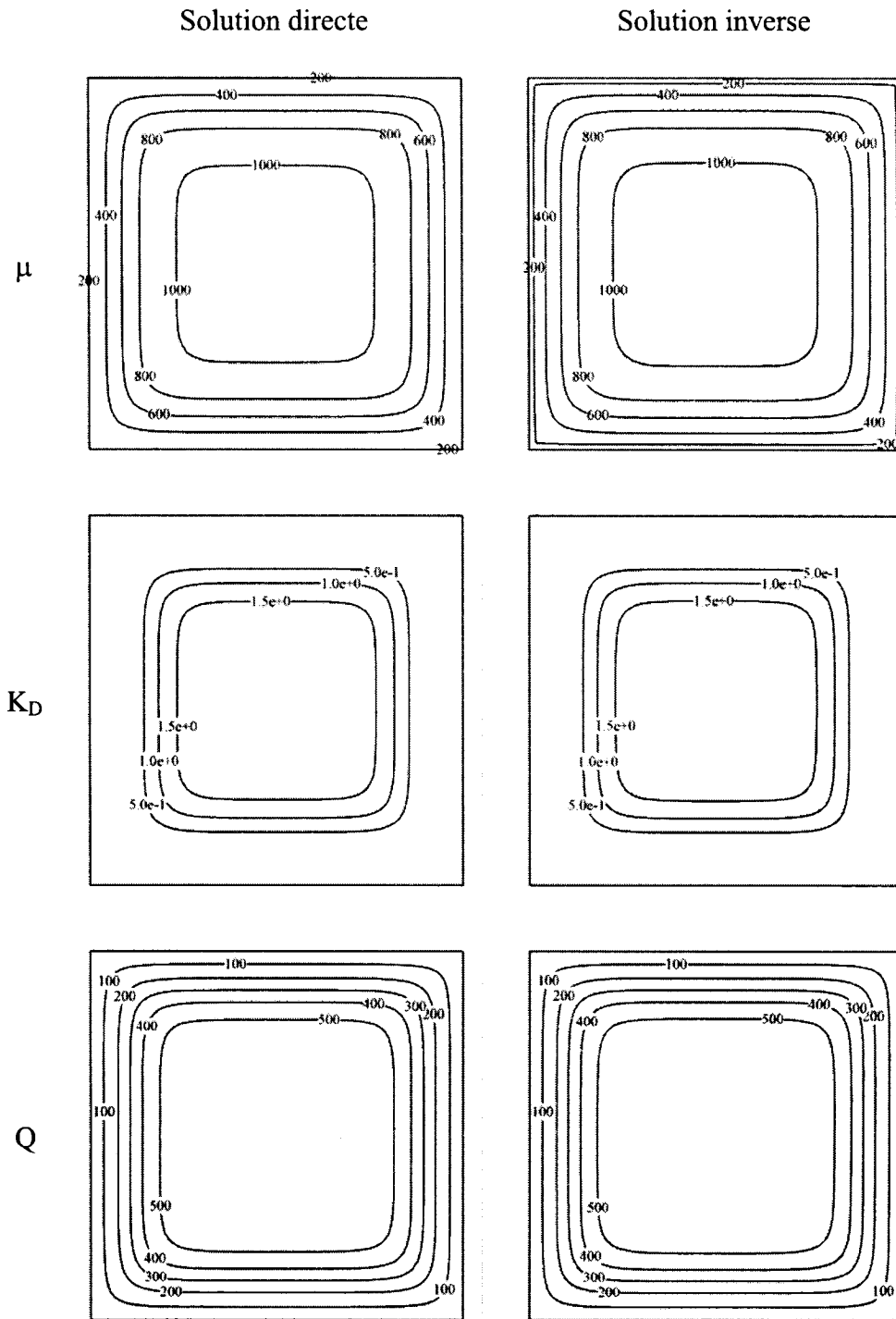


Figure 6.37 : Courbes de niveau de μ , K_D et Q à $t = 7,8 \times 10^{-3}$, paramètres variables,
 $Ra = 2,5$

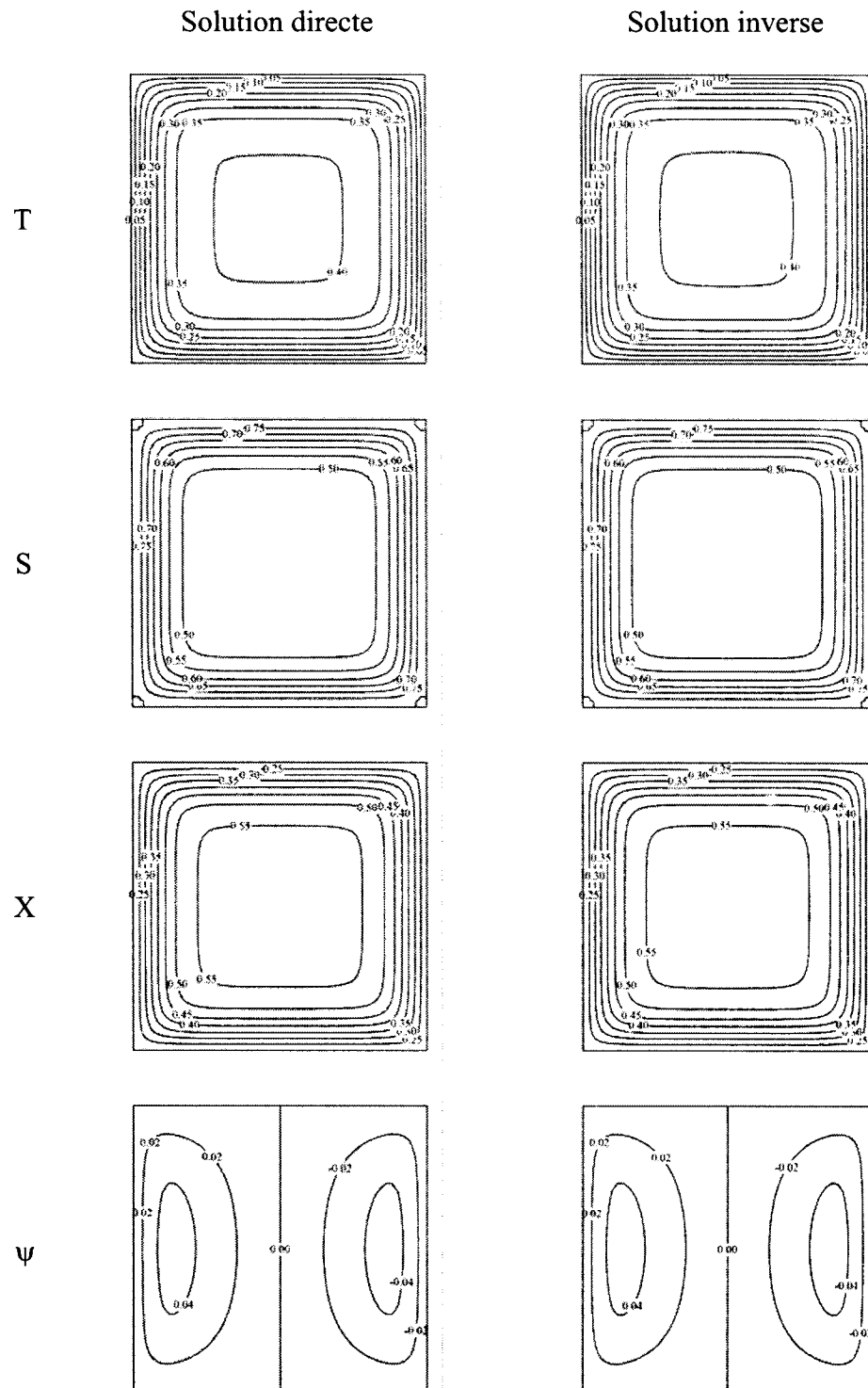


Figure 6.38 : Isothermes, isoconcentration de S et X et lignes de courant à $t = 7,8 \times 10^{-3}$,
paramètres variables, $Ra = 2,5$

6.5 Effet du bruit

Dans le but d'étudier l'effet du bruit dans les relevés de température sur les solutions inverses, on considère un bruit avec une distribution de probabilité uniforme d'un écart type $\sigma = 4\%$. Les solutions inverses obtenues ainsi doivent être sélectionnées avec beaucoup d'attention. En effet, les solutions qui satisfont strictement le critère de convergence $\varepsilon \leq \sigma^2$ sont inutilisables, car elles oscillent de façon importante à cause de la rigidité du problème. Tel que démontré aux chapitres précédent, l'optimisation est réalisée en arrêtant les simulations avant que le critère de convergence ne soit satisfait.

À cet égard, il est instructif d'examiner la solution inverse obtenue pour $Ra = 0,25$ et des paramètres constants qui est présentée à la figure 6.39. Le premier intervalle de solution est tracé après 42 itérations de l'algorithme modifié suivi de 6 itérations de l'algorithme régulier. La convergence de ce premier intervalle de temps est illustrée à la figure 6.40 pour chacun des algorithmes alors que le nombre d'itérations pour chaque intervalle est colligé à l'intérieur du tableau 6.5. Malgré les oscillations importantes du premier intervalle de temps, une solution inverse relativement adéquate est générée jusqu'à l'épuisement du substrat. La solution obtenue pour $Ra = 2,5$, tracée à la figure 6.41, semble encore plus précise, toutefois, on y retrouve encore certaines oscillations au début de la réaction. La convergence pour ce premier intervalle de temps, présentée à la figure 6.42, est semblable celle du premier intervalle obtenu pour $Ra = 0,25$, comme on peut le constater au tableau 6.5. En revanche, hormis pour les premiers intervalles de temps, à partir de $Ra = 2,5$, une seule itération avec l'algorithme régulier est requise pour obtenir une solution satisfaisante. On remarque à la figure 6.43 qu'il est également possible d'obtenir de bonnes solutions pour $Ra = 25$. Cette dernière converge plus rapidement pour le premier intervalle comme le démontre la figure 6.44.

Tableau 6.5 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$, $2,5$ et 25 , paramètres constants, bruit $\sigma = 0,04$

Intervalle	$Ra = 0,25$		$Ra = 2,5$		$Ra = 25$	
	Modifié	Régulier	Modifié	Régulier	Modifié	Régulier
1	42	6	42	6	19	16
2	6	15	12	9	10	1
3	4	3	2	1	4	1
4	2	8	2	1	4	1
5	6	3	2	1	3	1
6	3	2	2	1	3	1
7	6	1	3	1	2	1

Pour des paramètres qui varient en fonction de la température, il convient généralement d'arrêter les simulations après une itération de l'algorithme régulier. Une observation attentive des taux de croissance au centre de la cavité en fonction du temps présentés aux figures 6.45, 6.47 et 6.49 respectivement pour $Ra = 0,25$, $2,5$ et 25 démontre que les solutions inverses obtenues, lorsque la température n'augmente pas de façon importante, comportent plus d'oscillations que lorsqu'elle devient plus élevée. En outre, la représentation de l'augmentation abrupte de μ est très bien reproduite par la solution inverse quand les relevés de température utilisés pour la déterminer comportent du bruit. De surcroît, la consultation du tableau 6.6 révèle que lorsque la dimension de la cavité augmente, il devient plus difficile de satisfaire la convergence avec l'algorithme modifié, sauf pour le premier intervalle de solution. Afin d'illustrer ce point, l'évolution de l'erreur normalisée en fonction du nombre d'itérations pour cet intervalle de temps est présentée aux figures 6.46, 6.48 et 6.50 selon le nombre de Rayleigh étudié.

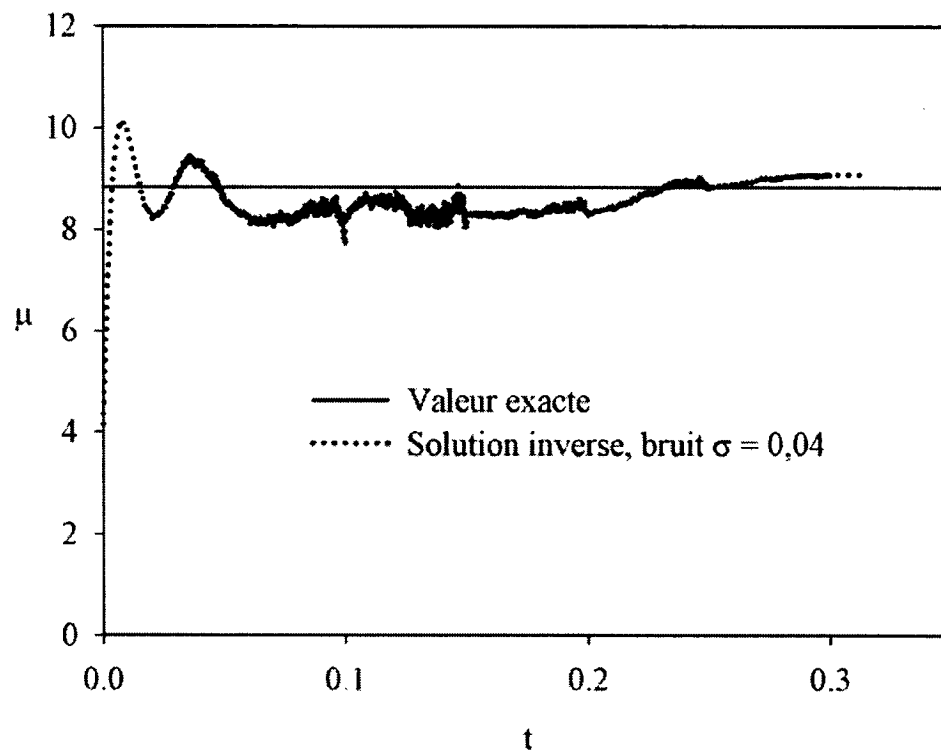


Figure 6.39 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

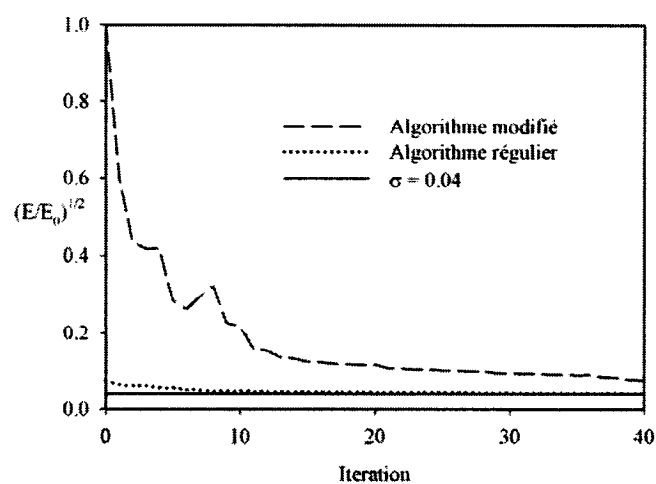


Figure 6.40 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres constants, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

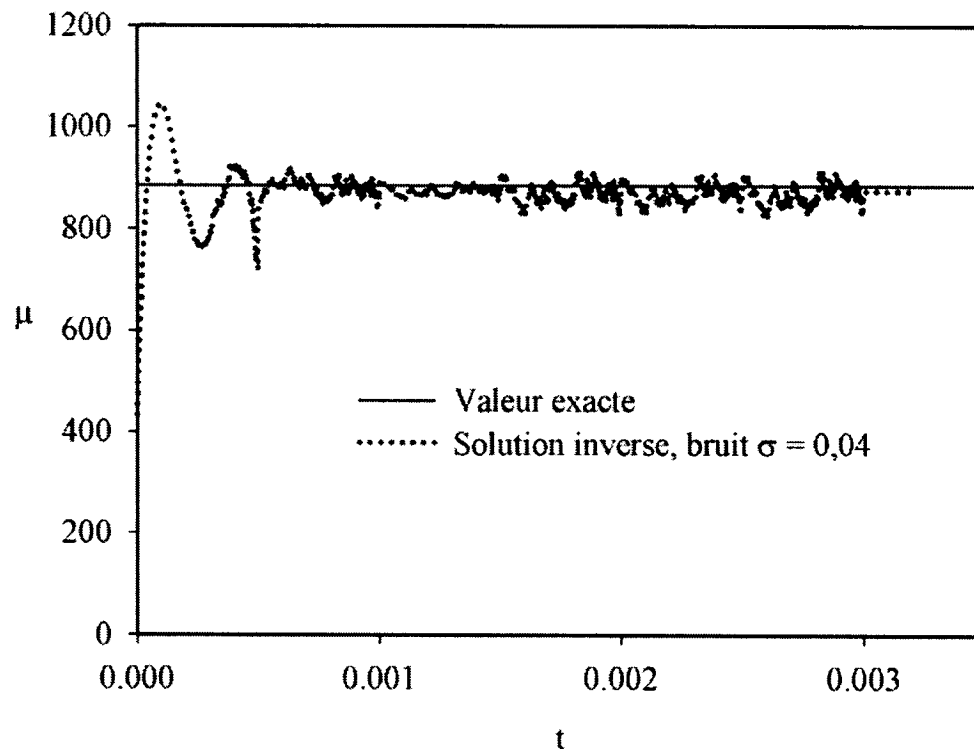


Figure 6.41 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

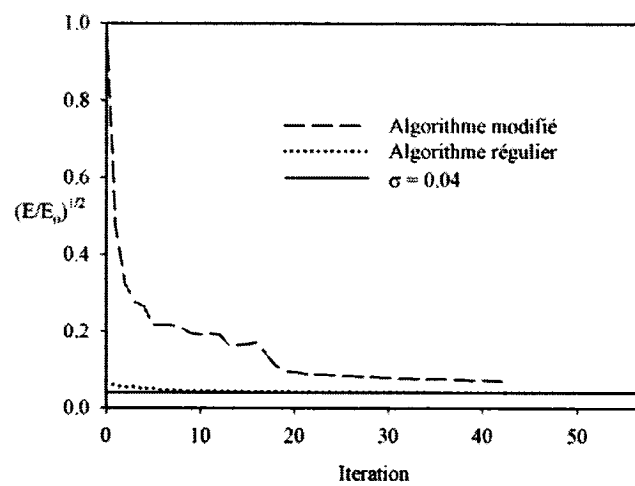


Figure 6.42 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres constants, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

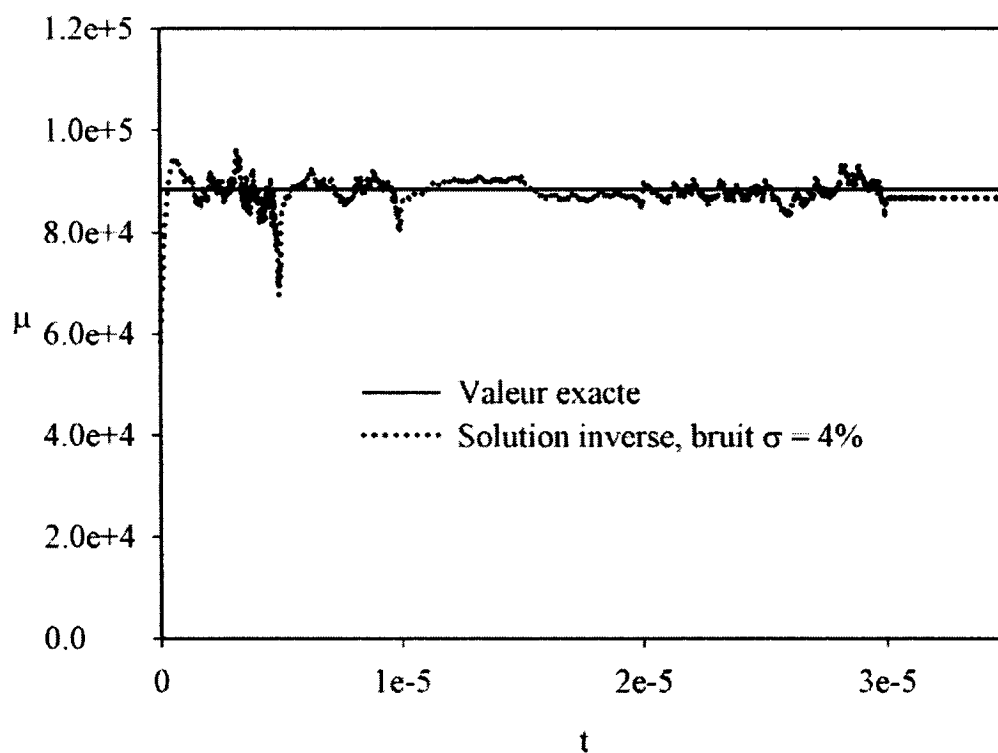


Figure 6.43 : Taux de croissance μ en fonction du temps, paramètres constants, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

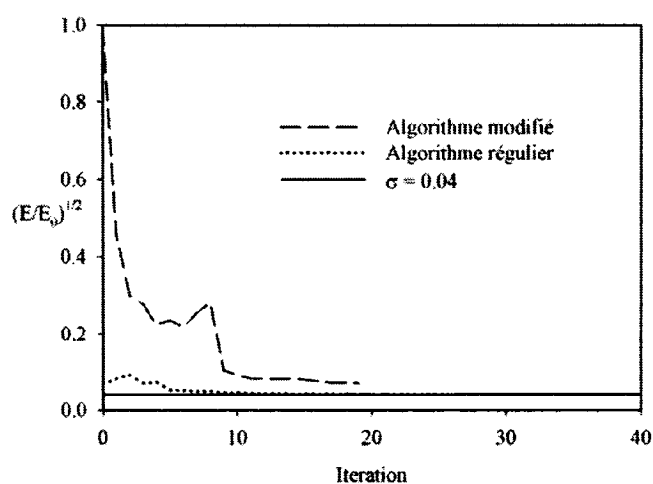


Figure 6.44 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres constants, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

Tableau 6.6 : Nombre d'itérations requis par les différents algorithmes pour $Ra = 0,25$,
2,5 et 25, paramètres variables, bruit $\sigma = 0,04$

Intervalle	Ra = 0,25		Ra = 2,5		Ra = 25	
	Modifié	Régulier	Modifié	Régulier	Modifié	Régulier
1	70	4	92	1	13	5
2	7	1	20	1	6	1
3	2	1	20	1	33	1
4	2	1	25	1	7	1
5	2	1	48	1	26	1
6	2	1	34	1	30	1
7	2	1	35	1	32	1
8	2	1	25	1	25	0
9	2	1	24	1	38	0
10	2	1	24	1	21	1
11	2	1	25	1	52	1
12	2	1	22	1	17	1
13	2	1	24	1	8	1
14	2	1	25	1	27	1
15	2	1	23	1	14	1
16	2	1	14	1	9	1
17	2	1	3	1	4	1
18	2	1	-	-	-	-
19	2	1	-	-	-	-
20	2	1	-	-	-	-
21	3	1	-	-	-	-
22	3	1	-	-	-	-
23	3	1	-	-	-	-
24	3	1	-	-	-	-

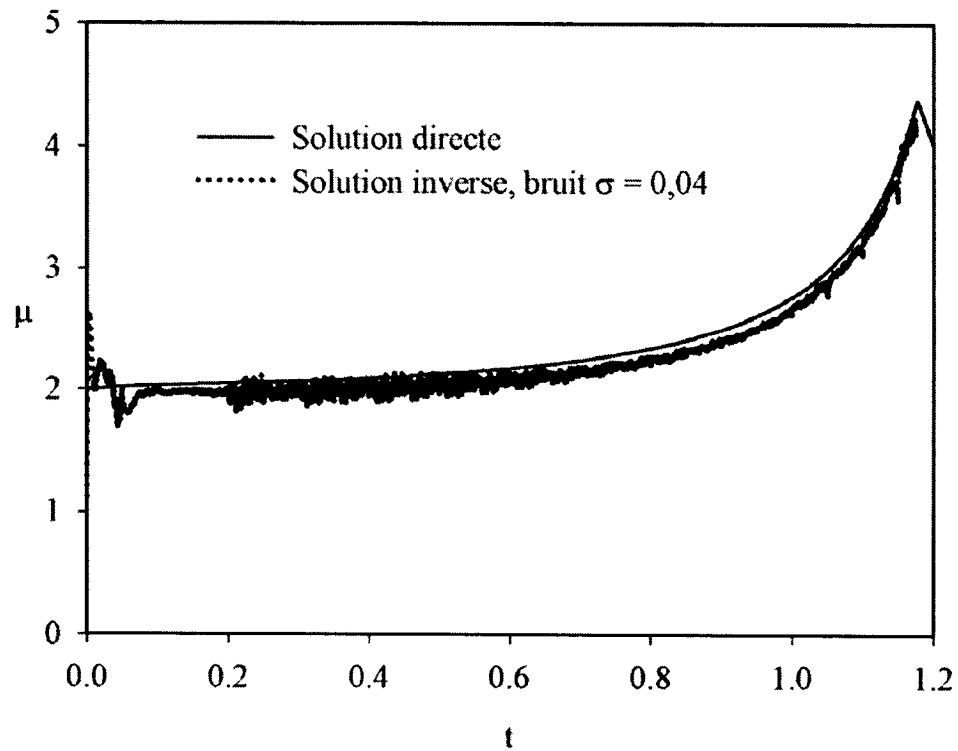


Figure 6.45 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre de la cavité, paramètres variables, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

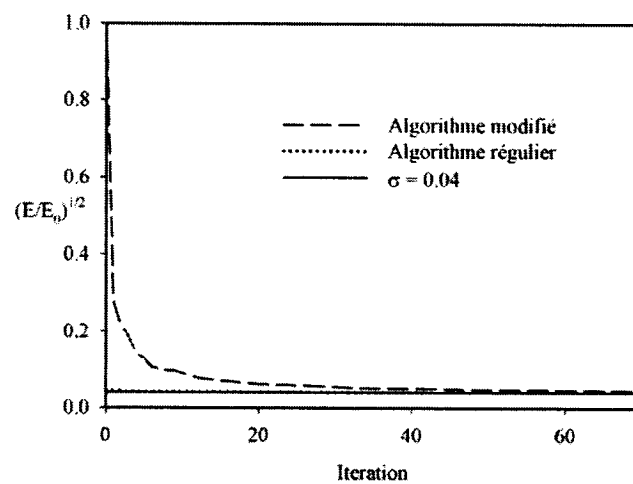


Figure 6.46 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres variables, $Ra = 0,25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

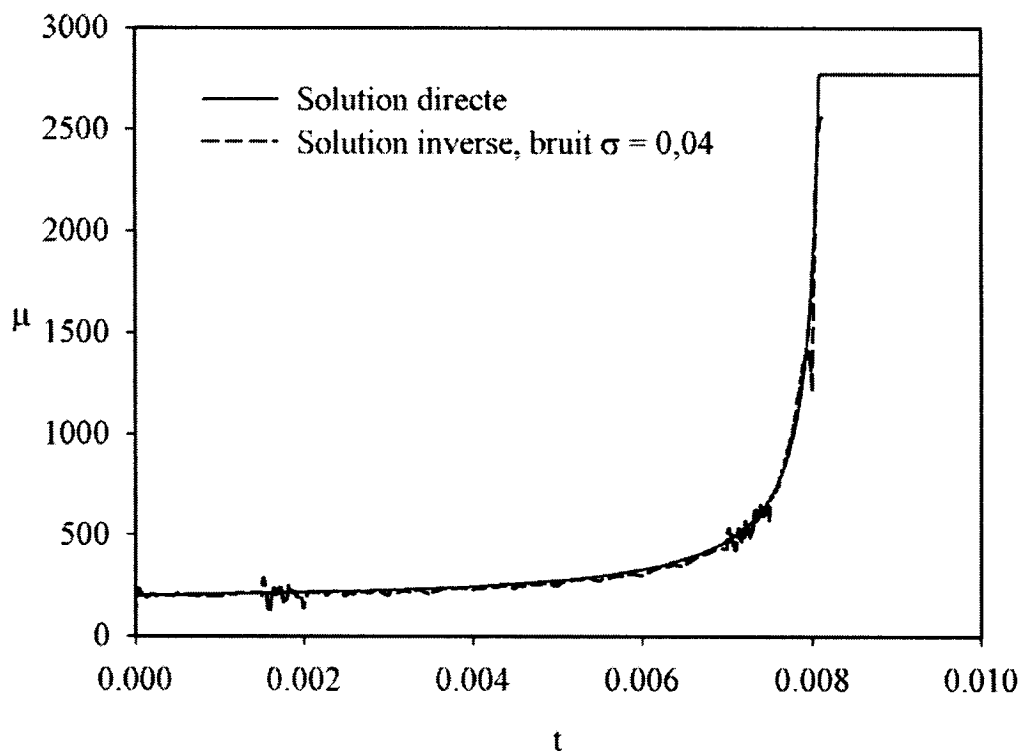


Figure 6.47 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre de la cavité, paramètres variables, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

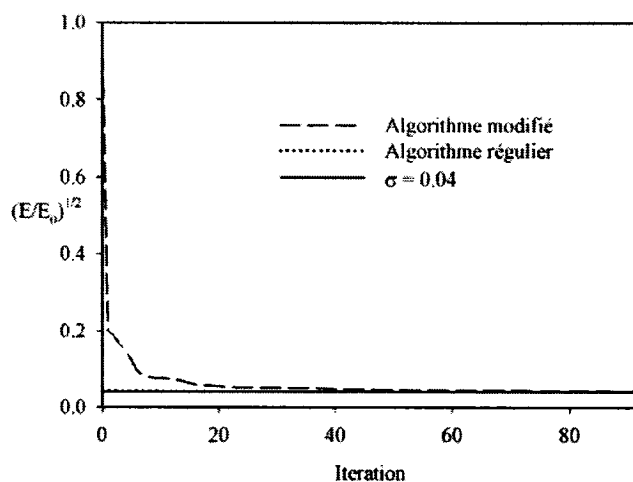


Figure 6.48 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres variables, $Ra = 2,5$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

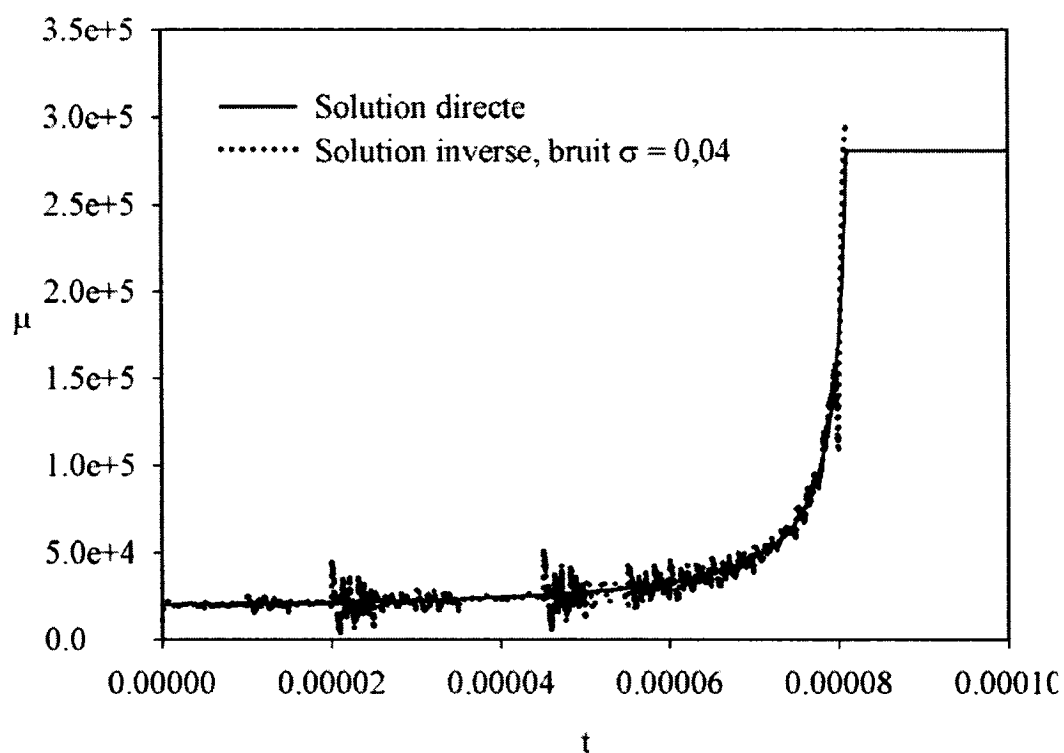


Figure 6.49 : Taux de croissance μ en fonction du temps au centre de la cavité, paramètres variables, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

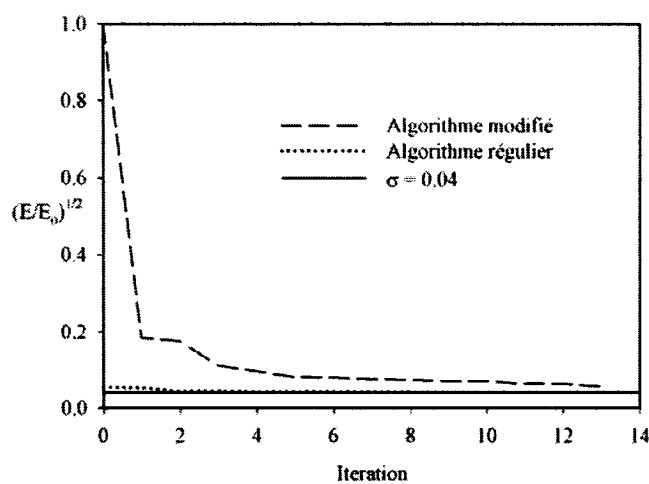


Figure 6.50 : Évolution de $(E/E_0)^{1/2}$ du premier intervalle de temps en fonction du nombre d'itérations, paramètres variables, $Ra = 25$, bruit sur les données avec $\sigma = 0,04$

6.6 Conclusion

La combinaison des méthodes du gradient conjugué modifié et régulier avec équations adjointes permet de déterminer avec succès le taux de croissance μ de la biomasse impliqué dans le modèle de Monod. De ce fait, il a été démontré que la chaleur générée par une réaction de dégradation est suffisante pour permettre la détermination de l'évolution de μ à partir de mesures de température. Malgré les nombres de Rayleigh relativement modestes que l'on retrouve dans les problèmes typiques, les cas étudiés présentent des variations significatives des différentes variables autant pour des paramètres biochimiques constants que pour ceux qui varient en fonction de la température.

La physique du problème nécessite de consacrer une attention particulière au choix des paramètres de résolution numérique. En effet, le manque de sensibilité du problème impose une subdivision du domaine temporel dans le but d'assurer la convergence des solutions. Cette rigidité devient particulièrement apparente lorsque du bruit est introduit dans les données fournies par les senseurs de température. La solution inverse devient alors inutilisable si le critère de convergence est appliqué à la lettre. Néanmoins, on peut optimiser ces solutions en arrêtant les simulations lorsque le niveau d'erreur se stabilise, ce qui se produit généralement après une seule itération de l'algorithme régulier.

Finalement, lorsque les dimensions du réacteur deviennent suffisamment grandes et que les effets de bords deviennent négligeables ou encore lorsque la convection devient plus intense et les phénomènes de transport plus importants, il suffit alors d'un seul senseur de température pour déterminer, avec précision, le taux de croissance.

Chapitre VII : Conclusion

7.1 Conclusions générales

Cette étude a permis de développer un outil servant à déterminer la source de chaleur et le taux de croissance spécifique à l'intérieur d'un milieu poreux à partir de mesures provenant de senseurs de température. Dans ce problème, les phénomènes de transport sont alimentés par de la convection naturelle, générée par la chaleur provenant d'une réaction de dégradation organique.

Une revue bibliographique a permis de constater le besoin de développer une telle méthode, compte tenu de la nécessité de modéliser adéquatement la génération de chaleur et les différents paramètres biochimiques, qui peuvent dépendre de réactions biochimiques très complexes, pour le design et le contrôle efficaces des réacteurs biologiques. Pour ce faire, l'approche du problème inverse se révèle donc intéressante.

La méthode inverse sélectionnée est celle du gradient conjugué avec les équations adjointes. Ces équations adjointes sont dérivées dans le cas général pour les problèmes de convection naturelle en milieu poreux avec diffusion de masse pour une source de chaleur proportionnelle à la consommation de substrat par de la biomasse régie par le modèle de Monod. La modélisation de la source de chaleur est cohérente avec plusieurs applications réelles telles que le compostage, la dégradation des matières organiques, la dispersion des contaminants, la biofiltration ou les réacteurs à lit granulaire. Les effets du transport du substrat et de la biomasse, bien que plus importants dans le domaine de la dispersion des contaminants ou les réacteurs à lit granulaire, s'appliquent aussi bien aux cas plus simples où ces substances sont fixes. Il s'agit alors de la première étude qui traite de ces cas pour la détermination de sources de chaleur et de taux de croissance biochimiques avec convection naturelle en milieu poreux à l'aide de la méthode inverse

du gradient conjugué avec équations adjointes. La méthode de volumes de contrôle basée sur un schéma de puissance pour les termes d'advection permet la résolution numérique des équations de ce problème de minimisation.

En premier lieu, on a considéré le cas simplifié du problème inverse de convection naturelle où l'on doit déterminer la source de chaleur inconnue en milieu poreux avec une seule équation de diffusion de masse sans terme source. Des solutions sont obtenues avec des modèles simples de source de chaleur et sont comparées avec une solution analytique. On a pu démontrer ainsi que cette méthode permet de prédire adéquatement, pour différents nombres de Rayleigh et de Lewis, une source de chaleur $Q(x,t)$ qui est égale à la concentration moyenne verticale. Le flux de concentration imposé à la paroi supérieure était soit de forme sinusoïdale, soit de forme triangulaire. De plus, un modèle non linéaire de la source de chaleur a été testé.

En second lieu, on a étudié un cas plus complexe faisant intervenir tous les paramètres, dans lequel le modèle de Monod, décrivant la consommation du substrat par la biomasse et générant ainsi de la chaleur, a été intégré dans le but d'étudier la performance, de même que les limites, de la méthode inverse. Sans information préalable, il ressort qu'on peut prédire adéquatement la source de chaleur $Q(r,t)$, proportionnelle à la consommation de substrat jusqu'à des nombres de Rayleigh de l'ordre de 10^5 . Les solutions, tant directes qu'inverses, sont extrêmement sensibles aux variations, mêmes faibles, des rapports de forces volumiques. De ce fait, la méthode permet d'obtenir d'excellentes solutions jusqu'à $Ra = 10^4$, lorsque $N_S = 0,1$ et $N_X = 0,05$, tandis que, lorsque l'écoulement est induit simultanément par les gradients de température, de concentration de substrat et de biomasse, les solutions satisfaisantes convergent plus difficilement, même à $Ra = 10^3$ pour $N_S = N_X = 0,5$. Lorsque le nombre de Ra est inférieur à 10^3 , la source de chaleur est quasi-unidimensionnelle. Une seule rangée de senseurs est alors requise pour obtenir une solution inverse adéquate. Cependant, pour des niveaux de convection plus élevés, la source de chaleur devient bidimensionnelle et

des senseurs à tous les nœuds sont nécessaires afin d'assurer la convergence de la solution inverse.

Une fois la méthode inverse validée numériquement, on a étudié un problème avec un modèle biochimique et des conditions limites comportant des valeurs de paramètres plus réalistes. La méthode du gradient conjugué a été mise à l'épreuve pour déterminer l'intensité et la distribution de la source de chaleur générée à partir d'une activité biochimique décrite par un modèle de Monod avec les paramètres typiques considérés. Le cas où les paramètres de ce modèle dépendent de la température et engendrent des phénomènes de transport plus importants a également été traité.

On a alors pu déterminer avec succès la source de chaleur, même lorsque celle-ci évolue rapidement par rapport à la diffusion thermique. Toutefois, un pas de temps relativement petit est alors requis. Les solutions directes démontrent que, même avec un nombre de Rayleigh égal à 0,25, soit près d'un régime de conduction, la source de chaleur obtenue avec des paramètres qui varient exponentiellement avec la température est clairement bidimensionnelle et que les variations spatiales des différentes quantités sont importantes. Pour ce cas, il faut des senseurs à tous les nœuds du maillage afin d'obtenir des solutions inverses précises.

Toutefois, il a été démontré que, lorsque les dimensions considérées deviennent plus importantes, à des nombres de Rayleigh de l'ordre de 2,5 ou de 25, des couches limites apparaissent. Une conséquence importante de la présence de la convection est d'uniformiser les variables à l'intérieur de la cavité ainsi que la source de chaleur. Il est alors possible profiter de ces conditions et d'obtenir de bonnes solutions inverses en n'utilisant qu'un seul senseur.

Dans tous les cas, lorsque du bruit est introduit dans les données fournies par les senseurs de température, la stabilisation des solutions inverses peut être réalisée en

arrêtant la simulation quelques itérations avant que le critère d'arrêt ne soit atteint. Par conséquent, les composantes à plus hautes fréquences, essentiellement attribuables au bruit, ne sont pas reproduites dans la solution inverse.

La connaissance de cette source de chaleur permet ensuite de la relier aux différentes concentrations ainsi qu'aux variations de celles-ci. On étudie alors également la capacité de cette même méthode à déterminer les paramètres intervenant dans le modèle utilisé pour décrire cette activité microbienne. Une mesure directe des concentrations est généralement employée pour ce faire, toutefois, on utilise ici des senseurs de température, puisque l'on dispose à présent d'une relation pour décrire les réactions générant de la chaleur. Cette approche présente plusieurs avantages, dont un coût financier plus faible, la simplicité de ne requérir que des relevés de température, la possibilité de les réaliser in situ et l'utilisation de méthodes qui ne perturbent pas les réactions. On détermine donc le taux de croissance spécifique μ à partir des données fournies par des senseurs de température.

La combinaison des méthodes du gradient conjugué modifié et régulier avec équations adjointes permet de déterminer avec succès le taux de croissance μ de la biomasse impliqué dans le modèle de Monod. De ce fait, on démontre que la chaleur générée par une réaction de dégradation est suffisante pour permettre la détermination de l'évolution de μ à partir de mesures de température. Malgré les nombres de Rayleigh relativement modestes que l'on retrouve dans les problèmes typiques, les cas étudiés présentent des variations significatives des différentes variables, autant pour des paramètres biochimiques constants que pour ceux qui varient en fonction de la température.

La physique du problème nécessite de consacrer une attention particulière au choix des paramètres de résolution numérique. En effet, le manque de sensibilité du problème impose une subdivision du domaine temporel dans le but d'assurer la convergence des solutions. Cette rigidité devient particulièrement apparente lorsque du bruit est introduit

dans les données fournies par les senseurs de température. La solution inverse devient alors inutilisable si le critère de convergence est appliqué à la lettre. Néanmoins, on peut optimiser ces solutions en arrêtant les simulations lorsque le niveau d'erreur se stabilise, ce qui se produit généralement après une seule itération de l'algorithme régulier.

Finalement, lorsque les dimensions du réacteur deviennent suffisamment grandes et que les effets des parois deviennent négligeables ou encore lorsque la convection devient plus intense et les phénomènes de transport plus importants, il suffit alors d'un seul senseur de température pour déterminer, avec précision, le taux de croissance.

7.2 Recommandations

Le développement de la formulation présentée dans cette thèse ouvre de nouvelles voies de recherche. En démontrant que la méthode inverse du gradient conjugué avec équations adjointes permet de déterminer le taux de croissance, il devient particulièrement intéressant de développer ces équations pour permettre l'identification simultanée de l'ensemble des paramètres intervenant dans les modèles décrivant l'activité microbienne.

Dans un autre ordre d'idée, l'étude des différents problèmes traités s'est limitée à leur aspect bidimensionnel. Toutefois, cette hypothèse peut ne pas être valable dans plusieurs situations, il serait donc pertinent d'évaluer la capacité de cette méthode à résoudre les problèmes inverses en trois dimensions.

Finalement, les résultats présentés dans cette thèse sont basés sur des simulations numériques. En effet, les données de température utilisées pour résoudre le problème inverse ont été générées par des solutions directes. Une approche expérimentale serait alors de mise afin de valider la capacité de la méthode inverse de produire des solutions

à partir de données fournies par des senseurs de température utilisés lors d'essais expérimentaux sur le terrain ou en laboratoire. Il est également intéressant de remarquer que les modélisations de la source de chaleur et des taux de croissance peuvent être entièrement différentes de celles employées dans cette recherche, puisque aucune hypothèse sur la forme de ces fonctions n'est effectuée lors de la résolution du problème inverse. En conséquence, des problèmes plus complexes, faisant intervenir d'autres facteurs tels que les nutriments, l'acidité, la présence d'inhibiteurs, etc. peuvent être considérés.

Références

ALIFANOV, O. M. 1994. *Inverse Heat Transfer Problems*. 5th ed. New York : Springer-Verlag. 348p.

ALIFANOV, O. M., ARTYUKHIN, E. A., RUMYANTSEV, S. V. 1996. *Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems with Applications to Inverse Heat Transfer Problems*. New York : Begell House. 306p.

ALIFANOV, O. M., MIKHAILOV, V. V. 1978. «Solution of the Nonlinear Inverse Thermal Conductivity Problem by the Iteration Method». *Journal of Engineering Physics*. 35:6. 1501-1506.

BECK, J. V. 1970. «Nonlinear Estimation Applied to the Nonlinear Inverse Heat Conduction Problem». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 13:4. 703-716.

BECK, J. V., ARNOLD, K. J. 1977. *Parameter Estimation in engineering and science*. New York : Wiley. 501p.

BECK, James V., BLACKWELL, Ben, ST-CLAIR Jr., Charles R. 1985. *Inverse Heat Conduction: Ill-Posed Problems*. New-York : Wiley. 326p.

BECK, J. V., LITKOUHI, B., ST-CLAIR Jr., C. R. 1982. «Efficient Sequential Solution of the Nonlinear Inverse Heat Conduction Problem». *Numerical Heat Transfer*. 5:3. 275-286.

BEJAN, Adrian. 1995. *Convection Heat Transfer*. 2nd ed. New York : Wiley. 623p.

BLANCH, Harvey W., CLARK, Douglas S. 1997. *Biochemical Engineering*. 1st ed. New York : Marcel Dekker. 702p.

CHAMKHA, Ali J. 2002. «Double-Diffusive Convection in a Porous Enclosure with Cooperating Temperature and Concentration Gradients and Heat Generation or Absorption Effects». *Numerical Heat Transfer, Part A*. 41:1. 65-87.

CHAO, B. H., WANG, H., CHENG, P. 1996. «Stagnation point flow of a chemical reactive fluid in a catalytic porous bed». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 39:14. 3003-3019.

COLACO, Marcelo J., ORLANDE, Helcio R. B. 2004. «Inverse natural convection problem of simultaneous estimation of two boundary heat fluxes in irregular cavities». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 47:6-7. 1201-1215.

EL-FADEL, Mouhtassem. 1991. *Modeling Gas and Heat Generation and Transport in Sanitary Landfills*. 413p. Thèse de doctorat en génie civil, Stanford University.

EL-FADEL, M., FINDIKAKIS, A. N., LECKIE, J. O. 1996a. «Numerical Modelling of Generation and Transport of Gas and Heat in Sanitary Landfills: I. Model Formulation». *Waste Management and Research*. 14:5. 483-504.

EL-FADEL, M., FINDIKAKIS, A. N., LECKIE, J. O. 1996b. «Numerical Modelling of Generation and Transport of Gas and Heat in Sanitary Landfills: II. Model Application». *Waste Management and Research*. 14:6. 537-551.

EL-FADEL, M., FINDIKAKIS, A. N., LECKIE, J. O. 1997. «Numerical Modelling of Generation and Transport of Gas and Heat in Sanitary Landfills: III. Sensitivity Analysis». *Waste Management and Research*. 15:1. 87-102.

FLETCHER, Roger. 1987. *Practical Methods of Optimization*. 2nd ed. New York : Wiley. 450p.

FOGLER, H. Scott. 1999. *Elements of Chemical Reaction Engineering*. 3rd ed. Upper Saddle River, New Jersey : Prentice-Hall. 967p.

GOSTOMSKI, Peter A., SISSON, James B., CHERRY, Robert S. 1997. «Water Content Dynamics in Biofiltration: The Role of Humidity and Microbial Heat Generation». *Journal of the Air & Waste Management Association*. 47:9. 936-944.

GRADY, C. P. L., SMETS, B. F., BARBEAU, D. S. 1996. «Variability in Kinetic Parameter Estimates: a Review of Possible Causes and a Proposed Terminology». *Water Research*. 30:3. 742-748.

HAUG, R. T. 1993. *The Practical Handbook of Compost Engineering*. Boca Raton Flor. : Lewis Publishers. 717p.

HEIJNEN, J. J. 1999. «Bioenergetics of microbial growth». *Encyclopedia of Bioprocess Technology: Fermentation, Biocatalysis, and Bioseparation Vol. I*. Sous la direction de FLICKINGER, M. C., DREW, S. W. New York : Wiley. P. 267-291.

HUANG, C. H. 2001. «A nonlinear inverse vibration problem of estimating the external forces for a system with displacement-dependent parameters». *Journal of Sound and Vibration*. 248:5. 789-807.

HUANG, C. H., CHEN, W. C. 2000. «A three-dimensional inverse forced convection problem in estimating surface heat flux by conjugate gradient method». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 43:17. 3171-3181.

HUANG, C. H. et HUANG, C. Y. 2004. «An inverse biotechnology problem in estimating the optical diffusion and absorption coefficients of tissue». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 47:3. 447–457.

HUANG, C. H., KIM, S. 2005. «An inverse problem for estimating the time-dependent reaction coefficient in an autocatalytic reaction pathway». *Chemical Engineering Science*. 60:2. 447-457.

HUANG, C. H., YEH, C. Y., ORLANDE, H. R. B. 2003. «A nonlinear inverse problem in simultaneously estimating the heat and mass production rates for a chemically reacting fluid». *Chemical Engineering Science*. 58:16. 3741-3752.

JASMIN, S., PRUD'HOMME, M. 2004. «An inverse solution for heat source profile in porous medium with chemical species diffusion». *4th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2004) : July 24-28, 2004, Jyväskylä, Finland*. [En ligne]. Edited by NEITTAANMAKI, P., ROSSI, T., MAJAVA, K., PIRONNEAU, O.

<http://www.mit.jyu.fi/eccomas2004/proceedings/pdf/360.pdf> (Page consultée le 10 janvier 2006)

JASMIN, S., PRUD'HOMME, M. 2005a. «Inverse determination of a heat source from a solute concentration generation model in porous medium». *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 32:1-2. 43-53.

JASMIN, S., PRUD'HOMME, M. 2005b. «Détermination d'une source de chaleur biochimique en milieu poreux avec convection». *VII^e Colloque Interuniversitaire Franco-Québécois sur la Thermique des systèmes*. Saint-Malo, France : CIFQ. 1, 49-54.

JIANG, Hui. 2003. *Inverse double diffusive natural convection problem in a porous medium*. 82p. Mémoire de maîtrise en génie mécanique, École Polytechnique de Montréal.

KIRANMAI, D., JYOTHIRMAI, A., MURTY, C.V.S. 2005. «Determination of kinetic parameters in fixed-film bio-reactors: an inverse problem approach». *Biochemical Engineering Journal*. 23:1. 73-83.

KORDYLEWSKI, W., KRAJEWSKI, Z. 1984. «Convection effects on thermal ignition in porous media». *Chemical Engineering Science*. 39:3. 610–612.

LARSEN, Kevin L., McCARTNEY, Daryl M. 2000. «Effect of C:N Ratio on Microbial Activity and N Retention: Bench-Scale Study Using Pulp and Paper Biosolids». *Compost Science and Utilization*. 8:2. 147-159.

LEVENSPIEL, Octave. 1999. *Chemical Reaction Engineering*. 3rd ed., New York : Wiley. 668p.

LOUAHLIA-GUALOUS, H., PANDAY, P. K., ARTIOUKHINE, E. A. 2003. «Inverse determination of the local heat transfer coefficients for nucleate boiling on a horizontal cylinder». *Journal of Heat Transfer*. 125:6. 1087-1095.

LOULOU, T., SCOTT, E. P. 2003. «Estimation of 3-dimensional heat flux from surface temperature measurements using an iterative regularization method». *Heat and Mass Transfer*. 39:5-6. 435-443.

MALASHETTY, M. S., CHENG, P., CHAO, B. H. 1994. «Convective instability in a horizontal porous layer saturated with a chemically reacting fluid». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 37:18. 2901-2908.

MASON, I. G., MILKE, M. W. 2005. «Physical modeling of the composting environment: A review. Part 1: Reactor systems». *Waste Management*. 25:5. 481-500.

MONOD, J. 1949. «The growth of bacterial cultures». *Ann. Rev. Microbiol.* 3. 371-394.

MOUTSOGLOU, A. 1989. «An Inverse Convection Problem». *Journal of Heat Transfer*. 111:1. 37-43.

NIELD, D. A., BEJAN, A. 1999. *Convection in Porous Media*. 2nd ed. New York : Springer-Verlag. 546p.

NIELSEN, J., VILLADSEN, J. 1992. «Modelling of microbial kinetics». *Chemical Engineering Science*. 47:17-18. 4225-4270.

ORLANDE, H. R. B., OZISIK, M. N. 1994. «Determination of the reaction function in a reaction-diffusion parabolic problem». *Journal of Heat Transfer*. 116. 1041-1044.

PARK, H. M., CHUNG O.Y. 1999. «An Inverse Natural Convection Problem of Estimating the Strength of a Heat Source». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 42:23. 4259-4273.

PARK, H. M., JUNG, W. S. 2001. «The Karhunen-Loève Galerkin Method for the Inverse Natural Convection Problems». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 44:1. 155-167.

PATANKAR, S. V. 1980. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York : McGraw-Hill. 197p.

PIRT, S. J. 1978. «Aerobic and Anaerobic Microbial Digestion in Waste Reclamation». *Journal of Applied Chemistry and Biotechnology*. 28:4. 232-236.

PRESCOTT, M. L., HARLEY, J. P., KLEIN, D. A. 2005. *Microbiology*. 6th ed. Montreal : McGraw-Hill. 1152p.

PRUD'HOMME, M. 1998. *Optimisation du problème de conduction inverse par le gradient conjugué*. Montréal : Éditions de l'École Polytechnique. 41p. EPM/RT-98/11.

PRUD'HOMME, M., JASMIN, S. 2001. «Component Analysis of a Steady Inverse Convection Problem Solution in a Porous Medium». *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 28:7. 911-921.

PRUD'HOMME, M., JASMIN, S. 2003. «Determination of a heat source in porous medium with convective mass diffusion by an inverse method». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 46:11. 2065-2075.

PRUD'HOMME, M., JASMIN, S. 2005. «Inverse free Convection Solution in a Porous Matrix with a Biochemical Heat Source». *International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering – Coupled Problem 2005*. Santorini Island, Greece. Barcelona : CIMNE.

PRUD'HOMME, M., JASMIN, S. 2006. «Inverse solution for a biochemical heat source in a porous medium in the presence of natural convection». *Chemical Engineering Science*. 61:5. 1667-1675.

PRUD'HOMME, M., JIANG, H. 2003. «Inverse determination of concentration in porous medium with thermosolutal convection». *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 30:3. 303-312.

PRUD'HOMME, M., NGUYEN, T. H. 1996. *Méthode de solution par volumes de contrôle du problème inverse en convection naturelle*. Montréal : Éditions de l'École Polytechnique. 27p. EPM/RT-96/10.

PRUD'HOMME, M., NGUYEN, T. H. 1997. «Whole time-domain approach to the inverse natural convection problem». *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*. 32:2. 169-186.

PRUD'HOMME, M., NGUYEN, T. H. 1999. «Fourier Analysis of Conjugate Gradient Method Applied to Inverse Heat Conduction Problems». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 42:24. 4447-4460.

PRUD'HOMME, M., NGUYEN, T. H. 2001a. «Solution of Inverse Free Convection Problems by Conjugate Gradient Method : Effects of Rayleigh number». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 44:11. 2011-2027.

PRUD'HOMME, M., NGUYEN, T. H. 2001b. «Solution of the inverse steady state convection problem in a porous medium by adjoint equations». *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 28:1. 11-21.

ROBERTSON, A. H. 1967. «Solution of a set of reaction rate equations». *Numerical Analysis: An Introduction Based On A Symposium Organized By The Institute Of Mathematics And Its Applications Birmingham England 1965*. WALSH, J. Washington : Thomas Brook Co. P. 1179–1184.

ROBINSON, J. A. 1985. «Determining microbial kinetics parameter using nonlinear analysis: advantages and limitations in microbial ecology». *Adv. Microb. Ecol.* 8. 61-114.

SHULER, M. L., KARGI, F. 2002. *Bioprocess Engineering: Basic Concepts*. 2nd ed. Upper Saddle River, N.J. : Prentice Hall. 553p.

SMITH, L., MCCARTY, P.L., KITANIDIS, P.K. 1998. «Spreadsheet method for evaluation of biochemical reaction rate coefficients and their uncertainties by weighted nonlinear least-squares analysis of the integrated Monod equation». *Applied and Environmental Microbiology*. 64:6. 2044-2050.

TALER, J., ZIMA, W. «Solution of Inverse Heat Conduction Problems using Control Volume Approach». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 42:6. 1123-1140.

TIKHONOV, A. N., ARSENIN, V. Y. 1977. *Solutions of Ill-Posed Problems*. Washington, D.C. :V. H. Winston & Sons.

VAFAI, K., DESAI, C. P., CHEN, S. C. 1993. «An investigation of heat transfer process in a chemically reacting packed bed». *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*. 24:2. 127-142.

WEPPEN, P. 2001. «Process Calorimetry on Composting of Municipal Organic Wastes». *Biomass and Bioenergy*. 21:4. 289-299.

YANG, C. Y. 1998. «Solving the Two-Dimensional Inverse heat Source Problem through the Linear Least-Squares Error Method». *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 41:2. 393-398.

YANG, G. Z., ZABARAS, N. 1998. «An Adjoint Method for the Inverse Design of Solidification Processes with Natural Convection». *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 42:6. 1121-1144.

ZABARAS, N., YANG, G. 1997. «A Functional Optimization Formulation and Implementation of an Inverse Natural Convection Problem». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 144:3-4. 245-274.

ZUECO, J., ALHAMA, F., GONZALEZ FERNANDEZ, C. F. 2003. «An inverse problem to estimate temperature dependent heat capacity under convection processes». *Heat and Mass Transfer*. 39:7. 599-604.

ANNEXES

Annexe I : Dérivation des équations adjointes

I.1 Formulation générale

On débute la dérivation des équations à partir de l'expression générale de la dérivée directionnelle de l'erreur :

$$D_{\Delta}E = \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt + \langle \mathbf{D}(\tilde{\mathbf{U}}) | \bar{\mathbf{U}} \rangle \quad (\text{AI.1})$$

L'équation (2.53) peut s'exprimer au long comme :

$$\begin{aligned} D_{\Delta}E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{\Psi} \left\{ \nabla^2 \tilde{\Psi} - Ra \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{T} \left\{ \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} T + \mathbf{u} \tilde{T}) - \nabla^2 \tilde{T} - \tilde{Q} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{S} \left\{ \varepsilon \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} S + \mathbf{u} \tilde{S}) - \frac{1}{Le_s} \nabla^2 \tilde{S} - \tilde{S} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{X} \left\{ \varepsilon \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} X + \mathbf{u} \tilde{X}) - \frac{1}{Le_x} \nabla^2 \tilde{X} - \tilde{X} \right\} dA dt \end{aligned} \quad (\text{AI.2})$$

Avec les deux identités suivantes, dans lesquelles ϕ représente une variable scalaire :

$$\bar{\phi} \nabla^2 \tilde{\phi} = \tilde{\phi} \nabla^2 \bar{\phi} + \nabla \cdot (\bar{\phi} \nabla \tilde{\phi} - \tilde{\phi} \nabla \bar{\phi}) \quad (\text{AI.3})$$

$$\bar{\phi} \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \phi + \mathbf{u} \tilde{\phi}) = \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \phi \bar{\phi} + \mathbf{u} \tilde{\phi} \bar{\phi}) - \phi (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi} - \tilde{\phi} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \bar{\phi} \quad (\text{AI.4})$$

on peut ensuite développer l'équation (AI.2) en :

$$\begin{aligned}
 D_{\Delta} E = & \int_0^{t_r} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\
 & + \int_0^{t_r} \int_A \left\{ \tilde{\psi} \nabla^2 \tilde{\psi} + \nabla \cdot (\tilde{\psi} \nabla \tilde{\psi} - \tilde{\psi} \nabla \tilde{\psi}) \right. \\
 & \quad \left. - Ra \tilde{\psi} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_r} \int_A \left\{ \bar{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} T \bar{T} + \mathbf{u} \tilde{T} \bar{T}) - T (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{T} - \tilde{T} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \bar{T} \right. \\
 & \quad \left. - \tilde{T} \nabla^2 \bar{T} - \nabla \cdot (\bar{T} \nabla \tilde{T} - \tilde{T} \nabla \bar{T}) - \bar{T} \tilde{Q} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_r} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} S \bar{S} + \mathbf{u} \tilde{S} \bar{S}) - S (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{S} - \tilde{S} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \bar{S} \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\tilde{S}}{Le_s} \nabla^2 \bar{S} - \frac{1}{Le_s} \nabla \cdot (\bar{S} \nabla \tilde{S} - \tilde{S} \nabla \bar{S}) - \bar{S} \tilde{S} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_r} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} X \bar{X} + \mathbf{u} \tilde{X} \bar{X}) - X (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{X} - \tilde{X} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \bar{X} \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\tilde{X}}{Le_x} \nabla^2 \bar{X} - \frac{1}{Le_x} \nabla \cdot (\bar{X} \nabla \tilde{X} - \tilde{X} \nabla \bar{X}) - \bar{X} \tilde{X} \right\} dA dt \quad (AI.5)
 \end{aligned}$$

On utilise maintenant le théorème de la divergence, avec un champ de vecteurs $\mathbf{u}$:

$$\int_A \nabla \cdot \mathbf{u} dA = \int_{dA} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dl = \int_{dA} \mathbf{u}_n dl, \quad \text{avec } \mathbf{u}_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \quad (AI.6)$$

où dA représente le contour de la surface A . Le théorème peut également s'appliquer sous la forme suivante :

$$\int_A \nabla \cdot (\nabla \phi) dA = \int_{dA} \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dl = \int_{dA} \frac{\partial \phi}{\partial n} dl, \quad \text{avec } \frac{\partial \phi}{\partial n} = \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \quad (AI.7)$$

Ceci permet de réécrire le membre de droite de l'équation (AI.5) :

$$\begin{aligned}
D_{\Delta} E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\
& + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \tilde{\psi} \nabla^2 \tilde{\psi} - Ra \tilde{\psi} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} \right\} dA dt \\
& + \int_0^{t_f} \int_{dA} \left(\tilde{\psi} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial n} - \tilde{\psi} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial n} \right) dldt \\
& + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \tilde{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} - T(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \tilde{T} - \tilde{T}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \tilde{T} - \tilde{T} \nabla^2 \tilde{T} - \tilde{T} \tilde{Q} \right\} dA dt \\
& + \int_0^{t_f} \int_{dA} \left\{ \tilde{T} (\tilde{\mathbf{u}}_n T + \mathbf{u}_n \tilde{T}) - \left(\tilde{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial n} - \tilde{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial n} \right) \right\} dldt \\
& + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \tilde{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} - S(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \tilde{S} - \tilde{S}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \tilde{S} - \frac{\tilde{S}}{Le_s} \nabla^2 \tilde{S} - \tilde{S} \tilde{S} \right\} dA dt \\
& + \int_0^{t_f} \int_{dA} \left\{ \tilde{S} (\tilde{\mathbf{u}}_n S + \mathbf{u}_n \tilde{S}) - \frac{1}{Le_s} \left(\tilde{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial n} - \tilde{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial n} \right) \right\} dldt \\
& + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \tilde{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} - X(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \tilde{X} - \tilde{X}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \tilde{X} - \frac{\tilde{X}}{Le_x} \nabla^2 \tilde{X} - \tilde{X} \tilde{X} \right\} dA dt \\
& + \int_0^{t_f} \int_{dA} \left\{ \tilde{X} (\tilde{\mathbf{u}}_n X + \mathbf{u}_n \tilde{X}) - \frac{1}{Le_x} \left(\tilde{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial n} - \tilde{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial n} \right) \right\} dldt
\end{aligned} \tag{AI.8}$$

En imposant les conditions limites homogènes du problème adjoint, i.e. :

$$\tilde{\psi} = 0, \text{ sur toute la frontière} \tag{AI.9}$$

$$\tilde{T} = 0, \text{ lorsque } T \text{ est imposé} \tag{AI.10}$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial n} = 0, \text{ lorsque } \frac{\partial T}{\partial n} \text{ est imposé} \tag{AI.11}$$

$$\tilde{S} = 0, \text{ lorsque } S \text{ est imposé} \tag{AI.12}$$

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial n} = 0, \text{ lorsque } \frac{\partial S}{\partial n} \text{ est imposé} \tag{AI.13}$$

$$\tilde{X} = 0, \text{ lorsque } X \text{ est imposé} \tag{AI.14}$$

$$\frac{\partial \tilde{X}}{\partial n} = 0, \text{ lorsque } \frac{\partial X}{\partial n} \text{ est imposé} \tag{AI.15}$$

les termes à l'intérieur des intégrales le long de la frontière dA s'annulent et l'équation (AI.8) devient :

$$\begin{aligned}
 D_{\Delta}E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \tilde{\psi} \nabla^2 \tilde{\psi} - Ra \tilde{\psi} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \bar{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} - T(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{T} - \tilde{T}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \bar{T} - \tilde{T} \nabla^2 \bar{T} - \bar{T} \tilde{Q} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} - S(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{S} - \tilde{S}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \bar{S} - \frac{\tilde{S}}{Le_s} \nabla^2 \bar{S} - \bar{S} \tilde{S} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} - X(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{X} - \tilde{X}(\mathbf{u} \cdot \nabla) \bar{X} - \frac{\tilde{X}}{Le_x} \nabla^2 \bar{X} - \bar{X} \tilde{X} \right\} dA dt
 \end{aligned} \tag{AI.16}$$

En regroupant les termes de convection-diffusion, on obtient :

$$\begin{aligned}
 D_{\Delta}E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \tilde{\psi} \nabla^2 \tilde{\psi} - Ra \tilde{\psi} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \bar{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} - \tilde{T} \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) - T(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{T} - \bar{T} \tilde{Q} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} - \tilde{S} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{Le_s} \nabla \bar{S} \right) - S(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{S} - \bar{S} \tilde{S} \right\} dA dt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} - \tilde{X} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{Le_x} \nabla \bar{X} \right) - X(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{X} - \bar{X} \tilde{X} \right\} dA dt
 \end{aligned} \tag{AI.17}$$

L'identité suivante peut se vérifier en introduisant le jacobien J :

$$\phi(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi} = -\nabla_n \times (\phi \tilde{\psi} \nabla \bar{\phi}) + \tilde{\psi} J(\phi, \bar{\phi}) \quad (\text{AI.18})$$

En intégrant cette égalité, nous obtenons :

$$\int_0^{t_f} \int_A \phi(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi} \, dA dt = \int_0^{t_f} \int_A -\nabla_n \times (\phi \tilde{\psi} \nabla \bar{\phi}) \, dA dt + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{\psi} J(\phi, \bar{\phi}) \, dA dt \quad (\text{AI.19})$$

Il vient en utilisant le théorème de Stokes

$$\int_A (\nabla \times \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dA = \int_A (\nabla_n \times \mathbf{u}) \, dA = \int_{dA} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{l} \quad (\text{AI.20})$$

la forme équivalente :

$$\int_0^{t_f} \int_A \phi(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\phi} \, dA dt = \int_0^{t_f} \int_{dA} -\phi \tilde{\psi} \nabla \bar{\phi} \cdot d\mathbf{l} dt + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{\psi} J(\phi, \bar{\phi}) \, dA dt \quad (\text{AI.21})$$

En appliquant les conditions limites, le premier terme du membre de droite s'annule, ce qui permet de réécrire l'équation (AI.17) sous la forme :

$$\begin{aligned} D_\Delta E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \, dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \tilde{\psi} \nabla^2 \bar{\psi} - \text{Ra} \bar{\psi} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} \right\} \, dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \bar{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} - \tilde{T} \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) - \tilde{\psi} J(T, \bar{T}) - \bar{T} \tilde{Q} \right\} \, dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} - \tilde{S} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla \bar{S} \right) - \tilde{\psi} J(S, \bar{S}) - \bar{S} \tilde{S} \right\} \, dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} - \tilde{X} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla \bar{X} \right) - \tilde{\psi} J(X, \bar{X}) - \bar{X} \tilde{X} \right\} \, dA dt \end{aligned} \quad (\text{AI.22})$$

Puisque $\hat{\mathbf{g}}$ est un vecteur constant, on a l'égalité suivante :

$$\bar{\psi} \nabla_n \times (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} = \nabla_n \times \bar{\psi} (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}} - (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \quad (\text{AI.23})$$

Avec le théorème de Stokes et les conditions limites, on démontre que :

$$\int_0^{t_f} \int_A \nabla_n \times (\bar{\psi} (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}}) dA dt = \int_0^{t_f} \int_{dA} (\bar{\psi} (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \hat{\mathbf{g}}) \cdot d\mathbf{l} dt = 0 \quad (\text{AI.24})$$

L'équation (AI.22) peut donc être réécrite telle que :

$$\begin{aligned} D_\Delta E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \bar{\psi} \nabla^2 \bar{\psi} + \text{Ra} (\tilde{T} + N_s \tilde{S} + N_x \tilde{X}) \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \bar{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} - \tilde{T} \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) - \bar{\psi} J(T, \bar{T}) - \bar{T} \tilde{Q} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} - \tilde{S} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla \bar{S} \right) - \bar{\psi} J(S, \bar{S}) - \bar{S} \tilde{S} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} - \tilde{X} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla \bar{X} \right) - \bar{\psi} J(X, \bar{X}) - \bar{X} \tilde{X} \right\} dA dt \end{aligned} \quad (\text{AI.25})$$

En regroupant les termes, on a :

$$\begin{aligned} D_\Delta E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \bar{\psi} \nabla^2 \bar{\psi} - \bar{\psi} J(T, \bar{T}) - \bar{\psi} J(S, \bar{S}) - \bar{\psi} J(X, \bar{X}) \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \bar{T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} - \tilde{T} \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) + \text{Ra} \tilde{T} \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) - \bar{T} \tilde{Q} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{S} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} - \tilde{S} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla \bar{S} \right) + \text{Ra} N_s \tilde{S} \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) - \bar{S} \tilde{S} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \varepsilon \bar{X} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial t} - \tilde{X} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla \bar{X} \right) + \text{Ra} N_x \tilde{X} \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) - \bar{X} \tilde{X} \right\} dA dt \end{aligned} \quad (\text{AI.26})$$

En ce qui a trait aux dérivées temporelles, l'intégration par parties permet d'écrire la relation suivante pour un domaine (A) constant dans le temps :

$$\int_0^{t_f} \int_A \bar{\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} dA dt = \int_A \left[(\bar{\phi} \tilde{\phi})_{t=t_f} - (\bar{\phi} \tilde{\phi})_{t=0} \right] dA - \int_0^{t_f} \int_A \tilde{\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} dA dt \quad (\text{AI.27})$$

Il faut maintenant imposer des conditions finales à $t = t_f$ nulles du problème adjoint, qui deviendront les conditions initiales à $\tau = 0$ suite au changement de variables $\tau = t_f - t$.

$$t = t_f \Rightarrow \begin{cases} \bar{T} = 0 \\ \bar{S} = 0 \\ \bar{X} = 0 \end{cases} \quad (\text{AI.28})$$

Avec les conditions initiales homogènes du problème adjoint, l'équation (AI.27) devient :

$$\int_0^{t_f} \int_A \bar{\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} dA dt = - \int_0^{t_f} \int_A \tilde{\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} dA dt \quad (\text{AI.29})$$

ce qui permet d'écrire l'équation (AI.26) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} D_{\Delta} E = & \int_0^{t_f} \int_A (T - T_m) \tilde{T} \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ \tilde{\psi} \nabla^2 \bar{\psi} - \tilde{\psi} J(T, \bar{T}) - \tilde{\psi} J(S, \bar{S}) - \tilde{\psi} J(X, \bar{X}) \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ -\tilde{T} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - \tilde{T} \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) + \text{Ra} \tilde{T} \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) - \bar{T} \tilde{Q} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ -\tilde{\epsilon} \tilde{S} \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} - \tilde{S} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla \bar{S} \right) + \text{Ra} N_s \tilde{S} \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) - \bar{S} \tilde{S} \right\} dA dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_A \left\{ -\tilde{\epsilon} \tilde{X} \frac{\partial \bar{X}}{\partial t} - \tilde{X} \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla \bar{X} \right) + \text{Ra} N_x \tilde{X} \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) - \bar{X} \tilde{X} \right\} dA dt \end{aligned} \quad (\text{AI.30})$$

En regroupant les termes selon les variables de sensibilité, l'équation (AI.30) devient :

$$\begin{aligned}
 D_{\Delta}E = & \int_0^{t_f} \int_A -\bar{T}\tilde{Q} - \bar{S}\tilde{S} - \bar{X}\tilde{X} \, dAdt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{\psi} \left\{ \nabla^2 \bar{\psi} - J(T, \bar{T}) - J(S, \bar{S}) - J(X, \bar{X}) \right\} dAdt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{T} \left\{ -\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) + Ra \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + (T - T_m) \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\} dAdt \quad (AI.31) \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{S} \left\{ -\varepsilon \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{Le_s} \nabla \bar{S} \right) + Ra N_s \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \right\} dAdt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{X} \left\{ -\varepsilon \frac{\partial \bar{X}}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{Le_x} \nabla \bar{X} \right) + Ra N_x \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \right\} dAdt
 \end{aligned}$$

Il reste maintenant à définir les termes sources, qui dépendent du problème à résoudre, pour obtenir les équations adjointes dans chaque cas.

I.2 Détermination de la source de chaleur

Pour les équations du problème adjoint visant à déterminer une source de chaleur Q , on définit les termes source de l'équation (AI.31) comme ceci :

$$\tilde{Q} = \Delta Q \quad (AI.32)$$

$$\tilde{S} = -\frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S} X + S \tilde{X} \right] \quad (AI.33)$$

$$\tilde{X} = \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S} X + S \tilde{X} \right] - K_d \tilde{X} \quad (AI.34)$$

En reportant ces dernières équations dans l'équation (AI.31) et en regroupant les termes selon les variables de sensibilité, on établit que :

$$\begin{aligned}
 D_{\Delta Q} E(Q) = & \int_0^{t_f} \int_A -\bar{T} \Delta Q \, dAdt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{\psi} \left\{ \nabla^2 \bar{\psi} - J(T, \bar{T}) - J(S, \bar{S}) - J(X, \bar{X}) \right\} dAdt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{T} \left\{ -\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) + Ra \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + (T - T_m) \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\} dAdt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{S} \left\{ -\varepsilon \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{Le_s} \nabla \bar{S} \right) + Ra N_s \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \right. \\
 & \quad \left. + \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \left(\frac{1}{Y} \bar{S} - \bar{X} \right) X \right\} dAdt \\
 & + \int_0^{t_f} \int_A \tilde{X} \left\{ -\varepsilon \frac{\partial \bar{X}}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{Le_x} \nabla \bar{X} \right) + Ra N_x \nabla_n \times (\bar{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu S}{K_s + S} \right) \bar{S} - \left(\frac{\mu S}{K_s + S} - K_D \right) \bar{X} \right\} dAdt
 \end{aligned} \tag{AI.35}$$

Cette dernière équation peut être écrite sous forme compacte pour retrouver l'expression de l'équation (AI.36) :

$$D_{\Delta Q} E(Q) = \int_0^{t_f} \int_A -\bar{T} \Delta Q \, dAdt + \langle \tilde{\mathbf{U}} | \mathbf{D}^\dagger(\bar{\mathbf{U}}) \rangle \tag{AI.36}$$

En imposant l'annulation des termes entre accolades de l'équation (AI.35), soit $\mathbf{D}^\dagger(\bar{\mathbf{U}}) = 0$, on obtient les équations du problème adjoint présentées au chapitre II.

I.3 Détermination du taux de croissance

Pour les équations du problème adjoint visant à déterminer le taux de croissance spécifique maximum $\mu_{\max}$, on définit les termes source de l'équation (AI.31) comme ceci :

$$\tilde{Q} = \Delta\mu \frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X + \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S}X + S\tilde{X} \right] \quad (\text{AI.37})$$

$$\tilde{S} = \Delta\mu \frac{-1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X - \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S}X + S\tilde{X} \right] \quad (\text{AI.38})$$

$$\tilde{X} = \Delta\mu \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X + \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left[\left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) \tilde{S}X + S\tilde{X} \right] - K_d \tilde{X} \quad (\text{AI.39})$$

En reportant ces dernières équations dans l'équation (AI.31), on obtient, après regroupement des termes :

$$\begin{aligned} D_{\Delta\mu} E(\mu) = & \int_0^{t_r} \int_A -\frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) X (\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) \Delta\mu \, dAdt \\ & + \int_0^{t_r} \int_A \tilde{\psi} \left\{ \nabla^2 \tilde{\psi} - J(T, \bar{T}) - J(S, \bar{S}) - J(X, \bar{X}) \right\} dAdt \\ & + \int_0^{t_r} \int_A \tilde{T} \left\{ -\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{u} \bar{T} + \nabla \bar{T}) + \text{Ra} \nabla_n \times (\tilde{\psi} \hat{\mathbf{g}}) + (T - T_m) \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\} dAdt \\ & + \int_0^{t_r} \int_A \tilde{S} \left\{ -\varepsilon \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{S} + \frac{1}{\text{Le}_s} \nabla \bar{S} \right) + \text{Ra} N_s \nabla_n \times (\tilde{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) \left(\frac{K_s}{K_s + S} \right) X (\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) \right\} dAdt \\ & + \int_0^{t_r} \int_A \tilde{X} \left\{ -\varepsilon \frac{\partial \bar{X}}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \bar{X} + \frac{1}{\text{Le}_x} \nabla \bar{X} \right) + \text{Ra} N_x \nabla_n \times (\tilde{\psi} \hat{\mathbf{g}}) \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{Y} \left(\frac{\mu}{K_s + S} \right) S (\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) + K_d \bar{X} \right\} dAdt \end{aligned} \quad (\text{AI.40})$$

Cette dernière équation peut être écrite sous forme compacte pour retrouver l'expression de l'équation (AI.41) :

$$D_{\Delta\mu}E(\mu) = \int_0^t \int_A -\frac{1}{Y} \left(\frac{S}{K_S + S} \right) X(\bar{T} - \bar{S} + Y\bar{X}) \Delta\mu \, dA dt + \langle \tilde{U} | D^*(\bar{U}) \rangle \quad (\text{AI.41})$$

En imposant l'annulation des termes entre accolades de l'équation (AI.40), soit $D^*(\bar{U}) = 0$, on obtient finalement les équations du problème adjoint présentées au chapitre II.

Annexe II : Dérivation des équations de l'algorithme du gradient conjugué

On définit le produit scalaire de deux fonctions, f et g , que l'on suppose intégrable sur l'intervalle $[0, t_f]$ tel que :

$$\langle f | g \rangle = \int_0^{t_f} f(t) g(t) dt = \langle g | f \rangle \quad (\text{AII.1})$$

On débute la dérivation des équations à partir de l'expression générale de l'erreur :

$$E = \frac{1}{2} \|T - T_m\|^2 \equiv \frac{1}{2} \langle T - T_m | T - T_m \rangle \quad (\text{AII.2})$$

Le principe de base de l'algorithme consiste à effectuer un pas α^k dans la direction p^k qui permettra, à partir de l'approximation courante de la source de chaleur Q^k (ou du taux de croissance μ^k), de déterminer Q^{k+1} qui minimise l'erreur E définie à l'équation (AII.2). La formule de récurrence pour la suite d'approximations est donnée par :

$$Q^{k+1} = Q^k + \alpha^k p^k \quad (\text{AII.3})$$

On pose ensuite l'hypothèse que la température dépend linéairement de Q selon la relation :

$$T = LQ \quad (\text{AII.4})$$

dans laquelle L est un opérateur linéaire qui, dans le cas discret, s'exprime par une matrice. Ce qui permet de réécrire l'équation (AII.2) sous la forme :

$$E = \frac{1}{2} \|LQ - T_m\|^2 \quad (\text{AII.5})$$

En particulier, si l'on reporte l'équation (AII.3) dans l'équation (AII.5), on obtient :

$$E^{k+1} = \frac{1}{2} \|L(Q^{k+1}) - T_m\|^2 = \frac{1}{2} \|L(Q^k + \alpha^k p^k) - T_m\|^2 \quad (\text{AII.6})$$

La valeur de α^k doit par définition minimiser l'erreur. Il faut donc annuler la dérivée de l'erreur par rapport à α^k , qui se développe comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{dE^{k+1}}{d\alpha^k} &= \langle L(Q^k + \alpha^k p^k) - T_m | Lp^k \rangle = 0 \\ &= \langle LQ^k - T_m + \alpha^k Lp^k | Lp^k \rangle = 0 \\ &= \langle LQ^k - T_m | Lp^k \rangle + \langle \alpha^k Lp^k | Lp^k \rangle = 0 \\ &= \langle LQ^k - T_m | Lp^k \rangle + \alpha^k \langle Lp^k | Lp^k \rangle = 0 \end{aligned} \quad (\text{AII.7})$$

Il suffit maintenant de substituer les identités suivantes :

$$\begin{aligned} T^k &= LQ^k \\ \tilde{T}^k &= Lp^k \end{aligned} \quad (\text{AII.8})$$

dans l'équation (AII.7) pour obtenir le résultat pour la valeur optimale de α^k :

$$\alpha^k = - \frac{\langle T^k - T_m | \tilde{T}^k \rangle}{\|\tilde{T}^k\|^2} \quad (\text{AII.9})$$

Cette relation s'applique peu importe que l'on dispose d'un ou de plusieurs senseurs ponctuels.

À partir de la relation (AII.5), on dérive l'équation du gradient de l'erreur :

$$\begin{aligned}
 \frac{dE^{k+1}}{d\alpha^k} &= \left\langle \nabla E^{k+1} \left| \frac{dQ^{k+1}}{d\alpha^k} \right. \right\rangle = 0 \\
 &= \left\langle \nabla E^{k+1} \left| \frac{d(Q^k + \alpha^k p^k)}{d\alpha^k} \right. \right\rangle = 0 \\
 &= \left\langle \nabla E^{k+1} \left| p^k \right. \right\rangle = 0
 \end{aligned} \tag{AII.10}$$

De l'équation (AII.7), on a :

$$\frac{dE^{k+1}}{d\alpha^k} = \left\langle L^T (LQ^{k+1} - T_m) \left| p^k \right. \right\rangle \tag{AII.11}$$

D'où, par comparaison avec l'équation (AII.10), on obtient :

$$\begin{aligned}
 \nabla E^{k+1} &= L^T (LQ^{k+1} - T_m) \\
 &= L^T (T^{k+1} - T_m)
 \end{aligned} \tag{AII.12}$$

Par réduction, on peut également écrire :

$$\nabla E^k = L^T (T^k - T_m) \tag{AII.13}$$

En réarrangeant les termes du numérateur de l'équation (AII.9) et en utilisant la relation (AII.12), on obtient :

$$\begin{aligned}
\langle T^k - T_m | \tilde{T}^k \rangle &= \langle T^k - T_m | L p^k \rangle \\
&= \langle L^T (T^k - T_m) | p^k \rangle \\
&= \langle \nabla E^k | p^k \rangle
\end{aligned} \tag{AII.14}$$

Ce qui permet d'obtenir une forme alternative de l'équation (AII.9).

$$\alpha^k = - \frac{\langle \nabla E^k | p^k \rangle}{\|\tilde{T}^k\|^2} \tag{AII.15}$$

De plus, en reprenant la dérivée de l'erreur de l'équation (AII.7) qu'on peut également écrire :

$$\begin{aligned}
\frac{dE^{k+1}}{d\alpha^k} &= \langle \nabla E (Q^k + \alpha^k p^k) | p^k \rangle = 0 \\
&= \langle \nabla E^{k+1} | p^k \rangle = 0
\end{aligned} \tag{AII.16}$$

on démontre ainsi l'orthogonalité de ∇E^{k+1} et p^k .

L'algorithme doit également déterminer la direction de descente p^k sous forme d'une combinaison linéaire de p^{k-1} et de la direction de Cauchy au point Q^k . Cette procédure permet d'obtenir une direction p^k conjugué à p^{k-1} . On pose alors en premier lieu la relation suivante :

$$p^k = -\nabla E^k + \gamma^k p^{k-1} \tag{AII.17}$$

On choisi le coefficient réel γ^k de telle sorte que :

$$\langle p^k | A p^{k-1} \rangle = 0 \quad (\text{AII.18})$$

où $A = \langle L | L \rangle$ est matrice symétrique positive. En insérant l'équation (AII.17) dans l'équation (AII.18), on obtient :

$$\begin{aligned} \langle -\nabla E^k + \gamma^k p^{k-1} | A p^{k-1} \rangle &= 0 \\ \langle -\nabla E^k | A p^{k-1} \rangle + \langle \gamma^k p^{k-1} | A p^{k-1} \rangle &= 0 \\ -\langle \nabla E^k | A p^{k-1} \rangle + \gamma^k \langle p^{k-1} | A p^{k-1} \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{AII.19})$$

En réarrangeant les termes, on déduit que :

$$\gamma^k = \frac{\langle A p^{k-1} | \nabla E^k \rangle}{\langle A p^{k-1} | p^{k-1} \rangle} \quad (\text{AII.20})$$

Compte tenu de l'expression du gradient en termes de Q et T_m (AII.12), on a :

$$\begin{aligned} \nabla E^k &= A Q^k - L^T T_m \\ &= A Q^{k-1} + A \alpha^{k-1} p^{k-1} - L^T T_m \end{aligned} \quad (\text{AII.21})$$

et

$$\nabla E^{k-1} = A Q^{k-1} - L^T T_m \quad (\text{AII.22})$$

En soustrayant l'équation (AII.22) de l'équation (AII.21), on peut écrire :

$$\nabla E^k - \nabla E^{k-1} = A \alpha^{k-1} p^{k-1} \quad (\text{AII.23})$$

En reportant cette dernière relation dans l'équation (AII.20), on obtient :

$$\gamma^k = \frac{\langle \nabla E^k - \nabla E^{k-1} | \nabla E^k \rangle}{\langle \nabla E^k - \nabla E^{k-1} | p^{k-1} \rangle} \quad (\text{AII.24})$$

En ce qui a trait au dénominateur, on peut le développer, avec la relation (AII.17), en :

$$\begin{aligned} \langle \nabla E^k - \nabla E^{k-1} | p^{k-1} \rangle &= \langle \nabla E^k | p^{k-1} \rangle - \langle \nabla E^{k-1} | p^{k-1} \rangle \\ &= \langle \nabla E^k | p^{k-1} \rangle - \langle \nabla E^{k-1} | -\nabla E^{k-1} + \gamma^{k-1} p^{k-2} \rangle \\ &= \langle \nabla E^k | p^{k-1} \rangle + \langle \nabla E^{k-1} | \nabla E^{k-1} \rangle - \langle \nabla E^{k-1} | \gamma^{k-1} p^{k-2} \rangle \end{aligned} \quad (\text{AII.25})$$

La relation d'orthogonalité (AII.16) permet d'effectuer les simplifications suivantes :

$$\begin{aligned} \langle \nabla E^k | p^{k-1} \rangle &= 0 \\ \langle \nabla E^{k-1} | \gamma^{k-1} p^{k-2} \rangle &= \gamma^{k-1} \langle \nabla E^{k-1} | p^{k-2} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (\text{AII.26})$$

qui réparties dans le membre de droite de l'équation (AII.25), permettent d'écrire :

$$\langle \nabla E^k - \nabla E^{k-1} | p^{k-1} \rangle = \langle \nabla E^{k-1} | \nabla E^{k-1} \rangle = \|\nabla E^{k-1}\|^2 \quad (\text{AII.27})$$

On obtient finalement la formule pour le calcul du coefficient γ :

$$\gamma^k = \frac{\langle \nabla E^k - \nabla E^{k-1} | \nabla E^k \rangle}{\|\nabla E^{k-1}\|^2} \quad (\text{AII.28})$$

que l'on retrouve au chapitre III.