



AVERTISSEMENT

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

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

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

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

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

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

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

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

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

NANCY – UNIVERSITÉ

Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée
École Doctorale EMMA

THÈSE

présentée en vue pour obtention du grade de :

DOCTEUR DE L'I.N.P.L.

spécialité : Mécanique-Énergétique

par :

Yuri Mizyakin

**DIFFÉRENTS PROBLÈMES THÉORIQUES ET
APPLIQUÉS DE TRANSPORT DISSIPATIF EN
MILIEUX POREUX**

Soutenue publiquement le 22 septembre 2010 devant la Commission d'Examen
composé de

Président : BOURGEAT Alain
Rapporteurs : AMAZIANE Brahim
BERTIN Henri
Examineur : PEREIRA Antonio
Invité : MONTEL François
Directeur de thèse : PANFILOV Mikhaïl
Co-Directeur de thèse : MOYNE Christian

Remerciements

Je remercie sincèrement Monsieur Mikhaïl PANFILOV, Professeur à l'Institut National Polytechnique de Lorraine, de m'avoir invité à travailler dans son équipe et d'avoir accepté d'être le Directeur de cette thèse. J'ai apprécié également son soutien pendant mon installation en France.

J'adresse mes remerciements à Monsieur Christian MOYNE, Directeur de Recherche CNRS, Directeur du Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée, de m'avoir accueilli dans le laboratoire ainsi que d'avoir co-encadré ma thèse. Ses conseils scientifiques et soutien moral à la fin de préparation de cette thèse m'ont permis de la mener à bien.

Je remercie l'entreprise Total et, particulièrement, Monsieur François MONTEL d'avoir proposé ce projet intéressant et d'avoir pris en charge son financement.

Je remercie également le président du jury Monsieur Alain BOURGEAT, Professeur Emérite à l'Université de Lyon et Messieurs Brahim AMAZIANE, Maître de Conférences à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour et Henry BERTIN, Directeur de Recherche CNRS, d'avoir accepté d'être les rapporteurs de mon travail et de l'intérêt qu'ils y ont porté.

Table des matières

PREFACE	5
CHAPITRE 1. Transport dissipatif de matière et chaleur dans un milieu homogène	9
§ 1.1 Formulation mathématique du problème	9
§ 1.2 Fermeture des équations de bilan	17
§ 1.3 Equilibre gravitationnel d'un mélange bicomposé	29
CHAPITRE 2. Transport dissipatif de matière et chaleur dans un milieu hétérogène	34
§ 2.1 Introduction	34
§ 2.2 Enoncé du problème pré-homogénéisé	35
§ 2.3 Homogénéisation des équations de bilan dans un milieu périodique	39
§ 2.4 Le cas du milieu stratifié	44
§ 2.5 Conclusion	47
CHAPITRE 3. Etude analytique de balayage d'un réservoir de gaz par un aquifère	49
§ 3.1 Introduction	49
§ 3.2 Séparation des problèmes couplés et réduction de l'information cherchée	53
§ 3.3 Approximation de la distribution de concentration à l'intérieur et en dessus du réservoir	56
§ 3.4 Fermeture du problème	62
§ 3.5 Etude qualitative de la solution obtenue	68
§ 3.6 Le cas de convection modérée	70
§ 3.7 Le cas de convection forte	72
§ 3.8 Le cas d'absence de convection	76
Annexe A. Solution du problème de Dirichlet dans de demi-espace et obtention de l'expression pour le flux à travers la limite	77
Annexe B. Le retour de transformation de Laplace	80
CHAPITRE 4. Simulation numérique de balayage d'un réservoir par un aquifère	84

§ 4.1 Introduction	84
§ 4.2 Formulation faible du problème et la méthode de projection	86
§ 4.3 Choix des fonctions de base et discrétisation géométrique	89
§ 4.4 Calcul des éléments des matrices	92
§ 4.5 Approximation des conditions limites de Dirichlet	98
§ 4.6 Approximation du terme de convection et discrétisation temporelle	99
§ 4.7 Formulation équivalente du problème de balayage d'un réservoir	101
§ 4.8 Résultats de modélisation	103
CHAPITRE 5. Convection forcée dans les champs croisés de gravité et de chaleur	110
§ 5.1 Introduction	110
§ 5.2 Ségrégation thermo-gravitationnelle dans une colonne infinie	110
§ 5.3 Énoncé du problème pour les écoulements stationnaires non-inertiels	115
§ 5.4 Des solutions analytiques pour les écoulements non-inertiels	119
CONCLUSION	123
Liste de citations	127

Préface

Les objectifs de cette thèse ont été définis à l'occasion de plusieurs entretiens avec les directeurs de la compagnie sponsor (la société Total), François Montel et Gilles Sermondadaz, entre mai 2007 et octobre 2009. Le manuscrit compte cinq chapitres et concerne trois problématiques indépendantes : le transport dissipatif dans des milieux hétérogènes géologiques ; un problème de transport dans un réservoir souterrain de gaz par dissolution dans un aquifère ; l'effet de ségrégation compositionnelle dans des réservoirs où le gradient de température est incliné par rapport à la verticale [29].

Le point commun entre les problèmes traités sont les processus irréversibles de redistribution de la composition chimique d'un fluide dans les réservoirs souterrains naturels ou artificiels (dépôts de gaz). Les réservoirs naturels d'hydrocarbures sont des systèmes généralement de grandes dimensions spatiales et non homogènes du point de vue de leur composition chimique. La prédiction de la distribution de composition dans un réservoir souterrain est un des problèmes théoriques de base pour l'exploitation des gisements d'hydrocarbures car c'est la composition chimique du produit récupéré qui définit sa valeur énergétique. Outre l'état initial (avant exploitation) du réservoir, il est également important de surveiller les processus pouvant changer les qualités du produit en cours d'exploitation comme le balayage du réservoir par un aquifère (les chapitres 3 et 4 sont consacrés à ce sujet).

L'établissement d'un état stationnaire d'un mélange multicomposé dans un réservoir avant exploitation est le résultat de l'annulation des flux de diffusion qui obéissent à une loi plus générale que la loi de Fick. Dans l'approche de diffusion de Fick, l'état stationnaire entraînerait un champ uniforme de composition chimique. En réalité, la composition chimique ne sera pas uniforme suite aux effets de thermo- et baro-diffusion. Ces deux processus trient en quelque sorte les composants du mélange selon leur masse moléculaire dans les champs de pression et de température [13, 7, 27, 47]. L'effet de thermo-diffusion (ou effet Soret-Dufour) a lieu dans un réservoir souterrain suite au gradient de température (normalement $\approx 4\text{K}/\text{km}$ et dirigé parallèlement la gravité), l'effet de baro-diffusion est provoqué par le gradient hydrostatique de pression important dans les systèmes de grande profondeur. Le phénomène de thermo-diffusion dans des réservoirs souterrains a été examiné dans de nombreuses références [18, 19, 11, 31, 29, 31, 34, 47]. Dans son ouvrage [4], Bedrikovetski a obtenu les distributions de composition chimique dans un champ imposé de température pour différentes

états thermodynamiques (mélange binaire de gaz parfaits, solution faiblement diluée). Le problème de la ségrégation compositionnelle isotherme par baro-diffusion a été examiné dans [43, 16, 38, 42, 20].

Les contributions proportionnelles aux gradients de température et pression pour les flux de diffusion des composants s'introduisent dans le cadre de la thermodynamique linéaire des processus irréversibles [36, 17, 8]. Normalement, ces flux supplémentaires de diffusion représentent des effets secondaires par rapport au flux causé par la variation de composition chimique (ce qui rend la loi de Fick valide dans une certaine approche). Mais, si les flux de diffusion selon la loi de Fick sont faibles ou négligeables, les processus de thermo- et baro-diffusion gagnent en importance. Le premier chapitre de la thèse est consacré à la déduction, en accord avec les principes de la thermodynamique, d'un modèle généralisé de transport simultané de matière et de chaleur dans un milieu homogène. L'approche phénoménologique de la thermodynamique linéaire des processus irréversibles pour la modélisation du mouvement simultané d'un mélange de plusieurs espèces chimiques est, aujourd'hui, suffisamment développée et éclaircie dans des ouvrages de référence [40, 17]. Le premier chapitre, surtout méthodologique, sert d'introduction à cette problématique en vue du chapitre suivant. Outre la déduction d'un modèle de transport multicompositionnel, nous formulons, sous forme générale, le problème consistant à trouver la distribution de composition chimique dans une colonne verticale d'un mélange binaire de gaz parfaits et obtenons sa solution dans le cas isotherme.

Le chapitre 2 est consacré à l'homogénéisation des équations de bilan obtenues au premier chapitre dans un milieu multiphasique dans l'approche hydrostatique. Un milieu multiphasique (particulièrement un milieu poreux saturé par une phase liquide) est par définition hétérogène. Dans un tel milieu, l'analyse des processus à l'échelle de pores et des hétérogénéités locales devient irréalisable et inutile. L'intérêt principal est d'obtenir les équations décrivant les processus à l'échelle macroscopique ou, autrement dit, d'homogénéiser le problème. L'homogénéisation des équations élémentaires (à l'échelle microscopique) est un problème non trivial d'un point de vue théorique et le choix de la méthode d'homogénéisation dépend des particularités du comportement attendu du système à l'échelle macroscopique. Il est possible que suivant les différentes approches, le même système d'équations élémentaires conduise à des modèles macroscopiques qualitativement différents. Il existe deux approches classiques pour obtenir les équations homogénéisées : une approche phénoménologique appelée théorie des mélanges ou théorie des continus

interagissant expliquée par exemple dans [9, 14, 15, 30, 37, 32] et la technique d'homogénéisation à deux échelles [1, 39]. Remarquons que ces deux méthodes ne sont pas des alternatives l'une à l'autre, mais s'appliquent plutôt à différentes classes de problèmes. La théorie des mélanges se base sur le concept d'un milieu multiphasique vu comme une superposition des plusieurs continus (y compris éventuellement les continus correspondant aux interfaces) où les processus se déroulent indépendamment mais interagissent au moyen de termes phénoménologiques d'échange (qui s'obtiennent comme un résultat du processus d'homogénéisation). Le caractère phénoménologique de la théorie des mélanges entraîne qu'elle ne possède pas de moyens formels pour déterminer les intensités des processus irréversibles étudiés, mais fournit davantage un cadre général. La théorie des mélanges est adaptée aux problèmes où les effets de l'échange (de matière, d'énergie, d'impulsion) entre les phases et les effets interfaciaux jouent un rôle important, d'autant que ces effets s'y introduisent d'une façon naturelle. La structure microscopique de la distribution des phases n'entre pas explicitement dans les relations obtenues au moyen de la théorie des mélanges mais on admet que cette structure détermine l'intensité des processus d'échange.

Dans cette thèse, nous n'étudierons pas la théorie de mélanges mais utiliserons l'approche à deux échelles pour obtenir les relations homogénéisées. Contrairement à la théorie des mélanges, la méthode d'homogénéisation à deux échelles opère directement avec une structure microscopique de distribution des phases et utilise le comportement asymptotique du système d'équations pour obtenir les équations homogénéisées. Il est évident que, techniquement, la structure microscopique d'un milieu hétérogène ne peut être donnée explicitement que dans des cas où cette structure est répétitive : périodique ou stochastique, statistiquement stationnaire. La méthode à deux échelles possède une base mathématique auto-cohérente permettant d'obtenir directement les relations homogénéisées à partir des équations microscopiques lorsque les champs microscopiques des coefficients de transport sont donnés explicitement. Un point faible de cette méthode consiste en ce qu'elle n'est pas adaptée aux équations différentielles avec un opérateur non-symétrique comme dans le cas d'un transport convectif. Pour l'utilisation de la méthode de deux échelles, nous sommes donc limités au cas hydrostatique.

Dans le chapitre 2, nous examinons le problème général du transport de matière et de chaleur dans un milieu de structure périodique. En particulier, nous examinons le cas d'une structure stratifiée typique des formations géologiques.

Les chapitres 3 et 4 sont consacrés à la résolution analytique et numérique du problème de balayage d'un réservoir de gaz par un aquifère. Ce problème présente un intérêt du point de vue de l'exploitation des réservoirs souterrains de stockage de gaz (une description du système étudié est donnée au § 3.1). L'analyse de ce problème permet d'évaluer les fuites de gaz dissous dans l'eau de l'aquifère. Dans le chapitre 4, nous développons un algorithme numérique, basé sur la méthode des éléments finis, appliqué à la résolution du problème examiné. Les deux approches analytique et numérique du problème se complètent l'une l'autre car, d'une part, certaines conclusions théoriques utilisées dans le chapitre 3 ont été faites à partir de l'observation des résultats du calcul numérique effectué au chapitre 4, et, d'autre part, l'accord entre les résultats théoriques et numériques permet une justification des résultats.

Le chapitre 5 est consacré à l'étude d'un mécanisme hypothétique de ségrégation compositionnelle dans un réservoir dans des champs de gravité et de température non colinéaires (∇T n'est pas parallèle à \mathbf{g}). Un réservoir, étendu dans une seule direction, soumis à un champ de température et un champ de gravité pourrait servir de colonne thermo-gravitationnelle naturelle favorisant la ségrégation compositionnelle. Des systèmes analogues artificiels sont employés dans le domaine de la séparation thermique d'isotopes [7] et servent aussi à la mesure du coefficient de thermo-diffusion. L'existence éventuelle de tels systèmes dans la nature a été étudiée dans [28, 29]. La ségrégation compositionnelle thermo-gravitationnelle résulte d'un effet coopératif du transport convectif de matière et de la thermo-diffusion. Au § 5.2, nous illustrons cet effet pour une couche infinie de liquide. Sauf au § 5.2, nous n'examinons dans le chapitre 5 que l'aspect hydrodynamique du problème. La convection forcée dans le réservoir existe parce que la force de gravité appliquée à un liquide dont la masse volumique varie dans une direction perpendiculaire au vecteur \mathbf{g} (suite à son expansion thermique) crée un champ de moment de rotation empêchant le liquide de rester immobile. Nous cherchons alors les champs de vitesses pour des écoulements non-inertiels de Stokes et de Darcy-Brinkman dans le cas de réservoirs plans symétriques.

Chapitre 1. Transport dissipatif de matière et chaleur dans un milieu homogène

§ 1.1 Formulation mathématique du problème

Dans cette partie, nous formulons mathématiquement sous une forme générale le problème du transport de matière et de chaleur dans un milieu liquide (ou gazeux), non isotherme, contenant n différents composants chimiques et entre lesquels se déroulent diverses réactions chimiques. La première étape de la formulation mathématique d'un problème consiste dans le choix des variables décrivant le comportement de l'objet étudié. Traditionnellement, en thermodynamique, l'état d'un système multicomposant est décrit à l'aide des paramètres : pression, température, composition molaire ou massique : $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}$ ou $p, T, c_1, \dots, c_{n-1}$, où les fractions molaires sont définies comme :

$$x_i = N_i / \sum_{k=1}^n N_k,$$

où N_1, \dots, N_n sont les nombres de moles de chaque composant, la fraction molaire du dernier composant n'est pas indépendante puisque par définition $\sum_{i=1}^n x_i = 1$. Les fractions massiques sont définies par :

$$c_i = M_i / \sum_{k=1}^n M_k,$$

où $M_1, \dots, M_n = m_1^{\text{mol}} N_1, \dots, m_n^{\text{mol}} N_n$ sont les masses des composants, $m_1^{\text{mol}}, \dots, m_n^{\text{mol}}$ sont les masses molaires des composants. L'équivalence entre les deux modes de description de la composition chimique s'exprime par les relations :

$$c_i = m_i^{\text{mol}} x_i / \sum_{k=1}^n m_k^{\text{mol}} x_k, \quad x_i = (c_i / m_i^{\text{mol}}) / \sum_{k=1}^n (c_k / m_k^{\text{mol}}).$$

S'il s'agit d'un système où la quantité de matière n'est pas fixe, à la base des paramètres intensifs, il faut ajouter un paramètre extensif quelconque, par exemple le nombre total de moles N . La composition des paramètres $N, p, T, x_1, \dots, x_{n-1}$ détermine de façon univoque l'état thermodynamique d'un mélange de n composants. L'information sur les propriétés thermodynamiques se formule sous la forme d'une équation d'état. La thermodynamique nous

enseigne que donner un des potentiels thermodynamiques comme une fonction explicite de ses variables dites canoniques est la même chose que formuler une équation d'état [2, 3]. Une équation d'état d'un tel type est dénommée canonique. Ici, nous supposons que l'équation d'état est donnée sous cette forme. Pour chaque composition complète de paramètres d'état, il doit exister un potentiel thermodynamique pour lequel cette composition est canonique. Pour l'ensemble des paramètres p, T, N_1, \dots, N_n , le potentiel thermodynamique convenant est celui de Gibbs :

$$G = G(p, T, N_1, \dots, N_n).$$

Une fois connue la fonction $G(p, T, N_1, \dots, N_n)$, nous disposons d'une information exhaustive sur les propriétés thermodynamiques du système [3], c'est-à-dire que nous pouvons exprimer à travers p, T, N_1, \dots, N_n toute grandeur thermodynamique. De plus, si nous disposons d'un des potentiels thermodynamiques exprimé au moyen de ses variables canoniques, nous pouvons obtenir tous les autres potentiels thermodynamiques comme fonctions de ses variables canoniques au moyen de la transformation de Legendre [2].

En plus de l'état thermodynamique, le système possède d'autres paramètres qui caractérisent son état dynamique : cela peut être les composantes cartésiennes de la vitesse. Dans un milieu consistant à plusieurs composants chimiques le choix de la vitesse moyenne n'est pas évident puisque tous les composants se meuvent dans certaines limites indépendamment. Si les vecteurs $\mathbf{I}_1, \dots, \mathbf{I}_n$ désignent les flux molaires totaux de chacun des composants (de dimension mole/(m²·sec)), sommant les contributions dues à la convection et à la diffusion, on peut alors définir la vitesse de convection comme la moyenne molaire :

$$\mathbf{v}^{\text{mol}} = n^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{I}_i,$$

ou comme la moyenne massique (ou barycentrique) :

$$\mathbf{v}^{\text{mass}} = \rho^{-1} \sum_{i=1}^n m_i^{\text{mol}} \mathbf{I}_i,$$

n désigne la concentration molaire (c'est-à-dire le nombre total de moles pour tous les composants se trouvant dans le volume unitaire), $\rho = m^{\text{mol}} n$ est la masse volumique du

mélange, $m^{\text{mol}} = \sum_{i=1}^n m_i^{\text{mol}} x_i$ est la masse molaire moyenne. Selon la définition de la vitesse, les flux de diffusion sont définis d'une manière différente. Dans le cas de la vitesse molaire :

$$\mathbf{J}_i^{\text{mol}} = \mathbf{I}_i - nx_i \mathbf{v}^{\text{mol}},$$

et dans le cas de la vitesse barycentrique, le flux massique (de dimension $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{sec})$) de diffusion se définit comme :

$$\mathbf{J}_i^{\text{mass}} = m_i^{\text{mol}} (\mathbf{I}_i - x_i n \mathbf{v}^{\text{mass}}) = m_i^{\text{mol}} \mathbf{I}_i - c_i \rho \mathbf{v}^{\text{mass}}.$$

On peut donc voir que la séparation du flux total en un flux de diffusion et un flux de convection peut être opérée de diverses manières selon la conception du mouvement « moyen ». Il faut remarquer que, dans un système assez comprimé (dont le paramètre gazeux est comparable à un), les vitesses individuelles des composants $\mathbf{v}_i = \mathbf{I}_i / (x_i n)$ ne peuvent pas être très différentes de la vitesse barycentrique puisque le composant dont la vitesse surpasserait beaucoup la vitesse barycentrique subirait alors une forte résistance à son mouvement suite aux collisions moléculaires avec les molécules des autres composants. Donc, malgré le fait que les vitesses individuelles sont différentes, le mouvement relatif des composants du point de vue de l'énergie cinétique est négligeable par rapport au mouvement avec du centre de gravité bien que ce mouvement soit néanmoins essentiel pour la diffusion et que ce soit grâce à lui que la composition chimique puisse changer dans l'espace et dans le temps. Par contre, dans un milieu raréfié où les collisions moléculaires sont assez rares, le mouvement relatif des composants est aussi important que leur mouvement barycentrique. De tels systèmes font l'objet de théorie de la diffusion dite de Stefan-Maxwell [23] ou de l'hydrodynamique multicomposant [13] où le mélange est considéré comme un système de continus superposés, chacun possédant sa propre vitesse et sa propre pression, l'échange d'impulsion entre ces continus s'effectuant au moyen de frottement moléculaire effectif. Il faut remarquer que ni la théorie de Stefan-Maxwell, ni l'hydrodynamique multicomposant n'utilisent pas le concept de potentiel chimique.

Ici, nous allons utiliser la description barycentrique du mouvement des composants, c'est-à-dire : $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}^{\text{mass}}$, $\mathbf{J}_i \equiv \mathbf{J}_i^{\text{mass}}$. Formellement, le mouvement du milieu peut être pris en compte au niveau du potentiel de Gibbs, si l'on introduit le potentiel de Gibbs généralisé sous la forme :

$$G^{\text{gen}}(p, T, N_1, \dots, N_n, \mathbf{v}) = G(p, T, N_1, \dots, N_n) + \frac{M\mathbf{v}^2}{2},$$

où $M(N_1, \dots, N_n) = \sum_{i=1}^n m_i^{\text{mol}} N_i$ est la masse du système, le terme $M\mathbf{v}^2/2$ représente l'énergie cinétique du système, $G(p, T, N_1, \dots, N_n)$ est le potentiel de Gibbs du système immobile. Les composantes cartésiennes de la vitesse v^1, v^2, v^3 jouent le rôle de trois paramètres intensifs additionnels. Le différentiel du potentiel de Gibbs généralisé donne :

$$dG^{\text{gen}} = Vdp - TdS + \sum_{i=1}^n \left(\mu_i + m_i^{\text{mol}} \frac{\mathbf{v}^2}{2} \right) dN_i + \mathbf{P} \cdot d\mathbf{v},$$

où $\mathbf{P} = M\mathbf{v}$ est l'impulsion du système, la somme $\mu_i + m_i^{\text{mol}} \mathbf{v}^2 / 2 = \mu_i^{\text{gen}}$ représente le potentiel chimique généralisé où $\mu_i = \partial G / \partial N_i$ est le potentiel chimique dans le sens commun. Dans l'expression pour l'énergie cinétique, nous avons négligé l'énergie cinétique du mouvement relatif des composants les uns par rapport aux autres pour la raison donnée ci-dessus.

Jusqu'ici il s'agissait d'un système thermodynamique singulier décrit par un nombre fini de paramètres. L'état d'un milieu continu est décrit par les distributions des paramètres intensifs en chaque point du milieu : $p(\mathbf{r}, t), T(\mathbf{r}, t), x_1(\mathbf{r}, t), \dots, x_{n-1}(\mathbf{r}, t), \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. En hydrodynamique, traditionnellement on utilise la paire de variables masse volumique-pression ρ, p au lieu de pression-température p, T , mais pour analyser les processus de transport de chaleur, il est plus commode d'utiliser T au lieu de ρ . Pour trouver l'évolution de l'état du système, nous devons trouver les distributions de pression, température, composition chimique et vitesse convective dans le milieu.

Dans la plupart de modèles de milieux continus, les équations de base pour modéliser le milieu sont des équations de bilan qui sont une formalisation des lois de conservation locales (écrites sous forme différentielle) des grandeurs extensives du milieu étudié. En d'autres termes, nous ne pouvons obtenir les équations pour les variables intensives sans recourir à la formulation des équations pour les variables extensives. Nous devons donc temporairement passer à la description de l'état du système pour l'ensemble des paramètres extensifs, afin de formuler les équations de bilan pour les valeurs volumiques des paramètres. Les extensivités volumiques comme les rapports des deux paramètres extensifs (l'extensité dont il s'agit est le volume), sont des paramètres intensifs et, donc, peuvent être exprimés au

moyen des paramètres canoniques $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, \mathbf{v}$ du potentiel de Gibbs par prise de dérivées (partielles).

Les bilans différentiels des extensités ont la forme suivante :

$$\frac{\partial a_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}a_m + \mathbf{A}_m) = \alpha_m, \quad (1.1)$$

a_1, a_2, \dots sont les extensités rapportées au volume, $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots$ et représentent les flux de ces extensités, additionnels aux flux convectifs, et les valeurs qui se trouvent dans la partie droite $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ représentent leurs productions volumiques. Soit

$$b_1, \dots, b_{n+4} = p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, v^1, v^2, v^3,$$

alors l'équation canonique d'état nous permet, en principe, d'obtenir les dépendances sous la forme :

$$a_m = a_m(b_1, \dots, b_{n+4}),$$

et transformer le système des équations de bilan (1.1) en un système d'équations pour les paramètres canoniques du potentiel de Gibbs :

$$\sum_{l=1}^{n+4} \frac{\partial a_m}{\partial b_l}(b_1, \dots, b_{n+4}) \frac{\partial b_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}a_m(b_1, \dots, b_{n+4}) + \mathbf{A}_m) = \alpha_m. \quad (1.2)$$

Le nombre d'équations du système (1.1) doit coïncider avec le nombre de paramètres indépendants qu'on a choisi, donc $m = 1, \dots, n + 4$.

Evidemment le système (1.2) ne sera fermé en exprimant $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots$ et $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ à l'aide de $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, v^1, v^2, v^3$. Les flux $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_{n+1}$ sont habituellement d'origine dissipative, et expriment l'échange irréversible d'extensité entre différents points du milieu, que l'on peut considérer comme des sous-systèmes élémentaires thermodynamiques. Dans notre cas, comme on a choisi la vitesse barycentrique comme vitesse moyenne, les sous-systèmes élémentaires sont identiques aux particules liquides de Lagrange, puisque les flux $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_{n+1}$ ont le sens de flux dans le système de coordonnées lagrangiennes. Quand il s'agit de masses volumiques partielles de composants, les parties droites des équations de bilan décrivent la transformation irréversible des composants les uns dans les autres par des

réactions chimiques qui ont lieu dans le système. Quand il s'agit d'impulsion la partie droite représente les forces massiques extérieures (particulièrement la gravité) qui exercent sur le système. Quand il s'agit d'énergie totale, la partie droite de l'équation de bilan représente le travail des forces extérieures.

Fixons maintenant la base de paramètres extensifs dont on cherche à obtenir les équations de bilan. Une composition extensive de paramètres indépendants d'état que l'on peut choisir en qualité de base est l'énergie totale (y compris l'énergie cinétique) E , le volume V , les masses des $n-1$ premiers composants M_1, \dots, M_{n-1} , la masse totale de tous les composants M , et les composantes cartésiennes d'impulsion P^1, P^2, P^3 . Pour un milieu continu il faut donc trouver les distributions d'énergie volumique : $e = \delta E / \delta V$, les masses partielles volumiques des $n-1$ composants : $m_i = \delta M_i / \delta V$, $i=1, \dots, n$, la masse volumique totale $\rho = \delta M / \delta V$, et l'impulsion volumique $p^k = \delta P^k / \delta V$, $k=1, 2, 3$ (ne pas confondre p^k avec la pression p), soit au total $n+4$ fonctions.

Pour obtenir les relations entre les extensités volumiques $m_1, \dots, m_{n-1}, \rho, e, \mathbf{p}$ et les paramètres de base $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, \mathbf{v}$, introduisons le potentiel de Gibbs généralisé spécifique :

$$g^{\text{gen,spec}} = \frac{G^{\text{gen}}}{M} = \frac{G}{M} + \frac{\mathbf{v}^2}{2}.$$

dont la forme différentielle est :

$$dg^{\text{gen,spec}} = \rho^{-1} dp - s^{\text{spec}} dT + \sum_{i=1}^{n-1} \eta_i dx_i + \mathbf{v} d\mathbf{v}, \quad (1.3)$$

où s^{spec} est l'entropie spécifique, qui selon (1.3) s'exprime à travers le potentiel de Gibbs comme :

$$s^{\text{spec}} = -\frac{\partial g^{\text{gen,spec}}}{\partial T} = -\frac{\partial g^{\text{spec}}}{\partial T}, \quad (1.4)$$

l'inverse de la valeur de la masse volumique ρ^{-1} joue le rôle du volume spécifique ; les valeurs η_i s'expriment au moyen des potentiels chimiques :

$$\eta_i = \frac{\mu_i}{m_i^{\text{mol}}} - \frac{\mu_n}{m_n^{\text{mol}}} \equiv \frac{\mu_i^{\text{gen}}}{m_i^{\text{mol}}} - \frac{\mu_n^{\text{gen}}}{m_n^{\text{mol}}}. \quad (1.5)$$

La masse volumique totale s'obtient comme la valeur inverse de la dérivée du potentiel de Gibbs spécifique par rapport à la pression:

$$\rho = \left(\frac{\partial g^{\text{gen,spec}}}{\partial p} \right)^{-1}. \quad (1.6)$$

L'énergie totale spécifique s'obtient au moyen de transformation de Legendre du potentiel de Gibbs généralisé spécifique par rapport aux pression et température:

$$e^{\text{spec}} = g^{\text{gen,spec}} - \rho^{-1} p + T s^{\text{spec}}, \quad (1.7)$$

De même l'énergie totale volumique s'obtient à partir de l'énergie totale spécifique en la multipliant par la masse volumique $e = \rho e^{\text{spec}}$. L'impulsion spécifique est tout simplement la vitesse $\mathbf{p}^{\text{spec}} \equiv \mathbf{v}$ et l'impulsion volumique est $\mathbf{p} = \rho \mathbf{v}$. Les masses volumiques partielles des $n-1$ composants s'expriment comme :

$$m_i = c_i \rho.$$

Ainsi, nous avons établi les relations entre les extensités volumiques et les paramètres canoniques du potentiel de Gibbs. Formulons maintenant les équations de bilan pour les grandeurs $m_1, \dots, m_{n-1}, \rho, e, \mathbf{p}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0, \\ \frac{\partial m_i}{\partial t} + \nabla \cdot (m_i \mathbf{v} + \mathbf{J}_i) &= \theta_i, \quad i = 1, \dots, n-1, \\ \frac{\partial p^i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^k} (p^i v^k + p \delta^{ik} + \tau^{ik}) &= f^i, \quad i, k = 1, 2, 3, \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e \mathbf{v} + p \mathbf{v} + \mathbf{q}) &= \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Dans la première équation le flux sur-convectif (diffusif) est égal à zéro par définition de la vitesse de convection, la partie droite est égale à zéro parce que les réactions chimiques ne changent pas la masse totale de l'ensemble des composants. Dans les deux dernières équations, nous avons séparé artificiellement les flux sur-convectifs d'impulsion et d'énergie

en deux parties dont la première s'exprime explicitement à travers les paramètres intensifs (p et \mathbf{v}) et la seconde reste inconnue. D'un point de vue formel, une telle séparation ne doit pas influencer le résultat final, car les parties restantes τ^{ik} et \mathbf{q} sont toujours inconnues. Les termes ∇p et $\nabla \cdot (p\mathbf{v})$ dans les bilans d'impulsion et d'énergie représentent la force et le travail de pression qui caractérisent la conversion de l'énergie interne en énergie cinétique et qui représente un processus réversible. Par contre les termes restants τ^{ik} et \mathbf{q} , comme on le verra, sont d'origine dissipative et peuvent être interprétés comme le tenseur des tensions visqueuses et le flux de chaleur généralisé (y compris le flux de chaleur produit par la viscosité). La partie droite dans le bilan d'impulsion, en absence de forces volumiques d'origine dissipative, est la force volumique extérieure exercée sur le système, dans notre cas c'est la force gravitationnelle

$$\mathbf{f} = \rho \nabla \Phi .$$

Dans la partie droite de l'équation de bilan d'énergie, nous avons pris en compte le fait que la seule source volumique d'énergie qui existe dans le système est le travail des forces extérieures volumiques :

$$A = \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} .$$

La chaleur produite par les tensions visqueuses ne peut pas être considérée comme une source d'énergie puisque ce n'est que la conversion de l'énergie cinétique en énergie interne alors que l'énergie totale reste la même. Pour la même raison l'effet thermique des réactions chimiques n'est pas une source d'énergie (ni par rapport à l'énergie totale, ni par rapport à l'énergie interne), il représente la conversion de l'énergie des affinités chimiques en énergie réservée dans la capacité thermique des produits de réaction. Les termes $\nabla \cdot \mathbf{J}_i$ dans les équations de bilan de masse partielles des composants représentent les masses apportées dans le volume unitaire par les flux de diffusion, le terme θ_i décrit l'apparition ou disparition du composant i en réactions chimiques.

Pour notre analyse ultérieure il nous faudra écrire les bilans d'énergie interne et d'enthalpie. Le bilan d'énergie interne s'obtient comme la différence entre le bilan d'énergie totale et le bilan d'énergie cinétique qui provient directement du bilan d'impulsion. Récrivons le bilan d'impulsion sous la forme matérielle :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}^i}{dt} + \frac{\partial}{\partial x^k} (p\delta^{ik} + \tau^{ik}) = f^i,$$

où $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ est la dérivée de Lagrange. En multipliant vectoriellement cette équation par la vitesse, nous obtenons le bilan d'énergie cinétique sous forme matérielle :

$$\rho \frac{d}{dt} \frac{\mathbf{v}^2}{2} + \frac{\partial}{\partial x^k} \left\{ \mathbf{v}^i (p\delta^{ik} + \tau^{ik}) \right\} = p(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \tau^{ik} \frac{\partial \mathbf{v}^i}{\partial x^k} + \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}.$$

En écrivant le bilan d'énergie totale aussi sous la même forme :

$$\rho \frac{d}{dt} \frac{e}{\rho} + \nabla \cdot (p\mathbf{v} + \mathbf{q}) = \mathbf{f} \cdot \mathbf{v},$$

et en faisant leur différence, nous obtenons :

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{e}{\rho} - \frac{\mathbf{v}^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x^k} (q^k - \mathbf{v}^i \cdot \tau^{ik}) = -p(\nabla \cdot \mathbf{v}) - \tau^{ik} \frac{\partial \mathbf{v}^i}{\partial x^k}, \quad (1.9)$$

la valeur $e/\rho - \mathbf{v}^2/2 \equiv u^{\text{spec}}$ est par définition l'énergie interne spécifique. Comme le tenseur de tensions visqueuses τ^{ik} est symétrique dans un milieu isotrope, le dernier terme dans la partie droite du bilan d'énergie interne peut être transformé en :

$$\tau^{ik} \frac{\partial \mathbf{v}^i}{\partial x^k} \equiv \tau^{ik} \cdot \varepsilon^{ik}$$

où $\varepsilon^{ik} = 1/2(\partial \mathbf{v}^i / \partial x^k + \partial \mathbf{v}^k / \partial x^i)$ est appelé tenseur de vitesses de déformations.

Ainsi, nous avons formulé les équations de bilan et trouvé, à l'aide de l'équation d'état canonique, les relations entre les paramètres $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, \mathbf{v}$ et les extensités volumiques. Afin de fermer le modèle il ne reste plus qu'à trouver les liaisons entre les flux dissipatif $\mathbf{J}_1, \dots, \mathbf{J}_{n-1}, \tau^{ik}, \mathbf{q}$ et $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, \mathbf{v}$.

§ 1.2 Fermeture des équations de bilan

La question de trouver les relations phénoménologiques entre les flux dissipatifs des paramètres extensifs du système $\mathbf{J}_1, \dots, \mathbf{J}_{n-1}, \tau^{ik}, \mathbf{q}$, et les paramètres intensifs $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, \mathbf{v}$ dépasse le cadre de thermodynamique de l'état équilibre et fait l'objet de la thermodynamique

de processus irréversibles (les relations linéaires entre $\mathbf{J}_1, \dots, \mathbf{J}_{n-1}, \tau^{ik}, \mathbf{q}$ et les gradients des valeurs $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, \mathbf{v}$ traditionnellement s'appellent les relations phénoménologiques, les coefficients dans ces relations s'appellent les coefficients phénoménologiques).

La thermodynamique des processus irréversibles offre une approche macroscopique phénoménologique à la construction de modèles quantitatifs du transport dissipatif. Une des hypothèses de base de la thermodynamique des processus irréversibles consiste en l'existence d'un état d'équilibre local dans le système. Comme le temps de relaxation d'un système vers son état d'équilibre augmente avec la taille du système, il est logique de supposer que l'équilibre réalisé au voisinage d'un point avant que le système dans son entier n'arrive à l'équilibre. Pour cette raison, en thermodynamique du non-équilibre, on admet que, bien que le système total ne soit pas en équilibre, les paramètres intensifs de ce système change assez lentement dans l'espace et dans le temps. Cette variation temporelle des variables crée des flux dissipatifs pour les extensités qui visent à équilibrer globalement le système.

La base formelle de la thermodynamique des processus irréversibles consiste en une hypothèse de dépendance linéaire entre les flux dissipatifs et les gradients de paramètres intensifs. Cette linéarité n'est que le premier terme d'un développement des flux dissipatifs en fonction des gradients des paramètres intensifs, mais comme ces gradients sont assez petits du fait de l'équilibre local, les relations linéaires sont en général suffisamment précises. Les coefficients phénoménologiques dans les relations linéaires entre les flux dissipatifs et les paramètres intensifs doivent satisfaire à la condition de symétrie provenant du principe fondamental de réciprocité formulé par Onsager. Le principe d'Onsager stipule que la matrice formée par les coefficients est symétrique si les relations phénoménologiques sont écrites sous une forme spéciale. L'obtention de cette forme spéciale des relations phénoménologiques consiste, d'abord, à écrire le bilan d'entropie où la source volumique d'entropie est écrite comme une forme bilinéaire des flux et des forces thermodynamiques [17, 8, 24]. Les flux thermodynamiques sont les flux des extensités et les forces thermodynamiques sont des combinaisons linéaires des gradients des paramètres intensifs.

Généralement on suppose que tout flux thermodynamique peut être généré par toute force thermodynamique : cette hypothèse outre les processus dissipatifs directs, admet l'existence de processus dissipatifs croisés tels que par exemple un flux supplémentaire d'un composant chimique causé par un gradient de température ou un flux supplémentaire de chaleur causé par les gradients de concentration des composants. Autrement dit, la matrice des

coefficients phénoménologiques, n'est généralement, pas diagonale, mais, d'après le principe d'Onsager, est symétrique. La symétrie de la matrice de coefficients phénoménologiques réduit le nombre de coefficients indépendants.

Le principe de Curie entraîne des limitations supplémentaires sur le nombre de coefficients responsables des processus croisés : il établit que dans un milieu isotrope, il ne peut y avoir interaction qu'entre des processus de même dimension tensorielle et que les coefficients sont scalaires.

Démontrons le principe d'Onsager à l'aide d'un exemple. Prenons l'exemple d'un système thermodynamique singulier décrit par un ensemble de paramètres $a_1(t), \dots, a_N(t)$ variant avec le temps quand le système s'approche de l'équilibre. La vitesse de création de l'entropie $s(a_1, \dots, a_N)$ du système est une forme bilinéaire de la forme :

$$\dot{s} = -\sum_{i=1}^N X_i \dot{a}_i, \quad (1.10)$$

où les valeurs

$$X_i = -\frac{\partial s}{\partial a_i},$$

appelées forces thermodynamiques sont égales à zéro à l'état d'équilibre. Les dérivées des paramètres par rapport au temps $\dot{a}_1, \dots, \dot{a}_N$, appelées flux thermodynamiques, ne sont pas égales à zéro tant que les forces X_1, \dots, X_N ne sont pas nulles. On peut donc écrire pour un état proche de l'équilibre, au premier ordre de grandeur :

$$\dot{a}_i = \sum_{k=1}^N \lambda_{ik} X_k.$$

Le principe d'Onsager stipule que la matrice des coefficients λ_{ik} est symétrique :

$$\lambda_{ik} = \lambda_{ki},$$

donc au lieu de N^2 coefficients, nous n'avons que $N(N+1)/2$ coefficients phénoménologiques indépendants.

Quand il s'agit d'un système continu, la création d'entropie s'écrit sous la forme d'une fonctionnelle :

$$\dot{S} = \int_{\Omega} \frac{\partial s}{\partial t} d^3x = \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} \frac{\partial s}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial t} d^3x, \quad (1.6)$$

où \dot{S} est le changement total d'entropie dans tout le volume du système, $s(a_1, \dots, a_N)$ est l'entropie volumique, qui, comme nous l'avons supposé, peut être exprimée comme une fonction des extensités rapportées au volume, les valeurs a_1, \dots, a_N sont les intensités. Les variations temporelles des extensités volumiques peuvent être déduites des équations de bilan (1.1) que nous avons formulées mais pas encore fermées. Sans préciser la nature de ces extensités, nous pouvons écrire de manière générale:

$$\dot{S} = \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} \frac{\partial s}{\partial a_i} \{ -\nabla \cdot (\mathbf{A}_i + \mathbf{v} \cdot a_i) + \alpha_i \} d^3x. \quad (1.7)$$

En faisant la transformation $(\partial s / \partial a_i) \nabla \cdot \mathbf{A}_i \equiv \nabla \cdot [(\partial s / \partial a_i) \mathbf{A}_i] - \mathbf{A}_i \cdot \nabla (\partial s / \partial a_i)$ et en utilisant le théorème d'Ostrogradski, nous transformons le bilan intégral d'entropie sous la forme :

$$\dot{S} = - \sum_{i=1}^N \oint_{\partial \Omega} \frac{\partial s}{\partial a_i} (A_i^n + a_i v^n) d\Sigma + \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} \left\{ (a_i \mathbf{v} + \mathbf{A}_i) \cdot \nabla \frac{\partial s}{\partial a_i} \right\} d^3x + \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} \frac{\partial s}{\partial a_i} \alpha_i d^3x, \quad (1.8)$$

où l'expression sous la seconde intégrale peut être encore être transformée en :

$$\mathbf{v} \cdot \sum_{i=1}^n a_i \nabla \frac{\partial s}{\partial a_i} = \mathbf{v} \cdot \nabla s - \mathbf{v} \cdot \nabla \left\{ \sum_{i=1}^n a_i \frac{\partial s}{\partial a_i} \right\}.$$

Concrétisons, maintenant, les valeurs \mathbf{A}_i, α_i . Il est évident que l'entropie volumique n'est une fonction que des paramètres thermodynamiques, mais pas de ceux cinétique comme les composantes d'impulsion. Dans notre analyse, il sera plus simple de chercher à obtenir l'entropie comme une fonction explicite de l'énergie interne, de la masse volumique totale, des masses volumiques partielles des $n-1$ premiers composants (ainsi cette base de paramètres d'état local est asymétrique par rapport au dernier composant) :

$$a_1, \dots, a_{n+1} = u, \rho, m_1, \dots, m_{n-1}.$$

Notre but est, maintenant, de trouver les dérivées $\partial s / \partial a_1, \dots, \partial s / \partial a_{n+1}$. Rappelons qu'une forme alternative de donner l'équation canonique d'état du système est de concrétiser l'énergie interne comme un potentiel par rapport aux variables canoniques V, S, N_1, \dots, N_n :

$$U = U(V, S, N_1, \dots, N_n).$$

Comme on sait, la forme différentielle de l'énergie est liée avec les variations des paramètres V, S, N_1, \dots, N_n au travers de la relation de Gibbs:

$$dU = -pdV + TdS + \sum_{i=1}^n \mu_i dN_i,$$

Compte tenu de :

$$N_1, \dots, N_n = \frac{M_1}{m_1^{\text{mol}}}, \dots, \frac{M_{n-1}}{m_{n-1}^{\text{mol}}}, \frac{M - \sum_{i=1}^{n-1} M_i}{m_n^{\text{mol}}},$$

et

$$\sum_{i=1}^n \mu_i dN_i = \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{\mu_i}{m_i^{\text{mol}}} - \frac{\mu_n}{m_n^{\text{mol}}} \right) dM_i + \frac{\mu_n}{m_n^{\text{mol}}} dM = \sum_{i=1}^{n-1} \eta_i dM_i + \frac{\mu_n}{m_n^{\text{mol}}} dM,$$

nous obtenons la forme différentielle pour l'énergie interne à l'aide des variables massiques :

$$dU = -pdV + TdS + \sum_{i=1}^{n-1} \eta_i dM_i + \frac{\mu_n}{m_n^{\text{mol}}} dM.$$

Si l'on connaît $U = U(S, V, M_1, \dots, M_{n-1}, M)$, il est en principe possible de trouver par une inversion fonctionnelle $S = S(U, V, M_1, \dots, M_{n-1}, M)$ (au moins son expression différentielle).

Pour l'entropie nous avons :

$$dS = \frac{1}{T} dU + \frac{p}{T} dV - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{n-1} \eta_i dM_i - \frac{1}{T} \frac{\mu_n}{m_n^{\text{mol}}} dM.$$

Nous pouvons donc trouver les dérivées partielles de l'entropie par rapport aux variables dont on construit les équations de bilan:

$$\frac{\partial s}{\partial u} = \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial s}{\partial \rho} = -\frac{1}{T} \frac{\mu_n}{m_n^{\text{mol}}}, \quad \frac{\partial s}{\partial m_i} = \frac{\eta_i}{T}. \quad (1.9)$$

Remarquons une propriété de l'entropie S écrite comme fonction des variables $U, V, M_1, \dots, M_{n-1}, M$. Comme l'entropie est une valeur extensive, c'est-à-dire proportionnelle à quantité de matière dans le système, elle est nécessairement une fonction homogène du 1^{er} ordre, par rapport à ces arguments:

$$S(\lambda U, \lambda V, \lambda M_1, \dots, \lambda M_{n-1}, \lambda M) = \lambda S(U, V, M_1, \dots, M_{n-1}, M),$$

alors, par le théorème d'Euler concernant les fonctions homogènes:

$$U \frac{\partial S}{\partial U} + V \frac{\partial S}{\partial V} + \sum_{i=1}^{n-1} M_i \frac{\partial S}{\partial M_i} + M \frac{\partial S}{\partial M} \equiv S.$$

Divisant cette égalité sur le volume V nous trouvons que:

$$u \frac{\partial s}{\partial u} + \rho \frac{\partial s}{\partial \rho} + \sum_{i=1}^{n-1} m_i \frac{\partial s}{\partial m_i} \equiv \sum_{k=1}^{n+1} a_k \frac{\partial s}{\partial a_k} = s - \frac{\partial S}{\partial V} = s - \frac{p}{T}. \quad (1.10)$$

Ainsi, le terme $\mathbf{v} \cdot \nabla s - \mathbf{v} \cdot \nabla \sum_{i=1}^n a_i (\partial s / \partial a_i)$ qui apparaît dans le bilan intégral de l'entropie peut être simplifié :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla s - \mathbf{v} \cdot \nabla \left\{ \sum_{i=1}^n a_i \frac{\partial s}{\partial a_i} \right\} = \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{p}{T} \right). \quad (1.11)$$

Utilisons maintenant (1.9) et (1.10) dans (1.8). On peut prouver à l'aide de l'égalité (1.11) que la contribution de l'énergie interne ajoutée au terme $\sum_{i=1}^N \int_{\Omega} \{ a_i (\mathbf{v} \cdot \nabla) (\partial s / \partial a_i) \} d^3 x$ donne l'expression suivante :

$$\int_{\Omega} \left\{ \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{p}{T} \right) + (\mathbf{q} - (\mathbf{v} : \boldsymbol{\tau})) \cdot \nabla \frac{1}{T} + \frac{p}{T} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right\} d^3 x = \oint_{\partial \Omega} \frac{p}{T} \mathbf{v}^n d\Sigma + \int_{\Omega} \left\{ (\mathbf{q} - (\mathbf{v} : \boldsymbol{\tau})) \cdot \nabla \frac{1}{T} - \frac{1}{T} (\boldsymbol{\tau}^{ik} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{ik}) \right\} d^3 x$$

où la notation $(\mathbf{v} : \boldsymbol{\tau})$ signifie le produit tensoriel contracté du vecteur \mathbf{v}^i avec le tenseur τ^{ik} (l'indice n'importe pas car le tenseur τ^{ik} est symétrique). A son tour la somme de deux

intégrales de surface $\oint_{\partial\Omega} (p/T)\mathbf{v}^n d\Sigma$ et $\sum_{i=1}^{n+1} \oint_{\partial\Omega} a_i (\partial s / \partial a_i) \mathbf{v}^n d\Sigma$, selon l'égalité (1.8) donnent un résultat simple :

$$\oint_{\partial\Omega} (p/T)\mathbf{v}^n d\Sigma + \sum_{i=1}^N \oint_{\partial\Omega} a_i (\partial s / \partial a_i) \mathbf{v}^n d\Sigma \equiv \oint_{\partial\Omega} s \mathbf{v}^n d\Sigma.$$

La somme de toutes les intégrales de surface nous donne :

$$\oint_{\partial\Omega} (s \mathbf{v}^n + \sum_{i=1}^{n+1} (\partial s / \partial a_i) A_i^n) d\Sigma = (\dot{S})_{\text{ext}}, \quad (1.12)$$

que nous interprétons comme le flux total de l'entropie entrant dans le système du dehors (au travers des limites du système) et à cause de cela nous le notons $(\dot{S})_{\text{ext}}$. Remarquons que si les flux des extensités au travers des surfaces extérieures du système sont connus, c'est-à-dire que si sur les limites du système $\partial\Omega$ nous disposons des conditions limites du 2nd type, le terme $(\dot{S})_{\text{ext}}$ est aussi connu. Dans le cas où le système est isolé : $\mathbf{v}^n = 0$, $A_i^n = 0$ sur $\partial\Omega$, le flux entrant d'entropie est égal à zéro $(\dot{S})_{\text{ext}} \equiv 0$.

La partie restante dans le bilan d'entropie est la suivante :

$$(\dot{S})_{\text{int}} = \int_{\Omega} \left\{ (\mathbf{q} - (\mathbf{v} : \boldsymbol{\tau})) \cdot \nabla \frac{1}{T} + \sum_{i=1}^{n-1} \left(\mathbf{J}_i \cdot \nabla \left(\frac{\eta_i}{T} \right) + \frac{\theta_i \eta_i}{T} \right) - \frac{1}{T} (\boldsymbol{\tau}^{ik} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{ik}) \right\} d^3x. \quad (1.13)$$

Examinons le terme sous l'intégrale dans (1.13), responsable des réactions chimiques $T^{-1} \sum_{i=1}^{n-1} \theta_i \eta_i$. Dans le système, se déroulent A réactions chimiques numérotées par l'indice $\alpha = 1, \dots, A$. Les bilans stœchiométriques des réactions s'écrivent sous la forme :

$$\sum_{i=1}^n \nu_{i\alpha} = 0,$$

où $\nu_{i\alpha}$ sont les coefficients stœchiométriques des diverses réactions. Introduisons des coefficients stœchiométriques fractionnaires de telle manière que la somme de tous les coefficients stœchiométriques positifs d'une réaction soit égale à 1 (et la somme des coefficients négatifs égale à -1) :

$$\nu_{i\alpha}^{\text{frac}} = \nu_{i\alpha} / \sum_{\text{positive}} \nu_{k\alpha}.$$

Alors, l'apparition (ou disparition) selon le signe « + » (ou « - ») d'un composant i dans toutes les réactions chimiques peut être écrite sous la forme

$$\theta_i = \sum_{\alpha=1}^A m_i^{\text{mol}} v_{i\alpha}^{\text{frac}} \omega_\alpha,$$

où ω_α est la vitesse de la réaction α définie comme le nombre de moles total de tous les composants entrant dans la réaction par volume unité et unité de temps. La somme $\sum_{i=1}^{n-1} \theta_i \eta_i$ se transforme alors en :

$$\sum_{i=1}^{n-1} \theta_i \eta_i = \sum_{i=1}^{n-1} \eta_i \sum_{\alpha=1}^A m_i^{\text{mol}} v_{i\alpha}^{\text{frac}} \omega_\alpha \equiv \sum_{\alpha=1}^A \omega_\alpha \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} m_i^{\text{mol}} \eta_i v_{i\alpha}^{\text{frac}} \right\},$$

Transformons la somme $\sum_{i=1}^{n-1} m_i^{\text{mol}} \eta_i v_{i\alpha}^{\text{frac}}$. Compte tenu que $\eta_i = \mu_i / m_i^{\text{mol}} - \mu_n / m_n^{\text{mol}}$ et $v_{n\alpha}^{\text{frac}} = -\sum_{i=1}^{n-1} v_{i\alpha}^{\text{frac}}$ (comme $\sum_{i=1}^n v_{i\alpha}^{\text{frac}} \equiv 0$) nous obtenons :

$$\sum_{i=1}^{n-1} m_i^{\text{mol}} \eta_i v_{i\alpha}^{\text{frac}} \equiv \sum_{i=1}^n v_{i\alpha}^{\text{frac}} \mu_i = \Delta_\alpha,$$

valeur dénommée affinité chimique de la réaction α . Alors le terme responsable des réactions chimiques $T^{-1} \sum_{i=1}^{n-1} \theta_i \eta_i$ donne :

$$T^{-1} \sum_{i=1}^{n-1} \theta_i \eta_i \equiv T^{-1} \sum_{\alpha=1}^A \Delta_\alpha \omega_\alpha.$$

Analysant les réactions chimiques, il est plus facile d'exprimer les propriétés thermodynamiques du système sous une forme proche de celle des systèmes parfaits. Introduisons les activités chimiques $\phi_i(p, T, x_1, \dots, x_{n-1})$ suivant la définition :

$$\mu_i = RT \log(p\phi_i) + f_i(T),$$

où R est la constante de gaz, $f_i(T)$ une fonction de la température. Pour un système parfait : $\phi_i \equiv x_i$, pour un système imparfait ϕ_i s'approche de x_i lorsque $x_i \rightarrow 0$. Alors, l'affinité chimique peut être exprimée en termes de ϕ_i comme :

$$\Delta_\alpha = RT \cdot \log \left[p^{\sum_{i=1}^n v_{i\alpha}^{\text{frac}}} \prod_{i=1}^n \phi_i^{v_{i\alpha}^{\text{frac}}} \right] + \sum_{i=1}^n v_{i\alpha}^{\text{frac}} f_i,$$

mais comme $\sum_{i=1}^n \nu_{i\alpha}^{\text{frac}} \equiv 0$:

$$\Delta_\alpha = RT \cdot \log \left[\prod_{i=1}^n \phi_i^{\nu_{i\alpha}^{\text{frac}}} \right] + \sum_{i=1}^n \nu_{i\alpha}^{\text{frac}} f_i = RT \log \left[\prod_{i=1}^n \phi_i^{\nu_{i\alpha}^{\text{frac}}} \right] + f(T).$$

Ainsi, si nous estimons en première approximation que la vitesse d'une réaction chimique est proportionnelle à son affinité :

$$\omega_\alpha \sim \Delta_\alpha,$$

pour un système parfait où $\phi_i \equiv x_i$ nous aurons :

$$\omega_\alpha \sim RT \log \left[\prod_{i=1}^n x_i^{\nu_{i\alpha}^{\text{frac}}} \right] + f(T),$$

c'est la loi d'action de masse connue en chimie.

Examinons, maintenant le terme sous l'intégrale dans (1.13), responsable de la viscosité $T^{-1}(\tau^{ik} \cdot \varepsilon^{ik})$. Décomposons le tenseur ε^{ik} en sa partie sphérique et son déviateur :

$$\varepsilon^{ik} \equiv \frac{1}{3} \varepsilon^{nn} \delta^{ik} + \left(\varepsilon^{ik} - \frac{1}{3} \varepsilon^{nn} \delta^{ik} \right) = (\varepsilon)^{\text{sph}} \delta^{ik} + (\varepsilon^{ik})^{\text{dev}}.$$

La partie sphérique du tenseur ε^{ik} est liée avec la divergence de la vitesse par

$$(\varepsilon)^{\text{sph}} = 1/3(\nabla \cdot \mathbf{v}).$$

Décomposons de la même façon le tenseur τ^{ik} :

$$\tau^{ik} \equiv \frac{1}{3} \tau^{nn} \delta^{ik} + \left(\tau^{ik} - \frac{1}{3} \tau^{nn} \delta^{ik} \right) = (\tau)^{\text{sph}} \delta^{ik} + (\tau^{ik})^{\text{dev}}.$$

Alors pour le produit tensoriel de deux tenseurs, nous obtenons :

$$(\tau^{ik} \cdot \varepsilon^{ik}) \equiv 3 (\tau)^{\text{sph}} (\varepsilon)^{\text{sph}} + (\tau^{ik})^{\text{dev}} (\varepsilon^{ik})^{\text{dev}}$$

C'est la somme du produit de deux scalaires et du produit tensoriel des deux déviateurs.

Ainsi, la valeur $(\dot{S})_{\text{int}}$ peut être présentée sous la forme :

$$(\dot{S})_{\text{int}} = \int_{\Omega} \left(\mathbf{q}^t \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{J}_i \cdot \nabla \left(\frac{\eta_i}{T} \right) \right) d^3x + \int_{\Omega} \frac{1}{T} \left(\sum_{\alpha=1}^A \omega_{\alpha} \Delta_{\alpha} - 3(\tau)^{\text{sph}}(\mathcal{E})^{\text{sph}} \right) d^3x - \int_{\Omega} \frac{(\tau^{ik})^{\text{dev}}(\mathcal{E}^{ik})^{\text{dev}}}{T} d^3x$$

où $\mathbf{q}^t = \mathbf{q} - (\mathbf{v} : \boldsymbol{\tau})$ est le flux de chaleur dans le sens commun. Le premier terme représente la contribution des processus vectoriels ; le deuxième représente la contribution des processus scalaires et le troisième, la contribution des processus tensoriels.

La valeur de σ , dont la définition est :

$$\sigma = \mathbf{q}^t \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{J}_i \cdot \nabla \left(\frac{\eta_i}{T} \right) + \frac{1}{T} \left\{ \sum_{\alpha=1}^A \omega_{\alpha} \Delta_{\alpha} - 3(\tau)^{\text{sph}}(\mathcal{E})^{\text{sph}} - (\tau^{ik})^{\text{dev}}(\mathcal{E}^{ik})^{\text{dev}} \right\}, \quad (1.14)$$

et qui représente la partie droite du bilan différentiel d'entropie, est dite production d'entropie.

La production d'entropie dans les processus irréversibles σ est l'analogie de $\dot{s} = -\sum_{i=1}^N X_i \dot{a}_i$ pour un milieu continu où les valeurs $\mathbf{q}^t, \mathbf{J}_1, \dots, \mathbf{J}_{n-1}, \omega_1, \dots, \omega_A, (\tau)^{\text{sph}}, (\tau^{ik})^{\text{dev}}$ jouent le rôle des flux thermodynamiques généralisés, et les valeurs $\nabla T^{-1}, -\nabla(\eta_1/T), \dots, -\nabla(\eta_{n-1}/T), \Delta_1, \dots, \Delta_A, -3(\mathcal{E})^{\text{sph}}, -(\mathcal{E}^{ik})^{\text{dev}}$ jouent le rôle des forces thermodynamiques généralisées. Dans le cas d'un état proche de l'équilibre, les flux thermodynamiques s'expriment linéairement en fonction des forces thermodynamiques. Selon le principe de Curie, dans un milieu isotrope, les flux d'un rang tensoriel (dans notre cas il s'agit des rangs 0, 1, 2) ne peuvent être causés que par les forces de même rang tensoriel. Les effets croisés ne sont possibles qu'à l'intérieur des trois groupes de processus : « diffusion - transport de chaleur », « réactions chimiques – deuxième viscosité », « première viscosité » comme dans le troisième groupe il n'y a qu'un seul processus, il ne peut y avoir d'effets croisés.

De manière générale, les relations phénoménologiques peuvent être écrites :

$$\mathbf{q}^t = L_{00} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^{n-1} L_{0i} \nabla \left(\frac{\eta_i}{T} \right),$$

$$\mathbf{J}_i = L_{i0} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \nabla \left(\frac{\eta_k}{T} \right),$$

$$\omega_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^A \Lambda_{\alpha\beta} \Delta_{\beta} + 3\Lambda_{\alpha 0} (\mathcal{E})^{\text{sph}},$$

$$(\tau)^{\text{sph}} = 3\zeta(\varepsilon)^{\text{sph}} + \sum_{\alpha=1}^A \Lambda_{0\alpha} \Delta_{\alpha}, \quad (\tau^{ik})^{\text{dev}} = 3\eta(\varepsilon^{ik})^{\text{dev}}.$$

où les matrices des coefficients

$$\hat{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} L_{00} & \cdots & L_{0(n-1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{(n-1)0} & \cdots & L_{(n-1)(n-1)} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{\mathbf{\Lambda}} = \begin{pmatrix} \zeta & \cdots & \Lambda_{0A} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda_{A0} & \cdots & \Lambda_{AA} \end{pmatrix}$$

sont symétriques :

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}^T, \quad \hat{\mathbf{\Lambda}} = \hat{\mathbf{\Lambda}}^T,$$

d'après le principe de réciprocité d'Onsager. Au total nous avons $1/2(n(n+1) + (\alpha+1)(\alpha+2)) + 1$ coefficients inconnus.

L'interaction de la seconde viscosité avec les réactions chimiques est rare (elle présente un intérêt quand il s'agit des ondes sonores dans un milieu chimiquement actif [25]), et habituellement $L_{01}, \dots, L_{0A} = 0$. Dans ce cas le nombre des coefficients non égaux à zéro est $1/2(n(n+1) + \alpha(\alpha+1)) + 1$, ce qui, dans le cas simple à trois composants et une réaction possible donne 7.

La production d'entropie peut être écrite comme une forme quadratique des forces thermodynamiques que nous écrivons de manière symbolique :

$$T\sigma = \left\{ \nabla\left(\frac{1}{T}\right), -\nabla\left(\frac{\eta_1}{T}\right), \dots, -\nabla\left(\frac{\eta_{n-1}}{T}\right) \right\} \cdot \hat{\mathbf{L}} \cdot \left\{ \nabla\left(\frac{1}{T}\right), -\nabla\left(\frac{\eta_1}{T}\right), \dots, -\nabla\left(\frac{\eta_{n-1}}{T}\right) \right\}^T + \left\{ \Delta_1, \dots, \Delta_A, 3(\varepsilon)^{\text{sph}} \right\} \cdot \hat{\mathbf{\Lambda}} \cdot \left\{ \Delta_1, \dots, \Delta_A, 3(\varepsilon)^{\text{sph}} \right\}^T + \eta(\varepsilon^{ik})^{\text{dev}} (\varepsilon^{ik})^{\text{dev}}$$

La positivité de la production d'entropie exige la positivité de cette forme quadratique ce qui implique des conditions sur les coefficients. En particulier, tous les coefficients diagonaux des matrices $\hat{\mathbf{L}}$ et $\hat{\mathbf{\Lambda}}$ doivent être non négatifs :

$$L_{00}, L_{11}, \dots, L_{(n-1)(n-1)}, \zeta, \Lambda_{11}, \dots, \Lambda_{AA}, \eta \geq 0.$$

De plus :

$$\det \hat{\mathbf{L}} \geq 0, \quad \det \hat{\mathbf{\Lambda}} \geq 0,$$

$$\sum_{i,k=0}^{n-1} (L_{ii}L_{kk} - L_{ik}L_{ki}) \geq 0, \quad \sum_{\alpha,\beta=0}^A (\Lambda_{\alpha\alpha}\Lambda_{\beta\beta} - \Lambda_{\alpha\beta}\Lambda_{\beta\alpha}) \geq 0$$

Tout modèle de transport où ces conditions ne sont pas respectées risque de ne pas donner le résultat correct de point de vue physique.

Formulons maintenant un système fermé d'équations pour les paramètres $p, T, x_1, \dots, x_{n-1}, \mathbf{v}$ en nous appuyant sur le système d'équations de bilan où les flux dissipatifs sont maintenant connus. Le système fermé d'équations décrivant le transport irréversible de matière et de chaleur dans un milieu chimiquement actif s'obtient par la substitution des flux trouvés dans le système d'équations de bilan (1.3) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1.15)$$

$$\rho \frac{dc_i}{dt} + \nabla \cdot \left\{ -\sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \nabla \left(\frac{\eta_k}{T} \right) + L_{0i} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) \right\} = m_i^{\text{mol}} \sum_{\alpha=1}^A v_{i\alpha}^{\text{frac}} \sum_{\beta=1}^A \Lambda_{\alpha\beta} \Delta_{\beta}, \quad (1.16)$$

$$\rho \frac{dv^i}{dt} + \frac{\partial}{\partial x^k} \left\{ (p + 3\zeta(\varepsilon^{ik})^{\text{sph}}) \delta^{ik} + \eta(\varepsilon^{ik})^{\text{dev}} \right\} = \rho \nabla \Phi, \quad (1.17)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \frac{u}{\rho} + \nabla \cdot \left\{ L_{00} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^{n-1} L_{0i} \nabla \left(\frac{\eta_i}{T} \right) \right\} + p \text{div} \mathbf{v} = T \sigma, \quad (1.18)$$

(l'effet croisé entre les réactions chimiques et viscosité a été négligé). Démontrons que la combinaison de termes $\rho d(u/\rho)/dt + p \text{div} \mathbf{v}$ n'est autre que le changement d'enthalpie dans le système de coordonnées de Lagrange. Comme l'on sait, les formes différentielles pour l'enthalpie et l'énergie interne sont liées au travers la relation :

$$dH = dU + pdV,$$

Cette relation reste exacte pour les valeurs spécifiques :

$$d(h/\rho) = d(u/\rho) + pd(1/\rho),$$

alors :

$$\rho \frac{d}{dt} \frac{u}{\rho} + p(\nabla \cdot \mathbf{v}) \equiv \rho \left(p \frac{d}{dt} \frac{1}{\rho} + \frac{d}{dt} \frac{u}{\rho} \right) = \rho \frac{d}{dt} \frac{h}{\rho}.$$

De plus, comme nous avons admis, la production d'entropie est une valeur du second ordre de petitesse car représente une forme bilinéaire des flux généralisés, qui sont des valeurs du premier ordre de petitesse, et dans l'équation de bilan d'énergie interne peut être négligée devant les autres termes. Alors l'équation (1.18) prend la forme suivante :

$$\rho \frac{d}{dt} \frac{h}{\rho} + \nabla \cdot \left\{ L_{00} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^{n-1} L_{0i} \nabla \left(\frac{\eta_i}{T} \right) \right\} \approx 0. \quad (1.19)$$

Il faut remarquer que le système d'équations (1.15)-(1.18) (ou (1.19)) n'est symétrique qu'en étant formulé en termes de forces thermodynamiques généralisées, si nous exprimons les flux de diffusion à travers les gradients des valeurs observées directement : $p, T, c_1, \dots, c_{n-1}$, la symétrie disparaît. Le système (1.15)-(1.18) représente le modèle du transport dissipatif cherché.

§ 1.3 Equilibre gravitationnel d'un mélange bicomposé

Examinons la distribution non-uniforme stationnaire de composition chimique dans les réservoirs de grande profondeur qui s'établit sous l'effet de la baro-diffusion. L'état stationnaire d'un mélange multicomposant s'obtient comme la solution stationnaire des équations de transport développées par la méthode de thermodynamique des processus irréversibles.

Dans le cas d'un mélange bicomposé, le modèle de transport se réduit à une seule équation de diffusion :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho c}{\partial t} + \text{div}(\rho c \mathbf{v} + \mathbf{J}) &= 0, \\ \mathbf{J} &= -L_{11} \nabla \left(\frac{\eta}{T} \right) + L_{10} \nabla \left(\frac{1}{T} \right), \\ \eta &= \frac{\mu_1(x, p, T)}{m_1} - \frac{\mu_2(x, p, T)}{m_2} \end{aligned}$$

(les réactions chimiques sont impossibles).

Récrivons le flux de diffusion sous une autre forme équivalente :

$$\mathbf{J} = -\rho D (\nabla x + k_T \nabla \log T + k_B \nabla \log p),$$

où le coefficient de diffusion et les rapports entre coefficients de thermo-diffusion et baro-diffusion et le coefficient de diffusion sont définis par :

$$D = \frac{L_{11}}{\rho T} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad k_T = \frac{1}{\rho DT} (L_{11} h + L_{10}), \quad k_B = \frac{\partial \eta / \partial \log p}{\partial \eta / \partial x},$$

où

$$h = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\eta}{T} \right) = h_1^{\text{spec}} - h_2^{\text{spec}}$$

est la différence des enthalpies partielles spécifiques des composants. Remarquons que la définition du rapport pour la baro-diffusion est proprement thermodynamique et ne demande pas la connaissance des coefficients phénoménologiques, ce qui n'est pas le cas du coefficient de thermo-diffusion. En pratique, les valeurs k_T et k_B ne dépendent que de la fraction molaire d'un des composants, mais ni de la pression et ni de la température.

Dans ce chapitre nous n'examinons que l'état hydrostatique ($\mathbf{v} = 0$) du mélange. Une étude qualitative de l'influence de la convection sur la ségrégation compositionnelle sera faite au chapitre 5. Dans l'état hydrostatique le gradient de pression est équilibré par la force gravitationnelle :

$$\nabla p = \rho \mathbf{g}. \quad (1.20)$$

Si les bords du réservoir sont imperméables, le flux de diffusion est égal à zéro sur les bords et aussi partout dans le réservoir, la fraction molaire du composant étudié se trouve à partir de la relation entre les gradients des paramètres thermodynamiques :

$$\nabla x + k_T(x) \nabla \log T + k_B(x) \nabla \log p = 0. \quad (1.21)$$

L'état hydrostatique n'est possible que dans le cas où le gradient de température ∇T est parallèle au vecteur \mathbf{g} (voir chapitre 5), et par la suite à ∇p , alors si nous admettons l'état hydrostatique, l'équation (1.21) devient monodimensionnelle :

$$\frac{dx}{dz} + k_T \frac{d \log T}{dz} + k_B \frac{d \log p}{dz} = 0, \quad (1.22)$$

puisque toutes les valeurs ne changent que de long d'un axe cartésien.

Un des systèmes thermodynamiques où k_T et k_B peuvent être déduits de l'équation d'état ou d'un modèle cinétique de transport est le mélange de deux gaz parfaits, dont les potentiels chimiques sont :

$$\mu_1 = f_1(T) + RT \log(xp), \quad \mu_2 = f_2(T) + RT \log\{(1-x)p\},$$

où $R = 8.31 \text{ J/K}$ est la constante de gaz, $f_1(T)$, $f_2(T)$ sont des fonctions de température.

A partir des potentiels chimiques, on peut calculer directement le rapport de baro-diffusion :

$$k_B = x(1-x) \frac{m_2 - m_1}{m_1x + m_2(1-x)} = x(1-x) \frac{\Delta m}{m(x)}.$$

D'après la théorie cinétique basée sur l'équation de Boltzmann [27] et une approche plus simple développée dans [13, 23], le rapport de thermo-diffusion dans un mélange des gaz parfaits possède la même dépendance de la fraction massique que le rapport de baro-diffusion, mais se distingue du dernier par un facteur numérique :

$$k_T(x) = \varepsilon \cdot x(1-x) \frac{m_2 - m_1}{m_1x + m_2(1-x)} = \varepsilon \cdot k_B(x), \quad \varepsilon \approx 0.25,$$

(ce facteur numérique peut être déduit des paramètres du potentiel d'interaction intermoléculaire [13]).

Pour trouver la masse volumique en fonction de pression, composition chimique et température, nous utilisons la définition :

$$\rho = m(x)n,$$

avec l'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits :

$$p = RT(n_1 + n_2) = RTn,$$

où n_1 , n_2 , n sont les concentrations molaires partielles et sommaire, alors :

$$\rho(x, p, T) = \frac{m(x)p}{RT}. \quad (1.23)$$

Pour fermer le système d'équations (1.20)-(1.22), il ne manque que la connaissance de température comme la fonction de la coordonnée z . Examinons le cas le plus simple où la température est constante dans tout le réservoir, alors la condition d'hydrostatique, compte tenu de (1.22) se réduit à :

$$\frac{d \log p}{dz} = \frac{m(x)g}{RT} \quad (1.24)$$

où A est une constante. La variation verticale de composition chimique dans le cas où $\nabla T = 0$ s'obtient à partir de l'équation :

$$\frac{dx}{dz} + k_B \frac{d}{dz} \log p = 0, \quad (1.25)$$

Compte tenu des expressions pour $d \log p / dz$ et k_B , nous obtenons :

$$\frac{1}{x(1-x)} \frac{dx}{dz} = -\frac{\Delta mg}{RT} \Rightarrow \frac{x}{1-x} = B \exp\left(-\frac{\Delta mgz}{RT}\right). \quad (1.26)$$

Il ne reste qu'à déterminer les constantes A et B pour fixer la pression et la fraction molaire.

Examinons le cas d'un réservoir illimité dans les deux directions perpendiculaires à l'axe z . Choisissons l'origine et la direction de l'axe z sont choisies afin que le point $z = 0$ corresponde à la couverture du réservoir et $z = h$ au fond du réservoir. Désignons par N_1 et N_2 les quantités de moles totales des composants une colonne de section unitaire, soit :

$$\int_0^H n x dz = N_1, \quad \int_0^H n(1-x) dz = N_2. \quad (1.27)$$

Pour la masse molaire en fonction de la coordonnée z , nous pouvons déduire l'expression suivante :

$$m(x) = m_1 x + m_2(1-x) = \frac{RT}{g} \frac{d}{dz} \log \left\{ A \cdot \exp\left(\frac{m_1 g z}{RT}\right) + \exp\left(\frac{m_2 g z}{RT}\right) \right\},$$

En substituant cette expression dans (1.16) nous trouvons que :

$$p = B \left\{ A \exp\left(\frac{m_1 g z}{RT}\right) + \exp\left(\frac{m_2 g z}{RT}\right) \right\}.$$

En substituant $n(z) = p(z)/RT$ et $x(z)$ de (1.26) dans les conditions (1.27), après intégration, nous trouvons que :

$$A = gm_2N_2 \left(\exp\left(\frac{m_2gh}{RT}\right) - 1 \right)^{-1}, \quad B = \frac{m_1N_1}{m_2N_2} \cdot \frac{\exp(m_2gh/RT) - 1}{\exp(m_1gh/RT) - 1}.$$

Finalement la pression et la fraction molaire d'un des composants sont données par les expressions:

$$p(z) = gm_1N_1 \left\{ \exp\left(\frac{m_1gh}{RT}\right) - 1 \right\}^{-1} \exp\left(\frac{m_1gz}{RT}\right) + gm_2N_2 \left\{ \exp\left(\frac{m_2gh}{RT}\right) - 1 \right\}^{-1} \exp\left(\frac{m_2gz}{RT}\right),$$

$$x(z) = \frac{gm_1N_1}{p(z)} \cdot \left\{ \exp\left(\frac{m_1gh}{RT}\right) - 1 \right\}^{-1} \exp\left(\frac{m_1gz}{RT}\right).$$

D'après l'équation (1.26), la puissance de ségrégation des composants dépend de la différence de leurs masses. La longueur caractéristique de ségrégation est :

$$\lambda = \frac{RT}{(m_1 - m_2)g},$$

qui ne dépend pas de la profondeur du réservoir. Une ségrégation importante ne peut être obtenue que dans des réservoirs dont la profondeur h est comparable à λ . Dans un mélange de deux hydrocarbures, de masses molaires très différentes, par exemple les alcanes $C_{10}H_{22}$ et CH_4 ($m_{CH_4} \approx 16 \cdot 10^{-3}$ kg/mole, $m_{C_{10}H_{22}} \approx 142 \cdot 10^{-3}$ kg/mole), cette distance à $T = 300K$ vaut $\lambda \sim 1.5$ km.

Chapitre 2 Transport dissipatif de matière et chaleur dans un milieu hétérogène

§ 2.1 Introduction

La description phénoménologique des processus de transport dissipatif, construite sur la base des lois de thermodynamique linéaire des processus irréversibles, et particulièrement sur le principe de réciprocité d'Onsager, est une méthode suffisamment développée pour le cas des milieux continus homogènes. L'homogénéité du milieu continu signifie que chaque particule matérielle macroscopique est un système élémentaire thermodynamique identique à toute autre particule du milieu. Cela, évidemment, n'est plus le cas dans un milieu composé d'un ensemble de plusieurs phases de différentes constitutions physiques et thermodynamiques.

La présence de plusieurs phases (dans le cas le plus simple : fluide+solide), quasiment dans tous les cas, impose un caractère aléatoire à la distribution des propriétés du milieu. Tout modèle de transport pour un milieu composite dispersif doit être évidemment déduit en tenant compte de ce caractère aléatoire et opérer avec des paramètres moyens universels pour des champs microscopiques de propriétés statistiquement identiques. La méthode d'homogénéisation à deux échelles définit un milieu hétérogène au moyen de fonctions irrégulières : des fonctions périodiques spatialement dont on va faire tendre la période asymptotiquement vers zéro ou des fonctions stochastiques dont on va faire tendre la longueur de corrélation asymptotiquement vers zéro. De telles fonctions modélisent les changements brusques des propriétés du milieu à l'échelle microscopique et cette échelle est considérée comme infinitésimalement petite.

Dans l'approche à deux échelles, on admet que les fluctuations des paramètres du milieu sont du même ordre de grandeur que leurs moyennes (quel que soit le volume sur lequel ces moyennes ont été prises), alors d'un côté le milieu devient extrêmement fracturé et irrégulier, mais d'un autre côté l'absence d'une échelle finie d'hétérogénéité est l'indicateur de l'existence de champs effectifs des paramètres du système [1]. L'analyse quantitative du comportement de ces paramètres est notre objectif.

Dans ce chapitre, nous examinons le transport diffusif en milieux hétérogènes où l'hétérogénéité correspond à l'échelle microscopique par rapport à la dimension du domaine

où se déroule le processus. Outre ses applications pratiques, l'intérêt de cette analyse est théorique et consiste à comprendre les lois qualitatives du comportement homogénéisé et l'influence du type de l'hétérogénéité sur le comportement macroscopique. Cette analyse permet aussi de répondre à la question : est-ce que les hétérogénéités peuvent produire une interférence supplémentaire entre les différents flux thermodynamiques et quelles sont les lois d'une telle interférence.

L'analyse des processus irréversibles dans un milieu hétérogène avec la même complétude qu'au chapitre précédent pour des milieux homogènes est une tâche irréalisable du fait des difficultés théoriques causées par la présence du terme de convection dans les équations de bilan des extensités: l'application de la méthode n'est possible que dans le cas correspondant à un très grand nombre de Péclet. Dans notre analyse nous négligeons la convection. De plus, nous ne prenons pas en compte les réactions chimiques.

§ 2.2 Enoncé du problème pré-homogénéisé

Le système d'équations de bilan de masse pour tous les composants chimiques dans un milieu immobile (sans convection) homogène en absence de réactions chimiques s'écrit :

$$\rho \frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ - \sum_{k=1}^{N-1} L_{ik} \nabla \left(\frac{\eta_k}{T} \right) + L_{0i} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) \right\} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (2.1)$$

où ρ est la masse volumique, c_i est la fraction massique d'un composant, $\eta_i = \mu_i / m_i - \mu_N / m_N$ est le potentiel chimique massique du constituant i rapporté au constituant N , introduit dans le chapitre précédent. Comme la température entre dans le système (2.1), il est nécessaire d'introduire une équation supplémentaire qui peut être le bilan d'énergie interne introduit au chapitre précédent (le bilan d'énergie interne est préférable du point de vue de la symétrie des coefficients phénoménologiques) :

$$\rho \frac{\partial u^{\text{spec}}}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ L_{00} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^{N-1} L_{0i} \nabla \left(\frac{\eta_i}{T} \right) \right\} = 0 \quad (2.2),$$

$u^{\text{spec}} = u^{\text{spec}}(p, T, c_1, \dots, c_{N-1})$ est l'énergie interne rapportée à la masse. La pression qui entre dans l'expression pour l'énergie s'obtient à partir de la condition hydrostatique :

$$\nabla p = \rho \mathbf{g}.$$

Si nous supposons qu'il est possible de négliger l'influence de la gravité sur le processus, nous avons alors:

$$p = p_0 = \text{const} .$$

Comme $\mathbf{v} = 0$, compte tenu de

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 ,$$

on déduit que $\partial \rho / \partial t = 0$.

Comme nous l'avons dit au chapitre 1, la base des grandeurs thermodynamiques intensives traditionnellement utilisée pour caractériser l'état d'un système multicomposant, est p, T (p joue le rôle d'un paramètre constant) et la composition chimique c_1, \dots, c_{N-1} . Mais la composition chimique, exprimée en termes de fractions soit molaires soit massiques, n'est pas pratique pour caractériser l'état d'un système composite contenant des interphases car les fractions c_1, \dots, c_{N-1} ne sont en général pas continues. De ce point de vue, l'ensemble des paramètres $T, \eta_1, \dots, \eta_{N-1}$, ou de manière équivalente $-\eta_1/T, \dots, -\eta_{N-1}/T, 1/T$, est plus commode car il est nécessairement continu sur les interphases. Nous choisissons donc cet ensemble de paramètres thermodynamiques indépendants. Introduisons la notation :

$$u_1, \dots, u_N = \frac{\eta_1}{T}, \dots, \frac{\eta_{N-1}}{T}, -\frac{1}{T},$$

$$e_1, \dots, e_N = \rho c_1, \dots, \rho c_{N-1}, \rho u^{\text{spec}},$$

(la notation « e_i » signifie extensité volumique i) et supposons qu'il est possible de trouver les expressions explicites :

$$e_i = e_i(u_1, \dots, u_N | p = p_0), \quad i = 1, \dots, N .$$

Le système (2.1) et l'équation (2.2) peuvent alors être rassemblés sous une forme symétrique, en faisant abstraction de la signification physique des grandeurs u_i et e_i :

$$\frac{\partial e_i}{\partial t} - \nabla \cdot \left\{ \sum_{k=1}^N L_{ik} \nabla u_k \right\} = 0, \quad (2.3)$$

Il est commode d'introduire la notation symbolique :

$$\frac{\partial \mathbf{e}(\mathbf{u})}{\partial t} - \nabla \cdot \{ \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}) \cdot \nabla \mathbf{u} \} = 0, (2.3^*)$$

où $\mathbf{e}(\mathbf{u})$ est le vecteur N -dimensionnel des extensités volumiques, $\hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u})$ la matrice symétrique de dimension $N \times N$ des coefficients phénoménologiques, exprimée au moyen du vecteur des paramètres de base \mathbf{u} .

Le système (2,3*) peut être réduit à la forme quasi linéaire:

$$\hat{\mathbf{c}}(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \{ \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}) \cdot \nabla \mathbf{u} \} = 0, (2.3^{**})$$

où nous avons introduit la matrice $\hat{\mathbf{c}}$ des capacités généralisées dont les éléments sont:

$$c_{ik} = \frac{\partial e_i}{\partial u_k} \neq c_{ki}.$$

Dans un milieu homogène, les coefficients phénoménologiques dépendent des paramètres d'état locaux mais pas explicitement des coordonnées \mathbf{r} . Si l'état thermodynamique change continûment, les coefficients phénoménologiques changent aussi continûment. La situation d'un milieu composé de plusieurs phases de différentes constitutions physiques et thermodynamiques est différente. A l'intérieur d'une phase, les coefficients phénoménologiques ne dépendent que de l'état thermodynamique local, mais lorsque l'on traverse l'interphase, cette dépendance change. Les coefficients phénoménologiques changent continûment par morceaux. La même chose peut être dite à propos des extensités volumiques comme fonctions d'état local thermodynamique.

La description mathématique d'un tel changement des coefficients et des extensités volumiques peut être effectuée au moyen des fonctions indicatrices des phases :

$$\theta^a(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \text{si le point } \mathbf{r} \text{ est à l'intérieur de la phase } a \\ 0, & \text{s'il est ailleurs} \end{cases}$$

qui servent en quelque sorte de commutateur entre les différentes équations d'état exprimant des différentes lois constitutives thermodynamiques. Alors :

$$\mathbf{e}(\mathbf{u}, \mathbf{r}) = \sum_{a=1}^A \theta^a(\mathbf{r}) \mathbf{e}^a(\mathbf{u}),$$

$$\hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}, \mathbf{r}) = \sum_{a=1}^A \theta^a(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{L}}^a(\mathbf{u}),$$

l'indice « a » parcourt tout l'ensemble des phases liquides et gazeuses et la phase solide si elle est présente. Les fonctions $\mathbf{e}^a(\mathbf{u})$ et $\hat{\mathbf{L}}^a(\mathbf{u})$ sont les extensités volumiques et les coefficients phénoménologiques de la phase a seule. Nous supposons les fonctions $\theta^1(\mathbf{r}), \dots, \theta^A(\mathbf{r})$ données.

Au travers de la phase solide, n'a lieu qu'un transfert de chaleur mais pas de transfert de masse. Certaines phases peuvent être inaccessibles à certains composants (s'ils ne s'y dissolvent pas). Cela signifie simplement que la capacité généralisée correspondant à ce composant dans cette phase est égale à zéro :

$$c_{ik}^a = \frac{\partial e_i^a}{\partial u_k} = 0, \text{ pour tout } i \text{ si le composant } k \text{ ne se dissout pas dans la phase } a,$$

$$c_{ik}^{\text{solide}} = \frac{\partial e_i^{\text{solide}}}{\partial u_k} = 0 \text{ pour tous } i \text{ et } k \text{ à l'exception de } i, k = N \text{ qui correspondent à } u_N \equiv -1/T.$$

De plus, il faut prendre en compte qu'une phase inaccessible à une espèce ne peut pas la transporter, soit :

$$L_{ik}^a = L_{ki}^a = 0 \text{ pour tout } i, \text{ si l'extensité } k \text{ n'est pas présente dans la phase } a, \text{ particulièrement :}$$

$$L_{ik}^{\text{solide}} = L_{ki}^{\text{solide}} = 0 \text{ pour tous } i \text{ et } k \text{ à l'exception de } i, k = N.$$

Le système (2.3*) ou (2.3**) en passant des milieux homogènes aux milieux hétérogènes, garde son ancienne forme, une fois faite la correction que les coefficients des équations dépendent explicitement des coordonnées spatiales au travers des fonctions indicatrices.

§ 2.3 Homogénéisation des équations de bilan dans un milieu périodique

Examinons maintenant le transport dissipatif en milieu hétérogène. Les hétérogénéités apparaissent à une échelle microscopique par rapport à la dimension macroscopique du domaine où se déroule le processus, c'est-à-dire que l'échelle de l'hétérogénéité l et la longueur du domaine L vérifient

$$\frac{l}{L} = \varepsilon \ll 1.$$

Supposons que les variations des propriétés géométriques du milieu (les fonctions $\theta^1(\mathbf{r}), \dots, \theta^A(\mathbf{r})$) soient spatialement périodiques (ou approximativement périodiques) avec une période égale à l .

La technique d'analyse des équations avec des coefficients fluctuants consiste à étendre les fonctions en espace à deux vecteur-variables : la variable $x = (x_1, x_2, x_3)$ dite lente, qui décrit le comportement global, et la variable $y = (y_1, y_2, y_3)$ dite rapide, qui correspond aux variations à l'échelle interne (à l'intérieur d'une cellule élémentaire du milieu). Cette nouvelle variable est définie par

$$(y_1, y_2, y_3) = \varepsilon^{-1}(x_1, x_2, x_3),$$

Suivant la méthode des développements à deux échelles, considérons le vecteur \mathbf{u} comme une fonction des deux types de coordonnées :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y, t)$$

et définissons le gradient étendu comme :

$$\frac{d}{dx_i} \equiv \nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i}.$$

Le problème de départ formulé dans l'espace à deux échelles sera :

$$\hat{\mathbf{c}}(\mathbf{u}, x, y) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \frac{d}{dx_i} \cdot \left\{ \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}, x, y) \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dx_i} \right\} = 0 \quad (2.4)$$

Une hypothèse fondamentale de la méthode d'homogénéisation à deux échelles est que le vecteur des fonctions inconnues $\mathbf{u}(x, y, t)$ est développable sous la forme d'une série entière par rapport à ε :

$$\mathbf{u}(x, y, t) = \mathbf{u}^0(x, t) + \varepsilon \mathbf{u}^{(1)}(x, y, t) + \varepsilon^2 \mathbf{u}^{(2)}(x, y, t) + \dots \quad (2.5).$$

La convergence de cette série signifie que lorsque l'on diminue la taille des hétérogénéités, la solution devient lisse, bien que les coefficients dans les équations deviennent indéterminés. On suppose que le terme d'ordre 0 est invariant par rapport à y et, de plus, on identifie la fonction $\mathbf{u}^0(x, t)$ avec la moyenne de la fonction \mathbf{u} sur une cellule élémentaire :

$$\mathbf{u}^0(x, t) \equiv \langle \mathbf{u} \rangle(x, t),$$

où l'opérateur d'homogénéisation est définie de la façon suivante :

$$\langle f \rangle(x, t) = \int_Y f(x, y, t) d^3 y, \quad (2.6)$$

où $Y = \{-1/2 \leq y_i \leq 1/2, i=1,2,3\}$ est le cube unitaire dans l'espace des coordonnées rapides. Le seul terme de la série (2.5) qui présente pour nous un intérêt est $\mathbf{u}^{(0)}$, mais, comme nous verrons, pour le trouver il faudra aussi connaître $\mathbf{u}^{(1)}$.

Rappelons-nous que les coefficients non linéaires $\hat{\mathbf{c}}(\mathbf{u}, x, y)$ et $\hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}, x, y)$ sont des fonctions continues par rapport à l'état thermodynamique mais discontinues comme fonctions explicites des coordonnées. Cela signifie que lorsque \mathbf{u} converge vers $\mathbf{u}^{(0)}$, les coefficients $\hat{\mathbf{c}}(\mathbf{u}, x, y)$ et $\hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}, x, y)$ convergent vers $\hat{\mathbf{c}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y)$ et $\hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y)$ respectivement. Autrement dit, les perturbations infinitésimalement petites (quand $\varepsilon \rightarrow 0$) de l'état thermodynamique local produisent des perturbations infinitésimales des coefficients, même si les perturbations causées par les fonctions indicatrices ne disparaissent pas quand $\varepsilon \rightarrow 0$. Ainsi l'effet de dépendance des coefficients du reste de la série (2.5) $\varepsilon \mathbf{u}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathbf{u}^{(2)} + \dots$ est d'ordre de grandeur $O(\varepsilon)$ et peut être négligé. Le système (2.4) se réduit dans ce cas à :

$$\hat{\mathbf{c}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \frac{d}{dx_i} \cdot \left\{ \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dx_i} \right\} = 0 \quad (2.7).$$

Le gradient étendu du vecteur des inconnues \mathbf{u} est donné par la série :

$$\frac{d\mathbf{u}}{dx_i} = \left(\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} \right) (\mathbf{u}^{(0)} + \varepsilon \mathbf{u}^{(1)} + \dots) = \left(\frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_i} \right) + \varepsilon \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{u}^{(2)}}{\partial y_i} \right) + \varepsilon^2 \dots$$

Les systèmes d'équations pour les différentes fonctions $\mathbf{u}^{(n)}$ selon la méthode à deux échelles, s'obtiennent par la substitution de \mathbf{u} et $d\mathbf{u}/dx_i$ (sous forme de séries en puissances de ε) dans le système (2.7) en égalant à zéro les expressions pour chaque puissance de ε . Les deux premiers systèmes, d'ordres -1 et 0 , sont les suivantes:

$$\varepsilon^{-1}: \quad \frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_i} \right) \right\} = 0,$$

$$\varepsilon^0: \quad \hat{\mathbf{c}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \left\{ \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_i} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial y_i} \cdot \left\{ \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{u}^{(2)}}{\partial y_i} \right) \right\}$$

Remarquons que pour les systèmes d'équations aux ordres suivants : $1, 2, \dots$, il faudrait prendre en compte le fait que $\hat{\mathbf{L}}$ et $\hat{\mathbf{c}}$ dépendent aussi de $\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}, \dots$, mais nous n'en aurons pas besoin.

Le système correspondant à ε^0 homogénéisé selon la définition (2.6) ne contient pas le dernier terme et par la suite les fonctions $\mathbf{u}^{(2)}$. Prouvons que la valeur moyenne d'un gradient dans l'espace des coordonnées rapides est nulle. Selon le théorème d'Ostrogradski, l'intégrale volumique d'un gradient peut être transformée en intégrale sur la surface :

$$\int_Y \frac{\partial f}{\partial y_i} d^3 y = \oint_{\partial Y} f n_i d\sigma.$$

Si la fonction $f(x, y)$ est continue par rapport à y , ces valeurs sont les mêmes sur les faces opposées du cube Y , suite à la périodicité de la fonction et que les vecteurs normaux sont anti-colinéaires, alors la somme des intégrales sur toutes les faces est égale à zéro.

Le système d'équations correspondant à ε^0 , homogénéisé compte tenu du fait que $\mathbf{u}^{(0)}$ est invariable par l'opération d'homogénéisation et que les dérivées lentes commutent avec l'homogénéisation :

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} \right\rangle \equiv \frac{\partial \langle f \rangle}{\partial x_i},$$

prend la forme suivante :

$$\langle \hat{\mathbf{c}} \rangle(\mathbf{u}^{(0)}, x) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \left\{ \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle(\mathbf{u}^{(0)}, x) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_i} + \left\langle \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_i} \right\rangle \right\}, \quad (2.8)$$

où le terme :

$$\left\langle \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_i} \right\rangle$$

contient l'interférence des fluctuations des fonctions inconnues et des coefficients. Ce terme contient la fonction $\mathbf{u}^{(1)}$ qui doit être obtenue à partir du système d'équations correspondant à ε^{-1} , qui peut être réécrite comme :

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ \hat{\mathbf{L}} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_i} \right\} = - \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial y_i} \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_i} \quad (2.9)$$

et représente un système d'équations elliptiques par rapport à $\mathbf{u}^{(1)}$.

Le système d'équations (2.9), par sa forme, indique une relation linéaire entre $\mathbf{u}^{(1)}$ et $\partial \mathbf{u}^{(0)} / \partial x_i$ qui y joue le rôle d'un paramètre constant, puisqu'il ne dépend pas de la coordonnée rapide y . Cette relation linéaire sera plus facile à déterminer sur un cas particulier plus simple.

Examinons le cas classique, où il s'agit d'une seule fonction scalaire $\mathbf{u} = u$ et d'un seul coefficient $\hat{\mathbf{L}} = L$. Une relation linéaire entre $\mathbf{u}^{(1)}$ et $\partial \mathbf{u}^{(0)} / \partial x_i$ s'établit de façon générale au moyen des fonctions cellulaires $\psi_1(y)$, $\psi_2(y)$, $\psi_3(y)$ périodiques de telle manière que :

$$u^{(1)}(x, y, t) = \psi_k(y) \frac{\partial u^{(0)}}{\partial x_k}(x, t)$$

(l'expression pour $u^{(1)}(x, y, t)$ peut contenir une fonction de x additionnelle dont la présence ne changerait rien dans l'équation (2.8) où $u^{(1)}(x, y, t)$ n'entre que par sa dérivée suivant y_i).

En substituant l'expression précédente pour $u^{(1)}(x, y, t)$ dans les équations (2.8) et (2.9) (réduites au cas $N = 1$), nous obtenons, d'une part, les équations auxquelles les fonctions $\psi_1(y)$, $\psi_2(y)$, $\psi_3(y)$ doivent satisfaire (appelées problème cellulaire) :

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ L \frac{\partial \psi_k}{\partial y_i} \right\} = - \frac{\partial L}{\partial y_k},$$

Et, d'autre part, les expressions des composantes tensorielles du coefficient effectif définies par :

$$\begin{aligned} \langle L \rangle \frac{\partial u^{(0)}}{\partial x_i} + \left\langle L \frac{\partial u^{(1)}}{\partial y_i} \right\rangle &\equiv L_{ik}^{\text{eff}} \frac{\partial u^{(0)}}{\partial x_k}, \\ L_{ik}^{\text{eff}} &= \left\langle L \left(\delta_{ik} + \frac{\partial \psi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle. \end{aligned}$$

Remarquons à propos du problème cellulaire que les équations déduites pour $\psi_1(y)$, $\psi_2(y)$, $\psi_3(y)$ peuvent être résolues chacune séparément.

Dans notre cas, plus général, il nous faut trouver une forme plus générale pour la relation linéaire. Changeons d'abord les indices utilisés pour la numérotation des composants du mélange (i, k) contre (α, β) , afin de ne pas les confondre avec les indices des coordonnées cartésiennes. Admettons que chaque fonction $u_\alpha^{(1)}$ dépende des trois composantes cartésiennes du gradient de chaque fonction $u_\alpha^{(0)}$, c'est-à-dire que :

$$u_\alpha^{(1)} = \sum_{\beta=1}^N \psi_{\alpha\beta,k} \frac{\partial u_\beta^{(0)}}{\partial x_k},$$

ou, dans une autre forme d'écriture :

$$\mathbf{u}^{(1)} = \hat{\Psi}_k \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_k}, \quad (2.10)$$

où $(\hat{\Psi}_1, \hat{\Psi}_2, \hat{\Psi}_3)$ est un vecteur tridimensionnel des matrices de dimension $N \times N$. En imposant la forme (2.10) dans le système (2.9), nous arrivons au problème cellulaire généralisé :

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ \hat{\mathbf{L}} \otimes \frac{\partial \hat{\Psi}_k}{\partial y_i} \right\} = - \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial y_k}, \quad (2.11)$$

où le signe « \otimes » indique le produit de deux matrices :

$$\left(\hat{\mathbf{L}} \otimes \frac{\partial \hat{\Psi}_k}{\partial y_i} \right)_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma=1}^N L_{\alpha\gamma} \frac{\partial \psi_{\gamma\beta,k}}{\partial y_i}.$$

Le problème cellulaire (2.11) se sépare en trois problèmes indépendants correspondant aux trois coordonnées cartésiennes (de même que dans le cas de $N=1$). En imposant la forme (2.10) dans le système (2.8), nous obtenons les expressions pour les coefficients effectifs :

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_i} + \left\langle \hat{\mathbf{L}} \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_i} \right\rangle &\equiv \hat{\mathbf{L}}_{ik}^{\text{eff}} \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_k}, \\ \hat{\mathbf{L}}_{ik}^{\text{eff}} &= \left\langle \hat{\mathbf{L}} \delta_{ik} + \hat{\mathbf{L}} \otimes \frac{\partial \hat{\Psi}_k}{\partial y_i} \right\rangle = \left\langle \hat{\mathbf{L}} \otimes \left(\hat{\mathbf{E}} \delta_{ik} + \frac{\partial \hat{\Psi}_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.12)$$

où $\hat{\mathbf{E}}$ est la matrice unitaire de dimension $N \times N$.

Finalement, le système d'équations pour les fonctions homogénéisées $\mathbf{u}^{(0)} \equiv \langle \mathbf{u} \rangle$ est le suivant :

$$\langle \hat{\mathbf{c}} \rangle \cdot \frac{\partial \langle \mathbf{u} \rangle}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \left\{ \hat{\mathbf{L}}_{ik}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \langle \mathbf{u} \rangle}{\partial x_k} \right\} = 0,$$

où :

$$\langle \hat{\mathbf{c}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{c}}(x, y, \langle \mathbf{u} \rangle) \rangle.$$

Les coefficients effectifs $\hat{\mathbf{L}}_{ik}^{\text{eff}}$ s'expriment au travers les fonctions cellulaires $\hat{\psi}_k(y)$ selon (2.12) où les fonctions cellulaires sont solutions du problème cellulaire (2.11).

§ 2.4 Le cas du milieu stratifié

Examinons le cas particulier, important d'un point de vue pratique, d'un milieu stratifié. Un milieu stratifié est un système des strates parallèles, le long desquelles les propriétés du milieu ne changent pas, mais changent dans la direction perpendiculaire.

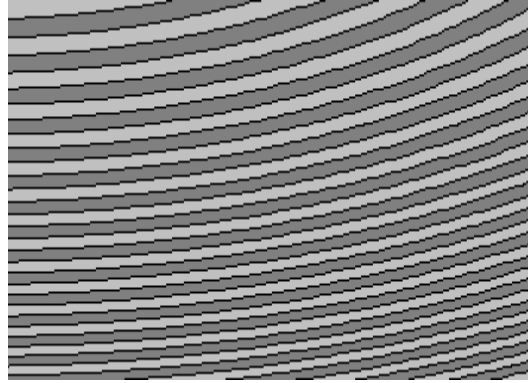


Fig. 2.1 Image schématique d'un milieu stratifié

Un milieu stratifié comme sur la fig.2.1, est un milieu anisotrope où la direction de l'axe d'anisotropie change assez lentement. Dans le cas des strates parfaitement parallèles, un tel milieu peut être modélisé des coefficients $\hat{\mathbf{L}}$ qui dépendent que d'une seule coordonnée rapide disons y_1 :

$$\hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y) \equiv \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y_1).$$

Le système d'équations correspondant à l'ordre ε^{-1} (2.9) dévient monodimensionnel:

$$\frac{\partial}{\partial y_1} \left\{ \hat{\mathbf{L}} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_1} \right\} = - \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial y_1} \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1}, \quad (2.13)$$

et le problème se simplifie d'une manière remarquable. Le système (2.8) prend la forme :

$$\langle \hat{\mathbf{c}} \rangle(\mathbf{u}^{(0)}, x) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle(\mathbf{u}^{(0)}, x) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_i} \right\} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left\langle \hat{\mathbf{L}}(\mathbf{u}^{(0)}, x, y_1) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_1} \right\rangle. \quad (2.14)$$

On voit que l'interférence entre les fluctuations des coefficients et les fonctions inconnues ne joue que sur la première composante cartésienne des flux d'extensités.

Suite à l'uniformité des fonctions des coordonnées rapides par rapport à y_2 et y_3 , l'opération d'homogénéisation se réduit à l'intégration sur $-1/2 \leq y_1 \leq 1/2$:

$$\langle f \rangle(x, t) \equiv \int_Y f(x, y, t) d^3 y = \int_{-1/2}^{1/2} f(x, y_1, t) dy_1.$$

Le système (2.13), qui est un système d'équations différentielles ordinaires (linéaires du second ordre) peut être intégré sans introduire les fonctions cellulaires. Une fois intégré sur y_1 le système (2.13) donne :

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_1} = -\hat{\mathbf{L}} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1} - \mathbf{C}(x, t), \quad (2.15)$$

où $\mathbf{C}(x)$ est un vecteur fonction des coordonnées lentes qui joue le rôle de constante d'intégration.

Intégrons (2.15) sur $-1/2 \leq y_1 \leq 1/2$ et comparons le résultat avec la partie droite du système (2.14). Nous trouvons que le vecteur $\mathbf{C}(x, t)$ n'est autre que le vecteur (N -dimensionnel) des premières composantes cartésiennes des flux des extensités :

$$\mathbf{C}(x, t) = -\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1} - \left\langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_1} \right\rangle. \quad (2.16)$$

Une fois le vecteur $\mathbf{C}(x, t)$ est déterminé, le problème est résolu.

Pour trouver $\mathbf{C}(x, t)$, récrivons le système (2.15) sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_1} + \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1} = -\hat{\mathbf{L}}^{-1} \cdot \mathbf{C}(x, t), \quad (2.17)$$

où $\hat{\mathbf{L}}^{-1}$ est la matrice inverse des coefficients phénoménologiques. Lorsqu'on intègre (2.17) sur $-1/2 \leq y_1 \leq 1/2$, le terme $\partial \mathbf{u}^{(1)} / \partial y_1$ disparaît comme la dérivée moyenne d'une fonction périodique et $\partial \mathbf{u}^{(0)} / \partial x_1$ reste invariant comme une fonction des coordonnées lentes. Alors :

$$\frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1} = -\langle \hat{\mathbf{L}}^{-1} \rangle \cdot \mathbf{C}(x, t),$$

d'où il suit que :

$$\mathbf{C}(x, t) = -\langle \hat{\mathbf{L}}^{-1} \rangle^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1}. \quad (2.18)$$

Maintenant, en substituant les expressions trouvées :

$$-\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1} - \left\langle \hat{\mathbf{L}} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(1)}}{\partial y_1} \right\rangle = \mathbf{C}(x, t) = -\langle \hat{\mathbf{L}}^{-1} \rangle^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_1}$$

dans les équations homogénéisées de bilan (2.14), nous trouvons que :

$$\langle \hat{\mathbf{c}} \rangle(\mathbf{u}^{(0)}, x) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \left\{ \left[n_i n_k \langle \hat{\mathbf{L}}^{-1} \rangle^{-1} + (\delta_{ik} - n_i n_k) \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle \right] \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^{(0)}}{\partial x_k} \right\}$$

où $n = (1, 0, 0)$ la direction perpendiculaire aux strates.

Les tenseurs qui lient les flux d'extensités avec les gradients lents des paramètres de base homogénéisés $\partial \mathbf{u}^{(0)} / \partial x_i$ ne sont autres que les coefficients phénoménologiques effectifs :

$$\hat{\mathbf{L}}_{ik}^{\text{eff}} = n_i n_k \langle \hat{\mathbf{L}}^{-1} \rangle^{-1} + (\delta_{ik} - n_i n_k) \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle. \quad (2.19)$$

Au début de ce paragraphe, nous avons admis que la direction n_i est invariante, mais si cette direction change assez lentement, c'est-à-dire que c'est une fonction des coordonnées lentes $n_i = n_i(x)$, dans le problème local (2.9), nous avons le droit de tourner les axes y_1, y_2, y_3 ainsi que le nouvel axe y_1 qui coïnciderait avec la direction de $n_i(x)$. Une généralisation de (2.19) pour le cas d'une lente variation de la direction normale des strates consiste simplement à substituer $n_i = n_i(x)$ à $n_i = \text{const}$.

Dans le cas particulier de processus dissipatifs indépendants, la matrice $\hat{\mathbf{L}}$ est diagonale :

$$\hat{\mathbf{L}} = \text{diag} \{ L_{11}, \dots, L_{NN} \}$$

L'inversion au sens de matrices est équivalente à l'inversion de chaque élément diagonal de la matrice au sens commun. Pour le coefficient effectif, nous obtenons donc :

$$\hat{\mathbf{L}}_{ik}^{\text{eff}} = n_i n_k \text{diag} \left\{ \langle L_{11}^{-1} \rangle^{-1}, \dots, \langle L_{NN}^{-1} \rangle^{-1} \right\} + (\delta_{ik} - n_i n_k) \text{diag} \left\{ \langle L_{11} \rangle, \dots, \langle L_{NN} \rangle \right\}.$$

Ceci représente un résultat classique qui peut être interprété simplement : le flux le long des hétérogénéités passe par un système de milieux conducteurs connectés en parallèle dont la conductivité effective est la somme des conductivités partielles ; le flux à travers les hétérogénéités (dans la direction n_i) passe par un système de milieux conducteurs connectés en série dont la résistance effective est la somme des résistances partielles.

Remarquons que si les résultats que nous avons obtenus pour un milieu stratifié sont appliqués au cas où il y a la phase solide, la matrice $\hat{\mathbf{L}}$ n'aura pas d'inverse à l'intérieur du solide puisque qu'un seul élément est non nul L_{NN}^{solide} . Dans ce cas, il n'y a pas de sens à parler d'une diffusion au travers des hétérogénéités car le solide forme un système d'écrans imperméables par rapport à la diffusion. De même, une phase où un des composants n'est pas transporté est un obstacle à la diffusion. De la façon générale, on peut affirmer que si dans la matrice des coefficients phénoménologiques partiels $\hat{\mathbf{L}}^a$, il y a une ligne (et une colonne) « α » d'éléments tous égaux à zéro, le flux de l'extensité « α » s'obtient au moyen de la relation :

$$J_{\alpha i} = -(\delta_{ik} - n_i n_k) \sum_{\beta=1}^N \langle L_{\alpha\beta} \rangle \frac{\partial u_{\beta}^{(0)}}{\partial x_i},$$

$$J_{\alpha i} n_i = 0.$$

§ 2.5 Conclusion

Un système d'équations homogénéisées dans des milieux hétérogènes a été obtenu. Un des effets essentiels dûs à l'hétérogénéité par rapport au cas homogène est l'anisotropie effective des propriétés macroscopiques du milieu, même si, les coefficients de transport des

équations microscopiques sont les mêmes dans toutes les directions. Un autre effet consiste en apparition d'une interaction supplémentaire entre les différents processus dissipatifs dans un milieu stratifié : chaque coefficient phénoménologique effectif est influencé par les variations microscopiques de tous les autres coefficients de telle façon que :

$$\hat{\mathbf{L}}_{ik}^{\text{eff}} = n_i n_k \langle \hat{\mathbf{L}}^{-1} \rangle^{-1} + (\delta_{ik} - n_i n_k) \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle,$$

Même dans le cas de deux processus dissipatifs $\alpha, \beta = (1, 2)$, ce résultat se réduit à une expression non triviale :

$$\{L_{11}^{\alpha\beta}\}^{\text{eff}} = \frac{\langle L^{\alpha\beta} / \det\{\hat{\mathbf{L}}\} \rangle}{\det\{\langle \hat{\mathbf{L}} / \det\{\hat{\mathbf{L}}\} \rangle\}},$$

$$\{L_{22}^{\alpha\beta}\}^{\text{eff}} = \{L_{33}^{\alpha\beta}\}^{\text{eff}} = \langle L^{\alpha\beta} \rangle, \quad \{L_{i\neq k}^{\alpha\beta}\}^{\text{eff}} = 0.$$

Il faut enfin remarquer qu'en pratique, les milieux sont rarement exactement périodiques. Le milieu périodique n'est qu'une abstraction mathématique d'un milieu réel, pour modéliser certaines de ses caractéristiques qui jouent un rôle important dans la dynamique des processus étudiés. L'application pratique d'un modèle homogénéisé se base, alors sur la supposition intuitive d'universalité des relations effectives (liant les valeurs homogénéisées), démontrées pour un processus périodique.

Il existe une technique spéciale d'homogénéisation dans un milieu stochastique [48, 21], qui est d'un point de vue moins idéalisé qu'un milieu périodique, mais sa mise en œuvre est beaucoup plus difficile que pour un milieu périodique puisqu'il faut opérer avec des équations différentielles stochastiques. La procédure d'homogénéisation dans un milieu stochastique est un hybride entre une procédure analytique et la méthode numérique de projection.

Chapitre 3. Etude analytique du balayage d'un réservoir de gaz par un aquifère

§ 3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la résolution analytique d'un problème ayant une application pratique directe. L'objet de notre étude est un réservoir souterrain de méthane situé au-dessus d'un aquifère schématiquement représenté sur la fig.3.1. Onze des quatorze réservoirs souterrains de gaz en France sont des réservoirs en nappe aquifère (d'après l'Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie). Un réservoir souterrain en nappe aquifère est un gisement de gaz créé artificiellement: le gaz est injecté sous pression dans une élévation de l'aquifère initialement saturée en eau et couverte d'une couche imperméable d'argile. Il remplace l'eau et se trouve bloqué entre l'eau au-dessous et l'argile au-dessus.

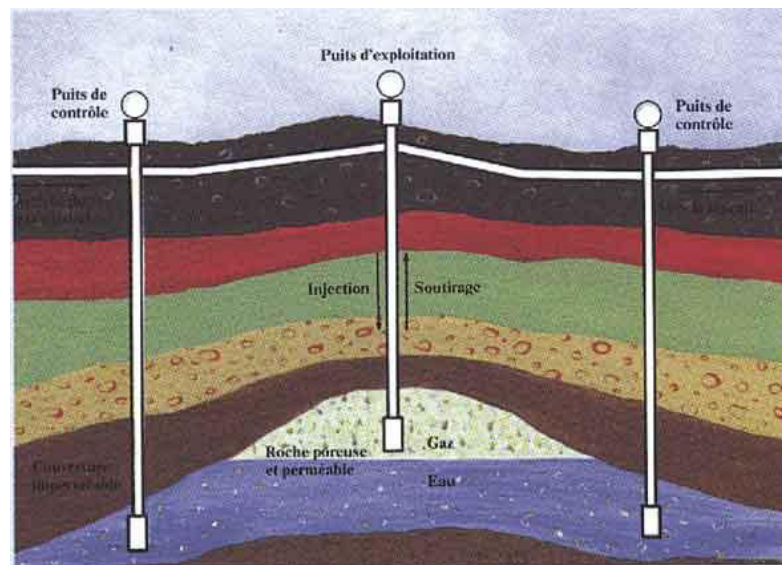


Fig.3.1 Schéma d'un réservoir de gaz en nappe aquifère.

Le réservoir dont la forme habituelle est un dôme est rempli d'un mélange de gaz (CH_4 et N_2). Le méthane est principalement localisé en haut du réservoir tandis que l'azote forme un tampon sur le réservoir et l'aquifère. Bien que les gaz soient partiellement ségrégés, une limite brusque n'existe pas : tous deux sont présents partout dans le réservoir. Le méthane soluble dans l'eau peut quitter le réservoir en se dissolvant dans l'aquifère où il est transporté par l'éventuel écoulement. En absence d'écoulement dans l'aquifère, la dissolution du

méthane va simplement saturer la zone de l'aquifère que se trouve juste au-dessus du réservoir. En principe, après saturation de cette zone, le méthane va diffuser dans l'aquifère vers les zones éloignées du réservoir ; mais, cette diffusion va très vite devenir faible et, d'un point de vue pratique, les pertes dissipatives du méthane sont négligeables. La situation est différente s'il existe un écoulement dans l'aquifère. L'écoulement renouvelle l'eau dans la zone de l'aquifère située au-dessus du réservoir et, de cette façon, maintient un déséquilibre (du point de vue de thermodynamique) entre le réservoir et l'aquifère entraînant la fuite du méthane. Du point de vue d'exploitation des réservoirs souterrains, il est important d'estimer les pertes du gaz par dissolution dans l'aquifère et par évacuation ultérieure par l'écoulement. C'est à cette question que ce chapitre est consacré.

Pour la résoudre, nous nous appuyons sur un modèle physique idéalisé de diffusion dans le système. La simplification la plus importante consiste à considérer une géométrie bidimensionnelle : le système est invariant par translation dans la direction z perpendiculaire au plan de la fig. 3.2. Nous admettons de plus les simplifications suivantes :

- le contact entre les deux phases est fixe dans l'espace ;
- les propriétés thermodynamiques et cinétiques des deux milieux (masse volumique, coefficient de diffusion) ne varient pas significativement lors du processus, de telle manière que le problème devienne linéaire ;
- la vitesse d'écoulement est nulle dans le réservoir et uniforme dans l'aquifère ; de plus, nous supposons que la vitesse de l'aquifère est donnée et est considérée dans notre analyse comme un paramètre constant ;
- la solution diffuse aussi bien dans le réservoir que dans l'aquifère selon une simple loi de Fick avec des coefficients de diffusion constants mais différents pour deux milieux ;
- l'équilibre surfacique des compositions chimiques de part et d'autre des deux côtés du contact réservoir-aquifère obéit à la loi d'Henry ;
- il n'y a qu'une seule espèce chimique dissoute dans l'aquifère (ou il y en a plusieurs mais chacune d'entre elles se dissout et diffuse indépendamment des autres).

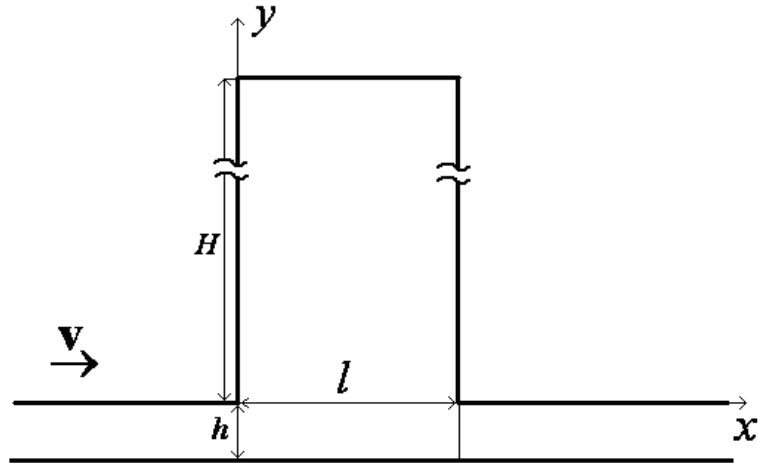


Fig.3.2 Géométrie idéalisée d'un réservoir de stockage de gaz.

Géométriquement, le système est un rectangle $H \times l$ connecté sur sa face inférieure à une couche horizontale d'épaisseur h infinie dans les deux directions. En réalité, l'épaisseur de la couche d'eau au-dessous du réservoir peut varier suite aux changements saisonniers de consommation et remplissage du gaz. L'approche avec une géométrie fixe correspond à des temps petits en comparaison avec le temps des changements saisonniers. Les dimensions des systèmes réels sont telles que $h/l \ll 1$, quant au rapport des dimensions H et l , nous supposons que $H \gg l$ et nous considérerons le cas $H = \infty$.

L'origine du système de coordonnées est prise à l'extrémité basse du système, centrée par rapport à la direction horizontale, de telle manière que :

$$\text{réservoir} = \{-l/2 < x < l/2, h < y < +\infty\}, \text{ aquifère} = \{-\infty < x < \infty, 0 < y < h\}.$$

Le bilan local de quantité de l'espèce diffusante, dans le réservoir, est décrit par une équation de diffusion :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (D_g \nabla u) = 0, \quad (3.1)$$

et dans l'aquifère par une équation de convection-diffusion :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot u - D_w \nabla u) = 0, \quad (3.2)$$

où u est la concentration du composant diffusant estimée petite en comparaison avec la concentration du composant dominant (dans le réservoir, le gaz coussin; dans l'aquifère,

l'eau), ce qui nous permet d'appliquer la loi de Fick pour la diffusion. Les équations (3.1) et (3.2) sont formulées avec l'hypothèse que tous les facteurs devant la dérivée de la concentration par rapport au temps sont constants et peuvent donc être incorporés au coefficient de diffusion dont il faut alors préciser la définition. Normalement on définit le coefficient de diffusion comme le coefficient devant ∇u rapporté à la masse volumique macroscopique (c'est-à-dire multipliée par la porosité), ainsi les coefficients D_g et D_w sont les coefficients de diffusion dans le sens commun, y compris l'effet de tortuosité qui peut réduire la valeur du coefficient dans un milieu poreux. Quant à la valeur $\mathbf{v} = v\mathbf{e}_x$, elle est, par son sens, la vitesse intrinsèque d'écoulement, c'est-à-dire la vitesse de filtration divisée par la porosité supposée constante.

Le champ de concentration satisfait à la condition d'imperméabilité sur toute la limite externe du système réservoir-aquifère :

$$\begin{aligned}u_x(-l/2, y, t) &= u_x(l/2, y, t) = 0 \\u_y(-l/2 < x < l/2, h, t) &= 0 \\u_y(x, 0, t) &= 0\end{aligned}$$

A l'interface réservoir-aquifère, le champ de concentration satisfait à la condition de continuité du flux :

$$D_g u_y(x, h+0, t) = D_w u_y(x, h-0, t), \quad (3.3)$$

qui vient de la conservation de quantité de matière et à loi d'Henry liant les concentrations d'équilibre des deux côtés de la surface liquide-gaz

$$\frac{u(x, h-0, t)}{u(x, h+0, t)} = \frac{n_g}{n_w} H^0 p \quad (3.4)$$

où H^0 est la constante d'Henry du contact de deux milieux, p est la pression, n_g, n_w sont les concentrations molaires de matière des deux côtés de l'interface (dans l'approche choisie, les valeurs n_g et n_w sont constantes). La loi d'Henry vient de l'égalité des potentiels chimiques du constituant diffusant, d'une part, dans un mélange des gaz parfaits et, d'autre part, dans une solution diluée de liquide ; elle n'est donc exacte que pour de tels systèmes. La pression supposée ne pas varier significativement sur la longueur l est considérée constante bien que

son gradient soit indispensable pour existence d'écoulement ; l'expression $(n_g / n_w)H^0 p$ est donc une constante :

$$\frac{n_g}{n_w} H^0 p = \sigma .$$

Comme distribution initiale nous prenons :

$$u = \begin{cases} u_0 = \text{const}, & \text{dans le réservoir} \\ 0, & \text{dans l'aquifère} \end{cases}$$

Les équations (3.1)-(3.2) avec les conditions (3.3)-(3.4) forment un problème fermé permettant trouver la concentration dans le système réservoir-aquifère en fonction de l'espace et du temps.

§ 3.2 Séparation des problèmes couplés et réduction de l'information cherchée

Comme la concentration $u(x, y, t)$ est discontinue du fait de la condition d'Henry (si $\sigma \neq 1$), il est plus simple de faire l'analyse en introduisant deux fonctions : $u^{res}(x, y, t)$ et $u^{aq}(x, y, t)$ définies sur $h < y < \infty, -l/2 < x < l/2$ et sur $0 < y < h, -\infty < x < +\infty$ respectivement, par :

$$u = \begin{cases} u^{res}, & \text{dans le réservoir} \\ u^{aq}, & \text{dans l'aquifère} \end{cases}$$

l'indéfinition de concentration à l'interface se résout comme :

$$u(x, h+0, t) = u^{res}(x, h, t),$$

$$u(x, h-0, t) = u^{aq}(x, h, t),$$

chacune des deux fonctions u^{res} et u^{aq} , séparément, est continue ainsi que ses premières dérivées. La fonction u^{res} satisfait dans son domaine à l'équation de diffusion et u^{aq} satisfait à l'équation de convection-diffusion. A l'interface, elles sont liées par les conditions :

$$\begin{cases} u^{res}(x, h, t) = u^{aq}(x, h, t) \\ D_g u_y^{res}(x, h, t) = D_w u_y^{aq}(x, h, t) \end{cases}$$

Pour deux fonctions u^{res} et u^{aq} nous avons donc deux problèmes couplés au travers des conditions limites. Le nombre de fonctions inconnues et des conditions limites garantit l'existence et unicité de la solution.

La fonction u^{aq} à son tour peut être décomposée en trois composantes (voir fig. 3.3):

$$u^{aq} = \begin{cases} u^{aq+}, & x > l/2 \\ u^{art}, & -l/2 < x < l/2 \\ u^{aq-}, & -\infty < x < -l/2 \end{cases}$$

u^{aq+} est la concentration dans la zone de l'aquifère située après le réservoir, u^{art} est la concentration dans la zone de l'aquifère au-dessous du réservoir (l'articulation entre le réservoir et l'aquifère), u^{aq-} est la concentration dans la zone de l'aquifère située avant le réservoir.

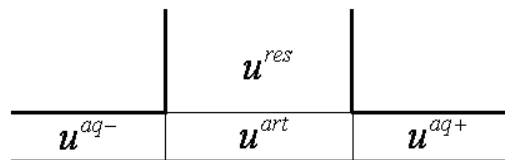


Fig. 3.3 Schéma de séparation des problèmes couplés

Une telle décomposition dans l'aquifère simplifie l'analyse du comportement de la fonction u^{aq} sur les limites latérales de l'articulation $x = \pm l/2$. Les conditions de la continuité pour ces trois fonctions en $x = \pm l/2$ s'écrivent :

$$\begin{cases} u^{art}(l/2, y, t) = u^{aq+}(l/2, y, t) \\ u_x^{art}(l/2, y, t) = u_x^{aq+}(l/2, y, t) \\ u^{art}(-l/2, y, t) = u^{aq-}(-l/2, y, t) \\ u_x^{art}(-l/2, y, t) = u_x^{aq-}(-l/2, y, t) \end{cases}$$

Ainsi, le problème de départ peut être reformulé en termes de 4 problèmes couplés pour les fonctions $u^{res}, u^{art}, u^{aq+}, u^{aq-}$.

L'obtention de la solution exacte de ce problème est extrêmement difficile (voire impossible) techniquement et inutile de point de vue pratique parce que le problème posé n'est qu'une approximation d'un problème plus réaliste. Il est donc raisonnable de le

simplifier en cherchant à réduire la quantité d'information recherchée et en ne s'occupant d'obtenir que les résultats caractéristiques du processus présentant un intérêt essentiel :

- la concentration homogénéisée sur la direction horizontale dans le réservoir :

$$\bar{u}^{res}(y,t) = \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{l/2} u^{res}(x,y,t) dx ,$$

- la concentration homogénéisée dans la direction verticale dans l'aquifère :

$$\tilde{u}^{aq} = \frac{1}{h} \int_0^h u^{aq}(x,y,t) dy .$$

Les différentes parties de la fonction $\tilde{u}^{aq}(x,t)$ s'introduisent respectivement comme :

$$\tilde{u}^{art,aq+,-}(x,t) = \frac{1}{h} \int_0^h u^{art,aq+,-}(x,y,t) dy .$$

Les équations pour ces nouvelles fonctions s'obtiennent par intégration des équations de départ suivant la coordonnée d'homogénéisation, compte tenu des conditions limites imposées. L'équation (3.1) après intégration, compte tenu que:

$$\int_{-l/2}^{l/2} u_{xx}^{res}(x,y,t) dx = u_x^{res}(l/2,y,t) - u_x^{res}(-l/2,y,t) = 0 ,$$

se réduit à une simple équation monodimensionnelle de diffusion :

$$\frac{\partial \bar{u}^{res}}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 \bar{u}^{res}}{\partial y^2} . \quad (3.5)$$

L'équation (3.2) homogénéisée dans les sous-domaines $0 < y < h$, $l/2 < x < +\infty$ et $0 < y < h$, $-\infty < x < -l/2$, compte tenu que :

$$\int_0^h u_{yy}^{aq+,-}(x,y,t) dy = u_y^{aq+,-}(x,h,t) - u_y^{aq+,-}(x,0,t) = 0 ,$$

se réduit à une équation monodimensionnelle de convection-diffusion :

$$\frac{\partial \tilde{u}^{aq+,-}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{u}^{aq+,-}}{\partial x} = D_w \frac{\partial^2 \tilde{u}^{aq+,-}}{\partial x^2} . \quad (3.6)$$

Quant à la concentration dans la zone d'articulation homogénéisée dans la direction verticale, elle satisfait l'équation de convection-diffusion avec une source volumique :

$$\frac{\partial \tilde{u}^{art}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{u}^{art}}{\partial x} = D_w \frac{\partial^2 \tilde{u}^{art}}{\partial x^2} + \frac{D_g}{h} \frac{\partial u^{res}}{\partial y}(x, h, t), \quad (3.7)$$

Le problème non homogénéisé pour l'ensemble des quatre fonctions $u^{res}, u^{art}, u^{aq+}, u^{aq-}$ est non séparable mais fermé mais le problème homogénéisé obtenu a cessé d'être fermé puisque, d'un côté, dans l'équation pour \tilde{u}^{art} entre la fonction non homogénéisée u^{res} qui n'est pas parmi les fonctions inconnues et, de l'autre côté, il est devenu impossible de poser les conditions limites en $y = h$ sans connaître les fonctions : $u^{res}(x, h, t)$ et $u_y^{res}(x, h, t)$. Pour résoudre ce couplage, il faudra donc trouver la concentration non homogénéisée dans le réservoir.

§ 3.3 Approximation de la distribution concentration à l'intérieur et en-dessous du réservoir

Pour la concentration non homogénéisée dans le réservoir $u^{res}(x, y, t)$, nous cherchons une expression approchée. Examinons le problème dans le réservoir en ayant changé de fonction inconnue et en introduisant comme nouvelle fonction inconnue la dérivée horizontale de la concentration :

$$w^{res}(x, y, t) = u_x^{res}(x, y, t),$$

Elle satisfait évidemment à la même équation que la fonction $u^{res}(x, y, t)$ mais au lieu des conditions limites d'imperméabilité (de Neumann), la fonction $w^{res}(x, y, t)$ satisfait aux conditions d'adsorption (de Dirichlet) sur les limites latérales du réservoir.

Remarquons que les valeurs limites de w^{res} (qui sont imposées), peuvent être exprimées sous la forme de séries de Taylor où les dérivées sont calculées au point $x = 0$ (séries de puissances entières de $l/2$) :

$$w^{res}(-l/2, y, t) = w^{res}(0, y, t) - w_x^{res}(0, y, t) \frac{l}{2} + w_{x^2}^{res}(0, y, t) \frac{l^2}{8} - w_{x^3}^{res}(0, y, t) \frac{l^3}{48} + w_{x^4}^{res}(0, y, t) \frac{l^4}{192} + \dots$$

$$w^{res}(l/2, y, t) = w^{res}(0, y, t) + w_x^{res}(0, y, t) \frac{l}{2} + w_{x^2}^{res}(0, y, t) \frac{l^2}{8} + w_{x^3}^{res}(0, y, t) \frac{l^3}{48} + w_{x^4}^{res}(0, y, t) \frac{l^4}{192} + \dots$$

Substituant maintenant :

$$w^{res}(-l/2, y, t) = w^{res}(l/2, y, t) = 0,$$

nous obtenons que :

$$w_{x^2}^{res}(0, y, t) = -\frac{8}{l^2} w^{res}(0, y, t) - w_{x^4}^{res}(0, y, t) \frac{l^2}{24} + \dots (\text{puissances paires}),$$

la valeur de la seconde dérivée horizontale de $w^{res}(x, y, t)$ au centre du réservoir représente la somme de la valeur de la fonction elle-même en ce point multipliée par le facteur $-8/l^2$ et une série infinie des puissances paires de $l/2$ à partir de la puissance 4. Si nous ne gardons que le premier terme dans cette série, nous obtenons :

$$w_{x^2}^{res}(0, y, t) \approx -\frac{8}{l^2} w^{res}(0, y, t). \quad (3.8)$$

Lors d'un processus de diffusion, la distribution tend à gagner le maximum de monotonie et à la limite $t = \infty$ à devenir une constante (si les conditions limites le permettent). On peut alors estimer que les dérivées d'ordres supérieurs sont limitées :

$$\left| w_{x^{2n}}^{res}(0, y, t) \right| < \frac{M}{l^{2n}},$$

l'erreur d'approximation (3.8) est donc une série infinie majorée par :

$$R \leq \sum_{n=2}^{\infty} \frac{l^{2n}}{2^{2n} (2n)!} w_{x^{2n}}^{res}(0, y, t) \leq M \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{2^{2n} (2n)!},$$

cette dernière série se converge très rapidement : ses trois premiers termes sont : $1/384$, $1/46080$, $\approx 9.7 \times 10^{-8}$. Ceci justifie l'approximation (3.8).

Retenons cette approximation pour la seconde dérivée dans l'équation pour $w^{res}(x, y, t)$ en la supposant écrite au point $x = 0$:

$$\left. \frac{\partial w^{res}}{\partial t} \right|_{x=0} = D_g \left(\frac{\partial^2 w^{res}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w^{res}}{\partial y^2} \right) \Big|_{x=0} \approx -\frac{8D_g}{l^2} w^{res} \Big|_{x=0} + D_g \left. \frac{\partial^2 w^{res}}{\partial y^2} \right|_{x=0},$$

introduisons la fonction du temps et de la coordonnée y :

$$\omega^{res}(y, t) = w^{res}(0, y, t).$$

La fonction $\omega^{res}(y, t)$ satisfait alors à l'équation de diffusion avec un terme d'amortissement :

$$\frac{\partial \omega^{res}}{\partial t} = -\lambda \omega^{res} + D_g \frac{\partial^2 \omega^{res}}{\partial y^2},$$

Le paramètre λ est la valeur inverse du temps de relaxation du gradient horizontal de concentration.

Nous disposons, alors de trois valeurs de la fonction $w^{res}(x, y, t)$ dont deux sont connues a priori : $w^{res}(-l/2, y, t) = 0$, $w^{res}(l/2, y, t) = 0$ et enfin $w^{res}(0, y, t) = \omega^{res}(y, t)$ s'obtient au moyen de résolution d'un problème monodimensionnel parabolique. Cela nous permet de construire une interpolation continue pour la fonction $w^{res}(x, y, t)$ basée sur trois points:

$$w^{res}(x, y, t) = \omega(y, t) \Phi(x),$$

où la fonction d'interpolation satisfaisant aux conditions limites est :

$$\Phi(x) = 1 - \frac{4x^2}{l^2}.$$

A partir de l'approximation de la dérivée horizontale, nous pouvons trouver une approximation de la concentration elle-même :

$$u^{res}(x, y, t) \approx \bar{u}^{res}(y, t) + \omega^{res}(y, t) \int_0^x \Phi(\xi) d\xi, \quad (3.9)$$

les limites d'intégration sont choisies pour que le second terme ne contribue pas à la valeur homogénéisée de la concentration.

L'expression pour $u^{res}(x, y, t)$ est un polynôme cubique de la variable x où seuls deux coefficients sont indépendants, lesquels s'expriment linéairement à travers \bar{u}^{res} et ω^{res} . Différentes distributions horizontales possibles de concentration sont montrées sur la fig. 3.4. Le rapport $\omega^{res} l / \bar{u}^{res}$ varie entre 0 et 3 : une valeur plus élevée de ce rapport rendrait la concentration négative.

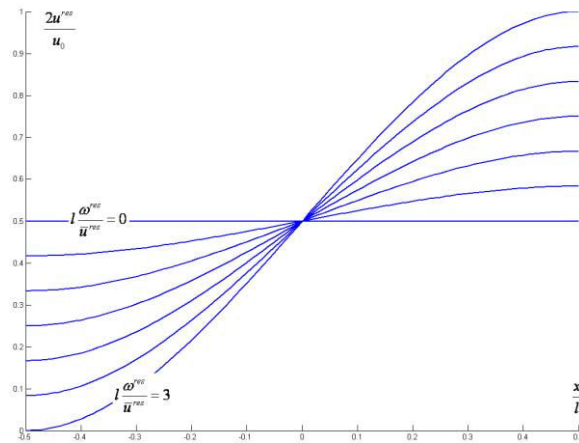


Fig. 3.4 Différents profils horizontaux possibles dans le réservoir en fonction du rapport $l\omega^{res} / \bar{u}^{res}$.

Comme l'équation pour ω^{res} contient le terme d'amortissement, plus la coordonnée y est supérieure à h , plus la distribution horizontale devient homogène : une forte variation horizontale ne peut exister qu'en bas du réservoir proche de l'articulation.

Examinons maintenant la distribution de concentration dans l'articulation entre le réservoir et l'aquifère. Une simplification du problème vient du fait que la géométrie du système est dégénérée : le facteur de forme h/l est proche de zéro. La dégénérescence de la géométrie entraîne une dégénérescence du comportement de la concentration. D'un côté, l'aquifère tend à devenir une ligne sans épaisseur, d'un autre côté, une variation de concentration dans la direction verticale doit avoir lieu, puisque sans elle le flux de diffusion verticale et donc l'échange de matière entre le réservoir et aquifère sont impossibles.

Introduisons la fonction :

$$\delta u^{art}(x, y, t) = u^{art}(x, y, t) - u^{art}(x, h, t),$$

qui représente la déviation de la concentration par rapport à la distribution limite (au sommet de l'aquifère). Il est raisonnable de supposer que la fonction $u^{art}(x, y, t)$, comme la fonction de la coordonnée y , se comporte de façon monotone, ainsi que :

$$u^{art}(x, y, t) \leq u^{art}(x, h, t); u_y^{art}(x, y, t) \leq u_y^{art}(x, h, t).$$

Les valeurs prises par la fonction $\delta u^{art}(x, y, t)$ sont contenues dans l'intervalle :

$$-hu_y^{art}(x, h, t) < \delta u^{art}(x, y, t) \leq 0.$$

Cet intervalle diminue proportionnellement à l'épaisseur h et donc, pour des petites valeurs de h :

$$\delta u^{art}(x, y, t) \ll u^{art}(x, h, t), u^{art}(x, y, t) \approx u^{art}(x, h, t), \quad (3.10)$$

et de même :

$$\tilde{u}^{art}(x, t) \approx u^{art}(x, h, t),$$

une telle distribution de concentration correspond à l'équilibre entre l'aquifère et le réservoir.

Mais, la condition (3.10) n'est pas compatible avec la continuité du flux de diffusion au contact réservoir-aquifère, car la fonction $u^{art}(x, y, t) \approx u^{art}(x, h, t)$ ne pourra satisfaire aux conditions limites non triviales $u_y^{art}(x, h, t) \neq 0$. D'autre part, comme $u^{art}(x, h, t) \equiv \sigma u^{res}(x, h, t)$ (la condition d'Henry) et que $u^{res}(x, h, t)$ selon (3.9), est un polynôme cubique avec des dérivées nulles (par rapport à x) en $x = \pm l/2$, $\tilde{u}^{art}(x, t) \approx u^{art}(x, h, t)$ ne pourra pas non plus satisfaire aux conditions limites non triviales $u_x^{art}(x = \pm l/2, t) \neq 0$.

Ces deux circonstances signifient que la déviation $\delta u^{art}(x, y, t)$, bien qu'elle soit petite en comparaison avec $u^{art}(x, h, t) \approx \tilde{u}^{art}(x, t)$, apporte une contribution dans les dérivées limites de $u^{art}(x, y, t)$ et il n'est donc pas correct d'ignorer sa présence. Dans un certain sens la déviation $\delta u^{art}(x, y, t)$ joue le rôle d'une fonction de couche limite.

Alors, l'approximation (3.10) est incorrecte de point de vue d'existence des flux latéraux de diffusion en $x = \pm l/2$ et doit être corrigée. Remarquons que la fonction $\int_0^x \Phi(\xi) d\xi \equiv 2x/3 + x\Phi(x)/3$ bien que cubique est proche d'être linéaire comme illustré sur la fig. 3.5.

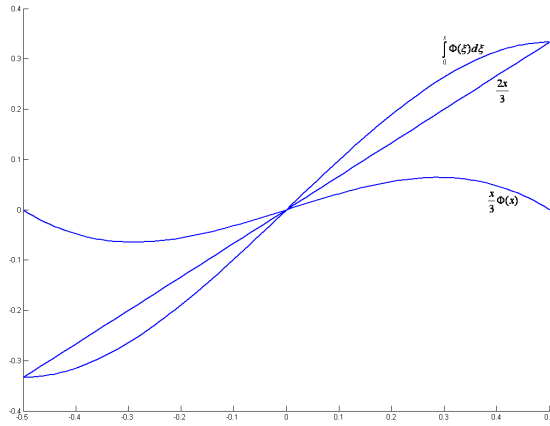


Fig.3.5 Extraction de la partie linéaire de $\int_0^x \Phi(\xi) d\xi$.

Alors, si dans la condition (3.10) combinée avec la condition d'Henry :

$$u^{art}(x, y, t) \approx \sigma u^{res}(x, h, t),$$

nous ignorons le terme $x\Phi(x)/3$ dans $u^{res}(x, h, t)$, ceci d'une part ne perturbera pas beaucoup la condition d'Henry (car $x\Phi(x)/3 \ll 2x/3$) et d'autre part permettra à la fonction $\tilde{u}^{art}(x, t)$ d'avoir des dérivées limites non nulles. Admettons alors :

$$\tilde{u}^{art}(x, t) \approx \sigma \left\{ \bar{u}^{res}(h, t) + \frac{2x}{3} \omega^{res}(h, t) \right\} \quad (3.11).$$

Pour montrer la validité des estimations (3.9), (3.10) utilisons les résultats de modélisation numérique (fig. 3.6) obtenus au chapitre suivant.

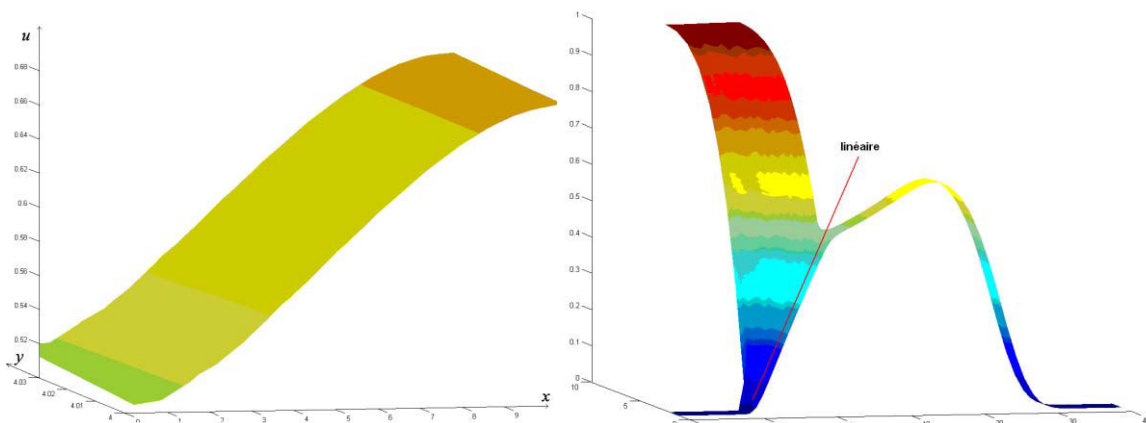


Fig. 3.6 A justification des estimations théoriques (3.9), (3.11) : à gauche le profil de concentration dans un coup vertical du réservoir loin de l'aquifère (à comparer avec fig.3.4) ; à droite la distribution de concentration dans le système où la linéarité du profil dans l'articulation est visible.

§ 3.4 Fermeture du problème

Maintenant que nous avons obtenu des profils horizontaux approximatifs dans le réservoir et l'aquifère, nous pouvons avancer vers la fermeture du problème pour les équations homogénéisées. Intégrons l'équation pour $\tilde{u}^{art}(x, y, t)$

$$\frac{\partial \tilde{u}^{art}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{u}^{art}}{\partial x} = D_w \frac{\partial^2 \tilde{u}^{art}}{\partial x^2} + \frac{D_g}{h} \frac{\partial u^{res}}{\partial y}(x, h, t),$$

sur l'intervalle $-l/2 < x < l/2$ afin d'obtenir le bilan intégral de quantité de matière dans la zone d'articulation :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-l/2}^{l/2} \tilde{u}^{art}(x, t) dx + v \{ \tilde{u}^{art}(l/2, t) - \tilde{u}^{art}(-l/2, t) \} = \\ = D_w \{ \tilde{u}_x^{art}(l/2, t) - \tilde{u}_x^{art}(-l/2, t) \} + \frac{D_g l}{h} \bar{u}_y^{res}(h, t) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dans les termes de la partie gauche de la relation (3.12), nous pouvons imposer à la concentration dans la zone d'articulation son expression (3.11), alors :

$$\frac{1}{l} \int_{-l/2}^{l/2} \tilde{u}^{art}(x, t) dx \approx \sigma \bar{u}^{res}(h, t),$$

$$\tilde{u}^{art}(l/2, t) - \tilde{u}^{art}(-l/2, t) \approx \frac{2\sigma}{3} l \omega^{res}(h, t).$$

Bien que les dérivées limites $\tilde{u}_x^{art}(\pm l/2, t)$ puissent être calculées à partir de l'expression (3.11), traitons $\tilde{u}_x^{art}(\pm l/2, t)$ néanmoins comme des fonctions inconnues en admettant que \tilde{u}^{aq} puisse subir une discontinuité faible aux points $x = \pm l/2$ (voir fig. 3.6). Dans ce cas, dans (3.12) il faut substituer $\tilde{u}_x^{aq}(\pm l/2 \pm 0, t) = \tilde{u}_x^{aq+,-}(\pm l/2, t)$. Alors, les termes de la partie droite de (3.12) restent inconnus.

Comme le problème du second ordre dans le réservoir ne peut pas satisfaire deux conditions limites quelconques, les fonctions de temps $\bar{u}^{res}(h,t)$ et $\bar{u}_y^{res}(h,t)$ ne sont pas indépendantes, et, évidemment, le rapport qui les lie est linéaire. Le rapport entre $\bar{u}^{res}(h,t)$ et $\bar{u}_y^{res}(h,t)$ peut être établi explicitement par les méthodes de la théorie des systèmes linéaires. Un système linéaire (le terme également employé est « filtre linéaire ») est un système qui à chaque signal d'entrée (une fonction du temps) associe une réponse (aussi une fonction du temps) : du point de vue mathématique, cette transformation s'exprime à travers une convolution dont le noyau est la réponse à un signal de Dirac $\delta(t)$:

$$\varphi_{rep}(t) = \int_0^t \mathcal{K}(t-\tau)\varphi_{sign}(\tau)d\tau = \mathcal{K} * \varphi_{sign}.$$

La diffusion dans le réservoir fonctionne comme un système linéaire avec $\bar{u}^{res}(h,t)$ comme signal d'entrée et $\bar{u}_y^{res}(h,t)$ comme signal de réponse. Supposons que $\bar{u}^{res}(h,t)$ est connue alors $\bar{u}^{res}(y,t)$ peut être obtenue sous la forme d'une convolution de la condition limite de Dirichlet $\bar{u}^{res}(h,t)$ avec la dérivée spatiale de la solution fondamentale (dont l'expression est simple suite à la géométrie triviale du domaine). Ayant la fonction $\bar{u}^{res}(y,t)$ sous cette forme-là, on peut directement calculer la dérivée limite $\bar{u}_y^{res}(h,t)$. Dans l'annexe A, nous avons obtenu explicitement la relation entre $\bar{u}_y^{res}(h,t)$ et $\bar{u}^{res}(h,t)$ sous la forme :

$$\bar{u}_y^{res}(h,t) = f(t) * \dot{\bar{u}}^{res}(h,t) + u_0 f(t), \quad (3.13)$$

où :

$$\dot{\bar{u}}^{res}(h,t) = \frac{d\bar{u}^{res}(h,t)}{dt},$$

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi D_g t}} \text{ est dit noyau d'Abel,}$$

u_0 est la concentration initiale dans le réservoir. Comme on peut le voir, la réponse n'est pas égale à zéro, même si le signal d'entrée est zéro, Cela signifie que le flux à travers la limite existe même si l'on y maintient une concentration nulle.

Il est plus simple d'analyser ce problème dans l'espace des transformées de Laplace où la transformée d'une convolution de deux fonctions est le produit algébrique des leurs transformées :

$$\bar{u}_y^{res}(h, s) = D_g^{-1/2} \left[-\sqrt{s} \bar{u}^{res}(h, s) + \frac{u_0}{\sqrt{s}} \right]. \quad (3.14)$$

En utilisant la même approche, c'est-à-dire en considérant la sortie droite de l'aquifère comme un système linéaire dont $\tilde{u}^{art}(l/2, s)$ et $\tilde{u}_x^{art}(l/2, s)$ sont le signal d'entrée et la réponse, nous trouvons que :

$$\tilde{u}_x^{art}(l/2, s) = -\frac{f^+(s, \beta)}{\sqrt{D_w}} \tilde{u}^{art}(l/2, s), \quad (3.15)$$

où le noyau de transformation est (voir annexe A pour le détail des calculs) :

$$f^+(s, \beta) = \sqrt{s + \beta} - \sqrt{\beta},$$

$$\beta = v^2 / 4D_w,$$

si $v=0$ le noyau de la transformation est identique à celui du cas précédent. De manière analogue, pour les fonctions: $\tilde{u}^{art}(-l/2, t)$ et $\tilde{u}_x^{art}(-l/2, t)$, on peut montrer que :

$$\tilde{u}_x^{art}(-l/2, s) = -\frac{f^-(s, \beta)}{\sqrt{D_w}} \tilde{u}^{art}(-l/2, s), \quad (3.16)$$

où

$$f^-(s, \beta) = -\sqrt{s + \beta} - \sqrt{\beta}.$$

Démontrons l'applicabilité des relations (3.15)-(3.16) au cas extrême d'une forte convection, telle que $D_w \ll vl$. $D_w \rightarrow 0$ étant équivalent à $\beta \rightarrow \infty$, nous pouvons alors remplacer la fonction $f^+(s, \beta)$ par sa linéarisation par rapport au paramètre s :

$$f^+(s, \beta) \approx f^+(0, \beta) + \frac{\partial f^+}{\partial s}(0, \beta)s = \frac{s}{2\sqrt{\beta}},$$

alors :

$$\frac{\tilde{u}_x^{art}(l/2, s)}{\tilde{u}^{art}(l/2, s)} = -\frac{f^+(s, \beta)}{\sqrt{D_w}} \approx -\frac{s}{2\sqrt{D_w\beta}} = -\frac{s}{v},$$

C'est exactement ce qui devrait avoir lieu dans le cas où $\tilde{u}^{aq+}(x, t)$ satisfaisait à l'équation de transport sans diffusion :

$$\frac{\partial \tilde{u}^{aq+}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{u}^{aq+}}{\partial x} = 0. \quad (3.17)$$

Là, il faut remarquer que la linéarisation de l'expression pour $f^+(s, \beta)$ n'est pas absolument juste, car le paramètre s prend ses valeurs dans l'intervalle $(0, +\infty)$ et donc prend des valeurs telles que $s \gg \beta$. Mais, comme

$$u(t = 0 + 0) = \lim_{s \rightarrow \infty} su(s),$$

et que la concentration dans le domaine temporel est telle que

$$u^{art}(t = 0, x, y) = 0,$$

(suite à la condition initiale) sa transformée de Laplace vérifie :

$$u^{art}(s = \infty, x, y) = 0.$$

Le domaine des valeurs de s où la linéarisation de $f^+(s, \beta)$ n'est pas justifiée coïncide avec le domaine où $\tilde{u}^{art}(l/2, s) \approx 0$. Si l'affirmation $f^+(s, \beta) \approx s/2\sqrt{\beta}$ n'est pas exacte, l'affirmation:

$$f^+(s, \beta)\tilde{u}^{art}(l/2, s) \approx s/2\sqrt{\beta}\tilde{u}^{art}(l/2, s)$$

est correcte.

Quant à la limite opposée $x = -l/2$:

$$f^-(s, \beta) \approx f^-(0, \beta) = -2\sqrt{\beta}.$$

Le terme suivant, proportionnel à s , est dominé par le premier et peut être ignoré. Ainsi :

$$\frac{\tilde{u}_x^{art}(-l/2, s)}{\tilde{u}^{art}(-l/2, s)} = \frac{v}{D_w}.$$

Cela signifie que le flux total passant à travers $x = -l/2$, somme des flux de diffusion et de convection, est égal à zéro :

$$q^-(s) = v\tilde{u}^{art}(-l/2, s) - D_w \tilde{u}_x^{art}(-l/2, s) = 0.$$

Le flux de convection équilibre le flux de diffusion, ce qui veut dire que la matière ne pénètre pas à gauche de la limite $x = -l/2$. Comme initialement la concentration à gauche de $x = -l/2$ est égale à zéro, elle reste égale à zéro tout le temps. La fonction $\tilde{u}^{aq}(x, t)$ subit une discontinuité du premier genre au point $x = -l/2$ puisque d'un côté :

$$\frac{1}{\tilde{u}^{aq}} \frac{\partial \tilde{u}^{aq}}{\partial x} \Big|_{x=-l/2+0} = \frac{v}{D_w} \rightarrow \infty,$$

et de l'autre côté :

$$\tilde{u}^{aq}(-l/2+0, t) - \tilde{u}^{aq}(-l/2-0, t) = \tilde{u}^{art}(l/2, t) - \tilde{u}^{aq-}(l/2, t) = \tilde{u}^{art}(l/2, t) < \infty.$$

Autrement dit, le comportement de la fonction $\tilde{u}^{aq}(x, t)$ ressemble à celui de la fonction généralisée de Heaviside : un tel comportement est normal pour une fonction satisfaisant à une équation hyperbolique.

Nous avons toutes les relations nécessaires pour réduire le bilan intégral de matière (3.12) à un rapport entre les fonctions $\bar{u}^{res}(h, s)$ et $\omega^{res}(h, s)$. En utilisant les relations trouvées entre les valeurs et les dérivées limites, nous obtenons que :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_x^{art}(l/2, s) - \tilde{u}_x^{art}(-l/2, s) &= -\sigma D_w^{-1/2} \left\{ \bar{u}^{res}(h, s)(f^-(s, \beta) - f^+(s, \beta)) + \frac{l}{3} \omega^{res}(h, s)(f^-(s, \beta) - f^+(s, \beta)) \right\} = \\ &= -\sigma D_w^{-1/2} \left\{ 2\sqrt{s + \beta} \bar{u}^{res}(h, s) - \frac{2l}{3} \sqrt{\beta} \omega^{res}(h, s) \right\}. \end{aligned}$$

Compte tenu du fait que la combinaison des paramètres $2\sqrt{D_w \beta}$ est égale à la vitesse d'écoulement v , la différence entre les termes $v \{ \tilde{u}^{art}(l/2, t) - \tilde{u}^{art}(-l/2, t) \}$ et $D_w \{ \tilde{u}_x^{art}(l/2, s) - \tilde{u}_x^{art}(-l/2, s) \}$ vaut :

$$v \{ \tilde{u}^{art}(l/2, t) - \tilde{u}^{art}(-l/2, t) \} - D_w \{ \tilde{u}_x^{art}(l/2, s) - \tilde{u}_x^{art}(-l/2, s) \} = \sigma \left\{ 2D_w^{1/2} \sqrt{s + \beta} \bar{u}^{res}(h, s) + \frac{vl}{3} \omega^{res} \right\}$$

Finalement, le bilan de matière se réduit à la relation suivante :

$$\left\{ \sigma \left[s + 2 \frac{D_w^{1/2}}{l} \sqrt{s + \beta} \right] + \frac{D_g^{1/2}}{h} \sqrt{s} \right\} \bar{u}^{res}(h, s) + \sigma \frac{v}{3} \omega^{res}(h, s) = \frac{D_g^{1/2}}{h} \frac{u_0}{\sqrt{s}}. \quad (3.18)$$

Il reste encore à obtenir une relation entre $\bar{u}^{res}(h, s)$ et $\omega^{res}(h, s)$. La méthode que nous utilisons pour trouver cette liaison consiste en une collocation de l'équation

$$\frac{\partial \tilde{u}^{art}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{u}^{art}}{\partial x} = D_w \frac{\partial^2 \tilde{u}^{art}}{\partial x^2} + \frac{D_g}{h} \frac{\partial u^{res}}{\partial y}(x, h, t),$$

au point $x = 0$. Si dans l'équation précédente nous utilisons pour $\tilde{u}^{art}(x, t)$ l'expression (3.11) nous obtenons alors :

$$\left\{ s + \frac{D_g^{1/2}}{\sigma h} \sqrt{s} \right\} \bar{u}^{res}(h, s) + \frac{2v}{3} \omega^{res}(h, s) = \frac{D_g^{1/2}}{\sigma h} \frac{u_0}{\sqrt{s}}, \quad (3.19)$$

La relation obtenue de par la structure de ses termes est très similaire à celle obtenue pour le bilan de matière (3.18). A l'aide de ces deux relations, il est élémentaire de montrer que :

$$\bar{u}^{res}(h, s) = \frac{\sqrt{\mu u_0}}{\sqrt{s} \left\{ s + 2\sqrt{\eta(s + \beta)} + \sqrt{\mu s} \right\}}, \quad (3.20)$$

où $\eta = 4D_w / l^2$, $\mu = D_g / (h\sigma)^2$ sont deux paramètres de dimension de temps inverse. Pour ω^{res} , nous avons :

$$\omega^{res}(h, s) = \frac{3}{l} \frac{\sqrt{s + \beta}}{\sqrt{\beta}} \bar{u}^{res}(h, s). \quad (3.21)$$

Quant aux valeurs limites de la fonction \tilde{u}^{art} :

$$\tilde{u}^{art}(\pm l / 2, s) = \sigma \left\{ 1 \pm \frac{\sqrt{s + \beta}}{\sqrt{\beta}} \right\} \bar{u}^{res}(h, s). \quad (3.22)$$

§ 3.5 Etude qualitative de la solution obtenue

Étudions du point de vue qualitatif la fonction $\bar{u}^{res}(h,s)$ trouvée. L'expression (3.20) contient trois paramètres indépendants ayant la dimension du temps : $\tau_1 = \beta^{-1}$, $\tau_2 = \eta^{-1}$, $\tau_3 = \mu^{-1}$: nous avons donc trois échelles de temps indépendantes. La présence de trois temps caractéristiques est la conséquence de la complexité du processus de balayage qui se déroule en deux étapes (de manière similaire à une réaction chimique avec un produit intermédiaire). Pour que la matière puisse fuir à $x = +\infty$, il faut d'abord qu'elle passe du haut du réservoir à l'articulation par diffusion, puis une fois la matière dans l'articulation, elle s'en échappe par convection et diffusion longitudinale. Les temps de passage du réservoir à l'articulation et de fuite ne sont pas liés l'un avec l'autre. Le rapport de deux mécanismes de fuite de l'aquifère (convection et diffusion) permet de définir le nombre de Péclet :

$$Pe = \frac{vl}{D_w} = \sqrt{\frac{\tau_2}{\tau_1}}.$$

La valeur $\tau_3 = \mu^{-1}$, que nous allons appeler le temps de régénération, est le temps nécessaire à rétablir l'équilibre entre le réservoir et l'aquifère à condition que ses limites latérales soient fermées. La combinaison des paramètres $\tau_4 = l/v = \sqrt{\tau_1\tau_2}$, que nous allons appeler temps d'érosion, est le temps caractéristique nécessaire à la convection à exporter toute la matière de l'articulation à travers les limites latérales, à condition que la régénération soit arrêtée. La valeur $\tau_2 = \eta^{-1}$, que nous allons appeler temps de dissipation, est le temps nécessaire à diffusion latérale pour dissiper la matière de l'articulation jusqu'à l'infini, aux conditions que la régénération soit arrêtée et que l'espace $|x| > l/2$ ne soit pas saturé de matière.

Il est possible de définir quatre hiérarchies de temps caractéristiques et, par voie de conséquence, quatre modes du comportement du système (l'analyse qualitative est basée sur l'étude asymptotique de la solution générale) :

- $v/l \gg D_g/h^2 \gg D_w/l^2$: c'est le cas d'une érosion extrêmement forte, pas seulement en comparaison avec la dissipation dans l'aquifère, mais aussi en comparaison avec la régénération de matière dans l'articulation. Dans ce cas la concentration dans l'aquifère est toujours très petite ($\sim D_g l / v h^2$) comparée à celle caractéristique du réservoir : la matière n'y reste pas longtemps avant de s'échapper.

La matière quitte le réservoir comme si la concentration sur la limite $y = h$ était maintenue à zéro.

- $D_g / h^2 \gg v / l \gg D_w / l^2$: c'est le cas où la régénération réussit à compenser l'érosion et à maintenir dans l'articulation une concentration comparable à u_0 . D'un côté, le flux de convection est plus faible que dans le cas précédent, puisque la vitesse d'écoulement est bien inférieure, mais, d'un autre côté, comme le niveau de concentration dans l'articulation est élevé, la convection force à se mouvoir de plus grandes quantités de matière. Les vitesses de fuites dans les deux cas examinés peuvent être comparables, mais le second mode de fuite est néanmoins moins intense car la fuite maximale correspond au cas où $\bar{u}^{res}(h, s) = 0$.
- $D_g / h^2 \gg v / l \sim D_w / l^2$ ou $D_g / h^2 \gg D_w / l^2 \gg v / l$: c'est le cas d'une convection modérée ou faible. Initialement le réservoir et l'aquifère se trouvent dans des états très déséquilibrés (un gradient infini) et donc la dissipation de matière (la diffusion) est dominante aux premiers temps. Puis, après la fin du processus transitoire d'équilibration (dans un certain sens, une couche limite temporelle) avec la saturation de l'aquifère, la diffusion faiblit (comme $t^{-1/2}$) et le rôle principal passe à la convection. Les cas $v / l \sim D_w / l^2$ et $D_w / l^2 \gg v / l$ sont équivalents du point de vue de leurs comportements asymptotiques aux grandes valeurs du temps.
- $D_g / h^2 \gg D_w / l^2$, $v \equiv 0$: ici, la convection est absente, le processus est symétrique par rapport à l'inversion $x \rightarrow -x$. Ce cas n'est pas similaire au cas où la vitesse est petite mais finie car une faible convection redistribue la concentration d'une toute autre façon qu'avec une vitesse exactement égale à zéro. Dans ce cas, la fuite est la moins intense de tous les cas examinés. La fuite se passe de telle manière que le réservoir reste à l'équilibre ; la concentration dans le réservoir reste presque uniforme en cours du processus et par suite, la distribution de concentration dans les sorties de l'aquifère est la même que dans le cas où la concentration sur les limites latérales de l'articulation serait maintenue à une valeur $\tilde{u}^{aq+, -}(l/2, t) = \sigma u_0$. Le flux de diffusion baisse d'autant plus vite avec le temps que l'aquifère est saturé.

Examinons en détail des différents cas extrêmes. Si $Pe \sim 1$, les deux mécanismes de fuite doivent être pris simultanément en compte. Dénotons l'ancien paramètre s par « s' », et

utilisons la notation « s » pour le paramètre adimensionnel $s = s' / \eta$, respectivement si t' est le temps réel, le temps adimensionnel s'obtient comme $t = \eta t'$. Compte tenu la règle selon laquelle la substitution :

$$f(t') = f(at)$$

est équivalente à la substitution :

$$f(s') = \frac{1}{a} f\left(\frac{s}{a}\right)$$

dans l'espace des transformées de Laplace (dans notre cas $a = \eta^{-1}$), nous obtenons :

$$\bar{u}^{res}(h, s) = \frac{u_0}{\sqrt{s} \left\{ \varepsilon \left[s + 2\sqrt{s + \text{Pe}^2} \right] + \sqrt{s} \right\}},$$

où nous avons encore introduit un paramètre constant adimensionnel :

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\eta}{\mu}} = \frac{\sigma h}{2l} \sqrt{\frac{D_w}{D_g}},$$

qui est petit et proportionnel à un facteur de forme.

Il est facile de prouver que $\varepsilon = 0$ correspond à une dégénérescence extrême de la géométrie du système qui fait disparaître l'aquifère :

$$\bar{u}^{res}(h, s) = \frac{u_0}{s},$$

ce qui signifie que la fonction $\bar{u}^{res}(h, t)$ est une constante égale à u_0 . Dans ce cas, il n'y a pas de processus de fuite.

§ 3.6 Le cas de convection modérée (le cas général)

Introduisons les coordonnées normalisées : $\zeta = 2\sqrt{\chi}(y-h)/l$, $\xi = 2x/l$, $\chi = \sqrt{D_g / D_w}$,

alors :

$$\bar{u}^{res}(0, s) = \frac{u_0}{\sqrt{s} \left\{ \varepsilon \left[s + 2\sqrt{s + \text{Pe}^2} \right] + \sqrt{s} \right\}},$$

$$\omega^{res}(0, s) = \frac{3}{l} \frac{\sqrt{s + \text{Pe}^2}}{\text{Pe}} \bar{u}^{res}(0, s),$$

$$\tilde{u}^{art}(\pm 1, s) = \sigma \left\{ 1 \pm \frac{\sqrt{s + \text{Pe}^2}}{\text{Pe}} \right\} \bar{u}^{res}(0, s),$$

$$\bar{u}^{res}(\zeta, s) = \bar{u}^{res}(0, s) \exp\{-\zeta \sqrt{s}\},$$

$$\omega^{res}(\zeta, s) = \omega^{res}(0, s) \exp\{-\zeta \sqrt{s + \lambda}\},$$

λ est la constante d'amortissement qui figure dans l'équation pour ω^{res} ,

$$u^{aq+}(\xi, s) = u^{aq+}(1, s) \exp\{-(\xi - 1)(\sqrt{s + \text{Pe}^2} - \text{Pe})\},$$

$$u^{aq-}(\xi, s) = u^{aq-}(-1, s) \exp\{(\xi + 1)(\sqrt{s + \text{Pe}^2} + \text{Pe})\}.$$

Bien que ces expressions soient assez simples, leurs retours de Laplace ne peuvent pas être trouvés analytiquement. Mais nous pouvons obtenir leurs asymptotiques pour $t \rightarrow \infty$ (qui dans l'espace de Laplace est équivalent à $s \rightarrow 0$). Nous avons :

$$\bar{u}^{res}(0, s \rightarrow 0) \approx \frac{u_0}{\varepsilon \text{Pe} \sqrt{s}} \Rightarrow \bar{u}^{res}(0, t \rightarrow \infty) \approx \frac{u_0}{\varepsilon \text{Pe} \sqrt{\pi t}},$$

$$\bar{u}^{res}(\zeta, s \rightarrow 0) \approx \frac{u_0}{\varepsilon \text{Pe} \sqrt{s}} \exp\{-\zeta \sqrt{s}\} \Rightarrow \bar{u}^{res}(\zeta, t \rightarrow \infty) = \frac{u_0}{\varepsilon \text{Pe} \sqrt{\pi t}} \exp\left\{-\frac{\zeta^2}{4t}\right\},$$

$$\omega^{res}(0, t \rightarrow \infty) \approx \frac{3}{l} \bar{u}^{res}(0, t \rightarrow \infty),$$

$$\omega^{res}(\zeta, t \rightarrow \infty) \approx \omega^{res}(0, t \rightarrow \infty) \exp\{-\sqrt{\lambda} \zeta\},$$

$$\tilde{u}^{aq+}(\xi, t \rightarrow \infty) \approx \tilde{u}^{aq+}(1, t \rightarrow \infty) \approx 2\sigma \bar{u}^{res}(0, t \rightarrow \infty),$$

(uniformité dans la sortie droite de l'aquifère)

$$\tilde{u}^{aq-}(\xi, t \rightarrow \infty) \approx \tilde{u}^{aq-}(-1, t \rightarrow \infty) \approx 0.$$

Dans la sortie gauche de l'aquifère, la concentration disparaît avec le temps. Ceci s'explique parce que le flux de diffusion (dirigé vers $-\infty$) au début comparable voire supérieur à celui de convection diminue au cours du temps alors que le flux de convection qui faiblit plus lentement épuise la zone $-\infty < x < -l/2$ (le flux total à travers $x = -l/2$ change son signe au bout d'un moment).

§ 3.7 Le cas de convection forte

Il y a deux approches à obtention de la solution du problème, dans le cas où $Pe \rightarrow \infty$. Nous pouvons l'obtenir comme limite asymptotique (par rapport au nombre de Péclet) de la solution générale ou en supposant que la concentration dans l'aquifère satisfait à l'équation réduite :

$$\frac{\partial u^{aq}}{\partial t} + v \frac{\partial u^{aq}}{\partial x} = D_w \frac{\partial^2 u^{aq}}{\partial y^2},$$

où la diffusion longitudinale est négligée. Quant à la diffusion verticale, nous n'avons pas le droit de la négliger car elle représente l'unique mécanisme d'échange de matière entre le réservoir et l'aquifère. Les résultats obtenus par ces deux approches sont identiques.

Dans l'expression pour $u^{aq+}(\xi, s)$, la dépendance de la coordonnée n'entre que dans le facteur exponentiel, où la coordonnée est multipliée par l'expression : $\sqrt{s + Pe^2} - Pe$. Nous avons prouvé que le passage de la convection accompagnée de diffusion à la convection pure consiste en substitution :

$$\sqrt{s + Pe^2} - Pe \approx \frac{s}{2Pe},$$

dans ce cas le facteur exponentiel dans l'expression pour $u^{aq+}(\xi, s)$ se réduit à :

$$\exp\{-s(\xi - 1)/2Pe\}.$$

La multiplication d'une transformée de Laplace par un facteur e^{as} correspond à une translation du temps : $t \rightarrow t + a$. Comme $u^{aq+}(\xi, s)$ ne se distingue de $u^{aq+}(1, s)$ que de ce facteur :

$$u^{aq+}(\xi, t) = u^{aq+}(1, t + (\xi - 1) / 2Pe),$$

La fonction d'un tel argument est la solution d'un problème hyperbolique. Passons de nouveau aux coordonnées et temps dimensionnels :

$$\exp\{-s(\xi - 1) / 2Pe\} \equiv \exp\{-s'(x - l/2) / v\},$$

$$u^{aq+}(x, t') = u^{aq+}(l/2, t' + (x - l/2) / v),$$

ce qui signifie que $u^{aq+}(x, t')$ satisfait à l'équation de transport convectif :

$$\frac{\partial u^{aq+}}{\partial t'} + v \frac{\partial u^{aq+}}{\partial x} = 0.$$

Partout, sauf pour le facteur exponentiel, on peut poser $\sqrt{s + Pe^2} \approx Pe$, alors :

$$\bar{u}^{res}(h, s') \approx \frac{\sqrt{\mu} u_0}{\sqrt{s'} \{s' + 2v/l + \sqrt{\mu s'}\}}$$

$$u^{aq+}(l/2, s') = 2\sigma \bar{u}^{res}(x, s'),$$

$$u^{aq-}(l/2, s') = 0 \text{ (à comparer avec la fig. 3.6).}$$

Il n'est pas difficile de vérifier que si nous prenons le bilan intégral réduit dans l'articulation :

$$\frac{d}{dt'} \int_{-l/2}^{l/2} \tilde{u}^{art}(x, t') dx + v \{ \tilde{u}^{art}(l/2, t') - \tilde{u}^{art}(-l/2, t') \} = \frac{D_g l}{h} \bar{u}_y^{res}(h, t'),$$

(comparé avec l'ancien bilan, il manque le terme de diffusion longitudinale) et imposons :

$$\tilde{u}^{art}(-l/2, t') = 0 \text{ (suite à une forte érosion de la zone } x < l/2),$$

$$\tilde{u}^{art}(l/2, t') = (2/l) \int_{-l/2}^{l/2} \tilde{u}^{art}(x, t') dx' \text{ (suite à linéarité de } \tilde{u}^{art}(x, t') \text{ entre } -l/2 \text{ et } l/2),$$

nous serions arrivés au même résultat pour $\bar{u}^{res}(h, s')$.

Dans l'annexe B, nous avons trouvé que le retour de Laplace pour $\bar{u}^{res}(h, s')$ est :

$$\frac{\bar{u}^{res}(h, t')}{u_0} = \frac{u^{aq+}(l/2, t')}{2\sigma u_0} = e^{a_2^2 t'} \operatorname{erfc}(a_2 \sqrt{t'}) - e^{a_1^2 t'} \operatorname{erfc}(a_1 \sqrt{t'}),$$

où

$$a_{1,2} = -\sqrt{\mu}/2 \pm \sqrt{\mu/4 - \nu/l}.$$

Introduisons le paramètre $\varepsilon_1 = \mu l / \nu$. Selon la valeur de ε_1 , les racines $a_{1,2}$ peuvent être réelles ou complexes conjuguées, mais la solution est toujours réelle et positive (la preuve est dans l'annexe B). La grandeur du paramètre ε_1 définit de quel cas s'agit-il : régénération empêchée par l'érosion ou quasi-équilibre.

Dans le cas où $\varepsilon_1 \ll 1$, à la précision $O(\varepsilon_1^2)$:

$$a_{1,2} \approx \pm i\sqrt{\nu/l}, \quad a_1^2 \approx a_2^2 \approx -\nu/l,$$

$$\frac{\bar{u}^{res}(h, t')}{u_0} = \frac{2\varepsilon_1}{\sqrt{\pi}} e^{-\nu t'/l} \int_0^{\sqrt{\nu t'/l}} e^{-z^2} dz,$$

$$\tilde{u}^{aq+}(x, t') = \sigma \bar{u}^{res}(h, t' - x/\nu).$$

La fonction $\varphi_1(\tau) = (2/\sqrt{\pi})e^{-\tau} \int_0^{\sqrt{\tau}} e^{-z^2} dz$ qui définit la forme de la solution est représentée sur la fig.3.7.

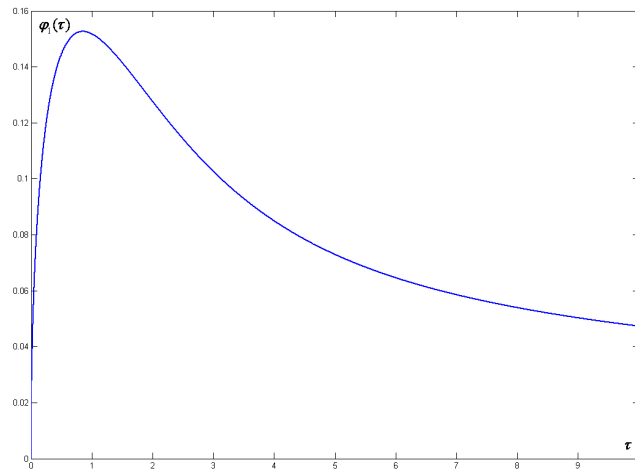


Fig. 3.7 La concentration sur la limite $y = h$ en fonction de temps

Les valeurs de la fonction $\varphi_1(\tau)$ ne dépassent pas 0.16. De plus, la concentration dans l'aquifère est proportionnelle à ε_1 qui est petit dans le cas examiné. Cela signifie que la concentration dans l'aquifère est très faible et l'érosion domine donc la régénération. Quant à la concentration dans le réservoir, elle se conduit presque comme si la concentration à son extrémité basse était maintenue zéro :

$$u^{res}(h, t') = 0.$$

La solution est donc classique :

$$u^{res}(y, t') = u_0 \operatorname{erf} \left\{ \frac{(y-h)^2}{4D_g t'} \right\}.$$

Examinons le cas extrême opposé où $\varepsilon_1 \gg 1$, dans ce cas, à la précision $O(\varepsilon_1^{-2})$, nous avons :

$$\sqrt{\mu/4 - v/l} \approx \sqrt{\mu}/2 + 2v/(\sqrt{\mu}l),$$

et donc :

$$a_1 \approx \sqrt{\mu}, \quad a_2 \approx \frac{2v}{\sqrt{\mu}l}, \quad (\text{tous les deux réels})$$

alors :

$$\frac{\bar{u}^{res}(h, t')}{u_0} = \frac{u^{aq+}(l/2, t')}{2\sigma u_0} = e^{a_2^2 t'} \operatorname{erfc}(a_2 \sqrt{t'}) - e^{\mu t'} \operatorname{erfc}(\sqrt{\mu t'}).$$

Les allures des fonctions pour différentes valeurs de ε_1 sont données sur la fig. 3.8

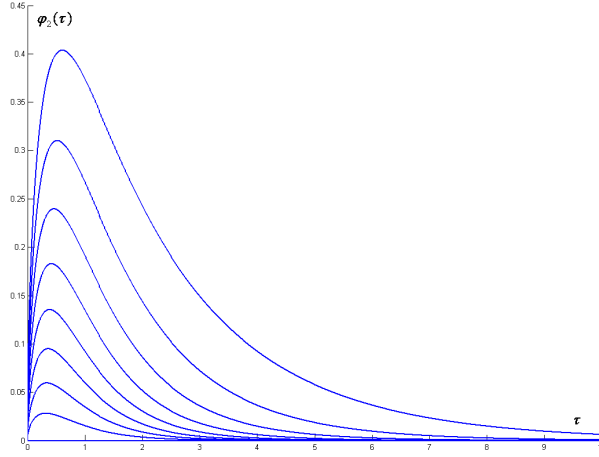


Fig. 3.8 Famille de fonctions $\varphi_2(\tau; \varepsilon_1) = e^{-\varepsilon_1^2 \tau} \operatorname{erfc}(\varepsilon_1 \sqrt{\tau}) - e^{-\tau} \operatorname{erfc} \sqrt{\tau}$, $\varepsilon_1^2 = 0.1, 0.2, \dots 0.9$ (les courbes croissent avec ε_1).

Quant à la concentration dans le réservoir, elle est donnée par le retour de Laplace de l'expression :

$$\bar{u}^{res}(y, s') \approx \frac{\sqrt{\mu} u_0}{\sqrt{s'}(\sqrt{s'} - \sqrt{\mu})(\sqrt{s'} - a_2)} \exp\left\{-\frac{y-h}{\sqrt{D_g}} s'\right\},$$

qui est (voir annexe B) :

$$\begin{aligned} \frac{\bar{u}^{res}(y, t')}{u_0} &= \exp\left\{a_2 \frac{y-h}{\sqrt{D_g}} + a_2^2 t'\right\} \operatorname{erfc}\left\{a_2 \sqrt{t'} + \frac{y-h}{2\sqrt{D_g t'}}\right\} - \exp\left\{\mu \frac{y-h}{\sqrt{D_g}} + \mu^2 t'\right\} \operatorname{erfc}\left\{\mu \sqrt{t'} + \frac{y-h}{2\sqrt{D_g t'}}\right\} \approx \\ &\approx \exp\left\{a_2 \frac{y-h}{\sqrt{D_g}}\right\} \operatorname{erfc}\left\{\frac{y-h}{2\sqrt{D_g t'}}\right\} - \exp\left\{\mu \frac{y-h}{\sqrt{D_g}} + \mu^2 t'\right\} \operatorname{erfc}\left\{\mu \sqrt{t'} + \frac{y-h}{2\sqrt{D_g t'}}\right\} \end{aligned}$$

§ 3.8 Le cas d'absence de convection

Dans le cas où la convection est absente : $Pe = 0$ et :

$$\bar{u}^{res}(h, s) = \frac{u_0}{s\{1 + \varepsilon(\sqrt{s} + 1)\}}, \quad \omega^{res} \equiv 0 \text{ (par symétrie).}$$

Naturellement, une variation horizontale de concentration dans le réservoir existe mais, à la précision avec laquelle ω^{res} a été obtenue, elle s'annule. Pour la concentration limite dans le réservoir, nous obtenons l'expression :

$$\bar{u}^{res}(h, t) = \frac{u_0}{\varepsilon + 1} \left\{ 1 - \exp\left(\frac{(\varepsilon + 1)^2 t}{\varepsilon^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(\varepsilon + 1)\sqrt{t}}{\varepsilon}\right) \right\},$$

comme $\varepsilon \ll 1$ nous pouvons écrire $(\varepsilon + 1) / \varepsilon \approx 1 / \varepsilon$:

$$\bar{u}^{res}(h, t) \approx u_0 \left\{ 1 - \exp(t / \varepsilon^2) \operatorname{erfc}(\sqrt{t} / \varepsilon) \right\},$$

mais, par définitions du temps adimensionnel et du paramètre ε :

$$\frac{t}{\varepsilon^2} \equiv \mu t'.$$

La dépendance des paramètres de l'aquifère disparaît. Une telle approche ne décrit que le processus transitoire de saturation de la zone $-l/2 < x < l/2$, $0 < y < h$ sans prendre en compte l'effet de diffusion à travers les limites latérales. De plus :

$$\bar{u}^{res}(h, \infty) = \bar{u}^{res}(h, 0) = u_0,$$

ce qui est logique dans cette approche. Mais, comme le processus transitoire se termine très vite, $\tau_{trans} = \sigma^2 / \mu$, nous pouvons estimer que ce processus se termine immédiatement une fois que le système abandonné à lui-même, c'est-à-dire imposer $\tau_{trans} = 1 / \mu \approx 0$, alors :

$$\tilde{u}^{art}(x, t') = \sigma u_0,$$

$$\bar{u}^{res}(y, t') = u_0.$$

La concentration dans les sorties de l'aquifère s'obtient de manière élémentaire :

$$\tilde{u}^{aq+,-}(x, t') = \sigma u_0 \operatorname{erfc}\left\{ \frac{(x \mp l/2)^2}{4D_w t'} \right\}.$$

En comparaison avec les autres cas, c'est dans le cas où il n'y a pas de convection que la fuite est la moins intense.

Annexe A. Solution du problème de Dirichlet dans de demi-espace et obtention de l'expression pour le flux à travers la limite.

Toutes les variations du problème de Dirichlet obtenues dans ce chapitre sont des cas particuliers du problème suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + b \frac{\partial w}{\partial z} = a^2 \frac{\partial w}{\partial z^2}, & 0 < z < \infty, \quad 0 < t \\ w(0, z) = w_0, \\ w(t, 0) = \varphi(t). \end{cases} \quad (3.A.1)$$

Les conditions limite et initiale ne sont pas obligées d'être compatibles dans le sens commun, c'est-à-dire que généralement :

$$w_0 \neq \varphi(0).$$

L'incompatibilité peut être résolue à l'aide de la fonction de Heaviside, si au lieu de w_0 , nous prenons la condition initiale discontinue :

$$w(x, 0) = \varphi(0) + (w_0 - \varphi(0)) \cdot \mathcal{H}(x - 0),$$

Le problème (3.A.1) peut être réduit au problème classique de Dirichlet pour l'équation de diffusion (sans terme de convection) avec une condition initiale nulle. Soit

$$w_1(z, t) = w(z, t) - w_0,$$

alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial w_1}{\partial t} + b \frac{\partial w_1}{\partial z} = a^2 \frac{\partial w_1}{\partial z^2}, & 0 < z < \infty, \quad 0 < t \\ w_1(0, z) = 0, \\ w_1(t, 0) = \varphi_1(t) = \varphi(t) - w_0 \end{cases} \quad (3.A.2)$$

Servons-nous de la substitution :

$$w_1(z, t) = \omega(z, t) \cdot \exp\left(\frac{2bz - b^2t}{4a^2}\right),$$

alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} = a^2 \frac{\partial \omega}{\partial z^2}, & 0 < z < \infty, & 0 < t \\ \omega(0, z) = 0, \\ \omega(t, 0) = \varphi_2(t) = (\varphi(t) - w_0) \exp\left(\frac{b^2 t}{4a^2}\right) \end{cases}$$

La solution de ce problème est [35]:

$$\omega(z, t) = \frac{a^2}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{z \cdot \varphi_2(\tau)}{[a^2(t-\tau)]^{3/2}} \exp\left(-\frac{z^2}{4a^2(t-\tau)}\right) d\tau,$$

Après la substitution inverse nous obtenons :

$$w_1(z, t) = -\frac{a^2 w_0}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{z}{[a^2(t-\tau)]^{3/2}} \exp\left(-\frac{(z-b(t-\tau))^2}{4a^2(t-\tau)}\right) d\tau + \frac{a^2}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{z \cdot \varphi(\tau)}{[a^2(t-\tau)]^{3/2}} \exp\left(-\frac{(z-b(t-\tau))^2}{4a^2(t-\tau)}\right) d\tau$$

$$w(z, t) = w_0 + w_1(z, t)$$

Trouverons, maintenant, la dérivée spatiale limite de la fonction $w(z, t)$, évidemment :

$$\frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial w_1}{\partial z},$$

la fonction $w_1(z, t)$ peut être représentée sous la forme d'une convolution:

$$w_1(z, t) = \exp\left(\frac{bz}{2a^2}\right) \left\{ (\varphi(t) - w_0) * F\left(\frac{z}{a}, t\right) \right\},$$

où

$$F(k, t) = \frac{k}{2\sqrt{\pi t^3}} \exp\left(-\frac{k^2}{4t} - \frac{b^2 t}{4a^2}\right),$$

est la fonction dont la transformée de Laplace est :

$$F(s) = e^{-k\sqrt{s+b^2/4a^2}}.$$

Ainsi :

$$w_1(z, s) = (\varphi(s) - w_0 / s) \exp\left(-\frac{z}{a} \left(\sqrt{s + \frac{b^2}{4a^2}} - \frac{b}{2a}\right)\right),$$

($-w_0 / s$ est la transformée de $f(t) = -w_0$). Prenant la dérivée en z en $z = 0$:

$$\frac{\partial w}{\partial z}(z, s) = \frac{\partial w_1}{\partial z}(z, s) = -\frac{1}{a} \left[\sqrt{s + (b/2a)^2} - b/2a \right] (\varphi(s) - w_0 / s).$$

Appliquons, maintenant, les résultats obtenus aux problèmes intermédiaires de Dirichlet qui apparaissent lors résolution du problème de base afin de trouver les relations entre les valeurs et les dérivées limites. Dans le cas du problème pour la concentration homogénéisée dans le réservoir: $w = \bar{u}^{res}$, $z = y - h$, $b = 0$, $a = \sqrt{D_g}$, $\varphi(t) = u^{art}(h, t) / \sigma$, $w_0 = u_0$:

$$\left. \frac{\partial \bar{u}^{res}}{\partial y} \right|_{y=h} (s) = -\frac{\bar{u}^{art}(h, s) \sqrt{s}}{\sigma \sqrt{D_g}} + \frac{u_0}{\sqrt{D_g s}}.$$

Dans le problème pour trouver la concentration homogénéisée à droite de $x = l/2$:

$$w = \tilde{u}^{aq+}, \quad z = x - l/2, \quad a = \sqrt{D_w}, \quad b = v, \quad \varphi(t) = \tilde{u}^{art}(l/2, t), \quad w_0 = 0,$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}^{aq+}}{\partial x} \right|_{x=l/2} (s) = -\frac{\tilde{u}^{art}(l/2, s)}{\sqrt{D_w}} \left[\sqrt{s + v^2 / 4D_w} - v / (2\sqrt{D_w}) \right].$$

Dans le problème pour trouver la concentration homogénéisée à gauche de $x = -l/2$:

$$w = \tilde{u}^{aq-}, \quad z = -x + l/2, \quad a = \sqrt{D_w}, \quad b = -v, \quad \varphi(t) = \tilde{u}^{art}(h, t), \quad w_0 = 0 :$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}^{aq-}}{\partial x} \right|_{x=-l/2} (s) = \frac{\tilde{u}^{art}(h, s)}{\sqrt{D_w}} \left[\sqrt{s + v^2 / 4D_w} + v / (2\sqrt{D_w}) \right].$$

Annexe B. Le retour de transformation de Laplace

Les transformées de Laplace qui apparaissent dans ce chapitre et dont le retour peut être trouvé analytiquement peuvent être mises sous la forme générale suivante :

$$f(s) = \frac{e^{-k\sqrt{s}}}{\sqrt{s} \{s + a\sqrt{s} + b\}}.$$

Comme

$$s + a\sqrt{s} + b = (\sqrt{s} - a_1)(\sqrt{s} - a_2),$$

où

$$a_{1,2} = -a/2 \pm \sqrt{a^2/4 - b},$$

les racines peuvent être complexes. Ensuite :

$$\frac{1}{(\sqrt{s} - a_1)(\sqrt{s} - a_2)} \equiv \frac{1}{\sqrt{a^2/4 - b}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{s} - a_2} - \frac{1}{\sqrt{s} - a_1} \right\}.$$

Nous pouvons maintenant nous servir de la table de retour de Laplace, exposée dans le manuel [22] afin de trouver le retour :

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{a^2/4 - b}} \left\{ \exp\{-a_2 k + a_2^2 t\} \operatorname{erfc}\left\{-a_2 \sqrt{t} + \frac{k}{2\sqrt{t}}\right\} - \exp\{-a_1 k + a_1^2 t\} \operatorname{erfc}\left\{-a_1 \sqrt{t} + \frac{k}{2\sqrt{t}}\right\} \right\},$$

où

$$\operatorname{erfc}(z) = \int_z^\infty e^{-\zeta^2} d\zeta = 1 - \operatorname{erf}(z)$$

est la fonction d'erreur complémentaire.

Démontrons que, dans le cas de racines $a_{1,2}$ complexes conjuguées, le résultat final est réel et donnons également un moyen pratique de calculer la fonction d'erreur d'une variable complexe (une telle option n'est pas habituellement intégrée aux *packages* mathématiques, il faut donc obtenir le résultat « manuellement »)

Soit $z = x + iy$, par définition :

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\zeta^2) d\zeta,$$

nous avons la liberté de choisir le trajet d'intégration dans le plan complexe, soit :

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\zeta^2) d\zeta = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\zeta^2) d\zeta + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{x+iy} \exp(-\zeta^2) d\zeta,$$

La première intégrale n'est que la fonction d'erreur de la partie réelle de l'argument. Dans la seconde intégrale, nous faisons la substitution :

$$\zeta = x + i\zeta,$$

où ζ est une variable réel qui varie entre 0 et y :

$$\begin{aligned} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{x+i\zeta} \exp(-\zeta^2) d\zeta &= \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \int_0^y \exp(\zeta^2 + 2ix\zeta) d\zeta = \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \left\{ i \int_0^y \exp(\zeta^2) \cos(2x\zeta) d\zeta - \int_0^y \exp(\zeta^2) \sin(2x\zeta) d\zeta \right\} \end{aligned}$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \operatorname{erf}(x + iy) &= \operatorname{erf}(x) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \int_0^y \exp(\zeta^2) \sin(2x\zeta) d\zeta \\ \operatorname{Im} \operatorname{erf}(x + iy) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \int_0^y \exp(\zeta^2) \cos(2x\zeta) d\zeta \end{aligned}$$

Notons

$$e^{z^2} \operatorname{erfc}(z) = F(z)$$

et calculons l'expression $F(x + iy) - F(x - iy)$ (il faut qu'elle soit purement imaginaire afin que $f(t)$ soit réel) :

$$\begin{aligned} F(x + iy) - F(x - iy) &= e^{x^2 - y^2} \left[e^{2ixy} (1 - \operatorname{erf}(x + iy)) - e^{-2ixy} (1 - \operatorname{erf}(x - iy)) \right] = \\ &= 2ie^{x^2 - y^2} \sin(2xy) + e^{x^2 - y^2} \left[e^{-2ixy} \operatorname{erf}(x - iy) - e^{2ixy} \operatorname{erf}(x + iy) \right] = \\ &= 2ie^{x^2 - y^2} \sin(2xy) + e^{x^2 - y^2} \left[\cos(2xy) [\operatorname{erf}(x - iy) - \operatorname{erf}(x + iy)] + i \sin(2xy) [\operatorname{erf}(x - iy) + \operatorname{erf}(x + iy)] \right] \end{aligned}$$

comme $\operatorname{Re} \operatorname{erf}(x + iy)$ est une fonction paire par rapport à y (l'intégrale d'une fonction impaire), et $\operatorname{Im} \operatorname{erf}(x + iy)$ est une fonction impaire par rapport à y , nous avons donc :

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}(x + iy) - \operatorname{erf}(x - iy) &= 2i \operatorname{Im} \operatorname{erf}(x + iy) \\ \operatorname{erf}(x + iy) + \operatorname{erf}(x - iy) &= 2 \operatorname{Re} \operatorname{erf}(x + iy) \end{aligned}$$

alors :

$$F(x+iy) - F(x-iy) = 2ie^{x^2-y^2} \sin(2xy) + 2ie^{x^2-y^2} \left\{ -\cos(2xy) \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \int_0^y \exp(\xi^2) \cos(2x\xi) d\xi \right. \\ \left. + \sin(2xy) \left[\operatorname{erf}(x) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \int_0^y \exp(\xi^2) \sin(2x\xi) d\xi \right] \right\} = 2ie^{x^2-y^2} \operatorname{erfc}(x) \sin(2xy) - \frac{4i}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2} \int_0^y \exp(\xi^2) \cos(2x(\xi-y)) d\xi$$

le résultat est purement imaginaire.

Alors si $a_{1,2}$ sont conjuguées complexes, l'expression $F(a_2\sqrt{t}) - F(a_1\sqrt{t})$ est imaginaire, mais multipliée par $\sqrt{a^2/4-b} = i\sqrt{b-a^2/4}$, elle donne un résultat final réel.

Chapitre 4. Simulation numérique du balayage d'un réservoir par un aquifère

§ 4.1 Introduction

Le premier objectif de ce chapitre est de construire un code numérique permettant modéliser les processus de transport convectif-diffusif dans les milieux composites dans les domaines de géométrie complexe. Le second objectif est de résoudre numériquement le problème de balayage d'un réservoir (un dépôt de méthane) souterrain par aquifère. C'est le même problème qui a été examiné dans le chapitre précédent d'un point de vue analytique. L'algorithme numérique de résolution du problème est basé sur la méthode des éléments finis avec des fonctions de base pyramidales.

Par milieu composite nous entendons un milieu dont les propriétés physiques sont irrégulières à l'échelle macroscopique ou un système composé de plusieurs milieux mis en contact. L'irrégularité macroscopique (distincte de la microscopique) du milieu a lieu souvent quand il s'agit d'un système géologique et, dans certaines applications, a une importance considérable vis-à-vis des processus qui s'y déroulent.

Les processus de dissipation dans les milieux composites s'expriment mathématiquement par des équations paraboliques ou elliptiques (dans l'approche stationnaire) avec des coefficients de transport discontinus :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (a \nabla u),$$

$\nabla a = \infty$ sur la séparatrice de deux milieux .

D'un point de vue mathématique, la fonction u n'est pas deux fois différentiable (bien que ses dérivées secondes entrent dans l'équation), mais possède une dérivée seconde au sens des distributions. Les méthodes basées sur l'approximation des dérivées secondes (en supposant qu'elles existent en chaque point) ne peuvent donner des résultats qualitativement corrects à proximité des surfaces séparatrices des milieux puisque les dérivées n'y existent pas. Il faut alors appliquer une méthode n'exigeant pas la continuité du gradient. De telles méthodes n'opèrent pas avec le problème formulé en termes d'une équation différentielle, mais avec celui formulé en termes d'une équivalence intégrale dérivée de l'équation du problème et de

ses conditions limites où les exigences de dérivation pour la fonction inconnue sont affaiblies. Un exemple d'une telle méthode est la méthode des éléments finis [10, 49].

Prenons un exemple montrant l'avantage de la méthode des éléments finis dans le cas d'un milieu composite. Examinons le problème elliptique :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (a \nabla u) = 0 \text{ dans } \Omega_1 \cup \Omega_2 \\ -a \frac{\partial u}{\partial n} = 1, \text{ sur } \partial\Omega_1 \setminus \partial\Omega_2 \\ -a \frac{\partial u}{\partial n} = -1, \text{ sur } \partial\Omega_2 \setminus \partial\Omega_1 \\ a = 0.1, \text{ dans } \Omega_1 \\ a = 10, \text{ dans } \Omega_2 \end{array} \right.$$

dans le domaine (voir fig.4.1) carré coupé en deux parties par une diagonale avec des propriétés différentes des deux cotés.

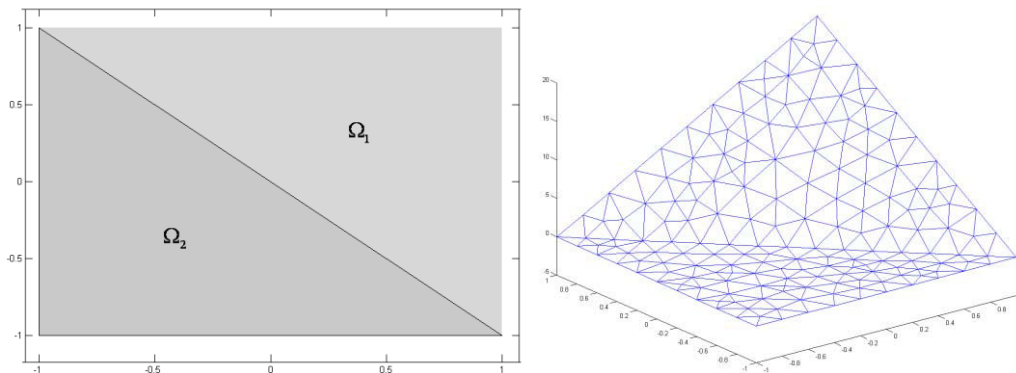


Fig.4.1 Exemple montrant la coïncidence absolue de la solution approchée obtenue par la méthode des éléments finis avec la solution exacte.

La solution exacte du problème est linéaire par morceaux avec des gradients constants dans Ω_1 et Ω_2 . A droite sur la fig. 4.1, est présentée la solution approchée obtenue à l'aide de la méthode des éléments finis dans le cas exposé ci-dessus. Les solutions exacte et approchée coïncident, la résolution du maillage ne jouant qu'un rôle secondaire.

§ 4.2 Formulation faible du problème et la méthode de projection

Examinons le problème parabolique pour une seule fonction inconnue avec des conditions limites mixtes : conditions de Neumann sur une partie de la frontière et conditions de Dirichlet sur l'autre partie de la frontière :

$$\begin{cases} b \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (a \nabla u) = 0 \text{ dans } \Omega \\ -a \frac{\partial u}{\partial n} = I \text{ sur } \partial_N \Omega \\ u = \omega \text{ sur } \partial_D \Omega \end{cases} \quad (4.1)$$

où Ω est le domaine, $\partial_N \Omega$, $\partial_D \Omega$ sont les différentes parties de la frontière, $a = a(x, y) > 0$, $b = b(x, y) > 0$, $I = I(s)$, $\omega = \omega(s)$, où s est un paramètre imposé sur la frontière, par exemple la longueur du trajet comptée à partir d'un point fixe.

Examinons d'abord le cas particulier où $\partial_D \Omega = \emptyset$, c'est-à-dire que sur toute la frontière, nous avons des conditions limites de Neumann.

Multiplions l'équation de départ par une fonction de coordonnées quelconque $\psi(x, y)$ et prenons-en l'intégrale sur tout le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \psi \left\{ b \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (a \nabla u) \right\} dx dy = 0. \quad (4.2)$$

Le second terme sous l'intégrale, par le théorème d'Ostrogradski, peut être transformé en :

$$-\int_{\Omega} \psi \nabla \cdot (a \nabla u) dx dy \equiv \int_{\Omega} a (\nabla \psi \cdot \nabla u) dx dy - \oint_{\partial \Omega} \psi a \frac{\partial u}{\partial n} ds.$$

Comme la dérivée normale $\partial u / \partial n$ est connue sur toute la frontière, l'intégral sur la surface est connu :

$$\int_{\Omega} \{b\psi u_t + a\nabla\psi \cdot \nabla u\} dx dy = -\oint_{\partial\Omega} \psi Ids . \quad (4.3)$$

La relation obtenue représente la formulation dite faible du problème. Introduisons la fonctionnelle intégrale :

$$\mathcal{I}(u, \psi) = \int_{\Omega} \{b\psi u_t + a\nabla\psi \cdot \nabla u\} dx dy - \int_{\partial\Omega} \psi Ids . \quad (4.4)$$

La formulation faible du problème consiste à affirmer que la solution exacte du problème annule la fonctionnelle $\mathcal{I}(u, \psi)$, quel que soit $\psi(x, y)$.

La formulation faible admet une interprétation géométrique en termes d'analyse fonctionnelle. Chaque fonction w de norme finie:

$$\int_{\Omega} \{w^2 + (\nabla w)^2\} dx dy < \infty \quad (4.5)$$

est un vecteur dans un espace linéaire fonctionnel de dimension infinie. Définissons l'écart de la fonction $u(x, y, t)$ à la vraie solution du problème (4.1) par :

$$r(x, y, t) = bu_t - \nabla \cdot (a\nabla u) .$$

Si la fonction $u(x, y, t)$ est exactement la solution du problème (4.1) : $r(x, y, t) \equiv 0$, ce qui signifie que le vecteur $r(x, y, t)$ ait ses projections nulles dans toutes les directions de l'espace, l'expression : $\int_{\Omega} r\psi dx dy$ représente la projection du vecteur $r(x, y, t)$ sur la direction $\psi(x, y)$. Dans ce sens, l'équivalence (4.4) peut être interprétée de la manière suivante : l'écart $r(x, y, t)$, étant projeté sur toute direction dans l'espace fonctionnel, donne un résultat nul.

La formulation faible du problème a un avantage par rapport à la formulation forte (4.1), qui consiste à supprimer l'exigence de l'existence des dérivées secondes de u et du gradient de a , qui obtiennent le droit de n'exister qu'au sens des distributions. Cette « réserve de discontinuité » que la fonction gagne est très utile d'un point de vue pratique car, dans les applications, le coefficient a se présente souvent comme une fonction continue par morceaux, surtout quand il s'agit d'un milieu composite (de point de vue macroscopique), la fonction u dans ce cas ayant un gradient continu par morceaux.

La méthode de projection considère la fonction inconnue comme un vecteur dans un espace fonctionnel et consiste en une approximation de la fonction inconnue par une série fonctionnelle finie ou si l'on préfère par une décomposition sur une base fonctionnelle incomplète :

$$u(x, y, t) \approx \sum_{k=1}^N u_k(t) \varphi_k(x, y),$$

ou, dans un autre mode d'écriture :

$$u(x, y, t) \approx \boldsymbol{\varphi}^T(x, y) \cdot \mathbf{u}(t), \quad (4.5)$$

où $\mathbf{u}(t) = [u_1(t), \dots, u_N(t)]^T$, $\boldsymbol{\varphi}(x, y) = [\varphi_1(x, y), \dots, \varphi_N(x, y)]^T$ sont les vecteurs N -dimensionnels des coefficients et des fonctions de base. La base complète ferait un ensemble de puissance équivalente à \mathbb{N}^2 (dans un domaine bidimensionnel fini): c'est pour cela que la décomposition (4.5) est toujours approximative. Les fonctions de base relèvent du choix du développeur de la méthode. Comme la base de fonctions est fixe, toute l'information sur la fonction inconnue est incluse dans les coefficients. Les coefficients inconnus sont choisis ainsi que la combinaison linéaire des fonctions de base en minimisant la distance à la solution du problème selon un certain critère.

Comme nous avons la liberté de choisir la fonction ψ , à la seule condition qu'elle soit de norme finie (4.5), nous pouvons prendre N fonctions indépendantes ψ_1, \dots, ψ_N et obtenir N formulations faibles indépendantes du problème. Alors en écrivant $u(x, y, t)$ sous la forme $\mathbf{u}^T(t) \cdot \boldsymbol{\varphi}(x, y)$ et en le substituant dans la formulation faible (4.4), nous pouvons formuler N équations différentielles ordinaires pour le vecteur des coefficients :

$$\sum_{i=1}^N \left(B_{ik}^{(b)} \frac{d}{dt} + A_{ik}^{(a)} \right) u_i = i_k^{(l)}, \quad (4.6)$$

où les matrices sont données par :

$$A_{ik}^{(a)} = \int_{\Omega} a(\nabla \varphi_i \cdot \nabla \psi_k) dx dy,$$

$$B_{ik}^{(b)} = \int_{\Omega} b \varphi_i \psi_k dx dy,$$

et le vecteur de la partie droite :

$$i_k^{(I)} = \int_{\partial\Omega} I\psi_k ds$$

(l'indice supérieur dans les parenthèses indique le noyau d'intégral). Les matrices $A_{ik}^{(a)}$ et $B_{ik}^{(b)}$ sont dites matrices de rigidité et de masse. L'ensemble des fonctions ψ_1, \dots, ψ_N (qu'on appelle les fonctions de pondération) peut être choisi indépendamment de la base fonctionnelle $\varphi_1, \dots, \varphi_N$, à la seule condition qu'elles soient en même nombre que les fonctions de base, mais, de tous les points de vue, il est raisonnable de choisir $\psi_1, \dots, \psi_N \equiv \varphi_1, \dots, \varphi_N$ (dite pondération de Galerkin), alors les matrices $B_{ik}^{(b)}$ et $A_{ik}^{(a)}$ deviennent symétriques :

$$A_{ik}^{(a)} = A_{ki}^{(a)}, B_{ik}^{(b)} = B_{ki}^{(b)}.$$

§ 4.3 Choix des fonctions de base et discrétisation géométrique

Les fonctions de base (ou shape functions) doivent satisfaire aux exigences suivantes :

- simplicité de calcul des éléments des matrices ;
- reproduction du comportement qualitatif de la solution : par exemple, si la solution est lisse par morceaux, les fonctions de base lisses ne conviennent pas puisqu'elles ne peuvent pas modéliser la discontinuité du gradient ;
- il est préférable que les matrices soient creuses, c'est-à-dire que la plupart de leurs éléments soient égaux à zéro ;
- la base de fonctions doit être asymptotiquement complète pour assurer la convergence de la série réduite.

Les matrices creuses permettent d'économiser la mémoire vive de l'ordinateur, à l'aide d'un format spécial de stockage de la matrice en ne gardant que les éléments non-zéros et leurs positions (ligne-colonne) dans la matrice (dans logiciel Matlab un tel format de données s'appelle « sparse matrix »).

Dans le cas d'une géométrie quelconque du domaine, le calcul des éléments des matrices reste simple si nous utilisons les fonctions dont le support est limité, c'est-à-dire qu'une fonction de base n'est différente de zéro que dans un petit sous-domaine (dits éléments finis). Si nous utilisons des fonctions à support limité, la plupart des intégrales $\int_{\Omega} b\varphi_i\varphi_k dx dy$, $\int_{\Omega} a\nabla\varphi_i \cdot \nabla\varphi_k dx dy$ sont nulles puisque les supports des fonctions φ_i et φ_k ne se croisent pas.

L'utilisation de fonctions à support limité rend creuses les matrices de rigidité et de masse, ce qui permet d'augmenter le nombre de fonctions de base (par la suite d'améliorer la précision de la méthode).

Supposons que tout le domaine de calcul soit couvert d'un maillage triangulaire dont les cellules ne se croisent pas (voir fig. 4.2).

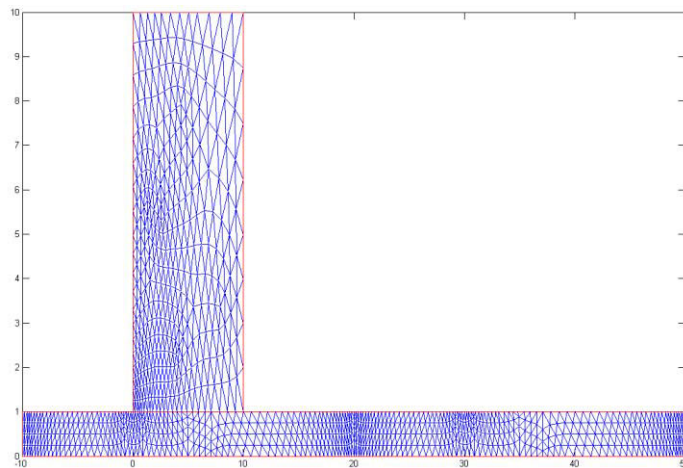


Fig. 4.2 Maillage de 1824 triangles et 1073 nœuds.

Soit N le nombre de nœuds. Associons à chaque nœud une fonction qui :

1. prend la valeur 1 sur son nœud associé ;
2. est égale à zéro dans tous les autres nœuds ;
3. varie linéairement dans les triangles possédant le nœud associé comme sommet.

Une fonction, ainsi définie, n'est différente de zéro que dans un petit ensemble de triangles voisins qui ont un sommet en commun et, dans son support, la fonction est linéaire par morceaux son graphique représente une pyramide dont la génératrice est la ligne normale au plan du maillage qui passe par le sommet commun (voir fig.4.3).

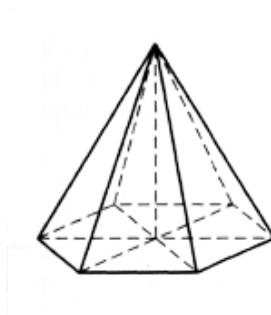


Fig.4.3 Fonction de base pyramidale.

Comme les fonctions de base sont linéaires par morceaux et continues, toute combinaison linéaire de ces fonctions est linéaire par morceaux et continue. Cela permet donc d'approcher une fonction continue par morceaux. De plus, il est facile de calculer les éléments des matrices puisque les gradients des fonctions de base sont constants dans chaque triangle : le calcul de $\int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_k dx dy$ se réduit à sommation de gradients constants sur tous les triangles. Dans une ligne de la matrice $A_{ik}^{(a)}$ ou $B_{ik}^{(b)}$ qui correspond à un nœud, les éléments non nuls sont en égale au nombre de triangles ayant ce nœud en commun. Pour le maillage présenté sur la fig.4.2, c'est $\sim 1\%$ du nombre total de nœuds. Un autre avantage des fonctions pyramidales consiste à ce que les coefficients multiplicateurs de ces fonctions, dans la combinaison linéaire, ne sont autres que les valeurs de cette fonction sur les nœuds du maillage puisque $\varphi_i = 1$ sur le nœud i et $\varphi_i = 0$ sur tous les autres nœuds. Cela signifie que s'il faut décomposer une fonction connue $f(x, y)$ en utilisant les fonctions pyramidales, pour calculer les coefficients de la décomposition il suffit simplement d'imposer les coordonnées du nœud dans l'expression pour $f(x, y)$:

$$f_i \equiv f(x_i, y_i).$$

L'approximation d'une fonction continue par un système des fonctions pyramidales n'est autre que l'analogie bidimensionnel de l'approximation d'une courbe continue par une ligne polygonale. Quand la longueur du plus petit segment tend vers zéro, la ligne polygonale se converge vers la courbe. De même, si l'aire du plus petit triangle tend vers zéro, la fonction linéaire par morceaux converge vers la fonction continue : cela signifie que notre base fonctionnelle est asymptotiquement complète.

La fragmentation du domaine en triangles s'effectue à l'aide des instruments d'une toolbox « Partial Differential Equation Toolbox » intégrée au logiciel Matlab. Le générateur des maillages de Matlab effectue automatiquement la triangulation du domaine de calcul et fournit trois suites de données contenant toute l'information nécessaire sur le maillage :

- La quantité « t » (triangles), avec un numéro pour chaque triangle et donnant les numéros des nœuds du triangle pris dans la liste globale des nœuds et le numéro du sous-domaine où se trouve le triangle (les différents sous-domaines correspondent aux différents milieux dans un système composite).

- La quantité « p » (points), numérotée par le numéro des nœuds, comprenant leurs coordonnées x et y .
- La quantité « e » (edges) des éléments frontières), repérés par le numéro des côtés limites et comprenant les numéros de leurs points finaux dans la liste de nœuds et le numéro de la frontière où se trouve le côté (la numérotation des différents segments de la frontière permet d'y poser des conditions limites de différents types).

§ 4.4 Calcul des éléments des matrices

Les méthodes numériques basées sur la discrétisation spatiale utilisent les concepts d'une fonction de nœud et d'une fonction de cellule qui représentent des fonctions de l'argument discret (le numéro de nœud/cellule), donc un massif (vecteur) ayant pour dimension le nombre des nœuds/cellules. Les composantes des ces vecteurs normalement s'identifient avec les valeurs approximatives de la fonction inconnue sur les nœuds du maillage ou de sa moyenne sur la cellule. De même, nous introduisons les concepts d'une fonction de nœud et d'une fonction de triangle. Une fonction de nœud est un vecteur N – dimensionnel où chaque composant est une valeur nodale d'une fonction continue. Une fonction de triangle est un vecteur M – dimensionnel, dont les composants sont les valeurs homogénéisées d'une fonction continue sur tous les triangles du maillage.

Une fonction de nœud, naturellement, peut être convertie en une fonction de triangle de la façon suivante : chaque fonction de nœuds sert de base de construction d'une interpolation linéaire dans chaque triangle ; le résultat de cette interpolation peut être homogénéisé sur tous les triangles et l'on obtient ainsi une fonction de triangle. La moyenne d'une fonction linéaire sur un triangle est tout simplement la moyenne arithmétique de ses valeurs aux sommets. Lors cette conversion, l'information sur la fonction inconnue est réduite et la conversion inverse « fonction de triangle \rightarrow fonction de nœud » est impossible. Remarquons que comme le gradient d'une fonction linéaire dans chaque triangle est une fonction constante dans chaque triangle, il est une fonction de triangle. Ainsi la dérivation d'une fonction de nœud rend une fonction de triangle.

Introduisons aussi, le concept d'une fonction de segment frontière (les côtés des triangles qui se trouvent sur la frontière du domaine) : un vecteur dont la dimension est égale

au nombre de tous les segments frontières (qui sont ordonnés et numérotés automatiquement par le générateur de maillage). Ce vecteur est une image discrète de la fonction du paramètre frontière qui ordonne l'ensemble frontière $\partial\Omega$.

La fonction de nœud sert de moyen de discrétisation de la fonction inconnue $u(x,y,t)$; la fonction de triangle sert de moyen de discrétisation des coefficients de l'équation $a(x,y)$ et $b(x,y)$. La fonction de segment frontière modélise la fonction $I(s)$. Dans les problèmes où il s'agit d'un milieu composite, les coefficients $a(x,y)$ et $b(x,y)$ souvent représentent des fonctions constantes par morceaux c'est-à-dire déjà codifiées en format d'une fonction de triangle. Si les fonctions $a(x,y)$ et $b(x,y)$ sont continues, pour opérer avec elles, il faut d'abord les convertir en fonctions de triangle.

Le calcul direct des intégrales $\int_{\Omega} b\varphi_i\varphi_k dx dy$, $\int_{\Omega} a\nabla\varphi_i \cdot \nabla\varphi_k dx dy$ est compliqué d'un point de vue technique. C'est pourquoi pour trouver les éléments des matrices $\hat{\mathbf{A}}^{(a)}$ et $\hat{\mathbf{B}}^{(b)}$, nous utilisons une approche implicite, que nous appelons l'assemblage par triangles, qui n'exige pas d'obtenir des expressions explicites pour les fonctions de base.

Multiplions le système d'équations différentielles ordinaires (4.6) par un vecteur N -dimensionnel stationnaire quelconque \mathbf{v}^T :

$$\sum_{k=1}^N v_k \sum_{i=1}^N \left(B_{ik}^{(b)} \frac{d}{dt} + A_{ik}^{(a)} \right) u_i = \sum_{k=1}^N i_k^{(I)} v_k, \quad (4.7)$$

Ou sous une autre forme :

$$\frac{d}{dt} \left\{ \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{B}^{(b)} \cdot \mathbf{u} \right\} + \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{A}^{(a)} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{i}^{(I)}.$$

La dernière relation, bien qu'elle soit scalaire, contient la même quantité d'information que le système de N équations (4.5), puisque le vecteur \mathbf{v}^T est quelconque et satisfaire l'égalité (4.7) n'est possible que dans le cas où l'égalité (4.6) est satisfaite. Les expressions : $\mathbf{v}^T \cdot \mathbf{B}^{(b)} \cdot \mathbf{u}$ et $\mathbf{v}^T \cdot \mathbf{A}^{(a)} \cdot \mathbf{u}$ sont des approximations des intégrales :

$$\mathbf{v}^T \cdot \mathbf{A}^{(a)} \cdot \mathbf{u} \approx \int_{\Omega} a \nabla v \cdot \nabla u dx dy, \quad (4.8)$$

$$\mathbf{v}^T \cdot \mathbf{B}^{(b)} \cdot \mathbf{u} \approx \int_{\Omega} b v u dx dy, \quad (4.9)$$

où $v(x, y)$ est une fonction des coordonnées, telle que $v(x, y) = \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Phi}^T(x, y)$, $v_i = v(x_i, y_i)$. Les relations (4.8-4.9) peuvent servir de définition alternative des matrices $\mathbf{B}^{(b)}$, $\mathbf{A}^{(a)}$. Trouvons ces matrices suivant cette définition.

L'intégrale sur tout le domaine Ω est la somme des intégrales sur tous les triangles $\Omega_1, \dots, \Omega_M$:

$$\int_{\Omega} a(\nabla \mathbf{v} \cdot \nabla u) dx dy = \sum_{m=1}^M \int_{\Omega_m} a(\nabla \mathbf{v} \cdot \nabla u) dx dy.$$

Le coefficient a sous l'intégrale peut être remplacé par sa valeur homogénéisée sur le triangle et être sorti de l'intégrale :

$$\sum_{m=1}^M \int_{\Omega_m} a(\nabla \mathbf{v} \cdot \nabla u) dx dy = \sum_{m=1}^M a_m \int_{\Omega_m} (\nabla \mathbf{v} \cdot \nabla u) dx dy.$$

Comme la dérivée spatiale d'une fonction de nœud est une fonction de triangle, $\nabla \mathbf{v}$, ∇u sont constants dans chaque triangle, et l'intégration se réduit à une sommation :

$$\sum_{m=1}^M a_m \int_{\Omega_m} (\nabla \mathbf{v} \cdot \nabla u) dx dy = \sum_{m=1}^M \Delta_m a_m (\nabla \mathbf{v})_m \cdot (\nabla u)_m,$$

où

$$\Delta_m = \frac{1}{2} \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_m^1 & x_m^2 & x_m^3 \\ y_m^1 & y_m^2 & y_m^3 \end{bmatrix}$$

est l'aire du triangle m exprimée à travers les coordonnées de ses sommets : (x_m^1, y_m^1) , (x_m^2, y_m^2) , (x_m^3, y_m^3) .

Pour calculer les valeurs des gradients $(\nabla \mathbf{v})_m$, $(\nabla u)_m$ utilisons la formule générale d'interpolation linéaire dans un triangle :

$$[u(x, y)]_{\text{dans } \Omega_m} = \frac{1}{2\Delta_m} \cdot \left(\det \begin{bmatrix} u_m^1 & u_m^2 & u_m^3 \\ x_m^1 & x_m^2 & x_m^3 \\ y_m^1 & y_m^2 & y_m^3 \end{bmatrix} - \det \begin{bmatrix} u_m^1 & u_m^2 & u_m^3 \\ x & x & x \\ y_m^1 & y_m^2 & y_m^3 \end{bmatrix} - \det \begin{bmatrix} u_m^1 & u_m^2 & u_m^3 \\ x_m^1 & x_m^2 & x_m^3 \\ y & y & y \end{bmatrix} \right),$$

u_m^1, u_m^2, u_m^3 sont les valeurs nodales de la fonction u dans le triangle m . Pour les composantes du gradient, nous avons :

$$\left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{\text{dans } \Omega_m} = -\frac{1}{2\Delta_m} \cdot \det \begin{bmatrix} u_m^1 & u_m^2 & u_m^3 \\ 1 & 1 & 1 \\ y_m^1 & y_m^2 & y_m^3 \end{bmatrix}, \quad \left[\frac{\partial u}{\partial y} \right]_{\text{dans } \Omega_m} = -\frac{1}{2\Delta_m} \cdot \det \begin{bmatrix} u_m^1 & u_m^2 & u_m^3 \\ x_m^1 & x_m^2 & x_m^3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix},$$

Ainsi

$$(\nabla v)_m \cdot (\nabla w)_m = \left[\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} \right]_{\text{dans } \Omega_m} = [v_m^1, v_m^2, v_m^3] \cdot \hat{\mathbf{A}}_m^{\text{loc}} \cdot [u_m^1, u_m^2, u_m^3]^T,$$

où

$$\hat{\mathbf{A}}_m^{\text{loc}} = \frac{1}{4\Delta_m^2} \begin{bmatrix} \alpha_1^2 + \beta_1^2 & \alpha_1\alpha_2 + \beta_1\beta_2 & \alpha_1\alpha_3 + \beta_1\beta_3 \\ \alpha_2\alpha_1 + \beta_2\beta_1 & \alpha_2^2 + \beta_2^2 & \alpha_2\alpha_3 + \beta_2\beta_3 \\ \alpha_3\alpha_1 + \beta_3\beta_1 & \alpha_3\alpha_2 + \beta_3\beta_2 & \alpha_3^2 + \beta_3^2 \end{bmatrix},$$

est une matrice 3x3, où les valeurs α_k, β_k sont définies par :

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= y_2 - y_3, & \beta_1 &= x_2 - x_3, \\ \alpha_2 &= y_3 - y_1, & \beta_2 &= x_3 - x_1, \\ \alpha_3 &= y_1 - y_2, & \beta_3 &= x_1 - x_2. \end{aligned}$$

La matrice $\hat{\mathbf{A}}_m^{\text{loc}}$ est l'analogie local de la matrice de rigidité. Appelons matrice globalisée $\hat{\mathbf{A}}_m^{\text{glob}}$ de la matrice locale $\hat{\mathbf{A}}_m^{\text{loc}}$ la matrice ayant une dimension $N \times N$ et ne possédant que 9 éléments non-zéros dans les positions qui correspondent aux sommets du triangle m .

Evidemment :

$$[v_m^1, v_m^2, v_m^3]^T \cdot \hat{\mathbf{A}}_m^{\text{loc}} \cdot [u_m^1, u_m^2, u_m^3] \equiv [v_1, \dots, v_N]^T \cdot \hat{\mathbf{A}}_m^{\text{glob}} \cdot [u_1, \dots, u_N],$$

Bien que dans la somme figurent toutes les valeurs nodales, elle se somme multipliée par zéro si ce ne sont pas les sommets du triangle m . Finalement, nous obtenons que la contribution du

triangle m dans l'intégrale (4.8) s'exprime à travers les vecteurs N -dimensionnels de \mathbf{v} et \mathbf{u} et à travers une matrice dont nous venons d'éclaircir son obtention

$$a_m \int_{\Omega_m} (\nabla \mathbf{v} \cdot \nabla u) dx dy = \frac{a_m}{4\Delta_m} \mathbf{v}^T \cdot \hat{\mathbf{A}}_m^{\text{glob}} \cdot \mathbf{u}.$$

Quant à l'intégrale complète, elle vaut :

$$\int_{\Omega} a(\nabla \mathbf{v} \cdot \nabla u) dx dy = \mathbf{v}^T \cdot \hat{\mathbf{A}}^{(a)} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{v}^T \cdot \left(\sum_{m=1}^M \frac{a_m}{4\Delta_m} \hat{\mathbf{A}}_m^{\text{glob}} \right) \cdot \mathbf{u}.$$

Ainsi la somme

$$\sum_{m=1}^M \frac{a_m}{4\Delta_m} \hat{\mathbf{A}}_m^{\text{glob}} = \hat{\mathbf{A}}^{(a)}$$

n'est autre que la matrice de rigidité.

L'obtention de matrice de masse $\hat{\mathbf{B}}^{(b)}$ est similaire à l'obtention de la matrice de rigidité. Représentons l'intégrale

$$\int_{\Omega} b(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) dx dy \approx \mathbf{v}^T \cdot \hat{\mathbf{B}}^{(b)} \cdot \mathbf{u}$$

comme la somme des contributions de chaque triangle :

$$\int_{\Omega} b(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) dx dy = \sum_{m=1}^M \int_{\Omega_m} b(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) dx dy = \sum_{m=1}^M b_m \int_{\Omega_m} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) dx dy.$$

Il faut donc calculer l'intégrale par triangle du produit de deux fonctions linéaires. Le résultat de cette intégration peut être exprimée comme :

$$\int_{\Omega_m} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) dx dy = \begin{bmatrix} v_m^1 & v_m^2 & v_m^3 \end{bmatrix} \cdot \hat{\mathbf{B}}_m^{\text{loc}} \cdot \begin{bmatrix} u_m^1 & u_m^2 & u_m^3 \end{bmatrix}^T,$$

où

$$\hat{\mathbf{B}}_m^{\text{loc}} = \frac{\Delta_m}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix},$$

est la matrice locale de masse (pour son obtention voir [41]). Ensuite la matrice complète de masse s'obtient par sommation des matrices globalisées de chaque triangle :

$$\int_{\Omega} b(v \cdot w) d\omega \equiv \mathbf{v}^T \cdot \hat{\mathbf{B}}^{(b)} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{v}^T \cdot \left(\sum_{m=1}^M b_m \hat{\mathbf{B}}_m^{\text{glob}} \right) \cdot \mathbf{u},$$

$$\hat{\mathbf{B}}^{(b)} = \sum_{m=1}^M b_m \hat{\mathbf{B}}_m^{\text{glob}}.$$

L'approximation du flux à la frontière qui entre dans la partie droite du système d'équations pour les valeurs nodales, peut être obtenue par le calcul direct de l'intégrale :

$$i_k^{(I)} = \oint_{\partial\Omega} I \varphi_k ds.$$

Décomposons cette intégrale en la somme des contributions de chaque segment frontière :

$$\oint_{\partial\Omega} I \varphi_k ds = \sum_{n_L=1}^{N_L} \int_{s_{n_L}^1}^{s_{n_L}^2} I(s) \varphi_k(s) ds$$

$s_{n_L}^1$, $s_{n_L}^2$ sont les coordonnées limites des extrémités du segment. Comme $I(s)$ est constant sur chaque segment :

$$\sum_{n_L=1}^{N_L} \int_{s_{n_L}^1}^{s_{n_L}^2} I(s) \varphi_k(s) ds = \sum_{n_L=1}^{N_L} I_{n_L} \int_{s_{n_L}^1}^{s_{n_L}^2} \varphi_k(s) ds,$$

la fonction $\varphi_k(s)$ peut : soit être nulle sur le segment, soit y être linéaire et varier entre 0 et 1.

Donc :

$$\int_{s_{n_L}^1}^{s_{n_L}^2} \varphi_k(s) ds = \begin{cases} (s_{n_L}^2 - s_{n_L}^1) / 2, & \text{si le noeud } k \text{ est une des fins du segment } n_L \\ 0, & \text{dans le cas contraire} \end{cases}$$

et donc :

$$i_k^{(I)} = \begin{cases} I_{n_L} (s_{n_L}^2 - s_{n_L}^1) / 2, & \text{si le noeud } k \text{ est une des fins du segment } n_L \\ 0, & \text{dans le cas contraire} \end{cases}$$

Finalement, nous avons formalisé l'algorithme d'obtention des matrices de rigidité et de masse et du vecteur flux. Pour le problème de Neumann, nous obtenons un système d'équation différentielles ordinaires par rapport au temps :

$$\left(\hat{\mathbf{B}}^{(b)} \frac{d}{dt} + \hat{\mathbf{A}}^{(a)} \right) \mathbf{u} = \mathbf{i}^{(I)},$$

et pris en compte la condition initiale du problème qui consiste en l'initialisation du vecteur \mathbf{u} :

$$u_n(0) = u(x_n, y_n, 0).$$

En principe, un tel problème pour un système d'équations ordinaires différentielles, vu qu'il est linéaire, peut être résolu exact en utilisant l'exponentielle matricielle, mais comme le nombre d'équations est d'ordre de 10^3 , une telle solution est trop compliquée. Alors, en dépit de la linéarité, il vaut mieux d'effectuer une résolution temporelle par la méthode des différences finies.

§ 4.5 Approximation des conditions limites de Dirichlet

Généralisons, maintenant, le schéma de discrétisation spatiale pour le cas où, sur une partie de la frontière, nous avons une condition de Dirichlet. Montrons que cette généralisation se fait au prix de corrections élémentaires sur les matrices $\hat{\mathbf{B}}^{(b)}$ et $\hat{\mathbf{A}}^{(a)}$. Extrapolons le flux limite $I(s)$ (qui n'est donné que sur $\partial_N \Omega$) sur toute la limite $\partial \Omega$ par :

$$I^{ext}(s) = \begin{cases} I(s) & \text{sur } \partial_N \Omega \\ 0 & \text{sur } \partial_D \Omega \end{cases}$$

La fonction $u(x, y, t)$ comme auparavant est approchée par la combinaison linéaire des fonctions pyramidales, y compris celles associées aux nœuds frontières où la condition limite est de Dirichlet, mais les valeurs nodales (les coefficients devant les fonctions) nous sont connues a priori.

Distinguons deux cas : si la condition limite de Dirichlet est stationnaire, comme elle ne change pas avec le temps et se trouve en accord avec la condition initiale, c'est-à-dire que les valeurs initiales dans ses nœuds se conservent quel que soit le temps ; l'autre cas correspond à celui où certaines valeurs limites sont données comme des fonctions explicites

du temps. Dans le premier cas nous pouvons procéder de la manière suivante : soit i' est l'indice non-ordonné qui parcourt les nœuds limites de Dirichlet, alors, dans la matrice $\hat{\mathbf{A}}^{(a)}$, nous mettons à zéro tous les colonnes et toutes les lignes dont numéro est i' ; dans la matrice $\hat{\mathbf{B}}^{(b)}$ nous faisons la même chose mais nous gardons les valeurs non nulles des éléments diagonaux $B_{i'i'}^{(b)}$. Alors, l'équation numéro i' , (i' ème ligne du système) prend la forme :

$$B_{i'i'}^{(b)} \frac{du_{i'}}{dt} = 0.$$

La valeur limite est conservée. Dans le second cas,

$$u_{i'} = f_{i'}(t),$$

et nous mettons alors à zéro les lignes et les colonnes numéro i' dans les matrices $\hat{\mathbf{A}}^{(a)}$ et $\hat{\mathbf{B}}^{(b)}$ sauf les éléments diagonaux $i'i'$ de la matrice $\hat{\mathbf{A}}^{(a)}$ égaux à 1 ; de plus, nous mettons $f_{i'}(t)$ dans les positions correspondantes du vecteur \mathbf{i} . Les équations pour les nœuds frontières de Dirichlet prennent alors la forme :

$$1 \cdot u_{i'} = f_{i'}(t).$$

§ 4.6 Approximation du terme de convection et discrétisation temporelle

La méthode des éléments finis dans la forme exposée jusqu'ici est adaptée à la résolution des problèmes avec un opérateur symétrique qui rend les matrices $\hat{\mathbf{A}}^{(a)}$ et $\hat{\mathbf{B}}^{(b)}$ symétriques dans le cas où les fonctions de pondération coïncident avec les fonctions de base. Pour les problèmes où l'opérateur différentiel n'est plus symétrique, comme dans le cas de convection, la convergence de la méthode est mise en question. On peut toujours utiliser la méthode de projection même avec un opérateur asymétrique, mais il n'y a pas de garantie qu'une telle approximation du terme convectif ne conduira pas à instabilité numérique, surtout dans le cas où la convection est dominante ($Pe \gg 1$). Il existe des approches pour améliorer la méthode de point de vue de stabilité au moyen de l'introduction de fonctions de pondération non stationnaires (stationnaires d'après Lagrange, mais non stationnaires d'après Euler) [50] afin que la matrice du système soit symétrique. La réalisation d'une telle approche est compliquée d'un point de vue technique et pour notre problème n'est pas indispensable.

Nous avons utilisé une approche plus simple qui est valable (d'après les observations des résultats de calcul) dans une gamme limitée de nombres de Péclet.

Dans le cas avec convection, un terme convectif est ajouté à l'équation du problème :

$$b \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}u) - \nabla \cdot (a \nabla u) = 0,$$

Supposons que, l'écoulement soit potentiel et nous connaissons le potentiel de la vitesse :

$$\mathbf{V} = \nabla \Phi_{\mathbf{V}},$$

alors :

$$\nabla \cdot (\mathbf{V}u) = \nabla \cdot (u \nabla \Phi_{\mathbf{V}}).$$

Une telle expression est d'un certain point de vue analogue à $\nabla \cdot (a \nabla u)$, mais u joue le rôle du coefficient et $\Phi_{\mathbf{V}}$ joue le rôle qui appartenait à la fonction inconnue. En projetant le terme sur la base des fonctions pyramidales

$$\int_{\Omega} \varphi_k \nabla \cdot (u \nabla \Phi_{\mathbf{V}}) dx dy = \int_{\Omega} u (\nabla \varphi_k \cdot \nabla \Phi_{\mathbf{V}}) dx dy - \oint_{\partial \Omega} \varphi_k u \mathbf{V}_n ds \approx \left\{ \hat{\mathbf{A}}^{(u)} \cdot \Phi_{\mathbf{V}} \right\}_k - i_k^{(u \mathbf{V}_n)}$$

Ainsi le problème avec convection, après la discrétisation spatiale, se réduit au système d'équations :

$$\left(\hat{\mathbf{B}}^{(b)} \frac{d}{dt} + \hat{\mathbf{A}}^{(a)} \right) \cdot \mathbf{u} + \hat{\mathbf{A}}^{(u)} \cdot \Phi_{\mathbf{V}} = \mathbf{i}^{(I)} + \mathbf{i}^{(\mathbf{V}_n u)}$$

où une des matrices et une partie du flux dépendent linéairement de la solution.

Discrétisons le problème dans le domaine du temporel :

$$\hat{\mathbf{B}}^{(b)} \frac{\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} + \hat{\mathbf{A}}^{(a)} \tilde{\mathbf{u}}^n + \hat{\mathbf{A}}^{(u)} \cdot \Phi_{\mathbf{V}} = \mathbf{i}^{(I)} + \mathbf{i}^{(\mathbf{V}_n \hat{u}^n)}$$

$n = 1, 2, \dots$ est le numéro de l'itération dans le temps, $n = 0$ correspond à l'état initial, Δt est le pas de temps, \tilde{u}^n et \hat{u}^n sont deux combinaisons linéaires de u^{n-1} et u^n qui convergent vers u^n quand $\Delta t \rightarrow 0$. Le choix de \tilde{u}^n et \hat{u}^n est une question de facilité dans la résolution du problème. Quant à \hat{u}^n , nous ne pouvons nous permettre d'utiliser l'approximation :

$$\hat{u}^n = u^{n-1}.$$

Ainsi, tout le terme convectif est approché explicitement, car la présence de u^n dans l'expression pour \hat{u}^n complique énormément le problème. Mais \tilde{u}^n peut être approchée sous forme d'une combinaison linéaire des distributions des itérations temporelles précédente et actuelle :

$$\tilde{u}^n = \alpha u^n + (1 - \alpha)u^{n-1}, 0 \leq \alpha \leq 1.$$

Nos observations montrent que le schéma est de meilleure qualité si $\alpha = 1$, c'est-à-dire quand l'expression pour \tilde{u}^n est purement implicite.

§ 4.7 Formulation équivalente du problème de balayage d'un réservoir

La solution analytique pour le problème de balayage d'un réservoir par aquifère du chapitre précédent a été obtenue en admettant certaines hypothèses (voir § 3.3) qui n'ont pas de fortes bases théoriques, mais plutôt ont été déduites à partir de l'analyse des résultats de simulation numérique du problème. De plus, la solution analytique définitive n'a été obtenue que pour des cas extrêmes, l'analyse numérique permet d'élargir les cas examinés en incluant les cas intermédiaires.

La méthode développée est applicable aux problèmes où la fonction inconnue est continue, mais dont le gradient peut être discontinu. Dans le problème de balayage d'un réservoir, la concentration est discontinue suite à la condition d'Henry. Il faut donc introduire une nouvelle fonction afin qu'elle soit continue

$$U = \begin{cases} u, & \text{dans le réservoir} \\ \sigma^{-1}u, & \text{dans l'aquifère} \end{cases}$$

ou en terme de la fonction de Heaviside :

$$U(x, y, t) = u(x, y, t) \{1 + (\sigma - 1)\mathcal{H}(h - y)\}.$$

Le problème de départ reformulé en termes de cette fonction prend la forme suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot (D_g \nabla U), \text{ dans le r\u00e9servoir} \\ \frac{\partial \sigma U}{\partial t} + v \frac{\partial \sigma U}{\partial x} = \nabla \cdot (D_w \nabla (\sigma U)), \text{ dans l'aquif\u00e8re} \\ U(x, h+0, t) = U(x, h-0, t) \\ D_g U_y(x, h+0, t) = \sigma D_w U_y(x, h+0, t) \end{cases}$$

Introduisons $D'_w = \sigma D_w$, $v' = \sigma v$, alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot (D_g \nabla U), \text{ dans le r\u00e9servoir} \\ \sigma \frac{\partial U}{\partial t} + v' \frac{\partial U}{\partial x} = \nabla \cdot (D'_w \nabla U), \text{ dans l'aquif\u00e8re} \\ U(x, h+0, t) = U(x, h-0, t) \\ D_g U_y(x, h+0, t) = D'_w U_y(x, h+0, t) \end{cases}$$

Nous avons le m\u00eame probl\u00e8me que dans le cas d'un probl\u00e8me de diffusion dans un milieu composite o\u00f9 « la porosit\u00e9 » change d'un milieu \u00e0 l'autre (1 et σ), la concentration et le flux de diffusion restent continus, mais la vitesse et le coefficient de diffusion dans le second milieu ont chang\u00e9 contre σD_w et σv respectivement.

Le potentiel de la vitesse doit \u00eatre tel que :

$$\frac{\partial \Phi_v}{\partial x} = \begin{cases} v', y < h \\ 0, y > h \end{cases}, \quad \frac{\partial \Phi_v}{\partial y} = 0 \text{ (partout)},$$

A vrai dire, une telle fonction n'existe pas car d'un c\u00f4t\u00e9 :

$$\frac{\partial \Phi_v}{\partial x \partial y} = v' \delta(y-h), \text{ et de l'autre c\u00f4t\u00e9 : } \frac{\partial \Phi_v}{\partial y \partial x} = 0,$$

mais on peut trouver une fonction qui satisfait approximativement \u00e0 ces exigences :

$$\Phi_v(x, y) = \frac{v'x}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{y-h-\delta h}{\delta h}\right), \quad \delta \ll 1.$$

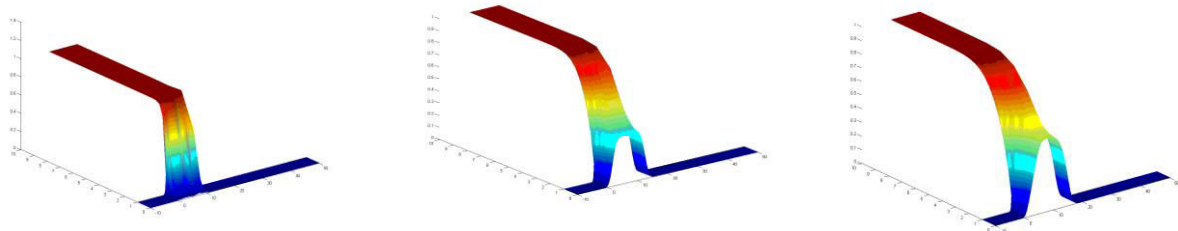
Un tel \u00e9coulement est presque uniforme (par rapport \u00e0 y) loin de $y=h$, mais faiblit brusquement \u00e0 proximit\u00e9 de $y=h$.

Le problème de départ est posé dans le domaine illimité dans la direction x , ainsi que dans la direction y , mais, évidemment, le domaine de calcul doit être limité. Les limites supplémentaires doivent être installées le plus loin possible du centre géométrique du domaine. Sur les frontières « fictives », nous avons posé des conditions limites de type classique. Pour le cas où la convection est présente, nous supposons que loin de la zone d'articulation (où l'on a installé les limites fictives) la dérivée normale de la concentration peut être négligée : nous utilisons donc une condition de Neumann avec une dérivée nulle. La matière ne quitte donc le système que grâce au flux de convection à travers la frontière fictive. Pour le cas où la convection est absente, la même condition limite conduirait à la conservation de la matière dans le système, ce qui n'est pas physique. C'est pourquoi nous avons alors posé sur la frontière fictive une condition limite de Dirichlet avec une concentration nulle estimant qu'assez loin du centre du système, le niveau de concentration baisse assez vite.

§ 4.8 Résultats de modélisation

Dans le cas de forte convection la matière ne pénètre presque pas à gauche du réservoir. Pour cette raison, nous avons construit un maillage asymétrique (voir fig.4.2) afin d'économiser les ressources de calcul.

Sur les figures 4.4, 4.6-8 sont présentés les résultats de la modélisation pour trois cas typiques traités analytiquement dans le chapitre précédent : forte convection, convection modérée, pas de convection et le cas de forte convection dans une géométrie modifiée, plus proche à celle du système réel.



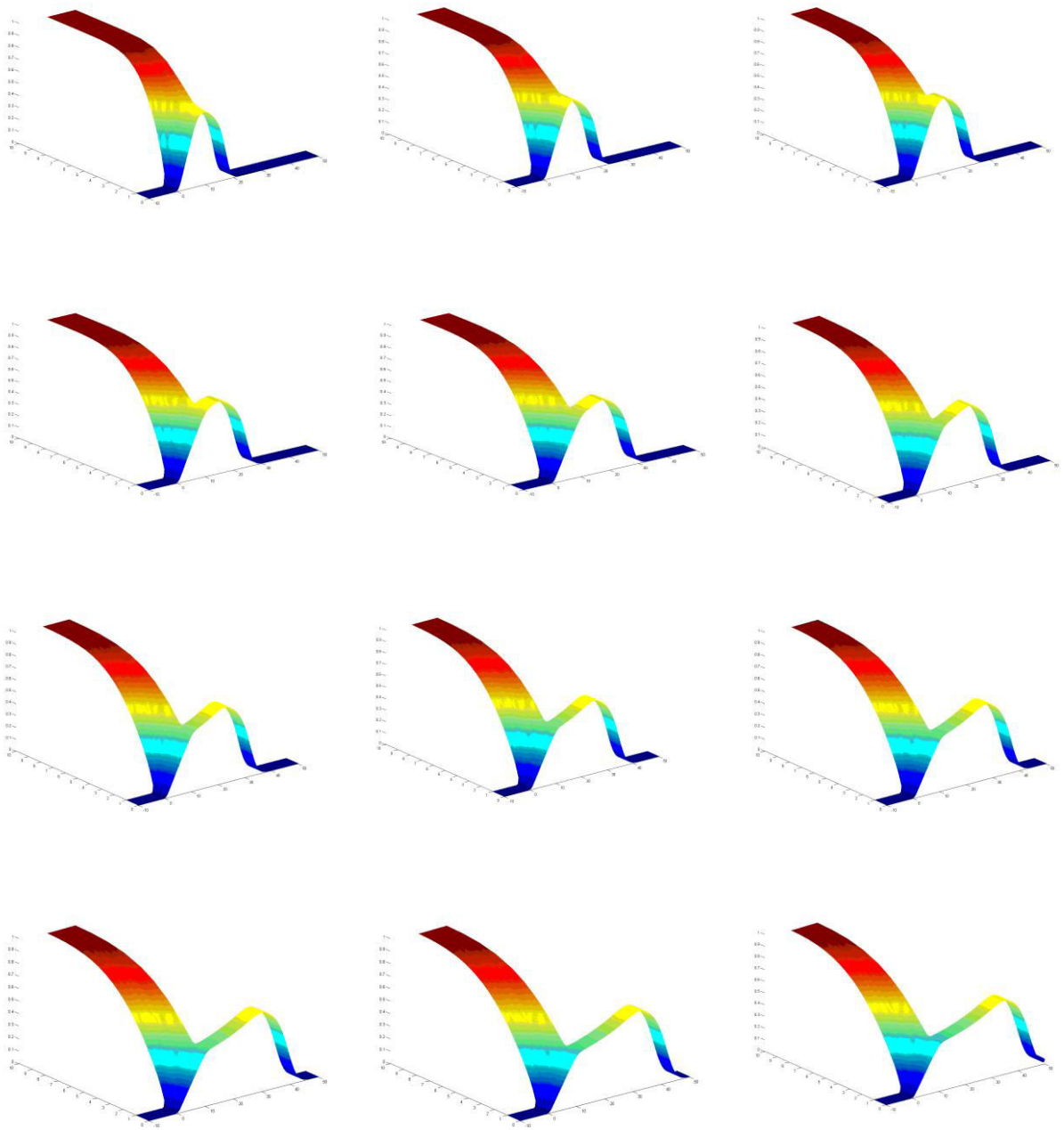


Fig.4.4 Balayage d'un réservoir : résultats de modélisation numérique $Pe = 50$, $h/l = 1/10$, $D_w = D_g$, $\sigma = 1$,
 A comparer avec les estimations théoriques (fig. 9)

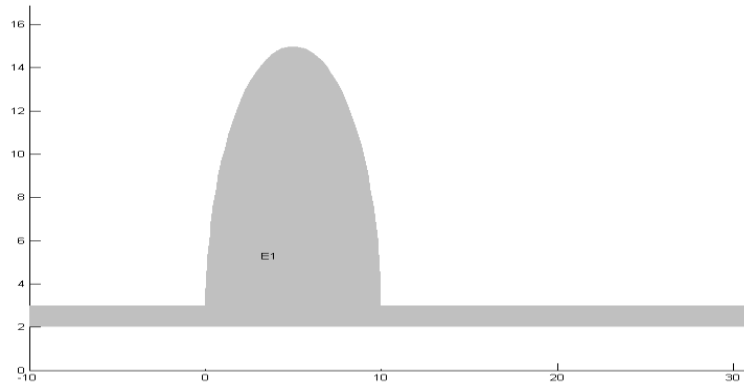
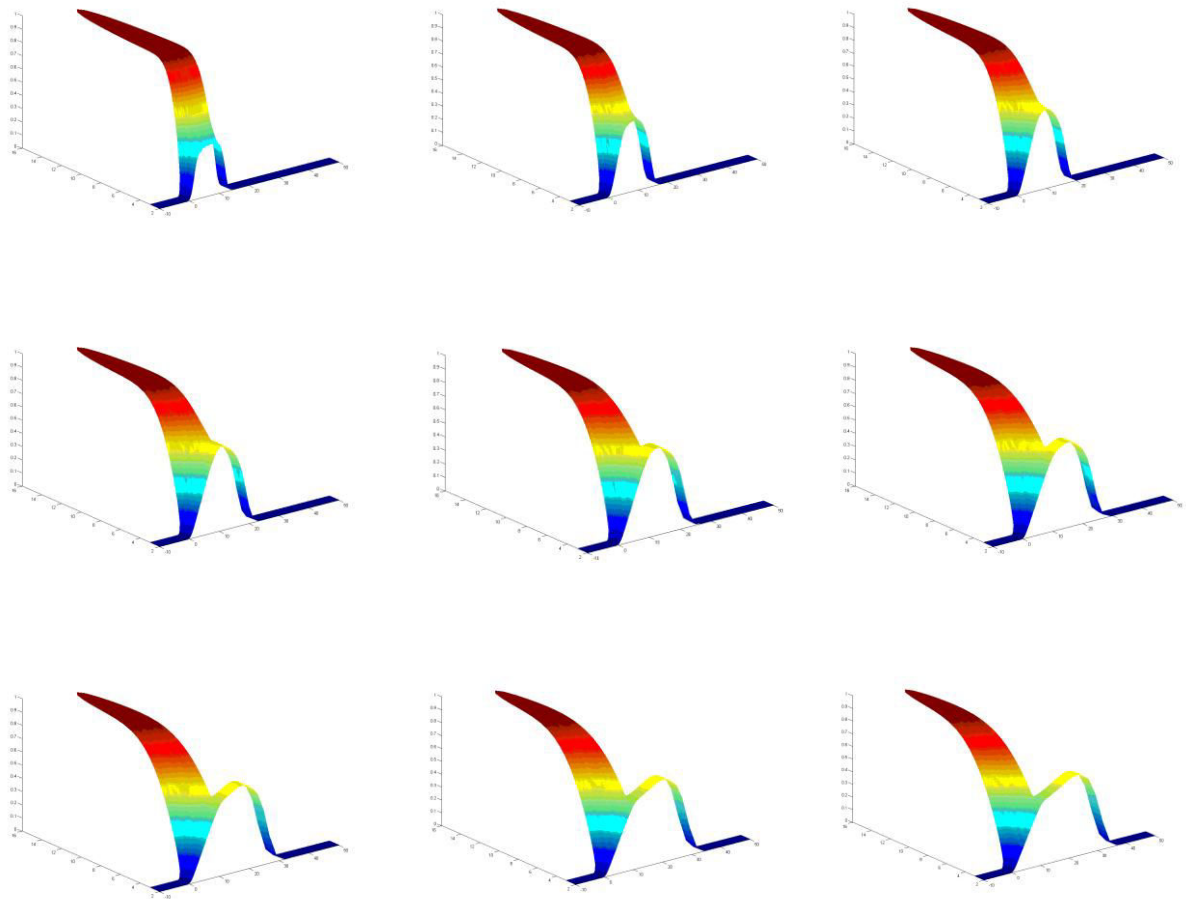


Fig.4.5 Géométrie plus réaliste du système réservoir-aquifère.



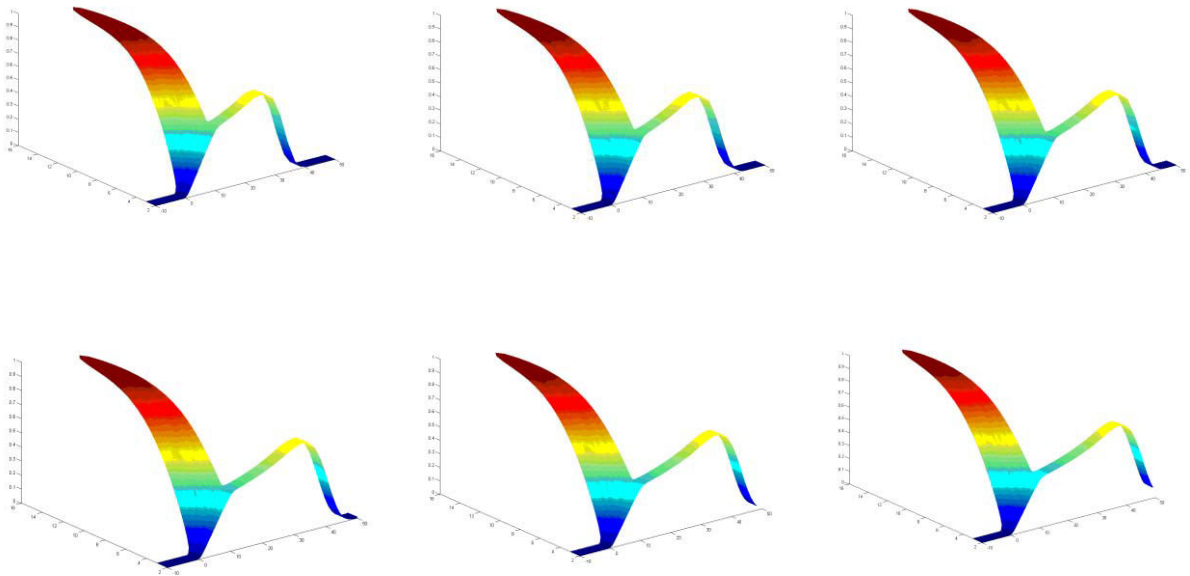
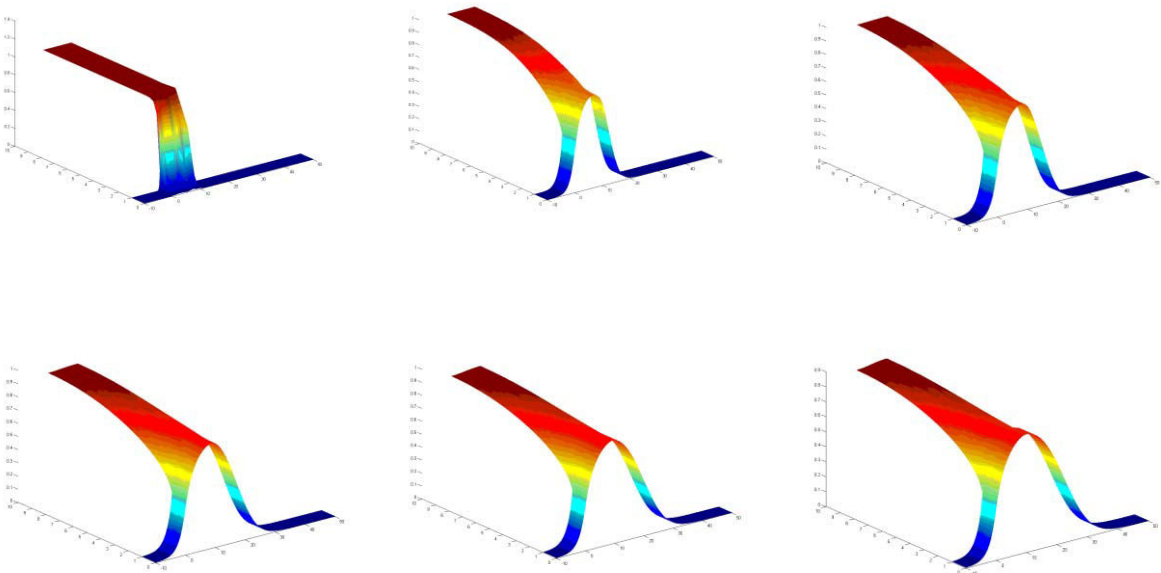


Fig. 4.6 Balayage d'un réservoir : résultats de modélisation numérique $Pe = 50$, $h/l = 1/10$, $D_w = D_g$, $\sigma = 1$,
 A comparer avec les estimations théoriques (la géométrie du domaine est identique à la fig. 5).



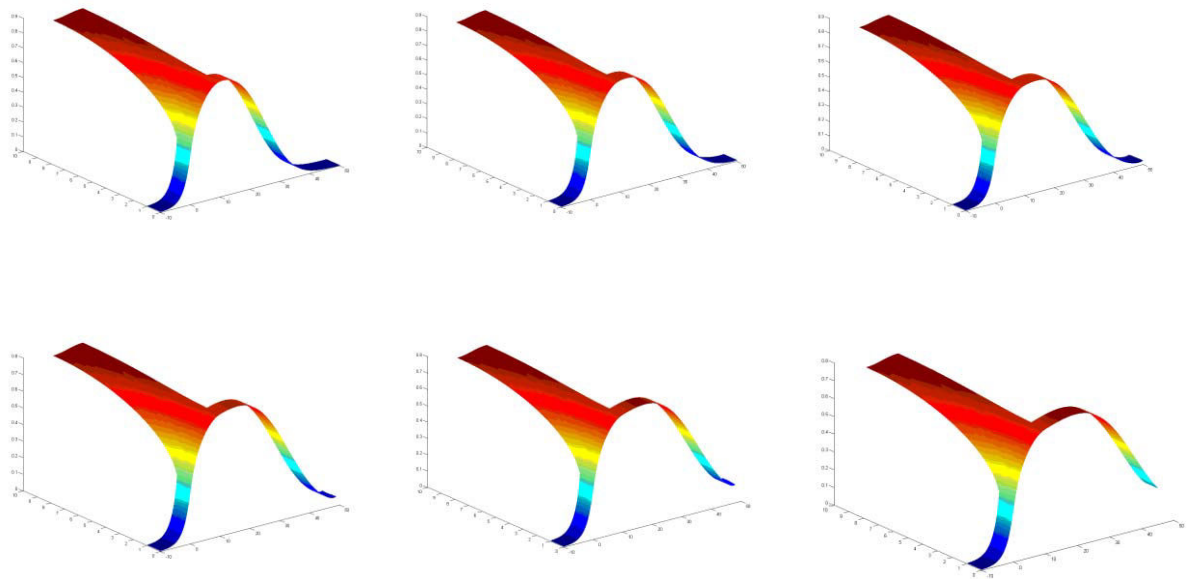
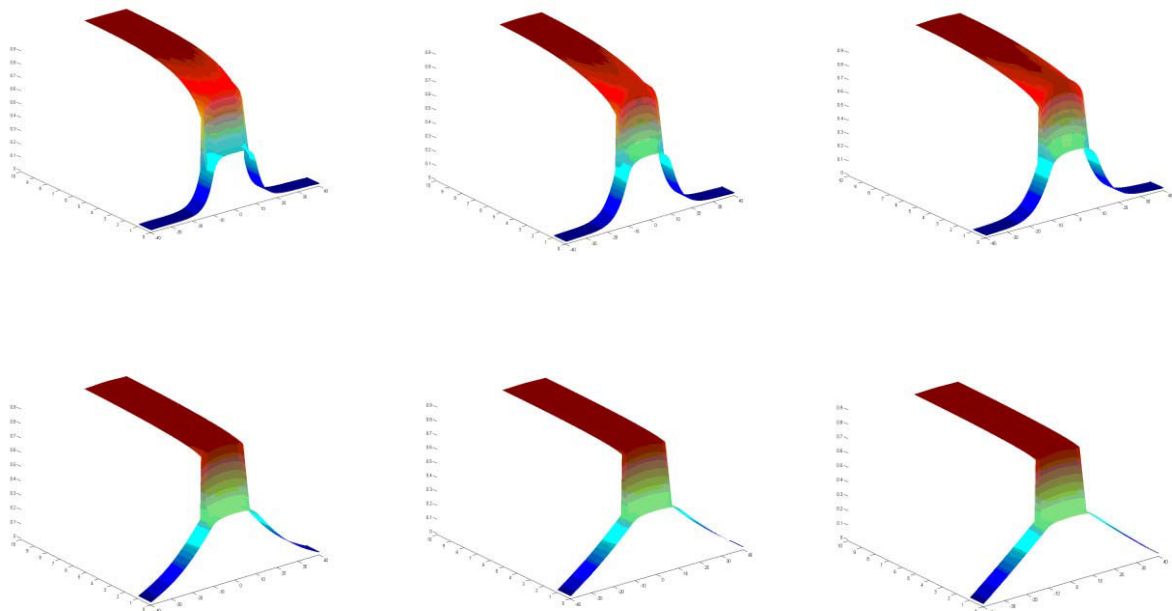


Fig.4.7 Balayage d'un réservoir : résultats de modélisation numérique $Pe = 5$, $h/l = 1/10$, $D_w = D_g$, $\sigma = 1$.

La résolution temporelle de cette série de calculs est 10 fois inférieure à celle du cas précédent.



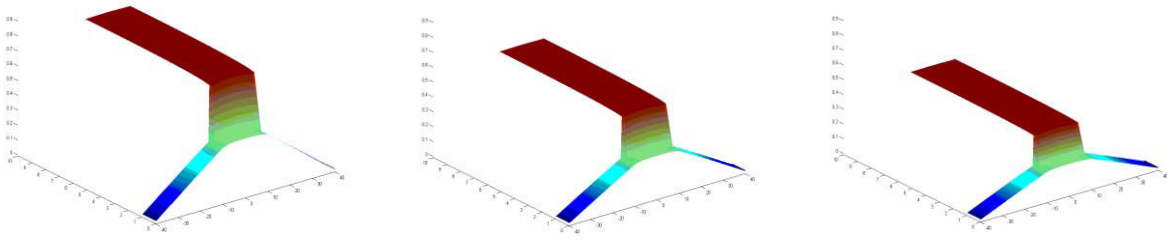


Fig.4.8 Balayage d'un réservoir sans convection : distribution de la concentration aux instants :

$$t = 0.1, 0.2, 0.3, 1, 2, 3, 10, 20, 30 \times l^2 / 4D_w, \sigma = 1/2.$$

Les résultats de la simulation numérique, de point de vue qualitatif, se trouvent en accord avec les estimations théoriques faites au chapitre précédent.

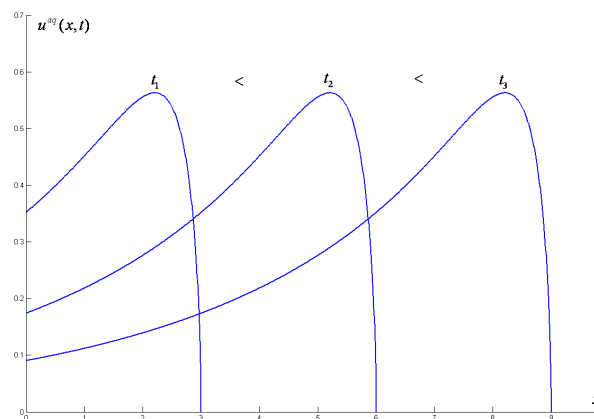


Fig.4.9 Comportement théorique de la concentration à la sortie de l'aquifère en fonction de temps ($Pe \rightarrow \infty$)

Pour le cas de forte convection, la propagation de l'onde de concentration à la sortie de l'aquifère que nous avons calculée est similaire à celle théorique (voir fig. 4.9) sauf une dissipation du front de concentration qui a lieu dans le calcul. La solution analytique obtenue dans le chapitre précédent, possède la propriété suivante :

$$\frac{\partial u^{aq+}(l/2, 0)}{\partial t} = \infty,$$

et, par conséquent, possède un gradient infini au point mobile :

$$X(t) = vt - l/2.$$

Dans la zone $x > X(t)$, la concentration est nulle. Nous pouvons donc parler d'un front de concentration. A l'exception du point $X(t)$, le champ de concentration est assez lisse en fonction de la coordonnée. Mais, évidemment, si dans le système il y a la moindre diffusion, l'existence d'un front est impossible, il sera dissipé. Mais comme, la diffusion reste faible, elle n'apparaît que sur le front. La concentration après le front, visiblement, ne subit pas de dissipation, elle est transportée uniformément dans le temps. L'estimation théorique donne donc un résultat plutôt bon, hors du front.

En l'absence de convection, les calculs confirment les estimations théoriques : il y a un processus transitoire d'équilibration entre le réservoir et l'articulation qui se passe très vite ; après la fin de ce processus transitoire, le réservoir se trouve en quasi équilibre avec une concentration du réservoir quasi uniforme. Dans le cas d'un réservoir infini, la concentration dans le réservoir reste, de plus, constante dans le temps, mais dans un réservoir fini elle baisse assez lentement sans perturber l'équilibre.

Le cas que dans le chapitre précédent nous avons appelé le cas de forte érosion est impossible à modéliser numériquement en utilisant l'algorithme développé, puisque son nombre de Péclet dépasse la limite de stabilité numérique du schéma (voir fig. 4.10)

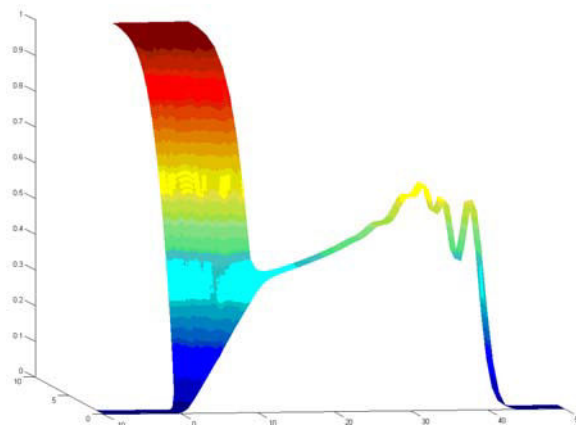


Fig. 10 Instabilité numérique observée dans le cas de grands nombres de Péclet (ici $Pe = 70$).

Le calcul présenté sur les figs. 4.5 et 4.6 ($Pe = 50$) est réalisé quasiment à la limite de stabilité du schéma. Pour le cas de convection modérée, nous n'avons pas de solution analytique définitive dans l'espace réel (uniquement dans l'espace de Laplace) pour faire une comparaison avec les résultats de modélisation.

Chapitre 5. Convection forcée dans les champs croisés de diffusion et de chaleur.

§ 5.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude analytique des écoulements dans un liquide placé dans des champs de gravité et chaleur croisés, c'est-à-dire tels que les vecteurs ∇T et \mathbf{g} ne soient pas colinéaires. La variation de température produit une expansion thermique du liquide et donc une variation de masse volumique qui dans le champ de pesanteur va générer un moment de rotation forçant le liquide à effectuer un mouvement rotatif.

Les mouvements convectifs peuvent entraîner une ségrégation compositionnelle dans des systèmes très allongés selon la direction verticale (parallèle à \mathbf{g}). De tels systèmes sont connus pour leur capacité à séparer différentes espèces chimiques d'un mélange bicomposé et, par exemple, sont appliqués dans l'industrie (les colonnes thermo-gravitationnelles à séparation des isotopes dont une description détaillée du principe de fonctionnement est exposée dans la revue [7]) depuis les années 1930. Outre ces systèmes artificiels, des configurations de champs de gravité et température permettant une séparation des composants d'un mélange peuvent se rencontrer dans la nature [28, 29] : des réservoirs souterrains d'hydrocarbures de grande profondeur situés à proximité d'une forte source de chaleur peuvent servir de systèmes de séparation compositionnelle.

§ 5.2 Ségrégation thermo-gravitationnelle dans une colonne infinie

Pour illustrer la possibilité d'une séparation des composants, étudions le bilan de quantité de matière dans une colonne et obtenons la loi de changement de la composition chimique de long de la colonne dans une situation très simple.

Examinons une colonne verticale (une couche) infinie (voir fig. 5.1) de liquide avec un gradient constant de température dans la direction perpendiculaire à la colonne. Le liquide dans la colonne est un mélange bicomposé.

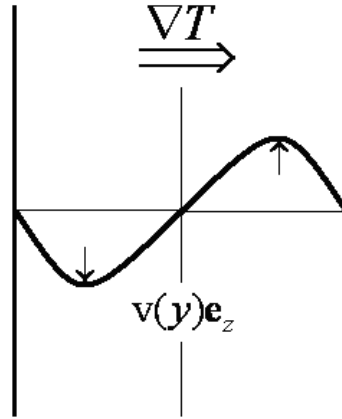


Fig. 5.1. A illustration du principe de séparation compositionnelle.

Admettons que, le long de la colonne, il y ait un écoulement parallèle et que le profil de la vitesse soit antisymétrique de telle manière le flux de convection dans le plan médian de la colonne soit égal à zéro. Il y a donc un flux de convection ascendant et un flux descendant.

Le gradient de température cause une ségrégation compositionnelle par thermodiffusion (effet Soret) : la partie droite de la colonne (où le flux convectif monte) sera enrichie en composant léger par rapport à la partie gauche. En l'absence d'écoulement, la séparation compositionnelle n'aurait lieu que dans la direction horizontale et comme la colonne est assez limitée dans la direction horizontale, une telle séparation serait faible. La présence de la convection change qualitativement la situation, les flux ascendant et descendant (de même débit) ont des compositions chimiques différentes entraînant un flux convectif dirigé vers le haut de composant léger. Dans l'état équilibre (stationnaire), ce flux doit être compensé par le flux de diffusion dirigé vers le bas. Le flux de diffusion existe du fait du gradient vertical de composition chimique moyenne sur la section de la colonne.

Le bilan stationnaire de quantité d'un composant d'un mélange binaire, baro-diffusion négligée, est suivant (voir § 1.3) :

$$\nabla \cdot \{ \rho (c\mathbf{v} - D(\nabla x + k_T \nabla \log T)) \} = 0,$$

où $x(y, z)$ et $c(y, z)$ sont les fractions molaire et massique en composant léger en fonction des coordonnées, liées par les relations :

$$c = \frac{m_{\text{léger}} x}{m_{\text{léger}} x + m_{\text{lourd}} (1 - x)} \Leftrightarrow x = \frac{c / m_{\text{léger}}}{c / m_{\text{léger}} x + (1 - c) / m_{\text{lourd}}}, \quad (5.1)$$

$v(y)$ est la vitesse d'écoulement en fonction de la coordonnée horizontale, D est le coefficient de diffusion. Examinons le bilan semi-intégral (intégré sur la section de la colonne) de quantité du composant léger :

$$\int_{-L/2}^{L/2} c(y, z) \cdot v(y) dy = D \frac{d}{dz} \int_{-L/2}^{L/2} x(y, z) dy, \quad (5.2)$$

le domaine $-L/2 \leq y \leq L/2$ représente la section perpendiculaire de la colonne, le terme $k_T \nabla \log T$ ne contribue pas dans le bilan (5.2) puisque $dT/dz = 0$. Comme :

$$\int_{-L/2}^{L/2} v(y) dy = 0,$$

la valeur moyenne sur $-L/2 \leq y \leq L/2$ de la fraction massique \bar{c} ne contribue pas à la partie gauche de l'équation (5.1) :

$$\int_{-L/2}^{L/2} c(y, z) \cdot v(y) dy = \int_{-L/2}^{L/2} \delta c(y, z) \cdot v(y) dy,$$

où

$$\delta c = c - \bar{c} \text{ et } \bar{c}(z) = L^{-1} \int_{-L/2}^{L/2} c(y, z) dy,$$

sont la variation verticale et la valeur moyenne de la fraction massique. On peut supposer que

$$|\delta c| \ll \bar{c} \text{ ou } |\delta x| \ll \bar{x}.$$

Suite à la faiblesse de séparation horizontale (par thermodiffusion), dans une première approche la variation de la composition exprimée en termes de δc ou δx comme fonction de la coordonnée horizontale peut être supposée linéaire :

$$\delta x = y \cdot G_{\perp}(\bar{x}), \quad (5.3)$$

où la fonction $G_{\perp}(\bar{x})$ exprime la puissance de séparation horizontale des composants (voir § 1.5 ou le livre [13] pour le coefficient de thermodiffusion):

$$G_{\perp} \approx k_T(\bar{x}) \frac{\Delta T}{\bar{T}} = \varepsilon \bar{x}(1 - \bar{x}) \frac{m_{\text{lourd}} - m_{\text{léger}}}{m_{\text{léger}} \bar{x} + m_{\text{lourd}}(1 - \bar{x})} \frac{\Delta T}{\bar{T}}, \quad (5.4)$$

$\Delta T / \bar{T}$ est la différence des températures sur les bords latéraux de la colonne rapportée à la température moyenne. On peut trouver à partir des relations (5.1) que :

$$\frac{dc}{dx} = \frac{m_{\text{lourd}} m_{\text{léger}}}{\{m_{\text{léger}} x + m_{\text{lourd}} (1-x)\}^2},$$

La variation verticale de la fraction massique vérifie alors :

$$\delta c = \frac{m_{\text{lourd}} m_{\text{léger}}}{\{m_{\text{léger}} \bar{x} + m_{\text{lourd}} (1-\bar{x})\}^2} \delta x,$$

Ou encore, compte tenu de (5.3) et (5.4) :

$$\delta c = y \cdot \varepsilon \bar{x} (1-\bar{x}) \frac{m_{\text{lourd}} m_{\text{léger}} (m_{\text{lourd}} - m_{\text{léger}}) \Delta T}{\{m_{\text{léger}} \bar{x} + m_{\text{lourd}} (1-\bar{x})\}^3 \bar{T}}.$$

En substituant $\delta c(y, z)$ dans l'équation de bilan (5.1), nous arrivons à l'équation différentielle ordinaire du premier ordre pour la fonction $\bar{x}(z)$:

$$\frac{d\bar{x}}{dz} = \frac{1}{\lambda} \bar{x} (1-\bar{x}) \frac{m_{\text{lourd}} m_{\text{léger}} (m_{\text{lourd}} - m_{\text{léger}})}{\{m_{\text{léger}} \bar{x} + m_{\text{lourd}} (1-\bar{x})\}^3}, \quad (5.5)$$

où λ est un paramètre ayant la dimension d'une longueur défini par :

$$\frac{1}{\lambda} = \varepsilon \frac{\Delta T}{L \bar{T}} \frac{M}{D} = \varepsilon \frac{|\nabla T|}{\bar{T}} \frac{M}{D}$$

où :

$$M = \int_{-L/2}^{L/2} y \cdot v(y) dy$$

représente le moment de rotation d'un segment de hauteur unitaire rapporté à la masse volumique. Un profil de fraction molaire du composant léger est montré sur la fig. 5.2

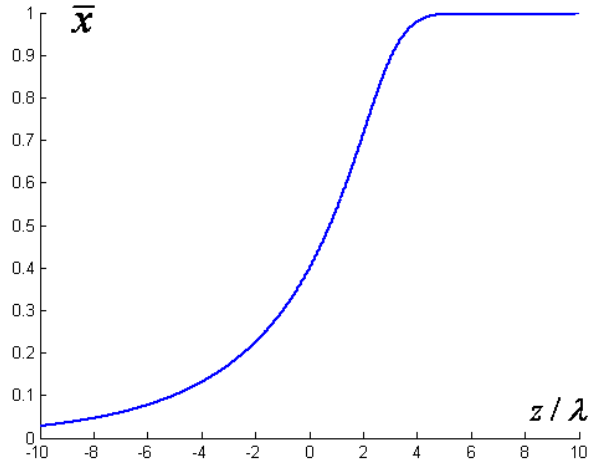


Fig. 5.2 Fraction molaire du composant léger dans une colonne infinie pour un rapport de masse :

$$m_{\text{lourd}} / m_{\text{léger}} = 2$$

Le profil de fraction molaire montré sur la fig. 5.2 ne peut se réaliser que dans une colonne extrêmement longue. Si c'est n'est pas le cas, la ségrégation sera loin d'être complète.

Jusqu'ici nous analysons le problème en supposant que l'écoulement convectif est donné, ce qui signifie que le problème hydrodynamique peut être séparé du problème de diffusion. Mais une telle séparation n'est possible que dans le cas où l'on peut négliger l'effet du changement de la masse volumique avec le changement de la composition chimique qui, à son tour, n'est possible que dans deux cas :

- soit on sait a priori que la ségrégation compositionnelle sera loin d'être complète,
- soit il s'agit du mélange de deux isotopes de la même espèce chimique, le remplacement d'un composant par l'autre influençant très peu la masse volumique du mélange.

Dans le problème de séparation compositionnelle que nous avons examiné, la seule caractéristique de l'écoulement entrant dans le résultat final est le moment rotatif spécifique M .

§ 5.3 Enoncé du problème pour des écoulements stationnaires non inertiels

L'état hydrostatique d'un liquide placé dans les champs de gravité et température n'est possible que dans le cas où \mathbf{g} et ∇T sont parallèles (plus précisément : les équations du mouvement admettent alors une solution hydrostatique qui néanmoins peut être instable). Si les champs de gravité et de température ne sont pas colinéaires, le liquide effectue un mouvement à caractère rotatif. Une variation de température, dans la direction perpendiculaire à \mathbf{g} , cause, sous l'effet de l'expansion thermique, une variation de la masse volumique dans la même direction. Comme on le voit sur la fig. 5.3, la force de gravité appliquée à une telle distribution de masse volumique génère un moment de rotation.

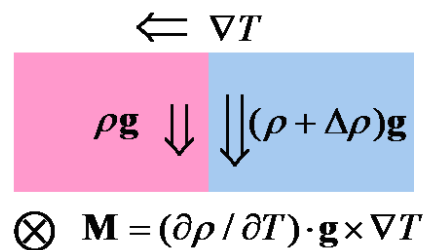


Fig. 5.3. Illustration du principe de génération d'un moment rotatif dans des champs croisés de gravité et de température

Formellement, l'existence d'un écoulement convectif vient du fait que la force de pression ∇p est par définition potentielle et irrotationnelle :

$$\nabla \times \nabla p \equiv 0,$$

mais la force de gravité possède une rotation égale à :

$$\nabla \times (\rho \mathbf{g}) = \frac{\partial \rho}{\partial T} \mathbf{g} \times \nabla T,$$

On constate donc qu'il n'existe pas de champ de pression dont le gradient pourrait équilibrer la totalité de la force gravitationnelle.

Un écoulement a lieu indépendamment du type d'équation de mouvement du liquide. Nous examinons trois modèles non-inertiels de mouvement : de Stokes (l'équation de Navier-Stokes s'y réduit dans le cas $Re \rightarrow 0$), Brinkman et Darcy. Le modèle d'écoulement de Brinkman représente une généralisation de la loi de Darcy prenant en compte les cisaillements

entre les couches du fluide. Ce modèle a été proposé initialement par Brinkman [6] et peut être déduit à partir de l'équation de Stokes, décrivant l'écoulement microscopique (à l'échelle des pores), au moyen d'une homogénéisation spatiale [33]. Les modèles non-inertiels d'écoulement, pour l'essentiel, sont un bilan entre les forces motrices et dissipatives. La dissipation joue un rôle définitif dans l'établissement du régime stationnaire. Comme la source externe d'énergie est inépuisable, sans dissipation le liquide devrait être accéléré jusqu'à l'infini, mais la dissipation établit une limite supérieure à l'intensité du mouvement pour laquelle la dissipation de l'énergie dépasse la génération. Cet écoulement limite est celui que nous cherchons.

Dans le cas de l'écoulement de Darcy, l'origine de la dissipation est la résistance au mouvement $\sim -\mathbf{v}$ que le fluide subit de la part de la matrice solide. Dans le cas de l'écoulement de Stokes la dissipation d'énergie s'effectue au moyen des cisaillements ($\sim \Delta \mathbf{v}$). Dans le cas d'écoulement de Brinkman, les deux mécanismes de dissipation sont inclus (mais le coefficient devant le terme $\Delta \mathbf{v}$ n'est pas identique à la viscosité). Le terme de contraintes visqueuses qui distingue l'équation de Brinkman de l'équation de Darcy est introduit comme une correction d'un ordre de grandeur inférieur au terme de Darcy, mais il joue néanmoins le rôle important pour certains régimes d'écoulement. Par exemple l'interaction entre les tourbillons, qui ont lieu dans la convection de Rayleigh, n'est possible qu'au travers du cisaillement entre les différentes couches de liquide qui s'expriment au moyen du terme $\Delta \mathbf{v}$. De plus, le terme $\sim \Delta \mathbf{v}$ est responsable de la formation d'une couche limite, puisque ce terme augmente l'ordre de l'équation du mouvement et le nombre des conditions limites. L'épaisseur caractéristique de la couche limite est une propriété interne du liquide et ne dépend pas des dimensions du réservoir. Si l'une des dimensions du réservoir est comparable à l'épaisseur de la couche limite, l'écoulement sera remarquablement affaibli.

Toutes ces équations du mouvement traduisent, fondamentalement, l'égalité entre les forces de pression et gravité et la force dissipative correspondant au retour d'un opérateur différentiel linéaire appliqué à la vitesse :

$$\mathcal{L}\mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g}, \quad (5.6)$$

La partie droite est commune à toutes les équations mais l'opérateur \mathcal{L} est différent.

Nous examinons les écoulements plans symétriques dans le plan (x, y) en supposant que $\partial T / \partial z = 0$, $g_z = 0$. La masse volumique est la somme de la valeur moyenne et d'une variation :

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho(T),$$

La dépendance en composition chimique est négligée dans la masse volumique. L'équation (5.6) peut être réécrite comme :

$$\mathcal{L}\mathbf{v} + \nabla(p - \Phi_0) + \mathbf{F}_A = 0, \quad (5.7)$$

où

$$\Phi_0 = \rho_0 \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}$$

est le potentiel gravitationnel moyen,

$$\mathbf{F}_A = \delta\rho(T)\mathbf{g}$$

est la force d'Archimède. L'opérateur différentiel \mathcal{L} , sous forme générale, est une combinaison linéaire de l'opérateur unitaire et de l'opérateur de Laplace :

$$\mathcal{L} = c_1 - c_2 \Delta.$$

Dans le cas de l'écoulement de Stokes : $c_1 = 0$, et $c_2 = \eta$ où η est la viscosité dynamique du liquide ; dans le cas de l'écoulement de Darcy, $c_2 = 0$ et $c_1 = \eta / K$ est le rapport de la viscosité dynamique du liquide et de la perméabilité du milieu poreux; dans le cas d'un écoulement de Brinkman, les deux coefficients sont positifs $c_1 > 0$, $c_2 > 0$.

Dans l'approche de Boussinesq, le liquide peut être considéré comme incompressible dans l'équation de continuité:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (5.8).$$

De l'équation (5.8), il suit que les composantes cartésiennes de la vitesse peuvent être exprimées en termes d'une fonction de courant:

$$v_x = \frac{\partial A}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial A}{\partial x}, \quad v_z = 0.$$

Appliquons l'opération de rotation $\nabla \times$ à l'équation (5.7), compte tenu que la rotation d'un gradient est zéro et que $\nabla \times$ et Δ , dans le cas plan-symétrique, commutent :

$$\mathcal{L}\Delta A = \{\mathbf{g} \times \nabla \rho\}_z. \quad (5.9)$$

Le scalaire ΔA représente la valeur absolue du tourbillon de vitesse $\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{e}_z \Delta A$.

La partie droite de l'équation (5.9) s'écrit

$$\{\mathbf{g} \times \nabla \rho\}_z = g(d\rho/dT)|\nabla T| \sin \Theta$$

où $\sin \Theta$ est le sinus de l'angle entre le gradient de température et la force gravitationnelle, supposé constant. Admettons que $d\rho/dT = \text{const}$ et que $\nabla T = \text{const}$, alors toute l'expression $(\nabla \times \mathbf{F}_A)_z$ est une constante que nous notons μ . La partie droite de l'équation (5.9), qui est constante, ne change pas lorsque l'on tourne le réservoir dans le plan (x, y) . De plus, la gravité n'entre pas explicitement dans la distribution de composition chimique obtenue au § 5.2. L'effet de la convection forcée et la ségrégation thermo-gravitationnelle doit avoir lieu même dans des réservoirs étendus dans la direction horizontale.

En substituant la vitesse exprimée au moyen de la fonction de courant dans (5.9), nous trouvons que cette fonction de courant satisfait à une équation non homogène du 4^{ème} ordre :

$$(c_1 - c_2 \Delta) \Delta A = \mu, \quad (5.10)$$

Le nombre de conditions limites nécessaires dépend de la valeur du coefficient c_2 .

Si $c_2 = 0$, ce qui signifie que l'écoulement obéit à loi de Darcy, il suffit d'une seule condition limite qui consiste en l'imperméabilité des bords du réservoir :

$$v_n = \left. \frac{\partial A}{\partial t} \right|_{\partial \Omega} = 0,$$

où t est la coordonnée tangente sur la frontière, ou de manière équivalente :

$$A|_{\partial \Omega} = \text{const}.$$

La valeur de cette constante n'a aucune importance puisqu'elle ne contribue pas au calcul de la vitesse. Si $c_2 \neq 0$ l'équation (5.10) a besoin d'une condition limite supplémentaire qui consiste en l'adhésion de la couche limite aux bords du réservoir :

$$v_t = -\frac{\partial A}{\partial n}\Big|_{\partial\Omega} = 0.$$

En sommant les deux conditions limites, nous trouvons que :

$$\nabla A\Big|_{\partial\Omega} = 0. \quad (5.11)$$

§ 5.4 Solutions analytiques pour les écoulements non-inertiels.

Dans le cas d'écoulement de Stokes : $c_1 = 0$, $c_2 = \eta$, l'équation (5.10) se réduit à l'équation biharmonique non homogène :

$$\Delta^2 A = \mu / \eta. \quad (5.12)$$

L'énoncé mathématique du problème (5.11)-(5.12) est identique au problème de la flexion transversale statique d'une membrane élastique fixée sur sa limite dans un champ de force appliqué [45, 26]. Le problème pour l'équation biharmonique non homogène avec les conditions limites de Dirichlet (5.11) a été examiné d'un point de vue numérique dans [5].

Examinons un cas particulier où la solution satisfaisant aux conditions limites peut être trouvée facilement. Soit le domaine Ω dans le plan (x, y) représentant une figure du second ordre (une section conique) donnée par l'équation :

$$P_2(x, y) = 0,$$

où $P_2(x, y)$ est un polynôme de 2nd ordre. La fonction définie de la façon suivante :

$$A(x, y) = A_0 P_2^2(x, y),$$

est un polynôme de 4^{ème} ordre égal à une constante après application de l'opérateur Δ^2 , donc, est une solution particulière de l'équation (5.12). D'autre part, la fonction $A(x, y)$ satisfait aux deux conditions limites, puisque :

$$\nabla A(x, y) = 2A_0 P_2(x, y) \nabla P_2(x, y),$$

mais par définition :

$$P_2(x, y)|_{\partial\Omega} = 0,$$

et donc :

$$\nabla A|_{\partial\Omega} = 0.$$

Les figures du 2nd ordre qui présentent pour nous un intérêt pratique sont les ellipses, puisqu'elles sont fermées. Soient a et b les demi-axes de l'ellipse, alors :

$$P_2(x, y) = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - 1,$$

la constante A_0 s'obtient après substitution $A(x, y) = A_0 P_2^2(x, y)$ dans l'équation (5.11) :

$$A_0 = \frac{\mu}{\eta} \left(24 \left(\frac{1}{a^4} + \frac{1}{b^4} \right) + \frac{4}{a^2 b^2} \right)^{-1}.$$

Finalement la fonction de courant est la suivante :

$$A = A_0 \left(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - 1 \right)^2,$$

Les lignes de courant dans le réservoir sont une famille d'ellipses dont le facteur de forme est fixe :

$$a/b = \text{const}.$$

Un cas particulier de réservoir elliptique est celui pour lequel $a/b = \infty$: dans ce cas l'ellipse dégénère en deux droites parallèles soit une couche infinie.

Dans le cas où la vitesse satisfait à l'équation de Brinkman, il apparaît une distance caractéristique interne qui s'exprime au moyen des coefficients c_2 et c_1 (dont le rapport est de dimension L^2) :

$$\lambda_{\text{int}} \sim \sqrt{c_2 / c_1}.$$

Nous allons démontrer que, si la distance λ_{int} est petite comparée aux dimensions du réservoir, le terme de Brinkman dans l'équation de mouvement ne produit pas d'autres effets qu'une couche limite, et loin des bords, la vitesse est identique ou presque à celle correspondant au cas de l'écoulement de Darcy. Il est commode d'introduire des coordonnées adimensionnelles. Soit l la dimension caractéristique du domaine. Dénotons les anciennes coordonnées dimensionnelles par x' et y' et réservons la notation x et y pour les coordonnées adimensionnalisées : $x = x'/l$, $y = y'/l$. L'équation pour la fonction $A(x, y)$ prend la forme :

$$\Delta(1 - \varepsilon^2 \Delta)A = \mu l^2 / c_1 \quad (5.13)$$

où $\Delta = l^2 \Delta'$ est, maintenant, l'opérateur adimensionnalisé de Laplace. La valeur

$$\varepsilon^2 = c_2 / (c_1 l^2)$$

est un paramètre adimensionnel. La limite $\varepsilon = 0$ correspond à l'écoulement pur de Darcy. Soit la fonction de courant $A^{\text{Darcy}}(x, y)$ solution du problème :

$$\begin{aligned} \Delta A^{\text{Darcy}} &= \mu l^2 / c_1 \\ A^{\text{Darcy}} \Big|_{\partial\Omega} &= \text{const} \end{aligned} \quad (5.14)$$

Outre la satisfaction à l'équation (5.14), la fonction $A^{\text{Darcy}}(x, y)$ représente une solution particulière de l'équation plus générale (5.13) (mais n'est pas la solution du problème (5.11)-(5.13) car elle ne satisfait pas aux deux conditions limites). La solution complète de l'équation (5.13), se compose de la solution générale homogène A^{gh} et d'une solution particulière non homogène A^{Darcy} :

$$A = A^{\text{Darcy}} + A^{\text{gh}},$$

$$\Delta(1 - \varepsilon^2 \Delta)A^{\text{gh}} = 0,$$

choisies de telle façon que leur superposition satisfasse aux conditions limites (5.11). La fonction $A^{\text{gh}}(x, y)$ est la fonction de la couche limite. Les solutions exactes de l'équation

(3.13) peuvent être obtenues dans les cas où le réservoir possède une symétrie. Dans le cas où le réservoir est une couche parallèle infinie de demi-épaisseur l :

$$A(y) = \mu l^2 \left(\frac{y^2}{2} - \varepsilon \frac{\cosh(y/\varepsilon)}{\sinh(1/\varepsilon)} \right), \quad v_x(y) = \mu l \left(y - \frac{\sinh(y/\varepsilon)}{\sinh(1/\varepsilon)} \right),$$

où $\mu l^2 y^2 / 2 = A^{\text{Darcy}}(y)$. Dans le cas d'un réservoir circulaire de rayon l :

$$A(r) = \frac{\mu l^2}{2} \left(\frac{r^2}{2} - \frac{\varepsilon I_0(r/\varepsilon)}{I_0'(1/\varepsilon)} \right), \quad v_\varphi(r) = \frac{\mu l}{2} \left(r - \frac{I_0'(r/\varepsilon)}{I_0'(1/\varepsilon)} \right),$$

où $\mu l^2 r^2 / 4 = A^{\text{Darcy}}(r)$ (correspond à une rotation de solide), I_0 et I_0' sont la fonction de Bessel du premier ordre et sa dérivée. Les profils de vitesse trouvés sont montrés sur la fig. 5.4. Dans le cas où le paramètre $\varepsilon \sim 1$, les écoulements sont faibles suite à une forte dissipation ; dans le cas $\varepsilon \ll 1$, les profils sont asymptotiquement linéaires ce qui correspond à un écoulement de Darcy.

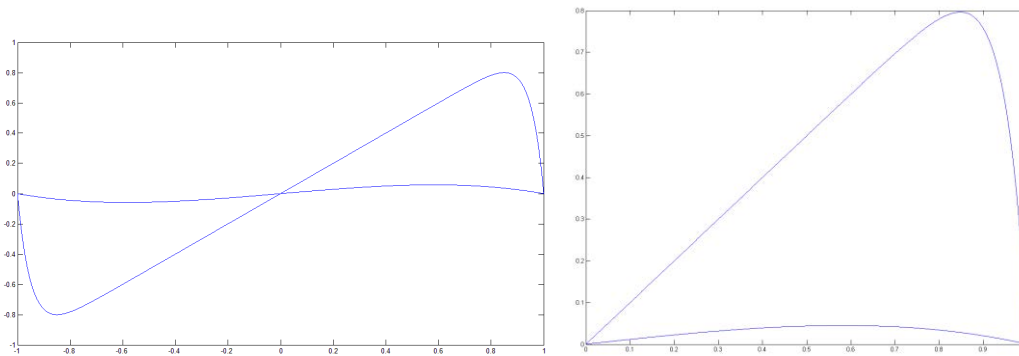


Fig.5.4 Graphiques de $y - \sinh(y/\varepsilon)/\sinh(1/\varepsilon)$ à gauche et $r - I_0'(r/\varepsilon)/I_0'(1/\varepsilon)$ à droite, pour $\varepsilon = 1; 0.1$

Quant au problème de trouver l'écoulement de Darcy, la formulation mathématique :

$$\Delta u = \text{const}, \quad u|_{\partial\Omega} = 0$$

apparaît dans le problème d'écoulement de Poiseuille pour un tube infini de section quelconque (u est la vitesse normale à la section). Ce problème admet des solutions analytiques exposées dans [6] dans un domaine elliptique ou en forme de triangle équilatéral.

Conclusion

Les problématiques étudiées dans cette thèse sont diverses autant pour les sujets examinés que pour la profondeur de l'analyse que nous avons réussi à effectuer. Le chapitre 1 introductif ne prétend pas à quelque nouveauté scientifique, sauf au § 1.3 où nous avons examiné un problème concret de variation de la composition d'un mélange binaire de gaz parfaits dans le champ de gravité à température constante. Nous y avons obtenu explicitement les profils de concentration des composants et de la pression en fonction de la coordonnée verticale.

Dans le chapitre 2 nous avons examiné le problème du transport dissipatif de matière et chaleur dans un milieu multiphasique dans une approche hydrostatique. Les processus de transport dans un milieu hétérogène et le mouvement hydrodynamique au sein du milieu lui-même représentent un très vaste domaine de connaissance, et, évidemment, dans une thèse on ne peut se concentrer que sur un nombre limité des questions. Tout mouvement hydrodynamique étant absent dans notre analyse suite à l'admission d'un état hydrostatique, l'intérêt essentiel a été dirigé vers les processus d'interférence entre les champs microscopiques des paramètres caractérisant l'état thermodynamique du système et les champs microscopiques des coefficients de transport. La méthode d'homogénéisation la plus adaptée pour une telle analyse est la technique à deux échelles.

Nous avons étudié un problème assez général de transport diffusif d'un mélange d'un nombre quelconque de composants accompagné du transport de chaleur dans un milieu multiphasique (et donc hétérogène) de microstructure périodique. La périodicité du milieu est une hypothèse nécessaire pour la méthode de deux échelles. Le modèle de transport de départ comprend les effets croisés introduits en thermodynamique des processus irréversibles. Le but de l'étude était de trouver les coefficients effectifs de transport entrant dans les équations homogénéisées en supposant qu'après homogénéisation les équations du modèle gardent leur type. En qualité de paramètres de base (les fonctions inconnues), nous avons choisi certaines combinaisons des paramètres thermodynamiques continus sur les interphases (la température et les potentiels chimiques des composants).

Dans le cas d'une hétérogénéité quelconque (limitée seulement par la condition de périodicité), nous avons déduit le problème dit cellulaire : un système d'équations aux dérivées partielles dont la solution explicite permet de calculer les coefficients effectifs de

transport. Les coefficients effectifs ainsi trouvés peuvent être des tenseurs du second ordre même si dans le modèle de départ, les coefficients microscopiques sont scalaires. Dans le § 2.4, nous avons examiné le cas spécial d'un milieu stratifié (milieu formé d'un système de couches dont les propriétés ne changent que dans la direction perpendiculaire aux couches) où il est possible de trouver les coefficients effectifs sans résolution du problème cellulaire. Les coefficients effectifs que nous avons trouvés sont des moyennes (des intégrales sur une période) de certaines expressions qui contiennent les champs fluctuants. Un résultat non trivial obtenu est que les fluctuations de chaque coefficient contribuent à chaque coefficient effectif. Ceci représente une interaction supplémentaire entre les processus irréversibles indépendants en plus de celle admise en thermodynamique des processus irréversibles. Si l'interaction entre les processus irréversibles est absente dans le modèle de départ (ce qui est équivalent au découplage du problème en plusieurs problèmes indépendants), les expressions trouvées se réduisent au résultat classique pour l'homogénéisation d'une équation parabolique.

Dans les chapitres 3 et 4, nous avons examiné un problème concret de balayage d'un réservoir par un aquifère. Une étude analytique approfondie d'un problème pratique est normalement impossible sans simplifications et réductions des effets d'une importance secondaire. Le problème réel se réduit alors à un problème mathématique canonique dont l'on connaît les méthodes de résolution. Le modèle mathématique dans une version très simplifiée du processus de balayage d'un réservoir par aquifère est donné par une équation linéaire de diffusion-convection dans un domaine bidimensionnel (voir fig. 3.2) pour la concentration du composant se dissolvant dans l'eau de l'aquifère. Dans ce modèle, la concentration peut subir une discontinuité ainsi que sa dérivée normale à l'interface entre le réservoir et l'aquifère.

La solution exacte d'un tel problème est difficile à trouver d'un point de vue technique et, de plus, elle n'est guère pratique puisque elle nécessiterait une série fonctionnelle infinie. Mais l'intérêt essentiel n'est pas dans la solution exacte, mais dans ses moments transversaux : les moyennes sur les sections du réservoir et de l'aquifère qui satisfont à des équations de diffusion-convection monodimensionnelles, mais dont les conditions limites sont inconnues (après la prise de moyenne, le problème obtenu cesse d'être fermé). La fermeture du nouveau problème s'obtient en supposant une dégénérescence géométrique du système en admettant que l'épaisseur de l'aquifère tend vers zéro. Le problème fermé admet alors une solution simple dans l'espace des transformées de Laplace. Elle contient trois paramètres indépendants ayant la dimension d'un temps, ce qui établit une hiérarchie de temps

caractéristiques admettant plusieurs régimes extrêmes pour le processus (quand les différents temps caractéristiques sont incommensurables). Pour ces régimes extrêmes, nous avons trouvé les expressions explicites pour les valeurs recherchées. Dans le chapitre 4, nous avons validé les résultats théoriques obtenus au chapitre 3 en utilisant un code 2D par éléments finis que nous avons développé. Les résultats théoriques et de modélisation sont en bon accord.

Dans le chapitre 5 nous avons examiné un mécanisme hypothétique de ségrégation compositionnelle pouvant avoir lieu dans des réservoirs souterrains d'hydrocarbures. Ce phénomène présente une analogie naturelle avec le problème de ségrégation thermo-gravitationnelle ayant lieu dans des colonnes à séparation des isotopes. La ségrégation thermo-gravitationnelle représente l'effet couplé de la convection forcée et de la thermo-diffusion. Une analyse stricte de ce processus complexe doit prendre en compte le couplage entre convection, transport de chaleur et transport de matière, mais notre objectif s'est limité à indiquer les conditions dans lesquelles un tel processus peut se réaliser et dégager les paramètres du système définissant son intensité. Nous examinons le problème dans une approche où convection, transports de chaleur et de matière se déroulent indépendamment.

Au § 5.2, nous avons analysé la distribution de composition chimique dans une colonne infinie de liquide en présence d'un écoulement « rotatif » et d'un gradient de température transversal. La fraction molaire du composant léger, en fonction de la coordonnée de long de la colonne, est solution d'une équation ordinaire différentielle du premier ordre. Dans cette équation intervient un paramètre homogène dimensionnellement à l'inverse d'une longueur (distance caractéristique inverse de séparation des composants λ^{-1}) combinaison du gradient de température rapporté à sa valeur moyenne, du coefficient de diffusion et du premier moment de la vitesse :

$$M = \int_{-L/2}^{L/2} y \cdot v(y) dy,$$

où le domaine $-L/2 \leq y \leq L/2$ définit la section transversale de la colonne, $v(y)$ la vitesse longitudinale dans la colonne. La gravité n'entre pas explicitement dans la distribution des composants mais au travers de la vitesse de l'écoulement.

Aux § 5.2-5.3 nous avons examiné, d'un point de vue analytique, l'écoulement convectif lui-même pour différentes géométries et pour différentes équations du mouvement. Nous avons analysé deux modèles d'écoulement non-inertiels : Stokes et Darcy-Brinkman

dans l'approche de Boussinesq. L'équation de Darcy-Brinkmann, admet des solutions analytiques dans les cas de symétries par translation (dans une couche ou colonne infinie) ou azimutale (dans un disque). Dans le cas de l'écoulement de Stokes, nous avons trouvé le champ de vitesse dans un réservoir elliptique. Les vitesses caractéristiques de tous les écoulements examinés sont proportionnelles au produit vectoriel entre le gradient de masse volumique (suite à l'expansion thermique) et l'intensité du champ gravitationnel, rapporté au coefficient cinétique responsable de la dissipation du moment de rotation dans le système.

Liste de citations

1. Allaire Grégoire "Homogenization and two-scale convergence", *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, v.23 n.6, p.1482-1518, Nov. 1992
2. Alberty, R. A. "Use of Legendre transforms in chemical thermodynamics" *Pure and Applied Chemistry*. 73 (8), 2001, pages 1349–1380
3. Bazarov I.P. *Thermodynamics*, Vysshaya Shkola, Moscow, 1983 [in Russian]
4. Bedrikovetsky P., *Mathematical Theory of Oil and Gas Recovery*, Kluwer Academic Publishers, 1993.
5. Bialecki Bernard "A fast solver for the orthogonal spline collocation solution of the biharmonic Dirichlet problem on rectangles" *Journal of Computational Physics*, Volume 191, Issue 2, 1 November 2003, Pages 601-621
6. Brinkman H. C. *Appl. Sci. Res.* AI , 1947, 27.
7. Clark Jones R., Furry W.H. "The separation of isotopes by thermal diffusion", *Modern Physics*, 1946, 2, vol. 18, pages 151-222
8. Diarmati I., *Nonequilibrium Thermodynamics. Field Theory and Variational Principles*, Mir, Moscow (1974).
9. Donald D.A., Passman S.L. *Theory of Multicomponent Fluids, Applied Mathematical Sciences*. Vol. 135, Springer, 1999
10. Ern A., Guermond J.L. *Theory and practice of finite elements*, Springer, 2004
11. Faissat B., Knudsen K., Stenby E.H. and Montel F. "Fundamental Statements about Thermal Diffusion for a Multicomponent Mixture in a Porous Medium" *Fluid Phase Equilibria*, 100, pp.209-222 (1994)
12. Firoozabadi A., Ghorayeb K., and Shukla K. "Theoretical model of thermal diffusion factors in multicomponent mixtures". *AIChE J.*, v. 46, 2000
13. Frank-Kamenetsky David *Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics*, Princeton University Press, 1955.
14. Gray William G. "Thermodynamics and constitutive theory for multiphase porous-media flow considering internal geometric constraints" *Advances in Water Resources*, Volume 22, Issue 5, January 1999, Pages 521-547
15. Gray William G., Hassanizadeh Majid S. "Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries" *Advances in Water Resources*, Volume 13, Issue 4, December 1990, Pages 169-186

16. Greek J.L. & Schrader M.L. East Printer: an example of a compositional gradient from a gravitational field, SPE Paper No. 14411, Las Vegas, September 1985
17. de Groot S. R. & Marur P. *Nonequilibrium thermodynamics*. Amsterdam, 1962
18. Hoier L., Whitson C.H. "Compositional Grading, Theory and Practice", paper presented at the 2000 SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Dallas
19. Holt, T., Lindeberg, E., and Ratkje S.K. "The effect of Gravity and Temperature Gradients on Methane Distribution in Oil Reservoirs". Unsolicited paper 11761, 1983
20. Jacquin D. "The Interaction of Natural Convection and Gravity Segregation in Oil/Gas Reservoirs". *SPE Paper* 16703 presented at the 1987 SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Dallas, Sept. 27-30
21. Jardak M., Ghanem R. G. "Spectral stochastic homogenization of divergence-type PDEs" , *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Volume 193, Issues 6-8, 13 February 2004, Pages 429-447
22. Korn Granino, Korn Theresa. *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers*. McGraw-Hill, 1968.
23. Krishna R., Wesselingh J. A. "The Maxwell-Stefan approach to mass transfer" *Chemical Engineering Science*, Volume 52, Issue 6, March 1997, Pages 861-911
24. Landau L., Lifshitz E. Vol. 5. *Statistical Physics*, Part I, Pergamon, 1980
25. Landau L., Lifshitz E. Vol. 6. *Hydrodynamics*, Pergamon, 1981
26. Landau L., Lifshitz E. Vol. 7. *Theory of Elasticity*, Pergamon, 1981
27. Lifshitz E., Pitaevski L Vol. 10. *Physical Kinetics*, Pergamon, 1981
28. Montel F., Gaillet G., Pucheu A. and Caltagirone J.P "Diffusion model for predicting reservoir gas losses". *Marine and Petroleum Geology*, Vol. 10 pages: 51-58, 1993
29. Montel François, Bickert Jacques, Lagisquet Aurélie, Galliéro Guillaume. « Initial state of petroleum reservoirs: A comprehensive approach ». *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Volume 58, Issues 3-4, September 2007, Pages 391-402
30. Marle C. M. "On macroscopic equations governing multiphase flow with diffusion and chemical reactions in porous media". *International Journal of Engineering Science*, Volume 20, Issue 5, 1982, Pages 643-662
31. Nasrabadi H., Ghorayeb K. and Firoozabadi A. "Two-Phase Multicomponent Diffusion and Convection in Porous Media for Reservoir Initialization". *SPE Reservoir Evaluation and Engineering*, Oct. 2006.
32. Nigmatulin R.I. *Dynamics of Multiphase Media, Parts 1*, Hemisphere, 1991

33. Ochoa-Tapia Alberto, Whitaker Stephen “ Momentum transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid I. Theoretical development ” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 38, Issue 14, September 1995, Pages 2635-2646
34. Padua K.G.O. “Nonisothermal Gravitational Equilibrium Model”, *SPE Reservoir Eval & Eng.* 2, pages 211-217, 1999
35. Polyanin A. D. *Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists*. Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton–London, 2002
36. Prigogine I., *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes*, 3rd Ed., Interscience, New-York, 1967
37. Reggiani Paolo, Hassanizadeh Majid S., Sivapalan Murugesu, Gray William G. “A unifying framework for watershed thermodynamics: constitutive relationships” , *Advances in Water Resources*, Volume 23, Issue 1, 15 September 1999, Pages 15-39
38. Riemens, W.G., Schulte, A.M., De Jong, L.N.J. “Bibra field PVT variations along the hydrocarbon column and confirmatory field test” *J.Petr.Tech.*,40, No.1, pages 83-89
39. Sanchez-Palencia E., Zaoui A. (eds.), *Homogenization techniques for composite media: lectures delivered at the CISM International Center for Mechanical Science*, Springer-Verlag 1987.
40. Sedov L.I. *Mechanics of continuous media*, Part I, World Scientific, 1997
41. Silvester, Ferrari *Finite Elements for Electrical Engineers*, Cambridge University Press, 1996
42. Schutle A.M. “Compositional variations within a hydrocarbon column due to gravity” SPE paper 9235, presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Dallas, 1980
43. Snorri Halldórsson, Erling H. Stenby “Isothermal gravitational segregation: algorithms and specifications “, *Fluid Phase Equilibria*, Volume 175, Issues 1-2, 1 October 2000, Pages 175-183
44. Sterberg S.P.K., Cushman J.H. and Greenkorn R.A. “Random walks in prefractal porous media”, *AdChE Journal*, 1996. – 42, №4, p. 921-926
45. Tikhonov, A. N., & Samarski A. A. *Partial Differential Equations of Mathematical Physics*, Holden-Day, San Francisco, 1964
46. Valdes-Parada Francisco J., Ochoa-Tapia Alberto, Alvarez-Ramirez Jose “On the effective viscosity for the Darcy–Brinkman equation”. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Volume 385, Issue 1, 1 November 2007, Pages 69-79

47. Whitson C.H. and Belery P. : “Compositional Gradients in Petroleum Reservoirs”
paper SPE 28000 presented at the 1994 U. Tulsa/SPE Centennial Petroleum
Engineering Symposium, Aug. 28-31, Tulsa
48. Xu Frank X., Lori Graham-Brady “Computational stochastic homogenization of
random media elliptic problems using Fourier Galerkin method” *Finite Elements in
Analysis and Design*, Volume 42, Issue 7, April 2006, Pages 613-622
49. Zienkiewicz O.C. & Taylor R.L. *Finite Element Method. Vol.I. Basic Formulations
and Linear Problems*. McGraw-Hill, 1991
50. Zienkiewicz O.C., Taylor, R.L., Nithiarasu P. *Finite Element Method for Fluid
Dynamics*, 6th Edition, Elsevier, 2005

AUTORISATION DE SOUTENANCE DE THESE
DU DOCTORAT DE L'INSTITUT NATIONAL
POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

o0o

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :

Monsieur Henri BERTIN, Directeur de Recherche, ENSAM, Laboratoire TREFLE, Talence

Monsieur Brahim AMAZIANE, Maître de Conférences, IPRA, LMA, Pau

Le Président de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, autorise :

Monsieur Yuri MIZYAKIN

à soutenir devant un jury de l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE,
une thèse intitulée :

"Différents problèmes théoriques et appliqués de transport dissipatif en milieux poreux"

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

Spécialité : « **Mécanique et Energétique** »

Fait à Vandoeuvre, le 13 septembre 2010

Le Président de l'I.N.P.L.,

F. LAURENT



NANCY BRABOIS
2, AVENUE DE LA
FORET-DE-HAYE
BOITE POSTALE 3
F - 54501
VANDŒUVRE CEDEX

Différents problèmes théoriques et appliqués de transport dissipatif en milieux poreux

Mots clés : transport en milieux poreux, diffusion multi-compositionnelle, homogénéisation à deux échelles.

La thèse concerne trois problématiques indépendantes : le transport dissipatif dans des milieux hétérogènes; échange de masse entre un réservoir de gaz et aquifère ; ségrégation compositionnelle. Le point commun entre les problèmes traités sont les processus irréversibles de redistribution de la composition chimique. Le premier chapitre est consacré à la déduction, en accord avec les principes de la thermodynamique, d'un modèle généralisé de transport simultané de matière et de chaleur. Le chapitre 2 est consacré à l'étude de diffusion multi-compositionnelle dans un milieu hétérogène. Cette étude vise une application aux phénomènes de transport dans les réservoirs des hydrocarbures qui, d'une part, sont le siège de divers des processus de transport (plusieurs composants + chaleur) en interaction (processus croisés au sens d'Onsager) et, d'autre part, sont anisotropes pour les processus de transport étudiés. Le chapitre 3 est consacré à l'étude du processus de balayage d'un réservoir par une nappe aquifère. Le chapitre 4 est consacré au développement d'un code « éléments finis » conçu pour résoudre le même problème que dans le chapitre 3, mais dans une approche moins idéalisée. Le chapitre 5 est consacré à l'étude de la convection forcée dans un réservoir avec des champs de gravité et de température non colinéaires. Cette convection est une des composantes du processus de séparation thermo-gravitationnelle des espèces chimiques qui peut avoir lieu dans les réservoirs souterrains.

Different theoretical and applied problems of dissipative transport in porous media

Key words: transport in porous media, multi-component diffusion, two-scales homogenization

The thesis concerns three independent subject areas: the dissipative transport in heterogeneous geological media; a transport problem in an underground gas reservoir; compositional segregation in reservoirs. The common point of all examined problems is the irreversible redistribution of chemical composition of a fluid in the reservoirs. The first chapter is devoted to development of a microscopic model of simultaneous mass and heat transfer in agreement with thermodynamic principles. The second chapter is dedicated to study of multi-component diffusion in a heterogeneous medium. This study aims an application to transport phenomena in hydrocarbon reservoirs characterized firstly by diversity of transported substances (several components + heat) and their interaction (in Onsager's meaning) and secondly by anisotropy of medium where they take place. The third chapter is dedicated to analytical study of underground gas storage sweeping due to gas dissolution in aquifer. In the fourth chapter the same problem (gas sweeping) was studied numerically in a less idealized approach using finite element method. The fifth chapter is dedicated to study of forced convection taking place in the reservoirs where the temperature gradient and gravity force are not collinear. This convection represents an element of the thermo-gravitational component segregation employed in industry (thermo-gravitational columns) and can take place in underground reservoirs.