



HAL
open science

Détermination analytique du coefficient de thermodiffusion effectif en milieu poreux : application aux fluides de gisements. Etude locale et changement d'échelle.

Bruno Lacabanne

► **To cite this version:**

Bruno Lacabanne. Détermination analytique du coefficient de thermodiffusion effectif en milieu poreux : application aux fluides de gisements. Etude locale et changement d'échelle.. Modélisation et simulation. Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2001. Français. NNT : . tel-00003207

HAL Id: tel-00003207

<https://theses.hal.science/tel-00003207>

Submitted on 18 Jan 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Détermination analytique
du coefficient de thermodiffusion
effectif en milieu poreux:
application aux fluides de gisements.

Etude locale et changement d'échelle.

Bruno Lacabanne

(Projet de mémoire de Thèse)

Table des matières

Table des matières	i
Table des figures	ii
I Introduction et modélisation	1
Sur l'intérêt industriel de l'effet Soret...	3
Une nouvelle approche	5
Les équations en milieu libre	6
L'équation du mouvement	6
Les équations de conservation: le formalisme thermodynamique	7
Thermodiffusion en milieu poreux	12
Sur le bien-fondé des équations locales	12
Les phénomènes d'adsorption	14
II A l'échelle du pore : le milieu libre	17
1 Analyse mathématique des équations locales	19
1.1 Introduction	19
1.2 Condition au bord de type "Dirichlet homogène"	27
1.2.1 Estimations <i>a priori</i> dans un cadre fonctionnel approprié	28
1.2.2 Mise en œuvre d'une stratégie de point fixe	31
1.3 Condition de type "Dirichlet non homogène"	35
1.3.1 Estimations <i>a priori</i>	37
1.3.2 Un théorème de point fixe	39
1.3.3 Généralisation à des fonctions d'état moins régulières	41

Table des matières

1.4	Admissibilité physique de la solution	41
1.5	Unicité et stabilité de la solution	46
1.6	Dépendance de la solution envers le coefficient de Soret	52
2	Une formulation mixte pour une méthode volumes finis	55
2.1	Problème considéré	55
2.2	Notations	56
2.3	Résultats sur l'erreur d'approximation	62
2.4	Etude du problème d'évolution	65
2.5	Consistance du schéma	65
2.6	Convergence du schéma	67
III	De l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique	71
3	Développement asymptotique et convergence à double échelle	73
3.1	Introduction	73
3.2	Notations et définitions	77
3.2.1	Notations utiles à l'analyse	77
3.2.2	Développement asymptotique	81
3.2.3	Convergence à double échelle	82
3.3	De Navier-Stokes à Darcy	85
3.4	Homogénéisation de l'équation de l'énergie	91
3.5	Coefficients de diffusion équivalents	102
3.5.1	Comportement de $\bar{N}_{i,\varepsilon}$	102
4	Estimation des tenseurs de diffusion et thermodiffusion	107
4.1	Diffusivités thermiques homogénéisées	109
4.1.1	Problème considéré	109
4.1.2	Un encadrement des diffusivités homogénéisées	111
4.2	Coefficients de diffusion et coefficient de Soret effectifs	113
4.2.1	Nature du problème	113

IV	Adsorption en milieu poreux	117
5	Isothermes équivalents	119
5.1	Introduction	119
5.2	Problème considéré	120
5.3	Cas irréversible: l'isotherme de Langmuir	121
5.4	Cas réversible: l'isotherme de Freundlich	125
V	Conclusions	129
	Notations	133
	Bibliographie	136
VI	Applications numériques	143
	Applications numériques	144
A	Ecoulement capillaire	145
A.1	Sur un couplage local $(\mathbf{U}, \nabla\theta)$	145
A.1.1	Problème considéré	146
A.2	Le cas 1D: résolution analytique	147
A.2.1	Evaluation de la quantité de matière accumulée Ξ	150
A.3	Résolution numérique	150
A.3.1	Equations considérées	151
A.3.2	Méthode des directions alternées	151
A.3.3	Discussion	153
A.4	Un procédé itératif de mesure du coefficient Soret	154
A.4.1	Dispositif expérimental	154
A.4.2	Evolution des concentrations	155
A.5	Influence du profil thermique en adsorption dans un capillaire	157

B	Tenseurs homogénéisés	159
B.1	Diffusivités thermiques équivalentes	159
B.1.1	Caractéristiques physiques du milieu	159
B.1.2	Un maillage non structuré	160
B.2	Coefficients effectifs	163
B.2.1	Résolution du problème (III.3.19)	163
B.2.2	Résolution du problème (III.3.28)	164

Table des figures

1	<i>Mécanisme de l'effet Soret dans un fluide binaire.</i>	5
2	<i>Relation entre équations de l'énergie et de conservation de la masse</i>	9
3	<i>Zone d'influence du gradient thermique par effet Soret</i>	11
4	<i>Adsorption, désorption et irréversibilité.</i>	15
2.1	<i>Visualisation des différents maillages</i>	57
3.1	<i>Front d'injection dans un milieu poreux aléatoire (Source: IMFT)</i>	74
3.2	<i>Schématisme d'une cellule élémentaire $Y = Y_f \cup Y_s$</i>	77
3.3	<i>Recouvrement du domaine</i>	78
3.4	<i>Exemple de situation géométrique illicite: Y_f est non connexe</i>	79
3.5	<i>Milieu poreux hétérogène périodique: notion d'échelles multiples</i>	81
3.6	<i>Hétérogénéités des diffusivités thermiques</i>	91
4.1	<i>Cellule élémentaire Y</i>	108
4.2	<i>Fonction de base utilisée pour la périodicité</i>	114
4.3	<i>Maillage de Donald</i>	115
5.1	<i>Schématisme des échanges à l'interface fluide-solide</i>	122
A.1	<i>Capillaire: Ecoulement et profil thermique à la paroi.</i>	146
A.2	<i>Visualisation du profil de vitesse à l'intérieur du capillaire</i>	146
A.3	<i>Profil de fraction massique dans le capillaire: résolution 1D</i>	149
A.4	<i>Profil thermique le long de la paroi</i>	149
A.5	<i>Couplage convection-Effet Soret dans un écoulement capillaire</i>	152
A.6	<i>Visualisation de la séparation selon la variable radiale</i>	153
A.7	<i>Profil thermique le long de la paroi</i>	154
A.8	<i>Evolution des suites V_k et N_k au cours du temps</i>	156

Table des figures

B.1	<i>Exemple de 2 structures poreuses (source: IMFT)</i>	160
B.2	<i>Paramètres définissant la qualité d'un élément T</i>	161
B.3	<i>Maillages de 2 types de cellules</i>	162
B.4	<i>Solution σ_1 du problème (III.3.19).</i>	165
B.5	<i>Isovaleurs des solutions $(\sigma_k)_{k=1,2}$ du problème (III.3.19) pour différentes géométries élémentaires.</i>	166
B.6	<i>Maillages et solutions $(\omega_k)_{k=1,2}$ du problème (III.3.28) pour différentes géométries élémentaires.</i>	167

Première partie

Introduction et modélisation

Introduction

Sur l'intérêt industriel de l'effet Soret...

Dans un but d'optimisation des coûts de production lors de l'extraction des fluides de gisements par les producteurs pétroliers (extraction à des profondeurs de plus en plus importantes et donc nécessitant des moyens de technologies plus avancées), il est important de connaître de façon précise la distribution des différentes espèces à l'intérieur d'un gisement. Cette distribution s'est effectuée pendant de longues périodes de formation du gisement et a été principalement influencée par la gravité ainsi que la distribution des pressions dans le réservoir. Des moyens importants ont été mis en œuvre afin d'obtenir des modèles thermodynamiques fiables, permettant de restituer de manière correcte la répartition des espèces dans le réservoir. Etant donné qu'il n'est pas possible de négliger l'importante extension verticale d'un gisement, il est très probable que cette répartition soit influencée par la convection naturelle (la gravité est l'une des premières composantes intégrées dans les modèles), mais aussi par le gradient géothermique (gradient de température naturel de la Terre). Ce gradient pourrait être la cause de la migration d'espèces par un phénomène connu sous le nom d'Effet Soret ou Thermodiffusion (*cf.* F. MONTEL, [53]) (plus généralement, le nom "thermodiffusion" désigne cet effet en milieu gaz, alors que l'expression effet Soret ou effet Ludwig sera plus utilisée dans les liquides). Ce dernier consiste en l'établissement d'un gradient de concentration d'un composant chimique par la présence d'un gradient thermique, *i.e.* l'existence d'un gradient thermique est cause d'une migration différenciée des espèces. Cet effet, découvert par C. Ludwig en 1856 (et mieux exploité par C. Soret en 1879) est un phénomène particulier puisqu'il appartient à la famille des phénomènes thermodynamiques "croisés", c'est-à-dire où un flux est créé par une force qui ne lui est pas conjuguée (ici, un gradient de concentration est induit par la présence d'un gradient thermique), contrairement

à la diffusion moléculaire qui est un phénomène dit “diagonal”. On visualise dans le tableau suivant la classification des effets couplages flux-force entre chaleur et matière:

Flux \ Force	$\vec{\nabla}\theta$	$\vec{\nabla}N$
Chaleur	Loi de Fourier	<i>Effet Dufour</i>
Matière	<i>Effet Soret</i>	Loi de Fick

TAB. 1 – *Couplages flux-forces entre chaleur et matière*

La présence de ces forces entraîne le système vers un état hors-équilibre. L'étude des relations entre flux et forces de ce type s'appelle thermodynamique linéaire des processus irréversibles. La principale grandeur caractéristique de la thermodiffusion est un coefficient appelé Coefficient de Soret (noté S_i), et afin de conclure sur l'intérêt de le négliger ou non, il est important d'en connaître la valeur. De nombreux travaux ont donc été entrepris afin de déterminer cette grandeur avec des approches diverses: approches expérimentales (projet SCCO, colonnes thermogravitationnelles) ou approches théoriques (simulations par dynamique moléculaire, modèles numériques multicomposants). Toutes ont abouti à la conclusion que les valeurs obtenues expérimentalement et par simulations numériques différaient. Ces différences s'expliquent essentiellement par le fait que les mesures sont techniquement plus simples en milieu libre (absence de matrice poreuse), et que les effets locaux dûs aux variations de la vitesse ou aux différences de conductivités thermiques entre roche et liquide ne sont alors pas prises en compte. Les échecs nés de tentatives de modélisation de colonnes thermogravitationnelles par les équations données en milieu libre sont une bonne illustration de la nécessité de déterminer un nouveau modèle pour les phénomènes de diffusion et de thermodiffusion en milieu poreux.

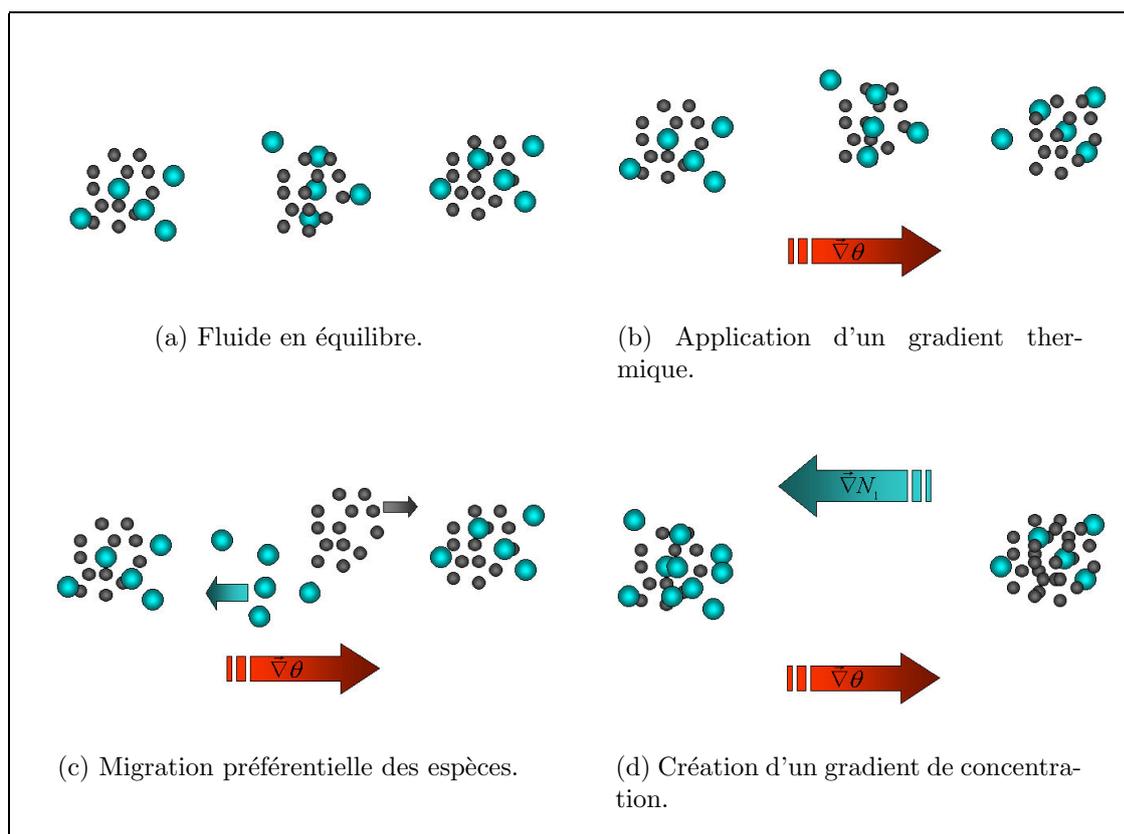


FIG. 1 – Mécanisme de l'effet Soret dans un fluide binaire.

Une nouvelle approche

Notre approche dans cette étude est donc la suivante:

- dans un premier temps, on étudie l'Effet Soret à une échelle locale, en milieu libre, afin de s'affranchir de tout paramètre extérieur au fluide (géométrie du milieu, variations des paramètres caractéristiques du fluide, ...) et de bien en comprendre la nature et les mécanismes le gouvernant,
- puis on introduit une matrice poreuse pour passer à une échelle globale, qui prendrait en compte des paramètres tels que la porosité du milieu, sa tortuosité, les variations de direction de l'écoulement ainsi que du champ thermique.

L'obtention d'équations macroscopiques pour la modélisation de la thermodiffusion en milieu poreux permettra une meilleure prise en compte de ce phénomène dans les simulateurs de gisements. Les résultats des simulations obtenues dans la première partie de cette étude montrent en effet que certaines configurations du vecteur vi-

tesse et du gradient thermique provoquent une accumulation locale de matière (*cf.* sur ce point [37]). La simple modélisation de l'effet Soret en milieu poreux par un gradient thermique vertical et un profil de vitesse donné ne prendrait pas en compte de tels phénomènes locaux et ne restituerait donc pas de manière fidèle la répartition des composants du fluide à l'intérieur du domaine.

Notre démarche est donc analogue à celle de G. CHAVENT et J. JAFFRÉ dans le cas de simulations de réservoirs ([19]) : elle s'étend de la modélisation du phénomène physique (mise en équations), de l'analyse mathématique des équations ainsi définies jusqu'à la résolution du problème à l'aide d'un code numérique, dont on aura préalablement effectué l'analyse.

Nous décrivons par la suite le formalisme thermodynamique permettant la définition d'équations traduisant l'effet Soret en milieu libre, qui seront à l'origine du modèle obtenu en milieu poreux à l'aide de procédés d'homogénéisation qui prennent en compte l'interaction fluide - substrat.

Les équations en milieu libre

L'équation du mouvement

On considère en milieu libre les équations de Navier-Stokes données par

$$\rho(\partial_t \mathbf{U} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}) = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{U} + \lambda \nabla(\operatorname{div}(\mathbf{U})) + \rho_0 \vec{f} \text{ dans } Q =]0, T[\times \Omega$$

auxquelles on adjoint une condition d'incompressibilité locale du type

$$\operatorname{div}(\mathbf{U}) = 0 \text{ dans } Q$$

Dans toute la première partie concernant l'étude locale du phénomène, nous ne nous intéresserons pas à la résolution de l'équation régissant l'écoulement. En effet, modélisant le milieu local par un capillaire Ω de rayon R , on utilisera le profil de vitesse permanent, en négligeant toute convection naturelle (du fait de la petite taille d'une cellule). L'équation de Navier-Stokes est alors donnée par la forme stationnaire :

$$\rho(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\nabla P + \mu \Delta \mathbf{U}$$

qui se réécrit en coordonnées cylindriques (r, ϕ, x)

$$\begin{cases} -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} = 0 \\ -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial P}{\partial \phi} = 0 \\ \mu \frac{\partial^2 \mathbf{U}_x}{\partial r^2} + \frac{\mathbf{U}_x}{r} \frac{\partial \mathbf{U}_x}{\partial r} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \end{cases}$$

Une intégration et la considération de la condition de bord d'adhérence (vitesse nulle à la paroi) permet alors d'établir la formulation du profil de vitesse à l'intérieur du pore donnée par le profil de type parabolique, appelé profil de **Poiseuille**

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ U_x(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ U_0 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \end{pmatrix}.$$

Les équations de conservation de la masse et de l'énergie: le formalisme thermodynamique

On considère un fluide à n composants s'écoulant dans un domaine Ω . Si on note par \vec{f}_i (resp. \vec{J}_i) les forces (resp. les flux) citées dans le tableau I, on dispose des lois linéaires généralisées de Onsager

$$\vec{J}_i = \sum_j L_{ij} \vec{f}_j.$$

La matrice des coefficients phénoménologiques de Onsager $L = (L_{ij})$ possède alors une propriété de symétrie, d'après l'hypothèse d'ergodicité. Dès lors, la génération d'entropie par le système s'exprime par la forme quadratique

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \sum_i \vec{J}_i \cdot \vec{f}_i \\ &= \sum_{i,j} L_{ij} \vec{f}_i \cdot \vec{f}_j \end{aligned}$$

qui, d'après le second principe de la Thermodynamique doit être définie positive. Le théorème de Prigogine permet alors de définir l'état stationnaire du système comme étant celui où est minimisée la production d'entropie, de manière à se rapprocher de l'état d'équilibre thermodynamique (*cf.* [11], [12] ou encore [54]). C'est ainsi que se crée une distribution des espèces à l'intérieur du domaine et on peut donc écrire les flux de chaleur et de matière de la manière suivante:

$$\begin{aligned}\vec{J}_q &= -L_{qq} \frac{\nabla\theta}{\theta^2} - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{L_{qk}}{\theta} [\nabla_\theta(\mu_k - \mu_n)] \\ \vec{J}_i &= -L_{iq} \frac{\nabla\theta}{\theta^2} - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{L_{ik}}{\theta} [\nabla_\theta(\mu_k - \mu_n)]\end{aligned}$$

où sont présents les quatre termes du tableau I. On reconnaît ainsi:

– les effets diagonaux:

– la loi de Fourier: $\vec{J}_q^\theta = -\lambda \frac{\nabla\theta}{\theta^2}$

– la loi de Fick: $\vec{J}_i^\mu = -\sum_{k=1}^{n-1} \frac{L_{ik}}{\theta} [\nabla_\theta(\mu_k - \mu_n)]$

– les effets croisés:

– l'effet Dufour: $\vec{J}_q^\mu = -\sum_{k=1}^{n-1} \frac{L_{qk}}{\theta} [\nabla_\theta(\mu_k - \mu_n)]$

– l'effet Soret: $\vec{J}_i^\theta = -L_{iq} \frac{\nabla\theta}{\theta^2}$.

Dès lors, en réduisant le gradient isotherme de potentiel chimique $\nabla_\theta\mu_i$ au gradient de fraction massique ∇N_i (milieu isobare, forces de gravitation négligées), on obtient¹, pour chaque constituant i , l'expression de son flux

$$\begin{aligned}\vec{J}_i &= \vec{J}_i^{\mathbf{U}} + \vec{J}_i^{\mathbf{N}} + \vec{J}_i^\theta \\ &= \rho N_i \mathbf{U} - \rho \sum_{j=1}^n D_{ij} \nabla N_j - \rho D_\theta^i N_i (1 - N_i) \nabla\theta\end{aligned}\tag{I.1}$$

1. nous verrons par la suite que cette hypothèse induit des difficultés dans la formulation d'une condition de bord à l'interface solide-liquide pour la fraction massique

Introduction et modélisation

\vec{J}_i^u , \vec{J}_i^N , \vec{J}_i^θ représentant respectivement les flux convectif diffusif et thermodiffusif du constituant i . De la même façon, on écrit le flux de chaleur

$$\begin{aligned}\vec{J}_q &= \vec{J}_q^U + \vec{J}_q^\theta + \vec{J}_q^N \\ &= \theta \mathbf{U} - \lambda \nabla \theta - \sum_{j=1}^n D_N^j \nabla N_j\end{aligned}$$

\vec{J}_q^U , \vec{J}_q^θ , \vec{J}_q^N représentant les flux convectif, diffusif et de Dufour de la chaleur. Les équations de l'énergie et de conservation de la masse s'écrivent alors

$$\begin{cases} \rho C_p \partial_t \theta + \text{div}(\vec{J}_q) = 0 \\ \rho \partial_t N_i + \text{div}(\vec{J}_i) = 0 \end{cases}$$

ou encore, explicitement,

$$\begin{aligned} \partial_t \theta + \text{div}(\theta \mathbf{U} - \kappa \nabla \theta - \sum_{j=1}^n D_N^j \nabla N_j) &= 0 \\ \partial_t N_i + \text{div}(N_i \mathbf{U} - \sum_{j=1}^n D_{ij} \nabla N_j - D_\theta^i N_i (1 - N_i) \nabla \theta) &= 0 \end{aligned}$$

Le coefficient de Soret de chaque constituant est ainsi défini par la relation

$$S_t^i = \frac{D_\theta^i}{D_{ii}}$$

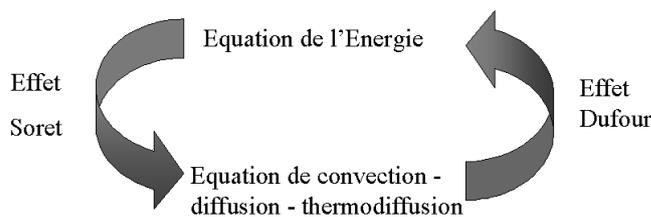


FIG. 2 – Relation entre équations de l'énergie et de conservation de la masse

On effectue dans une première partie, l'analyse mathématique de telles équations auxquelles on adjoint un effet d'adsorption, représenté par l'introduction d'un coefficient non linéaire devant le terme d'évolution des équations en concentration. On

considère ainsi un phénomène plus général et, en outre, cela permet d'obtenir un résultat d'existence de solution forte. On montre que le système ainsi constitué est bien posé au sens de Hadamard. On utilise notamment une technique de point fixe, méthode classique dans l'analyse des problèmes non linéaires (*cf.* [35]). Le résultat d'unicité est obtenu par un procédé de transposition, permettant de se ramener à l'étude de l'existence d'une solution à un problème dual (méthode introduite par S.N. ANTONSEV et A.V. DOMANSKI dans [7] et réutilisée notamment dans [35] ou encore dans [27]). On démontre de plus, un résultat de forte stabilité locale du vecteur "concentration" envers le gradient thermique et le coefficient de thermo-diffusion: on peut maîtriser l'erreur sur les concentrations des espèces relatives à l'erreur commise sur la mesure de leur coefficient de Soret. On effectue enfin l'analyse numérique d'une méthode de type "éléments finis mixtes" aboutissant à un schéma volumes finis, dont les résultats sont présentés en annexe. La convergence et la stabilité de cette méthode introduite par J.M. THOMAS et D. TRUJILLO dans [64] sont démontrées à l'aide d'hypothèses de pseudo-ellipticité des tenseurs d'adsorption et de diffusion analogues aux conditions introduites dans l'analyse mathématique. Les concentrations sont donc régies par des équations d'évolution non linéaires, divergentielles, de type parabolique. Nous montrons par la suite comment les concentrations sont alors liées à l'équation de l'énergie. On peut interpréter l'effet Soret comme une perturbation de l'équation de diffusion-convection classique

$$\partial_t N_i + \mathbf{U} \cdot \nabla N_i - \sum_{j=1}^n D_{ij} \Delta N_j = 0$$

par l'ajout d'un terme de transport au second membre du type

$$\operatorname{div}(S_t^i \sigma(N) \nabla \theta) = S_t^i (\nabla \sigma(N) \cdot \nabla \theta + \sigma(N) \Delta \theta).$$

Dans le cadre d'approximation linéarisé ($\sigma = \text{cste} > 0$), cette observation permet de mettre en évidence l'importance de la concavité du profil thermique. En effet, en régime établi et dans le cas où l'effet Dufour est négligé, l'équation de l'énergie se

réécrit dans sa forme usuelle

$$\begin{cases} \partial_t \theta - \kappa \Delta \theta = f, f \geq 0, f \in L^2(\Omega) \\ C.I. + C.B. \end{cases}$$

On en déduit alors que $\kappa \Delta \theta = -f \leq 0$ *pp.* dans Ω et donc la perturbation apportée par l'effet Soret dans les équations de conservation de la masse est un terme de puits. De même la convexité du profil thermique provoquerait l'apparition de l'effet Soret dans ces mêmes équations comme un terme source. C'est pourquoi il est nécessaire d'étudier ces deux équations simultanément. Il est intéressant de remarquer de même, que, du fait de la propriété d'hypoellipticité de l'opérateur laplacien, la fraction massique d'un constituant i sur un ouvert ω , dépend de la valeur de f sur le domaine entier et pas seulement sur l'ouvert ω : l'effet Soret obéit à la propriété de "vitesse de propagation infinie" des équations de type parabolique.

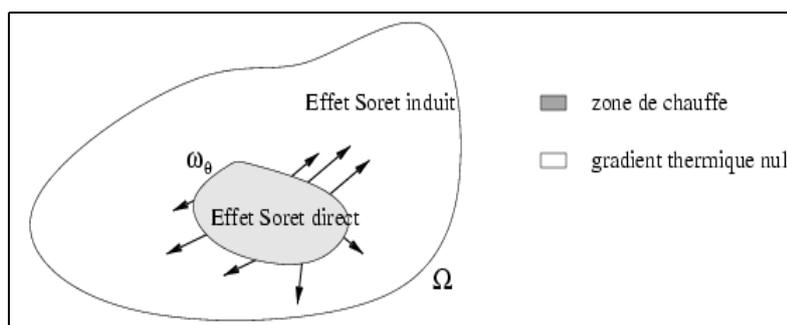


FIG. 3 – Zone d'influence du gradient thermique par effet Soret

Ainsi, la quantité N_i est influencée par un effet Soret "direct", dans la zone définie par $\omega_\theta = \{x \in \Omega, \text{div}(S_i^j \nabla \theta) \neq 0\}$ mais sa valeur est perturbée sur le domaine entier par un effet Soret "induit" hors de la zone d'effet direct par diffusion. Par ailleurs, la régularité de la solution dépend uniquement de la régularité du profil thermique sur la zone "de chauffe" (H. BREZIS [18], p. 189).

Il devient alors évident que toute variation même locale du champs thermique dans le domaine influe sur le profil en concentration des espèces. Les hétérogénéités des diffusivités thermiques aux interfaces fluide-solide sont la cause de fortes variations locales de la courbure du profil thermique et par là même de changement de nature de la perturbation apportée par la thermodiffusion.

C'est pourquoi il est nécessaire d'obtenir des modèles pour les équations de conservation sur la totalité d'un domaine.

Thermodiffusion en milieu poreux

Les équations macroscopiques décrivant l'effet Soret ainsi que l'écoulement en milieu poreux font l'objet du deuxième volet de cette étude. Nous y démontrons qu'elles sont globalement de la même forme que les équations locales, la matrice poreuse introduisant des tenseurs gouvernant les flux et des coefficients de porosité modulant les grandeurs scalaires. Elle sont déduites rigoureusement des équations locales par des procédés d'homogénéisation tels que le développement asymptotique (notamment pour l'équation linéaire de Darcy, obtenue formellement à partir de l'équation de Navier-Stokes) ou encore la convergence à deux échelles qui permet de prouver la convergence de la solution locale vers un état limite, solution du problème macroscopique. Quelques travaux ont déjà abordé ce thème, fondés sur des techniques diverses, notamment par A. GALKA, J.J. TELEGA, R. WOJNAR ([36]) ou encore E. ARQUIS et J.P. CALTAGIRONE ([10]). Notre but ici reste de déterminer le coefficient Soret équivalent en milieu poreux, mais aussi de démontrer la convergence en un sens à préciser dans le contexte des équations locales vers le modèle macroscopique établi. La détermination numérique des coefficients de transport équivalents fait l'objet d'une troisième partie et se fonde essentiellement sur la résolution de problèmes locaux fortement liés au choix de la cellule de référence choisie pour modéliser le milieu périodique. Le procédé d'homogénéisation a par ailleurs permis de montrer l'inadéquation de la condition de bord usuellement employée pour l'effet Soret avec la considération d'un milieu diphasique (solide-liquide) comme c'est le cas avec un milieu poreux. L'origine-même de l'Effet Soret et son formalisme thermodynamique entraînent une contradiction que nous décrivons par la suite.

Sur le bien-fondé des équations locales

La considération des équations (équation de l'énergie et équation de l'effet Soret) telles qu'elles sont employées couramment reste valable dès que l'on ne considère qu'un système monophasique. Dans le cas d'un milieu poreux, la considération

Introduction et modélisation

de ces deux équations associées à la condition de bord de type “flux nul” pose nécessairement un problème. En effet, si on examine alors l’équation de fermeture donnée par la condition de Neumann

$$\vec{J}_i \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial\omega_f$$

ω_f étant la partie fluide d’un volume élémentaire du domaine global; en décomposant J_i comme dans l’égalité (I.1), la considération des conditions au bord

$$\vec{J}_i^N \cdot \vec{n} = \vec{J}_i^U \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial\omega_f$$

et donc

$$\vec{J}_i^\theta \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial\omega_f$$

amène une contradiction dès lors que l’on a remarqué que

$$\frac{\partial\theta}{\partial n_{f,s}} \neq 0 \text{ sur } \partial\omega_f$$

$n_{f,s}$ étant la normale à l’interface fluide solide $\Gamma_{f,s} = \partial\omega_f$. Une telle contradiction découle directement de la nature non diagonale (*cf.* tableau I) de l’effet Soret. Le flux d’un constituant i du fluide (qui, par définition, représente une grandeur monophasique, car présente uniquement en phase fluide) est provoqué et exprimé par un flux de chaleur, grandeur présente en phase fluide comme en phase solide. Plus précisément, c’est le formalisme thermodynamique de l’effet Soret qui n’est plus adapté dès lors que l’on considère un milieu diphasique. La thermodynamique des systèmes ouverts généralise des lois diagonales, notamment la loi de Fick qui apparaît comme la restriction au gradient de concentration d’un effet plus large qui s’écrit en gradient de potentiel chimique $\nabla_\theta \mu_i$. On utilise en effet les relations d’équilibre de Onsager pour traduire un phénomène qui par essence est hors équilibre. Il est probable que la principale erreur réside dans la restriction du gradient de potentiel chimique au gradient de concentration décrite ci-dessus; la considération d’une équation ayant pour inconnue non plus des concentrations ou des fractions massiques mais les potentiels chimiques des espèces (que l’on peut aussi définir en phase solide) lèverait cette contradiction. Le problème principal résiderait alors dans la définition

de ces quantités en phase solide. Dans de tels cas, il faut définir des concentrations fictives dont la valeur permettrait d'obtenir un flux de matière à travers l'interface fluide - solide dont la valeur compenserait celle du flux de chaleur.

Les phénomènes d'adsorption

On décrit brièvement par la suite les équations modélisant à une échelle locale les phénomènes d'adsorption. Soit N_i^{abs} la fraction massique de composant i en phase adsorbée. Le bilan de la masse sur un volume élémentaire s'écrit :

$$\partial_t (N_i^{abs} + N_i) = -div(\vec{J}_i) \quad (I.2)$$

où \vec{J}_i est le flux de masse défini en (I.1) (en ne considérant toutefois pas ici les effets thermodiffusifs, dans un souci de simplification). En utilisant l'incompressibilité de l'écoulement, on obtient alors

$$\partial_t N_i + \mathbf{U} \cdot \nabla N_i - \sum_{j=1}^n D_{ij} \Delta N_j = -\partial_t N_i^{abs}. \quad (I.3)$$

Ce système comporte *a priori* $2n$ inconnues: les concentrations en phase fluide $(N_i)_{i=1..n}$ et les concentrations en phase adsorbée $(N_i^{abs})_{i=1..n}$. Afin de réduire le nombre d'inconnues de moitié, on se place dans le cas d'équilibre d'adsorption (approche quasi stationnaire), qui permet de disposer de la relation :

$$N_i^{abs} = \varphi_i(N_1, \dots, N_j, \dots, N_n) \quad (I.4)$$

(ce type de relation étant par ailleurs justifié dans toute situation où la réaction d'adsorption est rapide relativement à l'échelle de temps de l'écoulement). De ce fait, la cinétique de la réaction d'adsorption n'est pas considérée. La fonction $\varphi_i(\cdot)$ reliant les inconnues N_i^{abs} et $(N_j)_{j=1..n}$ est appelée isotherme d'adsorption. Les équations de conservations de la masse sont alors réécrites

$$\partial_t (N_i + \varphi_i(N_1, \dots, N_n)) + \mathbf{U} \cdot \nabla N_i - \sum_{j=1}^n D_{ij} \Delta N_j = 0. \quad (I.5)$$

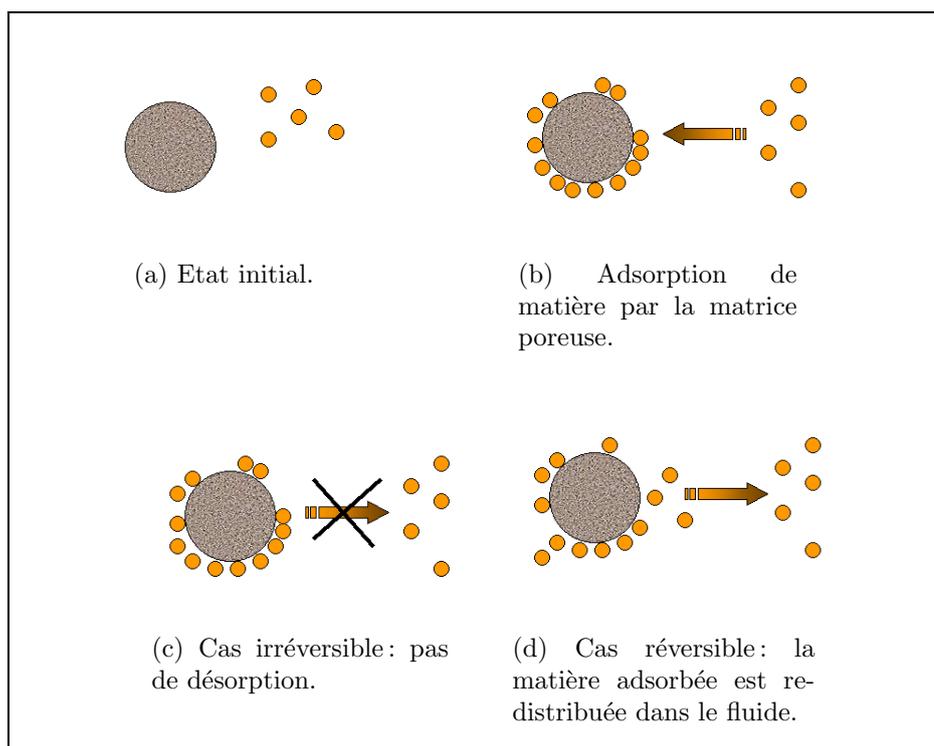


FIG. 4 – *Adsorption, désorption et irréversibilité.*

Un tel changement d’inconnue présente par ailleurs plusieurs avantages :

- il permet de restreindre le nombres d’inconnues,
- il restreint de la même manière le domaine d’étude à la phase fluide,
- il permet de décrire une classe large de comportements “naturels”.

Sur le dernier point, on effectue dans la partie 5, un changement d’échelle pour deux type d’isothermes: l’isotherme de Langmuir irréversible (lipschitzien, nul en 0) et l’isotherme de Freundlich (monotone, non lipschitzien). On trouve beaucoup d’autres exemples d’isothermes dans la littérature (*cf.* notamment [20], [45]) obtenus de manière empirique ou encore à l’aide de la thermodynamique statistique. La modélisation des effets d’adsorption a par ailleurs fait l’objet de plusieurs études (*cf.* [32] ou encore [41], [42]). D’un point de vue mathématique, la présence d’un coefficient de couplage devant le terme d’évolution dans l’équation de conservation de la masse commande d’obtenir un résultat d’existence de solution forte et suffisamment de régularité sur celle-ci pour éviter le recours à des espaces fonctionnels tératologiques (par la définition de solution faible, ultra faible) où les règles de dérivation à la chaîne sont très délicates et où la définition de dérivée nor-

male (flux) doit être affaiblie. On prend le parti que les différentes expressions mathématiques rencontrées et qui ont une interprétation physique pour l'utilisateur soient représentées par des classes de fonctions de Sobolev. Des exemples d'équations possédant de telles non-linéarités ont été traités notamment par F. DE THELIN et J.I. DIAZ dans [26]. La partie suivante est ainsi consacrée à l'analyse mathématique des équations de conservation.

Deuxième partie

A l'échelle du pore : le milieu libre

Chapitre 1

Analyse mathématique des équations locales

Nous présentons ici l'analyse mathématique d'un modèle tenant compte des effets d'adsorption, de diffusion et de thermodiffusion dans un écoulement multiconstituant. Après avoir mis en place un cadre fonctionnel approprié, on démontre notamment l'existence d'une solution au problème par une technique de point fixe. L'admissibilité physique de la solution est démontrée en partie par application du lemme d'Ascoli. On exhibe ensuite une méthode de transposition ramenant le problème de l'unicité de la solution à l'étude d'un problème dual. On énonce enfin un résultat de forte stabilité locale des fractions massiques par rapport au coefficient de Soret.

1.1 Introduction

Nous nous plaçons dans le cas d'un liquide constitué de n composants se déplaçant dans un capillaire modélisant à l'échelle locale un pore. L'analyse mathématique qui suit est indépendante de la géométrie (sauf pour ce qui est de l'analyse numérique) et représente de façon plus générale l'étude mathématique d'un modèle caractérisant le couplage entre effets d'adsorption et des effets du second ordre tels la diffusion moléculaire et la thermodiffusion intervenant dans un fluide multiconstituant

1.1 Introduction

à l'intérieur d'une colonne capillaire. Ce modèle, dans le cas de grands nombres de Péclet (convection prépondérante) est aussi celui de la chromatographie, même si les seuls effets de sorption sont habituellement pris en compte (système alors modélisé par des équations hyperboliques du premier ordre (*cf.* notamment [44])). Il peut toutefois se révéler intéressant de considérer les phénomènes de transport diffusif et de dispersion en chromatographie, notamment en chromatographie analytique, processus donnant lieu à des gradients de concentration importants et où opère alors la diffusion moléculaire.

L'équation de bilan de la matière pour l'espèce k est alors donnée, en l'absence de réaction chimique, par

$$\left\{ \partial_t (N_k + \varphi^k(\mathbf{N})) + \operatorname{div}(\vec{J}_k) = 0, \quad (1 \leq k \leq n) \right. \quad (\text{II.1.1})$$

où \vec{J}_k est le flux de matière associé à la fraction massique N_k du composant k et $\varphi_k(\cdot)$ est une fonction à variable vectorielle, appelée "isotherme d'adsorption", traduisant la quantité de matière absorbée par la matrice poreuse de la colonne. Cette fonction permet de réduire de moitié le nombre d'inconnues du problème puisqu'on ne s'intéresse qu'aux espèces présentes dans la phase mobile, le fluide. L'aspect de l'adsorption que nous privilégions est celui d'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire d'un état où la répartition d'un constituant entre les deux phases (mobile et stationnaire) est établie. L'expression de la famille de fonctions $(\varphi_k)_k$ est obtenue à l'aide de la thermodynamique statistique et ne prend pas en compte une quelconque cinétique (le facteur de retard φ_k ne dépend pas directement du temps). La séparation proprement dite résulte alors du couplage entre mouvement forcé et rétention, c'est-à-dire entre des phénomènes de nature hydrodynamique d'une part et thermodynamique d'autre part. L'expression du flux \vec{J}_k est donnée à l'aide de la loi de Fick par

$$\vec{J}_k = - \sum_{j=1}^n D_{kj} \vec{\nabla} N_j + N_k \mathbf{U} - D_{\theta}^k N_k \left(\sum_{j=1}^n N_j - N_k \right) \vec{\nabla} \theta. \quad (\text{II.1.2})$$

L'explication des différents termes pris en compte dans ce flux est donnée dans la partie précédente. Le but est de montrer que le problème considéré est bien posé au sens de Hadamard: se donnant une vitesse et un profil thermique réguliers (on peut

1.1 Introduction

aussi coupler ces équations avec l'équation de l'énergie), on considère les équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t [N_i + \varphi^i(N_1, \dots, N_n)] + \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} N_i - \sum_{j=1}^n D_{ij} \Delta N_j - \operatorname{div}(S_t^i N_i (\sum_{j=1}^n N_j - N_i) \vec{\nabla} \theta) = 0 \\ (1 \leq i \leq n), \text{ dans un cylindre }]0, T[\times \Omega, \Omega \subset \mathbb{R}^3 \end{array} \right.$$

associées à des conditions de bord et initiales conformes à l'expérimentation, où Ω est un ouvert borné et connexe de \mathbb{R}^3 de frontière Γ lipschitzienne, partitionnée selon la règle

$$\Gamma = \partial\Omega = \Gamma_e \cup \Gamma_l \cup \Gamma_s \cup \partial\Gamma_l, \mathcal{L}^2 - \operatorname{mes}(\Gamma_e \cup \Gamma_s) > 0, \quad (\text{II.1.3})$$

et Γ_e (resp. Γ_s) représente la "section" d'entrée (resp. de sortie) du fluide, et Γ_l la paroi étanche et isolée thermiquement du domaine considéré. On adjoint à ces équations des conditions de bord de type Dirichlet non homogène et Neumann homogène, ainsi qu'une condition initiale, pour la formulation complète du problème sur la frontière parabolique. Pour mettre en lumière la structure mathématique du modèle et garder la maîtrise de l'analyse lors d'éventuelles corrections des lois d'état, on considère plus largement une formulation générale. Soit alors le système d'équations aux dérivées partielles, modélisant en particulier les équations de convection - diffusion et thermodiffusion avec effet d'adsorption pour un fluide multiconstituant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t N_i + \sum_{j=1}^n \frac{\partial \varphi^i(\mathbf{N})}{\partial x_j} \partial_t N_j - \sum_{j=1}^n D_{ij} \Delta N_j + \vec{\nabla}(\mu(N_i)) \cdot \mathbf{U} + \operatorname{div}(\sigma^i(\mathbf{N}) \vec{\nabla} \theta) = 0 \\ \text{dans }]0, T[\times \Omega, \text{ sous les conditions suivantes au bord parabolique :} \\ N_i(0, \cdot) = N_i^0, \quad N_i = N_i^{\text{bord}} \text{ sur } \Gamma_e \cup \Gamma_s, \quad \frac{\partial N_i}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l, \quad \mathbf{U} \cdot \vec{n} = 0 \text{ et } \frac{\partial \theta}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l \\ \mathbf{U} \text{ et } \vec{\nabla} \theta \text{ étant deux champs de vecteurs donnés, stationnaires et réguliers, tels que :} \\ \vec{\nabla} \theta \in (L^\infty(\Omega))^3, \quad \Delta \theta \in L^2(\Omega), \quad \operatorname{div}(\mathbf{U}) = 0, \quad 1 \leq i \leq n, \end{array} \right.$$

où :

μ est une fonction lipschitzienne de \mathbb{R} dans \mathbb{R} nulle en 0 et (σ^i) représente une famille de fonctions de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R} telles que $\sigma^i(N_1, \dots, N_{i-1}, 0, N_{i+1}, \dots, N_n) = 0$, prolongées de telle sorte que $\sigma^i(\mathbf{N}) = 0$ sur $\{\mathbf{N} \in \mathbb{R}^n, N_i \leq 0\}$.

1.1 Introduction

On introduit de manière classique l'espace fonctionnel hilbertien

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1(\Omega), \text{trace}(v) = 0 \text{ sur } \Gamma_e \cup \Gamma_s\}. \quad (\text{II.1.4})$$

Les profils permanents thermiques et la vitesse seront supposés donnés *a priori*, avec la régularité précisée ci-dessus. On considère un écoulement non turbulent incompressible (on sait en effet que la diffusion thermique et la viscosité sont modifiées par la turbulence, cf. J.I. DIAZ et F. DE THELIN [26] sur ce point).

Remarque 1

Dans la suite, les lettres en gras désigneront des grandeurs vectorielles.

Le problème considéré présente une condition de type Dirichlet non homogène sur $(\Gamma_e \cup \Gamma_s)$ que l'on traite par l'introduction d'une inéquation variationnelle vectorielle (cf. [18], p.143, [48] ou [31]) relative au convexe fermé K de $(H^1(\Omega))^n$, défini par

$$K = \prod_{i=1}^n K_i, \quad \text{où } K_i = \{v \in H^1(\Omega), v|_{\Gamma_e \cup \Gamma_s} = N_i^{\text{bord}}\} \text{ et } \mathcal{V} = K_i - K_i.$$

Il faut donc s'assurer que chacun des K_i est non vide, ce que l'on supposera désormais, i.e. précisément, que chaque fonction N_i^{bord} est suffisamment régulière (en fait que N_i^{bord} appartienne à $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_e \cup \Gamma_s)$, défini comme l'espace des restrictions à $(\Gamma_e \cup \Gamma_s)$ des fonctions de $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$ (cf. sur ce point, [24], vol. 4, chap. VII, §2)).

Afin d'écrire les équations scalaires sous forme vectorielle, nous introduisons les notations suivantes :

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} N_1 \\ \dots \\ N_n \end{pmatrix} \text{ le vecteur des concentrations, et } \mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_1 \\ \dots \\ V_n \end{pmatrix} \text{ le vecteur des}$$

fonctions "test", pris *a priori* dans $(\mathcal{V})^n$.

On introduit de même les matrices suivantes :

$$\tilde{\mathbf{K}}(x_1, \dots, x_n) = \begin{pmatrix} K_{11}(x) & \dots & K_{1n}(x) \\ \dots & \dots & \dots \\ K_{n1}(x) & \dots & K_{nn}(x) \end{pmatrix}$$

1.1 Introduction

où $K_{ij}(x) = \delta_{ij} + \frac{\partial \varphi^i}{\partial x_j}(x)$, pour $(1 \leq i, j \leq n)$ et pour $x \in (\mathbb{R}^+)^n$, puis pour $x \in \mathbb{R}^n$, après prolongement *ad hoc* (où δ_{ij} désigne le symbole de Kronecker).

Le tenseur de diffusion est défini par :

$$D = [D_{ij}]_{1 \leq i, j \leq n}, \quad D_{ij} \in \mathbb{R}.$$

Nous donnerons des hypothèses de vérification simple en pratique relatives à ces différents éléments, et suffisantes à l'analyse mathématique du modèle.

En multipliant de manière informelle chaque équation (E_i) par la composante correspondante V_i dans \mathcal{V} et en intégrant sur Ω , on obtient à l'aide de formules de Green le problème variationnel vectoriel en vue de définir une solution forte :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher } \mathbf{N} \in (L^\infty(0, T; H^1(\Omega)) \cap H^1(Q))^n, \mathbf{N}(t, \cdot) \in K \text{ p.p. en } t, \text{ tel que,} \\ \text{pp. } t \in]0, T[, \forall \mathbf{V} \in (L^2(0, T; \mathcal{V}))^n, \\ \text{(P) } \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{N}) \partial_t \mathbf{N}, \mathbf{V}) + d(\mathbf{N}, \mathbf{V}) + U(\mathbf{N}, \mathbf{V}) + \sigma(\mathbf{N}, \theta, \mathbf{V}) = 0 \\ \mathbf{N}(0, \cdot) = \mathbf{N}^0 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

où on aura préalablement défini d, U, σ et (\cdot, \cdot) de la manière suivante (en utilisant désormais la convention de somme sur l'indice répété) :

$$\begin{aligned} d(\mathbf{N}, \mathbf{V}) &= D_{ij} \int_{\Omega} \vec{\nabla} N_j \cdot \vec{\nabla} V_i dx, \quad U(\mathbf{N}, \mathbf{V}) = - \int_{\Omega} \mu(N_i) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} V_i dx \\ \sigma(\mathbf{N}, \theta, \mathbf{V}) &= - \int_{\Omega} \sigma^i(\mathbf{N}) \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} V_i dx, \quad (\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{N}), \partial_t \mathbf{N}, \mathbf{V}) = \int_{\Omega} K_{ij}(\mathbf{N}) \partial_t N_j V_i dx. \end{aligned}$$

On est donc amené à étudier l'existence de la solution forte d'un système couplé d'équations d'évolution de type parabolique non linéaire avec des terme de transport et de convection thermique non linéaires et des conditions de bord mêlées. Il s'agit de montrer que cette formulation est bien posée au sens de Hadamard.

Hypothèse 1 *La matrice $\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{x})$ et le tenseur de diffusion sont à diagonales prépondérantes, i.e. vérifient les conditions de pseudo-ellipticité, uniformes par rapport à x :*

$$(\mathcal{H}) \left\{ \begin{array}{l} \exists \alpha > 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \forall \zeta \in \mathbb{R}^n, \quad \left(\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{x}) \zeta, \zeta \right) \geq \alpha \|\zeta\|^2, \\ \exists d > 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \forall \zeta \in \mathbb{R}^n, \quad \left(\tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{x}) \zeta, \zeta \right) \geq d \|\zeta\|^2. \end{array} \right.$$

1.1 Introduction

Nous explicitons par la suite une condition suffisante, simple à vérifier, assurant la validité de l'hypothèse précédente. Soit le tenseur défini par

$$K_{ij}^* = \begin{cases} 1 - \left| \frac{\partial \varphi^i}{\partial x_i} \right|_{L^\infty(\mathbb{R}_+^n)} & \text{si } i = j \\ \left| \frac{\partial \varphi^i}{\partial x_j} \right|_{L^\infty(\mathbb{R}_+^n)} & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (\text{II.1.5})$$

En supposant que la matrice constante $\tilde{\mathbf{K}}_{ij}^*$ (non nécessairement symétrique) d'élément générique K_{ij}^* soit à diagonale dominante, au sens où :

$$(\mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{K}}^*}) \begin{cases} \forall i \in \{1..n\} \\ K_{ii}^* > \frac{1}{2} \sum_{j=1, j \neq i}^n (K_{ij}^* + K_{ji}^*) \geq 0. \end{cases}$$

Proposition 1

Sous l'hypothèse $(\mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{K}}^})$, la matrice $\tilde{\mathbf{K}}_{ij}^*(\mathbf{x})$ vérifie la condition (\mathcal{H}) .*

✓ Preuve

Soient $(i, j) \in \{1..n\}^2$ tels que $i \neq j$; alors, pour tout $\zeta \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} K_{ij}(x) \zeta_i \zeta_j dx \right| &\leq \frac{1}{2} |K_{ij}|_{L^\infty} \int_{\Omega} |\zeta_i|^2 dx + \frac{1}{2} |K_{ij}|_{L^\infty} \int_{\Omega} |\zeta_j|^2 dx \\ &= \frac{1}{2} K_{ij}^* \int_{\Omega} |\zeta_i|^2 dx + \frac{1}{2} K_{ij}^* \int_{\Omega} |\zeta_j|^2 dx \end{aligned}$$

1.1 Introduction

d'où,

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} \int_{\Omega} K_{ij} \zeta_i \zeta_j dx &= \sum_i \int_{\Omega} K_{ii}(x) |\zeta_i|^2 dx + \sum_{i,j \text{ } i \neq j} \int_{\Omega} K_{ij}(x) \zeta_i \zeta_j dx \\
&\geq \sum_i \left\{ \left[K_{ii}^* - \frac{1}{2} \sum_j (K_{ij}^* + K_{ji}^*) \right] \int_{\Omega} |\zeta_i|^2 dx \right\} \\
&\geq \alpha \sum_i \int_{\Omega} |\zeta_i|^2 dx \\
&= \alpha \|\zeta\|^2
\end{aligned}$$

à l'aide de l'hypothèse ($\mathcal{H}_{\mathbf{K}^*}$), pour un certain α strictement positif. ■

Hypothèse 2 *On suppose de plus que le tenseur de diffusion est symétrique i.e.*

$$\forall (i,j) \in \{1, \dots, n\}^2 \quad D_{ij} = D_{ji} \quad (\text{II.1.6})$$

Cette dernière hypothèse, physiquement admissible, est communément adoptée dans la littérature (P. BIA, M. COMBARNOUS [14], G. DUVAUT, J.L. LIONS [31]).

Dans un premier temps et pour des raisons techniques, nous traiterons le problème pour les conditions de régularité suivantes (hypothèses de régularité provisoirement adoptées en vue d'établir un résultat préparatoire) :

$$\mu \in C^1(\mathbb{R}) \cap W^{1,+\infty}(\mathbb{R}), \mu(0) = 0, \sigma^i \in C^1(\mathbb{R}^n) \cap W^{1,+\infty}(\mathbb{R}^n)$$

Par un argument de densité, on pourra ensuite s'affranchir de l'hypothèse de différentiabilité pour ne garder que le caractère plus conforme à la réalité de lip-schitzianité des fonctions d'état.

Nous proposons ici le plan de travail suivant pour l'analyse mathématique du phénomène en milieu libre:

- Dans un premier temps, on démontre l'existence d'une solution au problème, en établissant des estimations *a priori* après s'être intéressé à un problème

1.1 Introduction

linéarisé. On met alors en oeuvre une méthode de point fixe de type Schauder Tychonov, usuelle pour le traitement des lois de conservation paraboliques quasi linéaires (*cf.* G. GAGNEUX - M. MADAUNE-TORT [35]). La méthode est traitée dans le cas d'une condition au bord de type "Dirichlet homogène" puis généralisée aux situations du type "Dirichlet non homogène".

- Dans un second temps, on démontre que cette solution est physiquement admissible dans des cas particuliers usuels pour l'expérimentateur, tels en dimension d'espace égale à 1 (cas du tube capillaire).
- On établit enfin un résultat d'unicité et de dépendance continue pour des topologies *ad hoc* de la solution en fonction de l'état initial et de certains paramètres du transport convectif en se ramenant à un problème auxiliaire, selon la méthode de transposition introduite par S.N. ANTONTSEV et A.V. DOMANSKĪ [7] (*cf.* aussi sur ce point G. GAGNEUX [34]) ou DE HOLMGREN ([63], *p.* 66 – 68). On donne notamment, un résultat sur la stabilité de la fraction massique selon le coefficient de thermodiffusion.

1.2 Condition au bord de type “Dirichlet homogène”

On se ramène ici à un problème de type homogène à l’aide d’un relèvement régulier des conditions de bord. Ce procédé introduit alors une modification de la définition des lois d’état non linéaires et des termes nouveaux dans le second membre, réguliers, n’altérant pas la méthode propre à démontrer l’existence de la solution à ce problème. Il est donc possible, sans perte de généralité, d’étudier le problème de type Dirichlet homogène sur $(\Gamma_e \cup \Gamma_s)$, dès lors que les fonctions N_i^{bord} sont assez régulières (d’après la remarque précédente).

On définit préalablement, pour des raisons de commodité d’écriture, la famille de fonctions suivantes:

$$\mu_i^k \equiv \frac{\partial \sigma^i}{\partial x_k} \quad (\text{II.1.7})$$

Soit alors $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)^\top$ un vecteur à notre discrétion pris dans $(H^1(Q))^n$ et soit $(P_{lin}^0(\mathbf{f}))$ le problème suivant (avec la convention de l’indice répété d’Einstein):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \mathbf{N} \in (L^2(0, T; \mathcal{V}))^n, \text{ tel que } \partial_t \mathbf{N} \in (L^2(Q))^n, \\ \text{solution du problème de Cauchy paralinéarisé dans } Q =]0, T[\times \Omega \\ \partial_t N_i + \frac{\partial \varphi^i(\mathbf{f})}{\partial x_j} \partial_t N_j - D_{ij} \Delta N_j + \mu'(f_i) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} N_i + \sigma^i(\mathbf{f}) \Delta \theta + \left(\mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x_j} = 0 \\ N_i(0, \cdot) = N_i^0, \\ \text{associé aux conditions latérales :} \\ N_i = 0 \text{ sur } \Gamma_e \cup \Gamma_s, \frac{\partial N_i}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l, \mathbf{U} \cdot \vec{n} = 0 \text{ et } \frac{\partial \theta}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l \quad (1 \leq i \leq n). \end{array} \right.$$

Proposition 2

Sous les hypothèses précédentes, et pour tout \mathbf{f} pris dans $(H^1(Q))^n$, le problème $(P_{lin}^0(\mathbf{f}))$ admet une solution \mathbf{N} appartenant à $(L^\infty(0, T; \mathcal{V}) \cap H^1(Q))^n$ et une seule.

Principe de la démonstration:

Le problème considéré est constitué d’une famille faiblement couplée d’équations paraboliques linéaires. Il suffit d’appliquer les résultats généraux abstraits sur les systèmes paraboliques linéaires (immédiat d’après le théorème de J.L. LIONS appliqué aux équations vectorielles ([48] chap. 3, [50])). ■

1.2.1 Estimations *a priori* dans un cadre fonctionnel approprié

Proposition 3

L’analyse du problème paralinéarisé $(P_{lin}^0(\mathbf{f}))$ permet de mettre en évidence les estimations *a priori* suivantes :

$$\begin{cases} \exists C_1 > 0, \text{ tel que, } \forall \mathbf{f} \in (H^1(Q))^n, \|\mathbf{N}\|_{(L^\infty(0,T;\mathcal{V}))^n} \leq C_1 \\ \exists C_2 > 0, \text{ tel que, } \forall \mathbf{f} \in (H^1(Q))^n, \|\partial_t \mathbf{N}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega)^n)} \leq C_2 \end{cases} \quad (\text{II.1.8})$$

ces constantes dépendant uniquement de \mathbf{N}^0, d, α , des diverses constantes de Lipschitz des fonctions d’état, de $\|\mathbf{U}\|_{(L^\infty(Q))^n}, T, \left| \vec{\nabla} \theta \right|_{(L^\infty(Q))^n}, |\Delta \theta|_{L^2(Q)}$.

✓ Preuve

En multipliant chaque équation par $\partial_t N_i$ et en sommant sur i , nous obtenons l’égalité, pour presque tout t et presque partout dans Ω :

$$\begin{cases} (\partial_t N_i)^2 + \frac{\partial \varphi^i(\mathbf{f})}{\partial x_j} \partial_t N_i \partial_t N_j - D_{ij} \Delta N_j \partial_t N_i + \mu'(f_i) \partial_t N_i \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} N_i \\ + \sigma^i(\mathbf{f}) \partial_t N_i \Delta \theta + \left(\mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \right) \partial_t N_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} = 0 \end{cases}$$

On intègre ensuite sur Ω pour obtenir, pour presque tout t ,

$$\begin{cases} \int_{\Omega} K_{ij}(\mathbf{f}) \partial_t N_j \partial_t N_i dx - \int_{\Omega} D_{ij} \Delta N_j \partial_t N_i dx + \int_{\Omega} \mu'(f_i) \vec{\nabla} N_i \cdot \mathbf{U} \partial_t N_i dx \\ + \int_{\Omega} \sigma^i(\mathbf{f}) \partial_t N_i \Delta \theta dx + \int_{\Omega} \left(\mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \right) \partial_t N_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} dx = 0 \end{cases}$$

Ainsi, pour presque tout t ,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} K_{ij}(\mathbf{f}) \partial_t N_j \partial_t N_i dx - \int_{\Omega} D_{ij} \Delta N_j \partial_t N_i dx \\ & \leq \int_{\Omega} \left| \mu'(f_i) \vec{\nabla} N_i \cdot \mathbf{U} \partial_t N_i \right| dx + \int_{\Omega} \left| \sigma^i(\mathbf{f}) \partial_t N_i \Delta \theta \right| dx + \int_{\Omega} \left| \mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \partial_t N_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right| dx \end{aligned}$$

1.2 Condition au bord de type “Dirichlet homogène”

Puis, par intégration entre 0 et τ où $\tau \in [0, T]$, et en utilisant les hypothèses émises et les définitions des normes considérées :

$\|\mathbf{N}\|_n^2 = \int_{\Omega} \left| \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} N_i \right| dx$: norme sur \mathcal{V}^n (par définition de la norme hilbertienne de l'espace produit, \mathcal{V} étant muni de la norme définie par le produit scalaire de type Poincaré, conséquence directe de la définition de \mathcal{V} et de la généralisation de l'inégalité de Poincaré).

Les hypothèses émises permettent alors d'affirmer que :

$$\int_0^\tau (\tilde{\mathbf{K}}(x) \partial_t \mathbf{N}, \partial_t \mathbf{N}) dt \geq \alpha \int_0^\tau |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 dt$$

et

$$\begin{aligned} \int \int_{\Omega \times [0, T]} D_{ij} \vec{\nabla} N_j \cdot \vec{\nabla} (\partial_t N_i) dx dt &= \frac{D_{ij}}{2} \int \int_{\Omega \times [0, T]} \partial_t (\vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} N_j) dx dt \\ &= \frac{D_{ij}}{2} \int_{\Omega} (\vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} N_j) (\tau) dx - \frac{D_{ij}}{2} \int_{\Omega} (\vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} N_j) (0) dx \\ &\geq \frac{d}{2} \|\mathbf{N}(\tau)\|_n^2 - \sum_{ij} \frac{D_{ij}}{2} \|\mathbf{N}(0)\|_n^2. \end{aligned}$$

De plus, à l'aide de l'inégalité de Young, on a, pour ε strictement positif à choisir au moment opportun de la démonstration,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left| \mu'(f_i) \vec{\nabla} N_i \cdot \mathbf{U} \partial_t N_i \right| dx &\leq C(\varepsilon) \|\mathbf{N}\|_n^2 + \frac{\varepsilon}{3} |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 \\ \int_{\Omega} \left| \sigma^i(\mathbf{f}) \partial_t N_i \Delta \theta \right| dx &\leq C'(\varepsilon) |\Delta \theta|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\varepsilon}{3} |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 \\ \int_{\Omega} \left| \mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \partial_t N_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right| dx &\leq C''(\varepsilon) \|\mathbf{N}\|_n^2 + \frac{\varepsilon}{3} |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 \end{aligned}$$

où $C''(\varepsilon)$ dépend de $|\mu_k^i|_{L^\infty(\Omega)}$, $|\vec{\nabla} \theta|_{L^\infty(Q)}$, et $C(\varepsilon)$ dépend de $\|\vec{\nabla} \mu\|_{(L^\infty(\Omega))^n}$, $\|\mathbf{U}\|_{(L^\infty(\Omega))^n}$.

1.2 Condition au bord de type “Dirichlet homogène”

Ainsi, on obtient l’inégalité (\diamond) , pour tout τ de $[0, T]$,

$$\alpha \int_0^\tau |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 dt + \frac{d}{2} \|\mathbf{N}(\tau)\|_n^2 \leq C_1(\mathbf{N}^0, \theta) + \varepsilon \int_0^\tau |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 dt + C(\varepsilon) \int_0^\tau \|\mathbf{N}(s)\|_n^2 ds$$

où $C(\varepsilon) = C(\varepsilon, |\mu_k^i|_{L^\infty(\Omega)}, \|\vec{\nabla} \theta\|_{L^\infty(Q)}, \|\vec{\nabla} \mu\|_{(L^\infty(\Omega))^n}, \|\mathbf{U}\|_{(L^\infty(\Omega))^n})$.

On choisit ensuite ε assez petit pour que le terme $\varepsilon \int_0^\tau |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 dt$ soit absorbé par le premier membre de l’inégalité (il suffit de prendre, par exemple $\varepsilon = \varepsilon_0 = \frac{\alpha}{2}$). On obtient alors en particulier l’inégalité suivante :

$$\forall \tau \in [0, T], \quad \|\mathbf{N}(\tau)\|_n^2 \leq C_1(\mathbf{N}^0, \theta) + C(\varepsilon_0) \int_0^\tau \|\mathbf{N}(s)\|_n^2 ds.$$

On utilise ensuite le lemme de Gronwall ([24], p.672, vol. 2) pour obtenir la majoration uniforme suivante :

$$\begin{aligned} \text{pour tout } \tau \text{ dans } [0, T] \quad \|\mathbf{N}(\tau)\|_n^2 &\leq C_1(\mathbf{N}^0, \theta) \int_0^\tau C(\varepsilon_0) ds \\ &= \underbrace{C_1(\mathbf{N}^0, \theta) T C(\varepsilon_0)}_{C_1} \end{aligned}$$

Ainsi, \mathbf{N} demeure dans un borné fixe de $(L^\infty(0, T; \mathcal{V}))^n$ et *a fortiori*, il existe une constante \tilde{C}_1 telle que pour tout $p \in]1, +\infty]$

$$\|\mathbf{N}\|_{(L^p(0, T; \mathcal{V}))^n} \leq \tilde{C}_1$$

puisque T est fini. On réutilise ensuite l’inégalité (\diamond) pour obtenir la majoration sur la dérivée par rapport au temps :

$$\frac{\alpha}{2} \int_0^\tau |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 dt \leq C_2.$$

■

1.2.2 Mise en œuvre d’une stratégie de point fixe

On énonce un premier lemme de démonstration immédiate.

Lemme 1

La famille de fonctions $\mathbf{N} = \mathbf{N}(f_1, f_2, \dots, f_n)$ reste, indépendamment de \mathbf{f} , dans un borné fixe de $X = (L^\infty(0, T; \mathcal{V}) \cap H^1(Q))^n$, lorsque \mathbf{f} parcourt $(H^1(Q))^n$.

✓ Preuve

Ce résultat est immédiat d’après les estimations trouvées dans la proposition précédente. On déduit de celles-ci que \mathbf{N} reste dans un borné fixe de $(L^\infty(0, T; \mathcal{V}))^n$ (cela essentiellement par le fait que \mathbf{N}^0 est dans \mathcal{V}^n , donnée initiale régulière) et que $\partial_t \mathbf{N}$ reste dans un borné fixe de $(L^2(Q))^n$. ■

Notation et stratégie

Pour mettre en œuvre une méthode de point fixe, on recherche un espace de Banach à dual séparable (en vue d’obtenir des informations sur la métrisabilité de la topologie faible sur les bornés, d’après le théorème III.25’, p. 50 de [18]). En outre, pour disposer de propriétés de compacité pour la topologie faible, on introduit l’espace réflexif, pour p_0 fixé dans $[2, +\infty[$,

$$X_{p_0} = \{L^{p_0}(0, T; \mathcal{V}) \cap H^1(Q)\}^n \quad (\text{II.1.9})$$

et

$$\mathcal{K} = \left\{ \mathbf{V} \in X_{p_0}, \|\mathbf{V}\|_{X_{p_0}} \leq C, \text{ où } C = \sqrt{\tilde{C}_1^2 + C_2^2}, \mathbf{V}(0, \cdot) = \mathbf{N}^0 \right\} \quad (\text{II.1.10})$$

le borné relatif au lemme précédent.

De la considération de l’application $\mathfrak{S}_{p_0} : \begin{cases} X_{p_0} \rightarrow X_{p_0} \\ \mathbf{f} \rightarrow \mathbf{N} \end{cases}$ (bien définie en vertu de la proposition 2) et des calculs précédents, il résulte la propriété suivante :

1.2 Condition au bord de type “Dirichlet homogène”

Lemme 2

L'ensemble \mathcal{K} est stable par l'application \mathfrak{S}_{p_0} . De plus \mathcal{K} est un ensemble non vide, convexe fermé borné de X_{p_0} et donc faiblement compact de X_{p_0} .

✓ **Preuve**

Le premier point est immédiat d'après le lemme précédent. En outre, \mathcal{K} est une partie non vide (par définition de \mathbf{N}), convexe, fermée. Sachant que l'espace X_{p_0} est réflexif (c'est pour cela qu'il a été choisi), la propriété voulue résulte du corollaire III.19, p. 46 de [18]. ■

Proposition 4

L'application \mathfrak{S}_{p_0} admet un point fixe, solution du problème de départ.

✓ **Preuve**

On considère donc l'application \mathfrak{S}_{p_0} lorsque X_{p_0} est muni de la topologie faible $\sigma(X_{p_0}, (X_{p_0})')$, qui lui confère la structure d'espace vectoriel topologique localement convexe séparé. Pour mettre en oeuvre un théorème de point fixe de type "Schauder-Tychonov", il suffit de montrer que \mathfrak{S}_{p_0} est une application faiblement-faiblement séquentiellement continue de \mathcal{K} dans \mathcal{K} . Pour cela, considérons une suite $(\mathbf{f}^q)_{q \in \mathbf{N}}$ d'éléments de X_{p_0} , convergeant faiblement dans X_{p_0} vers \mathbf{f} .

Les fonctions \mathbf{N} et $\partial_t \mathbf{N}$ restant respectivement dans des bornés fixes de $(L^{p_0}(0, T; \mathcal{V}))^n$ et de $(L^2(Q))^n$, on peut en extraire des sous-suites faiblement convergentes (on notera \mathbf{N}^{q_k} et $\partial_t \mathbf{N}^{q_k}$ les "dernières" des sous-suites extraites). Ainsi,

$$\exists \mathbf{N} \in X_{p_0}, \text{ tel que } \mathbf{N}^{q_k} \xrightarrow{X_{p_0}} \mathbf{N} \text{ et } \mathbf{N} \in \mathcal{K}.$$

Il nous reste à montrer que

$$\mathbf{N} = \mathfrak{S}_{p_0}(\mathbf{f})$$

On a donc la propriété de convergence

$$\mathbf{N}^{q_k} \xrightarrow{(H^1(Q))^n} \mathbf{N}.$$

1.2 Condition au bord de type “Dirichlet homogène”

Or, pour tout $q_k \in \mathbb{N}$, les problèmes linéaires associés ($P_{lin}(f_{q_k})$) s'énoncent sous forme variationnelle par : $\mathbf{N}^{q_k} \in \mathcal{K}$ et $\forall \mathbf{V} \in \mathcal{V}^n$, p.p. en t,

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} K_{ij}(f_{q_k}) \partial_t N_j^{q_k} V_i dx + \int_{\Omega} D_{ij} \vec{\nabla} N_j^{q_k} \cdot \vec{\nabla} V_i dx + \int_{\Omega} \mu'((f_{q_k})_i) V_i \vec{\nabla} N_i^{q_k} \cdot \mathbf{U} dx \\ + \int_{\Omega} \sigma^i(f_{q_k}) V_i \Delta \theta dx + \int_{\Omega} \left(\mu'_i(f_{q_k}) \frac{\partial N_i^{q_k}}{\partial x_j} \right) V_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} dx = 0. \end{array} \right.$$

Par compacité de l'injection de $H^1(Q)$ dans $L^2(Q)$ (théorème de Rellich-Kondrachoff), on dispose des convergences suivantes :

$$\mathbf{f}_{q_k} \xrightarrow{pp \text{ dans } Q} \mathbf{f}$$

et, comme \tilde{K} est une matrice de fonctions régulières (de classe C^0), on a :

$$K_{ij}(\mathbf{f}_{q_k}) V_i \xrightarrow{pp \text{ dans } Q} K_{ij}(\mathbf{f}) V_i.$$

A l'aide du théorème de la convergence dominée de Lebesgue, et en considérant dans $L^2(Q)$ le produit d'une convergence forte et d'une convergence faible, on obtient :

$$\int_{\Omega} K_{ij}(\mathbf{f}_{q_k}) \partial_t N_j^{q_k} V_i dx \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \int_{\Omega} K_{ij}(\mathbf{f}) \partial_t N_j V_i dx.$$

On effectue de même pour les autres intégrales de l'équation en utilisant le fait techniquement essentiel ici que les coefficients d'état $\left(\mu', \frac{\partial \sigma^i}{\partial x_k}, \text{etc...} \right)$ sont bornés et continus.

L'application trace en $t = 0$ étant continue fortement de X_{p_0} dans $L^2(\Omega)$ et linéaire, elle y est faiblement faiblement continue et donc

$$\mathbf{N}(0, \cdot) = \mathbf{N}^0$$

1.2 Condition au bord de type “Dirichlet homogène”

On obtient à la limite, pour tout \mathbf{V} de \mathcal{V}^n et presque partout sur $]0, T[$: $\mathbf{N} \in \mathcal{K}$ et

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} K_{ij}(\mathbf{f}) \partial_t N_j V_i dx + \int_{\Omega} D_{ij} \vec{\nabla} N_j \cdot \vec{\nabla} V_i dx + \int_{\Omega} \mu'(f_i) V_i \vec{\nabla} N_i \cdot \mathbf{U} dx \\ + \int_{\Omega} \sigma^i(\mathbf{f}) V_i \Delta \theta dx + \int_{\Omega} \left(\mu_i^l(\mathbf{f}) \frac{\partial N_l}{\partial x_j} \right) V_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} dx = 0 \\ \mathbf{N}(0, \cdot) = \mathbf{N}^0(\cdot). \end{array} \right.$$

Il s'ensuit, d'après la propriété d'unicité, que

$$\mathbf{N} = \mathfrak{S}_{p_0}(\mathbf{f}).$$

Le point d'accumulation $\mathfrak{S}_{p_0}(\mathbf{f})$ étant indépendant de la sous-suite extraite du fait de l'unicité de la solution au problème parabolique linéarisé ($P_{lin}(\mathbf{f})$), on en déduit que toute la suite $(\mathbf{N}^q)_{q \in N}$ converge faiblement dans X_{p_0} vers $\mathbf{N} = \mathfrak{S}_{p_0}(\mathbf{f})$. L'application \mathfrak{S}_{p_0} est donc faiblement faiblement séquentiellement continue de \mathcal{K} dans \mathcal{K} , faiblement compact. D'après le lemme de Schauder - Tychonov, elle y admet un point fixe noté \mathbf{N} . Ainsi, parce que pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$ et avec la convention de l'indice répété,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma^i(\mathbf{N}) \Delta \theta + \left(\mu_i^k(\mathbf{N}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x_j} = \operatorname{div} \left(\sigma^i(\mathbf{N}) \vec{\nabla} \theta \right), \\ \mu'(N_i) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} N_i = \operatorname{div}(\mu(N_i) \mathbf{U}), \text{ car } \operatorname{div}(\mathbf{U}) = 0 \end{array} \right.$$

ce qui légitime *a posteriori* la formulation du problème paralinéarisé, et on peut énoncer :

$$\left\{ \begin{array}{l} \exists \mathbf{N} \in (L^{p_0}(0, T; \mathcal{V}) \cap H^1(Q))^n, \text{ tel que,} \\ p.p. t \in [0, T], \forall \mathbf{V} \in (L^2(0, T; \mathcal{V}))^n, \\ (\mathbf{P}) \left\{ \begin{array}{l} (\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{N}) \partial_t \mathbf{N}, \mathbf{V}) + d(\mathbf{N}, \mathbf{V}) + U(\mathbf{N}, \mathbf{V}) + \sigma(\mathbf{N}, \theta, \mathbf{V}) = 0 \\ \mathbf{N}(0, \cdot) = \mathbf{N}^0. \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Or, d'après le lemme 1, pour p_0 pris dans $[2, +\infty[$,

$$\mathfrak{S}_{p_0}(X_{p_0}) \subset X \subset X_{p_0} \tag{II.1.11}$$

1.3 Condition de type “Dirichlet non homogène”

et donc, *a fortiori*, tous les points fixes de l’application \mathfrak{S}_{p_0} , et donc, en l’occurrence, \mathbf{N} est en particulier dans $(L^\infty(0,T; \mathcal{V}))^n$. ■

1.3 Condition de type “Dirichlet non homogène”

On décrit ici le raisonnement utilisé pour démontrer directement l’existence d’une solution au problème avec condition de Dirichlet non homogène sur la partie du bord $(\Gamma_e \cup \Gamma_s)$. Pour cela, il nous faut d’abord donner des hypothèses de régularité sur les données le long de la frontière parabolique $(\{0\} \times \Omega \cup]0,T[\times \partial\Omega)$, en vue d’obtenir des solutions fortes.

Hypothèse 3

Soient les hypothèses de régularité sur les données au bord suivantes :

$\forall i \in \{1..n\}$,

$$\left\{ \begin{array}{l} N_i^{bord} \text{ admet un relèvement } \tilde{N}_i^{bord} \text{ dans } H^2(\Omega), \text{ avec } \frac{\partial \tilde{N}_i^{bord}}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l, \\ N_i^{bord} \geq 0 \text{ p.p. sur } \Gamma_e \cup \Gamma_s, \\ N_i^0 \in K \cap L^\infty(\Omega) \text{ et } N_i^0 \geq 0, \text{ p.p. dans } \Omega. \end{array} \right. \quad (\text{II.1.12})$$

On considère désormais $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)^\top$ un vecteur pris dans $(H^1(Q))^n$ et $(P_{lin}(\mathbf{f}))$ le problème

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \mathbf{N} \in (L^\infty(0,T; H^1(\Omega)))^n, \text{ tel que } \mathbf{N}(t) \in K \text{ p.p. en } t, \partial_t \mathbf{N} \in (L^2(Q))^n, \\ \text{vérifiant } \forall V \in (L^2(0,T; \mathcal{V}))^n \text{ et p.p. en } t \text{ sur }]0,T[, \forall i \in \{1..n\}, \\ \int_{\Omega} \partial_t N_i V_i dx + \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi^i(\mathbf{f})}{\partial x_j} \partial_t N_j dx + \int_{\Omega} D_{ij} \vec{\nabla} N_j \vec{\nabla} V_i dx \\ \quad + \int_{\Omega} \left[\mu'(f_i) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} N_i + \sigma^i(\mathbf{f}) \Delta \theta + \left(\mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right] V_i dx = 0 \\ N_i(0, \cdot) = N_i^0, \\ \text{associé aux conditions latérales :} \\ N_i = N_i^{bord} \text{ sur } \Gamma_e \cup \Gamma_s, \frac{\partial N_i}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l, \mathbf{U} \cdot \vec{n} = 0 \text{ et } \frac{\partial \theta}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l \quad (1 \leq i \leq n). \end{array} \right.$$

1.3 Condition de type “Dirichlet non homogène”

Proposition 5

Sous les hypothèses précédentes, et pour tout \mathbf{f} pris dans $(H^1(Q))^n$, le problème $(P_{lin}(\mathbf{f}))$ admet une solution \mathbf{N} appartenant à $(L^\infty(0,T; H^1(\Omega))) \cap H^1(Q)^n$ et une seule.

✓ Principe de la démonstration :

On introduit un changement d’inconnues

$$\tilde{N}_i = N_i - \tilde{N}_i^{bord}$$

de sorte que

$$\tilde{N}_i|_{\Gamma_e \cup \Gamma_s} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{N}_i}{\partial n}|_{\Gamma_l} = 0, \quad D_{ij} \Delta \tilde{N}_i^{bord} \in L^2(\Omega), \quad \tilde{N}_i(0) \in \mathcal{V}.$$

Ainsi, pour l’inconnue $\tilde{\mathbf{N}} = (\tilde{N}_1, \dots, \tilde{N}_n)$, il s’agit d’un problème parabolique linéaire de conditions aux limites homogènes, posé dans \mathcal{V}^n à second membre $(L^2)^n$ avec forme bilinéaire stationnaire et symétrique et état initial régulier dans \mathcal{V}^n , pour lequel il existe une solution régulière $(\tilde{N}_i \in L^\infty(0,T; \mathcal{V}), \partial_t \tilde{N}_i \in L^2(Q))$. En outre, grâce aux estimations de type Faedo-Galerkin et de la faible semi-continuité inférieure des formes convexes fortement continues, on dispose de l’estimation suivante, $\forall \tau \in [0, T]$,

$$(\#) \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega \times]0, T[} K_{ij}(\mathbf{f}) \partial_t N_j \partial_t N_i dx ds + \frac{1}{2} \int_{\Omega} d(\mathbf{N}(\tau), \mathbf{N}(\tau)) dx \\ \leq \sum_i \int_{\Omega \times]0, T[} F_i \partial_t N_i dx ds + \frac{1}{2} \int_{\Omega} d(\mathbf{N}(0), \mathbf{N}(0)) dx \end{array} \right.$$

en ayant préalablement posé, $\forall i \in \{1..n\}$,

$$F_i = \mu'(f_i) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} N_i + \sigma^i(\mathbf{f}) \Delta \theta + \left(\mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x_j}.$$

■

1.3 Condition de type “Dirichlet non homogène”

Remarque 2

En réalité, comme $\tilde{N}_i \in L^\infty(0,T; \mathcal{V})$ et $\partial_t \tilde{N}_i \in L^2(Q)$, on a la propriété

$$\tilde{N}_i \in C^0([0,T]; \mathcal{V}) \quad (\text{II.1.13})$$

c'est-à-dire

$$\forall \tau \geq 0, \tilde{N}_i(\tau) \text{ a un sens et } \tilde{N}_i(\tau) \in \mathcal{V}.$$

1.3.1 Estimations *a priori*

Proposition 6

L'analyse du problème paralinéarisé ($P_{lin}(\mathbf{f})$) permet de mettre en évidence les estimations *a priori* suivantes :

$$\begin{cases} \exists C_1 > 0, \text{ tel que, } \forall \mathbf{f} \in (H^1(Q))^n, \|\mathbf{N}\|_{(L^\infty(0,T;H^1(\Omega)))^n} \leq C_1 \\ \exists C_2 > 0, \text{ tel que, } \forall \mathbf{f} \in (H^1(Q))^n, \|\partial_t \mathbf{N}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega)^n)} \leq C_2 \end{cases} \quad (\text{II.1.14})$$

ces constantes dépendant uniquement de \mathbf{N}^0, d, α , des diverses constantes de Lipschitz des fonctions d'état, de $\|\mathbf{U}\|_{(L^\infty(Q))^n}, T, \left| \vec{\nabla} \theta \right|_{(L^\infty(Q))^n}, |\Delta \theta|_{L^2(Q)}$.

✓ **Preuve**

On réutilise ici l'estimation obtenue dans la démonstration précédente (§), en remarquant qu'elle peut être obtenue formellement en prenant dans la formulation du problème la fonction-test $V_i = \partial_t N_i$, *a priori* non loisible car non élément de $L^2(0,T; \mathcal{V})$, mais pouvant être approchée par le quotient différentiel $\frac{N_i(t+h, \cdot) - N_i(t, \cdot)}{h}$, élément de $L^2(0,T; \mathcal{V})$, car

$$tr_{\Gamma_e \cup \Gamma_s} \frac{N_i(t+h, \cdot) - N_i(t, \cdot)}{h} = \frac{N_i^{bord} - N_i^{bord}}{h} = 0. \quad (\text{II.1.15})$$

1.3 Condition de type “Dirichlet non homogène”

On utilise ensuite l’inégalité de Young, comme dans le cas homogène, pour ε strictement positif à choisir au moment opportun de la démonstration,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left| \mu'(f_i) \vec{\nabla} N_i \cdot \mathbf{U} \partial_t N_i \right| dx &\leq C(\varepsilon) \|\mathbf{N}\|_n^2 + \frac{\varepsilon}{3} |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 \\ \int_{\Omega} |\sigma^i(\mathbf{f}) \partial_t N_i \Delta \theta| dx &\leq C'(\varepsilon) |\Delta \theta|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\varepsilon}{3} |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 \\ \int_{\Omega} \left| \mu_i^k(\mathbf{f}) \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \partial_t N_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right| dx &\leq C''(\varepsilon) \|\mathbf{N}\|_n^2 + \frac{\varepsilon}{3} |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 \end{aligned}$$

où $C''(\varepsilon)$ dépend de $|\mu_i^k|_{L^\infty(\Omega)}$, $|\vec{\nabla} \theta|_{L^\infty(Q)}$, et $C(\varepsilon)$ dépend de $\|\vec{\nabla} \mu\|_{(L^\infty(\Omega))^n}$, $\|\mathbf{U}\|_{(L^\infty(\Omega))^n}$.

D’où, pour tout τ de $[0, T]$,

$$(\diamond) \quad \alpha \int_0^\tau |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 dt + \frac{d}{2} \|\mathbf{N}(\tau)\|_n^2 \leq C_1(\mathbf{N}^0, \theta) + \varepsilon \int_0^\tau |\partial_t \mathbf{N}|_n^2 dt + C(\varepsilon) \int_0^\tau \|\mathbf{N}(s)\|_n^2 ds$$

$$\text{où } C(\varepsilon) = C(\varepsilon, |\mu_i^k|_{L^\infty(\Omega)}, |\vec{\nabla} \theta|_{L^\infty(Q)}, \|\vec{\nabla} \mu\|_{(L^\infty(\Omega))^n}, \|\mathbf{U}\|_{(L^\infty(\Omega))^n}).$$

On choisit ensuite ε suffisamment petit et on obtient alors en particulier l’inégalité suivante :

$$\forall \tau \in [0, T], \quad \|\mathbf{N}(\tau)\|_n^2 \leq C_1(\mathbf{N}^0, \theta) + C(\varepsilon_0) \int_0^\tau \|\mathbf{N}(s)\|_n^2 ds.$$

L’estimation ainsi obtenue l’est sur $\sup_{[0, T]} \int_{\Omega} |\vec{\nabla} N_i|^2 dx$. C’est pourquoi il faut d’abord remarquer que sur $H^1(\Omega)$

$$u \longmapsto \left(\int_{\Omega} |\vec{\nabla} u|^2 dx + \int_{(\Gamma_e \cup \Gamma_s)} (\text{trace}(u))^2 d\sigma \right)^{\frac{1}{2}}$$

définit une norme équivalente à la norme usuelle dès que $d\sigma - \text{mes}(\Gamma_e \cup \Gamma_s) > 0$. Et donc, pour \mathbf{N} tel que $\mathbf{N}(t) \in K$, *p.p. en t*, on a, avec C^* constante

$$\|\mathbf{N}\|_{(L^\infty(0, T; H^1(\Omega)))^n} \leq C^* \sum_i \left\{ \sup_{[0, T]} \text{ess} \left(\int_{\Omega} |\vec{\nabla} u|^2 dx + \int_{(\Gamma_e \cup \Gamma_s)} (\text{trace}(u))^2 d\sigma \right)^{\frac{1}{2}} \right\}$$

1.3 Condition de type “Dirichlet non homogène”

et donc l’estimation sur les gradients fournit (et c’est une condition suffisante) une estimation de la norme $H^1(\Omega)$.

Ainsi, selon le lemme de Gronwall et la remarque sur l’équivalence de norme, \mathbf{N} élément de K demeure dans un borné fixe de $(L^\infty(0,T; H^1(\Omega)))^n$ et *a fortiori*, il existe une constante \tilde{C}_1 telle que pour tout $p \in]1, +\infty]$

$$\|\mathbf{N}\|_{(L^p(0,T; H^1(\Omega)))^n} \leq \tilde{C}_1.$$

On réutilise ensuite l’inégalité (\diamond) pour obtenir la majoration sur la dérivée par rapport au temps. ■

1.3.2 Un théorème de point fixe

Dans le cas non homogène, les deux lemmes énoncés dans la partie précédente ainsi que la stratégie envisagée restent valables; nous les rappelons ici, avec les changement d’espaces nécessaires. Les démonstration similaires à celles de la partie précédente ne sont pas reproduites ici.

Lemme 3

La famille de fonctions $\mathbf{N} = \mathbf{N}(f_1, f_2, \dots, f_n)$ reste, indépendamment de \mathbf{f} , dans un borné fixe de $X = (L^\infty(0,T; H^1(\Omega)) \cap H^1(Q))^n$, lorsque \mathbf{f} parcourt $(H^1(Q))^n$.

De la même façon que dans le cas homogène, on recherche un espace de Banach à dual séparable.

On note donc désormais, pour p_0 fixé dans $[2, +\infty[$,

$$X_{p_0} = \{L^{p_0}(0,T; H^1(\Omega)) \cap H^1(Q)\}^n \quad (\text{II.1.16})$$

et

$$\mathcal{K} = \left\{ \mathbf{V} \in X_{p_0}, \|\mathbf{V}\|_{X_{p_0}} \leq C, \mathbf{V}(0, \cdot) = \mathbf{N}^0, \mathbf{V}(t, \cdot) \in K \text{ p.p. en } t \right\}, \quad (\text{II.1.17})$$

1.3 Condition de type “Dirichlet non homogène”

où $C = \sqrt{\tilde{C}_1^2 + C_2^2}$ selon les estimations de la proposition 6, et on considère de nouveau l’application

$$\mathfrak{S}_{p_0} : \left\{ \begin{array}{l} X_{p_0} \rightarrow X_{p_0} \\ \mathbf{f} \rightarrow \mathbf{N} \end{array} \right. . \quad (\text{II.1.18})$$

Remarque 3

On remarque ici que la définition de l’ensemble \mathcal{K} a été changée par rapport au cas homogène. En effet, on doit désormais incorporer la contrainte $\mathbf{V}(t, \cdot) \in K$ p.p. en t , afin de garder la condition p.p. en t , $\mathbf{V}(t)|_{\Gamma_e \cup \Gamma_s} = \mathbf{N}^{bord}$.

Pour le choix particulier $p_0 = 2$, on a

$$X_2 = (H^1(Q))^n . \quad (\text{II.1.19})$$

Lemme 4

L’ensemble \mathcal{K} est stable par l’application \mathfrak{S}_{p_0} . De plus \mathcal{K} est un ensemble non vide, convexe fermé borné de X_{p_0} et donc faiblement compact de X_{p_0} .

Proposition 7

L’application \mathfrak{S}_{p_0} admet un point fixe, solution du problème de départ.

✓ **Preuve**

La démonstration de cette proposition est identique à celle donnée dans la partie précédente. Il suffit de reprendre celle-ci en introduisant la définition de l’espace X_{p_0} donnée ci-dessus. ■

1.4 Admissibilité physique de la solution

1.3.3 Généralisation à des fonctions d'état moins régulières

Proposition 8

Le résultat de la proposition 7 reste vrai dans le cadre de régularité

$$\mu \in W^{1,+\infty}(\mathbb{R}), \sigma^i \in W^{1,+\infty}(\mathbb{R}^n).$$

✓ Preuve

On sait, notamment à l'aide de suites régularisantes, que toute fonction élément de $W^{1,+\infty}(\mathbb{R})$ peut être approchée par une suite d'éléments de $C^\infty(\mathbb{R}) \cap W^{1,+\infty}(\mathbb{R})$. Le résultat de la proposition 5 étant valable pour ce type de fonctions, il suffit d'approcher μ (respectivement (σ^i)) par une suite d'éléments de même module de Lipschitz de $C^1(\mathbb{R}) \cap W^{1,+\infty}(\mathbb{R})$ (respectivement $C^1(\mathbb{R}^n) \cap W^{1,+\infty}(\mathbb{R}^n)$). On conclut alors en passant à la limite, en remarquant, selon la proposition 6, que les estimations *a priori* restent valables, puisqu'elles peuvent être majorées indépendamment des fonctions d'état considérées par ce mode de régularisation. ■

1.4 Admissibilité physique de la solution

Hypothèse 4 *On suppose dans cette section que l'hypothèse (H) suivante est satisfaite :*

$$(H) \begin{cases} \forall (i,j), \forall (x_1, \dots, x_{i-1}, 0, x_{i+1}, \dots, x_n) \in (\mathbb{R}_+)^n, \\ \frac{\partial \varphi^i}{\partial x_j}(x_1, \dots, x_{i-1}, 0, x_{i+1}, \dots, x_n) = 0 \\ \forall (i,j), \quad D_{ij} = D_{ij} \delta_{ij} \text{ (tenseur de diffusion diagonal)}. \end{cases}$$

Proposition 9

Sous l'hypothèse (H), la solution du problème (P) vérifie la propriété de cohérence physique :

$$\forall \tau \in [0, T], \forall i \in \{1, \dots, n\}, N_i(\tau, \cdot) \geq 0, \quad \mathcal{L}^3 - pp. \text{ dans } \Omega. \quad (\text{II.1.20})$$

1.4 Admissibilité physique de la solution

✓ Preuve

Le principe de la démonstration se fonde sur le fait que l'espace \mathcal{V} est stable par troncature nulle à l'origine et permet le choix de la fonction test $\mathbf{V} = -\mathbf{N}^-$ où \mathbf{N}^- est la fonction définie par :

$$\begin{cases} \text{pp. } t \in]0, T[, \text{ et pp. } x \in \Omega \\ \mathbf{N}^-(x, t) = \max(\mathbf{0}, -\mathbf{N}(t, x)) \end{cases}$$

Ce choix est loisible puisque l'espace $(L^\infty(0, T; \mathcal{V}) \cap H^1(Q))^n$ est réticulé. Ainsi, $\forall i \in \{1..n\}$, et presque partout sur $]0, T[$

$$\begin{cases} - \int_{\Omega} K_{ij}(\mathbf{N}) \partial_t N_j N_i^- dx - \int_{\Omega} D_{ij} \vec{\nabla} N_j \cdot \vec{\nabla} (N_i^-) dx \\ + \int_{\Omega} \mu(N_i) \vec{\nabla} (N_i^-) \cdot \vec{u} dx + \int_{\Omega} \sigma^i(\mathbf{N}) \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} N_i^- dx = 0 \end{cases}$$

Or, $\forall i \in \{1..n\}$,

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} D_{ij} \vec{\nabla} N_j \cdot \vec{\nabla} (N_i^-) dx &= - \int_{\Omega \cap \{x \in \mathbb{R}^n, \mathbf{N} \leq 0\}} D_{ij} \vec{\nabla} N_j \cdot \vec{\nabla} (N_i^-) dx \\ &= D_{ii} \int_{\Omega} |\vec{\nabla} N_i^-|^2 dx \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

(d'après le théorème de Marcus et Mizel),

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mu(N_i) \vec{\nabla} (N_i^-) \cdot \mathbf{U} dx &= - \int_{\Omega \cap \{x \in \mathbb{R}^n, \mathbf{N} \leq 0\}} \mu(N_i) \vec{\nabla} N_i \cdot \mathbf{U} dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

(car μ est nulle sur \mathbb{R}^- , par construction),

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sigma^i(\mathbf{N}) \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} N_i^- dx &= \int_{\Omega \cap \{x \in \mathbb{R}^n, \mathbf{N} \leq 0\}} \sigma^i(\mathbf{N}) \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} N_i^- dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

1.4 Admissibilité physique de la solution

car σ est prolongée de façon que $\sigma^i(\mathbf{N}) = 0$ quand $N \leq 0$. D'où l'inégalité obtenue par intégration sur $[0, \tau]$, $\forall \tau \in [0, T]$,

$$\int_0^\tau (\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{N})\partial_t \mathbf{N}, -\mathbf{N}^-) dt \leq 0.$$

En utilisant l'hypothèse (H), et un prolongement approprié des termes $\frac{\partial k^i}{\partial x_j}$ hors de $(\mathbb{R}^+)^n$, on a

$$\int_0^\tau (\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{N})\partial_t \mathbf{N}, -\mathbf{N}^-) dt = \int_0^\tau \partial_t \mathbf{N}, -\mathbf{N}^-) dt.$$

Puis à l'aide d'un lemme d'intégration non linéaire, il vient

$$\begin{aligned} \int_0^\tau (\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{N})\partial_t \mathbf{N}, -\mathbf{N}^-) dt &= \frac{1}{2} \int_0^\tau \partial_t \|\mathbf{N}^-(t)\|_n^2 dt \\ &= \frac{1}{2} \{ \|\mathbf{N}^-(\tau)\|_n^2 - \|\mathbf{N}^-(0)\|_n^2 \} \\ &= \frac{1}{2} \{ \|\mathbf{N}^-(\tau)\|_n^2 - \|(\mathbf{N}^0)^-\|_n^2 \} \\ &= \frac{1}{2} \|\mathbf{N}^-(\tau)\|_n^2 \end{aligned}$$

puisque $(\mathbf{N}^0)^- \equiv 0$. D'où

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{N}^-(\tau)\|_n^2 \leq 0$$

et donc,

$$\forall \tau \in [0, T], \|\mathbf{N}^-(\tau)\|_n^2 = 0 \implies \mathbf{N}(\tau, \cdot) \geq 0 \text{ } \mathcal{L}^3 - \text{pp. dans } \Omega.$$

■

Remarque 4

Pour les modèles moins élaborés où la somme $\sum_{j=1}^n N_j$ est prise a priori constante (égale à \mathcal{N}_0 pour fixer les idées), la même méthode de troncature de Stampacchia

1.4 Admissibilité physique de la solution

conduit à la propriété

$$\forall \tau \geq 0, \forall i \in \{1, \dots, n\}, N_i(\tau, \cdot) \leq \mathcal{N}_0 \text{ pp. en } \Omega. \quad (\text{II.1.21})$$

On choisit alors des prolongements $\tilde{\sigma}_i$ nuls hors de $]0, \mathcal{N}_0[$, en vérifiant que ce sont bien des fonctions uniformément lipschitziennes sur \mathbb{R} . De manière générale, toutes les méthodes développées précédemment restent valables lorsque les coefficients de Soret S_t^i sont "des lois de Soret" fonctions des diverses fractions massiques,

$$\mathbf{N} \longmapsto S_t^i(\mathbf{N})$$

pourvu qu'on soit assuré d'une dépendance lipschitzienne séparément par rapport à chaque variable N_i .

Dans le cas monodimensionnel (cas d'une colonne capillaire), l'utilisation du lemme d'Ascoli permet de mettre en relief un résultat plus précis ; cela fait l'objet de la

Proposition 10 (Déplacements unidirectionnels, cas du tube capillaire)

Lorsque Ω est un borné de \mathbb{R} , i.e. $\Omega =]0, L[$ et $\Gamma_e = \{0\}$, $\Gamma_s = \{L\}$, $\Gamma_l = \emptyset$, on établit que

$\forall i \in \{1, \dots, n\}$, $N_i \in C^0([0, T] \times [0, L]) = C^0(\bar{Q})$. Il s'ensuit la propriété :

$$\exists M \geq 0, \forall i \in \{1, \dots, n\}, \forall (t, x) \in \bar{Q}, 0 \leq N_i(t, x) \leq M. \quad (\text{II.1.22})$$

Les solutions trouvées sont donc physiquement admissibles par cette propriété de cohérence déduite du modèle.

✓ Preuve

On sait que $\forall i \in \{1, \dots, n\}$, $N_i \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega)) \cap C^0([0, T]; L^2(\Omega))$ et donc d'après [[50], tome 1, p.297, lemme 8.1], on peut choisir dans sa classe un représentant de N_i scalairement continu de $[0, T]$ à valeurs dans $H^1(\Omega)$. Ainsi, quel que soit $t \in [0, T]$, $N_i(t, \cdot)$ a un sens et définit un élément de $H^1(\Omega)$ et

$$\exists M_i \geq 0, \forall t \in [0, T], \|N_i(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} \leq M_i$$

1.4 Admissibilité physique de la solution

Il s'ensuit d'après un théorème d'injection de Sobolev que la fonction $x \longrightarrow N_i(t, x)$ est höldérienne d'ordre $\frac{1}{2}$, uniformément par rapport à t . Montrons alors la continuité de N_i sur $\bar{Q} = [0, T] \times [0, L]$. Soit (t_n, x_n) une suite de \bar{Q} convergeant dans \mathbb{R}^2 vers (t, x) . On a

$$(*) \quad N_i(t_n, x_n) - N_i(t, x) = N_i(t_n, x_n) - N_i(t_n, x) + N_i(t_n, x) - N_i(t, x)$$

Or, pour une constante \tilde{M}_i convenable,

$$(i) \quad |N_i(t_n, x_n) - N_i(t_n, x)| \leq \tilde{M}_i |x_n - x|^{\frac{1}{2}}$$

(ii) Si on pose $\Psi_n(\cdot) = N_i(t_n, \cdot)$ pour $x \in [0, L]$, on construit une suite de fonctions (Ψ_n) de $C^0([0, L])$, muni de la topologie de la convergence uniforme. On observe que la famille $\{\Psi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ constitue un sous-ensemble borné, uniformément équicontinu; en effet, par la continuité de l'injection de $H^1(]0, L[)$ dans $C^0([0, L])$

- $\|\Psi_n\|_{C^0([0, L])} = \|N_i(t_n, \cdot)\|_{C^0([0, L])} \leq C \|N_i(t_n, \cdot)\|_V \leq CM_i$
- $\forall n, \quad |\Psi_n(x) - \Psi_n(y)| = |N_i(t_n, x) - N_i(t_n, y)| \leq \tilde{M}_i |x - y|^{\frac{1}{2}},$

ce qui implique que, pour $\varepsilon > 0$, on ait

$$|x - y| < \left(\frac{\varepsilon}{M_i}\right)^2 \implies |\Psi_n(x) - \Psi_n(y)| < \varepsilon$$

(et ceci, indépendamment de n). On en déduit, à l'aide du lemme d'Ascoli que cet ensemble est relativement compact dans $C^0([0, L])$. On peut donc en extraire une sous-suite convergeant uniformément vers une limite χ_i qui est nécessairement $N_i(t, \cdot)$ (identification rendue possible par le fait que $t \longrightarrow N_i(t, \cdot)$ est continue de $[0, T]$ dans $L^2([0, L])$), et de fait, par unicité du point d'accumulation, toute la suite $N_i(t_n, \cdot)$ converge uniformément vers $N_i(t, \cdot)$ quand $t_n \longrightarrow t$. Il en résulte, grâce à $(*)$ et (i) que, lorsque $n \longrightarrow +\infty$, $N_i(t_n, x_n)$ converge vers $N_i(t, x)$ ce qui implique que $N_i \in C^0(\bar{Q})$. ■

1.5 Unicité et stabilité de la solution

Dans cette partie, nous démontrons l'unicité de la solution, en utilisant une technique de dualité, c'est-à-dire en recherchant des fonctions-test qui permettront de conclure. Cette technique, récemment utilisée par J.I. DIAZ pour des problèmes de type Boussinesq (cf. [27] et [28]) ramène la question de l'unicité à l'étude de l'existence de la solution à un autre problème "dual". Nous détaillons ici cette méthode.

Proposition 11

Pour montrer l'unicité de la solution au problème (P), il suffit d'établir l'existence d'une solution à un problème linéaire adjoint (P').

✓ **Preuve**

Considérons un à un les différents termes de l'équation, et soient $\mathbf{N} = \begin{pmatrix} N_1 \\ \dots \\ N_n \end{pmatrix}$ et

$\hat{\mathbf{N}} = \begin{pmatrix} \hat{N}_1 \\ \dots \\ \hat{N}_n \end{pmatrix}$ deux éventuelles solutions du problème (P). On soustrait les deux

équations vérifiées par chaque solution pour obtenir:

$$(E^-) \begin{cases} \left(\tilde{\mathbf{K}}_i(\mathbf{N})\partial_t N_j - \tilde{\mathbf{K}}_i(\hat{\mathbf{N}})\partial_t \hat{N}_j, \zeta \right) + \left(d_i(\mathbf{N}, \zeta) - d_i(\hat{\mathbf{N}}, \zeta) \right) + \\ \left(U_i(\mathbf{N}, \zeta) - U_i(\hat{\mathbf{N}}, \zeta) \right) + \left(\sigma_i(\mathbf{N}, \theta, \zeta) - \sigma_i(\hat{\mathbf{N}}, \theta, \zeta) \right) = 0 \end{cases}$$

où ζ est une fonction test de $(L^2(0, T; \mathcal{V}))^n$ à préciser, et les applications d, U, σ sont prises sans être sommées sur i . Examinons un à un les différents termes de cette équation, après les avoir intégrés sur $[0, T]$:

$$\begin{aligned} Int_1^i &= \int_0^T \left(\tilde{\mathbf{K}}_i(\mathbf{N})\partial_t N_j - \tilde{\mathbf{K}}_i(\hat{\mathbf{N}})\partial_t \hat{N}_j, \zeta \right) dt \\ &= \int_Q \partial_t \left[\kappa^i(N_1, \dots, N_n) - \kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_n) \right] \zeta_i dx dt \\ &\stackrel{Green}{=} - \int_Q \left[\kappa^i(N_1, \dots, N_n) - \kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_n) \right] \partial_t \zeta_i dx dt \end{aligned}$$

1.5 Unicité et stabilité de la solution

pour toute fonction ζ vérifiant $\zeta_i(T) = 0$ et puisque $\left[\kappa^i(N_1, \dots, N_n) - \kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_n) \right] (0) = \kappa^i(N^0) - \kappa^i(\hat{N}^0) = 0$. Ainsi

$$Int_1^i = - \int_Q \left[\sum_{j \in \{1..n\}} \left(\kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_{j-1}, N_j, \dots, N_n) - \kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n) \right) \right] \partial_t \zeta_i dx dt.$$

Ecrivant

$$\kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_{j-1}, N_j, \dots, N_n) - \kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n) = (N_j - \hat{N}_j) \kappa_j^i(t, x)$$

on définit, sur deux ensembles \mathcal{E}_j et $Q \setminus \mathcal{E}_j$, \mathcal{L}^4 -mesurables de Q , complémentaires,

$$\kappa_j^i(t, x) = \begin{cases} \frac{\kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_{j-1}, N_j, \dots, N_n) - \kappa^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n)}{(N_j - \hat{N}_j)} & \text{sur } \mathcal{E}_j \\ \frac{\partial \kappa^{i*}}{\partial x_j} (\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n) & \text{sur } Q \setminus \mathcal{E}_j \end{cases} \quad (\text{II.1.23})$$

où

$$\mathcal{E}_j = \left\{ (t, x) \text{ tels que } N_j \neq \hat{N}_j \right\} \quad (\text{II.1.24})$$

et $\frac{\partial \kappa^{i*}}{\partial x_j}$ est un représentant (dans sa classe de Lebesgue) borélien borné de la dérivée (au sens classique), définie \mathcal{L}^1 -presque partout de la fonction lipschitzienne $x_j \rightarrow \kappa^i(\dots, x_j, \dots)$ (théorème de Rademacher). On obtient donc l'expression suivante pour Int_1^i :

$$Int_1^i = - \int_Q \left[\sum_{j \in \{1..n\}} (N_j - \hat{N}_j) \kappa_j^i(t, x) \right] \partial_t \zeta_i dx dt.$$

Puis, en sommant les équations relatives à chaque composante, *i.e.* en sommant sur $i \in \{1..n\}$, on obtient:

$$Int_1 = - \int_Q \sum_{j \in \{1..n\}} \left((N_j - \hat{N}_j) \left[\sum_{i \in \{1..n\}} \kappa_j^i(t, x) \partial_t \zeta_i \right] \right) dx dt.$$

1.5 Unicité et stabilité de la solution

Examinons à présent le deuxième terme de l'équation (E^-):

$$\begin{aligned}
 Int_2^i &= \sum_{j \in \{1..n\}} D_{ij} ((N_j, \zeta_i)) - \sum_{j \in \{1..n\}} D_{ij} ((\hat{N}_j, \zeta_i)) \\
 &= \sum_{j \in \{1..n\}} D_{ij} \int_{\Omega} \vec{\nabla} (N_j - \hat{N}_j) \cdot \vec{\nabla} \zeta_i dx \\
 &= - \sum_{j \in \{1..n\}} D_{ij} \int_{\Omega} (N_j - \hat{N}_j) \Delta \zeta_i dx + \sum_{j \in \{1..n\}} D_{ij} \int_{\partial\Omega} (N_j - \hat{N}_j) \frac{\partial \zeta_i}{\partial n} d\sigma \\
 &= - \sum_{j \in \{1..n\}} D_{ij} \int_{\Omega} (N_j - \hat{N}_j) \Delta \zeta_i dx
 \end{aligned}$$

dès que $\frac{\partial \zeta_i}{\partial n} \Big|_{\Gamma_i} = 0$, puisque $N_j - \hat{N}_j \Big|_{\Gamma_e \cup \Gamma_s} = 0$ par définition du problème (P). On obtient alors, après sommation sur $i \in \{1..n\}$ et intégration sur $[0, T]$,

$$Int_2 = - \int_Q \sum_{j \in \{1..n\}} (N_j - \hat{N}_j) \left[\sum_{i \in \{1..n\}} D_{ij} \Delta \zeta_i \right] dx dt.$$

On fait de même pour les troisième et quatrième termes de l'équation (E^-):

$$\begin{aligned}
 Int_3^i &= \int_Q \left[\mu(N_i) - \mu(\hat{N}_i) \right] \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} \zeta_i dx dt \\
 &= \int_Q (N_i - \hat{N}_i) \mu^*(t, x) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} \zeta_i dx dt
 \end{aligned}$$

où on aura préalablement défini:

$$\mu^*(t, x) = \begin{cases} \frac{\mu(N_i) - \mu(\hat{N}_i)}{N_i - \hat{N}_i} & \text{sur } \mathcal{E}_j \\ \mu'^*(N_i) & \text{sur } Q \setminus \mathcal{E}_j \end{cases} \quad (\text{II.1.25})$$

où μ'^* est un représentant (dans sa classe de Lebesgue) borélien borné de la dérivée (au sens classique), définie \mathcal{L}^1 -presque partout de la fonction lipschitzienne μ . Puis

1.5 Unicité et stabilité de la solution

en sommant sur chaque composant:

$$Int_3 = \sum_{i \in \{1..n\}} \int_Q (N_i - \hat{N}_i) \left[\mu^*(t,x) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} \zeta_i \right] dxdt.$$

De la même façon:

$$\begin{aligned} Int_4^i &= \int_Q \left[\sigma^i(\mathbf{N}) - \sigma^i(\hat{\mathbf{N}}) \right] \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} \zeta_i dxdt \\ &= \int_Q \left[\sum_{j \in \{1..n\}} \left(\sigma^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_{j-1}, N_j, \dots, N_n) - \sigma^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n) \right) \right] \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} \zeta_i dxdt. \end{aligned}$$

Or

$$\sigma^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_{j-1}, N_j, \dots, N_n) - \sigma^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n) = (N_j - \hat{N}_j) S_j^i(t,x)$$

où l'on a posé, selon le même principe:

$$S_j^i(t,x) = \begin{cases} \frac{\sigma^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_{j-1}, N_j, \dots, N_n) - \sigma^i(\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n)}{N_j - \hat{N}_j} & \text{sur } \mathcal{E}_j \\ \frac{\partial \sigma^{i*}}{\partial x_j} (\hat{N}_1, \dots, \hat{N}_j, N_{j+1}, \dots, N_n) & \text{sur } Q \setminus \mathcal{E}_j. \end{cases} \quad (\text{II.1.26})$$

D'où

$$Int_4^i = \int_Q \left[\sum_{j \in \{1..n\}} (N_j - \hat{N}_j) S_j^i(t,x) \right] \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} \zeta_i dxdt.$$

Et, en sommant sur chaque composant:

$$Int_4 = \int_Q \sum_{j \in \{1..n\}} (N_j - \hat{N}_j) \left[\sum_{i \in \{1..n\}} S_j^i(t,x) \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} \zeta_i \right] dxdt$$

1.5 Unicité et stabilité de la solution

On obtient alors l'équation suivante:

$$(\dagger) \left\{ \int_Q \left(\sum_{j \in \{1..n\}} (N_j - \hat{N}_j) \left[- \sum_{i \in \{1..n\}} \kappa_j^i(t,x) \partial_t \zeta_i - \sum_{i \in \{1..n\}} D_{ij} \Delta \zeta_i + \mu^*(t,x) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} \zeta_i + \sum_{i \in \{1..n\}} S_j^i(t,x) \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} \zeta_i \right] \right) dx dt = 0. \right.$$

Intéressons-nous au problème rétrograde d'inconnue $\zeta = (\zeta_i)_i$ suivant:

$$(P') \left\{ \begin{array}{l} - \sum_{i \in \{1..n\}} \kappa_j^i(t,x) \partial_t \zeta_i - \sum_{i \in \{1..n\}} D_{ij} \Delta \zeta_i + \mu^*(t,x) \mathbf{U} \cdot \vec{\nabla} \zeta_i + \sum_{i \in \{1..n\}} S_j^i(t,x) \vec{\nabla} \theta \cdot \vec{\nabla} \zeta_i = N_j - \hat{N}_j \\ \text{dans } [0, T] \times \Omega, \quad (1 \leq j \leq n), \\ \zeta_j(T) = 0 \\ \zeta_j = 0 \text{ sur } \Gamma_e \cup \Gamma_s, \quad \frac{\partial \zeta_j}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma_l. \end{array} \right. \quad \blacksquare$$

Remarque 5

Les fonctions κ_j^i , μ^* , S_j^i *définies par les équations (II.1.23), (II.1.25) et (II.1.26) sont des éléments de* $L^\infty(Q)$ *dès que les fonctions d'état sont séparément lipschitziennes par rapport à chaque variable, hypothèse que nous considérerons vraie dans notre analyse.*

Proposition 12

Le problème (P') admet une solution unique.

✓ **Preuve**

(P') est un problème linéaire parabolique rétrograde à coefficients dans $L^\infty(Q)$. Pour démontrer l'existence et l'unicité de la solution d'un tel problème, il suffit d'effectuer des estimations *a priori* afin d'utiliser le théorème de J.L. LIONS appliqué aux équations vectorielles comme dans la démonstration de la proposition 5. ■

La dépendance des solutions au cours du temps par rapport à l'état initial fait l'objet de la proposition suivante :

1.5 Unicité et stabilité de la solution

Proposition 13

Le problème (P) admet une solution unique. En outre l'application (non linéaire) qui à \mathbf{N}^0 dans $H^1(\Omega)^n$ fait correspondre \mathbf{N} dans $[L^\infty(0,T; H^1(\Omega)) \cap H^1(Q)]^n$ est localement lipschitzienne de $L^2(\Omega)^n$ dans $L^2(Q)^n$.

✓ Preuve

En prenant précisément pour fonction test ζ la solution du système rétrograde associé (P') et en introduisant l'équation vérifiée par ζ dans l'expression (†), on obtient immédiatement :

$$\left\| \mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}} \right\|_{(L^2(Q))^n}^2 = 0$$

et donc, compte-tenu de la régularité des solutions,

$$\forall t \in [0, T], \mathbf{N}(t, \cdot) = \hat{\mathbf{N}}(t, \cdot) \text{ } \mathcal{L}^3 - \text{ pp. dans } \Omega.$$

Pour démontrer la stabilité de la solution du problème (P), considérons \mathbf{N} (resp. $\hat{\mathbf{N}}$) la solution relative à \mathbf{N}^0 (resp. $\hat{\mathbf{N}}^0$). Alors, reprenant la méthode précédente et pour le même choix de ζ , il vient, à la suite d'intégrations par parties loïsibles

$$(*) \quad \left\| \mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}} \right\|_{(L^2(Q))^n}^2 = \sum_{i=1}^n \left(N_i^0 - k_i(\mathbf{N}^0) - \hat{N}_i^0 + k_i(\hat{\mathbf{N}}^0), \zeta^i(0) \right)_{L^2(\Omega)}$$

Or, p.p. en t et presque partout dans Ω , et pour $i \in \{1, \dots, n\}$

$$(**) \quad \left| N_i^0 - \hat{N}_i^0 - \left(\varphi^i(\mathbf{N}^0) - \varphi^i(\hat{\mathbf{N}}^0) \right) \right| \leq \left| N_i^0 - \hat{N}_i^0 \right| + \left(\sum_{j=1}^n \left| N_j^0 - \hat{N}_j^0 \right| \left\| \frac{\partial k_i}{\partial x_j} \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} \right)$$

et, par ailleurs, d'après les résultats généraux sur les équations paraboliques linéaires à propos de la dépendance continue des solutions en fonction des données (cf. notamment R. DAUTRAY-J.L.LIONS [24], vol. 8, chap. XVIII, § 3 et 4), (ici ζ est solution relativement à une donnée initiale nulle et un terme de source égal à $\mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}}$), il existe une constante C^* (dépendant *a priori* de $\Omega, T, \mathbf{U}, \theta$, et des fonctions d'état) telle que :

$$(***) \quad |\zeta(\mathbf{0})|_{L^2(\Omega)^n} \leq |\zeta|_{C^0([0,T]; L^2(\Omega)^n)} \leq C^* \left\| \mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}} \right\|_{(L^2(Q))^n}^2.$$

1.6 Dépendance de la solution envers le coefficient de Soret

En conséquence, d'après (*), (**), et (***) et grâce à l'inégalité de Cauchy-Schwarz, il existe donc une constante C (qui dépend essentiellement de la constante de Lipschitz C^* et des modules de Lipschitz des fonctions partielles $x_j \rightarrow k_i(\dots, x_j, \dots)$), telle que

$$\left\| \mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}} \right\|_{(L^2(Q))^n} \leq C \left| \mathbf{N}^0 - \hat{\mathbf{N}}^0 \right|_{L^2(\Omega)^n}. \quad (\text{II.1.27})$$

■

1.6 Dépendance de la solution envers le coefficient de Soret

On montre ici, que dans une situation donnée, et pour des coefficients de Soret évalués avec une erreur de l'ordre de ε , l'erreur résultante sur l'évaluation du vecteur des fractions massiques \mathbf{N} est, au sens de la moyenne quadratique sur Q , de même ordre (un résultat de forte stabilité locale envers le gradient thermique de même type est aussi donné).

Proposition 14

Considérons une famille de coefficients de Soret $\mathbf{S}_t = (S_t^i)_{i=1..n}$ et les fractions massiques des composants associées $\mathbf{N} = (N_i)_{i=1..n}$.

Soit K un pavé compact de $(\mathbb{R}^+)^n$, centré en \mathbf{S}_t , $\mathbf{S}_t \in (\mathbb{R}_*^+)^n$.

Alors, $\exists C_K > 0$, $\forall \hat{\mathbf{S}}_t \in K$ (de solution associée $\hat{\mathbf{N}}$),

$$\left\| \mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}} \right\|_{(L^2(Q))^n} \leq C_K |\mathbf{S}_t - \hat{\mathbf{S}}_t|_{\mathbb{R}^n}. \quad (\text{II.1.28})$$

En d'autres termes, l'application non linéaire qui à $\{S_t^i\}_{1 \leq i \leq n}$ (resp. $\vec{\nabla} \theta$) fait correspondre \mathbf{N} est localement lipschitzienne de \mathbb{R}^n dans $L^2(Q)^n$ (resp. de $L^\infty(\Omega)^n$ dans $L^2(Q)^n$).

✓ Preuve

De la même manière que pour la démonstration de la proposition précédente et par

1.6 Dépendance de la solution envers le coefficient de Soret

considération du système rétrograde (P'), on introduit deux familles de coefficients Soret $(S_t^i)_{(1 \leq i \leq n)}$ (resp. $(\hat{S}_t^i)_{(1 \leq i \leq n)}$) et les solutions du problème correspondantes $(N_i)_{(1 \leq i \leq n)}$ (resp. $(\hat{N}_i)_{(1 \leq i \leq n)}$). Alors, on a

$$\sigma^i(\mathbf{N}) - \sigma^i(\hat{\mathbf{N}}) = (S_t^i - \hat{S}_t^i)\tau^i(\mathbf{N}) + \hat{S}_t^i(\tau^i(\mathbf{N}) - \tau^i(\hat{\mathbf{N}})), \quad \text{où } \tau^i \in W^{1,+ \infty}(\mathbb{R}).$$

En prenant alors la même fonction test ζ_i où le terme $(\sigma^i(\mathbf{N}) - \sigma^i(\hat{\mathbf{N}}))\vec{\nabla}\theta \cdot \vec{\nabla}\zeta_i$ est remplacé par $\hat{S}_t^i(\tau^i(\mathbf{N}) - \tau^i(\hat{\mathbf{N}}))\vec{\nabla}\theta \cdot \vec{\nabla}\zeta_i$, il vient, *mutatis mutandis*,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}}\|_{(L^2(Q))^n}^2 &= - \sum_{1 \leq i \leq n} \int_Q (S_t^i - \hat{S}_t^i)\tau^i(\mathbf{N})\vec{\nabla}\theta \cdot \vec{\nabla}\zeta_i dxdt \\ &\leq C \left(\|\nabla\theta\|_{(L^2(\Omega))^n}, \max_i \|\tau^i\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \right) \|\mathbf{S}_t - \hat{\mathbf{S}}_t\|_{\mathbb{R}^n} \|\zeta\|_{(L^2(0,T;H^1(\Omega)))^n} \end{aligned}$$

(d'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz). Sachant que $\{\zeta_i\}_{1 \leq i \leq n}$ est une solution relativement à une donnée initiale nulle et d'après les résultats généraux sur les systèmes paraboliques linéaires (de dépendance des solutions par rapport aux données) à données "second membre L^2 " et mettant en œuvre des opérateurs du second ordre avec partie principale symétrique, on dispose de l'estimation suivante

$$\|\zeta\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))^n} \leq \|\zeta\|_{(H^1(Q))^n} \leq C^* \|\mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}}\|_{(L^2(Q))^n}$$

où la constante C^* dépend *a priori* de $\vec{\nabla}\theta$, \mathbf{U} , des modules de Lipschitz de τ^i , μ^i , Ω , T et surtout de $\{\hat{S}_t^i\}_i$, ce qui donne le caractère **localement** lipschitzien du résultat final énoncé. On obtient finalement,

$$\|\mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}}\|_{(L^2(Q))^n} \leq C_K \left(\Omega, T, \|\vec{\nabla}\theta\|_{(L^2(\Omega))^n}, \max_i \|\sigma^i\|_{L^\infty(\mathbb{R})}, \mathbf{U} \right) \|\mathbf{S}_t - \hat{\mathbf{S}}_t\|_{\mathbb{R}^n}$$

pour $(S_t, \hat{S}_t) \in K \times K$. ■

Remarque 6

On peut noter que dans le cas plus général de lois de Soret $S_t^i = S_t^i(x)$, avec $S_t^i \in L^\infty(\Omega)$, $\vec{\nabla}\theta \in L^\infty(\Omega)$, on obtient le résultat équivalent

$$\|\mathbf{N} - \hat{\mathbf{N}}\|_{(L^2(Q))^n} \leq C_{loc} \|\mathbf{S}_t - \hat{\mathbf{S}}_t\|_{(L^2(\Omega))^n} \quad (\text{II.1.29})$$

1.6 Dépendance de la solution envers le coefficient de Soret

avec des propriétés de dépendance de la constante C_{loc} similaires.

Chapitre 2

Une formulation mixte pour une méthode volumes finis

On effectue dans cette partie l'analyse numérique d'un schéma de type volumes finis fondé sur une formulation mixte. On exhibe notamment les trois conditions "Inf-Sup" nécessaires à l'analyse du schéma. On démontre ensuite, sous certaines conditions, la convergence du schéma numérique.

2.1 Problème considéré

Dans toute la suite, nous noterons par n_c le nombre d'inconnues (*i.e.* le nombre de constituants du fluide), afin d'éviter toute confusion entre ce dernier et l'indice de discrétisation en temps.

Nous présentons ici un schéma numérique fondé sur une formulation mixte (*cf.* en particulier [60] et [61]) et du problème et pour lequel nous effectuons l'analyse numérique.

Dans un premier temps, nous décrivons le maillage adopté et présentons les différents espaces et notations utiles à l'analyse. Après un résultat d'existence et d'unicité pour le problème d'évolution, nous démontrons alors des résultats sur les erreurs d'approximation commise dans le problème stationnaire. Nous étudions enfin le problème d'évolution et présentons des résultats de consistance et de convergence du schéma. La difficulté principale de cette étude numérique réside dans la vérification des trois

2.2 Notations

conditions Inf-Sup associées à la formulation mixte utilisée. Le choix des espaces de discrétisation susceptibles de vérifier ces conditions doit être fait avec précaution. Notons de plus que nous traitons ici un système et non pas une équation scalaire. Nous verrons que sous des hypothèses *ad hoc* sur les tenseurs de diffusion et d'adsorption introduits (hypothèses conformes à la réalité et justifiables par ailleurs), il est possible de démontrer la convergence de la méthode. Pour finir, nous faisons le lien entre la discrétisation proposée et les méthodes volumes finis (une large description de ces méthode et leur application à tout type de problème est donnée dans [33]).

Remarque 7 Les développements à venir détaillent l'analyse numérique d'un schéma avec l'obtention notamment de résultats de convergence et de consistance dans le cas de faibles nombres de Péclet (situation où les phénomènes de diffusion sont prépondérants sur la convection, ce qui est le cas pour des fluides très visqueux soumis à la convection naturelle dans un gisement).

On s'intéresse donc dans un premier temps au problème stationnaire suivant:

$$-div \left(\tilde{\mathbf{D}} (\nabla \mathbf{N})^\top \right) + \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{N} = f(\mathbf{N}) \Delta \theta$$

qui se réécrit, $\forall i \in \{1..n_c\}$,

$$- \sum_{1 \leq l \leq n_c} D_{il} \Delta N_l + \sum_{1 \leq j \leq n_c} K_{ij} N_j = f_i(\mathbf{N}, x).$$

On pose alors $\tilde{p} = \tilde{D} \left(grad \mathbf{N} \right)^\top$. Un problème équivalent est donné par, $\forall i \in \{1..n_c\}$,

$$-div(p_i) + \sum_{1 \leq j \leq n_c} K_{ij} N_j = f_i(\mathbf{N}, x) \quad (\text{II.2.1})$$

2.2 Notations

On modélise le milieu par une colonne plane rectangulaire, dont on effectue un maillage régulier à l'aide de rectangles.

2.2 Notations

Soient les espaces fonctionnels suivants:

$$W_1 = (H(\operatorname{div}, \Omega))^{n_c}, W_2 = ((L^2(\Omega))^2)^{n_c}, M_1 = (H_0^1(\Omega))^{n_c}, M_2 = L^2(\Omega) \quad (\text{II.2.2})$$

munis de leurs normes usuelles, auxquels on associe les espaces discrets

$$W_{1h} \subset W_1, W_{2h} \subset W_2, M_{1h} \subset M_1, M_{2h} \subset M_2. \quad (\text{II.2.3})$$

On définit aussi les espaces

- $P_0(K)$: espace des fonctions constantes sur K
- $P_{1,0}(K)$: espace des fonctions linéaires en la première variable sur K
- $P_{0,1}(K)$: espace des fonctions linéaires en la deuxième variable sur K
- $Q_1(K)$: espace des fonctions linéaires en chacune des variables sur K .

On notera $(P_h)_h$ (resp. $(U_h)_h$) la famille de triangulations associée à W_{1h} (resp. M_{1h}).

On construit ensuite les maillages Q_{1h} (resp. Q_{2h}) en reliant les milieux des faces horizontales (resp. verticales) de P_h . On note alors K une maille de P_h , K^* une maille de U_h et K^\sharp une maille de $Q_h = Q_{1h} \cup Q_{2h}$.

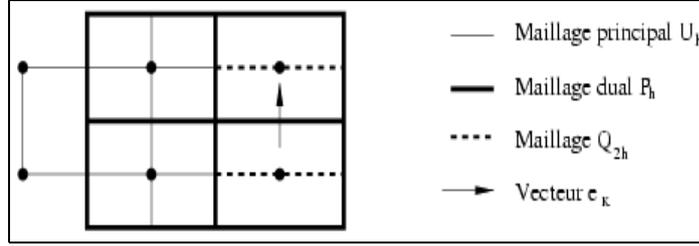


FIG. 2.1 – Visualisation des différents maillages

On peut alors donner la définition exacte des espaces d'approximation

$$\begin{aligned} M_{1h} &= \{u^h \in (H_0^1(\Omega))^{n_c}; \forall K^* \in U_h, u_i^h|_{K^*} \in Q_1(K^*)\} \\ M_{2h} &= \{u^h \in L^2(\Omega); \forall K \in P_h, u^h|_K \in P_0(K)\}. \\ W_{1h} &= \{p^h \in W_1, \forall K \in P_h, p_i^h|_K \in P_{1,0}(K) \times P_{0,1}(K)\} \\ W_{2h} &= \operatorname{Vect}\{e_{K^\sharp}, K^\sharp \in Q_h\}^{n_c}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.4})$$

On est ainsi en mesure de définir les applications suivantes:

$$\begin{aligned} \forall \tilde{q} \in (L^2(\Omega))^2, p_i \in H(\operatorname{div}, \Omega)^{n_c}, v \in L^2(\Omega), \mathbf{N} \in (H_0^1(\Omega))^{n_c}, \\ - m^i(\tilde{p}, \tilde{q}) = \int_{\Omega} \tilde{p}_i \tilde{q}_i dx \quad \bullet d^i(v, \mathbf{N}) = - \sum_{1 \leq j \leq n_c} K_{ij} \int_{\Omega} N_j v dx \end{aligned}$$

2.2 Notations

$$- b^i(v, \tilde{p}) = \int_{\Omega} v \operatorname{div}(\tilde{p}_i) dx \quad \bullet \quad a^i(\mathbf{N}, \tilde{q}) = - \sum_{1 \leq j \leq n_c} D_{ij} \int_{\Omega} \tilde{\nabla} N_j \cdot \tilde{q}_i dx$$

$$- l^i(v) = - \int_{\Omega} f_i v dx.$$

On associe à ce problème la formulation mixte primale duale suivante

$\forall i \in \{1..n_c\}$, trouver $(\tilde{p}_i, N_i) \in H(\operatorname{div}, \Omega) \times H_0^1(\Omega)$ solution de

$$\begin{cases} \forall \tilde{q} \in (L^2(\Omega)^2)^{n_c}, & m^i(\tilde{p}, \tilde{q}) + a^i(\mathbf{N}, \tilde{q}) = 0 \\ \forall v \in L^2(\Omega), & b^i(v, \tilde{p}) + d^i(v, \mathbf{N}) = l^i(v). \end{cases} \quad (\text{II.2.5})$$

On introduit ensuite les opérateurs R et R^* dont nous donnons l'expression sur W_{1h} et M_{1h}

$$\forall p^h \in W_{1h}, R(p^h) \in W_{2h} \text{ et } R(p^h) = \sum_{K^\sharp \in Q_h} (\tilde{p}^h \cdot e_{K^\sharp})|_{\Gamma_{K^\sharp}} e_{K^\sharp} \quad (\text{II.2.6})$$

où Γ_{K^\sharp} est l'arête d'une maille K de P_h incluse dans K^\sharp de Q_h ,

$$\forall u^h \in M_{1h}, R^*(u^h) \in W_{2h} \text{ et } R^*(u^h) = \sum_{K^\sharp \in Q_h} (\tilde{\nabla} u^h \cdot e_{K^\sharp})|_{\sigma_{K^\sharp}} e_{K^\sharp} \quad (\text{II.2.7})$$

où σ_{K^\sharp} est l'arête d'une maille K^* de U_h incluse dans K^\sharp de Q_h .

On définit alors les applications d'approximations numériques pour tout i de $\{1..n_c\}$

$$m_h^i(\tilde{p}, \tilde{q}) = \int_{\Omega} R(\tilde{p}_i) \tilde{q}_i dx \text{ et } d_h^i(v, \mathbf{N}) = \sum_{1 \leq j \leq n_c} K_{ij} \int_{\Omega} \Pi_{0,h}(N_j) v dx.$$

et les espaces W_{1h}^0 et W_{2h}^0 définis par

$$\begin{aligned} W_{1h}^0 &= \{\tilde{p}^h \in W_{1h}, \forall v^h \in M_{2h}, b^i(v^h, \tilde{p}^h) = 0\} \\ W_{2h}^0 &= \{\tilde{q}^h \in W_{2h}, \forall \tilde{p}^h \in W_{1h}^0, m_h^i(\tilde{p}^h, \tilde{q}^h) = 0\}. \end{aligned}$$

2.2 Notations

On considère ainsi le problème discret associé

$$(P_h) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\tilde{p}^h, \mathbf{N}^h) \in W_{1h} \times M_{1h} \text{ tels que} \\ \forall i \in \{1..n_c\}, \left\{ \begin{array}{l} \forall \tilde{q}_i^h \in W_{2h, m_h^i}(\tilde{p}^h, \tilde{q}^h) + a^i(\mathbf{N}^h, \tilde{q}^h) = 0 \\ \forall v^h \in M_{2h}, b^i(v^h, \tilde{p}^h) + d_h^i(v^h, \mathbf{N}^h) = l^i(v^h). \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Dans un premier temps, on énonce deux lemmes préparatoires, déjà établis dans [65].

Lemme 5 *On établit le résultat suivant sur l'erreur d'approximation numérique:*

$$\forall i \in \{1..n_c\}, \forall N_i^h \in M_{1h}, \|N_i^h - \Pi_{0,h}(N_i^h)\|_{0,\Omega} \leq C_i h \|N_i^h\|_{1,\Omega} \quad (\text{II.2.8})$$

✓ **Preuve**

On considère K^* une maille de U_h , et on définit par $(K_i^*)_{1 \leq i \leq 4}$ les quatres rectangles obtenus par subdivision de K^* par les arêtes des mailles de P_h . On raisonne par la suite sur l'un des ces 4 rectangles, que l'on note de manière abusive K . Les valeurs de N_i^h aux noeuds de K sont alors notées $(N_i^j)_{1 \leq j \leq 4}$. Ainsi, à l'aide d'une formule de quadrature exacte sur $P_{1,0}(K) \times P_{0,1}(K)$ (cf. [65]), on calcule l'intégrale

$$\begin{aligned} \int_K (N_i^h - \Pi_{0,h} N_i^h)^2 dx &= \frac{h^2}{36} \left[\frac{1}{4} ((N_i^4 - N_i^1)^2 + (N_i^3 - N_i^1)^2 + (N_i^2 - N_i^1)^2) \right. \\ &\quad + \left(\frac{N_i^1 + N_i^2}{2} - N_i^1 \right)^2 + \left(\frac{N_i^1 + N_i^4}{2} - N_i^1 \right)^2 \\ &\quad + \left(\frac{N_i^3 + N_i^4}{2} - N_i^1 \right)^2 + \left(\frac{N_i^2 + N_i^3}{2} - N_i^1 \right)^2 \\ &\quad \left. + 4 \left(\frac{N_i^1 + N_i^2 + N_i^3 + N_i^4}{4} - N_i^1 \right)^2 \right] \end{aligned}$$

et donc,

$$\int_K (N_i^h - \Pi_{0,h} N_i^h)^2 dx \leq \frac{2h^2}{9} [(N_i^4 - N_i^1)^2 + (N_i^3 - N_i^2)^2 + (N_i^2 - N_i^1)^2.]$$

Or,

$$\begin{aligned} \int_K (\tilde{\nabla} N_i^h)^2 dx &= \frac{1}{24} [(N_i^2 - N_i^1)^2 + (N_i^2 - N_i^1 + N_i^3 - N_i^4)^2 + (N_i^3 - N_i^4)^2 \\ &\quad + (N_i^3 - N_i^2)^2 + (N_i^3 - N_i^2 + N_i^4 - N_i^1)^2 + (N_i^4 - N_i^1)^2] \end{aligned}$$

2.2 Notations

et la comparaison de ces deux estimations nous permet donc d'écrire,

$$\int_K (\tilde{\nabla} N_i^h)^2 dx \geq \frac{3}{16h^2} \int_K (N_i^h - \Pi_{0,h} N_i^h)^2 dx.$$

Le résultat vient immédiatement en sommant sur tout le maillage U_h . ■

Lemme 6 *On a la majoration suivante:*

$$\forall i \in \{1..n_c\}, \forall N_i^h \in M_{1h}, \|N_i^h\|_{0,\Omega} \leq C_i^* \|\Pi_{0,h}(N_i^h)\|_{0,\Omega}. \quad (\text{II.2.9})$$

✓ **Preuve**

$\forall N_i^h \in M_{1h}, \forall K^* \in U_h$, en reprenant les mêmes notations que dans la démonstration précédente,

$$\begin{aligned} \int_{K^*} (N_i^h)^2 dx &= \frac{h^2}{9} \left[\frac{1}{4} ((N_i^1)^2 + (N_i^2)^2 + (N_i^3)^2 + (N_i^4)^2) + \left(\frac{N_i^1 + N_i^2}{2} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{N_i^1 + N_i^3}{2} \right)^2 + \left(\frac{N_i^3 + N_i^4}{2} \right)^2 + \left(\frac{N_i^3 + N_i^2}{2} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + 4 \left(\frac{N_i^1 + N_i^2 + N_i^3 + N_i^4}{4} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

et donc,

$$\begin{aligned} \int_{K^*} (N_i^h)^2 dx &\leq \frac{2h^2}{9} [(N_i^1)^2 + (N_i^2)^2 + (N_i^3)^2 + (N_i^4)^2] \\ &\leq \frac{8}{9} \int_{K^*} (\Pi_{0,h}(N_i^h))^2 dx \end{aligned}$$

(par décomposition sur le maillage U_h). Le résultat vient à nouveau en sommant sur tous les quadrangles.

Théorème 1 *Le problème (P_h) admet une solution unique.*

✓ **Preuve**

La démonstration de ce théorème se fonde essentiellement sur le fait que $\dim(W_{1h}) + \dim(M_{1h}) = \dim(W_{2h}) + \dim(M_{2h})$ ce qui permet de ramener l'étude de l'existence

2.2 Notations

de la solution à celle de l'unicité. Elle fait en outre intervenir la théorie de R.A. NICOLAIDES (cf. [56]), et en particulier une condition de type "inf. sup." subordonnées à l'existence d'un réel α_2^i vérifiant

$$\inf_{\mathbf{N}^h \in M_{1h}} \sup_{\tilde{q}^h \in W_{2h}^0} \frac{a^i(\mathbf{N}^h, \tilde{q}^h)}{\|\mathbf{N}^h\| \cdot \|\tilde{q}^h\|} \geq \alpha_2^i > 0 \quad (\text{II.2.10})$$

$$(\text{II.2.11})$$

La démonstration de telles conditions se fonde ici sur l'hypothèse techniquement essentielle de pseudo-ellipticité des tenseurs \tilde{D} et \tilde{K} , donnée par (\mathcal{H}) .

On considère donc le problème homogène dont on veut montrer que la solution est nulle. En prenant pour fonction-tests les fonctions suivantes

$$\tilde{q}_i^h = R^*(N_i^h) \text{ et } v^h = \Pi_{0,h}(N_i^h),$$

on obtient après avoir sommé les équations du problème (P_h)

$$\forall 1 \leq i \leq n_c, \begin{cases} m_h^i(\tilde{p}, R^*(\mathbf{N}^h)) + a^i(\mathbf{N}^h, R^*(\mathbf{N}^h)) \\ + b^i(\Pi_{0,h}(N_i^h), \tilde{p}^h) + d_h^i(\Pi_{0,h}(N_i^h), \mathbf{N}^h) = 0. \end{cases}$$

On utilise ensuite une formule de Green discrète que l'on démontre par un calcul direct élément par élément et qui est donnée par

$$m_h^i(\tilde{p}, R^*(\mathbf{N}^h)) = -b^i(\Pi_{0,h}(N_i^h), \tilde{p}^h), \quad (\text{II.2.12})$$

d'où l'égalité obtenue, après avoir sommé sur chaque composant

$$\sum_{1 \leq i \leq n_c} a^i(\mathbf{N}^h, R^*(\mathbf{N}^h)) + \sum_{1 \leq i \leq n_c} d_h^i(\Pi_{0,h}(N_i^h), \mathbf{N}^h) = 0.$$

A l'aide de la propriété (\mathcal{H}) , puisque

$$\sum_{1 \leq i \leq n_c} d_h^i(\Pi_{0,h}(N_i^h), \mathbf{N}^h) = \sum_{1 \leq i \leq n_c} K_{ij} \int_{\Omega} \Pi_{0,h}(N_j) \Pi_{0,h}(N_i) dx \quad (\text{II.2.13})$$

2.3 Résultats sur l'erreur d'approximation

on a,

$$\sum_{1 \leq i \leq n_c} d_h^i(\Pi_{0,h}(N_i^h), \mathbf{N}^h) \geq \alpha \|\Pi_{0,h}(\mathbf{N}^h)\|_{(W_{1,h})}^2 \geq 0$$

et donc

$$\sum_{1 \leq i \leq n_c} a^i(\mathbf{N}^h, R^*(\mathbf{N}^h)) \leq 0,$$

et, toujours à l'aide de conséquences directes de (\mathcal{H}) ,

$$|N_i^h|_{1,\Omega} = 0, \forall i \in \{1..n_c\}$$

■

2.3 Résultats sur l'erreur d'approximation

Considérons le problème non homogène stationnaire suivant

$$(P_h^g) \quad \begin{cases} (\tilde{p}^h, \mathbf{N}^h) \in W_{1h} \times M_{1h} \\ \forall i \in \{1..n_c\}, \begin{cases} \forall \tilde{q}^h \in W_{2h}, m_h^i(\tilde{p}^h, \tilde{q}^h) + a^i(\mathbf{N}^h, \tilde{q}^h) = L^i(q^h) \\ \forall v^h \in M_{2h}, b^i(v^h, \tilde{p}^h) = l^i(v^h). \end{cases} \end{cases}$$

où L^i est définie par: $q^h \in W_{2h} \mapsto L^i(q^h) = \int_{\Omega} \tilde{g} \cdot \tilde{q}^h dx$, \tilde{g} étant un élément de $L^2(\Omega)^{n_c}$. Comme le montre la théorie de R.A. NICOLAÏDES (*cf.* [56]), généralisant la théorie de Babuska-Brezzi, l'étude d'un système de ce type passe par la vérification de trois conditions Inf-Sup, données par

$$\begin{aligned} \inf_{\tilde{p}^h \in W_{1h}^0} \sup_{\tilde{q}^h \in W_{2h}} \frac{m_h^i(\tilde{p}^h, \tilde{q}^h)}{\|\tilde{p}^h\| \cdot \|\tilde{q}^h\|} &\geq \alpha_1^i > 0 \\ \inf_{\mathbf{N}^h \in M_{1h}} \sup_{\tilde{q}^h \in W_{2h}^0} \frac{a^i(\mathbf{N}^h, \tilde{q}^h)}{\|\mathbf{N}^h\| \cdot \|\tilde{q}^h\|} &\geq \alpha_2^i > 0 \\ \inf_{v^h \in M_{2h}} \sup_{\tilde{p}^h \in W_{1h}} \frac{b^i(v^h, \tilde{p}^h)}{\|\tilde{p}^h\| \cdot \|v^h\|} &\geq \alpha_3^i > 0. \end{aligned} \tag{II.2.14}$$

2.3 Résultats sur l'erreur d'approximation

Les espaces de discrétisation proposés plus haut sont construits de manière à ce que ces trois conditions soient vérifiées. Pour plus de détails sur la vérification des conditions Inf-Sup, on renvoie aux travaux de J-M. THOMAS et D. TRUJILLO ([64]). On démontre alors le résultat suivant:

Lemme 7 *La solution $(\tilde{p}^h, \mathbf{N}^h)$ du problème (P_h^g) vérifie:*

$\exists C > 0$, indépendante de h , telle que

$$\|\tilde{p}^h\|_{H(\text{div}, \Omega)^{n_c}} + |\mathbf{N}^h|_{(1, \Omega)^{n_c}} \leq C\{\|f\|_{0, \Omega} + \|g\|_{0, \Omega}\}. \quad (\text{II.2.15})$$

✓ **Preuve**

La démonstration de ce lemme découle de la considération des fonctions test particulières $q^h = R^*(N^h)$ et $v^h = \Pi_{0,h}(N_i^h)$ dans la formulation du problème (P_h^g) . Dès lors, on a

$$m_h^i(\tilde{p}, R^*(\mathbf{N}^h)) + a^i(\mathbf{N}^h, R^*(\mathbf{N}^h)) + b^i(\Pi_{0,h}N_i^h, \tilde{p}) = L^i(R^*(\mathbf{N}^h)) + l^i(\Pi_{0,h}N_i^h).$$

La formule de Green discrète nous assure que

$$m_h^i(\tilde{p}, R^*(\mathbf{N}^h)) = -b^i(\Pi_{0,h}N_i^h, \tilde{p}).$$

Ainsi, après avoir sommé sur $i \in \{1..n_c\}$, on obtient

$$\sum_{i \in \{1..n_c\}} a^i(\mathbf{N}^h, R^*(\mathbf{N}^h)) = \sum_{i \in \{1..n_c\}} L^i(R^*(\mathbf{N}^h)) + l^i(\Pi_{0,h}N_i^h).$$

En utilisant, comme dans la démonstration précédente, l'hypothèse (\mathcal{H}) , on obtient l'inégalité

$$\sum_{i \in \{1..n_c\}} a^i(N^h, R^*(\mathbf{N}^h)) \leq \sum_{i \in \{1..n_c\}} L^i(R^*(\mathbf{N}^h)) + l^i(\Pi_{0,h}N_i^h).$$

Des inégalités de Cauchy-Schwarz et de Poincaré permettent ensuite de conclure à l'existence d'une constante $C > 0$ telle que

$$\forall i \in \{1..n_c\}, |N_i^h|_{1, \Omega} \leq C\{\|f\|_{0, \Omega} + \|g\|_{0, \Omega}\}.$$

2.3 Résultats sur l'erreur d'approximation

On démontre de même qu'en prenant pour fonction test $\tilde{q}^h = R(p^h)$ dans la première équation de (P_h^g) , on obtient

$$m_h^i(\tilde{p}^h, R(\tilde{p}^h)) + a^i(\mathbf{N}^h, R(\tilde{p}^h)) = 0$$

qui permet de déduire, à l'aide du résultat précédent, que

$$\forall i \in \{1..n_c\}, \quad \|p_i^h\|_{0,\Omega} \leq C\{\|f\|_{0,\Omega} + \|g\|_{0,\Omega}\}.$$

Et enfin, en prenant pour fonction test $v^h = \text{div}(p_i^h)$ dans la deuxième équation de (P_h^g) , on a, en utilisant le lemme 5

$$\forall i \in \{1..n_c\}, \quad \|\text{div}(p_i^h)\|_{0,\Omega} \leq C\{\|f\|_{0,\Omega} + \|g\|_{0,\Omega}\},$$

ce qui permet de conclure. ■

On est alors en mesure d'établir le résultat sur l'erreur d'approximation donné par

Théorème 2 *Soit (\mathbf{N}, \tilde{p}) la solution du problème (P) . Si $(\mathbf{N}, \tilde{p}) \in (H^2(\Omega) \times (H^1(\Omega))^2)^{n_c}$ et $\text{div}(\tilde{p}) \in (H^1(\Omega))^{n_c}$, alors, $\exists C > 0$ indépendante de h , telle que,*

$$\|\tilde{p} - \tilde{p}^h\|_{H(\text{div}, \Omega)^{n_c}} + \|\mathbf{N} - \mathbf{N}^h\|_{(L^2, \Omega)^{n_c}} \leq Ch\{|\text{div}(\tilde{p})|_{(L^2, \Omega)^{n_c}} + \|\tilde{p}\|_{(L^2, \Omega)^{n_c}} + \|\mathbf{N}\|_{(L^2, \Omega)^{n_c}}\}. \quad (\text{II.2.16})$$

✓ **Preuve**

On considère \tilde{r}^h et \mathbf{m}^h deux éléments quelconques de W_{1h} et M_{1h} . On a, $\forall \tilde{q}^h \in W_{2h}$,

$$m_h^i(\tilde{p}^h - \tilde{r}^h, \tilde{q}^h) + a^i(\mathbf{N}^h - \mathbf{m}^h, \tilde{q}^h) = m^i(p - \tilde{r}^h, \tilde{q}^h) + a^i(\mathbf{N} - \mathbf{m}^h, \tilde{q}^h) + m_h^i(\tilde{r}^h, \tilde{q}^h) - m^i(\tilde{r}^h, \tilde{q}^h)$$

De la même manière, $\forall v^h \in M_{2h}$,

$$b^i(v^h, \tilde{p}^h - \tilde{r}^h) + d_h^i(\mathbf{N}^h - \mathbf{m}^h, v^h) = b^i(v^h, \tilde{p} - \tilde{r}^h) - d_h^i(\mathbf{m}^h, v^h) + d^i(\mathbf{N}, v^h).$$

2.4 Etude du problème d'évolution

Et donc, à l'aide du lemme 7, après avoir sommé sur l'indice i , il vient,

$$\begin{aligned} & \|\tilde{p}^h - \tilde{r}^h\|_{H(\text{div}, \Omega)^{n_c}} + |\mathbf{N}^h - \mathbf{m}^h|_{(1, \Omega)^{n_c}} \leq \\ C \{ & \|\tilde{p} - \tilde{r}^h\|_{(0, \Omega)^{n_c}} + |\mathbf{N} - \mathbf{m}^h|_{(1, \Omega)^{n_c}} \|R(\tilde{r}^h) - \tilde{r}^h\|_{(0, \Omega)^{n_c}} + \\ & \|\text{div}(\tilde{p} - \tilde{r}^h)\|_{(0, \Omega)^{n_c}} + \|\mathbf{N} - \Pi_{0,h}(\mathbf{m}^h)\|_{(0, \Omega)^{n_c}} \} \end{aligned}$$

On déduit aisément le résultat en utilisant le lemme 5 et des inégalités triangulaires. ■

2.4 Etude du problème d'évolution

Dans cette partie, nous nous ramenons au problème initial d'évolution. Nous nous plaçons toutefois dans le cas d'un système à petit nombre de Péclet, *i.e.* où les phénomènes de diffusion sont prédominants par rapport aux phénomènes de convection. Cette hypothèse, bien qu'elle soit faite ici pour simplifier l'étude, est justifiable dans toute situation où le mélange est fortement dilué, *i.e.* chaque espèce est peu concentrée (ce qui donne donc lieu à de forts gradients de concentration). Afin d'effectuer une discrétisation en temps du système, pour un pas de temps $\Delta t = \frac{T}{N}$ fixé, on pose $t_n = n\Delta t$ et on note alors $N_i(n\Delta t, x) = N_{i,n}(x)$, $\tilde{p}_i(n\Delta t, x) = \tilde{p}_{i,n}(x)$. Introduisons donc le problème défini par la formulation variationnelle suivante

$$(P_h^n) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\tilde{p}_{n+1}^h, \mathbf{N}_{n+1}^h) \in W_{1h} \times M_{1h} \\ \forall i \in \{1..n_c\}, \left\{ \begin{array}{l} \forall \tilde{q}^h \in W_{2h}, m_h^i(\tilde{p}_{n+1}^h, \tilde{q}^h) + a^i(\mathbf{N}_{n+1}^h, \tilde{q}^h) = 0 \\ \forall v^h \in M_{2h}, b^i(v^h, \tilde{p}_{n+1}^h) + \frac{1}{\Delta t} d_h^i(v^h, \mathbf{N}_{n+1}^h - \mathbf{N}_n^h) = l^{i,n}(v^h). \end{array} \right. \end{array} \right.$$

2.5 Consistance du schéma

Dans cette étude, on commence par définir l'équivalent d'une projection de la solution exacte sur l'espace discret $W_{1h} \times M_{1h}$. Pour cela, on définit à chaque instant $n\Delta t$, le couple $(\Phi \tilde{p}_n^h, \psi \mathbf{N}_n^h)$ par l'intermédiaire du problème stationnaire suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } (\Phi \tilde{p}_n^h, \psi \mathbf{N}_n^h) \in W_{1h} \times M_{1h} \\ \forall \tilde{q}^h \in W_{2h}, m_h^i(\Phi \tilde{p}_n^h, \tilde{q}^h) + a^i(\psi \mathbf{N}_n^h, \tilde{q}^h) = 0 \\ \forall v^h \in M_{2h}, b^i(v^h, \Phi \tilde{p}_n^h) = b^i(v^h, \tilde{p}_n^h). \end{array} \right. \quad (\text{II.2.17})$$

2.5 Consistance du schéma

Ce problème ayant été étudié au paragraphe précédent, et sachant que

$$\|\Phi\tilde{p}_{i,n} - \tilde{p}_{i,n}\|_{H(\text{div},\Omega)} + \|\psi N_{i,n} - N_{i,n}\| \leq Ch, \quad (\text{II.2.18})$$

il nous reste à étudier l'erreur entre $(\Phi\tilde{p}_n^h, \psi\mathbf{N}_n^h)$ and $(\tilde{p}_n^h, \mathbf{N}_n^h)$. On pose alors pour tout $n = 1, \dots, N$

$$\begin{cases} E_i^n = \Phi\tilde{p}_{i,n} - \tilde{p}_{i,n}^h \text{ et } \mathbf{E}^n = (E_i^n)_i \\ e_i^n = \psi N_{i,n} - N_{i,n}^h \text{ et } \mathbf{e}^n = (e_i^n)_i. \end{cases}$$

On peut ainsi écrire, $\forall q_h \in W_{2h}$

$$m_h^i(\mathbf{E}^{n+1}, \tilde{q}^h) + a^i(\mathbf{e}^{n+1}, \tilde{q}^h) = 0.$$

De plus,

$$b^i(v^h, \mathbf{E}^{n+1}) + \frac{1}{\Delta t} d_h^i(v^h, \mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n) = l^{i,n}(v^h) + b^i(v^h, \Phi\tilde{p}_n) + \frac{1}{\Delta t} d_h^i(v^h, \psi\mathbf{N}_{n+1} - \psi\mathbf{N}_n).$$

Puis, à l'aide du problème initial, on obtient

$$\begin{aligned} b^i(v^h, \mathbf{E}^{n+1}) + \frac{1}{\Delta t} d_h^i(v^h, \mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n) &= -d^i(v^h, \partial_t \mathbf{N}_n) + \frac{1}{\Delta t} d^i(v^h, \psi\mathbf{N}_{n+1} - \psi\mathbf{N}_n) \\ &\quad - \frac{1}{\Delta t} d_h^i(v^h, \psi\mathbf{N}_{n+1} - \psi\mathbf{N}_n) - d^i(v^h, \psi\mathbf{N}_{n+1} - \psi\mathbf{N}_n). \end{aligned}$$

Considérant la solution \mathbf{N} comme étant assez régulière, on établit l'estimation suivante

$$\left\| \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} \partial_t N_{i,n} - \frac{1}{\Delta t} \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} (\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}) \right\|_{0,\Omega} \leq C(\Delta t + h).$$

On utilise ensuite le lemme 5 pour déduire l'inégalité

$$\begin{aligned} &\left\| \frac{1}{\Delta t} \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} \Pi_{0,h}(\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}) - (\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}) \right\|_{0,\Omega} \\ &\leq C \frac{h}{\Delta t} \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} \|\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}\|_{0,\Omega}, \end{aligned}$$

2.6 Convergence du schéma

et donc pour une solution suffisamment régulière, on prouve l'existence d'une constante $C > 0$, telle que,

$$\left\| \frac{1}{\Delta t} \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} \Pi_{0,h}(\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}) - (\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}) \right\|_{0,\Omega} \leq C.h.$$

On pose alors

$$\begin{aligned} \epsilon_i^n &= \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} \partial_t N_{l,n} - \frac{1}{\Delta t} \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} (\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}) \\ &+ \frac{1}{\Delta t} \sum_{1 \leq l \leq n_c} K_{il} [\Pi_{0,h}(\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n}) - (\psi N_{l,n+1} - \psi N_{l,n})] \end{aligned}$$

On a, d'après les résultats précédents,

$$\forall i \in \{1..n_c\}, \exists C_i > 0, \text{ tel que } \|\epsilon_i^n\|_{0,\Omega} \leq C_i(\Delta t + h). \quad (\text{II.2.19})$$

2.6 Convergence du schéma

On a montré que

$$\begin{cases} (\dagger) \quad \forall 1 \leq i \leq n_c, \forall \tilde{q}^h \in W_{2h}, m_h^i(R(\mathbf{E}^{n+1}), \tilde{q}^h) + a^i(\mathbf{e}^{n+1}, \tilde{q}^h) = 0, \\ (\dagger\dagger) \quad \forall 1 \leq i \leq n_c, \forall v^h \in M_{2h}, b^i(v^h, \mathbf{E}^n) + \frac{1}{\Delta t} d_h^i(v^h, \mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n) = \int_{\Omega} \epsilon_i^n v^h dx. \end{cases}$$

On est alors en mesure d'établir le résultat de convergence du schéma suivant:

Théorème 3 *Pour une solution $\mathbf{N} = (N_i)_{1 \leq i \leq n_c}$ suffisamment régulière,*

$$\forall i \in \{1..n_c\}, \exists C_i > 0, \text{ tel que } \max_n |N_{i,n}^h - N_{i,n}| \leq C_i(\Delta t + h). \quad (\text{II.2.20})$$

✓ **Preuve**

Dans (\dagger) et $(\dagger\dagger)$ on choisit pour fonctions tests particulières

$$v^h = \Pi_{0,h}(e_i^{n+1} - e_i^n), \quad \tilde{q}^h = R^*(e_i^{n+1} - e_i^n)$$

2.6 Convergence du schéma

On a ainsi,

$$b^i(e_i^{n+1} - e_i^n, \mathbf{E}^n) + \frac{1}{\Delta t} d_h^i(\Pi_{0,h}(e_i^{n+1} - e_i^n), \mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n) = \int_{\Omega} \epsilon_i^n \Pi_{0,h}(e_i^{n+1} - e_i^n) dx.$$

On utilise ensuite la formule de Green discrète,

$$\begin{aligned} b^i(e_i^{n+1} - e_i^n, \mathbf{E}^n) &= m_i^h (R(\mathbf{E}^n), R^*(\mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n)) \\ &= \int_{\Omega} \tilde{\nabla} e_i^n \cdot R^*(e_i^{n+1} - e_i^n) dx \end{aligned}$$

et donc

$$\int_{\Omega} \tilde{\nabla} e_i^n \cdot R^*(e_i^{n+1} - e_i^n) dx + \frac{1}{\Delta t} d_h^i(\Pi_{0,h}(e_i^{n+1} - e_i^n), \mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n) = \int_{\Omega} \epsilon_i^n \Pi_{0,h}(e_i^{n+1} - e_i^n) dx.$$

On somme ensuite sur chaque composant afin de pouvoir utiliser l'hypothèse de coercivité sur le tenseur d'adsorption pour en déduire l'inégalité

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq i \leq n_c} \int_{\Omega} \tilde{\nabla} e_i^n \cdot R^*(e_i^{n+1} - e_i^n) dx + \frac{\alpha}{\Delta t} \|\Pi_{0,h}(\mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n)\|_{0,\Omega}^2 \\ \leq \sum_{1 \leq i \leq n_c} \int_{\Omega} |\epsilon_i^n \Pi_{0,h}(e_i^{n+1} - e_i^n)| dx. \end{aligned}$$

Puis à l'aide de la définition de la norme $|\cdot|$ et de l'inégalité de Young, on obtient

$$\sum_{1 \leq i \leq n_c} [|e_i^{n+1}|^2 - |e_i^n|^2 - |e_i^{n+1} - e_i^n|^2] + \frac{\alpha}{\Delta t} \|\Pi_{0,h}(\mathbf{e}^{n+1} - \mathbf{e}^n)\|_{0,\Omega}^2 \leq \frac{\Delta t}{\alpha} \sum_{1 \leq i \leq n_c} \|\epsilon_i^n\|_{0,\Omega}^2.$$

Or, de manière évidente,

$$\exists C_{1,i} > 0, \text{ tel que } |e_i^{n+1} - e_i^n|^2 \leq \frac{C_{1,i}}{h^2} \|(e_i^{n+1} - e_i^n)\|_{0,\Omega}^2.$$

Ainsi, pour des valeurs spécifiques du pas de temps Δt données par

$$\Delta t \leq \frac{\alpha h^2}{2n_c \max_{i \in \{1..n_c\}} (C_i^* C_{1,i})} \quad (\text{II.2.21})$$

2.6 Convergence du schéma

(où les constantes (C_i^*) sont données par le lemme 6), on obtient l'inégalité suivante

$$\sum_{1 \leq i \leq n_c} [|e_i^{n+1}|^2 - |e_i^n|^2] \leq \frac{\Delta t}{\alpha} \sum_{1 \leq i \leq n_c} \|\epsilon_i^n\|_{0,\Omega}^2,$$

et donc, en sommant sur les itérations en temps, il vient, $\forall i \in \{1..n_c\}$

$$|e_i^{n+1}| \leq C_i (\Delta t + h). \tag{II.2.22}$$

■

Troisième partie

De l'échelle microscopique à
l'échelle macroscopique

Chapitre 3

Développement asymptotique et convergence à double échelle

Dans ce chapitre, on s'intéresse désormais à la formulation des équations en milieu poreux et plus exactement à l'obtention de celles-ci à partir des équations en milieu libre. On introduit dans un premier temps les notations utiles à un tel passage, puis sont rappelés les principes des techniques d'homogénéisation telles que le développement asymptotique ainsi que la convergence à deux échelles. On détermine enfin les équations macroscopiques du mouvement, de l'énergie et de conservation de la masse.

3.1 Introduction

Alors que l'analyse effectuée dans la première partie considère un écoulement en milieu libre, on s'intéresse désormais à l'influence que peut avoir l'introduction d'hétérogénéités sur les équations décrivant le système et plus particulièrement à l'expression des coefficients (de diffusion et de thermodiffusion) dans le cas d'un écoulement en milieu poreux. Le milieu poreux que l'on décrit ici est un milieu poreux saturé, constitué par une matrice et un espace interstitiel saturé par un fluide. Nous en reprenons ici la définition donnée par O. COUSSY dans [23]. Ainsi l'espace interstitiel (ou espace poreux connecté) est l'espace par l'intermédiaire duquel s'effectue l'écoulement du fluide ainsi que le transport des espèces. Dans toute notre

3.1 Introduction

étude, nous le considérerons connecté, *i.e.* connexe par arcs: deux points du fluide qui le sature sont toujours reliés par un trajet intérieur à cet espace (un exemple de situation illicite est illustré dans la figure 3.4). On dit alors que la phase fluide est continue. Nous considérons de plus que ce milieu ne possède pas de parties occluses, qui ne sont le lieu d’aucune filtration. Cette hypothèse tend à rapprocher plus le milieu considéré des sols (sables, argiles) que des roches (des illustrations de milieux poreux sont donnés en annexe, aux figures B.1(a) et B.1(b)).

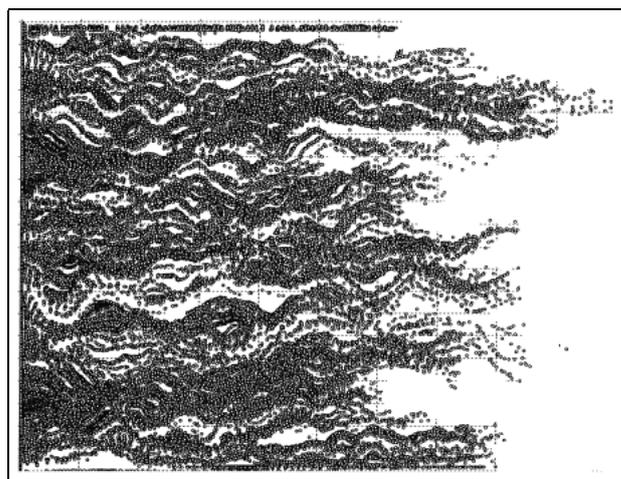


FIG. 3.1 – *Front d’injection dans un milieu poreux aléatoire (Source: IMFT)*

Afin d’obtenir les coefficients de transport équivalents, il est utile, voire nécessaire de recourir à une technique de changement d’échelle: l’homogénéisation. L’homogénéisation, c’est “la déduction rigoureuse d’équations macroscopiques posées au niveau microscopique et décrivant des phénomènes comportant des hétérogénéités de nature diverses”. Cette phrase décrit bien le but et la méthode de l’homogénéisation: on pose des équations au niveau microscopique (en fait à une échelle qui n’est pas nécessairement celle des particules mais où il existe déjà des lois constitutives) qui nous permettent de déduire leur “équivalent” par un passage à la limite approprié à l’échelle globale. Dans le cas qui nous concerne, l’expression “hétérogénéités” désigne les effets induits sur le champ thermique par les différences de conductivité entre la matrice poreuse et le fluide. Les variations du champ de vitesse seront aussi prises en compte puisqu’on s’intéresse également à l’homogénéisation de l’équation de Navier-Stokes. Beaucoup de travaux ont déjà été menés sur le sujet utilisant

3.1 Introduction

de nombreuses techniques relatives à l'homogénéisation (développement asymptotique, convergence à double échelle, H-convergence...) et la détermination de coefficients de transports équivalents a déjà fait l'objet de nombreuses études; comme le rappelle E. ARQUIS dans [9], plusieurs processus sont employés: des concepts théoriques déterministes (dont fait partie l'homogénéisation ou la prise de moyenne employée par QUINTARD et WHITAKER dans [58]), des méthodes statistiques ainsi que des méthodes numériques directes (utilisées notamment par E. ARQUIS et J.P. CALTAGIRONE dans [10], ou encore P.V.JAMET dans [46]). D'un point de vue purement mathématique, l'utilisation de techniques d'homogénéisation s'est beaucoup développée depuis ces quinze dernières années. Si le cadre périodique semble être le plus apte pour obtenir des solutions analytiques, de nouvelles théories permettent d'obtenir des résultats dans le cadre non périodique. Un des résultats les plus connus est l'application de la propriété de compacité par compensation, dûe à F. MURAT et L. TARTAR (*cf.* par exemple [21], chap. 13) qui permet le passage à la limite dans un produit de convergences faibles, sous des hypothèses *ad hoc*. Pour le procédé que nous utiliserons, on retrouve notamment des techniques de développement asymptotique dans [13] ou encore dans [62] et [38]. L'utilisation de la convergence à double échelle dans cette optique est plus récente et est développée dans [1]. De nombreux ouvrages ont essayé de regrouper l'ensemble des techniques d'homogénéisation, comme par exemple [38] et plus récemment [21]; des publications plus spécifiques les ont évoquées (*cf.* notamment [39] ou [59]).

Notre but ici, est avant tout d'adopter une démarche permettant de garder une certaine approche analytique du coefficient homogénéisé, tout en étant conscient du fait qu'une géométrie aussi simple soit-elle implique un traitement numérique pour la détermination de coefficients d'homogénéisation. G. ALLAIRE a montré dans [3] que selon l'échelle caractéristique choisie pour le volume élémentaire, l'équation régissant le mouvement du fluide changeait: on passe de Navier-Stokes à Darcy par l'intermédiaire du modèle de Brinkmann

$$-\mu \frac{\mathbf{U}}{\kappa} - \nabla p + \tilde{\mu} \Delta \mathbf{U} = 0 \quad (\text{III.3.1})$$

correspondant au cas où les effets d'adhérence du fluide sont encore pris en compte (modèle aussi étudié par E. ARQUIS dans [9]). Nous restreindrons notre modèle à un volume élémentaire où le mouvement est décrit par l'équation de Navier-Stokes.

3.1 Introduction

On considère désormais le système d'équations à l'échelle microscopique suivant :

- L'équation de Navier-Stokes :

$$\rho (\partial_t \mathbf{U} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}) = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{U} + \lambda \nabla (\operatorname{div}(\mathbf{U})) + \rho_0 \vec{f}$$

- L'équation de l'énergie en régime permanent :

$$\begin{cases} \kappa_f \Delta \theta + \mathbf{U} \cdot \nabla \theta = 0 & \text{en milieu libre} \\ \kappa_s \Delta \theta = 0 & \text{dans la matrice poreuse} \end{cases}$$

- Les équations de conservation de la masse :

$$\forall i \in \{1..n\} \quad \partial_t N_i + \mathbf{U} \cdot \nabla N_i - \sum_j D_{ij} \Delta N_j - S_t^i \operatorname{div}(N_i (\sum_j N_j - N_i) \nabla \theta) = 0.$$

Ces équations sont associées à des conditions au bord que nous préciserons dans le traitement de chacune d'elles.

Nous effectuons donc dans cette partie l'homogénéisation de chacune de ces équations. L'équation de Navier-Stokes y est traitée de façon informelle à l'aide de la méthode des développements asymptotiques. Les équations relatives à la thermique et à la conservation de la masse sont traitées à l'aide de la convergence à double échelle qui permet simultanément de démontrer la convergence vers l'état limite et de déterminer ce dernier. L'originalité de ces équations provient essentiellement du fait que deux d'entre elles sont définies seulement sur une partie du domaine (la phase fluide) alors que la dernière est à résoudre dans la totalité du domaine. L'obtention d'équations globales pour le "triptyque" vitesse-concentration-température permettra de pallier cela: la résolution des équations est alors effectuée sur le domaine entier, sans distinction de phase.

3.2 Notations et définitions

3.2.1 Notations utiles à l'analyse

On présente ici les différentes notations utiles à l'analyse qui sont celles utilisées par S.N. ANTONTSEV et al. dans [8] ou [52] et par G. ALLAIRE dans [2]. On montre notamment de quelle manière est partitionné l'ouvert sur lequel doit être faite la mise à l'échelle, et comment sont notés les différents éléments "géométriques" utilisés par la suite. On introduit ensuite les différentes notations relatives aux fonctions (prolongements, opérateurs de moyenne) qui seront utilisées lors de l'analyse.



FIG. 3.2 – Schématisation d'une cellule élémentaire $Y = Y_f \cup Y_s$

On considère donc un ouvert borné non vide (de frontière régulière, notion que nous précisons par la suite) Ω de \mathbb{R}^d et on note $Y = [0,1]^n$ le cube unité "semi ouvert" de \mathbb{R}^n . Cette cellule est divisée en deux parties (comme indiqué dans la figure 3.2), la partie solide Y_s et le milieu libre Y_f tel que $Y_f \cap \text{Int}(Y)$ soit un ouvert. On introduit alors la porosité ϕ (porosité connectée) du milieu, définie comme étant le paramètre adimensionné

$$\phi = \frac{\mathcal{L}^3 - \text{mes}(Y \setminus Y_s)}{\mathcal{L}^3 - \text{mes}(Y)} = \frac{\text{mes}(Y_f)}{\text{mes}(Y)}.$$

Soit alors un réel ε strictement positif. On peut effectuer une partition de l'espace

3.2 Notations et définitions

\mathbb{R}^n de la manière suivante :

$$\mathbb{R}^n = \bigcup_{z \in \mathbb{Z}^n} \varepsilon(z + Y)$$

On peut de la même façon partitionner \mathbb{R}^n en une partie libre et la matrice poreuse de la manière suivante

$$E_f = \bigcup_{z \in \mathbb{Z}^n} (z + Y_f)$$

$$E_s = \bigcup_{z \in \mathbb{Z}^n} (z + Y_s).$$

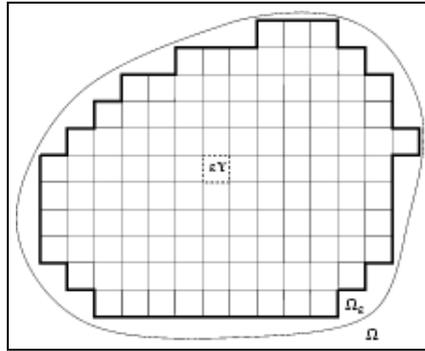


FIG. 3.3 – *Recouvrement du domaine*

Il ne reste alors plus qu'à définir le domaine d'écoulement du fluide par l'expression

$$\Omega_{f,\varepsilon} = \Omega \cap \varepsilon E_f$$

et la partie

$$C_\varepsilon = \text{Int} \left(\bigcup_{\varepsilon(z+Y) \subset \Omega} \varepsilon(z+Y) \right).$$

On introduit alors les notations suivantes

$$\Omega_{\varepsilon,f}^0 = C_\varepsilon \cap \varepsilon E_f \quad \Omega_{\varepsilon,s}^0 = \Omega \setminus \overline{\Omega_{\varepsilon,f}^0}.$$

3.2 Notations et définitions

On a ainsi effectué un “maillage” du domaine (*cf.* figure 3.3). Ce dernier se compose d’une partie fluide $\Omega_{\varepsilon,f}$ et d’une partie solide $\Omega_{\varepsilon,s}$ tout comme les cellules élémentaires Y_ε^i qui sont constituées d’un milieu libre $Y_{\varepsilon,f}^i$ et une matrice poreuse $Y_{\varepsilon,s}^i$. On effectue alors les hypothèses suivantes sur Y , Y_f , Y_s , E_f , E_s et leurs frontières respectives déjà introduites dans [8] et [2] :

Hypothèse 5

- On suppose que la partition de la cellule est réelle au sens où

$$\min(\text{mes}(Y_f), \text{mes}(Y_s)) > 0.$$

- L’ensemble $Y_f \cap \text{int}(Y)$ est une partie ouverte et connectée¹ de frontière localement lipschitzienne.
- E_f est une partie ouverte connectée de frontière \mathcal{C}^1 telle que

$$\text{int}(E_s) = \mathbb{R}^n \setminus \overline{E_f}.$$

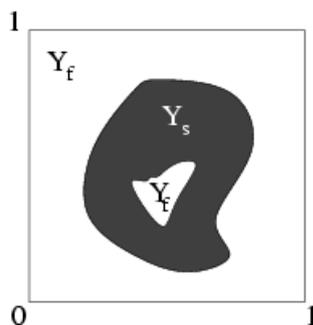


FIG. 3.4 – Exemple de situation géométrique illicite: Y_f est non connexe

On présente par la suite différentes notations relatives aux fonctions considérées dans l’analyse. On y introduit notamment la notion de prolongement ou encore celle de moyenne.

1. On trouve notamment dans [2], des représentations géométriques des situations satisfaisant ces hypothèses et des situations “illicites”, ainsi qu’une illustration de la notion de “connectivité”.

3.2 Notations et définitions

Notations 1 Par la suite, pour toute fonction f “définie” sur Ω_ε , on note par \bar{f} sa prolongée par zéro sur Ω , i.e. la fonction définie par

$$\begin{cases} \bar{f} = f \text{ sur } \Omega_\varepsilon \\ \bar{f} = 0 \text{ sur } \Omega \setminus \Omega_\varepsilon. \end{cases}$$

Notations 2 De même, pour toute fonction f de $L^1(\Omega)$ où Ω est un ouvert de \mathbb{R}^n , on note par \tilde{f} sa moyenne sur cet ouvert, i.e. le réel

$$\tilde{f} = \frac{1}{\text{mes}(\Omega)} \int_{\Omega} f(x) dx$$

Notations 3 Dans la suite, la fonction $\chi_{\Omega_{f,\varepsilon}}$ désigne la fonction caractéristique du milieu fluide, i.e. la fonction définie par

$$\forall x \in \Omega, \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_{f,\varepsilon} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Notations 4 On notera par l'indice \sharp toute fonction périodique. Ainsi $f \in L^2_{\sharp}(Y)$ est équivalent à

$$\begin{cases} f \in L^2(Y) \\ f \text{ périodique de période } Y. \end{cases}$$

L'ensemble de ces notations reste valable pour toute la partie à suivre.

On est désormais en mesure d'introduire les différentes notions que nous utiliserons lors des processus d'homogénéisation par la suite et notamment la convergence à double échelle introduite par G. ALLAIRE dans [1]. On distingue ici deux étapes dans le processus d'homogénéisation choisi: le développement asymptotique et la convergence de la solution. Nous détaillons par la suite les définitions de ces deux notions.

3.2 Notations et définitions

3.2.2 Développement asymptotique

Définition 1

On dit qu'une fonction u définie sur un ouvert Ω_ε admet un développement asymptotique si elle peut s'écrire sous la forme

$$u^\varepsilon(x) = u_0(x,y) + \varepsilon u_1(x,y) + \varepsilon^2 u_2(x,y) + \dots$$

avec $y = \frac{x}{\varepsilon}$ et $u_i(x,y)$ fonctions périodiques en y .

Remarque 8

La notion de fonction admettant un développement asymptotique est un peu vague dans la mesure où on ne précise pas a priori en quel sens ce développement est convergent. Il s'agit plus globalement de définir une classe de fonctions faisant intervenir deux types de variables (la variable géométrique et une variable oscillante). La convergence d'un tel développement est difficile à prouver en pratique; de fait, cette méthode contribue à identifier l'état limite plausible. Aussi est-il préférable dans certains cas, de recourir à d'autres méthodes, telle que la convergence à double-échelle, qui permet simultanément de prouver l'existence de u_0 et la convergence de la suite (u_ε) vers ce dernier, en un sens précisé.

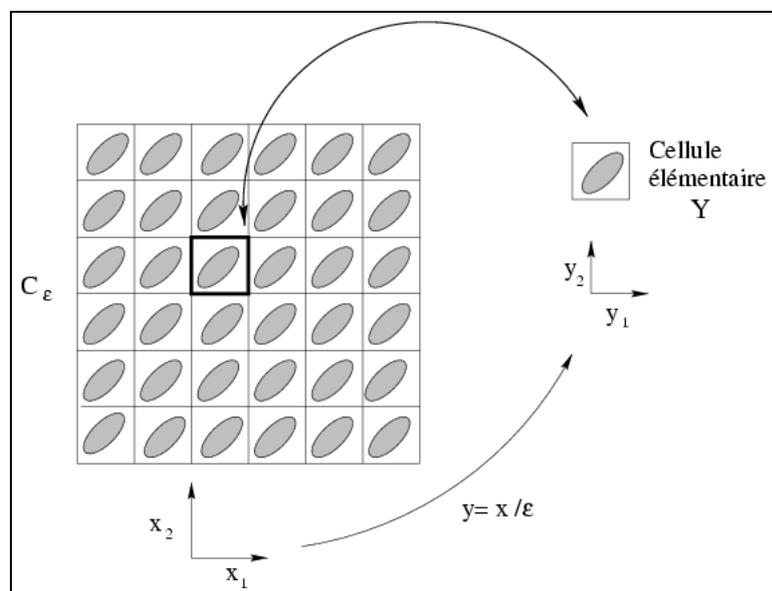


FIG. 3.5 – Milieu poreux hétérogène périodique: notion d'échelles multiples

3.2 Notations et définitions

On est alors en mesure de définir de nouveaux opérateurs de dérivation de la manière suivante

Notations 5

Les opérateurs de dérivation usuels peuvent se réécrire de la manière suivante :

$$\nabla = \nabla_x + \frac{1}{\varepsilon} \nabla_y, \quad (3.2a)$$

$$\operatorname{div} = \operatorname{div}_x + \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{div}_y, \quad (3.2b)$$

$$\Delta = \Delta_x + \frac{2}{\varepsilon} \Delta_{xy} + \frac{1}{\varepsilon^2} \Delta_y \quad (3.2c)$$

où on aura noté $\Delta_{xy} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial y_i}$.

Toutefois, quand il n'y aura pas de confusion possible (c'est-à-dire à l'échelle macroscopique, une fois éliminée toute variable locale) nous utiliserons pour simplifier la notation ∇ au lieu de ∇_x .

Une fois ces opérateurs de dérivation définis, la technique du développement asymptotique consiste en la substitution des développements de chaque fonction inconnue dans le problème à traiter puis en l'identification des différentes puissances de ε . Après avoir défini des prolongements *ad hoc* pour chaque fonction, on obtient ainsi l'équation du problème homogénéisé dont le premier terme du développement est solution. Cette technique est utilisée par la suite dans le traitement de l'équation de Navier-Stokes.

3.2.3 Convergence à double échelle

On décrit par la suite, une technique, "la convergence à deux échelles" permettant de déterminer l'état limite de fonctions définies sur un milieu périodique, à l'aide de fonctions oscillantes, et de prouver la convergence d'un tel passage. Cette notion, introduite pour la première fois par G. NGUETSENG en 1986 (*cf.* [55]) a fait depuis l'objet de plusieurs travaux, dont nous présentons ici les principaux résultats.

3.2 Notations et définitions

Définition 2

Une suite (f_ε) d'éléments de $L^2(\Omega)$ converge à double échelle vers un élément $f_0(x,y)$ de $L^2(\Omega \times Y)$,

si, pour toute fonction $\psi(x,y)$ de $D[\Omega; \mathcal{C}_\#^\infty(Y)]$,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} f_\varepsilon(x) \psi(x, \frac{x}{\varepsilon}) dx = \int_{\Omega} \int_Y f_0(x,y) \psi(x,y) dx dy.$$

On note alors $f_\varepsilon \xrightarrow{2-scale} f_0$.

On énonce ainsi le théorème suivant :

Théorème 4 (Nguetseng, 1986)

De toute suite bornée $(f_\varepsilon)_\varepsilon$ dans $L^2(\Omega)$, on peut extraire une sous suite qui converge à double échelle vers une limite $f_0(x,y)$ de $L^2(\Omega \times Y)$.

On cite enfin un théorème essentiel dans le processus de convergence à double échelle :

Théorème 5

Soit Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^n et (u_ε) une suite bornée dans $H^1(\Omega)$ qui converge faiblement vers u .

Alors (u_ε) converge à double échelle vers u ,

$$(u_\varepsilon) \xrightarrow{2-scale} u$$

et de plus, il existe $u_1 = u_1(x,y)$, $x \in \Omega$, $y \in Y$, tel que

$$u_1 \in L^2(\Omega; H_\#^1(Y)), \nabla_y u_1 \in ((L^2(\Omega); H_\#^1(Y))^n$$

et

$$\nabla_x u_\varepsilon \xrightarrow{2-scale} \nabla_x u(x) + \nabla_y u_1(x,y).$$

Les démonstrations de ces théorèmes ne sont pas données ici. On se référera aux travaux de G. ALLAIRE dans [1]. Toutefois nous reprenons la démonstration du

3.2 Notations et définitions

théorème 5 et l'adaptions au problème de la thermique par la suite.

On présente enfin un dernier résultat de convergence utile pour le passage à la limite dans certains termes d'équations définis seulement en milieu libre.

Théorème 6

La suite généralisée de fonctions $\chi_{\Omega_{f,\varepsilon}}$ possède la propriété de convergence suivante :

$$\chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \rightharpoonup \phi\chi_{\Omega} \text{ dans } L^{\infty} \text{ faible} - *.$$

3.3 De Navier-Stokes à Darcy

On décrit ici les calculs permettant de passer de l'équation en milieu libre (Navier-Stokes) au milieu poreux (Darcy). Ce passage mathématique d'une loi phénoménologique à une loi empirique a donné lieu à beaucoup de travaux. Ainsi, une démonstration rigoureuse de l'homogénéisation de l'équation de Navier-Stokes dans le cas stationnaire a été faite par L. TARTAR dans [62], alors que l'étude de l'homogénéisation des équations de type "Stokes" a été faite par S.N. ANTONTSEV et *al.* dans [8]. On trouve encore de nombreuses autres approches pour l'obtention mathématique de la loi de Darcy (*cf.* notamment [29] et [17]).

Nous reprenons les travaux effectués par J.I. DIAZ dans [25] qui utilise la méthode des développements asymptotiques.

Après avoir mis à l'échelle les paramètres physiques de l'équation microscopique², l'équation de Navier-Stokes à laquelle on adjoint une condition locale d'incompressibilité du fluide devient

$$(E^{\mathbf{U}_\varepsilon}) \begin{cases} \varepsilon^2 \rho_0 (\partial_t \mathbf{U}_\varepsilon + (\mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla) \mathbf{U}_\varepsilon) = -\nabla p_\varepsilon + \mu \varepsilon^2 \Delta \mathbf{U}_\varepsilon + \lambda \varepsilon^2 \nabla(\operatorname{div}(\mathbf{U}_\varepsilon)) + \rho_0 \vec{f} \\ \operatorname{div}(\mathbf{U}_\varepsilon) = 0 \\ \mathbf{U}_\varepsilon|_{t=0} = 0. \end{cases}$$

La démonstration de J.I. DIAZ se fonde sur l'hypothèse de développement asymptotique de la vitesse, de la pression et de la densité. On suppose ainsi que ces inconnues peuvent s'écrire sous la forme (*cf.* remarque 10)

$$\begin{cases} \mathbf{U}_\varepsilon(x, t) = \varepsilon^2 (\mathbf{U}_0(x, y, \tau) + \varepsilon \mathbf{U}_1(x, y, \tau) + \varepsilon^2 \mathbf{U}_2(x, y, \tau) + \dots) \\ p_\varepsilon(x, t) = p_0(x, y, \tau) + \varepsilon p_1(x, y, \tau) + \varepsilon^2 p_2(x, y, \tau) + \dots \end{cases} \quad (\text{III.3.3})$$

où $y = \frac{x}{\varepsilon}$ et $\tau = \varepsilon^2 t$ et les fonctions (ρ_i) , (\mathbf{U}_i) , (p_i) sont Y -périodiques. On introduit ensuite les développements de chaque inconnue dans l'équation $(E^{\mathbf{U}_\varepsilon})$ et on identifie selon les puissances de ε .

Ainsi en regroupant les termes en ε^{-1} on obtient l'égalité

$$\nabla_y p_0 = 0.$$

2. le choix de ces paramètres est justifié dans la remarque 10

3.3 De Navier-Stokes à Darcy

On en déduit aisément à l'aide de la fonction F que p_0 ne dépend pas de y (p_0 est une fonction Y -périodique).

De la même façon, en regroupant les coefficients de ε , on obtient l'égalité

$$-(\nabla_x p_0 + \nabla_y p_1) + \mu \Delta_y \mathbf{U}_0 + \lambda \nabla_y (\operatorname{div} \mathbf{U}_0) + \rho_0 \vec{f} = 0. \quad (\text{III.3.4})$$

En identifiant les coefficients des termes en ε^2 , on obtient l'égalité

$$\operatorname{div}_x(\rho_0 \mathbf{U}_0) + \operatorname{div}_y(\rho_0 \mathbf{U}_1) = 0, \quad (\text{III.3.5})$$

et

$$\operatorname{div}_y(\rho_0 \mathbf{U}_0) = 0.$$

La densité étant par hypothèse indépendante de la variable y et ne s'annulant pas sur Y , il vient, à l'aide de l' "Y-périodicité" de \mathbf{U}_0

$$\operatorname{div}_y(\mathbf{U}_0) = 0 \text{ dans } Y_f.$$

On est alors en mesure d'établir le résultat suivant, décrivant la loi qui régit le mouvement en milieu poreux:

Théorème 7 *Le profil de vitesse homogénéisé est de type darcéen et vérifie³ la loi*

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{U}) = 0 \\ \mathbf{U} = \frac{1}{\mu} \tilde{\mathbf{K}}^p (\rho_0 f - \nabla p_0) \end{cases} \quad (\text{III.3.6})$$

où $\tilde{\mathbf{K}}^p$ est un tenseur symétrique défini positif à déterminer à l'aide de la géométrie de la cellule (tenseur des perméabilités absolues).

✓ **Preuve**

Dans un premier temps, on prolonge par zéro les fonctions définies seulement sur

3. pour la première condition, on se référera à la remarque 11

3.3 De Navier-Stokes à Darcy

Y_f sur tout Y comme dans la partie précédente de manière à pouvoir intégrer sur la cellule entière. Dès lors, en appliquant l'opérateur de moyenne à l'égalité (III.3.5), il vient

$$\widetilde{div}_x(\rho_0 \mathbf{U}_0) + \widetilde{div}_y(\rho_0 \mathbf{U}_1) = 0;$$

on examine ensuite un à un chaque terme. Ainsi

$$div_y(\widetilde{\mathbf{U}}_1) = \frac{1}{mes(Y)} \int_Y div_y(\mathbf{U}_1) dy = \frac{1}{mes(Y)} \int_{\partial Y} \mathbf{U}_1 \cdot \vec{n} d\sigma = 0,$$

puisque la vitesse s'annule sur la frontière Γ et est Y -périodique. L'égalité (III.3.5) nous mène alors à "l'équation de conservation de la masse macroscopique du fluide homogénéisé" donnée par

$$div_x(\rho_0 \tilde{\mathbf{U}}_0) = 0$$

et donc

$$div_x(\tilde{\mathbf{U}}_0) = 0.$$

Il suffit ensuite de remarquer à partir de l'égalité (III.3.4) que l'inconnue \mathbf{U}_0 est solution du problème de Stokes défini par

$$\begin{cases} -\mu \Delta_y \mathbf{U}_0 = -\nabla_y p_1 + \rho_0 \vec{f} - \nabla_x p_0 & \text{dans } Y_f \times [0, \infty] \\ div_y \mathbf{U}_0 = 0 & \text{dans } Y_f \times [0, \infty] \\ \mathbf{U}_0 = 0 & \text{sur } \partial Y_f \times [0, \infty] \\ \mathbf{U}_0 \text{ est } Y\text{-périodique.} \end{cases} \quad (\text{III.3.7})$$

On utilise alors un raisonnement similaire à celui employé dans ([62], prop. 2.1). Il vient, en ayant défini l'espace $V_Y = \{\vec{\omega} \in H_{\sharp}^1(Y) \text{ tels que } div_y(\vec{\omega}) = 0, \vec{\omega}|_{\Gamma} = 0\}$, $\mathbf{U}_0 \in V_Y$ et

$$\forall \vec{\omega} \in V_Y, \mu \int_Y \nabla_y \mathbf{U}_0 \cdot \nabla_y \vec{\omega} dy = \int_{Y^*} (\vec{f} - \nabla_x p_0) \cdot \vec{\omega} dy.$$

3.3 De Navier-Stokes à Darcy

En considérant alors les solutions $\vec{\eta}_i$ dans V_Y des problèmes

$$\int_Y \nabla_y \vec{\eta}_i \cdot \nabla_y \vec{\omega} dy = \int_{Y^*} \omega_i dy$$

où ω^i sont les coordonnées de $\vec{\omega}$ dans la base canonique, on obtient par linéarité

$$\mathbf{U}_0 = \frac{1}{\mu} \left(\rho_0 f_i - \frac{\partial p_0}{\partial x_i} \right) \vec{\eta}_i.$$

Puis en moyennant sur tout l'ensemble Y , on obtient l'expression des composantes de la vitesse en fonction du tenseur des perméabilités ainsi défini,

$$\mathbf{U}_{0j} = \frac{K_{ij}^p}{\mu} \left(\rho_0 f_i - \frac{\partial p_0}{\partial x_i} \right).$$

Il suffit ensuite de prendre $\mathbf{U} = \mathbf{U}_0$. ■

Remarque 9

La démonstration de la convergence de la solution du problème local vers la solution du problème macroscopique n'est pas donnée ici; on se référera aux travaux cités en début de section. Le problème majeur dans cette démonstration, est d'obtenir des estimations a priori indépendantes de ε alors que les fonctions sont elles-mêmes définies sur un ouvert Ω_ε . Pour surmonter cet obstacle, on utilise des prolongements des fonctions sur tout l'ouvert Ω . Le prolongement de la vitesse en dehors du milieu libre est le prolongement classique par zéro. Il est plus difficile d'introduire un prolongement adéquat pour la pression comme cela est expliqué par G. ALLAIRE dans [38]. Afin d'obtenir des estimations a priori indépendantes de ε , il semble commode d'utiliser, par exemple sur une cellule Y_ε ,

$$\begin{cases} \tilde{p}_\varepsilon = p_\varepsilon & \text{sur } Y_{\varepsilon,f} \\ \tilde{p}_\varepsilon = \frac{1}{\text{mes}(Y_{\varepsilon,f})} \int_{Y_{\varepsilon,f}} p_\varepsilon & \text{sur } Y_{\varepsilon,s}. \end{cases}$$

Remarque 10

Le degré de ε dans le développement de la vitesse et dans la variable de temps microscopique ainsi que l'ajustement des grandeurs physiques dans l'équation de

3.3 De Navier-Stokes à Darcy

Navier-Stokes sont obtenus par le biais d'analyse dimensionnelle et ont fait l'objet d'une justification par J.I. DIAZ dans [25]. Rappelons succinctement, pour la commodité du lecteur, les clefs essentielles de la compréhension de cet équilibrage des coefficients des équations microscopiques (E^{U_ε}). Introduisant quelques grandeurs caractéristiques $L, t_c, T_c, p_c, \rho_c, u_c, U_c$ pour respectivement la longueur macroscopique, le temps dans les flux microscopique et macroscopique, la pression et la vitesse (à l'échelle microscopique et macroscopique), on considère les variables adimensionnées

$$\bar{x} = \frac{x}{L}, \bar{t} = \frac{t}{t_c}, \bar{\tau} = \frac{\tau}{T_c}, \bar{p} = \frac{p}{p_c}, \bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_c}, \bar{u}_\varepsilon = \frac{u_\varepsilon}{u_c}, \bar{u}_0 = \frac{u_0}{U_c}, \quad (\text{III.3.8})$$

la longueur caractéristique à l'échelle microscopique étant εL . En reportant ces expressions dans les équations du mouvement, on fait apparaître que le terme issu de la dérivation particulaire de la vitesse est négligeable par la considération des nombres de Reynolds et Reynolds-Strouhal du flux microscopique, *i.e.*

$$Re = \frac{\rho_c u_c \varepsilon L}{\mu}, \quad ReSt = \frac{\rho_c u_c \varepsilon^2 L^2}{t_c}, \quad (\text{III.3.9})$$

ici **petits** (dans un écoulement instationnaire, le nombre de Strouhal définit le rapport entre forces d'inertie associées à l'accélération locale -forces d'inerties temporelles- et les forces d'inertie liées à l'accélération convective). Il s'ensuit immédiatement par identification de paramètres que

$$u_c = \varepsilon^2 \frac{p_c L}{\lambda + \mu}, \quad (\text{III.3.10})$$

ce qui explique dans (III.3.3) le développement a priori de U_ε . Considérant alors l'équation macroscopique de conservation de la masse, on met en évidence le fait que $\varepsilon^2 T_c$ est constant, ce qui justifie le changement d'échelle du temps $\tau = \varepsilon^2 t$.

Un choix différent de ces paramètres provoquerait l'apparition dans la loi de vitesse macroscopique de termes intégral-différentiels ou non linéaires comme le fait remarquer G. ALLAIRE dans [1]. Par exemple, dans le cas de l'équation microscopique,

$$\partial_t \mathbf{U}_\varepsilon - \mu \varepsilon^2 \Delta \mathbf{U}_\varepsilon = \vec{f} - \nabla p_\varepsilon$$

3.3 De Navier-Stokes à Darcy

G. ALLAIRE montre dans [38] que l'équation homogénéisée est de la forme

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{U}(t,x)) = 0 & \text{dans }]0,T[\times \Omega, \\ \mathbf{U}(t,x) = \mathbf{U}_{init}(x) + \frac{1}{\mu} \int_0^t \tilde{K}(t-s)(\rho_0 f - \nabla p_0)(s,x) ds & \text{dans }]0,T[\times \Omega \end{cases}$$

où \mathbf{U}_{init} est la condition initiale dépendant uniquement de la donnée initiale locale $\mathbf{U}_{init}^\varepsilon$ et de la structure de la matrice poreuse. Cette équation est de type "intégrodifférentielle", ce qui est dû à un effet de mémoire, c'est-à-dire à la conservation d'une variable locale.

Par ailleurs, la méthode peut introduire assez naturellement des lois non linéaires de Darcy lors de l'étude de fluides non newtoniens en milieu poreux.

Remarque 11

La condition d'incompressibilité globale donnée par

$$\operatorname{div}(\mathbf{U}) = 0 \text{ dans } \Omega \tag{III.3.11}$$

n'est généralement pas conforme à l'expérimentation puisqu'un écoulement incompressible localement ne l'est pas à l'échelle d'un gisement. Cette condition provient directement du choix des paramètres dans l'équation de Navier-Stokes et dans le développement asymptotique, dont la justification est donnée dans la remarque 10. On insiste en particulier ici sur le fait que le passage de l'équation de Navier-Stokes à celle de Darcy est rendu possible par le choix particulier des coefficients dans l'équation de Navier-Stokes et dans le développement de la vitesse qui induit des conditions du type de (III.3.11). Il faut donc comprendre ici que l'on sait trouver un cheminement intellectuel pour déduire l'équation macroscopique de Darcy linéaire à partir d'expressions locales de Navier-Stokes, mais que d'autres pondérations des coefficients (via les puissances de ε) conduisent à d'autres lois, à effet notamment de mémoire.

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

On considère l'équation de l'énergie en régime permanent, avec pour conditions de bord à l'interface milieu poreux-milieu libre la continuité de la température ainsi que la continuité des flux associés aux diffusivités respectives. Cette équation se distingue des deux autres par le fait que le champ thermique est défini sur tout le domaine et il n'y a donc pas besoin d'introduire des prolongements par zéro. On obtient ainsi la formulation variationnelle

$$(E_\varepsilon^\theta) \begin{cases} \forall v \in H_0^1(\Omega), \int_\Omega \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla v dx + \int_\Omega \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \theta_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla v dx = 0 \\ \theta_\varepsilon|_{\partial\Omega} = g \end{cases} \quad (\text{III.3.12})$$

où g est une fonction $L^2(\partial\Omega)$ sur laquelle nous donnerons des hypothèses par la suite, et κ la fonction définie par

$$\begin{aligned} \kappa(\cdot) &= \kappa_f \chi(Y \setminus \overline{Y_s}) + \kappa_s \chi(Y_s) \\ &= \kappa_f \chi(Y_f) + \kappa_s \chi(Y_s), \end{aligned}$$

avec κ_f et κ_s diffusivités thermiques des milieux fluides et solides.

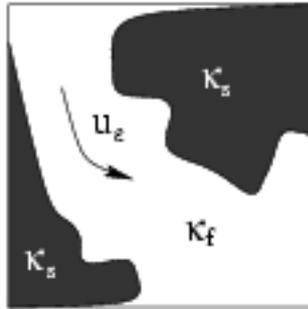


FIG. 3.6 – Hétérogénéités des diffusivités thermiques

Notre but ici est d'utiliser le procédé de convergence à double échelle, afin de pouvoir disposer d'une convergence assez forte sur la température pour l'introduire dans l'équation de conservation de la masse des constituants et pouvoir conclure. On distingue dans le raisonnement suivant quatre étapes essentielles ; dans un premier temps, on déduit à l'aide d'estimations *a priori* un résultat de convergence à double

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

échelle pour l'inconnue θ_ε (lemme 8 et théorème 8). Dans un deuxième temps, on multiplie l'équation microscopique par des fonctions tests appropriées pour obtenir une formulation variationnelle à l'état limite. Une intégration par parties permet alors de déterminer le problème macroscopique. Une dernière étape consiste en l'élimination des variables locales du problème macroscopique par un "découplage" du problème macroscopique et d'un problème sur une cellule élémentaire (théorème 9). Afin d'obtenir ce genre de résultat, on doit néanmoins effectuer une première hypothèse de régularité sur la condition au bord g , propre à permettre un relèvement:

Hypothèse 6 *On suppose que la fonction g est telle que*

$$g \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$$

On peut alors énoncer le lemme suivant:

Lemme 8 *La solution θ_ε du problème précédent est bornée dans $H^1(\Omega)$ indépendamment de ε , i.e.*

$$\exists C > 0, \|\theta_\varepsilon\|_{1,\Omega} \leq C.$$

✓ **Preuve**

A l'aide de l'hypothèse 6, il existe $\hat{g} \in H^1(\Omega)$, telle que $\hat{g}|_{\partial\Omega} = g$. Dès lors, pour le choix de fonction test $v = \theta_\varepsilon - \hat{g}$, on obtient l'égalité

$$\int_{\Omega} \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx + \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \theta_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx = 0.$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla^2 (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx + \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} (\theta_\varepsilon - \hat{g}) \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx \\ &= \int_{\Omega} \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \hat{g} \cdot \nabla (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx + \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \hat{g} \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx. \end{aligned}$$

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

On utilise ensuite l'inégalité de Poincaré (puisque $\theta_\varepsilon - \hat{g} \in H_0^1(\Omega)$), pour obtenir

$$\begin{aligned} & \alpha \|\theta_\varepsilon - \hat{g}\|_{1,\Omega}^2 + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla [(\theta_\varepsilon - \hat{g})^2] dx \\ & \leq \int_{\Omega} \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \hat{g} \cdot \nabla (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx + \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \hat{g} \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla (\theta_\varepsilon - \hat{g}) dx \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} & \alpha \|\theta_\varepsilon - \hat{g}\|_{1,\Omega}^2 + \underbrace{\frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \theta_\varepsilon^2 \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \vec{n} d\sigma}_{=0 \text{ car } \mathbf{U}_\varepsilon|_{\partial\Omega}=0} \\ & \leq \frac{\alpha}{2} \|\theta_\varepsilon - \hat{g}\|_{1,\Omega}^2 + \frac{1}{\alpha} \|\kappa \hat{g}\|_{1,\Omega}^2 + \frac{1}{\alpha} \|\chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \hat{g} \mathbf{U}_\varepsilon\|_{(0,\Omega)^n}^2 \end{aligned}$$

à l'aide de l'inégalité de Young et comme $\hat{g} \in H^1(\Omega)$. On obtient facilement l'existence d'une constante $C > 0$, telle que

$$\frac{\alpha}{2} \|\theta_\varepsilon - \hat{g}\|_{1,\Omega} \leq C$$

Le résultat vient immédiatement en utilisant une simple inégalité triangulaire et l'hypothèse 6. ■

En conséquence du lemme précédent, on démontre le résultat de convergence suivant:

Théorème 8 *Les suites $(\theta_\varepsilon)_\varepsilon$ et $(\nabla \theta_\varepsilon)_\varepsilon$ convergent à double échelle respectivement vers des éléments $\theta^*(x)$ de $H^1(\Omega)$ et $(\nabla_x \theta^* + \nabla_y \xi(x,y))$ de $H^1(\Omega) \times L^2[\Omega; H_\#^1(Y) \setminus \mathbb{R}]$.*

✓ **Preuve**

Nous reprenons ici la démonstration de ce théorème détaillée par G. ALLAIRE dans [1] et l'adaptions au problème du champ thermique dans le milieu poreux. Le problème considéré est associé à une condition de bord de type "Dirichlet non homogène". Afin de ne pas alourdir le traitement du problème, on considère dans un premier temps une condition au bord de type homogène et on se ramène au premier cas en effectuant un changement de variable, par l'intermédiaire d'un relèvement sur Ω de la fonction g dans $H^1(\Omega)$ (tel que \hat{g} introduit dans la démonstration du lemme

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

8). Ainsi, en posant,

$$\theta'_\varepsilon = \theta_\varepsilon - \hat{g}$$

on se ramène à un problème associé à une condition de Dirichlet homogène. Pour des raisons de commodité d'écriture, on notera encore θ_ε la fonction ainsi obtenue. L'équation (III.3.12) se réécrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall v \in H_0^1(\Omega), \\ \int_{\Omega} \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \theta_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} \operatorname{div}\left(\kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \hat{g} + \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \hat{g} \mathbf{U}_\varepsilon\right) v dx \\ \theta_\varepsilon|_{\partial\Omega} = 0 \end{array} \right.$$

On note de plus par f_ε le second membre obtenu de sorte que l'équation se réécrit encore sous la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall v \in H_0^1(\Omega), \\ \int_{\Omega} \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \theta_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} f_\varepsilon v dx \\ \theta_\varepsilon|_{\partial\Omega} = 0. \end{array} \right. \quad (\text{III.3.13})$$

Le changement de variable introduit alors un second membre dans l'équation de l'énergie, dépendant uniquement de ε par la présence de la forme microscopique du profil de vitesse, puisque le relèvement est effectué sur une condition posée à l'échelle globale. L'introduction de ce second membre n'amène ainsi aucune difficulté dans le changement d'échelle. Il nous suffit donc de traiter le problème avec une condition de bord homogène.

La convergence des suites $(\theta_\varepsilon)_\varepsilon$ et $(\nabla \theta_\varepsilon)_\varepsilon$ découle du théorème 4 et du lemme précédent. Ainsi

$$\exists \theta^*, \xi_0 \text{ tels que } \theta_\varepsilon \xrightarrow{2-scale} \theta^*, \nabla \theta_\varepsilon \xrightarrow{2-scale} \xi_0.$$

Ainsi, pour des fonctions $\psi \in D[\Omega; \mathcal{C}_\#^\infty(Y)]$ et $\Psi \in D[\Omega; \mathcal{C}_\#^\infty(Y)]^n$, on a

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} \theta_\varepsilon(x) \psi\left(x, \frac{x}{\varepsilon}\right) dx = \int_{\Omega} \int_Y \theta^*(x,y) \psi(x,y) dx dy \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} \nabla \theta_\varepsilon(x) \Psi\left(x, \frac{x}{\varepsilon}\right) dx = \int_{\Omega} \int_Y \xi_0(x,y) \Psi(x,y) dx dy. \end{array} \right. \quad (\text{III.3.14})$$

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

Dès lors, en utilisant des formules de Green, on obtient

$$\varepsilon \int_{\Omega} \nabla \theta_{\varepsilon}(x) \cdot \Psi(x, \frac{x}{\varepsilon}) dx = - \int_{\Omega} \theta_{\varepsilon}(x) \left[\operatorname{div}_y \Psi(x, \frac{x}{\varepsilon}) + \varepsilon \operatorname{div}_x \Psi(x, \frac{x}{\varepsilon}) \right] dx.$$

Par passage à la limite sur ε , il vient

$$- \int_{\Omega} \int_Y \theta(x, y) \operatorname{div}_y \Psi(x, y) dx dy = 0.$$

Ce qui montre que $\theta = \theta(x)$ est une fonction indépendante de y . On considère désormais des fonctions $\Psi(x, y)$ vérifiant la propriété $\operatorname{div}_y \Psi(x, y) = 0$. Dès lors, la formule de Green se réécrit

$$\int_{\Omega} \nabla \theta_{\varepsilon}(x) \cdot \Psi(x, \frac{x}{\varepsilon}) dx = - \int_{\Omega} \theta_{\varepsilon}(x) \operatorname{div}_x \Psi(x, \frac{x}{\varepsilon}) dx$$

et donc, à l'aide de la définition de convergence à double échelle,

$$\int_{\Omega} \int_Y \xi_0(x, y) \cdot \Psi(x, y) dx dy = - \int_{\Omega} \int_Y \theta^*(x) \operatorname{div}_x \Psi(x, y) dx dy. \quad (\text{III.3.15})$$

On utilise ensuite le lemme (2.10) donné dans [1] pour conclure à l'existence d'une fonction $\omega \in (L^2(\Omega))^n$ telle que

$$\int_Y \Psi(x, y) dy = \omega(x).$$

Dès lors, l'égalité (III.3.15) se réécrit

$$\int_{\Omega} \int_Y \xi_0(x, y) \cdot \Psi(x, y) dx dy = - \int_{\Omega} \theta^*(x) \operatorname{div}_x \omega(x) dx.$$

θ^* est donc solution d'un problème de type

$$- \int_{\Omega} \theta^*(x) \operatorname{div}_x \omega(x) dx = l(\omega)$$

où l est une forme linéaire continue, ce qui permet de prouver que $\theta^* \in H_0^1(\Omega)$.

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

A l'aide d'une formule de Green, on réécrit (III.3.15) sous la forme

$$\int_{\Omega} \int_Y [\xi_0(x,y) - \nabla_x \theta^*(x)] \Psi(x,y) dx dy = 0$$

pour toute fonction $\Psi \in L^2[\Omega; L^2_{\sharp}(Y)]^n$ vérifiant $div_y \Psi(x,y) = 0$ et $\Psi(x,y) \cdot n_x|_{\Gamma} = 0$. On utilise ensuite le fait que l'ensemble orthogonal à celui des fonctions à divergence nulle est l'ensemble des "gradients", *i.e.* il existe une fonction $\xi(x,y) \in L^2[\Omega; H^1_{\sharp}(Y) \setminus \mathbb{R}]$ tel que

$$\xi_0(x,y) = \nabla_x \theta^*(x) + \nabla_y \xi(x,y) \quad (\text{III.3.16})$$

■

On est désormais en mesure de déterminer le problème homogénéisé vérifié par l'état limite θ^* :

Théorème 9 θ^* est l'unique solution dans $H^1(\Omega)$ du problème homogénéisé suivant

$$(E^{\theta^*}) \begin{cases} \forall v \in H_0^1(\Omega), \int_{\Omega} \tilde{\Lambda} \nabla \theta^* \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} \phi \theta^* \mathbf{U} \cdot \nabla v dx = 0 \\ \theta^*|_{\partial\Omega} = g \end{cases} \quad (\text{III.3.17})$$

où $\tilde{\Lambda}$ est le tenseur donné par

$$\begin{aligned} \Lambda_{kl} &= \int_Y \kappa(\nabla_y \sigma_k + \vec{e}_k) \cdot \vec{e}_l dy \\ &= \int_{Y_f} \kappa_f(\nabla_y \sigma_k + \vec{e}_k) \cdot \vec{e}_l dy + \int_{Y_s} \kappa_s(\nabla_y \sigma_k + \vec{e}_k) \cdot \vec{e}_l dy \end{aligned} \quad (\text{III.3.18})$$

et (σ_k) est la famille des solutions du problème de transmission suivant

$$(E_{cell}^{\theta}) \begin{cases} \sigma_k \in H^1_{\sharp}(Y) \\ div_y(\kappa_f[\nabla_y \sigma_k + \vec{e}_k]) = 0 \text{ dans } Y_f \\ div_y(\kappa_s[\nabla_y \sigma_k + \vec{e}_k]) = 0 \text{ dans } Y_s \\ [\kappa_f(\nabla_y \sigma_k + \vec{e}_k) - \kappa_s(\nabla_y \sigma_k + \vec{e}_k)] \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial Y_f \setminus \partial Y. \end{cases} \quad (\text{III.3.19})$$

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

✓ **Preuve**

On réécrit l'équation de la thermique en milieu libre (III.3.13) et en multipliant celle-ci par la fonction test $\psi(x) + \psi_1(x,y)$ où $\psi \in D(\Omega)$ et $\psi_1 \in D[\Omega; \mathcal{C}_\#^\infty(Y)]$, on obtient, à l'aide d'une formule de Green,

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \int_Y \kappa\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla (\psi(x) + \varepsilon \psi_1(x, \frac{x}{\varepsilon})) dx dy &= - \int_{\Omega} \int_Y \chi_{\Omega_f, \varepsilon} \theta_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla (\psi(x) + \varepsilon \psi_1(x, \frac{x}{\varepsilon})) dx dy \\ &= \int_{\Omega} \int_Y f_\varepsilon (\psi(x) + \varepsilon \psi_1(x, \frac{x}{\varepsilon})) dx dy \end{aligned}$$

En remarquant que

$$\nabla (\psi(x) + \varepsilon \psi_1(x,y)) = \nabla_x \psi(x) + \nabla_y \psi_1(x,y) + \varepsilon \nabla_x \psi_1(x,y),$$

et en utilisant les égalités (III.3.16) et (III.3.14), on obtient par passage à la limite quand $\varepsilon \rightarrow 0^+$,

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} \int_Y \kappa(y) [\nabla_x \theta^* + \nabla_y \xi(x,y)] \cdot [\nabla_x \psi(x) + \nabla_y \psi_1(x,y)] dx dy \\ & - \int_{\Omega} \int_Y \chi_{\Omega_f} \phi \theta^* \mathbf{U} \cdot [\nabla_x \psi(x) + \nabla_y \psi_1(x,y)] dx dy = \int_{\Omega} \int_Y f \psi(x) dx dy \end{aligned}$$

pour tout $(\psi, \psi_1) \in D(\Omega) \times D[\Omega; \mathcal{C}_\#^\infty(Y)]$ et donc, par densité, pour tout $(\psi, \psi_1) \in H_0^1(\Omega) \times L^2[\Omega; H_\#^1(Y) \setminus \mathbb{R}]$. On aura préalablement défini la fonction $f = \text{div}(\kappa(x) \nabla \hat{g} + \phi \chi_{\Omega_f} \hat{g} \mathbf{U})$. On reconnaît aisément à l'aide d'une formule de Green la formulation variationnelle associée au problème

$$\begin{cases} \text{div}_y (\kappa(y) (\nabla \theta^* + \nabla_y \xi(x,y))) = 0 \text{ dans } \Omega \times Y \\ \text{div}_x \left(\int_Y \kappa(y) (\nabla \theta^* + \nabla_y \xi(x,y)) dy + \chi_{\Omega_f} \phi \theta^* \mathbf{U} \right) = 0 \text{ dans } \Omega \times Y \\ \theta^*|_{\partial\Omega} = g. \end{cases}$$

Ce problème possédant une solution unique (la démonstration de ce résultat est immédiate dès que l'on a observé que $\|\nabla_x \theta^* + \nabla_y \xi\|_{L^2(\Omega \times Y)^n}$ est une norme pour l'espace $H_0^1(\Omega) \times L^2[\Omega; H_\#^1(Y) \setminus \mathbb{R}]$), on peut alors conclure à la convergence de toute la suite (θ_ε) (resp. $\nabla \theta_\varepsilon$) vers $\theta^*(x)$ (resp. $(\nabla \theta^*(x) + \nabla_y \xi(x,y))$).

La première équation représente le problème local (sur une cellule élémentaire) permettant de déterminer la fonction ξ . La deuxième est l'équation homogénéisée de

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

la thermique. Afin de mieux caractériser le problème homogénéisé, il est nécessaire d'éliminer la variable locale y de cette formulation. C'est l'objet de la suite de cette démonstration.

Considérons les solutions $\sigma_k(x,y)$ du problème (E_{cell}^θ) . Soit alors la fonction $\xi(x,y)$ définie par la relation

$$\xi(x,y) = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \sigma_k(x,y).$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_y (\kappa(y)(\nabla \theta^* + \nabla_y \xi(x,y))) &= \operatorname{div}_y \left(\kappa(y) \left(\nabla \theta^* + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \nabla_y \sigma_k(x,y) \right) \right) \\ &= \operatorname{div}_y \left(\kappa(y) \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \vec{e}_k + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \nabla_y \sigma_k(x,y) \right) \right) \\ &= \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \underbrace{\operatorname{div}_y [\kappa(y)(\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x,y))]}_{=0 \text{ d'après (III.3.19)}} \\ &= 0 \end{aligned}$$

et donc ξ ainsi définie est bien la solution de l'équation sur la cellule élémentaire. Il reste maintenant à déterminer la forme macroscopique de l'équation

$$\operatorname{div}_x \left(\int_Y \kappa(y)(\nabla \theta^* + \nabla_y \xi(x,y)) dy + \chi_{\Omega_f} \phi \theta^* \mathbf{U} \right) = 0 \text{ dans } \Omega \times Y$$

Pour cela, il suffit d'introduire l'expression de la fonction ξ donnée ci-dessus dans l'expression du flux de chaleur diffusif homogénéisé. Ainsi,

$$\begin{aligned} \int_Y \kappa(y)[\nabla \theta^* + \nabla_y \xi(x,y)] dy &= \int_Y \kappa(y) \left[\nabla \theta^* + \nabla_y \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \sigma_k(x,y) \right) \right] dy \\ &= \int_Y \kappa(y) \left[\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \vec{e}_k + \nabla_y \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \sigma_k(x,y) \right) \right] dy \\ &= \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \theta^*}{\partial x_k} \left(\int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x,y)] dy \right). \end{aligned}$$

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

On définit alors le tenseur $\tilde{\Lambda}$ par

$$\Lambda_{kl} = \int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot \vec{e}_l dy.$$

A l'aide de formules de Green, il vient de manière immédiate,

$$(E^{\theta^*}) \begin{cases} \forall v \in H_0^1(\Omega), \int_{\Omega} \tilde{\Lambda} \nabla \theta^* \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} \phi \theta^* \mathbf{U} \cdot \nabla v dx = 0 \\ \theta^*|_{\partial\Omega} = g. \end{cases}$$

Le problème homogénéisé a donc été complètement déterminé. On remarque qu'il est de même nature que le problème posé en milieu libre. L'étude d'un tel problème n'est donc pas nécessaire puisque le tenseur introduit possède des propriétés (symétrique, défini positif) qui permettent de conclure immédiatement, à l'aide de l'analyse faite en première partie, à l'existence et l'unicité d'une solution à un tel problème. ■

Lemme 9 *Le tenseur $\tilde{\Lambda}$ ainsi défini est symétrique et défini positif.*

✓ **Preuve**

Montrons d'abord que $\tilde{\Lambda}$ est symétrique. Le terme générique de ce tenseur est

$$\Lambda_{kl} = \int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot \vec{e}_l dy$$

Or la formulation variationnelle du problème (E_{cell}^{θ}) nous assure que

$$\int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot \nabla_y \phi dy = 0$$

pour toute fonction ϕ Y -périodique. Dès lors, par la considération de la fonction $\phi = \nabla_y \sigma_l(x, y)$, il vient

$$\begin{aligned} 0 &= \int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot \nabla_y \sigma_l(x, y) dy \\ &= \int_Y \kappa(y) \vec{e}_k \cdot \nabla_y \sigma_l(x, y) dy + \int_Y \kappa(y) \nabla_y \sigma_k(x, y) \cdot \nabla_y \sigma_l(x, y) dy. \end{aligned}$$

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

On obtient ainsi l'égalité

$$\int_Y \kappa(y) \vec{e}_k \cdot \nabla_y \sigma_l(x, y) dy = - \int_Y \kappa(y) \nabla_y \sigma_k(x, y) \cdot \nabla_y \sigma_l(x, y) dy$$

qui permet de conclure en remarquant que

$$\begin{aligned} \Lambda_{kl} &= \int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot \vec{e}_l dy \\ &= \int_Y \kappa(y) \delta_{kl} dy + \int_Y \kappa(y) \nabla_y \sigma_k(x, y) \cdot \vec{e}_l dy \\ &= \int_Y \kappa(y) \delta_{lk} dy - \int_Y \kappa(y) \nabla_y \sigma_k(x, y) \cdot \nabla_y \sigma_l(x, y) dy \\ &= \int_Y \kappa(y) \delta_{kl} dy + \int_Y \kappa(y) \nabla_y \sigma_l(x, y) \cdot \vec{e}_k dy \\ &= \Lambda_{lk}. \end{aligned}$$

Le tenseur $\tilde{\Lambda}$ est donc symétrique.

On a vu par ailleurs qu'il était possible d'écrire

$$\Lambda_{kl} = \int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot \vec{e}_l dy = \int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot [\vec{e}_l + \nabla_y \sigma_l(x, y)] dy \quad (\text{III.3.20})$$

puisque $\int_Y \kappa(y) [\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y)] \cdot \nabla_y \sigma_l(x, y) dy = 0$. Dès lors, pour tout vecteur $X = (x_i) \in \mathbb{R}^3$, on a

$$X^\top \tilde{\Lambda} X = \sum_{k,l} \int_Y \kappa(y) [x_k (\vec{e}_k + \nabla_y \sigma_k(x, y))] \cdot [x_l (\vec{e}_l + \nabla_y \sigma_l(x, y))] dy$$

et si il existe au moins un indice l tel que $x_l \neq 0$, la forme quadratique ainsi construite ne s'annule pas. ■

3.4 Homogénéisation de l'équation de l'énergie

Conclusion 1

L'équation régissant le champ thermique homogénéisé est la suivante:

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\tilde{\Lambda}\nabla\theta^* + \phi\theta^*\mathbf{U}) = 0 & \text{dans } \Omega \\ \theta^*|_{\partial\Omega} = g. \end{cases} \quad (\text{III.3.21})$$

où on aura introduit le tenseur symétrique défini positif $\tilde{\Lambda}$ par

$$\begin{aligned} \forall (k,l) \in \{1..3\}^2 \quad \Lambda_{kl} &= \int_Y \kappa(y)[\vec{e}_k + \nabla_y\sigma_k(x,y)].\vec{e}_l dy \\ &= \int_{Y_f} \kappa_f(\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k).\vec{e}_l dy + \int_{Y_s} \kappa_s(\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k).\vec{e}_l dy \end{aligned}$$

σ_k étant les solutions du problème de transmission sur une cellule élémentaire (E_{cell}^θ)

$$(E_{cell}^\theta) \begin{cases} \sigma_k \in H_{\#}^1(Y) \\ \operatorname{div}_y(\kappa_f[\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k]) = 0 & \text{dans } Y_f \\ \operatorname{div}_y(\kappa_s[\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k]) = 0 & \text{dans } Y_s \\ [\kappa_f(\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k) - \kappa_s(\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k)].\vec{n} = 0 & \text{sur } \partial Y_f \setminus \partial Y. \end{cases}$$

La détermination complète du champ thermique dans le milieu poreux via l'équation homogénéisée nécessite donc la résolution du problème (E_{cell}^θ) et la connaissance des fonctions (σ_k) et plus exactement l'estimation d'énergies liées à ces fonctions (le terme Λ_{kl}), moins coûteuse en terme de calcul. Cette estimation fera l'objet de la troisième partie de cette étude.

Remarque 12

Dans le cas de diffusivités thermiques constantes en milieu fluide et dans la matrice poreuse, le problème (E_{cell}^θ) est équivalent à

$$\begin{cases} \sigma_k \in H_{\#}^1(Y) \\ \Delta_y\sigma_k = 0 & \text{dans } Y_f \\ \Delta_y\sigma_k = 0 & \text{dans } Y_s \\ [\kappa_f(\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k) - \kappa_s(\nabla_y\sigma_k + \vec{e}_k)].\vec{n} = 0 & \text{sur } \partial Y_f \setminus \partial Y. \end{cases}$$

3.5 Coefficients de diffusion équivalents

On s'intéresse dans cette partie au traitement des équations de conservation de la masse de chaque constituant présent dans le fluide. La principale différence par rapport au traitement de l'équation de l'énergie réside dans le fait que les quantités $N_{i,\varepsilon}$ sont définies sur un domaine $(\Omega_{\varepsilon,f})$ dépendant du paramètre ε . Cette difficulté est surmontée à l'aide de l'introduction d'un opérateur de prolongement que nous définissons par la suite.

On considère donc les équations de diffusion-convection avec effet Soret suivantes dans $\Omega_{f,\varepsilon}$

$\forall i \in \{1..n\}$,

$$\partial_t N_{i,\varepsilon} + \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla N_{i,\varepsilon} - \sum_j D_{ij} \Delta N_{j,\varepsilon} - S_t^i \operatorname{div}(N_{i,\varepsilon}(1 - N_{i,\varepsilon}) \nabla \theta_\varepsilon) = 0 \quad (\text{III.3.22})$$

associées aux conditions sur la frontière⁴ et initiale

$$\begin{cases} \sum_j D_{ij} \frac{\partial N_{j,\varepsilon}}{\partial n} + S_t^i N_{i,\varepsilon} (1 - N_{i,\varepsilon}) \frac{\partial \theta_\varepsilon}{\partial n} = 0 \\ N_{i,\varepsilon}(x, t = 0) = N_i^0. \end{cases}$$

3.5.1 Comportement de $\bar{N}_{i,\varepsilon}$

Nous avons vu dans la partie relative à l'analyse mathématique des équations de l'effet Soret (*cf.* proposition 6) que les inconnues $N_{i,\varepsilon}$ sont bornées dans $H^1(Q_\varepsilon)$, indépendamment de ε . Toute la difficulté de la méthode réside dans la recherche d'un opérateur de prolongement des inconnues sur $H^1(Q)$ permettant de conserver une telle propriété. On introduit ainsi l'opérateur de prolongement P_ε

$$P_\varepsilon : \begin{cases} H^1(Q_\varepsilon) \longrightarrow H^1(Q) \\ N_{i,\varepsilon} \longmapsto P_\varepsilon(N_{i,\varepsilon}) = \bar{N}_{i,\varepsilon} \end{cases} \quad (\text{III.3.23})$$

continu, de constante de continuité C_p indépendante de ε . Cet opérateur, auquel font référence J.I. DIAZ dans [25] et A. BOURGEAT et L. PANKRATOV dans [16] permet de conserver des constantes dans les estimations *a priori* indépendantes de ε . Ainsi comme conséquence directe de l'existence de cette famille d'opérateurs équi-bornés,

4. on se reportera à la première partie pour la discussion sur la validité de cette condition.

3.5 Coefficients de diffusion équivalents

on a

$$\|\bar{N}_{i,\varepsilon}\|_{1,Q} \leq C_p \|N_{i,\varepsilon}\|_{1,Q_\varepsilon} \leq C' \quad (\text{III.3.24})$$

C' étant indépendante de ε . Or Q est un ouvert borné, lipschitzien. On peut donc appliquer le théorème de compacité de Rellich Kondrachoff (*cf.* [49] ou encore [50]) qui permet d'affirmer que

$$H^1(Q) \hookrightarrow\hookrightarrow L^2(Q).$$

Proposition 15 *Il existe une sous-suite extraite encore notée $(\bar{N}_{i,\varepsilon})$ qui converge fortement dans $L^2(Q)$ et presque partout dans Q vers une limite N_i .*

✓ **Preuve**

On utilise l'inégalité (III.3.24) qui nous permet d'affirmer l'existence d'une sous-suite extraite de $\bar{N}_{i,\varepsilon}$ qui converge faiblement dans $H^1(Q)$. L'injection de $H^1(Q)$ dans $L^2(Q)$ étant compacte, le résultat est immédiat. ■

On considère ainsi la formulation variationnelle associée à l'équation (III.3.22)

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \partial_t N_{i,\varepsilon} v dx + \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} N_{i,\varepsilon} \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla v dx \\ & - \sum_j D_{ij} \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \nabla N_{j,\varepsilon} \cdot \nabla v dx - \int_{\Omega} \chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} S_t^i N_{i,\varepsilon} (1 - N_{i,\varepsilon}) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla v dx = 0 \end{aligned}$$

On possède donc les résultats de convergence suivants, puisque l'opérateur ∇ est faiblement-faiblement continu de $H^1(\Omega)$ dans $(L^2(\Omega))^3$,

$$\chi_{\Omega_{f,\varepsilon}} \rightharpoonup \phi \chi_\Omega \text{ dans } L^\infty \text{ faible} - * \quad (3.25a)$$

$$\nabla \theta_\varepsilon \rightharpoonup \nabla \theta^* \text{ dans } (L^2(\Omega))^3 \quad (3.25b)$$

$$N_{i,\varepsilon} \rightharpoonup N_i \text{ dans } H^1(Q) \quad (3.25c)$$

$$N_{i,\varepsilon} \longrightarrow N_i \text{ dans } L^2(Q) \text{ et p.p. dans } Q \quad (3.25d)$$

3.5 Coefficients de diffusion équivalents

On détaille dans ce qui suit les passages aux limites dans chaque membre de l'équation.

Théorème 10 *La suite $\bar{N}_{i,\varepsilon}$ converge en moyenne quadratique sur Q vers la solution du problème d'équation variationnelle associée*

$$\int_{\Omega} \phi \partial_t N_i v dx + \int_{\Omega} \phi N_i \mathbf{U} \cdot \nabla v dx - \sum_j D_{ij} \int_{\Omega} [\tilde{\Upsilon} \nabla N_j] \cdot \nabla v dx - \int_{\Omega} N_i (1 - N_i) [\tilde{\Sigma}_i \nabla \theta^*] \cdot \nabla v dx = 0 \quad (\text{III.3.26})$$

où $\tilde{\Upsilon}_i$ et $\tilde{\Sigma}_i$ sont les tenseurs définis par

$$(\tilde{\Sigma}_i)_{kl} = S_t^i (\tilde{\Upsilon})_{kl} \quad (3.27a)$$

$$= \frac{S_t^i}{\mathcal{L}^3 - \text{mes}(Y)} \int_{Y_f} (\nabla_y \omega_k + \vec{e}_k) (\nabla_y \omega_l + \vec{e}_l) dy \quad (3.27b)$$

avec $(\omega_k)_{k=1,2}$ famille de fonctions solutions des problèmes elliptiques sur la cellule élémentaire Y

$$\begin{cases} \omega_k \in H_{\sharp}^1(Y) \\ -\text{div}_y (\nabla_y \omega_k + \vec{e}_k) = 0 \text{ dans } Y_f \\ (\nabla_y \omega_k + \vec{e}_k) \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial Y_f \setminus \partial Y. \end{cases} \quad (\text{III.3.28})$$

✓ Preuve

La démonstration de la convergence des termes de diffusion et de convection est similaire à celle faite pour le problème de l'équation de l'énergie. Nous traitons par la suite le passage à la limite dans le terme non linéaire de l'effet Soret $\int_{\Omega} \chi_{\Omega_\varepsilon} S_t^i N_{\varepsilon,i} (1 - N_{\varepsilon,i}) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla v dx$. Pour cela, on utilise les résultats de convergence énoncés en (3.25a) et (3.25b) qui permettent d'affirmer que

$$\chi_{\Omega_\varepsilon} \nabla \theta_\varepsilon \rightharpoonup \tilde{\Upsilon} \nabla \theta^* \text{ dans } (L^2(\Omega))^3 \quad (\text{III.3.29})$$

le tenseur $\tilde{\Upsilon}$ étant calculable à l'aide de fonctions auxiliaires construites sur Y_f . Ensuite on utilise les résultats de convergence de la propriété 15 pour établir l'existence d'une sous-suite (encore notée $N_{\varepsilon,i}$) convergeant fortement dans $L^2(Q)$ vers une limite N_i . Ainsi la suite $N_{\varepsilon,i} (1 - N_{\varepsilon,i}) \nabla v$ converge fortement vers la limite $N_i (1 - N_i) \nabla v$

3.5 Coefficients de diffusion équivalents

dans $(L^2(Q))^3$. Le produit d'une convergence forte et d'une convergence faible dans $(L^2(Q))^3$ permet dès lors d'affirmer que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_Q \chi_{\Omega_\varepsilon} S_t^i N_{\varepsilon,i} (1 - N_{\varepsilon,i}) \nabla \theta_\varepsilon \cdot \nabla v dx = \int_Q N_i (1 - N_i) [\tilde{\Sigma}_i \nabla \theta^*] \cdot \nabla v dx \quad (\text{III.3.30})$$

$\tilde{\Sigma}$ étant le tenseur défini par $\tilde{\Sigma} = S_t^i \tilde{\Upsilon}$.

■

Remarque 13

Le tenseur $\tilde{\Upsilon}$ peut aussi se réécrire, à l'aide des problèmes (III.3.28) de la manière suivante:

$$\begin{aligned} \Upsilon_{kl} &= \frac{1}{\mathcal{L}^3 - \text{mes}(Y)} \left\{ \int_{Y_f} \frac{\partial \omega_k}{\partial y_l} dy + \text{mes}(Y_f) \delta_{kl} \right\} \\ &= \phi \delta_{kl} + \frac{1}{\mathcal{L}^3 - \text{mes}(Y)} \int_{Y_f} \frac{\partial \omega_k}{\partial y_l} dy \end{aligned} \quad (\text{III.3.31})$$

On retrouve alors une formulation similaire à celle du tenseur $\tilde{\Lambda}$ dans (III.3.18), ayant sur la diagonale la porosité (modulo les coefficients de diffusion). La symétrie du tenseur $\tilde{\Upsilon}$ n'est alors plus évidente, mais implicitement donnée par les problèmes élémentaires.

Remarque 14

On notera l'importance dans l'homogénéisation de l'effet Soret de l'hypothèse de l'existence de l'opérateur P_ε . Le fait que la constante de continuité C_p de l'opérateur de prolongement P_ε , ne dépende pas du paramètre ε est capital dans la démonstration du passage à la limite. La principale difficulté dans la démonstration de la convergence réside dans le fait que les quantités $N_{i,\varepsilon}$ soient définies sur une partie $\Omega_{\varepsilon,f}$; comme le rappelle G. ALLAIRE dans [1], deux méthodes sont utilisables pour pallier cette difficulté dont fait partie la définition de l'opérateur P_ε . D'autres techniques ont été envisagées, notamment l'établissement de la compacité directe de l'injection de

3.5 Coefficients de diffusion équivalents

$H^1(\Omega_{\varepsilon,f})$ dans $L^2(\Omega_{\varepsilon,f})$, compacité uniforme selon le paramètre ε (version adaptée aux milieux "perforés" du théorème de Rellich).

Conclusion 2

Les équations régissant la conservation de la masse homogénéisées (équations de convection-diffusion-thermodiffusion macroscopiques) sont les suivantes:

$$\phi \partial_t N_i + \operatorname{div} \left(\phi N_i \mathbf{U} - \sum_j D_{ij} \tilde{\Upsilon} \nabla N_j - N_i (1 - N_i) \tilde{\Sigma}_i \nabla \theta^* \right) = 0 \quad (\text{III.3.32})$$

où on aura introduit les tenseurs symétriques définis positifs $\tilde{\Sigma}_i$ et $\tilde{\Upsilon}$ par

$$\begin{aligned} \forall (k,l) \in \{1..3\}^2 \quad (\tilde{\Sigma}_i)_{kl} &= S_i^i(\tilde{\Upsilon})_{kl} \\ &= \frac{S_i^i}{\mathcal{L}^3 - \operatorname{mes}(Y)} \int_{Y_f} (\nabla_y \omega_k + \vec{e}_k)(\nabla_y \omega_l + \vec{e}_l) dy \end{aligned}$$

ω_k étant les solutions du problème elliptique sur une cellule élémentaire Y

$$\begin{cases} \omega_k \in H_{\#}^1(Y) \\ -\operatorname{div}_y(\nabla_y \omega_k + \vec{e}_k) = 0 \text{ dans } Y_f \\ (\nabla_y \omega_k + \vec{e}_k) \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial Y_f \setminus \partial Y. \end{cases}$$

Chapitre 4

Estimation des tenseurs de diffusion et thermodiffusion

Les coefficients de diffusion et thermodiffusion macroscopiques ont été déterminés. Nous nous plaçons dans le cas où chaque phase est isotrope, à diffusivités thermiques et coefficients de diffusion constants. Nous décrivons ici la résolution des problèmes locaux introduits dans les parties précédentes qui permettra de donner la valeur numérique exacte de ces coefficients. La méthode utilisée pour la détermination des diffusivités thermiques équivalentes n'est pas la même que celle engagée pour la détermination des coefficients de diffusion. Nous explicitons ici ces deux démarches.

On s'intéresse dans cette partie à la détermination des coefficients de transport obtenus par le procédé d'homogénéisation. Celle-ci n'est possible que par la résolution de problèmes posés sur la cellule élémentaire du milieu périodique illustrés par les équations (III.3.19) et (III.3.28). Nous décrivons par la suite comment sont obtenues les solutions de tels problèmes.

La difficulté principale réside alors dans les conditions de périodicité sur le bord de la cellule: souvent coûteuses en terme de calcul, ces conditions induisent des matrices creuses dont la largeur de bande est très grande. Nous montrons ainsi qu'il est possible de se ramener dans certains cas à la résolution d'un problème simple, avec

seulement une condition de bord de type “dirichlet non homogène”. C’est le cas du problème obtenu pour l’équation de l’énergie dont nous détaillons la résolution par la suite. Nous conservons ici les notations utilisées dans la partie précédente. On introduit les notations suivantes:

Notations 6 On note Y le carré unité semi-ouvert $[0,1[^2$ et on définit sa frontière ∂Y par

$$\partial Y = \bigcup_{1 \leq i \leq 4} \partial Y_i$$

où $\partial Y_1 = [0,1] \times \{0\}$, $\partial Y_2 = \{0\} \times [0,1]$, $\partial Y_3 = [0,1] \times \{1\}$ et $\partial Y_4 = \{1\} \times [0,1]$ (cf. figure 4.1).

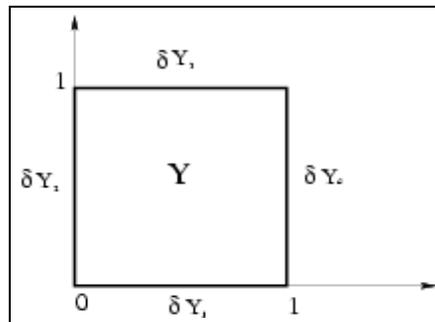


FIG. 4.1 – Cellule élémentaire Y

Dans toute cette partie, les problèmes étant posés uniquement à une échelle locale, il n’est plus nécessaire de faire la distinction entre variable locale et variable macroscopique. Tous les opérateurs seront donc notés sans indice, les variables considérées faisant uniquement référence aux coordonnées microscopiques $y = (y_1, \dots, y_n)$.

4.1 Diffusivités thermiques homogénéisées

4.1.1 Problème considéré

On considère donc le problème suivant:

Trouver $\sigma_k \in H_{\#}^1(Y)$ solution de, $\forall k \in \{1...3\}$

$$\operatorname{div}(\kappa_f[\nabla\sigma_k + \vec{e}_k]) = 0 \text{ dans } Y_f \quad (4.1a)$$

$$\operatorname{div}(\kappa_s[\nabla\sigma_k + \vec{e}_k]) = 0 \text{ dans } Y_s \quad (4.1b)$$

$$[\kappa_f(\nabla\sigma_k + \vec{e}_k) - \kappa_s(\nabla\sigma_k + \vec{e}_k)] \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial Y_f \setminus \partial Y. \quad (4.1c)$$

Soit alors le changement de variable

$$\mathbf{p}_k = \kappa(\cdot)\nabla(\sigma_k + y_k), \quad (III.4.2)$$

la formulation précédente se réécrit

$$\begin{cases} \mathbf{p}_k \in H(\operatorname{div}, Y) \\ \operatorname{div}(\mathbf{p}_k) = 0 \text{ dans } Y \end{cases} \quad (III.4.3)$$

dès qu'on a remarqué que la condition à l'interface fluide/solide (4.1c) revient à chercher une solution du problème dans l'espace $H(\operatorname{div}, Y)$.

Proposition 16 *Une solution évidente du problème (III.4.3) sans condition de périodicité est*

$$\mathbf{p}_k^0 = \kappa(\cdot)\nabla\sigma_k^0$$

où la fonction σ_k^0 est définie par

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix} \in Y \longmapsto \sigma_k^0(y) = -y_k$$

✓ **Preuve**

La démonstration est immédiate dès qu'on écrit $\nabla y_k = \vec{e}_k$. ■

4.1 Diffusivités thermiques homogénéisées

On a ainsi déterminé de manière partielle une solution au problème. Afin de vérifier la condition de périodicité (essentielle dans le cadre de notre étude), on recherche donc une solution de:

Trouver $\tilde{\sigma}_k \in H(\text{div}, Y)$ solution de, $\forall k \in \{1..3\}$

$$\begin{cases} \text{div}(\kappa(\cdot)\nabla_y \tilde{\sigma}_k) = 0 \text{ dans } Y \\ \tilde{\sigma}_k|_{\partial Y_1 \cup \partial Y_2} = 0 \\ \tilde{\sigma}_k|_{\partial Y_3} = -\sigma_k^0|_{\partial Y_3} = -\delta_{2k} \\ \tilde{\sigma}_k|_{\partial Y_4} = -\sigma_k^0|_{\partial Y_4} = -\delta_{1k} \end{cases} \quad (\text{III.4.4})$$

problème de formulation classique dont on sait qu'il possède une unique solution. La formulation particulière des conditions de Dirichlet sur les parties du bord ∂Y_3 et ∂Y_4 est due au fait que la solution obtenue pour le problème (III.4.3) n'est pas Y -périodique. Afin de pallier cela, et sachant que la solution σ_k^0 vérifie $\tilde{\sigma}_k^0|_{\partial Y_3} = \delta_{1k}$, $\tilde{\sigma}_k^0|_{\partial Y_1} = 0$, $\tilde{\sigma}_k^0|_{\partial Y_2} = 0$ et $\tilde{\sigma}_k^0|_{\partial Y_4} = \delta_{2k}$, il suffit de rajouter à celles-ci une fonction dont la trace sur ces parties du bord permettrait d'obtenir cette périodicité. On peut alors énoncer la proposition suivante:

Proposition 17 *Soit $\tilde{\sigma}_k$ la solution du problème (III.4.4).*

Alors la fonction

$$\sigma_k = \tilde{\sigma}_k + \sigma_k^0 = \tilde{\sigma}_k - y_k$$

est une solution du problème (E_{cell}^θ).

✓ **Preuve**

On a bien $\sigma_k \in H_{\#}^1(Y)$ (c'est ainsi qu'ont été construites les conditions de Dirichlet du problème (III.4.4)). De plus, $\forall k \in \{1..2\}$, $\forall y \in Y_f \cup Y_s$,

$$\begin{aligned} \text{div}(\kappa(y)(\nabla \sigma_k + \vec{e}_k)) &= \text{div}(\kappa(y)(\nabla \tilde{\sigma}_k + \nabla \sigma_k^0 + \vec{e}_k)) \\ &= \text{div}(\kappa(y)(\nabla \sigma_k^0 + \vec{e}_k)) + \text{div}(\kappa(y)\nabla \tilde{\sigma}_k) \\ &= 0 \end{aligned}$$

(par définition des problèmes vérifiés par σ_k^0 et $\tilde{\sigma}_k$). A l'interface fluide solide $\partial Y_f \setminus \partial Y$ la condition de continuité des flux est vérifiée puisque la solution est recherchée dans $H(\text{div}, Y)$. ■

4.1 Diffusivités thermiques homogénéisées

Il suffit donc de résoudre le problème (III.4.4) pour pouvoir déterminer les diffusivités thermiques homogénéisées. Nous présentons dans l'annexe B.1 les résultats obtenus pour ce type de problème.

Remarque 15

Il est évident que le passage du problème (III.3.19) à la formulation (III.4.4) n'est qu'un artifice mathématique présentant deux avantages : cela permet d'obtenir un système inversible (on a déjà souligné que la solution de (III.3.19) pouvait être définie à une constante près), et on simplifie en même temps le type de conditions aux bords (on passe de conditions aux bords de périodicité à des conditions de type Dirichlet non homogène).

4.1.2 Un encadrement des diffusivités homogénéisées

Dans cette partie, nous décrivons brièvement la technique permettant d'obtenir une borne inférieure et supérieure du coefficient équivalent obtenu par le procédé d'homogénéisation. Cette technique décrite par G. ALLAIRE dans [4] est fondée essentiellement sur la considération de problèmes de minimisation.

Théorème 11 (Inégalités de Voigt-Reuss) *On dispose des estimations suivantes sur la diffusivité thermique homogénéisée :*

$$\forall \zeta \in \mathbb{R}^n, \left(\int_Y \frac{1}{\kappa(y)} dy \right)^{-1} \zeta \cdot \zeta \leq \tilde{\Lambda} \zeta \cdot \zeta \leq \left(\int_Y \kappa(y) dy \right) \zeta \cdot \zeta \quad (\text{III.4.5})$$

✓ **Preuve**

En reprenant l'équation (III.3.20), on vérifie aisément qu'on peut la réécrire

$$\forall \zeta \in \mathbb{R}^n, \tilde{\Lambda} \zeta \cdot \zeta = \int_Y \kappa(y) [\zeta + \nabla_y \sigma_\zeta(x, y)] \cdot [\zeta + \nabla_y \sigma_\zeta(x, y)] dy \quad (\text{III.4.6})$$

où σ_ζ est la solution du problème élémentaire

$$\operatorname{div}_y (\kappa(y)(\zeta + \nabla_y \sigma_\zeta)) = 0 \text{ sur } Y \quad (\text{III.4.7})$$

et σ_ζ est une fonction Y -périodique. On reconnaît alors l'équation (III.4.7) comme l'équation d'Euler-Lagrange associée au problème variationnel suivant :

4.1 Diffusivités thermiques homogénéisées

Trouver σ_ζ minimisant la quantité $\int_Y \kappa(y)[\zeta + \nabla_y \sigma(x,y)] \cdot [\zeta + \nabla_y \sigma(x,y)] dy$ sur tous les champs périodiques σ . Ainsi, $\tilde{\Lambda} \zeta \cdot \zeta$ est donné par

$$\tilde{\Lambda} \zeta \cdot \zeta = \min_{\sigma \in H_{\#}^1(Y)} \int_Y \kappa(y)[\zeta + \nabla_y \sigma(x,y)] \cdot [\zeta + \nabla_y \sigma(x,y)] dy. \quad (\text{III.4.8})$$

Le choix simple $\sigma \equiv 0$ dans (III.4.8) permet d'obtenir immédiatement la borne supérieure

$$\forall \zeta \in \mathbb{R}^n, \tilde{\Lambda} \zeta \cdot \zeta \leq \left(\int_Y \kappa(y) dy \right) \zeta \cdot \zeta. \quad (\text{III.4.9})$$

Par ailleurs, l'équation (III.4.7) peut aussi être associée à la formulation variationnelle duale,

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^n, \tilde{\Lambda}^{-1} \xi \cdot \xi = \min_{\tau \in \mathcal{S}} \int_Y \frac{1}{\kappa(y)} [\xi + \tau(y)] \cdot [\xi + \tau(y)] dy \quad (\text{III.4.10})$$

où \mathcal{S} est l'ensemble défini par $\mathcal{S} = \tau \in (L_{\#}^2(Y))^n, \text{div}(\tau) = 0, \int_Y \tau dy = 0$. Le choix $\tau \equiv 0$ dans (III.4.10) permet alors d'écrire sur la borne inférieure

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^n, \tilde{\Lambda} \xi \cdot \xi \leq \left(\int_Y \frac{1}{\kappa(y)} dy \right)^{-1} \xi \cdot \xi \quad (\text{III.4.11})$$

ce qui permet de conclure. ■

Remarque 16

D'un point de vue plus pratique, le résultat précédent fournit un "encadrement" de la diffusivité thermique équivalente par les moyennes harmonique et arithmétique pondérées des diffusivités locales. En effet, la fonction $\kappa(\cdot)$ étant constante dans

4.2 Coefficients de diffusion et coefficient de Soret effectifs

chaque phase, on a

$$\begin{aligned}
 \int_Y \kappa(y) dy &= \int_{Y_f} \kappa_f dy + \int_{Y_s} \kappa_s dy \\
 &= \text{mes}(Y_f) \kappa_f + \text{mes}(Y_s) \kappa_s \\
 &= \phi \kappa_f + (1 - \phi) \kappa_s \\
 &= \text{moy}_a[(\kappa_f, \phi), (\kappa_s, 1 - \phi)].
 \end{aligned} \tag{III.4.12}$$

De la même manière,

$$\left(\int_Y \frac{1}{\kappa(y)} dy \right)^{-1} = \text{moy}_h[(\kappa_f, \phi), (\kappa_s, 1 - \phi)]. \tag{III.4.13}$$

4.2 Coefficients de diffusion et coefficient de Soret effectifs

4.2.1 Nature du problème

Le problème lié à la détermination des coefficients de diffusion effectifs est plus complexe que le précédent. Il est posé uniquement sur la partie fluide Y_f de la cellule, et donne lieu à des conditions de bord mêlées (périodicité sur une partie du bord, condition de Neumann sur le reste). Il est donné par:

$\forall i \in \{1 \dots 2\}$, trouver $\omega_i \in H_{\#}^1(Y)$ solution de,

$$\begin{cases} -\text{div}(\nabla \omega_i + \vec{e}_i) = 0 & \text{dans } Y_f \\ (\nabla \omega_i + \vec{e}_i) \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial Y_f \setminus \partial Y \end{cases} \tag{III.4.14}$$

On impose ainsi des conditions de périodicité sur $\partial Y_f \cap \partial Y$. Dès lors, le problème se réécrit,

$$\begin{cases} -\text{div}(\nabla \omega_i + \vec{e}_i) = 0 & \text{dans } Y_f \\ (\nabla \omega_i + \vec{e}_i) \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial Y_f \setminus \partial Y \\ \omega_i|_{\partial Y_1 \cap \partial Y_f} = \omega_i|_{\partial Y_3 \cap \partial Y_f} \\ \omega_i|_{\partial Y_2 \cap \partial Y_f} = \omega_i|_{\partial Y_4 \cap \partial Y_f} \end{cases} \tag{III.4.15}$$

4.2 Coefficients de diffusion et coefficient de Soret effectifs

La méthode utilisée pour ce problème reste celle des volumes finis. Elle nécessite néanmoins la considération de fonctions de base particulières, illustrées dans la figure 4.2. De telles fonctions de base impliquent une grande largeur de bande de la matrice

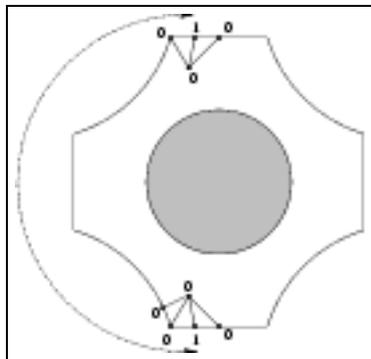


FIG. 4.2 – Fonction de base utilisée pour la périodicité

du système et donc une résolution un peu plus lourde.

Remarque 17

Il est à noter que dans le cas du problème (III.4.14), il n'y a pas unicité de la solution, et ceci du fait des conditions de bord particulières considérées. Il y a en fait unicité dans l'espace quotient $H_{\#}^1(Y)/\mathbb{R}$ et donc, le résultat de la résolution de ce problème est connu à une constante près. Ceci ne constitue toutefois pas une gêne ici, puisque pour la détermination des coefficients équivalents, ce sont les gradients des fonctions ω_i qui sont utilisés (cf. (3.27a)).

Le maillage considéré pour ce type de problème est un maillage constitué de triangles, afin d'obtenir les approximations les meilleures possibles des diverses géométries élémentaires considérées (maillage de Donald, cf. figure 4.3). Se donnant une famille de triangulations $(U_h)_h$, régulière, on construit la triangulation duale P_h (relative aux inconnues "flux") de la manière suivante:

- On détermine les centres de gravité c_K de chaque triangle K de U_h
- On relie le point c_K aux milieux des côtés du triangle K
- On relie chaque centre c_K au sommet P pour obtenir la triangulation P_h .

Ce procédé est illustré dans la figure 4.3. L'analyse du schéma relatif à la résolution des problèmes élémentaires n'est pas détaillée ici, mais l'étude effectuée au chapitre 2 peut facilement être adaptée au cas des maillages triangulaires. Le maillage utilisé

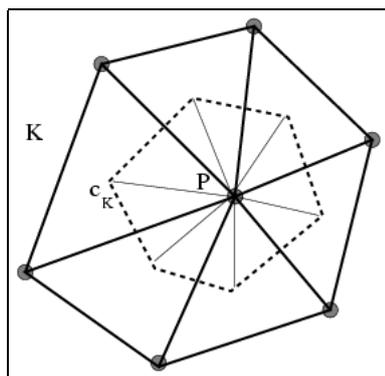


FIG. 4.3 – *Maillage de Donald*

est d'une grande importance puisqu'il doit être adapté aux géométries élémentaires considérées. Ainsi pour chaque géométrie, un nouveau maillage devra être construit et adapté à celle-ci, tout en gardant une qualité convenable¹. D'un point de vue plus pratique, et dans le cadre de la remarque 17, on est obligé de recourir à des algorithmes de résolution matricielles qui permettent d'inverser le système dans de bonnes conditions; la méthode que nous avons choisie est celle du "gradient-conjugué".

L'ensemble des simulations effectuées à l'aide de tels outils est présenté en annexe B.

1. Le critère de qualité d'un maillage ainsi que d'autres notions relatives à celui-ci sont développés dans l'annexe B

Quatrième partie

Adsorption en milieu poreux

Chapitre 5

Isothermes équivalents

On effectue ici la dérivation (au sens déductif) des lois macroscopiques d'adsorption dans un milieu poreux afin d'obtenir une modélisation réaliste à une échelle macroscopique de l'adsorption de produits contaminants dans une nappe aquifère. On démontre notamment que le changement d'échelle induit la présence d'un terme puits dans l'équation macroscopique, exprimant de manière globale les effets de sorption, initialement traduits par une condition de flux à l'interface fluide-solide. Deux situations "extrêmes" sont envisagées, les cas réversible et irréversible.

5.1 Introduction

On s'intéresse aux phénomènes de contamination des nappes aquifères par adsorption de produits polluants. La modélisation de tels phénomènes nécessite la connaissance des isothermes d'adsorption de chaque produit (fonction reliant la concentration du contaminant dans la phase aqueuse à la quantité adsorbée par unité de surface de la phase solide). Ces derniers peuvent être représentés par des fonctions simples dont les principaux paramètres sont la température et la nature du solide. On envisage ici l'adsorption dans un cas général en n'effectuant l'analyse que pour les deux cas extrêmes que sont le cas irréversible total (cas où le solide fixe définitivement le contaminant) et réversible total. Si les phénomènes irréversibles sont en général difficiles à traiter (et donnent lieu en particulier à

5.2 Problème considéré

des phénomènes d’hystérésis), plusieurs tentatives de modélisation ont déjà été envisagées, notamment par PESZYŃSKA et SHOWALTER dans [57]. Par ailleurs on trouve une littérature abondante en ce qui concerne la modélisation et l’analyse mathématique des phénomènes d’adsorption (*cf.* en particulier [44] ou [43]). L’application de procédés d’homogénéisation à de tels phénomènes a déjà été envisagée par U. HORNING dans [38] ou U. HORNING et W. JÄGER dans [40], mais la démonstration de la convergence n’avait pas été établie.

5.2 Problème considéré

On s’intéresse dans cette partie aux phénomènes d’adsorption se déroulant sur la surface poreuse décrits notamment dans la première partie. Les notations que nous utilisons par la suite sont celles introduites dans le chapitre 3. Les phénomènes d’adsorption se déroulant à l’interface fluide/solide du milieu poreux, il est nécessaire d’introduire les notations suivantes

$$\Sigma_\varepsilon = \Gamma_\varepsilon \times]0, T[\quad (\text{IV.5.1})$$

Γ_ε étant la frontière définie par $\Gamma_\varepsilon = \partial\Omega_{\varepsilon,f} \setminus \partial\Omega_\varepsilon$.

La répartition des espèces à l’intérieur de la phase fluide est régie par une classique équation de type “diffusion convection” à caractère divergentiel

$$\partial_t N_\varepsilon + \operatorname{div}(N_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon - D \nabla N_\varepsilon) = 0 \quad \text{dans } \Omega_{f,\varepsilon}. \quad (\text{IV.5.2})$$

Les effets d’adsorption se traduisent alors par l’apport d’un terme de bord à l’interface fluide/solide (loi d’échange au contact de la roche-magasin) de type

$$- D \frac{\partial N_\varepsilon}{\partial n} = \varepsilon \lambda \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \varphi(N_\varepsilon) \quad \text{sur } \Gamma_\varepsilon. \quad (\text{IV.5.3})$$

où λ est un élément de $L^\infty_\#(\Gamma)$ et D le coefficient de diffusion du constituant dans le fluide. Le rôle de λ est ici celui d’un coefficient d’échange au contact de la roche, permettant de prendre en compte d’éventuelles variations des “facultés” d’adsorption de la matrice poreuse selon des critères géométriques et donc de modéliser une classe large de comportements naturels. C’est un paramètre sans dimension, laissé à notre discrétion. La condition initiale et la condition sur le reste du bord sont

5.3 Cas irréversible: l'isotherme de Langmuir

de même type que dans la première partie. Il est évident ici que le modèle adopté ne prend en compte dans l'adsorption aucun phénomène externe. Par exemple, en présence d'un champ thermique non constant, les "isothermes" sont déformés et ne peuvent plus être traduits de manière simple (les visualisations données en annexe A.5 permettent de s'en convaincre). Néanmoins et dans un souci de clarté, nous avons considéré l'adsorption dans un cadre où n'est pris en compte aucun effet dû à la température, comme cela peut l'être fait en chromatographie par exemple.

On obtient, à l'aide de formules de Green, et pour une fonction test v assez régulière définie sur \bar{Q} , la formulation variationnelle, à t fixé,

$$\int_{\Omega_{f,\varepsilon}} \partial_t N_\varepsilon v dx - \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} N_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla v dx + D \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} \nabla N_\varepsilon \cdot \nabla v dx - D \int_{\Gamma_\varepsilon} v \frac{\partial N_\varepsilon}{\partial n} d\sigma_\varepsilon = (IV.5.4)$$

On utilise ensuite l'égalité (IV.5.3) pour obtenir la formulation avec terme de puits

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} \partial_t N_\varepsilon v dx - \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} N_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla v dx \\ + D \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} \nabla N_\varepsilon \cdot \nabla v dx + \varepsilon \int_{\Gamma_\varepsilon} \lambda\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \varphi(N_\varepsilon) v d\sigma_\varepsilon = 0 \end{aligned} \quad (IV.5.5)$$

pour des fonctions v assez régulières, définies sur \bar{Q} .

Proposition 18 *Le problème constitué des équations (IV.5.5) et (IV.5.3) admet une solution unique.*

✓ **Preuve**

La démonstration de cette proposition est classique en analyse non linéaire. Il s'agit d'un problème d'évolution parabolique avec une condition de Fourier-Robin, non linéaire mais lipschitzienne. ■

5.3 Cas irréversible: l'isotherme de Langmuir

On se place ici dans le cas d'adsorption irréversible totale (figure 4(c)), donnée par le modèle de Langmuir, l'un des isothermes d'adsorption les plus classiquement utilisés. Ainsi, pour une valeur saturante $N_{sat} \geq 0$, le phénomène d'adsorption n'a

5.3 Cas irréversible: l'isotherme de Langmuir

plus lieu, ce qui est traduit par la relation

$$\varphi : r \in \mathbb{R} \mapsto \varphi(r) = \left(\frac{\alpha r}{1 + \beta r} - N_{sat} \right)^+ \quad (\text{IV.5.6})$$

où la fonction $(\cdot)^+$ est la fonction “partie positive” définie sur \mathbb{R} par

$$r \mapsto r^+ = \begin{cases} r & \text{si } r \in \mathbb{R}^+ \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{IV.5.7})$$

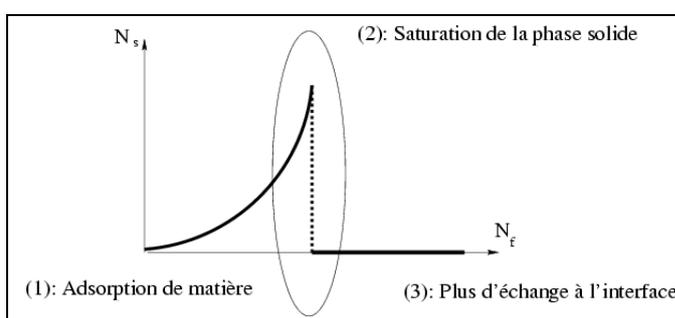


FIG. 5.1 – Schématisation des échanges à l'interface fluide-solide

Proposition 19 *On possède les estimations, uniformes par rapport à ε :*

$$\exists C_1 > 0, \quad \|N_\varepsilon\|_{H^1(Q_\varepsilon)} \leq C_1 \quad (5.8a)$$

$$\exists C_2 > 0, \quad \|\varphi(N_\varepsilon)\|_{H^1(Q_\varepsilon)} \leq C_2 \quad (5.8b)$$

✓ **Preuve**

Le caractère borné de N_ε au sens d'une fonction de Sobolev est obtenu immédiatement à l'aide d'un choix particulier de fonctions-test. On remarque que la fonction φ vérifie les propriétés

$$\begin{cases} \varphi \text{ lipschitzienne} \\ \varphi(0) = 0 \end{cases}$$

et que donc les espaces de Sobolev sont stables dans les superpositions fonctionnelles par φ .

5.3 Cas irréversible: l'isotherme de Langmuir

Il s'ensuit que $\varphi(N_\varepsilon)$ est bornée dans $H^1(Q_\varepsilon)$ et que

$$\|\varphi(N_\varepsilon)\|_{H^1(Q_\varepsilon)} \leq Lip(\varphi)\|N_\varepsilon\|_{H^1(Q_\varepsilon)} \quad (\text{IV.5.9})$$

où $Lip(\varphi)$ est la constante de Lipschitz de la fonction φ .

Proposition 20 *La suite $(N_\varepsilon)_\varepsilon$ converge faiblement dans $H^1(Q)$ vers un élément N solution de l'équation*

$$\phi \partial_t N + \text{div} \left(\phi N \mathbf{U} - D \tilde{\Upsilon} \nabla N \right) + \left[\int_\Gamma \lambda(y) d\sigma(y) \right] \varphi(N) = 0. \quad (\text{IV.5.10})$$

✓ **Preuve**

Reprenons la formulation variationnelle vérifiée par N_ε , et intégrons l'égalité (IV.5.5) sur l'intervalle $[0, T]$.

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} \partial_t N_\varepsilon v dx dt &- \int_0^T \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} N_\varepsilon \mathbf{U}_\varepsilon \cdot \nabla v dx dt \\ &+ D \int_0^T \int_{\Omega_{f,\varepsilon}} \nabla N_\varepsilon \cdot \nabla v dx dt = -\varepsilon \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon} \lambda\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \varphi(N_\varepsilon) v d\sigma_\varepsilon dt \end{aligned}$$

La convergence des termes de diffusion, convection et de la dérivée en temps a déjà été établie dans les parties précédentes. On effectue dans un premier temps un prolongement adéquat \tilde{N}_ε des inconnues N_ε de telle manière à exhiber une constante $C > 0$, indépendante de ε , telle que

$$\|\tilde{N}_\varepsilon\|_{H^1(Q)} \leq C \|N_\varepsilon\|_{H^1(Q_\varepsilon)} \quad (\text{IV.5.11})$$

Le problème principal réside dans le passage à la limite dans le terme $\varepsilon \int_{\Gamma_\varepsilon} \lambda\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \varphi(N_\varepsilon) v d\sigma_\varepsilon$. Pour cela, on utilise les résultats de convergence à double échelle pour les expressions portant sur des traces. Ces résultats, introduits par G. ALLAIRE, A. DAMLAMIAN et U. HORNUNG dans [4], ont notamment été appliqués à des équations de diffusion avec des condition de bord de type Fourier. Nous les reprenons ici pour dériver notre modèle. Ainsi, le théorème 5 introduit dans [1] a notamment été élargi au cas des traces dans [4] de la manière suivante:

5.3 Cas irréversible: l'isotherme de Langmuir

Théorème 12 Soit u_ε une suite de $L^2(\Gamma_\varepsilon)$ telle que

$$\varepsilon \int_{\Gamma_\varepsilon} |u_\varepsilon(x)|^2 d\sigma_\varepsilon(x) \leq C \quad (\text{IV.5.12})$$

(C constante positive indépendante de ε). Il existe une sous-suite encore notée u_ε et une fonction $u_0(x,y) \in L^2(\Omega; L^2(\Gamma))$ telle que $u_\varepsilon(x)$ converge à deux échelles vers $u_0(x,y)$, i.e.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\varepsilon} u_\varepsilon(x) \phi(x, \frac{x}{\varepsilon}) d\sigma_\varepsilon = \int_{\Omega} \int_{\Gamma} u_0(x,y) \phi(x,y) dx d\sigma(y) \quad (\text{IV.5.13})$$

pour toute fonction continue $\phi(x,y) \in \mathcal{C}[\bar{\Omega}; \mathcal{C}_\#(Y)]$. On note alors

$$u_\varepsilon \xrightarrow{2\text{-scale}} u_0$$

L'adaptation de ce théorème à notre modèle ne pose pas de problème à l'aide de la proposition 19. Ainsi en prenant pour fonction test $v = \varphi(N_\varepsilon)$ dans la formulation variationnelle (IV.5.5), on obtient aisément l'inégalité

$$\varepsilon \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon} |\lambda(\frac{x}{\varepsilon}) \varphi(x)|^2 d\sigma_\varepsilon(x) \leq C. \quad (\text{IV.5.14})$$

Dès lors, il existe une fonction $\varphi(x,y) \in L^2(\Omega; L^2(\Gamma))$ telle que

$$\varphi_\varepsilon \xrightarrow{2\text{-scale}} \varphi. \quad (\text{IV.5.15})$$

On a donc les propriétés de convergence suivantes:

$$\varepsilon' \int_0^T \int_{\Gamma_{\varepsilon'}} \lambda(\frac{x}{\varepsilon'}) \varphi(N_{\varepsilon'}) \phi(t, x, \frac{x}{\varepsilon'}) d\sigma_{\varepsilon'}(x) dt \xrightarrow{\varepsilon' \rightarrow 0} \int_Q \int_{\Gamma} \lambda(y) \varphi(N) \phi(t, x, y) d\sigma(y) dx dt \quad (\text{IV.5.16})$$

pour toute fonction continue $\phi(x,y) \in \mathcal{C}[\bar{\Omega}; \mathcal{C}_\#(Y)]$. De plus,

$$\begin{aligned} \tilde{N}_{\varepsilon'} &\rightarrow N \text{ dans } H^1(Q) \text{ faible} \\ \tilde{N}_{\varepsilon'} &\rightarrow N \text{ dans } L^2(Q) \text{ fort} \end{aligned}$$

5.4 Cas réversible: l'isotherme de Freundlich

(par compacité de l'injection de $H^1(Q)$ dans $L^2(Q)$). On déduit aisément (l'application φ étant lipschitzienne) que

$$\varphi(\tilde{N}_{\varepsilon'}) \longrightarrow \varphi(N) \text{ dans } L^2(Q) \text{ fort} \quad (\text{IV.5.17})$$

■

Conclusion 3 (Isotherme de Langmuir)

L'équation de conservation macroscopique est la suivante:

$$\phi \partial_t N + \operatorname{div}(\phi N \mathbf{U} - D \tilde{\Upsilon} \nabla N) + \left[\int_{\Gamma} \lambda(y) d\sigma(y) \right] \gamma \left(\frac{\alpha N}{1 + \beta N} - N_{sat} \right)^+ = (\text{IV.5.18})$$

où $\tilde{\Upsilon}$ est le tenseur introduit au chapitre 3.

Remarque 18 Dans le cas d'un coefficient $\lambda(\cdot)$ constant, l'expression du terme de puits non linéaire introduit dans l'équation de conservation macroscopique (IV.5.18) se restreint à

$$\lambda \operatorname{aire}(\Gamma) \gamma \left(\frac{\alpha N}{1 + \beta N} - N_{sat} \right)^+ . \quad (\text{IV.5.19})$$

La démonstration présentée ci-dessus reste valable pour toute fonction φ **lipschitzienne, croissante au sens large et nulle en 0**, ce qui ouvre une large classe naturelle de comportements. Nous présentons par la suite, un autre type de comportement, correspondant au cas de l'adsorption réversible.

5.4 Cas réversible: l'isotherme de Freundlich

On considère désormais le cas réversible (figure 4(d)), modélisé en particulier par l'isotherme de Freundlich. Ce dernier correspond à la donnée

$$\varphi : r \in \mathbb{R} \longmapsto \varphi(r) = |r|^{p-1} r \quad (0 < p < 1) \quad (\text{IV.5.20})$$

5.4 Cas réversible: l'isotherme de Freundlich

qui se traduit par la condition à l'interface fluide/solide

$$-\frac{\partial N_\varepsilon}{\partial n} = \varepsilon \lambda |N_\varepsilon - N_{sat}|^{p-1} (N_\varepsilon - N_{sat}) \text{ sur } \Gamma_\varepsilon. \quad (\text{IV.5.21})$$

Ainsi, le flux de masse à l'interface fluide-solide est régi par une valeur de saturation de la phase solide N_{sat} . Cette valeur atteinte, le flux change de signe et donne lieu à un phénomène de désorption. Pour ce type de comportement, on établit le résultat suivant :

Conclusion 4 (Isotherme de Freundlich)

L'équation de conservation macroscopique est la suivante :

$$\phi \partial_t N + \text{div} \left(\phi N \mathbf{U} - D \tilde{\Upsilon} \nabla N \right) = -\lambda \text{aire}(\Gamma) |N - N_{sat}|^{p-1} (N - N_{sat}) \quad (\text{IV.5.22})$$

où $\tilde{\Upsilon}$ est le tenseur introduit au chapitre 3.

Le type d'isotherme considéré ici ne vérifie plus les critères donnés lors de la démonstration du résultat précédent: la fonction φ **n'est plus lipschitzienne** mais elle présente un caractère de **monotonie**. C'est pourquoi il est nécessaire de faire appel à d'autres outils. La démonstration d'un résultat analogue concernant la modélisation macroscopique de réactions chimiques à l'interface fluide/solide d'un milieu poreux a été établie par J.I. DIAZ dans [25]. Nous la reprenons par la suite.

✓ Preuve

On montre aisément l'estimation suivante

$$\exists C_1 > 0 \text{ tel que } \|\nabla N_\varepsilon\|_{L^2(Q_\varepsilon)} \leq C_1, \forall \varepsilon > 0 \quad (\text{IV.5.23})$$

C_1 étant une constante indépendante de ε . On utilise alors l'opérateur de prolongement introduit en (III.3.23), vérifiant la condition de continuité indépendante de ε ,

$$\forall v, \forall \varepsilon, \int_Q |\nabla P_\varepsilon(v)|^2 dx dt \leq C_2 \int_{Q_\varepsilon} |\nabla v|^2 dx dt. \quad (\text{IV.5.24})$$

5.4 Cas réversible: l'isotherme de Freundlich

Soit alors \bar{N}_ε l'élément défini par

$$P_\varepsilon(N_\varepsilon) = \bar{N}_\varepsilon. \quad (\text{IV.5.25})$$

On peut extraire une sous-suite encore notée \bar{N}_ε qui converge faiblement vers un élément N de $H^1(Q)$. On introduit alors l'élément

$$\bar{\varrho}_\varepsilon = \begin{cases} \nabla N_\varepsilon & \text{sur } Q_\varepsilon \\ 0 & \text{sur } Q \setminus Q_\varepsilon. \end{cases} \quad (\text{IV.5.26})$$

On a, notamment à l'aide de (IV.5.23),

$$\bar{\varrho}_\varepsilon \xrightarrow{L^2(Q)} \varrho \quad (\text{IV.5.27})$$

quand $\varepsilon \rightarrow 0$. De plus, d'après (IV.5.26), il vient

$$\int_0^T \int_\Omega \partial_t N_\varepsilon v dx dt + \int_0^T \int_\Omega \bar{\varrho}_\varepsilon \cdot \nabla v dx dt + \lambda \varepsilon \int_{\Sigma_\varepsilon} |N_\varepsilon - N_{sat}|^{p-1} (N_\varepsilon - N_{sat}) v d\sigma_\varepsilon dt = 0. \quad (\text{IV.5.28})$$

Reste à déterminer la limite du terme d'adsorption. Puisque $p < 1$, J.I. DIAZ démontre dans [25] que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Sigma_\varepsilon} |N_\varepsilon - N_{sat}|^{p-1} (N_\varepsilon - N_{sat}) v d\sigma_\varepsilon dt = \frac{mes(\Gamma)}{mes(Y)} \int_Q |N - N_{sat}|^{p-1} (N - N_{sat}) v d\sigma dt \quad (\text{IV.5.29})$$

La convergence du terme de diffusion se démontre aisément, à l'aide de raisonnements analogues à ceux utilisés pour les équations de la partie précédente. ■

Cinquième partie

Conclusions

Conclusions

Les travaux effectués lors de cette thèse avaient pour objectif d'élaborer un modèle complet de l'effet Soret en milieu poreux articulé autour de trois axes principaux:

- une analyse locale de la thermodiffusion en milieu libre,
- l'application de méthodes de changement d'échelle,
- l'exploitation du modèle macroscopique ainsi obtenu.

L'analyse mathématique des équations en milieu libre a permis d'obtenir des résultats d'existence de solutions fortes (*i.e.* dans l'acception de l'ingénierie mathématique) aux équations de conservation. Cette analyse, établie pour une classe large de comportements des lois d'état -coefficients de (thermo) diffusion, écoulement-, a notamment mis en évidence un résultat de dépendance en moyenne quadratique des concentrations envers le coefficient de thermodiffusion. L'étude de la thermodiffusion en milieu libre a pu être complétée par l'élaboration d'un code de calcul de type "volumes finis" permettant de quantifier notamment l'influence des effets thermiques en adsorption. L'analyse numérique d'un tel schéma a été faite avec pour effet, la démonstration d'un résultat de convergence du schéma sous des hypothèses *ad hoc*. Les simulations effectuées à l'aide d'un tel code ont par ailleurs démontrées la possibilité d'accumuler localement et de manière dynamique de la matière par Effet Soret, ce qui ouvre de nouvelles perspectives dans l'élaboration d'un procédé de mesure du coefficient Soret.

Le changement d'échelle effectué par la suite a eu pour but d'obtenir les équations macroscopiques de conservations et de mouvement. Les techniques utilisées ont permis de démontrer la convergence des équations de conservation locales vers les équations globales. Les équations obtenues sont de même type que les équations locales: ce sont des équations de type divergentiel, paraboliques. Le changement d'échelle induit notamment la présence de tenseurs (isotropes ou non), dûs aux effets

géométriques du milieu poreux. Ces tenseurs, dont on possède l'expression analytique, mettent en jeu des fonctions auxiliaires, solutions de problèmes élémentaires posés sur une cellule référence du milieu poreux. C'est plus exactement l'évaluation d'énergies liées à ces fonctions auxiliaires qui permet de déterminer de manière précise les coefficients macroscopiques. L'avantage de l'utilisation de tels procédés est évident: la modélisation à l'échelle d'un réservoir ne nécessite que la résolution numérique d'un problème posé à une échelle microscopique.

Une approche numérique fondée sur la méthode des volumes finis a enrichi cette étude par la détermination complète des coefficients macroscopiques obtenue pour des géométries particulières. On a pu ainsi préciser les propriétés de symétrie des tenseurs introduits et obtenir des valeurs réalistes de ces coefficients.

L'étude relative aux phénomènes d'adsorption a permis de démontrer que l'adsorption en milieu poreux est traduite de manière macroscopique par un terme "puits" dans l'équation de conservation de la masse. Ce terme est notamment constitué d'un coefficient (variable ou non) traduisant un effet de mémoire vis-à-vis de l'interface fluide-solide lors de l'application des techniques d'homogénéisation. Il s'agit là, selon la terminologie de D. CIORANESCU et F. MURAT "d'un terme étrange et venu d'ailleurs" ([22]). Ainsi, la détermination du coefficient de Soret en milieu poreux a offert la possibilité d'une voie nouvelle d'application des méthodes d'homogénéisation.

Notations

Notations latines

grandeurs scalaires

C_p	capacité calorifique massique
D	Coefficient de diffusion massique
D_N	Coefficient de Dufour
D_θ	Coefficient de thermodiffusion
k^i	Isotherme d'adsorption du constituant i
$Lip(f)$	Constante de Lipschitz de la fonction f
N_i	Fraction massique du constituant i
N_i^{abs}	Fraction massique du constituant i en phase adsorbée
N_{sat}	Valeur de saturation de la phase adsorbée
n	Nombre de constituants du mélange
p	Pression
Pe	Nombre de Péclet massique
Pe_θ	Nombre de Péclet thermique
S	Entropie
S_t^i	Coefficient de Soret de l'espèce i
U_0	Vitesse maximale au centre de l'écoulement

grandeurs vectorielles

$(\vec{e}_k)_k$	Base canonique de \mathbb{R}^3
\vec{f}	Force
\vec{J}	Flux
\vec{J}_i	Flux de matière relatif au constituant i
\vec{J}_q	Flux de chaleur
\mathbf{U}	vecteur vitesse

grandeurs tensorielles

$\tilde{\mathbf{D}}$	Tenseur des coefficients de diffusion massique
$\tilde{\mathbf{K}}$	Tenseur des dérivées des isothermes d'adsorption
$\tilde{\mathbf{K}}^p$	Tenseur des perméabilités absolues
$\tilde{\mathbf{L}}$	Matrice des coefficients d'Onsager

Notations grecques

grandeurs scalaires

λ	conductivité thermique
θ	Température
θ^*	Température homogénéisée
κ	diffusivité thermique
ρ	densité
μ	viscosité dynamique de la phase fluide
μ_i	Potentiel chimique de l'espèce i
$\varphi(\cdot)$	Isotherme d'adsorption
ϕ	Porosité
Ξ	Quantité de matière accumulée

grandeurs tensorielles

$\tilde{\Lambda}$	Tenseur des diffusivités thermiques homogénéisées
$\tilde{\Upsilon}$	Tenseur des coefficients de diffusion massique homogénéisés
$\tilde{\Sigma}$	Tenseur des coefficients de Soret homogénéisés

Notations mathématiques

δ_{ij}	Symbole de Kronecker : $\forall i, j \in \mathbb{N} \quad \delta_{ij} = 1$ si $i = j$, 0 sinon
I_n	Matrice identité d'ordre n : $\forall i, j \in \{1, \dots, n\} \quad (I_n)_{i,j} = \delta_{ij}$
$moy_a[.,.]$	Moyenne arithmétique de deux nombres : $moy_a[(x_1, p_1), (x_2, p_2)] = p_1 x_1 + p_2 x_2$
$moy_h[.,.]$	Moyenne harmonique de deux nombres : $moy_h[(x_1, p_1), (x_2, p_2)] = \frac{1}{\frac{p_1}{x_1} + \frac{p_2}{x_2}}$

Par la suite f désigne une fonction à variable $x \in \mathbb{R}^n$ et à valeur dans \mathbb{R} , g une fonction de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R}^n , Ω un ouvert de \mathbb{R}^n et V un espace de Banach.

Opérateurs

$div(\cdot)$	Opérateur divergence : $\forall x \in \mathbb{R}^n, div(g) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial g_i}{\partial x_i}$
$\nabla(\cdot)$	Opérateur gradient : $\forall x \in \mathbb{R}^n, \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$
$\Delta(\cdot)$	Opérateur Laplacien : $\forall x \in \mathbb{R}^n, \Delta(f) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$
$\frac{\partial \cdot}{\partial n}$	Opérateur dérivée normale extérieure : $\frac{\partial f}{\partial n} = \nabla f \cdot \vec{n}$

Espaces fonctionnels

$C^k(\Omega)$	Ensemble des fonctions k fois continûment différentiables sur Ω
$L^p(\Omega)$	Ensemble des fonctions f mesurables sur Ω telles que : $\int_{\Omega} f ^p dx < \infty$
$L^\infty(\Omega)$	Ensemble des fonctions f mesurables sur Ω telles que : $\exists C > 0$, tel que $ f(x) < C$ p.p. sur Ω
$L^p(0, T; V)$	Ensemble des classes de fonctions de $]0, T[$ à valeurs dans V , mesurables pour la mesure de Lebesgue dt et telles que: $- f _{L^p(0, T; V)} = \left(\int_0^T \ f\ _V^p dt \right)^{\frac{1}{p}} < \infty \quad \text{si } p \in [1, +\infty[$ $- f _{L^\infty(0, T; V)} = \sup_{t \in]0, T[} \ f(t)\ _V < \infty \quad \text{si } p = +\infty$
$H^1(\Omega)$	Espace de Sobolev défini par : $H^1(\Omega) = \{f \in L^2(\Omega), \nabla f \in [L^2(\Omega)]^n\}$
$H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$	Espace des traces défini par : $H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega) = \{h \in L^2(\partial\Omega), \exists f \in H^1(\Omega) f _{\partial\Omega} = h\}$
$W^{1,p}(\Omega)$	Espace de Sobolev défini par : $W^{1,p}(\Omega) = \{f \in L^p(\Omega), \nabla f \in [L^p(\Omega)]^n\}$

Bibliographie

- [1] **ALLAIRE G.** : *Homogenization and two-scale convergence*. SIAM Journal of Mathematical Analysis, Vol. 23, No. 6, pp.1482-1518, November 1992.
- [2] **ALLAIRE G.** : *Two-scale convergence and homogenization of periodic structures*. School on Homogenization, ICTP, Trieste, september 6-17, 1993.
- [3] **ALLAIRE G.** : *Homogénéisation des équations de Stokes et de Navier-Stokes*. Thèse de doctorat de l'Univesité Paris VI, 1989.
- [4] **ALLAIRE G.** : *Homogenization and applications to material sciences*. Lecture Notes at the Newton Institute, Cambridge, Septembre 1999.
- [5] **ALLAIRE G., DAMLAMIAN A., HORNUNG U.** : *Two-scale convergence on periodic surfaces and applications*. In proceedings of the International Conference on Mathematical Modelling of flow through Porous Media, A. Bourgeat et al. eds, World Scientific Pub, Singapore, mai 1995.
- [6] **AMAZIANE B.** : *Global behaviour of compressible three-phase flow in heterogeneous porous media*. Transport in Porous media, 10, pp. 43-56, 1993.
- [7] **ANTONTSEV S.N., DOMANSKY A.V.** : *Uniqueness generalizated solutions of degenerate problem two phase filtration. Numerical methods mechanics in continuum medium*, Collection Sciences Research, Sbornik, tome 15, n°6, pp. 15-28, 1984 (en russe).
- [8] **ANTONTSEV S.N., MEIRMANOV A.M., YURINSKY V.V.** : *Homogenization of Stokes-Type Equations with Variable Viscosity* Siberian Advances in Mathematics, vol. 8, N2, Allerton Press, 1998.
- [9] **ARQUIS E.** : *Transferts en milieu poreux et à l'interface: de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique*. Thèse de doctorat d'état, Université de Bordeaux I, 1994.

- [10] **ARQUIS E., CALTAGIRONE J.P. :** *Détermination numérique des coefficients de thermodiffusion effectifs en milieu poreux par une approche à une échelle locale.* Entropie n°198/199, pp.39-44, 1996.
- [11] **BALIAN R. :** *De la mécanique statistique hors équilibre aux équations de transport.* Cours donné à l'école Joliot-Curie, Ann. Phys. Fr., vol. 21, pp.437-460, 1996.
- [12] **BALIAN R. :** *Incomplete descriptions and relevant entropies.* Am. Journal of Physics, 1999.
- [13] **BENSOUSSAN A., LIONS J.L., PAPANICOLAOU G. :** *Asymptotic analysis for periodic structures.* North-Holland, Amsterdam, 1978. .
- [14] **BIA P., COMBARNOUS M. :** *Les méthodes thermiques de production des hydrocarbures ; chapitre 1, Transfert de chaleur et de masse.* Revue de l'Institut Français du Pétrole, pp. 359-395, mai-juin 1975.
- [15] **BLANCHER S., CREFF R., GAGNEUX G., LACABANNE B., MONTEL F., TRUJILLO D. :** *Multicomponent flow in a porous medium. Adsorption and Soret effect phenomena: local study and upscaling process.* A paraître dans Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, M2AN, 33 pages, février 2001.
- [16] **BOURGEAT A., PANKRATOV L. :** *Homogénéisation d'une équation parabolique semi-linéaire dans un domaine avec "pièges" sphériques.* Applicable Analysis, **64**, n° 3 – 4, pp. 303-317, 1997.
- [17] **BOURGEAT A., MARUŠIĆ-PALOKA E., MIKELIĆ A. :** *Weak non linear corrections for Darcy's law.* M3AS, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, **6**, n° 8, pp. 1143-1155, 1996.
- [18] **BREZIS H. :** *Analyse fonctionnelle, théorie et applications.* Masson, 1983.
- [19] **CHAVENT G., JAFFRÉ J. :** *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation.* Studies in Mathematics and its applications, vol. 17, North-Holland, 1986.
- [20] **CHATTORAJ D.K., BIRDI K.S. :** *Adsorption and the Gibbs surface excess,* Plenum Press, juin 1984.
- [21] **CIORANESCU D., DONATO P. :** *An introduction to homogenization.* Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications, vol. 17, 1999.

- [22] **CIORANESCU D., MURAT F. :** *Un terme étrange venu d'ailleurs*. Non-linear P.D.E. and their applications. Séminaire du Collège de France, vol. II et III. Pitman, 98-138, pp. 154-178, 1982.
- [23] **COUSSY O. :** *Mécanique des milieux poreux*. Editions Technip, 1991.
- [24] **DAUTRAY R., LIONS J.L. :** *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*. 9 volumes, Masson, 1985.
- [25] **DÍAZ J.I. :** *Two Problems in homogenization of porous media*. Prépublication du département de mathématiques appliquées de l'Université Complutense de Madrid, MA-UCM 1999-25, mars 1999.
- [26] **DÍAZ J.I., DE THELIN F. :** *On a nonlinear parabolic problem arising in some models related to turbulent flows*. SIAM Journal on Mathematical Analysis, vol. 25, n°4, pp. 1085-1111, juillet 1994.
- [27] **DÍAZ J.I., GALIANO G. :** *Existence and uniqueness of solutions of the Boussinesq system with nonlinear thermal diffusion*, Topological Methods in Nonlinear Analysis, Journal of the Juliusz Schauder Center, vol 11, 59-82, 1998.
- [28] **DÍAZ J.I., GALIANO G., JUNGEL A. :** *On a quasilinear degenerated system arising in semiconductors theory. Part I: existence and uniqueness of solutions*. Centrum voor Wiskunde en Informatica, Modelling, Analysis and Simulation, rapport MAS-R9723, septembre 1997.
- [29] **DMITRIEVSKY A., PANFILOV M. :** *Porous media: Physics, Models, Simulation*. Actes de la conférence du même nom, World Scientific, Moscou, 1997.
- [30] **DUTOURNIÉ P., BLANCHER S., CREFF R., MONTEL F. :** *Thermomodiffusion dans un mélange binaire en convection forcée dans un canal périodique*. Actes des 5^{èmes} Journées Européennes de Thermodynamique Contemporaine, Entropie, n°214, 1998.
- [31] **DUVAUT G., LIONS J.L. :** *Les inéquations en mécanique et en physique*, Dunod, 1972.
- [32] **EWING R.E., ESPEDAL M.S., SHARPLAY R.C. :** *Contaminant transfer simulation of unsaturated and multiphase flows in porous media*. In "Advances in Hydro-Science and Engineering", 1, part. B, (S. Wang, ed), University of Mississippi Press, pp. 1867-1873, 1993.
- [33] **EYMARD R., GALLOUËT T., HERBIN R. :** *Finite Volume Methods*. Handbook of Numerical Analysis, P.G. Ciarlet, J.L.Lions Eds, 1998.

Références bibliographiques

- [34] **GAGNEUX G.** : *Sur l'analyse de modèles de la filtration diphasique en milieu poreux*. Equations aux dérivées partielles et applications. Articles dédiés à J.L. Lions. Gauthier-Villars, p.527-540, 1998.
- [35] **GAGNEUX G., MADAUNE-TORT M.** : *Analyse mathématique de modèles non linéaires de l'ingénierie pétrolière*, Collection Mathématiques et Applications, Springer - Verlag, vol. 22, 1996.
- [36] **GALKA A., TELEGA J.J., WOJNAR R.** : *Thermodiffusion in heterogeneous elastic solids and homogenization*, Archives of Mechanics, Polish Academy of Sciences, vol. 4, issue 3, pp 267-314, Warszawa, 1994.
- [37] **GEORIS P., LACABANNE B.** : *Coupling between Soret Effect and convection in a Poiseuille flow*. En préparation.
- [38] **HORNUNG U.** : *Homogenization and porous media*. Interdisciplinary Applied Mathematics, n° 6, Springer, New York, 1996.
- [39] **HORNUNG U.** : *Applications of the homogenization method to flow and transport in porous media*. "Summer school on flow and transport in porous media. Beijing, China, 8-26 August 1988" World Scientific, Singapore, 167-222, 1992.
- [40] **HORNUNG U., JÄGER W.** : *Diffusion, convection, adsorption, and reaction of chemicals in porous media*. Journal of differential equations, 199-225, 1991.
- [41] **HORNUNG U., JÄGER W., MIKELIC A.** : *Reactive transport through an array of cells with semipermeable membranes*. Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 28; pp. 59-94, 1994.
- [42] **HORNUNG U., SHOWALTER R.** : *Homogenization of reactive transport through porous media*. International Conference on Differential Equations, Barcelona, 1991. Perellò C., Simò C. and Solà-Morales J. editors, World Scientific, pp. 136-152, 1993.
- [43] **IGLER B., KNABNER P.** : *Structural Identification of Nonlinear coefficient Functions in Transport Processes through Porous Media*. "Lectures on Applied Mathematics" (H.J. Bungartz et al, eds) Springer Verlag, Berlin, pp. 157-178, 2000.
- [44] **JAMES F.** : *Sur la modélisation mathématique des équilibres diphasiques et des colonnes de chromatographie*. Thèse de doctorat de l'Ecole Polytechnique,

Références bibliographiques

- spécialité : mathématiques, 1990.
- [45] **JAMES F., SEPULVEDA M., VALENTIN P. :** *Modèle de thermodynamique statistique pour un isotherme d'équilibre diphasique multicomposant.* Rapport de recherche du centre de Mathématiques Appliquées de l'Ecole Polytechnique n°223, 1990.
- [46] **JAMET P.V. :** *Sur certains aspects du couplage en milieu poreux entre les champs de température et de concentration.* Thèse de doctorat , Ecole des Mines de Paris, 1991.
- [47] **KÖHLER W., MÜLLER B. :** *Soret and mass diffusion coefficients of toluene/n-hexane mixtures* Journal of Chem. Phys., n°103 (10), pp. 4367-4370, 1995.
- [48] **LIONS J.L. :** *Contrôle optimal de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles.* Dunod, 1968.
- [49] **LIONS J.L. :** *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires.*Dunod, Gauthiers-Villars, 1969.
- [50] **LIONS J.L., MAGENES E. :** *Problèmes aux limites non homogènes et applications,* Dunod, vol. 1, 1968.
- [51] **MARINI L.D. :** *Estimates from above and from below for the homogenized coefficients.* Numer. Math. vol 50, pp. 533-545, 1987.
- [52] **MEIRMANOV A., ANTONTSEV S., IOURINSKI V. :** *Modelos Matemáticos de Sistemas com Fronteiras Livres.* Final report on the project PRAXIS XXI 2/2.1/MAT/53/94, Centro de Matemática da Universidade da Beira Interior, avril 2000.
- [53] **MONTEL F. :** *Importance de la thermodiffusion en exploration et production pétrolières,* Entropie n°184/185, pp 86-93.
- [54] **MONTEL F. :** *Cours de thermodynamique pétrolière.* version 3.1, 1992.
- [55] **NGUETSENG G. :** *A general convergence result for a functional related to the theory of homogenization.,* SIAM Journal of Mathematical Analysis, 20 (3), pp. 608-623, 1989.
- [56] **NICOLAÏDES R. :** *Existence, uniqueness and approximation for generalized saddle-point problems.* SIAM Journal of numerical analysis, 19, pp.349-357, 1982.

- [57] **PESZYŃSKA M., SHOWALTER R.E. :** *A transport model with Adsorption hysteresis.* Differential and Integral Equations, **11**, pp. 327-340, 1998.
- [58] **QUINTARD M., KAVIANY M., WHITAKER S. :** *Two-medium treatment of heat transfer in porous media: numerical results for effective properties.* Advances in Water resources, Vol 20, n°2 – 3, pp 77-94, 1997.
- [59] **RADU M. :** *Homogenization techniques.* PhD thesis, Faculty of Mathematics, University of Heidelberg, 1992.
- [60] **RAVIART P-A., THOMAS J-M. :** *A mixed finite element method for second order elliptic problems.* Mathematical aspects of the finite element method, lecture notes in mathematics, vol. 606. Springer: Berlin, pp. 292-315, 1977.
- [61] **ROBERTS JE., THOMAS J-M. :** *Mixed and hybrid methods.* Handbook of numerical analysis, finite element methods, vol. II, finite element methods (part. 1). Ciarlet P-G., Lions J-L. (eds) North Holland, Amsterdam, pp.523-639, 1991.
- [62] **SANCHEZ-PALENCIA E. :** *Non-homogeneous media and vibration theory.* Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [63] **SERRE D. :** *Systèmes de lois de conservations*, tome 1, Fondations, Diderot Editeur, Arts et Sciences, pp 66-68, 1996.
- [64] **THOMAS J-M., TRUJILLO D. :** *Mixed finite volume methods.* International Journal for Numerical Methods in Engineering, 46, pp. 1351-1366, 1999.
- [65] **TRUJILLO D. :** *Couplage espace temps de schémas numériques en simulation de réservoir*, thèse de doctorat, Université de Pau et des Pays de l'Adour, 1994.
- [66] **ZHANG K.J., BRIGGS M.E., GAMMON R.W., SENEGERS J.V. :** *Optical measurement of the Soret coefficient and the diffusion coefficient of liquid mixtures* J. Chem. Phys. n°104 (17), pp. 6881-6892, 1996.

Sixième partie

Applications numériques

Annexe A

Écoulement capillaire

On s'intéresse ici au couplage entre Effet Soret et convection pouvant intervenir dans un fluide binaire s'écoulant dans un capillaire, aux parois duquel on applique un gradient thermique. Les équations de conservation pour la température et un constituant du fluide sont alors résolues numériquement à l'aide de code 1D et 3D axisymétrique. On met notamment en évidence la possibilité de concentrer localement un des deux constituants du fluide. On propose ensuite un procédé "expérimental" itératif permettant la mesure du coefficient Soret en milieu libre. On donne enfin le résultat de simulations obtenues à l'aide du schéma analysé au chapitre 2, dans le cas d'un écoulement capillaire avec prise en compte des effets d'adsorption.

A.1 Sur un couplage local ($\mathbf{U}, \nabla\theta$)

On considère donc un écoulement non isotherme dans un cylindre, afin de caractériser les phénomènes de thermodiffusion dûs au gradient thermique ainsi appliqué. Si l'effet soret à un échelle locale a déjà été considéré dans de nombreuses études (*cf.* notamment [30] dans le cas d'un canal périodique), l'originalité de notre approche vient du fait que nous considérons ici un gradient thermique longitudinal, *i.e.* parallèle à la direction de l'écoulement.

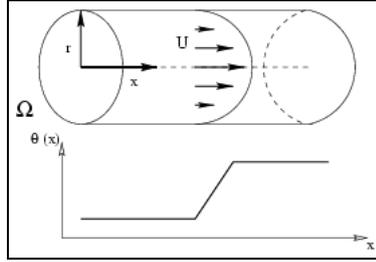


FIG. A.1 – Capillaire: Ecoulement et profil thermique à la paroi.

A.1.1 Problème considéré

On s'intéresse ici aux équations de conservation suivantes

$$\begin{cases} \partial_t \theta + \text{div}(\theta \mathbf{U} - \kappa_f \nabla \theta) = 0 \text{ sur } Q =]0, T[\times \Omega \\ \partial_t N + \text{div}(N \mathbf{U} - D \nabla N - D_\theta N (1 - N) \nabla \theta) = 0 \text{ sur } Q =]0, T[\times \Omega \\ N(0, \cdot) = N_0 \end{cases} \quad (\text{A.VI.A.1})$$

où est le profil de Poiseuille donné par

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ U_x(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ U_0 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.VI.A.2})$$

On prend pour échelle de longueur de référence le rayon du capillaire R afin d'utiliser

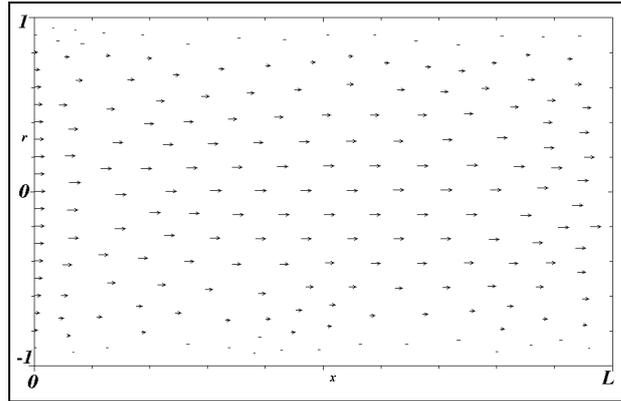


FIG. A.2 – Visualisation du profil de vitesse à l'intérieur du capillaire

des grandeurs et variables sans unités. On notera encore r (resp. x) la variable adimensionnelle radiale (resp. longitudinale) ainsi obtenue. Les équations (A.VI.A.1)

peuvent alors être réécrites

$$\begin{cases} \partial_t \theta + (1 - r^2) \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{1}{Pe_\theta} \Delta \theta = 0 \text{ sur } Q =]0, T[\times \Omega \\ \partial_t N + (1 - r^2) \frac{\partial N}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \Delta N - \frac{S_t^*}{Pe} \Delta \theta = 0 \text{ sur } Q =]0, T[\times \Omega \end{cases} \quad (\text{A.VI.A.3})$$

où on aura adopté les notations suivantes:

- $Pe_\theta = \frac{U_0 R_0}{\kappa_f}$ est le nombre de Péclet thermique,
- $Pe = \frac{U_0 R_0}{D}$ est le nombre de Péclet massique,
- $S_t^* = \Delta \theta (1 - N(x=0)) \frac{D_\theta}{D}$ est le coefficient de Soret adimensionné.

A.2 Le cas 1D: résolution analytique

On se place dans le cas d'écoulements à faibles nombres de Péclet, *i.e.* $Pe_\theta \ll 1$, pour lesquels le transport de chaleur est donc essentiellement dominé par la convection radiale et ainsi

$$\theta(r, x) = \theta_{wall}(x) \quad (\text{A.VI.A.4})$$

(situation justifiée par ailleurs par le faible rayon du capillaire). Le domaine Ω est donc ici représenté par un segment $[0, L]$, L étant un réel positif, supposé grand ($L \gg 1$). La dépendance radiale "quadratique" de la vitesse est éliminée en moyennant l'équation (A.VI.A.3) pour obtenir

$$\int_0^1 \frac{\partial N}{\partial t} dr = \int_0^1 -(1 - r^2) \frac{\partial N}{\partial x} dr + \int_0^1 \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} dr + \int_0^1 \frac{S_t^*}{Pe} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} dr \quad (\text{A.VI.A.5})$$

qui donne

$$\frac{\partial \bar{N}}{\partial t} \approx -\bar{u} \frac{\partial \bar{N}}{\partial x} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial x^2} + \frac{S_t^*}{Pe} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (\text{A.VI.A.6})$$

en ayant défini

$$\bar{N} = \int_0^1 N(x, r) dr \text{ et } \int_0^1 (1 - r^2) \frac{\partial N(x, r)}{\partial x} dr \approx \bar{u} \int_0^1 \frac{\partial \bar{N}}{\partial x} dr. \quad (\text{A.VI.A.7})$$

L'équation (A.VI.A.5) peut alors être résolue de manière explicite à l'état stationnaire. En effet, par intégration, on obtient de manière évidente, par décomposition sur chaque région du capillaire:

$$\bar{N} = \begin{cases} -\frac{C_0}{\bar{u}} + C_1 e^{Pe\bar{u}x} \quad \forall x \leq x_1 \\ -\frac{\bar{y}}{\bar{C}_0} + \frac{S_t^* A}{Pe\bar{u}} + C_2 e^{Pe\bar{u}x} \quad \forall x \in]x_1, x_2[\\ -\frac{C_0}{\bar{u}} + C_3 e^{Pe\bar{u}x} \quad \forall x \geq x_2. \end{cases} \quad (\text{A.VI.A.8})$$

où A est la constante donnée par $A = \frac{1}{x_2 - x_1}$. On détermine les valeurs des constantes C_i à l'aide des conditions de continuité le long du profil thermique et du fait que la fraction massique reste bornée dans le capillaire. Ainsi,

$$\begin{cases} C_0 = \frac{S_t^* A}{Pe} (e^{-Pe\bar{u}x_1} - e^{Pe\bar{u}x_2}) - \bar{u} \\ C_1 = \frac{S_t^* A}{Pe\bar{u}} (e^{-Pe\bar{u}x_1} - e^{Pe\bar{u}x_2}) \\ C_2 = \frac{S_t^* A}{Pe\bar{u}} e^{-Pe\bar{u}x_2} \\ C_3 = 0 \end{cases} \quad (\text{A.VI.A.9})$$

La visualisation du profil de fraction massique donné par (A.VI.A.8) et (A.VI.A.9) (profil stationnaire de la figure A.3) permet alors de mettre en évidence l'accumulation locale de matière dans le capillaire, précisément dans la zone de changement du signe de la courbure du profil thermique. Un simple raisonnement à l'aide de l'équation (A.VI.A.3) permet alors de préciser les mécanismes aboutissant à cette déformation du profil des concentrations. A l'aide de la figure A.4, et de l'équation (A.VI.A.3), on peut aisément voir que le terme de **l'effet Soret, agit selon l'endroit où l'on se situe dans le capillaire, comme un terme puits ou un terme source dans l'équation de conservation de la masse**. Ainsi dans la zone Z_1 définissant l'endroit où le profil thermique a une courbure positive, l'effet Soret figure comme un terme source et il y a donc accumulation (dynamique seulement, du fait du terme de convection); par un raisonnement analogue, l'effet Soret figure comme un terme puits dans la zone Z_2 où le déficit dû à la thermodiffusion est rapidement comblé par dispersion de la zone amont. L'équilibrage (même si cet équilibre reste dynamique) de ces deux régions est à l'origine de la séparation observée dans la zone

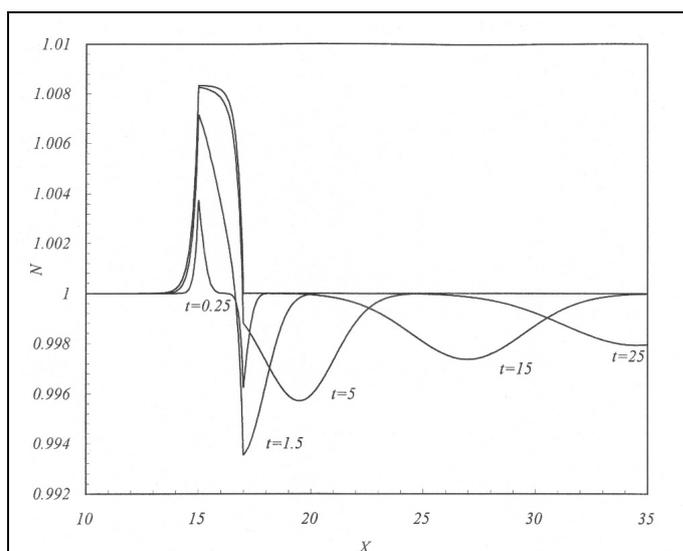


FIG. A.3 – Profil de fraction massique dans le capillaire: résolution 1D

non isotherme. Afin de confirmer ces résultats, une approche numérique du cas 1D instationnaire, fondée sur la méthode des différences finies, dont la visualisation est donnée dans la figure A.3. Le profil obtenu à l'état stationnaire est identique à celui donné par l'expression analytique, et l'évolution de la fraction massique à l'intérieur du capillaire dans le temps corrobore l'explication de la séparation donnée ci-dessus.

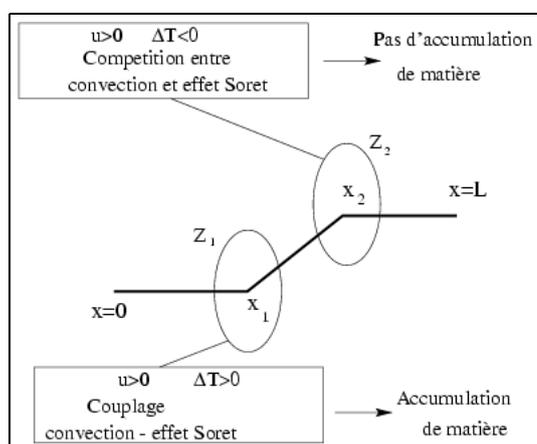


FIG. A.4 – Profil thermique le long de la paroi

A.2.1 Evaluation de la quantité de matière accumulée Ξ

La résolution analytique de l'équation effectuée dans la partie précédente permet notamment d'évaluer la quantité de matière accumulée à l'aide de ce procédé. Une simple intégration le long du capillaire permet en effet de calculer

$$\Xi(t \rightarrow \infty) = \int_0^{x_1} \bar{N}(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} \bar{N}(x)dx - x_2 \quad (\text{A.VI.A.10})$$

$$= \frac{S_t^*}{Pe\bar{u}} \left[1 - \frac{A}{Pe\bar{u}} (e^{-Pe\bar{u}x_1} - e^{-Pe\bar{u}x_2}) \right] \quad (\text{A.VI.A.11})$$

de manière à obtenir, à l'aide du théorème des accroissements finis,

$$\Xi(t \rightarrow \infty) \approx \frac{S_t^*}{Pe\bar{u}} (1 - e^{-Pe\bar{u}\tilde{x}}) \quad (\text{A.VI.A.12})$$

\tilde{x} étant un point de $[0, L]$ vérifiant $x_1 \leq \tilde{x} \leq x_2$. Ainsi, pour un point \tilde{x} vérifiant $Pe\bar{u}\tilde{x} \gg 1$ (situation où la zone de changement de courbure du profil thermique est très éloignée de l'entrée du capillaire), on dispose de l'évaluation suivante:

$$\boxed{\Xi(t \rightarrow \infty) \approx \frac{S_t^*}{Pe\bar{u}}.}$$

Cette évaluation est à la base du procédé mis en place dans la partie suivante, et permet essentiellement de quantifier la dépendance de la quantité de matière accumulée envers le coefficient de Soret.

A.3 Résolution numérique

Afin de mieux comprendre les mécanismes opérant dans le couplage mis en évidence dans la partie précédente, on effectue l'intégration numérique 3D (axi-symétrique) des équations de conservations données dans (A.VI.A.3). Un simple code de calcul basé sur la méthode des différences finies et la méthode des directions alternées permet alors d'obtenir le profil de fraction massique donné dans la figure A.5.

A.3.1 Equations considérées

On considère désormais le domaine cylindrique $\Omega = [0, L] \times D$ où D est le disque de centre 0 et de rayon R . On se place toutefois dans le cadre axisymétrique, où les grandeurs ne dépendent pas de la coordonnée angulaire (grandeurs constantes radialement). On réduit donc le système de coordonnées (x, r, ϕ) à (x, r) . On note alors par $\Omega' = [0, L] \times [0, r]$ les restrictions de Ω à ce cas. Les équations (A.VI.A.3) se réécrivent alors:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{U}_x \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{1}{Pe_\theta} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) \right) \\ \frac{\partial N}{\partial t} + \mathbf{U}_x \frac{\partial N}{\partial x} &= \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial^2 N}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial N}{\partial r} + \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \right) \right) + \frac{S_t^*}{Pe} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.VI.A.13})$$

où \mathbf{U}_x représente la composante longitudinale du vecteur vitesse à l'intérieur du capillaire (sa composante radiale \mathbf{U}_r étant nulle du fait du profil de Poiseuille considéré).

A.3.2 Méthode des directions alternées

La méthode la plus rapide à mettre en oeuvre pour ce type d'équations nous a paru être la méthode des différences finies couplée à la méthode des directions alternées. Le domaine plan Ω' obtenu dans le cas axisymétrique se prête en effet de manière idéale à cette méthode (cf. DAUTRAY-LIONS, vol. 9 [24]). On décompose ainsi le problème en deux directions, sur deux itérations successives:

$$\begin{cases} \frac{2}{\Delta t} (N^{n+\frac{1}{2}} - N^n) + F_x N^{n+\frac{1}{2}} = -F_r N^n + B\theta \\ \frac{2}{\Delta t} (N^{n+1} - N^{n+\frac{1}{2}}) + F_r N^{n+1} = -F_x N^{n+\frac{1}{2}} + B\theta \end{cases} \quad (\text{A.VI.A.14})$$

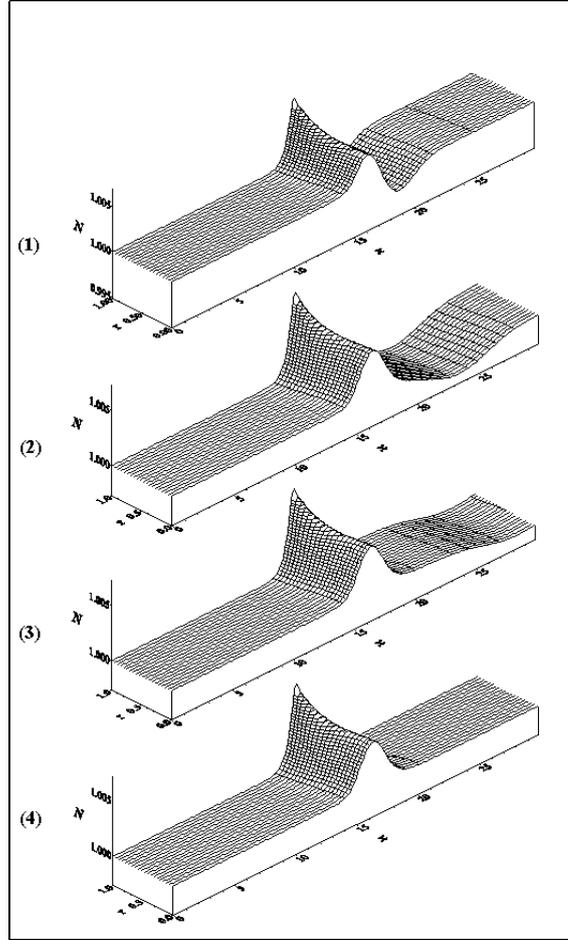


FIG. A.5 – Couplage convection-Effet Soret dans un écoulement capillaire

en ayant défini les opérateurs F_r , F_x et B suivants:

$$\begin{aligned}
 (F_x A)_{i,j} &= -\frac{1}{Pe\Delta x^2}(2A_{i,j} - A_{i+1,j} - A_{i-1,j}) + \frac{U_x}{2\Delta x}(A_{i+1,j} - A_{i-1,j}) \\
 (F_r A)_{i,j} &= -\frac{1}{Pe\Delta r^2}(2A_{i,j} - A_{i,j+1} - A_{i,j-1}) - \frac{1}{2jPe\Delta r}(A_{i,j+1} - A_{i,j-1}) \\
 (B\theta)_{i,j} &= \frac{S_t^*}{Pe\Delta x^2}(2\theta_{i,j} - \theta_{i+1,j} - \theta_{i-1,j}) + \frac{S_t^*}{Pe\Delta r^2}(2\theta_{i,j} - \theta_{i,j+1} - \theta_{i,j-1}) \\
 &\quad + \frac{S_t^*}{2jPe\Delta r}(\theta_{i,j+1} - \theta_{i,j-1})
 \end{aligned}$$

On vérifie aisément que ces opérateurs sont symétriques. L'analyse numérique du code ainsi construit n'est pas détaillée ici. On pourra se référer aux études de stabilité détaillées dans [24], même si les opérateurs mis en jeu ici sont sensiblement différents.

A.3.3 Discussion

Les résultats obtenus à l'aide des simulations $2D$ confirment le comportement obtenu lors de la résolution analytique. La figure A.5 présente le profil de fraction massique obtenu pour 4 étapes. La première visualisation présente la séparation obtenue par séparation thermodiffusive "pure" (au sens où elle n'est pas encore altérée par la diffusion et la convection). Les étapes (2) et (3) mettent en évidence l'évacuation du déficit par convection et diffusion vers la sortie du capillaire. La dernière étape permet de visualiser l'état stationnaire, où la zone de déficit a presque disparu (la séparation est encore visible à la paroi, en $r = 1$).

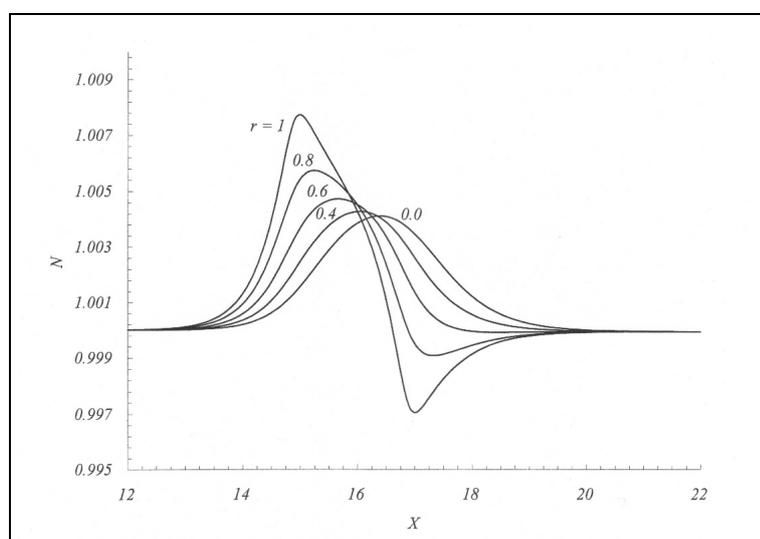


FIG. A.6 – Visualisation de la séparation selon la variable radiale

On remarque que le profil en concentration n'est pas constant radialement (figure A.6) : cela vient essentiellement du profil de vitesse qui varie selon la variable radiale. La vitesse étant maximale au centre, la séparation s'effectue principalement en $r = 1$ (où la vitesse est nulle), et on voit aisément que celle-ci est maximale à la paroi. On montre de plus que le déficit engendré par effet Soret n'est pas convecté et subsiste à l'état stationnaire (bien qu'atténué par diffusion).

A.4 Un procédé itératif de mesure du coefficient Soret

Les observations effectuées lors de ces simulations ont notamment permis d’imaginer un nouveau moyen de mesure du coefficient Soret. Il est basé sur un procédé itératif, seul apte à permettre d’accumuler assez de matière pour permettre des mesures significatives. Ce procédé est décrit sommairement par la suite et dans la figure A.7.

A.4.1 Dispositif expérimental

On considère deux réservoirs reliés l’un à l’autre par un tube capillaire. Le premier réservoir est rempli d’un mélange binaire, analogue à celui étudié dans la partie précédente, conservé à une température constante θ_f . On applique le long des parois du capillaire un gradient thermique (*cf.* figure A.7) de manière à reproduire le dispositif décrit ans la partie précédente. Sous l’action d’une pompe le fluide s’écoule

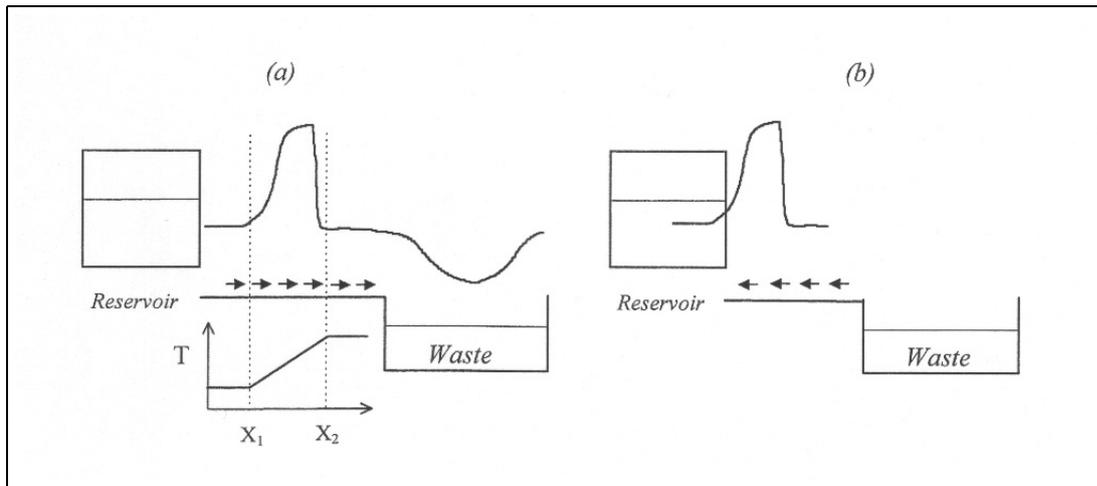


FIG. A.7 – Profil thermique le long de la paroi

alors lentement à l’intérieur du capillaire, permettant ainsi le couplage adsorption-convection mis en évidence dans la section A.1. Une fois l’accumulation “effectuée”, au bout d’un temps t_{acc} , on change le sens de l’écoulement de manière à réintroduire le fluide enrichi dans le réservoir initial (pendant un temps $t_{rev} < t_{acc}$ de manière à isoler le déficit de matière ainsi créé). On a ainsi enrichi le fluide dans le réservoir

initial ; la partie “aval” du fluide est quant à elle évacuée dans un récipient annexe. On répète ainsi le procédé un “certain” nombre d’itérations de manière à obtenir une séparation significative. Une simple simulation de l’évolution des composants du fluide est donnée par la suite à partir d’une formule de récurrence. Elle permet notamment de disposer d’un outil d’évaluation du nombre d’itérations à effectuer pour obtenir une bonne séparation.

A.4.2 Evolution des concentrations

Un raisonnement élémentaire permet alors d’établir l’expression de la fraction massique du constituant au bout de k étapes à l’intérieur du réservoir:

$$N^k = N^{k-1} \left(1 + \frac{S_t^*}{Pe\bar{u}(V^0 - kV^{lost})} \right) \quad (\text{A.VI.A.15})$$

et donc, en inversant la relation,

$$S_t^* = \frac{N^k - N^{k-1}}{N^{k-1}Pe\bar{u}(V^0 - kV^{lost})}. \quad (\text{A.VI.A.16})$$

Ainsi, en mesurant la quantité de matière accumulée au bout de l’étape k (l’entier k devra être choisi assez grand de manière à obtenir un enrichissement significatif), on détermine aisément la valeur du coefficient Soret à l’aide de l’égalité (A.VI.A.16). Le comportement de la suite ainsi construite est donné dans le tableau

TAB. A.1 – *Evolution des suites $(N^k)_k$ et $(V^k)_k$ lors du processus “multistage”*

itération	$k = 0$	$k = 1$	$k = 5$	$k = 10$	$k = 25$	$k = 50$	$k = 100$	$k = 200$
$t(h, min, s)$	0	45’’	3’45’’	7’30’’	18’45’’	37’30’’	1h15’	2h30’
$V^k(cm^3)$	1	1.0000	0.9941	0.9867	0.9647	0.9278	0.8542	0.7069
N^k	0.5	0.5007	0.5034	0.5068	0.5176	0.5374	0.5855	0.7475

On remarque à l’aide d’un tel procédé qu’il est possible de concentrer le mélange de manière à obtenir un enrichissement assez significatif pour pouvoir mesurer la différence de concentration avec le mélange initial. Ainsi en 200 itérations, il est possible d’obtenir un taux d’enrichissement du mélange de 150%.

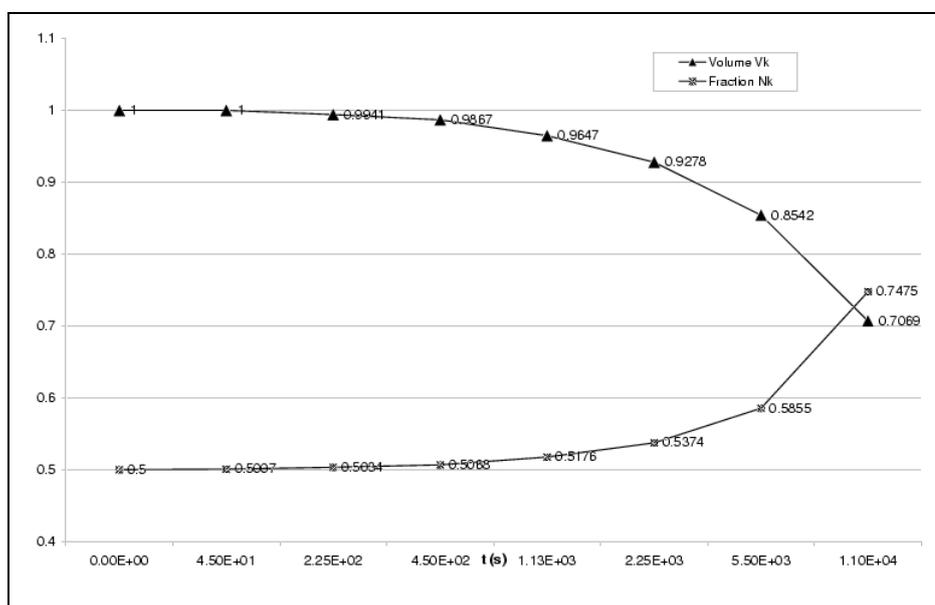


FIG. A.8 – Evolution des suites V_k et N_k au cours du temps

A.5 Influence du profil thermique en adsorption dans un capillaire

Nous présentons ici les premières simulations obtenues à l'aide du schéma numérique décrit dans le chapitre 2. Elles ont été effectuées sur un domaine rectangulaire, modélisant un capillaire.

On détaille ici les différents éléments utilisés pour celles-ci, notamment les coefficients de thermodiffusion adimensionnés $S_t^{i*} = S_t^i \Delta T (1 - N_i(x=0))$, les nombre de Péclet Pe^i , les isothermes d'adsorption de chaque constituant i , ainsi que les données relatives au système telles que la différence de température appliquée $\Delta\theta$, le profil de vitesse employé U . Toutes ces données sont résumées dans le tableau suivant.

const. i	Pe_i	S_t^{i*}	$\Delta\theta$ (K^{-1})	U	k^i
$C_{14}H_{30}$	20	0.0625	30°	Poiseuille	Langmuir (cf. [44])
$C_2H_4Cl_2$	20	0.0625			
C_6F_{12}	20	0.0625			

L'isotherme d'adsorption ainsi choisi, défini par

$$\forall i \in \{1..n\}, \forall x = (x_i)_{1 \leq i \leq n_c} \in \{0..1\}^{n_c} \quad k^i(x) = \frac{K_i N_i}{\epsilon + \sum_{1 \leq j \leq n_c} K_j N_j}$$

où ϵ représente la porosité du milieu et $(K_i)_{1 \leq i \leq n_c}$ la famille des constantes d'équilibre de Langmuir. Il est facile de voir que le tenseur des dérivées de cette fonction vérifie bien l'hypothèse (\mathcal{H}). Cet isotherme est l'un des plus simples et des plus utilisés pour la modélisation des processus d'adsorption, et, s'il est connu qu'il ne reproduit pas de manière très précise l'adsorption, il possède ici valeur de test, permettant de mettre en évidence les mécanismes se déroulant dans le système.

De même, nous avons considéré un tenseur de diffusion symétrique comme indiqué dans l'hypothèse 2 puisque nous avons introduit un tenseur diagonal (conformément à l'hypothèse 4).

Annexe B

Tenseurs homogénéisés

On effectue dans cette partie la résolution des problèmes élémentaires (III.3.19) et (III.3.28). On utilise notamment les techniques décrites au chapitre 4 pour la résolution de ces problèmes en considérant plusieurs types de géométries élémentaires. On discute enfin de l'influence des différents paramètres (géométrie, porosité ou caractéristiques physiques de chaque phase) sur les tenseurs macroscopiques ainsi obtenus.

B.1 Diffusivités thermiques équivalentes

B.1.1 Caractéristiques physiques du milieu

On présente ici les résultats obtenus lors de la résolution numérique du problème (III.4.4) sur différents type de cellules¹. Le milieu poreux est alors modélisé à la manière d'un amas périodique de grains, représentés par des billes (un milieu poreux similaire est donné à la figure B.1(a)). Afin d'obtenir des diffusivités homogénéisées réalistes, on considère le jeu de données suivant:

Les valeurs données ci-dessus le sont pour un fluide pétrolier moyen, dans les conditions du gisement ainsi que pour un grès moyen, non saturé. Ces données varient en effet selon que le grès considéré soit plus ou moins saturé, et ne sont en réalité pas constantes selon la température et la pression à l'intérieur du domaine. Nous

1. Les simulations effectuées ici le sont en 2D

Tab. B.1 – Paramètres physiques de chaque phase

Paramètres physiques	Phase liquide (Y_l)	Phase solide (Y_s)
λ ($W.m^{-1}.K^{-1}$)	2×10^{-1}	9×10^{-1}
C_p ($J..kg^{-1}.K^{-1}$)	2×10^3	7.6×10^2
ρ ($kg^{-1}.m^{-3}$)	7.5×10^2	2.1×10^3
κ ($m^2.s^{-1}$)	1.3×10^{-7}	5.6×10^{-7}
D ($m^2.s^{-1}$)	2.75×10^{-7}	-
S_t (K^{-1})	4.92×10^{-3}	-

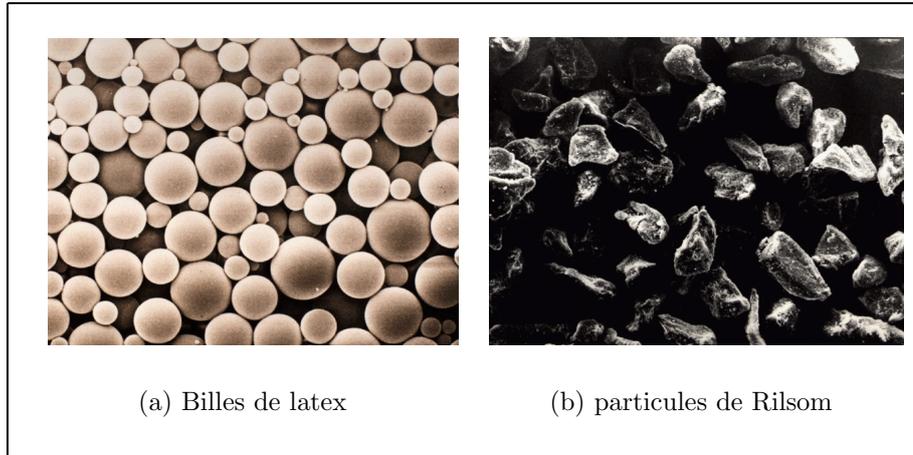


FIG. B.1 – Exemple de 2 structures poreuses (source: IMFT)

nous plaçons toutefois dans une situation éloignée du point critique, où les variations selon ces deux grandeurs restent relativement faibles.

B.1.2 Un maillage non structuré

Les caractéristiques géométriques de la cellule élémentaire considérée sont données dans le tableau (B.2). Le maillage de ces cellules est effectué à l'aide du logiciel ME-FISTO. C'est un maillage **non structuré** au sens où il ne possède pas les propriétés de symétrie de la cellule². Nous utilisons un maillage triangulaire afin de mieux reproduire la courbure de l'interface fluide-solide. Nous présentons dans la figure (B.3)

². Cette propriété induit des conséquences sur les coefficients homogénéisés calculés, comme cela est expliqué dans le paragraphe B.2.1.

quelques exemples de maillages.

Définition 3 Soit T un élément de la triangulation \mathcal{T}_h dont est munie $\bar{\Omega}$, au sens où

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T.$$

On définit $h_T = \text{diam}(T)$, $\rho_T = \text{rond}(T)$ les diamètre (plus grand côté du triangle T) et la rondeur (diamètre du cercle inscrit) de T .

On désigne alors par qualité de l'élément T , le scalaire Q_T défini par

$$Q_T = \frac{\rho_T}{h_T} \quad (\text{B.VI.B.1})$$

Remarque 19 La qualité d'un élément vérifie toujours

$$0 \leq Q_T \leq 1$$

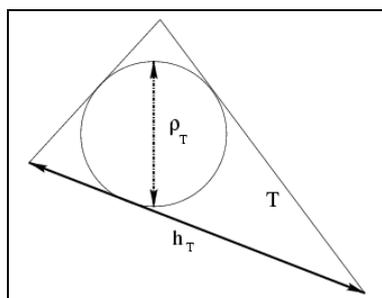


FIG. B.2 – Paramètres définissant la qualité d'un élément T

Ce critère défini de façon arbitraire, permet de juger de l'état de dégénérescence d'un élément de la triangulation (au sens de l'aplatissement des angles du triangle). La qualité des maillages construits lors de cette étude est donnée dans le tableau B.3. Il est important de considérer deux maillages distincts pour chaque phase (dont les noeuds à l'interface coïncident) afin de pouvoir résoudre indifféremment de manière globale ou "locale" les problèmes posés sur la cellule élémentaire Y . Par exemple, pour la détermination des diffusivités thermiques homogénéisées, on résout le problème élémentaire sur la cellule entière, avec pour paramètre la diffusivité thermique locale (κ_f ou κ_s selon l'élément sur lequel on se situe). Aussi est-il nécessaire

de construire des éléments sur lesquels la fonction $\kappa(\cdot)$ est constante. La résolution des problèmes liés aux coefficients de diffusion et thermodiffusion ne nécessite quant à elle qu'une résolution sur "la partie fluide" de la cellule, effectuée à l'aide du maillage déjà construit pour les diffusivités thermiques.

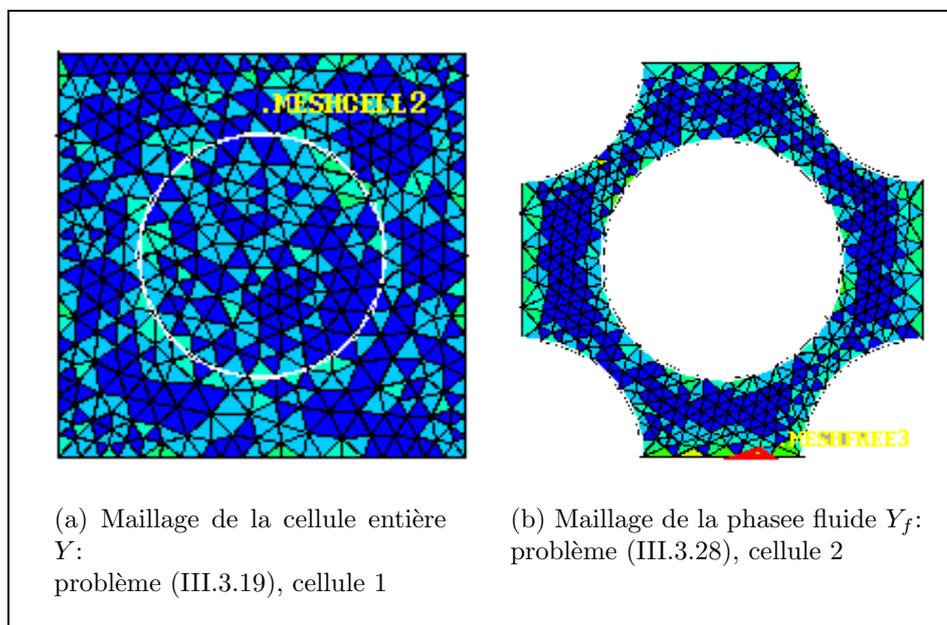


FIG. B.3 – Maillages de 2 types de cellules

TAB. B.2 – Paramètres géométriques de chaque cellule

Paramètres géométriques	Cellule 1	Cellule 2
Rayon des billes R_0	3×10^{-1}	3×10^{-1}
$\mathcal{L}^2 - mes(Y_s)$	$9\pi \times 10^{-2}$	$18\pi \times 10^{-2}$
$\mathcal{L}^2 - mes(Y_f)$	$1 - 9\pi \times 10^{-2}$	$1 - 18\pi \times 10^{-2}$
Porosité ϕ	$\simeq 0.72$	$\simeq 0.43$

TAB. B.3 – Critères de qualité de chaque maillage de la figure B.3

Paramètres\ maillage	Maillage global <i>B.3(a)</i>	Maillage partiel <i>B.3(b)</i>
Nombre d'éléments	1490	727
Nombre de sommets	786	409
% d'éléments de qualité ≥ 0.8	97%	94%
Qualité minimale	0.54	0.469
Qualité moyenne	0.917	0.871

B.2 Coefficients effectifs

Dans cette section, les cellules élémentaires considérées sont les mêmes que celles de la section précédente. Les caractéristiques physiques du fluide proviennent des mesures effectuées par K.J. ZHANG & al. dans [66], ou encore par W. KÖHLER et B. MÜLLER dans [47] pour un mélange binaire, équimolaire. Elles sont résumées dans le tableau (B.1).

Les résultats de l'ensemble des simulations effectuées ainsi que les visualisations des solutions aux problèmes élémentaires sont donnés dans les pages suivantes. Elles sont axées sur les paramètres suivants:

- Influence de la porosité de la cellule.
- Variation de la géométrie de la cellule :
 - Influence de la symétrie.
 - Isotropie ou anisotropie de chaque phase.
- Influence des paramètres physique de chaque phase.

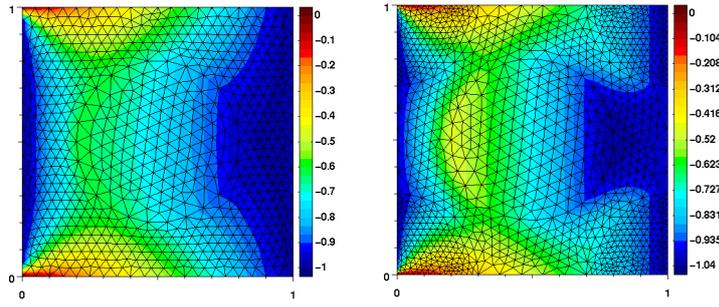
B.2.1 Résolution du problème (III.3.19)

Les résultats relatifs à la résolution des problèmes (III.3.19) sont donnés dans les figures B.4 et B.5 d'une part, et le tableau récapitulatif B.2.2 d'autre part. L'influence des conditions de périodicité sur le bord y est évidente, et la différence de conductivités thermiques entre phases fluide et solide est mieux visualisée à l'aide courbes "isovaleurs" dans la figure B.5 (cas B.5(a) et B.5(b) où la direction préférentielle de la géométrie est prépondérante dans le calcul des coefficients macroscopiques). La porosité semble quant elle ne jouer qu'un rôle numérique dans

les tenseurs obtenus bien qu'il soit difficile d'obtenir des conclusions: en effet, même si la valeur des coefficients du tenseur est directement liée à celle-ci, on remarque qu'en diminuant ϕ (passage du cas 1 au cas 3 dans le tableau B.2.2), on ne diminue pas forcément les valeurs des éléments du tenseur (puisque en diminuant la porosité, on augmente la contribution de la phase solide et donc la valeur du coefficients homogénéisé dès lors que $\kappa_s > \kappa_f$). Il est à noter dans le cas des géométries "elliptiques", que les tenseurs obtenus pour les géométries 4 et 5 ne sont pas tout à fait "symétriques" bien que l'on puisse interchanger les rôles des directions x et y . Cela est simplement dû au fait que nous utilisons un maillage non structuré.

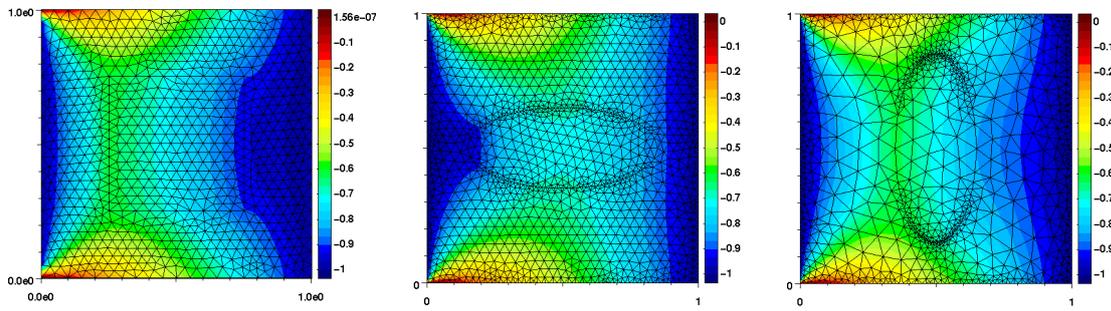
B.2.2 Résolution du problème (III.3.28)

Une partie des simulations effectuées est résumée dans la figure B.6. On y montre notamment pour quelques géométries particulières le maillage construit ainsi que les solutions aux problèmes élémentaires. Les figures B.6(a) et B.6(d) sont des illustrations de géométries symétriques alors que les cellules considérées dans B.6(c) et B.6(b) font référence à des cas non symétriques et ayant pour résultat des coefficients non isotropes (*cf.* tableau B.2.2). On remarque dans un premier temps la grande influence des conditions de Neumann à l'interface fluide-solide dans les solutions des problèmes élémentaires. Afin de diminuer le coût de calcul relatif à la résolution de ces problèmes, il est préférable d'utiliser des maillages plus adaptés: la figure B.6(c) illustre bien un maillage qui a été raffiné dans la zone où sont appliquées les conditions de Neumann (du moins pour la résolution du problème relatif à ω_2). Cela permet une meilleure considération des conditions de bord sans augmenter la taille du système. On remarque ici la différence entre les valeurs de ω_1 et ω_2 , bien que le problème soit totalement symétrique dans les cas B.6(a) et B.6(d). Elle est entièrement due au fait que le problème (III.3.28) ne possède pas une solution unique, comme cela l'a été noté dans la remarque 17. La solution déterminée numériquement l'est donc à une constante près, ce qui importe peu puisque nous ne récupérons que les gradients de ces solutions. On peut effectuer la même remarque que dans la section précédente pour ce qui concerne l'influence de la porosité sur les résultats, même si dans le cas du coefficient de diffusion homogénéisé, ce n'est pas la contribution du milieu solide qui augmente mais plutôt la contribution des conditions de bord via l'influence de l'interface fluide - solide.



(a) Y_s sphère.

(b) Y_s empilement de sphères.

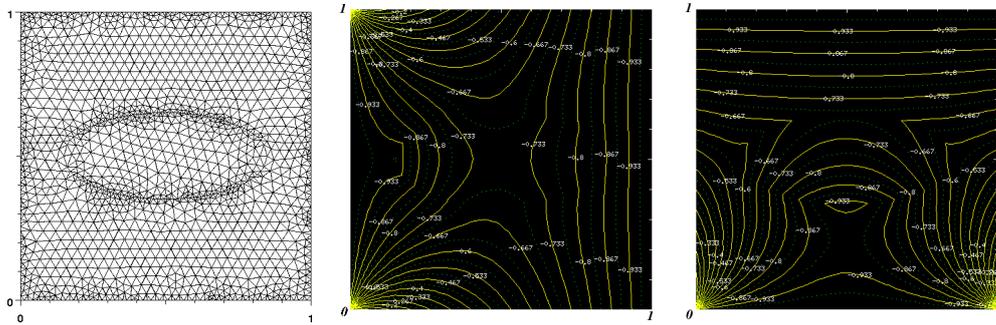


(c) Y_s carré.

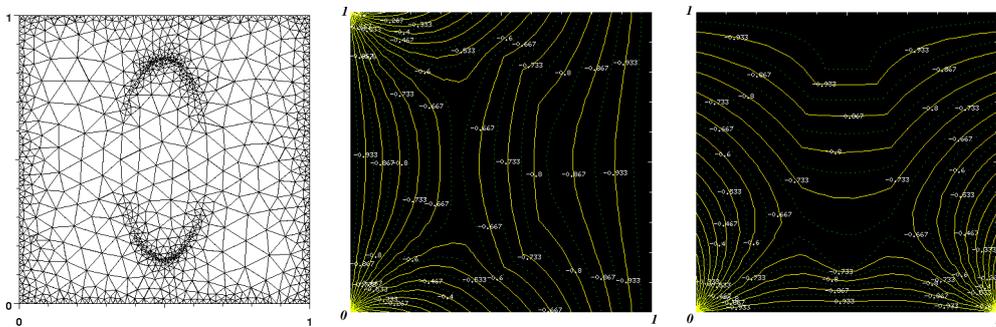
(d) Y_s ellipse horizontale.

(e) Y_s ellipse verticale.

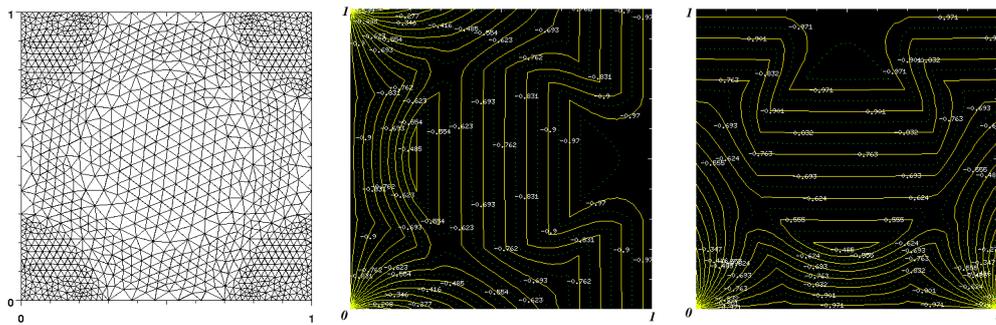
FIG. B.4 – Solution σ_1 du problème (III.3.19).



(a) Y_s ellipse horizontale: maillage, isovaleurs de σ_1 , σ_2 .

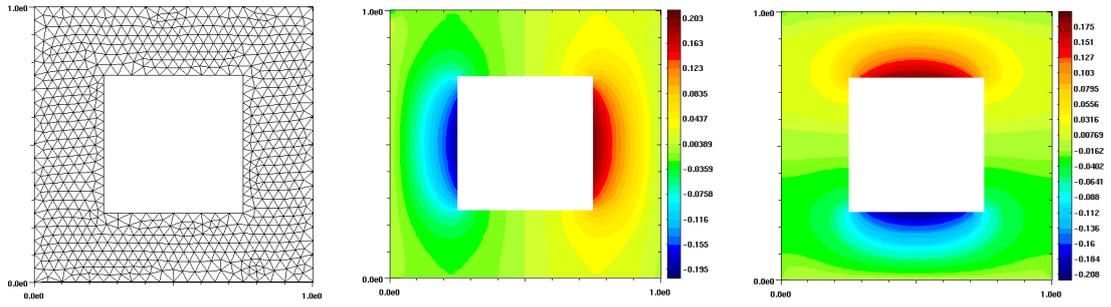


(b) Y_s ellipse verticale: maillage, isovaleurs de σ_1 , σ_2 .

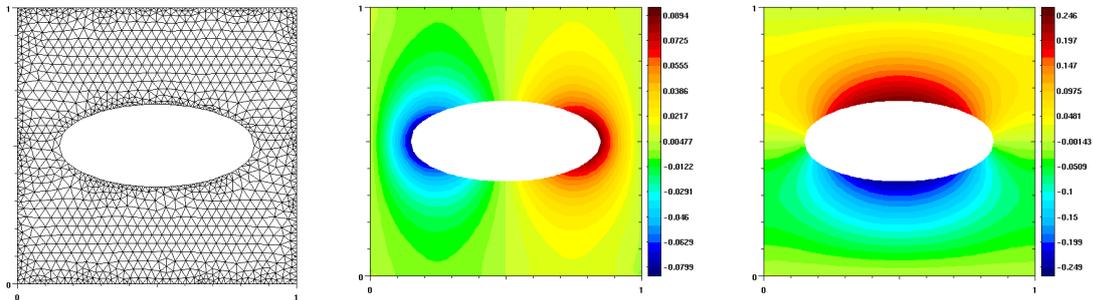


(c) Y_s empilement de sphères: maillage, isovaleurs de σ_1 , σ_2 .

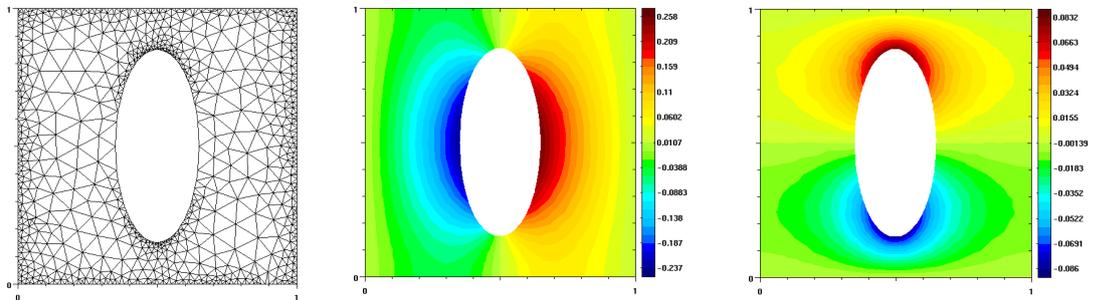
FIG. B.5 – Isovaleurs des solutions $(\sigma_k)_{k=1,2}$ du problème (III.3.19) pour différentes géométries élémentaires.



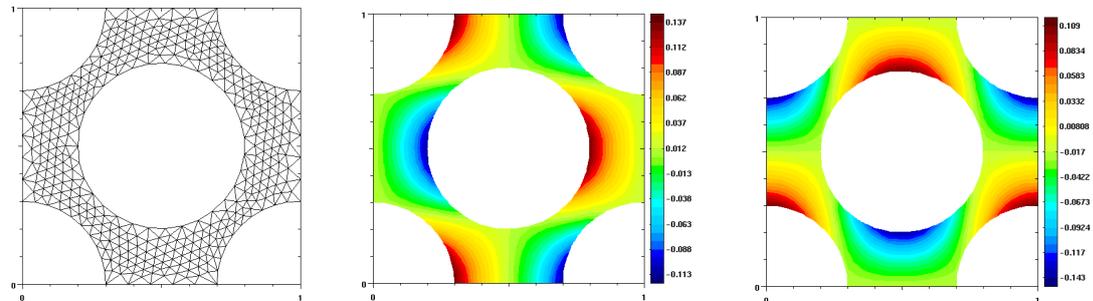
(a) Y_s carré: maillage, ω_1 , ω_2 .



(b) Y_s ellipse horizontale: maillage, ω_1 , ω_2 .

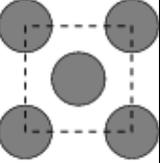


(c) Y_s ellipse verticale: maillage, ω_1 , ω_2 .



(d) Y_s empilement de sphères: maillage, ω_1 , ω_2 .

FIG. B.6 – Maillages et solutions $(\omega_k)_{k=1,2}$ du problème (III.3.28) pour différentes géométries élémentaires.

Cellule $Y = Y_f \cup Y_s$	Porosité ϕ	Tenseur Λ	Tenseur Υ	Tenseur Σ
	0.72	$1.704 \times 10^{-7} I_2$	$1.55 \times 10^{-7} I_2$	$3.15 \times 10^{-5} I_2$
	$\frac{3}{4}$	$1.648 \times 10^{-7} I_2$	$1.6 \times 10^{-7} I_2$	$3.25 \times 10^{-5} I_2$
	0.43	$3.48 \times 10^{-7} I_2$	$2.67 \times 10^{-7} I_2$	$5.44 \times 10^{-5} I_2$
	0.83	$\begin{pmatrix} 1.66 \times 10^{-7} & 0 \\ 0 & 1.46 \times 10^{-7} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2.1814 \times 10^{-7} & 0 \\ 0 & 1.53 \times 10^{-7} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 4.44 \times 10^{-5} & 0 \\ 0 & 3.12 \times 10^{-5} \end{pmatrix}$
	0.83	$\begin{pmatrix} 1.459 \times 10^{-7} & 0 \\ 0 & 1.666 \times 10^{-7} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.53 \times 10^{-7} & 0 \\ 0 & 2.18 \times 10^{-7} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 3.11 \times 10^{-5} & 0 \\ 0 & 4.45 \times 10^{-5} \end{pmatrix}$

TAB. B.4 – Récapitulatif des simulations effectuées ($\kappa_f = 1.3 \times 10^{-7} m^2 s^{-1}$, $\kappa_s = 5.6 \times 10^{-7} m^2 s^{-1}$, $D = 2.75 \times 10^{-7} m^2 s^{-1}$, $S_t = 4.92 \times 10^{-3} K^{-1}$)