



HAL
open science

Modeling and simulation of advective and diffusive transport in monophasic and biphasic porous media

Pierre Tardif d'Hamonville

► **To cite this version:**

Pierre Tardif d'Hamonville. Modeling and simulation of advective and diffusive transport in monophasic and biphasic porous media. Mathematics [math]. Ecole des Ponts ParisTech, 2006. English. NNT : . pastel-00002184

HAL Id: pastel-00002184

<https://pastel.hal.science/pastel-00002184>

Submitted on 15 Feb 2007

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.



THÈSE

présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'École Nationale des Ponts et Chaussées

Spécialité : Mathématiques, Informatique

par **Pierre TARDIF D'HAMONVILLE**

Sujet : *Modélisation et simulation
du transport advectif et diffusif
en milieu poreux monophasique et diphasique*

Soutenue le 19 décembre 2006
devant le jury composé de :

Rapporteurs :	Grégoire Allaire (président) Andro Mikelić
Examineurs :	Christian Geindreau Eric Lemarchand
Directeurs de thèse :	Alexandre Ern Luc Dormieux

« “Tous les hommes aspirent à la connaissance”, ^a et l’objet de cette aspiration est la vérité. La vie quotidienne elle-même montre que chacun éprouve de l’intérêt pour découvrir, au-delà du simple oui-dire, comment sont vraiment les choses. L’homme est l’unique être dans toute la création visible qui, non seulement est capable de savoir, mais qui sait aussi connaître et, pour cela, il s’intéresse à la vérité réelle de ce qui lui apparaît. Personne ne peut être sincèrement indifférent à la vérité de son savoir. S’il découvre qu’il est faux, il le rejette ; s’il peut, au contraire, en vérifier la vérité, il se sent satisfait. C’est la leçon de saint Augustin quand il écrit : “J’ai rencontré beaucoup de gens qui voulaient tromper, mais personne qui voulait se faire tromper”.^b On pense à juste titre qu’une personne a atteint l’âge adulte quand elle peut discerner, par ses propres moyens, ce qui est vrai de ce qui est faux, en se formant un jugement sur la réalité objective des choses. C’est là l’objet de nombreuses recherches, en particulier dans le domaine des sciences, qui ont conduit au cours des derniers siècles à des résultats très significatifs, favorisant un authentique progrès de l’humanité tout entière. »

Jean-Paul II, *Fides et ratio*

^aAristote, *Métaphysique*

^bSaint Augustin, *Confessions*

Remerciements

Tout au long des trois années pendant lesquelles j'ai effectué les travaux présentés dans ce mémoire, j'ai reçu l'aide et le soutien de nombreuses personnes auxquelles je souhaite rendre hommage. Je remercie donc

- les Professeurs Luc Dormieux et Alexandre Ern, mes directeurs de thèses. J'ai particulièrement apprécié les qualités scientifiques et humaines de nos réunions. Je retiendrai l'exemple de rigueur et de précision qu'ils m'ont donné et la justesse de leurs jugements. Je suis particulièrement reconnaissant envers Alexandre Ern pour son soutien, ses conseils et sa confiance dans les périodes difficiles ;
- le Professeur Grégoire Allaire de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma thèse et d'avoir accepté d'être rapporteur de ce mémoire ;
- le Professeur Andro Mikelić qui a aussi accepté d'évaluer ce mémoire. Je me souviens que c'est sous sa responsabilité que j'ai étudié pour la première fois les milieux poreux en 2001 ;
- Christian Geindreau et Eric Lemarchand qui ont bien voulu faire partie du jury en tant qu'examineurs ;
- les membres du laboratoire et de l'Ecole grâce à qui mon séjour à l'ENPC a été agréable. Je pense en particulier à Linda, Héloïse, Hervé, Amin, Annette, Sébastien, Daniele, Pierre.
- le Professeur Jean-Pierre Croisille et le laboratoire LMAM de l'université de Metz pour la mise à disposition du logiciel « Tetmesh-GHS3D » dans le cadre du GdR MOMAS ;
- Henriette et Cécile qui ont participé avec courage à la relecture du mémoire ;
- les membres de la Chorale Inter-Scoute de Paris pour leur amitié et pour leur contribution au pot, le jour de la soutenance ;
- ma famille ;
- et tous ceux à qui je pense sans les nommer explicitement.

Table des matières

1	Introduction	9
1.1	Cadre général	9
1.2	Homogénéisation des structures périodiques	11
1.2.1	Préliminaires	11
1.2.2	Développement asymptotique à double échelle	12
1.2.3	Les grandes étapes du processus d'homogénéisation	14
1.3	Organisation du mémoire	15
1.4	Principales notations	17
2	Transport advectif monophasique	19
2.1	Introduction	19
2.2	Construction du modèle	19
2.2.1	Equations à homogénéiser	19
2.2.2	Développement asymptotique à double échelle	20
2.2.3	Formulation mathématique et caractère bien posé	23
2.3	Discretisation du problème	25
2.3.1	Généralités sur les maillages	25
2.3.2	Faces du maillage	25
2.3.3	Espaces d'éléments finis	26
2.3.4	Construction des fonctions de base	27
2.3.5	Quadratures	28
2.3.6	Opérateurs de divergence et gradient discrets	29
2.3.7	Stratégies pour l'approximation du champ de vitesse	30
2.4	Approximation par éléments finis stabilisés	31
2.4.1	Discretisation du problème	31
2.4.2	Assemblage du système linéaire	31
2.5	Approximation par éléments finis mixtes	33
2.5.1	Discretisation du problème	33
2.5.2	Assemblage du système linéaire	34
2.6	Projection à divergence nulle du champ de vitesse discret	36
2.6.1	Construction et propriétés du projecteur	36
2.6.2	Mise en œuvre numérique	38
2.7	Validation	39
2.7.1	Ecoulement de Poiseuille entre deux plans infinis	39
2.7.2	Ecoulement de Poiseuille dans un cylindre	42
2.8	Résultats sur des réseaux cubiques de sphères	45
2.8.1	Calcul de perméabilités	46
2.8.2	Extension au cas non-newtonien	47

3	Transport diffusif monophasique en présence d'advection	53
3.1	Introduction	53
3.2	Construction du modèle	54
3.2.1	Equations à homogénéiser	54
3.2.2	Développement asymptotique à double échelle	55
3.2.3	Formulation mathématique et caractère bien posé	60
3.3	Approximation par éléments finis	63
3.4	Mise en œuvre numérique	65
3.4.1	Suppression de la contrainte de moyenne nulle	65
3.4.2	Assemblage du système linéaire	67
3.5	Validation	68
3.5.1	Transport entre deux plans infinis	68
3.5.2	Transport dans un cylindre	70
3.6	Résultats sur des réseaux cubiques de sphères	72
3.6.1	Impact de la qualité du champ de vitesse discret	72
3.6.2	Réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$	73
3.6.3	Réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.57$	73
3.6.4	Réseau cubique centré de sphères	75
4	Transport advectif et diffusif diphasique	77
4.1	Introduction	77
4.1.1	Hypothèses et notations	77
4.1.2	Equilibre liquide-vapeur	78
4.1.3	Géométrie des ménisques	79
4.1.4	Influence de la fraction molaire de vapeur sur la géométrie des ménisques	82
4.2	Régime de diffusion pure	84
4.2.1	Modèles	84
4.2.2	Simulation du transport macroscopique purement diffusif	86
4.3	Diffusion en présence d'advection	89
4.3.1	Modèles	89
4.3.2	Résultats	97
5	Conclusions et perspectives	101
A	Construction de maillages	105
A.1	Principes généraux	105
A.2	Opérateurs de projection entre un plan et une surface sphérique	105
A.2.1	Projection de la sphère vers le plan	106
A.2.2	Projection du plan vers la sphère	107
A.3	Processus d'assemblage	108
	Bibliographie	113

Chapitre 1

Introduction

1.1 Cadre général

Les milieux poreux sont omniprésents autour de nous, qu'ils soient naturels comme le sable, l'argile, les roches, les os, ou manufacturés comme les bétons, les ciments, la céramique, etc. La dénomination de milieu poreux désigne une large palette de matériaux qui peuvent être très différents les uns des autres. Leur point commun est d'être composés d'une matrice solide et d'un espace poreux. Leur importance dans les problèmes environnementaux et industriels a motivé et motive encore aujourd'hui de nombreuses études sur leurs propriétés afin de mieux prévoir leur comportement. Dès 1856, Darcy publiait les résultats d'expériences et la loi qui porte son nom décrivant les écoulements fluides à travers les milieux poreux [Dar56]. Plus tard, Biot et Terzaghi apportaient une contribution essentielle à la connaissance du comportement mécanique des milieux poreux en précisant le couplage entre les contraintes dues à la présence du fluide dans les pores et la déformation de la matrice solide [Bio41, Bio55, Ter43]. Aujourd'hui, la palette de phénomènes qui sont étudiés dans les milieux poreux s'est considérablement enrichie : les transferts de chaleur, les réactions chimiques, leur influence sur la structure solide ou le couplage entre plusieurs de ces phénomènes, pour ne citer que quelques exemples.

La principale difficulté dans la modélisation des milieux poreux provient de l'hétérogénéité du système. Il serait en effet très coûteux de tenir compte de la complexité morphologique des pores pour étudier le comportement du milieu. De plus, de tels détails dans la structure du milieu poreux ne sont en général pas connus avec précision. Une alternative consiste à déterminer des propriétés effectives reflétant la structure morphologique du milieu. Cette idée distingue donc au moins deux *échelles d'observation* : une échelle fine appelée *échelle microscopique* à laquelle les interactions entre les phases et les fluctuations des grandeurs physiques dans les pores sont observables, et une échelle grossière appelée *échelle macroscopique* à laquelle la phase solide et l'espace poreux sont volontairement confondus pour bénéficier du cadre théorique de la mécanique des milieux continus.

La déduction des propriétés macroscopiques à partir de la description microscopique du milieu peut être purement empirique comme c'était à l'origine le cas pour la loi de Darcy, ou bien elle peut utiliser les différentes méthodes développées depuis environ une trentaine d'années : la modélisation statistique développée par Kröner [Krö72, Krö86], les méthodes auto-consistantes développées par Zaoui [Zao91] ou encore les techniques de moyennes volumiques développées par Nigmatulin [Nig81]. Une quatrième méthode appelée homogénéisation des structures périodiques a été développée depuis les années 70. Elle est due entre autres à Ene et Sanchez-Palencia [SP74, ESP75, San80], Keller [Kel77], Bensoussan, Lions et Papanicolaou [BLP78], Allaire [All89, All92, All97] et Auriault [Aur91]. Un des grands succès

de cette méthode est qu'elle permet de retrouver la loi de Darcy à l'échelle macroscopique à partir des équations de Stokes à l'échelle microscopique. D'autres exemples d'applications des méthodes d'homogénéisation dans les milieux poreux périodiques concernent entre autres les phénomènes de diffusion dans des domaines avec trous [CSJP79], les équations de Biot [Aur87], les écoulements diphasiques non miscibles [BM94] et les effets de pression capillaire [BP98], les écoulements dans les milieux fracturés [Bou84, BMPM95, BMP03, BPP04], les écoulements de fluides polymériques [BM96, BGMP03], les écoulements de fluides non-newtoniens [Mik97], les conditions d'interface entre des écoulements en milieux poreux et des écoulements libres [JM00], les transferts thermiques [Aur02] et le transport d'un soluté en milieu non saturé en présence d'adsorption [MR04]. Une grande diversité de phénomènes physiques peuvent donc être appréhendés par le biais de l'homogénéisation des structures périodiques. Bien que dans la pratique les milieux poreux soient rarement périodiques, il existe des similitudes de comportement entre les milieux périodiques et les milieux désordonnés (Auriault, [Aur05]). Quintard et Whitaker [QW93] montrent que le modèle de milieu poreux périodique fournit des résultats raisonnables dans de nombreux cas.

Le cadre du présent mémoire est la modélisation et la simulation du transport d'un soluté à travers un milieu poreux. Par la suite, on considère uniquement des milieux isothermes, chimiquement inertes et où les couplages hydro-mécaniques entre l'écoulement du fluide et les déformations du squelette sont négligeables. On s'intéressera à deux situations. D'abord celle où le fluide occupant l'espace poreux est un mélange monophasique composé d'un solvant et d'un soluté. Puis celle où le milieu est partiellement saturé, l'écoulement ne concernant que la phase gazeuse tandis que la phase liquide est isolée dans les pores sous forme de ménisques. Une telle situation peut servir de prototype à la simulation du séchage d'un milieu poreux.

On distingue classiquement trois modes de transport du soluté, advectif, diffusif et dispersif, dont on peut trouver une description macroscopique par exemple dans l'ouvrage de Bear et Bachmat [BB90]. Ces modes de transport ont également un fondement micromécanique, c'est-à-dire peuvent s'obtenir par le biais de méthodes d'homogénéisation des milieux poreux périodiques tels que décrites par exemple par Auriault et Lewandowska [AL96] ou plus récemment par Dormieux, Kondo et Ulm [DKU06]. Rappelons brièvement la nature de ces trois modes de transport. Tout d'abord, le transport advectif est décrit par les équations de Stokes à l'échelle microscopique et la loi de Darcy à l'échelle macroscopique. Par ailleurs, si la concentration du soluté est hétérogène, il existe un mouvement relatif du soluté par rapport au solvant appelé diffusion, dépendant du gradient de la concentration et décrit par la loi de Fick à l'échelle microscopique et par une loi semblable à l'échelle macroscopique mais qui fait intervenir un tenseur de diffusion homogénéisé. Lorsque la diffusion est couplée avec l'advection, le flux de soluté contient en plus un terme supplémentaire qui fait intervenir un tenseur de dispersion.

Pour évaluer de manière quantitative les coefficients effectifs qui régissent ces trois modes de transport à l'échelle macroscopique, deux problèmes doivent être résolus à l'échelle microscopique : un écoulement laminaire et un problème de type advection-diffusion d'inconnue vectorielle et utilisant le champ de vitesse de l'écoulement microscopique. La méthode d'homogénéisation périodique fournit ainsi un cadre théorique adéquat pour construire les modèles et pour faire le lien quantitatif entre les tenseurs de diffusion et de dispersion d'une part et la morphologie microscopique du milieu, le mouvement d'ensemble de la phase fluide et, le cas échéant, le degré de saturation de la phase fluide d'autre part. La description des grands principes de cette méthode d'homogénéisation fait l'objet de la section suivante.

1.2 Homogénéisation des structures périodiques

L'objet de cette section est d'esquisser les grandes lignes de la méthode des développements asymptotiques à double échelle qui joue un rôle central dans ce mémoire.

1.2.1 Préliminaires

La dimension d'espace est notée d . En général, $d = 3$ mais certaines situations où $d = 2$ seront également considérées. L'espace \mathbb{R}^d est muni d'un repère orthonormé $(e_i)_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$. Un point de l'espace est identifié par le vecteur position y . Les opérateurs de dérivation sont construits à partir de l'opérateur nabla ∇_y où l'indice y désigne la variable de dérivation. Les autres notations utilisées dans ce mémoire pour la manipulation des tenseurs et les opérateurs de dérivation sont regroupées pour plus de commodité dans la section 1.4.

Soit \mathcal{C} une structure poreuse de grandeur caractéristique L (m). La valeur de L peut être directement liée à la taille de \mathcal{C} . Elle peut aussi dépendre de la nature du phénomène physique observé. Par exemple, si l'étude porte sur la propagation d'une onde, L peut être liée à la longueur d'onde. L'objectif des méthodes de changement d'échelle est de déterminer les propriétés macroscopiques du système à partir de la description microscopique de la structure poreuse à l'aide d'un volume élémentaire représentatif (v.e.r.). Le v.e.r. peut dépendre de la position à l'échelle macroscopique si les propriétés de \mathcal{C} (comme la porosité par exemple) varient. La taille caractéristique d'un v.e.r. doit donc être suffisamment grande pour contenir statistiquement toutes les informations géométriques du milieu. Mais elle doit être également suffisamment petite pour permettre une modélisation continue du milieu. Toujours avec l'exemple de propagation d'une onde, si la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que les hétérogénéités, la propagation donne lieu à des effets de piégeage qui ne peuvent pas être décrits de manière continue à l'échelle macroscopique.

Dans le cadre de modèles périodiques de milieux poreux, la structure \mathcal{C} est formée par l'agencement périodique de cellules élémentaires identiques (cf figure 1.1). La notion de cel-

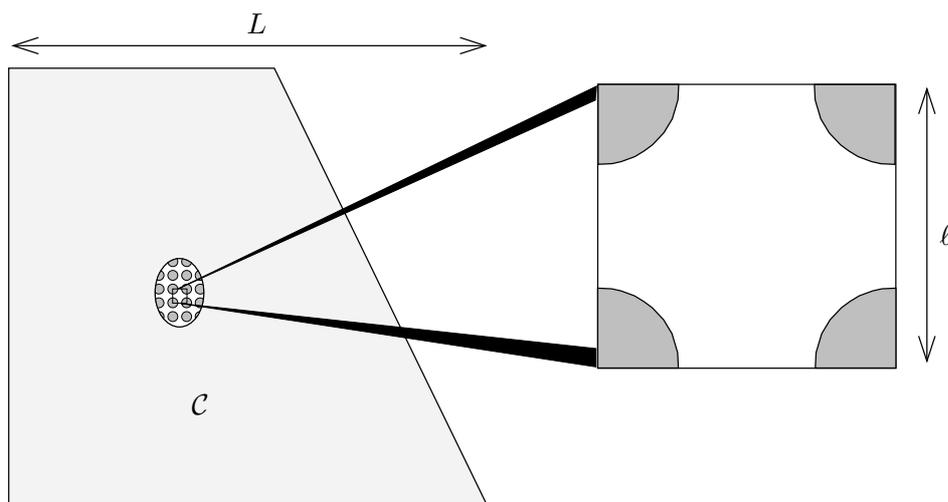


FIG. 1.1 – Deux points de vue sur la structure \mathcal{C} : point de vue macroscopique à gauche où on ne distingue pas les phases fluide et solide et point de vue microscopique à droite où on distingue ces phases.

lule élémentaire se substitue alors à celle du v.e.r. Notons Ω une représentation de la cellule

élémentaire du milieu poreux, et ℓ (m) sa taille caractéristique. La morphologie de Ω est alors invariante selon la position à l'échelle macroscopique et elle est supposée coïncider avec un parallélépipède :

$$\Omega = \prod_{i=1}^d [0, a_i] \quad (1.1)$$

Les types de géométries considérées ici sont restreints aux cas où tous les a_i sont de l'ordre de ℓ .

1.2.2 Développement asymptotique à double échelle

L'homogénéisation par développement asymptotique à double échelle se fonde sur l'hypothèse de la séparation des échelles imposée par la condition

$$\delta = \frac{\ell}{L} \ll 1 \quad (1.2)$$

Soit $w(\underline{y})$ une grandeur physique attachée au fluide et à valeurs scalaires (si la fonction est à valeurs vectorielles, ce qui suit s'applique composante par composante). L'objectif de l'homogénéisation périodique est de faire le lien entre la fluctuation de w au sein de Ω et ses propriétés observables à l'échelle macroscopique. Elle utilise la technique de développement asymptotique à double échelle qui consiste à définir deux variables spatiales \underline{x} et \underline{z} liées respectivement à la position dans \mathcal{C} et à la position dans Ω et à considérer w comme une fonction de ces deux nouvelles variables. Par abus de notation, la fonction déduite de $w(\underline{y})$ avec les nouvelles variables est notée également $w(\underline{x}, \underline{z})$. Les variables \underline{x} et \underline{z} sont sans dimension et du même ordre de grandeur de manière à pouvoir comparer leur influence sur les variations de w . Ainsi,

$$\underline{x} \approx \frac{1}{L} \underline{y} \quad \text{et} \quad \underline{z} \approx \frac{1}{\ell} (\underline{y} - \ell \lfloor \frac{L\underline{x}}{\ell} \rfloor) \in \Omega' := \prod_{i=1}^d [0, \frac{a_i}{\ell}] \quad (1.3)$$

où $\lfloor \cdot \rfloor$ désigne la partie entière d'un scalaire ou bien les parties entières des composantes d'un vecteur. Du fait de la périodicité de \mathcal{C} , $w(\underline{x}, \underline{z})$ est supposée périodique en \underline{z} . La dépendance de w par rapport à \underline{x} (resp. \underline{z}) est donc liée à ses variations à l'échelle macroscopique (resp. microscopique). Les dérivées de w par rapport à \underline{y} s'expriment de la manière suivante en fonction des dérivées de la nouvelle fonction w par rapport à \underline{x} et à \underline{z} :

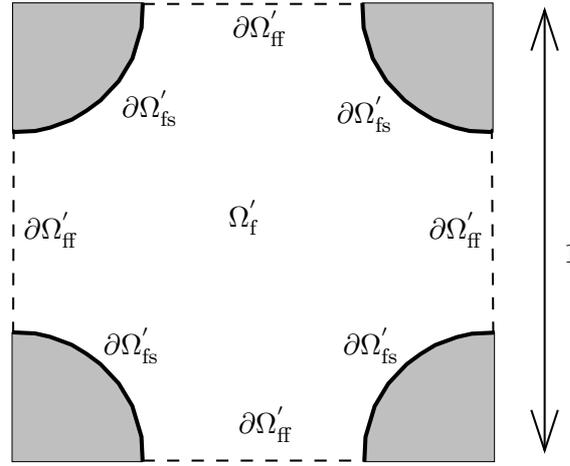
$$\nabla_{\underline{y}} w = \frac{1}{L} \nabla_{\underline{x}} w + \frac{1}{\ell} \nabla_{\underline{z}} w \quad (1.4)$$

Les variations d'une cellule élémentaire à l'autre sont exprimées par les dérivées de w selon la variable macroscopique \underline{x} :

$$\forall i \in \llbracket 1, d \rrbracket \quad w(\underline{y} + a_i \underline{e}_i) - w(\underline{y}) = w(\underline{x} + \frac{a_i}{L} \underline{e}_i, \underline{z}) - w(\underline{x}, \underline{z}) = \frac{a_i}{L} \frac{\partial w}{\partial x_i} + O(\frac{a_i^2}{L^2}) \quad (1.5)$$

le coefficient $\frac{a_i}{L}$ étant de l'ordre de $\delta \ll 1$.

La cellule élémentaire adimensionnée Ω' définie dans l'équation (1.3) est composée pour une partie notée Ω'_s de phase solide et pour une partie Ω'_f d'espace poreux dans lequel circule un fluide (cf figure 1.2). Les frontières de Ω' , Ω'_s et Ω'_f sont notées respectivement $\partial\Omega'$, $\partial\Omega'_s$ et $\partial\Omega'_f$. Par ailleurs, $\partial\Omega'_{fs}$ désigne l'intersection entre $\partial\Omega'_s$ et $\partial\Omega'_f$ et $\partial\Omega'_{ff}$ l'intersection entre $\partial\Omega'$ et $\partial\Omega'_f$.

FIG. 1.2 – Ω' : cellule élémentaire adimensionnée du milieu périodique.

A l'échelle macroscopique, on peut considérer deux valeurs homogénéisées de w : sa moyenne apparente sur Ω'_f donnée par

$$\langle w \rangle_f(\underline{x}) = \frac{1}{|\Omega'_f|} \int_{\Omega'_f} w(\underline{x}, \underline{z}) dz \quad (1.6)$$

où $|\cdot|$ désigne la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d , et sa moyenne intrinsèque qui est donnée par

$$\bar{w}^f(\underline{x}) = \frac{1}{|\Omega'_f|} \int_{\Omega'_f} w(\underline{x}, \underline{z}) dz \quad (1.7)$$

Enfin, on utilisera à plusieurs reprises la décomposition

$$w = \bar{w}^f + \tilde{w} \quad (1.8)$$

où \tilde{w} désigne la fluctuation de w à l'échelle de la cellule élémentaire. Par construction, \tilde{w} est \underline{z} -périodique et de moyenne nulle sur Ω'_f .

Les moyennes intrinsèque et apparente sont liées par la porosité

$$\phi = \frac{|\Omega'_f|}{|\Omega'|} \quad (1.9)$$

sous la forme

$$\langle w \rangle_f = \phi \bar{w}^f. \quad (1.10)$$

Exemple 1.1. Soit w la fonction définie sur $\mathcal{C} = [0, 1]$ et à valeurs dans \mathbb{R} telle que $w(y) = y + \sin(100 \times 2\pi y)$. Soit $\Omega = [0, \frac{1}{100}]$ la cellule élémentaire de \mathcal{C} . Les grandeurs caractéristiques associées à ce système sont $L = 1$ et $\ell = \frac{1}{100}$. Les variables x et z sont définies par $x = \frac{1}{L}y$ et $z = \frac{1}{\ell}(y - \ell \left\lfloor \frac{Lx}{\ell} \right\rfloor)$ et $\Omega' = [0, 1]$. Ainsi $w(x, z) = Lx + \sin(2\pi(z + \left\lfloor \frac{Lx}{\ell} \right\rfloor)) = Lx + \sin(2\pi z)$, $w(x, z)$ est bien périodique en z sur Ω' et $\nabla_y w = \frac{1}{L} \nabla_x w + \frac{1}{\ell} \nabla_z w$ (cf figure 1.3).

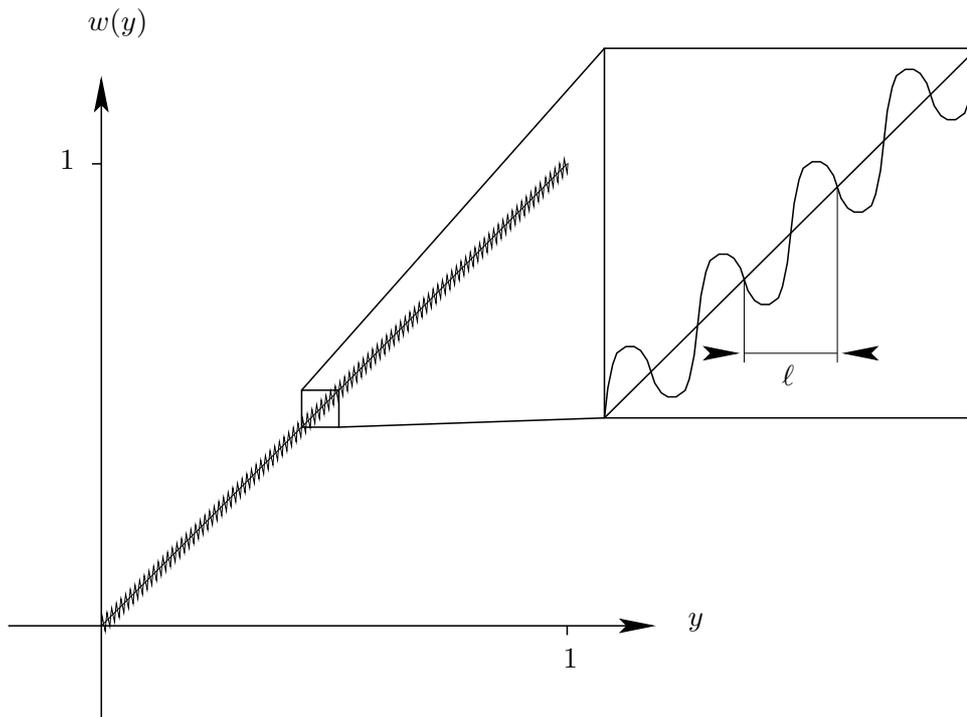


FIG. 1.3 – Exemple de comportement macroscopique et de fluctuation microscopique d'une fonction à valeurs scalaires.

1.2.3 Les grandes étapes du processus d'homogénéisation

La technique de développement asymptotique à double échelle dans le cadre des milieux poreux périodiques se déroule en sept étapes.

1. Exprimer toutes les quantités physiques (dépendant à l'origine de la variable \underline{y}) en fonction des deux variables \underline{x} et \underline{z} en supposant la périodicité par rapport à \underline{z} .
2. Formuler la description du système sous forme adimensionnée en introduisant des valeurs caractéristiques pour les quantités physiques.
3. Faire apparaître des paramètres sans dimension et les évaluer par rapport aux puissances entières de δ .
4. Chercher les inconnues du système sous forme de développements en fonction des puissances entières de δ :

$$w(\underline{x}, \underline{z}) = w^{(0)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta w^{(1)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta^2 w^{(2)}(\underline{x}, \underline{z}) + \dots \quad (1.11)$$

où toutes les fonctions $w^{(i)}$ sont réputées du même ordre et périodiques en \underline{z} .

5. Identifier les termes de même ordre dans les équations descriptives après y avoir introduit le développement précédent et extraire les problèmes aux limites correspondants.
6. Utiliser les opérateurs de moyenne pour construire les modèles décrivant le système homogénéisé à l'échelle macroscopique.
7. Vérifier que les estimations faites sur les quantités physiques et les paramètres sans dimension sont cohérentes.

Dans certains cas, la technique de développement asymptotique à double échelle ne permet pas d'homogénéiser le phénomène observé, mais d'autres méthodes d'homogénéisation, qui ne

reposent pas sur le développement (1.11), peuvent être plus fructueuses, comme par exemple en combinant les techniques d'homogénéisation avec les ondes de Bloch [AC96, AC98] ou encore en utilisant la méthode WKB [BLP78].

1.3 Organisation du mémoire

Ce mémoire est organisé en trois grands chapitres, une conclusion et une annexe.

Le **chapitre 2** est consacré au transport advectif monophasique en régime stationnaire. Nous présentons l'application de la méthode d'homogénéisation aux problèmes d'écoulements dans les milieux poreux périodiques et l'approximation du problème obtenu à l'échelle microscopique. Le but est de déterminer le champ de vitesse du fluide à partir de la morphologie des pores et du gradient de pression macroscopique. La connaissance de ce champ de vitesse est nécessaire pour l'étude du problème de transport d'un soluté en présence d'advection qui fait l'objet du chapitre 3. Les hypothèses faites pour modéliser l'écoulement sont les suivantes. Nous considérons l'espace poreux occupé par un fluide monophasique newtonien et incompressible. De plus nous supposons que l'écoulement est stationnaire et en régime laminaire. Ce type d'écoulement est régi par les équations de Stokes. L'homogénéisation de ce problème permet de retrouver la loi de Darcy à l'échelle macroscopique. Il s'agit de considérations très classiques qui sont reprises ici uniquement dans un souci de complétude de l'exposé. Le cœur du chapitre 2 est consacré à l'étude de diverses méthodes d'éléments finis permettant de construire une approximation satisfaisante du champ de vitesse à l'échelle microscopique. Après une présentation générale des techniques d'éléments finis (qui seront utilisées également dans le chapitre 3), une attention particulière est portée sur la qualité du champ de vitesse discret. Pour cela, nous comparons deux types d'éléments finis : les éléments finis de Lagrange de degré 1 stabilisés et les éléments finis mixtes de Crouzeix-Raviart. Un opérateur de projection sur les éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini est également utilisé en post-traitement des éléments finis mixtes pour obtenir un champ de vitesse discret conservatif (c'est-à-dire à divergence nulle) avec une bonne précision. Enfin, des résultats de calculs sont donnés, d'abord sur des géométries de pore simple, pour lesquelles une solution exacte est connue de manière analytique : il s'agit d'écoulements de Poiseuille entre deux plans infinis ou dans un cylindre. La précision des résultats numériques est ainsi évaluée, notamment l'ordre de convergence des approximations. Ensuite, le problème d'écoulement est résolu numériquement sur des réseaux cubiques et cubiques centrés de sphères en dimension 3 pour calculer les perméabilités correspondantes. En guise de complément, nous présentons des calculs de perméabilité pour des fluides non-newtoniens.

Dans le **chapitre 3**, nous abordons le transport diffusif et dispersif d'un soluté dissous dans un fluide monophasique en présence d'advection. Le but est de calculer les tenseurs adimensionnels de diffusion $\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}$ et de dispersion $\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}$ qui interviennent dans la formulation des flux diffusif $\underline{J}_{\gamma}^{\text{diff}}$ et dispersif $\underline{J}_{\gamma}^{\text{disp}}$ à l'échelle macroscopique en fonction du gradient macroscopique de concentration \underline{H} :

$$\underline{J}_{\gamma}^{\text{diff}} = -D_{\gamma} \underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H} \quad \text{et} \quad \underline{J}_{\gamma}^{\text{disp}} = -D_{\gamma} \underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H} \quad (1.12)$$

où D_{γ} est le coefficient de diffusion du soluté dans le solvant dans un domaine fluide infini. Le modèle utilisé pour décrire le transport du soluté à l'échelle microscopique combine la loi de Fick et l'équation de conservation de la masse du soluté. L'homogénéisation de ces équations permet de construire un problème de type advection-diffusion à l'échelle microscopique d'inconnue vectorielle et faisant intervenir le champ de vitesse microscopique du fluide. L'homogénéisation est faite sous l'hypothèse du régime d'advection dominante qui signifie que la vitesse associée aux processus de diffusion microscopique est du même ordre que la vitesse d'advection. Autrement

dit, le nombre de Péclet à l'échelle de la cellule élémentaire est de l'ordre de l'unité. La solution du problème d'advection-diffusion d'inconnue vectorielle fait le lien entre la fluctuation microscopique et le gradient macroscopique de concentration. Elle est utilisée avec le champ de vitesse et les opérateurs de moyenne pour calculer les tenseurs de diffusion et de dispersion. Nous présentons une analyse numérique de l'approximation de ce problème par les éléments finis de Lagrange de degré 1, en distinguant le type de champ de vitesse utilisé. Un des principaux résultats de cette analyse est que les trois champs de vitesse discrets obtenus au chapitre 2 conduisent à une approximation optimale du problème d'advection-diffusion, mais que le caractère non-conservatif du champ de vitesse discret conduit à un système linéaire mal posé si, comme il est naturel de le faire pour des raisons pratiques, on s'affranchit de la contrainte de moyenne nulle sur les fonctions de forme dans l'assemblage de la matrice de rigidité. Puis, la méthode d'approximation est validée sur des cas simples dont les solutions sont connues de manière analytique : il s'agit à nouveau d'écoulements de Poiseuille entre deux plans infinis ou dans un cylindre. Enfin, nous présentons les valeurs des tenseurs de diffusion et de dispersion sur des réseaux cubiques et cubiques centrés de sphères en dimension 3, en analysant l'influence de la vitesse d'écoulement et de la morphologie des pores sur les coefficients des tenseurs.

Les principaux résultats des chapitres 2 et 3 sont présentés dans [TdED06].

Le **chapitre 4** étend l'étude des chapitres 2 et 3 au cas du transport en milieu partiellement saturé en régime stationnaire. L'espace poreux est occupé par un gaz thermodynamiquement inerte et une espèce chimique présente sous forme liquide et sous forme vapeur. L'écoulement ne concerne que le mélange gazeux tandis que la phase liquide est isolée dans les pores sous forme de ménisques et se comporte comme la phase solide vis-à-vis du gaz. L'équilibre entre les deux phases est décrit par les lois de Kelvin et de Laplace qui font le lien entre la concentration de vapeur et le rayon de courbure des ménisques en passant par la pression capillaire. Deux aspects supplémentaires sont à prendre en compte par rapport au cas monophasique : la compressibilité du gaz pour la modélisation de l'écoulement et l'influence de la concentration de vapeur sur la morphologie des pores. L'étude est décomposée en deux parties : le cas de la diffusion pure en l'absence d'advection et le cas où la diffusion est couplée avec l'advection. La technique des développements asymptotiques à double échelle est utilisée pour construire les modèles microscopiques et macroscopiques à partir de la loi de Fick et de la conservation de la masse de vapeur pour la diffusion et à partir du problème de Stokes pour l'écoulement. Il apparaît que, par rapport au cas monophasique, la compressibilité du gaz ajoute un terme au flux dispersif dans l'équation de transport macroscopique. Cette contribution est liée à la fluctuation de la pression dans les pores. Les valeurs des tenseurs de diffusion et de dispersion pour des réseaux cubiques de sphères en dimension 3 sont données en exemple d'application numérique. Enfin, des simulations du transport à l'échelle macroscopique en dimension 1 ont été réalisées dans le cas de la diffusion pure.

Le **chapitre 5** tire les conclusions de cette étude et propose un certain nombre de perspectives.

L'ensemble des résultats numériques présentés dans ce mémoire ont été obtenus à l'aide de deux outils informatiques spécifiques qui ont été développés en langage FORTRAN. Le premier est un solveur éléments finis sur maillages tétraédriques non-structurés permettant de résoudre les différents problèmes posés à l'échelle du pore. Le deuxième est un pré-processeur permettant de mailler des surfaces courbes (comme des portions de sphères ou de tores), et qui est interfacé au mailleur tétraédrique « Tetmesh-GHS3D ».¹ **L'annexe** qui clot ce mémoire présente brièvement le mailleur surfacique.

¹<http://www.inria.fr/rapportsactivite/RA2005/gamma/uid31.html>

1.4 Principales notations

Une quantité vectorielle $\underline{w} \in \mathbb{R}^d$ est distinguée d'une quantité scalaire w en étant soulignée. Une quantité tensorielle $\underline{\underline{w}} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ est soulignée deux fois. En toute rigueur, les vecteurs sont des tenseurs d'ordre 1, et les grandeurs appelées tenseurs ici sont des tenseurs d'ordre 2.

Les coordonnées d'un vecteur \underline{w} dans le repère orthonormé $(\underline{e}_i)_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$ sont notées $(w_i)_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$ et celles du tenseur $\underline{\underline{w}}$ sont notées $(w_{ij})_{(i,j) \in \llbracket 1, d \rrbracket^2}$. La convention de sommation sur les indices répétés est utilisée (sauf mention contraire).

Le produit tensoriel contracté entre deux vecteurs \underline{w} et \underline{w}' s'écrit $\underline{w} \cdot \underline{w}' = w_i w'_i$. Il correspond au produit scalaire dans \mathbb{R}^d . Le produit tensoriel entre \underline{w} et \underline{w}' est noté $\underline{w} \otimes \underline{w}'$; il s'agit d'un tenseur d'ordre 2 dont les composantes valent $(\underline{w} \otimes \underline{w}')_{ij} = w_i w'_j$. Le produit tensoriel doublement contracté entre deux tenseurs $\underline{\underline{w}}$ et $\underline{\underline{w}'}$ s'écrit $\underline{\underline{w}} : \underline{\underline{w}'}$ et est égal au scalaire $w_{ij} w'_{ji}$.

Le gradient d'une fonction à valeurs scalaires $w(\underline{y})$ noté $\underline{\nabla}_y w$ a pour composantes $\left(\frac{\partial w}{\partial y_i} \right)_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$.

La divergence d'une fonction à valeurs vectorielles \underline{w} s'écrit $\underline{\nabla}_y \cdot \underline{w} = \frac{\partial w_i}{\partial y_i}$. L'opérateur de gradient peut aussi être appliqué à une fonction à valeurs vectorielles \underline{w} . Le résultat est un tenseur noté $\underline{\underline{\nabla}}_y w$ dont les composantes valent $\left(\underline{\underline{\nabla}}_y w \right)_{ij} = \frac{\partial w_i}{\partial y_j}$; celles-ci sont également notées $w_{i,j}$.

Le transposé de $\underline{\underline{\nabla}}_y w$ est le tenseur noté ${}^t \underline{\underline{\nabla}}_y w$ dont les composantes valent $\left({}^t \underline{\underline{\nabla}}_y w \right)_{ij} = w_{j,i}$.

De même, il est parfois nécessaire de calculer la divergence d'un tenseur $\underline{\underline{w}}$, dont le résultat est le vecteur de composantes $(\underline{\nabla}_y \cdot \underline{\underline{w}})_i = \frac{\partial w_{ij}}{\partial y_j} = w_{ij,j}$. Enfin l'opérateur laplacien Δ_y s'écrit

$\Delta_y = \underline{\underline{\nabla}}_y \cdot \underline{\underline{\nabla}}_y$. Ainsi $\Delta_y w = \frac{\partial^2 w}{\partial y_i^2}$ pour une fonction w à valeurs scalaires et $\Delta_y \underline{w} = (\Delta_y w_j) \underline{e}_j$ pour une fonction \underline{w} à valeurs vectorielles.

Chapitre 2

Transport advectif monophasique

2.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude de l'écoulement en régime stationnaire et laminaire d'un fluide monophasique, newtonien et incompressible à travers un milieu poreux périodique. Après avoir énoncé les équations de Stokes décrivant l'écoulement à l'échelle macroscopique, nous appliquons dans la section 2.2 la technique des développements asymptotiques à double échelle pour construire le problème d'écoulement à l'échelle du pore et pour retrouver la loi de Darcy à l'échelle macroscopique. Ensuite, dans la section 2.3 sont données les notations générales, les espaces d'éléments finis, et les propriétés liées aux techniques d'éléments finis utilisées dans ce chapitre et dans le chapitre 3. Les sections 2.4, 2.5 et 2.6 décrivent et analysent trois méthodes d'approximation du problème d'écoulement : la méthode des éléments finis de Lagrange de degré 1 stabilisés, la méthode des éléments finis mixtes de Crouzeix-Raviart et une projection du champ de vitesse obtenue par les éléments finis mixtes sur l'espace d'éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini, le but de cette projection étant de construire un champ de vitesse discret conservatif avec une précision suffisante. Dans la section 2.7, les résultats obtenus à l'aide de ces trois méthodes sont comparés avec des solutions analytiques obtenues sur des cas géométriquement simples. Enfin la dernière section du chapitre donne les valeurs du tenseur de perméabilité pour quelques exemples de réseaux cubiques de sphères en dimension 3, d'abord pour des fluides newtoniens, puis, par extension, pour des fluides non-newtoniens régis par une loi « puissance ». Ces derniers résultats permettent d'étudier l'évolution de la perméabilité en fonction du paramètre de la loi de comportement et en fonction du gradient de pression.

2.2 Construction du modèle

2.2.1 Equations à homogénéiser

Nous nous intéressons aux écoulements stationnaires et incompressibles de fluides newtoniens. Soit ϱ la masse volumique du fluide et \underline{v} le champ de vitesse. On rappelle que l'espace \mathbb{R}^d est équipé du repère orthonormé $(\underline{e}_i)_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$, les composantes de la variable spatiale \underline{y} dans ce repère sont désignées par $(y_i)_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$ et $\nabla_{\underline{y}}$ désigne l'opérateur de dérivation par rapport à \underline{y} .

En utilisant l'hypothèse d'incompressibilité, la forme locale de l'équation de conservation de la masse s'écrit

$$\nabla_{\underline{y}} \cdot \underline{v} = 0 \tag{2.1}$$

Par ailleurs, la forme locale de l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans le

fluide s'écrit

$$\rho \nabla_y \cdot (\underline{v} \otimes \underline{v}) = -\nabla_y p + \nabla_y \cdot \underline{\tau} \quad (2.2)$$

où la pression p inclut éventuellement la contribution hydrostatique due aux forces de pesanteur. Le tenseur $\underline{\tau}$ désigne le tenseur des contraintes visqueuses. Les fluides newtoniens sont caractérisés par l'expression de $\underline{\tau}$ en fonction de la déformation sous la forme

$$\underline{\tau} = \mu_1 (\underline{\nabla}_y v + {}^t \underline{\nabla}_y v) + \mu_2 (\nabla_y \cdot \underline{v})$$

où μ_1 et μ_2 sont les coefficients de Navier qui caractérisent le comportement visqueux du fluide : μ_1 correspond à la viscosité de cisaillement et μ_2 à la viscosité de volume [LL87]. Ces coefficients sont supposés constants. En utilisant (2.1) et le fait que $\nabla_y \cdot {}^t \underline{\nabla}_y v = \underline{\nabla}_y (\nabla_y \cdot \underline{v}) = 0$ et que $\nabla_y \cdot (\underline{\nabla}_y v) = \Delta_y v$, l'équation de bilan de la quantité de mouvement se simplifie sous la forme

$$\rho \nabla_y \cdot (\underline{v} \otimes \underline{v}) = -\nabla_y p + \mu_1 \Delta_y v$$

Dans le cadre du régime laminaire, la taille des pores et la vitesse d'écoulement sont suffisamment faibles pour que le nombre de Reynolds caractérisant l'écoulement soit inférieur ou égal à 1. Ainsi, les termes convectifs (ou inertiels) de l'équation de bilan de la quantité de mouvement peuvent être négligés. Pour une étude détaillée de l'influence de ces effets dans les écoulements à travers des milieux poreux périodiques, on pourra consulter la référence [MPM00] qui analyse la dérivation de lois de filtration non-linéaires incluant les effets inertiels. Des lois de filtration non-linéaires dues aux effets inertiels ont également été obtenues dans [BMP98] pour des écoulements dans des canaux avec étranglements périodiques. Enfin, des simulations numériques prenant en compte les effets inertiels ont été récemment réalisées dans [Tra00].

Du fait que les effets inertiels sont négligés, le système décrivant le comportement du fluide s'écrit

$$\begin{cases} -\mu_1 \Delta_y v + \nabla_y p = \underline{0} & \text{(phase fluide)} \\ \nabla_y \cdot \underline{v} = 0 & \text{(phase fluide)} \end{cases} \quad (2.3)$$

Il correspond donc au problème de Stokes. Ce problème est complété par les conditions aux limites d'adhérence :

$$\underline{v} = \underline{0} \quad \text{(interfaces fluide-solide)}.$$

2.2.2 Développement asymptotique à double échelle

On applique la séparation des échelles et on introduit les variables spatiales adimensionnées \underline{x} et \underline{z} au système (2.3). Il vient

$$\begin{cases} -\mu_1 \left[\frac{1}{\ell^2} \Delta_z v + \frac{1}{L^2} \Delta_x v + \frac{1}{\ell L} (\nabla_x \cdot \underline{\nabla}_z v + \nabla_z \cdot \underline{\nabla}_x v) \right] + \frac{1}{\ell} \nabla_z p + \frac{1}{L} \nabla_x p = \underline{0} \\ \frac{1}{\ell} \nabla_z \cdot \underline{v} + \frac{1}{L} \nabla_x \cdot \underline{v} = 0 \end{cases}$$

L'écoulement est induit par un gradient de pression macroscopique $\underline{\alpha}$ d'ordre de grandeur α . L'ordre de grandeur de la pression est donc $L\alpha$. De plus, on suppose que le terme des contraintes visqueuses de l'échelle microscopique, c'est-à-dire le terme $-\frac{\mu_1}{\ell^2} \Delta_z v$, compense le terme du gradient de pression macroscopique, c'est-à-dire le terme $\frac{1}{L} \nabla_x p$. En conséquence, il est naturel de

fixer la taille caractéristique de la vitesse à $\frac{\alpha\ell^2}{\mu_1}$. L'introduction de la vitesse et de la pression adimensionnées sous la forme

$$p = L\alpha p' \quad \text{et} \quad \underline{v} = \frac{\alpha\ell^2}{\mu_1} \underline{v}' \quad (2.4)$$

conduit au système

$$\begin{cases} - \left[\alpha \Delta_z \underline{v}' + \frac{\alpha\ell^2}{L^2} \Delta_x \underline{v}' + \frac{\alpha\ell}{L} (\underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \underline{v}' + \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \underline{v}') \right] + \frac{\alpha L}{\ell} \underline{\nabla}_z p' + \alpha \underline{\nabla}_x p' = \underline{0} \\ \alpha \ell \underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}' + \frac{\alpha\ell^2}{L} \underline{\nabla}_x \cdot \underline{v}' = 0 \end{cases}$$

En simplifiant la première équation par α et la deuxième par $\frac{\alpha\ell^2}{L}$, tous les coefficients multiplicatifs des opérateurs de dérivation peuvent être exprimés en fonction des puissances de $\delta = \frac{\ell}{L}$. Après changement de variable et adimensionnement le problème s'écrit :

$$\begin{cases} - \Delta_z \underline{v}' - \delta (\underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \underline{v}' + \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \underline{v}') - \delta^2 \Delta_x \underline{v}' + \frac{1}{\delta} \underline{\nabla}_z p' + \underline{\nabla}_x p' = \underline{0} \\ \frac{1}{\delta} \underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}' + \underline{\nabla}_x \cdot \underline{v}' = 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

En développant les inconnues selon les puissances de δ , les équations peuvent être divisées selon les différents ordres de grandeur qui les composent. Les champs de vitesse et de pression sont décomposés sous la forme

$$\begin{aligned} p'(\underline{x}, \underline{z}) &= p^{(0)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta p^{(1)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta^2 p^{(2)}(\underline{x}, \underline{z}) + \dots \\ \underline{v}'(\underline{x}, \underline{z}) &= \underline{v}^{(0)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta \underline{v}^{(1)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta^2 \underline{v}^{(2)}(\underline{x}, \underline{z}) + \dots \end{aligned} \quad (2.6)$$

où les fonctions $p^{(i)}$ et $\underline{v}^{(i)}$ sont réputées du même ordre et \underline{z} -périodiques.

L'ordre δ^{-1} dans la première équation du système (2.5) donne

$$\underline{\nabla}_z p^{(0)} = 0 \quad \Rightarrow \quad p^{(0)}(\underline{x}, \underline{z}) = p^{(0)}(\underline{x}) \quad \text{et} \quad \tilde{p}^{(0)} = 0 \quad (2.7)$$

L'ordre δ^0 dans la première équation du système (2.5) et **l'ordre** δ^{-1} dans la deuxième donnent :

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{v}^{(0)} + \underline{\nabla}_z p^{(1)} + \underline{\nabla}_x p^{(0)} = \underline{0} & (\Omega'_f) \\ \underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \underline{v}^{(0)} = \underline{0} & (\partial\Omega'_{fs}) \end{cases} \quad (2.8)$$

Rappelons que $p^{(1)}$ peut s'écrire $p^{(1)} = \overline{p^{(1)}}^f + \tilde{p}^{(1)}$, où $\tilde{p}^{(1)}$ est \underline{z} -périodique et de moyenne nulle. Les dérivées selon \underline{z} de $\overline{p^{(1)}}^f$ sont nulles donc, dans le système (2.8), le terme $\underline{\nabla}_z p^{(1)}$ est égal à $\underline{\nabla}_z \tilde{p}^{(1)}$. Par ailleurs, le terme $\underline{\nabla}_x p^{(0)}$ correspond au gradient macroscopique de pression adimensionné. On le désigne par \underline{e}_α où \underline{e}_α est un vecteur unitaire. En tenant compte des conditions périodiques et des conditions aux limites, le système devient

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{v}^{(0)} + \underline{\nabla}_z \tilde{p}^{(1)} = -\underline{e}_\alpha & (\Omega'_f) \\ \underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \underline{v}^{(0)} = \underline{0} & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \underline{v}^{(0)} \text{ et } \tilde{p}^{(1)} \text{ } \underline{z}\text{-périodiques sur } (\partial\Omega'_{ff}) & \text{et} \quad \int_{\Omega'_f} \tilde{p}^{(1)} dz = 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

Dans le système (2.9) le champ de vitesse dépend linéairement du gradient de pression macroscopique \underline{e}_α . Il existe donc un tenseur de localisation $\underline{k}(\underline{z})$ tel que $\underline{v}^{(0)} = -\underline{k} \cdot \underline{e}_\alpha$. En revenant aux quantités dimensionnées, cette égalité moyennée sur Ω'_f conduit à la loi de Darcy à l'ordre δ^0 :

$$\langle \underline{v} \rangle_f = -\phi \frac{\ell^2 \bar{k}}{\mu_1} \cdot \underline{\alpha} + O(\delta)$$

où $\langle \underline{v} \rangle_f$ correspond à la vitesse de filtration. Ainsi, $\underline{K} = \phi \frac{\ell^2 \bar{k}}{\mu_1}$ désigne la perméabilité du milieu par rapport au fluide considéré, et $\underline{K}' = \phi \ell^2 \bar{k}$ la perméabilité intrinsèque du milieu.

Validité des modèles

Soit Υ_{av} la norme de la moyenne sur Ω'_f du terme du premier ordre de la vitesse adimensionnée, $\underline{v}^{(0)}$, solution du problème (2.9). C'est un paramètre sans dimension qui dépend uniquement de la morphologie de Ω'_f . Dans les cas étudiés ici, ce paramètre prend des valeurs comprises entre 1e-2 et 1e-3. On peut donc affiner l'ordre de grandeur de la vitesse en introduisant la quantité V qui a les dimensions d'une vitesse et qui est donnée par

$$V = \frac{\alpha \ell^2}{\mu_1} \Upsilon_{av} \quad (2.10)$$

La validité du problème de Stokes pour décrire l'écoulement du fluide dépend du nombre de Reynolds

$$\text{Re} = \frac{\rho V \ell}{\mu_1} = \frac{\rho \Upsilon_{av} \alpha \ell^3}{\mu_1^2} \quad (2.11)$$

Le modèle de Stokes est justifié si $\text{Re} \leq 1$. Cette condition fixe une borne supérieure pour la valeur du gradient de pression en fonction des propriétés du fluide et de la morphologie du pore :

$$\alpha \leq \frac{\mu_1^2}{\rho \Upsilon_{av} \ell^3}. \quad (2.12)$$

A titre d'exemple, dans le cas où le fluide est de l'eau pour laquelle $\rho = 1\text{e-}3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $\mu_1 \approx 1\text{e-}3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ et où la taille caractéristique des pores vaut $\ell = 1\text{e-}3 \text{ m}$ (pour un sable grossier par exemple), la condition de validité devient $\alpha \leq 1\text{e-}6 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-2}$ si $\Upsilon_{av} = 1$ et $\alpha \leq 1\text{e-}4 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-2}$ si $\Upsilon_{av} = 1\text{e-}2$.

Analyse des ordres supérieurs

L'analyse des ordres supérieurs du système (2.5) fournit des propriétés du champ de vitesse qui seront utiles dans l'étude du problème d'advection-diffusion (cf section 3.2.2).

L'ordre δ^1 dans la première équation du système (2.5) et **l'ordre δ^0** dans la deuxième donnent :

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\Delta_z \underline{v}^{(1)} - \left(\underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \underline{v}^{(0)} + \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \underline{v}^{(0)} \right) + \underline{\nabla}_z p^{(2)} + \underline{\nabla}_x p^{(1)} = \underline{0} & (\Omega'_f) \\ \underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{(1)} + \underline{\nabla}_x \cdot \underline{v}^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \underline{v}^{(1)} = \underline{0} & (\partial\Omega'_{fs}) \end{array} \right. \quad (2.13)$$

La moyenne intrinsèque de la deuxième équation de (2.13) donne

$$\overline{\underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{(1)}}^f + \underline{\nabla}_x \cdot \overline{\underline{v}^{(0)}}^f = 0$$

En utilisant la périodicité de $\underline{v}^{(1)}$ en \underline{z} sur $\partial\Omega'_{\text{ff}}$ et la condition de Dirichlet sur $\partial\Omega'_{\text{fs}}$, on montre que

$$\overline{\underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{(1)}}^f = 0 \quad (2.14)$$

En conséquence,

$$\underline{\nabla}_x \cdot \overline{\underline{v}^{(0)}}^f = 0 \quad (2.15)$$

L'ordre δ^2 dans la première équation du système (2.5) et **l'ordre** δ^1 dans la deuxième donnent

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{v}^{(2)} - (\underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \underline{v}^{(1)} + \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \underline{v}^{(1)}) - \Delta_x \underline{v}^{(0)} + \underline{\nabla}_z p^{(3)} + \underline{\nabla}_x p^{(2)} = \underline{0} & (\Omega'_f) \\ \underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{(2)} + \underline{\nabla}_x \cdot \underline{v}^{(1)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \underline{v}^{(2)} = \underline{0} & (\partial\Omega'_{\text{fs}}) \end{cases} \quad (2.16)$$

En raisonnant comme ci-dessus sur la moyenne intrinsèque de la deuxième équation de (2.16), on obtient

$$\overline{\underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{(2)}}^f = 0 \quad \text{et} \quad \underline{\nabla}_x \cdot \overline{\underline{v}^{(1)}}^f = 0 \quad (2.17)$$

2.2.3 Formulation mathématique et caractère bien posé

Pour simplifier les notations, le champ de vitesse $\underline{v}^{(0)}$ dans le système (2.9) est remplacé par \underline{v} et la fluctuation microscopique de pression $\tilde{p}^{(1)}$ est remplacée par p . Comme tous les opérateurs de dérivation sont relatifs à la variable microscopique \underline{z} , la notation en indice est abandonnée. Enfin, la notation prime en exposant pour les domaines de calcul dans l'espace adimensionné est abandonnée. Le problème d'inconnues \underline{v} et p , étudié ici, s'écrit

$$\begin{cases} -\Delta \underline{v} + \underline{\nabla} p = -\underline{e}_\alpha & (\Omega_f) \\ \underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 & (\Omega_f) \\ \underline{v} = \underline{0} & (\partial\Omega_{\text{fs}}) \\ \underline{v} \text{ et } p \text{ périodiques} & (\partial\Omega_{\text{ff}}) \end{cases} \quad \text{et} \quad \int_{\Omega_f} p dz = 0 \quad (2.18)$$

Soit φ une fonction suffisamment régulière. On multiplie la première équation du système (2.18) par φ puis on intègre sur (Ω_f) :

$$-\int_{\Omega_f} \Delta \underline{v} \cdot \underline{\varphi} dz + \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} p \cdot \underline{\varphi} dz = -\int_{\Omega_f} \underline{e}_\alpha \cdot \underline{\varphi} dz$$

Les termes du membre de gauche sont intégrés par parties :

$$\int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \underline{v} : \underline{\nabla} \underline{\varphi} dz - \int_{\partial\Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{v} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{\varphi} dS_z - \int_{\Omega_f} p (\underline{\nabla} \cdot \underline{\varphi}) dz + \int_{\partial\Omega_f} p (\underline{\varphi} \cdot \underline{n}) dS_z = -\int_{\Omega_f} \underline{e}_\alpha \cdot \underline{\varphi} dz$$

La fonction φ est choisie nulle sur $\partial\Omega_{\text{fs}}$ et périodique sur $\partial\Omega_{\text{ff}}$, car on sait que le champ de vitesse satisfait ces propriétés. On fait l'hypothèse que le champ \underline{v} est suffisamment régulier pour

que $\underline{\nabla}v \cdot \underline{n}$ soit anti-périodique sur $\partial\Omega_{\text{ff}}$. Cette dernière propriété est importante car elle exprime l'équilibre des contraintes normales d'une cellule élémentaire à l'autre. Avec ces hypothèses et en décomposant $\partial\Omega_f$ selon $\partial\Omega_{\text{fs}}$ et $\partial\Omega_{\text{ff}}$, on montre que le terme $\int_{\partial\Omega_f} (\underline{\nabla}v \cdot \underline{n}) \cdot \underline{\varphi} \, dS_z$ est nul. De même, $\underline{\varphi}$ étant nul sur $\partial\Omega_{\text{fs}}$, et $\underline{\varphi}$ et p étant périodiques,

$$\int_{\partial\Omega_f} p(\underline{\varphi} \cdot \underline{n}) \, dS_z = 0$$

On définit les espaces suivants :

$$\mathcal{C}_{\text{per}}^\infty(\overline{\Omega_f}) = \{ \varphi \in \mathcal{C}^\infty(\overline{\Omega_f}) ; \varphi \text{ périodique sur } \partial\Omega_{\text{ff}} \}$$

$$L_{\text{per}}^2(\Omega_f) = \overline{\mathcal{C}_{\text{per}}^\infty(\overline{\Omega_f})}^{L^2}$$

$$H_{\text{per}}^1(\Omega_f) = \overline{\mathcal{C}_{\text{per}}^\infty(\overline{\Omega_f})}^{H^1}$$

On définit également

$$\mathcal{X} = \left\{ \underline{\varphi} \in (H_{\text{per}}^1(\Omega_f))^d ; \underline{\varphi}|_{\partial\Omega_{\text{fs}}} = \underline{0} \right\}$$

$$\mathcal{M} = \left\{ q \in L_{\text{per}}^2(\Omega_f) ; \int_{\Omega_f} q \, dz = 0 \right\}$$

La formulation faible du problème (2.18) consiste à trouver $(\underline{v}, p) \in \mathcal{X} \times \mathcal{M}$ tels que

$$\begin{cases} \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}v : \underline{\nabla}\varphi \, dz - \int_{\Omega_f} p(\underline{\nabla} \cdot \underline{\varphi}) \, dz = - \int_{\Omega_f} \underline{e}_\alpha \cdot \underline{\varphi} \, dz \\ \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \cdot \underline{v})q \, dz = 0 \end{cases} \quad \forall (\underline{\varphi}, q) \in \mathcal{X} \times \mathcal{M} \quad (2.19)$$

Théorème 2.1. Le problème (2.19) admet une et une seule solution.

Preuve. Il est clair que \mathcal{X} et \mathcal{M} sont des espaces de Hilbert. De plus, par l'inégalité de Poincaré, la forme bilinéaire $a(\underline{w}, \underline{\varphi}) = \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}w : \underline{\nabla}\varphi \, dz$ est \mathcal{X} -coercive. Afin d'établir le caractère bien posé de (2.19), il reste à montrer la condition inf-sup [GR86, BF91, BS94, Gal94, EG04]

$$\inf_{p \in \mathcal{M}} \sup_{\underline{\varphi} \in \mathcal{X}} \frac{\int_{\Omega_f} p(\underline{\nabla} \cdot \underline{\varphi}) \, dz}{\|p\|_{\mathcal{M}} \|\underline{\varphi}\|_{\mathcal{X}}} \geq \beta > 0$$

qui résulte de la surjectivité de l'opérateur $(\underline{\nabla} \cdot) : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{M}$. □

On observe que si le domaine de calcul Ω_f est suffisamment régulier, en particulier s'il ne contient pas de coins rentrants, la solution (\underline{v}, p) de (2.19) est plus régulière. En effet,

$$\underline{v} \in (H^2(\Omega_f))^d \quad \text{et} \quad p \in H^1(\Omega_f). \quad (2.20)$$

Ces conditions seront utiles pour obtenir des résultats de convergence optimaux pour la méthode des éléments finis décrite dans les sections suivantes. Par la suite, l'hypothèse de régularité (2.20) est systématiquement conservée.

2.3 Discrétisation du problème

Pour un domaine Ω_f quelconque, il n'est pas possible de calculer une solution analytique exacte du problème (2.19), surtout si la morphologie de Ω_f est compliquée. En revanche, il existe des méthodes numériques permettant d'approcher la solution du problème (2.19) avec une très bonne précision grâce à la puissance de calcul des ordinateurs. Dans cette section, la technique des éléments finis est présentée et appliquée au problème (2.19).

La méthode des éléments finis permet de transformer un problème continu où la solution vit dans un espace de dimension infinie en un système linéaire de dimension finie. Elle consiste à discrétiser le domaine de calcul en le subdivisant en éléments géométriques simples appelés mailles, puis à construire des espaces fonctionnels de dimension finie basés sur la discrétisation du domaine et dans lesquels est cherchée une solution approchée du problème continu. La discrétisation du domaine de calcul peut être plus ou moins fine, entraînant la construction d'espaces fonctionnels plus ou moins grands et, par suite, une approximation de la solution plus ou moins précise. Une revue détaillée de la méthode des éléments finis est disponible dans [Cia91, BS94, EG04].

Nous utiliserons plusieurs normes pour l'analyse numérique des méthodes d'éléments finis. En particulier, lorsque deux indices interviennent dans l'écriture d'une norme sous la forme $\|\cdot\|_{s,\Omega}$ où s est un entier, il s'agit de la norme canonique de l'espace de Sobolev (hilbertien) $H^s(\Omega)$. Par ailleurs, $\|\cdot\|_{\infty,\Omega}$ désigne la norme canonique de $L^\infty(\Omega)$. Les mêmes notations sont employées pour des fonctions à valeurs vectorielles.

2.3.1 Généralités sur les maillages

Soit $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ une famille de maillages conformes de Ω_f , formés de simplexes (triangles en dimension 2 ou tétraèdres en dimension 3). Un maillage est conforme si l'intersection entre deux simplexes distincts est une face, une arête, un sommet ou l'ensemble vide. L'indice h représente le pas maximal du maillage, c'est-à-dire le plus grand diamètre des éléments de \mathcal{T}_h . Dans la suite, c désigne un réel positif indépendant de h . Il se peut que \mathcal{T}_h ne recouvre pas parfaitement le domaine Ω_f , lorsque celui-ci n'est pas polyédrique. Cependant, le domaine recouvert par \mathcal{T}_h est désigné également par Ω_f pour ne pas alourdir les notations. Comme les éléments finis que nous utiliserons dans le cadre de ce mémoire pour approcher les problèmes sont tous de degré inférieur ou égal à 1, il n'est pas nécessaire de discrétiser le domaine avec plus de précision. Par contre, cela se serait avéré nécessaire si on avait travaillé avec des éléments finis de degré 2 auquel cas une approximation isoparamétrique de Ω_f (par des triangles courbes) aurait été nécessaire.

Pour pouvoir tenir compte des conditions aux limites périodiques, il est commode que les maillages possèdent une propriété supplémentaire. Pour tout $i \in \llbracket 1, d \rrbracket$, la trace du maillage sur le plan $(\underline{z} \cdot \underline{e}_i = \frac{a_i}{\ell})$ doit être l'image par translation de vecteur $\frac{a_i}{\ell} \underline{e}_i$ de la trace du maillage sur le plan $(\underline{z} \cdot \underline{e}_i = 0)$.

Par ailleurs, nous n'aurons pas à traiter de problème présentant des couches limites pour lesquelles des maillages localement raffinés s'avèrent nécessaires. Nous utiliserons donc uniquement des maillages quasi-uniformes. La taille de tous les simplexes de \mathcal{T}_h est donc équivalente à h .

2.3.2 Faces du maillage

Pour tout $K \in \mathcal{T}_h$, $\mathcal{F}(K)$ désigne l'ensemble des faces de K . Les faces de K sont des triangles en dimension 3 et des segments en dimension 2. L'ensemble des faces de \mathcal{T}_h est noté

$$\mathcal{F}_h^\# = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \mathcal{F}(K).$$

Il se décompose en 4 sous-ensembles

$$\mathcal{F}_h^\# = \underbrace{\mathcal{F}_h^i \cup \mathcal{F}_h^{\text{fs}} \cup \mathcal{F}_h^{\text{ff}} \cup \mathcal{F}_h^{\text{ff}'}}_{\mathcal{F}_h}$$

où

- \mathcal{F}_h^i désigne l'ensemble des faces intérieures du maillage. Autrement dit F appartient à \mathcal{F}_h s'il existe $K_1(F)$ et $K_2(F)$ dans \mathcal{T}_h tels que $F = K_1(F) \cap K_2(F)$. Pour tout $F \in \mathcal{F}_h^i$, \underline{n}_F désigne le vecteur normal unitaire orienté de $K_1(F)$ vers $K_2(F)$ et $\mathcal{T}(F) = \{K_1(F), K_2(F)\}$. Pour toute fonction w suffisamment régulière (pour que ses restrictions à $K_1(F)$ et $K_2(F)$ admettent une trace sur F), le saut de w au travers de F est défini par $\llbracket w \rrbracket_F = w|_{K_1(F)} - w|_{K_2(F)}$. L'opérateur de saut est étendu aux fonctions à valeurs vectorielles en utilisant la même notation. Rien de ce qui est dit par la suite ne dépend du caractère arbitraire de l'orientation de \underline{n}_F .
- $\mathcal{F}_h^{\text{fs}}$ désigne les faces du maillage situées sur $\partial\Omega_{\text{fs}}$. Pour tout $F \in \mathcal{F}_h^{\text{fs}}$, \underline{n}_F désigne le vecteur normal de F orienté vers l'extérieur de Ω_f , $K(F)$ l'élément du maillage auquel appartient F , $\mathcal{T}(F) = \{K(F)\}$ et pour toute fonction w suffisamment régulière, $\llbracket w \rrbracket_F = w|_{K(F)}$.
- Par périodicité, l'ensemble des faces de $\partial\Omega_{\text{ff}}$ est partitionné en deux sous-ensembles $\mathcal{F}_h^{\text{ff}}$ et $\mathcal{F}_h^{\text{ff}'}$. Pour toute face $F \in \mathcal{F}_h^{\text{ff}}$, $K_1(F)$ et $K_2(F)$ désignent les éléments de \mathcal{T}_h partageant F par périodicité de telle sorte que $F \subset \partial K_1(F)$. Alors \underline{n}_F , $\mathcal{T}(F)$ et $\llbracket w \rrbracket_F$ sont définis comme pour $F \in \mathcal{F}_h^i$. Pour $F \in \mathcal{F}_h^{\text{ff}'}$, \underline{n}_F et $\llbracket w \rrbracket_F$ prennent les mêmes valeurs que sur la face correspondante de $\mathcal{F}_h^{\text{ff}}$.

Pour toute face F de $\mathcal{F}_h^\#$, h_F désigne le diamètre de F et $|F|$ sa mesure dans \mathbb{R}^{d-1} . De même pour tout $K \in \mathcal{T}_h$, h_K désigne le diamètre de K et $|K|$ sa mesure dans \mathbb{R}^d . Puisque les maillages utilisés sont quasi-uniformes, il existe une constante c telle que pour tout $F \in \mathcal{F}_h^\#$, $h \leq ch_F$.

2.3.3 Espaces d'éléments finis

Soit \mathbb{P}^k l'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à k . Soit les espaces d'éléments finis suivants (notons qu'on n'impose pas de conditions de périodicité dans ces espaces) :

- Eléments finis discontinus :

$$P_h^0 = \{\varphi_h \in L^2(\Omega_f); \forall K \in \mathcal{T}_h, \varphi_h|_K \in \mathbb{P}^0\}$$

$$P_h^1 = \{\varphi_h \in L^2(\Omega_f); \forall K \in \mathcal{T}_h, \varphi_h|_K \in \mathbb{P}^1\}$$

- Eléments finis de Lagrange

$$P_{\text{Lag},h}^1 = \{\varphi_h \in P_h^1; \forall F \in \mathcal{F}_h^i, \llbracket \varphi_h \rrbracket_F = 0\}$$

$$P_{\text{Lag},0,h}^1 = \{\varphi_h \in P_{\text{Lag},h}^1; \forall F \in \mathcal{F}_h^{\text{fs}} \cup \mathcal{F}_h^{\text{ff}}, \llbracket \varphi_h \rrbracket_F = 0\}$$

$$P_{\text{Lag},h,*}^1 = \left\{ \varphi_h \in P_{\text{Lag},h}^1; \int_{\Omega_f} \varphi_h = 0, \forall F \in \mathcal{F}_h^{\text{ff}}, \llbracket \varphi_h \rrbracket_F = 0 \right\}$$

L'espace $P_{\text{Lag},h}^1$ est l'espace usuel des éléments finis de Lagrange de degré 1 construit sur les éléments du maillage \mathcal{T}_h . Les fonctions qu'il contient sont continues à cause de la condition de saut nul sur les faces intérieures du maillage. La restriction de chaque fonction de $P_{\text{Lag},h}^1$ à un élément K de \mathcal{T}_h est un polynôme de degré inférieur ou égal à 1. L'espace $P_{\text{Lag},h,0}^1$ est inclus dans $P_{\text{Lag},h}^1$. Par rapport à ce dernier, il intègre les conditions de Dirichlet homogènes sur les faces de $\mathcal{F}_h^{\text{fs}}$ qui correspondent à l'interface fluide-solide et les conditions de périodicité sur les faces de $\mathcal{F}_h^{\text{ff}}$.

- Éléments finis de Crouzeix-Raviart :

$$P_{\text{CR},h}^1 = \left\{ \varphi_h \in L^2(\Omega_f); \forall K \in \mathcal{T}_h, \varphi_h|_K \in \mathbb{P}^1(K); \forall F \in \mathcal{F}_h^i, \int_F [[\varphi_h]]_F dS_z = 0 \right\}$$

$$P_{\text{CR},h,0}^1 = \left\{ \varphi_h \in P_{\text{CR},h}^1; \forall F \in \mathcal{F}_h^{\text{fs}} \cup \mathcal{F}_h^{\text{ff}}, \int_F [[\varphi_h]]_F = 0 \right\}$$

L'espace $P_{\text{CR},h}^1$ est l'espace usuel des éléments finis de Crouzeix-Raviart [CR73]. La deuxième condition caractérisant l'espace $P_{\text{CR},h}^1$ est équivalente à la continuité de φ au barycentre de la face F . L'espace $P_{\text{CR},h,0}^1$ intègre les conditions de Dirichlet homogènes sur les faces de $\mathcal{F}_h^{\text{fs}}$ et les conditions de périodicité sur les faces de $\mathcal{F}_h^{\text{ff}}$.

- Éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini [BDM85] :

$$P_{\text{BDM},h}^1 = \left\{ \underline{v}_h \in H(\text{div}, \Omega_f); \forall K \in \mathcal{T}_h, \underline{v}_h|_K \in (\mathbb{P}^1(K))^d \right\},$$

$$\text{où } H(\text{div}, \Omega_f) = \left\{ \underline{v} \in (L^2(\Omega_f))^d; \nabla \cdot \underline{v} \in L^2(\Omega_f) \right\}.$$

Les inégalités suivantes nous seront utiles par la suite. Elles sont rappelées ici sans démonstration [Cia91, BS94].

Lemme 2.2. Soit $K \in \mathcal{T}_h$. Il existe $c > 0$ tel que pour tout $\psi_h \in P_h^1$ et pour tout $F \in \mathcal{F}(K)$ nous avons les inégalités inverses :

$$\|\psi_h\|_{\infty, F} \leq ch_F^{\frac{1-d}{2}} \|\psi_h\|_{0, F} \quad (2.21)$$

$$\|\psi_h\|_{0, F} \leq ch_F^{-\frac{1}{2}} \|\psi_h\|_{0, K} \quad (2.22)$$

$$\|\nabla \psi_h\|_{0, K} \leq ch_K^{-1} \|\psi_h\|_{0, K} \quad (2.23)$$

2.3.4 Construction des fonctions de base

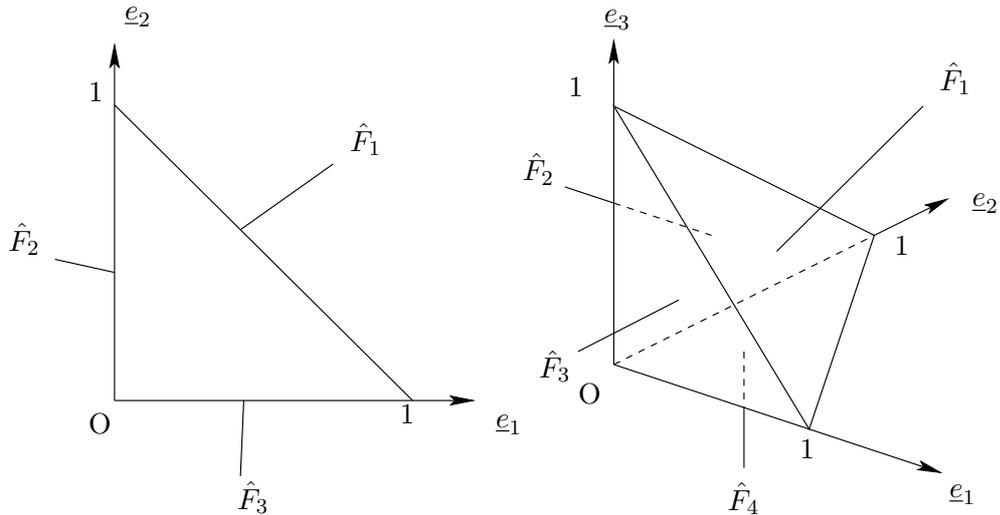


FIG. 2.1 – Élément de référence \hat{K} en dimension 2 et 3.

En général, pour des raisons de simplicité, les fonctions de base des espaces d'éléments finis sont calculées à partir de l'élément de référence \hat{K} (cf figure 2.1). Pour tout $K \in \mathcal{T}_h$, T_K désigne l'application affine qui permet de passer de \hat{K} à K . Soit \underline{J} la matrice jacobienne de l'application

T_K et $|J|$ son déterminant. Pour les éléments finis de type Lagrange, une fonction de base θ définie sur le simplexe $K \in \mathcal{T}_h$ s'exprime en fonction de la fonction de base correspondante $\hat{\theta}$ définie sur \hat{K} de la manière suivante

$$\theta = \hat{\theta} \circ T_K^{-1} \quad \Rightarrow \quad \underline{\nabla} \theta = \underline{J}^{-1} \cdot (\underline{\nabla} \hat{\theta} \circ T_K^{-1})$$

Pour les éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini, chaque fonction de base $\underline{\theta}$ définie sur $K \in \mathcal{T}_h$ est donnée en fonction de $\hat{\underline{\theta}}$, la fonction de base correspondante définie sur \hat{K} par la relation

$$\underline{\theta} = \frac{1}{|J|} \underline{J} \cdot (\hat{\underline{\theta}} \circ T_K^{-1})$$

2.3.5 Quadratures

k	l	Coordonnées barycentriques	Multiplicité	Poids
3	4	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$	1	$-\frac{9}{16} S$
		$(\frac{1}{5}, \frac{1}{5}, \frac{3}{5})$	3	$\frac{25}{48} S$
5	7	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$	1	$\frac{9}{40}$
		$(a_i, a_i, 1 - 2a_i), i \in \llbracket 1, 2 \rrbracket$	3	
		$a_1 = \frac{6 - \sqrt{15}}{21}$ $a_2 = \frac{6 + \sqrt{15}}{21}$		$\frac{155 - \sqrt{15}}{1200} S$ $\frac{155 + \sqrt{15}}{1200} S$

TAB. 2.1 – Nœuds et poids pour des quadratures sur un triangle de surface S.

k	l	Coordonnées barycentriques	Multiplicité	Poids
3	5	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	1	$-\frac{4}{5} V$
		$(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{2})$	4	$\frac{9}{20} V$
5	15	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	1	$\frac{16}{135} V$
		$(a_i, a_i, a_i, 1 - 3a_i), i \in \llbracket 1, 2 \rrbracket$	4	
		$a_1 = \frac{7 - \sqrt{15}}{34}$ $a_2 = \frac{7 + \sqrt{15}}{34}$		$\frac{2665 + 14\sqrt{15}}{37800} V$ $\frac{2665 - 14\sqrt{15}}{37800} V$
		$(a, a, \frac{1}{2} - a, \frac{1}{2} - a)$ $a = \frac{10 - 2\sqrt{15}}{40}$	6	$\frac{10}{189} V$

TAB. 2.2 – Nœuds et poids pour des quadratures sur un tétraèdre de volume V.

Les intégrales qui apparaissent dans la construction des systèmes linéaires issus de la discrétisation par éléments finis et dans le calcul de l'erreur d'approximation lors de la validation des méthodes sur des cas tests analytiques ou des grandeurs moyennes sont évaluées numériquement à l'aide de quadratures sur chaque élément $K \in \mathcal{T}_h$ [HS56, Str69, Str71, AS72].

Une quadrature $Q_K^{k,l}$ sur $K \in \mathcal{T}_h$ est définie par une liste de nœuds de K , $(\xi_K^i)_{i \in \llbracket 1, l \rrbracket}$, une liste de réels $(m_K^i)_{i \in \llbracket 1, l \rrbracket}$ et son ordre k . Pour une fonction f à valeurs scalaires et continue sur

K , elle fournit une approximation de $\int_K f dz$ donnée par

$$Q_K^{k,l}(f) = \sum_{i=1}^l m_K^i f(\xi_K^i)$$

L'ordre de la quadrature est égal au plus grand entier n tel que

$$\forall p \in \mathbb{P}^n(K) \quad Q_K^{k,l}(p) = \int_K p dz$$

Nous utilisons ici des quadratures d'ordre 3 ou 5 selon le type des fonctions à intégrer, les quadratures de degré 5 étant uniquement utilisées pour le calcul des erreurs d'approximation sur cas tests analytiques. Les tableaux 2.1 et 2.2 donnent les quadratures utilisées en dimension 2 et 3. La multiplicité désigne le nombre de permutations nécessaires sur les coordonnées barycentriques pour obtenir tous les nœuds de la quadrature.

Remarque 2.3. L'ordre de la quadrature choisie pour calculer l'erreur d'une approximation doit être suffisamment grand pour pouvoir observer l'ordre de convergence. En effet, soit f la différence entre une fonction w et son approximation w_h . La norme de f dans $L^2(\Omega_f)$ s'écrit

$$\sqrt{\int_{\Omega_f} f^2 dz} \approx \sqrt{\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K f^2 dz} = \sqrt{\sum_{K \in \mathcal{T}_h} [Q_K^{k,l}(f^2) + ch^{k+1}]}$$

où c désigne une constante générique indépendante de h . Or le cardinal de l'ensemble des $K \in \mathcal{T}_h$ est de l'ordre de h^{-d} . Donc

$$\sqrt{\int_{\Omega_f} f^2 dz} \approx \sqrt{\sum_{K \in \mathcal{T}_h} [Q_K^{k,l}(f^2)] + ch^{k+1-d}} = \sqrt{\sum_{K \in \mathcal{T}_h} Q_K^{k,l}(f^2) + ch^{k+1-d} + \dots}$$

Ainsi, pour observer une convergence d'ordre 2, il faut que $k + 1 - d$ soit supérieur ou égal à 2, soit $k \geq d + 1 = 4$ en dimension 3.

2.3.6 Opérateurs de divergence et gradient discrets

L'objet de cette section est d'introduire un opérateur de gradient local $\nabla_h(\cdot)$ et un opérateur de divergence locale $\nabla_h \cdot (\cdot)$.

Soit $H^1(\mathcal{T}_h) = \{q \in L^2(\Omega_f); \forall K \in \mathcal{T}_h, q|_K \in H^1(K)\}$. L'opérateur $\nabla_h : H^1(\mathcal{T}_h) \rightarrow (L^2(\Omega_f))^d$ est tel que pour tout $w \in H^1(\mathcal{T}_h)$, la quantité $\nabla_h w$ est définie localement en posant pour tout $K \in \mathcal{T}_h$, $(\nabla_h w)|_K = \nabla(w|_K)$. De même, l'opérateur $\nabla_h \cdot : (H^1(\mathcal{T}_h))^d \rightarrow L^2(\Omega_f)$ est tel que pour tout $\underline{w} \in (H^1(\mathcal{T}_h))^d$, la quantité $\nabla_h \cdot \underline{w}$ est définie localement en posant pour tout $K \in \mathcal{T}_h$, $(\nabla_h \cdot \underline{w})|_K = \nabla \cdot (\underline{w}|_K)$.

Le résultat suivant sera utile par la suite :

Proposition 2.4. Pour tout $\underline{w} \in (H^1(\mathcal{T}_h))^d$, on a au sens des distributions :

$$\nabla \cdot \underline{w} = \nabla_h \cdot \underline{w} - \sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \llbracket \underline{w} \rrbracket_F \cdot \underline{n}_F \delta_F \quad (2.24)$$

où le second terme du membre de droite est un combinaison de masses de Dirac surfaciques qui s'interprètent comme $\langle \llbracket \underline{w} \rrbracket_F \cdot \underline{n}_F \delta_F, \psi \rangle = \int_F (\llbracket \underline{w} \rrbracket_F \cdot \underline{n}_F) \psi dS_z$ pour toute fonction $\psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega_f)$, c'est-à-dire pour toute fonction indéfiniment dérivable et à support compact dans Ω_f .

Preuve. Soit $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega_f)$. Alors

$$\langle \nabla \cdot \underline{w}, \varphi \rangle = - \langle \underline{w}, \nabla \varphi \rangle = - \int_{\Omega_f} \underline{w} \cdot \nabla \varphi dz \quad (2.25)$$

$$= - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \underline{w} \cdot \nabla \varphi dz = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K (\nabla_h \cdot \underline{w}) \varphi dz - \int_{\partial K} (\underline{w} \cdot \underline{n}_K) \varphi dz \quad (2.26)$$

$$= \langle \nabla_h \cdot \underline{w}, \varphi \rangle - \sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \underbrace{\int_F \llbracket \underline{w} \rrbracket_F \cdot \underline{n}_F \varphi dS_z}_{\langle \llbracket \underline{w} \rrbracket \cdot \underline{n}_F \delta_F, \varphi \rangle} \quad (2.27)$$

où \underline{n}_K désigne le vecteur normal unitaire orienté vers l'extérieur de K . \square

2.3.7 Stratégies pour l'approximation du champ de vitesse

Deux classes d'éléments finis peuvent être utilisées pour approcher le problème (2.19) : des éléments finis mixtes où les espaces d'approximation de la vitesse et de la pression vérifient une condition inf-sup discrète et des éléments finis conformes stabilisés où la condition inf-sup n'est pas vérifiée mais pour lesquels un terme de type moindres carrés est ajouté à la formulation faible pour contrôler la norme du résidu (cf [BF91, EG04]). Une méthode de chaque classe est considérée à titre de comparaison. Un aspect important de l'approximation s'avère être la divergence du champ de vitesse discret. Les raisons en sont exposées au chapitre 3. Avec les éléments finis conformes stabilisés, le second terme du membre de droite de l'équation (2.24) est nul grâce à la continuité du champ de vitesse discret, mais pas le premier à cause du terme de stabilisation. En revanche, avec les éléments finis mixtes, le premier terme de l'équation (2.24) disparaît, mais pas le second à cause de la non-conformité de l'espace discret du champ de vitesse. Dans ce cas, il est possible de construire un post-traitement du champ de vitesse discret procurant la continuité des composantes normales au travers des faces tout en préservant la divergence locale, conduisant ainsi à un champ à divergence nulle.

Enfin, on observera que seuls des éléments finis de degré 1 sont utilisés pour approcher le problème d'advection-diffusion au chapitre 3. Il est donc inutile d'utiliser des méthodes de degré plus élevé que 1 pour approcher le champ de vitesse.

Remarque 2.5. Dans le cadre de cette remarque, on se place pour simplifier en dimension 2 et on suppose le domaine Ω_f simplement connexe. Soit un maillage de Ω_f constitué de triangles. On désigne par N_{el} le nombre d'éléments du maillage, N_v le nombre de sommets, N_{ed} le nombre d'arêtes, N_v^∂ le nombre de sommets situés sur la frontière du domaine et N_{ed}^∂ le nombre d'arêtes sur la frontière du domaine. Soit \underline{w} un champ de vecteurs de $(P_{Lag,h}^1)^d$ dont la divergence est nulle sur chaque élément et dont les valeurs sont nulles sur la frontière du maillage. Il y a alors $N_{el} + 2N_v^\partial$ équations imposées sur \underline{w} et $2N_v$ degrés de liberté. Or, les relations d'Euler montrent que $N_{el} + 2N_v^\partial = 2N_v - 2 + N_v^\partial$. Ainsi, dès que $N_v^\partial > 2$, le système est surdéterminé et la seule possibilité pour \underline{w} est en général le champ nul. En revanche, les éléments finis de Crouzeix-Raviart fournissent suffisamment de degrés de liberté pour construire des champs de vitesse non nuls dont la divergence est nulle à l'intérieur de chaque élément du maillage. En effet les conditions de Dirichlet plus la condition de divergence nulle fournissent $N_{el} + 2N_{ed}^\partial$ équations imposées sur \underline{w} , tandis qu'il y a $2N_{ed}$ degrés de liberté. Les relations d'Euler montrent que $2N_{ed} - N_{el} - 2N_{ed}^\partial = 2N_{el} - N_{ed}^\partial$. Or, bien souvent, les maillages utilisés vérifient $2N_{el} - N_{ed}^\partial > 0$. Donc il peut exister des champs de vitesse non nuls dans l'espace des éléments finis de Crouzeix-Raviart tels que leur divergence soit nulle sur chaque élément du maillage.

2.4 Approximation par éléments finis stabilisés

2.4.1 Discrétisation du problème

On considère ici l'élément fini de Lagrange $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisé. La vitesse discrète est cherchée dans

$$\mathcal{X}_h = (P_{\text{Lag},0,h}^1)^d$$

et la fluctuation de pression discrète dans

$$\mathcal{M}_h = P_{\text{Lag},h,*}^1$$

Le problème consiste à chercher $(\underline{v}_h^{\text{Lag}}, p_h^{\text{Lag}}) \in \mathcal{X}_h \times \mathcal{M}_h$ tels que

$$\begin{cases} \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \underline{v}_h^{\text{Lag}} : \underline{\nabla} \varphi_h \, dz - \int_{\Omega_f} p_h^{\text{Lag}} (\underline{\nabla} \cdot \varphi_h) \, dz = - \int_{\Omega_f} \underline{e}_\alpha \cdot \varphi_h \, dz & \forall \varphi_h \in \mathcal{X}_h \\ \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \cdot \underline{v}_h^{\text{Lag}}) q_h \, dz + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \int_K \underline{\nabla} p_h^{\text{Lag}} \cdot \underline{\nabla} q_h \, dz = - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \int_K \underline{e}_\alpha \cdot \underline{\nabla} q_h \, dz & \forall q_h \in \mathcal{M}_h \end{cases} \quad (2.28)$$

Le système (2.28) est obtenu dans le cadre de la méthode d'approximation dite de Galerkin moindres carrés. Il existe plusieurs variantes de cette méthode, la plus connue [FF92, TV96] étant celle où on impose un contrôle de type moindres carrés sur le gradient de pression et sur la divergence. La variante que nous considérons ici ne contrôle que le gradient de pression et conduit aux mêmes estimations d'erreur que pour la méthode de référence.

Proposition 2.6. Le système (2.28) est bien posé et il existe une constante $c > 0$ telle que sa solution $(\underline{v}_h^{\text{Lag}}, p_h^{\text{Lag}})$ vérifie l'estimation d'erreur

$$\forall h, \quad \|\underline{v} - \underline{v}_h^{\text{Lag}}\|_{0,\Omega_f} + h \left(\|\underline{\nabla} \underline{v} - \underline{\nabla} \underline{v}_h^{\text{Lag}}\|_{0,\Omega_f} + \|p - p_h^{\text{Lag}}\|_{0,\Omega_f} \right) \leq ch^2 (\|\underline{v}\|_{2,\Omega_f} + \|p\|_{1,\Omega_f}) \quad (2.29)$$

2.4.2 Assemblage du système linéaire

Etant donné un maillage \mathcal{T}_h de Ω_f , la solution $(\underline{v}_h^{\text{Lag}}, p_h^{\text{Lag}})$ est déterminée par 4 composantes en chaque nœud de \mathcal{T}_h . Soit $(\theta^i)_i$ la famille des fonctions de base de $P_{\text{Lag},h}^1$ telles que θ^i soit la fonction qui vaut 1 au sommet S_i de \mathcal{T}_h (cf figure 2.2). Les composantes du champ de vitesse et le champ de pression sont décomposés sur cette base. Le problème (2.28) peut ainsi être mis sous forme de système linéaire du type $\mathbb{A}\mathbf{U} = \mathbf{B}$. Les composantes de \mathbf{U} correspondent alors aux valeurs de la vitesse ou de la pression aux sommets du maillage.

L'assemblage du système linéaire se fait en deux étapes. Dans un premier temps, les termes de la matrice sont calculés selon la forme générale des équations sans tenir compte des conditions aux limites. Le vecteur des composantes de la solution \mathbf{U} est divisé en sous-vecteurs, chacun correspondant à un sommet de \mathcal{T}_h . Le $i^{\text{ème}}$ sous-vecteur \mathbf{U}_i contient donc les valeurs des composantes de la vitesse et la valeur de la pression au sommet S_i . La matrice \mathbb{A} et le second membre

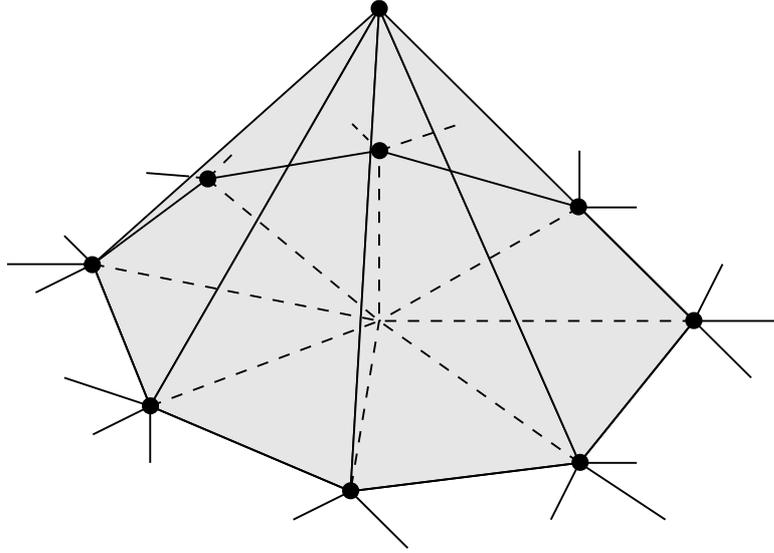


FIG. 2.2 – Fonction de base de l'espace $P_{Lag,h}^1$ associée à un sommet du maillage en dimension 2

\mathbf{B} sont également divisés en sous-matrices et sous-vecteurs. Ainsi,

$$\mathbf{U}_i = \begin{pmatrix} (v_h^{Lag})_1(S_i) \\ (v_h^{Lag})_2(S_i) \\ (v_h^{Lag})_3(S_i) \\ p_h^{Lag}(S_i) \end{pmatrix} \quad \mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} \int_{\Omega_f} (\underline{e}_\alpha)_1 \theta^i dz \\ \int_{\Omega_f} (\underline{e}_\alpha)_2 \theta^i dz \\ \int_{\Omega_f} (\underline{e}_\alpha)_3 \theta^i dz \\ - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \int_K \underline{e}_\alpha \cdot \underline{\nabla} \theta^i dz \end{pmatrix}$$

et

$$\mathbb{A}_{ij} = \begin{pmatrix} \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \theta^i \cdot \underline{\nabla} \theta^j dz & 0 & 0 & \int_{\Omega_f} \theta^j \theta_{,1}^i dz \\ 0 & \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \theta^i \cdot \underline{\nabla} \theta^j dz & 0 & \int_{\Omega_f} \theta^j \theta_{,2}^i dz \\ 0 & 0 & \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \theta^i \cdot \underline{\nabla} \theta^j dz & \int_{\Omega_f} \theta^j \theta_{,3}^i dz \\ \int_{\Omega_f} \theta_{,1}^j \theta^i & \int_{\Omega_f} \theta_{,2}^j \theta^i & \int_{\Omega_f} \theta_{,3}^j \theta^i & \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 \int_K \underline{\nabla} \theta^i \cdot \underline{\nabla} \theta^j dz \end{pmatrix}$$

Il est rappelé que pour tout $i \in \llbracket 1, d \rrbracket$, $\theta_{,i} = \frac{\partial \theta}{\partial z_i}$.

Dans un deuxième temps, on prend en compte les conditions de Dirichlet sur l'interface fluide-solide. Pour chaque sommet i correspondant à l'interface fluide-solide, les termes des trois premières lignes des sous-matrices \mathbb{A}_{ij} sont remplacés par 0 pour tout j , sauf pour la sous-matrice \mathbb{A}_{ii} dont les termes diagonaux sont fixés à 1. De même les valeurs des trois premiers termes de \mathbf{B}_i sont fixées à 0. Ainsi, le champ de vitesse solution du système linéaire vérifie les conditions de Dirichlet sur l'interface fluide-solide.

Dans un troisième temps, on prend en compte les conditions périodiques. Soit i_1 un sommet de $\mathcal{F}_h^{\text{ff}}$ et i_2 son homologue par périodicité. Les conditions périodiques sont imposées sur la vitesse et la pression. Donc pour tout sommet j de \mathcal{T}_h , les sous-matrices \mathbb{A}_{i_2j} sont ajoutées aux sous-matrices \mathbb{A}_{i_1j} et le sous-vecteur \mathbf{B}_{i_2} est ajouté au sous-vecteur \mathbf{B}_{i_1} . Cette procédure revient à considérer $\theta^{i_1} + \theta^{i_2}$ à la place de θ^{i_1} , ce qui implique d'ajouter les contributions des éléments du support de θ^{i_2} pour le calcul des termes de \mathbb{A}_{i_1j} (cf figure 2.3). Ensuite, toutes les valeurs des sous-matrices \mathbb{A}_{i_2j} sont fixées à 0, sauf $\mathbb{A}_{i_2i_2}$ dont les termes diagonaux sont fixés à 1, et $\mathbb{A}_{i_2i_1}$ dont les termes diagonaux sont fixés à -1. Les valeurs du vecteur \mathbf{B}_{i_2} sont fixées à 0. De cette façon, les valeurs des composantes de la vitesse et de la pression au sommet i_2 sont égales aux valeurs correspondantes au sommet i_1 . Le système linéaire ainsi obtenu est résolu à l'aide de l'algorithme GMRes (cf page 67).

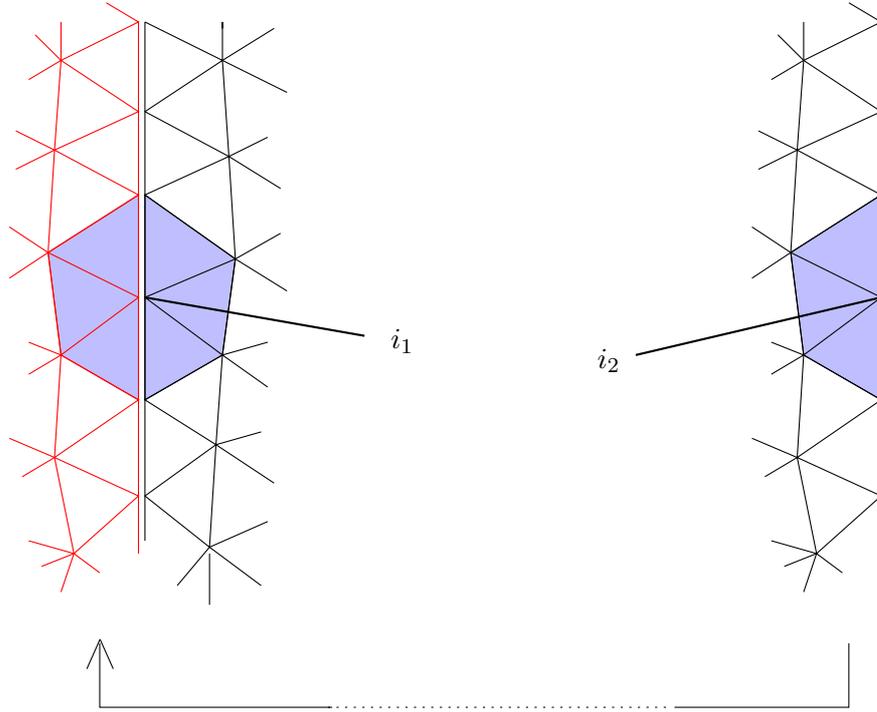


FIG. 2.3 – Contribution des éléments du support de la fonction de base associée au sommet i_2 pour le calcul des intégrales impliquant la fonction de base associée au sommet i_1

2.5 Approximation par éléments finis mixtes

2.5.1 Discrétisation du problème

Nous considérons ici l'élément fini mixte de Crouzeix-Raviart $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$ [CR73]. Le problème discret consiste donc à chercher $(\underline{v}_h^{\text{CR}}, p_h^{\text{CR}}) \in \mathcal{X}_h \times \mathcal{M}_h$ tels que

$$\begin{cases} \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}_h \underline{v}_h^{\text{CR}} : \underline{\nabla}_h \varphi_h \, dz - \int_{\Omega_f} p_h^{\text{CR}} (\underline{\nabla}_h \cdot \underline{\varphi}_h) \, dz = - \int_{\Omega_f} \underline{e}_\alpha \cdot \underline{\varphi}_h \, dz & \forall \underline{\varphi}_h \in \mathcal{X}_h \\ \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla}_h \cdot \underline{v}_h^{\text{CR}}) q_h \, dz = 0 & \forall q_h \in \mathcal{M}_h \end{cases} \quad (2.30)$$

On notera l'utilisation des opérateurs de gradient et de divergence discrets du fait de la non-conformité du champ de vitesse.

Proposition 2.7. Le système (2.30) est bien posé et il existe une constante $c > 0$ telle que sa solution $(\underline{v}_h^{\text{CR}}, p_h^{\text{CR}})$ vérifie l'estimation d'erreur

$$\forall h \quad \|\underline{v} - \underline{v}_h^{\text{CR}}\|_{0,\Omega_f} + h \left(\|\underline{\nabla} \underline{v} - \underline{\nabla}_h v_h^{\text{CR}}\|_{0,\Omega_f} + \|p - p_h^{\text{CR}}\|_{0,\Omega_f} \right) \leq ch^2 (\|\underline{v}\|_{2,\Omega_f} + \|p\|_{1,\Omega_f}). \quad (2.31)$$

Dans l'analyse du problème d'advection-diffusion présenté au chapitre 3, il sera utile de disposer d'une estimation sur les sauts de $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ aux faces du maillage. C'est l'objet du lemme suivant.

Lemme 2.8. On a l'estimation

$$\left(\sum_{F \in \mathcal{F}_h} h_F \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \rrbracket\|_{0,F}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq ch^2$$

Preuve. La démarche consiste à introduire $I_h^{\text{Lag}} \underline{v}$, l'interpolé de Lagrange de degré 1 où \underline{v} est la solution exacte de (2.19) et à utiliser l'estimation d'erreur (2.31). Soit $F \in \mathcal{F}_h$. Soit K tel que $F \in \mathcal{F}(K)$. Il vient

$$\|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \rrbracket\|_{0,F} = \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} - I_h^{\text{Lag}} \underline{v} \rrbracket\|_{0,F} \leq ch_F^{-\frac{1}{2}} \|\underline{v}_h^{\text{CR}} - I_h^{\text{Lag}} \underline{v}\|_{0,K} \leq ch_F^{-\frac{1}{2}} (\|\underline{v}_h^{\text{CR}} - \underline{v}\|_{0,K} + \|\underline{v} - I_h^{\text{Lag}} \underline{v}\|_{0,K}).$$

Par suite,

$$\sum_{F \in \mathcal{F}_h} h_F \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \rrbracket\|_{0,F}^2 \leq c \left(\|\underline{v}_h^{\text{CR}} - \underline{v}\|_{0,\Omega_f}^2 + \|\underline{v} - I_h^{\text{Lag}} \underline{v}\|_{0,\Omega_f}^2 \right) \leq ch^4$$

ce qui complète la preuve. □

2.5.2 Assemblage du système linéaire

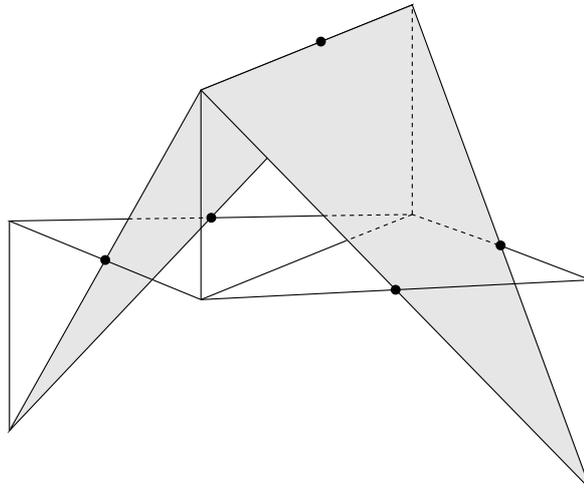


FIG. 2.4 – Fonction de base de l'espace $P_{\text{CR},h}^1$ en dimension 2.

Soit $(\theta^F)_{F \in \mathcal{F}_h^\#}$ la famille des fonctions de base de $P_{\text{CR},h}^1$ telle que pour toute face $F \in \mathcal{F}_h^\#$ la moyenne de θ^F sur toutes les faces du maillage est nulle, sauf sur la face F où elle vaut 1 (cf figure 2.4). Le cardinal de la base de $P_{\text{CR},h}^1$ est égal au cardinal de $\mathcal{F}_h^\#$. Comme les fonctions de $P_{\text{CR},h}^1$ sont continues aux barycentres des faces de $\mathcal{F}_h^\#$, le champ de vitesse \underline{v}_h est déterminé par les valeurs de ses composantes au barycentre de chaque face du maillage.

Soit $(q^K)_{K \in \mathcal{T}_h}$, la famille des fonctions de base de P_h^0 telle que pour tout élément K de \mathcal{T}_h , q^K vaut 0 partout sauf à l'intérieur de l'élément K de \mathcal{T}_h où elle vaut 1. Le champ de pression est donc déterminé par ses valeurs en chaque élément du maillage.

Soit \mathbf{U} le vecteur des composantes de $(\underline{v}_h^{\text{CR}}, p_h^{\text{CR}})$ dans la base ci-dessus. Il peut être décomposé en deux sous-vecteurs, \mathbf{U}_1 contenant les valeurs de la vitesse et \mathbf{U}_2 contenant les valeurs de la pression. De plus le vecteur \mathbf{U}_1 est subdivisé en sous-vecteurs correspondant chacun à une face de $\mathcal{F}_h^\#$ pour laquelle il contient les 3 composantes du champ de vitesse. Ainsi,

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \end{pmatrix}; \quad \forall F \in \mathcal{F}_h^\#, \quad \mathbf{U}_F^1 = \begin{pmatrix} \int_F (\underline{v}_h^{\text{CR}})_1 dS_z \\ \int_F (\underline{v}_h^{\text{CR}})_2 dS_z \\ \int_F (\underline{v}_h^{\text{CR}})_3 dS_z \end{pmatrix}; \quad \forall K \in \mathcal{T}_h, \quad \mathbf{U}_K^2 = p_h^{\text{CR}}|_K$$

Le problème (2.30) peut se mettre sous la forme de système linéaire

$$\mathbb{A}\mathbf{U} = \mathbf{B} \tag{2.32}$$

La matrice du système \mathbb{A} se décompose par bloc :

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \mathbb{C} & \mathbb{D} \\ {}^t\mathbb{D} & 0 \end{pmatrix}$$

où \mathbb{C} et \mathbb{D} se décomposent elle-mêmes en sous-matrices :

$$\mathbb{C}_{ij} = \begin{pmatrix} \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}_h \theta^i \cdot \underline{\nabla}_h \theta^j dz & 0 & 0 \\ 0 & \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}_h \theta^i \cdot \underline{\nabla}_h \theta^j dz & 0 \\ 0 & 0 & \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}_h \theta^i \cdot \underline{\nabla}_h \theta^j dz \end{pmatrix} \quad \mathbb{D}_{ij} = \begin{pmatrix} \int_{\Omega_f} \theta^i q_j dz \\ \int_{\Omega_f} \theta^i q_j dz \\ \int_{\Omega_f} \theta^i q_j dz \end{pmatrix}$$

Le second membre \mathbf{B} se décompose par bloc de la même manière que \mathbf{U} :

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}^1 \\ \mathbf{B}^2 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{B}_i^1 = \begin{pmatrix} \int_{\Omega_f} (\underline{e}_\alpha)_1 \theta^i \\ \int_{\Omega_f} (\underline{e}_\alpha)_2 \theta^i \\ \int_{\Omega_f} (\underline{e}_\alpha)_3 \theta^i \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{B}^2 = (0)$$

La décomposition de la matrice \mathbb{A} et la structure de la sous-matrice \mathbb{C} permettent d'appliquer la méthode d'Uzawa pour résoudre le système linéaire. Le point de départ de cette méthode consiste à écrire le système (2.32) sous la forme

$$\begin{aligned} \mathbb{C}\mathbf{U}_1 + \mathbb{D}\mathbf{U}_2 &= \mathbf{B}_1 \\ {}^t\mathbb{D}\mathbf{U}_1 &= \mathbf{B}_2 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Le vecteur \mathbf{U}_1 exprimé en fonction de \mathbf{U}_2 dans la première équation et son expression utilisée dans la deuxième équation donnent

$${}^t\mathbb{D}\mathbb{C}^{-1}\mathbf{B}_1 - {}^t\mathbb{D}\mathbb{C}^{-1}\mathbb{D}\mathbf{U}_2 = \mathbf{B}_2$$

La matrice $\mathbb{Z} = {}^t\mathbb{D}\mathbb{C}^{-1}\mathbb{D}$ est appelée la matrice d'Uzawa. Si \mathbb{C} est symétrique définie positive, la matrice \mathbb{Z} l'est également. Donc le système

$$\mathbb{Z}\mathbf{U}_2 = {}^t\mathbb{D}\mathbb{C}^{-1}\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2$$

peut être résolu par la méthode du gradient conjugué. La matrice \mathbb{Z} n'est jamais calculée explicitement, l'inversion de \mathbb{C} étant souvent trop coûteuse en temps de calcul et en mémoire. Mais comme seul le produit matrice-vecteur intervient dans l'algorithme de gradient conjugué, il suffit de savoir calculer le produit de \mathbb{C}^{-1} avec un vecteur \mathbf{P} , ce qui est obtenu de manière approchée en résolvant un système linéaire $\mathbb{C}\mathbf{X} = \mathbf{P}$ d'inconnue \mathbf{X} grâce à l'algorithme du gradient conjugué. Pour terminer, \mathbf{U}_1 est obtenu en utilisant l'expression déduite de la première équation du système (2.33).

Dans notre cas, la matrice \mathbb{C} n'est pas définie positive. De plus, du fait de l'implémentation des conditions aux limites et des conditions de périodicité, on modifie la matrice \mathbb{C} en une matrice \mathbb{C}_{cl} qui n'est pas symétrique. Néanmoins, on peut vérifier que la méthode d'Uzawa associée au gradient conjugué converge à condition que la valeur initiale du vecteur \mathbf{U} satisfait les conditions de Dirichlet et de périodicité.

L'inconvénient de la méthode des éléments finis de Crouzeix-Raviart est que les systèmes linéaires générés sont plus gros que ceux générés par la méthode des éléments finis de Lagrange. Cependant elle reste très compétitive grâce au fait qu'elle est compatible avec la méthode d'Uzawa.

2.6 Projection à divergence nulle du champ de vitesse discret

2.6.1 Construction et propriétés du projecteur

Le champ de vitesse approché par les éléments finis de Lagrange $\mathbb{P}^1, \underline{v}_h^{\text{Lag}}$, n'est pas à divergence nulle à cause de la stabilisation. Par ailleurs, les éléments finis de Crouzeix-Raviart permettent d'annuler cette divergence à l'intérieur de chaque élément. L'inconvénient est que le champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ est discontinu si bien qu'il n'est pas non plus à divergence nulle (cf la formule (2.24)).

Bastian et Rivière dans [BR03] proposent une méthode de projection des champs de vitesse discontinus sur l'espace des éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini. Cette méthode préserve la valeur locale de la divergence et impose la continuité des composantes normales. Nous adaptons ici cette technique de projection aux champs de vitesse de l'espace d'éléments finis de Crouzeix-Raviart et nous en établissons les deux propriétés essentielles, à savoir que le champ de vitesse ainsi projeté est à divergence nulle dans Ω_f et qu'il est suffisamment proche du champ de vitesse de Crouzeix-Raviart pour ne pas perturber la précision de la méthode d'approximation.

Pour toute face \hat{F} de l'élément de référence \hat{K} , soit $(\hat{p}_{\hat{F},i})_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$ une base de $\mathbb{P}^1(\hat{F})$. Alors pour toute face F du maillage \mathcal{T}_h , la base de $\mathbb{P}^1(F)$ est définie par

$$p_{F,i} = \hat{p}_{\hat{F},i} \circ T_K^{-1} \quad i \in \llbracket 1, d \rrbracket$$

où K est un élément de \mathcal{T}_h tel que F appartient à $\mathcal{F}(K)$ et T_K est l'application affine qui transforme \hat{K} en K . Pour tout $F \in \mathcal{F}_h^\#$ et pour toute fonction discrète $\underline{\varphi}_h$ définie de manière

univoque sur F , soit les formes linéaires suivantes

$$\sigma_{F,i}(\underline{\varphi}_h) = \int_F (\underline{\varphi}_h \cdot \underline{n}_F) p_{F,i} dS_z$$

Elles correspondent aux degrés de libertés de l'élément fini de Brezzi-Douglas-Marini [BDM85]. Pour la suite, nous prendrons $p_{F,1} \equiv 1$ sur F si bien que le degré de liberté $\sigma_{F,1}$ correspond à la moyenne de la composante normale sur F . De plus, pour tout $K \in \mathcal{T}_h$, il existe une unique base $(\underline{\theta}_{K,F,i})_{F \in \mathcal{F}(K), i \in \llbracket 1, d \rrbracket}$ de $(\mathbb{P}^1(K))^d$ telle que

$$\forall F, F' \in \mathcal{F}(K), \forall i, i' \in \llbracket 1, d \rrbracket, \quad \sigma_{F,i}(\underline{\theta}_{K,F',i'}) = \delta_{FF'} \delta_{ii'}$$

où $\delta_{FF'}$ et $\delta_{ii'}$ désignent des symboles de Kronecker. Ainsi toute fonction $\underline{\varphi}_h$ de $(P_h^1)^d$ peut s'écrire sous la forme

$$\underline{\varphi}_h = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{F \in \mathcal{F}(K)} \sum_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket} \sigma_{F,i}(\underline{\varphi}_h|_K) \underline{\theta}_{K,F,i} \quad (2.34)$$

étant entendu que les fonctions $\underline{\theta}_{K,F,i}$ sont prolongées par 0 en dehors de K . La moyenne d'une fonction $\underline{\varphi}_h$ de $(P_h^1)^d$ sur une face F de \mathcal{F}_h est désignée par

$$\begin{cases} \{\underline{\varphi}_h\}_F = \frac{1}{2}(\underline{\varphi}_h|_{K_1(F)} + \underline{\varphi}_h|_{K_2(F)}) & \text{si } F = (K_1(F) \cap K_2(F)) \in (\mathcal{F}_h^i \cup \mathcal{F}_h^{\text{ff}}) \\ \{\underline{\varphi}_h\}_F = \underline{\varphi}_h|_{K(F)} & \text{si } F \in \mathcal{F}_h^{\text{fs}} \end{cases}$$

Soit π_h la projection de $(P_h^1)^d$ dans $P_{\text{BDM},h}^1$ définie par

$$\forall \underline{\varphi}_h \in (P_h^1)^d, \quad \pi_h(\underline{\varphi}_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{F \in \mathcal{F}(K)} \sum_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket} \sigma_{F,i}(\{\underline{\varphi}_h\}_F) \underline{\theta}_{K,F,i} \quad (2.35)$$

Proposition 2.9. Soit \underline{v} la solution de (2.19) et $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ la solution de (2.30). Alors le champ

$$\underline{v}_h^{\text{BDM}} = \pi_h(\underline{v}_h^{\text{CR}})$$

vérifie la propriété et l'estimation d'erreur suivantes

1. $\underline{\nabla} \cdot \underline{v}_h^{\text{BDM}} = 0$
2. $\|\underline{v} - \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,\Omega_f} + h \|\underline{\nabla} \underline{v} - \underline{\nabla}_h \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2$

Preuve.

1. Soit $K \in \mathcal{T}_h$. Comme $\underline{v}_h^{\text{CR}} \in (P_{\text{CR},h,0}^1)^d$,

$$\begin{aligned} \int_K \underline{\nabla} \cdot (\pi_h \underline{v}_h^{\text{CR}}) dz &= \sum_{F \in \mathcal{F}(K)} \int_F (\pi_h \underline{v}_h^{\text{CR}}) \cdot \underline{n}_F dS_z = \sum_{F \in \mathcal{F}(K)} \int_F \epsilon_{K,F} \{\underline{v}_h^{\text{CR}}\} \cdot \underline{n}_F dS_z \\ &= \sum_{F \in \mathcal{F}(K)} \int_F \underline{v}_h^{\text{CR}} \cdot \underline{n}_K dS_z = \int_K \underline{\nabla}_h \cdot \underline{v}_h^{\text{CR}} dz = 0 \end{aligned} \quad (2.36)$$

où $\epsilon_{K,F} = \underline{n}_K \cdot \underline{n}_F = \pm 1$, \underline{n}_K étant la normale unitaire sortante de K . Comme $\underline{\nabla} \cdot \underline{v}_h^{\text{BDM}}$ est constant sur K et $\underline{v}_h^{\text{BDM}} \in H(\text{div}, \Omega_f)$, $\underline{\nabla} \cdot \underline{v}_h^{\text{BDM}} = 0$.

2. Soit $K \in \mathcal{T}_h$. Pour tout $F \in \mathcal{F}(K)$ et pour tout $i \in \llbracket 1, d \rrbracket$, on observe que $\|\underline{\theta}_{K,F,i}\|_{0,K} \leq ch_K |K|^{-\frac{1}{2}}$. De plus, $\underline{v}_h^{\text{CR}}|_F - \{\underline{v}_h^{\text{CR}}\}_F = \epsilon_{K,F} \frac{1}{2} \llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \rrbracket_F$ si $F \in \mathcal{F}_h^\# \setminus \mathcal{F}_h^{\text{fs}}$ et $\underline{v}_h^{\text{CR}}|_F - \{\underline{v}_h^{\text{CR}}\}_F = \underline{v}_h^{\text{CR}}|_F$ si $F \in \mathcal{F}_h^{\text{fs}}$. En conséquence, grâce à (2.34) et (2.35),

$$\|\underline{v}_h^{\text{CR}} - \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,K} \leq c \sum_{F \in \mathcal{F}(K)} \sum_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket} \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \rrbracket_F\|_{0,F} \|p_{F,i}\|_{0,F} h_K |K|^{\frac{1}{2}} \quad (2.37)$$

En utilisant le lemme 2.8 et le fait que

$$\|p_{F,i}\|_{0,F} \leq c |F|^{\frac{1}{2}} \quad (2.38)$$

pour tout $F \in \mathcal{F}_h^\#$, on obtient que $\|\underline{v}_h^{\text{CR}} - \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2$. L'estimation (2.31) et l'inégalité triangulaire conduisent à l'estimation

$$\|\underline{v} - \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2 \quad (2.39)$$

D'après l'inégalité inverse (2.23) et l'estimation (2.38), on a

$$\|\underline{\nabla}_h \underline{v}_h^{\text{CR}} - \underline{\nabla}_h \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,\Omega_f} \leq ch^{-1} \|\underline{v}_h^{\text{CR}} - \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,\Omega_f} \leq ch \quad (2.40)$$

En utilisant de nouveau le lemme 2.8 et l'inégalité triangulaire, on trouve que

$$\|\underline{\nabla}_h \underline{v} - \underline{\nabla}_h \underline{v}_h^{\text{BDM}}\|_{0,\Omega_f} \leq ch \quad (2.41)$$

ce qui achève la preuve. \square

2.6.2 Mise en œuvre numérique

En dimension 2, le triangle de référence \hat{K} et les faces correspondantes $(\hat{F}_i)_{i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket}$ sont définis par (cf figure 2.1)

$$\hat{K} = \{(z_1, z_2) \in \mathbb{R}^2; z_1 \geq 0, z_2 \geq 0, z_1 + z_2 \leq 1\}$$

$$\hat{F}_1 = \{(z_1, z_2) \in \mathbb{R}^2; z_1 \geq 0, z_2 \geq 0, z_1 + z_2 = 1\}$$

$$\hat{F}_2 = \{(z_1, z_2) \in \mathbb{R}^2; z_1 = 0, z_2 \in [0, 1]\}$$

$$\hat{F}_3 = \{(z_1, z_2) \in \mathbb{R}^2; z_1 \in [0, 1], z_2 = 0\}$$

Pour chaque $i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$, la base des polynômes de $\mathbb{P}^1(\hat{F}_i)$ est choisie de la manière suivante

$$p_{\hat{F}_1,1}(z_1, z_2) = 1 \quad p_{\hat{F}_1,2}(z_1, z_2) = 1 - 2z_1$$

$$p_{\hat{F}_2,1}(z_1, z_2) = 1 \quad p_{\hat{F}_2,2}(z_1, z_2) = 1 - 2z_2$$

$$p_{\hat{F}_3,1}(z_1, z_2) = 1 \quad p_{\hat{F}_3,2}(z_1, z_2) = 2z_1 - 1$$

Les polynômes $(p_{\hat{F}_i,2}(z_1, z_2))_{i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket}$ sont fixés ainsi de manière à ce qu'ils prennent la valeur -1 en un sommet de la face et 1 à l'autre sommet. Cette condition simplifie la forme des fonctions $\underline{\theta}$. Les degrés de liberté sont complètement déterminés par cette base et il en existe 6 par triangle. Les fonctions de base associées aux degrés de liberté ainsi définis s'écrivent

$$\begin{aligned} \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_1,1} &= \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_2,1} &= \begin{pmatrix} z_1 - 1 \\ z_2 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_3,1} &= \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 - 1 \end{pmatrix} \\ \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_1,2} &= \begin{pmatrix} -3z_1 \\ 3z_2 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_2,2} &= \begin{pmatrix} 3z_1 + 6z_2 - 3 \\ -3z_2 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_3,2} &= \begin{pmatrix} 3z_1 \\ -6z_1 - 3z_2 + 3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

En dimension 3, l'élément de référence \hat{K} et les faces correspondantes $(\hat{F}_i)_{i \in \llbracket 1,4 \rrbracket}$ sont donnés par (cf figure 2.1)

$$\begin{aligned}\hat{K} &= \{(z_1, z_2, z_3) \in \mathbb{R}^3; z_1 \geq 0, z_2 \geq 0, z_3 \geq 0, z_1 + z_2 + z_3 \leq 1\} \\ \hat{F}_1 &= \{(z_1, z_2, z_3) \in \mathbb{R}^3; z_1 \geq 0, z_2 \geq 0, z_3 \geq 0, z_1 + z_2 + z_3 = 1\} \\ \hat{F}_2 &= \{(z_1, z_2, z_3) \in \mathbb{R}^3; z_1 = 0, z_2 \geq 0, z_3 \geq 0, z_2 + z_3 \leq 1\} \\ \hat{F}_3 &= \{(z_1, z_2, z_3) \in \mathbb{R}^3; z_1 \geq 0, z_2 = 0, z_3 \geq 0, z_1 + z_3 \leq 1\} \\ \hat{F}_4 &= \{(z_1, z_2, z_3) \in \mathbb{R}^3; z_1 \geq 0, z_2 \geq 0, z_1 + z_2 \leq 1, z_3 = 0\}\end{aligned}$$

Pour chaque $i \in \llbracket 1,4 \rrbracket$, les éléments de la base de $\mathbb{P}^1(\hat{F}_i)$ sont choisis de la manière suivante

$$\begin{array}{lll} p_{\hat{F}_1,1}(z_1, z_2, z_3) = 1 & p_{\hat{F}_1,2}(z_1, z_2, z_3) = 2z_2 + z_3 + 1 & p_{\hat{F}_1,3}(z_1, z_2, z_3) = z_3 - z_1 \\ p_{\hat{F}_2,1}(z_1, z_2, z_3) = 1 & p_{\hat{F}_2,2}(z_1, z_2, z_3) = z_3 - z_2 & p_{\hat{F}_2,3}(z_1, z_2, z_3) = 1 - z_3 - 2z_2 \\ p_{\hat{F}_3,1}(z_1, z_2, z_3) = 1 & p_{\hat{F}_3,2}(z_1, z_2, z_3) = 1 - z_1 - z_2 - 2z_3 & p_{\hat{F}_3,3}(z_1, z_2, z_3) = z_1 - z_3 \\ p_{\hat{F}_4,1}(z_1, z_2, z_3) = 1 & p_{\hat{F}_4,2}(z_1, z_2, z_3) = 2z_1 + z_2 - 1 & p_{\hat{F}_4,3}(z_1, z_2, z_3) = z_1 + 2z_2 - 1 \end{array}$$

Les polynômes $(p_{\hat{F}_i,j}(z_1, z_2, z_3))_{i \in \llbracket 1,4 \rrbracket, j \in \llbracket 2,3 \rrbracket}$ sont fixés ainsi de manière à ce qu'ils prennent les valeurs -1 en un sommet de la face, 1 à un autre sommet et 0 au troisième. Cette condition simplifie la forme des fonctions $\hat{\theta}$. Les fonctions de bases associées aux degrés de liberté ainsi définis s'écrivent

$$\begin{array}{lll} \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_1,1} = \begin{pmatrix} 2z_1 \\ 2z_2 \\ 2z_3 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_1,2} = \begin{pmatrix} -8z_1 \\ 16z_2 \\ -8z_3 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_1,3} = \begin{pmatrix} -8z_1 \\ -8z_2 \\ 16z_3 \end{pmatrix} \\ \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_2,1} = \begin{pmatrix} 2z_1 - 2 \\ 2z_2 \\ 2z_3 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_2,2} = \begin{pmatrix} -8z_1 - 24z_3 + 8 \\ -8z_2 \\ 16z_3 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_2,3} = \begin{pmatrix} 16z_1 + 24z_2 + 24z_3 - 16 \\ -8z_2 \\ -8z_3 \end{pmatrix} \\ \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_3,1} = \begin{pmatrix} 2z_1 \\ 2z_2 - 2 \\ 2z_2 - 2 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_3,2} = \begin{pmatrix} -8z_1 \\ 24z_1 + 16z_2 + 24z_3 - 16 \\ -8z_3 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_3,3} = \begin{pmatrix} 16z_1 \\ -24z_1 - 8z_2 + 8 \\ -8z_3 \end{pmatrix} \\ \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_4,1} = \begin{pmatrix} 2z_1 \\ 2z_2 \\ 2z_3 - 2 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_4,2} = \begin{pmatrix} 16z_1 \\ -8z_2 \\ -24z_1 - 8z_3 + 8 \end{pmatrix} & \hat{\theta}_{\hat{K},\hat{F}_4,3} = \begin{pmatrix} -8z_1 \\ 16z_2 \\ -24z_2 - 8z_3 + 8 \end{pmatrix} \end{array}$$

2.7 Validation

Chacune des trois méthodes d'approximation du champ de vitesse est utilisée pour calculer un écoulement de type Poiseuille entre deux plans infinis puis dans un cylindre. Ces cas simples offrent l'avantage de pouvoir comparer les résultats numériques avec des solutions analytiques exactes et donc d'évaluer la qualité des approximations. Pour tester la convergence des méthodes, plusieurs maillages de finesse croissante sont utilisés comme discrétisation du domaine.

2.7.1 Ecoulement de Poiseuille entre deux plans infinis

Considérons les plans $z_2 = a$ et $z_2 = -a$ où $a \in]0, 0.5[$ est un paramètre adimensionnel qui permet de faire varier la porosité. Le liquide est situé entre ces deux plans et est soumis à un

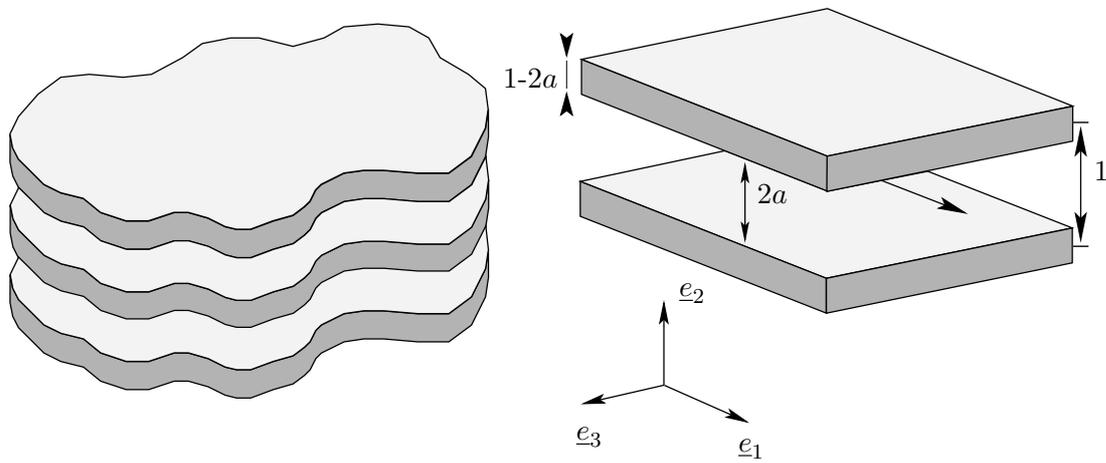


FIG. 2.5 – Domaine d'écoulement entre deux plans infinis.

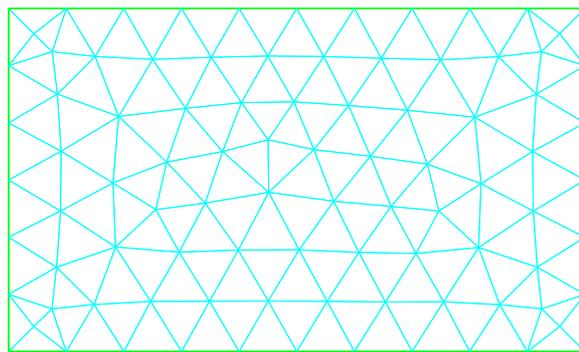


FIG. 2.6 – Maillage du domaine de calcul pour l'écoulement entre deux plan infinis. Le pas du maillage vaut $h = 0.1$.

gradient de pression $\underline{e}_\alpha = -\underline{e}_1$ (cf figure 2.5). La géométrie et les termes sources sont invariants dans les directions \underline{e}_1 et \underline{e}_3 et le terme source est nul dans la direction \underline{e}_3 . La composante v_3 de la vitesse est donc nulle. La dimension selon \underline{e}_3 peut alors être supprimée et une portion de domaine de longueur non nulle dans la direction \underline{e}_1 suffit pour modéliser l'écoulement. On choisit le domaine d'écoulement $\Omega_f = [0, 0.2] \times [-a, a]$. La solution du système (2.18) pour cette géométrie est donnée par

$$\underline{v}(\underline{z}) = \frac{1}{2}(a^2 - z_2^2)\underline{e}_1 \quad \text{et} \quad p = 0$$

Approximation par éléments finis $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisés

i	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	Stokes					
		$E_{L^2}(p_h^{\text{Lag}})$	ordre	$E_{L^2}(\underline{v}_h^{\text{Lag}})$	ordre	$E_{H^1}(\underline{v}_h^{\text{Lag}})$	ordre
0	7.0e-10	1.2e-02		1.9e-03		3.4e-02	
1	9.3e-10	5.7e-03	1.1e+00	6.6e-04	1.5e+00	2.0e-02	7.9e-01
2	9.3e-10	1.5e-03	1.9e+00	1.6e-04	2.1e+00	9.8e-03	1.0e+00
3	9.8e-10	4.6e-04	1.7e+00	3.9e-05	2.0e+00	4.9e-03	1.0e+00
4	1.0e-09	1.2e-04	2.0e+00	9.4e-06	2.0e+00	2.4e-03	1.0e+00

TAB. 2.3 – Erreurs et ordre de convergence relatifs aux champs de pression et de vitesse entre deux plans infinis approchés à l'aide des éléments finis $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisés.

Les champs de vitesse et de pression sont calculés numériquement à l'aide des éléments finis $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisés sur 5 maillages de pas $(h_i)_{i \in [0,4]}$ tels que $h_i = 0.2 \times 2^{-i}$. La figure 2.6 montre le maillage de Ω_f de pas $h = 0.1$. La solution du système linéaire est approchée par méthode itérative (GMRes) avec une tolérance de $1e-9$. C'est-à-dire que l'algorithme s'arrête lorsque la norme du résidu du système linéaire $\frac{\|\mathbf{R}\|_N}{\sqrt{N}}$, avec $\mathbf{R} = \mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{U}$, est inférieure à $1e-9$, où $\|\cdot\|_N$ désigne la norme euclidienne dans \mathbb{R}^N et N la taille du système linéaire. Le tableau 2.3 donne pour chaque maillage les valeurs des erreurs d'approximation pour les champs de vitesse et de pression. L'erreur $E_{L^2}(p_h^{\text{Lag}}) = \|p - p_h^{\text{Lag}}\|_{0, \Omega_f}$ désigne l'erreur en norme L^2 sur Ω_f entre p , solution du problème (2.19), et l'approximation p_h^{Lag} , solution du problème (2.28). De même $E_{L^2}(\underline{v}_h^{\text{Lag}})$ désigne l'erreur en norme L^2 pour la vitesse et $E_{H^1}(\underline{v}_h^{\text{Lag}})$ l'erreur en semi-norme H^1 pour la vitesse. Entre deux valeurs de l'erreur E^{i-1} et E^i correspondant à deux maillages de finesses h_{i-1} et h_i consécutives, l'ordre de convergence local est calculé selon le rapport :

$$\frac{\log(E^i) - \log(E^{i-1})}{\log(h_i) - \log(h_{i-1})}$$

Les ordres de convergence observés correspondent (sauf sur le premier maillage qui est très grossier) à ce qui est prévu par l'analyse théorique avec une super-convergence pour la pression. La deuxième colonne du tableau donne la valeur de la norme du résidu du système linéaire à la fin du calcul.

Approximation par éléments finis mixtes $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$

La solution du problème (2.19) est maintenant approchée à l'aide de la méthode des éléments finis mixtes $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$, sur les mêmes maillages que pour la méthode des éléments finis stabilisés

		Stokes					
i	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(p_h^{\text{CR}})$	ordre	$E_{L^2}(v_h^{\text{CR}})$	ordre	$E_{H^1}(v_h^{\text{CR}})$	ordre
0	9.7e-12	6.0e-03		1.1e-03		3.2e-02	
1	1.9e-10	3.4e-03	8.1e-01	3.6e-04	1.6e+00	1.9e-02	7.8e-01
2	4.4e-10	1.6e-03	1.1e+00	9.2e-05	2.0e+00	9.4e-03	9.8e-01
3	3.7e-10	7.8e-04	1.0e+00	2.3e-05	2.0e+00	4.7e-03	1.0e+00
4	4.3e-12	3.9e-04	1.0e+00	5.7e-06	2.0e+00	2.4e-03	1.0e+00

TAB. 2.4 – Erreurs et ordres de convergence relatifs aux champs de pression et de vitesse entre deux plans infinis approchés à l’aide des éléments finis mixtes $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$.

$\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$. Le système linéaire est résolu par la méthode d’Uzawa combinée au gradient conjugué. La tolérance est toujours fixée à $1e-9$, sauf pour le maillage associé à $i = 4$ où elle est fixée à $1e-11$ pour exploiter la finesse du maillage. Sans cette précaution, la précision de l’approximation est limitée par la qualité de la résolution du système linéaire, et non par la qualité de la discrétisation. Le tableau 2.4 donne les valeurs des erreurs d’approximation et les ordres de convergence locaux correspondants pour les champs de vitesse et de pression. La faible valeur de la norme du résidu pour $i = 0$ s’explique par le fait qu’à chaque itération du solveur linéaire, la norme du résidu diminue de plusieurs ordres de grandeur. Les ordres de convergence sont conformes aux prévisions (sauf à nouveau sur le premier maillage qui est très grossier).

Projection du champ de vitesse sur les éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini

		Stokes			
i	$E_{L^2}(v_h^{\text{BDM}})$	ordre	$E_{H^1}(v_h^{\text{BDM}})$	ordre	
0	1.6e-03		3.4e-02		
1	5.1e-04	1.6e+00	1.9e-02	8.3e-01	
2	1.3e-04	2.0e+00	9.5e-03	9.9e-01	
3	3.2e-05	2.0e+00	4.7e-03	1.0e+00	
4	7.9e-06	2.0e+00	2.4e-03	1.0e+00	

TAB. 2.5 – Erreurs et ordres de convergence relatifs à v_h^{BDM} pour l’écoulement entre deux plans infinis.

Les champs de vitesse calculés par la méthode $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$ sur chaque maillage sont projetés sur l’espace des éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini. Le tableau 2.5 donne les valeurs des erreurs et les ordres de convergence associés. La convergence de la méthode est conforme aux estimations théoriques.

2.7.2 Écoulement de Poiseuille dans un cylindre

Soit un cylindre de génératrice parallèle à l’axe e_1 et dont la section est un cercle de rayon r_1 , où $r_1 \in]0, 1[$ est un paramètre adimensionnel qui permet de faire varier la porosité. Le liquide contenu dans le cylindre est soumis à un gradient de pression $e_\alpha = -e_1$. La géométrie est

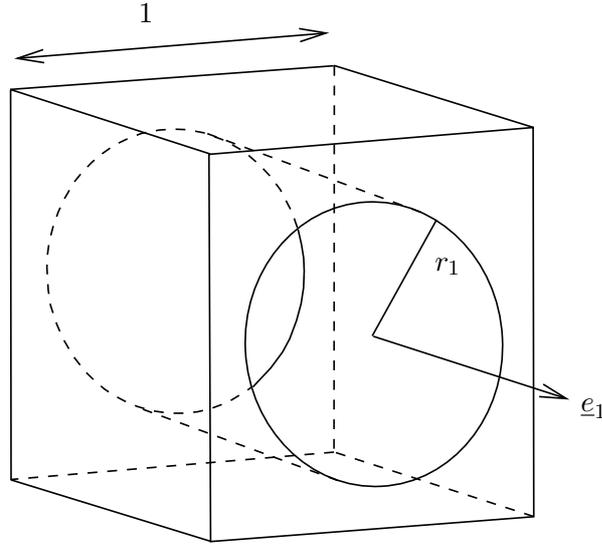


FIG. 2.7 – Domaine d'écoulement cylindrique.

invariante le long de \underline{e}_1 , donc une portion de cylindre de longueur non nulle dont l'entrée et la sortie sont liées par périodicité suffit à représenter le domaine d'écoulement. Soit Ω_f la portion de cylindre située entre les plans $z_1 = 0$ et $z_1 = 0.2$. La figure 2.7 permet de visualiser la cellule de base parallélépipédique contenant Ω_f . La solution du système (2.19) pour cette géométrie est donnée par $\underline{v}(\underline{z}) = \frac{1}{4}(r_1^2 - r^2)\underline{e}_1$ où $r^2 = z_2^2 + z_3^2$ et $p = 0$.

Approximation par éléments finis $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisés

h	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	Stokes					
		$E_{L^2}(p_h^{\text{Lag}})$	ordre	$E_{L^2}(v_h^{\text{Lag}})$	ordre	$E_{H^1}(v_h^{\text{Lag}})$	ordre
1.6e-01	9.2e-10	4.1e-04		1.5e-04		3.5e-03	
8.9e-02	8.3e-10	4.2e-04	-7.0e-02	4.2e-05	2.3e+00	1.9e-03	1.1e+00
5.4e-02	9.4e-10	3.3e-04	5.3e-01	1.3e-05	2.3e+00	1.0e-03	1.2e+00
3.0e-02	9.8e-10	7.0e-05	2.6e+00	3.4e-06	2.3e+00	5.5e-04	1.1e+00

TAB. 2.6 – Erreurs et ordre de convergence relatifs aux champs de pression et de vitesse dans un cylindre approchés à l'aide des éléments finis $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisés.

Les champs de vitesse et de pression sont calculés à l'aide des éléments finis $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisés, sur quatre maillages de pas $(h_i)_{i \in \llbracket 0,3 \rrbracket}$. La figure 2.8 montre le maillage de Ω_f de pas $h = 8.9\text{e-}2$. La solution du problème (2.19) est toujours approchée avec une tolérance de $1\text{e-}9$ pour la résolution du système linéaire. Le tableau 2.6 donne les erreurs et les ordres de convergence locaux pour les champs de vitesse et de pression. Les ordres de convergence observés correspondent aux estimations théoriques pour la vitesse. En revanche, pour la pression, il faut attendre la discrétisation la plus fine pour observer une convergence satisfaisante. Il serait intéressant d'approcher le problème avec des discrétisations encore plus fines pour bien confirmer l'ordre de convergence.

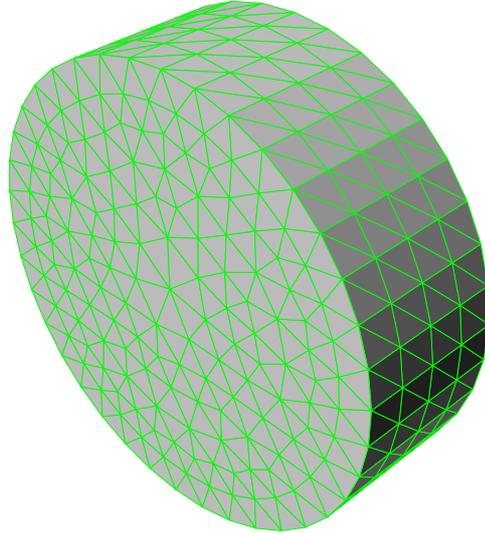


FIG. 2.8 – Maillage du domaine de calcul pour l'écoulement de Poiseuille dans un cylindre de rayon $r_1 = 0.3$. Le pas du maillage vaut $h = 8.9e-2$.

		Stokes					
h	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(p_h^{\text{CR}})$	ordre	$E_{L^2}(\underline{v}_h^{\text{CR}})$	ordre	$E_{H^1}(\underline{v}_h^{\text{CR}})$	ordre
1.6e-01	3.0e-13	6.7e-04		1.1e-04		3.0e-03	
8.9e-02	2.5e-13	3.2e-04	1.3e+00	2.8e-05	2.4e+00	1.6e-03	1.1e+00
5.4e-02	2.9e-13	1.6e-04	1.4e+00	7.3e-06	2.7e+00	8.4e-04	1.3e+00
3.0e-02	6.6e-13	8.5e-05	1.1e+00	1.9e-06	2.3e+00	4.5e-04	1.0e+00

TAB. 2.7 – Erreurs et ordres de convergence relatifs aux champs de pression et de vitesse dans un cylindre approchés à l'aide des éléments finis mixtes $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$.

Approximation par éléments finis mixtes $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$

La simulation de l'écoulement dans un cylindre sur la même série de maillages avec les éléments finis mixtes $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$ produit les erreurs et les ordres de convergence donnés par le tableau 2.7 pour les champs de vitesse et de pression. La tolérance pour la résolution du système linéaire est fixée à $1e-12$. Pour une tolérance supérieure, la qualité potentielle de la discrétisation n'est pas exploitée. On retrouve les ordres de convergence prévus par la théorie.

Projection du champ de vitesse sur les éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini

h	Stokes			
	$E_{L^2}(\underline{v}_h^{\text{BDM}})$	ordre	$E_{H^1}(\underline{v}_h^{\text{BDM}})$	ordre
1.6e-01	7.5e-05		3.8e-03	
8.9e-02	1.9e-05	2.4e+00	2.0e-03	1.1e+00
5.4e-02	4.9e-06	2.8e+00	1.0e-03	1.4e+00
3.0e-02	1.3e-06	2.3e+00	5.5e-04	1.0e+00

TAB. 2.8 – Erreurs et ordres de convergence relatifs à $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$ pour l'écoulement dans un cylindre.

Enfin, les champs de vitesse $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ calculés sur la série de maillages sont projetés sur l'espace des éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini. Le tableau 2.8 donne les valeurs des erreurs et les ordres de convergence associés. Ceux-ci sont bien conformes à ce qui est attendu.

2.8 Résultats sur des réseaux cubiques de sphères

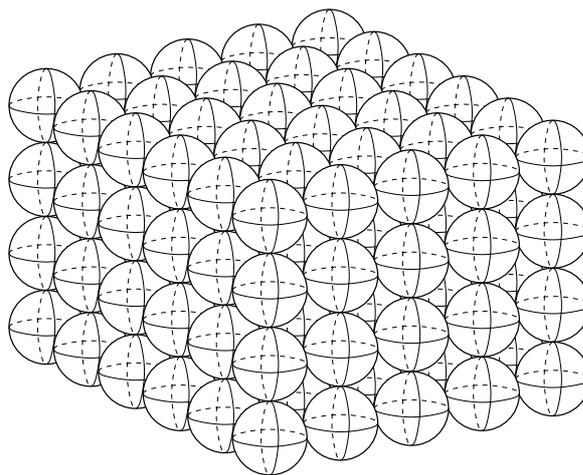


FIG. 2.9 – Réseau cubique de sphères

L'objectif de cette section est de présenter des calculs de tenseurs de perméabilité dans des milieux poreux périodiques tridimensionnels. Nous nous restreignons à des morphologies de pores isotropes si bien que le tenseur de perméabilité est proportionnel à l'identité via un coefficient (scalaire) de perméabilité qui sera noté k .

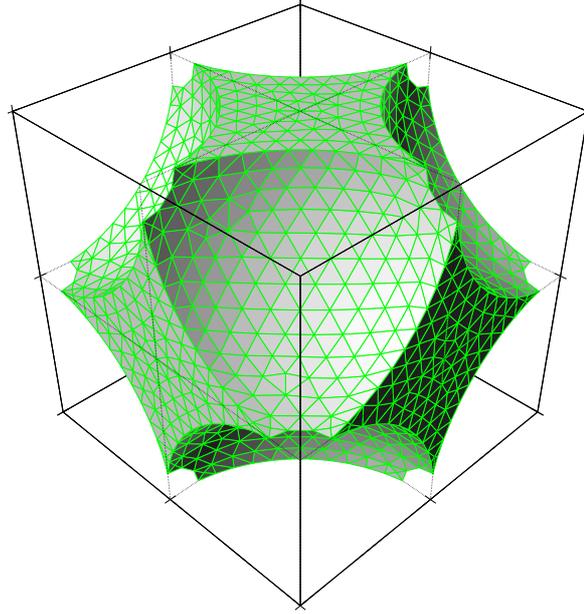


FIG. 2.10 – Maillage du domaine d'écoulement

2.8.1 Calcul de perméabilités

Les milieux considérés sont des réseaux cubiques et cubiques centrés de sphères (cf figure 2.9). Dans le cadre des variables spatiales adimensionnées, la cellule élémentaire du milieu est le cube unité. Un exemple de maillage du domaine d'écoulement limité à une cellule du milieu poreux est montré par la figure 2.10. Chaque face plane du maillage correspond à une interface avec le domaine d'écoulement d'une cellule voisine. Les faces courbes sont des portions de sphères, elles correspondent à l'interface fluide-solide. Afin de pouvoir modifier la porosité du milieu, les sphères du réseau peuvent s'interpénétrer. Dans le cas particulier de la figure 2.10, l'intersection des sphères forme un cercle de rayon 0.1.

Nous nous intéressons à trois géométries particulières. La première est un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$ dont la porosité vaut $\phi = 4.5e-1$. La deuxième est un réseau du même type mais avec $r_s = 0.57$ et dont la porosité vaut $\phi = 2.8e-1$. Le dernier est un réseau cubique centré de sphères ; la cellule représentative de ce réseau est un cube dont les sommets sont les centres de sphères de rayon $r_s = 0.56$ et dont le centre est occupé par une sphère de rayon $r_c = 0.15$. La porosité vaut $\phi = 2.9e-1$. Le tableau 2.9 donne la norme de la moyenne intrinsèque de la vitesse Υ_{av} , la valeur maximale de la norme de la vitesse Υ_{max} et la perméabilité correspondante k calculée selon la formule $k = \langle v_{h1} \rangle_f$. Il existe d'autres formules permettant d'évaluer k , par exemple en évaluant une énergie de dissipation visqueuse. De telles formules sont préférables dans le cas anisotrope car elles permettent de préserver la symétrie du tenseur \underline{k} ; voir par exemple [San80, p.55] ou [All92].

Pour chaque géométrie, deux maillages sont utilisés, un maillage plus grossier de pas $h = 0.05$ et un maillage plus fin de pas $h = 0.025$. Dans chaque cas, on donne les valeurs de Υ_{av} , Υ_{max} et k obtenues par éléments finis stabilisés (v_h^{Lag}) et par éléments finis mixtes (v_h^{CR}). On constate que dans tous les cas, le maillage grossier fournit des résultats de précision suffisante et que les deux stratégies pour évaluer le champ de vitesse discret conduisent à des résultats très proches. Les valeurs de Υ_{av} confirment les considérations de la fin de la section 2.2.2. Celles de Υ_{max} sont toujours suffisamment proches de Υ_{av} pour que l'analyse de la validité du régime de Stokes

Géométrie						
r_s	r_c	h		Υ_{av}	Υ_{max}	k
0.51		0.050	\underline{v}_h^{Lag}	4.87e-03	2.37e-02	2.17e-03
0.51		0.050	\underline{v}_h^{CR}	4.76e-03	2.36e-02	2.12e-03
0.51		0.025	\underline{v}_h^{Lag}	4.86e-03	2.38e-02	2.17e-03
0.51		0.025	\underline{v}_h^{CR}	4.75e-03	2.37e-02	2.12e-03
0.57		0.050	\underline{v}_h^{Lag}	2.09e-03	1.30e-02	5.75e-04
0.57		0.050	\underline{v}_h^{CR}	2.01e-03	1.33e-02	5.55e-04
0.57		0.025	\underline{v}_h^{Lag}	2.04e-03	1.32e-02	5.61e-04
0.57		0.025	\underline{v}_h^{CR}	1.99e-03	1.33e-02	5.49e-04
0.56	0.15	0.050	\underline{v}_h^{Lag}	1.88e-03	1.13e-02	5.41e-04
0.56	0.15	0.050	\underline{v}_h^{CR}	1.91e-03	1.14e-02	5.50e-04
0.56	0.15	0.025	\underline{v}_h^{Lag}	1.86e-03	1.14e-02	5.36e-04
0.56	0.15	0.025	\underline{v}_h^{CR}	1.87e-03	1.13e-02	5.38e-04

TAB. 2.9 – Valeurs caractéristiques de la vitesse et valeur de la perméabilité pour des réseaux de sphères.

puisse se faire en utilisant Υ_{av} pour évaluer le nombre de Reynolds. Enfin, on observe que k est monotone avec la porosité, ce qui constitue un résultat de micromécanique bien connu.

2.8.2 Extension au cas non-newtonien

Le modèle classique du fluide newtonien ne suffit pas pour étudier certains écoulements. Un autre modèle plus général consiste à écrire le tenseur des contraintes comme la dérivée d'un potentiel $\pi(\underline{d})$ [Dor05, DKU06]. Les travaux présentés ici ont été réalisés dans le cadre d'un stage de maîtrise en 2005 [Viv05]. Le point de départ est l'écriture du tenseur des contraintes sous la forme

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + \frac{\partial \pi}{\partial \underline{d}} \quad \text{avec} \quad \underline{d} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\nabla}}v + {}^t\underline{\underline{\nabla}}v)$$

où $\underline{\underline{I}}$ est le tenseur identité. Dans le cas d'un fluide newtonien,

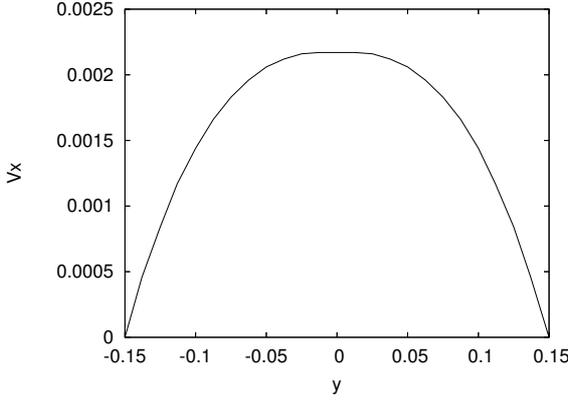
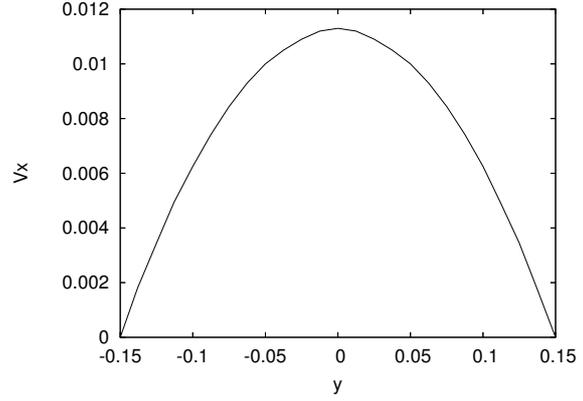
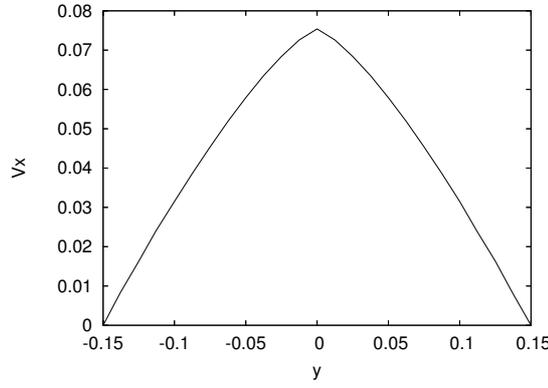
$$\pi = \mu_1 \underline{d} : \underline{d} = 2\mu_1 d^2 \quad \text{où} \quad d = \left(\frac{1}{2} \underline{d} : \underline{d} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Pour un fluide modélisé par la loi « puissance »

$$\pi = \beta d^n \quad \Rightarrow \quad \underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + \frac{n\beta}{2} d^{n-2} \underline{d}$$

Le modèle newtonien est un cas particulier de ce modèle où $\beta = 2\mu_1$ et $n = 2$. Explicitons la valeur du tenseur des contraintes en fonction de p , \underline{v} et n :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + \left[\frac{n\beta}{4} \left(\frac{1}{8} (\underline{\underline{\nabla}}v + {}^t\underline{\underline{\nabla}}v) : (\underline{\underline{\nabla}}v + {}^t\underline{\underline{\nabla}}v) \right)^{\frac{n-2}{2}} \right] (\underline{\underline{\nabla}}v + {}^t\underline{\underline{\nabla}}v)$$

FIG. 2.11 – $n = 1.6$ FIG. 2.12 – $n = 2$ FIG. 2.13 – $n = 4$

Ce qui est présenté ici est le calcul par simulations numériques du champ de vitesse pour plusieurs exemples de milieux poreux périodiques. On utilise pour cela les équations de Stokes avec une viscosité qui dépend du champ de vitesse selon le modèle de la loi « puissance ». Pour le bilan de quantité de mouvement, la formulation faible s'écrit

$$\int_{\Omega_f} \eta(\underline{v}) \underline{\nabla} v : \underline{\nabla} \varphi dz - \int_{\Omega_f} p(\underline{\nabla} \cdot \underline{\varphi}) dz = \int_{\Omega_f} \underline{\alpha} \cdot \underline{\varphi} dz \quad (2.42)$$

où p est la fluctuation périodique de pression, $\underline{\alpha}$ est le gradient de pression macroscopique de norme α , $\underline{\varphi}$ appartient à l'ensemble des fonctions test et

$$\eta(\underline{v}) = \frac{n\beta}{4} \left(\frac{1}{8} (\underline{\nabla} v + {}^t \underline{\nabla} v) : (\underline{\nabla} v + {}^t \underline{\nabla} v) \right)^{\frac{n-2}{2}} \quad (2.43)$$

Le paramètre β est fixé à $\beta = 2\mu_1$, comme dans le cas newtonien. A cause de la dépendance de η par rapport à \underline{v} , il n'existe pas de relation linéaire entre le champ de vitesse dans les pores et le gradient macroscopique de pression. Dans le cas général, il n'est donc pas possible de calculer un tenseur de perméabilité analogue à celui de la loi de Darcy dans le cas linéaire. Cependant, il existe des estimations comme celle présentée dans [Dor05]. Il existe aussi des travaux théoriques comme par exemple [BM96, Mik97, BGMP03].

Dans le cadre de ce mémoire, nous considérons des géométries de pores isotropes, et étudions des écoulements orientés selon les axes de symétrie du milieu, si bien qu'à l'échelle macroscopique, la vitesse de filtration est colinéaire au gradient de pression. On peut donc définir le coefficient

$$k(\underline{\alpha}) = -\phi \frac{1}{\alpha} \|\overline{\underline{v}(\underline{\alpha})}\|_d \quad (2.44)$$

tel que la vitesse de filtration $\langle \underline{v} \rangle_f$ vaut

$$\langle \underline{v} \rangle_f = -k(\underline{\alpha})\underline{\alpha} \quad (2.45)$$

où ϕ est la porosité du milieu et $\| \cdot \|_d$ est la norme euclidienne dans \mathbb{R}^d . Ce coefficient nous permet d'étudier l'influence du paramètre n dans (2.43) sur le module de la vitesse de filtration. Le champ de vitesse est approché dans l'espace des éléments finis de Lagrange \mathbb{P}^1 de même que la fluctuation périodique de pression p (cette méthode nécessite, comme nous l'avons déjà vu, une stabilisation de type Galerkin moindres carrés). Du fait de la non linéarité, l'algorithme itératif de Newton est utilisé pour résoudre le problème (cf [BF95]).

n	k	Newton	GMRes
1.5	2.16e-04	8	1801
1.6	4.59e-04	7	597
1.7	7.95e-04	3	187
1.8	1.21e-03	2	57
1.9	1.68e-03	2	22
2.0	2.20e-03	1	10
2.5	5.09e-03	3	19
3.0	7.93e-03	4	37
3.5	1.05e-02	4	60
4.0	1.27e-02	5	123

TAB. 2.10 – Valeurs de la perméabilité, nombre d'itérations de Newton et de GMRes pour un réseau de plaques en fonction de n .

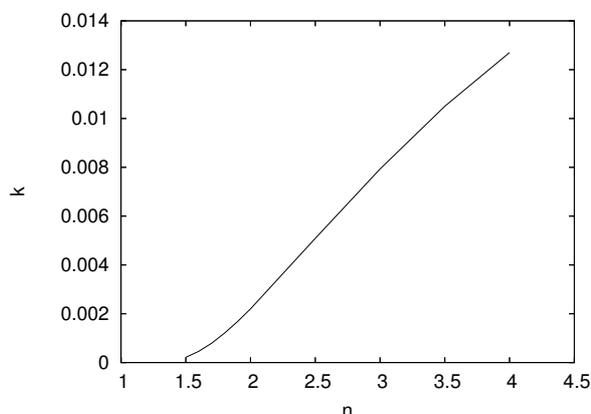


FIG. 2.14 – Perméabilité en fonction de n pour l'écoulement dans un réseau de plaques en dimension 2.

Première expérience On simule l'écoulement dans un réseau de plaques réduit à un problème en dimension 2. L'épaisseur de la cellule de base de ce milieu vaut 1. Le domaine de calcul correspondant est un rectangle de longueur $L = 1$ et d'épaisseur $a = 0.3$, la porosité de cette géométrie vaut $\varphi = 0.3$. Le pas du maillage vaut $h = 0.05$. L'écoulement se fait selon la direction \underline{e}_1 , c'est-à-dire de gauche à droite dans le cadre de la figure 2.6, $\underline{\alpha} = -\underline{e}_1$ et on impose des conditions de périodicité entre les bords gauche et droit du domaine. Les bords supérieurs et inférieurs représentent l'interface fluide-solide, donc on y impose la condition d'adhérence.

Les figures 2.11, 2.12 et 2.13 montrent le profil de la vitesse suivant une droite orthogonale à l'écoulement. On retrouve le profil parabolique pour $n = 2$. Le profil s'aplatit au centre de l'écoulement à mesure que n décroît vers 1 et, au contraire, il s'aiguise au niveau de l'axe quand n augmente. Le tableau 2.10 donne les résultats obtenus : pour chaque valeur de n , la deuxième colonne du tableau donne les valeurs de $k(-\underline{e}_1)$, la troisième colonne donne le nombre d'itérations dans l'algorithme de Newton et la quatrième donne le nombre total d'itérations pour la résolution des systèmes linéaires. La vitesse initiale au début de l'algorithme est la solution de l'écoulement newtonien, sauf pour $n = 2$ (cf tableau 2.10 et figure 2.14). On observe que le coût des simulations augmente considérablement lorsque n décroît vers 1.5 ou lorsque n dépasse 4. Par ailleurs, la valeur du paramètre n a un impact significatif sur la valeur de k .

n	k	Newton	GMRes
1.4	1.33e-03	7	4773
1.5	2.56e-03	5	849
1.6	4.12e-03	4	313
1.7	5.91e-03	3	131
1.8	7.85e-03	2	45
1.9	9.87e-03	2	21
2.0	1.19e-02	1	13
2.5	2.16e-02	3	32
3.0	2.97e-02	4	62
3.5	3.63e-02	5	153
4.0	4.15e-02	5	599

TAB. 2.11 – Valeurs de la perméabilité, nombre d’itérations de Newton et de GMRes pour un réseau cubique de disques en dimension 2 en fonction de n .

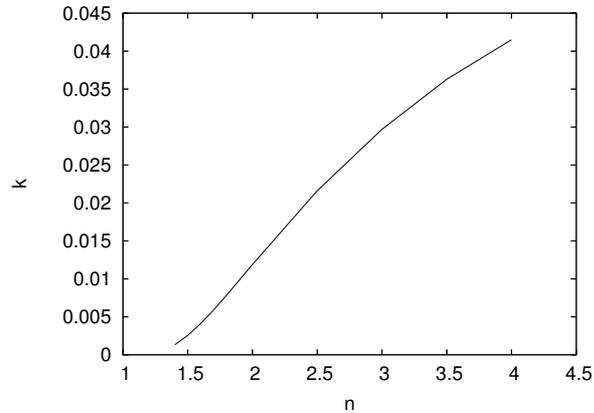


FIG. 2.15 – Perméabilité en fonction de n pour l’écoulement dans un réseau cubique de disques en dimension 2.

Deuxième expérience On simule l’écoulement dans un réseau cubique de disques en dimension 2. La cellule de base du milieu périodique est un carré de côté 1, avec en chaque sommet un disque de rayon $a = 0.3$. La porosité de ce milieu vaut $\phi = 0.72$. Le pas du maillage est fixé à $h = 0.05$. Le gradient macroscopique de pression vaut $\underline{\alpha} = -\underline{e}_1$. Les résultats sont donnés par le tableau 2.11 et la figure 2.15. Les conclusions sont analogues à celles de la première expérience.

n	k	Newton	GMRes
1.7	2.26e-04	8	3295
1.8	3.45e-04	2	86
1.9	4.83e-04	2	40
2.0	6.36e-04	1	27
2.5	1.54e-03	3	65
3.0	2.47e-03	4	142
3.5	3.32e-03	5	364
4.0	4.05e-03	5	1962

TAB. 2.12 – Valeurs de la perméabilité, nombre d’itérations de Newton et de GMRes pour un réseau cubique centré de disques en dimension 2 en fonction de n .

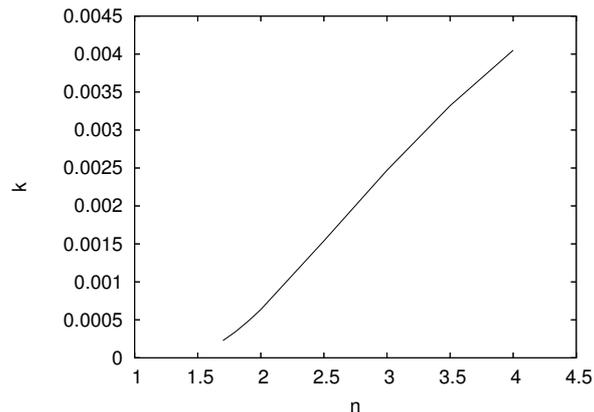


FIG. 2.16 – Perméabilité en fonction de n pour un écoulement dans un réseau cubique centré de disques en dimension 2.

Troisième expérience On simule l’écoulement dans un réseau cubique centré de disques en dimension 2. La cellule de base du milieu périodique est un carré de côté 1, avec un disque de rayon $a = 0.3$ centré en chaque sommet et au centre. La porosité de ce milieu vaut $\varphi = 0.435$.

Le pas du maillage est fixé à $h = 0.3$. Le gradient macroscopique de pression vaut $\underline{\alpha} = -\underline{e}_1$. Les résultats sont donnés par le tableau 2.12 et la figure 2.16. Les conclusions restent analogues à celles de la première expérience.

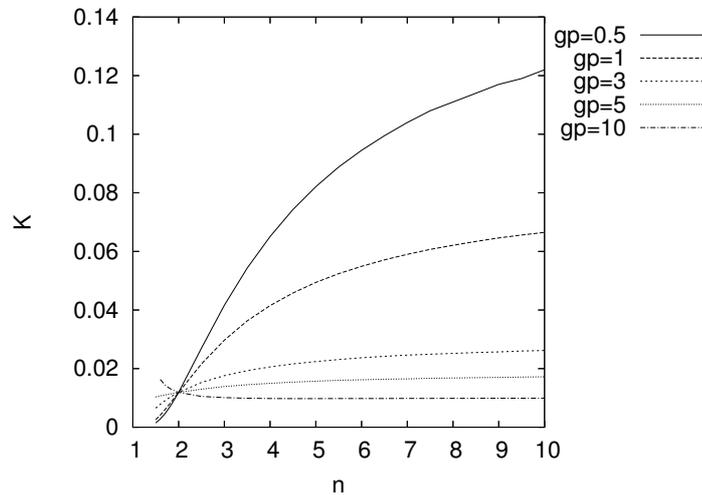


FIG. 2.17 – Evolution de la perméabilité en fonction de n pour différentes valeurs du gradient macroscopique de pression pour un réseau cubique de disques en dimension 2.

Quatrième expérience : influence du module du gradient de pression Pour étudier l'influence du module du gradient macroscopique de pression sur le module de la vitesse, on se place dans le cas du réseau cubique de disques en dimension 2 considéré pour la deuxième expérience et on calcule le champ \underline{v} solution du problème de Stokes (2.42) avec $\underline{\alpha} = -\alpha \underline{e}_1$ pour différentes valeurs de α . La figure 2.17 montre l'influence de la valeur du gradient de pression sur le calcul de k . Ici, nous avons poussé les calculs jusqu'à $n = 10$. On constate que toutes les courbes donnent, comme attendu, la même valeur de k pour $n = 2$. Mais la non-linéarité du problème pour les autres valeurs fait bien apparaître l'influence de α sur k . De plus, l'influence du gradient de pression est différente si $n < 2$ ou $n > 2$: pour $n < 2$, k est croissante en le gradient de pression, alors que pour $n > 2$, k est décroissante en le gradient de pression.

Chapitre 3

Transport diffusif monophasique en présence d'advection

3.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de calculer et d'étudier les tenseurs diffusif et dispersif qui apparaissent dans le problème de transport d'un soluté à l'échelle macroscopique en présence d'advection. Soit γ un soluté dissous dans le fluide qui occupe l'espace poreux et ρ_γ sa concentration. En régime permanent, l'usage consiste à écrire l'équation de transport à l'échelle macroscopique sous la forme [PJ63, BB90, dM94]

$$\underline{\nabla}_X \cdot \left(\phi \overline{\rho_\gamma} \underline{\bar{v}}^f + \underline{J}_\gamma^{\text{diff}} + \underline{J}_\gamma^{\text{disp}} \right) = 0 \quad (3.1)$$

où \underline{X} désigne la variable spatiale (dimensionnée), $\underline{\bar{v}}^f$ le champ de vitesse de la phase fluide, $\underline{J}_\gamma^{\text{diff}}$ le flux diffusif macroscopique et $\underline{J}_\gamma^{\text{disp}}$ le flux dispersif macroscopique. Les tenseurs de diffusion et de dispersion permettent d'exprimer $\underline{J}_\gamma^{\text{diff}}$ et $\underline{J}_\gamma^{\text{disp}}$ en fonction du gradient de concentration macroscopique :

$$\underline{J}_\gamma^{\text{diff}} = -D_\gamma \underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \cdot \underline{\nabla}_X \overline{\rho_\gamma}^f \quad \text{et} \quad \underline{J}_\gamma^{\text{disp}} = -D_\gamma \underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}} \underline{\nabla}_X \overline{\rho_\gamma}^f$$

où les tenseurs $\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}$ et $\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}$ sont sans dimension et où D_γ est le coefficient de diffusion du soluté dans le solvant dans un domaine fluide infini.

La section 3.2, après avoir introduit les équations de départ, présente la mise en œuvre de la technique de développement asymptotique à double échelle pour homogénéiser le problème de transport. Cette technique permet de retrouver l'équation macroscopique (3.1). Le flux diffusif macroscopique correspond à la moyenne apparente du flux diffusif microscopique \underline{j}_γ :

$$\underline{J}_\gamma^{\text{diff}} = \langle \underline{j}_\gamma \rangle_f$$

tandis que le flux dispersif s'écrit en fonction des fluctuations de la concentration et de la vitesse sous la forme

$$\underline{J}_\gamma^{\text{disp}} = \langle \tilde{\rho}_\gamma \tilde{\underline{v}} \rangle_f$$

La technique de développement asymptotique à double échelle permet également de construire un problème d'advection-diffusion à l'échelle microscopique et fournit une expression des tenseurs

de diffusion et dispersion en fonction de la solution du problème microscopique. Ce dernier fait apparaître le champ de vitesse du fluide. Nous donnons ensuite une analyse mathématique du problème d'advection-diffusion en distinguant le cas où le champ de vitesse est la solution exacte du problème de Stokes et les trois types d'approximation présentés au chapitre 2. La section 3.3 analyse l'approximation du problème de transport microscopique par la méthode des éléments finis. La section 3.4 décrit la mise en œuvre numérique de l'approximation. Nous y montrons le caractère mal posé du système linéaire lorsque le champ de vitesse n'est pas à divergence nulle et que la contrainte de moyenne nulle est éliminée du problème discret, puis nous présentons la solution adoptée pour pallier cette difficulté. La section 3.5 compare les résultats de l'approximation du problème microscopique sur des cas géométriquement simples avec des solutions analytiques connues. Enfin, la section 3.6 présente une étude du comportement des tenseurs diffusif et dispersif en fonction du module de la vitesse d'écoulement et de la morphologie des pores. Comme au chapitre 2, deux types de géométries sont considérées : des réseaux cubiques et des réseaux cubiques centrés de sphères.

3.2 Construction du modèle

L'objet de cette section est de faire le lien entre les tenseurs $\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}$ et $\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}$ intervenant dans l'équation macroscopique (3.1) et un problème microscopique posé à l'échelle des pores. La dérivation que nous présentons est formelle et se base sur les outils usuels des développements asymptotiques à double échelle rappelés au chapitre 1. La justification mathématique rigoureuse de la dérivation ci-dessous est un problème difficile. On peut citer [MPP85, MK99] pour une analyse du cas où la vitesse microscopique est de moyenne nulle. Dans le cas général, on peut citer [Mau91], l'utilisation d'un repère mobile à la vitesse moyenne du champ microscopique [JKO94] et les techniques d'ondes de Bloch [AR06].

3.2.1 Equations à homogénéiser

Soit \underline{v}_γ la vitesse du soluté et \underline{v} la vitesse du fluide. Le flux diffusif \underline{j}_γ du soluté γ par rapport au fluide s'écrit

$$\underline{j}_\gamma = \rho_\gamma(\underline{v}_\gamma - \underline{v})$$

Les équations utilisées pour décrire le transport du soluté à l'échelle microscopique sont la loi de Fick, le bilan de masse et l'hypothèse qu'il n'y a pas d'échange entre les phases fluide et solide. La loi de Fick fait intervenir le coefficient de diffusion D_γ du soluté γ dans le fluide. Ce coefficient correspond à la diffusion du soluté dans un domaine fluide infini, c'est-à-dire en l'absence d'obstacle qui pourrait perturber la diffusion. Le coefficient D_γ est donc indépendant de la morphologie du pore et pour simplifier nous supposons qu'il est constant. De plus, nous considérons que le transport s'effectue en régime stationnaire. Les équations à homogénéiser s'écrivent donc

$$\left\{ \begin{array}{ll} \underline{j}_\gamma = -D_\gamma \underline{\nabla}_y \rho_\gamma & \text{(phase fluide)} \\ \underline{\nabla}_y \cdot \underline{j}_\gamma + \underline{\nabla}_y \cdot (\rho_\gamma \underline{v}) = 0 & \text{(phase fluide)} \\ \underline{j}_\gamma \cdot \underline{n} = 0 & \text{(interface fluide-solide)} \end{array} \right.$$

L'écoulement du fluide est de type newtonien incompressible. Le champ \underline{v} vérifie donc $\underline{\nabla}_y \cdot \underline{v} = 0$. Avec cette hypothèse et en éliminant le flux diffusif \underline{j}_γ , il vient

$$\begin{cases} -D_\gamma \Delta_y \rho_\gamma + \underline{v} \cdot \underline{\nabla}_y \rho_\gamma = 0 & (\text{phase fluide}) \\ \underline{\nabla}_y \rho_\gamma \cdot \underline{n} = 0 & (\text{interface fluide-solide}) \end{cases} \quad (3.2)$$

3.2.2 Développement asymptotique à double échelle

Comme pour le problème du chapitre précédent, la technique de développement asymptotique à double échelle est appliquée au système des équations de transport advectif-diffusif (3.2). L'introduction des variables d'espace sans dimension \underline{x} et \underline{z} conduit au système

$$\begin{cases} -D_\gamma \left(\frac{1}{\ell^2} \Delta_z \rho_\gamma + \frac{1}{\ell L} (\underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \rho_\gamma + \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma) + \frac{1}{L^2} \Delta_x \rho_\gamma \right) + \underline{v} \cdot \left(\frac{1}{\ell} \underline{\nabla}_z \rho_\gamma + \frac{1}{L} \underline{\nabla}_x \rho_\gamma \right) = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\frac{1}{\ell} \underline{\nabla}_z \rho_\gamma + \frac{1}{L} \underline{\nabla}_x \rho_\gamma \right) \cdot \underline{n} = 0 & (\partial\Omega'_{fs}) \end{cases} \quad (3.3)$$

On distingue différentes valeurs caractéristiques pour la vitesse :

$$v_0 = \frac{D_\gamma}{L} \quad v_1 = \frac{v_0}{\delta} = \frac{D_\gamma}{\ell} \quad v_2 = \frac{v_0}{\delta^2} = \frac{D_\gamma L}{\ell^2}$$

Lorsque le module de \underline{v} est de l'ordre de v_0 , le transport est en régime dit d'*advection modérée*. La diffusion est prédominante et la contribution de l'écoulement du fluide est négligeable. Le transport du soluté γ ne dépend alors que de la tortuosité du milieu et le phénomène de dispersion est négligeable. Par ailleurs, pour une vitesse de l'ordre de v_2 le régime est *non-homogénéisable*.

Le cas étudié ici est celui où la vitesse est de l'ordre de v_1 , ce qui signifie que le nombre de Péclet à l'échelle du pore est de l'ordre de l'unité. Le transport est alors en régime d'*advection dominante*. Nous introduisons la vitesse adimensionnée \underline{v}^* telle que $\underline{v} = v_1 \underline{v}^*$. Le rapport entre l'ordre de grandeur de \underline{v}^* et celui de la vitesse \underline{v}' définie dans l'équation (2.4) est noté λ . On a donc $\underline{v}^* = \lambda \underline{v}'$ avec

$$\lambda = \frac{\alpha \ell^3}{\mu_1 D_\gamma} \quad (3.4)$$

Le régime d'advection dominante se caractérise par la condition que \underline{v}^* est d'ordre un. En utilisant le fait que \underline{v}' est d'ordre Υ_{av} , cela se traduit par la condition suivante sur λ :

$$\lambda \leq \frac{1}{\Upsilon_{av}} \quad (3.5)$$

Après simplification par $\frac{D_\gamma}{L^2}$ de la première équation de (3.3) et par $\frac{1}{L}$ de la deuxième, on obtient

$$\begin{cases} \frac{1}{\delta^2} \Delta_z \rho_\gamma + \frac{1}{\delta} (\underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \rho_\gamma + \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma) + \Delta_x \rho_\gamma + \frac{1}{\delta} \underline{v}^* \cdot \left(\frac{1}{\delta} \underline{\nabla}_z \rho_\gamma + \underline{\nabla}_x \rho_\gamma \right) = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\frac{1}{\delta} \underline{\nabla}_z \rho_\gamma + \underline{\nabla}_x \rho_\gamma \right) \cdot \underline{n} = 0 & (\partial\Omega'_{fs}) \end{cases} \quad (3.6)$$

Notons que le facteur d'adimensionnement de ρ_γ n'intervient pas directement ; il n'est donc pas introduit.

Les quantités ρ_γ et \underline{v}^* sont développées selon les puissances de δ :

$$\begin{aligned}\rho_\gamma(\underline{x}, \underline{z}) &= \rho_\gamma^{(0)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta \rho_\gamma^{(1)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta^2 \rho_\gamma^{(2)}(\underline{x}, \underline{z}) + \dots \\ \underline{v}^*(\underline{x}, \underline{z}) &= \underline{v}^{*(0)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta \underline{v}^{*(1)}(\underline{x}, \underline{z}) + \delta^2 \underline{v}^{*(2)}(\underline{x}, \underline{z}) + \dots\end{aligned}$$

où pour tout i , les fonctions $\rho_\gamma^{(i)}$ et $\underline{v}^{*(i)}$ sont réputées du même ordre et \underline{z} -périodiques.

L'ordre δ^{-2} dans l'équation de bilan de masse de (3.6) et **l'ordre** δ^{-1} dans la condition d'interface de (3.6) donnent

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta_z \rho_\gamma^{(0)} + \underline{v}^{*(0)} \cdot \nabla_z \rho_\gamma^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \nabla_z \rho_\gamma^{(0)} \cdot \underline{n} = 0 & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \rho_\gamma^{(0)} \quad \underline{z} - \text{périodique} & (\partial\Omega'_{ff}) \end{array} \right\} \implies \rho_\gamma^{(0)}(\underline{z}, \underline{x}) = \rho_\gamma^{(0)}(\underline{x}) \implies \tilde{\rho}_\gamma^{(0)} = 0 \quad (3.7)$$

On observera également que la moyenne intrinsèque de la première équation de (3.7) donne l'équation triviale $0 = 0$.

L'ordre δ^{-1} dans l'équation de bilan de masse de (3.6), **l'ordre** δ^0 dans la condition d'interface de (3.6) et le résultat précédent conduisent au système

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta_z \rho_\gamma^{(1)} + \underline{v}^{*(0)} \cdot \nabla_x \rho_\gamma^{(0)} + \underline{v}^{*(0)} \cdot \nabla_z \rho_\gamma^{(1)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \nabla_z \rho_\gamma^{(1)} \cdot \underline{n} = -\nabla_x \rho_\gamma^{(0)} \cdot \underline{n} & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \rho_\gamma^{(1)} \quad \underline{z} - \text{périodique} & (\partial\Omega'_{ff}) \end{array} \right.$$

Rappelons qu'on dispose de la décomposition

$$\rho_\gamma^{(1)}(\underline{z}, \underline{x}) = \tilde{\rho}_\gamma^{(1)}(\underline{z}, \underline{x}) + \overline{\rho_\gamma^{(1)}}^f(\underline{x})$$

où $\tilde{\rho}_\gamma^{(1)}$ est de moyenne nulle par construction. De plus, toujours par construction, $\overline{\rho_\gamma^{(1)}}^f$ ne dépend pas de \underline{z} ; toutes ses dérivées par rapport à \underline{z} sont donc nulles. Ces remarques permettent d'écrire le système

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} + \underline{v}^{*(0)} \cdot \nabla_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} = -\underline{v}^{*(0)} \cdot \nabla_x \rho_\gamma^{(0)} & (\Omega'_f) \\ \nabla_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} \cdot \underline{n} = -\nabla_x \rho_\gamma^{(0)} \cdot \underline{n} & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} \quad \underline{z} - \text{périodique} & (\partial\Omega'_{ff}) \end{array} \right. \quad (3.8)$$

Le système précédent montre que $\tilde{\rho}_\gamma^{(1)}$ dépend linéairement de $\nabla_x \rho_\gamma^{(0)}$. Il existe donc un vecteur de localisation $\underline{\chi}(\underline{z}, \underline{x})$ tel que $\overline{\underline{\chi}}^f = \underline{0}$ et

$$\tilde{\rho}_\gamma^{(1)} = \underline{\chi} \cdot \nabla_x \rho_\gamma^{(0)}$$

Le champ $\underline{\chi}$ est sans dimension. Il vérifie le système suivant

$$\left\{ \begin{array}{ll} \left(-\Delta_z \underline{\chi} + \underline{\underline{\nabla}}_z \underline{\chi} \cdot \underline{v}^{*(0)} + \underline{v}^{*(0)} \right) \cdot \nabla_x \rho_\gamma^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\underline{\nabla}}_z \underline{\chi} \cdot \underline{n} + \underline{n} \right) \cdot \nabla_x \rho_\gamma^{(0)} = 0 & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \underline{\chi} \quad \underline{z} - \text{périodique} & (\partial\Omega'_{ff}) \\ \int_{\Omega'_f} \underline{\chi} dz = \underline{0} & \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Les conditions périodiques, les conditions de Dirichlet et $\underline{\nabla}_z \cdot \underline{v}^{*(0)} = 0$ impliquent que $\overline{\underline{v}^{*(0)} \cdot \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)}}^f = 0$. Ainsi, la moyenne intrinsèque de la première équation de (3.9) donne

$$\overline{\underline{v}^{*(0)}}^f \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} = 0 \quad (3.10)$$

qui constitue une condition de compatibilité à imposer sur les grandeurs macroscopiques pour que les développements ci-dessus aient un sens. Le champ $\underline{v}^{(0)}$ étant une donnée du problème, la valeur de $\underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)}$ peut être choisie arbitrairement dans l'hyperplan $(\overline{\underline{v}^{*(0)}}^f)^\perp$.

On considère le problème suivant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\Delta_z \underline{\chi} + \underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{v}^{*(0)} = \overline{\underline{v}^{*(0)}}^f - \underline{v}^{*(0)} & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{n} \right) = -\underline{n} & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \underline{\chi} \text{ } \underline{z} \text{ - périodique} & (\partial\Omega'_{ff}) \\ \int_{\Omega'_f} \underline{\chi} dz = \underline{0} & \end{array} \right. \quad (3.11)$$

Le caractère bien posé de ce problème est étudié dans la section 3.2.3. Si $\underline{\chi}$ est une solution de (3.11), il est clair que $\underline{\chi}$ vérifie également (3.9). Réciproquement, on peut montrer que toute solution de (3.9) peut s'écrire sous la forme $\underline{\chi} = \underline{\chi}_1 + g(\underline{z}) \overline{\underline{v}^{*(0)}}^f(\underline{x})$ où $\underline{\chi}_1$ est solution de (3.11) et g ne dépend que de la variable microscopique \underline{z} . De par (3.10), $\tilde{\rho}_\gamma^{(1)}$ peut donc être évalué en utilisant indifféremment $\underline{\chi}$ ou $\underline{\chi}_1$.

Analyse des ordres supérieurs

Poursuivons l'analyse des ordres supérieurs du problème microscopique, ce qui nous permettra de retrouver l'équation de transport macroscopique.

L'ordre δ^0 dans l'équation de continuité de (3.6) et **l'ordre** δ^1 dans la condition d'interface de (3.6) conduisent à

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\Delta_z \tilde{\rho}_\gamma^{(2)} - \underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} - \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} - \Delta_x \rho_\gamma^{(0)} \\ \quad + \underline{v}^{*(0)} \cdot \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(2)} + \underline{v}^{*(1)} \cdot \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} + \underline{v}^{*(0)} \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(1)} + \underline{v}^{*(1)} \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(2)} \cdot \underline{n} = -\underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(1)} \cdot \underline{n} & (\partial\Omega'_{fs}) \end{array} \right. \quad (3.12)$$

La moyenne de la première équation du système (3.12), en remplaçant $\tilde{\rho}_\gamma^{(1)}$ par son expression en fonction de $\underline{\chi}$ et après simplification en utilisant les propriétés du champ de vitesse obtenues par l'homogénéisation du problème de Stokes (équations (2.15) et (2.17)) donne

$$\underline{\nabla}_x \cdot \left(\rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{*(1)}}^f + \overline{\rho_\gamma^{(1)} \underline{v}^{*(0)}}^f - \left(\underline{I} + {}^t \underline{\nabla}_z \underline{\chi} \right) \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} + \overline{\underline{v}^{*(0)} \otimes \underline{\chi}}^f \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} \right) = 0 \quad (3.13)$$

En effet,

- $\overline{-\Delta_z \tilde{\rho}_\gamma^{(2)} - \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(1)}}^f = -\frac{1}{|\Omega'_f|} \int_{\partial\Omega'_f} \left(\underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(2)} + \underline{\nabla}_x \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} \right) \cdot \underline{n} dS_z = 0$ à cause de la deuxième équation de (3.12).
- $\overline{-\underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)}}^f = -\underline{\nabla}_x \cdot \overline{\underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)}}^f = -\underline{\nabla}_x \cdot \left(\overline{{}^t \underline{\nabla}_z \underline{\chi}}^f \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} \right)$.

- $\overline{\underline{v}^{*(0)} \cdot \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(2)}}^f = \overline{\underline{\nabla}_z \cdot \left(\tilde{\rho}_\gamma^{(2)} \underline{v}^{*(0)} \right)}^f = \frac{1}{|\Omega_f|} \int_{\partial\Omega_f} \tilde{\rho}_\gamma^{(2)} \underline{v}^{*(0)} \cdot \underline{n} dS = 0$ car $\tilde{\rho}_\gamma^{(2)}$ et $\underline{v}^{*(0)}$ sont périodiques et $\underline{v}^{*(0)}$ est nulle sur $\partial\Omega_{fs}$.
- En utilisant (2.14) et (2.15), on montre que

$$\overline{\underline{v}^{*(1)} \cdot \underline{\nabla}_z \tilde{\rho}_\gamma^{(1)} + \underline{v}^{*(0)} \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(1)}}^f = \overline{\underline{\nabla}_z \cdot \left(\tilde{\rho}_\gamma^{(1)} \underline{v}^{*(1)} \right) + \underline{\nabla}_x \cdot \left(\rho_\gamma^{(1)} \underline{v}^{*(0)} \right)}^f$$

Or, $\overline{\underline{\nabla}_z \cdot \left(\tilde{\rho}_\gamma^{(1)} \underline{v}^{*(1)} \right)}^f = 0$ à cause des conditions périodiques et de la condition d'adhérence et

$$\overline{\underline{\nabla}_x \cdot \left(\rho_\gamma^{(1)} \underline{v}^{*(0)} \right)}^f = \underline{\nabla}_x \cdot \left(\overline{\rho_\gamma^{(1)} \underline{v}^{*(0)}}^f + \overline{\tilde{\rho}_\gamma^{(1)} \tilde{v}^{*(0)}}^f \right) = \underline{\nabla}_x \cdot \left(\overline{\rho_\gamma^{(1)} \underline{v}^{*(0)}}^f + \overline{\tilde{v}^{*(0)} \otimes \underline{\chi}}^f \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} \right)$$

- $\overline{\underline{v}^{*(1)} \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)}}^f = \overline{\underline{v}^{*(1)}}^f \cdot \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} = \underline{\nabla}_x \cdot \left(\rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{*(1)}}^f \right)$ car $\underline{\nabla}_x \cdot \overline{\underline{v}^{*(0)}}^f = 0$ d'après (2.17).

L'équation (3.10) correspond à l'ordre δ^0 de la moyenne de l'équation de conservation de la masse du soluté, tandis que l'équation (3.13) correspond aux termes d'ordre δ^1 . En revenant aux quantités dimensionnées dans (3.13), en calculant $\phi(\frac{1}{\delta}(3.10)+(3.13))$ et en remultipliant par $\frac{D_\gamma}{L^2}$, on obtient la moyenne de l'équation de conservation de la masse du soluté développée jusqu'à l'ordre δ^1 sous la forme

$$\begin{aligned} & \frac{1}{L} \underline{\nabla}_x \cdot \left(\phi \rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{(0)}}^f + \delta \phi \rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{(1)}}^f + \delta \phi \rho_\gamma^{(1)} \overline{\underline{v}^{(0)}}^f \right) \\ & + \frac{1}{L} \underline{\nabla}_x \cdot \left(-\phi D_\gamma (\underline{I} + \overline{\underline{\nabla}_z \underline{\chi}}^f) \cdot \frac{1}{L} \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} + \phi D_\gamma \overline{\underline{v}^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \cdot \frac{1}{L} \underline{\nabla}_x \rho_\gamma^{(0)} \right) = 0 \end{aligned}$$

En introduisant la variable macroscopique dimensionnée $\underline{X} = \frac{1}{L} \underline{x}$ et en observant que comme la moyenne de $\underline{\chi}$ est nulle, $\overline{\underline{v}^{*(0)} \otimes \underline{\chi}}^f = \overline{\underline{v}^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi}$, nous obtenons

$$\begin{aligned} & \underline{\nabla}_X \cdot \left(\phi \rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{(0)}}^f + \delta \phi \rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{(1)}}^f + \delta \phi \rho_\gamma^{(1)} \overline{\underline{v}^{(0)}}^f \right) \\ & + \underline{\nabla}_X \cdot \left(-\phi D_\gamma (\underline{I} + \overline{\underline{\nabla}_z \underline{\chi}}^f) \cdot \underline{\nabla}_X \rho_\gamma^{(0)} + \phi D_\gamma \overline{\underline{v}^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \cdot \underline{\nabla}_X \rho_\gamma^{(0)} \right) = 0 \end{aligned}$$

En introduisant les tenseurs de diffusion et de dispersion homogénéisés (sans dimension)

$$\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} = \phi \left(\underline{I} + \overline{\underline{\nabla}_z \underline{\chi}}^f \right) \quad \text{et} \quad \underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}} = -\phi \overline{\underline{v}^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \quad (3.14)$$

il vient

$$\begin{aligned} & \underline{\nabla}_X \cdot \left(\phi \rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{(0)}}^f + \delta \phi \rho_\gamma^{(0)} \overline{\underline{v}^{(1)}}^f + \delta \phi \rho_\gamma^{(1)} \overline{\underline{v}^{(0)}}^f \right) \\ & + \underline{\nabla}_X \cdot \left(-D_\gamma \underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \cdot \underline{\nabla}_X \rho_\gamma^{(0)} - D_\gamma \underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}} \cdot \underline{\nabla}_X \rho_\gamma^{(0)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.15)$$

En toute rigueur, l'équation (3.15) ne nous permet pas d'obtenir l'équation macroscopique de conservation de la masse du soluté car les termes advectif et diffusif-dispersif sont d'ordres différents. Moyennant cette approximation et en posant $\underline{H} = \underline{\nabla}_X \overline{\rho_\gamma}^f$, nous obtenons

$$\underline{\nabla}_X \cdot (\phi \overline{\rho_\gamma}^f \underline{v}^f) + \underline{\nabla}_X \cdot (-D_\gamma \underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H} - D_\gamma \underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H}) = 0 \quad (3.16)$$

On retrouve alors l'équation (3.1) en identifiant le flux diffusif macroscopique à

$$\underline{J}_\gamma^{\text{diff}} = -D_\gamma \underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H}$$

et le flux dispersif macroscopique à

$$\underline{J}_\gamma^{\text{disp}} = -D_\gamma \underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H}$$

On constate qu'à l'ordre 1 en δ , on a

$$\underline{J}_\gamma^{\text{diff}} = \langle \underline{j}_\gamma \rangle_f \quad \text{et} \quad \underline{J}_\gamma^{\text{disp}} = \langle \tilde{\rho}_\gamma \tilde{v} \rangle_f$$

Remarque sur la validité des modèles

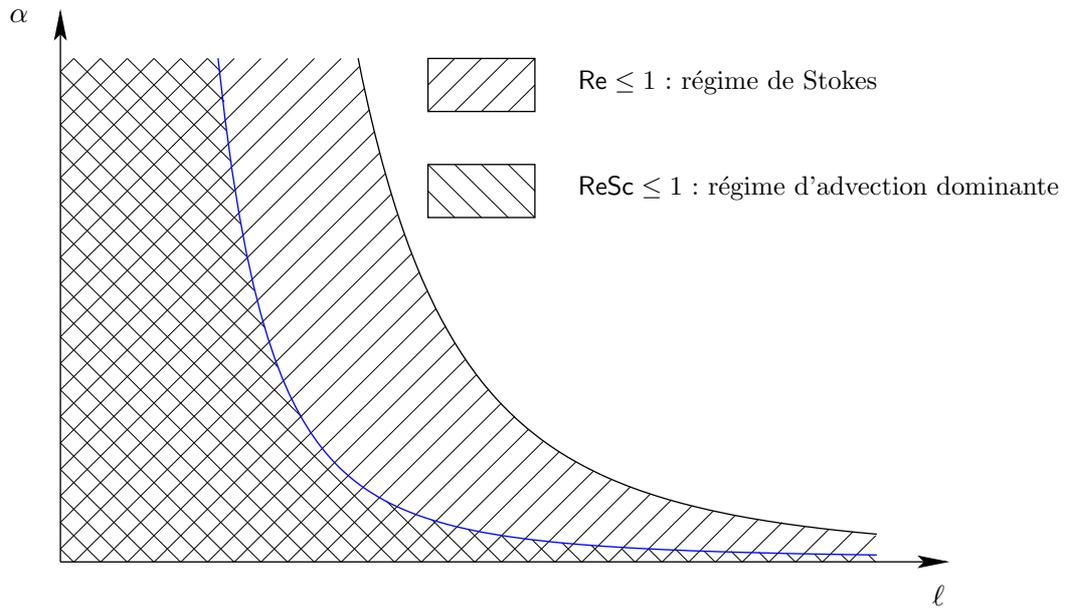


FIG. 3.1 – Domaines de validité en fonction de ℓ et α

Rappelons que pour des pores de taille ℓ , un gradient macroscopique de pression $\underline{\alpha} = \alpha \underline{e}_\alpha$ (où \underline{e}_α est un vecteur unitaire) et une viscosité μ_1 , l'ordre de grandeur de la vitesse est $V = \frac{\alpha \ell^2 \Upsilon_{\text{av}}}{\mu_1}$.

Le régime de Stokes est valable si $\frac{\rho \ell^2 \alpha \Upsilon_{\text{av}}}{\mu_1} \times \frac{\ell}{\mu_1} \lesssim 1$ de par la condition sur le nombre de Reynolds Re . La courbe qui fixe la limite haute pour les valeurs de α en fonction de ℓ (ρ et μ_1 étant supposés constants) est donnée par $\alpha = \frac{\mu_1^2}{\rho \ell^3 \Upsilon_{\text{av}}}$ (cf figure 3.1).

Le problème (3.9) est valable si l'ordre de grandeur de la vitesse est égal à $v_1 = \frac{D_\gamma}{\ell}$, c'est-à-dire, en introduisant le nombre de Peclet à l'échelle des pores Pe , si

$$\text{Pe} = \frac{V \ell}{D_\gamma} \sim 1.$$

En utilisant le nombre de Reynolds Re défini dans (2.11) et en introduisant le nombre de Schmidt $\text{Sc} = \frac{\mu_1}{\rho D_\gamma}$, on constate que

$$\text{Pe} = \text{Re} \cdot \text{Sc}.$$

Comme la validité du régime de Stokes suppose que $\text{Re} \leq 1$, une condition suffisante pour la validité du régime d'advection dominante revient à $\text{Sc} \leq 1$. La figure 3.1 illustre cette situation. Le régime de Stokes correspond aux couples (α, ℓ) situés en dessous de la courbe d'équation $\alpha \ell^3 = \frac{\mu_1^2}{\rho \Upsilon_{\text{av}}}$, le régime d'advection dominante correspond aux couples (α, ℓ) situés au voisinage de la courbe d'équation $\alpha \ell^3 = \frac{\mu_1 D_\gamma}{\Upsilon_{\text{av}}}$, et cette dernière se situe en dessous de la première si $\text{Sc} \leq 1$.

3.2.3 Formulation mathématique et caractère bien posé

L'objet de cette section est d'examiner le caractère bien posé du problème (3.11). On traite d'abord le cas où le champ de vitesse est la solution exacte du problème de Stokes présenté au chapitre 2. Ce champ étant en fait approché par éléments finis, nous traitons ensuite le cas d'un champ de vitesse approché, ce qui mettra en évidence le rôle joué par la divergence de ce champ de vitesse. Pour alléger les notations, les primes signalant les quantités adimensionnelles et les indices signalant les variables de dérivation sont éliminés. Il n'y a pas d'ambiguïté puisque tout le problème dépend de l'échelle microscopique et donc la seule variable utilisée est \underline{z} . Le système à étudier est

$$\begin{cases} -\Delta \underline{\chi} + \underline{\nabla} \underline{\chi} \cdot \underline{v} = \underline{\bar{v}}^f - \underline{v} & (\Omega_f) \\ \underline{\nabla} \underline{\chi} \cdot \underline{n} = -\underline{n} & (\partial \Omega_{\text{fs}}) \\ \underline{\chi} \text{ périodique} & (\partial \Omega_{\text{ff}}) \\ \int_{\Omega_f} \underline{\chi} dz = \underline{0} \end{cases} \quad (3.17)$$

- $\underline{\chi}$ est l'inconnue du problème. C'est une fonction à valeurs dans \mathbb{R}^d (d est la dimension de l'espace).
- \underline{v} est donnée. C'est le champ de vitesse sur Ω_f , il s'annule sur $\partial \Omega_{\text{fs}}$, est périodique sur $\partial \Omega_{\text{ff}}$ et à divergence nulle.
- $\underline{\bar{v}}^f$ représente la moyenne intrinsèque de la vitesse sur le domaine Ω_f .

Pour toute fonction $\underline{\varphi}$ suffisamment régulière, on obtient

$$-\int_{\Omega_f} \Delta \underline{\chi} \cdot \underline{\varphi} dz + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\chi} \cdot \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz = \int_{\Omega_f} (\underline{\bar{v}}^f - \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz$$

En intégrant par parties, l'équation devient

$$\int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \underline{\chi} : \underline{\nabla} \underline{\varphi} dz - \int_{\partial \Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\chi} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{\varphi} dS_z + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\chi} \cdot \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz = \int_{\Omega_f} (\underline{\bar{v}}^f - \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz \quad (3.18)$$

L'intégrale $\int_{\partial \Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\chi} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{\varphi} dS_z$ est décomposée sur $\partial \Omega_{\text{fs}}$ et sur $\partial \Omega_{\text{ff}}$. En supposant que la fonction $\underline{\chi}$ est suffisamment régulière pour que les composantes normales de $\underline{\nabla} \underline{\chi}$ soient périodiques sur $\partial \Omega_{\text{ff}}$, que $\underline{\varphi}$ est périodique sur $\partial \Omega_{\text{ff}}$ et en utilisant la deuxième équation du système (3.17), l'équation (3.18) devient

$$\int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \underline{\chi} : \underline{\nabla} \underline{\varphi} dz + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\chi} \cdot \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz = \int_{\Omega_f} (\underline{\bar{v}}^f - \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz - \int_{\partial \Omega_{\text{fs}}} \underline{\varphi} \cdot \underline{n} dS_z$$

Soit l'espace de fonctions à valeurs vectorielles suivant :

$$\mathcal{V} = \left\{ \underline{\varphi} \in (H_{\text{per}}^1(\Omega_f))^d ; \int_{\Omega_f} \underline{\varphi} dz = \underline{0} \right\}$$

Lemme 3.1. L'application qui à $\underline{\varphi} \in \mathcal{V}$ associe $\|\underline{\nabla}\underline{\varphi}\|_{0,\Omega_f} \in \mathbb{R}_+$ est une norme sur \mathcal{V} et celle-ci est équivalente à la norme canonique $\|\cdot\|_{1,\Omega_f}$.

Preuve. C'est une conséquence immédiate de l'inégalité de Poincaré-Wirtinger qui stipule qu'il existe une constante $c > 0$ telle que

$$\forall \varphi \in H_{\text{per}}^1(\Omega_f), \quad c \int_{\Omega_f} (\varphi - \bar{\varphi}^f)^2 dz \leq \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}\varphi^2 dz$$

On applique cette inégalité composante par composante sur les fonctions de \mathcal{V} et on utilise le fait que ces fonctions sont de moyenne nulle. \square

Pour tout champ de vecteur \underline{w} , $a(\underline{w}; \cdot, \cdot)$ désigne la forme bilinéaire définie sur $\mathcal{V} \times \mathcal{V}$ par

$$a(\underline{w}; \underline{\varphi}, \underline{\psi}) = \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}\underline{\varphi} : \underline{\nabla}\underline{\psi} dz + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla}\underline{\varphi} \cdot \underline{w}) \cdot \underline{\psi} dz \quad (3.19)$$

et $b(\underline{w}; \cdot)$ la forme linéaire définie sur \mathcal{V} par

$$b(\underline{w}; \underline{\varphi}) = \int_{\Omega_f} (\bar{\underline{w}}^f - \underline{w}) \cdot \underline{\varphi} dz - \int_{\partial\Omega_f} \underline{\varphi} \cdot \underline{n} dz \quad (3.20)$$

La formulation faible du problème (3.17) consiste à chercher $\underline{\chi} \in \mathcal{V}$ tel que

$$a(\underline{w}; \underline{\chi}, \underline{\varphi}) = b(\underline{w}; \underline{\varphi}) \quad \forall \underline{\varphi} \in \mathcal{V} \quad (3.21)$$

Lemme 3.2. Soit \underline{v} la solution exacte du problème de Stokes sur Ω_f . Alors, la forme bilinéaire $a(\underline{v}, \cdot, \cdot)$ est \mathcal{V} -coercive.

Preuve. On observe que

$$\forall \underline{\varphi} \in \mathcal{V}, \quad a(\underline{v}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi}) = \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}\underline{\varphi} : \underline{\nabla}\underline{\varphi} dz + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla}\underline{\varphi} \cdot \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz$$

L'intégration par parties du deuxième terme de l'expression de $a(\underline{v}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi})$ donne

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla}\underline{\varphi} \cdot \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz &= \frac{1}{2} \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}(\underline{\varphi} \cdot \underline{\varphi}) \cdot \underline{v} dz \\ &= - \int_{\Omega_f} \left(\frac{1}{2} \underline{\varphi} \cdot \underline{\varphi} \right) \underline{\nabla} \cdot \underline{v} dz + \int_{\partial\Omega_f} \left(\frac{1}{2} \underline{\varphi} \cdot \underline{\varphi} \right) (\underline{v} \cdot \underline{n}) dS_z \end{aligned}$$

Le premier terme de l'expression précédente est nul car $\underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0$. Le second est nul car $\underline{v}|_{\partial\Omega_{fs}} = \underline{0}$ et car $\underline{\varphi}$ et \underline{v} sont périodiques. Donc

$$a(\underline{v}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi}) = \int_{\Omega_f} \underline{\nabla}\underline{\varphi} : \underline{\nabla}\underline{\varphi} dz$$

On conclut grâce au lemme 3.1. \square

Théorème 3.3. Le problème (3.21) est bien posé si $\underline{w} = \underline{v}$, la solution du problème de Stokes sur Ω_f .

Preuve. Conséquence immédiate du lemme de Lax-Milgram. \square

Si le domaine de calcul Ω_f est suffisamment régulier, en particulier s'il ne contient pas de coins rentrants, la solution $\underline{\chi}$ de (3.21) est plus régulière. En effet,

$$\underline{\chi} \in (H^2(\Omega_f))^d \quad (3.22)$$

Cette condition sera utile pour obtenir des résultats de convergence optimaux pour la méthode des éléments finis. Par la suite, l'hypothèse (3.22) est systématiquement conservée.

Passons maintenant à l'analyse dans le cas d'un champ de vitesse approché par éléments finis. On rappelle qu'on désigne par $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$ l'approximation du champ de vitesse par les éléments finis de Lagrange $\mathbb{P}^1/\mathbb{P}^1$ stabilisés, par $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ l'approximation du champ de vitesse par les éléments finis mixtes $\mathbb{P}_{\text{CR}}^1/\mathbb{P}^0$ et par $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$ la projection de $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ sur l'espace des éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini.

Théorème 3.4. Le problème (3.21) est bien posé si $\underline{w} = \underline{v}_h^{\text{BDM}}$, ou si $\underline{w} = \underline{v}_h^{\text{CR}}$ et h est suffisamment petit, ou si $\underline{w} = \underline{v}_h^{\text{Lag}}$, h est suffisamment petit et $\|\underline{v}_h^{\text{Lag}} - \underline{v}\|_{\infty, \Omega_f} < ch^{2-\frac{d}{2}}$, où \underline{v} est la solution de (2.19).

Preuve. On rappelle le théorème de trace selon lequel il existe une constante c telle que pour tout $K \in \mathcal{T}_h$ et pour toute fonction ψ de $H^1(K)$,

$$\|\psi\|_{0, \partial K} \leq c \|\psi\|_{1, K}$$

où ∂K désigne la frontière de K . Dans le cas général où \underline{w} est discontinue, $a(\underline{w}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi})$ peut s'écrire, pour tout $\underline{\varphi} \in \mathcal{V}$,

$$a(\underline{w}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi}) = \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \underline{\varphi} : \underline{\nabla} \underline{\varphi} dz - \underbrace{\frac{1}{2} \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla}_h \cdot \underline{w}) \underline{\varphi}^2 dz}_A - \underbrace{\frac{1}{2} \left(\sum_{F \in \mathcal{F}_h^i} \int_F \llbracket \underline{w} \cdot \underline{n} \rrbracket \underline{\varphi}^2 dS_z \right)}_B$$

1. Si $\underline{w}_h = \underline{v}_h^{\text{BDM}}$, A et B sont tous les deux nuls et donc $a(\underline{v}_h^{\text{BDM}}; \cdot, \cdot)$ est \mathcal{V} -coercive.
2. Si $\underline{w} = \underline{v}_h^{\text{CR}}$, $A = 0$. Afin d'estimer B , on observe que pour tout $F \in \mathcal{F}_h^i$,

$$\left| \int_F \llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \cdot \underline{n} \rrbracket \underline{\varphi}^2 dz \right| \leq \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \cdot \underline{n} \rrbracket\|_{\infty, F} \|\underline{\varphi}\|_{0, F}^2 \leq c \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \cdot \underline{n} \rrbracket\|_{\infty, F} \|\underline{\varphi}\|_{1, K}^2$$

où K est un élément du maillage auquel appartient F . Par ailleurs, en utilisant l'inégalité (2.21) (page 27) et le lemme 2.8 (page 34), on montre que

$$\|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \cdot \underline{n} \rrbracket\|_{\infty, F} \leq ch^{\frac{1-d}{2}} \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \rrbracket\|_{0, F} \leq ch^{2-\frac{d}{2}}$$

Finalemnt $|B| \leq ch^{2-\frac{d}{2}} \|\underline{\nabla} \underline{\varphi}\|_{0, \Omega_f}^2$ et $a(\underline{v}_h^{\text{CR}}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi}) \geq (1 - ch^{2-\frac{d}{2}}) \|\underline{\nabla} \underline{\varphi}\|_{0, \Omega_f}^2$, d'où la coercivité si h est suffisamment petit.

3. Si $\underline{w} = \underline{v}_h^{\text{Lag}}$, nous travaillons directement sur l'expression (3.19) pour la forme bilinéaire $a(\underline{w}; \cdot, \cdot)$. Comme \underline{v} est solution de (2.19), \underline{v} est à divergence nulle et grâce aux conditions aux limites, on montre que $\int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\varphi} \cdot \underline{v}) \cdot \underline{\varphi} dz = 0$ pour tout $\underline{\varphi} \in \mathcal{V}$. Ainsi, on a

$$a(\underline{v}_h^{\text{Lag}}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi}) = \|\underline{\nabla} \underline{\varphi}\|_{0, \Omega_f}^2 + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\varphi} \cdot (\underline{v}_h^{\text{Lag}} - \underline{v})) \cdot \underline{\varphi} dz$$

Par hypothèse $\|\underline{v}_h^{\text{Lag}} - \underline{v}\|_{\infty, \Omega_f} < ch^{2-\frac{d}{2}}$, donc $a(\underline{v}_h^{\text{Lag}}; \underline{\varphi}, \underline{\varphi}) \geq (1 - ch^{2-\frac{d}{2}}) \|\underline{\nabla} \underline{\varphi}\|_{0, \Omega_f}^2$, d'où la coercivité si h est suffisamment petit.

Dans tous les cas, la forme bilinéaire a est \mathcal{V} -coercive sous les hypothèses du théorème. D'après le lemme de Lax-Milgram, les problèmes d'advection-diffusion construits avec chacun des trois champs de vitesse numériques évoqués admettent une unique solution dans \mathcal{V} . \square

Remarque 3.5. L'hypothèse $\|\underline{v}_h^{\text{Lag}} - \underline{v}\|_{\infty, \Omega_f} \leq ch^{2-\frac{d}{2}}$ est très raisonnable puisqu'on observe habituellement une convergence d'ordre 2 en norme $(L^\infty(\Omega_f))^d$.

3.3 Approximation par éléments finis

Soit $\mathcal{V}_{h,*} = (P_{\text{Lag},h,*}^1)^d$. Le problème discret consiste à chercher $\underline{\chi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}$ tel que

$$a(\underline{w}_h; \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h) = b(\underline{w}_h; \underline{\varphi}_h) \quad \forall \underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_{h,*} \quad (3.23)$$

où \underline{w}_h est égal à $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ ou $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$. Comme $\mathcal{V}_{h,*} \subset \mathcal{V}$, la forme bilinéaire $a(\underline{w}_h; \cdot, \cdot)$ est coercive sur $\mathcal{V}_{h,*}$ sous les hypothèses du théorème 3.4 si bien que le problème (3.23) admet une unique solution. On observera que l'hypothèse du régime d'advection dominante dans le développement asymptotique à double échelle implique que le nombre de Péclet dans le problème (3.23) est de l'ordre de l'unité. Par suite il n'est pas nécessaire d'utiliser une technique de stabilisation pour contrôler les dérivées advectives de l'erreur dans le problème discret (3.23).

Théorème 3.6. Soit $\underline{\chi}$ la solution de (3.21) avec $\underline{w} = \underline{v}$ la solution du problème (2.19) et $\underline{\chi}_h$ la solution exacte du problème de Stokes avec \underline{w}_h égal à $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ ou $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$. Alors $\underline{\chi}_h$ vérifie l'estimation d'erreur suivante

$$\|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{1, \Omega_f} \leq ch$$

Preuve. D'après le premier lemme de Strang [Str72], on a

$$\|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{1, \Omega_f} \leq c \inf_{\underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}} \left(\underbrace{\|\underline{\chi} - \underline{\varphi}_h\|_{1, \Omega_f}}_A + \underbrace{\sup_{\underline{\psi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}} \frac{a(\underline{w}; \underline{\varphi}_h, \underline{\psi}_h) - a(\underline{w}_h; \underline{\varphi}_h, \underline{\psi}_h)}{\|\underline{\psi}_h\|_{1, \Omega_f}}}_B \right) + \underbrace{\sup_{\underline{\psi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}} \frac{b(\underline{w}; \underline{\psi}_h) - b(\underline{w}_h; \underline{\psi}_h)}{\|\underline{\psi}_h\|_{1, \Omega_f}}}_C$$

Comme $\underline{\chi} \in (H^2(\Omega_f))^d$ et $d \leq 3$, $\underline{\chi}$ est continue et bornée sur Ω_f . La quantité $\inf_{\underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}} (A + B)$ est majorée en choisissant $\underline{\varphi}_h = I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi})$, l'interpolé de Lagrange de degré 1 de $\underline{\chi}$. Dans ce cas, $\inf_{\underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}} A \leq ch\|\underline{\chi}\|_{2, \Omega_f} \leq ch$.

Estimation de B. On a

$$a(\underline{w}; I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi}), \underline{\psi}_h) - a(\underline{w}_h; I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi}), \underline{\psi}_h) = \int_{\Omega_f} \left(\underline{\nabla} \cdot (I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi})) \cdot (\underline{w} - \underline{w}_h) \right) \cdot \underline{\psi}_h. \quad (3.24)$$

Une intégration par parties donne

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_f} \left(\underline{\nabla} \left(I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi}) \right) \cdot (\underline{w} - \underline{w}_h) \right) \cdot \underline{\psi}_h &= \underbrace{\int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \psi_h \cdot (\underline{w}_h - \underline{w}) \cdot I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi})}_{B_1} \\ &+ \underbrace{\int_{\Omega_f} (\underline{\nabla}_h \cdot \underline{w}_h) (I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi}) \cdot \underline{\psi}_h)}_{B_2} + \underbrace{\sum_{F \in \mathcal{F}_h} \int_F \llbracket \underline{w}_h \rrbracket_F \cdot \underline{n} I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi}) \cdot \underline{\psi}_h}_{B_3} \end{aligned}$$

puisque $\underline{\nabla} \cdot \underline{w} = 0$ et $\llbracket \underline{w} \rrbracket = 0$ pour tout $F \in \mathcal{F}_h$. On constate que

$$|B_1| \leq \|\underline{w} - \underline{w}_h\|_{0,\Omega_f} \|I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi})\|_{\infty,\Omega_f} \|\underline{\nabla} \psi_h\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2 \|\underline{\psi}_h\|_{1,\Omega_f}$$

car $\|\underline{w} - \underline{w}_h\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2$ dans tous les cas. Estimons B_2 et B_3 .

1. Si $\underline{w}_h = \underline{v}_h^{\text{BDM}}$, alors $B_2 = B_3 = 0$.
2. Si $\underline{w}_h = \underline{v}_h^{\text{CR}}$, alors $B_2 = 0$ et grâce à (2.21), au lemme 2.8 et à l'inégalité de Poincaré-Wirtinger,

$$|B_3| \leq c \sum_{F \in \mathcal{F}_h} \|\llbracket \underline{v}_h^{\text{CR}} \rrbracket_F\|_{0,F} h_F^{-\frac{1}{2}} \|\underline{\psi}_h\|_{0,K(F)} \|I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi})\|_{\infty,\Omega_f} \leq ch^2 \|\underline{\psi}_h\|_{1,\Omega_f}. \quad (3.25)$$

3. Si $\underline{w}_h = \underline{v}_h^{\text{Lag}}$, alors $B_3 = 0$ et

$$|B_2| \leq \|\underline{\nabla}_h \cdot \underline{v}_h^{\text{Lag}}\|_{0,\Omega_f} \|\underline{\psi}_h\|_{0,\Omega_f} \|I_h^{\text{Lag}}(\underline{\chi})\|_{\infty,\Omega_f} \leq ch \|\underline{\psi}_h\|_{1,\Omega_f}. \quad (3.26)$$

On en déduit que dans tous les cas, $\inf_{\underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}} B \leq ch$.

Estimation de C . On a

$$\begin{aligned} b(\underline{w}; \underline{\psi}_h) - b(\underline{w}_h; \underline{\psi}_h) &= \int_{\Omega_f} (\underline{w} - \overline{\underline{w}}^f - \underline{w}_h + \overline{\underline{w}_h}^f) \cdot \underline{\psi}_h \\ &= \int_{\Omega_f} (\underline{w} - \underline{w}_h) \cdot \underline{\psi}_h + \int_{\Omega_f} (\overline{\underline{w}_h}^f - \overline{\underline{w}}^f) \cdot \underline{\psi}_h \leq \|\underline{w} - \underline{w}_h\|_{0,\Omega_f} \|\underline{\psi}_h\|_{0,\Omega_f} \end{aligned}$$

Notons que $\int_{\Omega_f} (\overline{\underline{w}_h}^f - \overline{\underline{w}}^f) \cdot \underline{\psi}_h = 0$ car $(\overline{\underline{w}_h}^f - \overline{\underline{w}}^f)$ est constant et $\underline{\psi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}$ est de moyenne nulle.

La propriété $\|\underline{\psi}_h\|_{0,\Omega_f} \leq c \|\underline{\psi}_h\|_{1,\Omega_f}$ permet de conclure que $|C| \leq ch^2$. \square

Pour compléter l'analyse, nous établissons une estimation de l'erreur d'approximation en norme L^2 en utilisant le lemme de Aubin-Nitsche [Aub87]. Considérons pour cela le problème adjoint qui consiste à chercher $\underline{\Xi} \in \mathcal{V}$ tel que

$$a(\underline{v}; \underline{\varphi}, \underline{\Xi}) = \int_{\Omega_f} (\underline{\chi} - \underline{\chi}_h) \cdot \underline{\varphi} dz \quad \underline{\varphi} \in \mathcal{V} \quad (3.27)$$

où $\underline{\chi}$ est solution de (3.21) avec le champ \underline{w} égal à \underline{v} et $\underline{\chi}_h$ est solution de (3.23) avec le champ \underline{w}_h égal à $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ ou $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$. Nous supposons une propriété de régularité elliptique pour le problème (3.27), c'est-à-dire qu'il existe une constante $c > 0$ telle que

$$\|\underline{\Xi}\|_{2,\Omega_f} \leq c \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f} \quad (3.28)$$

Théorème 3.7. Avec les hypothèses précédentes, il existe une constante $c > 0$ telle que

$$\|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2 \quad (3.29)$$

Preuve. Comme $\underline{\Xi}$ est solution de (3.27), le choix de $\underline{\varphi} = \underline{\chi} - \underline{\chi}_h$ comme fonction test donne

$$\begin{aligned} \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f}^2 &= a(\underline{v}; \underline{\chi} - \underline{\chi}_h, \underline{\Xi}) \\ &= a(\underline{v}; \underline{\chi} - \underline{\chi}_h, \underline{\Xi} - \underline{\varphi}_h) + a(\underline{v}; \underline{\chi} - \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h) \\ &= a(\underline{v}; \underline{\chi} - \underline{\chi}_h, \underline{\Xi} - \underline{\varphi}_h) + \left[a(\underline{w}_h; \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h) - a(\underline{v}; \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h) \right] \\ &\quad + \left[b(\underline{v}; \underline{\varphi}_h) - b(\underline{w}_h, \underline{\varphi}_h) \right] \equiv T_1 + T_2 + T_3 \end{aligned}$$

où $\underline{\varphi}_h$ est une fonction choisie arbitrairement dans $\mathcal{V}_{h,*}$ et \underline{w}_h est égal à $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ ou $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$. Comme $\underline{\Xi} \in (H^2(\Omega_f))^d$ et que $d \leq 3$, $\underline{\Xi}$ est continue et bornée sur Ω_f . Prenons $\underline{\varphi}_h = I_h^{\text{Lag}}(\underline{\Xi})$, l'interpolé de Lagrange de degré 1 de $\underline{\Xi}$.

1. D'après (3.28) et en utilisant les propriétés d'interpolation de I_h^{Lag} , on a

$$|T_1| \leq c \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{1,\Omega_f} h \|\underline{\Xi}\|_{2,\Omega_f} \leq ch \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{1,\Omega_f} \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f}$$

2. Comme $\|\underline{\varphi}_h\|_{\infty,\Omega_f} \leq c \|\underline{\Xi}\|_{2,\Omega_f} \leq c \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f}$ et que $\|\underline{\nabla} \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f} \leq c$,

$$|T_2| \leq \|\underline{\nabla} \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f} \|\underline{w} - \underline{w}_h\|_{0,\Omega_f} \|\underline{\varphi}_h\|_{\infty,\Omega_f} \leq ch^2 \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f}$$

3. Finalement, puisque $\|\underline{v}^f - \underline{v}_h^f\|_{0,\Omega_f} \leq \|\underline{v} - \underline{v}_h\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2$,

$$|T_3| \leq ch^2 \|\underline{\varphi}_h\|_{0,\Omega_f} \leq ch^2 \|\underline{\Xi}_h\|_{2,\Omega_f} \leq ch^2 \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f}$$

Donc, $\|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{0,\Omega_f} \leq c(h \|\underline{\chi} - \underline{\chi}_h\|_{1,\Omega_f} + h^2)$ et la conclusion résulte du théorème 3.6. \square

3.4 Mise en œuvre numérique

3.4.1 Suppression de la contrainte de moyenne nulle

Dans la pratique, il est peu commode de construire des fonctions de base de l'espace discret à moyenne nulle. On préfère donc supprimer cette contrainte de moyenne nulle. On considère donc l'espace

$$\mathcal{V}_h = \left\{ \underline{\varphi}_h \in (P_{\text{Lag},h}^1)^d; \forall F \in \mathcal{F}_h^{\text{ff}}, \llbracket \underline{\varphi}_h \rrbracket_F = 0 \right\}$$

si bien que $\mathcal{V}_{h,*} = \left\{ \underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_h; \int_{\Omega_f} \underline{\varphi}_h = \underline{0} \right\}$. Le nouveau problème approché consiste à chercher $\underline{\eta}_h \in \mathcal{V}_h$ tel que

$$a(\underline{w}_h; \underline{\eta}_h, \underline{\psi}_h) = b(\underline{w}_h; \underline{\psi}_h) \quad \forall \underline{\psi}_h \in \mathcal{V}_h \quad (3.30)$$

Proposition 3.8. On suppose que $\underline{\nabla} \cdot \underline{w}_h = 0$.

1. Si $\underline{\eta}_h$ est solution de (3.30), alors $\underline{\chi}_h = \underline{\eta}_h - \overline{\underline{\eta}_h}^f$ est solution de (3.23).

2. Réciproquement, si $\underline{\chi}_h$ est solution de (3.23), alors $\forall \underline{cte} \in \mathbb{R}^d$, $\underline{\eta}_h = \underline{\chi}_h + \underline{cte}$ est solution de (3.30).

Preuve.

1. On suppose que $\underline{\eta}_h$ est solution de (3.30). Posons $\underline{\chi}_h := \underline{\eta}_h - \overline{\eta}_h^f$ et remarquons que $\underline{\chi}_h \in \mathcal{V}_{h,*}$. De plus, $\forall \underline{cte} \in \mathbb{R}^d$ et $\forall \underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_h$,

$$a(\underline{w}_h; \underline{cte}, \underline{\varphi}_h) = \int_{\Omega_f} \underbrace{\underline{\nabla} \underline{cte}}_{=0} : \underline{\nabla} \underline{\varphi}_h + \int_{\Omega_f} \left(\underbrace{\underline{\nabla} \underline{cte} \cdot \underline{w}_h}_{=0} \right) \cdot \underline{\varphi}_h = 0. \quad (3.31)$$

Par conséquent,

$$\forall \underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_{h,*} \subset \mathcal{V}_h, \quad a(\underline{w}_h; \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h) = a(\underline{w}_h; \underline{\eta}_h, \underline{\varphi}_h) = b(\underline{w}_h; \underline{\varphi}_h)$$

i.e., $\underline{\chi}_h$ vérifie (3.23).

2. Réciproquement, on suppose que $\underline{\chi}_h$ est solution de (3.23). On constate que $\forall \underline{cte} \in \mathbb{R}^d$ et $\forall \underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_h$,

$$\begin{aligned} a(\underline{w}_h; \underline{\varphi}_h, \underline{cte}) &= \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \underline{\varphi}_h : \underbrace{\underline{\nabla} \underline{cte}}_{=0} + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \underline{\varphi}_h \cdot \underline{w}_h) \cdot \underline{cte} \\ &= - \int_{\Omega_f} \left(\underbrace{\underline{\nabla} \cdot \underline{w}_h}_{=0} \right) (\underline{\varphi}_h \cdot \underline{cte}) + \int_{\partial\Omega_f} (\underline{\varphi}_h \cdot \underline{cte}) (\underline{w}_h \cdot \underline{n}) \\ &= \int_{\partial\Omega_f} (\underline{\varphi}_h \cdot \underline{cte}) (\underline{w}_h \cdot \underline{n}) = 0 \end{aligned} \quad (3.32)$$

à cause des conditions périodiques et de la condition d'adhérence de \underline{w}_h sur $\partial\Omega_{fs}$. De plus,

$$b(\underline{w}_h; \underline{cte}) = 0. \quad (3.33)$$

Par suite, $\forall \underline{cte} \in \mathbb{R}^d$, $\underline{\eta}_h := \underline{\chi}_h + \underline{cte} \in \mathcal{V}_h$ et $\forall \underline{\varphi}_h \in \mathcal{V}_h$,

$$\begin{aligned} a(\underline{w}_h; \underline{\eta}_h, \underline{\varphi}_h) &= a(\underline{w}_h; \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h) \\ &= a(\underline{w}_h; \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h - \overline{\varphi}_h^f) + a(\underline{w}_h; \underline{\chi}_h, \overline{\varphi}_h^f) \\ &= a(\underline{w}_h; \underline{\chi}_h, \underline{\varphi}_h - \overline{\varphi}_h^f) \\ &= b(\underline{w}_h; \underline{\varphi}_h - \overline{\varphi}_h^f) \\ &= b(\underline{w}_h; \underline{\varphi}_h) \end{aligned} \quad (3.34)$$

i.e., $\underline{\eta}_h$ vérifie (3.30)

□

Si $\underline{\nabla} \cdot \underline{w}_h \neq 0$, le problème (3.30) n'a en général pas de solution. Ceci est dû au fait que $\forall \underline{cte} \in \mathbb{R}^d$,

$$b(\underline{w}_h; \underline{cte}) = 0 \quad \text{et} \quad a(\underline{w}_h; \cdot, \underline{cte}) \neq 0 \quad (3.35)$$

Ceci est hélas le cas pour $\underline{v}_h^{\text{CR}}$, $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$ et, dans une moindre mesure, pour $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$ car $\underline{\nabla} \cdot \underline{v}_h^{\text{BDM}} = \underline{\nabla}_h \cdot \underline{v}_h^{\text{CR}}$ et $\underline{\nabla}_h \cdot \underline{v}_h^{\text{CR}}$ n'est pas exactement nul à cause de la tolérance de l'approximation de la solution du système linéaire pour les éléments finis mixtes qui implique que $\underline{\nabla}_h \cdot \underline{v}_h^{\text{CR}} \ll 1$ mais $\underline{\nabla}_h \cdot \underline{v}_h^{\text{CR}} \neq 0$.

Le problème discrétisé se met sous la forme d'un système linéaire :

$$\mathbb{A}\mathbf{U} = \mathbf{B}, \quad \mathbb{A} \in \mathbb{R}^{N,N}, \quad \mathbf{B} \in \mathbb{R}^N, \quad (3.36)$$

où N est égal au nombre de sommets de \mathcal{T}_h multiplié par la dimension de l'espace.

Soit $(\mathbf{Y}^j)_{j \in \llbracket 1,3 \rrbracket}$ les trois vecteurs de \mathbb{R}^N qui sont les vecteurs composantes des fonctions constantes $(e_j)_{j \in \llbracket 1,3 \rrbracket}$. Il est immédiat que la proposition 3.8 signifie que si $\nabla \cdot \underline{w}_h = 0$, la famille $(\mathbf{Y}^j)_{j \in \llbracket 1,3 \rrbracket}$ constitue une base du noyau de ${}^t\mathbb{A}$, c'est-à-dire que ${}^t\mathbf{Y}^j\mathbb{A} = 0$, et que ${}^t\mathbf{Y}^j\mathbf{B} = 0$. En revanche, si $\nabla \cdot \underline{w}_h \neq 0$, on a toujours ${}^t\mathbf{Y}^j\mathbf{B} = 0$ mais en général, ${}^t\mathbf{Y}^j\mathbb{A} \neq 0$.

Même lorsque le système linéaire (3.36) n'est pas inversible, il est possible d'en obtenir une solution approchée en minimisant le résidu en norme euclidienne. L'algorithme GMRes (Generalized Minimal Residual) est un algorithme itératif applicable aux systèmes linéaires non symétriques [SS86]. Soit $\mathbf{U}^0 \in \mathbb{R}^N$ une estimation initiale de la solution et $\mathbf{R}^0 = \mathbf{B} - \mathbb{A}\mathbf{U}^0$ le résidu correspondant. Pour tout entier $0 < m \leq N$, le principe de l'algorithme GMRes est de minimiser le résidu du système sur l'espace de Krylov de dimension m noté K_m :

$$K_m = \text{vect}\{\mathbf{R}^0, \mathbb{A}\mathbf{R}^0, \dots, \mathbb{A}^{m-1}\mathbf{R}^0\}$$

Autrement dit, l'algorithme consiste à calculer le vecteur $\mathbf{Z}_m \in K_m$ minimisant la quantité $\|\mathbf{B} - \mathbb{A}(\mathbf{U}^0 + \mathbf{Z}_m)\|_N$, où $\|\cdot\|_N$ est la norme euclidienne sur \mathbb{R}^N . On pourra trouver les détails de l'algorithme dans [SS86, Saa96, EG04].

Généralement la condition d'arrêt de l'algorithme porte sur la norme du résidu. Comme on ne connaît pas a priori la valeur minimale possible de la norme du résidu (celle-ci étant strictement positive du fait du caractère mal posé du système linéaire), elle est complétée, dans notre cas, par une condition qui arrête les itérations lorsque la norme du résidu stagne.

3.4.2 Assemblage du système linéaire

Soit \mathcal{T}_h un maillage de Ω_f . Le champ $\underline{\chi}_h$ est déterminé par 3 composantes en chaque sommet de \mathcal{T}_h . Soit $(\theta^i)_i$ la famille des fonctions de base de $P_{\text{Lag},h}^1$ telles que θ^i soit la fonction qui vaut 1 au sommet S_i de \mathcal{T}_h et 0 à tous les autres sommets. Chaque composante de $\underline{\chi}_h$ est décomposée dans cette base. Soit \mathbf{U} le vecteur contenant les valeurs de chaque composante de $\underline{\chi}_h$ en chaque sommet de \mathcal{T}_h . Il est décomposé en sous-vecteurs \mathbf{U}^i :

$$\mathbf{U}_i = \begin{pmatrix} (\underline{\chi}_h)_1(S_i) \\ (\underline{\chi}_h)_2(S_i) \\ (\underline{\chi}_h)_3(S_i) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$$

où $(\underline{\chi}_h)_j(S_i)$ est la valeur de la $j^{\text{ème}}$ composante de $\underline{\chi}_h$ au sommet S_i . La matrice \mathbb{A} et le vecteur \mathbf{B} sont également décomposés en sous-matrices et en sous-vecteurs de manière compatible avec la décomposition de \mathbf{U} . Les sous-matrices de \mathbb{A} sont de la forme générale

$$(A_{ij})_{kl} = \left(\int_{\Omega_f} \nabla \theta^j \cdot \nabla \theta^i dz + \int_{\Omega_f} (\nabla \theta^j \cdot \underline{w}_h) \theta^i dz \right) \delta_{kl} \quad (k, l) \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$$

où δ_{kl} est un symbole de Kronecker. Les sous-vecteurs de \mathbf{B} sont de la forme générale

$$\mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} \int_{\Omega_f} \left(\left(\overline{w_h^f} \right)_1 - (w_h)_1 \right) \theta^i dz - \int_{\partial\Omega_{fs}} n_1 \theta^i dS_z \\ \int_{\Omega_f} \left(\left(\overline{w_h^f} \right)_2 - (w_h)_2 \right) \theta^i dz - \int_{\partial\Omega_{fs}} n_2 \theta^i dS_z \\ \int_{\Omega_f} \left(\left(\overline{w_h^f} \right)_3 - (w_h)_3 \right) \theta^i dz - \int_{\partial\Omega_{fs}} n_3 \theta^i dS_z \end{pmatrix}$$

Afin de pouvoir exploiter le fait que $\underline{\nabla} \cdot \underline{w}_h^{\text{BDM}} \approx 0$, les conditions périodiques sont implémentées de façon forte (c'est-à-dire en éliminant les degrés de liberté redondants par périodicité) alors que précédemment, les conditions aux limites de périodicité étaient implémentées de manière faible (c'est-à-dire en conservant les degrés de liberté redondants par périodicité). La raison de ce choix est qu'il permet d'assembler une matrice \mathbb{A} telle que ${}^t \mathbf{Y}^j \mathbb{A} \approx 0$ pour $i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$. Pour cela, il faut que les termes de toutes les sous-matrices $((\mathbb{A}_{i_1 j})_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket})_{S_{i_1} \in \mathcal{F}_h^{\text{ff}'}}$ et $((\mathbb{A}_{j i_1})_{j \in \llbracket 1, N \rrbracket})_{S_{i_1} \in \mathcal{F}_h^{\text{ff}'}}$ et de tous les sous-vecteurs $(\mathbf{B}_{i_1})_{S_{i_1} \in \mathcal{F}_h^{\text{ff}'}}$ soient fixés à 0. En revanche les termes des sous-matrices $\mathbb{A}_{i_2 j_2}$ doivent tenir compte des fonctions de base θ^{i_1} et θ^{i_2} où S_{i_1} (resp. S_{j_1}) est le sommet lié à S_{i_2} (resp. S_{j_2}) par périodicité :

$$\forall (k, l) \in \llbracket 1, 3 \rrbracket^2 \quad (\mathbb{A}_{i_2 j_2})_{kl} = \left(\int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \theta^{j_2} \cdot \underline{\nabla} \theta^{i_2} dz + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \theta^{j_2} \cdot \underline{w}_h) \theta^{i_2} dz \right. \\ \left. + \int_{\Omega_f} \underline{\nabla} \theta^{j_1} \cdot \underline{\nabla} \theta^{i_1} dz + \int_{\Omega_f} (\underline{\nabla} \theta^{j_1} \cdot \underline{w}_h) \theta^{i_1} dz \right) \delta_{kl} \quad (3.37)$$

Une fois la solution approchée par l'algorithme GMRes, les valeurs de \mathbf{U} qui ont été ignorées peuvent être mises à jour en utilisant les valeurs de la solution associées aux sommets de $\mathcal{F}_h^{\text{ff}}$.

3.5 Validation

3.5.1 Transport entre deux plans infinis

La résolution du problème (3.17) est étudiée dans un réseau de plaques d'épaisseur $1 - 2a$, séparées par un espace libre d'épaisseur $2a$ où s'écoule le fluide. La géométrie est décrite dans la section 2.7 : le domaine d'écoulement est délimité par les plans $z_2 = -a$ et $z_2 = a$. On rappelle que $a \in]0, 0.5[$ est un paramètre adimensionnel qui permet de faire varier la porosité. Le champ \underline{v} étant la solution exacte du problème (2.19) avec $\underline{e}_\alpha = -\underline{e}_1$, le champ $\underline{\chi}$ vérifiant (3.17) s'écrit

$$\underline{\chi} = \left(-\frac{1}{24} z_2^4 + \frac{1}{12} a^2 z_2^2 - \frac{7}{360} a^4 \right) \underline{e}_1$$

La figure 3.2 montre le profil de $\underline{\chi}$ dans l'épaisseur du domaine. Les tenseurs de diffusion et de dispersion correspondant à ce milieu s'écrivent

$$\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \right)_{11} = 2a \quad \left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}} \right) = \frac{4}{945} a^7$$

A titre d'exemple pour $a = 0.3$, $(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}})_{11} = 0.926\text{e-}6$.

Comme pour l'écoulement, le problème de transport est invariant selon la direction \underline{e}_3 . De plus la composante de la vitesse (à l'origine du terme source) selon \underline{e}_3 est nulle. Donc la troisième dimension est supprimée. Numériquement, les calculs sont donc faits en dimension deux, pour

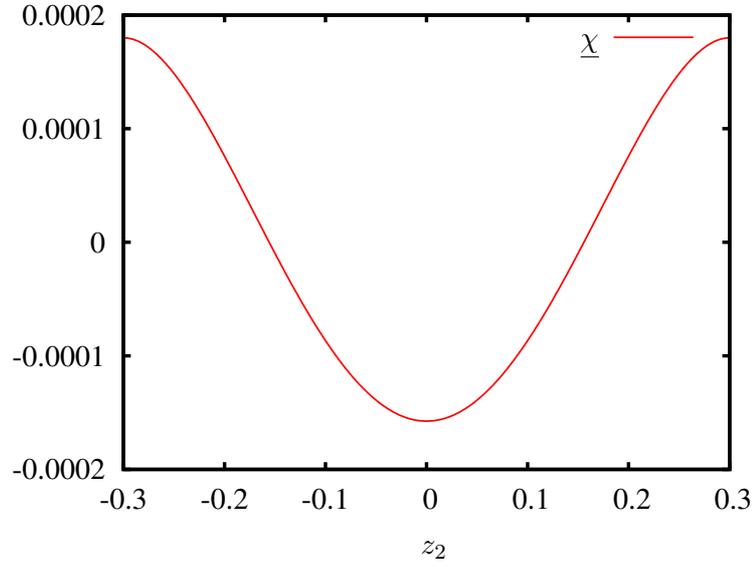


FIG. 3.2 – Profil de $\underline{\chi}$ pour le transport entre deux plans infinis en présence d'advection.

		Transport diffusif et dispersif			
i	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(\underline{\chi}_h)$	ordre	$E_{H^1}(\underline{\chi}_h)$	ordre
0	2.6e-11	2.3e-05		4.0e-04	
1	4.6e-10	7.9e-06	1.6e+00	2.5e-04	6.9e-01
2	1.3e-10	1.7e-06	2.2e+00	1.3e-04	9.5e-01
3	6.2e-10	4.5e-07	2.0e+00	6.5e-05	9.8e-01
4	9.9e-13	1.1e-07	2.0e+00	3.2e-05	1.0e+00

TAB. 3.1 – Erreurs et ordres de convergence relatifs au champ $\underline{\chi}_h$ calculé entre deux plans infinis avec l'approximation du champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$.

		Transport diffusif et dispersif			
i	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(\underline{\chi}_h)$	ordre	$E_{H^1}(\underline{\chi}_h)$	ordre
0	2.0e-11	1.7e-05		3.8e-04	
1	1.5e-08	6.7e-06	1.4e+00	2.5e-04	6.5e-01
2	1.3e-10	1.8e-06	1.9e+00	1.3e-04	9.4e-01
3	6.2e-10	4.5e-07	2.0e+00	6.5e-05	9.8e-01
4	8.5e-12	1.1e-07	2.0e+00	3.2e-05	1.0e+00

TAB. 3.2 – Erreurs et ordres de convergence relatifs au champ $\underline{\chi}_h$ calculé entre deux plans infinis avec l'approximation du champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{CR}}$.

		Transport diffusif et dispersif			
i	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(\underline{\chi}_h)$	ordre	$E_{H^1}(\underline{\chi}_h)$	ordre
0	7.6e-11	1.7e-05		3.9e-04	
1	2.3e-12	6.5e-06	1.3e+00	2.5e-04	6.5e-01
2	2.8e-10	1.8e-06	1.9e+00	1.3e-04	9.4e-01
3	7.4e-10	4.5e-07	2.0e+00	6.5e-05	9.8e-01
4	6.2e-12	1.1e-07	2.0e+00	3.2e-05	1.0e+00

TAB. 3.3 – Erreurs et ordres de convergence relatifs au champ $\underline{\chi}_h$ calculé entre deux plans infinis avec l'approximation du champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$.

$a = 0.3$. Chaque champ de vitesse numérique décrit dans la section 2.4 ($\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$, $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$) est utilisé pour approcher le champ $\underline{\chi}_h$.

Les tableaux 3.1, 3.2 et 3.3 donnent les valeurs des erreurs en norme H^1 et L^2 et les ordres de convergence locaux associés, en fonction de la finesse du maillage comme décrit dans la section 2.7, pour l'approximation de $\underline{\chi}_h$ en utilisant les champs de vitesse $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ et $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$ respectivement. Les pas des maillages sont donnés par $h_i = 0.2 \times 2^{-i}$. La deuxième colonne des tableaux donne la norme du résidu $\frac{\|\mathbf{R}\|_N}{\sqrt{N}}$ atteinte dans la résolution du système linéaire. Pour le maillage le plus fin, la tolérance fixée est plus petite afin d'exploiter la finesse du maillage.

		Transport diffusif et dispersif			
i	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(\underline{\chi}_h)$	ordre	$E_{H^1}(\underline{\chi}_h)$	ordre
0	2.4e-11	1.8e-05		3.8e-04	
1	8.6e-12	6.6e-06	1.4e+00	2.5e-04	6.5e-01
2	2.4e-12	1.7e-06	1.9e+00	1.3e-04	9.4e-01
3	6.5e-13	4.4e-07	2.0e+00	6.5e-05	9.8e-01
4	1.7e-13	1.1e-07	2.0e+00	3.2e-05	1.0e+00

TAB. 3.4 – Erreurs et ordres de convergence relatifs au champ $\underline{\chi}_h$ calculé entre deux plans infinis avec le champ de vitesse exact.

A titre de comparaison, le tableau 3.4 montre la convergence de l'approximation du problème formulé avec la vitesse analytique. Dans tous les cas, les ordres de convergence sont en accord avec la théorie. De plus, la différence de précision des calculs en fonction du champ de vitesse utilisé n'est pas sensible en dimension 2.

3.5.2 Transport dans un cylindre

La géométrie du cylindre déjà utilisée dans la section 2.7 pour tester l'approximation du problème d'écoulement est reprise pour calculer le champ discret $\underline{\chi}_h$. Si a désigne toujours le rayon du cylindre centré sur l'axe \underline{e}_1 , si le gradient de pression vaut $\underline{e}_\alpha = -\underline{e}_1$ et si le champ de vitesse \underline{v} dans le problème (3.17) est la solution exacte du problème (2.19), la solution de (3.17) s'écrit

$$\underline{\chi} = \left(-\frac{1}{64}r^4 + \frac{1}{32}a^2r^2 - \frac{1}{96}a^4 \right) \underline{e}_1 \quad (3.38)$$

		Transport diffusif et dispersif			
h	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(\underline{\chi}_h)$	ordre	$E_{H^1}(\underline{\chi}_h)$	ordre
1.6e-01	1.3e-09	1.2e-06		3.5e-05	
8.9e-02	1.1e-11	3.5e-07	2.2e+00	2.0e-05	1.0e+00
5.4e-02	1.3e-13	9.3e-08	2.7e+00	1.0e-05	1.4e+00
3.0e-02	8.2e-14	2.9e-08	2.0e+00	5.6e-06	1.0e+00

TAB. 3.5 – Erreurs et ordres de convergence relatifs au champ $\underline{\chi}_h$ calculé dans un cylindre avec l'approximation du champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$.

où $r^2 = z_2^2 + z_3^2$. La valeur de a est fixée à 0.3. Le tableau 3.5 donne les valeurs des erreurs d'approximation en norme H^1 et L^2 de $\underline{\chi}_h$ en utilisant le champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$. La tolérance est fixée à 1e-13. La deuxième colonne du tableau donne la valeur de la norme du résidu atteint lors de la résolution du système linéaire. Il apparaît clairement que l'algorithme n'a pas réussi à atteindre la tolérance demandée pour les maillages les plus grossiers. La précision atteinte mesure la distance entre le second membre du système linéaire et l'image de la matrice. Cette différence diminue avec la finesse du maillage. En revanche les ordres de convergence sont bien conformes à ce qui est attendu.

		Transport diffusif et dispersif			
h	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(\underline{\chi}_h)$	ordre	$E_{H^1}(\underline{\chi}_h)$	ordre
1.6e-01	8.2e-10	1.2e-06		3.5e-05	
8.9e-02	1.0e-11	3.5e-07	2.1e+00	2.0e-05	1.0e+00
5.4e-02	7.9e-13	9.2e-08	2.8e+00	1.0e-05	1.4e+00
3.0e-02	8.8e-13	2.8e-08	2.0e+00	5.6e-06	1.0e+00

TAB. 3.6 – Erreurs et ordres de convergence relatifs au champ $\underline{\chi}_h$ calculé dans un cylindre avec l'approximation du champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{CR}}$.

Le tableau 3.6 donne les valeurs des erreurs d'approximation en norme H^1 et L^2 en utilisant le champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ et les ordres de convergence locaux associés en fonction de la finesse des maillages. La tolérance est fixée à 1e-12. Comme dans le cas de l'approximation avec le champ $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, la résolution du système linéaire n'atteint pas la tolérance requise. Cependant la précision atteinte avec $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ est légèrement meilleure qu'avec $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$. Les ordres de convergence sont conformes aux prévisions théoriques.

Le tableau 3.7 fournit les valeurs des erreurs d'approximation en norme H^1 et L^2 en utilisant le champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$, ainsi que les ordres de convergence locaux correspondants. La tolérance est fixée à 1e-12. D'après la deuxième colonne du tableau, le solveur linéaire atteint systématiquement la tolérance demandée, prouvant ainsi l'avantage du champ $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$ sur les deux autres.

		Transport diffusif et dispersif			
h	$\frac{\ \mathbf{R}\ _N}{\sqrt{N}}$	$E_{L^2}(\chi_h)$	ordre	$E_{H^1}(\chi_h)$	ordre
1.6e-01	5.6e-13	1.2e-06		3.5e-05	
8.9e-02	1.4e-13	3.5e-07	2.1e+00	2.0e-05	1.0e+00
5.4e-02	5.9e-13	9.1e-08	2.8e+00	1.0e-05	1.4e+00
3.0e-02	8.7e-13	2.8e-08	2.0e+00	5.6e-06	1.0e+00

TAB. 3.7 – Erreurs et ordres de convergence relatifs au champ χ_h calculé dans un cylindre avec l'approximation du champ de vitesse $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$.

3.6 Résultats sur des réseaux cubiques de sphères

On considère ici les mêmes réseaux cubiques de sphères que dans le chapitre 2, c'est-à-dire un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$, un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.57$ et un réseau cubique centré dont le rayon des sphères centrées aux sommets de la cellule élémentaire vaut $r_s = 0.56$ et le rayon de la sphère centrale vaut $r_c = 0.15$. Nous étudions d'abord l'impact du calcul du champ de vitesse discret sur la précision des évaluations des termes principaux des tenseurs de diffusion et de dispersion. Puis, pour chaque réseau de sphères, nous étudions l'impact des effets advectifs sur les tenseurs de diffusion et de dispersion en faisant varier le paramètre λ .

3.6.1 Impact de la qualité du champ de vitesse discret

Les tableaux 3.8 et 3.9 donnent les valeurs des coefficients de diffusion $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{11}$ et $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ et des coefficients de dispersion $\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{11}$ et $\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ pour $\lambda = 1000$. Leurs valeurs ont été calculées en utilisant chacun des champs de vitesse $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ et $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$ et en utilisant pour chaque géométrie deux finesses de maillage : $h = 0.5$ et $h = 0.025$.

Géométrie		h	$\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{11}$			$\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{22}$		
r_s	r_c		$\underline{v}_h^{\text{Lag}}$	$\underline{v}_h^{\text{CR}}$	$\underline{v}_h^{\text{BDM}}$	$\underline{v}_h^{\text{Lag}}$	$\underline{v}_h^{\text{CR}}$	$\underline{v}_h^{\text{BDM}}$
0.51		0.050	3.56e-01	3.64e-01	3.66e-01	3.11e-01	3.12e-01	3.12e-01
0.51		0.025	3.57e-01	3.59e-01	3.60e-01	3.08e-01	3.08e-01	3.08e-01
0.57		0.050	1.68e-01	1.71e-01	1.72e-01	1.50e-01	1.50e-01	1.50e-01
0.57		0.025	1.67e-01	1.68e-01	1.68e-01	1.48e-01	1.48e-01	1.48e-01
0.56	0.15	0.050	1.78e-01	1.79e-01	1.80e-01	1.64e-01	1.64e-01	1.64e-01
0.56	0.15	0.025	1.78e-01	1.79e-01	1.79e-01	1.63e-01	1.63e-01	1.63e-01

TAB. 3.8 – Coefficients $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{11}$ et $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ pour trois réseaux de sphères avec $\underline{v}_h^{\text{Lag}}$, $\underline{v}_h^{\text{CR}}$ et $\underline{v}_h^{\text{BDM}}$.

On observe que les trois méthodes de calcul du champ de vitesse donnent des résultats équivalents pour le tenseur de diffusion, les différences relatives étant de quelques pour cent. L'emploi du maillage fin conduit à une meilleure cohérence des les trois méthodes.

Géométrie		h	$\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{11}$			$\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{22}$		
r_s	r_c		v_h^{Lag}	v_h^{CR}	v_h^{BDM}	v_h^{Lag}	v_h^{CR}	v_h^{BDM}
0.51		0.050	2.00e-01	2.25e-01	2.33e-01	1.76e-03	2.79e-03	3.06e-03
0.51		0.025	2.11e-01	2.18e-01	2.20e-01	2.42e-03	2.83e-03	2.90e-03
0.57		0.050	3.53e-02	4.50e-02	4.87e-02	1.73e-04	2.44e-04	2.53e-04
0.57		0.025	4.00e-02	4.27e-02	4.38e-02	1.79e-04	2.26e-04	2.30e-04
0.56	0.15	0.050	2.80e-02	3.05e-02	3.17e-02	7.77e-04	1.02e-03	1.07e-03
0.56	0.15	0.025	2.83e-02	2.99e-02	3.06e-02	8.67e-04	1.03e-03	1.07e-03

TAB. 3.9 – Coefficients $\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{11}$ et $\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ pour trois réseaux de sphères avec v_h^{Lag} , v_h^{CR} et v_h^{BDM} .

En revanche, pour le calcul des termes du tenseur de dispersion, l'utilisation du champ de vitesse v_h^{Lag} donne des résultats insatisfaisants. Sur les maillages fins, les résultats obtenus avec v_h^{CR} et v_h^{BDM} sont comparables, tandis que sur maillages grossiers, l'utilisation de v_h^{CR} fournit des résultats légèrement plus précis que l'utilisation de v_h^{BDM} , probablement du fait de compensations des erreurs.

3.6.2 Réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$

Le milieu modélisé est un réseau cubique de sphères de rayons $r_s = 0.51$. Comme la cellule de base du milieu est un cube de côté 1, les sphères centrées sur les sommets du cube s'interpénètrent. On rappelle que la porosité de ce milieu est $\phi = 4.5e-1$. On utilise le maillage fin dont le pas vaut $h = 0.025$. Le champ de vitesse utilisé est λv_h^{BDM} où λ varie de 0 à 1000. Théoriquement le choix des valeurs de λ est subordonné à la valeur de Υ_{av} puisque l'hypothèse d'advection dominante impose que $\lambda \leq \frac{1}{\Upsilon_{\text{av}}}$ (cf. la condition (3.5) dans la section 3.2.2). Ici, $\Upsilon_{\text{av}} = 4.7e-3$, donc $\lambda = 1000$ sort légèrement de la limite de validité et la moyenne intrinsèque de la vitesse $\overline{\lambda v_h^{\text{BDM}}}$ varie entre 0 à 4.8 ce qui dépasse la valeur maximale de 1. La figure 3.3 montre l'évolution des termes des tenseurs de diffusion et de dispersion en fonction de $\overline{\lambda v_h^{\text{BDM}}}$, c'est-à-dire en fonction du nombre de Peclet à l'échelle des pores. Les termes diagonaux du tenseur de diffusion ont été translatés de 0.3072 et les valeurs de $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ et $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{33}$ ont été multipliées par 10 pour pouvoir être comparées sur le même graphique avec $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{11}$. De même, les valeurs de $\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ et $\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{33}$ ont été multipliées par 10 pour pouvoir être comparées avec $\left(\underline{D}_{\text{disp}}^{\text{hom}}\right)_{11}$. Pour les deux tenseurs, les termes extra-diagonaux sont très petits devant les termes diagonaux. Leurs variations restent dominées par les erreurs numériques et ne doivent pas donner lieu à une interprétation physique.

3.6.3 Réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.57$

L'augmentation du rayon des sphères, étant donné qu'elles sont centrées sur les sommets du cube unité, fait diminuer la porosité et par conséquent la vitesse d'écoulement à gradient de pression constant. On considère un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.57$. La porosité

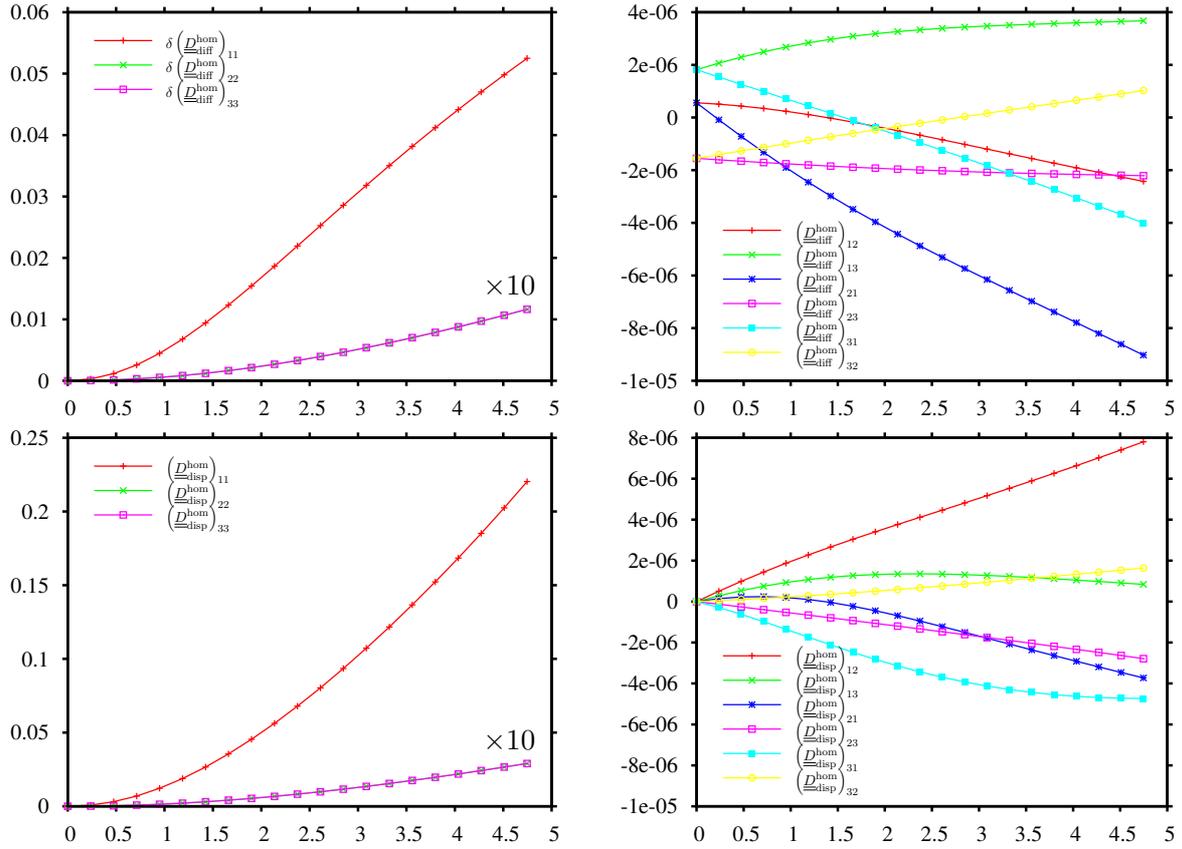


FIG. 3.3 – Réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$; tenseur de diffusion (en haut) et tenseur de dispersion (en bas) en fonction de $\lambda \underline{v}_h^{\text{BDM}^f}$. Les termes diagonaux du tenseur de diffusion ont été translatés de 0.3072.

de ce milieu est $\phi = 2.8e-1$. On utilise le maillage fin dont le pas vaut $h = 0.025$. Le champ de vitesse utilisé est $\lambda \underline{v}_h^{\text{BDM}}$ où λ varie de 0 à 1000. Pour cette plage de valeurs, la moyenne intrinsèque de la vitesse varie de 0 à 2.0.

La figure 3.4 montre l'évolution des tenseurs de diffusion et de dispersion en fonction de $\lambda \underline{v}_{h,1}^{\text{BDM}^f}$, c'est-à-dire en fonction du nombre de Peclet à l'échelle des pores. Les termes diagonaux du tenseur de diffusion ont été translatés de 0.1485. Les variations des termes transversaux du tenseur de diffusion ont été multipliées par 1000 pour pouvoir apparaître sur le même graphique que les variations du terme longitudinal. L'importance de ce facteur multiplicatif montre que les termes transversaux du tenseur de diffusion sont quasiment indépendants de l'intensité de l'advection. De même, les termes transversaux du tenseur de dispersion ont été multipliés par 100 pour pouvoir être comparés avec le terme longitudinal. De plus, comme dans le cas $r_s = 0.51$, les termes extra-diagonaux des deux tenseurs sont trop petits pour permettre une interprétation physique et leurs valeurs sont vraisemblablement polluées par des erreurs numériques.

Pour les termes diagonaux, la comparaison avec le réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$ met en évidence une diminution des valeurs des coefficients de diffusion. A vitesse nulle, les coefficients de diffusion sont proportionnels à la tortuosité via la porosité. Ces deux quantités diminuent lorsqu'on passe du réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$ au réseau de sphères de rayon $r_s = 0.57$. En revanche, l'amplitude des variations de la diffusion longitudinale (donnée par $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{11}$) en fonction de la vitesse d'écoulement augmente légèrement à vitesse comparable. Par exemple pour

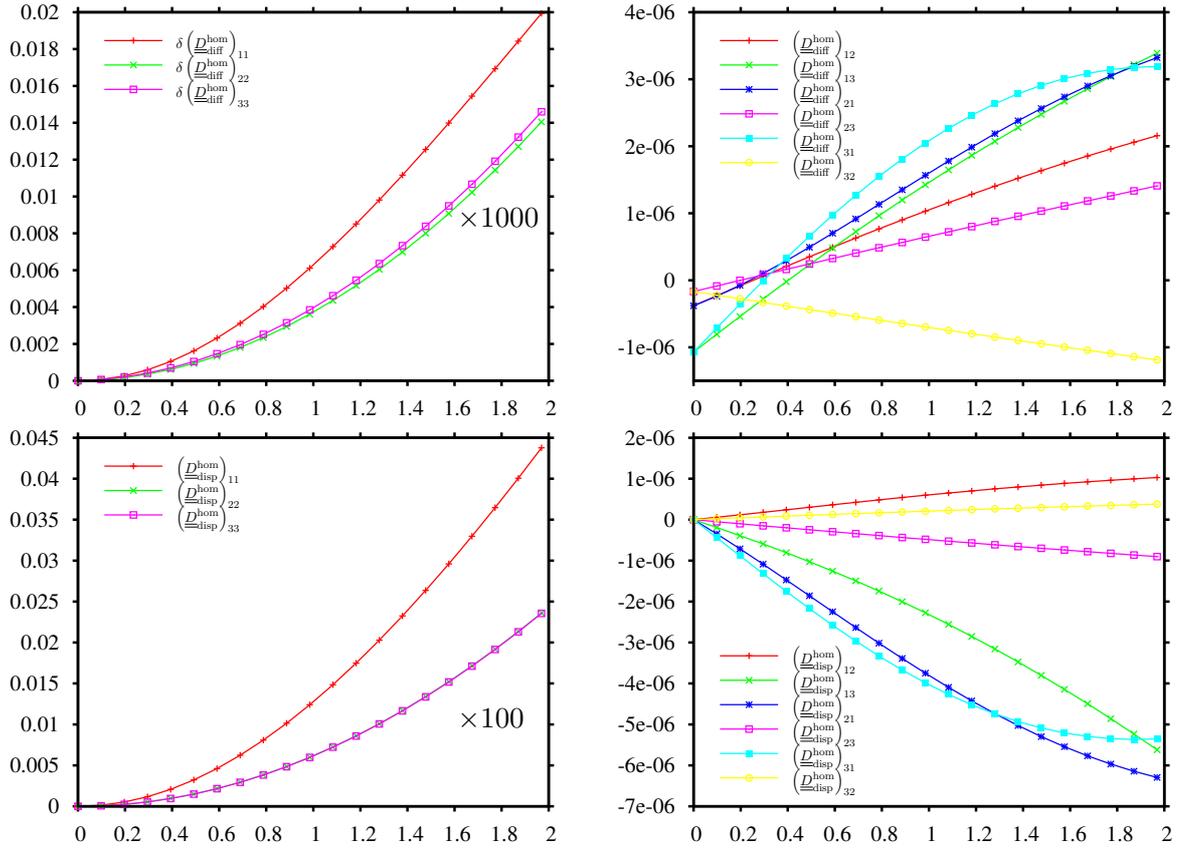


FIG. 3.4 – Réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.57$; tenseur de diffusion (en haut) et tenseur de dispersion (en bas) en fonction de $\overline{\lambda v_{h1}^{\text{BDM}^f}}$. Les termes diagonaux du tenseur de diffusion ont été translatsés de 0.1485.

$\overline{\lambda v_h^{\text{BDM}^f}} = 2$, la valeur de $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{11}$ a augmenté de 1.68e-2 dans le cas $r_s = 0.51$ à 2e-2 dans le cas $r_s = 0.57$. Par ailleurs, l'amplitude des variations de la diffusion transversale (donnée par $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ et $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{33}$) est beaucoup plus faible dans le cas $r_s = 0.57$.

Quant à la dispersion, les valeurs du terme longitudinal sont plus petites à vitesse comparable dans le cas $r_s = 0.57$. Par exemple, pour $\overline{\lambda v_{h1}^{\text{BDM}^f}} = 2$, $\left(\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}}\right)_{11} = 4.37\text{e-}2$ pour $r_s = 0.57$ contre $5\text{e-}2$ pour $r_s = 0.51$. Les termes transversaux sont également plus petits en comparaison absolue, mais aussi proportionnellement au terme longitudinal. Cette observation est mise en évidence par le facteur 100 dans le graphique en bas à gauche de la figure 3.4.

3.6.4 Réseau cubique centré de sphères

On considère maintenant un réseau cubique centré de sphères déjà évoqué au chapitre 3. On rappelle que la cellule de base est le cube unité. La phase solide est formée par 8 sphères de rayon $r_s = 0.56$ centrées aux sommets du cube, auxquelles s'ajoute une sphère centrale de rayon $r_c = 0.15$. La porosité de cette géométrie vaut $\phi = 2.9\text{e-}1$. Ces valeurs sont choisies pour pouvoir comparer les tenseurs avec ceux du réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.57$, pour des plages de valeurs de la vitesse moyenne analogues. Le pas du maillage vaut $h = 0.025$. Le champ de vitesse utilisé est $\lambda \underline{v}_h^{\text{BDM}}$ où λ varie de 0 à 1000. Pour cette plage de valeurs, la vitesse

moyenne $\overline{\lambda v_{h_1}^{\text{BDM}^f}}$ varie de 0 à 1.9.

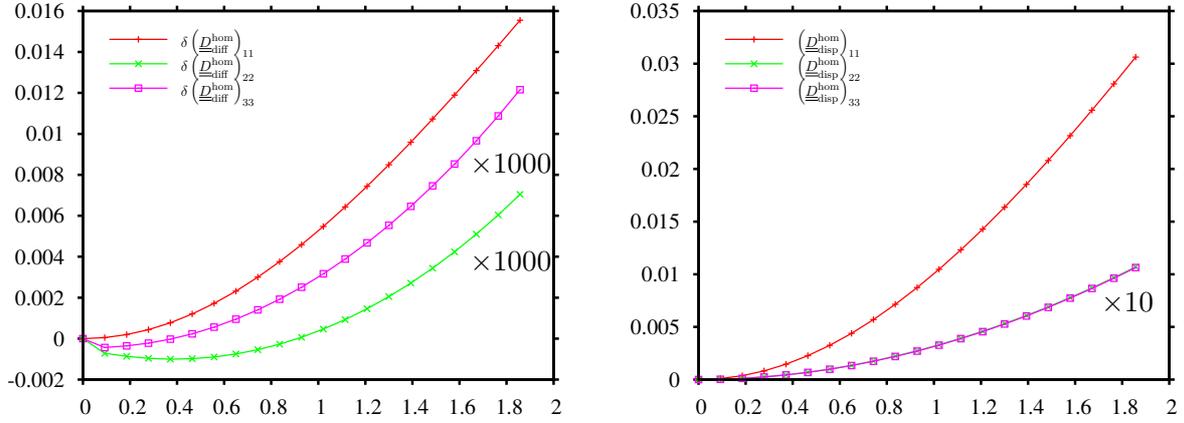


FIG. 3.5 – Réseau cubique centré de sphères de rayon $r_s = 0.56$ et $r_c = 0.15$; termes diagonaux du tenseur de diffusion (à gauche) et du tenseur de dispersion (à droite) en fonction de $\overline{\lambda v_{h_1}^{\text{BDM}^f}}$. Les termes diagonaux du tenseur de diffusion ont été translatés de 0.1633.

La figure 3.5 montre l'évolution des termes diagonaux des tenseurs de diffusion et de dispersion en fonction de $\overline{\lambda v_{h_1}^{\text{BDM}^f}}$, c'est-à-dire en fonction du nombre de Peclet à l'échelle des pores. Les termes diagonaux du tenseur de diffusion ont été translatés de 0.1633. Les variations des termes transversaux ont été multipliées par 1000 pour pouvoir être comparées avec le terme longitudinal. On en conclut donc que, comme pour le cas précédent, elles sont trop faibles pour pouvoir dominer les erreurs numériques. On ne peut donc pas interpréter le fait que les termes transversaux du tenseur de diffusion sont décroissants pour les faibles valeurs de la vitesse d'une part et le fait qu'ils prennent des valeurs différentes en présence d'advection d'autre part. Les termes transversaux du tenseur de dispersion ont été multipliés par 10 pour pouvoir être visualisés sur le même graphique que le terme longitudinal. Les termes extra-diagonaux des deux tenseurs ne sont pas présentés car leurs valeurs sont trop faibles pour dominer les erreurs numériques.

On observe que la présence de la sphère au centre de la cellule a pour effet d'augmenter les effets diffusifs. La valeur des termes diagonaux du tenseur de diffusion à vitesse nulle est de $1.48\text{e-}1$ pour le réseau cubique et de $1.63\text{e-}1$ pour le réseau cubique centré. En revanche, l'amplitude de la fluctuation de la diffusion longitudinale est légèrement moins importante : $1.5\text{e-}2$ pour le réseau cubique centré contre $1.7\text{e-}2$ pour le réseau cubique à vitesse $\overline{\lambda v_{h_1}^{\text{BDM}^f}} = 1.8$. Quant à la dispersion longitudinale, elle diminue avec la présence de la sphère centrale, passant de $3.7\text{e-}2$ pour le réseau cubique à $2.9\text{e-}2$ pour le réseau cubique centré à $\overline{\lambda v_{h_1}^{\text{BDM}^f}} = 1.8$. En revanche, la dispersion transversale augmente nettement ($\times 5$) passant de $2\text{e-}4$ pour le réseau cubique à $1\text{e-}3$ pour le réseau cubique centré, à $\overline{\lambda v_{h_1}^{\text{BDM}^f}} = 1.8$. Ceci est conforme à l'intuition physique. En effet, la présence de la sphère accentue la répartition du soluté dans le milieu, surtout dans les directions transversales par rapport à la direction de l'écoulement.

Chapitre 4

Transport advectif et diffusif diphase

4.1 Introduction

Ce chapitre prolonge l'étude du transport advectif et diffusif faite aux chapitres 2 et 3 au cas des milieux poreux partiellement saturés. L'accent est porté sur le transport par la phase gazeuse, la phase liquide étant supposée rester confinée sous forme de ménisques. Le transport en milieu non saturé est caractérisé par le couplage entre l'advection, la diffusion, la dispersion et les phénomènes de mouillage et de séchage des milieux poreux. D'une part, la capillarité permet, via la relation de Kelvin, la coexistence des phases vapeur et liquide d'une même espèce chimique. D'autre part, la valeur de la concentration de vapeur dans la phase gazeuse conditionne l'équilibre liquide-vapeur et modifie en conséquence le volume disponible pour l'écoulement gazeux. En effet, la variation de la concentration de vapeur dans la phase gazeuse, par rapport à l'état d'équilibre liquide-vapeur, entraîne une condensation de la vapeur ou une vaporisation des ménisques, faisant varier ainsi le volume disponible pour l'écoulement gazeux. Les propriétés de transport du milieu sont alors modifiées. Deux aspects rendent les résultats du cas monophasique insuffisants : la taille *a priori* inconnue des ménisques et la compressibilité du gaz. Cette dernière intervient dès la modélisation de l'écoulement [SBA93], mais aussi dans la modélisation du flux dispersif : au gradient macroscopique de concentration, moteur évident du transport, s'ajoute une contribution due à la variation de la pression à l'échelle macroscopique.

La section 4.2 traite le cas de la diffusion pure. La section 4.3 traite le cas de la diffusion en présence d'advection. La technique de développement asymptotique à double échelle permet, dans les deux cas, de construire les modèles microscopique et macroscopique à partir de la loi de Fick, de l'équation de conservation de la masse en phase gazeuse, de la loi de Laplace et de la loi de Kelvin. Dans ce chapitre, on se place systématiquement dans un cadre stationnaire et on suppose qu'il n'y a pas d'échange entre les phases.

4.1.1 Hypothèses et notations

Nous considérons un mélange gazeux de deux composantes dont l'une est thermodynamiquement inerte et l'autre est susceptible de changer de phase pour se condenser et former des ménisques liquides dans les pores. Réciproquement, les ménisques sont susceptibles de se vaporiser dans la phase gazeuse. Nous nous intéressons au problème de transport stationnaire et isotherme aussi bien pour le phénomène d'advection que pour le phénomène de diffusion. La plupart des notations des chapitres précédents ne sont pas modifiées et sont réutilisées dans ce

chapitre. Mais certaines sont adaptées au cas diphasique et d'autres sont définies en supplément. Les variables d'espace \underline{y} , \underline{x} et \underline{z} et le paramètre δ gardent le même sens. La cellule Ω désigne toujours la cellule élémentaire du milieu poreux dans le cadre des modèles périodiques. Sa taille caractéristique est encore notée ℓ . Les ménisques sont en contact avec la phase solide et sont déconnectés les uns des autres, si bien qu'il ne peut pas y avoir de transport d'un ménisque à l'autre. Nous supposons que le module de la vitesse d'écoulement du mélange gazeux reste suffisamment petit pour que le modèle de Stokes soit valide pour décrire l'écoulement du gaz. Nous supposons également que les variations de pression à l'interface ménisque-gaz sont suffisamment faibles pour ne pas modifier la forme du ménisque par rapport à sa position au repos. De plus, le champ de vitesse du mélange gazeux est nul au niveau de l'interface ménisque-gaz. Le ménisque se comporte donc comme la phase solide vis-à-vis du gaz. Pour cette raison, le domaine Ω_f , sur lequel seront définis les problèmes d'écoulement et de transport à l'échelle microscopique, désigne la phase gazeuse de la cellule, $\partial\Omega_{fs}$ l'union de l'interface solide-gaz et de l'interface liquide-gaz au sein de $\partial\Omega_f$ et $\partial\Omega_{ff}$ l'interface entre la phase gazeuse de la cellule et la phase gazeuse des cellules voisines.

Le comportement visqueux du mélange gazeux est déterminé par ses coefficients de Navier notés μ_1 et μ_2 , où μ_1 correspond à la viscosité de cisaillement et μ_2 à la viscosité de volume [LL87]. Ces paramètres sont supposés constants ([BSL60] donne une méthode pour calculer la viscosité d'un mélange gazeux en fonction de la viscosité et de la masse molaire de ses composantes, une théorie plus générale est donnée dans [EG94]). La concentration molaire du mélange gazeux est notée c_g et sa pression p_g . Le mélange gazeux est constitué d'air et de vapeur dont les concentrations molaires sont notées c_a et c_v respectivement ($c_a + c_v = c_g$), les fractions molaires $\theta_a = \frac{c_a}{c_g}$ et $\theta_v = \frac{c_v}{c_g}$, les vitesses \underline{v}_a et \underline{v}_v , les masses molaires M_a et M_v , et les pressions partielles p_a et p_v . Le coefficient de diffusion en milieu infini de la vapeur dans le mélange gazeux est noté D_v . La vitesse \underline{v}_g du mélange gazeux est déterminée par la moyenne des vitesses de ses composantes pondérées par les fractions molaires,

$$\underline{v}_g = \theta_a \underline{v}_a + \theta_v \underline{v}_v. \quad (4.1)$$

Le mélange et ses constituants vérifient la loi d'état des gaz parfaits et la loi de Dalton

$$p_i = c_i RT \quad i = g, a, v \quad (4.2)$$

où T désigne la température (K) et R la constante des gaz parfaits : $R = 8.314 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$.

4.1.2 Equilibre liquide-vapeur

L'existence des effets capillaires permet d'observer simultanément la phase vapeur et la phase liquide dans le milieu poreux. Soit p_{sat} la pression de vapeur saturante. C'est une fonction donnée qui dépend de la température. Lorsque l'espace n'est pas confiné comme dans un milieu poreux, la phase liquide s'évapore tant que $p_v < p_{sat}$. L'équilibre est atteint lorsque $p_v = p_{sat}$, alors que si $p_v > p_{sat}$, la phase vapeur se condense. Au sein d'un milieu poreux, le phénomène est différent. La pression capillaire permet, via la relation de Kelvin (cf ci-dessous), un équilibre liquide-vapeur même si $p_v < p_{sat}$.

Afin de définir la pression capillaire, on commence par introduire la tension de surface ou tension superficielle γ_{lg} qui caractérise l'interface liquide-gaz. Elle détermine la contrainte membranaire qui s'établit dans l'interface. C'est une fonction donnée qui dépend de la température. La tension de surface est à l'origine de la pression capillaire. Soit un point de l'interface et \underline{n} le vecteur normal à la surface en ce point, dirigé vers la phase gazeuse. Chaque plan contenant

\underline{n} coupe l'interface selon une courbe dont on peut calculer le rayon de courbure. Le rayon de courbure est positif si le centre de la courbure est situé dans la direction indiquée par \underline{n} par rapport au point de l'interface, et négatif s'il se trouve dans la direction opposée. Soit R_{\max} et R_{\min} les rayons de courbure maximum et minimum de la surface. La courbure moyenne k_r de l'interface au point considéré vaut

$$k_r = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_{\max}} + \frac{1}{R_{\min}} \right) \quad (4.3)$$

Soit p_l la pression du liquide dans le ménisque. La loi de Laplace relie la différence de pression de part et d'autre de l'interface, encore appelée pression capillaire, à la courbure moyenne à l'aide de la tension de surface [Atk94, VD02] :

$$p_g - p_l = 2\gamma_{lg}k_r \quad (4.4)$$

En conséquence, plus la courbure de l'interface est grande, plus la différence de pression est grande. Par exemple, la tension superficielle de l'interface eau-air à 20°C vaut $7.8 \cdot 10^{-3} \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$. La courbure d'une bulle de gaz sphérique est constante et égale à l'inverse du rayon de la bulle. La différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la bulle vaut $145.5 \text{ N}\cdot\text{m}^{-2}$ (ou Pa) si le rayon de la bulle est de 1 mm et $1.45\text{e}5 \text{ N}\cdot\text{m}^{-2}$ si le rayon de la bulle est de $1 \mu\text{m}$.

L'équilibre liquide-vapeur est caractérisé par la loi de Kelvin qui relie la concentration de vapeur à la pression capillaire. Soit ρ_l la masse volumique du liquide supposée constante. La loi de Kelvin s'écrit [Cou95]

$$\ln \left(\frac{p_v}{p_{sat}} \right) = \frac{M_v}{\rho_l RT} (p_l - p_g) \quad (4.5)$$

La forme de l'interface est liée aux propriétés de contact entre les phases, à la pression capillaire et à la pression partielle de vapeur. Par exemple si l'angle de contact entre l'interface liquide-gaz et l'interface liquide-solide vaut 0 (liquide parfaitement mouillant) et que la phase liquide est confinée sous forme de ménisques dans les recoins du pore, la pression capillaire $p_g - p_l$ est positive. Cette hypothèse est adoptée dans la suite. En conséquence, l'équilibre liquide-vapeur est vérifié pour une valeur de p_v inférieure à p_{sat} .

4.1.3 Géométrie des ménisques

L'objectif de cette section est de donner une expression du degré de saturation du milieu en fonction des paramètres géométriques définissant la structure du milieu poreux et la taille des ménisques. Nous ne considérerons que des milieux dont la structure microscopique est un réseau de sphères. Dans ce cas, les ménisques sont localisés au niveau des zones de contact entre les sphères.

Dans le cas des réseaux cubiques qui seront étudiés dans la suite du chapitre, la cellule de base est un cube et la phase solide est constituée de sphères qui sont centrées en chaque sommet du cube. On suppose que la surface libre du ménisque est tangente à la surface des sphères (ce qui correspond à une hypothèse de liquide parfaitement mouillant). A cause de la symétrie de révolution, les ménisques prennent une forme torique. Un ménisque est au repos si la différence entre la pression du liquide et la pression du gaz est constante. Donc, la courbure moyenne de la surface du ménisque en contact avec le mélange gazeux est constante d'après la loi de Laplace. Nous faisons l'approximation classique selon laquelle la partie de la section du tore en contact avec le gaz est un arc de cercle. Dans ces conditions, la courbure n'est pas exactement constante mais ses variations sont négligées.

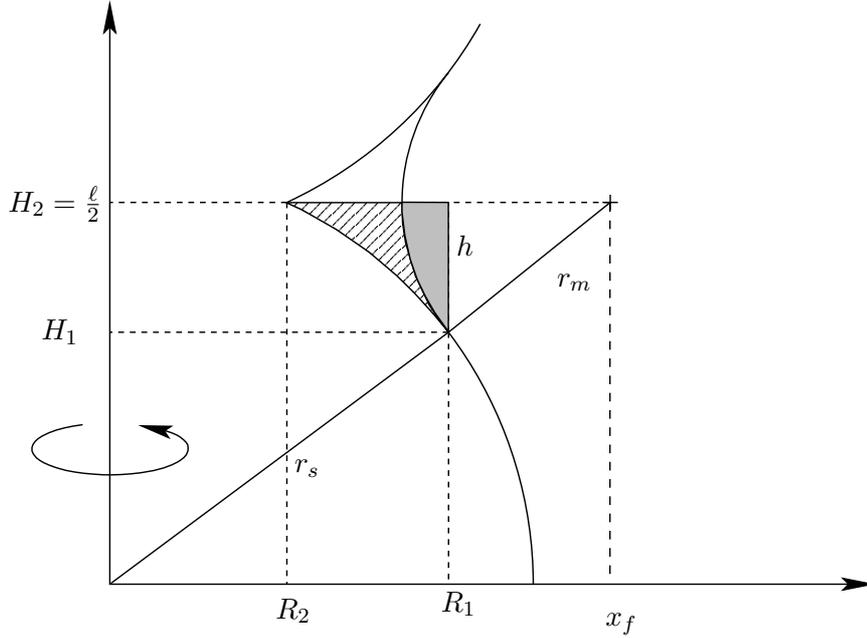


FIG. 4.1 – Coupe de la cellule de base du milieu poreux, avec les différents paramètres géométriques. La zone hachurée représente la moitié de la coupe d'un ménisque.

Même si les maillages et les calculs sont effectués dans le cadre adimensionnel, on considère ici des grandeurs dimensionnées. La cellule de référence est donc un cube de côté ℓ . Soit $r_s \geq 0.5\ell$ le rayon des sphères centrées aux sommets du cube. Les sphères s'interpénètrent si $r_s > 0.5\ell$, sinon elles sont tangentes les unes avec les autres. Les ménisques sont centrés aux milieux des arêtes du cube. La section du tore est délimitée par les parois des deux sphères en contact et par un arc de cercle de rayon r_m , tangent aux sphères. La valeur maximale pour r_m au-delà de laquelle les ménisques entrent en contact est donnée par

$$r_m^{\max} = \frac{\ell}{2}\sqrt{2} - r_s \quad (4.6)$$

On note (cf figure 4.1) R_1 la distance entre l'arête du cube et le point de contact du cercle avec les sphères, h la hauteur entre ce point de contact et le plan d'intersection des deux sphères, $H_1 = \frac{\ell}{2} - h$ la hauteur complémentaire de h dans la demi-arête du cube, R_2 le rayon du cercle formé par l'intersection de deux sphères, S_r le degré de saturation du milieu en liquide, c'est-à-dire le rapport entre le volume occupé par la phase liquide et le volume poreux total, et ϕ la porosité du milieu.

Les paramètres suivants peuvent être exprimés directement à l'aide de r_s et r_m

$$H_1 = \frac{\ell r_s}{2(r_s + r_m)} \quad R_1 = r_s \sqrt{1 - \frac{\ell^2}{4(r_s + r_m)^2}} \quad R_2 = \sqrt{r_s^2 - \frac{\ell^2}{4}}$$

$$h = \frac{\ell r_m}{2(r_s + r_m)} \quad x_f = \sqrt{(r_s + r_m)^2 - \frac{\ell^2}{4}}$$

Le cylindre centré sur l'arête du cube, indiquée par une flèche circulaire sur la figure 4.1, entre les plans situés aux hauteurs H_1 et $H_2 = \frac{\ell}{2}$ a une épaisseur h et un rayon R_1 . Il contient une partie de la sphère, la moitié du ménisque et le tore généré par la révolution de la surface grisée

(cf figure 4.1). Son volume est noté $V_{cyl} = \pi R_1^2 h$. Le volume V_{sph} de la portion de sphère qu'il contient est calculé en utilisant l'expression du volume d'une calotte de sphère d'épaisseur $r_s - H_1$ obtenue par l'intégrale

$$\int_{r=0}^{r=\sqrt{r_s^2-H_1^2}} r \left(\sqrt{r_s^2 - r^2} - H_1 \right) dr = 2\pi \left[\frac{1}{6} H_1^3 - \frac{1}{2} H_1 r_s^2 + \frac{1}{3} r_s^3 \right]$$

Ainsi,

$$V_{sph} = \frac{1}{3}\pi \left(\frac{\ell^3}{2^3} - H_1^3 \right) + \pi \left(\frac{\ell}{2} r_s^2 - H_1 r_s^2 \right)$$

L'aire de la surface grisée s'écrit

$$S = \frac{1}{2} r_m^2 \arcsin \left(\frac{h}{r_m} \right) - \frac{1}{2} h \sqrt{r_m^2 - h^2}$$

Pour calculer le volume du tore généré par la révolution de cette surface autour de l'arête du cube, il est nécessaire de connaître l'abscisse du centre de gravité de la surface grisée. Un calcul direct réalisé sur Maple donne

$$x_g = R_1 - \frac{(h r_m^2 - \frac{1}{3} h^3 - \sqrt{r_m^2 - h^2} r_m^2 \arcsin(\frac{h}{r_m}))}{2S}$$

Le volume de ce tore est noté $V_t = 2\pi x_g S$. Ainsi le volume d'un ménisque s'écrit

$$V_m = 2(V_{cyl} - V_{sph} - V_t)$$

Le volume de la phase solide dans la cellule de base s'écrit :

$$V_s = \frac{4}{3}\pi r_s^3 - 6 \left(\frac{2}{3}\pi \left(r_s^3 - \frac{\ell^3}{2^3} \right) - \frac{\pi \ell}{2} \left(r_s^2 - \frac{\ell^2}{2^2} \right) \right)$$

car $\left(\frac{2}{3}\pi \left(r_s^3 - \frac{\ell^3}{2^3} \right) - \frac{\pi \ell}{2} \left(r_s^2 - \frac{\ell^2}{2^2} \right) \right)$ représente le volume d'une calotte de sphère d'épaisseur $r_s - \frac{\ell}{2}$. La porosité se déduit de cette valeur

$$\phi = 1 - V_s$$

Dans la cellule de base du milieu poreux, on trouve l'équivalent de 3 ménisques. Le degré de saturation peut donc être exprimé par

$$S_r = \frac{3V_m}{\phi}$$

La figure 4.2 montre l'évolution de $\frac{r_m}{\ell}$ en fonction de S_r pour un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51\ell$. D'après (4.6), la valeur maximale de r_m vaut $r_m^{\max} = 0.197 \times \ell$ et la valeur maximale de S_r vaut $S_r^{\max} = 0.176$.

À titre de validation, un maillage est construit en choisissant les paramètres $\ell = 1$, $h = 0.025$, $r_s = 0.51$ et $r_m = 0.1$. Le volume de la phase gazeuse correspondant s'écrit

$$V_{gaz} = 1 - V_s - 3V_m$$

Le calcul du volume du maillage (en sommant les volumes de tous les tétraèdres) et l'expression précédente donnent tous les deux la valeur $V_{gaz} = 0.414$.

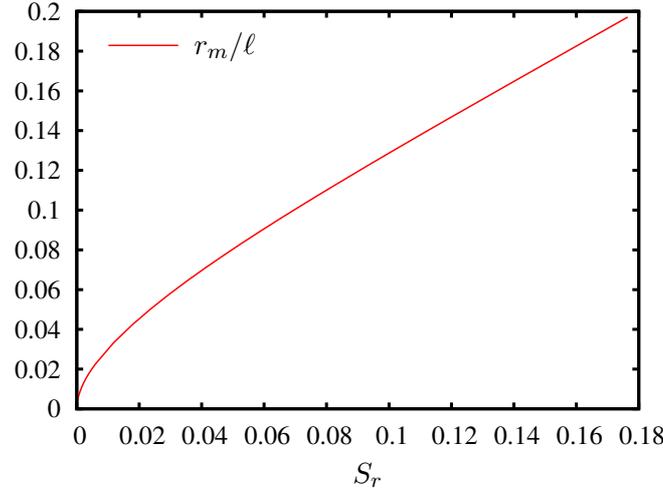


FIG. 4.2 – r_m/ℓ en fonction du degré de saturation pour un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51\ell$.

4.1.4 Influence de la fraction molaire de vapeur sur la géométrie des ménisques

Pour une valeur donnée de θ_v , la pression capillaire est obtenue à partir de la loi de Kelvin (4.5), que nous réécrivons sous la forme

$$(p_l - p_g) = \frac{\rho_l RT}{M_v} \ln \left(\frac{p_v}{p_{sat}} \right) \quad (4.7)$$

où p_v peut être exprimé en fonction de c_g et de θ_v sous la forme $p_v = c_v RT = \theta_v c_g RT$. La pression capillaire est reliée à la courbure moyenne de l'interface liquide-gaz à l'aide de (4.4) :

$$(p_g - p_l) = 2\gamma_{lg} k_r \Rightarrow k_r = -\frac{\rho_l RT}{2\gamma_{lg} M_v} \ln \left(\frac{\theta_v c_g RT}{p_{sat}} \right) \quad (4.8)$$

Passons dans l'espace adimensionnel décrit par les variables \underline{x} à l'échelle macroscopique et \underline{z} à l'échelle microscopique, où la cellule de base du milieu est le cube unité. Toutes les grandeurs restent inchangées sauf k_r qui devient $k'_r = \ell k_r = -\frac{\ell \rho_l RT}{2\gamma_{lg} M_v} \ln \left(\frac{\theta_v c_g RT}{p_{sat}} \right)$. On introduit les deux nombres sans dimension caractérisant le système

$$P_{sd} = \frac{c_g RT}{p_{sat}} \quad \text{et} \quad T_{sd} = \frac{\ell \rho_l RT}{2\gamma_{lg} M_v} \quad (4.9)$$

d'où

$$k'_r = \ell k_r = -T_{sd} \ln(\theta_v P_{sd}) \quad (4.10)$$

En utilisant les notations introduites dans la section 4.1.3, la courbure moyenne s'écrit :

$$k'_r = \frac{\ell}{2r_m} \left(1 - \frac{r_m}{\sqrt{(r_s + r_m - \frac{\ell}{2})(r_s + r_m + \frac{\ell}{2})}} \right) \quad (4.11)$$

Remarque 4.1. k'_r tend vers $+\infty$ lorsque r_m tend vers 0, ce qui signifie bien que θ_v tend vers 0 d'après (4.8).

Par ailleurs, les ménisques étant supposés déconnectés, il existe une valeur maximale θ_{\max} de θ_v au-delà de laquelle le système sort du cadre de notre étude. La valeur de θ_{\max} peut être exprimée en fonction de r_s , compte tenu de la valeur de r_m^{\max} définie par (4.6) et des valeurs de P_{sd} et T_{sd} .

$$\theta_{\max} = \frac{1}{P_{sd}} \exp\left(\frac{-k_r^{\max}}{T_{sd}}\right) \quad (4.12)$$

où k_r^{\max} est l'expression de k_r' , (4.11), avec r_m^{\max} comme valeur de r_m .

Exemple 4.2 (numérique). On considère un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$ (paramètre adimensionné). Pour cette géométrie, les valeurs maximales autorisées pour que les ménisques restent déconnectés sont $r_m^{\max} = 1.97e-01$ et $k_r^{\max} = 1.54$. Le mélange gazeux est constitué d'air et de vapeur d'eau à $T = 293$ K et à $p_g = 1e5$ N·m⁻² (Pa). Dans ce cas,^{1 2} on a $\rho_l = 1e3$ kg·m⁻³, $M_v = 1.8e-2$ kg·mol⁻¹, $\gamma_{lg} = 7.3e-2$ N·m⁻¹, $p_{sat} = 2.34e3$ N·m⁻². Pour $\ell = 1e-3$ m (taille de pore correspondant à un sable grossier), P_{sd} vaut 42.7 et T_{sd} vaut 9.27e5. Dans ce cas, $\theta_{\max} = 2.34e-02$, ce qui correspond à une valeur maximale du degré de saturation $S_r^{\max} = 17.6\%$. On observe que si θ_v diminue de 1% par rapport à θ_v^{\max} , alors le degré de saturation diminue de plus de 99% à $S_r = 4.40e-8$. C'est-à-dire que tout le milieu est quasiment asséché. En revanche si ℓ vaut 1e-8 m, alors $T_{sd} = 9.27$, $\theta_{\max} = 1.98e-02$ et si θ_v diminue de 1%, le degré de saturation diminue de 5.6%, à 16.7%. La coexistence des phases liquide et vapeur dans le milieu n'est observable, pour des valeurs de θ_v inférieures à θ_{\max} , que dans des structures microscopiques suffisamment fines. En effet, c'est le rôle de la pression capillaire qui permet d'observer ce phénomène et ce rôle devient d'autant plus important que la taille des pores est petite. Les figures 4.3 et 4.4 permettent de visualiser l'évolution de r_m et de S_r en fonction de θ_v pour $\ell = 1e-7$ m (ordre de grandeur de la taille des pores de la craie), $\ell = 1e-8$ m et $\ell = 5e-9$ m (ordre de grandeur de la taille des pores de la pâte de ciment).

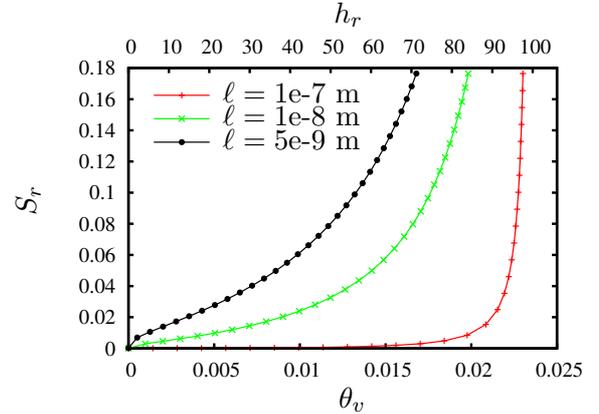
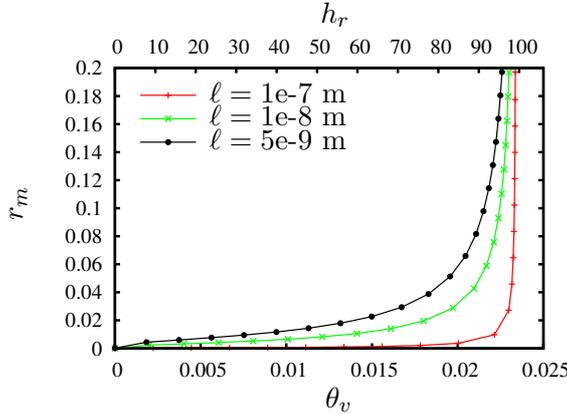


FIG. 4.3 – Evolution de r_m en fonction de θ_v pour trois tailles de pores différentes, dans un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$. FIG. 4.4 – Evolution de S_r en fonction de θ_v pour trois tailles de pores différentes, dans un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$.

Etant donné que l'humidité relative

$$h_r = \frac{p_v}{p_{sat}} \quad (4.13)$$

¹http://fr.wikipedia.org/wiki/Pression_de_vapeur_saturante

²http://www.ac-nancy-metz.fr/enseign/physique/PHYS/Bts-Cira/mecaflu/Mecaflu_BTS.pdf

est directement proportionnelle à θ_v selon l'équation

$$h_r = \theta_v \frac{p_g}{p_{sat}} \quad (4.14)$$

les graphiques faisant intervenir θ_v possèdent une échelle supplémentaire en abscisse donnant la valeur de l'humidité relative correspondant à θ_v . Ainsi, le bord haut des figures 4.3 et 4.4 donnent les valeurs de l'humidité relative correspondant aux valeurs de θ_v . En conclusion, la seule taille des pores fait que le milieu poreux est asséché beaucoup plus rapidement lorsque la structure est grossière.

4.2 Régime de diffusion pure

Dans cette section, nous considérons le cas simple de la diffusion pure dans un milieu partiellement saturé. C'est-à-dire que la vitesse du mélange gazeux, \underline{v}_g , est nulle. De même, les quantités p_g et c_g sont constantes et uniformes dans toute la phase fluide.

4.2.1 Modèles

La diffusion de la phase vapeur dans le mélange gazeux est provoquée par le gradient de fraction molaire $\nabla_y \theta_v$ [GM62, RPP87] et le flux de diffusion de vapeur $\underline{j}_v = c_v \underline{v}_v$ est donné par la loi de Fick :

$$\underline{j}_v = -D_v c_g \nabla_y \theta_v \quad (\text{phase gazeuse}) \quad (4.15)$$

La conservation de la masse de vapeur s'écrit

$$\begin{aligned} \nabla_y \cdot (c_v \underline{v}_v) &= c_g \nabla_y \cdot (\theta_v \underline{v}_v) = 0 \\ \Rightarrow \quad -c_g D_v \Delta_y \theta_v &= 0 \quad (\text{phase gazeuse}) \end{aligned} \quad (4.16)$$

Enfin, on suppose qu'il n'y a pas d'échange entre les phases solide et gazeuse d'une part et entre les phases liquide et gazeuse d'autre part. Les conditions aux limites sont donc données par

$$\underline{j}_v \cdot \underline{n} = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla_y c_v \cdot \underline{n} = c_g \nabla_y (\theta_v) \cdot \underline{n} = 0 \quad (\text{interfaces solide-gaz et liquide-gaz}) \quad (4.17)$$

où \underline{n} désigne le vecteur unitaire normal à la surface et orienté vers l'extérieur de la phase gazeuse.

Développement asymptotique à double échelle

L'introduction des variables d'espace adimensionnées \underline{x} et \underline{z} conduit, après simplification par $\frac{c_g D_v}{L^2}$, au système

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{1}{\delta^2} \Delta_z \theta_v - \Delta_x \theta_v - \frac{1}{\delta} (\nabla_x \cdot \nabla_z \theta_v + \nabla_z \cdot \nabla_x \theta_v) = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\frac{1}{\delta} \nabla_z \theta_v + \nabla_x \theta_v \right) \cdot \underline{n} = 0 & (\partial \Omega'_{fs}) \\ \theta_v \quad \underline{z}\text{-périodique} & (\partial \Omega'_{ff}) \end{array} \right. \quad (4.18)$$

On rappelle que Ω'_f désigne le domaine adimensionné occupé par la phase gazeuse, $\partial \Omega'_{fs}$ l'interface solide-gaz et liquide-gaz et $\partial \Omega'_{ff}$ l'interface gaz-gaz. L'inconnue θ_v est décomposée selon les puissances de δ sous la forme

$$\theta_v = \theta_v^{(0)} + \delta \theta_v^{(1)} + \delta^2 \theta_v^{(2)} + \dots \quad (4.19)$$

où les fonctions $\theta_v^{(i)}(\underline{x}, z)$ sont réputées du même ordre et z -périodiques sur $\partial\Omega'_{\text{ff}}$ pour tout i .

L'ordre δ^{-2} dans la première équation du système (4.18) et **l'ordre** δ^{-1} dans la deuxième équation de (4.18) donnent

$$-\Delta_z \theta_v^{(0)} = 0 \quad \text{et} \quad \underline{\nabla}_z \theta_v^{(0)} \cdot \underline{n} = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{\theta}_v^{(0)} = 0 \quad (4.20)$$

Le vecteur $\underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)}$ peut alors être interprété comme le gradient macroscopique de concentration.

L'ordre δ^{-1} dans la première équation de (4.18) et **l'ordre** δ^0 dans la deuxième équation de (4.18) donnent

$$\begin{cases} -\Delta_z \theta_v^{(1)} - \underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \theta_v^{(0)} - \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\nabla}_z \theta_v^{(1)} + \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} \right) \cdot \underline{n} = 0 & (\partial\Omega'_{\text{fs}}) \end{cases} \quad (4.21)$$

Les dérivées selon z de la moyenne $\overline{\theta_v^{(1)}}^f$ étant nulles, $\theta_v^{(1)}$ peut être remplacé par $\tilde{\theta}_v^{(1)}$ dans (4.21). De plus, la première équation peut être simplifiée en utilisant le résultat de (4.20). D'après la forme du système (4.21), $\theta_v^{(1)}$ dépend linéairement de $\underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)}$. Il existe donc un vecteur de localisation $\underline{\chi}$ à moyenne nulle et z -périodique tel que

$$\tilde{\theta}_v^{(1)} = \underline{\chi} \cdot \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} \quad (4.22)$$

et qui vérifie le système

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{\chi} \cdot \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{n} + \underline{n} \right) \cdot \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} = 0 & (\partial\Omega'_{\text{fs}}) \end{cases} \quad (4.23)$$

Il n'y a pas de contrainte sur la direction de $\underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)}$, donc le champ $\underline{\chi}$ vérifie

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{\chi} = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{n} + \underline{n} \right) = 0 & (\partial\Omega'_{\text{fs}}) \\ \underline{\chi} \quad z\text{-périodique} & (\partial\Omega'_{\text{ff}}) \end{cases} \quad (4.24)$$

La moyenne du membre de gauche de la première équation de (4.24) est nulle à cause des conditions aux limites et des conditions de périodicité, ce qui signifie que l'ordre δ^0 de la forme macroscopique de l'équation de conservation de la vapeur est l'équation triviale $0 = 0$.

L'ordre δ^0 dans la première équation de (4.18) et **l'ordre** δ^1 dans la deuxième équation de (4.18) donnent

$$\begin{cases} -\Delta_z \theta_v^{(2)} - \Delta_x \theta_v^{(0)} - \underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \theta_v^{(1)} - \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \theta_v^{(1)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\nabla}_z \theta_v^{(2)} + \underline{\nabla}_x \theta_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} = 0 & (\partial\Omega'_{\text{fs}}) \end{cases} \quad (4.25)$$

L'intégrale de la première équation de (4.25) sur Ω'_f montre que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega'_f} \left(-\Delta_z \theta_v^{(2)} - \underline{\nabla}_z \cdot \underline{\nabla}_x \theta_v^{(1)} \right) dz + \int_{\Omega'_f} \left(-\Delta_x \theta_v^{(0)} - \underline{\nabla}_x \cdot \underline{\nabla}_z \theta_v^{(1)} \right) dz = 0 \\ \Rightarrow & \int_{\partial\Omega'_f} \left(-\underline{\nabla}_z \theta_v^{(2)} - \underline{\nabla}_x \theta_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} dS_z + \int_{\Omega'_f} \underline{\nabla}_x \cdot \left(-\underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} - \underline{\nabla}_z \theta_v^{(1)} \right) dz = 0 \end{aligned} \quad (4.26)$$

La partie de l'intégrale de surface sur $\partial\Omega'_{\text{fs}}$ dans la deuxième ligne de (4.26) est nul à cause de la deuxième équation de (4.25) et la partie de l'intégrale sur $\partial\Omega'_{\text{ff}}$ est nulle à cause des conditions périodiques. L'intégrale de la première équation de (4.25) s'écrit donc

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot \left[|\Omega'_f| \overline{\left(-\nabla_x \theta_v^{(0)} - \nabla_z \theta_v^{(1)} \right)^f} \right] &= 0 \\ \Rightarrow \nabla_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(-\nabla_x \theta_v^{(0)} - \overline{\nabla_z \chi}^f \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) \right] &= 0 \end{aligned} \quad (4.27)$$

D'où en divisant par $|\Omega'_f|$,

$$\nabla_x \cdot \left(-\phi \left(\underline{I} + \overline{\nabla_z \chi}^f \right) \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) = 0 \quad (4.28)$$

Les moyennes de la première équation de (4.21) et de (4.20) ne fournissent aucune contribution à l'échelle macroscopique. En multipliant (4.28) par $\frac{c_g D_v}{L^2}$, on obtient l'ordre δ^0 de l'équation de conservation de la vapeur à l'échelle macroscopique

$$\underline{\nabla}_X \cdot \left(-c_g^{(0)} D_v \phi \left(\underline{I} + \overline{\nabla_z \chi}^f \right) \cdot \underline{\nabla}_X \theta_v^{(0)} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \underline{\nabla}_X \cdot \langle \underline{j}_v \rangle_f + O(\delta) = 0$$

où $\underline{X} = L\underline{x}$ est la variable d'espace dimensionnée relative à l'échelle macroscopique. On introduit le tenseur de diffusion homogénéisé sans dimension :

$$\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} = \phi \left(\underline{I} + \overline{\nabla_z \chi}^f \right)$$

si bien que le flux diffusif macroscopique s'écrit

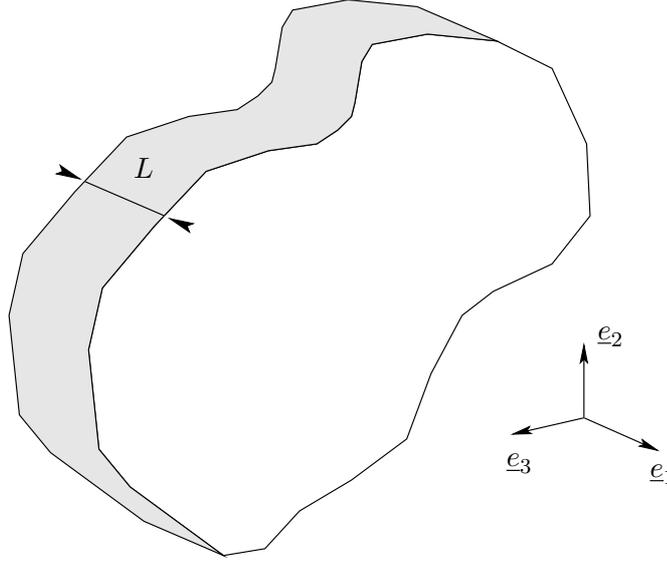
$$\langle \underline{j}_v \rangle_f = -c_g D_v \underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \cdot \underline{\nabla}_X \overline{\theta}_v^f + O(\delta)$$

Dans le cas observé ici où l'advection est nulle, le tenseur de diffusion homogénéisé est proportionnel au tenseur de tortuosité \underline{T} via la porosité [DB02] :

$$\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} = \phi \underline{T} \quad \text{avec} \quad \underline{T} = \underline{I} + \overline{\nabla_z \chi}^f \quad (4.29)$$

4.2.2 Simulation du transport macroscopique purement diffusif

Le but, ici, est d'étudier la diffusion dans un milieu partiellement saturé à l'échelle macroscopique. On néglige désormais les termes d'ordre supérieur à δ^0 . Considérons un réseau cubique de sphères de rayon r_s . Nous limitons l'étude à des problèmes en dimension 1, à l'échelle macroscopique. Pour cela nous considérons une plaque de surface infinie et d'épaisseur L et nous observons le transport de la vapeur dans l'épaisseur de la plaque selon la direction \underline{e}_1 . Le problème est invariant dans les directions \underline{e}_2 et \underline{e}_3 (cf figure 4.5). Il peut donc être réduit à un problème en dimension 1 dépendant uniquement de X_1 à l'échelle macroscopique. En conséquence, seul le premier coefficient diagonal du tenseur de diffusion, $\phi \left(\underline{T} \right)_{11}$, est utile. En vertu de la loi de Kelvin combinée avec la loi de Laplace, la fraction molaire de vapeur conditionne la courbure des ménisques et par suite leur taille. Donc la morphologie du volume gazeux varie en fonction de θ_v . Comme la tortuosité dépend de la morphologie du volume gazeux, $\left(\underline{T} \right)_{11}$ est une fonction de θ_v . Pour alléger les notations, nous posons $T_{11}(\theta_v) = \left(\underline{T} \right)_{11}(\theta_v)$ et $(\phi T_{11})(\theta_v) = \phi(\theta_v) T_{11}(\theta_v)$.

FIG. 4.5 – Plaque infinie d'épaisseur L

Ainsi, le transport à l'échelle macroscopique est modélisé par l'équation de conservation de la masse de vapeur

$$\frac{d}{dX_1} \cdot \langle j_v \rangle_f = 0 \quad \text{avec} \quad \langle j_v \rangle_f = -c_g D_v (\phi T_{11}) (\theta_v) \cdot \frac{d}{dX_1} \theta_v \quad (4.30)$$

Nous nous proposons de résoudre l'équation de transport macroscopique en cherchant θ_v solution de

$$\frac{d}{dX_1} \left(-c_g D_v (\phi T_{11}) (\theta_v) \frac{d}{dX_1} \theta_v \right) = 0 \quad X_1 \in [0, L] \quad (4.31)$$

ou encore (puisque c_g est constant)

$$\frac{d}{dX_1} \left(-(\phi T_{11}) (\theta_v) \frac{d}{dX_1} \theta_v \right) = 0 \quad X_1 \in [0, L] \quad (4.32)$$

avec les conditions aux limites

$$\theta_v(0) = \theta_0 \quad \text{et} \quad \theta_v(L) = \theta_L \quad (4.33)$$

Le choix des conditions aux limites θ_0 et θ_L doit respecter l'intervalle $[0, \theta_{\max}]$. Le problème est non-linéaire du fait de la dépendance de ϕ et de T_{11} par rapport à θ_v . La fonction $\theta_v \mapsto (\phi T_{11}) (\theta_v)$ peut être déterminée numériquement en utilisant les lois de Kelvin et de Laplace.

Calcul du coefficient de diffusion

Le problème de diffusion pure à l'échelle microscopique, modélisé par (4.24), est un cas particulier du problème (3.11) (page 57) avec le champ de vitesse $\underline{v}^{*(0)} \equiv \underline{0}$. L'analyse mathématique et numérique du chapitre 3 est donc encore valide. Les difficultés posées par l'approximation du champ de vitesse sont résolues dans le mesure où le problème discrétisé (3.23) défini avec $\underline{w}_h \equiv \underline{0}$ est toujours bien posé puisque $\underline{0}$ est à l'évidence un champ de vitesse à divergence exactement nulle.

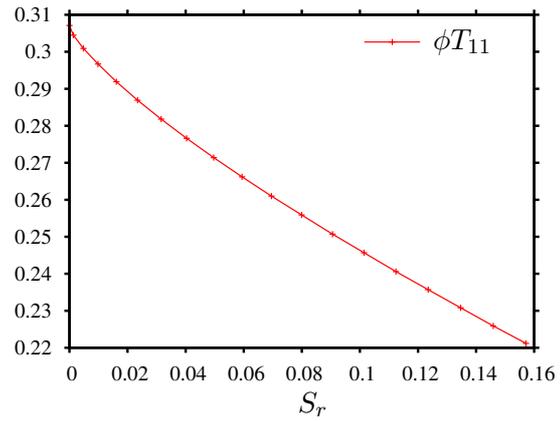
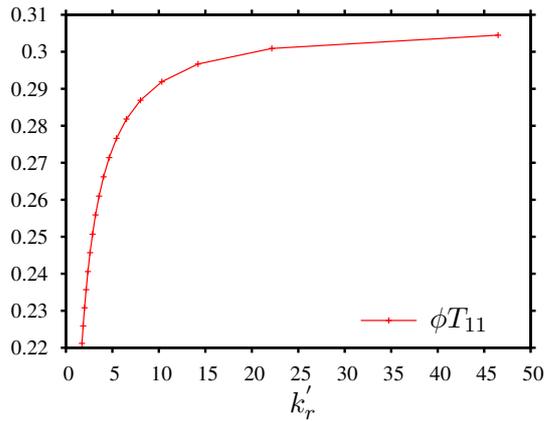


FIG. 4.6 – Evolution de ϕT_{11} en fonction de la courbure moyenne, pour un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$

de rayon $r_s = 0.51$

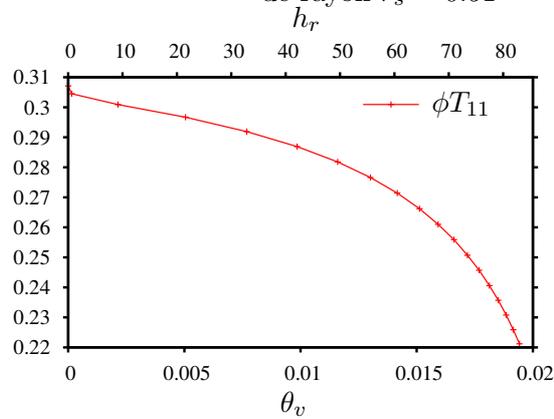


FIG. 4.8 – Evolution de ϕT_{11} en fonction de θ_v dans un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$ ($\ell = 1e-8$).

Le rayon des sphères r_s étant fixé, la morphologie du domaine d'écoulement est parfaitement déterminée par k'_r ou par S_r ou encore par θ_v et les valeurs de T_{sd} et P_{sd} . Il est donc possible de calculer numériquement la valeur de ϕT_{11} .

On considère de nouveau l'exemple numérique 4.2 (cf page 83). Le milieu est un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$. Le calcul du premier terme du tenseur de diffusion (correspondant à ϕT_{11}) en fonction de k'_r ou du degré de saturation donne les courbes présentées par les figures 4.6 et 4.7. Le tenseur de diffusion est isotrope à cause de l'isotropie de la géométrie. Avec $P_{sd} = 42.7$ et $T_{sd} = 9.27$ (ce qui correspond à $\ell = 1e-8$) l'évolution du coefficient ϕT_{11} en fonction de θ_v est donnée par la figure 4.8. Pour faciliter l'interprétation physique, le bord haut du graphique indique les valeurs de l'humidité relative, h_r , correspondant aux valeurs de θ_v . Les figures 4.6 et 4.7 sont indépendantes de la taille caractéristique des pores, ℓ , étant donné que k'_r est la courbure moyenne adimensionnée, que la saturation reste constante si la cellule élémentaire est transformée par homothétie et que ϕT_{11} ne dépend que de la morphologie des pores. En revanche, la courbe de la figure 4.8 dépend de la valeur de ℓ dans la mesure où elle agit, via la loi de Kelvin, sur la taille des ménisques par l'intermédiaire de k_r qui est dimensionnée et liée à ℓ .

Calcul macroscopique

La variable X_1 dans l'équation (4.31) est remplacée par la variable x_1 pour obtenir le problème adimensionné (le facteur d'adimensionnement de θ_v n'intervenant pas directement, il n'est pas introduit). Après simplification par $\frac{c_g D_v}{L}$, l'équation devient

$$\frac{d}{dx_1} \left(-(\phi T_{11})(\theta_v) \frac{d}{dx_1} \theta_v \right) = 0 \quad x_1 \in ([0, 1]) \quad (4.34)$$

à laquelle sont associées les conditions aux limites

$$\theta_v(0) = \theta_0 \quad \text{et} \quad \theta_v(1) = \theta_1 \quad (4.35)$$

La résolution de ce problème pour un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$, $P_{sd} = 42.7$, $T_{sd} = 9.27$ (ce qui correspond à $\ell = 1e-8$), $\theta_0 = 1.96e-2$ (ce qui correspond à une humidité relative $h_r = 0.99$) et $\theta_1 = 1.17e-3$ (ce qui correspond à une humidité relative $h_r = 0.05$) donne les variations de θ_v visibles sur la figure 4.9. La variation de θ_v dans le cas linéaire, correspondant au cas où le coefficient de diffusion macroscopique ϕT_{11} est constant, est tracée sur la même figure à titre de comparaison. La valeur du coefficient de diffusion $(\phi T_{11})(\theta_v)$ (normalisé pour apparaître sur la même échelle) en fonction de x_1 permet d'observer son influence sur la diffusion. Bien que visible, la différence entre la solution du cas linéaire et la solution de la diffusion en tenant compte de l'influence du degré de saturation sur le coefficient de diffusion n'est pas très importante. Dans le cas numérique présenté ici, l'erreur maximale observée sur la fraction molaire de vapeur est de 5.8%.

4.3 Diffusion en présence d'advection

Dans cette section, nous nous intéressons au problème stationnaire de la diffusion en présence d'advection dans un milieu partiellement saturé.

4.3.1 Modèles

Les développements de cette section sont inspirés de [Lem01, LD05]. Comme dans la section 3.2, la dérivation ci-dessous est formelle et nous ne chercherons pas à lui donner toute la rigueur mathématique nécessaire.

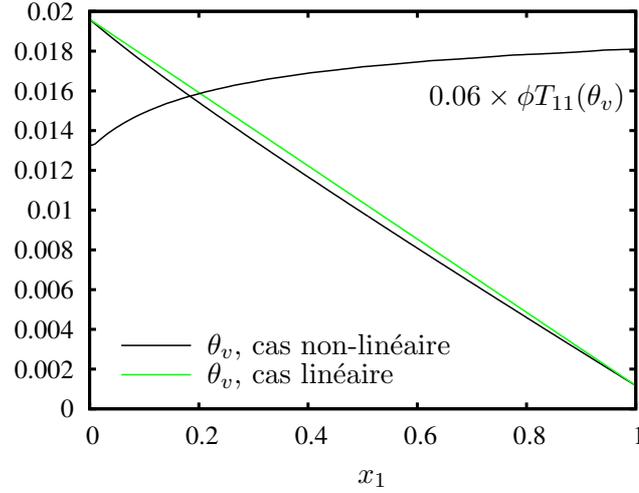


FIG. 4.9 – Evolution de la fraction molaire de vapeur dans l'épaisseur d'une plaque dont la structure microscopique est un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$ ($\ell = 1e-8$).

Nous supposons que l'écoulement peut être modélisé par les équations de Stokes incompressibles données par

$$\begin{aligned}
 -\mu_1 \Delta_y \underline{v}_g + \nabla_y p_g - (\mu_1 + \mu_2) \nabla_y (\nabla_y \cdot \underline{v}_g) &= \underline{0} && \text{(phase gazeuse)} \\
 \nabla_y \cdot (c_g \underline{v}_g) &= 0 && \text{(phase gazeuse)} \\
 \underline{v}_g &= \underline{0} && \text{(interface solide-gaz et liquide-gaz)}
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

Par ailleurs, le mouvement relatif de la vapeur par rapport à la phase gazeuse est modélisé par la loi de Fick, l'expression de la conservation de la masse et la condition sur l'interface solide-gaz et liquide-gaz qui impose qu'il n'y a pas d'échange au travers de l'interface

$$\begin{cases}
 \underline{j}_v \cdot \underline{v}_g = c_v (\underline{v}_v - \underline{v}_g) = -D_v c_g \nabla_y \theta_v & \text{(phase gazeuse)} \\
 \nabla_y \cdot \underline{j}_v + \nabla_y \cdot (c_v \underline{v}_g) = 0 & \text{(phase gazeuse)} \\
 \underline{j}_v \cdot \underline{n} = 0 & \text{(interfaces solide-gaz et liquide-gaz)}
 \end{cases} \tag{4.37}$$

Après simplification, le système devient

$$\begin{cases}
 \nabla_y \cdot (c_v \underline{v}_g - D_v c_g \nabla_y \theta_v) = 0 & \text{(phase gazeuse)} \\
 \nabla_y \theta_v \cdot \underline{n} = 0 & \text{(interfaces solide-gaz et liquide-gaz)}
 \end{cases} \tag{4.38}$$

On rappelle par ailleurs que les relations (4.1) et (4.2) sont toujours valables.

Les quantités $p_g^{(0)}$ et $c_g^{(0)}$ ne dépendent donc que de la position à l'échelle macroscopique.

L'ordre δ^0 dans la première équation de (4.41) et **l'ordre** δ^{-1} dans la seconde donnent

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{v}_g^{(0)} + \nabla_z p_g^{(1)} - \frac{\mu_1 + \mu_2}{\mu_1} \nabla_z (\nabla_z \cdot \underline{v}_g^{(0)}) = -\nabla_x p_g^{(0)} & (\Omega'_f) \\ \nabla_z \cdot (c_g^{(0)} \underline{v}_g^{(0)}) = 0 & (\Omega'_f) \end{cases} \quad (4.45)$$

où $\nabla_x p_g^{(0)}$ désigne le gradient macroscopique de pression adimensionné. On le note \underline{e}_α où \underline{e}_α est un vecteur unitaire. En utilisant le fait que $\nabla_z c_g^{(0)} = \underline{0}$ dans la deuxième équation de (4.45), on obtient $\nabla_z \cdot \underline{v}_g^{(0)} = 0$. D'autre part, $p_g^{(1)}$ peut-être remplacé par $\tilde{p}_g^{(1)}$. Le système à résoudre devient alors

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{v}_g^{(0)} + \nabla_z \tilde{p}_g^{(1)} = -\underline{e}_\alpha & (\Omega'_f) \\ \nabla_z \cdot \underline{v}_g^{(0)} = 0 & (\Omega'_f) \\ \underline{v}_g^{(0)} = \underline{0} & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \underline{v}_g^{(0)} \text{ et } \tilde{p}_g^{(1)} \text{ } z\text{-périodiques sur } (\partial\Omega'_{ff}) & \text{et } \int_{\Omega'_f} \tilde{p}_g^{(1)} dz = 0 \end{cases} \quad (4.46)$$

Malgré la compressibilité du gaz, le système d'équations qui décrit l'écoulement à l'ordre δ^0 a la même forme que pour un écoulement incompressible. D'après la structure du système, les inconnues $\underline{v}_g^{(0)}$ et $\tilde{p}_g^{(1)}$ dépendent linéairement du gradient macroscopique de pression \underline{e}_α . Donc il existe un tenseur de localisation \underline{k} z -périodique tel que

$$\underline{v}_g^{(0)} = -\underline{k} \cdot \underline{e}_\alpha \quad (4.47)$$

et un vecteur de localisation $\underline{\kappa}$ z -périodique et de moyenne nulle sur Ω'_f tel que

$$\tilde{p}_g^{(1)} = \underline{\kappa} \cdot \underline{e}_\alpha \quad (4.48)$$

L'ordre principal de l'équation de Darcy est obtenue en prenant la moyenne de (4.47) et en revenant aux quantités dimensionnées :

$$\langle \underline{v}_g \rangle_{\Omega'_f} = -\phi \frac{\ell^2}{\mu_1} \underline{k} \cdot \underline{\alpha} + O(\delta) \quad (4.49)$$

Poursuivons l'étude des ordres supérieurs à partir des équations de (4.41) pour déterminer des propriétés utiles à l'homogénéisation du problème d'advection-diffusion. **L'ordre** δ^0 dans la deuxième équation donne

$$\nabla_z \cdot (c_g^{(1)} \underline{v}_g^{(0)} + c_g^{(0)} \underline{v}_g^{(1)}) + \nabla_x \cdot (c_g^{(0)} \underline{v}_g^{(0)}) = 0 \quad (4.50)$$

L'ordre δ^1 dans la deuxième équation de (4.41) donne

$$\nabla_z \cdot (c_g^{(2)} \underline{v}_g^{(0)} + c_g^{(1)} \underline{v}_g^{(1)} + c_g^{(0)} \underline{v}_g^{(2)}) + \nabla_x \cdot (c_g^{(1)} \underline{v}_g^{(0)} + c_g^{(0)} \underline{v}_g^{(1)}) = 0 \quad (4.51)$$

Mouvement relatif de la vapeur

L'introduction des variables d'espace adimensionnées \underline{x} et \underline{z} dans (4.38) puis l'adimensionnement de la vitesse sous la forme

$$\underline{v}_g = \frac{D_v}{\ell} \underline{v}_g^* \quad (4.52)$$

dans le cadre du régime d'advection dominante, mènent, après simplification par $\frac{D_v}{L^2}$, au système

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\delta^2} \nabla_z \cdot (c_v \underline{v}_g^*) + \frac{1}{\delta} \nabla_x \cdot (c_v \underline{v}_g^*) \\ - \left[\frac{1}{\delta^2} \nabla_z \cdot (c_g \nabla_z \theta_v) + \frac{1}{\delta} (\nabla_z \cdot (c_g \nabla_x \theta_v) \right. \\ \left. + \nabla_x \cdot (c_g \nabla_z \theta_v)) + \nabla_x \cdot (c_g \nabla_x \theta_v) \right] = 0 \quad (\Omega'_f) \\ \left(\frac{1}{\delta} \nabla_z \theta_v + \nabla_x \theta_v \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad (\partial \Omega'_{fs}) \end{array} \right. \quad (4.53)$$

Les quantités \underline{v}_g^* et θ_v sont développées sous la forme

$$\begin{aligned} \underline{v}_g^* &= \underline{v}_g^{*(0)} + \delta \underline{v}_g^{*(1)} + \delta^2 \underline{v}_g^{*(2)} + \dots \\ \theta_v &= \theta_v^{(0)} + \delta \theta_v^{(1)} + \delta^2 \theta_v^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (4.54)$$

où pour tout i , les fonctions $\underline{v}_g^{*(i)}$ et $\theta_v^{(i)}$ sont réputées du même ordre et \underline{z} -périodiques.

L'ordre δ^{-2} dans la première équation de (4.53) et **l'ordre** δ^{-1} dans la deuxième équation de (4.53) donnent

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_z \cdot \left(c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) - \nabla_z \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(0)} \right) = 0 \quad (\Omega'_f) \\ \nabla_z \theta_v^{(0)} \cdot \underline{n} = 0 \quad (\partial \Omega'_{fs}) \end{array} \right. \quad (4.55)$$

Dans la première équation du système (4.55),

$$\nabla_z \cdot \left(c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) = \nabla_z \cdot \left(c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) = c_g^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \cdot \nabla_z \theta_v^{(0)} \quad (4.56)$$

à cause de la deuxième équation de (4.45) qui implique que $\underline{v}_g^{(0)}$ est un champ de vitesse à divergence nulle. De plus, $c_g^{(0)}$ dépend directement de $p_g^{(0)}$ et $\nabla_z p_g^{(0)} = 0$ d'après l'équation (4.43), si bien que $\nabla_z \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(0)} \right) = c_g^{(0)} \Delta_z \theta_v^{(0)}$. Enfin, $\theta_v^{(0)}$ peut être remplacé par $\tilde{\theta}_v^{(0)}$. Par conséquent, le système (4.55) implique

$$\tilde{\theta}_v^{(0)} = 0 \quad \iff \quad \nabla_z \theta_v^{(0)} = \underline{0} \quad (4.57)$$

L'ordre δ^{-1} dans la première équation du système (4.53) et **l'ordre** δ^0 dans la deuxième donnent

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_z \cdot \left(c_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(1)} \right) + \nabla_x \cdot \left(c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) \\ - \nabla_z \cdot \left(c_g^{(1)} \nabla_z \theta_v^{(0)} + c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(1)} \right) \\ - \nabla_z \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) - \nabla_x \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(0)} \right) = 0 \quad (\Omega'_f) \\ \left(\nabla_z \theta_v^{(1)} + \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad (\partial \Omega'_{fs}) \end{array} \right. \quad (4.58)$$

La première équation de (4.58) peut-être simplifiée en utilisant le fait que

$$\nabla_z c_g^{(0)} = \nabla_z \theta_v^{(0)} = \underline{0} \quad \text{et} \quad \nabla_z \cdot \underline{v}_g^{(0)} = 0$$

En effet, on obtient grâce à (4.50) et la deuxième équation de (4.45)

$$\begin{aligned}
& \nabla_z \cdot \left(c_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(1)} \right) + \nabla_x \cdot \left(c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) \\
&= \nabla_z \cdot \left(c_g^{(1)} \theta_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_g^{(0)} \theta_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(1)} \right) + \nabla_x \cdot \left(c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) \\
&= \left(c_g^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_g^{(0)} \underline{v}_g^{*(1)} \right) \cdot \nabla_z \theta_v^{(0)} + \left(c_g^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} + \nabla_z \cdot \left(c_g^{(0)} \theta_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) \\
&= \left(c_g^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \right) \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} + c_g^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \cdot \nabla_z \cdot \theta_v^{(1)}
\end{aligned}$$

De plus,

- $\nabla_z \cdot \left(c_g^{(1)} \nabla_z \theta_v^{(0)} + c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(1)} \right) = c_g^{(0)} \Delta_z \theta_v^{(1)}$;
- $\nabla_z \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) = 0$;
- $\nabla_x \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(0)} \right) = 0$.

Ainsi, la première équation de (4.58) se réécrit sous la forme

$$-c_g^{(0)} \Delta_z \theta_v^{(1)} + c_g^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \cdot \nabla_z \theta_v^{(1)} + c_g^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} = 0 \quad (4.59)$$

Après simplification par $c_g^{(0)}$, le système (4.58) devient finalement

$$\begin{cases} -\Delta_z \tilde{\theta}_v^{(1)} + \nabla_z \tilde{\theta}_v^{(1)} \cdot \underline{v}_g^{*(0)} = -\underline{v}_g^{*(0)} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} & (\Omega'_f) \\ \nabla_z \tilde{\theta}_v^{(1)} \cdot \underline{n} = -\nabla_x \theta_v^{(0)} \cdot \underline{n} & (\partial\Omega'_{fs}) \end{cases} \quad (4.60)$$

La moyenne intrinsèque de la première équation de (4.60) donne

$$\overline{\underline{v}_g^{*(0)} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)}} = 0 \quad (4.61)$$

La forme de (4.60) montre que $\tilde{\theta}_v^{(1)}$ dépend linéairement de $\nabla_x \theta_v^{(0)}$. Il existe donc un vecteur de localisation $\underline{\chi}$ \underline{z} -périodique et de moyenne nulle sur Ω'_f tel que

$$\tilde{\theta}_v^{(1)} = \underline{\chi} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} \quad (4.62)$$

et vérifiant

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{\chi} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} + \left(\underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{v}_g^{*(0)} \right) \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} = -\underline{v}_g^{*(0)} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{n} \right) \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} = -\nabla_x \theta_v^{(0)} \cdot \underline{n} & (\partial\Omega'_{fs}) \end{cases} \quad (4.63)$$

On justifie la simplification de (4.63) sous la forme

$$\begin{cases} -\Delta_z \underline{\chi} + \underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{v}_g^{*(0)} = \overline{\underline{v}_g^{*(0)}}^f - \underline{v}_g^{*(0)} & (\Omega'_f) \\ \left(\underline{\nabla}_z \underline{\chi} \cdot \underline{n} \right) = -\underline{n} & (\partial\Omega'_{fs}) \\ \underline{\chi} \text{ } \underline{z}\text{-périodique} & (\partial\Omega_{ff}) \quad \text{et} \quad \int_{\Omega'_f} \underline{\chi} dz = \underline{0} \end{cases} \quad (4.64)$$

de la même manière que pour le problème (3.11) (cf page 57).

Poursuivons l'étude des ordres supérieurs pour retrouver l'équation de transport macroscopique de la vapeur. **L'ordre** δ^0 dans la première équation du système (4.53) et **l'ordre** δ^1 dans la deuxième donnent

$$\left\{ \begin{array}{l} \underbrace{\nabla_z \cdot \left(c_v^{(2)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(1)} + c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(2)} \right)}_A + \underbrace{\nabla_x \cdot \left(c_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(1)} \right)}_B \\ \quad - \nabla_z \cdot \left(c_g^{(2)} \nabla_z \theta_v^{(0)} + c_g^{(1)} \nabla_z \theta_v^{(1)} + c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(2)} \right) \\ - \nabla_z \cdot \left(c_g^{(1)} \nabla_x \theta_v^{(0)} + c_g^{(0)} \nabla_x \theta_v^{(1)} \right) - \nabla_x \cdot \left(c_g^{(1)} \nabla_z \theta_v^{(0)} + c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(1)} \right) \\ \quad - \nabla_x \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) = 0 \quad (\Omega'_f) \\ \quad \left(\nabla_z \theta_v^{(2)} + \nabla_x \theta_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad (\partial\Omega'_{fs}) \end{array} \right. \quad (4.65)$$

Rappelons que $\overline{ab}^f = \overline{a^f b} + \overline{a \overline{b}^f}$ et remarquons que

- $\int_{\Omega'_f} Adz = \int_{\partial\Omega'_f} \left(c_v^{(2)} \underline{v}_g^{*(0)} + c_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(1)} + c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(2)} \right) \cdot \underline{n} dS_z = 0$ à cause des conditions périodiques sur $\partial\Omega'_{ff}$ et de la condition d'adhérence satisfaite par toutes les fonctions $\underline{v}_g^{(i)}$ sur $\partial\Omega'_{fs}$;
- en utilisant (4.48) et (4.62), \overline{B}^f se décline sous la forme

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'_f} B dz &= \nabla_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(\theta_v^{(0)} \overline{c_g^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + c_g^{(0)} \overline{\theta_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(1)}}^f \right) \right] \\ &= \nabla_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(\theta_v^{(0)} \overline{c_g^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + \theta_v^{(0)} \overline{\tilde{\underline{v}}_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\kappa} \cdot \nabla_x c_g^{(0)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + c_g^{(0)} \overline{\theta_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + c_g^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} + c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(1)}}^f \right) \right] \\ &= \nabla_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(\theta_v^{(0)} \overline{c_g^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + \theta_v^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\kappa} \cdot \nabla_x c_g^{(0)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + c_g^{(0)} \overline{\theta_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + c_g^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} + c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(1)}}^f \right) \right] \end{aligned} \quad (4.66)$$

car $\underline{\chi}$ et $\underline{\kappa}$ sont de moyenne nulle sur Ω'_f ;

- $-\nabla_z \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(2)} + c_g^{(0)} \nabla_x \theta_v^{(1)} \right)^f = -c_g^{(0)} \frac{1}{|\Omega'_f|} \int_{\partial\Omega'_f} \left(\nabla_z \theta_v^{(2)} + \nabla_x \theta_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} dS_z = 0$ à cause de la deuxième équation de (4.65) sur $\partial\Omega'_{fs}$ et des conditions de périodicité sur $\partial\Omega'_{ff}$;
- $-\nabla_z \cdot \left(c_g^{(1)} \nabla_z \theta_v^{(1)} + c_g^{(1)} \nabla_x \theta_v^{(0)} \right)^f = -\frac{1}{|\Omega'_f|} \int_{\partial\Omega'_f} c_g^{(1)} \left(\nabla_z \theta_v^{(1)} + \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) \cdot \underline{n} dS_z = 0$ à cause de la deuxième équation de (4.58) sur $\partial\Omega'_{fs}$ et des conditions de périodicité sur $\partial\Omega'_{ff}$;
- $-\int_{\Omega'_f} \nabla_x \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_z \theta_v^{(1)} \right) dz = -\nabla_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(c_g^{(0)} \overline{\nabla_z \theta_v^{(1)}}^f \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} \right) \right] ;$
- $-\nabla_x \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_x \theta_v^{(0)} \right)^f = -\nabla_x \cdot \left(c_g^{(0)} \nabla_x \theta_v^{(0)} \right)$

Ainsi, l'intégrale de (4.65) sur Ω'_f s'écrit

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(\theta_v^{(0)} \overline{c_g^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + c_g^{(0)} \overline{\theta_v^{(1)} \underline{v}_g^{*(0)}}^f + c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(1)}}^f - c_g^{(0)} \left(\underline{I} + \overline{\nabla_z \chi}^f \right) \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} \right. \right. \\ \left. \left. + c_g^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \cdot \nabla_x \theta_v^{(0)} + \theta_v^{(0)} \overline{\underline{v}_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\kappa} \cdot \nabla_x c_g^{(0)} \right) \right] = 0 \end{aligned}$$

(4.67)

L'intégrale de (4.50), en utilisant les conditions de périodicité sur $\partial\Omega'_{\text{ff}}$ et la condition d'adhérence sur $\partial\Omega'_{\text{fs}}$, montre que $\underline{\nabla}_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(c_g^{(0)} \overline{v_g^{*(0)f}} \right) \right] = 0$. L'équation (4.61) peut donc s'écrire également

$$\underline{\nabla}_x \cdot \left[|\Omega'_f| \left(c_g^{(0)} \theta_v^{(0)} \overline{v_g^{*(0)f}} \right) \right] = 0 \quad (4.68)$$

Multipliée par $\frac{D_v}{|\Omega'_f| \delta L^2}$, elle correspond à l'ordre δ^0 de l'équation de transport de la vapeur à l'échelle macroscopique dimensionnée. La correction à l'ordre δ^1 est obtenue en multipliant (4.67) par $\frac{D_v}{|\Omega'_f| L^2}$. La somme de l'équation ainsi obtenue avec (4.68) conduit au développement jusqu'à l'ordre δ^1 de l'équation macroscopique de transport de la vapeur sous la forme

$$\begin{aligned} \underline{\nabla}_X \cdot \left(\phi \overline{c_v^f v_g^f} - D_v c_g \phi \left(\underline{I} + {}^t \underline{\nabla}_z \chi \right) \cdot \underline{H} - D_v c_g \left(-\phi \overline{v_g^* \otimes \underline{\kappa}^f} \right) \cdot \underline{H} \right. \\ \left. - D_v \theta_v \left(-\phi \overline{v_g^* \otimes \underline{\kappa}^f} \right) \cdot \frac{1}{RT} \underline{\alpha} \right) + O(\delta^2) = 0 \end{aligned} \quad (4.69)$$

où $\underline{H} = \underline{\nabla}_X \overline{\theta_v^f} = \frac{1}{L} \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} + O(\delta)$.

On retrouve donc le flux diffusif microscopique

$$\underline{j}_v = -c_g \frac{D_v}{L} (\underline{\nabla}_z \tilde{\theta}_v^{(1)} + \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)}) + O(\delta^2) = -c_g \frac{D_v}{L} (\underline{I} + {}^t \underline{\nabla}_z \chi) \cdot \underline{\nabla}_x \theta_v^{(0)} + O(\delta^2) \quad (4.70)$$

dont la forme macroscopique est donnée par

$$\underline{J}_v^{\text{diff}} = \langle \underline{j}_v \rangle_f = -c_g \phi D_v (\underline{I} + {}^t \underline{\nabla}_z \chi) \cdot \underline{H} + O(\delta^2) \quad (4.71)$$

et le flux dispersif total macroscopique

$$\underline{J}_v^{\text{disp}} = \langle \tilde{c}_v \tilde{v}_g \rangle_f = -D_v c_g \left(-\phi \overline{v_g^* \otimes \underline{\kappa}^f} \right) \cdot \underline{H} - D_v \theta_v \left(-\phi \overline{v_g^* \otimes \underline{\kappa}^f} \right) \cdot \frac{1}{RT} \underline{\alpha} + O(\delta^2) \quad (4.72)$$

On définit les tenseurs sans dimension suivants

$$\underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} = \phi \left(\underline{I} + {}^t \underline{\nabla}_z \chi \right) \quad \underline{D}_{\text{disp1}}^{\text{hom}} = -\phi \left(\overline{v_g^* \otimes \underline{\kappa}^f} \right) \quad \underline{D}_{\text{disp2}}^{\text{hom}} = -\phi \left(\overline{v_g^* \otimes \underline{\kappa}^f} \right) \quad (4.73)$$

de telle sorte que les flux diffusif et dispersif s'écrivent

$$\begin{aligned} \underline{J}_v^{\text{diff}} &= -c_g D_v \underline{D}_{\text{diff}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H} + O(\delta^2) \\ \underline{J}_v^{\text{disp}} &= -c_g D_v \underline{D}_{\text{disp1}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H} - \theta_v D_v \underline{D}_{\text{disp2}}^{\text{hom}} \cdot \frac{1}{RT} \underline{\alpha} + O(\delta^2) \end{aligned} \quad (4.74)$$

On retrouve dans l'équation (4.72) le phénomène annoncé en introduction, à savoir que dans le modèle de flux dispersif s'ajoute au gradient macroscopique de concentration une contribution du gradient macroscopique de pression.

plan	$(\underline{v}_g^*)_1$	$(\underline{v}_g^*)_2$	$(\underline{v}_g^*)_3$	$(\underline{\kappa})_1$	$(\underline{\kappa})_2$	$(\underline{\kappa})_3$
$(z_1 = \frac{1}{2})$	1	-1	-1	-1	1	1
$(z_2 = \frac{1}{2})$	1	-1	1	1	-1	1
$(z_3 = \frac{1}{2})$	1	1	-1	1	1	-1

TAB. 4.1 – Propriétés de symétrie de \underline{v}_g^* et de $\underline{\kappa}$ dans un réseau cubique de sphères pour un écoulement dans la direction \underline{e}_1 .

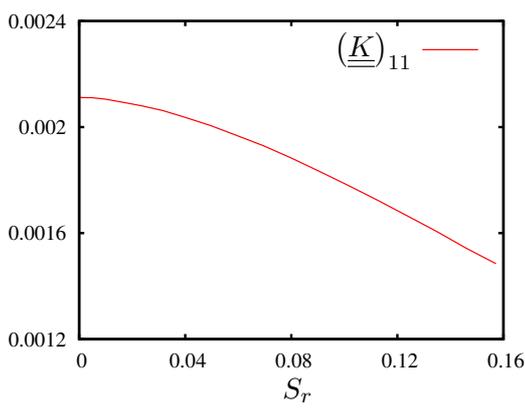


FIG. 4.10 – Evolution de la perméabilité en fonction de S_r pour un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$.

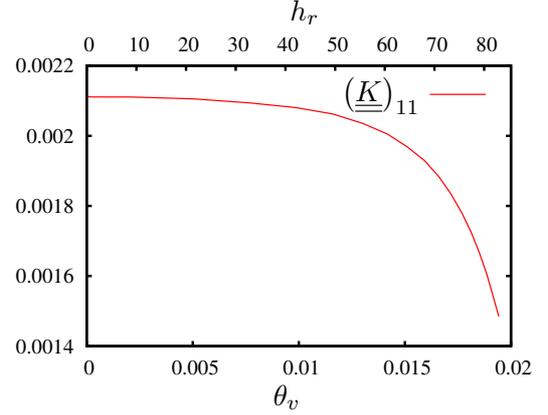


FIG. 4.11 – Evolution de la perméabilité en fonction de θ_v pour un réseau de sphères de rayon $r_s = 0.51$.

4.3.2 Résultats

Sur le plan mathématique, les problèmes à résoudre (4.46) et (4.64) sont formellement identiques aux problèmes (2.9) et (3.11) étudiés dans les chapitres 2 et 3. La seule différence est qu'ils sont maintenant posés sur un domaine plus petit du fait de la présence des ménisques. L'analyse numérique présentée aux chapitres 2 et 3 reste donc valide.

On considère de nouveau l'exemple numérique 4.2 (cf page 83) : le milieu poreux est un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$, P_{sd} vaut 42.7 et T_{sd} vaut 9.27 (ce qui correspond à une taille de pore $\ell = 1e-8$). Comme la géométrie est isotrope le tenseur de perméabilité \underline{K} est diagonal et isotrope. Nous ne calculerons que son premier terme $(\underline{K})_{11}$. De plus, comme l'écoulement a lieu dans la direction \underline{e}_1 , les termes $(\underline{D}_{diff}^{hom})_{22}$ et $(\underline{D}_{diff}^{hom})_{33}$ d'une part et $(\underline{D}_{disp1}^{hom})_{22}$ et $(\underline{D}_{disp1}^{hom})_{33}$ sont égaux. Enfin, on observe que les champs \underline{v}_g^* et $\underline{\kappa}$ vérifient des propriétés de symétries bien particulières. Le tableau 4.1 indique pour chaque plan défini dans la première colonne s'il est un plan de symétrie (1) ou un plan d'antisymétrie (-1) pour la quantité donnée en première ligne du tableau. On remarque que pour tout $i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$ et tout $j \in \llbracket 1, 3 \rrbracket$, le produit pour chaque ligne des produits des termes des colonnes $(\underline{v}_g^*)_i$ et $(\underline{\kappa})_j$ vaut toujours -1. Cela se traduit par le fait que

$$\forall (i, j) \in \llbracket 1, 3 \rrbracket^2, \quad \overline{(\underline{v}_g^*)_i (\underline{\kappa})_j}^f = 0 \quad (4.75)$$

Le tenseur $\underline{D}_{disp2}^{hom}$ est donc nul dans le cas considéré. Le domaine est discrétisé par un maillage de pas $h = 0.025$. Le problème de transport complet est simulé à l'échelle microscopique pour différentes valeurs de la taille des ménisques, échantillonnées entre l'état asséché et l'état limite où les ménisques entrent en contact les uns avec les autres. Le champ de vitesse est obtenu

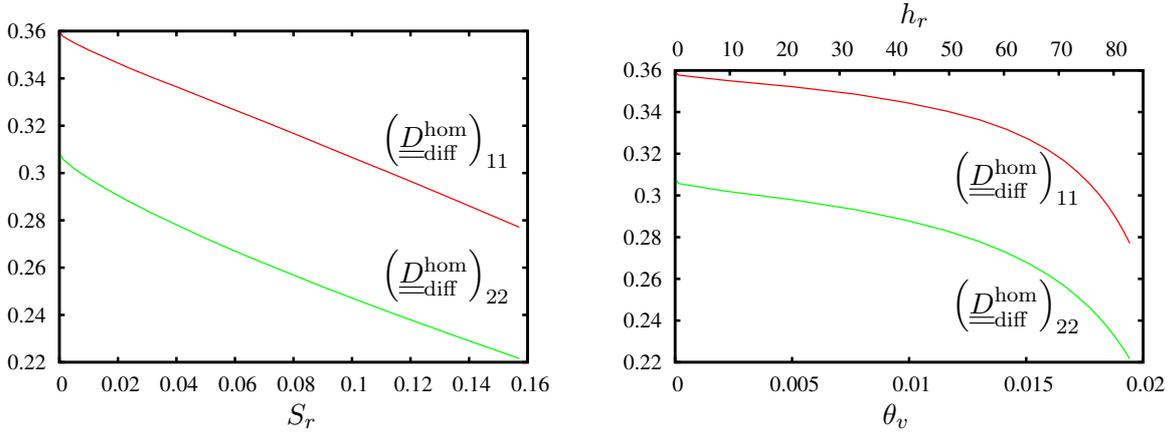


FIG. 4.12 – Evolution des deux premiers termes diagonaux du tenseur de diffusion en fonction du degré de saturation (à gauche) et en fonction de θ_v (à droite) dans un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$, pour une vitesse d'écoulement correspondant à $\lambda = 1000$.

par approximation par éléments finis mixtes puis projection sur l'espace d'éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini.

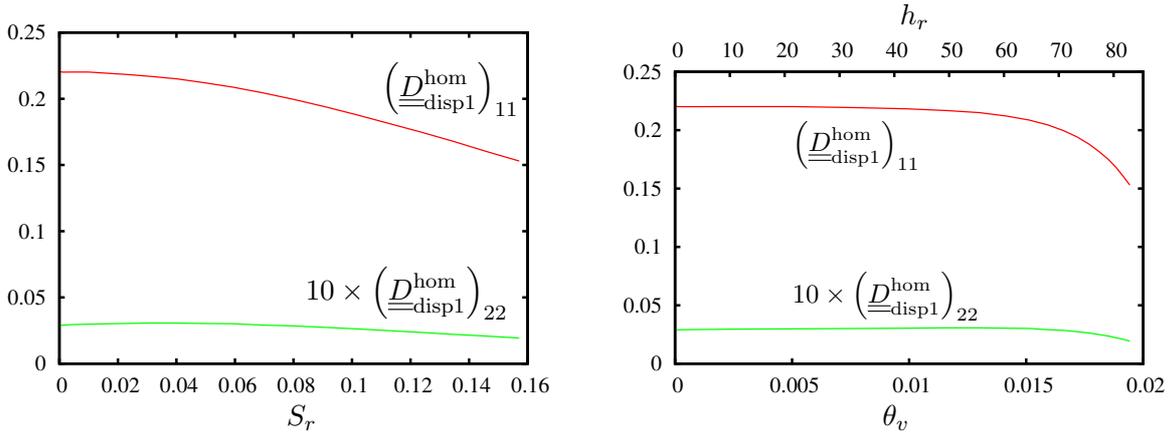


FIG. 4.13 – Evolution des deux premiers termes diagonaux du tenseur de dispersion en fonction du degré de saturation (à gauche) et en fonction de θ_v (à droite) dans un réseau cubique de sphères de rayon $r_s = 0.51$, pour une vitesse d'écoulement correspondant à $\lambda = 1000$.

Pour faciliter l'interprétation physique, les résultats sont donnés sous deux formes : en fonction du degré de saturation du milieu S_r et en fonction de la fraction molaire de vapeur θ_v . Dans ce dernier cas, l'échelle d'humidité relative est indiquée en complément. Les figures 4.10 et 4.11 donnent l'évolution de la perméabilité du milieu en fonction du degré de saturation et en fonction de la fraction molaire de vapeur. On observe une diminution de 30% de la valeur de K_{11} entre l'état désaturé et l'état limite où les ménisques entrent en contact.

La figure 4.12 donne l'évolution des deux premiers termes diagonaux du tenseur de diffusion homogénéisé en fonction du degré de saturation et en fonction de θ_v pour une intensité de l'écoulement correspondant à $\lambda = 1000$. Le fait de tracer les coefficients du tenseur en fonction de S_r ou en fonction de θ_v modifie sensiblement le profil des courbes. Mais dans chaque cas, le comportement du coefficient transversal de diffusion est comparable à celui du coefficient longitudinal, c'est-à-dire que la différence entre les deux reste à peu près constante. Cette différence

est la conséquence de l'advection.

La figure 4.13 donne l'évolution des deux premiers termes diagonaux du tenseur de dispersion en fonction du degré de saturation et en fonction de θ_v . Les valeurs de $\left(\underline{D}_{\text{disp1}}^{\text{hom}}\right)_{22}$ ont été multipliées par 10 pour pouvoir être comparées sur le même graphique. On remarque que les comportements respectifs du coefficient transversal et longitudinal sont différents : le coefficient longitudinal est strictement décroissant tandis que le coefficient transversal est légèrement croissant pour les valeurs de la saturation proches de 0.

Chapitre 5

Conclusions et perspectives

L'objectif des travaux présentés dans ce mémoire était de mener une étude quantitative par simulation numérique des tenseurs de diffusion et de dispersion et en particulier de mettre en évidence l'influence quantitative du mouvement d'ensemble de la phase fluide sur les valeurs des coefficients de ces tenseurs. Deux situations ont été envisagées : le cas où l'espace poreux est occupé par un fluide monophasique incompressible et le cas où l'espace poreux est partagé entre une phase liquide et une phase gazeuse. Tous les modèles utilisés sont issus de la technique de développement asymptotique à double échelle qui fournit une méthode d'homogénéisation adaptée aux modèles périodiques de milieux poreux.

L'écoulement monophasique d'un fluide incompressible a été étudié dans le chapitre 2. La construction des modèles part du problème de Stokes pour le fluide à l'échelle microscopique et conduit à l'équation de Darcy à l'échelle macroscopique. Trois méthodes d'approximation du champ de vitesse microscopique ont été analysées : les éléments finis de Lagrange de degré 1 stabilisés, les éléments finis mixtes de Crouzeix-Raviart et une projection de ces derniers sur l'espace des éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini. Ces méthodes se différencient par la valeur de la divergence du champ de vitesse qu'elles produisent. Leur mise en œuvre sur des cas tests analytiques pour calculer des écoulements de type Poiseuille a permis de valider l'outil numérique qui a été ensuite mis en œuvre sur des réseaux cubiques et cubiques centrés de sphères pour le calcul de tenseurs de perméabilité. Une étude complémentaire d'écoulements de fluides non-newtoniens a également été menée, ce qui a permis d'identifier l'impact significatif d'une loi en « puissance » sur la description macroscopique du transport.

Le problème du transport par advection et diffusion d'un soluté dissous dans le fluide a été traité dans le chapitre 3. A partir de la loi de Fick et de l'équation de conservation de la masse du soluté à l'échelle microscopique, le développement asymptotique à double échelle permet dans le cadre du régime dit « d'advection dominante » de retrouver les équations utilisées classiquement pour décrire le transport du soluté à l'échelle macroscopique et, de plus, fournit des expressions explicites des tenseurs de diffusion et de dispersion en fonction de la solution d'un problème d'advection-diffusion d'inconnue vectorielle à l'échelle microscopique. Ce problème intègre une contrainte de moyenne nulle. Nous avons montré qu'il est bien posé quelque soit le champ de vitesse utilisé. Mais la suppression de la contrainte de moyenne nulle pour faciliter la mise en œuvre numérique conduit à des systèmes linéaires singuliers. L'utilisation de l'algorithme GMRes nous a permis d'obtenir une solution approchée du problème en minimisant le résidu du système en norme euclidienne. L'outil numérique a été validé en reprenant les cas tests analytiques du chapitre 2, puis mis en œuvre sur les mêmes réseaux cubiques et cubiques centrés de sphères. Les principaux résultats des simulations du chapitre 3 sont les suivants :

- pour des tailles de maillage raisonnables, il apparaît que les éléments finis de Lagrange de

degré 1 stabilisés fournissent un champ de vitesse imprécis pour évaluer les coefficients diagonaux du tenseur de dispersion (leur précision reste suffisante pour évaluer les coefficients diagonaux du tenseur de diffusion) tandis que les éléments finis mixtes et leur projection sur l'espace des éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini conduisent à des résultats suffisamment précis ;

- les calculs fournissent les variations quantitatives des coefficients diagonaux des tenseurs de diffusion et de dispersion en fonction de l'intensité de l'advection. La dépendance se situe suivant le cas entre un régime linéaire et un régime quadratique ;
- on constate que les coefficients extra-diagonaux des tenseurs de diffusion et de dispersion sont trop faibles dans le cadre du régime d'advection dominante pour dominer les erreurs numériques.

Le chapitre 4 est consacré au transport en milieu diphasique, le transport se faisant par la phase gazeuse et la phase fluide restant confinée sous forme de ménisques. L'équilibre liquide-vapeur modifie, via l'utilisation des lois de Laplace et de Kelvin, la géométrie des ménisques. Nos simulations ont mis en évidence le rôle important de la taille caractéristique des pores dans cette relation. Le développement asymptotique à double échelle montre que les équations régissant l'écoulement du gaz et le transport advectif-diffusif à l'échelle microscopique sont similaires à celles obtenues dans le cas monophasique. Le développement asymptotique à double échelle fournit également un modèle de transport à l'échelle macroscopique et des expressions explicites pour les tenseurs de diffusion et de dispersion. La principale différence par rapport au transport monophasique est la présence dans l'expression du tenseur de dispersion d'un terme dépendant du gradient macroscopique de pression dont l'origine est due à la compressibilité du mélange gazeux. Dans le cas de la diffusion sans advection, le calcul du tenseur de diffusion pour un réseau cubique de sphères a été utilisé sur un problème de transport macroscopique en dimension 1, montrant ainsi l'influence de la présence de la phase liquide sur le profil de la concentration de vapeur dans le milieu. Dans le cas du transport en présence d'advection, les simulations ont permis de tracer les variations des coefficients diagonaux des tenseurs en fonction de la saturation ou en fonction de la concentration de vapeur ou encore en fonction de l'humidité relative.

Dans le cadre de cette étude, deux outils informatiques ont été développés en langage FORTRAN. Le premier est un logiciel qui manipule des maillages surfaciques, pouvant traiter des surfaces toriques et des portions de sphères et qui sert de préprocesseur à un mailleur tridimensionnel. Le second est un logiciel de calcul par éléments finis qui s'appuie sur une analyse numérique rigoureuse et qui permet d'approcher les solutions des deux problèmes posés à l'échelle microscopique et ainsi d'évaluer quantitativement les tenseurs de diffusion et de dispersion.

Un des objectifs de la thèse était de fournir une alternative aux modèles phénoménologiques utilisés classiquement dans le cas du couplage advection-diffusion. La confrontation détaillée du résultat de nos simulations avec la pratique courante est une des perspectives les plus intéressantes de ce travail. En particulier, les résultats obtenus permettent de tester divers modèles micromécaniques conçus par ailleurs. De plus, un premier pas a été accompli dans la simulation du transport à l'échelle macroscopique avec le cas de la diffusion sans advection en milieu partiellement saturé. Un prolongement naturel serait l'étude d'un problème macroscopique de diffusion en présence d'advection. Un deuxième prolongement possible est l'extension de la modélisation du transport au cas instationnaire et en particulier l'étude de l'influence de conditions aux limites instationnaires à l'échelle macroscopique sur le transport à l'échelle microscopique et l'identification de différents régimes temporels.

Enfin, il convient de souligner que la possibilité d'analyser de façon quantitative les deux modes de transport (diffusif et advectif) dans le contexte d'un mélange gazeux ouvre la voie à l'étude du séchage d'un milieu poreux à l'échelle macroscopique. En effet, la compréhension et

la simulation du séchage nécessitent de rendre compte du départ d'eau sous forme de vapeur, sous l'action d'un gradient de pression de gaz et d'un gradient de concentration de vapeur. La détermination numérique des coefficients de dispersion et de diffusion pour une vaste plage d'humidités relatives rend possible la résolution numérique du problème de transport macroscopique pour les géométries de cellule considérées. La mise en pratique du séchage concerne des applications industrielles telles que le séchage d'auto-dessiccation, le séchage propre du ciment et le séchage au voisinage d'une galerie (problématique du stockage de déchets radioactifs par exemple).

Annexe A

Construction de maillages

A.1 Principes généraux

Les maillages des réseaux cubiques de sphères ont été construits avec l'aide de deux outils. Un mailleur de surfaces planes en dimension 2, appelé par la suite « mailleur surfacique », et un mailleur commercial de volumes « Tetmesh-GHS3D ». Ce mailleur permet de construire des maillages de tétraèdres. Tetmesh-GHS3D prend en entrée un maillage de surface en dimension 3, appelé maillage peau, qui définit le volume à mailler. Il s'appuie sur la discrétisation de la frontière du volume pour déterminer la taille des mailles et intègre le maillage surfacique dans le maillage volumique final. Il est donc important de fournir au programme un maillage surfacique de bonne qualité.

La méthode utilisée pour construire le maillage peau est décomposée en cinq étapes :

1. diviser le maillage peau en sous-parties élémentaires ;
2. projeter ces sous-parties sur un plan en dimension 2 ;
3. mailler ces sous-parties à l'aide du mailleur surfacique ;
4. projeter les maillages en dimension 2 sur la surface du volume à mailler en prenant soin de ne pas trop déformer le maillage pour garder l'isotropie ;
5. connecter les différentes sous-parties pour obtenir le maillage peau.

La connection des sous-parties du maillage peau suppose que les arêtes communes ont été maillées avec le même nombre de segments. La qualité de la projection à l'étape 4, en plus de garantir que le maillage peau aura les propriétés d'isotropie recherchées, est cruciale également pour que les sommets des sous-maillages sur une arête commune soient bien en face les uns des autres de manière à pouvoir être identifiés automatiquement lors de l'étape 5. Pour les réseaux de sphères, la difficulté principale réside dans la projection sur les portions de sphères. Nous présentons, dans la section suivante, des opérateurs de projection entre un plan et une surface sphérique qui conservent l'isotropie du maillage de manière satisfaisante. Puis, nous présentons sur un exemple une illustration du processus d'assemblage.

A.2 Opérateurs de projection entre un plan et une surface sphérique

Soit \mathcal{P} la partie du plan d'équation $x + y + z = 1$ contenue dans le cône $\{x \geq 0, y \geq 0, z \geq 0\}$. Soit \mathcal{S} la partie de la sphère de centre O de coordonnées $(0, 0, 0)$ et de rayon 1 contenue dans le

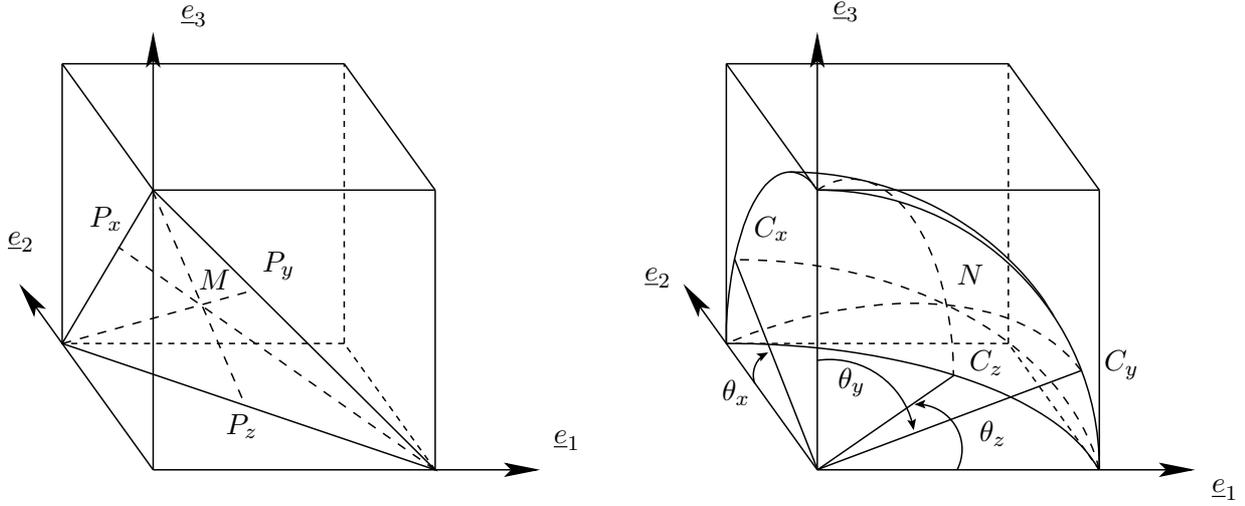


FIG. A.1 – Notations

même cone. Soit X le point de coordonnées $(1, 0, 0)$, Y le point de coordonnées $(0, 1, 0)$ et Z le point de coordonnées $(0, 0, 1)$.

Pour tout point M de \mathcal{P} ,

- $P_x(M)$ désigne l'intersection de (XM) et de (ZY) ;
- $P_y(M)$ désigne l'intersection de (YM) et de (XZ) ;
- $P_z(M)$ désigne l'intersection de (ZM) et de (YX) .

Pour tout point N de \mathcal{S} ,

- $C_x(N)$ désigne l'intersection du plan $(0, X, N)$ avec le plan $(x = 0)$ et \mathcal{S} ;
- $C_y(N)$ désigne l'intersection du plan $(0, Y, N)$ avec le plan $(y = 0)$ et \mathcal{S} ;
- $C_z(N)$ désigne l'intersection du plan $(0, Z, N)$ avec le plan $(z = 0)$ et \mathcal{S} ;
- on pose $\theta_x(N) = \widehat{YOC_x}$, $\theta_y(N) = \widehat{ZOC_y}$, $\theta_z(N) = \widehat{XOC_z}$.

A.2.1 Projection de la sphère vers le plan

Pour déterminer les surfaces à mailler avec le mailleur surfacique à partir de la géométrie du maillage peau, il est nécessaire de construire un opérateur de projection $\Pi_{\mathcal{S}}^{\mathcal{P}}$ de la sphère vers le plan.

On se donne un point N de coordonnées (x', y', z') sur \mathcal{S} . Dans un premier temps, on cherche un point M de coordonnées (x, y, z) tel que

$$\frac{YP_x(M)}{YZ} = \frac{\theta_x(N)}{\frac{\pi}{2}}, \quad \frac{ZP_y(M)}{ZX} = \frac{\theta_y(N)}{\frac{\pi}{2}}, \quad \frac{XP_z(M)}{XY} = \frac{\theta_z(N)}{\frac{\pi}{2}} \quad (\text{A.1})$$

ou de manière équivalente tel que

$$\theta_x(N) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{z}{1-x} \right) \quad \theta_y(N) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{x}{1-y} \right) \quad \theta_z(N) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{y}{1-z} \right) \quad (\text{A.2})$$

On résout ce système en supposant que $x + y + z \approx 1$ ce qui donne

$$x = \frac{\theta_x(N)\theta_y(N)\theta_z(N) + \frac{\pi}{2}(\frac{\pi}{2}\theta_y(N) - \theta_y(N)\theta_z(N))}{\frac{\pi^3}{8} + \theta_x(N)\theta_y(N)\theta_z(N)} \quad (\text{A.3})$$

$$y = \frac{\theta_x(N)\theta_y(N)\theta_z(N) + \frac{\pi}{2}(\frac{\pi}{2}\theta_z(N) - \theta_z(N)\theta_x(N))}{\frac{\pi^3}{8} + \theta_x(N)\theta_y(N)\theta_z(N)} \quad (\text{A.4})$$

$$z = \frac{\theta_x(N)\theta_y(N)\theta_z(N) + \frac{\pi}{2}(\frac{\pi}{2}\theta_x(N) - \theta_x(N)\theta_y(N))}{\frac{\pi^3}{8} + \theta_x(N)\theta_y(N)\theta_z(N)} \quad (\text{A.5})$$

Par ailleurs il est clair que

$$\theta_x(N) = \arctan\left(\frac{z'}{y'}\right) \quad \theta_y(N) = \arctan\left(\frac{x'}{z'}\right) \quad \theta_z(N) = \arctan\left(\frac{y'}{x'}\right) \quad (\text{A.6})$$

ce qui permet finalement d'évaluer (x, y, z) en fonction de (x', y', z') . Le point M ainsi construit ne se trouve pas exactement sur \mathcal{P} . L'image de N par la projection $\Pi_{\mathcal{S}}^{\mathcal{P}}$ est définie en projetant M orthogonalement sur \mathcal{P} . Le point $\Pi_{\mathcal{S}}^{\mathcal{P}}(N)$ a pour coordonnées

$$x'' = \frac{1}{3}(1 + 2x - y - z) \quad y'' = \frac{1}{3}(1 + 2y - x - z) \quad z'' = \frac{1}{3}(1 + 2z - x - y) \quad (\text{A.7})$$

A.2.2 Projection du plan vers la sphère

Une fois construit un maillage par le mailleur surfacique, il est nécessaire de le projeter sur la surface de sphère à laquelle il se rapporte. On souhaite donc disposer de l'application réciproque de $\Pi_{\mathcal{S}}^{\mathcal{P}}$. Toutefois, il n'est pas très commode de construire explicitement cette application réciproque. Nous allons donc construire un opérateur de projection $\Pi_{\mathcal{P}}^{\mathcal{S}}$ du plan vers la sphère tel que $\Pi_{\mathcal{P}}^{\mathcal{S}} \circ \Pi_{\mathcal{S}}^{\mathcal{P}} \approx I_{\mathcal{S}}$, l'opérateur identité de \mathcal{S} , et $\Pi_{\mathcal{S}}^{\mathcal{P}} \circ \Pi_{\mathcal{P}}^{\mathcal{S}} \approx I_{\mathcal{P}}$, l'opérateur identité de \mathcal{P} .

On se donne un point M de coordonnées (x, y, z) sur \mathcal{P} . On souhaite construire un point N de coordonnées (x', y', z') tel que (A.1) soit satisfaite. On peut exprimer $\cos(\theta_x(N))$ en fonction des coordonnées de N . Il vient

$$\cos(\theta_x(N)) = \frac{y'}{\sqrt{y'^2 + z'^2}}$$

On suppose que $x'^2 + y'^2 + z'^2 \approx 1$, si bien que

$$\cos(\theta_x(N)) = \frac{y'}{\sqrt{1 - x'^2}}$$

De même,

$$\cos(\theta_y(N)) = \frac{z'}{\sqrt{1 - y'^2}} \quad \text{et} \quad \cos(\theta_z(N)) = \frac{x'}{\sqrt{1 - z'^2}}$$

On écrit ainsi un système linéaire en x'^2 , y'^2 et z'^2 dont la solution est

$$\begin{cases} x'^2 = \frac{\cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_y(N)) \cos^2(\theta_z(N)) - \cos^2(\theta_y(N)) \cos^2(\theta_z(N)) + \cos^2(\theta_z(N))}{1 + \cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_y(N)) \cos^2(\theta_z(N))} \\ y'^2 = \frac{\cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_y(N)) \cos^2(\theta_z(N)) - \cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_z(N)) + \cos^2(\theta_x(N))}{1 + \cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_y(N)) \cos^2(\theta_z(N))} \\ z'^2 = \frac{\cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_y(N)) \cos^2(\theta_z(N)) - \cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_y(N)) + \cos^2(\theta_y(N))}{1 + \cos^2(\theta_x(N)) \cos^2(\theta_y(N)) \cos^2(\theta_z(N))} \end{cases}$$

ce qui permet finalement d'exprimer, en utilisant (A.2) pour évaluer $\theta_x(N)$, $\theta_y(N)$ et $\theta_z(N)$ et en choisissant les racines positives des équations ci-dessus, (x', y', z') en fonction de (x, y, z) . Le point N ainsi construit ne se trouve pas exactement sur \mathcal{S} , mais il en est très proche comme le montre la vérification numérique suivante.

Pour une famille de points situés sur la sphère de rayon 1, on applique la projection $\Pi_{\mathcal{S}}^{\mathcal{P}}$ de la sphère vers le plan, puis la projection $\Pi_{\mathcal{P}}^{\mathcal{S}}$ du plan vers la sphère, et on calcule l'erreur entre le point obtenu et le point d'origine. La figure A.2 représente la valeur de l'erreur de projection (en norme euclidienne) en fonction des coordonnées x et y des points de la sphère. On constate que l'erreur est au maximum de $9e-3$, ce qui est suffisant pour les maillages utilisés dans le cadre de ce mémoire et dont le pas est de l'ordre de 0.025 ou plus.

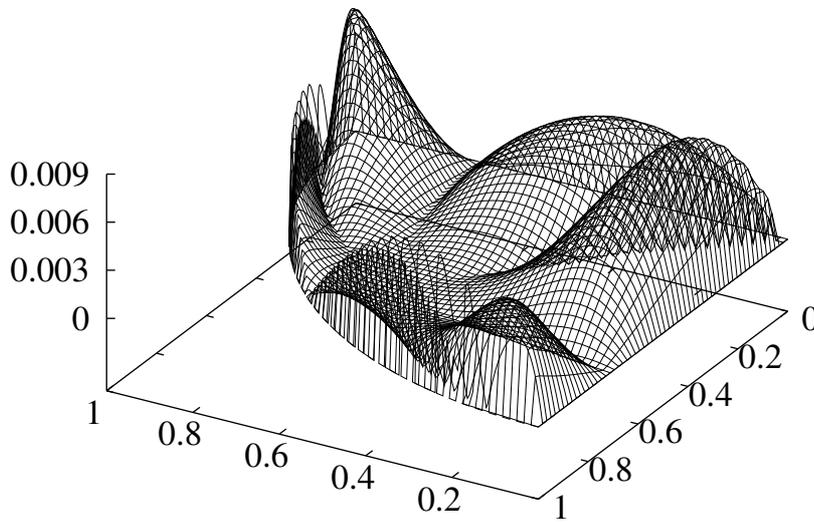


FIG. A.2 – Erreur de projection.

A.3 Processus d'assemblage

Le but de cette section est de détailler le processus de construction des maillages sur l'exemple d'une cellule élémentaire de réseau cubique de sphères en présence de ménisques. L'exemple choisi est le cas où les sphères du réseau ont un rayon r_s qui vaut 0.51 et où les ménisques sont caractérisés par $r_m = 0.1$ (cf figure 4.1).

Le maillage peau est divisé en trois sous-parties : l'interface *gaz-gaz* qui représente la frontière $\partial\Omega_{\text{ff}}$ du volume d'écoulement, l'interface *liquide-gaz* qui représente les surfaces de contact entre le volume gazeux et les ménisques et l'interface *solide-gaz* qui représente les surfaces de contact entre le volume gazeux et les sphères du réseau. Les maillages surfaciques sont d'abord générés en dimension 2 dans le plan ($z_3 = 0$). Ils sont délimités par des lacets.

Interface gaz-gaz

L'interface gaz-gaz est composée de deux types de lacets : ceux qui sont en contact avec les sphères et ceux qui sont en contact avec les ménisques. Pour le premier type, on génère donc un

arc de cercle centré en l'origine, de rayon r_s et décrit par les angles

$$\varphi_1 \in \left[\arccos \left(\frac{1}{2(r_s + r_m)} \right), \frac{\pi}{2} - \arccos \left(\frac{1}{2(r_s + r_m)} \right) \right]$$

On travaille ici avec des quantités adimensionnées. Pour le deuxième type, on génère un arc de cercle centré au point $\left(z_1 = x_m, z_2 = \frac{1}{2} \right)$ où $x_m = \sqrt{(r_s + r_m)^2 - \frac{1}{4}}$, de rayon r_m et décrit par les angles

$$\varphi_2 \in \left[\pi - \arcsin \left(\frac{1}{2(r_s + r_m)} \right), \pi + \arcsin \left(\frac{1}{2(r_s + r_m)} \right) \right]$$

Ces deux lacets initiaux sont dupliqués trois fois et transformés à l'aide de rotations dans le plan pour définir le contour de la partie de l'interface gaz-gaz située dans le plan ($z_3 = 0$). La surface définie par le contour ainsi obtenu est maillée uniformément à l'aide du mailleur surfacique, avec un pas constant $h = h_f$ (cf partie gauche de la figure A.3). Le maillage obtenu est dupliqué six fois et transformé par des translations et des rotations pour apparaître sur toutes les faces du cube unité en prenant soin de vérifier les propriétés de périodicité (cf partie droite de la figure A.3).

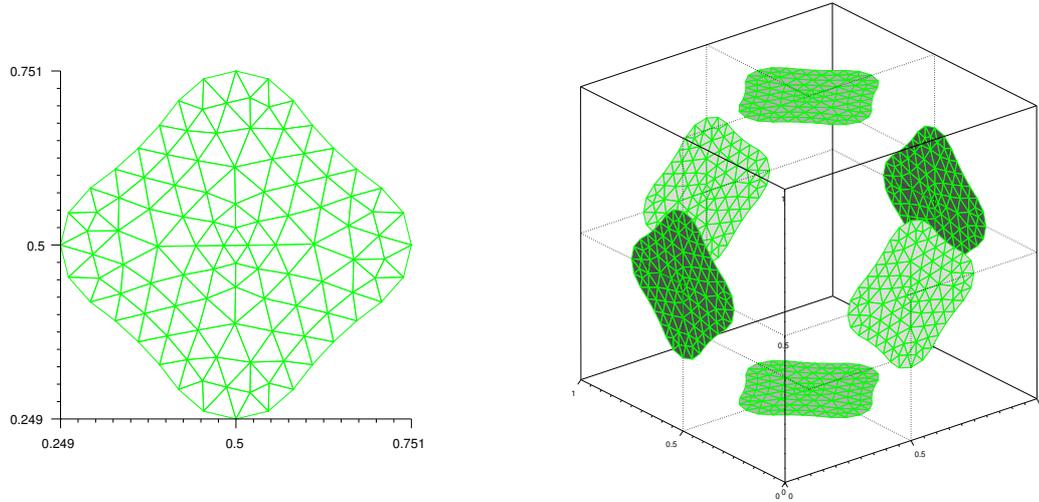


FIG. A.3 – Maillage surfacique d'une sous-partie élémentaire de l'interface gaz-gaz (à gauche) et sa projection et réplication sur le maillage peau (à droite) pour $h_f = 0.05$.

Interface liquide-gaz

L'interface liquide-gaz est formée de portions de tore de section circulaire qui ont la même topologie qu'un rectangle. Elles contiennent deux types de lacets. L'un correspond au contact avec l'interface gaz-gaz, il est de longueur

$$l_g = \frac{\pi}{2} r_s \cos \left(\arcsin \left(\frac{1}{2(r_s + r_m)} \right) \right)$$

et l'autre correspond au contact avec l'interface solide-gaz, il est de longueur

$$l_s = 2r_m \arcsin\left(\frac{1}{2(r_m + r_s)}\right)$$

On construit ainsi un rectangle centré sur l'origine du plan ($z_3 = 0$) (cf partie de gauche de la figure A.4) que l'on maille à l'aide du mailleur surfacique. Le maillage obtenu est dupliqué douze fois, puis transformé par projections, réflexions et rotations pour apparaître sur les tores de section circulaire centrés aux milieux des arêtes du cube unité (cf partie droite de la figure A.4). Pendant cette opération il faut prendre soin de conserver l'uniformité du maillage, surtout au niveau des lacets, en vue de la connexion des différentes sous-parties du maillage peau.

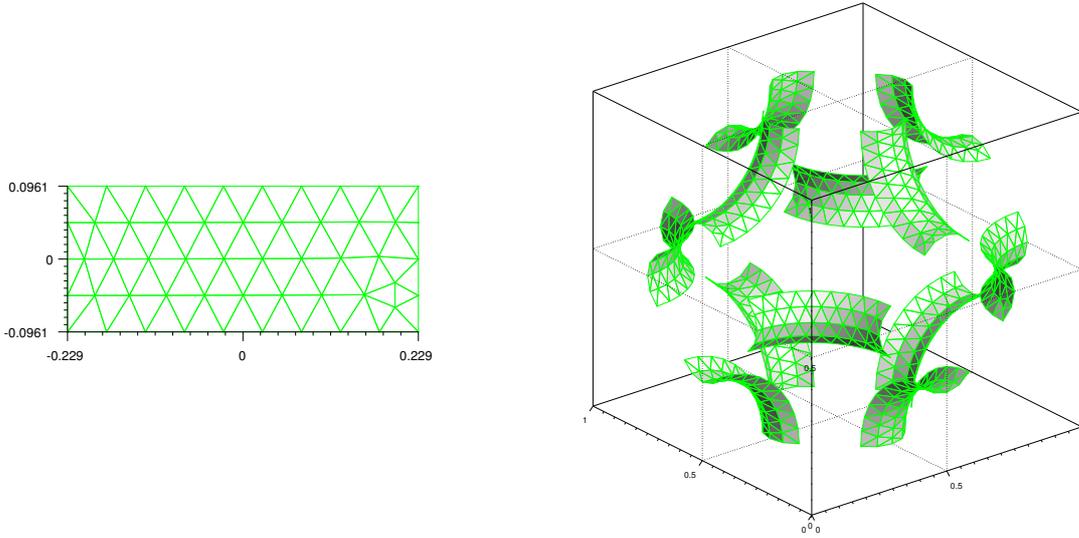


FIG. A.4 – Maillage surfacique d'une sous-partie élémentaire de l'interface ménisque-gaz (à gauche) et sa projection et duplication sur le maillage peau (à droite) pour $h_f = 0.05$.

Interface solide-gaz

L'interface solide-gaz est formée de portions de sphères. Elle contient deux types de lacets : les lacets correspondant au contact avec l'interface gaz-gaz et ceux correspondant au contact avec l'interface liquide-gaz. L'arc de cercle dans le plan ($z_3 = 0$), centré à l'origine, de rayon r_s et décrit par les angles

$$\varphi_1 \in \left[\arccos\left(\frac{1}{2(r_s + r_m)}\right), \frac{\pi}{2} - \arccos\left(\frac{1}{2(r_s + r_m)}\right) \right]$$

dans le repère trigonométrique $(\underline{e}_1, \underline{e}_2)$ est un représentant du premier type dont la longueur est notée l_0 et le quart de cercle dans le plan $z_2 = \frac{r_s}{2(r_s + r_m)}$, centré sur l'axe $(0, \underline{e}_2)$, de rayon $\sqrt{(r_s + r_m)^2} \frac{r_s}{r_s + r_m}$ est un représentant du second type. Ces deux lacets sont dupliqués trois fois et transformés par des rotations pour définir le contour de la partie de la frontière du volume gazeux correspondant à la sphère de rayon r_s centrée à l'origine. Ce contour est projeté par homothétie sur la sphère de rayon 1 centrée à l'origine. On utilise le projecteur défini dans la section A.2 pour projeter le contour sur le plan ($z_1 + z_2 + z_3 = 1$). Le contour est ensuite

transformé par des translations et des rotations pour être placé dans le plan ($z_3 = 0$). On note l_1 la longueur du lacet représentant du premier type défini ci-dessus. La surface définie par le contour plan obtenu est alors maillée à l'aide du mailleur surfacique avec un pas constant $h = h_f \frac{l_1}{l_0}$ (cf partie gauche de la figure A.5). Le choix du pas du maillage dans la mise en œuvre du mailleur surfacique est justifié par le besoin d'avoir exactement le même nombre de mailles sur les arêtes communes aux différentes sous-parties du maillage. Le maillage obtenu subit la transformation inverse pour être placé sur la sphère de rayon r_s centré à l'origine. Pour finir il est dupliqué huit fois puis transformé par des réflexions pour apparaître sur les huit sphères centrées aux sommets du cube unité (cf partie droite de la figure A.5).

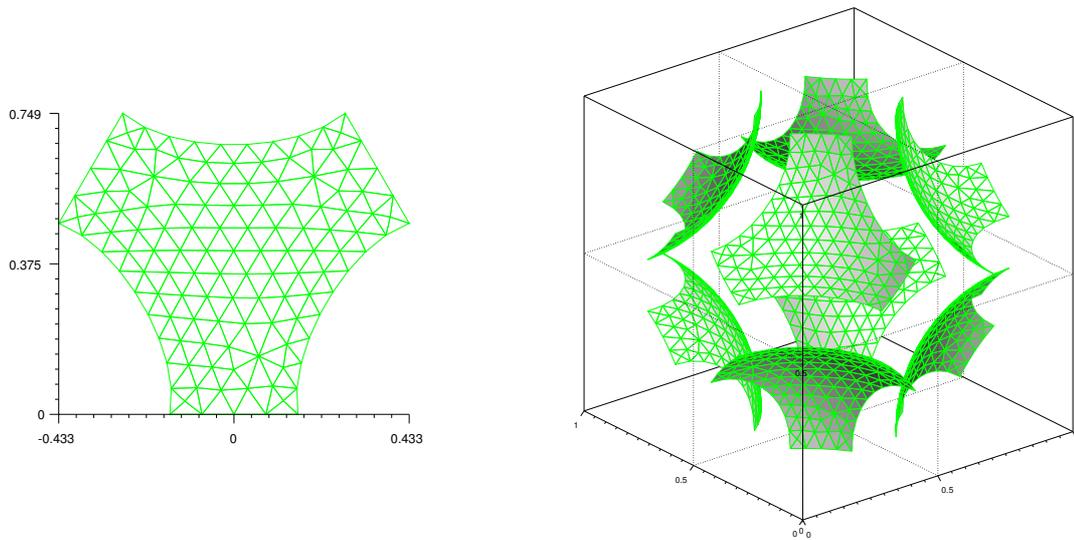


FIG. A.5 – Maillage surfacique d'une sous-partie élémentaire de l'interface solide-gaz (à gauche) et sa projection et duplication sur le maillage peau (à droite) pour $h_f = 0.05$.

Assemblage final

Les maillages des trois sous-parties du maillage peau sont réunis et les sommets redondants sur les arêtes communes sont supprimés. Le maillage peau ainsi obtenu est soumis au mailleur volumique Tetmesh-GHS3D qui produit un maillage du volume gazeux par des tétraèdres. Le résultat pour une valeur $h_f = 0.025$ est montré sur la figure A.6.

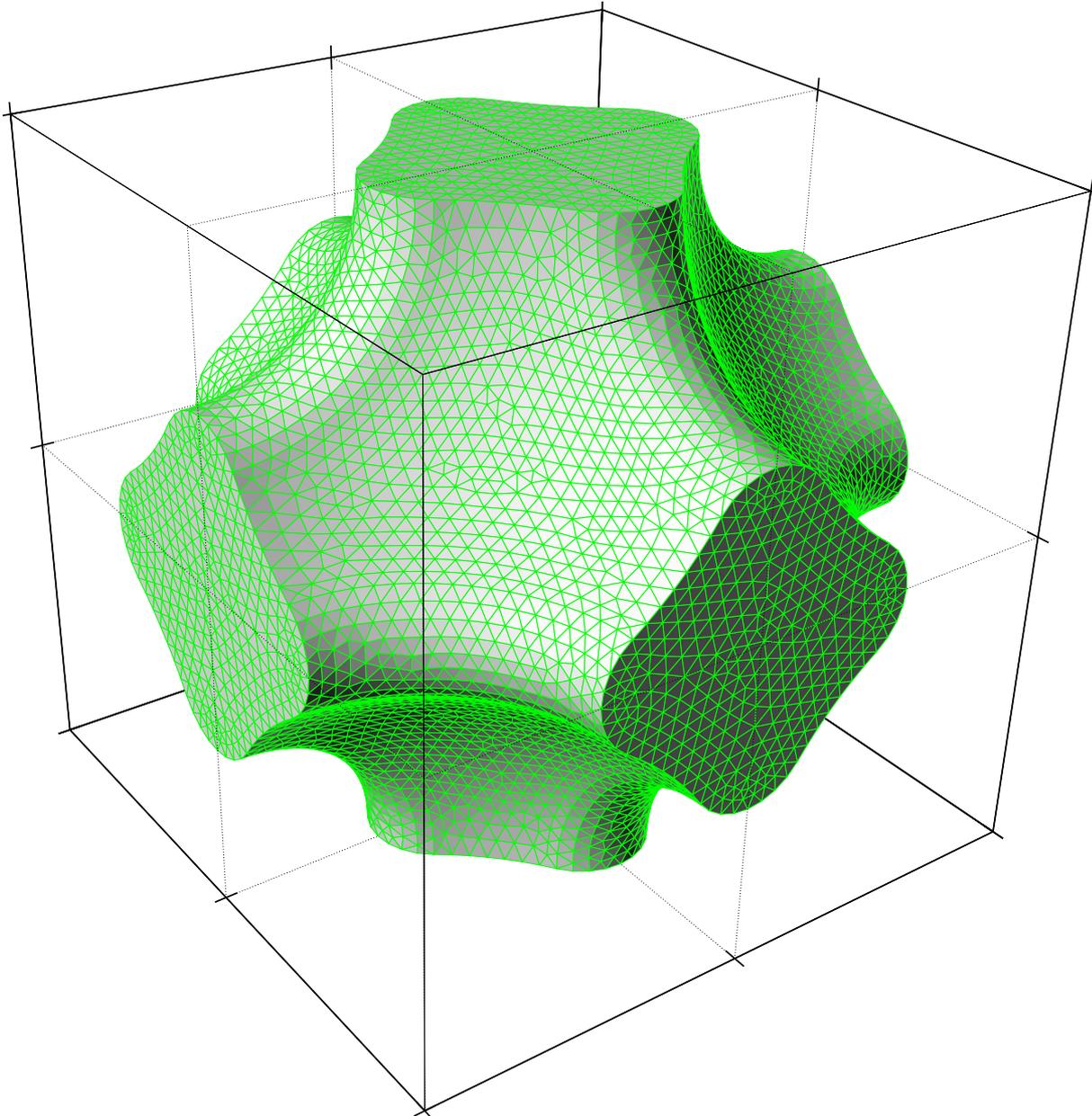


FIG. A.6 – Maillage total du volume gazeux avec le pas du maillage égal à $h_f = 0.025$.

Bibliographie

- [AS72] M. Abramowitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions, 9th ed.* Dover, New York, 1972.
- [All89] G. Allaire. Homogenization of the Stokes flow in connected porous medium. *Asymptot. Anal.*, volume 2, number 3 : 203–222, 1989.
- [All92] G. Allaire. Homogenization and two-scale convergence. *SIAM J. Math. Anal.*, volume 23, number 6 : 1482–1518, 1992.
- [All97] G. Allaire. Mathematical approaches and methods. In *Homogenization and porous media*, Volume 6 of *Interdiscip. Appl. Math.*, pages 225–250, 259–275. Springer, New York, 1997.
- [AC96] G. Allaire and C. Conca. Bloch-wave homogenization for a spectral problem in fluid-solid structures. *Arch. Rational Mech. Anal.*, volume 135, number 3 : 197–257, 1996.
- [AC98] G. Allaire and C. Conca. Boundary layers in the homogenization of a spectral problem in fluid-solid structures. *SIAM J. Math. Anal.*, volume 29, number 2 : 343–379 (electronic), 1998.
- [AR06] G. Allaire and A. Raphael. Homogénéisation d’un modèle de convection-diffusion avec chimie/adsorption en milieu poreux. Technical report, CMAP, Ecole Polytechnique, 2006. rapport interne n. 604.
- [Atk94] P. W. Atkins. *Physical Chemistry*. Univ Oxford Press, 1994.
- [Aub87] J.P. Aubin. *Analyse Fonctionnelle Appliquée – Vol 1 et 2*. Presses Universitaires de France, Paris, 1987.
- [Aur05] J.-L. Auriault. Homogenization theory applied to porous media. In Y.N. Abousleiman, A.H-D. Cheng and F.J. Ulm, editors, *Poromechanics 3*, pages 113–120, London, 2005. Taylor & Francis.
- [AL96] J.-L. Auriault and J. Lewandowska. Diffusion/adsorption/advection macrotransport in soils. *Eur. J. Mech., A/Solids*, volume 15, number 4 : 681–704, 1996.
- [Aur87] J.L. Auriault. Comportement des milieux poreux saturés. In Félix Darve, editor, *Manuel de Rhéologie des Géomatériaux*, 1987.
- [Aur91] J.L. Auriault. Heterogeneous medium. Is an equivalent macroscopic description possible? *Int. J. Eng. Sci.*, volume 29, number 7 : 861–869, 1991.
- [Aur02] J.L. Auriault. Upscaling heterogeneous media by asymptotic expansions. *J. Eng. Mech.*, volume 128, number 8 : 817–822, 2002.
- [BR03] P. Bastian and B. Rivière. Superconvergence and $H(\text{div})$ projection for discontinuous Galerkin methods. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, volume 42, number 10, 2003.

- [BB90] J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, 1990.
- [BLP78] A. Bensoussan, J.L. Lions and G. Papanicolaou. *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. North Holland, Amsterdam, 1978.
- [Bio41] M.A. Biot. General theory of three-dimensional consolidation. *J. Appl. Physics.*, volume 12 : 155–164, 1941.
- [Bio55] M.A. Biot. Theory of elasticity and consolidation for a porous anisotropic solid. *J. Appl. Physics*, volume 26 : 182–185, 1955.
- [BSL60] R.B. Bird, E.S. Stewart and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. 1960.
- [Bou84] A. Bourgeat. Homogenized behavior of two-phase flows in naturally fractured reservoirs with uniform fractures distribution. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, volume 47, number 1-2 : 205–216, 1984.
- [BGMP03] A. Bourgeat, O. Gipouloux and E. Marušić-Paloka. Filtration law for polymer flow through porous media. *Multiscale Model. Simul.*, volume 1, number 3 : 432–457, 2003.
- [BMP98] A. Bourgeat and E. Marušić-Paloka. Nonlinear effects for flow in periodically constricted channel caused by high injection rate. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, volume 8, number 3 : 379–405, 1998.
- [BMPM95] A. Bourgeat, E. Marušić-Paloka and A. Mikelić. Effective fluid flow in a porous medium containing a thin fissure. *Asymptotic Anal.*, volume 11, number 3 : 241–262, 1995.
- [BM94] A. Bourgeat and A. Mikelić. Homogenization of two-phase immiscible flows in a one-dimensional porous medium. *Asymptotic Anal.*, volume 9, number 4 : 359–380, 1994.
- [BM96] A. Bourgeat and A. Mikelić. Homogenization of a polymer flow through a porous medium. *Nonlinear Anal.*, volume 26, number 7 : 1221–1253, 1996.
- [BMP03] A. Bourgeat, A. Mikelić and A. Piatnitski. On the double porosity model of a single phase flow in random media. *Asymptot. Anal.*, volume 34, number 3-4 : 311–332, 2003.
- [BP98] A. Bourgeat and M. Panfilov. Effective two-phase flow through highly heterogeneous porous media : capillary nonequilibrium effects. *Comput. Geosci.*, volume 2, number 3 : 191–215, 1998.
- [BPP04] A. Bourgeat, L. Pankratov and M. Panfilov. Study of the double porosity model versus the fissures thickness. *Asymptot. Anal.*, volume 38, number 2 : 129–141, 2004.
- [BS94] S. Brenner and R. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, Volume 15 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, New York, 1994.
- [BDM85] F. Brezzi, J. Douglas, Jr. and L.D. Marini. Two families of mixed finite elements for second order elliptic problems. *Numer. Math.*, volume 47, number 2 : 217–235, 1985.
- [BF91] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer-Verlag, New York, 1991.
- [BF95] R.L. Burden and J.D. Faires. *Numerical Analysis – 5th ed.* PWS, Boston, 1995.
- [Cia91] P. G. Ciarlet. Basic error estimates for elliptic problems. In P.G. Ciarlet and J.L. Lions, editors, *Handbook of numerical analysis, Vol. II*, Handb. Numer. Anal., II, pages 17–351. North-Holland, Amsterdam, 1991.

- [CSJP79] D. Cioranescu and J. Saint Jean Paulin. Homogenization in open sets with holes. *J. Math. Anal. Appl.*, volume 71, number 2 : 590–607, 1979.
- [Cou95] O. Coussy. *Mechanics of Porous Continua*. Wiley, 1995.
- [CR73] M. Crouzeix and P.A. Raviart. Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations. *RAIRO - Analyse Numérique*, volume 3 : 33–75, 1973.
- [Dar56] H. Darcy. *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. Dalmont, Paris, 1856.
- [dM94] G. de Marsily. *Hydrogéologie Quantitative*. Masson, Paris, 1994.
- [Dor05] L. Dormieux. Non linear homogenization applied to the determination of transport properties and strength of saturated porous media. In N. Szygiol A. Garstecki, B. Mochnecki, editor, *CD-ROM Proceedings of the 16th International Conference on Computer Methods in Mechanics (CMM 2005)*, Czestochowa, 2005.
- [DB02] L. Dormieux and E. Bourgeois. *Introduction à la Micromécanique des Milieux Poreux*. Presses de l'ENPC, Paris, 2002.
- [DKU06] L. Dormieux, D. Kondo and F.J. Ulm. *Microporomechanics*. Wiley, 2006.
- [ESP75] H. Ene and E. Sanchez-Palencia. Equations et phénomènes de surface pour l'écoulement dans un modèle de milieu poreux. *Journal de Mécanique*, pages 73–108, 1975.
- [EG94] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent Transport Algorithms*, Volume 24 of *Lecture Notes in Physics. New Series m : Monographs*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [EG04] A. Ern and J.L. Guermond. *Theory and Practice of Finite Elements*, Volume 159 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, NY, 2004.
- [FF92] L. Franca and S. Frey. Stabilized finite element methods : II. The incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, volume 99 : 209–233, 1992.
- [Gal94] G. Galdi. *An Introduction to the Mathematical Theory of the Navier-Stokes Equations*, Volume 38 of *Vol. I. Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [GR86] V. Girault and P.A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations. Theory and Algorithms*, Volume 5 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [GM62] S.R. Groot and P. Mazur. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. North Holland, 1962.
- [HS56] P. Hammer and A. Stroud. Numerical integration over simplexes. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*, volume 10 : 137–139, 1956.
- [JM00] W. Jäger and A. Mikelić. On the interface boundary condition of Beavers, Joseph, and Saffman. *SIAM J. Appl. Math.*, volume 60, number 4 : 1111–1127, 2000.
- [JKO94] V. V. Jikov, S. M. Kozlov and O. A. Oleĭnik. *Homogenization of differential operators and integral functionals*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [Kel77] J. B. Keller. Effective behaviour of heterogeneous media. In U. Landman, editor, *Statistical Mechanics and Statistical Methods in Theory and Application*, pages 631–644, New York, 1977. Plenum.
- [Krö72] E. Kröner. *Statistical Continuum Mechanics*. Springer verlag, Wien, 1972.

- [Krö86] E. Kröner. *Statistical Modeling*. Elsevier, 1986.
- [LL87] I.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*, Volume 6 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, 2 edition, 1987.
- [Lem01] E. Lemarchand. *Contribution de la micromécanique à l'étude des phénomènes de transport et de couplage poromécanique dans les milieux poreux : Application aux phénomènes de gonflement des géomatériaux*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2001.
- [LD05] E. Lemarchand and L. Dormieux. Couplage advection-diffusion en phase gazeuse. In L. Dormieux, J. Kondo and K. Sab, editors, *Microstructure et Propriétés des Matériaux*, pages 145–150, Paris, 2005. Presses de l'École nationale des ponts et chaussées.
- [MK99] A.J. Majda and P.R. Kramer. Simplified models for turbulent diffusion : theory, numerical modelling, and physical phenomena. *Phys. Rep.*, volume 314, number 4-5 : 237–574, 1999.
- [MPM00] E. Marušić-Paloka and A. Mikelić. The derivation of a nonlinear filtration law including the inertia effects via homogenization. *Nonlinear Anal.*, volume 42, number 1, Ser. A : Theory Methods : 97–137, 2000.
- [Mau91] R. Mauri. Dispersion, convection, and reaction in porous media. *Phys. Fluids A*, volume 3, number 5, part 1 : 743–756, 1991.
- [MPP85] D. W. McLaughlin, G. C. Papanicolaou and O. R. Pironneau. Convection of microstructure and related problems. *SIAM J. Appl. Math.*, volume 45, number 5 : 780–797, 1985.
- [Mik97] A. Mikelić. Non-Newtonian flow. In *Homogenization and porous media*, Volume 6 of *Interdiscip. Appl. Math.*, pages 77–94, 259–275. Springer, New York, 1997.
- [MR04] A. Mikelić and C. Rosier. Modeling solute transport through unsaturated porous media using homogenization. I. *Comput. Appl. Math.*, volume 23, number 2-3 : 195–211, 2004.
- [Nig81] R.I. Nigmatulin. Three-dimensional averaging in the mechanics of heterogeneous media. *Fluid Mechanics*, volume 10, number 4 : 71–107, 1981.
- [PJ63] T.K. Perkins and O.C. Johnston. A review of diffusion and dispersion in porous media. *J. Pet. Sci. Eng.*, 1963.
- [QW93] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media : volume-averaged equations, closure problems, and comparison with experiment. *Chemical Engineering Science*, volume 48, number 14 : 2537–2564, 1993.
- [RPP87] R.C. Reid, J.M. Prausnitz and B.E. Poling. *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill International, 4 edition, 1987.
- [Saa96] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS Publishing, Boston, MA, 1996.
- [SS86] Y. Saad and M. Schultz. GMRES : A minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, volume 7 : 856–869, 1986.
- [SP74] E. Sanchez-Palencia. Comportement local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *J. Eng. Sci.*, volume 12 : 331–351, 1974.
- [San80] E. Sanchez-Palencia. *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, Volume 127 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, Berlin-New York, 1980.

- [Str72] G. Strang. Variational crimes in the finite element method. In A. Aziz, editor, *The Mathematical Foundations of the Finite Element Method with Applications to Partial Differential Equations*. Academic Press, New York, 1972.
- [Str69] A. Stroud. A fifth degree integration formula for the n-simplex. *SIAM J. Num. Anal.*, volume 6 : 90–98, 1969.
- [Str71] A. Stroud. *Approximate Calculation of Multiple Integrals*. Prentice-Hall. Englewood Cliffs, New Jersey, 1971.
- [SBA93] T. Strzelecki, J. Bauer and J.L. Auriault. Constitutive equation of a gas-filled two-phase medium. *Transp. Porous Media*, volume 10 : 197–202, 1993.
- [TdED06] P. Tardif d’Hamonville, A. Ern and L. Dormieux. Numerical evaluation of diffusive and dispersive transport in periodic porous media with advection. *Comput. Geosci*, (accepté), 2006.
- [Ter43] K. Terzaghi. *Theoretical Soils Mechanics*. New York, 1943.
- [TV96] L. Tobiska and R. Verfürth. Analysis of a streamline diffusion finite element method for the Stokes and Navier-Stokes equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, volume 33, number 1 : 107–127, 1996.
- [Tra00] P. Tran. *Corrections non linéaires à la loi de Darcy et dispersion en milieux poreux périodiques anisotropes*. PhD thesis, Université Paris 6, 2000.
- [VD02] H. Van Damme. L’eau et sa représentation. In O. Coussy and J.M. Fleureau, editors, *Mécanique des sols non saturés*. Hermès, Paris, 2002.
- [Viv05] A. Vives. Rapport de stage : Simulations numériques en vue de calculs d’homogénéisation pour les écoulements en milieu poreux. Technical report, Université Paris-Sud 11, 2005.
- [Zao91] A. Zaoui. *Matériaux Hétérogènes et Composites*. 1991. Ecole Polytechnique.

À l'échelle macroscopique, le transport d'un composant d'un mélange fluide dans un milieu poreux est décrit par des flux advectif, diffusif et dispersif. Ces deux derniers peuvent être formulés en utilisant les tenseurs de diffusion et de dispersion homogénéisés.

Nous nous intéressons d'abord au cas monophasique où le milieu est saturé par un liquide incompressible. En utilisant la technique de développement asymptotique à double échelle, le champ de vitesse est d'abord obtenu en résolvant le problème de Stokes à l'échelle microscopique, puis le champ de vitesse est utilisé pour résoudre un problème d'advection-diffusion vectoriel dont la solution permet d'évaluer les tenseurs de diffusion et de dispersion. Nous considérons une approximation par éléments finis des problèmes posés à l'échelle microscopique dont nous effectuons une analyse numérique complète. Dans le cas du problème de Stokes, nous comparons trois types d'éléments finis en fonction de la qualité de la divergence du champ de vitesse discret. A titre d'application, nous calculons les valeurs des tenseurs de diffusion et de dispersion pour des réseaux cubiques et cubiques centrés de sphères et nous étudions l'influence de l'intensité de l'advection et de la morphologie des pores sur les tenseurs.

La méthodologie ci-dessus est étendue au cas diphasique où nous considérons le transport de vapeur en équilibre avec des ménisques liquides localisés dans les pores. Nous mettons en évidence l'influence de la concentration de vapeur et de la taille des pores dans l'équilibre liquide-vapeur. Des simulations sur des réseaux cubiques et cubiques centrés de sphères fournissent les coefficients des tenseurs de diffusion et de dispersion. Enfin, un problème de transport macroscopique est résolu afin d'étudier les effets non-linéaires dus au caractère multi-échelles du problème.

Modeling and simulation of advective and diffusive transport in monophasic and biphasic porous media

At the macroscopic scale, the transport of a fluid mixture component in a porous medium is described by advective, diffusive and dispersive fluxes. The two latter fluxes are formulated using a diffusion tensor and a dispersion tensor. The actual value of these tensors depends on the pore geometry and on the magnitude of the advection velocity.

First we are interested in the monophasic case in which the medium is saturated with an incompressible liquid. Using the double scale expansion technique, the velocity field at the pore scale is first obtained by solving the Stokes problem. Then, the velocity field is used in a vector-valued advection-diffusion problem from which solution the diffusion and dispersion tensors are evaluated. We consider a finite element approximation at the microscopic scale and we perform the whole numerical analysis. For the Stokes problem, we compare three finite element spaces in terms of the divergence of the discrete velocity field. As an application, we compute the values of the diffusive and dispersive tensors for cubic and centered cubic sphere networks and we study the influence of the velocity magnitude and the pore morphology on the tensors.

This methodology is extended to the biphasic case in which we consider the vapor transport in equilibrium with liquid menisci localised in the pores. We show the influence of the vapor concentration on the menisci geometry and the importance of the pore size for the liquid-vapor equilibrium. We perform numerical simulations for cubic and centered cubic sphere networks to compute the diffusive and dispersive tensors coefficients. Finally, a macroscopic transport problem is solved in order to understand the non-linear effects due to the multi-scale nature of the problem.

Mots clefs : advection, diffusion, dispersion, milieu poreux périodique, homogénéisation, champ de vitesse discret à divergence nulle, capillarité, saturation, éléments finis.

Discipline : mathématiques, informatique

Laboratoire : CERMICS
Ecole Nationale des Ponts et Chaussées
6 - 8 avenue Blaise Pascal
77 455 Marne-la-Vallée cedex