

# Homogénéisation d'un modèle de convection-diffusion avec réaction en milieu poreux

Grégoire ALLAIRE, Annelise RAPHAEL  
CMAP, Ecole Polytechnique

*C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, 344, pp.523-528 (2007)*

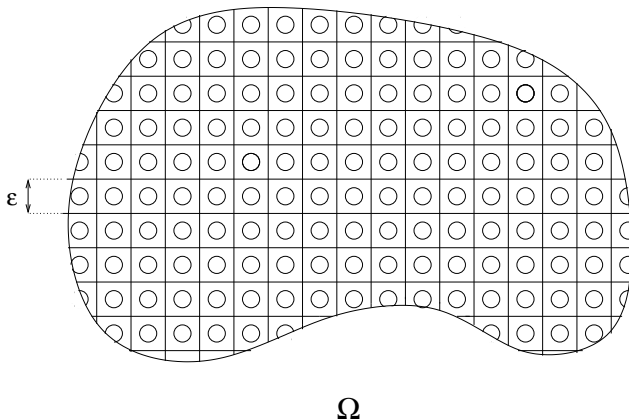
Travail soutenu par le GdR MOMAS

14 novembre 2007

- 1 Rappel : convection-diffusion
- 2 Convection, diffusion et réaction
- 3 Résultats numériques

## Rappels sur le problème classique d'homogénéisation d'une équation de convection-diffusion en milieu poreux.

## Idéalisation périodique d'un milieu poreux $\Omega_\epsilon$



## Notations :

- $\epsilon$  rapport entre les échelles microscopique et macroscopique
- $x$  variable macroscopique
- $y = \frac{x}{\epsilon}$  variable microscopique

## Milieu poreux périodique

$$\Omega_\epsilon = \Omega \setminus \bigcup_j \mathcal{O}_j^\epsilon \quad \text{et} \quad \mathcal{O}^\epsilon = \epsilon \mathcal{O}$$

Cellule de périodicité  $Y = (0, 1)^N = Y^* \cup \mathcal{O}$  avec  $Y^*$  = partie fluide et  $\mathcal{O}$  = partie solide.

$$\begin{cases} c\left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon}\right) \frac{\partial u_\epsilon}{\partial t} + \epsilon^{-1} \mathbf{b}\left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon}\right) \cdot \nabla u_\epsilon - \operatorname{div}\left(D\left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon}\right) \nabla u_\epsilon\right) = f & \text{dans } \Omega_\epsilon \\ D\left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon}\right) \nabla u_\epsilon \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega_\epsilon \\ u_\epsilon(0) = u_{init} \end{cases}$$

- $u_\epsilon(t, \mathbf{x})$  concentration d'une espèce chimique dans un fluide
- $c(\mathbf{y}) \geq c_0 > 0$  porosité
- $D(\mathbf{y})$  tenseur de diffusion moléculaire (symétrique défini positif)
- $\mathbf{b}(\mathbf{y})$  champ de vitesse du fluide

## Tous les coefficients sont périodiques

Vitesse de convection, incompressible, à moyenne nulle et non pénétrante

$$\operatorname{div}_y b(y) = 0, \quad \int_Y b(y) dy = 0, \quad b \cdot n = 0 \text{ sur } \partial\mathcal{O}$$

**Chacune de ces 3 conditions est essentielle !**

Mise à l'échelle (scaling) qui correspond à un nombre de Péclet

$$Pe_{local} = \mathcal{O}(1) \quad \Leftrightarrow \quad Pe_{macro} = \mathcal{O}(\epsilon^{-1})$$

Bien que, pour le problème considéré, il n'y ait qu'une seule valeur physique  $\epsilon_0$  du paramètre  $\epsilon$ , on considère une **suite de problèmes** avec  $\epsilon$  de plus en plus petit.

On suppose que

$$u_\epsilon(t, \mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{+\infty} \epsilon^i u_i \left( t, \mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right),$$

avec  $u_i(t, \mathbf{x}, y)$  fonction de deux variables d'espace  $\mathbf{x}$  et  $y$ , **périodique en  $y$**  de période  $Y = (0, 1)^N$ .

- On injecte cette série dans l'équation et on utilise la règle

$$\nabla \left( u_i \left( \mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right) \right) = \left( \epsilon^{-1} \nabla_y u_i + \nabla_x u_i \right) \left( \mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right).$$

- On identifie chaque puissance de  $\epsilon$ .

- On remarque que

$$\phi \left( \mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right) = 0 \quad \forall \mathbf{x}, \epsilon \quad \Leftrightarrow \quad \phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv 0 \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}.$$

- Seuls les 3 premiers termes de la série seront importants.

**Lemme technique** (*alternative de Fredholm*). Le problème aux limites

$$\begin{cases} b(y) \cdot \nabla_y v(y) - \operatorname{div}_y (D(y) \nabla_y v(y)) = g(y) \text{ dans } Y^* \\ D(y) \nabla_y v(y) \cdot n = h(y) \text{ sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow v(y) \text{ } Y\text{-périodique} \end{cases}$$

admet une solution, unique à l'addition d'une constante près, **si et seulement si**

$$\int_{Y^*} g(y) dy + \int_{\partial \mathcal{O}} h(y) ds = 0.$$

Rappel :  $Y = Y^* \cup \mathcal{O}$  avec  $Y^* =$  partie fluide et  $\mathcal{O} =$  partie solide.

Equation en  $\epsilon^{-2}$  :

$$\begin{cases} b(y) \cdot \nabla_y u_0(x, y) - \operatorname{div}_y (D(y) \nabla_y u_0(x, y)) = 0 \text{ dans } Y^* \\ D(y) \nabla_y u_0(x, y) \cdot n = 0 \text{ sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow u_0(x, y) \text{ } Y\text{-périodique} \end{cases}$$

Il s'agit d'une e.d.p. en  $y$  ( $x$  n'est qu'un paramètre).

Par unicité de la solution (à une constante près), on en déduit

$$u_0(x, y) \equiv u(x)$$

**Equation en  $\epsilon^{-1}$  :** (problème de cellule ou correcteur)

$$\begin{cases} b(y) \cdot \nabla_y u_1(x, y) - \operatorname{div}_y (D(y) \nabla_y u_1(x, y)) = \\ \quad -b(y) \cdot \nabla_x u(x) + \operatorname{div}_y (D(y) \nabla_x u(x)) \text{ dans } Y^* \\ D(y) \nabla_y u_1(x, y) \cdot n = -D(y) \nabla_x u(x) \cdot n \text{ sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow u_1(x, y) \text{ } Y\text{-périodique} \end{cases}$$

**La CNS d'existence est vérifiée car  $\int_{Y^*} b(y) dy = 0$ .**

On en déduit que  $u_1$  dépend linéairement de  $\nabla_x u$  :

$$u_1(x, y) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial u}{\partial x_i}(x) w_i(y)$$

Equation en  $\epsilon^0$  :

$$\begin{cases} b \cdot \nabla_y u_2(x, y) - \operatorname{div}_y (D \nabla_y u_2(x, y)) = -b \cdot \nabla_x u_1 \\ + \operatorname{div}_y (D \nabla_x u_1) + \operatorname{div}_x (D (\nabla_y u_1 + \nabla_x u)) - c \frac{\partial u}{\partial t} + f \text{ dans } Y^* \\ D(y) \nabla_y u_2 \cdot n = -D(y) \nabla_x u_1 \cdot n \text{ sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow u_2(x, y) \text{ Y-périodique} \end{cases}$$

CNS d'existence et d'unicité de la solution  $u_2$  :

$$\int_{Y^*} \left( -b \cdot \nabla_x u_1 + \operatorname{div}_y (D \nabla_x u_1) + \operatorname{div}_x (D (\nabla_y u_1 + \nabla_x u)) - c \frac{\partial u}{\partial t} + f \right) dy - \int_{\partial \mathcal{O}} D \nabla_x u_1 \cdot n ds = 0$$

On remplace  $u_1$  par sa valeur en fonction de  $\nabla_x u$  et on trouve le **problème homogénéisé**.

## PROBLEME HOMOGENEISE

$$\begin{cases} c^* \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div} (D^* \nabla u) = f & \text{dans } \Omega \\ u(0) = u_{init} & \text{dans } \Omega \end{cases}$$

avec la porosité homogénéisée :

$$c^* = \frac{1}{|Y^*|} \int_{Y^*} c(y) dy,$$

et le tenseur de diffusion homogénéisé :

$$D_{ij}^* = \frac{1}{|Y^*|} \int_{Y^*} D(y) (e_i + \nabla_y w_j(y)) \cdot (e_j + \nabla_y w_i(y)) dy.$$

## Tenseur de diffusion homogénéisé :

$$D_{ij}^* = \int_{Y^*} D(y) (e_i + \nabla w_i) \cdot (e_j + \nabla w_j) dy$$

avec  $(e_i)_{1 \leq i \leq N}$  la base canonique de  $\mathbb{R}^N$  et

$$\begin{cases} b \cdot \nabla_y (e_i + \nabla_y w_i) - \operatorname{div}_y (D (e_i + \nabla_y w_i)) = 0 & \text{dans } Y^* \\ D \nabla_y w_i \cdot n = -D e_i \cdot n & \text{sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow w_i(y) & Y\text{-périodique,} \end{cases}$$

- La formule pour  $D^*$  n'est pas totalement explicite car il faut résoudre les problèmes de cellule.
- $D^*$  ne dépend ni de  $\Omega$ , ni de  $f$ , ni des conditions aux limites.
- Le tenseur  $D^*$  caractérise le milieu poreux.

**Conclusion sur cette exemple** : on a trouvé un tenseur effectif de diffusion, la vitesse de convection effective est nulle, et on n'a pas changé de modèle.

$$u_\epsilon(t, \mathbf{x}) \approx u(t, \mathbf{x}) + \epsilon \sum_{i=1}^N \frac{\partial u_i}{\partial x_j}(t, \mathbf{x}) w_i \left( \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right)$$

**Généralisation dans ce qui suit** : on tient compte des réactions chimiques et/ou d'un fluide compressible ou de vitesse moyenne non nulle.

Nouveaux résultats sur l'homogénéisation d'une équation de convection-diffusion-réaction en milieu poreux.

**Convection-diffusion-réaction** : on rajoute des termes linéaires de réaction dans le volume et sur le bord des pores.






### Hypothèses :

- Aucune hypothèse sur la vitesse de convection  $b$ !
- Le milieu est infini périodique.
- Le nombre de Damkohler (équilibre diffusion/chimie) est localement de l'ordre de 1.
- Mise à l'échelle (scaling) qui correspond à

$$Pe_{local} = \mathcal{O}(1), \quad Da_{local} = \mathcal{O}(1)$$

$$Pe_{macro} = \mathcal{O}(\epsilon^{-1}), \quad Da_{macro} = \mathcal{O}(\epsilon^{-1})$$



-  H. Brenner, P. Adler, *Dispersion resulting from flow through spatially periodic porous media*, Philos. Trans. Roy. Soc. London Ser. A 307, no. 1498, 149–200 (1982).
-  R. Mauri, *Dispersion, convection, and reaction in porous media*, Phys.Fluids A3(5), May 1991.
-  P. Donato, A. Piatnitski, *Averaging of nonstationary parabolic operators with large lower order terms*, Multi scale problems and asymptotic analysis, 153–165, GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl., 24, Gakkotosho, Tokyo (2006).
-  Y. Capdeboscq, *Homogenization of a neutronic critical diffusion problem with drift*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A 132 (2002), no. 3, 567–594.
-  A. Mikelic, V. Devigne, C.J. van Duijn, *Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers*, preprint.

**Changement de stratégie** : développements asymptotiques à grande dérive  $b^* \in \mathbb{R}^N$

$$u_\epsilon(t, x) = e^{-r^* \epsilon^{-2} t} \sum_{j=0}^{+\infty} \epsilon^j u_j \left( t, x - \frac{b^* t}{\epsilon}, \frac{x}{\epsilon} \right),$$

avec  $u_j(t, x, y)$  fonction de deux variables d'espace  $x$  et  $y$ , périodique en  $y$  de période  $Y = (0, 1)^N$ .

On a besoin des 2 nouveaux paramètres  $b^*$  (vitesse effective) et  $r^*$  (coefficient de réaction) pour que les CNS des problèmes de cellule soient satisfaites !

On injecte cette série dans l'équation et on utilise la règle usuelle

$$\nabla \left( u_i \left( t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{b}^* t}{\epsilon}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right) \right) = \left( \epsilon^{-1} \nabla_y u_i + \nabla_x u_i \right) \left( t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{b}^* t}{\epsilon}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right).$$

Mais on a aussi

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( u_i \left( t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{b}^* t}{\epsilon}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right) \right) = \left( \frac{\partial u_i}{\partial t} - \epsilon^{-1} \mathbf{b}^* \cdot \nabla_x u_i \right) \left( t, \mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right)$$

## Théorème.

$$u_\epsilon(t, \mathbf{x}) \approx e^{-r^* \epsilon^{-2} t} \psi\left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon}\right) u\left(t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{b}^* t}{\epsilon}\right)$$

## Problème homogénéisé :

$$\begin{cases} c^* \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(D^* \nabla u) = 0 & \text{dans } \mathbb{R}^N \\ u(0) = u_{init} & \text{dans } \mathbb{R}^N \end{cases}$$

avec des formules nouvelles pour  $c^*$  et  $D^*$ , et la vitesse effective est

$$\mathbf{b}^* = \int_{Y^*} [\psi \psi^* \mathbf{b} + \psi D \nabla \psi^* - \psi^* D \nabla \psi](\mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

Problème spectral de cellule :

$$\begin{cases} b \cdot \nabla_y \psi - \operatorname{div}_y (D \nabla_y \psi) + r(y) \psi = r^* c \psi & \text{dans } Y^* \\ D \nabla_y \psi \cdot n + k \psi = 0 & \text{sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow \psi(y) & Y - \text{périodique} \end{cases}$$

Problème spectral **adjoint** de cellule :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y (b \psi^*) - \operatorname{div}_y (D \nabla_y \psi^*) + r \psi^* = r^* c \psi^* & \text{dans } Y^* \\ D \nabla_y \psi^* \cdot n + k \psi^* = 0 & \text{sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow \psi^*(y) & Y - \text{périodique} \end{cases}$$

Première valeur propre  $r^*$ , première fonction propre  $\psi(y) > 0$   
*(profil d'équilibre local entre diffusion, convection et réaction)* et  
 première fonction propre adjointe  $\psi^*(y) > 0$ .

## Autre écriture du résultat

$$u_\epsilon(t, x) \approx \psi\left(\frac{x}{\epsilon}\right) v_\epsilon(t, x)$$

avec  $v_\epsilon(t, x) = e^{-r^* \epsilon^{-2} t} u\left(t, x - \frac{b^* t}{\epsilon}\right)$

Problème homogénéisé modifié :

$$\begin{cases} c^* \frac{\partial v_\epsilon}{\partial t} + \epsilon^{-1} b^* \cdot \nabla v_\epsilon - \operatorname{div}(D^* \nabla v_\epsilon) + \epsilon^{-2} r^* v_\epsilon = 0 & \text{dans } \mathbb{R}^N \\ v_\epsilon(0) = u_{init} & \text{dans } \mathbb{R}^N \end{cases}$$

## Remarques

- On retrouve le cas précédent si  $r(y) \equiv 0$ ,  $k = 0$  et vitesse  $b(y)$  incompressible à moyenne nulle et non pénétrante. Dans ce cas on trouve  $\psi(y) = \psi^*(y) \equiv 1$ ,  $r^* = 0$  et  $b^* = 0$ .
- La chimie et le transport **ne se découplent pas** pour le calcul des coefficients effectifs.
- **Astuce pour simplifier l'équation** : la multiplier par  $\psi^*$ .
- Cf. H. Brenner - P. Adler (1982), R. Mauri (1991), Donato-Piatnitski (2006), G. Allaire - A.-L. Raphael (2007).
- Démonstration rigoureuse grâce à la convergence à deux échelles *avec dérive*.

Porosité homogénéisée ( $\tilde{c} = c\psi\psi^*$ ) :  $c^* = \frac{1}{|Y^*|} \int_{Y^*} \tilde{c}(y) dy$ ,

Tenseur de diffusion homogénéisé ( $\tilde{D} = D\psi\psi^*$ ) :

$$D_{ij}^* = \frac{1}{|Y^*|} \int_{Y^*} \tilde{D} (e_i + \nabla_y w_i) \cdot (e_j + \nabla_y w_j) dy.$$

avec le problème de cellule ( $\tilde{b} = [\psi\psi^* b + \psi D \nabla \psi^* - \psi^* D \nabla \psi]$ ) :

$$\begin{cases} (\tilde{b} - b^*) \cdot \nabla_y (e_i + \nabla_y w_i) - \operatorname{div}_y (\tilde{D} (e_i + \nabla_y w_i)) = 0 \text{ dans } Y^* \\ \tilde{D} \nabla_y w_i \cdot n = -\tilde{D} e_i \cdot n \text{ sur } \partial \mathcal{O} \\ y \rightarrow w_i(y) \text{ } Y\text{-périodique} \end{cases}$$

Bien posé car le champ de vitesse ( $\tilde{b} - b^*$ ) est incompressible, à moyenne nulle et non pénétrant !

## Résultats numériques

- On utilise le logiciel FreeFem++
- Ce logiciel utilise la librairie Arpack++ pour les problèmes aux valeurs propres.
- On décentre les éléments finis pour le problème convectif ("streamline diffusion")
- Champ de vitesse dans la direction  $e_1$ .

## Convergence en maillages pour la valeur propre $r^*$

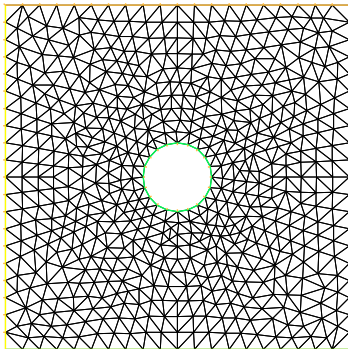


FIG.: Maillage de la cellule

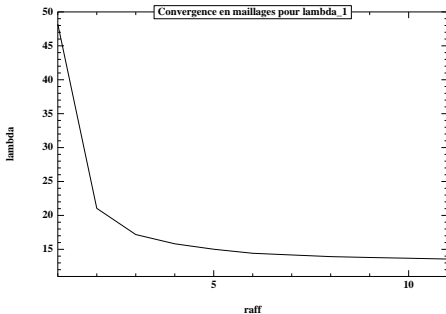
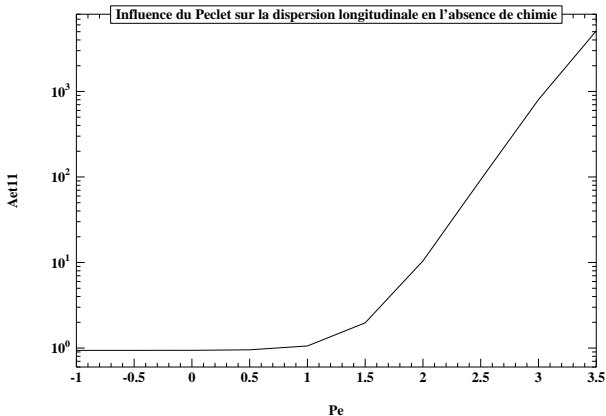


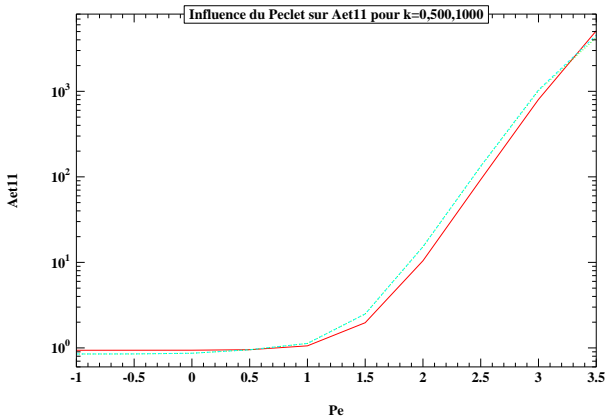
FIG.: convergence en maillage

**Cas sans chimie ( $k = 0$ )** : on observe l'influence du Péclet microscopique sur  $D_{11}^*$

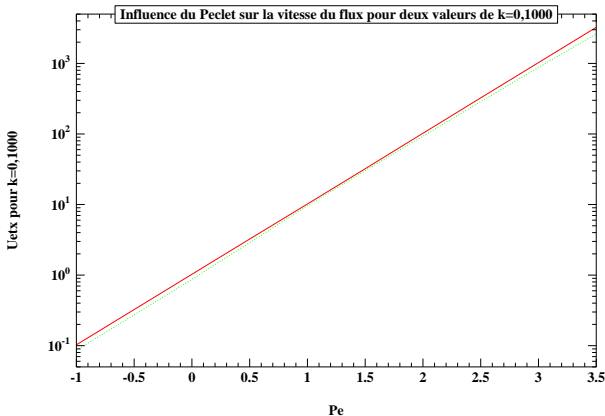




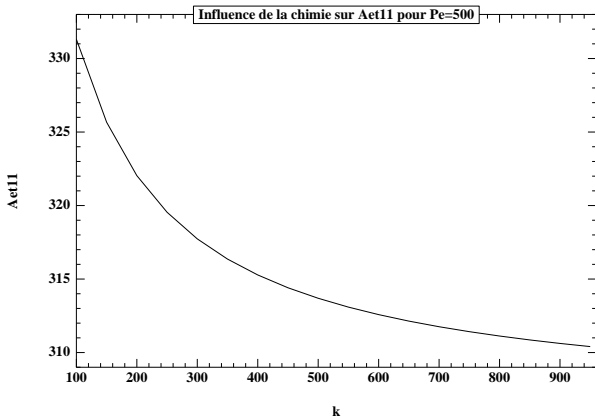
On trace  $D_{11}^*$  en fonction du Péclet pour les valeurs  $k = 0$ ,  
 $k = 500$  et  $k = 1000$



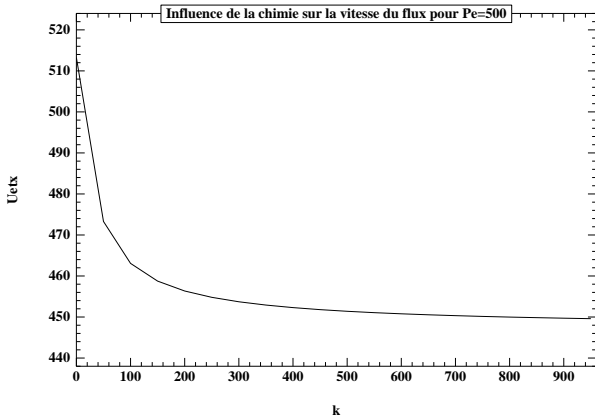
On trace  $b_1^*$  en fonction du Péclet pour les valeurs  $k = 0$  et  $k = 1000$



On trace  $D_{11}^*$  en fonction de  $k$  pour un Péclet fixé  $Pe = 500$



On trace  $b_1^*$  en fonction de  $k$  pour un Péclet fixé  $Pe = 500$



On trace la valeur propre  $r^*$  (taux de décroissance) en fonction de  $k$  pour un Péclet fixé  $Pe = 500$

