

HTRA Partie 1 : Changement d'échelle

18 décembre 2024

1 Caractérisation d'un milieu poreux dit homogène

On cherche à caractériser un échantillon de quelques centimètres (voir Figure 1) pour estimer les propriétés macroscopique d'un milieu poreux à l'aide de la modélisation numérique. A l'aide de l'échantillon fourni (voir fichier `echantillon_eta.mph` sur le moodle), on cherche à effectuer le changement d'échelle pour calculer la perméabilité du milieu et le coefficient de dispersion.



FIGURE 1 – Milieu homogène η dont les dimensions sont $L=0.05625\text{m}$, $l=0.005\text{m}$ les cylindres ont un diamètre de 0.0025m .

1.1 Détermination de la perméabilité K

En résolvant l'écoulement à la micro-échelle sur l'échantillon numérique, on cherchera dans un premier temps à mesurer la perméabilité de l'échantillon fourni à l'aide de la loi de Darcy. La loi de Darcy n'étant valide que pour les écoulements de Stokes (avec effets inertiels négligeables), on s'assurera de notre mesure en faisant varier la vitesse d'entrée.

1.2 Rappel sur la dispersion et stratégie de caractérisation

Nous avons vu en cours que la diffusion apparente en milieu poreux, appelée aussi dispersion D^* , dépend de la configuration d'écoulement qu'on caractérise via le nombre de Péclet Pe :

$$Pe = \frac{U\Phi}{D} \quad (1)$$

avec U la vitesse moyenne (vitesse imposée dans le milieu à l'entrée), Φ (la dimension caractéristique de notre milieu poreux à l'échelle microscopique, le diamètre des cylindres dans notre cas) et D le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce transportée dans l'eau. Afin de caractériser la dispersion de notre milieu, il est nécessaire de mesurer la valeur de dispersion D^* pour différente valeur de vitesse U afin de tracer la courbe $D^*(U)$ caractéristique de notre milieu.

1.3 Tracé des courbes de référence

Dans un premier temps, il est nécessaire de générer la solution de référence, c'est à dire de modéliser le transport d'espèce à l'échelle microscopique. En utilisant la géométrie réelle du milieu (Figure 1), nous imposons une concentration à l'entrée pendant un durée définie (cette durée dépendant de la vitesse d'écoulement, voir Tableau 1).

Pe	0.125	1.25	12.5	125	1250
durée du créneau de concentration (s)	1e4	1e3	100	10	1
durée totale de la simulation (s)	1e6	1e5	1e4	1000	100

TABLE 1 – Temps d’injection et de simulation à divers nombre de Péclet

On mesure ensuite en sortie la concentration en fonction du temps $C(t)$ ou flux de soluté en sortie $Q_C(t) = C(t) \times U$ (voir Figure 2) pour chaque vitesse d’écoulement.

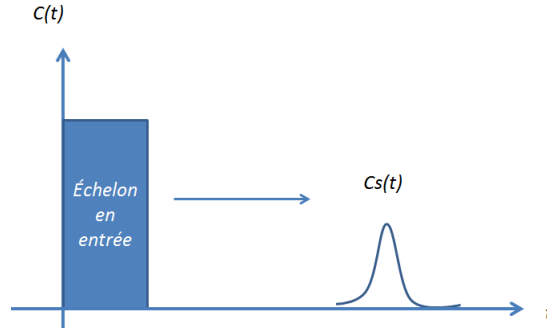


FIGURE 2 – Exemple de profil de concentration en sortie en fonction du temps $C(t)$

Attention, le champs de vitesse n’étant pas homogène en sortie, on n’intègre pas directement la concentration en sortie sur le bord de sortie : $C(t) \neq \int_l C_x(t) dl$ (avec $C_x(t)$ la valeur de concentration à la coordonnée x et au temps t et l la largeur du bord de sortie). Il faut intégrer en fonction de la vitesse pour obtenir une concentration moyenne, soit :

$$C(t) = \frac{1}{\bar{U}} \int_l U_x C_x(t) dl \quad (2)$$

avec \bar{U} la vitesse moyenne en sortie.

1.4 Détermination de valeurs de dispersion $D^*(U)$

Pour évaluer le coefficient de dispersion D^* , on va chercher à reproduire les courbes de référence à l’aide d’un modèle 1D à l’échelle macroscopique (ou échelle de Darcy) en ajustant le coefficient de dispersion D^* . A cette échelle, le transport d’une concentration C peut être résolu à l’aide de l’équation suivante :

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \varepsilon D^* \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3)$$

Cette équation est proche du transport à l’échelle microscopique avec cependant la porosité ε et le coefficient de dispersion D^* .

Le modèle 1D de transport permettant de résoudre cette équation sera développé sous COMSOL. Pour ceci, on génère un milieu 1D, un segment de longueur équivalente à l’échantillon ou on imposera une condition de Dirichlet en entrée et une condition de flux libre en sortie (zero flux dans COMSOL). L’écoulement moyen étant homogène (vitesse de Darcy U constante), il n’est pas nécessaire de résoudre cette équation, seule l’équation de convection-diffusion ci-dessus sera résolue.

Une corrélation pourra être trouvée en utilisant les valeurs D^* en fonction de U pour estimer la valeur du coefficient pour n’importe quelle valeur de U .

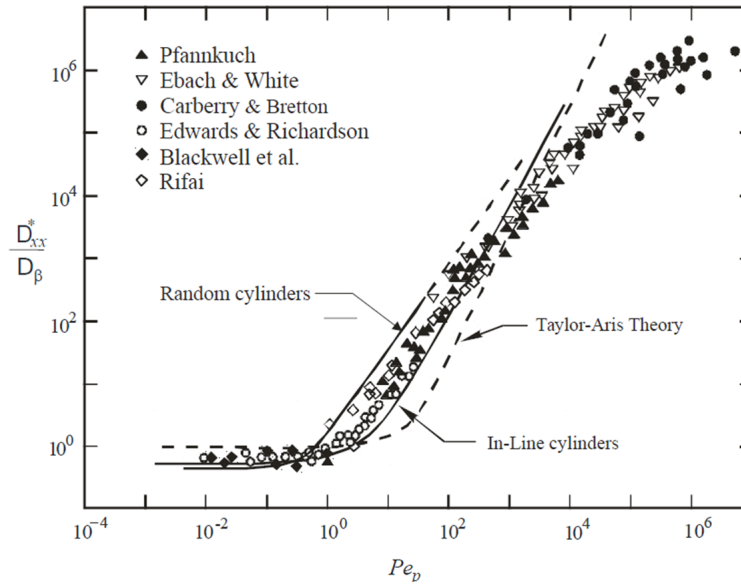


FIGURE 3 – Estimation du coefficient de dispersion longitudinal en fonction du nombre de Péclet

Quelques astuces.... On cherchera à évaluer le coefficient de dispersion pour un nombre de Péclet intermédiaire, 1.25 ou 12.5. Pour une première estimation du coefficient de dispersion, vous pouvez vous reporter à la Figure 3 où sont données les évolutions des coefficients de dispersion longitudinaux (sens de l'écoulement) en fonction du nombre de Péclet. Il est rappelé que la dispersion effective à bas nombre de Péclet est plus faible que la diffusion moléculaire. Ceci est dû à la tortuosité du milieu qui pénalise le transport et ralentit la diffusion. Lorsque le nombre de Péclet augmente, alors la dispersion est une fonction de Pe^γ avec $1 < \gamma < 2$.

Pour imposer un créneau en entrée, définissez la relation suivante :

if (t<tps ,1 ,0)

2 Caractérisation d'un milieu poreux dit hétérogène

On considère dans cette partie le second échantillon de milieu poreux dit « hétérogène » présentant une zone rapide (un canal sinusoidal) et une zone lente (enchevêtrement de cylindres rapprochés), voir Figure 4. De la même façon que pour le scénario 1, on cherche à effectuer un changement d'échelle des propriétés principales (perméabilité et dispersion) en utilisant le fichier **echantillon_gamma.mph**.

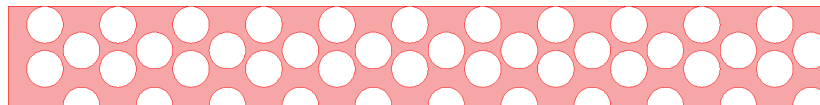


FIGURE 4 – Milieu “hétérogène” γ : Les dimensions sont $L=0.05625m, l = 0.00675m$, les cylindres ont un diamètre de $0.0025m$

2.1 Calcul de la perméabilité K

Identique à la section 1.1.

2.2 Tracé des courbes de référence

Identique à la section 1.3.

2.3 Détermination de valeurs de dispersion $D^*(U)$

On cherchera dans un premier temps à caractériser la dispersion du milieu à l'aide du modèle 1D construit précédemment (section 1.4). Néanmoins, pour ce second échantillon, on peut observer sur les courbes d'éluion $C(t)$ un effet du double milieu avec une zone de transport très lent (partie supérieure de l'échantillon) et une zone de transport rapide (partie inférieure). Le modèle 1D proposé dans la partie précédente (dit modèle à « équilibre local ») ne permet pas de capturer ce phénomène et il est nécessaire de recourir à un modèle à deux équations, le modèle dit « à non-équilibre local ».

2.4 Détermination des coefficients du modèle à non-équilibre local

On considère dans le modèle à non-équilibre local qu'il existe deux zones distinctes et il est donc nécessaire de suivre 2 concentrations, une concentration dans la phase mobile C_M occupant la porosité mobile ε_M et une concentration dans la phase immobile C_{im} occupant la porosité "immobile" ε_{im} , avec l'égalité naturelle $\varepsilon = \varepsilon_M + \varepsilon_{im}$. Le système à deux équations s'écrit :

$$\frac{\varepsilon_M \partial C_M}{\partial t} + V \frac{\partial C_M}{\partial x} = \varepsilon_M D^* \frac{\partial^2 C_M}{\partial x^2} - \alpha(C_M - C_{im}) \quad (4)$$

$$\frac{\varepsilon_{im} \partial C_{im}}{\partial t} = \alpha(C_M - C_{im}) \quad (5)$$

L'échange entre les deux zones est caractérisé par une vitesse d'échange α qu'il convient de déterminer (dépendante ou non de la vitesse, à vous d'explorer l'espace de paramètres). On pourra repartir du modèle 1D construit précédemment en ajoutant la seconde équation et il sera nécessaire de déterminer 3 coefficients pour chaque vitesse : D^* , α et ε_M (car $\varepsilon_{IM} = \varepsilon - \varepsilon_M$). A l'exception de la dispersion qui est fortement variable en fonction de la vitesse, on cherchera à garder le plus constant possible les paramètres ε_M et α . Il sera cependant nécessaire de faire des ajustements pour certaines configurations, pour des nombres de Péclet très grands ou très petit. A vous de proposer un modèle permettant une modélisation correcte de la gamme étudiée.

Quelques astuces.... Si vous voulez programmer le terme $\alpha(C_M - C_{im})$, il convient d'écrire dans le terme R d'une équation de convection/diffusion : $if(C_M > 0, \alpha(C_M - C_{im}), 0)$. Cela évite les oscillations numériques lorsque C_M devient légèrement inférieur à 0 en cours de simulation.

Pour faciliter la calibration du modèle, on peut procéder par étape. On peut par exemple ajuster la position temporelle du pic de concentration en ajustant les porosités ε_M et ε_m , puis le coefficient D^* pour ajuster l'étalement et enfin le coefficient α pour la concentration résiduelle en fin d'évènement.

3 Guide COMSOL

3.1 Pour simuler un transport sur un échantillon

Pour chaque configuration (nombre de Péclet) :

1. Imposer en entrée la vitesse permettant d'obtenir le nombre de Péclet reporté dans le tableau.
2. Résoudre l'écoulement (stationnaire) puis le transport dans le milieu par convection-diffusion :
 - (a) le temps du créneau dans COMPONENT 1 -> LAMINAR FLOW -> INLET 1 et dans COMPONENT 1 -> TRANSPORT OF DILUTED SPECIES -> INFLOW 1.
 - (b) le temps de simulation dans STUDY 1 -> STEP 2 : TIME DEPENDENT

- (c) Créer la Table temporelle de la concentration moyenne en sortie RESULTS -> DERIVED VALUES -> LINE AVERAGE 1 (RIGHT CLICK) -> EVALUATE
 - (d) Visualiser la courbe en sortie du domaine RESULTS -> 1D PLOT GROUP 1 -> TABLE GRAPH 1
3. Utiliser la formulation à équilibre local du modèle 1D macroscopique et déterminer le coefficient de dispersion permettant d'observer le signal de sortie $Q_C(t)$.