

CHAPITRE V

ÉTUDE DU PROBLÈME GÉOLOGIQUE GÉNÉRAL

V.1- Position du problème

V.2- Hyperbolicité et stabilité thermodynamique

V.2.1- Valeurs propres et vecteurs propres du système

V.2.2- Signes des valeurs propres

V.3- Détermination des courbes d'ondes

V.3.1- Ondes de détente

V.3.2- Ondes de chocs

V.4- Cas du problème limite ($a = 0$)

V.5- Résolution numérique

Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude mathématique du modèle obtenu au chapitre II associé à l'une des isothermes du chapitre I. Dans une première partie, nous vérifions la condition de stabilité thermodynamique et l'hyperbolicité du système. Nous exprimons ensuite les valeurs propres (qui sont des vitesses de concentration généralisées) et leurs signes (qui indiquent le sens du déplacement du front réactionnel). Et nous déterminons aussi les états par lesquelles passe le système et qui sont des courbes de détente ou des courbes de choc.

V.1- Position du problème

Nous nous proposons d'étudier le système (2.44) dans le cas où la solution solide est formée de trois pôles ($M = 3$). Pour simplifier les notations, on pose :

$$\begin{cases} x_1 = u \\ x_2 = v \\ x_3 = w \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} F_1 = F \\ F_2 = G \\ F_3 = H \end{cases}$$

Le système d'équations s'écrit alors:

$$(P) \begin{cases} \text{Chercher } (u, v, w) \in \mathbb{R}^{+3} \text{ tq :} \\ \partial_t u + \partial_x F(u, v, w) = 0 \\ \partial_t v + \partial_x G(u, v, w) = 0 \\ \partial_t w + \partial_x H(u, v, w) = 0 \\ u + v + w = 1 \end{cases} \quad (5.1)$$

où u , v et w désignent les fractions molaires des constituants de la phase solide et F , G et H les fonctions isothermes (à un facteur près) régissant le passage des constituants entre le solide et le fluide ($F + G + H = 1$). Si l'un des constituants est totalement absent du système (par exemple $w = 0$ et par suite $H = 0$) alors il est plus commode d'utiliser le modèle à un constituant (cf. chap. III).

Le domaine est schématisé par le triangle ci-après (figure 5.1) et sur lequel on représentera les états du système. Il est donnée par l'équation suivante :

$$T = \{(u, v, w) \in (\mathbb{R}^+)^3 / u + v + w = 1\} \quad (5.2)$$

Soit D la projection du triangle T sur le plan (u, v) .

$$D = \{(u, v) \in \mathbb{R}^{+2} / u + v \leq 1\}. \quad (5.3)$$

On obtient alors deux constituants indépendants :

$$u \geq 0, v \geq 0 \quad \text{et} \quad u + v \leq 1.$$

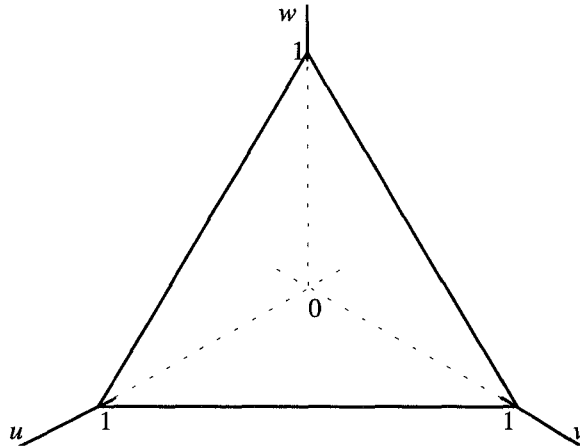


Figure 5.1 : Triangle de composition

Pour résoudre complètement (P), il suffit de résoudre le système (S) suivant :

$$(S) \begin{cases} \text{Chercher } (u, v) \in D \text{ tq :} \\ \partial_t u + \partial_x F(u, v) = 0 \\ \partial_t v + \partial_x G(u, v) = 0 \end{cases} \quad (5.4)$$

Stabilité thermodynamique

De point de vue thermodynamique les dérivées partielles de F et G doivent vérifier les deux conditions suivantes ([12]) :

$$1) F_u > 0 \text{ et } G_v > 0 \quad (5.5)$$

$$2) F_v \cdot G_u > 0 \quad (5.6)$$

V.2- Hyperbolicité et stabilité thermodynamique

L'isotherme exprimée au chapitre II (équation (2.34) et (2.52)) a la forme suivante :

$$(Iso.1) \quad \begin{cases} F(u, v) = \frac{f(u, v)}{D} \\ G(u, v) = \frac{g(u, v)}{D} \\ H(u, v) = \frac{h(u, v)}{D} \end{cases} \quad (5.7)$$

où : $D = f(u, v) + g(u, v) + h(u, v)$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} f(u, v) = Ku e^{a(1-u-v)v} \\ g(u, v) = Lv e^{a(1-u-v)u} \\ h(u, v) = Mwe^{auv} \end{cases} \quad (5.8)$$

a, K, L et M sont des constantes strictement positives telles que :

$$a \in [0,1], \quad K < L < M \quad \text{et} \quad \frac{M}{K} > \frac{M}{L} > 1 + a. \quad (5.9)$$

Lemme

Les dérivées partielles des fonctions F et G vérifient :

$$i) \quad F_u > F_v > 0 \quad (5.10)$$

$$ii) \quad G_v > G_u > 0 \quad (5.11)$$

Ces deux conditions nous permettent de dire qu'on a *la Stabilité thermodynamique* au sens de Glueckauf ([12]).

Remarque

Il suffit de montrer la première inégalité. l'autre inégalité est évidente et découle de la précédente. Il suffit d'échanger les rôles de u et v et ceux de K et L .

V.2.1- Valeurs propres du système

Soit $\lambda = \lambda(u, v)$ une valeur propre de $A(u, v)$, elle vérifie :

$$\lambda^2 - \lambda(F_u + G_v) + F_u G_v - F_v G_u = 0 \quad (5.12)$$

Proposition:

Si les constantes a, K, L et M sont telles que :

$$0 \leq a < 1 \text{ et } \frac{M}{K} > \frac{M}{L} > 1 + a \quad (5.13)$$

alors le système (S) est strictement hyperbolique.

En effet :

Le système est hyperbolique si les racines de l'équation (5.12) sont réelles et distinctes.

-On a :

$$\Delta = (F_u + G_v)^2 - 4(F_u G_v - F_v G_u) = (F_u - G_v)^2 + 4F_v G_u \quad (5.14)$$

Or si $0 \leq a < 1$ et $\frac{M}{K} > \frac{M}{L} > 1 + a$ alors F_v et G_u sont strictement positives d'après le lemme.

D'où le résultat.

V 2.2- Signes des valeurs propres du système

Les valeurs propres de $A(u, v)$ sont :

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}[(F_u + G_v) - \sqrt{\Delta}] \quad (5.15)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2}[(F_u + G_v) + \sqrt{\Delta}] \quad (5.16)$$

Où Δ est donné par les équations (5.14).

Proposition

Les deux valeurs propres λ_1 et λ_2 sont positives.

En effet:

La valeur propre λ_2 est strictement positive (d'après le lemme). De même λ_1 est strictement positive car d'après le lemme on a :

$$4(F_v G_u - F_u G_v) \leq 0 \quad (5.17)$$

et par suite

$$(F_u + G_v)^2 > (F_u + G_v)^2 + 4(F_v G_u - F_u G_v)$$

et puisque toutes les dérivées partielles de F et G sont positives alors on a :

$$(F_u + G_v) > \sqrt{(F_u + G_v)^2 + 4(F_v G_u - F_u G_v)}$$

et par suite $\lambda_1 > 0$.

V.2.3- Vecteurs propres du système

Les vecteurs propres à droite r^i sont solution de :

$$A(u, v).r^i(u, v) = \lambda(u, v)r^i(u, v) \quad i = 1, 2. \quad (5.18)$$

On peut prendre ces vecteurs propres r^i sous la forme suivante :

$$r^i(U) = (-1)^{i+1} \begin{pmatrix} 1 \\ a_i \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

$$\text{avec} \quad a_i = \frac{G_u}{\lambda_i - G_v} = \frac{\lambda_i - F_u}{F_v} \quad (5.20)$$

(la dernière égalité de (5.20) vient du fait que λ_i est valeur propre)

On normalise le vecteur $r_i(U)$ en $r_0^i(U)$ par :

$$r_0^i(U) = \alpha_i(U).r^i(U) \quad \text{tq} \quad \nabla \lambda_i(U).r_0^i(U) = 1 \quad (5.21)$$

V.3- Courbes d'ondes

V.3.1- Courbes de détente

Par définition, les invariants de Riemann W_i sont solution de :

$$\nabla W_i . r^i = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial W_i}{\partial u} + a_i \frac{\partial W_i}{\partial v} = 0 \quad i = 1, 2. \quad (5.22)$$

Or une onde de i -détente est une courbe dans le plan (u, v) le long de laquelle le i -invariant de Riemann reste constant. Donc d'après le théorème des fonctions implicites on a :

$$v = v(u) \quad (5.23)$$

W_i vérifie :

$$W_i(u, v) = Cste \Leftrightarrow dW_i = 0$$

$$\text{et } \partial_u W_i . du + \partial_v W_i . dv = 0$$

Donc on peut exprimer v comme fonction de u :

$$\frac{dv}{du} = - \frac{\partial_u W_i}{\partial_v W_i}$$

Donc d'après (5.22) , on déduit que sur la $i^{\text{ème}}$ détente on a :

$$\frac{dv}{du} = a_i = \frac{G_u}{\lambda_i - G_v} = \frac{\lambda_i - F_u}{F_v} \quad (5.24)$$

Déterminer le sens des variations de la $i^{\text{ème}}$ détente revient à déterminer le signe de a_i .

Proposition

La courbe $v = v(u)$ de la 1-détente est décroissante et celle de la 2-détente est croissante.

En effet :

Les dérivées partielles de F et de G vérifient :

$$F_v > 0 \text{ et } G_u > 0 \text{ et par suite } F_v G_u > 0$$

$$\text{et on a : } \lambda_1 - G_v = \frac{1}{2}[(F_u - G_v) - \sqrt{\Delta}] = \frac{1}{2}[(F_u - G_v) - \sqrt{(F_u - G_v)^2 + 4F_v G_u}] < 0$$

et $G_u > 0$ et par suite a_1 est négatif

$$\lambda_2 - G_v = \frac{1}{2}[(F_u - G_v) + \sqrt{\Delta}] = \frac{1}{2}[(F_u - G_v) + \sqrt{(F_u - G_v)^2 + 4F_v G_u}] > 0$$

et $G_u > 0$ et par suite a_2 est positif.

V.3.2- Courbes de choc

Soit $x = x(t)$ une courbe le long de laquelle la solution est discontinue (figure 5.2). Les courbes de choc doivent satisfaire la relation de Rankine-Hugoniot suivante :

$$\begin{cases} F(u, v) - F(u_0, v_0) = \sigma(u - u_0) \\ G(u, v) - G(u_0, v_0) = \sigma(v - v_0) \end{cases} \quad (5.25)$$

où $\sigma = \sigma(u, v, u_0, v_0)$ est la vitesse du choc entre les deux états (u, v) et (u_0, v_0) .

Les deux équations de (5.25) nous donnent :

$$\sigma = \frac{F(u, v) - F(u_0, v_0)}{u - u_0} = \frac{G(u, v) - G(u_0, v_0)}{v - v_0} \quad (5.26)$$

En éliminant σ entre les deux équations de (5.25), on obtient :

$$(u - u_0)(G(u, v) - G(u_0, v_0)) = (v - v_0)(F(u, v) - F(u_0, v_0)) \quad (5.27)$$

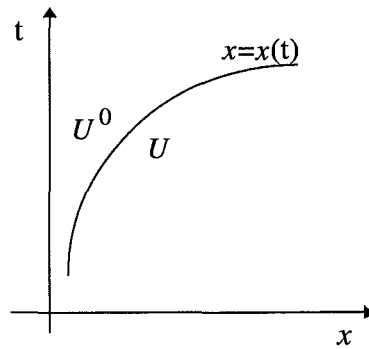


Figure 5.2

Remarque

F et G ayant des expressions compliquées, on ne peut pas déterminer explicitement les courbes de choc dans le plan (u, v) . On peut les déterminer numériquement par les deux façons suivantes.

a)- sous forme différentielle

En différentiant l'équation (5.27) par rapport à u , on obtient :

$$\frac{dv}{du} = \begin{cases} s(u, v) = \frac{G(u, v) - G(u_0, v_0) + (u - u_0)G_u + (v - v_0)F_u}{F(u, v) - F(u_0, v_0) + (v - v_0)F_v - (u - u_0)G_v} & \text{si } u \neq u_0 \\ a_i & \text{si } u = u_0 \end{cases} \quad (5.28)$$

En résolvant l'E.D, on obtient les deux courbes de choc.

Remarque

La valeur de la dérivée calculée en u_0 doit être la même pour le i -choc et la i -détente car entre ces deux courbes, il y a un raccordement C^2 en $(\bar{u}_0, v_0)$.

b)- Résolution d'un système non linéaire

On fixe dans l'équation (5.27) l'une des deux variables u ou v à une valeur donnée par la discrétisation en pas uniforme de l'intervalle $[0, 1]$. On aura alors une équation non linéaire à une seule inconnue. Ensuite on détermine cette inconnue par la méthode du point fixe ou la méthode de Newton de telle sorte que :

$$u, v \in [0, 1] \text{ et } u + v \leq 1$$

En balayant l'intervalle $[0, 1]$, on obtient les deux courbes de choc en résolvant à chaque pas de discrétisation le système non linéaire.

Proposition

Soit (u_0, v_0) un état donné tel que $u_0 + v_0 = 1$ alors les états (u, v) qu'on peut lier à (u_0, v_0) à droite par 1-choc sont donnés par la droite d'équation :

$$u + v = 1 \quad (5.29),$$

de vitesse σ_1 donnée par :

$$\sigma_1 = \frac{KL}{(L + (K - L)u)(L + (K - L)u_0)} \quad (5.30)$$

$$\text{et on a : } \frac{K}{L} < \sigma_1 < \frac{L}{K} \quad (5.31)$$

La vitesse du 2-choc est indépendante de u_0 et v_0 et vérifie :

$$H(u, v) = \sigma_2 w \quad (5.32)$$

En effet : si (u_0, v_0) est tel que $u_0 + v_0 = 1$ alors $H(u_0, v_0) = 0$.

Sur un choc on a la relation de Rankine-Hugoniot suivante :

$$F(u, v) - F(u_0, v_0) = \sigma(u - u_0)$$

$$G(u, v) - G(u_0, v_0) = \sigma(v - v_0)$$

En sommant membre à membre les deux égalités précédentes et en tenant compte que :

$$F(u, v) + G(u, v) + H(u, v) = 1 \quad (5.33)$$

on obtient :

$$H(u, v) = \sigma(1 - u - v) = \sigma w \quad (5.34)$$

Deux cas se présentent :

cas 1 si $w = 0$ alors la relation précédente est vérifiée et on a la courbe de 1-choc: $u + v = 1$.

La vitesse est déterminée par l'une des équations de R.H :

$$\sigma_1 = \frac{KL}{(Ku + Lv)(Ku_0 + Lv_0)}$$

cas 2 si $w \neq 0$ alors La vitesse de la courbe de 2-choc est indépendante de u_0 et v_0 et vérifie :

$$0 < \sigma_2 w < 1 \quad (5.35)$$

Remarque

Puisque les constituants de la solution $(u, v$ et $w)$ jouent un rôle symétrique, la proposition précédente nous assure que la solution du problème est toujours dans le domaine d'étude :

$$T = \{ (u, v, w) \in \mathbb{R}^{+3} / u + v + w \leq 1 \} \text{ (figure 5.3).}$$

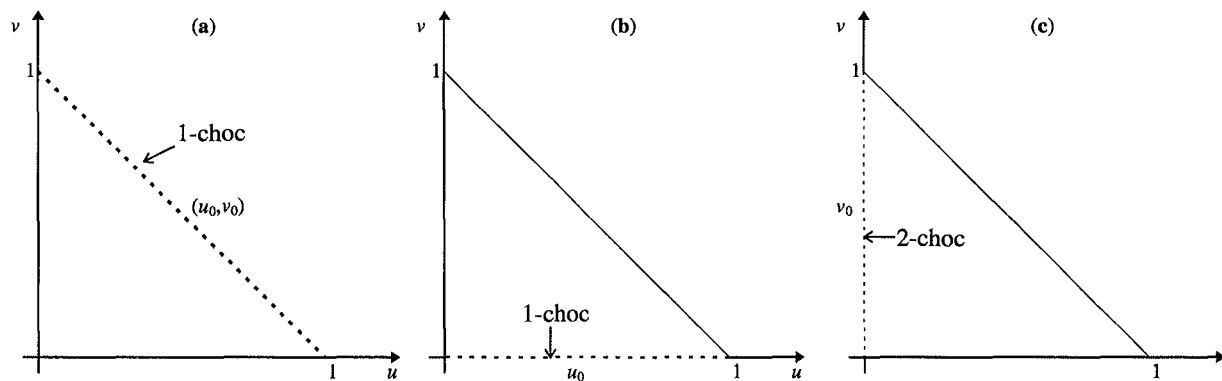


Figure 5.3 := les états (u,v) qu'on peut lier à un état sur la frontière du domaine par un choc à droite.

(a) $u + v = 1$ (ou $w = 0$) (b) $u + w = 1$ (ou $v = 0$) (c) $v + w = 1$ (ou $u = 0$)

V.3.3- Résolution du problème de Riemann : application au problème

Cette section se propose de déterminer numériquement les courbes d'ondes (chocs ou détente) qui forment la solution du problème de Riemann. Pour le problème géologique que nous étudions, ce cas correspond à la transformation d'une roche homogène par un fluide de composition constante en déséquilibre avec cette roche. Notre application porte sur la transformation du grenat et du pyroxène calcique.

La solution du problème d'interaction fluide-minéral dépend fortement de la composition initiale du minéral, du paramètre a de la solution solide et plus particulièrement des rapports des constantes d'équilibre. En faisant une étude comparative du modèle général ($a \neq 0$) et du cas ($a = 0$) étudié dans la section suivante et dans un cas particulier au chapitre IV, nous remarquons que :

- le paramètre a guide le caractère plus ou moins rectiligne des courbes de choc et de détente.
- les rapports des constantes d'équilibre influencent l'orientation de ces courbes.

Sur les figures 5.4 - 5.7, nous présentons quatre exemples d'expériences numériques montrant l'évolution de la composition des grenats dans le triangle grossulaire - spessartite - almandin ou celle des pyroxènes dans le triangle diopside - hedenbergite - johannsenite. Le minéral de départ (grenat ou pyroxène) est indexé par la lettre (d) et le minéral en équilibre avec le fluide métasomatique par la lettre (g). Les paramètres utilisés pour ces expériences sont indiqués sur leurs figures correspondantes.

Pour une validation du modèle étudié et une confrontation aux observations géologiques, on se reportera au chapitre VII.

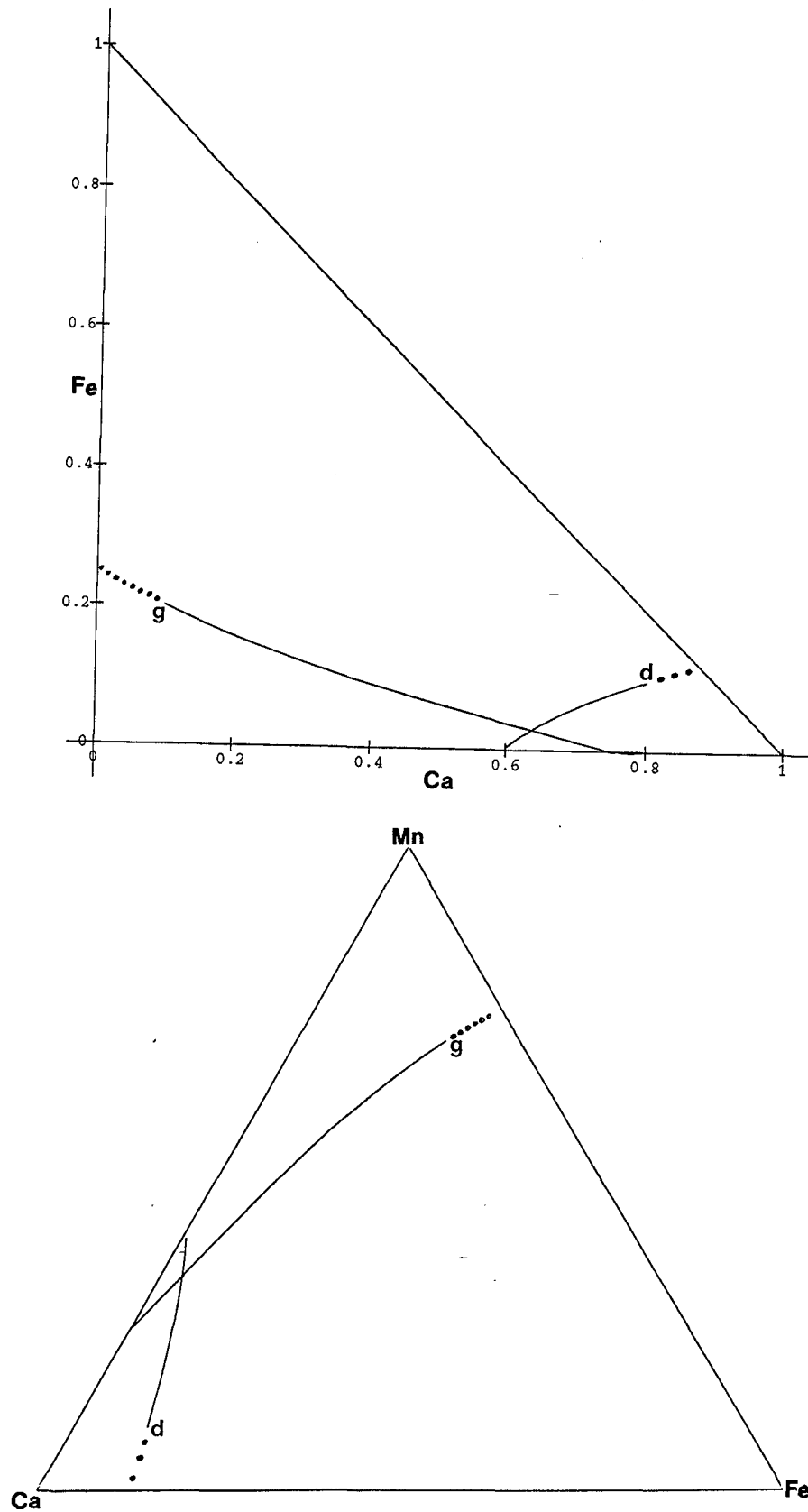


Figure 5.4 courbes d'ondes montrant l'évolution de la composition des grenats et reliant l'état gauche (g) et l'état droite (d). (— = détente, = choc). Les paramètres utilisés sont les suivants : $\alpha = 0.9$, $K = 1$, $L = 2$, $M = 6$

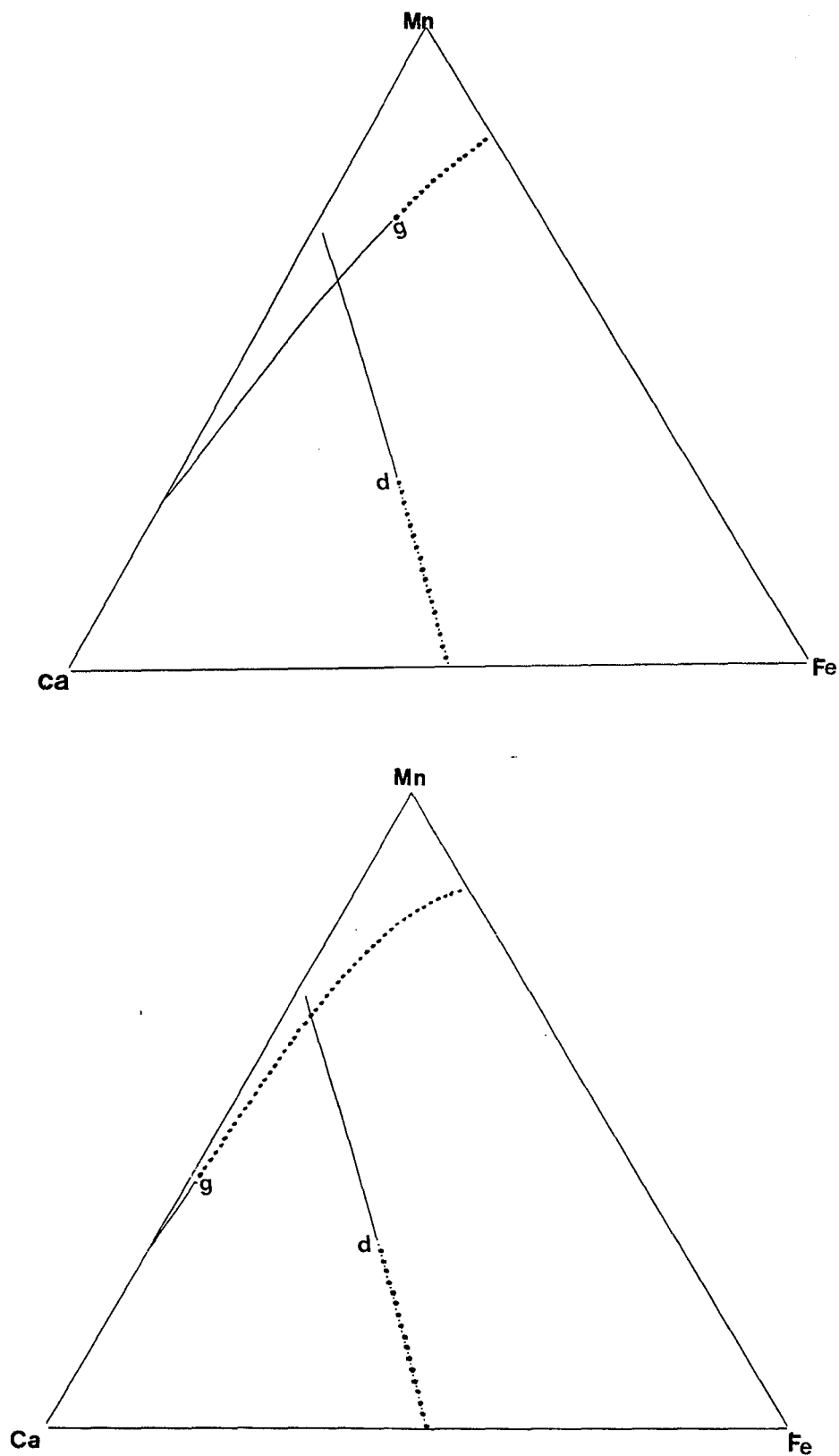


Figure 5.5 Courbes d'ondes liant l'état gauche (g) et l'état droite (d). (— = détente, = choc). Les paramètres utilisés sont les suivants (5.5-a) : $a = 0.9$, $K = 1$, $L = 2.$, $M = 6$; (5.5-b) : $a = 0.9$, $K = 1$, $L = 2.$, $M = 6$. On remarque que la courbe de 1-onde change avec la position de u^2

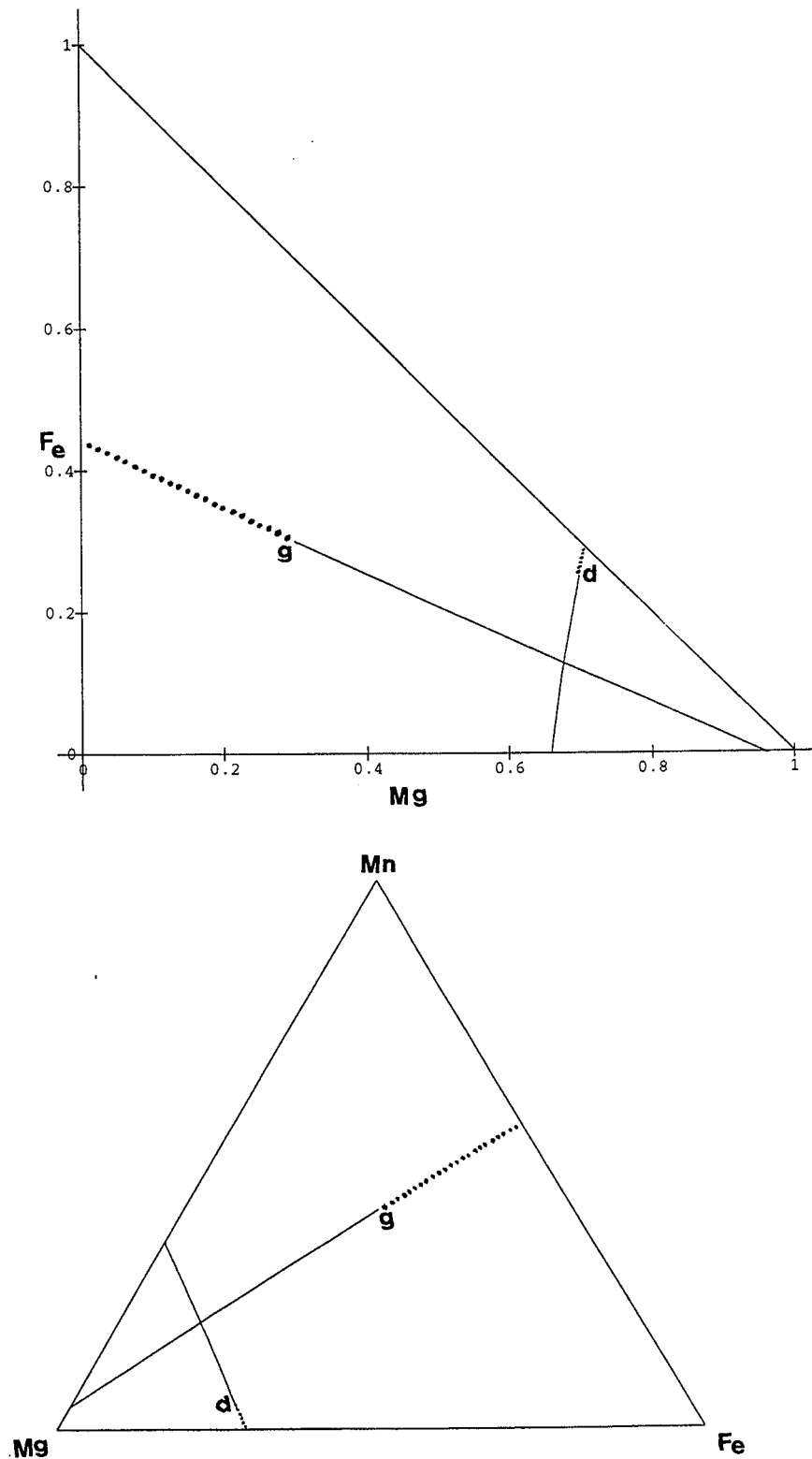


Figure 5.6 Courbes d'ondes liant l'état gauche (g) et l'état droite (d) montrant l'évolution de la composition des pyroxènes. (— = détente, = choc). Les paramètres utilisés sont les suivants : $a = 0.9$, $K = 1$, $L = 10$, $M = 40$. On remarque, en comparaison avec les figures 5.4 et 5.5, les rapports M/K et L/K influencent l'orientation des courbes d'ondes mais aussi le caractère plus ou moins rectiligne de ces courbes.

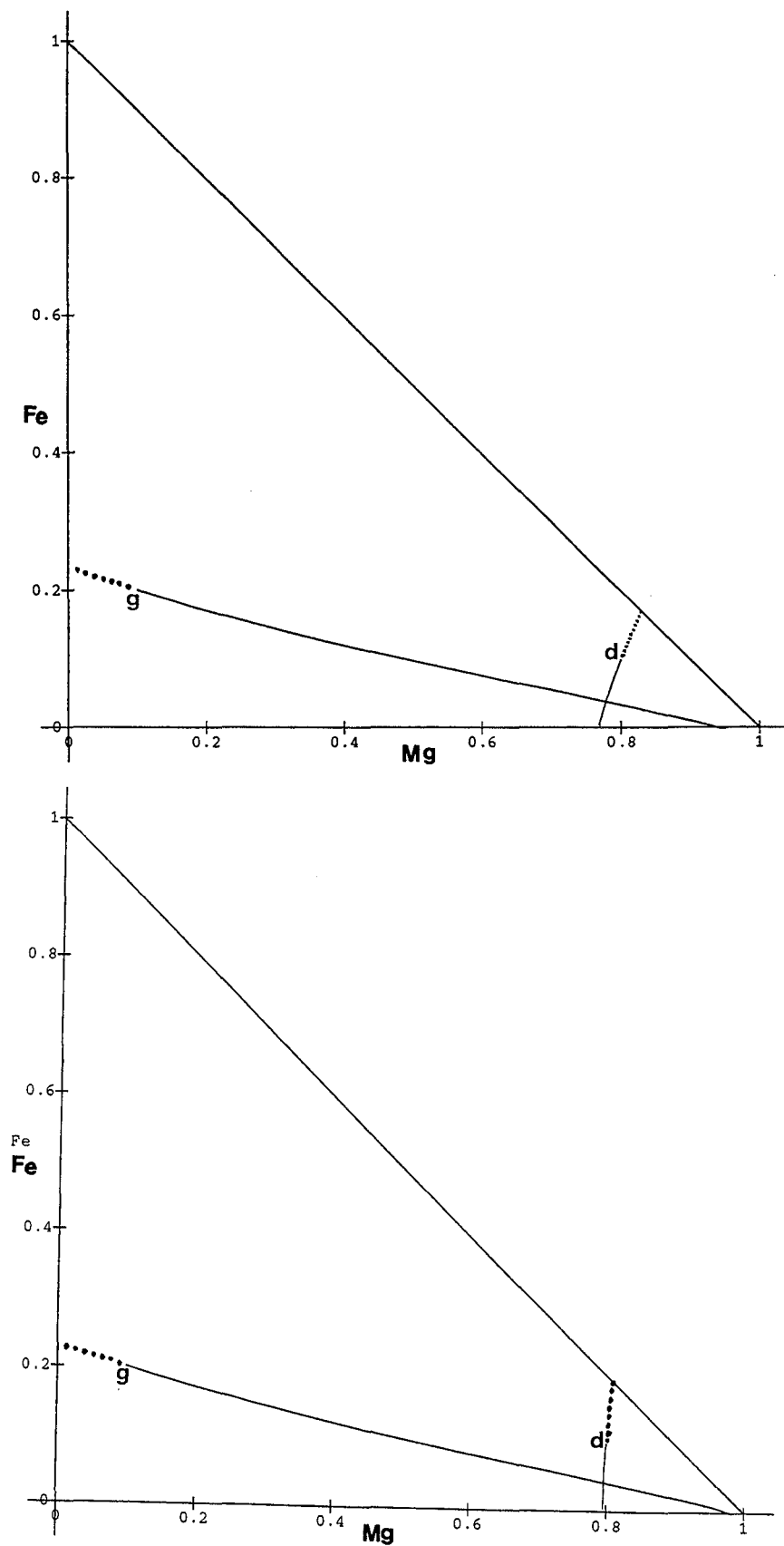


Figure 5.7 Courbes d'ondes liant l'état gauche (g) et l'état droite (d). (— = détente, = choc).
 Les paramètres utilisés sont les suivants : (5.7-a) $a = 0.9$, $K = 1$, $L = 10$, $M = 50$; (5.7-b) $a = 0.9$, $K = 1$, $L = 30$,
 $M = 50$. Mêmes remarques que la figure 5.6.

V.4- Cas du problème limite ($a = 0$)

Dans ce qui suit, on suppose que la phase solide est constituée de M constituants indépendants ($M \geq 2$).

Nous avons vu au § I.4.4 que, dans le cas où $a = 0$, l'isotherme obtenue peut se mettre sous la forme d'une isotherme de Langmuir. Le problème associé à un cas particulier de cette isotherme, a été étudié au chapitre IV. Dans ce dernier, nous avons montré que les courbes de choc et de détente sont des droites. Dans la section qui suit, on se propose de montrer que ce résultat est aussi vrai dans un cadre plus général. Sous forme matricielle la fonction isotherme s'écrit (cf. Chapitre I) : $C = F(U)$. Sa $i^{\text{ème}}$ composante est donnée par :

$$C_i^f = F_i(x_1, \dots, x_{M-1}) = N_i \frac{\alpha_i x_i}{1 - \sum_{i=1..M-1} \alpha_i x_i}$$

avec
$$N_i = \frac{1 - \alpha_i}{\alpha_i} \text{ et } 0 < \alpha_i < 1.$$

V.4.1- Modèle simplifié à deux constituants indépendants

En effectuant un changement de variables, le système à résoudre s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_\tau u + \partial_x F(u, v) = 0 \\ \partial_\tau v + \partial_x G(u, v) = 0 \end{cases}$$

où
$$\begin{cases} F(u, v) = K \frac{u}{1 - u - v} \\ G(u, v) = L \frac{v}{1 - u - v} \end{cases} \quad K \text{ et } L \text{ sont des constantes strictement positives.}$$

Proposition

Les courbes d'une i-détente et d'un i-choc sont des droites. En plus ces courbes sont confondues.

En effet:

Sur les détente, on a vu en (5.22) qu'on peut exprimer v comme fonction de u : $v = v(u)$.

posons :

$$X = \frac{dv}{du} \quad (5.36)$$

On remarque que $X_1 = a_1$ et $X_2 = a_2$, définies en (5.24), sont solution de l'équation :

$$F_v X^2 - [G_v - F_u]X - G_u = 0 \quad (5.37a)$$

En remplaçant dans (5.37a) les dérivées partielles de F et G par leur expressions on obtient :

$$KuX^2 - [L(1-u) - K(1-v)]X - Lv = 0 \quad (5.37b)$$

En dérivant (5.37b) par rapport à u on obtient :

$$K(X^2 + 2uXX'_u) - [L(1-u) - K(1-v)]X'_u - [-L + KX]X - LX = 0 \quad (5.38)$$

En réarrangeant les termes de (5.38), on aboutit à :

$$[2KuX - L(1-u) + K(1-v)]X'_u = 0 \quad (5.39)$$

Or d'après les équations (5.15), (5.16) et (5.24) on a :

$$2F_v X - (G_v - F_u) = \pm\sqrt{\Delta}$$

Et puisque le système est strictement hyperbolique ($\Delta \neq 0$) alors

$$[2F_v X - (G_v - F_u)] = [2KuX - L(1-u) + K(1-v)] \neq 0 \text{ et } X'_u = 0$$

et par conséquent, sur la i -détente, la fonction $v = v(u)$ est une fonction linéaire de u dont la pente est donnée par :

$$X_i = \frac{\lambda_i(u_0, v_0) - F_u(u_0, v_0)}{F_v(u_0, v_0)} \equiv a_i(u_0, v_0) \quad i=1,2 \quad (5.40)$$

Donc la courbe de i -détente est une droite donnée par :

$$v - v_0 = a_i(u_0, v_0)(u - u_0) \quad (5.41)$$

Montrons que ce résultat est aussi vrai pour les chocs. En effet :

En exprimant la relation de Rankine-Hugoniot et en éliminant σ , on obtient (5.42):

$$Ku_0(v - v_0)^2 + (K(1 - v_0) - L(1 - u_0))(v - v_0)(u - u_0) - Lv_0(u - u_0)^2 = 0$$

Posons $X = \frac{v - v_0}{u - u_0}$. L'équation (5.42) devient :

$$Ku_0X^2 + (K(1 - v_0) - L(1 - u_0))X - Lv_0 = 0 \quad (5.43)$$

dont les racines sont données par :

$$X_i = \frac{\lambda_i(u_0, v_0) - F_u(u_0, v_0)}{F_v(u_0, v_0)} \equiv a_i(u_0, v_0) \quad i=1,2 \quad (5.44)$$

Donc la courbe de i -choc est une droite donnée par :

$$v - v_0 = a_i(u_0, v_0)(u - u_0) \quad (5.45)$$

Nous remarquons, d'après (5.41) et (5.45), que la courbe de i -choc et celle de i -détente sont confondues (elles ont la même équation) ■

Remarque

Du point de vue théorique, on doit s'attendre à ce résultat, car : il y a au moins un raccordement C^2 entre un i -choc et une i -détente et si leur courbes sont des droites alors elles sont confondues ■

Expériences numériques

Dans le cas où les paramètres de la solution solide sont identiquement nuls, nous présentons, sur les figures 5.8 et 5.9, deux exemples d'expériences numériques montrant l'évolution de la composition des grenats dans le triangle grossulaire - spessartite - almandin ou celle des pyroxènes dans le triangle diopside - hédénbergite - johannsénite. Le minéral de départ (grenat ou pyroxène) est indexé par la lettre (d) et le minéral en équilibre avec le fluide métasomatique par la lettre (g). Les paramètres utilisés pour ces expériences sont indiqués sur les figures.

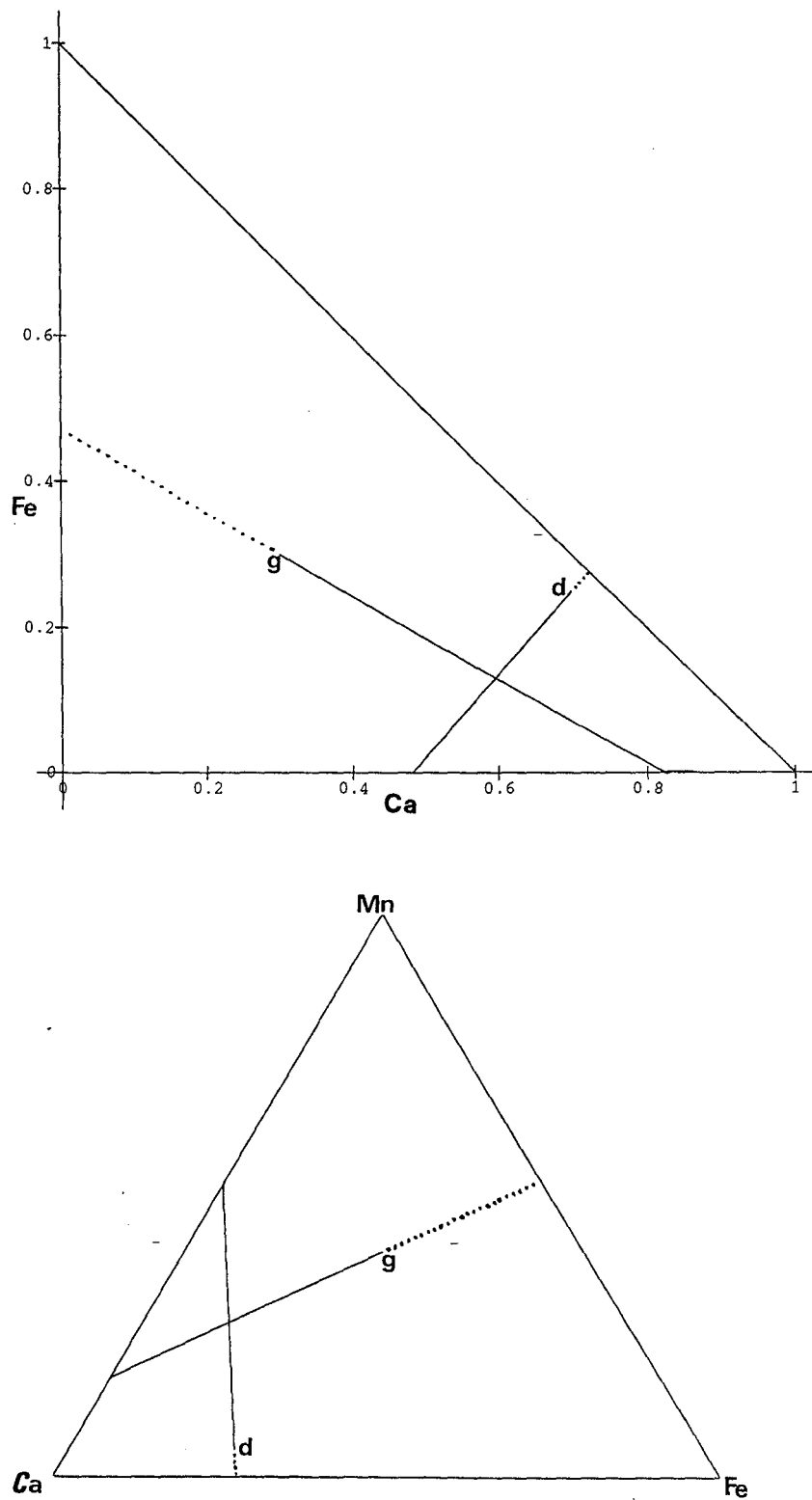


Figure 5.8 Courbes d'ondes liant l'état gauche (g) et l'état droite (d) et montrant l'évolution des grenats dans le cas où $a = 0$ (isotherme de Langmuir). (— = détente, = choc). Les paramètres utilisés sont les suivants : $a = 0, K = 1, L = 2, M = 4$.

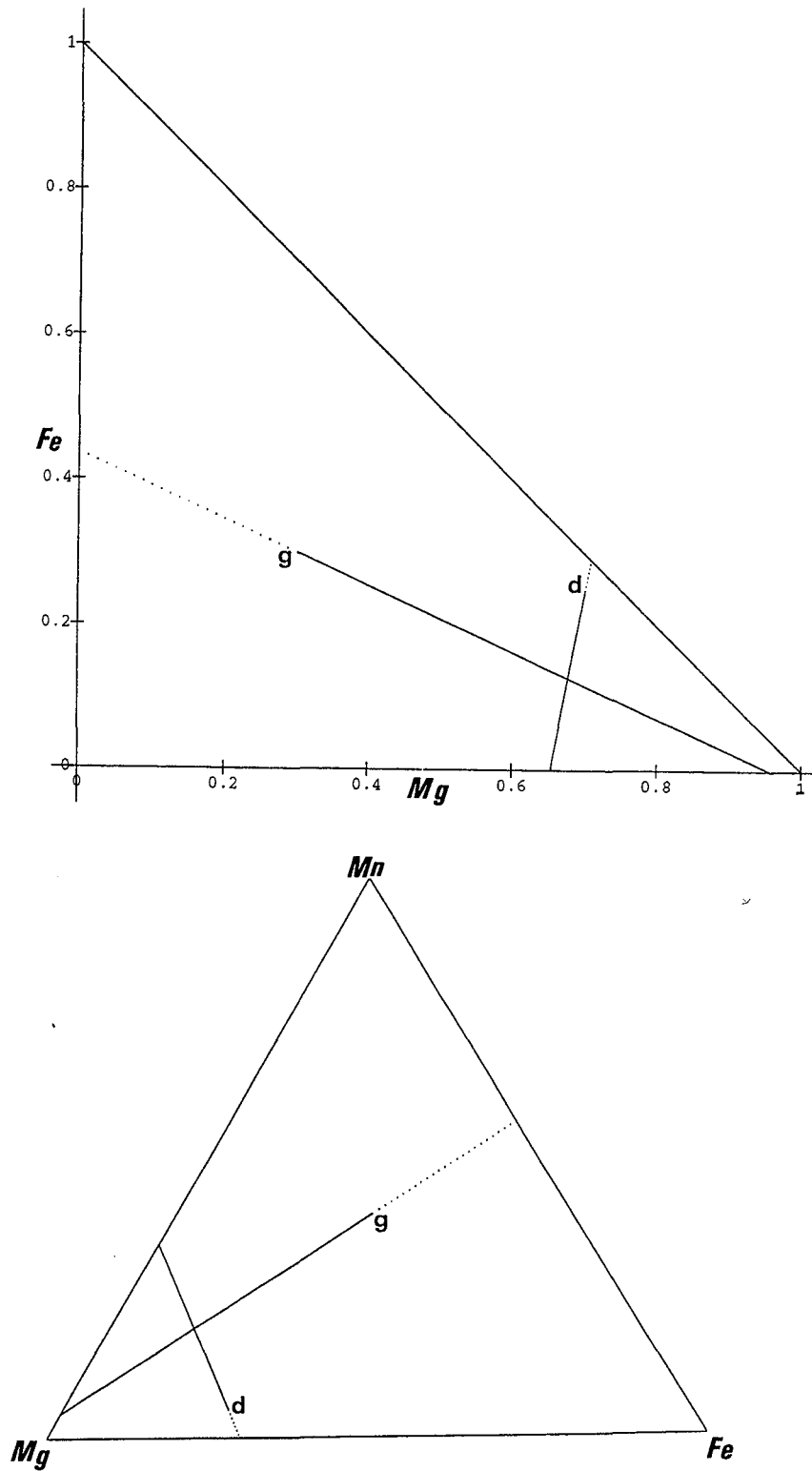


Figure 5.9 Courbes d'ondes liant l'état gauche (g) et l'état droite (d) (mêmes états que la figure 5.8) et montrant l'évolution des pyroxènes dans le cas où $a = 0$ (isotherme de Langmuir). (— = détente, = choc). Les paramètres utilisés sont les suivants : $a = 0$, $K = 1$, $L = 10$, $M = 40$. On remarque que l'orientation de ces courbes change si on fait varier les rapports L/K et M/K .

V.4.2- Modèle général : expression en fonction des concentrations en phase fluide

La fonction isotherme de Langmuir admet de bonnes propriétés mathématiques. En particulier, elle est inversible et son inverse a aussi une forme de Langmuir (voir annexe). Cette propriété nous permet d'exprimer les équations du modèle en terme de concentration en phase fluide. En effet, en faisant le changement de variables $\tau = vt$ et en tenant compte de (2.22), le système (2.10) s'écrit :

$$\partial_x C + \partial_\tau Z(C) = 0 \quad (5.46)$$

où
$$Z(C) = C + \omega F^{-1}(C), \quad (5.47)$$

$$\omega = \frac{(1-\phi)}{\phi B} \quad (5.48)$$

et F^{-1} est la réciproque de F .

Dans (5.46), l'espace et le temps sont inversés par rapport à la forme habituelle des systèmes de lois de conservation. Cependant l'étude mathématique reste la même. La variable C ici représente toujours le flux. Les valeurs propres sont des inverses des vitesses de propagation d'ondes. Comme pour les problèmes de la chromatographie, on peut se donner une donnée d'injection à l'entrée de la roche ($x = 0$) qu'on désigne par $C^I(t)$ et un état initial $C^E(x)$.

Pour une étude complète de ce modèle de la chromatographie associé à l'isotherme de Langmuir, on peut se référer aux travaux de James ([11]) et ceux de Ree & al. ([33]). Les principaux résultats qui sont utiles à notre étude sont énoncés ci-après.

Proposition ([11])

© *les courbes de choc et de détente sont des droites.*

L'espace des états correspondant à ce résultat est celui formé par les concentrations en phase fluide $(C_1, \dots, C_M)$. Montrons que ceci est aussi vrai dans l'espace des états $(x_1, \dots, x_M)$.

Proposition

Dans l'espace des états formé des fractions molaires en phase solide $(x_1, \dots, x_M)$, les courbes d'ondes sont aussi des droites.

Ce résultat est conséquence du corollaire suivant :

Corollaire

L'image d'une droite par la fonction F ou par sa réciproque F^{-1} est une droite.

En effet :

Par changement de variables, on peut se ramener au cas où la fonction F est donnée par :

$$C_i = \frac{x_i}{1 + \sum_{i=1..M-1} x_i} \quad (5.49)$$

Soient x^g un état donné, C^g l'image par F de x^g ($C^g = F(x^g)$) et U^x le vecteur directeur d'une droite passant par x^g . On peut paramétrer cette droite par :

$$x - x^g = \alpha U^x \quad (\alpha \in \mathbb{R})$$

La $i^{\text{ème}}$ composante est donnée par :

$$x_i - x_i^g = \alpha U_i^x \quad i = 1, \dots, M \quad (5.50)$$

En reportant (5.50) dans (5.49), on obtient :

$$C_i = \frac{\alpha U_i^x + x_i^g}{1 + \alpha \sum_{i=1..M-1} U_i^x + \sum_{i=1..M-1} x_i^g}$$

Si $\sum_{i=1..M-1} U_i^x = 0$ alors on a :

$$C_i - C_i^g = \frac{\alpha}{1 + \sum_{i=1..M-1} x_i^g} U_i^x$$

sinon, on normalise U^x en prenant $\sum_{i=1..M-1} U_i^x = 1$ et on a donc :

$$C_i = \frac{\alpha U_i^x}{1 + \alpha + \sum_{i=1..M-1} x_i^g} + \frac{x_i^g}{1 + \sum_{i=1..M-1} x_i^g} \left(1 - \frac{\alpha}{1 + \alpha + \sum_{i=1..M-1} x_i^g}\right) \quad (5.51)$$

En réarrangeant des termes de (5.51), on aboutit à :

$$C_i - C_i^g = \frac{\alpha (U_i^x - C_i^g)}{1 + \alpha + \sum_{i=1..M-1} x_i^g}$$

Finalement, l'image de la droite (5.50) est une droite paramétrée par :

$$C - C^g = \beta \cdot U^C$$

où $\beta = \frac{\alpha}{1 + \alpha + \sum_{i=1..M-1} x_i^g}$ et $U^C = U^x - C^g$ est le vecteur directeur de cette droite ■

Théorème ([11]) (Résolution du problème de Riemann)

©© Considérons deux états C^g et C^d dans $E_M = \{C \in \mathbb{R}^M; C_i \geq 0 \text{ pour tout } i\}$. Alors il existe une unique solution du problème de Riemann associé à C^g et C^d constituée d'au plus $M + 1$ états constants séparés par des ondes simples.

V.5- Vitesse du front réactionnel

Soient (u^g, v^g) , (u^g, v^g) et (u^d, v^d) les états constants du problème de Riemann et qui désignent respectivement l'état à gauche, l'état intermédiaire et l'état à droite du système (figure 5.10).

Les vitesses d'avancée des limites du front réactionnel sont données par :

Pour la limite gauche :

$$V_R^g = p v \lambda_1(u^g, v^g) \text{ si on a un 1-D.C ou une 1-détente.}$$

$$V_R^g = p v \sigma_1(u^g, v^g, u^*, v^*) \text{ si on a un 1-choc.}$$

Pour la limite droite :

$$V_R^d = p v \lambda_2(u^d, v^d) \text{ si on a un 2-D.C ou une 2-détente.}$$

$$V_R^d = p v \sigma_2(u^*, v^*, u^d, v^d) \text{ si on a un 2-choc.}$$

Remarque

- Pour les données qu'on a les deux valeurs propres sont de l'ordre de 10^{-3} . Et puisque la vitesse v varie de 1 à 100 cm/an, on a un facteur de 10^3 à 10^5 entre la vitesse du fluide et celle du front. Ceci paraît conforme à Guy [16a] où la vitesse d'avancée du front réactionnel est donnée par :

$$v' = 3.83 \cdot 10^{-5} \cdot v$$

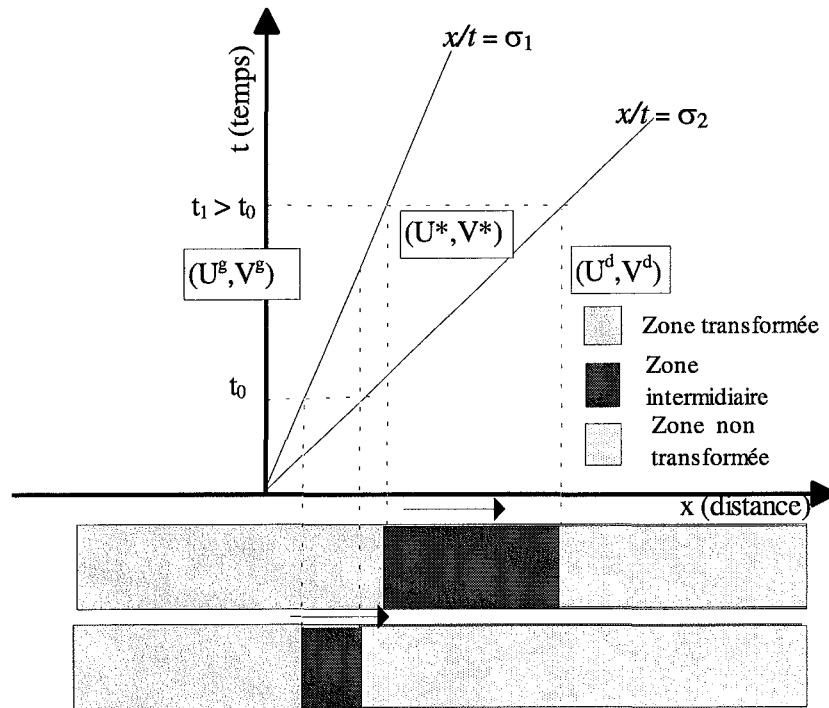


Figure 5.10 : Représentation schématique de l'avancée du front réactionnel dans le cas où la courbe d'onde est composée de deux chocs.