

CHAPITRE II

MODELISATION PHYSICO-CHIMIQUE DU PHENOMENE D'INTERACTION FLUIDE-MINERAL

II.1- Représentation du milieu et hypothèses générales

II.2- Équations de conservation de la matière : modèle général

II.2.1- Bilan total

II.2.2- Bilan sur la concentration en phase fluide

II.2.3- Application au transport d'une solution aqueuse dans une roche constituée de grenat

II.2.4- Conditions initiales

II.3- Équations du modèle à l'équilibre

II.3.1- Expression en fonction des fractions molaires

II.3.2- Modèle simplifié

a) *Influence de C_{Σ}^f*

b) *Changement d'échelle*

c) *Modèle final*

Introduction

Le *transport* de matière est, en général, dû à la circulation d'un fluide dans un milieu poreux induit par un gradient de pression ou par la gravité ou à la diffusion des espèces aqueuses dans un fluide immobile du fait des gradients des concentrations. La diffusion a tendance à régulariser et à faire décroître les variations totales des concentrations : les zones à concentration plus élevée en une espèce aqueuse envoient plus de particules dans toutes les directions que les zones à concentration plus faible ([28]). Donc la solution du problème devient plus régulière si le phénomène de diffusion est le plus important.

Pour le problème que nous traitons, le transport des constituants est dû essentiellement au mouvement du fluide (convection). Ce choix correspond à un choix d'échelle d'observation macroscopique. En réalité le coefficient de diffusion D est très petit (mais non nul). Et pour avoir un problème ayant un sens physique, on pourra perturber le modèle avec le terme de diffusion (le paramètre D est destiné à tendre vers zéro).

Dans ce chapitre, on se propose de modéliser quantitativement le transport de matière et d'exprimer ensuite les équations du système à l'équilibre. Ceci va nous permettre d'obtenir certaines informations sur le processus de transformation de la roche. Notons que, dans le cas général, le transport de matière et l'échange chimique entre phase s'influencent mutuellement. Ceci est dû essentiellement aux variations de la porosité du milieu et de la densité du fluide.

Pour mieux approcher le phénomène d'interaction fluide-roche, on a besoin de quelques simplifications décrites ci-après dont on va tenir compte au § II.3, après avoir exprimé les équations du modèle dans un cas général (§ II.2). Ces simplifications concernent la structure de la roche, les paramètres hydrogéologiques et les paramètres thermodynamiques.

II.1 Représentation du milieu et hypothèses générales

Vitesse du fluide

Le mouvement d'un fluide incompressible dans un milieu poreux suit la loi de Navier-Stokes. Puisque le milieu n'est pas homogène, les vitesses du fluide ne se distribuent pas uniformément dans les zones de circulation (les pores). Vue la lenteur du mouvement (il n'y

aura pas d'effet d'inertie) et le caractère incompressible du fluide, la vitesse moyenne ou homogénéisée suit la loi de Darcy suivante ([5]):

$$\bar{v} = -\frac{\pi}{\eta} (\rho \bar{g} + \bar{\nabla} P) \quad (2.1)$$

Où : ρ et η désignent respectivement la densité et la viscosité de l'eau,
 π est la perméabilité intrinsèque du milieu,
 P est la pression,
 \bar{g} est l'accélération de la pesanteur.

Si on travaille dans une zone où le gradient de pression est constant alors la vitesse v est constante. Dans les problèmes qui nous intéressent la valeur de la vitesse v de Darcy est de l'ordre de 1 à 100 cm par an ([16b]).

Température du système et équilibre chimique local

Le système que nous étudions est constitué de deux phases : une phase fluide et une phase solide. Entre ces deux phases il y a à priori un déséquilibre chimique entraînant le transfert de constituants chimiques entre le solide et le fluide. En isolant un petit volume de la roche pendant un certains temps, on observe que chacun des échanges locaux diminue jusqu'à s'annuler pour atteindre un état dit d'équilibre local. On peut supposer que cet équilibre local est instantané à cause des hautes températures du milieu et des vitesses de percolation lentes et par suite on considérera qu'il n'y a pas de termes de cinétique chimique dans la loi dite alors d'équilibre local régissant ces états d'équilibre ([46],[47]).

On suppose que :

- la réaction d'échange des constituants entre la phase fluide et la phase solide se fait de façon athermique. Il n'y aura pas d'échange de chaleur et la température sera considérée constante ($T > 450$ °C).

- L'équilibre chimique local est atteint en chaque point du domaine entre la phase fluide et la phase solide. Nous nous limiterons au cas où la phase solide est monophasée.

Sous ces hypothèses, l'évolution globale du système est alors contrôlée par le processus de transport du fluide. Ce dernier devient alors le processus limitant.

Structure de la roche et porosité du milieu

Si le volume du vide est nul et si la porosité ϕ est constante alors un volume V peut être exprimé en fonction du volume de la phase fluide et celui de la phase solide contenus dans V comme suit :

$$V = \phi V + (1 - \phi)V \equiv V^f + V^s \quad (2.2)$$

Autrement dit l'expression de la porosité est :

$$\phi = \frac{V^f}{V^f + V^s} \quad (2.3)$$

En général, la porosité ϕ dépend des variables x et t et vérifie l'équation :

$$\phi(x, t) + \sum_i \phi_i(x, t) = 1 - \phi_R \quad (2.4)$$

où ϕ_i est la fraction volumique du constituant i .

ϕ_R est la fraction du vide.

Si les deux phases fluide et solide sont homogènes et le volume du vide est nul ($\phi_R = 0$) alors l'équation (2.4) devient :

$$\sum_i \phi_i(x, t) = 1 - \phi(x, t) \quad (2.5)$$

Donc la porosité paraît comme fonction des concentrations en phase solide : $\phi = \phi(C_i^s)$

Pour le problème que nous étudions, la porosité moyenne est constante. Ceci est conséquence des points suivants :

- D'après la définition d'une solution solide ([45]) (cf. annexe) on a :

Pour que deux constituants entrent en solution solide en toutes proportions, il est nécessaire qu'ils aient la même structure cristalline et que les tailles des ions qui sont susceptibles d'occuper les mêmes sites cristallins soient voisines. Et par conséquent les volumes molaires des constituants formant la roche sont proches;

- La porosité diminue avec la profondeur du fait de la compaction. Cette dernière a tendance à égaliser et à homogénéiser ce paramètre dans tout le domaine.

Ce paramètre ϕ est relativement faible. Elle est de l'ordre de 0.01 ([16b]).

Remarque

Sous des températures assez élevées, l'échange chimique entre phase est instantané et la vitesse de percolation du fluide est négligeable devant celle des réactions chimiques (qui est supposée 'infinie'). Et si en plus les variations de la porosité et de la densité du fluide vecteur sont faibles, on peut alors découpler le phénomène de transport de matière et celui de l'échange chimique.

II.2 Équations de conservation de la matière : modèle général

Après homogénéisation, supposons que le fluide circule dans le domaine parallèlement à une direction x et considérons un volume dV de ce domaine formé par un cylindre de base ds et d'épaisseur Δx limitée par les abscisses x_1 et x_2 (fig. 2.1).

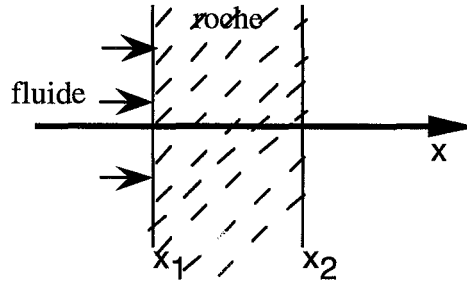


Figure 2.1

II.2.1- Bilan total

La quantité totale de matière de la $i^{\text{ème}}$ espèce chimique à l'instant t est donnée par :

$$Q_i(t) = \int_{x_1}^{x_2} [\phi C_i^f(x,t) + (1-\phi)C_i^s(x,t)] dx ds \quad (2.6)$$

Le flux de la matière J^i est la somme de deux flux :

Flux de convection dû au mouvement du fluide J_c^i

Flux de diffusion J_{Diff}^i

On a donc:

$$J^i = J_c^i + J_{Diff}^i \quad \text{où } J_c^i = \phi v C_i^f \text{ et } J_{Diff}^i = -\phi D \frac{\partial C_i^f}{\partial x}$$

et le bilan matière s'écrit alors (équation de continuité) :

$$Q_i(t + \Delta t) - Q_i(t) = -ds \cdot dt \left[J^i \right]_{x_1}^{x_2}$$

En divisant le premier membre par Δt et en faisant tendre Δt vers 0, on obtient :

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} [\phi C_i^f(x,t) + (1-\phi)C_i^s(x,t)] dx ds = -ds \left[J^i \right]_{x_1}^{x_2} \quad (2.7)$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} [\phi C_i^f(x,t) + (1-\phi)C_i^s(x,t)] dx ds = -ds [J^i]_{x_1}^{x_2} \quad (2.8)$$

En faisant tendre x_1 vers x_2 dans l'équation précédente, on obtient pour $i = 1, 2, \dots, M$:

$$\partial_t [(1-\phi)C_i^s + \phi C_i^f] + \partial_x J^i = 0 \quad (2.9)$$

Le flux par unité de surface est donné par :

$$J_i = \phi v C_i^f - \phi D \frac{\partial C_i^f}{\partial x} \quad (2.10)$$

En portant (2.8) dans (2.7), on obtient :

$$\partial_t [(1-\phi)C_i^s + \phi C_i^f] + \partial_x (\phi v C_i^f) - \partial_x (\phi D \partial_x C_i^f) = 0 \quad (2.11)$$

On considérera dans la suite que le flux se résume au premier facteur ($D = 0$) et qui est justifié par des considérations d'échelle (voir aussi Guy, [18]). Le système d'équations finales obtenu est donc :

$$\partial_t [(1-\phi)C_i^s + \phi C_i^f] + \partial_x (\phi v C_i^f) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (2.12)$$

II.2.2- Bilan matière sur la concentration en phase fluide

Le volume dV est siège de réactions chimiques produisant ou consommant l'espèce chimique et du transport du même espèce. On peut représenter ces réactions chimiques dans le système sous la forme suivante (m désigne à la fois le $m^{\text{ème}}$ minéral de formule A_m et la $m^{\text{ème}}$ réaction) :

$$A_m = \sum_{i=1}^{N_m} v_{mi} A_i \quad m = 1, \dots, M \quad (2.13)$$

Où v_{mi} est le coefficient stœchiométrique du soluté A_i dans l'équation de dissolution ou de précipitation du minéral A_m ($m^{\text{ème}}$ réaction).

La vitesse absolue \mathfrak{R}_m pour la $m^{\text{ème}}$ réaction est :

$$\mathfrak{R}_m = \frac{d\xi_m}{dt} \quad (2.14)$$

où ξ_m est l'avancement de la $m^{\text{ème}}$ réaction. ξ_m est donnée par :

$$\frac{dn_m}{-1} = \frac{dn_1^m}{v_{m1}} = \frac{dn_2^m}{v_{m2}} = \dots = \frac{dn_N^m}{v_{mN}} = d\xi_m \quad (2.15)$$

Le bilan matière s'écrit :

$$\partial_t (\delta n_i^f) = - \sum_m v_{mi} (v_m)_x \delta V + (J(x_1) - J(x_2)) \cdot \delta S_x \quad (2.16)$$

Le premier terme du second membre de (2.16) est le terme source. Il est dû aux réactions chimiques de dissolution ou de précipitation du minéral A_m contenant l'espèce chimique A_i de vitesse spécifique v_m . Tandis que le deuxième terme est dû au transport de la matière à travers les surfaces limitant l'élément de volume dV .

La concentration en phase fluide du constituant i s'écrit:

$$C_i^f = \frac{\delta n_i^f}{\phi \delta V} \quad (2.17)$$

En dérivant par rapport à t l'expression précédente, on obtient :

$$\partial_t (\phi C_i^f) = \frac{1}{\delta V} \partial_t (\delta n_i^f) + \frac{\phi C_i^f}{\delta V} \frac{d(\delta V)}{dt} \quad (2.18)$$

Le dernier terme du second membre de (2.18) désigne la variation temporelle de la concentration en phase fluide due à la variation du volume avec le temps. (Ceci traduit en fait la variation de la zone réactionnelle avec le temps ([42])) et on a :

$$\frac{\phi C_i^f}{\delta V} \frac{d(\delta V)}{dt} = \frac{\phi C_i^f}{V} \frac{dV}{dt} \quad (2.19)$$

Le bilan matière s'écrit :

$$\partial_t (\phi C_i^f) = \sum_m v_{mi} (v_m)_x + (J(x_1) - J(x_2)) \frac{\delta S_x}{\delta V} - \frac{\phi C_i^f}{V} \frac{dV}{dt} \quad (2.20)$$

et puisque $\frac{\delta S_x}{\delta V} = \frac{1}{\delta x}$, en faisant tendre δx vers 0, (2.20) devient :

$$\partial_t (\phi C_i^f) = \sum_{m=1}^{m=M} v_{mi} (v_m)_x - \partial_x J - \frac{\phi C_i^f}{V} \frac{dV}{dt} \quad (2.21)$$

Pour un écoulement tridimensionnel et sans variation de volume avec le temps, l'équation précédente s'écrit :

$$\partial_t(\phi C_i^f) + \text{div}(\phi v C_i^f) = \sum_{m=1}^{m=M} v_{mi} (v_m)_x \quad (2.22)$$

Ce qui est cohérent avec le modèle de Ortoleva et al. ([31]) sans terme de diffusion :

$$\partial_t(\phi C_i^f) + \text{div}(\phi v C_i^f) = - \sum_{m=1}^{m=M} v_{mi} \rho_m \partial_t \phi_m \quad (2.23)$$

ϕ_m désigne la fraction volumique dans la phase solide du minéral m .

ρ_m désigne la densité molaire du minéral m (l'inverse du volume molaire).

En faisant l'analogie entre les équations (2.12), (2.22) et (2.23), on doit avoir :

$$-\partial_t[(1-\phi)C_i^s] = - \sum_{m=1}^{m=M} v_{mi} \rho_m \partial_t \phi_m = \sum_{m=1}^{m=M} v_{mi} (v_m)_x \quad (2.24)$$

En effet :

La vitesse spécifique de la $m^{\text{ème}}$ réaction chimique au point de coordonnées x est exprimée en fonction de sa vitesse absolue par :

$$(v_m)_x = \frac{\mathfrak{R}_m}{\delta V} \quad (2.25)$$

et on a donc :

$$\sum_m v_{im} (v_m)_x = \frac{1}{\delta V} \sum_m v_{im} \mathfrak{R}_m = - \frac{1}{\delta V} \sum_m v_{im} \frac{\partial(\delta n_m)}{\partial t} \quad (2.26)$$

En explicitant le dernier terme de (2.26) de deux façons différentes, on obtient :

$$-\frac{1}{\delta V} \sum_m v_{im} \frac{\partial(\delta n_m)}{\partial t} = - \sum_m v_{im} \rho_m \partial_t \phi_m \quad (2.27)$$

et
$$-\frac{1}{\delta V} \sum_m v_{im} \frac{\partial(\delta n_m)}{\partial t} = - \frac{1}{\delta V} \frac{\partial(\delta n_i^s)}{\partial t} = - \partial_t[(1-\phi)C_i^s] \quad (2.28)$$

Donc le système d'équations finales est :

$$\partial_t[(1-\phi)C_i^s + \phi C_i^f] + \text{div}(\phi v C_i^f) = 0 \quad (2.29)$$

On retrouve ainsi, le système (2.12) (bilan total) ■

Remarques

- Le second terme des équations (2.22) et (2.23) est appelé terme source. Il mesure le nombre de moles produites ou consommées par toutes les réactions chimiques par unité de temps et par unité de volume.

- Dans l'équation (2.12), on n'a pas de terme source puisque le bilan est total. Donc tout se passe comme si le terme en $\partial_t C_i^s$, dans la formulation à l'équilibre, était équivalent au terme source dans la formulation avec cinétique. Avec la différence que dans une formulation chromatographique, on fait le bilan total et dans l'autre formulation on fait le bilan sur la concentration en phase fluide seulement ■

Ce modèle se généralise dans le cas d'un écoulement tridimensionnel au suivant (cf. [1]):

$$\partial_t [(1 - \phi) \rho_s C_i^s + \phi \rho_f C_i^f] + \text{div}(\phi \rho_f v C_i^f) = 0 \quad (2.30)$$

où ρ_s et ρ_f désignent respectivement la densité du solide et du fluide.

A ces équations s'ajoute l'équation de conservation de masse :

$$\partial_t [\phi \rho_f + (1 - \phi) \rho_s] + \text{div}(\phi \rho_f v) = 0 \quad (2.31)$$

La relation précédente permet de tenir compte des variations de la porosité ainsi que la vitesse de Darcy à cause des échanges entre le fluide et la roche. Le système (2.30)-(2.31) ainsi obtenu est totalement couplé.

Si ρ_s et ρ_f sont constantes alors la porosité et la vitesse de Darcy sont liées par :

$$(\rho_f - \rho_s) \cdot \partial_t \phi + \rho_f \text{div}(\phi v) = 0 \quad (2.32)$$

Et si en plus la porosité du milieu est constante partout, on retrouve la condition d'incompressibilité du fluide :

$$\text{div} v = 0 \quad (2.33)$$

II.2.3- Conditions initiales

Pour reconstituer ce scénario, il faut avoir des conditions initiales plus réalistes et tenir compte de la composition des solutions hydrothermales. Les variations de cette dernière

influencent le processus de la transformation ainsi que sa durée. Dans certains cas, cette durée est longue et peut être due à la lenteur du mouvement du fluide (faible vitesse de percolation) ou à la faible concentration des espèces en solution.

II.3- Équations du modèle à l'équilibre

Reprenons les notations adoptées au § I.4.3.

$$\text{On pose : } C_{\Sigma}^f = \sum_{i=1..M} C_i^f \text{ et } C_{\Sigma}^s = \sum_{i=1..M} C_i^s \quad (2.34)$$

A l'équilibre, nous avons exprimé la fonction isotherme donnant les concentrations en phase fluide C_i^f en fonction de la somme totale des concentrations en phase fluide des espèces chimiques susceptibles de se substituer et des fractions molaires en phase solide $x_{j=1,..,M}$ (cf. (1.71) et (1.72)):

$$C_i^f = C_{\Sigma}^f \cdot F_i(x_1, \dots, x_M) = C_i^f(C_{\Sigma}^f; x_1, \dots, x_M) \quad (2.35)$$

Puisque C_i^f est fonction de C_{Σ}^f , on doit rajouter au système l'équation que doit vérifier C_{Σ}^f et qui est obtenue en sommant toutes les équations du système (2.12). On obtient donc :

$$\partial_t [(1 - \phi)C_{\Sigma}^s + \phi C_{\Sigma}^f] + \partial_x (\phi v C_{\Sigma}^f) = 0 \quad (2.36)$$

De même, d'après l'équation (1.67), on a exprimé les concentrations en phase solide C_i^s en fonction des fractions molaires x_i , par :

$$C_i^s = C_i^s(x_1, \dots, x_M) \quad (2.37)$$

La fonction isotherme (2.35) (cf. (1.71), (1.72)), liant la concentration en phase fluide aux fractions molaires en phase solide et l'expression de C_i^s en fonction des x_i donnée par (1.67) nous seront utiles, dans la section suivante, pour l'écriture du système de lois de conservation en fonction des fractions molaires. Si la fonction isotherme est facilement inversible, on peut aussi exprimer les équations du modèle en fonction des concentrations en phase fluide (c'est le cas où les paramètres d'excès de la solution solide sont identiquement nuls (cf. §V.4.2).

II.3.1- Expression en fonction des fractions molaires

$$\text{On pose : } x^s = (x_1^s, \dots, x_M^s)$$

$$\begin{aligned}
F(x^s) &= (F_1(x^s), \dots, F_M(x^s)) \\
C^s(x^s) &= (C_1^s(x^s), \dots, C_M^s(x^s)) \\
C^f(c_\Sigma^f, x^s) &= (C_1^f(c_\Sigma^f, x^s), \dots, C_M^f(c_\Sigma^f, x^s))
\end{aligned}$$

Reportons (2.35) dans (2.12). On obtient alors:

$$\partial_t [(1-\phi)C_i^s(x^s) + \phi C_i^f(c_\Sigma^f, x^s)] + \partial_x (\phi v C_i^f(c_\Sigma^f, x^s)) = 0$$

ou sous forme matricielle :

$$\begin{cases} \partial_t [(1-\phi)C^s(x^s) + \phi C^f(c_\Sigma^f, x^s)] + \partial_x [\phi v C^f(c_\Sigma^f, x^s)] = 0 \\ \partial_t [(1-\phi)C_\Sigma^s + \phi C_\Sigma^f] + \partial_x (\phi v C_\Sigma^f) = 0 \end{cases} \quad (2.38)$$

II.3.2- Modèle simplifié

Sous les hypothèses simplificatrices énoncées au §II.1, le système (2.38) modélisant le phénomène d'interaction fluide-minéral, dans un processus qui associe transport et réactions chimiques, peut être approché par :

$$(S) \quad \begin{cases} \partial_t x^s + \phi v B \partial_x C^f(c_\Sigma^f, x^s) = 0 \\ \partial_t (C_\Sigma^f) + v \cdot \partial_x (C_\Sigma^f) = 0 \end{cases} \quad (2.39)$$

B est une constante donnée par $B = \frac{\bar{V}_0}{n}$ où n est le nombre de site où l'échange s'effectue et \bar{V}_0 désigne le volume molaire moyen de la solution solide.

En effet :

Pour le problème que nous étudions, nous adoptons deux types de simplifications :

i) puisque la porosité ϕ est très faible, la première simplification consiste (en plus des hypothèses énoncées au § II.1) à négliger dans les équations de conservation de la matière (équation (2.6)) $\int_{x_1}^{x_2} \phi C_i^f(x, t) dx ds$ devant $\int_{x_1}^{x_2} (1-\phi) C_i^s(x, t) dx ds$. L'équation (2.6) peut s'écrire comme suit :

$$Q_i(t) = \int_{x_1}^{x_2} [\phi C_i^f(x, t) + (1-\phi) C_i^s(x, t)] dx ds \cong \int_{x_1}^{x_2} C_i^s(x, t) dx ds \quad (2.40)$$

ii) La deuxième est de type structurale :

- la porosité moyenne du milieu est constante et est très faible;
- l'effet de variations de volume est négligeable. Ceci vient du fait que les volumes molaires des constituants de la phase solide sont proches. D'après l'équation (1.69), la fraction molaire x_i est approchée en fonction de C_i^s par :

$$x_i \cong \frac{\bar{V}_0}{n} C_i^s = B \cdot C_i^s \quad (2.41)$$

Donc en exprimant, à l'équilibre, les équations de la conservation de la matière (cf. (2.6)) et en tenant compte de (2.40) et de (2.41), on obtient le système (2.39) ■

a.- Influence de C_Σ^f

- La seconde équation de (2.39) signifie que le profil initial de C_Σ^f se déplace à la même vitesse v que fluide. Ceci peut s'interpréter comme suit : si la porosité est une constante faible et si l'effet de variation de volume est négligeable alors l'échange entre le fluide et le solide (en un point et à un instant donnés) se fait de telle sorte à maintenir cette variable constante et que seul le transport de matière est responsable de ses variations.

- Le processus de transformation, dont le moteur est le déséquilibre chimique, est dû essentiellement aux variations de la composition du fluide ou du solide même si la quantité C_Σ^f n'est pas modifiée. On peut voir ceci dans un cas simple : prenons un fluide de composition constante en équilibre chimique avec un minéral de composition constante. Rien ne se passe dès lors. Une légère variation de la composition du fluide fait passer celui-ci en état de déséquilibre chimique avec le minéral. Le processus de transformation commence alors même si la somme C_Σ^f reste constante.

- La quantité C_Σ^f ainsi que la porosité et la vitesse du fluide interviennent dans toutes les expressions du flux de matière. Leurs variations influencent donc essentiellement la vitesse du front réactionnel et la durée de la transformation du minéral¹. Or, ce qui nous intéresse c'est plus la succession qualitative des différents étapes de la transformation que sa durée précise et par suite on peut supposer que cette quantité est constante :

$$C_\Sigma^f = C_0 = \text{constante} \quad (2.42).$$

Ce choix correspond à étudier la transformation du minéral (milieu aval ou à droite; le fluide circule de gauche à droite) par un fluide de composition constante ■

¹ La porosité, la vitesse du fluide et la quantité C_Σ^f interviennent dans la condition de Rankine-Hugoniot liant le flux et la vitesse du choc. Par contre elles n'interviennent pas dans les équations des courbes de chocs. De même pour les détentes.

b.- Changement d'échelle

pour ce genre de problème, les valeurs propres - qui sont des vitesses de concentrations généralisées - sont très faibles. Donc pour pouvoir visualiser les chocs et les détente, on changera l'échelle de temps et on gardera celui de l'espace (l'unité de la vitesse du fluide est le cm/an. On prendra donc le cm comme unité d'espace et l'année comme unité de temps). On pose :

$$\tau = \phi v C_0 \cdot t \quad (2.43)$$

c.- Modèle final

En tenant compte de (2.42) et (2.43), le système (2.39) devient :

$$(S) \quad \partial_\tau x^s + B \partial_x F(x^s) = 0 \quad (2.44)$$

Au chapitre V, nous présentons une étude mathématique de ce système ■

DEUXIEME PARTIE

APPROCHE MATHEMATIQUE

Introduction à la deuxième partie

Dans cette deuxième partie, nous présentons une étude mathématique et numérique du problème d'interaction fluide-minéral avec transport. Notre application porte sur la transformation d'une solution solide (grenats et pyroxène) par le fluide dans le cas d'un constituant ou de deux constituants indépendants. Notons quelques détails de vocabulaire. Soit M le nombre de pôles (constituants) d'une solution solide. Puisque la somme de toutes les fractions molaires est égale à 1, le nombre d'inconnues est réduit de 1 : soit $M-1$ inconnues. On dit alors qu'on a une solution solide et un modèle à $M-1$ constituants indépendants. Dans le cas particulier où $M = 2$, on parle de modèle à un constituant.

Cette étude nous permet :

i) dans le cas d'un constituant :

- de voir la limite de validité du modèle de la chromatographie et d'envisager les conditions ... permettant de simplifier le problème.

ii) et à partir d'une composition initiale de la roche (figure P2.1 et P2.2) :

- de déterminer les états par lesquels passe le système dans le plan ou sur le triangle de composition et qui peuvent être :
 - des courbes de choc ou des discontinuités de contact quand la composition de la roche présente des discontinuités.
 - des courbes de détente quand le profil de la solution est continue;
- de visualiser sa transformation chimique au cours du temps et en particulier de tracer les courbes d'ondes qui forment la solution proprement dite;
- de valider le modèle de la chromatographie.

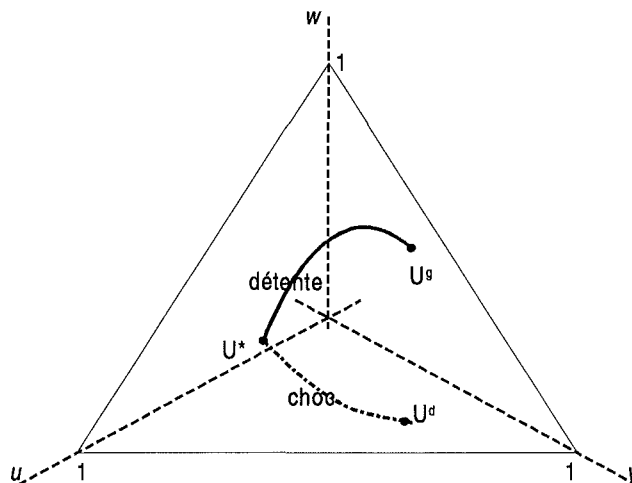


Figure P2.2 : Représentation dans le domaine des états : $U = (u, v, w) / u + v + w = 1$

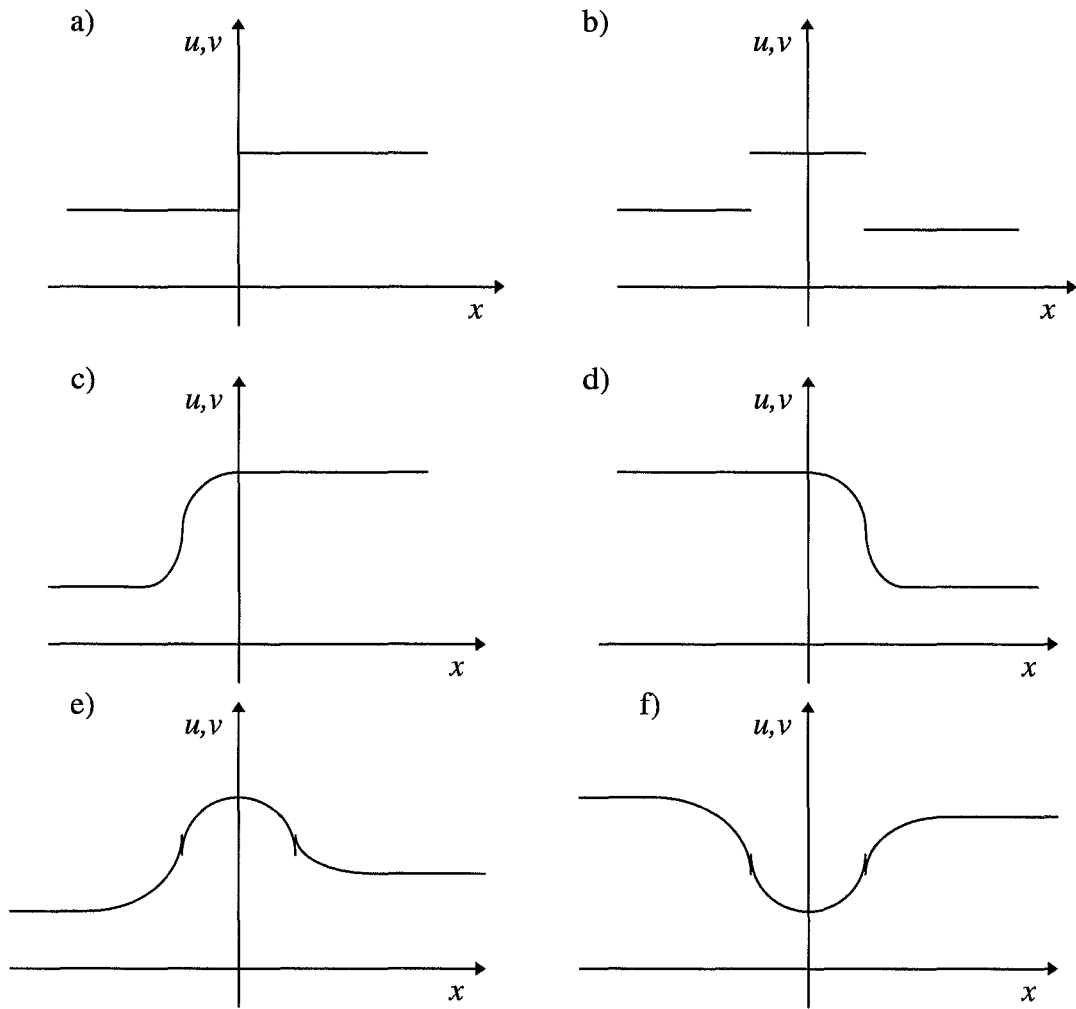


Figure P2.1 : conditions initiales types .

a) et b) du problème Riemann. c), d), e) et f) du problème de Cauchy