

Approche géométrique pour la réduction de systèmes à paramètres distribués : application à un procédé d'adsorption

H. Peng **F. Couenne** Y. Le Gorrec L. Lefèvre

LAGEP, Université de Lyon, CNRS , France

17-18 Janvier 2008

Outline

- 1 **Introduction**
- 2 **Modèle 1D d'un procédé d'adsorption**
 - Approche géométrique : Les variables de port pour le transport de matière
 - Modèle géométrique d'une colonne d'adsorption
 - Résumé
- 3 **Discrétisation : approche géométrique**
 - Interpolation des efforts et des flux
 - Discrétisation de la structure d'interconnexion
 - Discrétisation des équations de fermeture
- 4 **Simulation**

Méthode des éléments finis mixtes et modélisation structurée

Caractéristiques principales de la modélisation structurée (MS)

Méthode de modélisation multi-domaine qui représente les transferts de puissance dans les systèmes

- Systèmes de loi de conservation (système de diffusion réaction)
- Paire de variables **conjuguées de puissance** : effort et flux qui correspondent aux couple de variables de la thermodynamique.
- Les modèles sont décomposés en éléments ayant un comportement énergétique défini (accumulation, dissipation, interconnexion structure).
- La structure géométrique d'interconnexion (structure de Dirac) est une généralisation de la structure de Poisson pour les systèmes hamiltoniens.

Objectif: préserver cette structure géométrique lors de la réduction.

Méthode des éléments finis mixtes et modélisation structurée

L'utilisation de la MS pour la réduction spatiale

- Méthode des éléments finis mixtes (cf. Bossavit électromagnétisme)
- Transfert de matière dans un procédé d'adsorption : EDPs paraboliques.
- Utilisation de bases d'approximation différentes suivant les variables (effort et flux).
- Le schéma d'approximation préserve la structure géométrique ainsi que la nature thermodynamique des éléments.
- Pour le contrôle : passivité, energy shaping...

Choix des variables de port

- Utilisation du formalisme des dérivées extérieures
- on suppose un mélange à T et P constants \implies utilisation de l'énergie libre de Gibbs $g = u + Pv - Ts = \sum_{i=1}^n \mu_i q_i$:

\implies loi de conservation (bilan de matière) : $\int_{\Omega} \frac{\partial q}{\partial t} = - \int_{\Omega} dN + \int_{\Omega} N_r$

Considérons la dérivée par rapport au temps de la densité d'énergie libre de Gibbs :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} g = \int_{\Omega} \widehat{\delta_q g}^{\mu(q)} \wedge \dot{q} = \int_{\Omega} -\delta_q g \wedge dN + \delta_q g \wedge N_r$$

avec $\delta_q g$ dérivée variationnelle de g par rapport à q .

Choix des variables de port

- Utilisation du formalisme des dérivées extérieures
- on suppose un mélange à T et P constants \implies utilisation de l'énergie libre de Gibbs $g = u + Pv - Ts = \sum_{i=1}^n \mu_i q_i$:

\implies loi de conservation (bilan de matière) : $\int_{\Omega} \frac{\partial q}{\partial t} = - \int_{\Omega} dN + \int_{\Omega} N_r$

Considérons la dérivée par rapport au temps de la densité d'énergie libre de Gibbs :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} g = \int_{\Omega} \widehat{\delta_q g}^{\mu(q)} \wedge \dot{q} = \int_{\Omega} -\delta_q g \wedge dN + \delta_q g \wedge N_r$$

avec $\delta_q g$ dérivée variationnelle de g par rapport à q .

D'après le théorème de Stoke (1D) :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} g = - \int_{\partial\Omega} \mu \wedge N + \int_{\Omega} d\mu \wedge N + \int_{\Omega} \mu \wedge N_r$$



Choix des variables de port

- Utilisation du formalisme des dérivées extérieures
- on suppose un mélange à T et P constants \implies utilisation de l'énergie libre de Gibbs $g = u + Pv - Ts = \sum_{i=1}^n \mu_i q_i$:

\implies loi de conservation (bilan de matière) : $\int_{\Omega} \frac{\partial q}{\partial t} = - \int_{\Omega} dN + \int_{\Omega} N_r$

Considérons la dérivée par rapport au temps de la densité d'énergie libre de Gibbs :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} g = \int_{\Omega} \widehat{\delta_q g}^{\mu(q)} \wedge \dot{q} = \int_{\Omega} -\delta_q g \wedge dN + \delta_q g \wedge N_r$$

avec $\delta_q g$ dérivée variationnelle de g par rapport à q .

D'après le théorème de Stoke (1D) :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} g = - \int_{\partial\Omega} \mu \wedge N + \int_{\Omega} d\mu \wedge N + \int_{\Omega} \mu \wedge N_r$$

On obtient pour l'énergie libre de Gibbs l'équation de conservation :

$$\int_{\partial\Omega} \mu \wedge N = \int_{\Omega} d\mu \wedge N + \int_{\Omega} \mu \wedge dN$$

$$\int_{\partial\Omega} \mu \wedge N = \int_{\Omega} d\mu \wedge N + \int_{\Omega} \mu \wedge dN \quad (1)$$

Paires de variables conjuguées (**effort, flux**) :

(μ, dN) , $(d\mu, N)$ in Ω ,

(μ, N) in $\partial\Omega$.

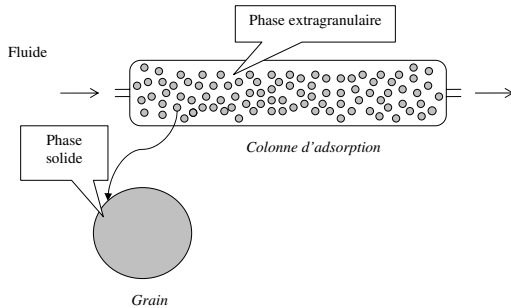
La structure d'interconnexion (structure de Dirac) qui exprime le fait que la puissance instantanée est nulle au sens du produit (1) est définie par

$$\begin{pmatrix} dN \\ d\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & d \\ d & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ N \end{pmatrix} \quad (2)$$

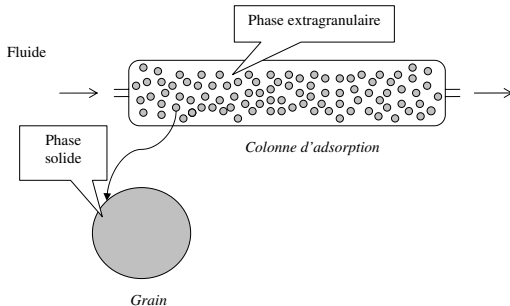
avec les variables de port aux frontières

$$\begin{pmatrix} f_{\partial} \\ e_{\partial} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N(0) \\ N(L) \\ \mu(0) \\ -\mu(L) \end{pmatrix} \quad (3)$$

Modèle géométrique d'une colonne d'adsorption



Modèle géométrique d'une colonne d'adsorption



Formalisme EDP.

$$\begin{aligned} \frac{\partial q(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial z} + \alpha F_{ads} &= 0 \\ \frac{\partial q_p(z,t)}{\partial t} - F_{ads} &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

avec les relations constitutives $N = N_{conv} + N_{disp} = vq - D' \frac{\partial q}{\partial z}$
 $F_{ads} = k'_1 a(Kq - q_p)$
 et les conditions aux limites : (Dankwert) $N|_0 = vq_{in}$ et $\frac{\partial q}{\partial z}|_L = 0$

q concentration dans la phase fluide, q_p dans la phase adsorbée.

Formalisme EDP.

$$\begin{aligned} \frac{\partial q(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial z} + \alpha F_{ads} &= 0 \\ \frac{\partial q_p(z,t)}{\partial t} - F_{ads} &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

avec les relations constitutives

$$\begin{aligned} N &= N_{conv} + N_{disp} = vq - D \frac{\partial \mu}{\partial z} \\ F_{ads} &= k_1 a(\mu - \mu_p) \end{aligned}$$

Formalisme géométrique

$$\begin{aligned} \frac{\partial q(z,t)}{\partial t} - f_q &= 0 \\ \frac{\partial q_p(z,t)}{\partial t} - f_{q_p} &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{bmatrix} f_q \\ \mathbb{F}_{disp} \\ \alpha f_{q_p} \\ \mathbb{F}_{ads} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & d & 0 & -1 \\ d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu \\ N \\ \mu_p \\ \mathbb{N}_{ads} \end{bmatrix} \quad (7)$$

avec les relations constitutives

$$\begin{aligned} N &= -D * \mathbb{F}_{disp} + v * q = -D * \mathbb{F}_{disp} + \frac{v}{b} \mu \\ \mathbb{N}_{ads} &= \alpha a k_1 \mathbb{F}_{ads} \\ \mu &= bq \end{aligned} \quad (8)$$

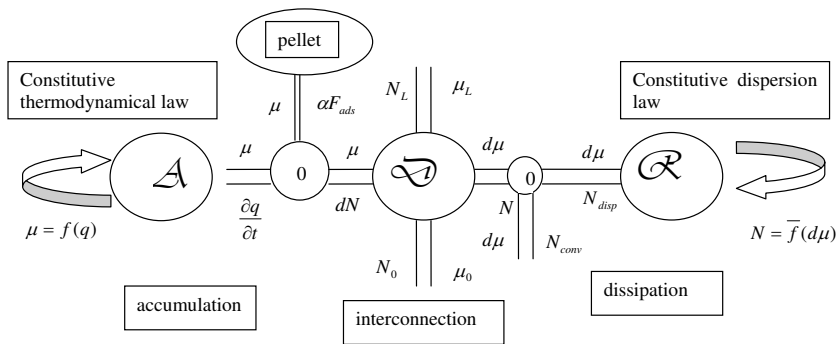
La structure de Dirac

$$\begin{bmatrix} f_q \\ \mathbb{F}_{disp} \\ \alpha f_{q_p} \\ \mathbb{F}_{ads} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & d & 0 & -1 \\ d & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu \\ N \\ \mu_p \\ N_{ads} \end{bmatrix} \quad (9)$$

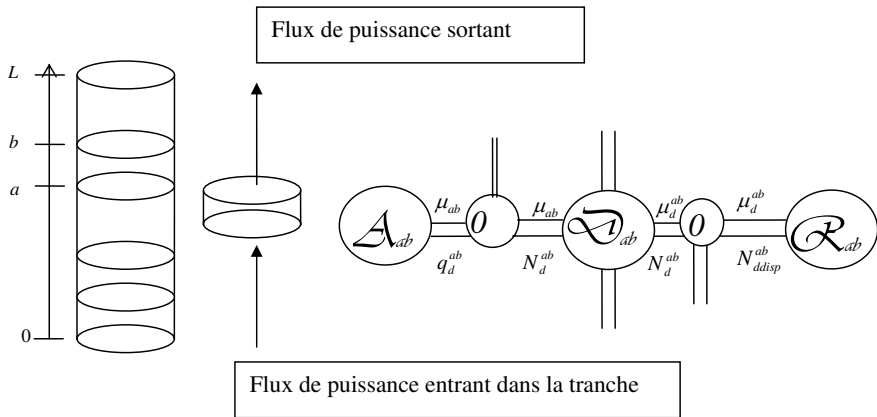
avec les variables de port aux frontières

$$\begin{pmatrix} f_{\partial} \\ e_{\partial} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N(0) \\ N(L) \\ \mu(0) \\ -\mu(L) \end{pmatrix}$$

Représentation graphique



Objectif de la discrétisation: préserver la structure



Les variables $dN = N_d$ et $d\mu = \mu_d$ sont des **une-formes** et sont approchées sur Ω_{ab} by:

$$\begin{aligned}\overline{N}_d(t, z) &= N_d^{ab}(t) w_{ab}^{N_d}(z) \\ \overline{e}_2(t, z) &= \mu_d^{ab}(t) w_{ab}^{\mu_d}(z)\end{aligned}\quad (10)$$

où les une-formes support $w_{ab}^{N_d}$ and $w_{ab}^{\mu_d}$ satisfont : $\int_{\Omega_{ab}} w_{ab}^{N_d} = \int_{\Omega_{ab}} w_{ab}^{\mu_d} = 1$.
Les variables μ et N sont des **zero-formes** et sont approchées sur Ω_{ab} par :

$$\begin{aligned}\overline{\mu}(t, z) &= \mu(a)w_a^\mu(z) + \mu(b)w_b^\mu(z), \\ \overline{N}(t, z) &= N(a)w_a^N(z) + N(b)w_b^N(z)\end{aligned}\quad (11)$$

où les zéro-formes support w_a^μ, w_b^μ, w_a^N et w_b^N satisfont :

$$\begin{aligned}w_a^\mu(a) &= 1, & w_a^\mu(b) &= 0, & w_b^\mu(a) &= 0, & w_b^\mu(b) &= 1 \\ w_a^N(a) &= 1, & w_a^N(b) &= 0, & w_b^N(a) &= 0, & w_b^N(b) &= 1,\end{aligned}$$

Discrétisation de la structure d'interconnexion

Les variables approchées doivent vérifier les relations de la structure de Dirac :

$$\begin{cases} \overline{N}_d = d\overline{N} \\ \overline{\mu}_d = d\overline{\mu} \end{cases} \implies \begin{cases} N_d^{ab} = N(b) - N(a) = N_{\partial}^b(t) - N_{\partial}^a(t) \\ \mu_d^{ab} = \mu(b) - \mu(a) = -\mu_{\partial}^b(t) - \mu_{\partial}^a(t) \end{cases}$$

Afin d'obtenir une structure de Dirac en dimension finie on choisit par analogie avec la dimension infinie une puissance approchée de la forme :

$$0 = \int_{\Omega} \mu \wedge dN + \int_{\Omega} d\mu \wedge N - \int_{\partial\Omega} \mu \wedge N$$

$$\overline{P}_{ab}^{net} = \mu^{ab} N_d^{ab} + \mu_d^{ab} N^{ab} + \left[\mu_{\partial}^b N_{\partial}^b - \mu_{\partial}^a N_{\partial}^a \right]$$

En identifiant on obtient pour μ^{ab} et N^{ab} :

$$\mu^{ab} = \alpha_{ab} \mu_{\partial}^a(t) - (1 - \alpha_{ab}) \mu_{\partial}^b(t)$$

$$N^{ab} = (1 - \alpha_{ab}) N_{\partial}^a(t) + \alpha_{ab} N_{\partial}^b(t)$$

avec $\alpha_{ab} = \int_{\Omega_{ab}} w_a^{\mu} w_{ab}^{N_d} \in [0, 1]$.

Les relations entre $\mathfrak{f}_{ab} = [N_d^{ab} \ N^{ab} \ N_{\partial}^a \ N_{\partial}^b]^T$, $e_{ab} = [\mu^{ab} \ \mu_d^{ab} \ \mu_{\partial}^a \ \mu_{\partial}^b]^T$ définissent une **structure de Dirac** en dimension finie.

Discrétisation de la loi de dispersion

Objectif : calculer N_{disp}^{ab} en fonction de μ_d^{ab} de telle sorte que le comportement énergétique soit préservé

$$N_{disp}^{ab}(t) \mu_d^{ab}(t) = \int_a^b \overline{\mu_d}(t, z) \wedge \overline{N_{disp}}(t, z)$$

ainsi que la loi constitutive de la dissipation $N_{disp} = -D * d\mu$.
On écrit la puissance dissipée approchée

$$\overline{P}_R^{ab} = -K_{ab} D (\mu_d^{ab}(t))^2 \quad (12)$$

où K_{ab} dépend des fonctions de formes uniquement.

$$N_{disp}^{ab} = \frac{\partial \overline{P}_R^{ab}}{\partial \mu_d^{ab}} = -2K_{ab} D \mu_d^{ab}(t) \quad (13)$$

Discrétisation des propriétés thermodynamiques

Objectif : calculer μ^{ab} en fonction de la concentration q^{ab} .

$q(t, z)$, \dot{q} and N_d sont dans le même espace de formes différentielles \implies

$$\bar{q}(t, z) = q^{ab}(t) w_{ab}^{N_d}(z)$$

L'énergie accumulée et son approximation sur $[a, b]$ sont données par :

$$G_{ab} = \int_0^t \left(\int_{ab} \dot{q}(t, z) \mu(t, z) \right) dt$$

$$\bar{G}_{ab} = \int_0^t \dot{q}^{ab} b q^{ab}(t) \left(\int_{ab} * w_{ab}^{N_d} w_{ab}^{N_d}(z) \right) dt = \int_0^t \dot{q}^{ab} \mu^{ab} dt$$

$$\frac{d\bar{G}_{ab}}{dt} = \dot{q}^{ab} \mu^{ab} \Rightarrow \frac{d\bar{G}_{ab}}{dq^{ab}} = \mu^{ab} = b q^{ab}(t) \left(\int_{ab} * w_{ab}^{N_d} w_{ab}^{N_d}(z) \right) \quad (14)$$

Les relations liant l'énergie libre de Gibbs, la concentration et les potentiels chimiques sont préservées par la discrétisation.

cas centré ($\alpha_{ab} = 0.5$)

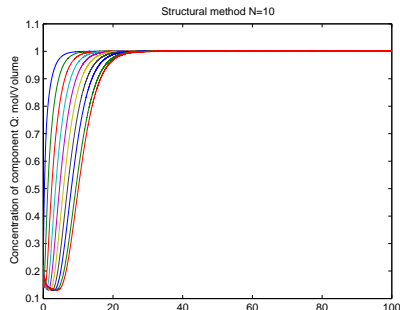
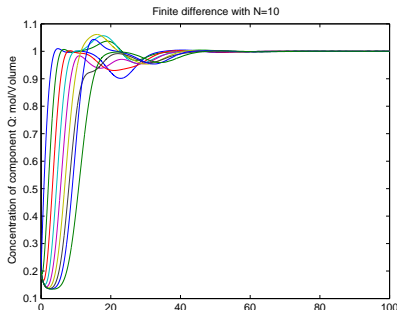
Pour 10 pas

avec $D = 1e^{-5}$, $v = 0.1$, $k = 1.0$, $K = 0.5$, $q(0, z) = 0.2$ et $L = 0.8m$.

Les formes : $\omega_{ab}^{N_d} = \omega_{ab}^{\mu_d} = \frac{dz}{b-a}$ et $\omega_a^N = \omega_a^{\mu} = \frac{z-a}{b-a}$,

$\omega_b^N = \omega_b^{\mu} = \frac{b-z}{b-a}$.

La concentration en entrée $q_{in}(t) = 1.0$.



Conclusion and perspective

Conclusion

- Une procédure unifiée pour la modélisation et la réduction spatiale des systèmes à paramètre distribués
- Conservation de la structure de Dirac (conservation de puissance)
- Les lois de fermeture discrétisées sont de même nature thermodynamique que leur homologue en dimension infinie

Perspective

- Comparaison des spectres des opérateurs
- Convergence de la méthode de discrétisation

Quelques résultats de dernière minute: structure de Dirac

pour la deuxième courbe bleu centre vert à gauche

