

Mô phỏng khuếch tán chất trong môi trường rỗng kếp không bão hòa bằng phương pháp đồng nhất hóa

Trần Ngọc Tiến Dũng, Phạm Minh Quang, Nguyễn Thông,
Bùi Phạm Phương Thanh, Trần Văn Tiếng

Tóm tắt— Khuếch tán chất là một quá trình then chốt được chú trọng nghiên cứu trong nhiều lĩnh vực như khoa học vật liệu hay kỹ thuật môi trường. Khuếch tán của một chất hóa học trong một môi trường rỗng thường được mô phỏng một cách truyền thống bằng định luật truyền chất Fick. Tuy nhiên, môi trường địa chất tự nhiên thường không đồng nhất và vì vậy cần có những mô hình tiên tiến cho phép mô tả ứng xử truyền chất trong môi trường như vậy. Quan niệm môi trường “rỗng kếp” có thể đại diện cho một lớp môi trường rỗng không đồng nhất mà ở đó tồn tại hai miền rỗng lớn và bé với đặc trưng thủy lực rất khác biệt nhau, ví dụ đá nứt nẻ, đất kết cục,... Trong bài báo này, chúng tôi trình bày cách phát triển một mô hình “vĩ mô” khuếch tán chất trong môi trường đất rỗng kếp không bão hòa nước bằng phương pháp đa tỷ lệ. Mô hình vĩ mô nhận được sẽ là một hệ phương trình phối hợp ở cả hai thang tỷ lệ vĩ mô - vĩ mô và một ten-xơ khuếch tán hiệu dụng đại diện cho cả môi trường rỗng không đồng nhất. Mô hình phát triển được kiểm tra khi so sánh với lời giải tham chiếu thông qua một ví dụ số 3D của bài toán địa chất thủy văn.

Bản thảo nhận ngày 02 tháng 4 năm 2017, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 16 tháng 10 năm 2017

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 107.01-2015.25.

Trần Ngọc Tiến Dũng, Phạm Minh Quang – CARE/Khoa Môi trường và Tài nguyên, Trường Đại học Bách Khoa – ĐHQG-HCM, Việt Nam (e-mail: tntdung@hcmut.edu.vn).

Nguyễn Thông - Khoa Kỹ thuật Xây dựng, Trường Đại học Bách Khoa – ĐHQG-HCM.

Bùi Phạm Phương Thanh - Khoa Khoa học Quản lý, Trường Đại học Thủ Dầu Một, Bình Dương.

Trần Văn Tiếng - Khoa Xây dựng, Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật TP. HCM

Từ khóa— khuếch tán, truyền chất, môi trường rỗng kếp, đồng nhất hóa.

1 MỞ ĐẦU

Cơ chế khuếch tán (*diffusion*) được Fick (1855) đề xuất, diễn ra khi có chênh lệch nồng độ và được áp dụng rộng rãi trong nhiều lĩnh vực. Tuy nhiên, nó được quan tâm nhiều trong kỹ thuật địa chất môi trường từ những năm 1970, để giải quyết các bài toán xây dựng các công trình chôn giữ chất thải rắn sinh hoạt và nguy hại [1]. Hệ số thẩm bé của môi trường địa chất (đất, đá nứt nẻ) chỉ là điều kiện cần nhưng chưa đủ để đảm bảo an toàn tránh rò rỉ. Khi đó chất ô nhiễm lan truyền trong môi trường bị chi phối mạnh mẽ bởi cơ chế khuếch tán, hơn là những cơ chế lan truyền khác. Trong môi trường rỗng có hệ số thẩm bé như vậy, rò rỉ của chất ô nhiễm sẽ nhanh hơn bởi sự khuếch tán chất, trong khi đó cơ chế đối lưu thuần túy (*convection*), đối lưu với khuếch tán và phân tán cơ học (*dispersion*) cho kết quả tính toán sai lệch [2].

Truyền chất khuếch tán trong môi trường rỗng đồng nhất (*homogeneous*) chưa bão hòa cũng được mô phỏng bằng định luật Fick [3], ở đó hệ số khuếch tán phụ thuộc vào độ khúc khuỷu của môi trường rỗng mà nó có thể ước tính bằng công thức thực nghiệm Millington và Quirk [4], thông qua độ ẩm của môi trường. Tuy nhiên, tồn tại những trường hợp, đặc biệt có môi trường không đồng nhất (*heterogeneous*), mà chúng ta không thể áp dụng định luật Fick “truyền thống” [5]. Thật vậy, môi trường địa chất tự nhiên thường có cấu trúc không đồng nhất do những tác động lý-hóa-sinh chất chằng chịt. Đối với một tập hợp môi trường địa

chất không đồng nhất mà được đặc trưng bởi 2 miền rỗng (rỗng lớn và rỗng bé) có tính chất thủy lực và truyền chất khác biệt nhau như đất kết cục (*aggregated soil*) hay đá nứt nẻ (*fractured rock*), chúng ta có thể dùng quan niệm “môi trường rỗng kép” [6] để đại diện chúng. Một mô hình toán học khuếch tán trong môi trường composite (tương tự môi trường rỗng kép) dưới điều kiện bão hòa đã được giới thiệu trong [5]. Mô hình này nhận được dưới dạng một phương trình, bằng phương pháp đồng nhất hóa tiệm cận [7], nhưng có khó khăn chính trong việc xác định biến đổi Laplace trong mô hình này.

Mục đích của bài báo này là trình bày mô hình hóa truyền chất khuếch tán trong một môi trường rỗng kép không bão hòa nước bằng phương pháp đồng nhất hóa tiệm cận và thực thi số để kiểm tra mô hình nhận được.

2 PHƯƠNG PHÁP ĐỒNG NHẤT HÓA VÀ THÀNH LẬP BÀI TOÁN.

2.1 Phương pháp

Phương pháp đồng nhất hóa (*Homogenization*) cho phép mô tả ứng xử của một môi trường không đồng nhất bằng cách thay thế nó bởi một môi trường đồng nhất tương đương. Quá trình này được gọi là sự chuyển đổi thang tỷ lệ và nguyên lý của phương pháp dựa trên những khai triển tiệm cận. Từ phương pháp toán học này [8,9], Auriault [7] đã đề xuất một cách tiếp cận gọi là đồng nhất hóa vật lý (*physical homogenization*), được thực hiện trên những số phi thứ nguyên đặc trưng cho những quá trình vật lý liên quan. Phương pháp của GS. Auriault được sử dụng trong bài báo này và giới thiệu tổng quát ở đây (chi tiết có thể tìm đọc ở [10]).

Đồng nhất hóa bắt đầu từ việc mô tả những hiện tượng vật lý ở thang tỷ lệ vật chất không đồng nhất, mà thang tỷ lệ này rất bé so với thang tỷ lệ công trình mà chúng ta thực hiện. Giả thiết nền tảng của phương pháp đồng nhất là thỏa mãn thông số tách tỷ lệ (*scale separation*) của những đại lượng hình học và vật lý:

$$\varepsilon = \ell / L \ll 1 \tag{1}$$

ở đây ℓ và L [L] lần lượt là chiều dài đặc trưng ở thang tỷ lệ “vi mô” và “vĩ mô”. Điều kiện (1) tương đương với việc tồn tại một thể tích phân tố đại diện (*representative elementary volume, REV*). Trong môi trường hiện diện 2 thang tỷ lệ, chúng ta có thể đưa vào 2 biến không gian phi thứ nguyên \mathbf{x}

$= \mathbf{x} (x_1, x_2, x_3)$ và $\mathbf{y} = \mathbf{y} (y_1, y_2, y_3)$ [-]: biến vi mô ($\mathbf{y} = \mathbf{X} / \ell$, biến nhanh) và biến vĩ mô ($\mathbf{x} = \mathbf{X} / L$, biến chậm), với $\mathbf{X} = \mathbf{X} (X_1, X_2, X_3)$ [L] là biến không gian. Vì vậy toán tử vi phân:

$$\nabla_{\mathbf{y}} \rightarrow \nabla_{\mathbf{y}} + \varepsilon \nabla_{\mathbf{x}} \tag{2}$$

Trong môi trường có cấu trúc vi mô (REV) mang tính chu kỳ, những biến đại lượng vật lý của bài toán được biểu diễn dưới dạng khai triển tiệm cận:

$$\psi^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t^*) = \psi^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t^*) + \varepsilon \psi^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t^*) + \varepsilon^2 \psi^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t^*) + \dots \tag{3}$$

ở đây “*” chỉ định những đại lượng phi thứ nguyên. Để đạt được mô hình ở tỷ lệ vĩ mô, quá trình đồng nhất hóa trải qua những bước sau:

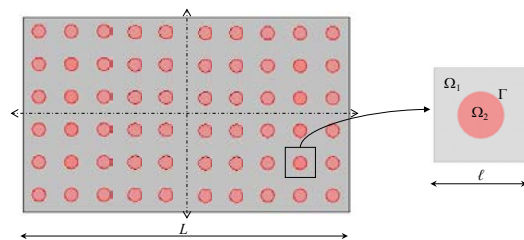
- Bước 1: Mô tả bài toán vật lý ở tỷ lệ vi mô;
- Bước 2: Chuẩn hóa các phương trình chủ đạo;
- Bước 3: Đánh giá số phi thứ nguyên đặc trưng theo lũy thừa ε ;
- Bước 4: Khai triển tiệm cận cho mọi đại lượng vật lý phi thứ nguyên;
- Bước 5: Giải các bài toán giá trị biên cho các lũy thừa ε khác nhau;
- Bước 6: Quay lại mô tả bài toán vĩ mô với đầy đủ thứ nguyên.

2.2 Giả thiết bài toán

Chúng ta xem xét hiện tượng khuếch tán của chất tan có nồng độ bé diễn ra trong một môi trường rỗng kép (*double-porosity medium*) có kích thước L , mang tính chu kỳ, không bão hòa và không bị biến dạng (rắn). Môi trường này cấu thành từ những REV giống nhau có kích thước ℓ , chứa 2 loại vật liệu rỗng và thỏa mãn phương trình (1) (Hình 1). Hai loại vật liệu rỗng này có đặc trưng thủy lực và truyền chất rất khác biệt nhau:

$$D_2 / D_1 = O(\varepsilon^2) \tag{4}$$

với D_1 và D_2 [L²T⁻¹] là hệ số khuếch tán của miền rỗng 1 và miền rỗng 2.



Hình 1. Môi trường rỗng kép chu kỳ có 2 miền: miền rỗng Ω_1 có tính thấm lớn và liên tục, miền rỗng Ω_2 tính thấm kém và giao diện Γ .

Trong mỗi vật liệu rỗng này, định luật Fick được áp dụng để tính thông lượng trung bình. Bỏ qua dòng chảy trong môi trường (số Peclet rất bé). Hiện tượng hấp phụ, cũng như là bất kỳ phản ứng sinh hóa nào không được xem xét ở đây.

2.3 Mô tả khuếch tán ở thang tỷ lệ địa phương

Phương trình chủ đạo của truyền chất khuếch tán trong mỗi miền rỗng của môi trường rỗng kép không bão hòa như sau:

$$\frac{\partial(\theta_1 C_1)}{\partial t} = \nabla_x \cdot (\mathbf{D}_1(\theta_1) \cdot \nabla_x C_1) \text{ trong miền } \Omega_1, (5)$$

$$\frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t} = \nabla_x \cdot (\mathbf{D}_2(\theta_2) \cdot \nabla_x C_2) \text{ trong miền } \Omega_2, (6)$$

cùng với điều kiện liên tục tại giao diện:

$$(\mathbf{D}_1(\theta_1) \cdot \nabla_x C_1) \cdot \mathbf{N} = (\mathbf{D}_2(\theta_2) \cdot \nabla_x C_2) \cdot \mathbf{N} \text{ trên } \Gamma, (7)$$

$$C_1 = C_2 \text{ trên } \Gamma, (8)$$

ở đây C [ML^{-3}] là nồng độ chất tan; D [L^2T^{-1}] là ten-xơ khuếch tán; [L^3L^{-3}] là độ ẩm môi trường; t [T] là thời gian; và \mathbf{N} [-] là vec-tơ pháp tuyến đơn vị với chiều dương hướng ra ngoài Ω_1 . “1” và “2” lần lượt là những chỉ số cho miền rỗng lớn và bé.

2.4 Chuẩn hóa phương trình chủ đạo

Bài toán vật lý truyền chất khuếch ở thang tỷ lệ địa phương trên đây sẽ được biểu diễn theo những đại lượng không chiều:

$$C_1^* = \frac{C_1}{C_c}; C_2^* = \frac{C_2}{C_c}; \mathbf{D}_1^* = \frac{\mathbf{D}_1}{D_{1c}}; \mathbf{D}_2^* = \frac{\mathbf{D}_2}{D_{2c}};$$

$$\theta_1^* = \frac{\theta_1}{\theta_c}; \theta_2^* = \frac{\theta_2}{\theta_c} \text{ và } t^* = \frac{t}{t_c}, (9)$$

Chỉ số “c” biểu thị cho các đại lượng đặc trưng mà chúng ta quan sát được. Từ (9) những phương trình (5) – (8) được chuẩn hóa đối với chiều dài vi mô l :

$$\frac{l^2 \theta_{1c}}{D_{1c} t_c} \frac{\partial(\theta_1^* C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^*) \text{ trong miền } \Omega_1, (10)$$

$$\frac{l^2 \theta_{2c}}{D_{2c} t_c} \frac{\partial(\theta_2^* C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*) \text{ trong miền } \Omega_2, (11)$$

$$(\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^*) \cdot \mathbf{N} = \frac{D_{2c}}{D_{1c}} \cdot (\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*) \cdot \mathbf{N} \text{ trên } \Gamma, (12)$$

$$C_1^* = C_2^* \text{ trên } \Gamma, (13)$$

2.5 Đánh giá số phi thứ nguyên

Chúng ta xem xét thời gian đặc trưng:

$$t_c = \frac{L^2 \theta_{1c}}{D_{1c}}. \text{ Vì vậy số } P_{1l} = \frac{l^2 \theta_{1c}}{D_{1c} t_c} = O(\varepsilon^2) \text{ và theo}$$

$$(4), P_{2l} = \frac{l^2 \theta_{2c}}{D_{2c} t_c} = O(1) \text{ với } \frac{\theta_{2c}}{\theta_{1c}} = O(1) (1)$$

Những phương trình (10) – (13) được viết lại với những xem xét (14):

$$\varepsilon^2 \frac{\partial(\theta_1^* C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^*) \text{ trong miền } \Omega_1, (2)$$

$$\frac{\partial(\theta_2^* C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*) \text{ trong miền } \Omega_2, (3)$$

$$(\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^*) \cdot \mathbf{N} = \varepsilon^2 \cdot (\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*) \cdot \mathbf{N} \text{ trên } \Gamma, (4)$$

$$C_1^* = C_2^* \text{ trên } \Gamma, (5)$$

2.6 Phân tích đồng nhất hóa

Mục đích của việc phân tích là đưa ra phương trình chủ đạo chứa thông số có hiệu mô tả truyền chất khuếch tán cho một môi trường liên tục từ môi trường thực tế rỗng kép.

Thay thế khai triển tiệm cận (3) vào (15) – (18) và nhóm những số hạng có cùng bậc ε , dẫn đến:

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \frac{\partial(\theta_1^* C_1^{(0)})}{\partial t^*} &= \\ &= \nabla_y \cdot [\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(0)} + \varepsilon (\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)})] + \\ &+ \nabla_y \cdot [\varepsilon^2 (\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)})] \varepsilon \nabla_x \cdot \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(0)} + \\ &+ \varepsilon^2 \nabla_x \cdot \mathbf{D}_1^* \cdot (\nabla_y C_1^{(1)} + \nabla_x C_1^{(0)}) \end{aligned} \text{ trong miền } \Omega_1, (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial[\theta_2^* (C_2^{(0)} + \varepsilon C_2^{(1)} + \varepsilon^2 C_2^{(2)})]}{\partial t^*} &= \\ &= \nabla_y \cdot [\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y (C_2^{(0)} + \varepsilon C_2^{(1)} + \varepsilon^2 C_2^{(2)})] + \\ &+ \nabla_y \cdot [\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_x (\varepsilon C_2^{(0)} + \varepsilon^2 C_2^{(1)})] + \\ &+ \varepsilon \nabla_x \cdot \mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)} + \varepsilon^2 \nabla_x \cdot \mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(1)} + \varepsilon^2 \nabla_x \cdot \mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_x C_2^{(0)} \end{aligned} \text{ trong miền } \Omega_2, (20)$$

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y (C_1^{(0)} + \varepsilon C_1^{(1)} + \varepsilon^2 C_1^{(2)}) + \right. \\ \left. + \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_x (\varepsilon C_1^{(0)} + \varepsilon^2 C_1^{(1)}) \right] \cdot \mathbf{N} = \\ = [\varepsilon^2 \mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}] \cdot \mathbf{N} \end{aligned} \text{ trên } \Gamma, (21)$$

$$(C_1^{(0)} + \varepsilon C_1^{(1)} + \varepsilon^2 C_1^{(2)}) = (C_2^{(0)} + \varepsilon C_2^{(1)} + \varepsilon^2 C_2^{(2)}) \text{ trên } \Gamma, (22)$$

Thực hiện đồng nhất hóa (19) – (22) theo bậc ε sẽ nhận được các bài toán cho ra những kết quả quan

tâm. Chi tiết quá trình biến đổi của các bài toán được trình bày trong [11].

3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN.

3.1 Bài toán biến nồng độ thang vĩ mô và khuếch tán thang vi mô

Ở bậc ε^0 , phương trình (19) – (22) trở thành:

$$\nabla_y \cdot (\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(0)}) = 0 \quad \text{trong miền } \Omega_1, \quad (23)$$

$$\frac{\partial(\theta_2^* C_2^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*) \quad \text{trong miền } \Omega_2, \quad (7)$$

$$(\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(0)}) \cdot \mathbf{N} = 0 \quad \text{trên } \Gamma, \quad (8)$$

$$C_1^{(0)} = C_2^{(0)} \quad \text{trên } \Gamma, \quad (9)$$

Lời giải của bài toán (23) và (25) có dạng [12]:

$$C_1^{(0)} = C_1^{(0)}(\mathbf{x}, t^*), \quad (10)$$

nghĩa là ở bậc đầu tiên $C_1^{(0)}$ đã là biến vĩ mô vì không phụ thuộc vào \mathbf{y} , và trở thành $C^{(0)}$. Phương trình (24) mô tả bài toán khuếch tán ở tỷ lệ địa phương (vi mô) và $C_2^{(0)}$ không là hằng số trong miền Ω_2 . Như vậy, ta có 2 biến nồng độ vĩ mô $C^{(0)}$ và vi mô $C_2^{(0)}$, tương tác với nhau qua điều kiện (26).

3.2 Bài toán giá trị biên địa phương

Phương trình (19) và (21) được phân tích ở bậc ε^1 khi kể đến lời giải (27):

$$\nabla_y \cdot (\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}) = 0 \quad \text{trong miền } \Omega_1, \quad (11)$$

$$(\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}) \cdot \mathbf{N} = 0 \quad \text{trên } \Gamma, \quad (12)$$

Hệ phương trình (28) và (29) có nghiệm dưới dạng:

$$C_1^{(1)} = \chi(\mathbf{y}) \nabla_x C_1^{(0)} + \bar{C}_1^{(1)}(\mathbf{x}, t^*), \quad (30)$$

ở đây $\chi(\mathbf{y})$ là hàm vector chu kỳ và là một

$\bar{C}_1^{(1)}(\mathbf{x}, t^*)$ hàm bất kỳ. Vector $\chi(\mathbf{y})$ nhận được từ việc giải bài toán giá trị biên địa phương sau:

$$\nabla_y \cdot [\mathbf{D}_1^* \cdot (\nabla_y \chi + \mathbf{I})] = 0 \quad \text{trong miền } \Omega_1, \quad (31)$$

$$[\mathbf{D}_1^* \cdot (\nabla_y \chi + \mathbf{I})] \cdot \mathbf{N} = 0 \quad \text{trên } \Gamma, \quad (32)$$

$$\langle \chi \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \chi d\Omega = 0 \quad (\Omega = \Omega_1 + \Omega_2) \quad (33)$$

3.3 Bài toán vĩ mô – Mô hình khuếch tán trong môi trường rỗng kép

Để xác định mô hình thang tỷ lệ vĩ mô, chúng ta viết phương trình (19) và (21) ở bậc ε^2 :

$$\frac{\partial(\theta_1^* C_1^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}) + \nabla_x \cdot \mathbf{D}_1^* \cdot (\nabla_y C_1^{(1)} + \nabla_x C_1^{(0)}) \quad \text{trong miền } \Omega_1, \quad (13)$$

$$(\mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \mathbf{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}) \cdot \mathbf{N} = (\mathbf{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}) \cdot \mathbf{N} \quad \text{trên } \Gamma, \quad (14)$$

Thực hiện hàng loạt các biến đổi cho (34) [11], chúng ta nhận được:

$$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1^* C_1^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_x \cdot (\mathbf{D}_{eff}^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}) - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_2} \frac{\partial(\theta_2^* C_2^{(0)})}{\partial t^*} d\Omega \quad (15)$$

với ten-xơ khuếch tán có hiệu của môi trường rỗng kép được định nghĩa như sau:

$$\mathbf{D}_{eff}^* = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \mathbf{D}_1^* \cdot (\nabla_y \chi + \mathbf{I}) d\Omega \quad (16)$$

$$\text{và } \phi_1 = \frac{|\Omega_1|}{|\Omega|}. \quad (17)$$

Cuối cùng quay lại bài toán vật lý thứ nguyên, chúng ta đạt được mô hình khuếch tán vĩ mô không cân bằng địa phương với C_1 và C_2 với một thông số có hiệu D_{eff} của môi trường:

$$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1 C_1)}{\partial t} = \nabla_x \cdot (\mathbf{D}_{eff} \cdot \nabla_x C_1) - \frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t} = \nabla_x \cdot (\mathbf{D}_2 \cdot \nabla_x C_2), \quad (40)$$

$$C_1 = C_2 \quad \text{trên } \Gamma, \quad (41)$$

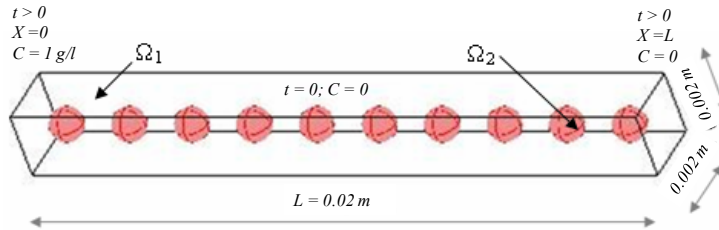
$$\text{với } \mathbf{D}_{eff}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \mathbf{D}_1(\theta) \cdot (\nabla \chi + \mathbf{I}) d\Omega. \quad (42)$$

Phương pháp đồng nhất hóa đưa đến kết quả nhiều bài toán khác nhau. Nó cho phép giải thích mối quan hệ giữa các tỷ lệ, tùy thuộc vào độ lớn của thông số tách tỷ lệ ε . Mô hình nhận được (39) – (42) khác với những mô hình giới thiệu trước đây (ví dụ [5]) khi cho phép mô phỏng bài toán môi trường chưa bão hòa. Để kiểm tra tính dự đoán mô hình này, chúng ta sẽ so sánh với lời giải tham chiếu (*reference solution*) của mô hình không đồng nhất hóa (mô hình 1 phương trình khuếch tán truyền thống) để đối chứng thông qua một ví dụ số.

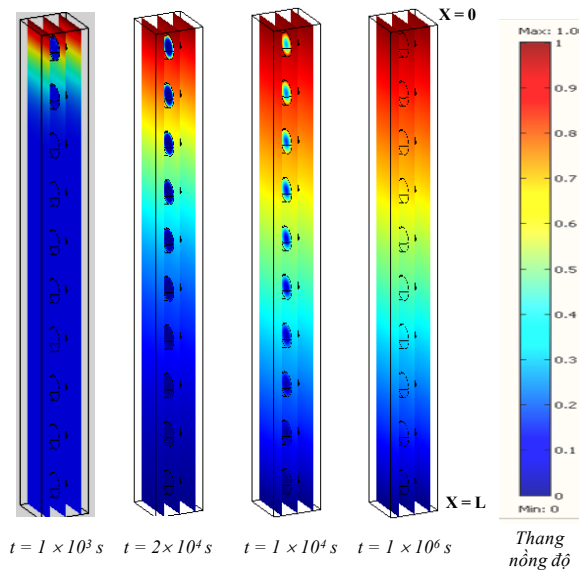
Môi trường rỗng kép của ví dụ số 3D bao gồm

những viên sét hình tròn có bán kính R sắp xếp đều đặn trong đất cát (Hình 2). Điều kiện biên và ban đầu được tóm tắt trên Hình 2. Thông số hình học và vật lý của 2 loại vật liệu được trình bày trong Bảng 1. Hệ số khuếch tán có hiệu của môi

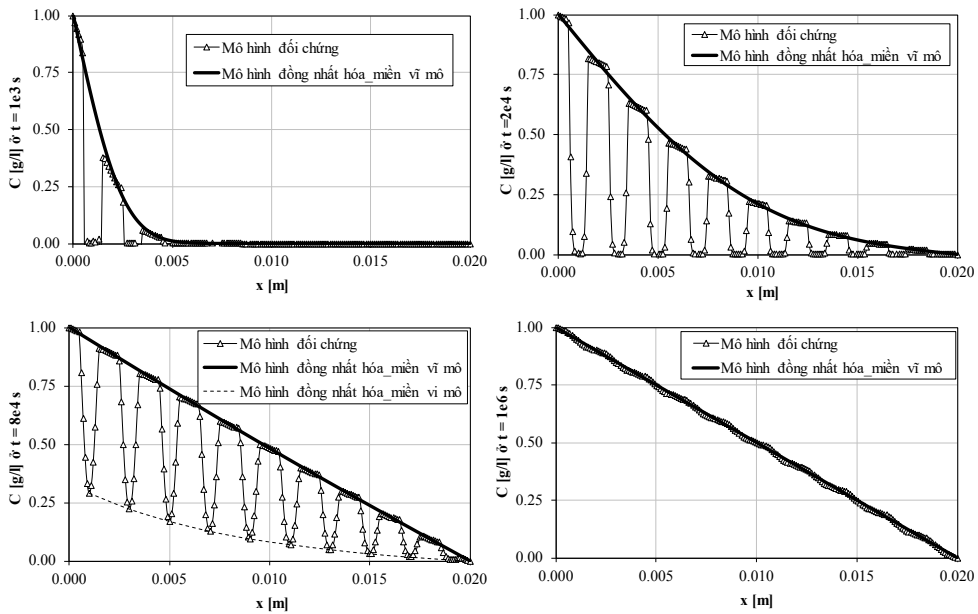
trường rỗng kép là $D_{\text{eff}} = 9.05 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, được tính toán từ bài toán giá trị biên địa phương (31) và (32). (Không trình bày chi tiết ở đây).



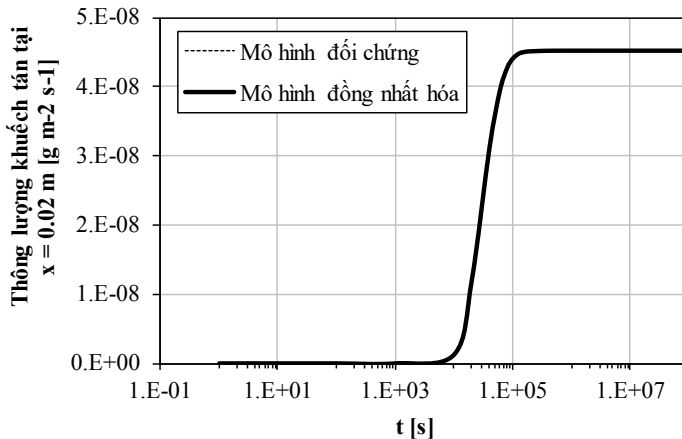
Hình 2. Kích thước hình học và tình huống truyền chất của ví dụ số.



Hình 3. Nồng độ chất trong môi trường ở thời gian khác nhau tính toán từ mô hình đối chứng. (Xem bản số của bài báo để phân biệt thang nồng độ với mã màu khác nhau.)



Hình 4. Nồng độ chất ở vị trí trung tâm môi trường ở thời gian khác nhau tính toán từ mô hình đối chứng và nồng độ vĩ mô từ mô hình đồng nhất hóa. (Nồng độ chất ở miền vĩ mô chỉ trình bày ở $t = 8e4$ s, ở $t = 1e3$ s hay $2e4$ s rất bé (~ 0), và ở $t = 1e6$ s nồng độ ở 2 miền xấp xỉ nhau (trạng thái cân bằng).)



Hình 5. Thông lượng khuếch tán chất quan sát ở lối ra của môi trường mô phỏng từ mô hình đối chứng và mô hình đồng nhất hóa.

Bảng 1: Thông số hình học và vật lý của 2 vật liệu trong môi trường rỗng kép ví dụ.

| Thông số | L | ℓ | R | ϕ_1 | ϕ_2 | θ_1 | θ_2 | D_1 | D_2 |
|----------|------|--------|--------|----------|----------|------------|------------|---------------------|--------------------|
| Đơn vị | m | m | m | - | - | m^3/m^3 | m^3/m^3 | m^2/s | m^2/s |
| Giá trị | 0.02 | 0.002 | 0.0005 | 0.935 | 0.065 | 0.5 | 0.3 | 1×10^{-13} | 1×10^{-9} |

Thực thi số (*numerical implementation*) của mô hình đồng nhất hóa có thể tham khảo ở [13]. Miền vĩ mô được phân chia thành 50 phần tử và 1200 phần tử tam giác cho miền vĩ mô, trong khi đó mô hình không đồng nhất được giải ở tỷ lệ mịn (fine scale) bằng việc phân chia miền bài toán thành ~ 13400 phần tử tứ diện (*tetrahedral*). Cả hai bài toán của mô hình đồng nhất và không đồng nhất được thực thi bằng một phần mềm thương mại

phần tử hữu hạn phát triển với Matlab. Thời gian giải là < 1 s cho mô hình đồng nhất và 16 s cho mô hình không đồng nhất với bộ xử lý của máy tính 3.30 GHz và RAM 4.0 GB.

Kết quả nồng độ chất ở một số thời gian được chọn giới thiệu, Hình 3. Hình 4 cho chúng ta thấy nồng độ chất mô phỏng bởi mô hình đối chứng dao động vì sự khuếch tán lần lượt qua miền vật liệu 1 (cát) và miền vật liệu 2 (sét). Kết quả mô hình

đồng nhất hóa cho ra đường cong nồng độ vĩ mô – vĩ mô trùng với kết quả mô hình đối chứng lần lượt ở miền 1 và 2. Trung bình nồng độ ở một mặt cắt tại những vị trí X sẽ rất giống nhau từ 2 mô hình, Hình 5. Như vậy mô hình phát triển trong bài báo này không chỉ được kiểm chứng, mà cách thực thi số cho mô hình đồng nhất ở đây chứng tỏ hiệu quả cho phép tính toán nồng độ ở cả hai tỷ lệ vĩ mô và vi mô.

Thông qua ví dụ số trên đây, chúng ta nhận thấy mô hình đồng nhất cho phép biết được sự khuếch tán chất ở những thang tỷ lệ hiện diện trong môi trường. Ngoài ra, mô hình đồng nhất vĩ mô giúp tiết kiệm tài nguyên, đặc biệt trong trường hợp mô phỏng cho bài toán thực tế.

4 KẾT LUẬN.

Mô hình truyền chất khuếch tán trong môi trường rỗng kép không bão hòa đã được phát triển bằng cách áp dụng phương pháp đa thang tỷ lệ đồng nhất hóa. Mô hình nhận được là một hệ phương trình cho phép mô tả khuếch tán ở cả hai thang tỷ lệ vĩ mô và vi mô mà nồng độ của chúng tương tác với nhau thông qua biên tiếp xúc giữa chúng. Sự truyền chất qua lại giữa hai miền trong môi trường và hệ số khuếch tán có hiệu đại diện cho toàn bộ môi trường hiện diện trong mô hình một cách chính xác mà không chịu bất kỳ điều kiện áp đặt nào. Mô hình đề xuất được xác nhận có khả năng mô phỏng truyền chất khuếch tán trong môi trường rỗng kép không đồng nhất, thông qua việc so sánh kết quả nồng độ của mô hình đồng nhất hóa và mô hình truyền thống.

Cuối cùng, phương pháp mô hình hóa giới thiệu trong bài báo này có thể mở rộng cho những trường hợp truyền chất khác tính đến sự biến đổi hóa sinh của chất ô nhiễm, cũng như là áp dụng cho những bài toán đa vật lý trong môi trường đa chất nhiều pha và nhiều thành phần.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Shackelford C.D., “The ISSMGE Kerry Rowe Lecture: The role of diffusion in environmental geotechnics”, *Can. Geotech. J.*, vol. 51, no. 11, pp. 1219–1242, 2014.
- [2] C.D. Shackelford and P.L. Redmond, “Solute breakthrough curves for processed kaolin at low flow rates”, *Journal of Geotechnical Engineering*, vol. 121, no. 1, pp. 17-32, 1995.
- [3] Rowe R.K., *Geotechnical and Geoenvironmental Engineering Handbook*, Springer, New York, 2001.
- [4] R.J. Millington and J.M. Quirk, “Permeability of porous solids”, *Transaction of Faraday Soc.*, vol. 57, pp. 1200–1207, 1961.
- [5] J.L. Auriault and J. Lewandowska, “Non-gaussian diffusion modeling in composite porous medium by homogenization: tail effect”, *Transp. Porous Media*, vol. 21, pp. 47–74, 1995.
- [6] G. Barenblatt, I. Zheltov and I. Kochina, “Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in the fissured rocks”, *J. Appl. Math.*, vol. 24, no. 5, pp. 1286–1303, (1960).
- [7] J.L. Auriault, “Heterogeneous medium. Is an equivalent macroscopic description possible?”, *Int. J. Engg. Sci.*, vol. 29, no. 7, pp. 785–795, 1991.
- [8] A. Bensoussan, J.L. Lions and G. Papanicolaou, *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland, Amsterdam, 1987.
- [9] Sanchez-Palencia E., “Non-homogeneous Media and Vibration Theory”, *Lecture Notes in Phys.* Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [10] J.L. Auriault, C. Boutin and C. Geindreau, “Homogenization of Coupled Phenomena in Heterogeneous Media”, ISBN: 978-1-84821-161-2, 476 pages, Wiley-ISTE, 2009.
- [11] N. T.D. Tran, *Transport de solutés dans un milieu à double-porosité non saturé. Modélisation par homogénéisation et application*, Thèse doctorale, Université Joseph Fourier-Grenoble, 185 p (in French), 2008.
- [12] Auriault J.L., Upscaling by multiscale asymptotic expansions, *CISM Lecture 480 Applied micromechanics of porous materials*, L. Dormieux and F.-J. Ulm Eds Springer, 2005.
- [13] N.T.D. Tran, J. Lewandowska, M. Vauclin and H. Bertin, “Two-scale modeling of solute dispersion in unsaturated double-porosity media: Homogenization and experimental validation”, *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, vol. 35, no. 14, pp. 1536-1559, 2011.

Trần Ngọc Tiến Dũng tốt nghiệp kỹ sư xây dựng Trường Đại học Bách Khoa, ĐHQG-HCM 2001, thạc sĩ kỹ thuật Môi trường ĐH INSA Lyon (Pháp) 2004 và tiến sĩ Khoa học Trái đất và Môi trường ĐH Grenoble (Pháp) 2008. Là nghiên cứu viên-giảng viên Trung tâm Châu Á Nghiên cứu về Nước (CARE), Trường Đại học Bách Khoa, ĐHQG-HCM. TS. Dũng quan tâm thực hiện các nghiên cứu liên ngành về Địa chất Thủy văn và Thủy văn Đô thị.

Phạm Minh Quang nghiên cứu viên Trung tâm CARE, Trường Đại học Bách Khoa, ĐHQG-HCM đến 2017. Nay ThS. Quang công tác tại Công Ty CP Nhựa Tân Phú.

Nguyễn Thống tốt nghiệp tiến sĩ Viện ĐH Bách khoa Grenoble (Pháp) 1991 và đạt học hàm PGS 2005. Hiện là chủ nhiệm bộ môn Kỹ thuật Tài nguyên Nước, Khoa Kỹ thuật Xây dựng, Trường Đại học Bách Khoa – ĐHQG-HCM.

Bùi Phạm Phương Thanh tốt nghiệp thạc sĩ 2013, là giảng viên Trường Đại học Thủ Dầu Một, Bình Dương từ năm 2010.

Trần Văn Tiêng tốt nghiệp tiến sĩ Đại học Grenoble (Pháp) 2011, là giảng viên Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật TP. HCM từ 2012. Hướng nghiên cứu chính của TS. Tiêng là phương pháp phần tử rời rạc để mô phỏng ứng xử của địa vật liệu bão hòa và chưa bão hòa.

A model of solute diffusion in unsaturated double-porosity medium by homogenization

Tran Ngoc Tien Dung, Pham Minh Quang, Nguyen Thong,
Bui Pham Phuong Thanh, Tran Van Tieng

Abstract— Solute diffusion is a key process in many fields like for example material science or environmental engineering. Diffusion mechanism in porous media is often described by Fick's law. However, we could not use this law for nonstandard diffusion behaviors occurring in cases of heterogeneous media. The conception of double-porosity medium can be applied to a class of such media. The double-porosity medium is characterized by two distinct pore sizes: macro-porosity domain and micro-porosity domain, respectively, having the contrasted hydraulic properties. This paper presents the development of a macroscopic model for the solute diffusion in unsaturated double-porosity medium, by using homogenization method. The obtained macroscopic model is a system of two equations coupling on the interface of the macro- and micro-porosity domain for diffusion. This model contains the effective diffusion tensor representing for the entire medium. The developed model is verified by comparing with the reference solution of the fine scale model through a 3D numerical example of hydrogeology problem.

Index Terms— diffusion, mass transport, double-porosity medium, homogenization.