

Homogénéisation d'un écoulement réactif à travers un pore, en présence des grands nombres de Peclet et Damkohler

Vincent Devigne¹, Andro Mikelić¹, Carole Rosier²

¹ Institut Camille Jordan, UFR Mathématiques, Site de Gerland

Bât. A, Université Claude Bernard Lyon 1,

50, avenue Tony Garnier, 69367 Lyon Cedex 07

² Laboratoire de Mathématiques Pures et Appliquées

Université du Littoral

50 rue F.Buisson, B.P. 699, 62228 Calais Cedex

Remerciements:

1. Cette recherche a bénéficié d'un support financier du GDR MOMAS (Modélisation Mathématique et Simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires: 2439 - ANDRA, BRGM, CEA, EDF, CNRS) au sein du projet "*Modélisation micro-macro des phénomènes couplés de transport-chimie-déformation en milieux argileux*", **Thème T.3 : Modélisation mathématique, changements d'échelle**, sous-projet "*Modélisation par homogénéisation du transport en milieux poreux fracturés, couplé avec adsorption, processus d'échanges surfaciques multi-sites et précipitations/cristallisations*"
2. Cette recherche est en collaboration avec C.J. van Duijn et I. S. Pop (TU Eindhoven, Pays-Bas)

Introduction

Dans beaucoup de processus surgissant en génie chimique il est important d'étudier la diffusion d'un soluté transporté par un fluide traversant un milieu poreux. En outre, il peut y avoir des réactions ou de processus d'adsorption se produisant aux interfaces solide/fluide.

Les exemples sont les systèmes chromatographiques, réacteurs hétérogènes de la technologie chimique et catalytique de réaction, l'utilisation des agents tensio-actifs (surfactants) dans des processus tertiaires de récupération du pétrole, problèmes environnementaux et écologiques..

Introduction

Dans beaucoup de processus surgissant en génie chimique il est important d'étudier la diffusion d'un soluté transporté par un fluide traversant un milieu poreux. En outre, il peut y avoir des réactions ou de processus d'adsorption se produisant aux interfaces solide/fluide.

Les exemples sont les systèmes chromatographiques, réacteurs hétérogènes de la technologie chimique et catalytique de réaction, l'utilisation des agents tensio-actifs (surfactants) dans des processus tertiaires de récupération du pétrole, problèmes environnementaux et écologiques..

Ces systèmes sont analysés en termes d'équations de dispersion pour le moment, l'énergie et le transfert de masse dans le milieu continu.

I2

En fait faire la moyenne des lois de conservation physiques devrait nous donner les coefficients de dispersion (= des coefficients efficaces). Néanmoins, il y a des difficultés: Même les modèles les plus simples contiennent des termes de transport de la forme $\vec{v} \cdot \nabla c$. Comme la vitesse et le gradient de la concentration sont oscillants, en général la **moyenne du produit est différente du produit des moyennes.**

I2

En fait faire la moyenne des lois de conservation physiques devrait nous donner les coefficients de dispersion (= des coefficients efficaces). Néanmoins, il y a des difficultés: Même les modèles les plus simples contiennent des termes de transport de la forme $\vec{v} \cdot \nabla c$. Comme la vitesse et le gradient de la concentration sont oscillants, en général la **moyenne du produit est différente du produit des moyennes**.

Par l'exemple dans la dispersion de Taylor le champ de vitesse contribue, après avoir fait la moyenne, à la diffusion efficace et on obtient le terme de la **dispersion mécanique** de Taylor. La présence des réactions chimiques complique en plus la détermination des **coefficients efficaces** puisqu'ils **peuvent dépendre du terme de réaction** ou de l'isotherme du processus d'adsorption d'une manière compliquée.

I3

Il est assez compliqué de déterminer cette dépendance en utilisant seulement les expériences de laboratoire. Afin de commencer par une situation simple, nous considérons un milieu poreux constitué en un faisceau de tubes capillaires. L'inconvénient est qu'un faisceau de tubes capillaires représente un modèle géométriquement trop simplifié d'un milieu poreux. Néanmoins, il y a une perspicacité considérable à gagner d'une telle analyse.

I3

Il est assez compliqué de déterminer cette dépendance en utilisant seulement les expériences de laboratoire. Afin de commencer par une situation simple, nous considérons un milieu poreux constitué en un faisceau de tubes capillaires. L'inconvénient est qu'un faisceau de tubes capillaires représente un modèle géométriquement trop simplifié d'un milieu poreux. Néanmoins, il y a une perspicacité considérable à gagner d'une telle analyse.

Nous commençons par un problème modèle :

Nous étudions la diffusion des particules de soluté transportées par le profil de Poiseuille dans un tuyau semi-infini 2D. Les particules de soluté sont des participants à une réaction chimique de premier ordre à la frontière du tuyau. Elles n'interagissent pas entre elles.

I4

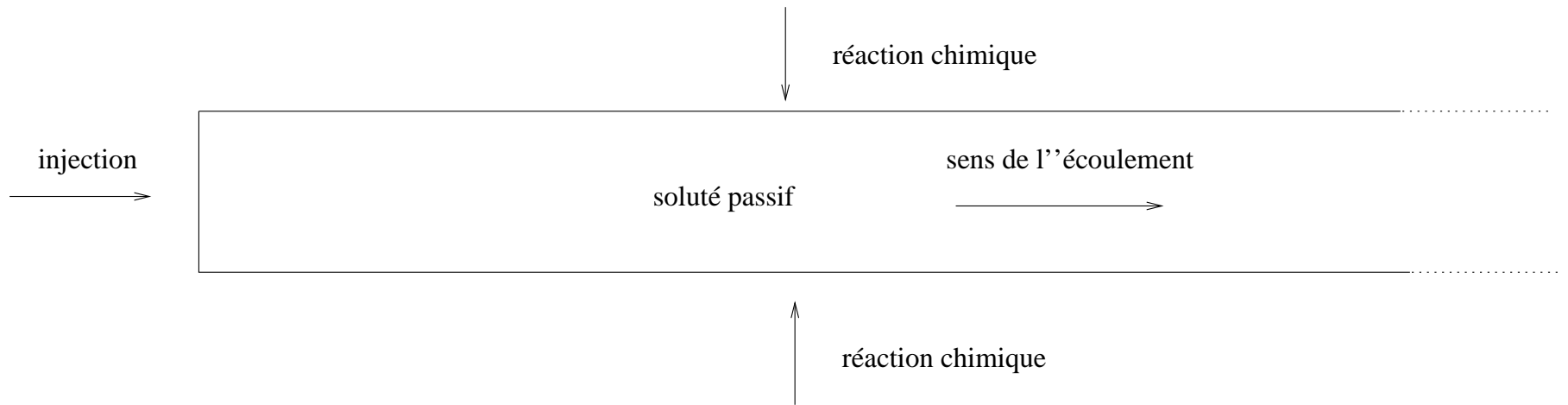


Figure 1: Le tuyau

I4

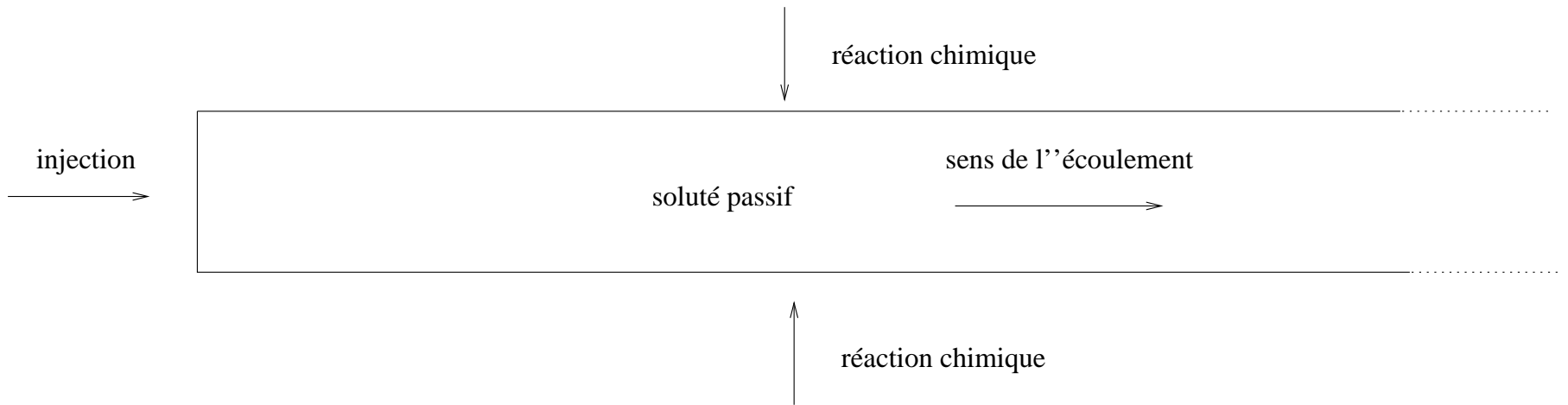
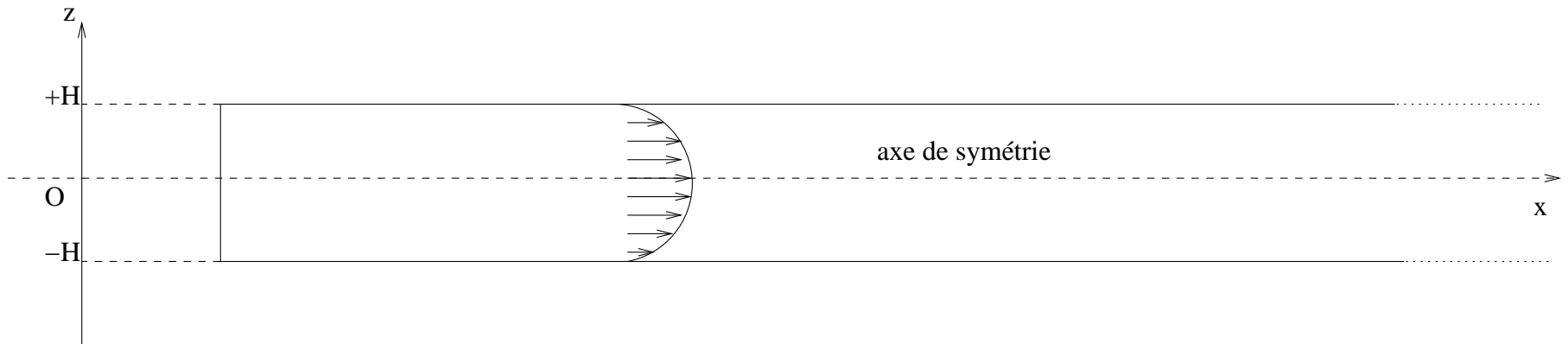


Figure 3: Le tuyau



I5

Un cas simple est donné par: le modèle suivant pour la concentration c^* du soluté:

$$\frac{\partial c^*}{\partial t^*} + q(z) \frac{\partial c^*}{\partial x^*} - D^* \Delta_{x^*,z} c^* = 0 \text{ dans } \mathbb{R}_+ \times (-H, H), \quad (1)$$

I5

Un cas simple est donné par: le modèle suivant pour la concentration c^* du soluté:

$$\frac{\partial c^*}{\partial t^*} + q(z) \frac{\partial c^*}{\partial x^*} - D^* \Delta_{x^*,z} c^* = 0 \quad \text{dans } \mathbb{R}_+ \times (-H, H), \quad (3)$$

où $q(z) = Q^*(1 - (z/H)^2)$ et Q^* (**la vitesse**) et D^* (**diffusion moléculaire**) sont des constantes positives. Sur la frontière latérale $z = \pm H$ nous avons une réaction chimique du 1er ordre:

$$D^* \partial_z c^* + k^* c^* = 0 \quad \text{sur } z = \pm H, \quad (4)$$

où k^* est le **coefficient de la réactivité surfacique**.

En effet, nous avons une **réaction chimique hétérogène, irréversible et d'ordre un, avec l'équilibre entre le fluide et les espèces adsorbées**.

I4

Le façon naturel d'aborder le problème est l'introduction des échelles appropriées.

Nous avons la concentration caractéristique \hat{c} , la longueur caractéristique L_R , la vitesse caractéristique Q_R , la diffusivité caractéristique D_R et le temps caractéristique T_c . La longueur caractéristique L_R coïncide avec la "distance de l'observation". $t = t^*/T_C$, $x = x^*/L_R$ et $y = z/H$.

I4

Le façon naturel d'aborder le problème est l'introduction des échelles appropriées.

Nous avons la concentration caractéristique \hat{c} , la longueur caractéristique L_R , la vitesse caractéristique Q_R , la diffusivité caractéristique D_R et le temps caractéristique T_c . La longueur caractéristique L_R coïncide avec la "distance de l'observation". $t = t^*/T_C$, $x = x^*/L_R$ et $y = z/H$.

Problème contient les échelles temporelles suivantes:

T_L = l'échelle temporelle longitudinale caractéristique $= L_R / Q_R$

T_T = l'échelle temporelle transversale caractéristique $= H^2 / D_R$

T_R = l'échelle temporelle caractéristique pour la réaction chimique surfacique $= H / k_R$

I5A

et les nombres sans dimension suivants

$$\mathbf{Pe} = \frac{L_R Q_R}{D_R} \quad (\text{le nombre de Peclet})$$

$$\mathbf{Da} = \frac{L_R^2 k_R}{H D_R} \quad (\text{le nombre de Damkohler})$$

Nous posons $\varepsilon = \frac{H}{L_R} \ll 1$ et nous prenons $T_c = T_L$.

I5A

et les nombres sans dimension suivants

$$\mathbf{Pe} = \frac{L_R Q_R}{D_R} \quad (\text{le nombre de Peclet})$$

$$\mathbf{Da} = \frac{L_R^2 k_R}{H D_R} \quad (\text{le nombre de Damkohler})$$

Nous posons $\varepsilon = \frac{H}{L_R} \ll 1$ et nous prenons $T_c = T_L$.

La résolution du problème complet pour des valeurs arbitraires est coûteuse et pratiquement impossible. En conséquence, **nous cherchons une valeur efficace (ou moyenne) du coefficient de la dispersion et de la vitesse de transport, avec une équation efficace parabolique 1D correspondante pour la concentration efficace.** En 1953 G.I. Taylor a trouvé une formule explicite pour le coefficient de la dispersion, qu'on appelle la formule *de dispersion de Taylor*.

I6

Nous prenons $Q = \frac{Q^*}{Q_R} = \mathcal{O}(1)$, et

$$\frac{T_T}{T_L} = \frac{HQ_R}{D_R} \varepsilon = \mathcal{O}(\varepsilon^{2-\alpha}) = \varepsilon^2 \mathbf{Pe}.$$

La dispersion de Taylor correspond à $\alpha = 1$ et $k = 0$.

I6

Nous prenons $Q = \frac{Q^*}{Q_R} = \mathcal{O}(1)$, et

$$\frac{T_T}{T_L} = \frac{HQ_R}{D_R} \varepsilon = \mathcal{O}(\varepsilon^{2-\alpha}) = \varepsilon^2 \mathbf{Pe}.$$

La dispersion de Taylor correspond à $\alpha = 1$ et $k = 0$.

Notre domain est la bande $Z^+ = \mathbb{R}_+ \times (0, 1)$. Soit

$\mathbf{Da} = k_0 \varepsilon^{-\alpha}$. Nous nous limitons au cas $\boxed{0 \leq \alpha < 2}$. En utilisant l'anti-symétrie de c , par rapport à y , nos équations sans dimension sont:

I7

$$\frac{\partial c}{\partial t} + Q(1 - y^2) \frac{\partial c}{\partial x} = D\varepsilon^\alpha \partial_{xxx} c + D\varepsilon^{\alpha-2} \partial_{yyy} c \text{ dans } Z^+ \quad (5)$$

$$c(x, y, 0) = 1, \quad (x, y) \in \mathbb{R}_+ \times (0, 1), \quad (6)$$

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \partial_y c|_{y=1} = -D \frac{1}{\varepsilon^2 \mathbf{Pe}} \partial_y c|_{y=1} =$$

$$k_0 \frac{\mathbf{Da}}{\mathbf{Pe}} c|_{y=1} = k_0 c|_{y=1} \quad (7)$$

$$\partial_y c(x, 0, t) = 0, \quad (x, t) \in \mathbb{R}_+ \times (0, T) \quad (8)$$

$$\text{et } c(0, y, t) = 0, \quad (y, t) \in (0, 1) \times (0, T), \quad (9)$$

Nous étudions le comportement de la solution de (5) -(9), avec $\nabla_{x,y} c$ dans L^2 , lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$.

I8

Le problème efficace avec le coefficient de dispersion de Taylor:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c^{Tay} + \frac{2Q}{3} \partial_x c^{Tay} = \varepsilon \left(D + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \right) \partial_{xx} c^{Tay}, \\ \text{in } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \quad c^{Tay}|_{x=0} = 1, \\ c^{Tay}|_{t=0} = 0, \quad \partial_x c^{Tay} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)), \end{array} \right. \quad (10)$$

Est-ce qu'on sait obtenir (10) ?

I8

Le problème efficace avec le coefficient de dispersion de Taylor:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c^{Tay} + \frac{2Q}{3} \partial_x c^{Tay} = \varepsilon \left(D + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \right) \partial_{xx} c^{Tay}, \\ \text{in } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \quad c^{Tay}|_{x=0} = 1, \\ c^{Tay}|_{t=0} = 0, \quad \partial_x c^{Tay} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)), \end{array} \right. \quad (11)$$

Est-ce qu'on sait obtenir (10) ?

- ◇ **Dérivation formelle en utilisant la méthode des moments** : voir l'article de R. Aris, Proc. Roy. Soc. London (1956)
- ◇ **Dérivation "presque rigoureuse" en utilisant la méthode de la variété centrale** : voir Mercer et Roberts, SIAM J. Appl. Math. (1990)

I10

- ◇ Et si on ajoute la chimie ?
 - Notons l'approche par M.A. Paine, R.G. Carbonell and S. Whitaker dans *Chemical Engineering Science*, (1983), où les auteurs utilisent les schemas de fermeture dit du single point de Launder utilisé en turbulence pour tronquer les moments et pour trouver une équation non-locale dans notre situation. En plus leur coefficients ne sont pas déterminés.
 - L'approche par la méthode de la variété centrale est dans l'article par Balakotaiah et Chang, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* (1995), où ils jouent avec le rapport du temps de diffusion transversale et de celui du transport transport longitudinal.

I11

Notre technique est motivée par l'article par J. Rubinstein et R. Mauri dans SIAM J. Appl. Math. (1986), où l'analyse est basée sur l'**hiérarchie des échelles temporelles**.

I11

Notre technique est motivée par l'article par J. Rubinstein et R. Mauri dans SIAM J. Appl. Math. (1986), où l'analyse est basée sur l'**hiérarchie des échelles temporelles**.

A notre connaissance, le seul résultat totalement **rigoureux** est celui de A. Bourgeat, M. Jurak and A.L. Piatnitski, dans Math. Meth. Appl. Sci. (2003), mais dans le contexte du transport à travers un milieu poreux mésoscopique, en absence de la chimie. Leur approche est basée sur le développement asymptotique, en utilisant des solutions régulières pour l'équation du transport linéaire et cette approche demande une grande compatibilité des données.

La moyenne simple

L'approche naturelle pour trouver une équation pour la concentration efficace est de prendre la moyenne du système (5)-(9) par rapport à y . Soit $c_0^{eff} = \langle c^\varepsilon \rangle = \int_0^1 c^\varepsilon dy$. En supposant que la moyenne du produit vaut le produit des moyennes, ce qui est incorrect en général, nous obtenons le problème suivant pour $c_0^{eff}(x, t)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c_0^{eff}}{\partial t} + \frac{2Q}{3} \frac{\partial c_0^{eff}}{\partial x} + k_0 c_0^{eff} = \varepsilon^\alpha D \frac{\partial^2 c_0^{eff}}{\partial x^2} \text{ in} \\ \mathbb{R}_+ \times (0, T), \quad \partial_x c_0^{eff} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) \\ c_0^{eff}|_{t=0} = 1, \quad c_0^{eff}|_{x=0} = 0. \end{array} \right. \quad (12)$$

La moyenne simple

L'approche naturelle pour trouver une équation pour la concentration efficace est de prendre la moyenne du système (5)-(9) par rapport à y . Soit $c_0^{eff} = \langle c^\varepsilon \rangle = \int_0^1 c^\varepsilon dy$. En supposant que la moyenne du produit vaut le produit des moyennes, ce qui est incorrect en général, nous obtenons le problème suivant pour $c_0^{eff}(x, t)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c_0^{eff}}{\partial t} + \frac{2Q}{3} \frac{\partial c_0^{eff}}{\partial x} + k_0 c_0^{eff} = \varepsilon^\alpha D \frac{\partial^2 c_0^{eff}}{\partial x^2} \text{ in} \\ \mathbb{R}_+ \times (0, T), \quad \partial_x c_0^{eff} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) \\ c_0^{eff}|_{t=0} = 1, \quad c_0^{eff}|_{x=0} = 0. \end{array} \right. \quad (13)$$

Peut-on comparer $c_0^{eff}(x, t)$ et $c^\varepsilon(x, y, t)$? Oui, et voici le résultat:

S1

Proposition 2

$$\|(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^\infty(0,T;L^2(Z^+))} \leq \varepsilon^{1-\alpha/2} \frac{F^0}{\sqrt{D}} \quad (14)$$

$$\|\partial_x(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{1-\alpha} \frac{F^0}{D} \quad (15)$$

$$\|\partial_y(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{2-\alpha} \frac{F^0}{D}, \quad (16)$$

Mais $\|\partial_x c_0^{eff}\|_{L^2(O_T)}^2 = \int_0^T \int_0^{+\infty} |\partial_x c_0^{eff}|^2 = C\varepsilon^{-\alpha/4}$ et

$$F^0 = C_1^F \|\partial_x c_0^{eff}\|_{L^2(O_T)} + C_2^F k_0 \leq C_3^F \varepsilon^{-\alpha/4} \quad (17)$$

S1

Proposition 2

$$\|(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^\infty(0,T;L^2(Z^+))} \leq \varepsilon^{1-\alpha/2} \frac{F^0}{\sqrt{D}} \quad (18)$$

$$\|\partial_x(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{1-\alpha} \frac{F^0}{D} \quad (19)$$

$$\|\partial_y(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{2-\alpha} \frac{F^0}{D}, \quad (20)$$

Mais $\|\partial_x c_0^{eff}\|_{L^2(O_T)}^2 = \int_0^T \int_0^{+\infty} |\partial_x c_0^{eff}|^2 = C\varepsilon^{-\alpha/4}$ et

$$F^0 = C_1^F \|\partial_x c_0^{eff}\|_{L^2(O_T)} + C_2^F k_0 \leq C_3^F \varepsilon^{-\alpha/4} \quad (21)$$

\Rightarrow

S5

$$\|c^\varepsilon - c_0^{eff}\|_{L^\infty(0,T;L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0,1)))} \leq C\varepsilon^{1-3\alpha/4} \quad (22)$$

UNE MAUVAISE APPROXIMATION. POUR $\alpha > 4/3$ ON PERD L'APPROXIMATION.

S5

$$\|c^\varepsilon - c_0^{eff}\|_{L^\infty(0,T;L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0,1)))} \leq C\varepsilon^{1-3\alpha/4} \quad (24)$$

UNE MAUVAISE APPROXIMATION. POUR $\alpha > 4/3$ ON PERD L'APPROXIMATION.

COMMENT FAIRE MIEUX ?

Voici le modèle de Paine et al:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c^{Pai} + Q\left(\frac{2}{3} + A_1\right) \partial_x c^{Pai} + C_2 c^{Pai} = K^* \partial_{xx} c^{Pai}, \\ \text{dans } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \partial_x c^{Pai} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) \\ c^{Pai}|_{x=0} = 0, c^{Pai}|_{t=0} = 1, \end{array} \right. \quad (25)$$

où A_1 dépend du moment d'ordre zéro de c^{Pai} et $q c^{Pai}$ et K^* dépendent des moments d'ordre zéro, 1 et 2 des mêmes quantités et du nombre de Peclet.

S6

Ici on a un problème non-local et sa résolution demande un schéma itératif. Encore pire: le modèle a été obtenu par une hypothèse de fermeture AD HOC.

Nous avons obtenu un modèle efficace différent:

S6

Ici on a un problème non-local et sa résolution demande un schéma itératif. Encore pire: le modèle a été obtenu par une hypothèse de fermeture AD HOC.

Nous avons obtenu un modèle efficace différent:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c^{Mau} + Q \left(\frac{2}{3} + \frac{4k_0}{45D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) \partial_x c^{Mau} + k_0 \left(1 - \frac{k_0}{3D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) c^{Mau} = \left(D \varepsilon^\alpha + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) \partial_{xx} c^{Mau} \\ \text{in } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \quad c^{Mau}|_{x=0} = 0, \\ c^{Mau}|_{t=0} = 1, \quad \partial_x c^{Mau} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)). \end{array} \right. \quad (EFF)$$

Pour $k_0 = 0$ et $\alpha = 1$ nous trouvons le modèle de la dispersion de Taylor.

S7

Revenons à la forme dimensionnelle:

Théorème 1 Supposons que

$$T_L > \max\{D_R/Q_R^2, T_T, H/Q_R\}.$$

L'approximation efficace *dimensionnelle* pour (1) est alors

S7

Revenons à la forme dimensionnelle:

Théorème 1 Supposons que

$$T_L > \max\{D_R/Q_R^2, T_T, H/Q_R\}.$$

L'approximation efficace *dimensionnelle* pour (1) est alors

$$\begin{aligned} \frac{\partial c^{*,eff}}{\partial t^*} + \left(\frac{2}{3} + \frac{4}{45}\mathbf{Da}_T\right)Q^* \frac{\partial c^{*,eff}}{\partial x^*} + \frac{k^*}{H} \left(1 - \frac{1}{3}\mathbf{Da}_T\right)c^{*,eff} \\ = D^* \left(1 + \frac{8}{945}\mathbf{Pe}_T^2\right) \frac{\partial^2 c^{*,eff}}{\partial (x^*)^2}, \end{aligned} \quad (27)$$

où $\mathbf{Pe}_T = \frac{Q^* H}{D^*}$ est le nombre de Peclet transversal

S8

et $\mathbf{Da}_T = \frac{k^* H}{D^*}$ est le nombre de Damkohler transversal.

Pourquoi notre modèle est-il meilleur que ceux que l'on trouve dans la littérature ? : car nous sommes capables d'en donner l'erreur d'approximation

Théorème 2 Soit c^{Ma} donnée par (EFF). Alors pour $\forall \delta > 0$ on a

S8

et $\mathbf{Da}_T = \frac{k^* H}{D^*}$ est le nombre de Damkohler transversal.

Pourquoi notre modèle est-il meilleur que ceux que l'on trouve dans la littérature ? : car nous sommes capables d'en donner l'erreur d'approximation

Théorème 2 Soit c^{Mau} donnée par (EFF). Alors pour $\forall \delta > 0$ on a

$$\|t^5 (c^\varepsilon - c^{Mau} - \mathbf{correcteur})\|_\infty \leq \begin{cases} C\varepsilon^{4-7\alpha/2-\delta}, & \alpha < 1, \\ C\varepsilon^{3/2-\alpha-\delta}, & \alpha \in [1, 2). \end{cases} \quad (31)$$

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^1_{loc}(Z^+))} \leq C\varepsilon^{2-\alpha} \quad (32)$$

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} \leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4} H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4} H(\alpha-1)) \quad (33)$$

S10

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_y c^\varepsilon\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4} H(1-\alpha) \\ &\quad + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4} H(\alpha-1)) \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_x (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq \\ C(\varepsilon^{2-7\alpha/4} H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-5\alpha/4} H(\alpha-1)) &\end{aligned} \quad (35)$$

S10

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_y c^\varepsilon\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4} H(1-\alpha) \\ &\quad + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4} H(\alpha-1)) \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_x (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq \\ C(\varepsilon^{2-7\alpha/4} H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-5\alpha/4} H(\alpha-1)) &\end{aligned} \quad (39)$$

Corollaire Dans les conditions de l'article de Taylor, $\alpha = 1$ et $k_0 = 0$, et nous avons

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau} - \mathbf{correcteurs})\|_{L^\infty(O_T)} \leq C\varepsilon^{1/2-\delta}, \quad \forall \delta > 0, \quad (40)$$

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^1_{loc}(Z^+))} \leq C\varepsilon \quad (41)$$

S11

Comment nous obtenons nos résultats ?

- **1er ETAPE:** Nous faisons un développement formel, en suivant Rubinstein et Mauri. Au lieu d'utiliser l'équation hyperbolique, obtenu à l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^{\alpha-1})$ nous supposons que l'opérateur hyperbolique est d'ordre ε . Ensuite nous le récupérons à l'ordre suivant, ce qui nous donne une équation parabolique. Malheureusement, les coefficients devant les opérateurs dépendent de ε^α et de $\varepsilon^{\alpha-2}$, respectivement. En conséquence, les dérivées vont croître avec des exposants négatifs de ε . En plus, le développement asymptotique est par rapport à $\varepsilon^{2-\alpha}$.

S12

- **2ème ETAPE:** Ensuite nous calculons l'énergie de la différence entre c^ε et $c^{Ma\mu}$ + le premier correcteur,

$$\varepsilon^{2-\alpha} \left(\frac{Q}{D} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} \right) \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{k}{D} \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) c(x, t; \varepsilon) \right)$$

tronquée à $t = 0$ et corrigée en $x = 0$ par une couche limite.

- **3ème ETAPE:** Nous ajoutons le correcteur suivant et par des techniques L^1 et par les estimations de Nash-Moser, nous obtenons des estimations annoncées.

S12

- **2ème ETAPE:** Ensuite nous calculons l'énergie de la différence entre c^ε et $c^{Ma\mu}$ + le premier correcteur,

$$\varepsilon^{2-\alpha} \left(\frac{Q}{D} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} \right) \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{k}{D} \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) c(x, t; \varepsilon) \right)$$

tronquée à $t = 0$ et corrigée en $x = 0$ par une couche limite.

- **3ème ETAPE:** Nous ajoutons le correcteur suivant et par des techniques L^1 et par les estimations de Nash-Moser, nous obtenons des estimations annoncées.

Pour les détails voir

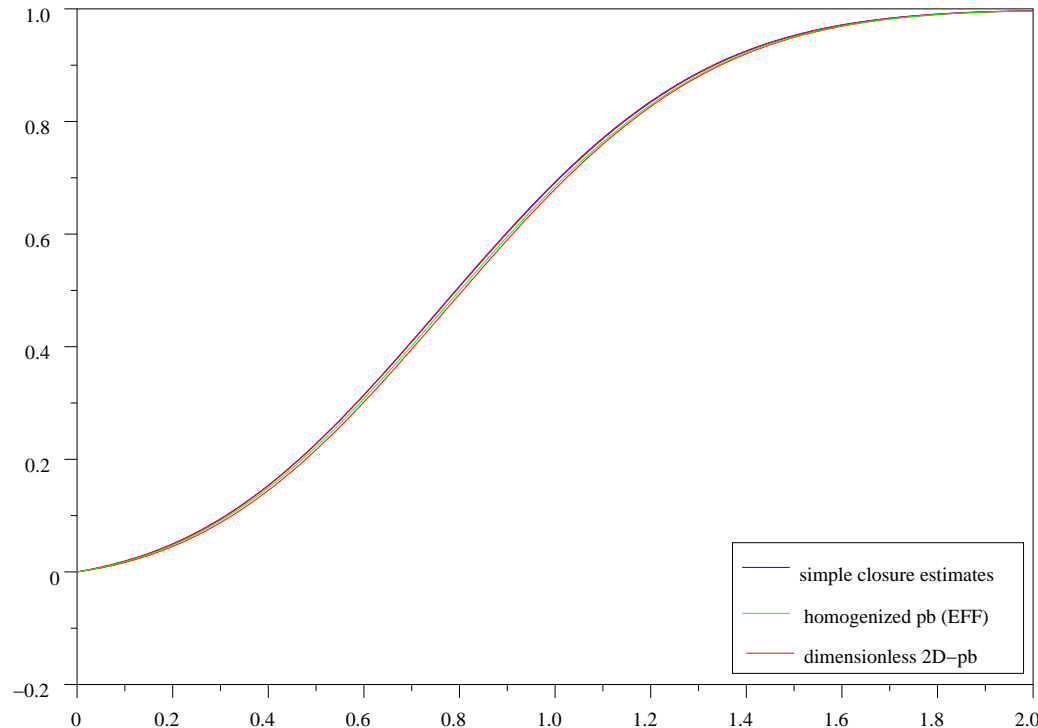
Comparaison numérique

A. Mikelić, V. Devigne, C.J. van Duijn, Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers, CASA report no. 19, Mai 2005, www.win.tue.nl/casa/research/casareports/2005.1

Comparaison numérique

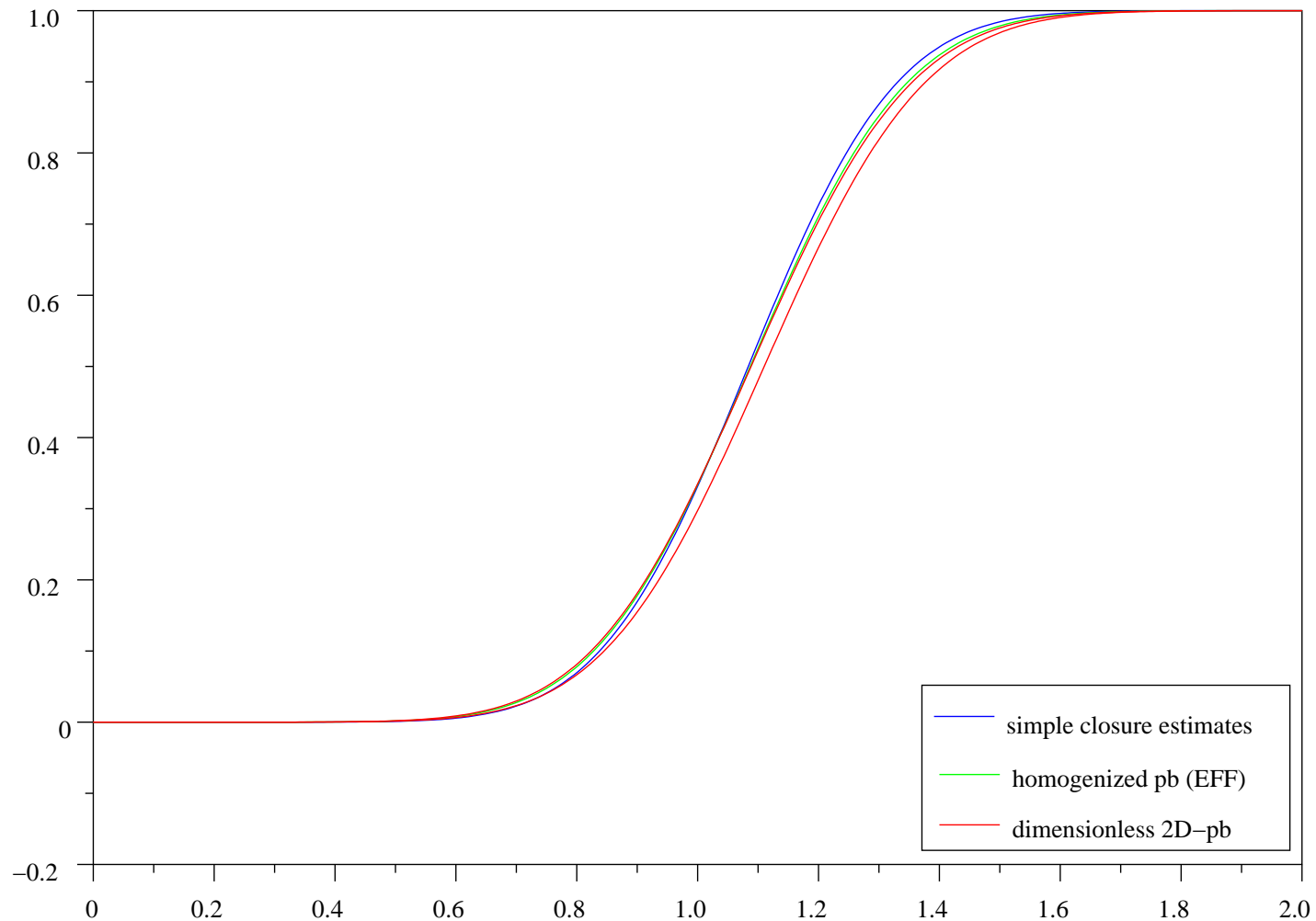
A. Mikelić, V. Devigne, C.J. van Duijn, Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers, CASA report no. 19, Mai 2005, www.win.tue.nl/casa/research/casareports/2005.1

Concentrations for $t=1$, $dt=0.0005$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.1$, $Q=2$, $D=1$, $k=1$



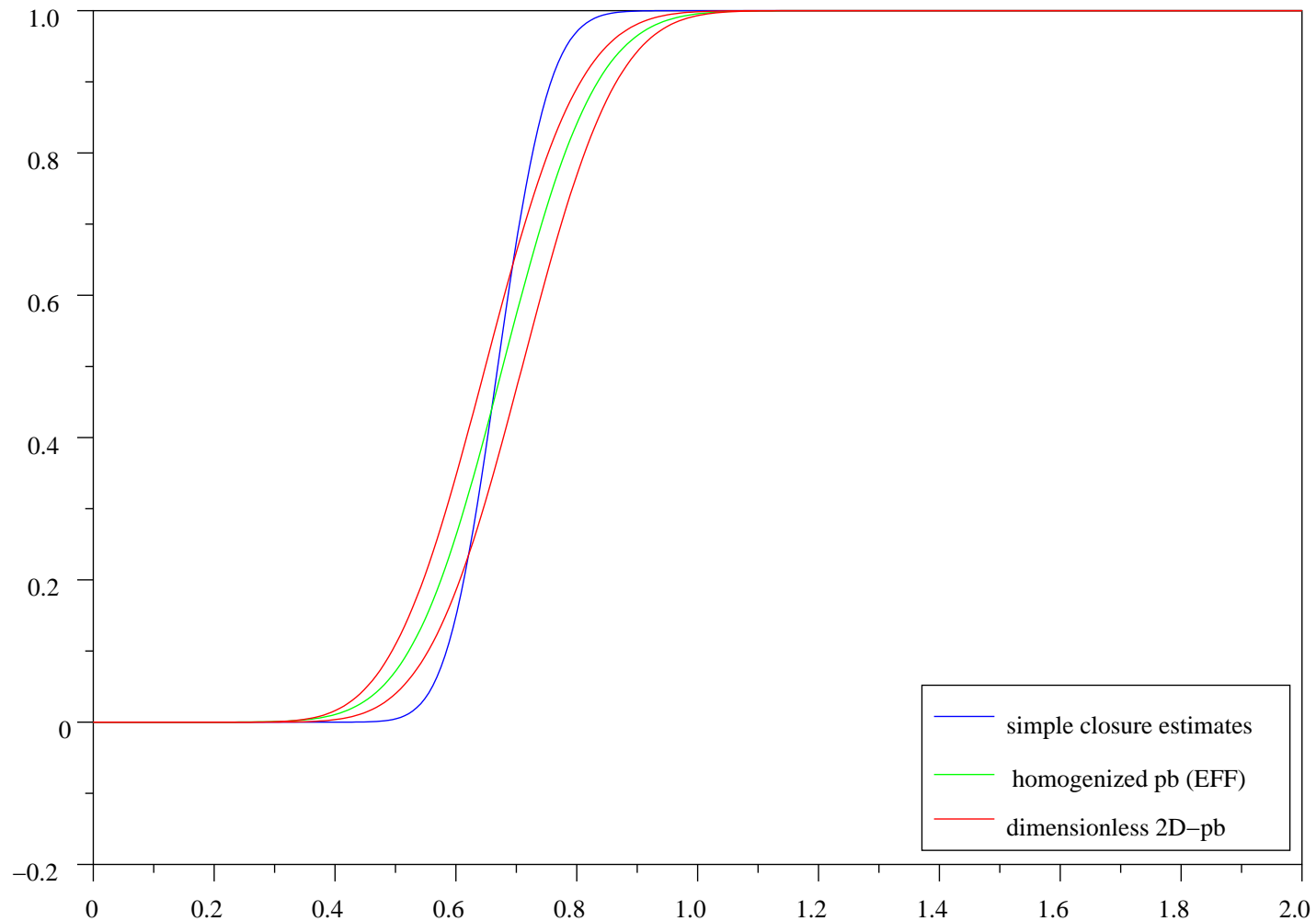
Comparaison numérique 2

Concentrations for $t=1$, $dt=0.0005$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.1$, $Q=2$, $D=1$, $k=0.1$



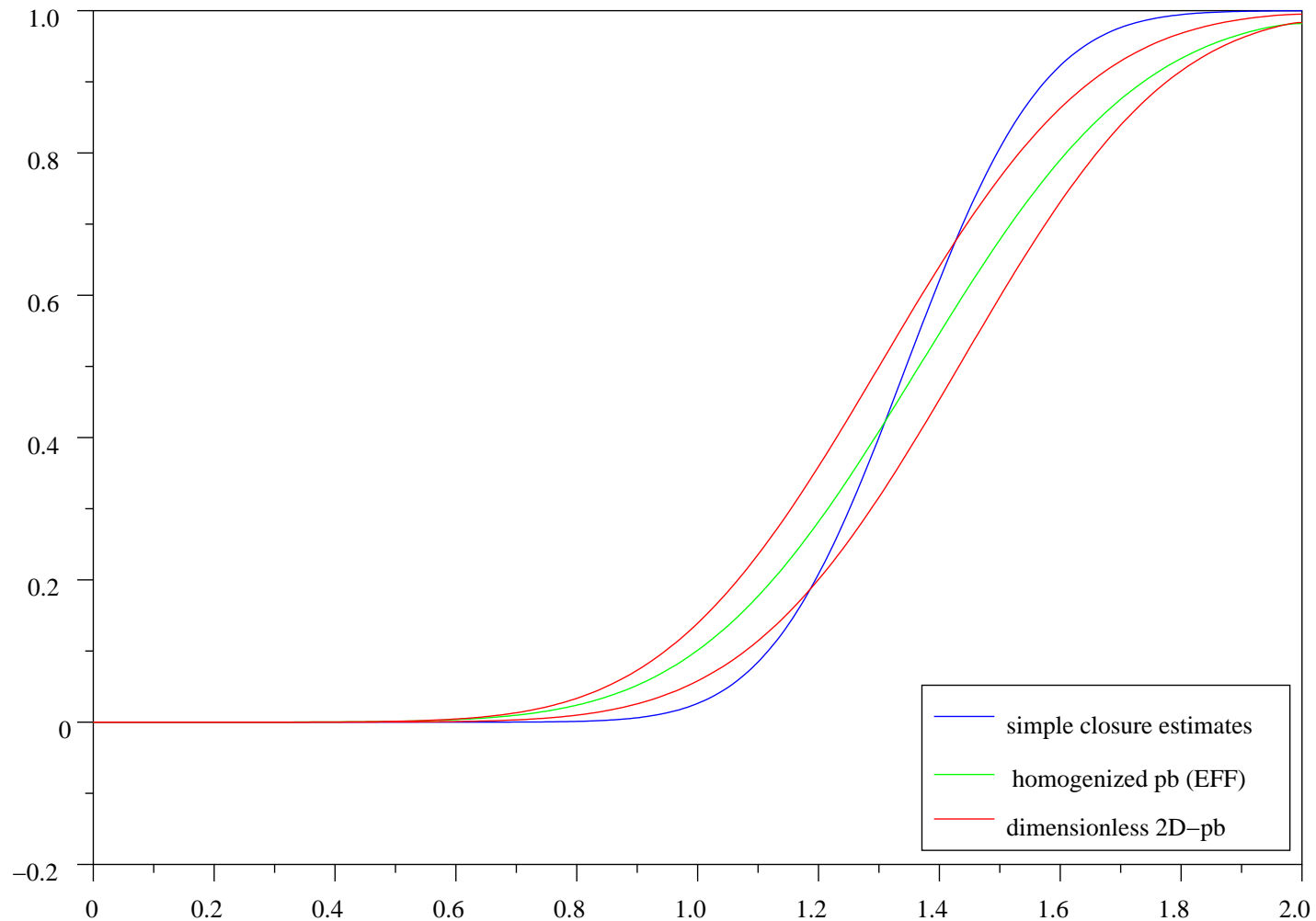
Comparaison numérique 3

Concentrations for $t=1$, $dt=0.0005$, $\alpha=1.9$, $\epsilon=0.01$, $Q=1$, $D=1$, $k=1$



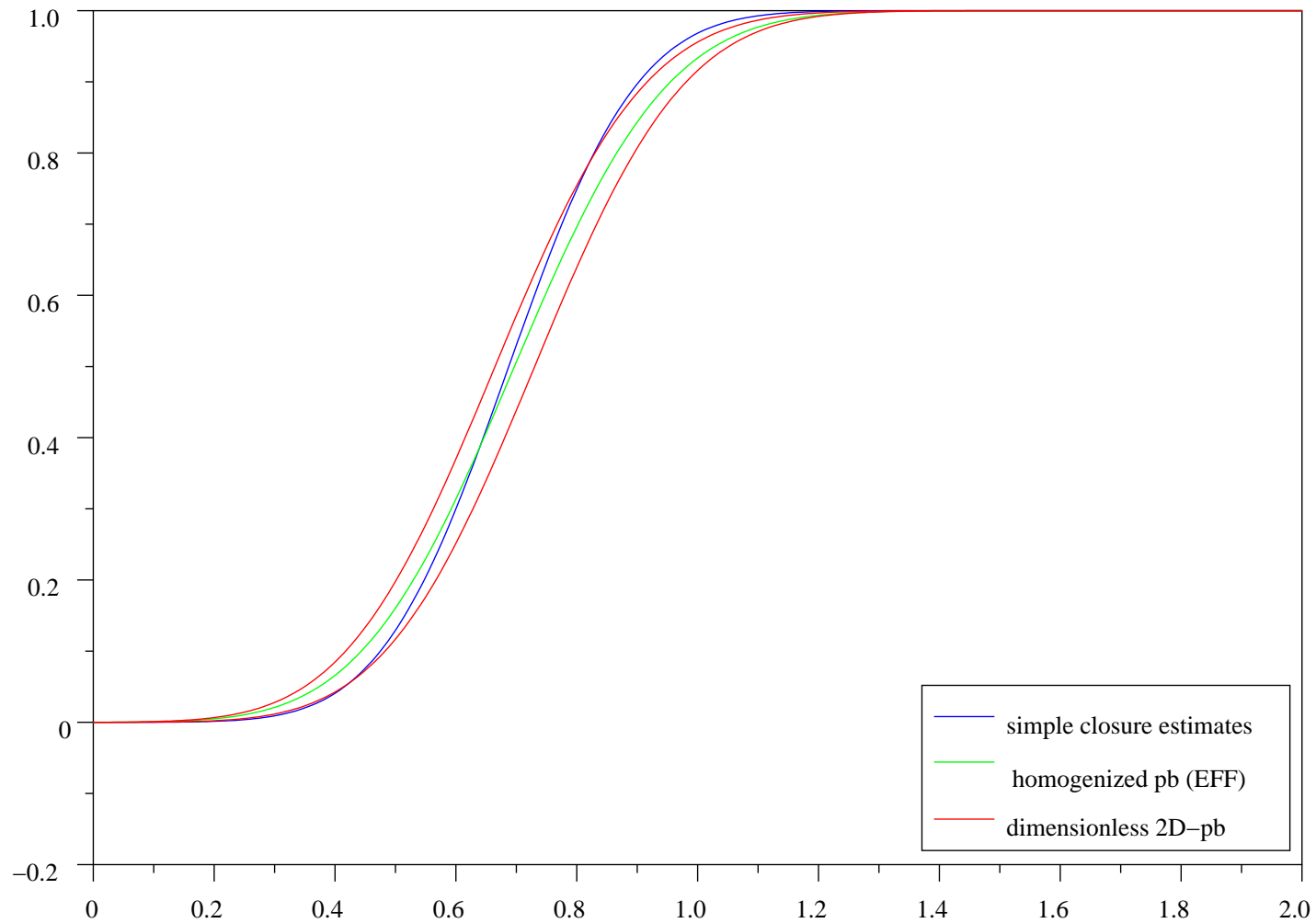
Comparaison numérique 4

Concentrations for $t=1$, $dt=0.001$, $\alpha=1.9$, $\epsilon=0.1$, $Q=2$, $D=1$, $k=1$



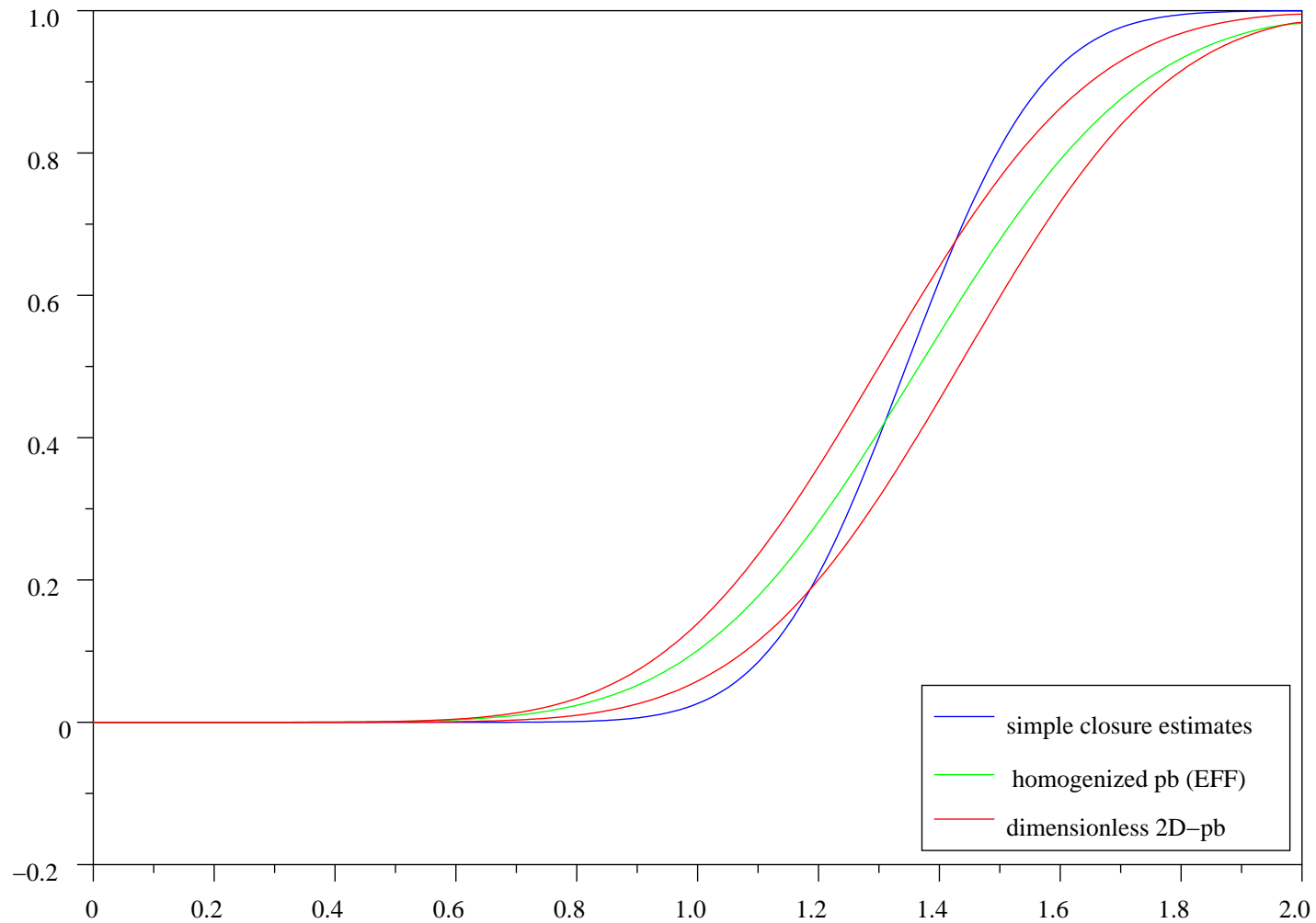
Comparaison numérique 4A

Concentrations for $t=1$, $dt=0.001$, $\alpha=1.9$, $\epsilon=0.1$, $Q=1$, $D=1$, $k=0.1$



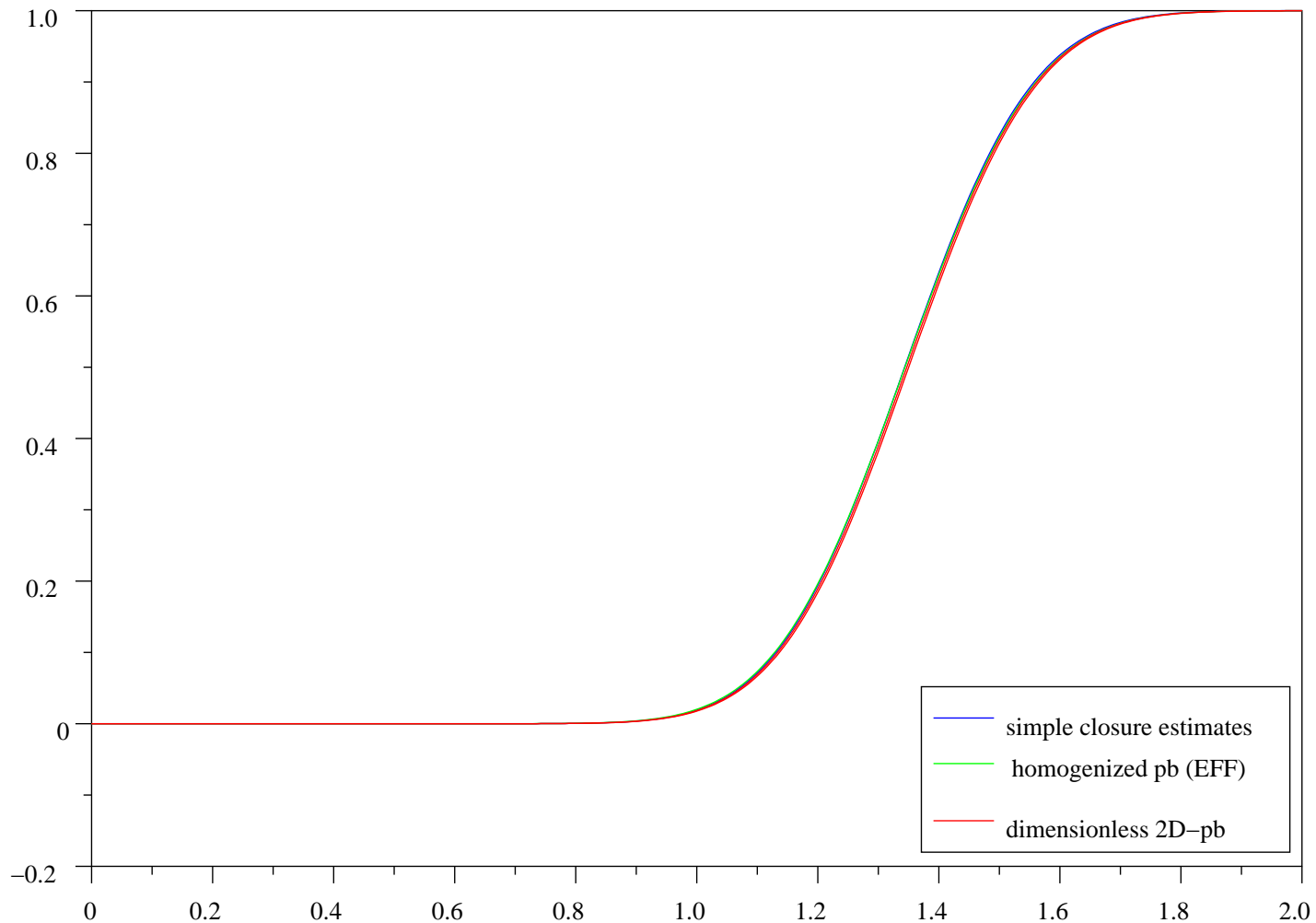
Comparaison numérique 4B

Concentrations for $t=1$, $dt=0.001$, $\alpha=1.9$, $\epsilon=0.1$, $Q=2$, $D=1$, $k=1$



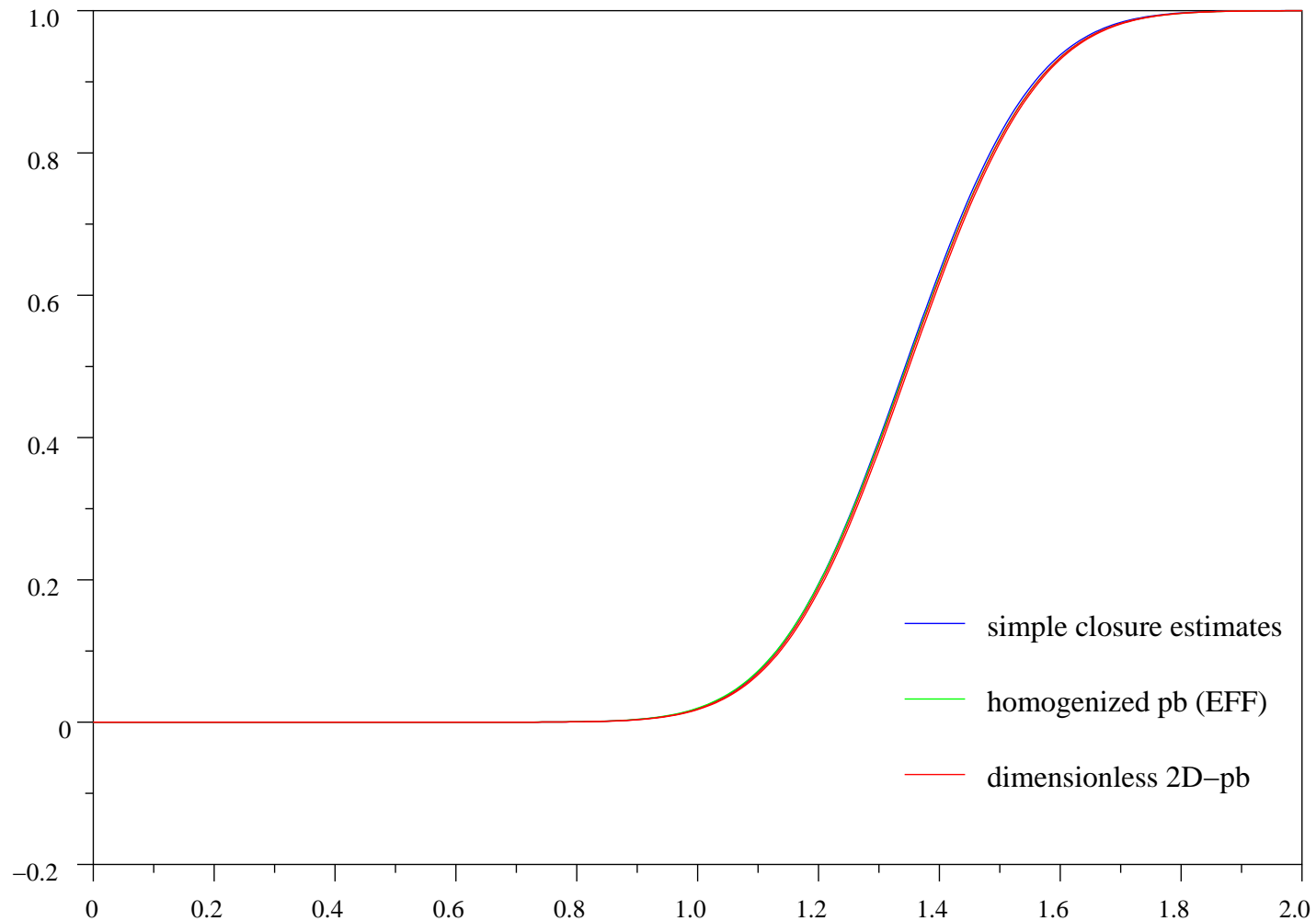
Comparaison numérique 5

Concentrations for $t=1$, $dt=0.0005$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.01$, $Q=2$, $D=1$, $k=0.1$



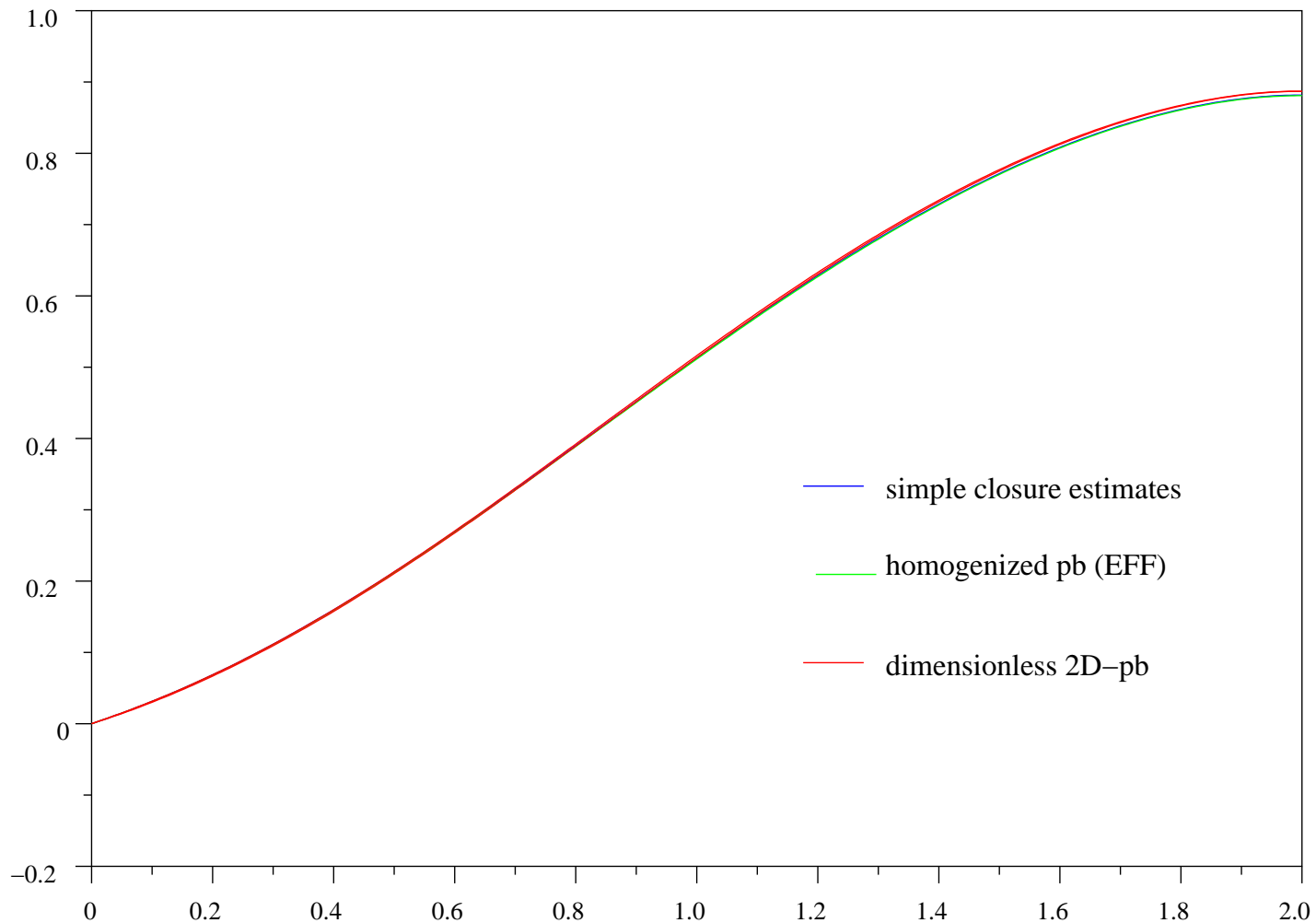
Comparaison numérique 6

Concentrations for $t=1$, $dt=0.0005$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.01$, $Q=2$, $D=1$, $k=1$



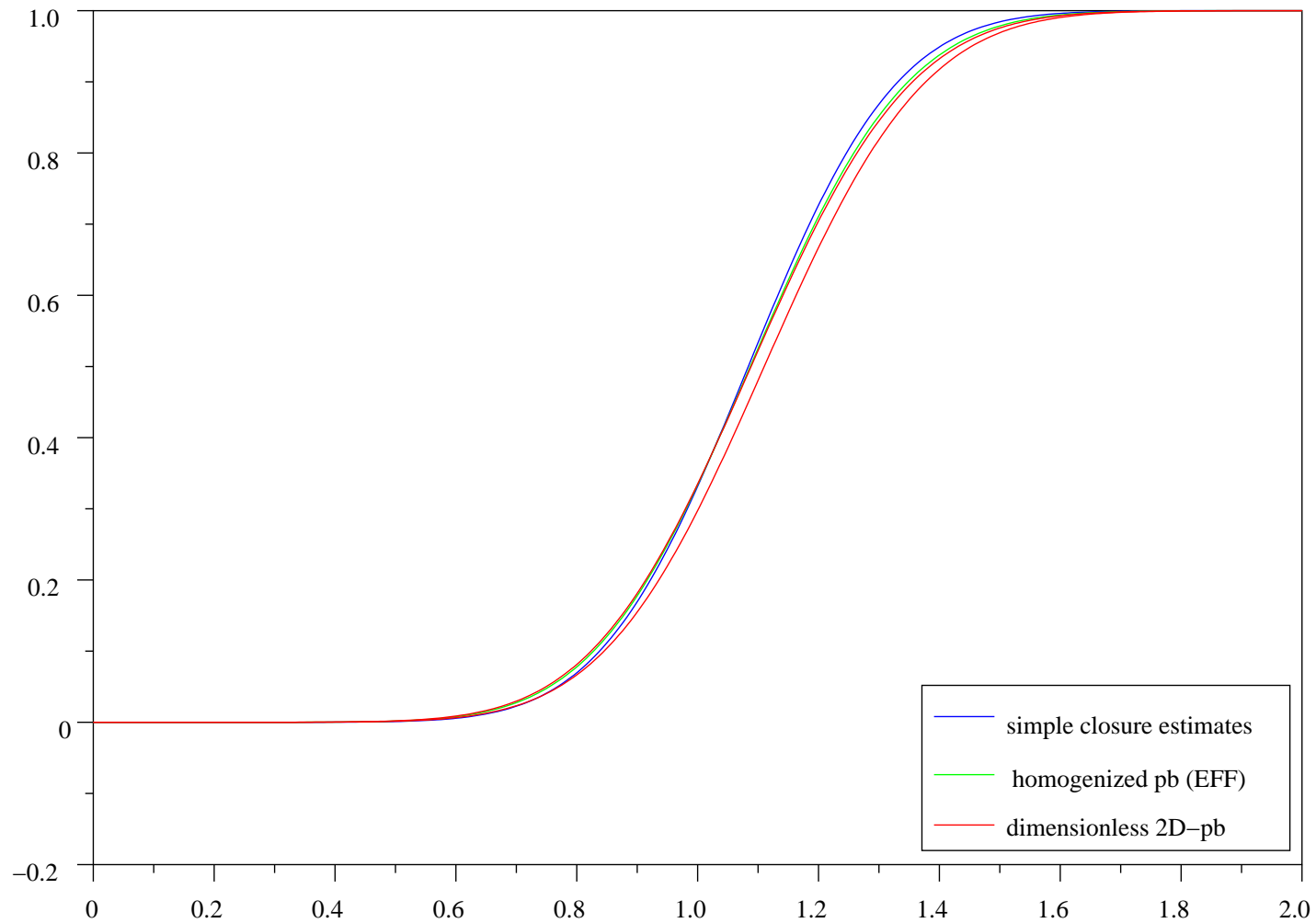
Comparaison numérique 7

Concentrations for $t=1$, $dt=0.001$, $\alpha=0.5$, $\epsilon=0.1$, $Q=2$, $D=1$, $k=0.1$



Comparaison numérique 8

Concentrations for $t=1$, $dt=0.0005$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.1$ $Q=2$, $D=1$, $k=0.1$



Deuxieme problème 3

Deuxieme problème

Maintenant nous s'intéressons au cas quand la constante représentant le taux d'adsorption est infiniment grande. Plus précisément, la condition (2) est remplacée par

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = K_e \frac{\partial c^*}{\partial t^*} \quad \text{sur } z = \pm H, \quad (42)$$

Dans la forme adimensionnée, (42) devient

$$-D \varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = -D \frac{1}{\varepsilon^2 \mathbf{Pe}} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = K \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} \quad \text{on } \Gamma^+ \times (0, T) \quad (43)$$

Maintenant le problème efficace devient

Deuxieme problème 1

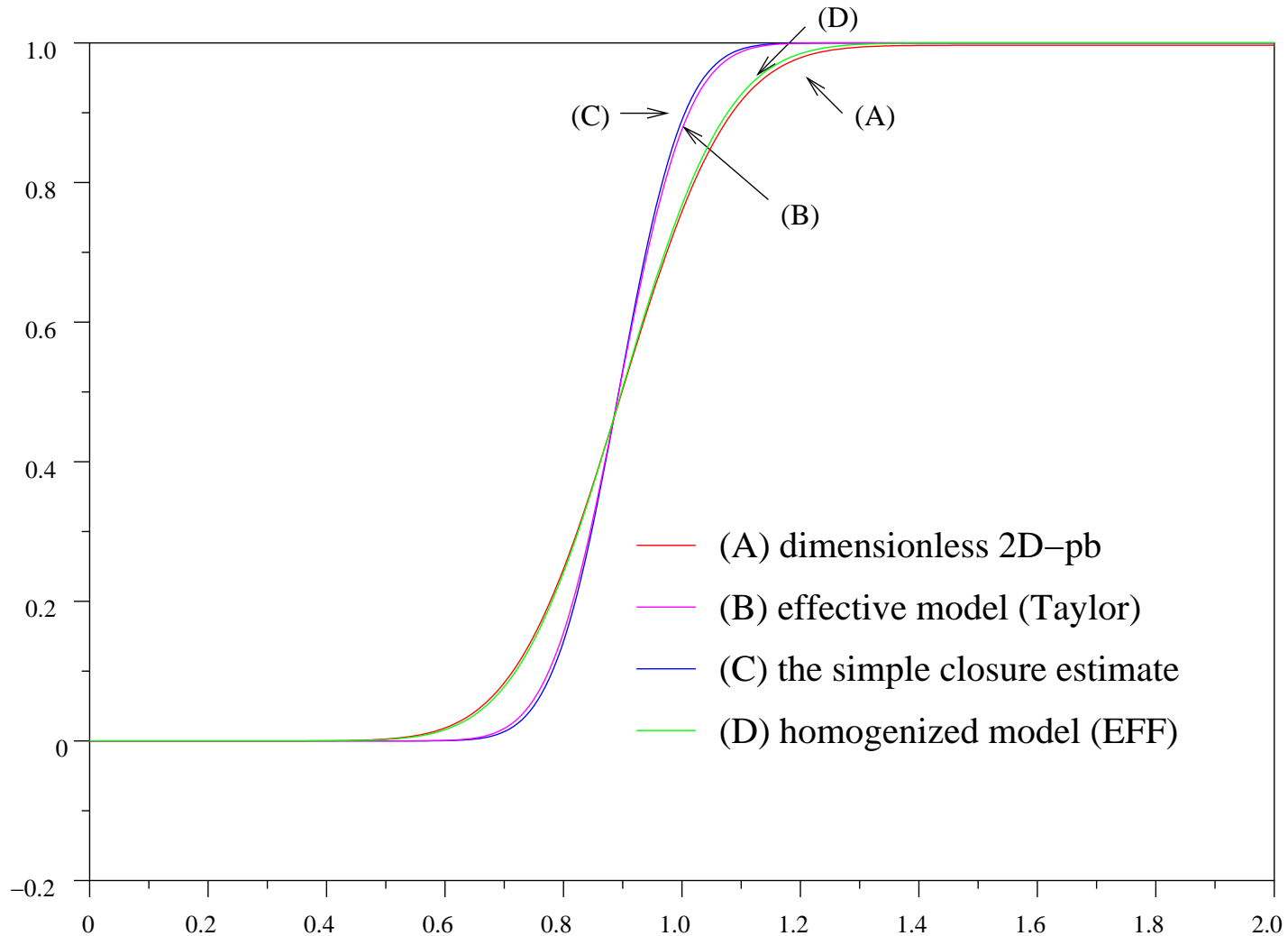
(EFF2)

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c + \frac{2Q}{3(1+K)} \partial_x c = (D\varepsilon^\alpha + \\ \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-\alpha} + \frac{4Q^2}{135D} \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} \varepsilon^{2-\alpha}) \frac{\partial_{xxx} c}{1+K} \text{ in } (0, +\infty) \times (0, T) \\ c|_{x=0} = 0, c|_{t=0} = 1, \partial_x c \in L^2((0, +\infty) \times (0, T)). \end{array} \right.$$

Pour les détails, on peut consulter l'article
V. Devigne, A. Mikelić, C. Rosier: Rigorous upscaling of the
reactive flow through a pore, under dominant Peclet number
and infinite adsorption rate, prépublication, octobre, 2005

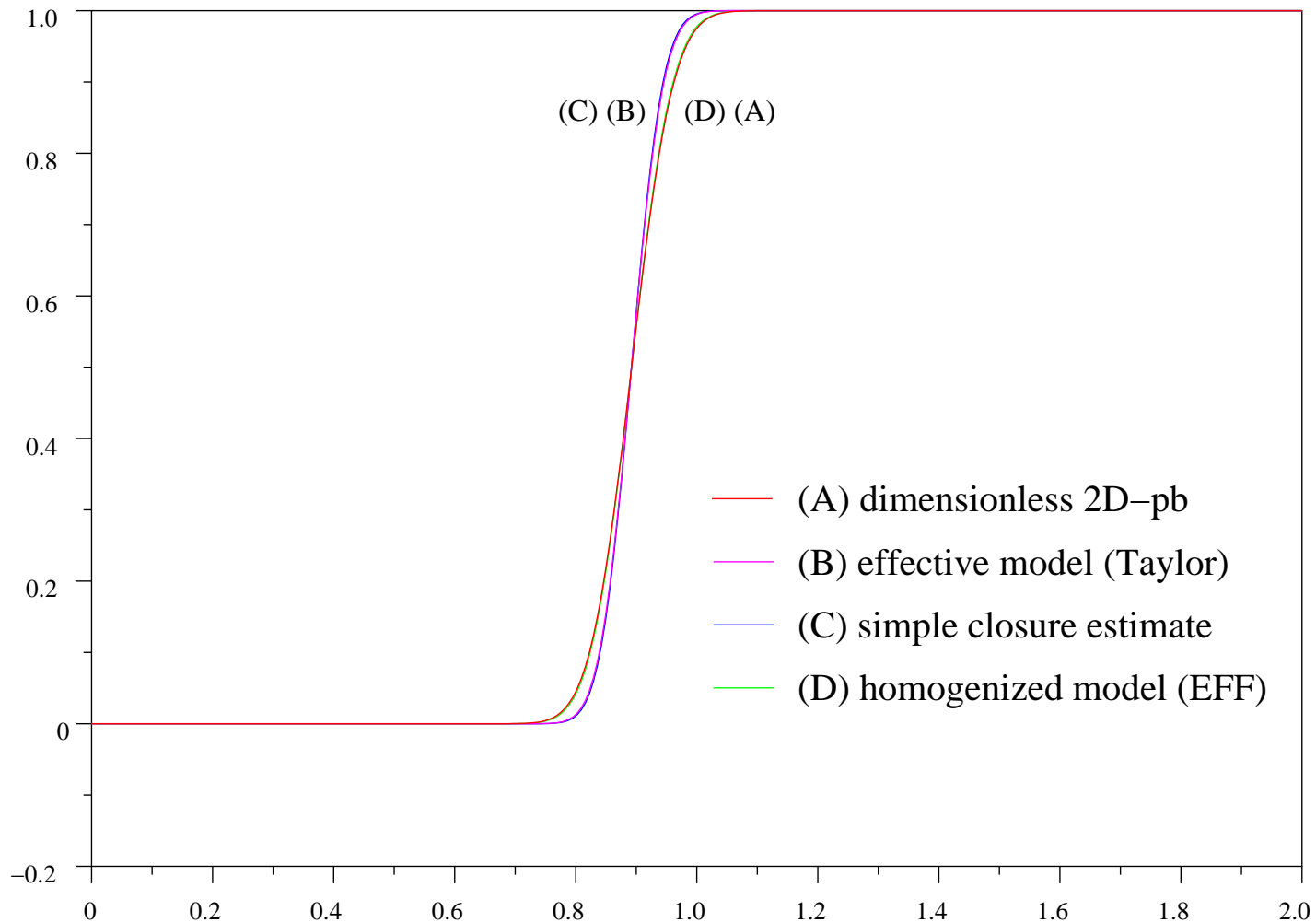
Deuxieme problème 2

Concentrations for $t=1$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.01$, $Q=4$, $D=1$, $k=2$



Deuxieme problème 3

Concentrations for $t=1$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.001$, $Q=4$, $D=1$, $k=2$



Deuxieme problème 4

Concentrations for $t=1$, $\alpha=1$, $\epsilon=0.0001$, $Q=4$, $D=1$, $k=2$

