

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

Andro Mikelić

Université Lyon 1

Institut Camille Jordan

UFR Mathématiques, Lyon

Carole Rosier

Université du Littoral

Laboratoire Joseph Liouville

Calais

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 *"Changements d'échelle dans la modélisation du transport multiphasique et réactif en milieux poreux : application aux milieux fracturés et aux argiles."*
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

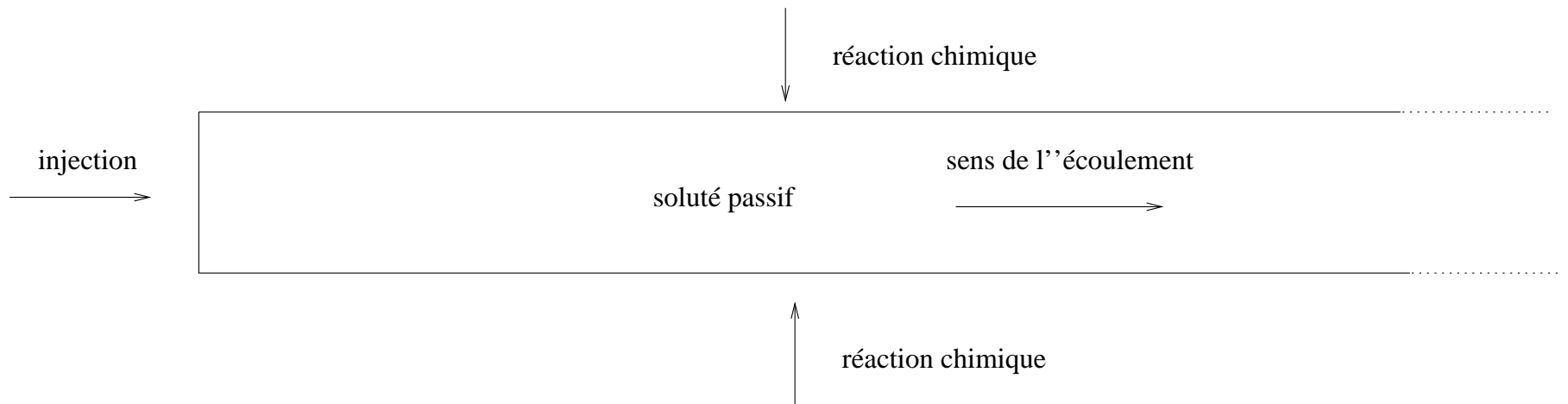


Figure 1: Le tuyau

I4

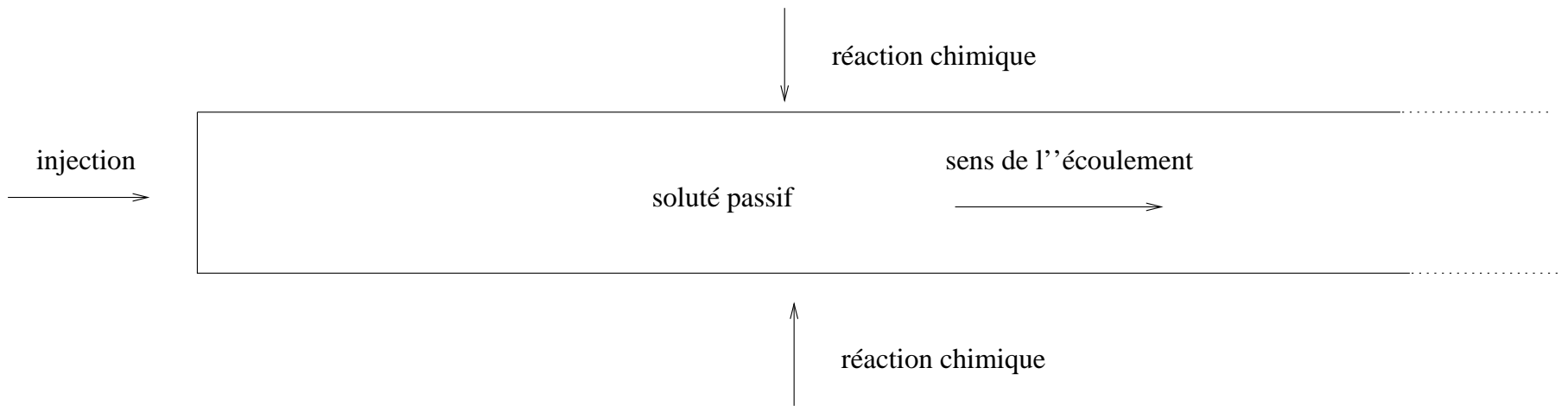
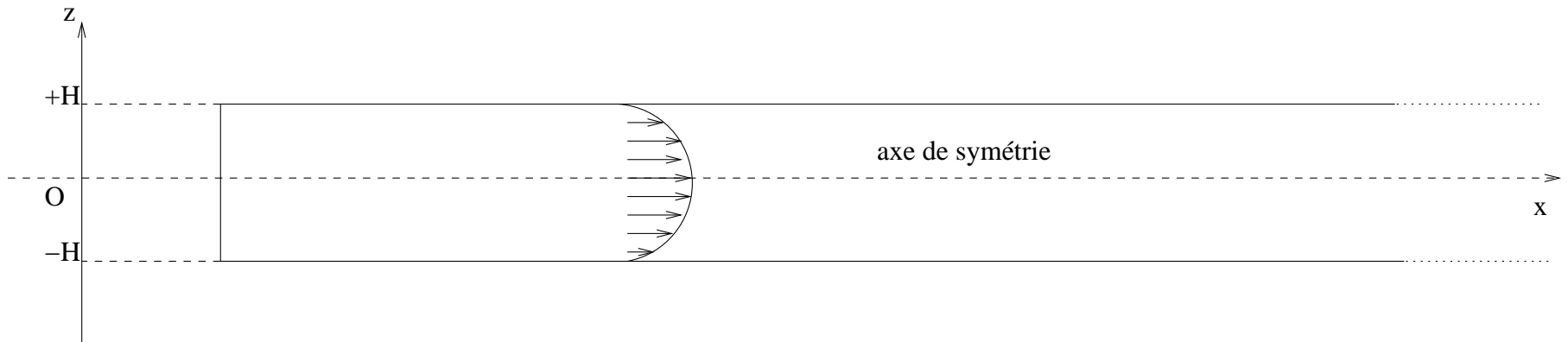


Figure 3: Le tuyau



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 $k = 0$.

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 $k = 0$.

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 $c_0^{eff}(x, t)$:

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

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 $c_0^{eff}(x, t)$:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_0^{eff}}{\partial t} + \frac{2Q}{3} \frac{\partial c_0^{eff}}{\partial x} + k_0 c_0^{eff} = \varepsilon^\alpha D \frac{\partial^2 c_0^{eff}}{\partial x^2} & \text{dans} \\ \mathbb{R}_+ \times (0, T), \quad \partial_x c_0^{eff} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) & (14) \\ c_0^{eff}|_{t=0} = 1, \quad c_0^{eff}|_{x=0} = 0. \end{cases}$$

Soit l'opérateur \mathcal{L}^ε donné par

$$\mathcal{L}^\varepsilon \zeta = \frac{\partial \zeta}{\partial t} + Q(1 - y^2) \frac{\partial \zeta}{\partial x} - D \varepsilon^\alpha \left(\partial_{xx} \zeta + \varepsilon^{-2} \partial_{yy} \zeta \right) \quad (15)$$

S1

Nous cherchons à approcher c^ε par c_0^{eff} . Soit $O_T = (0, T) \times Z^+$. Le problème aux limites pour l'erreur:

$$\mathcal{L}^\varepsilon(c_0^{eff}) = -k_0 c_0^{eff} + Q \partial_x c_0^{eff} \left(\frac{1}{3} - y^2\right) = R^\varepsilon$$

$$\mathcal{L}^\varepsilon(c^\varepsilon - c_0^{eff}) = -R^\varepsilon \text{ dans } Z^+ \times (0, T) \text{ et} \quad (16)$$

$$-D_\varepsilon^{\alpha-2} \partial_y (c^\varepsilon|_{y=1} - c_0^{eff}) = k_0 c^\varepsilon|_{y=1} \text{ sur } \mathbb{R}_+ \times (0, T) \quad (17)$$

S1

Nous cherchons à approcher c^ε par c_0^{eff} . Soit $O_T = (0, T) \times Z^+$. Le problème aux limites pour l'erreur:

$$\mathcal{L}^\varepsilon(c_0^{eff}) = -k_0 c_0^{eff} + Q \partial_x c_0^{eff} \left(\frac{1}{3} - y^2\right) = R^\varepsilon$$

$$\mathcal{L}^\varepsilon(c^\varepsilon - c_0^{eff}) = -R^\varepsilon \text{ dans } Z^+ \times (0, T) \text{ et} \quad (18)$$

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \partial_y (c^\varepsilon|_{y=1} - c_0^{eff}) = k_0 c^\varepsilon|_{y=1} \text{ sur } \mathbb{R}_+ \times (0, T) \quad (19)$$

Pour obtenir l'estimation nous utilisons le résultat auxiliaire suivant:

Lemme 1 Soit $\Psi(x) = 1/(x+1)$. Soient

$g^\varepsilon \in H_{loc}^1(Z^+ \times (0, T))$ et $\xi_0^\varepsilon \in L_{loc}^2(Z^+)$. Ensuite, supposons

que $\xi \in C([0, T]; L_{loc}^2(Z^+))$, $\nabla_{x,y} \xi \in L^2(Z^+ \times (0, T))$ est une solution pour le problème

S2

$$\mathcal{L}^\varepsilon(\xi) = -R^\varepsilon \text{ in } Z^+ \times (0, T) \quad (20)$$

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \partial_y \xi|_{y=1} = k_0 \xi|_{y=1} + g^\varepsilon|_{y=1} \text{ sur} \quad (21)$$

$$\mathbb{R}_+ \times \{1\} \times (0, T) \text{ et } \partial_y \xi|_{y=0} = 0 \text{ sur } \mathbb{R}_+ \times (0, T) \quad (22)$$

$$\xi|_{t=0} = \xi_0^\varepsilon \text{ dans } Z^+ \quad (23)$$

$$\xi|_{x=0} = 0 \text{ sur } (0, 1) \times (0, T). \quad (24)$$

S2

$$\mathcal{L}^\varepsilon(\xi) = -R^\varepsilon \text{ in } Z^+ \times (0, T) \quad (25)$$

$$-D\varepsilon^{\alpha-2}\partial_y\xi|_{y=1} = k_0\xi|_{y=1} + g^\varepsilon|_{y=1} \text{ sur} \quad (26)$$

$$\mathbb{R}_+ \times \{1\} \times (0, T) \text{ et } \partial_y\xi|_{y=0} = 0 \text{ sur } \mathbb{R}_+ \times (0, T) \quad (27)$$

$$\xi|_{t=0} = \xi_0^\varepsilon \text{ dans } Z^+ \quad (28)$$

$$\xi|_{x=0} = 0 \text{ sur } (0, 1) \times (0, T). \quad (29)$$

Nous avons l'estimation suivante:

$$\mathcal{E}(\xi, t) = \frac{1}{2} \int_{Z^+} \Psi(x)^2 \xi^2(t) \, dx dy + \frac{D}{2} \varepsilon^\alpha \int_0^t \int_{Z^+} \Psi(x)^2 \left\{ \varepsilon^{-2} |\partial_y \xi|^2 + \right. \\ \left. |\partial_x \xi|^2 \right\} \, dx dy d\tau + k_0 \int_0^t \int_{\mathbb{R}_+} \xi^2|_{y=1} \Psi^2(x) \, dx d\tau$$

S3

$$\begin{aligned} &\leq - \int_0^t \int_{Z^+} \Psi(x)^2 \cdot R^\varepsilon \xi \, dx dy d\tau - \\ &\int_0^t \int_{\mathbb{R}_+} g^\varepsilon|_{y=1} \xi|_{y=1} \Psi^2(x) \, dx d\tau + 2D\varepsilon^\alpha \int_0^t \int_{Z^+} \Psi(x)^2 \xi^2 \, dx dy d\tau. \end{aligned} \tag{30}$$

S3

$$\begin{aligned} &\leq - \int_0^t \int_{Z^+} \Psi(x)^2 \cdot R^\varepsilon \xi \, dx dy d\tau - \\ &\int_0^t \int_{\mathbb{R}_+} g^\varepsilon|_{y=1} \xi|_{y=1} \Psi^2(x) \, dx d\tau + 2D\varepsilon^\alpha \int_0^t \int_{Z^+} \Psi(x)^2 \xi^2 \, dx dy d\tau. \end{aligned} \tag{31}$$

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

S1

Proposition 2

$$\|(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^\infty(0,T;L^2(Z^+))} \leq \varepsilon^{1-\alpha/2} \frac{F^0}{\sqrt{D}} \quad (32)$$

$$\|\partial_x(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{1-\alpha} \frac{F^0}{D} \quad (33)$$

$$\|\partial_y(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{2-\alpha} \frac{F^0}{D}, \quad (34)$$

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

$$F^0 = C_1^F \|\partial_x c_0^{eff}\|_{L^2(O_T)} + C_2^F k_0 \leq C_3^F \varepsilon^{-\alpha/4} \quad (35)$$

S1

Proposition 2

$$\|(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^\infty(0,T;L^2(Z^+))} \leq \varepsilon^{1-\alpha/2} \frac{F^0}{\sqrt{D}} \quad (36)$$

$$\|\partial_x(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{1-\alpha} \frac{F^0}{D} \quad (37)$$

$$\|\partial_y(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^2((0,T)\times Z^+)} \leq \varepsilon^{2-\alpha} \frac{F^0}{D}, \quad (38)$$

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

$$F^0 = C_1^F \|\partial_x c_0^{eff}\|_{L^2(O_T)} + C_2^F k_0 \leq C_3^F \varepsilon^{-\alpha/4} \quad (39)$$

⇒

S5

$$\|c^\varepsilon - c_0^{eff}\|_{L^\infty(0,T;L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0,1)))} \leq C\varepsilon^{1-3\alpha/4} \quad (40)$$

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

S5

$$\|c^\varepsilon - c_0^{eff}\|_{L^\infty(0,T;L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0,1)))} \leq C\varepsilon^{1-3\alpha/4} \quad (42)$$

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

COMMENT FAIRE MIEUX ?

Voici le modèle de Paine et al:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c^{Pai} + Q\left(\frac{2}{3} + A_1\right) \partial_x c^{Pai} + C_2 c^{Pai} = K^* \partial_{xx} c^{Pai}, \\ \text{dans } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \partial_x c^{Pai} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) \\ c^{Pai}|_{x=0} = 0, c^{Pai}|_{t=0} = 1, \end{array} \right. \quad (43)$$

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

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

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

$$\|t^5 (c^\varepsilon - c^{Mau} - \mathbf{correcteur})\|_\infty \leq \begin{cases} C\varepsilon^{4-7\alpha/2-\delta}, \alpha < 1, \\ C\varepsilon^{3/2-\alpha-\delta}, \alpha \in [1, 2). \end{cases} \quad (49)$$

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^1_{loc}(Z^+))} \leq C\varepsilon^{2-\alpha} \quad (50)$$

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} \leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4} H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4} H(\alpha-1)) \quad (51)$$

S10

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_y c^\varepsilon\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4} H(1-\alpha) \\ &\quad + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4} H(\alpha-1)) \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_x (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq \\ C(\varepsilon^{2-7\alpha/4} H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-5\alpha/4} H(\alpha-1)) &\quad (53) \end{aligned}$$

S10

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_y c^\varepsilon\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4} H(1-\alpha) \\ &\quad + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4} H(\alpha-1)) \end{aligned} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \|t^3 \partial_x (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} &\leq \\ C(\varepsilon^{2-7\alpha/4} H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-5\alpha/4} H(\alpha-1)) &\end{aligned} \quad (57)$$

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

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau} - \mathbf{correcteurs})\|_{L^\infty(O_T)} \leq C\varepsilon^{1/2-\delta}, \quad \forall \delta > 0, \quad (58)$$

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0,T;L^1_{loc}(Z^+))} \leq C\varepsilon \quad (59)$$

The formal 2-scale expansion

L'estimation obtenue quand nous avons pris la valeur moyenne simple, n'est pas satisfaisante. Par ailleurs, on le sait que le modèle de dispersion de Taylor donne une très bonne approximation 1D. Avec cette motivation nous expliquons brièvement comment obtenir **formellement** les modèles efficaces de précision plus élevée et notamment la variante de la formule de la dispersion du Taylor, par l'expansion asymptotique à 2-échelles.

The formal 2-scale expansion

L'estimation obtenue quand nous avons pris la valeur moyenne simple, n'est pas satisfaisante. Par ailleurs, on le sait que le modèle de dispersion de Taylor donne une très bonne approximation 1D. Avec cette motivation nous expliquons brièvement comment obtenir **formellement** les modèles efficaces de précision plus élevée et notamment la variante de la formule de la dispersion du Taylor, par l'expansion asymptotique à 2-échelles.

Nous commençons par le problème (5)-(9) et nous cherchons c^ε dans la forme

$$c^\varepsilon = c^0(x, t; \varepsilon) + \varepsilon^{2-\alpha} c^1(x, y, t) + \varepsilon^{2(2-\alpha)} c^2(x, y, t) + \dots \quad (61)$$

Après l'introduction de (60) dans (5) nous trouvons

F1

$$\begin{aligned} & \varepsilon^0 \left\{ \partial_t c^0 + Q(1 - y^2) \partial_x c^0 - D \varepsilon^{\alpha-1} \partial_{yy} c^1 \right\} + \\ & \varepsilon^{2-\alpha} \left\{ \partial_t c^1 + Q(1 - y^2) \partial_x c^1 - D \varepsilon^{\alpha-1} \partial_{xx} c^0 - \right. \\ & \quad \left. D \varepsilon^{\alpha-1} \partial_{yy} c^2 \right\} = \mathcal{O}(\varepsilon^{2(2-\alpha)}) \end{aligned} \quad (62)$$

Donc tous les coefficients devant les puissances de ε sont zéro.

F1

$$\begin{aligned} & \varepsilon^0 \left\{ \partial_t c^0 + Q(1 - y^2) \partial_x c^0 - D \varepsilon^{\alpha-1} \partial_{yy} c^1 \right\} + \\ & \varepsilon^{2-\alpha} \left\{ \partial_t c^1 + Q(1 - y^2) \partial_x c^1 - D \varepsilon^{\alpha-1} \partial_{xx} c^0 - \right. \\ & \quad \left. D \varepsilon^{\alpha-1} \partial_{yy} c^2 \right\} = \mathcal{O}(\varepsilon^{2(2-\alpha)}) \end{aligned} \quad (64)$$

Donc tous les coefficients devant les puissances de ε sont zéro.

Le problème correspondant à l'ordre ε^0 est

$$\begin{cases} -D \partial_{yy} c^1 = -Q(1/3 - y^2) \partial_x c^0 - \\ (\partial_t c^0 + 2Q \partial_x c^0 / 3) \text{ sur } (0, 1), \\ \partial_y c^1|_{y=0} = 0, \quad -D \partial_y c^1|_{y=1} = k_0 c^0. \end{cases} \quad (65)$$

F2

pour chaque $(x, t) \in (0, +\infty) \times (0, T)$. Par l'alternative de Fredholm, le problème (63) admet une solution SSI

$$\partial_t c^0 + 2Q\partial_x c^0 / 3 + k_0 c^0 = 0 \quad \text{dans } (0, L) \times (0, T). \quad (66)$$

Malheureusement, nos données initiales et aux limites ne sont pas **compatibles** et on a une solution discontinue pour l'équation hyperbolique (66). Ensuite, le développement asymptotique pour c^ε contient les dérivées de c^0 , et l'équation (66) ne convient pas à nos besoins.

F2

pour chaque $(x, t) \in (0, +\infty) \times (0, T)$. Par l'alternative de Fredholm, le problème (63) admet une solution SSI

$$\partial_t c^0 + 2Q\partial_x c^0 / 3 + k_0 c^0 = 0 \quad \text{dans } (0, L) \times (0, T). \quad (68)$$

Malheureusement, nos données initiales et aux limites ne sont pas **compatibles** et on a une solution discontinue pour l'équation hyperbolique (66). Ensuite, le développement asymptotique pour c^ε contient les dérivées de c^0 , et l'équation (66) ne convient pas à nos besoins.

Dans l'article par Bourgeat et al la difficulté a été résolu en supposant les données initiales et aux limites **compatibles**. Nous procédons en suivant une idée de Rubinstein et de Mauri et supposons que

$$\partial_t c^0 + 2Q\partial_x c^0 / 3 + k_0 c^0 = \mathcal{O}(\varepsilon^{2-\alpha}) \quad \text{in } (0, +\infty) \times (0, T). \quad (69)$$

F3

L'hypothèse (67) sera justifiée *a posteriori*, après avoir trouvé une équation pour c^0 . Donc (63) se réduit au

$$\begin{cases} -D\partial_{yy}c^1 = -Q(1/3 - y^2)\partial_x c^0 + k_0c^0 \text{ sur } (0, 1), \\ \partial_y c^1|_{y=0} = 0, \quad -D\partial_y c^1|_{y=1} = k_0c^0, \end{cases} \quad (70)$$

pour chaque $(x, t) \in (0, +\infty) \times (0, T)$, et

F3

L'hypothèse (67) sera justifiée *a posteriori*, après avoir trouvé une équation pour c^0 . Donc (63) se réduit au

$$\begin{cases} -D\partial_{yy}c^1 = -Q(1/3 - y^2)\partial_x c^0 + k_0c^0 \text{ sur } (0, 1), \\ \partial_y c^1|_{y=0} = 0, \quad -D\partial_y c^1|_{y=1} = k_0c^0, \end{cases} \quad (72)$$

pour chaque $(x, t) \in (0, +\infty) \times (0, T)$, et

$$c^1(x, y, t) = \frac{Q}{D} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} \right) \partial_x c^0 + \frac{k_0}{D} \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) c^0 + C_0(x, t), \quad (73)$$

ou C_0 est une fonction arbitraire.

F4

Continuons avec l'ordre suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} -D\partial_{yy}c^2 = -Q(1-y^2)\partial_x c^1 + D\varepsilon^{2(\alpha-1)}\partial_{xx}c^0 - \\ \partial_t c^1 + D\varepsilon^\alpha\partial_{xx}c^1 - \varepsilon^{\alpha-2}(\partial_t c^0 + 2Q\partial_x c^0/3 \\ + k_0 c^0) \text{ sur } (0, 1), \partial_y c^2|_{y=0} = 0 \text{ et} \\ -D\partial_y c^2|_{y=1} = k_0 c^1|_{y=1} \end{array} \right. \quad (74)$$

pour chaque $(x, t) \in (0, +\infty) \times (0, T)$.

F4

Continuons avec l'ordre suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} -D\partial_{yy}c^2 = -Q(1-y^2)\partial_x c^1 + D\varepsilon^{2(\alpha-1)}\partial_{xx}c^0 - \\ \partial_t c^1 + D\varepsilon^\alpha\partial_{xx}c^1 - \varepsilon^{\alpha-2}(\partial_t c^0 + 2Q\partial_x c^0/3 \\ + k_0 c^0) \text{ sur } (0, 1), \partial_y c^2|_{y=0} = 0 \text{ et} \\ -D\partial_y c^2|_{y=1} = k_0 c^1|_{y=1} \end{array} \right. \quad (75)$$

pour chaque $(x, t) \in (0, +\infty) \times (0, T)$.

Le problème (74) admet une solution SSI

$$\begin{aligned} & \partial_t c^0 + 2Q\partial_x c^0/3 + k_0(c^0 + \varepsilon^{2-\alpha}c^1|_{y=1}) - \\ & D\varepsilon^2\partial_{xx}\left(\int_0^1 c^1 dy\right) + \varepsilon^{2-\alpha}\partial_t\left(\int_0^1 c^1 dy\right) - \varepsilon^\alpha D\partial_{xx}c^0 + \end{aligned}$$

F5

$$\varepsilon^{2-\alpha} Q \partial_x \left(\int_0^1 (1 - y^2) c^1 dy \right) = 0 \quad \text{in } (0, +\infty) \times (0, T). \quad (76)$$

(76) est l'équation pour c^0 . Afin d'obtenir l'équation la plus simple possible pour c^0 nous choisissons C_0 tel que $\int_0^1 c^1 dy = 0$.

F5

$$\varepsilon^{2-\alpha} Q \partial_x \left(\int_0^1 (1 - y^2) c^1 dy \right) = 0 \quad \text{in } (0, +\infty) \times (0, T). \quad (78)$$

(76) est l'équation pour c^0 . Afin d'obtenir l'équation la plus simple possible pour c^0 nous choisissons C_0 tel que $\int_0^1 c^1 dy = 0$.

Maintenant c^1 prend la forme

$$c^1(x, y, t) = \frac{Q}{D} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} \right) \partial_x c^0 + \frac{k_0}{D} \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) c^0. \quad (79)$$

F6

et l'équation (76) devient

$$\partial_t c^0 + Q\left(\frac{2}{3} + \frac{4k_0}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\right)\partial_x c^0 + k_0\left(1 - \frac{k_0}{3D}\varepsilon^{2-\alpha}\right)c^0 = \varepsilon^\alpha \tilde{D}\partial_{xx}c^0 \quad \text{dans } (0, +\infty) \times (0, T). \quad (80)$$

F6

et l'équation (76) devient

$$\partial_t c^0 + Q \left(\frac{2}{3} + \frac{4k_0}{45D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) \partial_x c^0 + k_0 \left(1 - \frac{k_0}{3D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) c^0 = \varepsilon^\alpha \tilde{D} \partial_{xx} c^0 \quad \text{dans } (0, +\infty) \times (0, T). \quad (82)$$

avec

$$\tilde{D} = D + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2(1-\alpha)} \quad (83)$$

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

S13

[*] A. Mikelić, V. Devigne, C.J. van Duijn, Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers, accepté pour publication dans **SIAM J. Math Analysis** 2006; voir aussi CASA report no. 19, Mai 2005,

www.win.tue.nl/casa/research/casareports/2005.1

S13

[*] A. Mikelić, V. Devigne, C.J. van Duijn, Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers, accepté pour publication dans **SIAM J. Math Analysis** 2006; voir aussi CASA report no. 19, Mai 2005,

www.win.tue.nl/casa/research/casareports/2005.

Donc l'approximation à l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^{2(2-\alpha)})$ que nous utilisons est

$$c_1^{cor}(x, y, t; \varepsilon) = c^{Mau}(x, t; \varepsilon) + \varepsilon^{2-\alpha} \zeta(t) \left(\frac{Q}{D} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} - \beta^\varepsilon \right) \frac{\partial c^{Mau}}{\partial x} + \frac{k_0}{D} \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) c^{Mau}(x, t; \varepsilon) \right) \quad (85)$$

E1

ou $c^{Ma u}$ est la solution au problème efficace avec le coefficient de la dispersion de Taylor et le terme de réaction:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c^{Ma u} + Q \left(\frac{2}{3} + \frac{4k_0}{45D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) \partial_x c^{Ma u} + \\ k_0 \left(1 - \frac{k_0}{3D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) c^{Ma u} = \left(D \varepsilon^\alpha + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) \partial_{xx} c^{Ma u}, \\ \text{in } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \partial_x c^{Ma u} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) \\ c^{Ma u}|_{x=0} = 0, c^{Ma u}|_{t=0} = 1, \end{array} \right. \quad (86)$$

$\tilde{D} = D \varepsilon^\alpha + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-\alpha}$ est le coefficient de la dispersion de Taylor.

E1

ou $c^{Ma u}$ est la solution au problème efficace avec le coefficient de la dispersion de Taylor et le terme de réaction:

$$\begin{cases} \partial_t c^{Ma u} + Q \left(\frac{2}{3} + \frac{4k_0}{45D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) \partial_x c^{Ma u} + \\ k_0 \left(1 - \frac{k_0}{3D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) c^{Ma u} = \left(D \varepsilon^\alpha + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-\alpha} \right) \partial_{xx} c^{Ma u}, \\ \text{in } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \partial_x c^{Ma u} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) \\ c^{Ma u}|_{x=0} = 0, c^{Ma u}|_{t=0} = 1, \end{cases} \quad (88)$$

$\tilde{D} = D \varepsilon^\alpha + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-\alpha}$ est le coefficient de la dispersion de Taylor.

La troncature temporelle ζ est donnée par

$$\zeta(t) = \begin{cases} \left(\frac{t}{\tilde{D}} \right)^r & \text{for } 0 \leq t \leq \tilde{D}, \\ 1 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (89)$$

E2

et on l'utilise pour éliminer la couche limite temporelle, qui apparaisse à $t = 0$. $\beta^\varepsilon(x, y) = \beta(\frac{x}{\varepsilon}, y)$ est la couche limite définie par

$$\begin{cases} -\Delta_{y,z}\beta = 0 & \text{for } (z, y) \in Z^+. \\ -\partial_y\beta = 0 & \text{for } y = 1, \quad \text{and for } y = 0, \\ \beta = \frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} & \text{for } z = 0. \end{cases} \quad (90)$$

E2

et on l'utilise pour éliminer la couche limite temporelle, qui apparaisse à $t = 0$. $\beta^\varepsilon(x, y) = \beta(\frac{x}{\varepsilon}, y)$ est la couche limite définie par

$$\begin{cases} -\Delta_{y,z}\beta = 0 & \text{for } (z, y) \in Z^+. \\ -\partial_y\beta = 0 & \text{for } y = 1, \quad \text{and for } y = 0, \\ \beta = \frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} & \text{for } z = 0. \end{cases} \quad (91)$$

Maintenant nous calculons l'énergie de la difference entre c^ε et c_1^{cor} . Pour les détails voir [*] Après le développement formel, nous savons que \mathcal{L}^ε appliqué à la correction, sans fonctions de la troncature et des couches limites, donnerait $F_1^\varepsilon + F_2^\varepsilon + F_3^\varepsilon + F_4^\varepsilon + F_5^\varepsilon$, où

E3

$$\left\{ \begin{array}{l}
 F_1^\varepsilon = \partial_{xxx} c^{Mau} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-\alpha} \left\{ \frac{8}{945} + (1 - y^2) \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} \right) \right\} \\
 F_2^\varepsilon = \partial_x c^{Mau} \frac{Qk_0}{D} \varepsilon^{2-\alpha} \left\{ -\frac{2}{45} + (1 - y^2) \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) \right\} \\
 F_3^\varepsilon = \varepsilon^{2-\alpha} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} \right) \left\{ \partial_{xt} c^{Mau} \frac{Q}{D} - \varepsilon^\alpha \partial_{xxx} c^{Mau} Q \right\} \\
 F_4^\varepsilon = \varepsilon^{2-\alpha} \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) \left\{ \partial_t c^{Mau} \frac{k_0}{D} - \varepsilon^\alpha \partial_{xx} c^{Mau} k_0 \right\} \\
 F_5^\varepsilon = \varepsilon^{2-\alpha} \left\{ -\frac{2}{45} \partial_x c^{Mau} \frac{Qk_0}{D} + \frac{k_0^2}{3D} c^{Mau} \right\}
 \end{array} \right. \quad (92)$$

Notons qu'il s'agit des fonctions non-intégrables à $t = 0$ et la troncature ζ est nécessaire pour les manipuler

correctement.

Sec 2

RÉSULTATS DE LA CONVERGENCE:

Théorème: Soit c^{Ma} donné par (10) et $\Omega_K = (0, K) \times (0, 1)$, $K > 0$.

Sec 2

RÉSULTATS DE LA CONVERGENCE:

Théorème: Soit c^{Ma} donné par (10) et $\Omega_K = (0, K) \times (0, 1)$, $K > 0$. Nous avons

$$\begin{aligned} & \|t^3(c^\varepsilon - c_1^{cor})\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega_K))} \leq \\ & C(\varepsilon^{3-9\alpha/4}H(1-\alpha) + \varepsilon^{3(1-\alpha/2)/2}H(\alpha-1)) \end{aligned} \quad (96)$$

$$\begin{aligned} & \|t^3\partial_y(c^\varepsilon - c_1^{cor})\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega_K))} \leq \\ & C\varepsilon^{1-\alpha/2}(\varepsilon^{3-9\alpha/4}H(1-\alpha) + \varepsilon^{3(1-\alpha/2)/2}H(\alpha-1)) \end{aligned} \quad (97)$$

$$\begin{aligned} & \|t^2\partial_x(c^\varepsilon - c_1^{cor})\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega_K))} \leq \\ & C\varepsilon^{-\alpha/2}(\varepsilon^{3-9\alpha/4}H(1-\alpha) + \varepsilon^{3(1-\alpha/2)/2}H(\alpha-1)) \end{aligned} \quad (98)$$

Estimations avec les termes d'ordre 2

La puissance la plus importante de α est $\alpha = 1$, qui décrit la situation dans l'article de Taylor. Dans ce cas-ci notre approximation est de l'ordre $\varepsilon^{3/4}$. Néanmoins, il est intéressant d'atteindre l'ordre ε au moins dans ce cas-ci. En outre, il pourrait être d'intérêt d'obtenir les évaluations d'ordre plus supérieur, qui peuvent être utiles pour ε qui n'est pas très petit. Clairement, l'estimation n'est pas suffisamment bon à la cause des termes ζF_1^ε et ζF_3^ε . En dérivant formellement l'équation efficace, nous avons vu qu'ils pourraient être éliminés en présentant la prochaine correction d'ordre. Après l'expansion formelle nous découvrons que c_1^{cor} devrait être remplacé par $c_1^{cor} + c_2^{cor}$, où

$$c_2^{cor} = -\varepsilon^{4-2\alpha} \frac{Q}{D^2} \zeta(t) \left\{ Q \partial_{xx} c^{Ma} \left(\frac{281}{453600} + \frac{23}{1512} y^2 \right) \right.$$

Sec1

$$\begin{aligned}
 & -\frac{37}{2160}y^4 + \frac{1}{120}y^6 - \frac{1}{672}y^8 - \tilde{\beta}_1) - (\partial_{xt}c^{Maou} \\
 & - D\varepsilon^\alpha \partial_{xxx}c^{Maou}) \left(-\frac{1}{360}y^6 + \frac{1}{72}y^4 - \frac{7}{360}y^2 - \right. \\
 & \left. \frac{31}{7560} - \tilde{\beta}_2 \right) \} + \varepsilon^{4-2\alpha} \frac{k_0}{D^2} \zeta(t) \left\{ Q \partial_x c^{Maou} \left(\frac{1}{60}y^6 - \right. \right. \\
 & \left. \left. \frac{1}{18}y^4 + \frac{11}{180}y^2 - \frac{11}{810} - \tilde{\beta}_3 \right) + \frac{1}{2} (\partial_t c^{Maou} - \right. \\
 & \left. D\varepsilon^\alpha \partial_{xx}c^{Maou}) \left(-\frac{1}{12}y^4 + \frac{1}{6}y^2 - \frac{7}{180} - \tilde{\beta}_5 \right) + \right. \\
 & \left. \frac{Q}{45} \partial_x c^{Maou} \left(\frac{1}{3} - y^2 - \tilde{\beta}_4 \right) - \frac{k_0}{6} c^{Maou} \left(\frac{1}{3} - y^2 \right) \right\}, \quad (99)
 \end{aligned}$$

Sec2

où $\tilde{\beta}_j, j = 1, \dots, 5$, sont les solutions pour des problèmes analogues à (90) et corrigent les nouvelles valeurs à $x = 0$. Avec ce terme de correction, nous avons

Théorème 3 On a

$$\begin{aligned} & \|t^5 (c^\varepsilon - c_1^{cor}(x, t; \varepsilon))\|_{L^\infty(0, T; L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0, 1)))} \leq \\ & C(\varepsilon^{4-13\alpha/4} H(1 - \alpha) + \varepsilon^{3(1-\alpha/2)/2} H(\alpha - 1)) \end{aligned} \quad (100)$$

$$\begin{aligned} & \|t^5 \partial_y (c^\varepsilon - c_1^{cor}(x, t; \varepsilon))\|_{L^2(0, T; L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0, 1)))} \leq \\ & C\varepsilon^{1-\alpha/2} (\varepsilon^{4-13\alpha/4} H(1 - \alpha) + \varepsilon^{3(1-\alpha/2)/2} H(\alpha - 1)) \end{aligned} \quad (101)$$

$$\begin{aligned} & \|t^5 \partial_x (c^\varepsilon - c_1^{cor}(x, t; \varepsilon))\|_{L^2(0, T; L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0, 1)))} \leq \\ & C\varepsilon^{-\alpha/2} (\varepsilon^{4-13\alpha/4} H(1 - \alpha) + \varepsilon^{3(1-\alpha/2)/2} H(\alpha - 1)) \end{aligned} \quad (102)$$

Sec3

Si nous renonçons à la norme d'énergie, encore alors de meilleures estimations sont possibles:

Théorème 4 On a

$$\|t^5 (c^\varepsilon - c_1^{cor}(x, t; \varepsilon) - c_2^{cor})\|_{L^\infty(0, T; L^1_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0, 1)))} \leq C(\varepsilon^{4-3\alpha} H(1-\alpha) + \varepsilon^{2-\alpha} H(\alpha-1)) \quad (103)$$

$$\|t^5 (c^\varepsilon - c_1^{cor}(x, t; \varepsilon) - c_2^{cor})\|_{L^2(0, T; L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0, 1)))} \leq C(\varepsilon^{4-3\alpha} H(1-\alpha) + \varepsilon^{2-\alpha} H(\alpha-1)) \quad (104)$$

Enfin, nous obtenons l'estimation L^∞ . En utilisant la technique de Nash et Moser, on obtient

Sec4

Théorème 5 (Pour les détails voir [*]).

$$\begin{aligned} \|t^5(c^\varepsilon - c_1^{cor}(x, t; \varepsilon) - c_2^{cor})\|_{L^\infty((0, T) \times (\mathbb{R}_+ \times (0, 1)))} \leq \\ C(\delta) \left(\varepsilon^{4-7\alpha/2-\delta} H(1-\alpha) \right. \\ \left. + \varepsilon^{3/2-\alpha-\delta} H(\alpha-1) \right), \quad \forall \delta > 0. \end{aligned} \quad (105)$$

Sec4

Théorème 5 (Pour les détails voir [*]).

$$\begin{aligned} \|t^5(c^\varepsilon - c_1^{cor}(x, t; \varepsilon) - c_2^{cor})\|_{L^\infty((0, T) \times (\mathbb{R}_+ \times (0, 1)))} \leq \\ C(\delta) \left(\varepsilon^{4-7\alpha/2-\delta} H(1-\alpha) \right. \\ \left. + \varepsilon^{3/2-\alpha-\delta} H(\alpha-1) \right), \quad \forall \delta > 0. \end{aligned} \quad (106)$$

Comparaison numérique (C. Rosier)

A la fin des transparents nous allons montrer la comparaison numérique entre a) la solution obtenue par la simulation directe du problème physique 2D adimensionné; b) la solution du problème 1D obtenu par la prise de moyenne simple et c) la solution du problème 1D obtenu par notre approche.

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

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = K_e \frac{\partial c^*}{\partial t^*} \quad \text{sur } z = \pm H, \quad (107)$$

Dans la forme adimensionnée, (107) devient

$$-D \varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = -D \frac{1}{\varepsilon^2 \mathbf{Pe}} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = K \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} \quad \text{sur } \Gamma^+ \times (0, T) \quad (108)$$

Maintenant le problème efficace devient

Deuxième problème 1

(EFF2)

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

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.

3ème problème

Maintenant nous considérons le cas linéaire général. Les conditions (2) sont remplacées par

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = \frac{\partial \hat{c}}{\partial t^*} = \hat{k}^* (c^* - \hat{c}/K_e) \quad \text{sur } z = \pm H, \quad (109)$$

où \hat{k}^* représente le taux de l'adsorption et K_e la constante d'équilibre pour l'adsorption linéaire. Nous avons 2 temps caractéristiques provenant de la chimie: $T_{DE} = K_e/\hat{k}^*$ (le temps caractéristique de la desorption) et $T_A = \hat{c}_R/(c_R \hat{k}^*)$ (le temps caractéristique de l'adsorption). Nous considérons le cas où $K_e = H$, $T_A = T_L = T_{DE}$. Dans la forme adimensionnée, (109) devient

3ème problème 1

$$-D\varepsilon^{\alpha-2}\frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = \frac{\partial c_s^\varepsilon}{\partial t} = k(c^\varepsilon - c_s^\varepsilon/K)|_{y=1} \quad \text{sur } \Gamma^+ \times (0, T) \quad (110)$$

Le problème efficace est maintenant

(EFF22)

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(c + c_s) + \left(\frac{2Q}{3} + \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\right)\partial_x c - (D\varepsilon^\alpha + \\ \frac{8}{945}\frac{Q^2}{D}\varepsilon^{2-\alpha})\partial_{xx}c = \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\partial_x c_s \quad \text{dans } (0, +\infty) \times (0, T) \\ \\ (1 + \frac{1}{3D}\varepsilon^{2-\alpha})\partial_t c_s = k(c + \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\partial_x c - c_s/K) \\ \text{dans } (0, +\infty) \times (0, T) \end{array} \right.$$

La forme dimensionnelle

La forme dimensionnelle du problème efficace est
(*NONDIM*)

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{t^*} \left(c^* + \frac{\hat{c}}{H} \right) + \left(\frac{2Q^*}{3} + \frac{2Q^* \mathbf{Da}_T}{45} \right) \partial_{x^*} c^* - D^* \left(1 + \right. \\ \left. \frac{8}{945} \mathbf{Pe}_T^2 \right) \partial_{x^* x^*} c^* = \frac{2Q^* \mathbf{Da}_T}{45 K_e} \partial_{x^*} \hat{c} \text{ dans } (0, +\infty) \times (0, T) \\ \\ \left(1 + \frac{1}{3} \mathbf{Da}_T \right) \partial_{t^*} \hat{c} = \hat{k}^* \left(c^* + \frac{4H \mathbf{Pe}_T}{45} \partial_{x^*} c^* - \frac{\hat{c}}{K_e} \right) \text{ dans } (0, +\infty) \times \\ c|_{x=0} = 0, \quad c|_{t=0} = 1, \quad \partial_x c \in L^2((0, +\infty) \times (0, T)). \end{array} \right.$$

Le problème non-linéaire

Passons maintenant aux cas non-linéaires. La condition (2) est maintenant remplacée par

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = \frac{\partial \hat{c}}{\partial t^*} = \hat{k}^* (\Phi(c^*) - \hat{c}/K_e) \quad \text{sur } z = \pm H, \quad (111)$$

où \hat{k}^* représente le taux de l'adsorption et K_e la constante d'équilibre pour l'adsorption. Exemples de Φ sont

$$\Phi(c) = \frac{k_1 c}{1 + k_2 c} \quad (\text{Langmuir}) ; \quad \Phi(c) = k_1 c^{k_2} \quad (\text{Freundlich}). \quad (112)$$

Dans la forme adimensionnée, (111) devient

Problème non-linéaire 1

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = \frac{\partial c_s^\varepsilon}{\partial t} = k(\Phi(c^\varepsilon) - c_s^\varepsilon/K)|_{y=1} \quad \text{dans } \Gamma^+ \times (0, T) \quad (113)$$

La forme dimensionnelle du problème efficace est
(*EFF2N*)

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(c + c_s) + \left(\frac{2Q}{3} + \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\right)\partial_x c - (D\varepsilon^\alpha + \\ \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D}\varepsilon^{2-\alpha})\partial_{xx} c = \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\partial_x c_s \quad \text{dans } (0, +\infty) \times (0, T) \\ \partial_t c_s = k(\Phi(c + \varepsilon^{2-\alpha}c^1|_{y=1}) - c_s/K) \quad \text{dans } (0, +\infty) \times (0, T) \\ c^1|_{y=1} = \frac{2Q}{45D}\partial_x c - \frac{k}{3D}(\Phi(c) - c_s) \\ c|_{x=0} = 0, \quad c|_{t=0} = 1, \quad \partial_x c \in L^2((0, +\infty) \times (0, T)). \end{array} \right.$$

Perspectives:

PERSPECTIVES:

- Obtenir l'équation efficace pour une chimie plus compliquée
- Modèles hyperboliques? Camacho, Cas Berentsen
.....
- Généralisation aux milieux poreux réalistes

1er Problème: $K = +\infty$

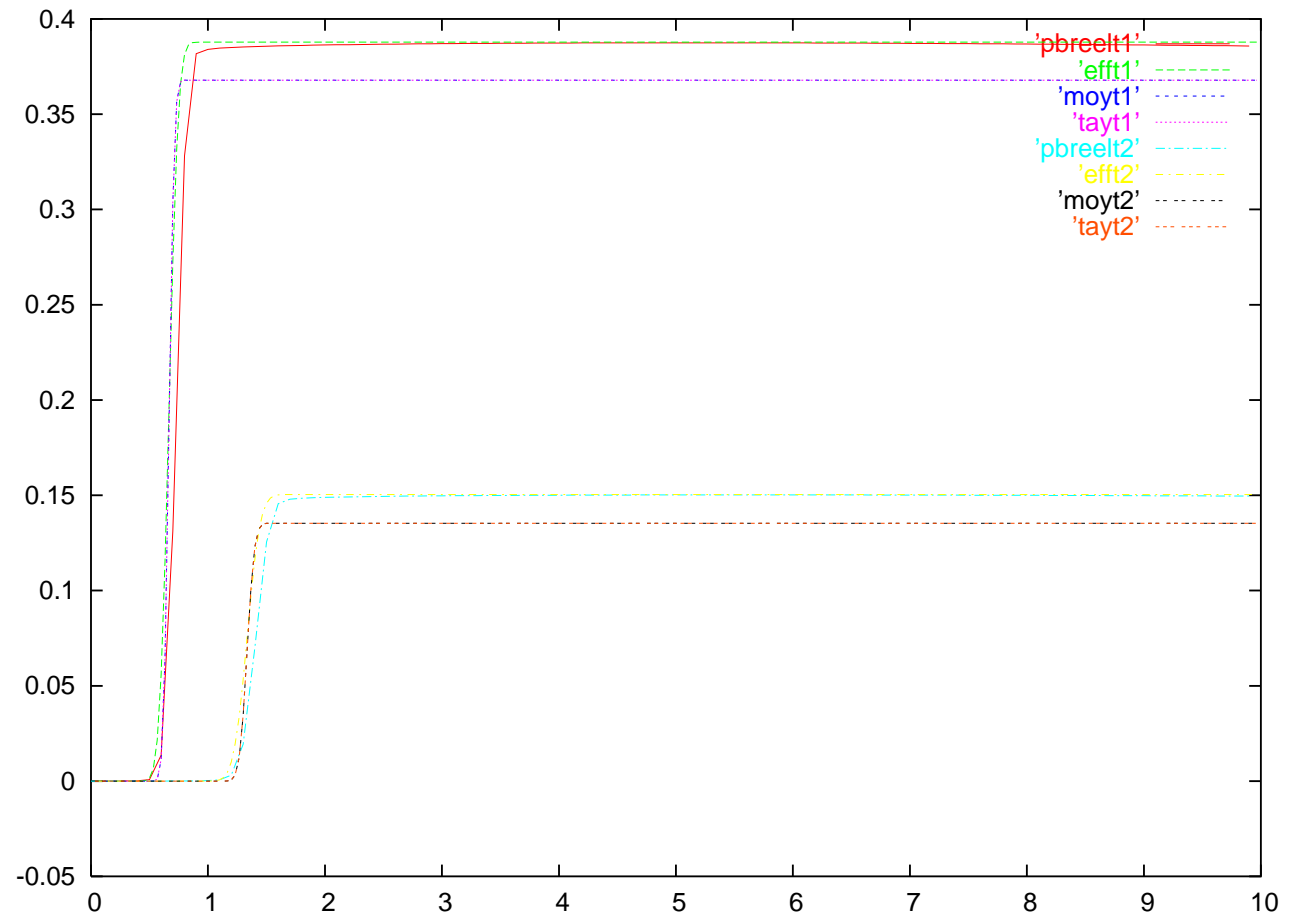


Figure 5: $t = 1, 5, \alpha = 1.6, q = 1, d = 1$.

1er Problème: $K = +\infty$

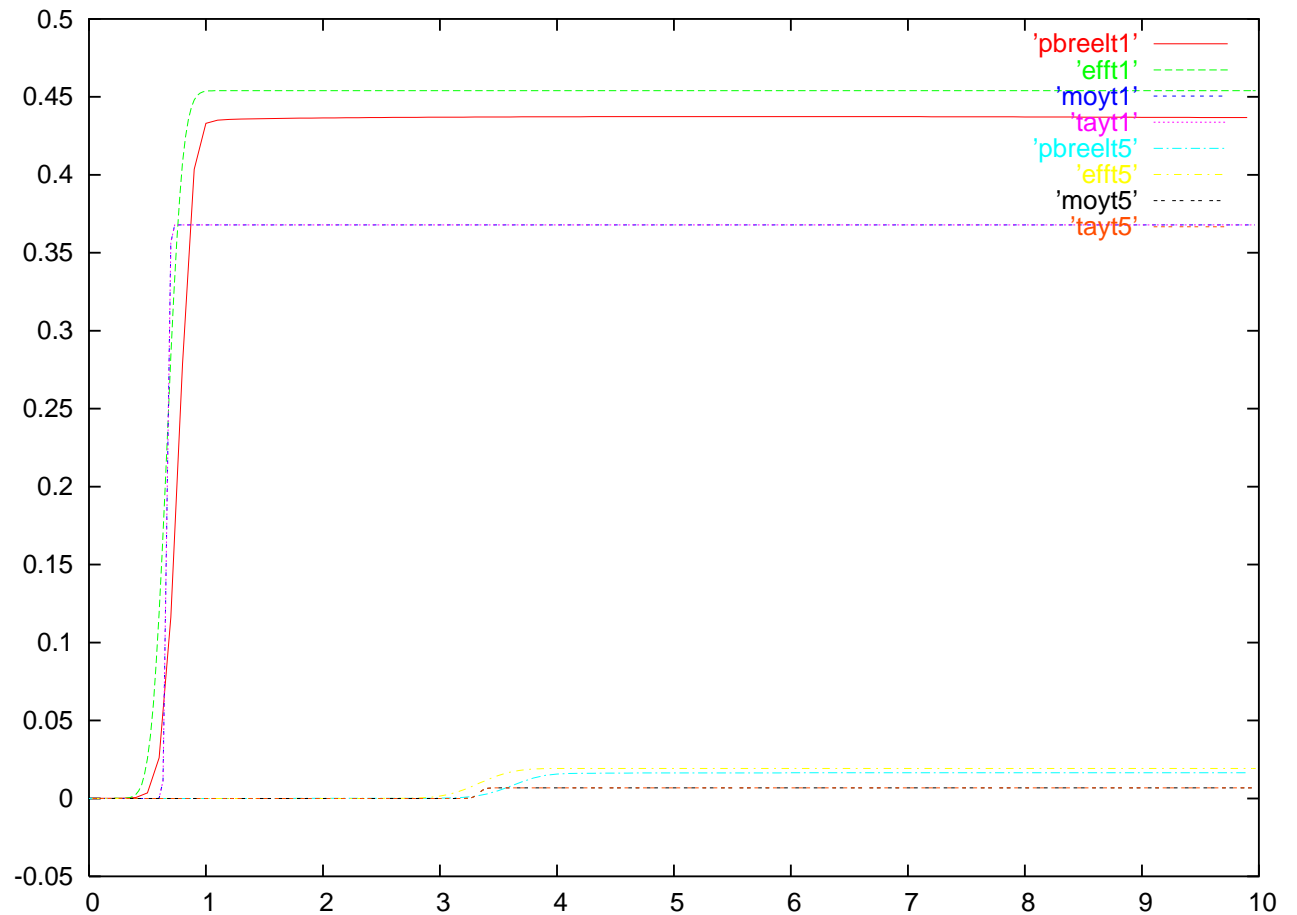


Figure 6: $t = 1, 5, \alpha = 1.9, q = 1, d = 1$.

1er Problème: $K = +\infty$

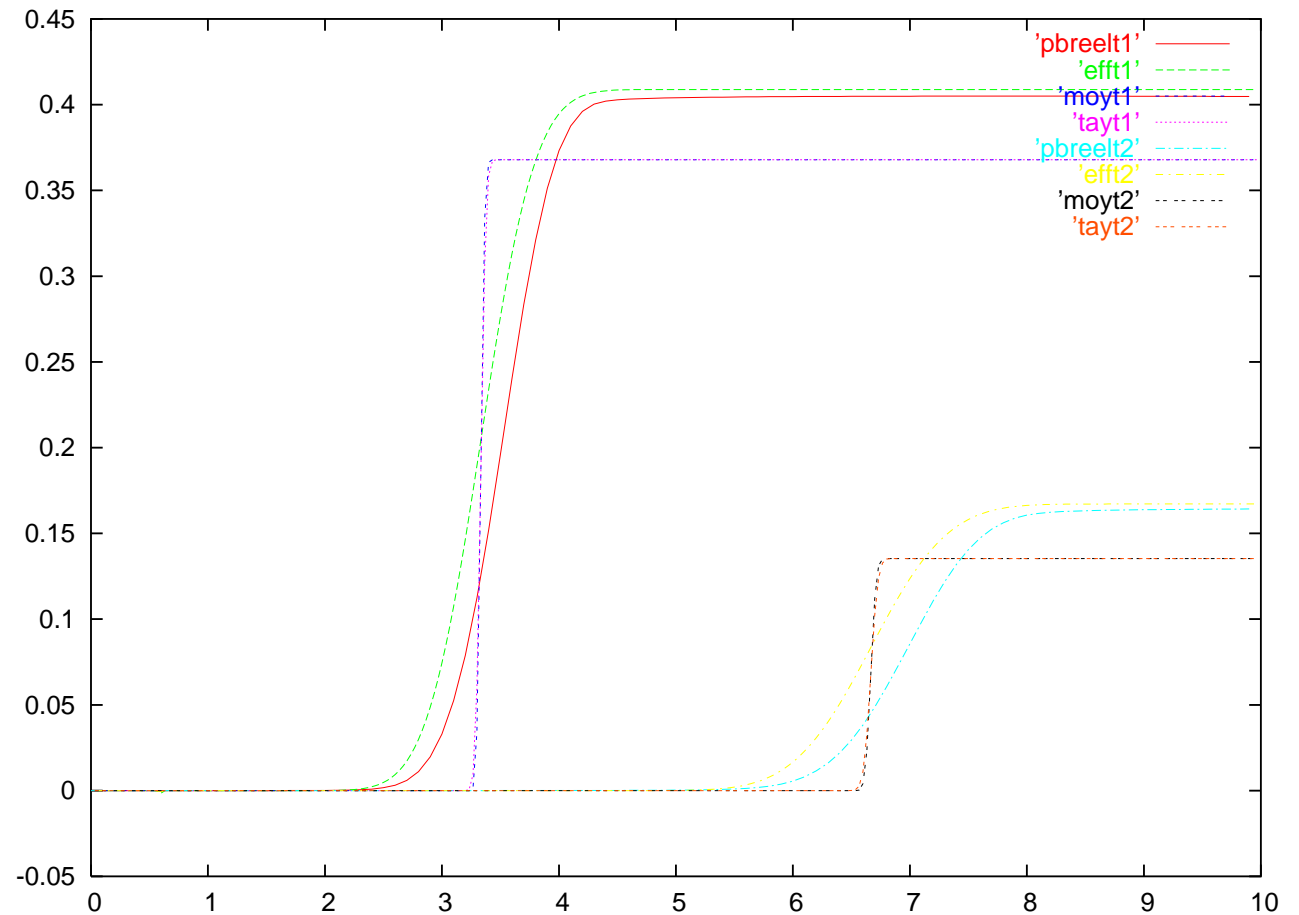


Figure 7: $t = 1, 2, \alpha = 1.6, q = 5, d = 0.5$.

1er Problème: $K = +\infty$

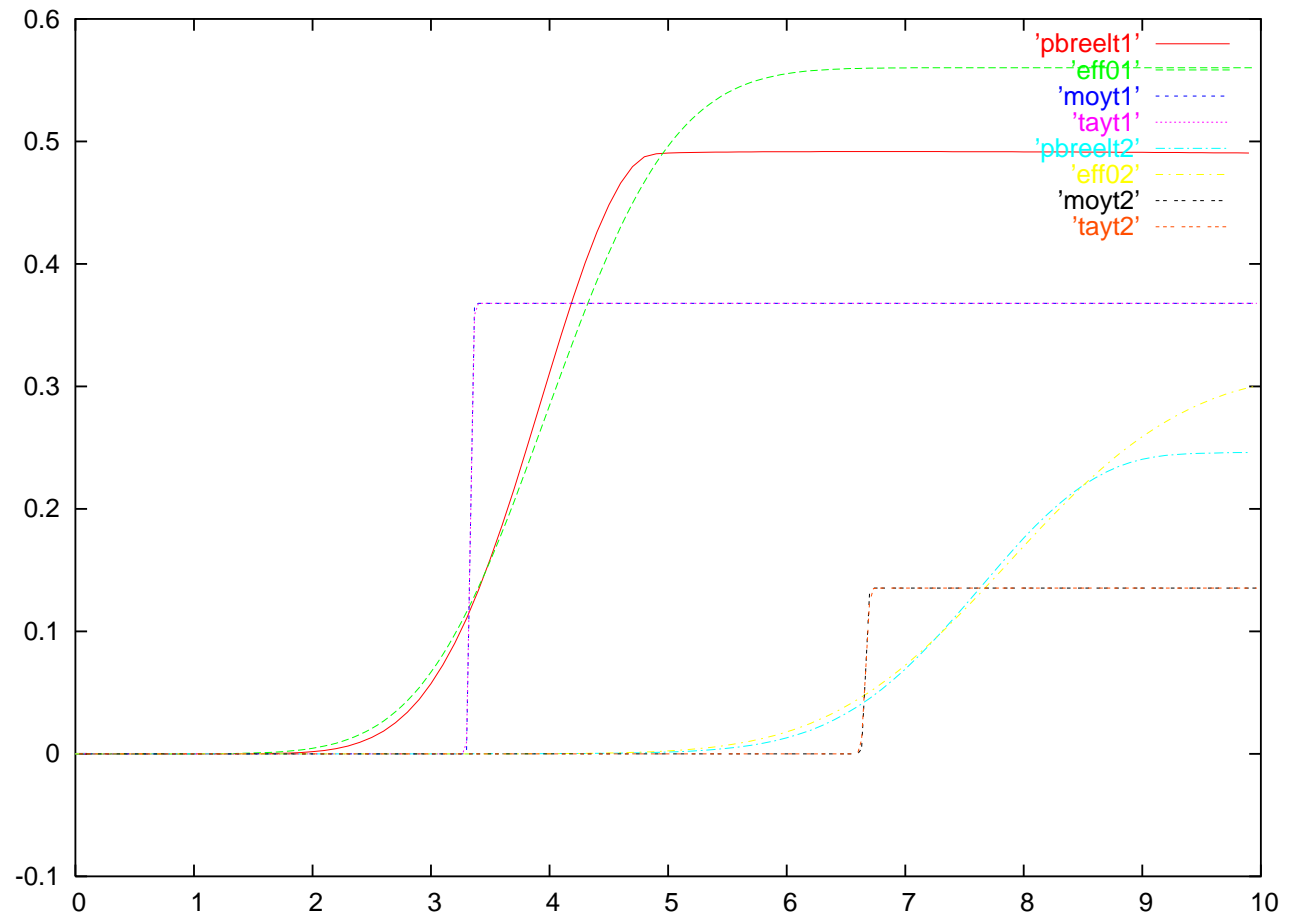


Figure 8: $t = 1, 2, \alpha = 1.9, q = 5, d = 0.5$.

2ième Problème: $k^* = \infty$

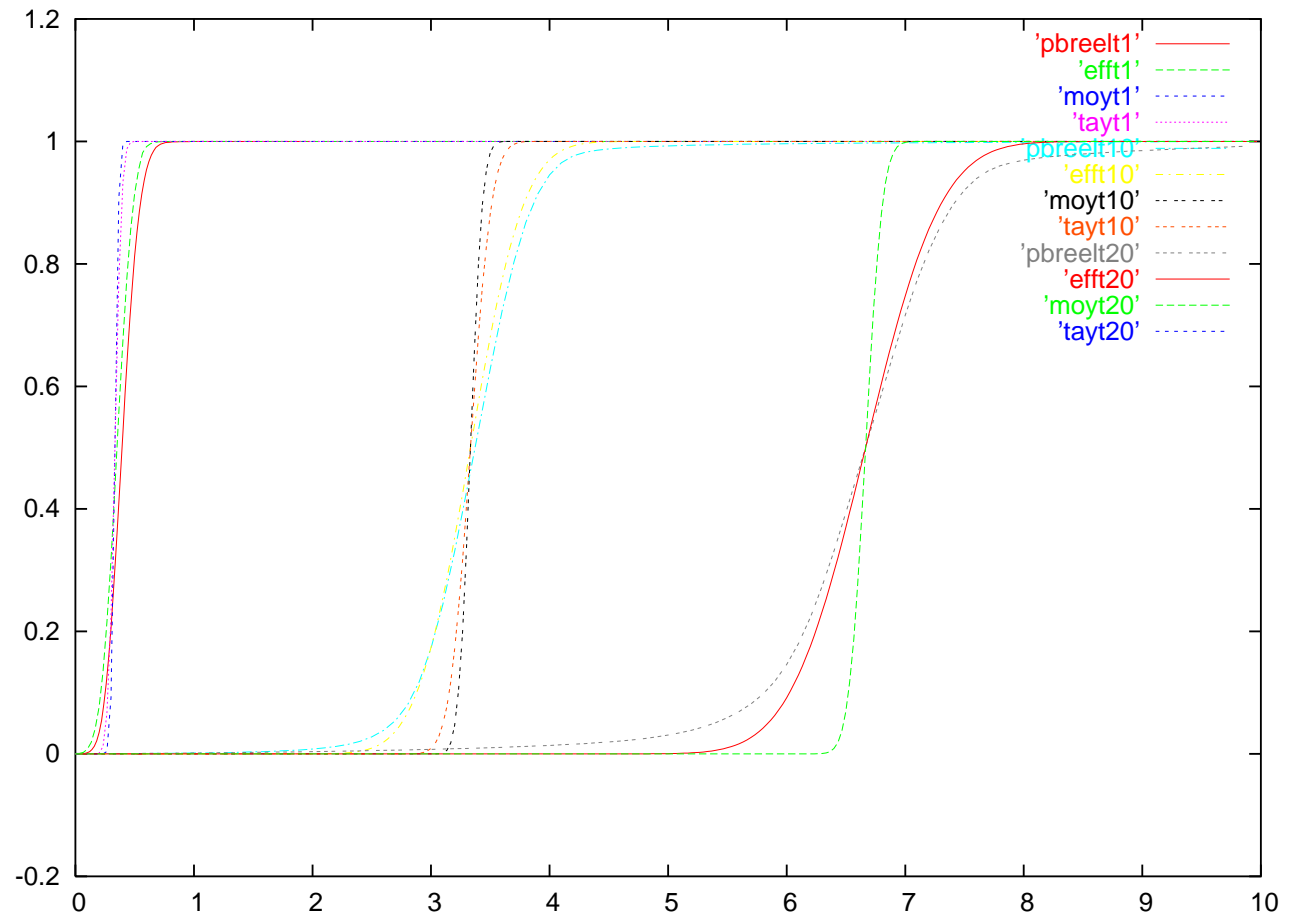


Figure 9: $t = 1, 10, 20, \alpha = 1.6, q = 1, d = 1$.

2ième Problème: $k^* = \infty$

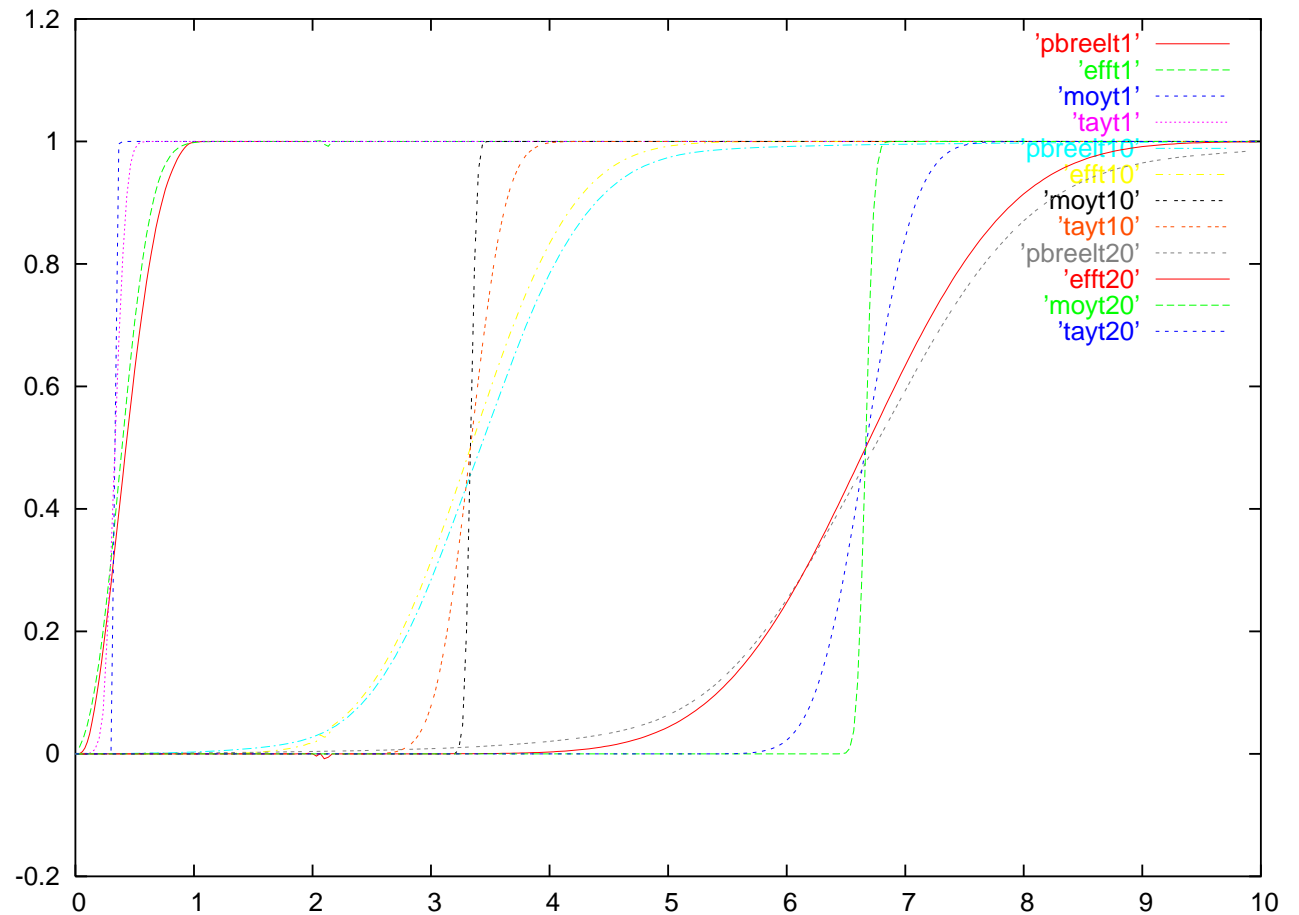


Figure 10: $t = 1, 10, 20, \alpha = 1.9, q = 1, d = 1$.

2ième Problème: $k^* = \infty$

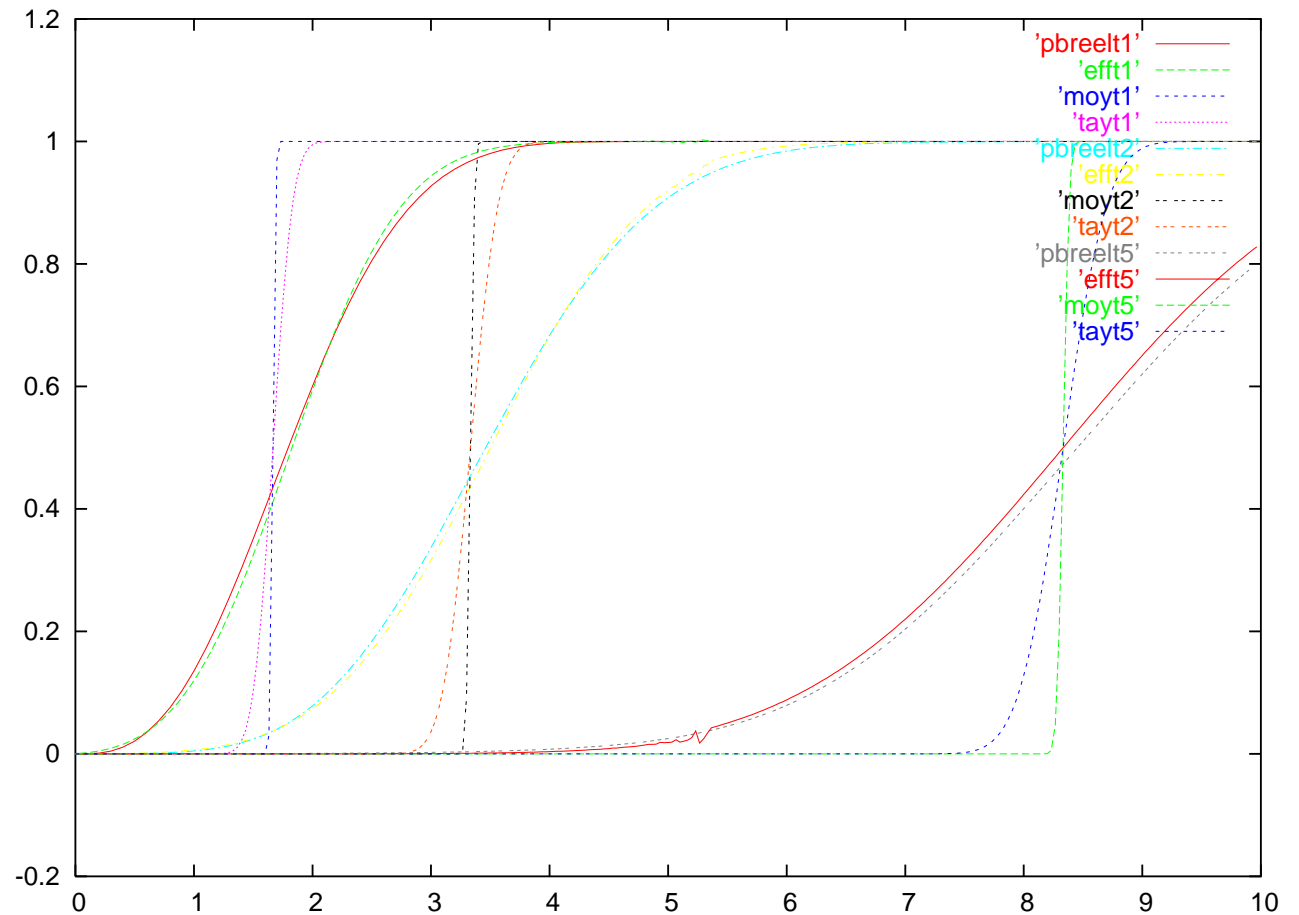


Figure 11: $t = 1, 2, 5, \alpha = 1.6, q = 5, d = 0.5$.

2ième Problème: $k^* = \infty$

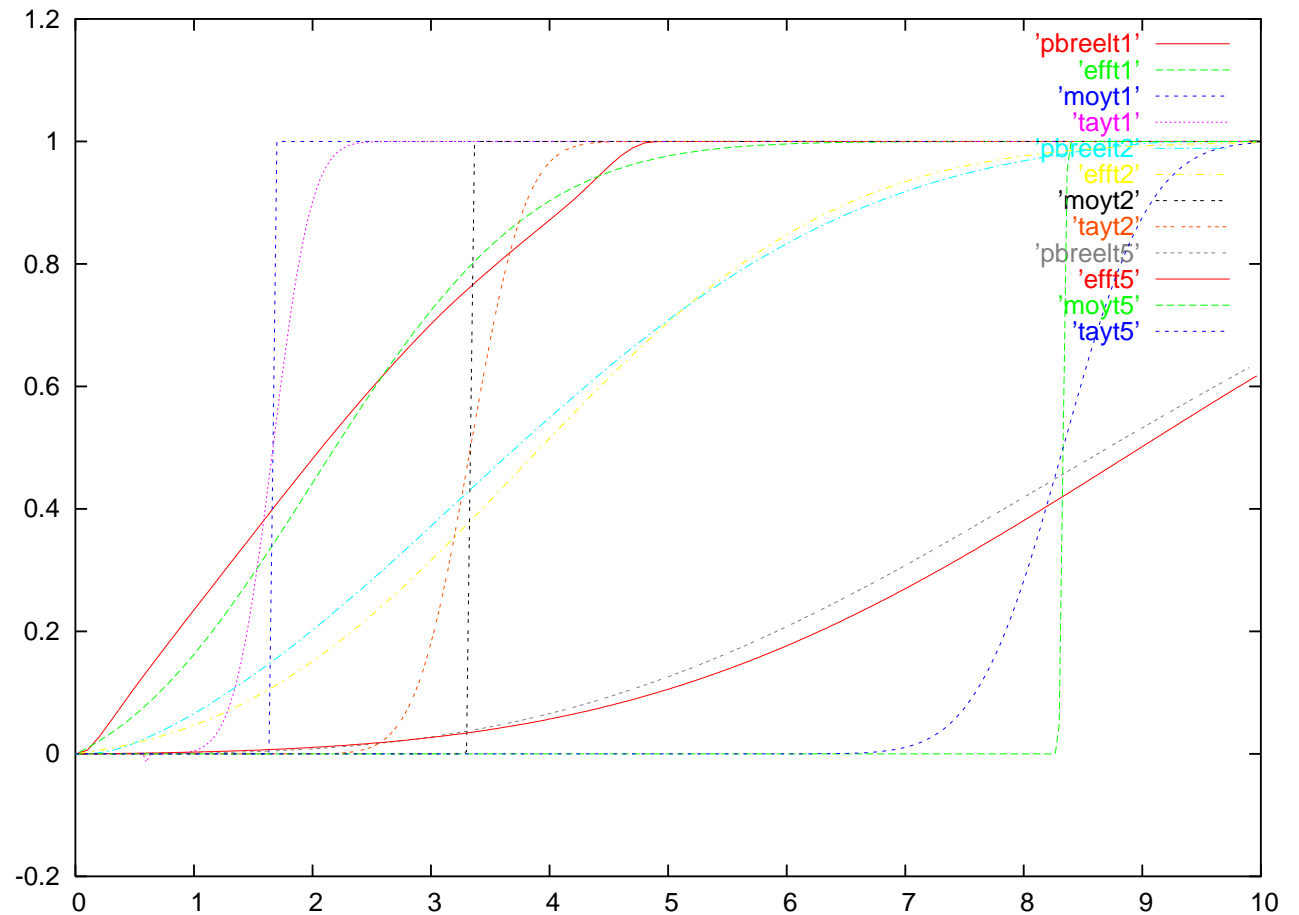


Figure 12: $t = 1, 2, 5, \alpha = 1.9, q = 5, d = 0.5$.

Comparaison

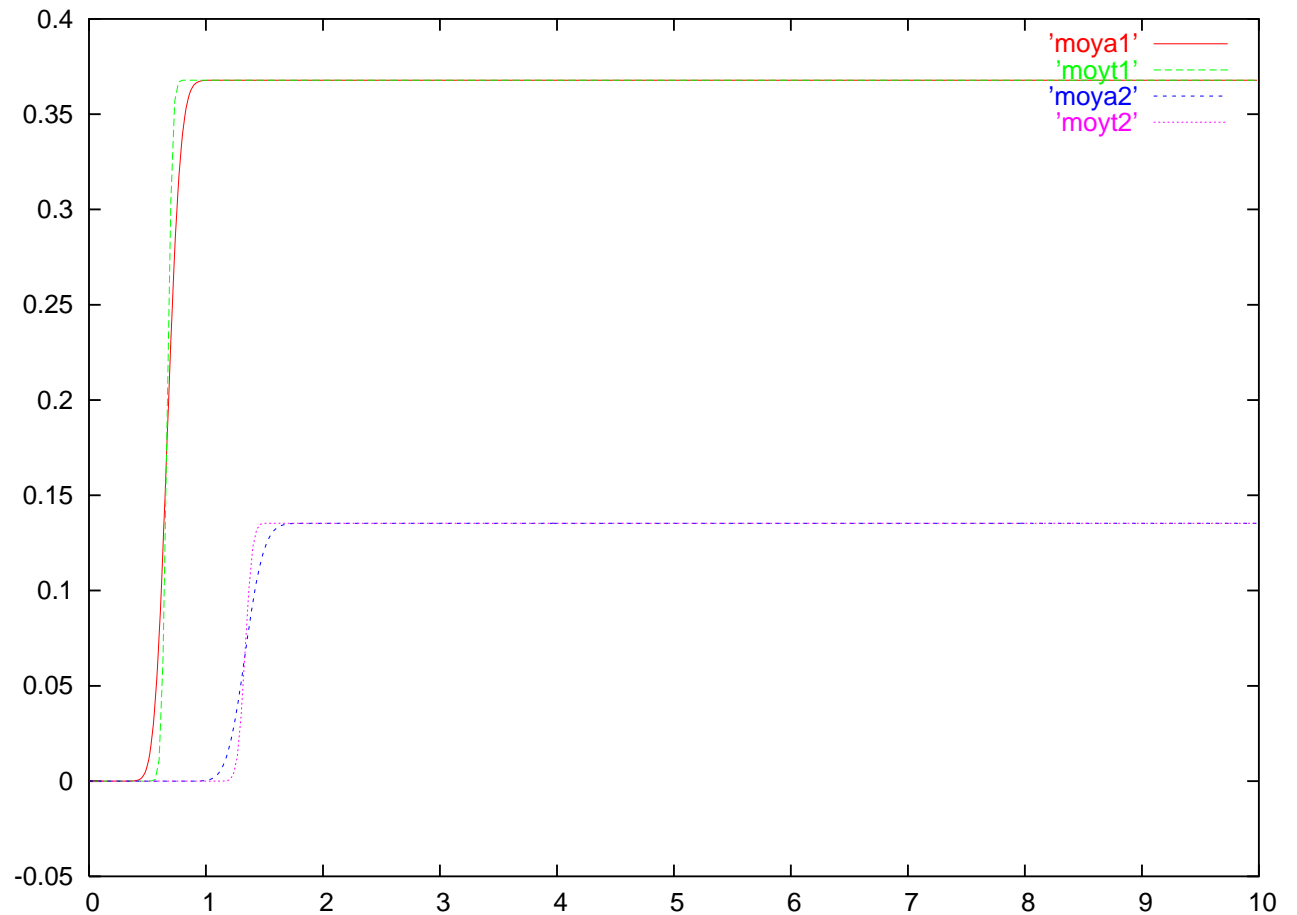


Figure 13: Comparaison entre la formule intégrale et le schéma aux différences finies.

CAS GENERAL

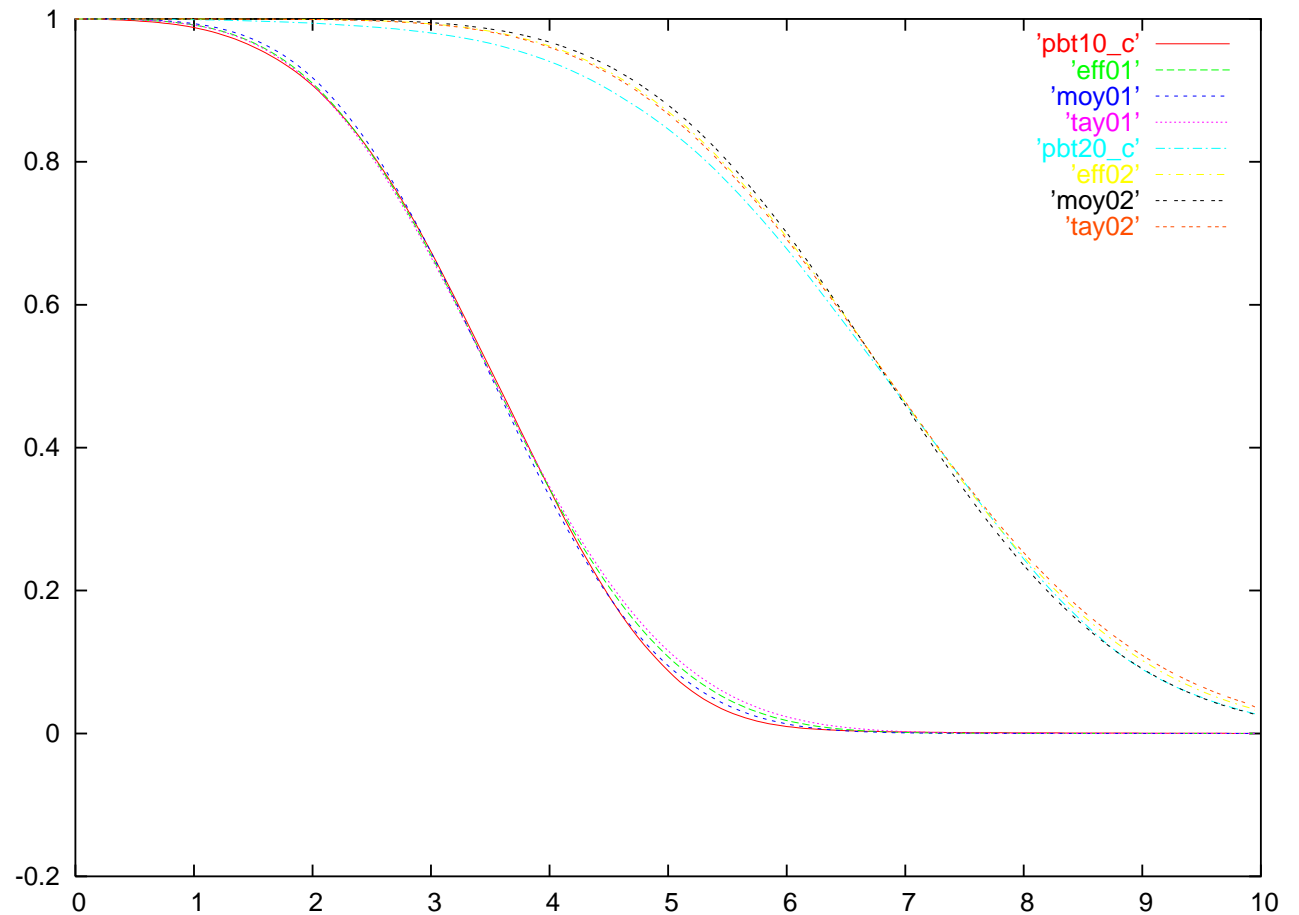


Figure 14: $t = 10, 20, \alpha = 1.6, q = 1, d = 1$.

CAS GENERAL

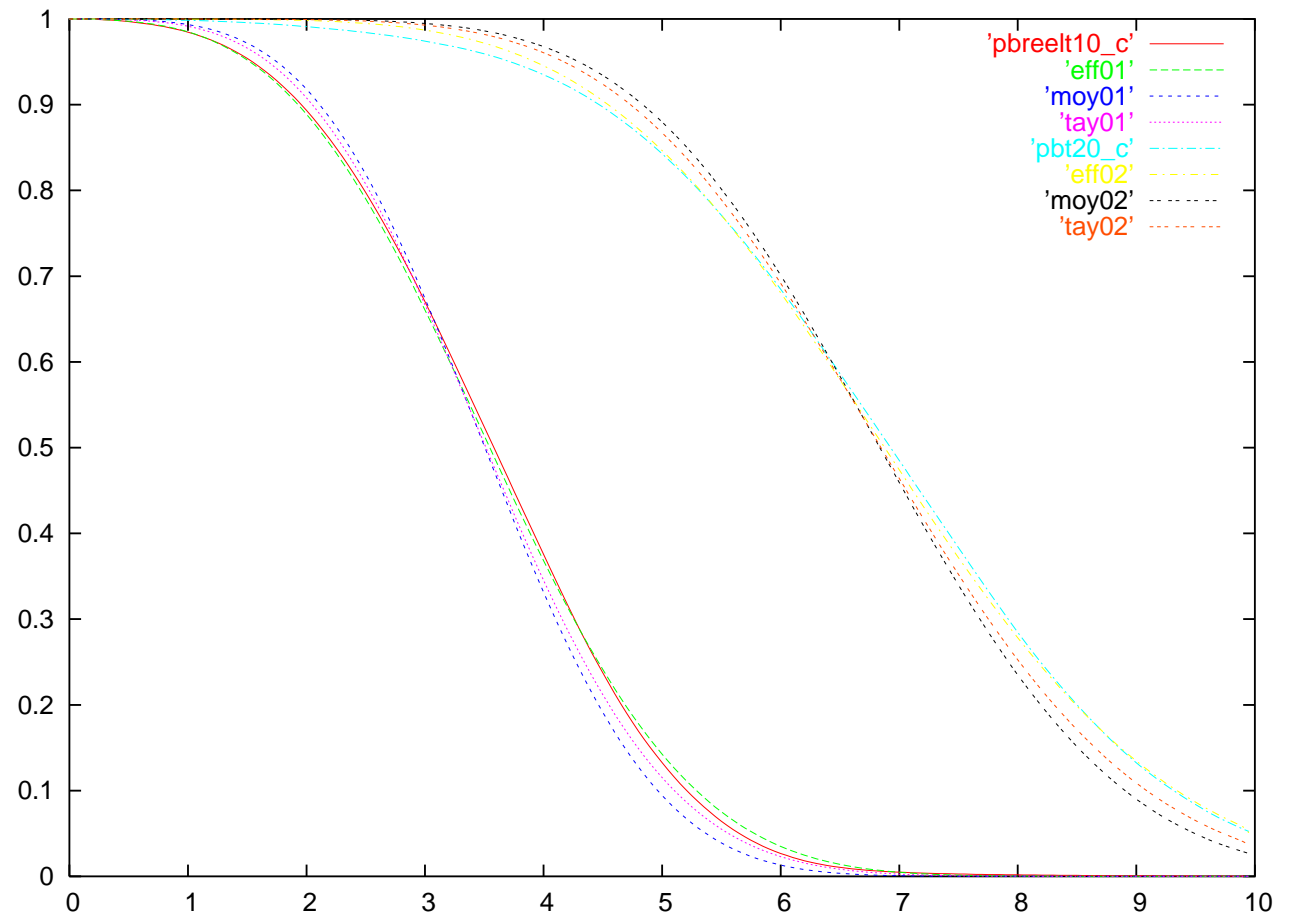


Figure 15: $t = 10, 20$, $\alpha = 1.9$, $q = 1$, $d = 1$.

CAS GENERAL

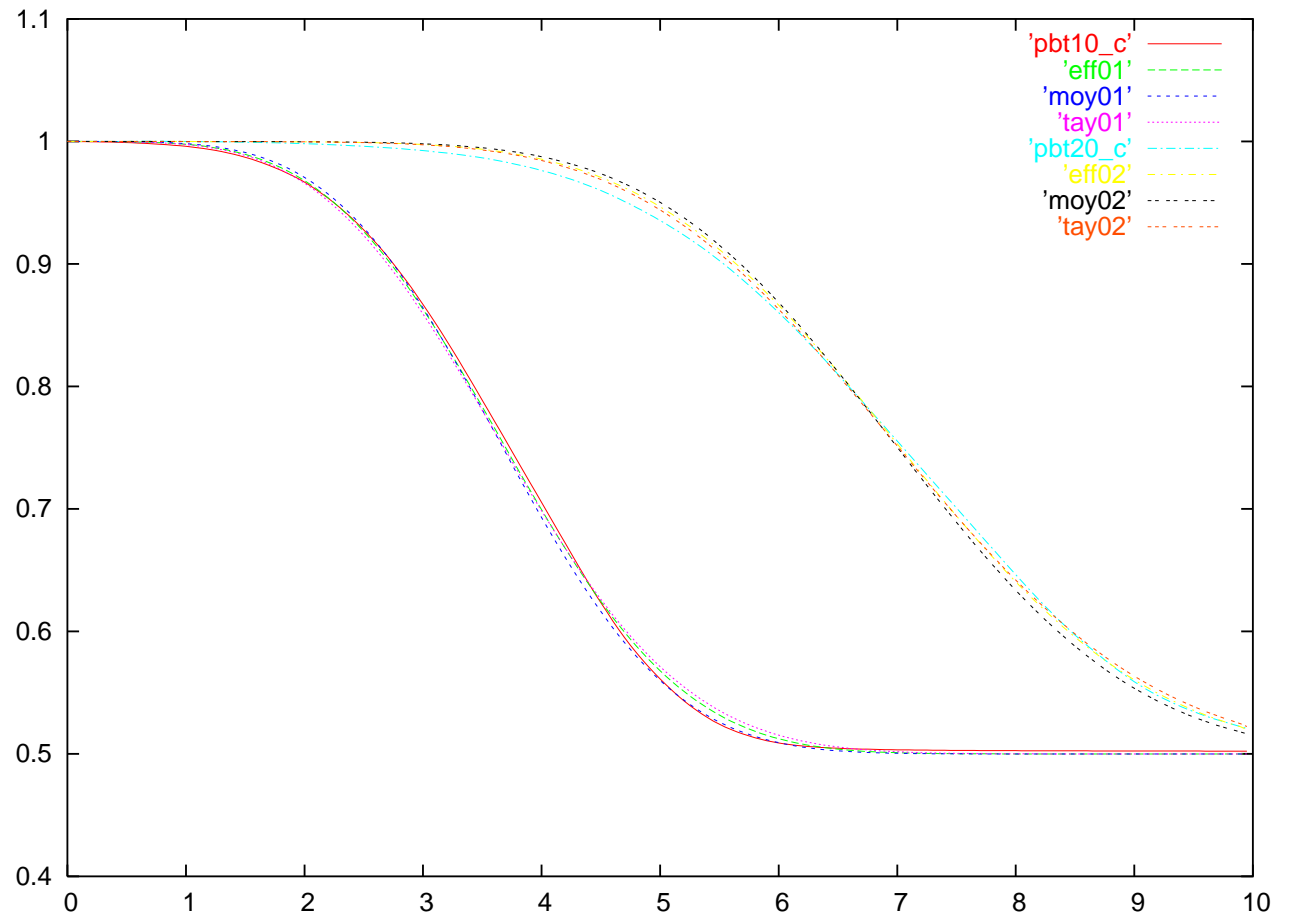


Figure 16: $t = 10, 20$, $\alpha = 1.6$, $q = 1$, $d = 1$.

CAS GENERAL

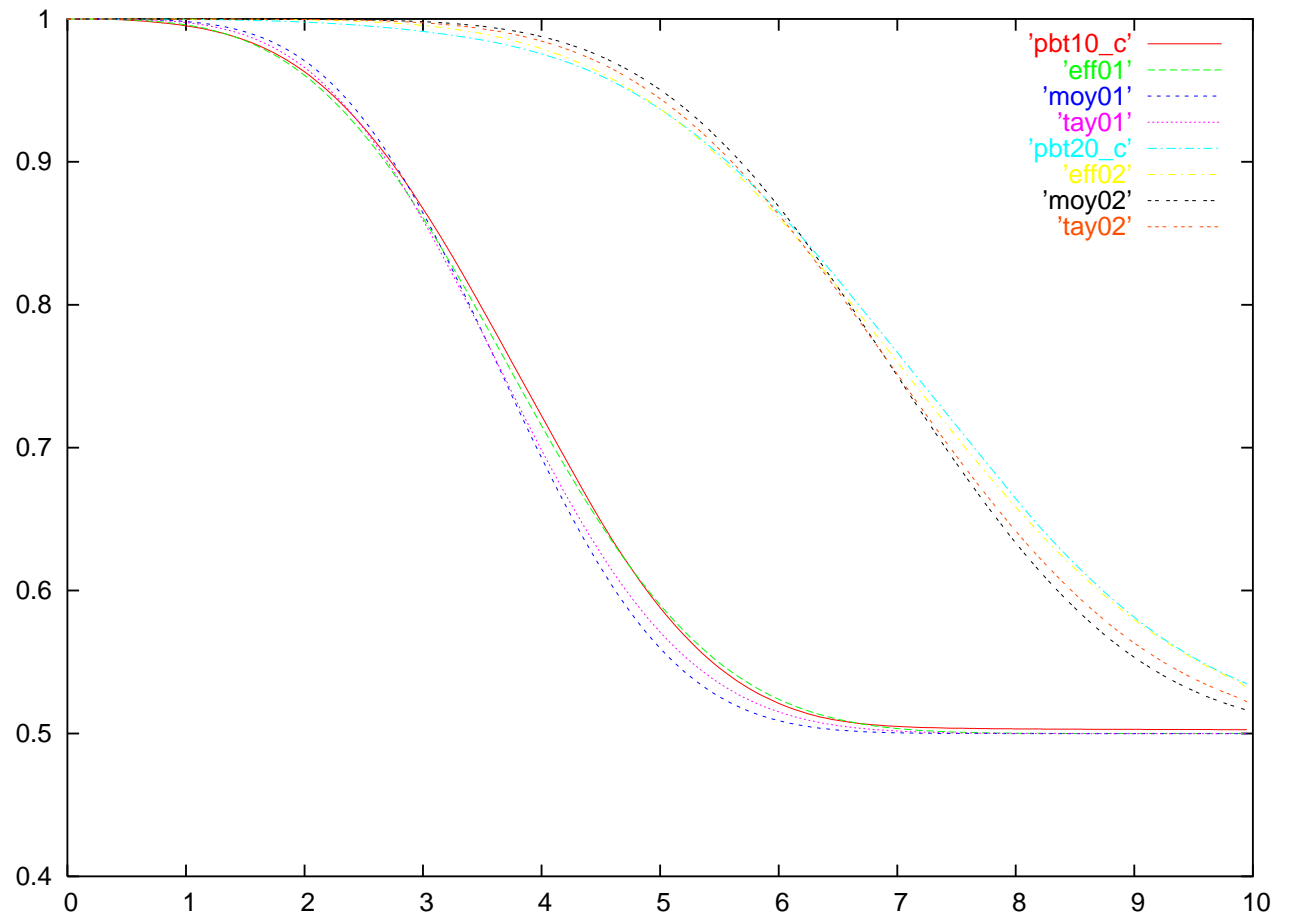


Figure 17: $t = 10, 20, \alpha = 1.9, q = 1, d = 1.$

CAS GENERAL

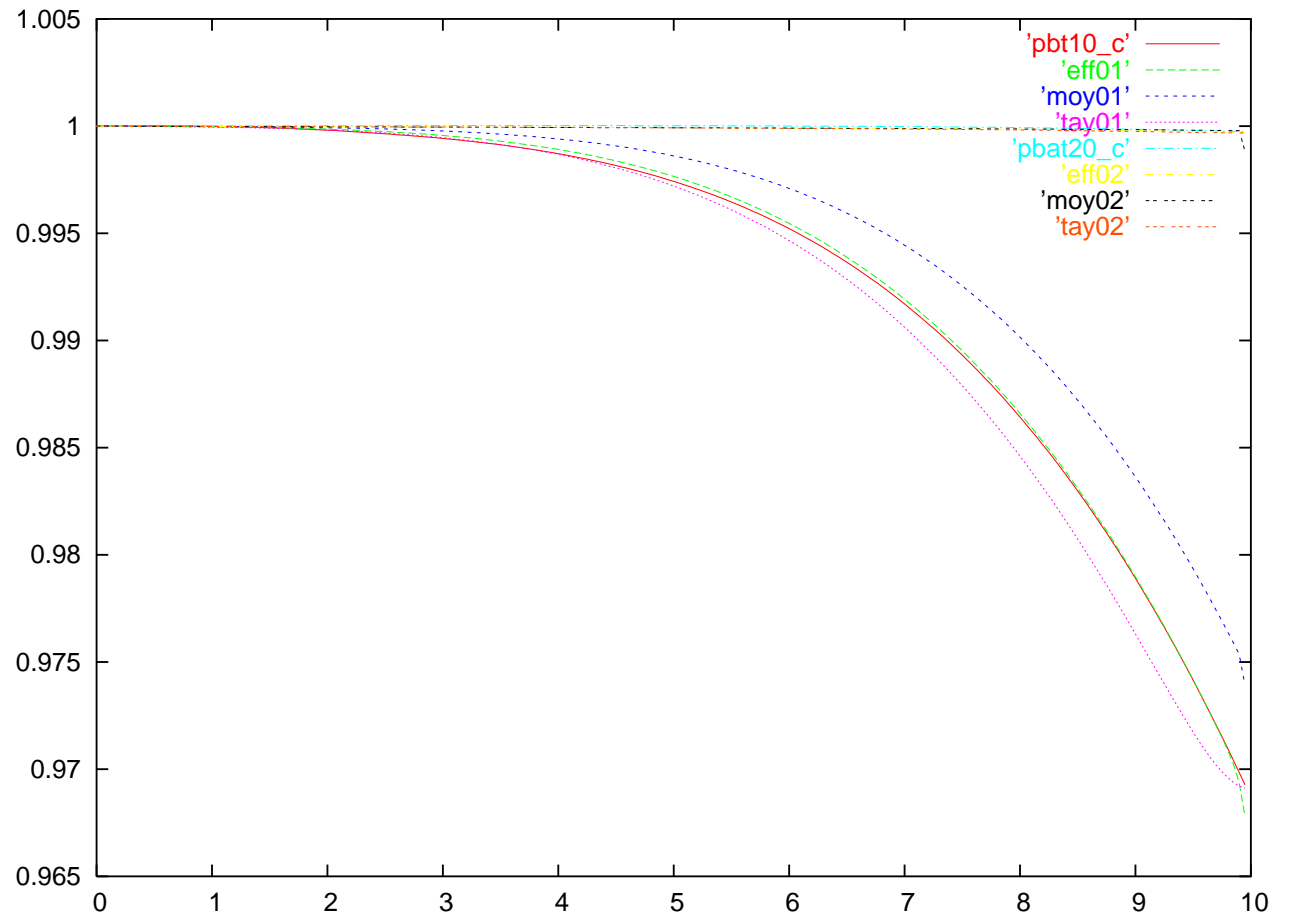


Figure 18: $t = 10, 20$, $\alpha = 1.6$, $q = 5$, $d = 0.5$.

CAS GENERAL

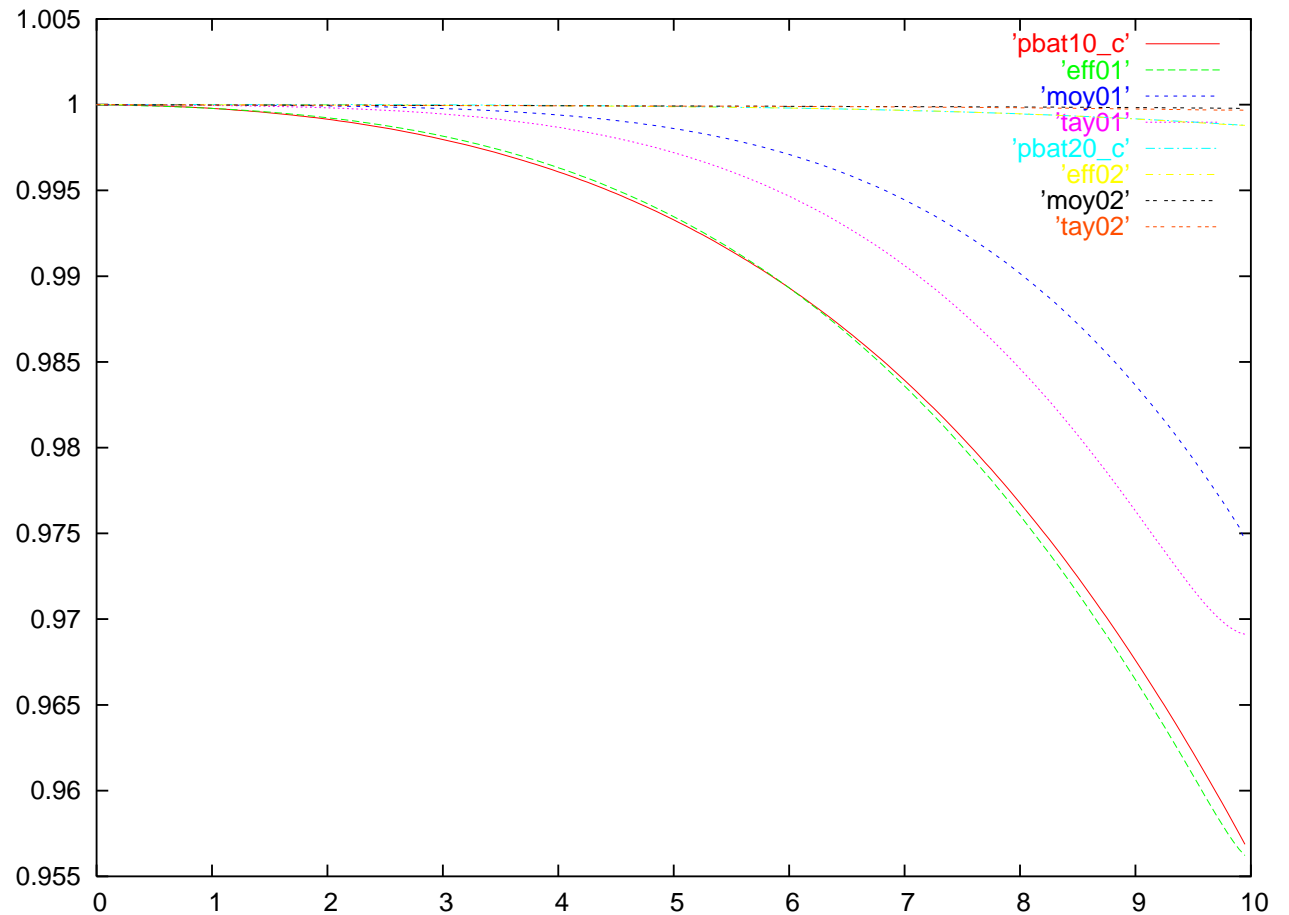


Figure 19: $t = 10, 20$, $\alpha = 1.9$, $q = 5$, $d = 0.5$.