

# **Contributions aux changements d'échelle pour le transport réactif en présence de nombres caractéristiques dominants et avec une cinétique chimique complexe**

**Andro Mikelić**

Université Lyon 1

Institut Camille Jordan

UFR Mathématiques, Lyon

**Carole Rosier**

Université du Littoral

Laboratoire Joseph Liouville

Calais

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).

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..

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.

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.**

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.

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.

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.

# I4a

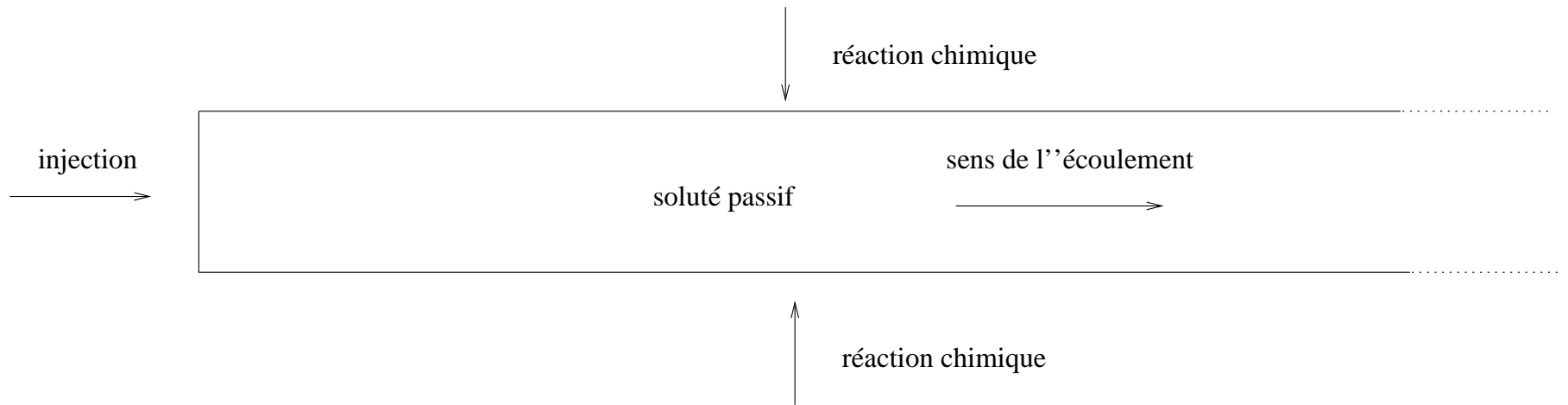


Figure 1: Le tuyau

# I4a

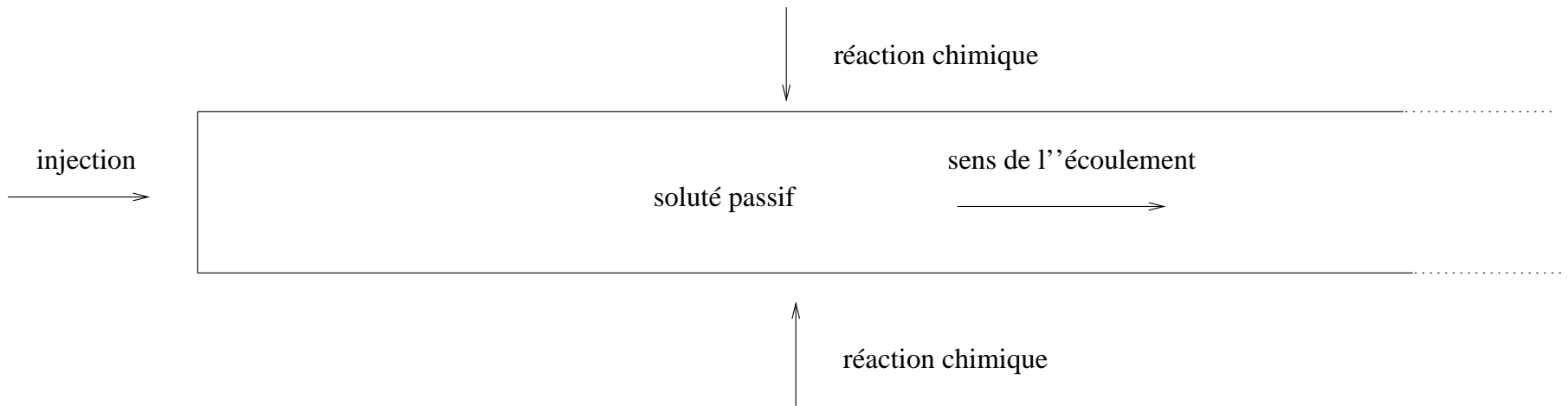
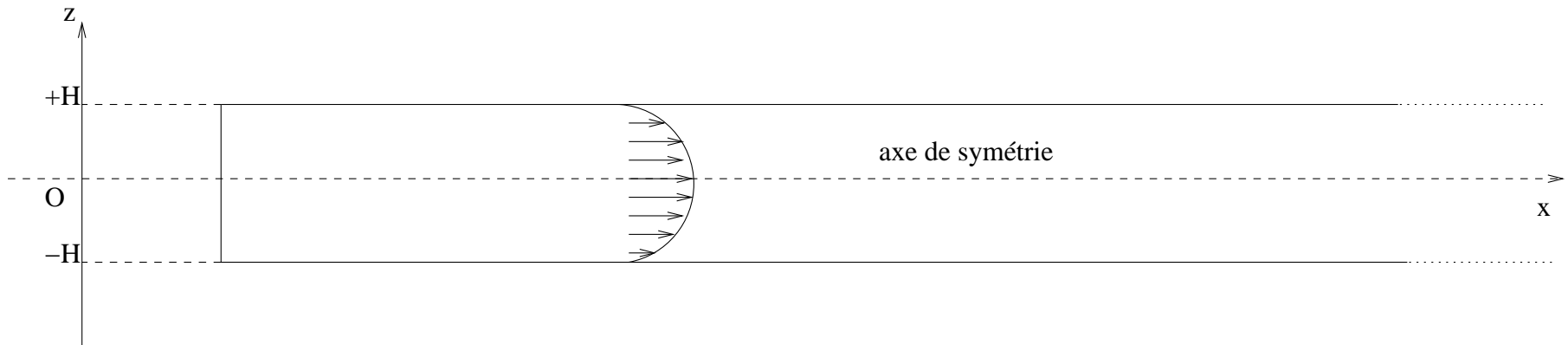


Figure 3: Le tuyau



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

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

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

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

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:

$$-D^* \partial_z c^* = \frac{\partial \hat{c}}{\partial t^*} = \hat{k}^* (c^* - \hat{c}/K_e) \text{ sur } z = \pm H, \quad (4)$$

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

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  $y = z/H$ .

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 =  $H^2/D_R$

$T_{DE}$  =  $K_{eR}/k_R$  (le temps caractéristique de la desorption)

$T_A$  =  $\hat{c}_R/(c_R k_R)$  (le temps caractéristique de l'adsorption).

$T_{react}$  = l'échelle temporelle caractéristique pour la réaction chimique surfacique  $= H/k_R$ .

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  $T_c = T_L$ .

$T_{react}$  = l'échelle temporelle caractéristique pour la réaction chimique surfacique  $= H/k_R$ .

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*.

Nous considérons le cas où  $K_e = H$ ,  $T_A = T_L = T_{DE}$  et 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  $0 \leq \alpha < 2$  et  $k = 0$ . Le nombre de Peclet transversal vaut  $(\frac{1}{\varepsilon})^{\alpha-1}$ . Notons que pour les expériences de Taylor, on a  $\alpha = 1,6$  et  $\alpha = 1,9$ , resp.

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*.

Nous considérons le cas où  $K_e = H$ ,  $T_A = T_L = T_{DE}$  et 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  $0 \leq \alpha < 2$  et  $k = 0$ . Le nombre de Peclet transversal vaut  $(\frac{1}{\varepsilon})^{\alpha-1}$ . Notons que pour les expériences de Taylor, on a  $\alpha = 1,6$  et  $\alpha = 1,9$ , resp.

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

Nous nous limitons au cas  $0 \leq \alpha < 2$ . En utilisant l'anti-symétrie de  $c$ , nos équations sans dimension sont:

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

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

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = \frac{T_A}{T_{DE}} \frac{\partial c_s^\varepsilon}{\partial t} = \frac{T_L}{T_{DE}} k \left( c^\varepsilon - \frac{T_A}{T_{DE}} \frac{c_s^\varepsilon}{K} \right) \Big|_{y=1}$$

sur  $\Gamma^+ \times (0, T)$  (7)

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

et  $c^\varepsilon(0, y, t) = 0, \quad (y, t) \in (0, 1) \times (0, T), \quad (9)$

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

Le problème efficace avec le coefficient de dispersion de Taylor, pour le problème avec  $k = 0$  :

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

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

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

Le problème efficace avec le coefficient de dispersion de Taylor, pour le problème avec  $k = 0$  :

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

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) ◇ 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 longitudinal.

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**. Notons aussi l'approche formelle similaire dans l'article de Balakotaiah et Chang, SIAM J. Appl. Math. (2003).

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**. Notons aussi l'approche formelle similaire dans l'article de Balakotaiah et Chang, SIAM J. Appl. Math. (2003).

Les résultats mathématiquement **rigoureux**:

- 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.

- l'article [1] A. Mikelić, V. Devigne, C.J. van Duijn : Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers, *SIAM J. Math. Anal.*, Vol. 38, Issue 4 (2006), p. 1262-1287, correspondant à la situation ou  $K_e = +\infty$ .
- l'article [2] A. Mikelić , C. Rosier : Rigorous upscaling of the infinite adsorption rate reactive flow under dominant Peclet number through a pore, accepté pour publication dans *Annali di Ferrara*, (2007), correspondant à la situation  $\hat{k}^* \rightarrow +\infty$ .

- l'article [1] A. Mikelić, V. Devigne, C.J. van Duijn : Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers, *SIAM J. Math. Anal.*, Vol. 38, Issue 4 (2006), p. 1262-1287, correspondant à la situation ou  $K_e = +\infty$ .
- l'article [2] A. Mikelić , C. Rosier : Rigorous upscaling of the infinite adsorption rate reactive flow under dominant Peclet number through a pore, accepté pour publication dans *Annali di Ferrara*, (2007), correspondant à la situation  $\hat{k}^* \rightarrow +\infty$ .

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

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

La comparaison entre  $c_0^{eff}$  et  $c^\varepsilon$  a été fait dans les articles [1] (resp. [2]), lorsque  $K_e = +\infty$  (resp.  $\hat{k}^* = +\infty$ ) et on a

## Proposition 2

$$\|(c^\varepsilon - c_0^{eff})\Psi\|_{L^\infty(0,T;L^2(Z^+))} \leq \varepsilon^{1-\alpha/2} \frac{F^0}{\sqrt{D}} \quad (13)$$

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

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

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

$$F^0 = C_1^F \|\partial_x c_0^{eff}\|_{L^2(O_T)} + C_2^F k_0 \leq C_3^F \varepsilon^{-\alpha/4} \quad (16)$$

$$\|c^\varepsilon - c_0^{eff}\|_{L^\infty(0,T;L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0,1)))} \leq C\varepsilon^{1-3\alpha/4} \quad (17)$$

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

$$\|c^\varepsilon - c_0^{eff}\|_{L^\infty(0,T;L^2_{loc}(\mathbb{R}_+ \times (0,1)))} \leq C\varepsilon^{1-3\alpha/4} \quad (19)$$

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

**COMMENT FAIRE MIEUX ?**

Voici le modèle de Paine et al:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c^{Pai} + Q\left(\frac{2}{3} + A_1\right) \partial_x c^{Pai} + C_2 c^{Pai} = K^* \partial_{xx} c^{Pai}, \\ \text{dans } \mathbb{R}_+ \times (0, T), \partial_x c^{Pai} \in L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, T)) \\ c^{Pai}|_{x=0} = 0, c^{Pai}|_{t=0} = 1, \end{array} \right. \quad (20)$$

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.

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.

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.

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 proposons l'expansion asymptotique à 2-échelles suivante:  $c^\varepsilon$  dans la forme

$$c^\varepsilon = c^0(x, t; \varepsilon) + \varepsilon^{2-\alpha} c^1(x, y, t) + \varepsilon^{2(2-\alpha)} c^2(x, y, t) + \dots \quad (22)$$

Après l'introduction du développement (21) dans le problème (5)-(9), la conditions de compatibilité nous donne une équation hyperbolique d'ordre 1,

couplée avec une EDO, comme le problème efficace. Nous suivons la stratégie de Rubinstein et Mauri et supposons que l'opérateur hyperbolique est d'ordre suivant. Ensuite nous le récupérons à l'ordre suivant, ce qui nous donne une équation pseudo-parabolique.

Nous avons obtenons le modèle efficace suivant:

couplée avec une EDO, comme le problème efficace. Nous suivons la stratégie de Rubinstein et Mauri et supposons que l'opérateur hyperbolique est d'ordre suivant. Ensuite nous le récupérons à l'ordre suivant, ce qui nous donne une équation pseudo-parabolique.

Nous avons obtenons le modèle efficace suivant:

$$\begin{aligned} \partial_t(c + c_s) + \left(\frac{2Q}{3} + \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\right)\partial_x c - (D\varepsilon^\alpha + \\ \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D}\varepsilon^{2-\alpha})\partial_{xx}c = \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\partial_x c_s \text{ dans } (0, +\infty) \times (0, T) \\ (1 + \frac{1}{3D}\varepsilon^{2-\alpha})\partial_t c_s = k(c + \frac{2Qk}{45D}\varepsilon^{2-\alpha}\partial_x c - c_s/K) \\ \text{dans } (0, +\infty) \times (0, T) \end{aligned} \quad (24)$$

Pour  $k = 0$  nous trouvons le modèle de la dispersion de Taylor.

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

Pour  $k = 0$  nous trouvons le modèle de la dispersion de Taylor.

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

$$\begin{aligned} \partial_{t^*} \left( c^* + \frac{\hat{c}}{H} \right) + \left( \frac{2Q^*}{3} + \frac{2Q^* \mathbf{Da}_T}{45} \right) \partial_{x^*} c^* - D^* \left( 1 + \right. \\ \left. \frac{8}{945} \mathbf{Pe}_T^2 \right) \partial_{x^* x^*} c^* = \frac{2Q^* \mathbf{Da}_T}{45 K_e} \partial_{x^*} \hat{c} \end{aligned} \quad (26)$$

$$(1 + \frac{1}{3}\mathbf{Da}_T)\partial_{t^*}\hat{c} = \hat{k}^*(c^* + \frac{2H\mathbf{Pe}_T}{45}\partial_{x^*}c^* - \frac{\hat{c}}{K_e}) \quad (27)$$

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

Nous allons donner le réponse dans le cas particulier

$K_e = +\infty$ :

**Théorème 2** (voir [1]) Soit  $c^{Ma}$  donnée par

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

Alors pour  $\forall \delta > 0$  on a

$$\|t^5 (c^\varepsilon - c^{Mau} - \mathbf{correcteur})\|_\infty \leq \begin{cases} C\varepsilon^{4-7\alpha/2-\delta}, & \alpha < 1, \\ C\varepsilon^{3/2-\alpha-\delta}, & \alpha \in [1, 2). \end{cases} \quad (28)$$

$$\|t^3 (c^\varepsilon - c^{Mau})\|_{L^2(0, T; L^1_{loc}(Z^+))} \leq C\varepsilon^{2-\alpha} \quad (29)$$

$$\|t^3(c^\varepsilon - c^{Ma u})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} \leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4}H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4}H(\alpha-1)) \quad (30)$$

$$\|t^3\partial_y c^\varepsilon\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} \leq C(\varepsilon^{2-5\alpha/4}H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-3\alpha/4}H(\alpha-1)) \quad (31)$$

$$\|t^3\partial_x(c^\varepsilon - c^{Ma u})\|_{L^2(0,T;L^2_{loc}(Z^+))} \leq C(\varepsilon^{2-7\alpha/4}H(1-\alpha) + \varepsilon^{3/2-5\alpha/4}H(\alpha-1)) \quad (32)$$

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  $\varepsilon$ . Ensuite nous le récupérons à l'ordre suivant, ce qui nous donne une équation parabolique. Malheureusement, les coefficients devant les opérateurs dépendent de  $\varepsilon^\alpha$  et de  $\varepsilon^{\alpha-2}$ , respectivement. En conséquence, les dérivées vont croître avec des exposants négatifs de  $\varepsilon$ . En plus, le développement asymptotique est par rapport à  $\varepsilon^{2-\alpha}$ .

- **2ème ETAPE:** Ensuite nous calculons l'énergie de la différence entre  $c^\varepsilon$  et le premier correcteur,

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

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.

- **2ème ETAPE:** Ensuite nous calculons l'énergie de la différence entre  $c^\varepsilon$  et le premier correcteur,

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

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 [1] et [2]

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

$$c_1^{cor}(x, y, t; \varepsilon) = c(x, t; \varepsilon) + \varepsilon^{2-\alpha} \zeta(t) \left( \frac{Q}{D} \left( \frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} - \beta^\varepsilon \right) \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{1}{D} \left( \frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) \frac{T_A}{T_{DE}} \frac{\partial c_s}{\partial t}(x, t; \varepsilon) \right) \quad (33)$$

ou  $\{c, c_s\}$  est la solution du problème efficace (23) avec le coefficient de la dispersion de Taylor et le terme de réaction:

<i>PARAMÈTRES</i>	<i>VALEURS</i>
Épaisseur du tuyau : $H$	$2.635 \cdot 10^{-4}$ m,
Longueur caractéristique : $L_R$	0.319 m
$\varepsilon = H/L_R$	$0.826 \cdot 10^{-3}$
vitesse caractéristique : $Q^*$	$4.2647 \cdot 10^{-5}$ m/sec
coefficient de la diffusion: $D^*$	$1.436 \cdot 10^{-10}$ m <sup>2</sup> /sec,
nombre de Peclet longitudinal: $\mathbf{Pe} = \frac{L_R Q^*}{D^*} =$	$0.94738 \cdot 10^5$
$\alpha = \log \mathbf{Pe} / \log(1/\varepsilon) =$	<b>1.614172</b>
nombre de Peclet transversal: $\mathbf{Pe}_T = \frac{H Q^*}{D^*} =$	$0.7825358 \cdot 10^2$

Table 1: A. Valeurs des paramètres pour l'exemple de Taylor au temps maximal.

Pour la simulation numérique nous avons adapté le Logiciel FreeFem++ à notre cas :

- Discrétisation en temps :  
L'opérateur d'ordre 1 est discrétisé en utilisant la méthode des caractéristiques. Plus précisément, l'EDP est écrite comme

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (\vec{q} \cdot \nabla)c = D\varepsilon^\alpha \partial_{xx}c + D\varepsilon^{\alpha-2} \partial_{yy}c = f(x, y, t) \quad (34)$$

Soit  $c^m$  l'approximation de la solution  $c$  au temps  $m\delta t$ .  
Alors le schéma s'écrit :

$$\frac{1}{\delta t} (c^{m+1}(x, y) - c^m(x - q(y)\delta t, y)) = f^m(x, y)$$

- Discrétisation en espace : Une des caractéristiques de notre problème est la propagation d'un front. Pour la traiter numériquement correctement on utilise la méthode des éléments finis " Lagrange P1" avec un maillage adaptatif. Le maillage est adapté au voisinage du front tous les 10 pas de temps.

Pour toutes les figures qui suivent, nous allons représenter 3 solutions : la moyenne de la solution du pb réel  $\frac{1}{H} \int_0^H c dz$ , la solution du pb effectif  $c^{eff}$ , notée aussi  $c^{Tay}$  et celle du pb moyenné simplement  $c^{moy}$ . Les paramètres considérés seront indiqués dans des tableaux. Les temps seront indiqués en légende.

CAS A: Dispersion de Taylor ( $k = 0$ );  $t^* = 11220$  sec Dans  
ce cas les pbs 1D s'écrivent :

1. Pb effectif :

$$\partial_{t^*} c^{Tay} + \frac{2Q^*}{3} \partial_{x^*} c^{Tay} = D^* \left(1 + \frac{8}{945} \mathbf{Pe}_T^2\right) \partial_{x^* x^*} c^{Tay} \text{ for } x, t > 0 \quad (35)$$

$$c^{Tay}|_{x=0} = 1 \text{ and } c^{Tay}|_{t=0} = 0. \quad (36)$$

2. Pb obtenu par une simple moyennisation sur la section verticale :

$$\partial_{t^*} c^{moy} + \frac{2Q^*}{3} \partial_{x^*} c^{moy} - D^* \partial_{x^* x^*} c^{moy} = 0 \text{ in } (0, +\infty) \times (0, T) \quad (37)$$

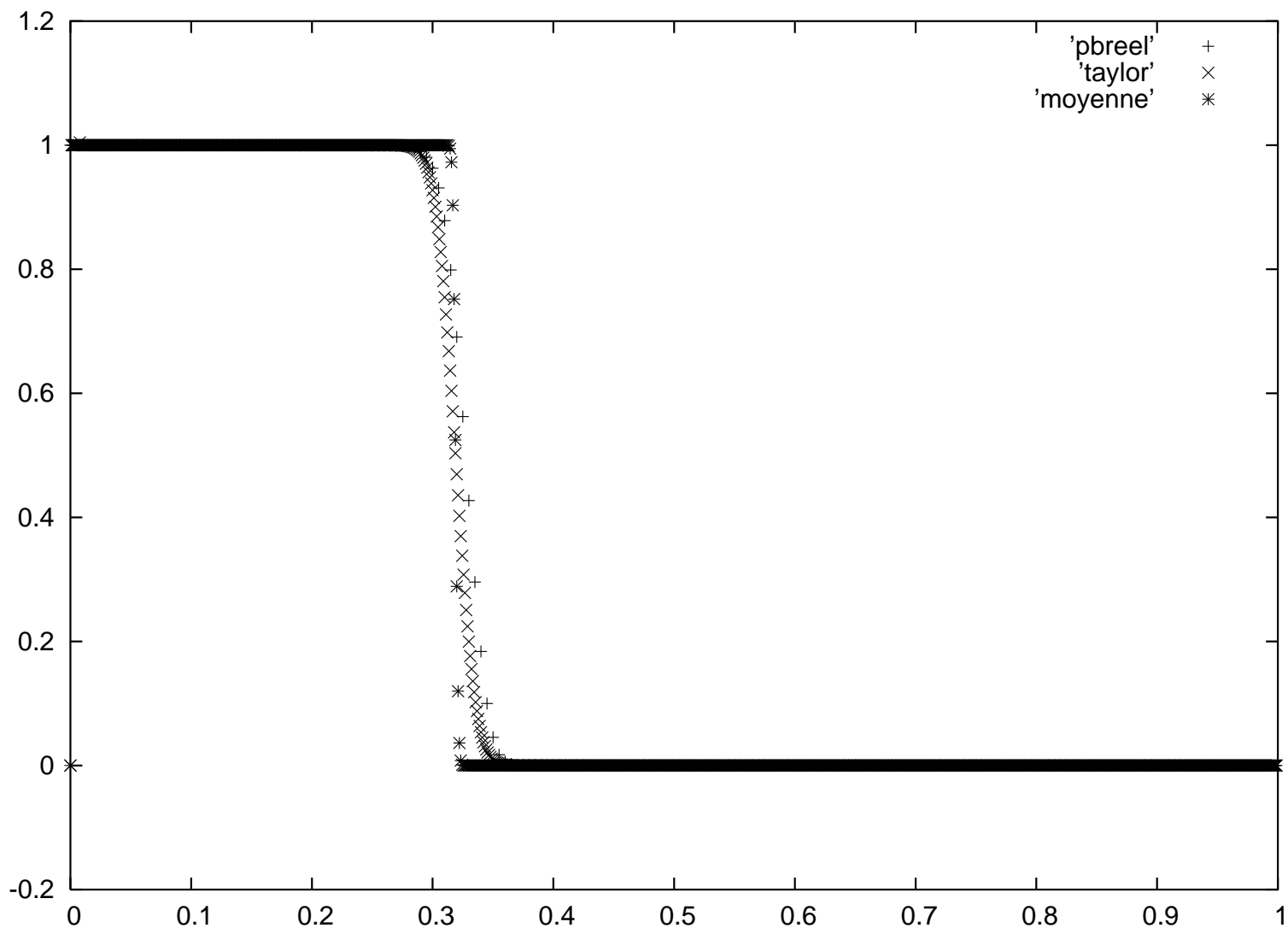


Figure 5: Comparaison entre concentrations à  $t = 11220$  sec.

Notons qu'en l'absence de réactions chimiques, on peut résoudre explicitement le pb effectif (35)-(36) (resp (37) - (36)) avec la formule integrale : En posant  $\bar{Q} = \frac{2Q^*}{3}$  et  $\bar{D} = D^*(1 + \frac{8}{945}\mathbf{Pe}_T^2)$ , alors

$$c^{Tay}(x, t) = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \exp\left\{\frac{\bar{Q}x}{\bar{D}}\right\} \int_{(x+\bar{Q}t)/(2\sqrt{\bar{D}t})}^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta + \int_{(x-\bar{Q}t)/(2\sqrt{\bar{D}t})}^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta \right] \quad (38)$$

Pour le problème (37),(36), tout est analogue.

CAS B: données numériques choisies par Taylor; le temps d'é

<i>PARAMETRES</i>	<i>VALEURS</i>
Épaisseur du tuyau: $H$	$2.635 \cdot 10^{-4}$ m,
Longueur caractéristique : $L_R$	0.632 m
$\varepsilon = H/L_R$	$0.41693 \cdot 10^{-3}$
vitesse caractéristique: $Q^*$	$0.393 \cdot 10^{-2}$ m/sec
coefficient de la diffusion : $D^*$	$0.6 \cdot 10^{-9}$ m <sup>2</sup> /sec,
nombre de Peclet longitudinal : $\mathbf{Pe} = \frac{L_R Q^*}{D^*} =$	$4.1396 \cdot 10^6$
$\alpha = \log \mathbf{Pe} / \log(1/\varepsilon) =$	1.95769
nombre de Peclet transversal : $\mathbf{Pe}_T = \frac{H Q^*}{D^*} =$	$1.72592 \cdot 10^3$

Table 2: B. Les paramètres pour le temps caractéristique 240 sec

# Numerical comparison 8

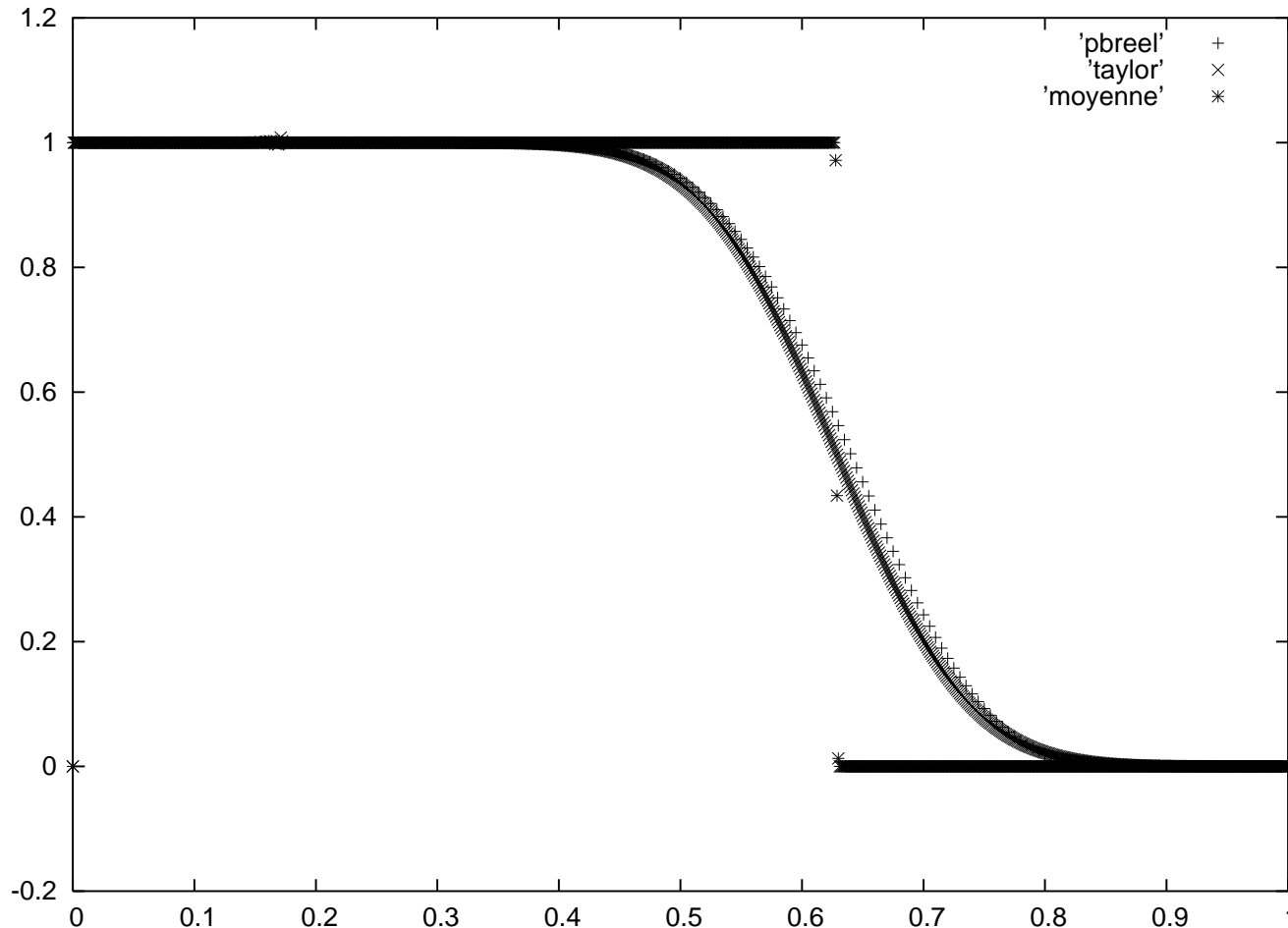


Figure 6: Cas B: 2ième cas dans l'article de Taylor. Comparaison entre les solutions à  $t^* = 240$  sec.

Dans ce cas la condition aux limites est :

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = \frac{\partial \hat{c}}{\partial t^*} = \hat{k}^* (c^* - \hat{c}/K_e) \quad \text{on } z = \pm H, \quad (39)$$

Le pb. effectif devient alors :

(DIM)

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

CAS A2: temps de l'écoulement :  $t^* = 100$  sec

On a  $\hat{k}^* = \varepsilon Q^*$  et  $K_e = H$ . Ensuite  $\mathbf{Da}_T = \varepsilon \mathbf{Pe}_T$ . Le problème à résoudre est (DIM) et nous le comparons les solutions aux (1), (39) avec les conditions (??),  $\hat{c}|_{t=0} = 0$  et (DIM) ; et aussi avec  $c^{moy}$ . Comparaison est montrée aux temps  $t^* = 100$ ,  $t^* = 211$  and  $t^* = 350$  sec, sur les Figures 7, 8 and 9.

<i>PARAMETRES</i>	<i>VALEURS</i>
Épaisseur du tuyau: $H$	$0.5 \cdot 10^{-2}$ m,
Longueur caractéristique : $L_R$	0.632 m
$\varepsilon = H/L_R$	$0.7911 \cdot 10^{-2}$
vitesse caractéristique : $Q^*$	$0.3 \cdot 10^{-2}$ m/sec
coefficient de la diffusion: $D^*$	$0.2 \cdot 10^{-6}$ m <sup>2</sup> /sec,
le nombre de Peclet longitudinal: $\mathbf{Pe} = \frac{L_R Q^*}{D^*} =$	$9.48 \cdot 10^3$
$\alpha = \log \mathbf{Pe} / \log(1/\varepsilon) =$	<b>1.670972</b>
le nombre de Peclet transversal: $\mathbf{Pe}_T = \frac{H Q^*}{D^*} =$	75
vitesse caractéristique de la réaction: $\hat{k}^* = \varepsilon Q^* =$	$0.237 \cdot 10^{-4}$ m/sec
le nombre de Damkohler transversal Damkohler: $\mathbf{Da}_T$	0.5933

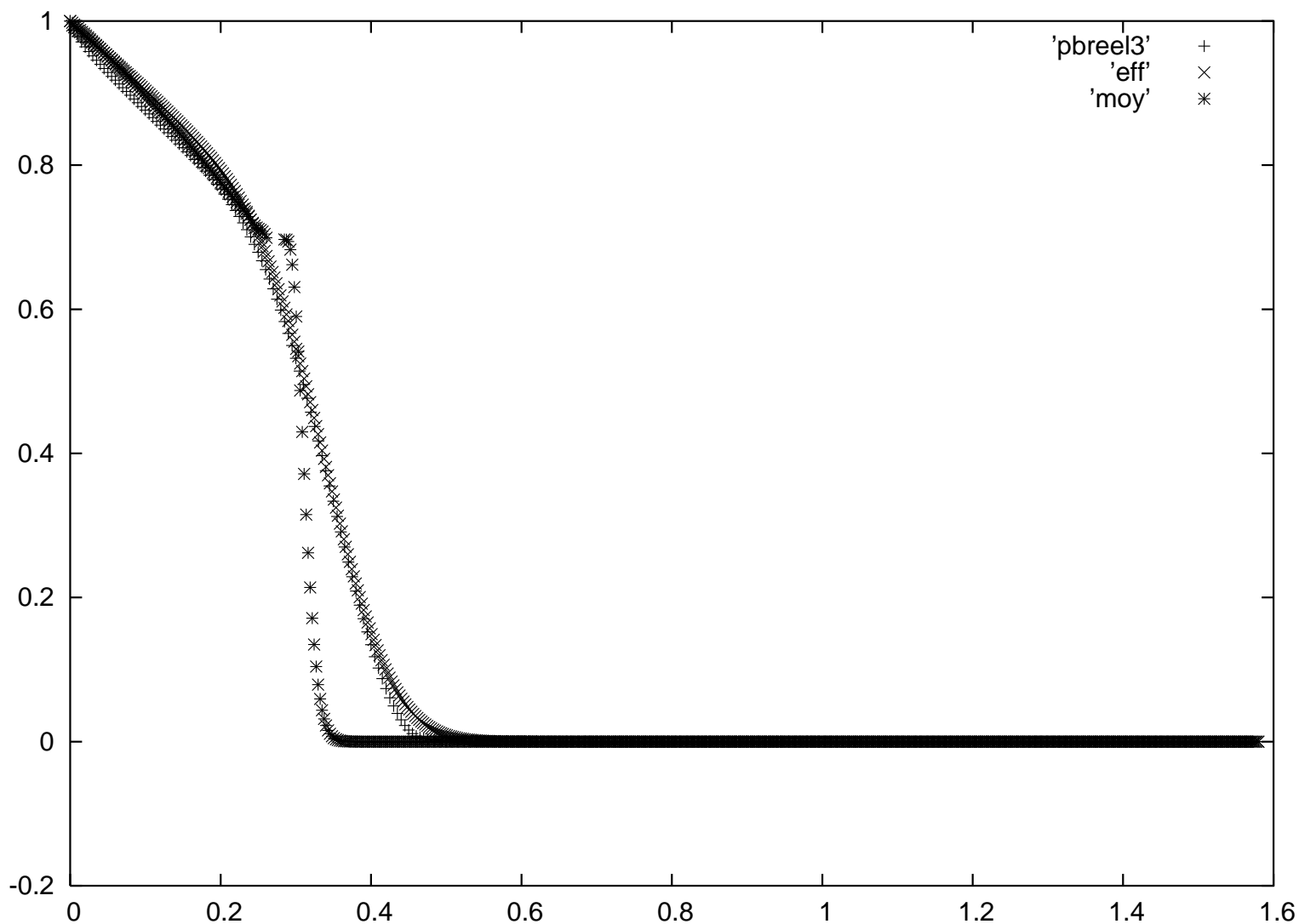


Figure 7: Comparaison entre les concentrations volumiques au temps  $t^* = 100$  sec.

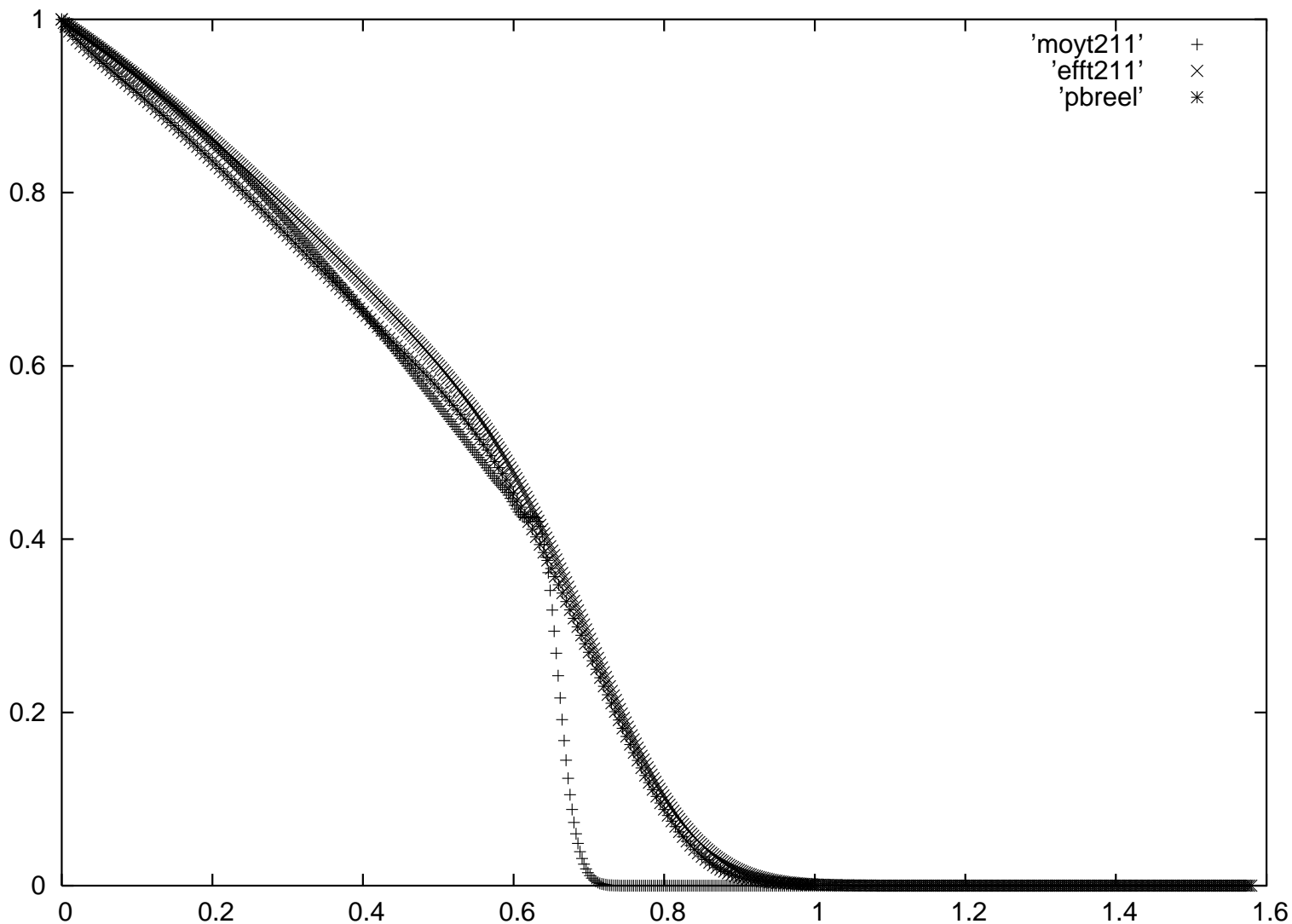


Figure 8: Comparaison entre les concentrations volumiques au temps  $t^* = 211$  sec.

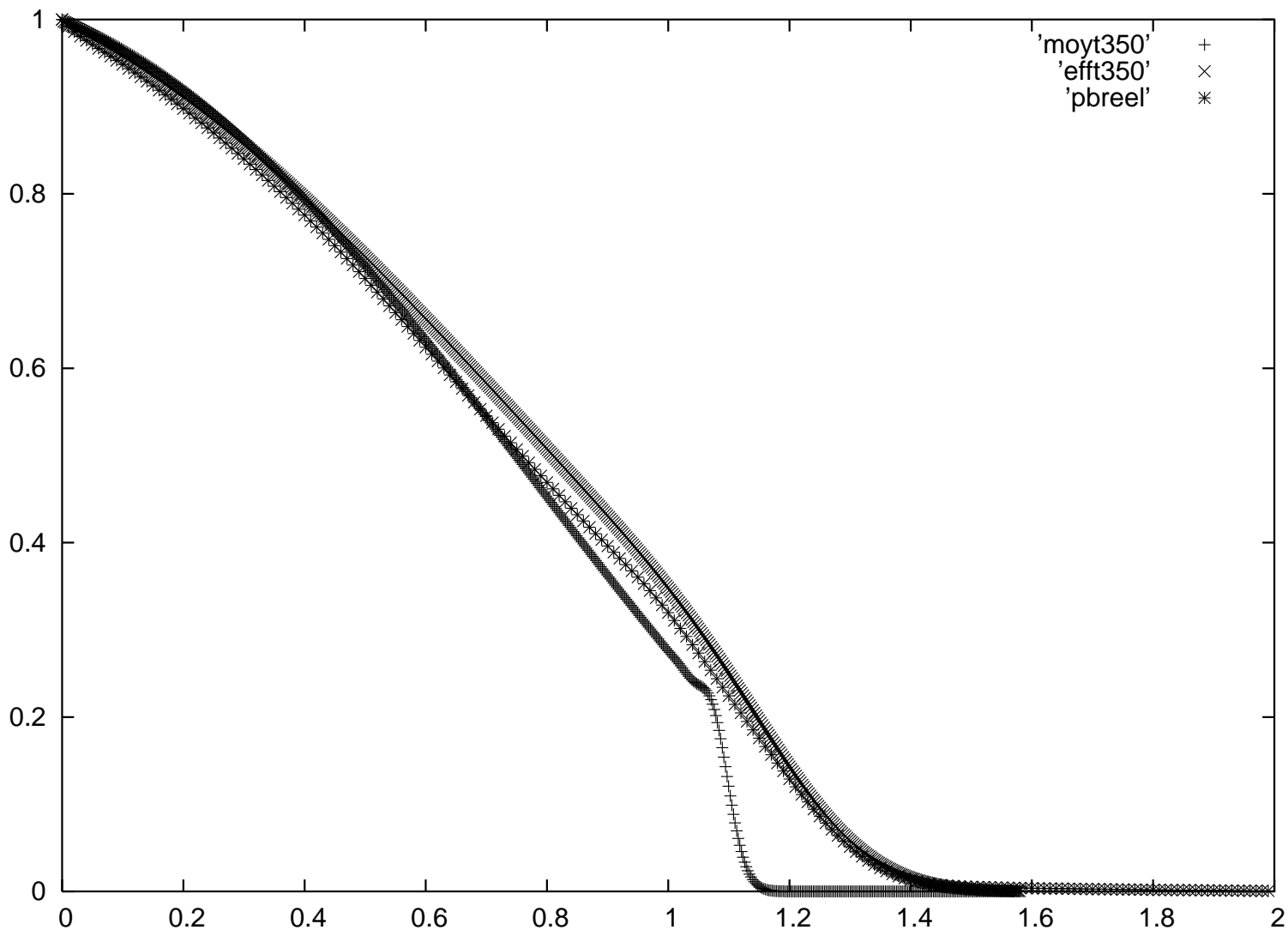


Figure 9: Comparaison entre les concentrations volumiques au temps  $t^* = 350$  sec.

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

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = \frac{\partial \hat{c}}{\partial t^*} = \hat{k}^* (\Phi(c^*) - \hat{c}/K_e) \quad \text{sur } z = \pm H, \quad (40)$$

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

$$\Phi(c) = \frac{k_1 c}{1 + k_2 c} \quad (\text{Langmuir}) ; \quad \Phi(c) = k_1 c^{k_2} \quad (\text{Freundlich}). \quad (41)$$

Dans la forme non-dimensionnelle, (40) devient

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = \frac{\partial c_s^\varepsilon}{\partial t} = k(\Phi(c^\varepsilon) - c_s^\varepsilon/K)|_{y=1} \quad \text{dans } \Gamma^+ \times (0, T) \quad (42)$$

La forme non-dimensionnelle du problème efficace est

$$\begin{aligned} \partial_t \left( c_{FN}^0 + \frac{T_A}{T_{react}} c_{sN}^{eff} \right) + \frac{2Q}{3} \partial_x \left( c_{FN}^0 + \frac{1}{15D} \frac{T_T}{T_{react}} \Phi(c_{FN}^0) \right) = \\ \varepsilon^\alpha \left( D + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2(1-\alpha)} \right) \partial_{xx} c_{FN}^0 + \frac{2Q}{45D} \frac{T_A T_T k_d^*}{T_{react}} \partial_x c_{sN}^{eff}, \end{aligned} \quad (43)$$

$$\partial_t c_{sN}^{eff} = \frac{T_L}{T_A} \left( \Phi(c_{FN}^0 + \varepsilon^{2-\alpha} c_{FN}^1|_{y=1}) - k_d^* T_A c_{sN}^0 \right), \quad (44)$$

$$c_{FN}^1|_{y=1} = \frac{2}{45} \frac{Q}{D} \partial_x c_{FN}^0 - \frac{T_A}{3DT_{react}} \partial_t c_{sN}^{eff}, \quad (45)$$

$$c_{FN}^0|_{x=0} = 0, \quad c_{FN}^0|_{t=0} = 1, \quad c_{SN}^{eff}|_{t=0} = c_{s0}. \quad (46)$$

La forme dimensionnelle:

$$\begin{aligned} \partial_{t^*} \left( c_N^* + \frac{\hat{c}_N}{H} \right) + \partial_{x^*} \left( \frac{2Q^*}{3} c_N^* + \frac{\mathbf{Pe}_T}{15} \hat{\Phi}(c_N^*) \right) = \\ D^* \left( 1 + \frac{8}{945} \mathbf{Pe}_T^2 \right) \partial_{x^* x^*} c_N^* + \frac{2k_d^* \mathbf{Pe}_T}{45} \partial_{x^*} \hat{c}_N \end{aligned} \quad (47)$$

$$\partial_{t^*} \hat{c}_N = \hat{\Phi}(c_N^* + \mathbf{Pe}_T \tilde{c}_N^1) - k_d^* \hat{c}_N \quad (48)$$

$$\tilde{c}_N^1 = \frac{2H}{45} \partial_{x^*} c_N^* - \frac{1}{3} \partial_{t^*} \hat{c}_N, \quad (49)$$

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

Pour plus des détails voir [3] C.J. van Duijn, **A. Mikelić**, I. S. Pop, **C. Rosier** : Effective Dispersion Equations For Reactive Flows With Dominant Peclet and Damkohler Numbers, sous révision dans les *Advances in Chemical Engineering*, 2007.

Pour plus des détails voir [3] C.J. van Duijn, A. Mikelić, I. S. Pop, C. Rosier : Effective Dispersion Equations For Reactive Flows With Dominant Peclet and Damkohler Numbers, sous révision dans les *Advances in Chemical Engineering*, 2007.

## Le taux d'adsorption infinie

Ce cas correspond à une vitesse d'adsorption infinie. Le problème effectif devient : Plus précisément, la condition (2) est remplacée par

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = K_e \frac{\partial c^*}{\partial t^*} \quad \text{sur } z = \pm H, \quad (51)$$

Dans la forme non-dimensionnelle, la condition sur la paroi laterale devient

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = -D \frac{1}{\varepsilon^2 \mathbf{Pe}} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = K \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} \quad \text{sur } \Gamma^+ \times (0, T) \quad (52)$$

Ici on remplace les temps caractéristiques  $T_A$  et  $T_{DE}$  par le temps caractéristique  $T_C = \frac{K_{eR}}{\varepsilon Q_R}$ , (le temps caractéristique des réactions chimiques superficielles). Maintenant le problème efficace devient

$$\frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} + Q(1 - y^2) \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x} = D\varepsilon^\alpha \frac{\partial^2 c^\varepsilon}{\partial x^2} + D\varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial^2 c^\varepsilon}{\partial y^2} \quad \text{in } \Omega^+ \times (0, T) \quad (53)$$

$$-D\varepsilon^{\alpha-2} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = -D \frac{1}{\varepsilon^2 \mathbf{Pe}} \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial y} = \frac{T_C}{T_L} K \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} \quad \text{on } \Gamma^+ \times (0, T) \quad (54)$$

$$c^\varepsilon(x, y, 0) = 1 \quad \text{for } (x, y) \in \Omega^+, \quad (55)$$

$$c^\varepsilon(0, y, t) = 0 \quad \text{for } (y, t) \in (0, 1) \times (0, T), \quad (56)$$

Nous supposons que  $T_C \approx T_L$ . Alors le problème efficace pour la concentration  $c_K^{*,eff}$ , dans la forme dimensionnelle, est

$$(1 + \mathbf{Da}_K) \frac{\partial c_K^{*,eff}}{\partial t^*} + \frac{2Q^*}{3} \frac{\partial c_K^{*,eff}}{\partial x^*} =$$

$$D^* \left( 1 + \frac{4}{135} \mathbf{Pe}_T^2 \left[ \frac{2}{7} + \frac{\mathbf{Da}_K (2 + 7\mathbf{Da}_K)}{(1 + \mathbf{Da}_K)^2} \right] \right) \frac{\partial^2 c_K^{*,eff}}{\partial (x^*)^2}. \quad (57)$$

$\mathbf{Pe}_T = \frac{Q^* H}{D^*}$  est le nombre de Peclet transversal et  $\mathbf{Da}_K = \frac{K_e}{H}$  est le nombre de Damkohler transversal. Pour la moyenne transversale on a

$$(1 + \mathbf{Da}_K) \partial_{t^*} c_K^{moy} + \frac{2Q^*}{3} \partial_{x^*} c_K^{moy} - D^* \partial_{x^* x^*} c_K^{moy} = 0 \quad (58)$$

PARAMETERS	VALUES
Epaisseur du tuyau : $H$	$5 \cdot 10^{-3}$ m,
Longueur caractéristique : $L_R$	0.8632 m
$\varepsilon = H/L_R$	$5.7924001 \cdot 10^{-3}$
vitesse caractéristique: $Q^*$	$0.3 \cdot 10^{-3}$ m/sec
coefficient de la diffusion: $D^*$	$2 \cdot 10^{-7}$ m <sup>2</sup> /sec,
le nombre de Peclet longitudinal: $\mathbf{Pe} = \frac{L_R Q^*}{D^*} =$	$1.2948 \cdot 10^5$
$\alpha = \log \mathbf{Pe} / \log(1/\varepsilon) =$	1.83815052
le nombre de Peclet transversal: $\mathbf{Pe}_T = \frac{H Q^*}{D^*} =$	75
le nombre de Damkohler transversal: $\mathbf{Da}_T = \frac{K_e}{H} =$	1

Table 4: Valeurs des paramètres dans le cas  $\hat{k}^* = +\infty$

Les conditions pour (57) sont

$$c_K^{*,eff}|_{x^*=0} = 0 \quad \text{and} \quad c_K^{*,eff}|_{t^*=0} = 1. \quad (59)$$

Les paramètres sont sur le tableau 4.

Résultats sont sur les Figures 10, 11 et 12, aux temps  $t^* = 863, 2877$  et  $5755$  sec.

Voir [1] et [2] pour les détails.

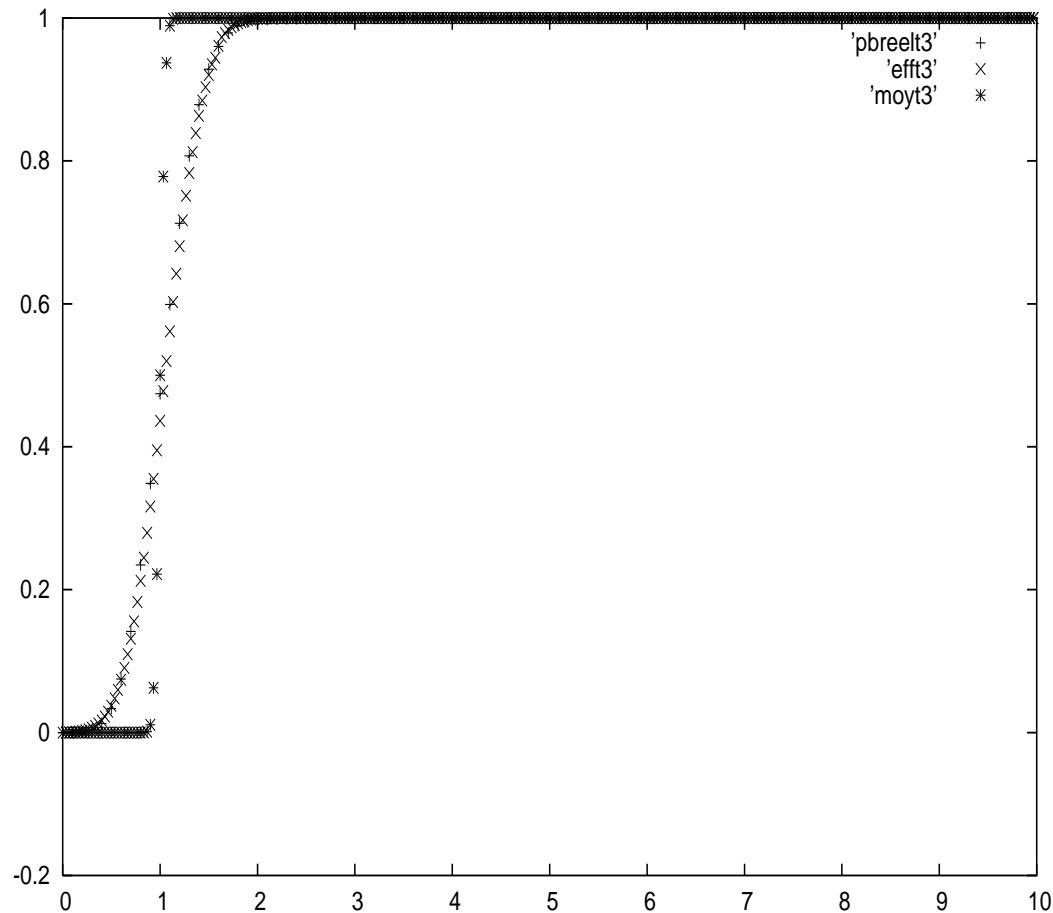


Figure 10: Cas  $\hat{k}^* = +\infty$ : Comparaisons entre concentrations au  $t = 863$  sec.

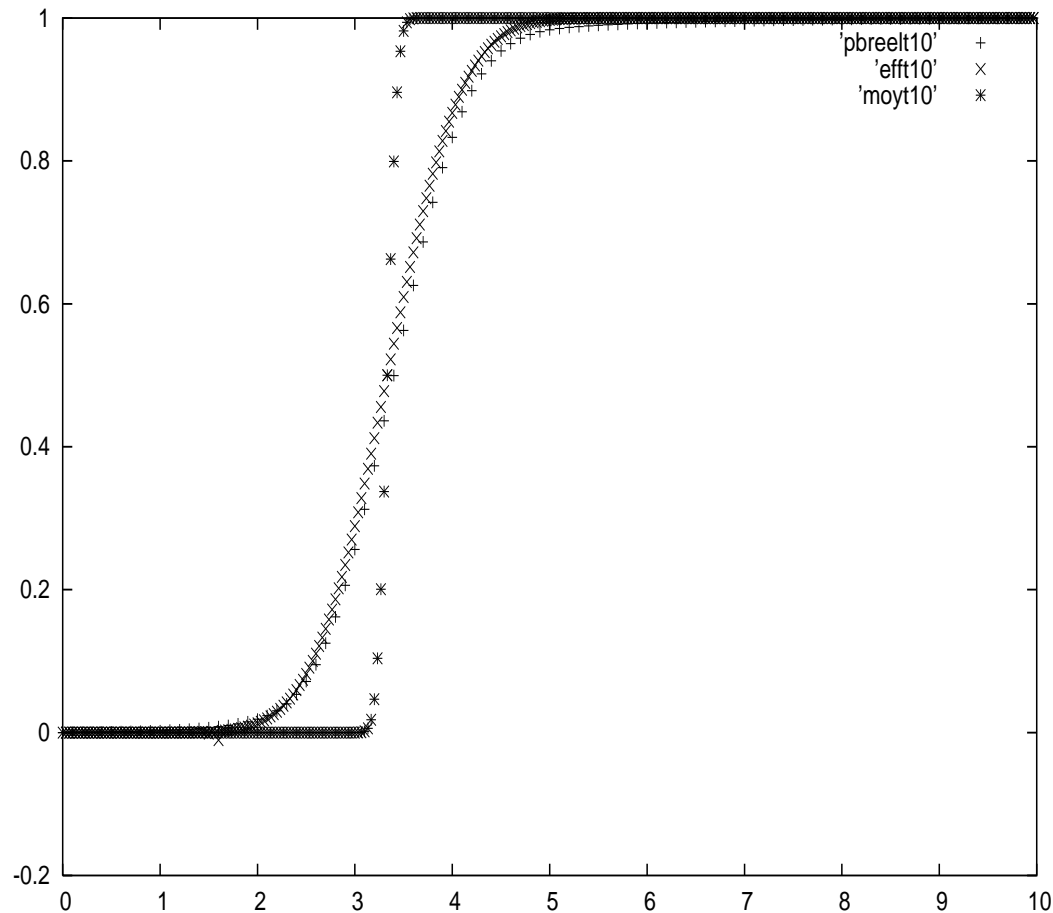


Figure 11: Cas  $\hat{k}^* = +\infty$ : Comparaison entre concentrations au  $t = 2877$  sec.

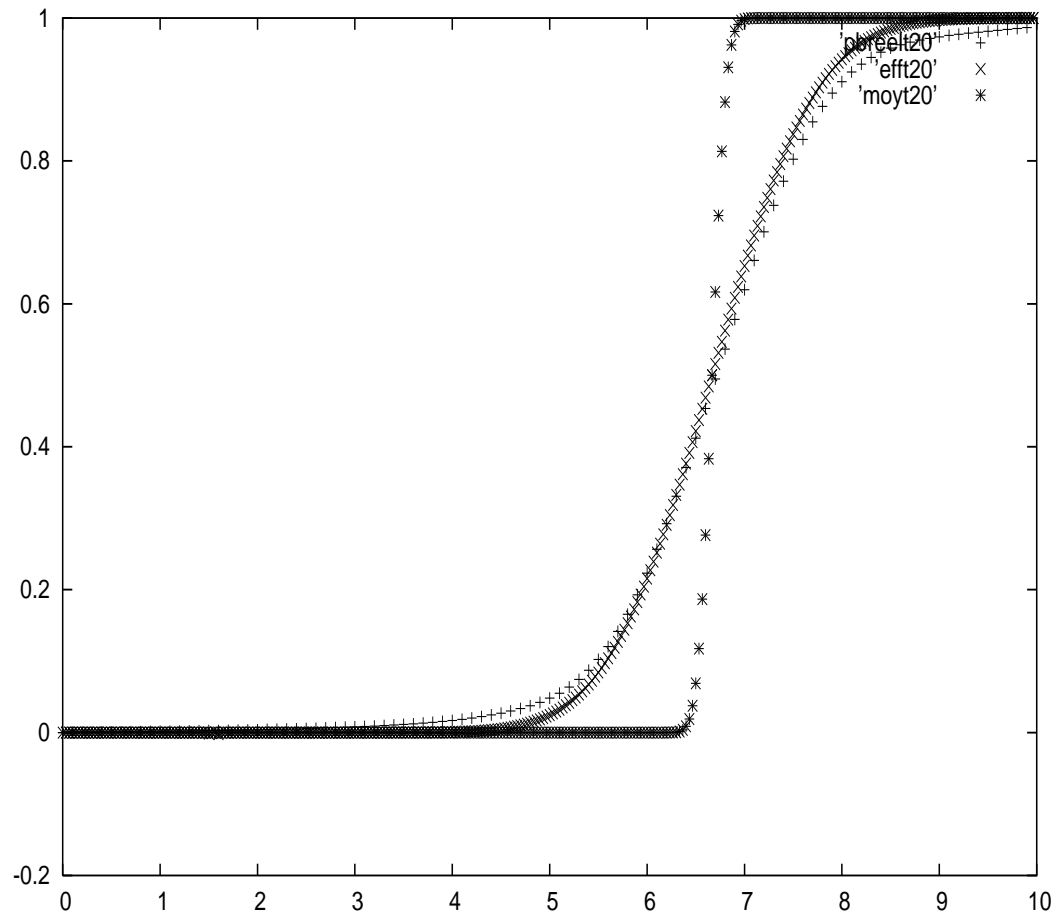


Figure 12: Cas  $\hat{k}^* = +\infty$ : Comparaison entre concentrations au  $t = 5755$  sec.

# Perspectives:

## PERSPECTIVES:

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