

Transformée de Laplace et homogénéisation des écoulements réactifs, avec taux d'adsorption infini et grand nombre de Péclet

Catherine Choquet

LATP, Univ. Paul Cézanne
Aix-Marseille 3

Rencontres scientifiques du thème Modèles et Couplages -
Lyon - 5 novembre 2008

La dispersion de Taylor... encore !



Un résultat de G.I. Taylor



Le modèle "exact" : dans $(0, \infty) \times (0, \epsilon)$

$$\partial_t c_\epsilon + \underline{v}_\epsilon \cdot \nabla c_\epsilon - D \Delta c_\epsilon = 0.$$

Le modèle "moyenné équivalent" de Taylor : dans $(0, \infty)$

$$\partial_t \langle c \rangle + \langle \underline{v} \rangle \partial_x \langle c \rangle - D \left(1 + \frac{\epsilon^2 \langle \underline{v} \rangle^2}{48 D^2} \right) \partial_{xx}^2 \langle c \rangle = 0.$$

Un résultat de G.I. Taylor



Le modèle "exact" : dans $(0, \infty) \times (0, \epsilon)$

$$\partial_t c_\epsilon + \underline{v}_\epsilon \cdot \nabla c_\epsilon - D \Delta c_\epsilon = 0.$$

Le modèle "moyenné équivalent" de Taylor : dans $(0, \infty)$

$$\partial_t \langle c \rangle + \langle \underline{v} \rangle \partial_x \langle c \rangle - D \left(1 + \frac{\epsilon^2 \langle \underline{v} \rangle^2}{48 D^2} \right) \partial_{xx}^2 \langle c \rangle = 0.$$

Notre modèle



Les équations :

$$\{(x^*, y^*) : 0 < x^* < +\infty, |y^*| < H\}$$

$$\partial_{t^*} c^* + v^*(y) \partial_{x^*} c^* - D^* \Delta_* c^* = 0.$$

- concentration : c^*
- vitesse (Poiseuille) : $v^*(y) = Q^* (1 - (y/H)^2)$
- diffusion moléculaire : D^*

Les conditions aux bords :

Réaction sur la paroi $\{(x^*, y^*) : 0 < x^* < +\infty, |y^*| = H\}$

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = \partial_{t^*} c_s = K_e \partial_{t^*} c^*.$$

– constante caractéristique de l'équilibre d'adsorption (linéaire ici) : K_e

Infiltration en $x = 0$ (cond. au bord type Danckwerts):

$$-D^* \partial_{x^*} c^* + q(y^*) c^* = \begin{cases} q(y^*) c_f^*, & \text{pour } 0 < t^* < t_0^* \\ 0, & \text{pour } t > t_0^*. \end{cases}$$

Les conditions aux bords :

Réaction sur la paroi $\{(x^*, y^*) : 0 < x^* < +\infty, |y^*| = H\}$

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = \partial_{t^*} c_s = K_e \partial_{t^*} c^*.$$

– constante caractéristique de l'équilibre d'adsorption (linéaire ici) : K_e

Infiltration en $x = 0$ (cond. au bord type Danckwerts):

$$-D^* \partial_{x^*} c^* + q(y^*) c^* = \begin{cases} q(y^*) c_f^*, & \text{pour } 0 < t^* < t_0^* \\ 0, & \text{pour } t^* > t_0^*. \end{cases}$$

Les conditions aux bords :

Réaction sur la paroi $\{(x^*, y^*) : 0 < x^* < +\infty, |y^*| = H\}$

$$-D^* \partial_{y^*} c^* = \partial_{t^*} c_s = K_e \partial_{t^*} c^*.$$

– constante caractéristique de l'équilibre d'adsorption (linéaire ici) : K_e

Infiltration en $x = 0$ (cond. au bord type Danckwerts):

$$-D^* \partial_{x^*} c^* + q(y^*) c^* = \begin{cases} q(y^*) c_f^*, & \text{pour } 0 < t^* < t_0^* \\ 0, & \text{pour } t > t_0^*. \end{cases}$$

Adimensionalisation

Valeurs de référence :

$$c = \frac{c^*}{\hat{c}}, \quad x = \frac{x^*}{L_R}, \quad y = \frac{y^*}{H}, \quad t = \frac{t^*}{T_R}, \quad Q = \frac{Q^*}{Q_R}, \quad D = \frac{D^*}{D_R}.$$

Équation adimensionalisée : dans $(0, \infty) \times (0, 1)$

$$\partial_t c + \frac{Q_R T_R}{L_R} Q (1 - y^2) \partial_x c - \frac{D_R T_R}{L_R^2} D \partial_{xx}^2 c - \frac{D_R T_R}{H^2} D \partial_{yy}^2 c = 0.$$

Trois temps et deux nombres caractéristiques :

$T_L = L_R / Q_R$ tps longitudinal caractéristique,

$T_T = H^2 / D_R$ tps transversal caractéristique,

$T_C = L_R K_e / H Q_R$ tps caractéristique de réaction en surface,

$Pe = (L_R Q_R) / D_R$ nombre de Péclet,

$Da = (L_R H) / D_R$ nombre de Damkohler.

Choix d'échelle

► MicroLap

$$\mathbf{Pe} = \epsilon^{-\alpha}.$$

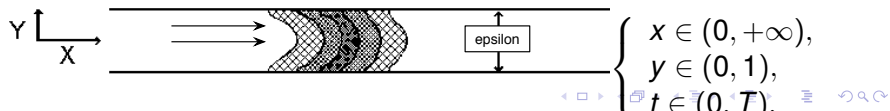
$$\partial_t c^\epsilon + Q(1 - y^2) \partial_x c^\epsilon = D\epsilon^\alpha \partial_{xx}^2 c^\epsilon + D\epsilon^{\alpha-2} \partial_{yy}^2 c^\epsilon,$$

$$-D\epsilon^{\alpha-2} \partial_y c^\epsilon|_{y=1} = K \partial_t c^\epsilon,$$

$$c^\epsilon(x, y, 0) = 0,$$

$$-D\epsilon^\alpha \partial_x c^\epsilon|_{x=0} + Q(1 - y^2) c^\epsilon|_{x=0} = \begin{cases} Q(1 - y^2) c_f, & \text{si } 0 < t < t_0 \\ 0, & \text{si } t > t_0. \end{cases}$$

$$\partial_y c^\epsilon|_{y=0} = 0.$$



Modèle effectif

(EFF)

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t c + \frac{2Q}{3(1+K)} \partial_x c = \tilde{D} \varepsilon^\alpha \frac{\partial_{xx} c}{1+K} \text{ ds } (0, +\infty) \times (0, T), \\ -D \varepsilon^\alpha \partial_x c|_{x=0} + \frac{2Q}{3} (c|_{x=0} - c_f \chi_{t < t_0}) = 0, \quad c|_{t=0} = 0, \\ \partial_x c \in L^2((0, +\infty) \times (0, T)), \end{array} \right.$$

avec

$$\tilde{D} = D + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \varepsilon^{2-2\alpha} + \frac{4Q^2}{135D} \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} \varepsilon^{2-2\alpha}.$$

(correspond au résultat de Taylor pour $K = 0$, i.e., pas de chimie)

$\varepsilon \rightarrow 0$; estimations d'erreur.

$$\partial_t c^\epsilon + Q(1 - y^2) \partial_x c^\epsilon = D\epsilon^\alpha \partial_{xx}^2 c^\epsilon + D\epsilon^{\alpha-2} \partial_{yy}^2 c^\epsilon,$$

$$-D\epsilon^{\alpha-2} \partial_y c^\epsilon|_{y=1} = K \partial_t c^\epsilon,$$

$$c^\epsilon(x, y, 0) = 0,$$

$$-D\epsilon^\alpha \partial_x c^\epsilon|_{x=0} + Q(1 - y^2) c^\epsilon|_{x=0} = \begin{cases} Q(1 - y^2) c_f, & \text{si } 0 < t < t_0 \\ 0, & \text{si } t > t_0. \end{cases}$$

$$\partial_y c^\epsilon|_{y=0} = 0. \text{ Si}$$

Les données de Taylor correspondent à $\alpha = 1.7$ and $\alpha = 1.9$

Estimations d'erreur

Théorème

Soit $\alpha \geq 1$. Soit $\underline{c_f} \in C_0^\infty(0, T)$.

$$\|c^\epsilon - c\|_{C([0, T]; L^2((0, \infty) \times (0, 1)))} \leq C\epsilon^{2-\alpha},$$

$$\|\partial_y c^\epsilon\|_{C([0, T]; L^2((0, \infty) \times (0, 1)))} \leq C\epsilon^{3-3\alpha/2},$$

$$\|\partial_x (c^\epsilon - c)\|_{C([0, T]; L^2((0, \infty) \times (0, 1)))} \leq C\epsilon^{2-3\alpha/2}.$$

▸ Micro

▸ Eff

Estimations d'erreur : " données mal préparées "

discontinuité de contact due à $c_f(0) \neq 0$

Théorème

Soit $\alpha \geq 1$. Soit $c_f \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}_+)$, à support compact dans $[0, +\infty)$, mais tel que $c_f(0) \neq 0$.

Alors pour $1 < r < +\infty$,

$$\left\| \int_0^t (c^\epsilon - c) dt \right\|_{L^r(\mathbb{R}_+; L^2(0,1))} \leq C \epsilon^{2-\alpha-\alpha\delta},$$

$0 < \delta < 1/4$, $r(1 - \delta) < 1$.

▶ Micro

▶ Eff

Quelques références...

- [G.I. Taylor] *Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube*, Proc. Royal Soc. A (1953).
- [R. Aris] *On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube*, Proc. Roy. Soc. A. (1956).
- [M.A. Paine, R.G. Carbonell, S. Whitaker] *Dispersion in pulsed systems – I, Heterogeneous reaction and reversible adsorption in capillary tubes*, Chem. Eng. Sci. (1983).
- [V. Balakotaiah, H.-C. Chang] *Dispersion of Chemical Solutes in Chromatographs and Reactors*, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A (1995).
- [R. Mauri] *Dispersion, convection and reaction in porous media*, Phys. Fluids A (1991).
- [G. Allaire, A.-L. Raphael] *Homogenization of a convection – diffusion model with reaction in a porous medium*, C.R.A.S. (2007).

... et d'autres

- [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. (2006).
- [A. Mikelić, C. Rosier] *Rigorous upscaling of the infinite adsorption rate reactive flow under dominant Peclet number through a pore*, Ann Univ Ferrara (2007).
- [C.J. van Duijn , A. Mikelić, I.S. Pop, C. Rosier] *Effective Dispersion Equations For Reactive Flows With Dominant Peclet and Damkohler Numbers*, Adv. Chemical Eng. (2008).
- [A. Mikelić, C. Choquet] *Laplace transform approach to the rigorous upscaling of the infinite adsorption rate reactive flow under dominant Peclet number through a pore*, Appl. Anal. (2008).

Les choses sérieuses

$$\partial_t c^\epsilon + Q(1 - y^2) \partial_x c^\epsilon = D\epsilon^\alpha \partial_{xx}^2 c^\epsilon + D\epsilon^{\alpha-2} \partial_{yy}^2 c^\epsilon,$$

$$-D\epsilon^{\alpha-2} \partial_y c^\epsilon|_{y=1} = K \partial_t c^\epsilon,$$

$$c^\epsilon(x, y, 0) = 0,$$

$$-D\epsilon^\alpha \partial_x c^\epsilon|_{x=0} + Q(1 - y^2) c^\epsilon|_{x=0} = \begin{cases} Q(1 - y^2) c_f, & \text{si } 0 < t < t_0 \\ 0, & \text{si } t > t_0. \end{cases}$$

$$\partial_y c^\epsilon|_{y=0} = 0.$$

Transformée de Laplace

Pour $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R})$ tq $f(t) = 0$ si $t < 0$ et $|f(t)| \leq Ae^{at}$ qd $t \rightarrow +\infty$,

$$\hat{f}(\tau) = \int_0^{+\infty} f(t)e^{-\tau t} dt, \quad \tau = \xi + i\eta \in \mathbb{C}.$$

▶ Micro

Le problème dans l'espace de Laplace

$$\mathcal{L}^\epsilon \zeta = \tau \zeta + Q(1 - y^2) \partial_x \zeta - D\epsilon^\alpha (\partial_{xx}^2 \zeta + \epsilon^{-2} \partial_{yy}^2 \zeta).$$

La transformée de la concentration \hat{c}^ϵ est solution de :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^\epsilon \hat{c}^\epsilon &= 0 \quad \text{dans } (0, +\infty) \times (0, 1) \\ -D\epsilon^\alpha \partial_x \hat{c}^\epsilon|_{x=0} + Q(1 - y^2) \hat{c}^\epsilon|_{x=0} &= Q(1 - y^2) \hat{c}_f, \\ -D\epsilon^{\alpha-2} \partial_y \hat{c}^\epsilon|_{y=1}(x, 1, \tau) &= K\tau \hat{c}^\epsilon|_{y=1}. \end{aligned}$$

► Micro

Un premier raisonnement, simple et faux...

Supposons : $PM = MP$.

Moyenne du problème précédent :

La concentration " moyenne " $c_0^{L,eff}(x, \tau)$ satisfait

$$\left\{ \begin{array}{l} (1 + K)\tau c_0^{L,eff} + \frac{2Q}{3} \partial_x c_0^{L,eff} = \varepsilon^\alpha D \partial_{xx}^2 c_0^{L,eff} \quad \text{dans } (0, +\infty), \\ \partial_x c_0^{L,eff} \in L^2((0, +\infty)), \\ -D\varepsilon^\alpha \partial_x c_0^{L,eff} + \frac{2Q}{3} c_0^{L,eff} = \frac{2Q}{3} \hat{c}_f, \quad \text{en } x = 0. \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau \hat{u} + \bar{Q} \partial_x \hat{u} = \gamma \bar{D} \partial_{xx}^2 \hat{u} \text{ dans } \mathbb{R}_+ \times \{\operatorname{Re}(\tau) > 0\}, \\ \partial_x \hat{u} \in L^2(\mathbb{R}_+), \quad \operatorname{Re}(\tau) > 0, \\ -\gamma \bar{D} \partial_x \hat{u} + \bar{Q} \hat{u} = \bar{Q} \hat{g} \text{ en } x = 0. \end{array} \right.$$

- ▶ **Problème 1D, diffusion-convection donnée, cond. bord Danckwerts.**
- ▶ Solution explicite !
- ▶ Estimation d'erreur en $\epsilon^{1-\alpha/2}$.

L'intuition du développement asymptotique

$$\hat{C}^\epsilon = c_0(x; \epsilon) + \epsilon^{2-\alpha} c_1(x, y; \epsilon) + \epsilon^{2(2-\alpha)} c_2(x, y; \epsilon) \cdots$$

L'intuition du développement asymptotique : modèle effectif ?

$$c_1^{L,eff}(x, y; \epsilon) = c_0(x; \epsilon) + \epsilon^{2-\alpha} \frac{Q}{D} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} - \frac{2}{45} \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} \right) \partial_x c_0 \\ + \epsilon^{2-\alpha} \frac{K}{D} \left(\frac{1}{6} + \frac{K}{3(1+K)} - \frac{y^2}{2} \right) \tau c_0(x; \epsilon)$$

où $c_0 \in H^1(\Omega^+)$ est solution du problème

$$\left\{ \begin{array}{l} (1+K)\tau c_0 + \frac{2Q}{3} \partial_x c_0 - \epsilon^\alpha \tilde{D} \partial_{xx}^2 c_0 = 0 \quad \text{dans } (0, +\infty), \\ -D\epsilon^\alpha \partial_x c_0 + \frac{2Q}{3} c_0 = \frac{2Q}{3} \hat{c}_f \quad \text{en } x = 0, \end{array} \right.$$

avec

$$\tilde{D} = D + \frac{8}{945} \frac{Q^2}{D} \epsilon^{2(1-\alpha)} + \frac{4Q^2}{135D} \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} \epsilon^{2(1-\alpha)}.$$

Solution analytique du problème effectif

Diffusion-convection, 1D, cond. bord type Danckwerts "perturbée".

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau \hat{u} + \bar{Q} \partial_x \hat{u} = \gamma \bar{D} \partial_{xx}^2 \hat{u} \text{ dans } \mathbb{R}_+ \times \{\operatorname{Re}(\tau) > 0\}, \\ \partial_x \hat{u} \in L^2(\mathbb{R}_+), \quad \operatorname{Re}(\tau) > 0, \\ -\gamma(\bar{D} + \delta) \partial_x \hat{u} + \bar{Q} \hat{u} = \bar{Q} \hat{g} \text{ en } x = 0. \end{array} \right.$$

Solution explicite :

$$\hat{u}(x, \tau) = \frac{2\bar{D}\bar{Q}}{(\sqrt{\bar{Q}^2 + 4\gamma\tau\bar{D}} + \bar{Q})(\bar{D} + \delta) - 2\bar{Q}\delta} e^{\frac{\bar{Q} - \sqrt{\bar{Q}^2 + 4\gamma\tau\bar{D}}}{2\gamma\bar{D}}x} \hat{g}(\tau).$$

Propriétés de la solution explicite

Proposition

$$\left\| \hat{g} \exp\left\{-\frac{\tau X}{\bar{Q}}\right\} - \hat{u} \right\|_{L^p((0, +\infty))} \leq \gamma \frac{C|\hat{g}(\tau)|}{\xi^{1/p}} \frac{|\tau|}{\bar{Q} + \gamma \bar{D}|\tau|}, \quad \forall 1 \leq p < +\infty.$$

Corollaire

Supposons $g \in C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$. Alors

$$\|u - g(t - \frac{X}{\bar{Q}})\|_{C(\mathbb{R}_+; L^p(\mathbb{R}_+))} \leq C\gamma, \quad 1 < p < +\infty.$$

Si $g \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}_+)$ mais $g(0) \neq 0$, alors

$$\|u - g(t - \frac{X}{\bar{Q}})\|_{L^r(\mathbb{R}_+; L^p(\mathbb{R}_+))} \leq C\gamma^{1-\delta},$$

$1 < p, r < +\infty, 0 < \delta < 1, r(1 - \delta) < 1.$

Propriétés de la solution explicite

Proposition

$$\left\| \hat{g} \exp\left\{-\frac{\tau X}{\bar{Q}}\right\} - \hat{u} \right\|_{L^p((0, +\infty))} \leq \gamma \frac{C|\hat{g}(\tau)|}{\xi^{1/p}} \frac{|\tau|}{\bar{Q} + \gamma \bar{D}|\tau|}, \quad \forall 1 \leq p < +\infty.$$

Corollaire

Supposons $g \in C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$. Alors

$$\left\| u - g\left(t - \frac{x}{\bar{Q}}\right) \right\|_{C(\mathbb{R}_+; L^p(\mathbb{R}_+))} \leq C\gamma, \quad 1 < p < +\infty.$$

Si $g \in W^{1, \infty}(\mathbb{R}_+)$ mais $g(0) \neq 0$, alors

$$\left\| u - g\left(t - \frac{x}{\bar{Q}}\right) \right\|_{L^r(\mathbb{R}_+; L^p(\mathbb{R}_+))} \leq C\gamma^{1-\delta},$$

$1 < p, r < +\infty, 0 < \delta < 1, r(1 - \delta) < 1.$

.....

$$\|\hat{u}(\cdot, \tau)\|_{L^2((0, +\infty))} \leq \frac{C|\hat{g}(\tau)|}{\sqrt{\xi}(1 + \gamma^{1/4}|\tau|^{1/4})},$$

$$|\partial_x \hat{u}(\cdot, \tau)|_{x=0} \leq \frac{C|\tau \hat{g}(\tau)|}{1 + \gamma|\tau|},$$

$$\|\partial_x^k \hat{u}(\cdot, \tau)\|_{L^2((0, +\infty))} \leq \frac{C|\hat{g}(\tau)|}{\sqrt{\xi}(1 + \gamma^{1/4}|\tau|^{1/4})} \left(\frac{|\tau|^2}{1 + \gamma|\tau|} \right)^{k/2} \quad k \geq 1.$$

Analyse d'erreur

Soit $w = \hat{c}^\epsilon - c_1^{L,eff}$.

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^+} \tau w \phi \, dx dy + \int_{\Omega^+} D \epsilon^\alpha (\partial_x w \partial_x \phi + \epsilon^{-2} \partial_y w \partial_y \phi) \, dx dy \\ & + K \int_0^{+\infty} \tau w|_{y=1} \phi|_{y=1} \, dx + \int_{\Omega^+} Q(1-y^2) \phi \partial_x w \, dx dy \\ & \quad + \int_0^1 Q(1-y^2) w|_{x=0} \phi|_{x=0} \, dy \\ & = - \int_0^1 Q(1/3 - y^2) (\hat{c}_f - c_{0|x=0}) \phi|_{x=0} \, dy + \int_0^1 \eta_{0|x=0}^\epsilon \phi|_{x=0} \, dy \\ & \quad - \int_{\Omega^+} \sum_{i=1}^5 F_i^\epsilon \phi \, dx dy + \int_0^{+\infty} g^\epsilon \int_0^1 (\phi - \phi|_{y=1}) \, dy dx. \end{aligned}$$

...avec

$$\Phi^\epsilon = \sum_{i=1}^5 F_i^\epsilon - g^\epsilon,$$

$$F_1^\epsilon = \epsilon^{2-\alpha} \partial_{xx}^2 c_0 \frac{Q^2}{D} \left(\frac{8}{945} + (1-y^2) \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} \right) \right),$$

$$F_2^\epsilon = \epsilon^{2-\alpha} \tau \partial_x c_0 \frac{QK}{D} \left(-\frac{2}{45} + (1-y^2) \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right) \right),$$

$$F_3^\epsilon = \epsilon^{2-\alpha} \tau \partial_x c_0 \frac{Q}{D} \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} \right),$$

$$F_4^\epsilon = \epsilon^{2-\alpha} \tau^2 c_0 \frac{K}{D} \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} \right),$$

$$F_5^\epsilon = -\epsilon^{2-\alpha} \frac{Q}{D} \left(\frac{1}{3} - y^2 \right) \left(\frac{2Q}{45} \partial_{xx}^2 c_0 \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} - \frac{K^2}{3(1+K)} \tau \partial_x c_0 \right),$$

$$g^\epsilon = \epsilon^{2-\alpha} \frac{K\tau}{D} \left(\frac{2Q}{45} \partial_x c_0 \left(1 - \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} \right) - \frac{K}{3(1+K)} \tau c_0 \right),$$

...et

$$\begin{aligned}\eta_0^\epsilon = & \epsilon^{2-\alpha} \frac{Q^2}{D} (1-y^2) \partial_x c_0 \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} - \frac{2}{45} \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} \right) \\ & + \epsilon^{2-\alpha} \frac{QK}{D} (1-y^2) \tau c_0 \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} + \frac{K}{3(1+K)} \right) \\ & - \epsilon^2 \left(K \tau \partial_x c_0 \left(\frac{1}{6} - \frac{y^2}{2} + \frac{K}{3(1+K)} \right) \right. \\ & \left. + Q \partial_{xx}^2 c_0 \left(\frac{y^2}{6} - \frac{y^4}{12} - \frac{7}{180} - \frac{2}{45} \frac{K(7K+2)}{(1+K)^2} \right) \right).\end{aligned}$$