



par Taylor sont appliquées à la dispersion d'un soluté dans un tube circulaire horizontal reliant deux réservoirs à des concentrations différentes.

## 2. Description du problème

Un tube circulaire de rayon  $R$  et de longueur  $L$  relie deux grands réservoirs. Le réservoir amont contient une solution ayant une concentration en soluté  $C_e$ , alors que le réservoir aval est maintenu à une concentration  $C_s = 0$  (figure 1). La concentration dans le tube, notée  $C$ , est initialement nulle.

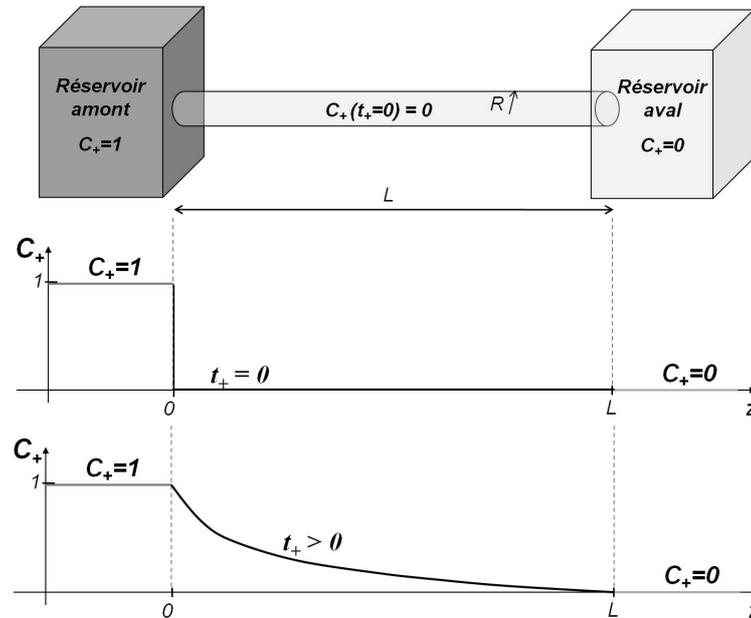


Figure 1 : Conditions aux limites et initiales pour le tube reliant les deux réservoirs.

Un écoulement laminaire de type Poiseuille est établi dans le tube. Sa vitesse débitante est notée  $\bar{U}$ . La longueur du tube est supposée suffisamment grande devant son rayon. Ceci se traduit par la faible valeur du facteur de forme du tube  $\gamma = R/L \ll 1$ . Par ailleurs, les dimensions des réservoirs sont considérées très grandes par rapport aux dimensions du tube afin d'assurer la constance des concentrations des conditions aux limites. Enfin, la paroi du tube est supposée imperméable au solvant et au soluté.

## 3. Équations et modélisation numérique

Ce problème peut être modélisé de deux façons : par un modèle en deux dimensions axisymétrique permettant de déterminer la solution exacte attendue et par le modèle unidimensionnel intégré en champ moyen de Taylor.

### 3.1. Modélisation exacte du problème

Dans le modèle exact, à cause de la symétrie de révolution (axisymétrie) autour de l'axe  $Oz$  (figure 2), seule une demi-section longitudinale du tube est traitée.

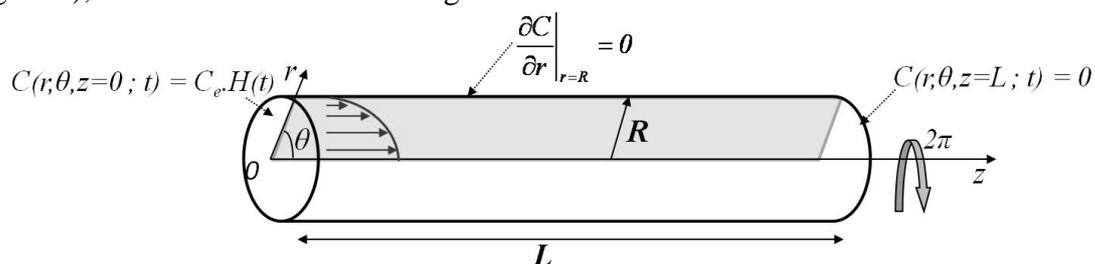


Figure 2 : Modèle et conditions aux limites du problème étudié.

La répartition de la concentration en soluté dans le tube est obtenue en résolvant l'équation de diffusion convective. Elle est donnée par l'expression (1) en considérant les variables adimensionnées suivantes :  $C_+ = \frac{C}{C_e}$  ;  $r_+ = \frac{r}{R}$  ;  $z_+ = \frac{z}{R}$  ;  $t_+ = \frac{t}{\tau_D}$  avec  $\tau_D = \frac{R^2}{D}$  qui est le temps de diffusion massique latérale et  $Pe = \frac{\bar{U}R}{D} = Re Sc$  le nombre de Péclet.

$$\frac{\partial C_+}{\partial t_+} + 2Pe(1-r_+^2)\frac{\partial C_+}{\partial z_+} = \left( \frac{\partial^2 C_+}{\partial r_+^2} + \frac{1}{r_+} \frac{\partial C_+}{\partial r_+} + \frac{\partial^2 C_+}{\partial z_+^2} \right) \quad (1)$$

Des concentrations réduites à l'entrée du tube égale à 1 et en sortie égale à 0 sont imposées (figure 1). Comme la paroi du tube est isolante, une condition de dérivée nulle pour la concentration est appliquée. Les conditions aux limites et initiales sont récapitulées à travers les relations (2) suivantes, où  $H(t)$  est la fonction de Heaviside.

$$\begin{cases} C_+(r_+, z_+ = 0, t_+) = H(t) & \forall t_+ \\ C_+(r_+, z_+ = 1/\gamma, t_+) = 0 & \forall t_+ \\ \left. \frac{\partial C_+}{\partial r_+} \right|_{r_+=1} = 0 & \forall t_+ \\ C_+(r_+, z_+, t_+) = 0 & 0 \leq r_+ \leq 1, 0 \leq z_+ \leq 1/\gamma \text{ et } t_+ < 0 \end{cases} \quad (2)$$

L'équation de diffusion convective (1) est résolue dans le régime instationnaire à l'aide de la méthode des volumes finis (code Fluent). La taille des cellules est choisie très inférieure au rayon  $R$  du tube et adaptée aux gradients de concentration. Une précision du second ordre est prise pour la résolution spatiale. Pour la résolution temporelle, le pas de temps est choisi très inférieur au temps de diffusion latérale  $\tau_D$  lorsque le régime est faiblement convectif ( $0 \leq Pe \leq 1$ ). En régime convectif ( $Pe \gg 1$ ), il est pris très inférieur au temps de convection  $\tau_c = \frac{R}{U} = \frac{\tau_D}{Pe}$ .

### 3.2. Modèle de Taylor

Dans ses travaux, Taylor a proposé une réécriture de l'équation de diffusion convective en une équation intégrée unidimensionnelle (3). La dispersion du soluté est décrite uniquement selon la direction longitudinale de coordonnée  $z$ , puisque la concentration est moyennée pour chacune des sections du tube circulaire. Il introduit dans l'équation (3) un coefficient de dispersion qui traduit le rehaussement de la diffusion par la convection. Ce coefficient est communément noté  $D^*$ . Il dépend du nombre de Péclet  $Pe$  avec  $D^* = D \left( 1 + \frac{Pe^2}{48} \right)$ .

$$\frac{\partial \bar{C}_+}{\partial t_+} + Pe \frac{\partial \bar{C}_+}{\partial z_+} = \left( 1 + \frac{Pe^2}{48} \right) \frac{\partial^2 \bar{C}_+}{\partial z_+^2} \quad (3)$$

Pour aboutir à l'équation (3), Taylor a formulé deux hypothèses. La première est que la diffusion longitudinale est négligeable par rapport au transport longitudinal. La seconde est que le temps de diffusion latérale  $\tau_D$  est inférieur au temps convectif  $\tau_c$  ( $Pe < 1$ ), d'où une atténuation rapide des variations autour de la valeur moyenne sous l'action de la diffusion moléculaire. La concentration peut alors être moyennée sur chacune des sections du tube. Typiquement, le modèle de Taylor est valable pour  $0 \leq Pe < 7$  [5].

Quoiqu'il serait possible de résoudre analytiquement l'équation de diffusion convective moyennée de Taylor (3) malgré les deux points singuliers à l'entrée et à la sortie du tube, nous

avons préféré la solution numérique directe en utilisant la méthode des différences finies avec un schéma explicite car celle-ci est précise et plus rapide que la première qui nécessite de toute façon un calcul numérique de la solution analytique faisant intervenir des séries très difficilement convergentes. Le schéma numérique utilisé a été programmé avec le code « Mathematica 7 ».

### 3.3. Extension du modèle de Taylor

Notre objectif est d'étendre le formalisme du champ moyen utilisé par Taylor. Ceci se fera en déterminant la bonne valeur du coefficient de dispersion  $D^*$  à introduire dans l'équation (3), dans le cas où l'écoulement reste à faible nombre de Reynolds et pour lequel le nombre de Péclet est grand. Cette situation correspond au cas de la diffusion massique où le nombre de Schmidt est très élevé ( $Sc \approx 1000$ ). La procédure adoptée pour résoudre ce problème consiste donc en la détermination, à partir des résultats de la modélisation exacte, du bon coefficient de dispersion  $D^*$  à utiliser dans l'équation du champ moyen (3) qui donnerait la même évolution spatio-temporelle de la concentration moyenne  $\bar{C}$  dans le tube utilisant le critère d'invasion décrit ci-dessous. Les résultats numériques sont illustrés par la suite à travers l'exemple d'un tube ayant un facteur de forme  $\gamma = 0,02$ . L'étude est restreinte au cas du tube circulaire en prévision d'une application au modèle de Carman-Kozeny (tubes parallèles) pour des milieux poreux.

## 4. Résultats et discussion

Les résultats numériques obtenus sont analysés dans le cas faiblement convectif (pour  $0 \leq Pe \leq 1$ ) et comparés à ceux obtenus analytiquement par Taylor. L'autre cas correspond au régime où la convection est prédominante ( $1 < Pe \leq 1000$ ). Rappelons que ce cas ne peut pas être traité facilement analytiquement et qu'il a fait l'objet de plusieurs propositions semi-empiriques pour l'extension du coefficient de dispersion  $D^*$  [5,6].

### 4.1. Régime faiblement convectif ( $0 \leq Pe \leq 1$ )

La figure 3 montre l'évolution de la répartition de la concentration moyenne sur chacune des sections du tube pour  $Pe = 0,5$  obtenue par la modélisation exacte et dans le cas du modèle de Taylor. Des résultats similaires sont obtenus pour les autres nombres de Péclet dans l'intervalle ici considéré.

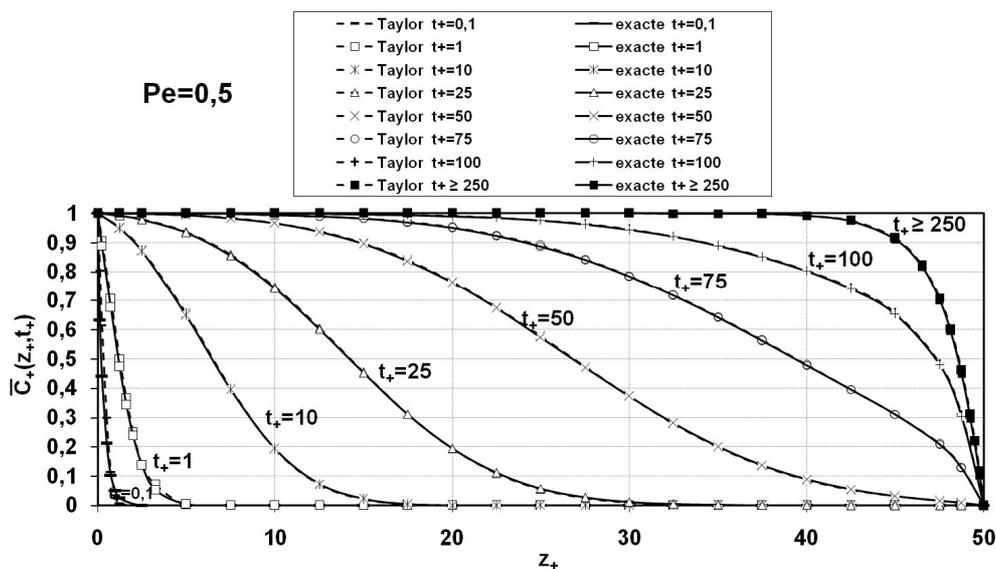


Figure 3 : Évolution de la répartition de la concentration moyenne dans le tube en régime faiblement convectif.

Une excellente adéquation est vérifiée entre la solution obtenue à l'aide du modèle de Taylor et celle donnée par la résolution numérique du modèle non moyenné (exact). Ajoutons, qu'aux temps « très » courts, par exemple  $t_+ \leq 1$  pour  $Pe = 0$ , le modèle de Taylor n'est pas en accord avec la solution exacte attendue car l'atténuation du gradient de concentration n'a pas eu le temps d'avoir lieu sur une section. Par ailleurs, il faut souligner qu'aux temps longs, la quantité totale de soluté dans le tube est plus grande quand le nombre de Péclet devient plus élevé.

#### 4.2. Régime convectif ( $1 < Pe \leq 1000$ )

L'évolution spatio-temporelle de la répartition de la concentration moyenne sur chacune des sections du tube donnée dans le cas non moyenné est comparée à celle obtenue par l'application du modèle de Taylor original pour une situation de forte convection (figure 4). L'écart entre les deux résultats est très important.

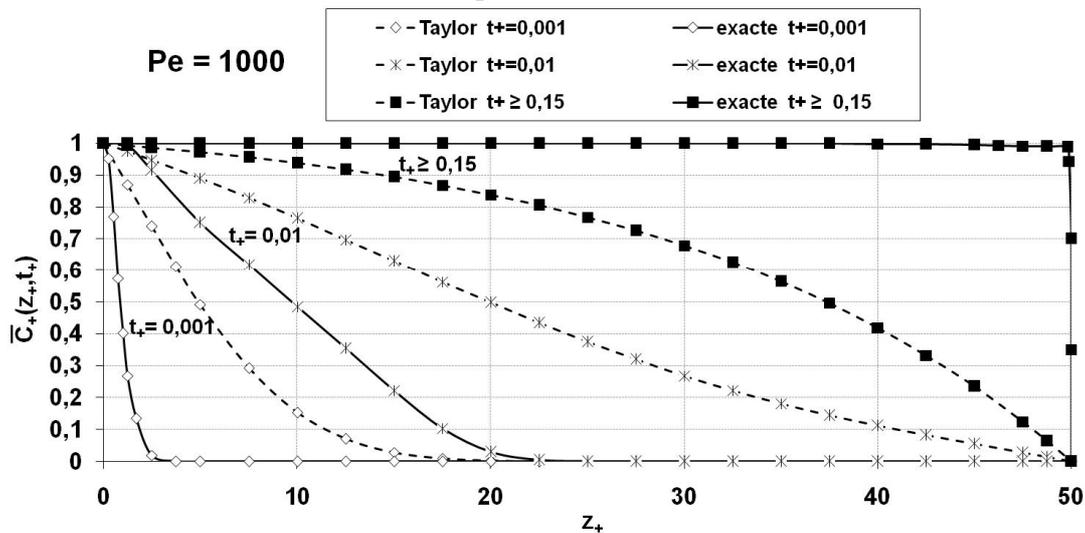


Figure 4 : Évolution de la répartition de la concentration moyenne dans le tube en régime fortement convectif.

En effet, cet écart est d'autant plus élevé que le nombre de Péclet est grand. Cependant, il reste faible jusqu'à  $Pe = 10$  confirmant la validité du modèle de Taylor pour le régime faiblement convectif [5]. Au-delà, pour les grands nombres de Péclet, la différence commence à s'accroître en raison de la convection qui devient prédominante. Ceci correspond à une augmentation apparente du coefficient de diffusion dans le modèle de Taylor. En effet, l'approximation du champ moyen pour la concentration n'est plus valable pour les grands nombres de Péclet. Pour étendre le formalisme du modèle de Taylor, il faut déterminer une valeur adéquate pour le coefficient de dispersion  $D^*$  à introduire dans l'équation (3) selon un critère différent que celui d'une concentration moyennée sur une section. Ce critère doit nous permettre de retrouver la même évolution spatio-temporelle pour la dispersion du soluté pour  $0 \leq Pe \leq 1000$ . Pour aboutir à cet objectif, il nous a semblé judicieux de considérer l'évolution de la quantité de soluté dispersée dans le tube  $Q(t)$  en comparant les résultats de la modélisation numérique à ceux obtenus à partir de l'équation de Taylor en utilisant le coefficient de dispersion corrigé.

$$Q(t) = \int_0^R \int_0^L C(r, z, t) dr dz \quad (4)$$

Dans cette approche, la bonne valeur de  $D^*$  retenue est celle qui conduit au bon accord dans l'évolution temporelle de la quantité  $Q(t)$ . L'exemple pour  $Pe = 1000$  est présenté sur la figure 5. La valeur trouvée est  $D_{mod}^* = 570 D$  alors que celle obtenue à partir du modèle

initial de Taylor serait  $D_{Taylor}^* = 20834 D$ . En calculant l'ensemble des valeurs corrigées du coefficient de diffusion, noté désormais  $D_{mod}^*$  pour  $0 \leq Pe \leq 1000$ , nous avons contribué à une extension du modèle de Taylor. Cependant, il faut noter que ce nouveau modèle basé sur notre critère proposé est en bon accord avec les résultats obtenus à partir du modèle de Taylor non modifié pour  $0 \leq Pe \leq 10$  (voir tableau 1).

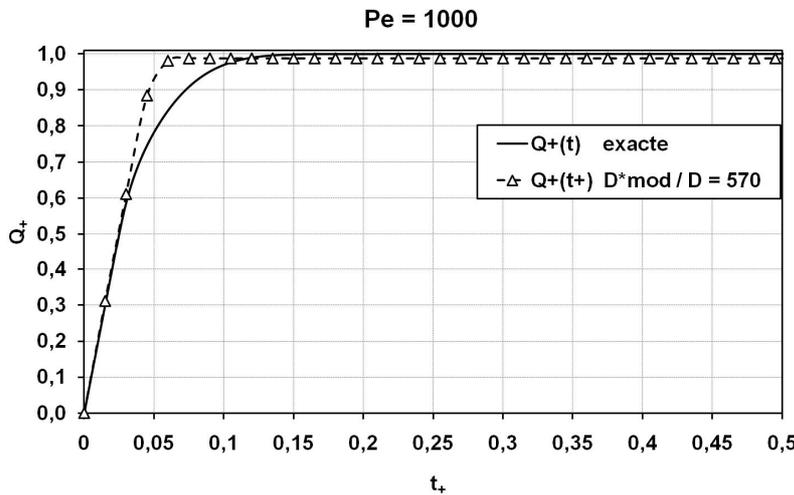


Figure 5 : Évolution de la quantité de soluté dispersée.

Tableau 1 : Coefficients de dispersion modifiés.

$Pe$	$\frac{D_{Taylor}^*}{D}$	$\frac{D_{mod}^*}{D}$
0	1	1
1	1,02	1,02
2	1,08	1,08
3	1,19	1,19
4	1,33	1,33
5	1,52	1,52
6	1,75	1,75
7	2,02	2,02
8	2,33	2,33
9	2,69	2,69
10	3,08	3,08
15	5,69	4,00
20	9,3	6,5
100	209	46
500	5209	270
1000	20834	570

## 5. Conclusion

L'extension du modèle de Taylor pour des grands nombres de Péclet en régime laminaire a été obtenue en introduisant un critère d'invasion du soluté dans le tube. La limitation du modèle de Taylor à décrire la diffusion convective en régime laminaire est liée au critère fixé par Taylor. Celui-ci consiste à supposer que la concentration s'est uniformisée dans chaque section. Un modèle reproduisant le cas exact a été confronté aux solutions de l'équation en champ moyen de dispersion de Taylor. Le choix du critère d'invasion nous a permis, dans un premier temps, de vérifier la validité du modèle de Taylor en régime faiblement convectif ( $Pe < 10$ ). Les écarts présentés par le modèle de Taylor par rapport à la réalité ont ensuite été appréciés en régime fortement convectif puis corrigés par l'utilisation des nouveaux coefficients de dispersion déterminés à partir de ce nouveau critère. Une expression générale permettant l'extension de la détermination d'un coefficient de dispersion en régime moyennement convectif est enfin possible.

## Références

- [1] K. Azer, C.S. Peskin, A one-dimensional model of blood flow in arteries with friction and convection based on the Womersley velocity profile, *Cardiovascular Engineering*, 7-2 (2007), 51-73.
- [2] D.C. Dalal, B.S. Mazumder, Unsteady convective diffusion in viscoelastic fluid flowing through a tube, *International Journal of Non Linear Mechanics*, 33-1 (1998), 135-150.
- [3] A. Nakayama, F. Kuwahara, An equation for thermal dispersion flux transport and its mathematical modelling for heat and fluid flow in a porous medium, *Journal of Fluid Mechanics*, 563 (2006), 81-96.
- [4] Sir G. I. Taylor, Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube, *Proceedings of the Royal Society, London Series, A* 219 (1953), 186-203.
- [5] R.F. Probstein, *Physicochemical Hydrodynamics, An Introduction*, Wiley-Interscience, New York (1994).
- [6] V.J. Charette, E. Evangelista, R. Chertcoff, H. Auradou, J.P. Hulin, I. Ippolito, Influence of the disorder on solute dispersion in a flow channel, *EPJ Applied Physics*, 39-3 (2007), 267-274.