

N°d'ordre:07/2018-D/G-P

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene
Faculté de Génie Mécanique et Génie des Procédés



Présentée pour l'obtention du grade de Docteur en Sciences

En Génie des Procédés

Spécialité : Procédés Chimiques et Environnement

Par : Zahra NEFFAH

Thème

Analyse des Transferts Thermique et Massique d'un Fluide non-Newtonien en Régime Oscillatoire dans un Canal muni de Cloisons Poreuses

Soutenue publiquement le 08 /07 / 2018, devant le Jury :

M. Y.K. BENKAHLA	Professeur	à l'USTHB	Président
M ^{me} H. KAHALERRAS	Professeur	à l'USTHB	Directrice de thèse
M ^{me} S. AKLOUCHE	Professeur	à l'USTHB	Examinatrice
M ^{me} R. BOUDRIES	Directrice de recherche	au CDER	Examinatrice
M. K. MANSOURI	Professeur	à l'UMBB	Examineur
M. M. BECHIRI	Maitre de conférences	à l'UOEB	Examineur

REMERCIEMENTS

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire des Transports Polyphasiques et Milieux Poreux de la Faculté de Génie Mécanique et Génie des Procédés de l'USTHB.

Je tiens à exprimer mes remerciements les plus chaleureux pour **Mme H. Kahalerras**, Professeur à l'USTHB, pour avoir accepté de m'encadrer et de diriger ce travail avec beaucoup de patience et de présence. Qu'elle soit saluée pour sa grande disponibilité, son humanité, son suivi continu, ses aides utiles, ses discussions fructueuses et ses conseils constructifs et précieux .

Je suis très sensible à l'honneur que me fait **M. Y.K. Benkahla**, Professeur à l'USTHB, en acceptant la présidence du jury malgré ses multiples occupations et ses nombreuses charges. Qu'il veuille trouver ici, l'expression de ma gratitude pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail.

J'adresse aussi mes vifs remerciements à **Mme R. Boudries**, Maitre de Recherche au CDER, **Mme S. Aklouche**, Professeur à l'USTHB, **M. K. Mansouri**, Professeur à l'UMBB, ainsi que **M. M. Bechiri**, Maitre de Conférences / A à l'Université d'Oum El Bouaghi pour avoir accepté de faire partie du jury et de m'accorder une partie de leur temps précieux pour examiner cette thèse.

Finalement, je remercie toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à l'aboutissement de ce travail.

DEDICACES

-A la mémoire de ma mère

-A mon très cher père

-A mes frères et sœurs

-A mes neveux et nièces

-A toutes mes amies

RESUME

L'analyse numérique des transferts de chaleur et de masse d'un fluide non-Newtonien dans un canal à plaques parallèles partiellement rempli d'un milieu poreux anisotrope sujet à un écoulement oscillatoire et une réaction chimique exothermique sur ses parois est effectuée. L'écoulement dans la région poreuse est modélisé par le modèle de Darcy -Brinkman-Forchheimer modifié pour les fluides en loi de puissance, et la méthode des volumes finis est utilisée pour résoudre les équations gouvernantes. Les effets du rapport d'anisotropie pour la conductivité thermique λ , l'indice de loi de puissance n , le nombre Darcy Da , les nombres modifiés de Frank-Kamenetskii FK_m et de Damköhler D_{μ} , l'amplitude d'oscillation A , ainsi que le nombre Strouhal St sont examinés. Les résultats mettent en évidence les situations pour lesquelles l'anisotropie d'un milieu poreux conduit à des améliorations significatives des transferts de chaleur et de masse par rapport au cas isotrope. Les fluides dilatants présentent les valeurs les plus élevées des nombres de Nusselt et de Sherwood moyens aux grands nombres de Darcy. L'augmentation des paramètres de réaction chimique diminue les taux de transferts de chaleur et de masse. Enfin, il a été trouvé que l'amplitude et la fréquence d'oscillation augmentent les taux de transferts.

Mots-clés : Transfert de chaleur, Transfert de masse, Fluide non-Newtonien, Milieu poreux anisotrope, Réaction chimique, Ecoulement oscillatoire

ABSTRACT

Numerical analysis of heat and mass transfer of a non-Newtonian fluid in a parallel-plate channel partly filled with an anisotropic porous medium and subjected to an oscillating flow and exothermic chemical reaction on its walls is conducted. The flow field in the porous region is modeled by the modified Brinkman-Forchheimer extended Darcy model for power-law fluids and the finite volume method is used to solve the governing equations. The effects of the anisotropic ratio for thermal conductivity λ , the power-law index n , the Darcy number Da , the modified Frank-Kamenetskii FK_m and Damköhler D_m numbers, the amplitude of oscillation A , as well as the Strouhal number St are examined. The results highlight the situations for which the anisotropy of a porous medium leads to significant improvements in heat and mass transfer compared to the isotropic case. The shear-thickening fluids exhibit the highest values of mean Nusselt and Sherwood numbers at large Darcy number. The increase of the parameters of chemical reaction decreases the heat and mass transfer rates. Finally, it is found that the amplitude and frequency of oscillation increase the transfer rates.

Keywords: Heat transfer, Mass transfer, Non-Newtonian fluid, Anisotropic porous medium, Chemical reaction, Oscillating flow

NOMENCLATURE

A	Amplitude d'oscillation
c	Concentration (mol/m ³)
C	Concentration adimensionnelle et coefficient inertiel
C*	Coefficient inertiel modifié
C _p	Chaleur spécifique à pression constante (J/kg K)
D	Diffusivité massique (m ² /s)
D _m	Nombre de Damköhler modifié
Da	Nombre de Darcy
E	Energie d'activation (J/mol)
e _p	Epaisseur du milieu poreux
f	Fréquence d'oscillation d (Hz)
FK _m	Nombre de Frank- Kamenetskii modifié
H	Hauteur du canal
k	Conductivité thermique (W/m K)
k ₀	Facteur pré-exponentiel d'Arrhenius (1/s)
K	Perméabilité du milieu poreux (m ²)
K*	Perméabilité Modifiée (m ⁿ⁺¹)
ℓ	Longueur du canal (m)
Le	Nombre de Lewis
n	Indice de loi de puissance
Nu	Nombre de Nusselt
P	Pression (Pa)
Pr	Nombre de Prandtl généralisé
Q	Chaleur de la réaction (J/mol)
R	Constante Universelle des gaz (J/mol K)
R _{Cp}	Rapport des capacités calorifiques poreux - fluide
Re	Nombre de Reynolds
R _k	Rapport de conductivités thermiques poreux-fluide
R _μ	Rapport de viscosités poreux-fluide

Sh	Nombre de Sherwood
St	Nombre de Strouhal
t	Temps (s)
T	Température (K)
u	Vitesse axiale (m/s)
v	Vitesse transversale (m/s)
x	Coordonnée axiale (m)
y	Coordonnée transversale (m)

Symboles Grecques

γ	Paramètre d'énergie d'activation
λ	Rapport de conductivités thermiques anisotrope
ε	Porosité
θ	Température adimensionnelle
μ	Viscosité (kg/m s)
μ^*	Facteur de consistance
ρ	Densité (kg/m ³)
τ	Temps adimensionnel
τ^*	Période d'oscillation adimensionnelle
η	Viscosité apparente (1/s ²)
η^*	Viscosité apparente adimensionnelle

Indices

c	Couche poreuse
e	Entrée
ex	Effective suivant x
ey	Efective suivant y
m	Moyen et matrices poreuses
p	Paroi
<>	Quantité moyennée sur un cycle d'oscillation

LISTE DES FIGURES

Figure I.1 : Schématisation d'un volume élémentaire représentatif	4
Figure I.2 : Arrangements réguliers de sphères de même diamètre avec la porosité ε associée	5
Figure I.3 : Illustration d'un bras d'écoulement	5
Figure I.4 : Modèle en série	7
Figure I.5 : Modèle en parallèle	7
Figure I.6 : Cristaux de zéolithes sur une surface en alumine vus au microscope électronique [3]	14
Figure I.7 : Catalyseur mousse utilisé au niveau du pot d'échappement des automobiles [3]	15
Figure I.8 : Cœur d'un complexe organo-métallique [3]	16
Figure I.9 : Structure cristallographique du domaine catalytique d'une enzyme appartenant à la famille des poly ADP-ribose polymérase [3]	17
Figure I.10 : Comportement rhéologiques des fluides non-Newtoniens à comportement indépendant du temps (Chhabra et Richardson [4])	19
Figure III.1a : Domaine physique : matrices poreuses	33
Figure III.1b : Domaine physique : couche poreuse	33
Figure IV.1 : Volume de contrôle	39
Figure IV.2 : Exemple d'un maillage uniforme décalé	40
Figure IV.3 : Volume d'intégration des équations de conservation	42
Figure IV.4a : Volume de control lié à U	47
Figure IV.4b : Volume de control lié à V	47
Figure IV.5 : Volume de contrôle lié à P	49
Figure V.1 : Diagrammes de phases U - θ et U - C pour la configuration en couche poreuse : $Da = 10^{-3}$, $St = 0.5$, $A = 0.5$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $FK_m = 10$ et $D_m = 5$	55
Figure V.2a : Profils de vitesse à l'établissement pour différentes valeurs de n, $Da \rightarrow \infty$ et $\varepsilon = 1$	56
Figure V.2b : Profils de vitesse à l'établissement pour différentes valeurs de n, $Da = 10^{-2}$ et $C^* = 0$	56
Figure V.3 : Variation temporelle, sur une période d'oscillation, du gradient de	56

pression axial : $\varepsilon = 0.6$, $E_{pm} = 1$, $Da = 10^{-4}$, $C^* = 0.057$, $Pr = 07$, $n = 1$, $Re = 50$, $A = 0.75$ et $St = 0.16$

Figure V.4 : Profils de vitesse à la sortie du canal pour différentes valeurs de n à $Da = 10^{-3}$ 58

Figure V.5 : Profils de Température et de concentration pour différentes valeurs de n et λ : $Da = 10^{-3}$, $FK_m = 1$ et $D_m = 5$ 59

Figure V.6 : Variation de Nu_m et Sh_m avec λ : $Da = 10^{-3}$, $FK_m = 1$ et $D_m = 5$ 60

Figure V.7a : Variation de Nu_m et Sh_m avec Da pour la configuration en couche poreuse : $FK_m = 1$ et $D_m = 5$ 61

Figure V.7b : Variation de Nu_m et Sh_m avec Da pour la configuration en matrices poreuses : $FK_m = 1$ et $D_m = 5$ 62

Figure V.8a : Variation de RNu_m et RSh_m avec Da pour la configuration en couche poreuse : $FK_m = 1$ et $D_m = 5$ 63

Figure V.8b : Variation de RNu_m et RSh_m avec Da pour la configuration en matrices poreuses : $FK_m = 1$ et $D_m = 5$ 63

Figure V.9a : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec FK_m en configuration couche poreuse : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $D_m = 5$ 65

Figure V.9b : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec FK_m en configuration matrices poreuses: $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $D_m = 5$ 66

Figure V.10 : Variation de Nu_m et Sh_m avec FK_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $D_m = 5$ 67

Figure V.11a : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec D_m en configuration couche poreuse : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $FK_m = 1$ 68

Figure V.11b : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec D_m en configuration matrices poreuses: $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $FK_m = 1$ 69

Figure V.12 : Variation de Nu_m et Sh_m avec D_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $FK_m = 1$ 70

Figure V.13a : Evolution temporelle de θ_m et C_m à la sortie du canal pour différentes amplitudes d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$ 71

Figure V.13b : Evolution temporelle de θ_p et C_p à la sortie du canal pour différentes 71

amplitudes d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.13c : Evolution temporelle de Nu_m et Sh_m à la sortie du canal pour 72

différentes amplitudes d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda=1$, $n=1$, $St=0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.14 : Evolutions de $\langle Nu_m \rangle$ et $\langle Sh_m \rangle$ avec l'amplitude d'oscillation : $Da =$ 73

10^{-3} , $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.15 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec l'amplitude d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$ 73

10^{-3} , $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.16a : Evolution temporelle de θ_m et C_m à la sortie du canal pour différentes 74

fréquences d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.16b : Evolution temporelle de θ_p et C_p à la sortie du canal pour différentes 74

fréquences d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.16c : Evolution temporelle de Nu_m et Sh_m à la sortie du canal pour 75

différentes fréquences d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.17 : Evolutions de $\langle Nu_m \rangle$ et $\langle Sh_m \rangle$ avec la fréquence d'oscillation : $Da =$ 75

10^{-3} , $\lambda=1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.18 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec la fréquence d'oscillation : $Da =$ 76

10^{-3} , $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Figure V.19 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec FK_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A =$ 77

0.5 , $St=0.5$ et $D_m = 5$

Figure V.20 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec D_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A =$ 77

0.5 , $St=0.5$ et $FK_m = 10$

LISTE DES TABLEAUX

Tableau I.1 : Exemples de modèles rhéologiques non-Newtoniens [5]	21
Tableau IV.1 : Différents termes des équations de conservation	41
Tableau IV.1 : Expressions des termes des équations de conservation	42
Tableau IV.3 : Expressions des termes sources linéarisés	46
Tableau V.1 : Sensibilité du maillage pour $n = 1.5$, $Da = 10^{-2}$, $\lambda = 10$, $FK_m = 1$ et $D_m = 5$	54

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE 1 : GENERALITES	3
Introduction	3
I.1 Caractérisation des milieux poreux	3
I.1.1 Définitions	3
I.1.2 Paramètres	3
I.1.3 Modèles d'écoulement	8
I.1.4 Transfert de chaleur	10
I.1.5 Transfert de masse	11
I.2 Réactions chimiques : mécanismes	11
I.2.1 Effet de la concentration	12
I.2.2 Effet de la température	13
I.2.3 Les catalyseurs	14
I.2.3.1 Catalyse hétérogène	15
I.2.3.2 Catalyse homogène	16
I.2.3.3 Catalyse enzymatique	16
I.2.3.4 Cycle catalytique	17
I.3 Fluides non-Newtoniens	18
I.3.1 Fluides à comportement indépendant du temps	19
I.3.1.1 Fluides pseudo-plastiques ou rhéo-fluidifiants	19
I.3.1.2 Fluides dilatants ou rhéo-épaississants	20
I.3.1.3 Fluides viscoplastiques	20
I.3.2 Fluides à comportement dépendant du temps	20
I.3.2.1 Fluides thixotropes	20
I.3.2.2 Fluides anti-thixotropes	20
I.3.2.3 Fluides viscoélastiques	21
I.3.3 Modèles mathématiques	21
I.3.3.1 Milieux non poreux	21
I.3.3.2 Milieux poreux	22
Conclusion	22

CHAPITRE II : RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE	23
Introduction	23
II.1 Régime oscillatoire	23
II.2 Fluides non-Newtoniens	26
II.3 Anisotropie	27
II.4 Réaction chimique	29
Conclusion	31
CHAPITRE III : FORMULATION MATHEMATIQUE	32
Introduction	32
III.1 Domaine physique	32
III.2 Modèle mathématique	33
III.2.1 Hypothèses simplificatrices	33
III.2.2 Equations gouvernantes	34
III.2.3 Conditions aux limites	35
III.2.4 Equations adimensionnelles	36
III.2.5 Conditions aux limites adimensionnelles	36
III.3 Nombre de Nusselt	37
III.4 Nombre de Sherwood	38
Conclusion	38
CHAPITRE IV : RESOLUTION NUMERIQUE	39
Introduction	39
IV.1 Maillage	39
IV.2 Discrétisation des équations gouvernantes	40
IV.3 Schémas d'interpolation	45
IV.4 Linéarisation du terme source	46
IV.5 Discrétisation des équations de quantité de mouvement	46
IV.5.1 Correction de la vitesse	47
IV.5.2 Equation de correction de la pression	49
IV.6 Algorithme SIMPLE	49
IV.7 Méthode de résolution	50
IV.8 Technique de relaxation	51
IV.9 Critères de convergence	52
Conclusion	53

CHAPITRE V : RESULTATS ET DISCUSSION	54
Introduction	54
V.1 Sensibilité du maillage et résolution temporelle	54
V.2 Validations	55
V.3 Résultats en régime stationnaire	56
V.3.1 Caractéristiques du milieu poreux	57
V.3.2 Caractéristiques de la réaction chimique	63
V.4 Résultats en régime oscillatoire	70
V.4.1 Amplitude d'oscillation	70
V.4.2 Fréquence d'oscillation	74
V.4 .3 Caractéristiques de la réaction chimique	76
Conclusion	77
CONCLUSION GENERALE	79
PERSPECTIVES	80
REFERENCES	81
ANNEXE	87

INTRODUCTION GENERALE

Dans de nombreuses applications pratiques, le transfert de masse se fait par des opérations de diffusion qui impliquent la diffusion moléculaire d'espèces en présence de deux types de réactions chimiques, à savoir, homogènes et hétérogènes. Une réaction homogène est celle qui se produit uniformément dans une phase donnée et elle est analogue à une source interne générant de la chaleur, alors qu'une réaction hétérogène a lieu dans une région restreinte ou dans la limite d'une phase. Une réaction chimique est dite de premier ordre, si la vitesse de réaction est directement proportionnelle à la concentration elle-même. Les espèces diffusives peuvent être générées ou absorbées en raison de différents types de réactions chimiques avec le fluide ambiant, ce qui peut grandement affecter les propriétés et la qualité des produits finis. L'étude des transferts de chaleur et de masse dans les milieux poreux en présence de réactions chimiques est donc d'une grande importance pour les ingénieurs et les scientifiques puisqu'ils sont rencontrés dans de nombreux domaines tels que les réacteurs catalytiques et nucléaires, les réservoirs géothermiques et pétroliers, etc.

Il est bien connu que la plupart des fluides rencontrés dans les applications chimiques ne satisfont pas à la loi de Newton et sont donc connus sous le nom de fluides non-Newtoniens. En raison des applications importantes de ce type de fluides en biologie, en physiologie, en technologie, et en industrie, des efforts considérables ont été consacrés à l'analyse et à la compréhension de leur physique. Plusieurs modèles mathématiques ont été proposés pour expliquer leur comportement rhéologique. Parmi ceux-ci, un modèle largement utilisé et fréquemment rencontré dans les procédés de génie chimique ; il s'agit du modèle en loi de puissance.

La plupart des études réalisées sont généralement portées sur des structures poreuses isotropes et homogènes. Cependant, dans de nombreuses situations pratiques, les matériaux poreux sont anisotropes dans leurs propriétés mécaniques et thermiques. Un exemple d'un tel milieu est une isolation de grenier qui a généralement une perméabilité plus faible dans la couche isolante que dans la direction perpendiculaire. Un autre exemple important est celui des systèmes géologiques avec des sédiments anisotropes et des roches. Au cours des dernières années, les effets de la non-homogénéité et de l'anisotropie dans les milieux poreux ont été étudiés. L'inclusion de plus de réalisme physique dans les propriétés matricielles du milieu est importante pour la modélisation précise des milieux anisotropes. L'anisotropie, qui est

généralement la conséquence d'une orientation préférentielle ou d'une géométrie asymétrique du grain ou des fibres, est en effet rencontrée dans de nombreux systèmes naturels et industriels.

L'ajout d'une composante oscillatoire à l'écoulement moyen peut être considéré comme une méthode active d'amélioration des échanges en raison des perturbations hydrodynamiques qui en résultent et conduisant à un meilleur brassage du fluide. Les écoulements oscillatoires sont fréquemment rencontrés dans les applications d'ingénierie, telles que les échangeurs de chaleur pulsés, les moteurs alternatifs, les systèmes de réfrigération, etc.

Ce travail de thèse s'inspire de ce contexte et il s'agit plus précisément d'une étude numérique des transferts de chaleur et de masse dans un canal partiellement rempli d'un milieu poreux qui peut se présenter sous forme soit de couche ou de matrices. Le substrat poreux est anisotrope en conductivité thermique et saturé d'un fluide non-Newtonien dont le comportement rhéologique obéit au modèle en loi de puissance. Les parois du canal sont le siège d'une réaction chimique exothermique, d'ordre un, non-isotherme et suivant la loi d'Arrhenius. Afin d'améliorer les échanges, le régime d'écoulement considéré est oscillatoire avec une vitesse à l'entrée du système variant sinusoïdalement au cours du temps.

Cette thèse se présente sous forme de cinq chapitres dont le premier est consacré à des notions fondamentales relatives aux milieux poreux, aux fluides non-Newtoniens ainsi qu'à la cinétique des réactions chimiques. Une synthèse bibliographique des différents travaux antérieurs effectués dans le même contexte que cette étude est exhibée dans le deuxième chapitre. Le troisième chapitre a pour but de présenter le système physique étudié, et de le modéliser sous forme d'un ensemble d'équations gouvernantes avec des conditions aux limites appropriées. L'adimensionnement de ces équations permettra de faire ressortir un certain nombre de paramètres de contrôle du problème physique étudié. Dans le quatrième chapitre est développée la méthode numérique choisie, en l'occurrence celle des volumes finis, pour la résolution des équations algébriques résultantes. Les résultats en régimes stationnaire et oscillatoire sont analysés et discutés dans le dernier chapitre. Enfin, vient une conclusion générale mettant en évidence l'ensemble de ce qui a été effectué et obtenu dans le cadre de cette thèse.

GENERALITES

Introduction

Dans ce chapitre, nous définirons les différents paramètres qui apparaissent au niveau des différents modèles de description macroscopique des écoulements en milieu poreux. Les phénomènes de transfert de chaleur et de masse dans ces milieux seront présentés ainsi que des notions sur les réactions chimiques, les catalyseurs, ainsi que les fluides non-Newtoniens.

I.1 Caractérisation des milieux poreux

I.1.1 Définitions

Les milieux poreux désignent des matériaux pour lesquels la phase solide, fortement imbriquée avec la phase fluide, est fixe. On trouve de nombreux matériaux naturels dans cette catégorie : les sols, les couches sédimentaires, la plupart des roches, ainsi que certains matériaux vivants. Certains matériaux artificiels requièrent d'être poreux soit dans le processus de fabrication, soit dans leur finalité pour jouer un rôle de filtre ou apporter des propriétés macroscopiques particulières (conductivité thermique par exemple). D'une manière générale, les milieux poreux sont définis par deux critères :

- le matériau doit contenir de petits espaces vides, appelés pores, délimités par une matrice solide ;
- le matériau doit être perméable à un écoulement de fluide (gaz ou liquide).

Ces deux critères renvoient à deux caractéristiques essentielles d'un milieu poreux : la porosité donnant la fraction de vide, et la perméabilité qui indique l'aptitude d'un milieu poreux à être traversé par un fluide. Ces deux quantités sont des variables macroscopiques, c'est-à-dire estimées sur un volume contenant de nombreuses entités microscopiques composant le matériau : les pores.

I.1.2 Paramètres

a. Volume Élémentaire Représentatif (VER)

Pour quantifier un problème de la physique en utilisant les outils mathématiques, il est nécessaire d'avoir un milieu continu. Dans les milieux poreux, les propriétés thermo-physiques (porosité, perméabilité, etc.) sont discontinues au niveau microscopique. La dérivation de solutions de problèmes d'écoulement doit donc toujours faire appel, implicitement ou explicitement, à la définition d'un volume

élémentaire représentatif VER (Figure I.1) à l'intérieur duquel les propriétés moyennes sont supposées uniformes et continues. Le VER doit être suffisamment grand pour que des propriétés globales moyennes puissent être définies sans que les fluctuations d'un pore à l'autre ne soient significatives (la taille du VER doit être suffisamment grande par rapport à la taille du pore d). Le VER doit cependant être suffisamment petit pour que les variations d'un paramètre dans le domaine d'étude puissent être représentées par des fonctions continues. **Marsily** [1] et surtout **Bear** [2] ont fourni une discussion détaillée de ce concept

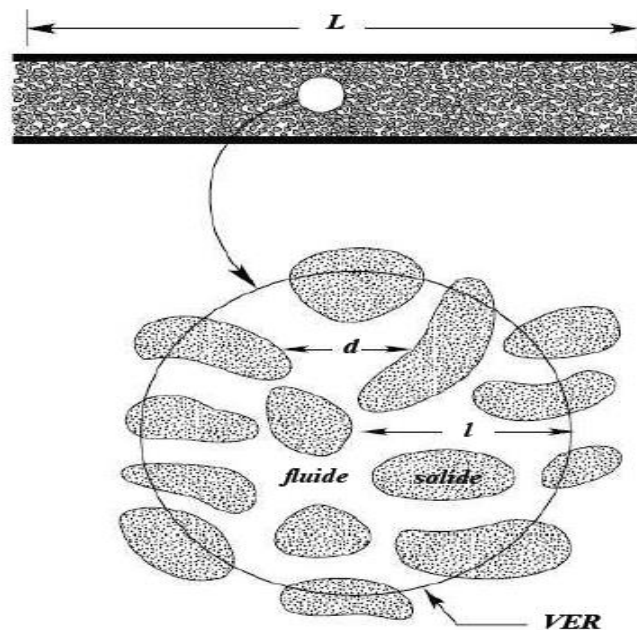


Figure I.1 : Schématisation d'un volume élémentaire représentatif

b. Porosité

Le volume total V_T d'un matériau poreux est constitué de la somme du volume des solides V_s et du volume des pores (ou vides) V_v présents dans le volume total :

$$V_T = V_v + V_s \quad (\text{I.1})$$

La porosité ε est définie comme étant le rapport du volume des pores V_v au volume total V_T :

$$\varepsilon = \frac{V_v}{V_T} \quad (\text{I.2})$$

Elle varie donc entre 0 (solide plein) et 1 (volume complètement vide). Les résultats des calculs effectués à partir de modèles géométriques, comme par exemple les empilements réguliers de sphères de même diamètre (Figure I.2), montrent que la porosité dépend fortement de l'arrangement et de la taille des grains. On trouve ainsi pour la porosité : $\varepsilon = 0.476$ dans le cas de l'arrangement cubique, $\varepsilon = 0.32$ dans le cas cubique centré et $\varepsilon = 0.255$ dans le cas cubique à face centrée.

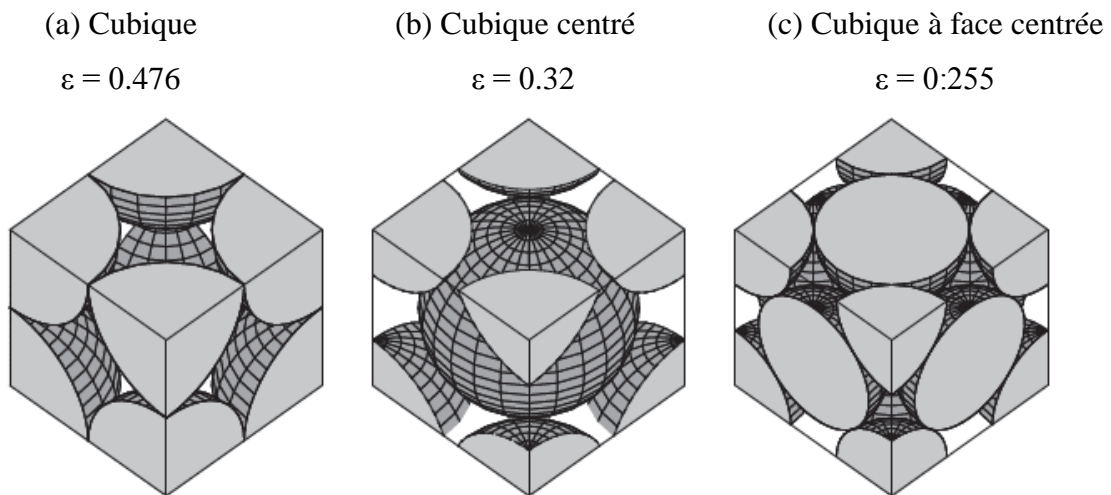


Figure I.2 : Arrangements réguliers de sphères de même diamètre avec la porosité ε associée

c. Tortuosité

La description de la géométrie des pores fait intervenir la notion de connectivité, correspondant à la complexité du chemin continu à travers l'espace des pores. Pour décrire ces différents aspects, on introduit un paramètre τ appelé tortuosité, que l'on définit de la manière suivante :

$$\tau = \frac{L_e}{L} \quad (I.3)$$



Figure I.3 : Illustration d'un bras d'écoulement

Où L_e est la longueur réelle des lignes de courant du fluide traversant un échantillon de longueur L d'un milieu poreux modélisé sous la forme d'un réseau de capillaires ou ondulés. Ce rapport joue un rôle important dans les problèmes de diffusion.

d. Perméabilité

La perméabilité est définie comme la conductance de l'écoulement dans la région poreuse. C'est l'aptitude de circulation qu'offre un milieu poreux à un fluide lors de son écoulement à travers les pores de ce milieu. Elle est exprimée par la relation suivante appelée loi de Darcy :

$$K = -\frac{\mu u_D}{dp/dx} \quad (\text{I.4})$$

μ : viscosité dynamique du fluide (kg/ms)

u_D : vitesse Darcienne (m/s)

dp/dx : gradient de pression (Pa/m)

Plusieurs modèles ont été proposés dans le but d'établir des expressions qui permettraient de calculer la valeur de la perméabilité K . On peut citer :

- Modèle des canaux tortueux

$$K = \frac{\varepsilon a^2}{24 \tau^2} \quad (\text{I.5})$$

a : diamètre des canaux

- Modèle de Carman-Kozeny

$$K = \frac{\varepsilon^3}{C A_s^2 \tau^2} \quad (\text{I.6})$$

A_s : aire spécifique

$C = 6$

e. Surface spécifique

Les milieux poreux se caractérisent par leur grande surface interne. La surface spécifique d'un tel matériau est définie par le rapport suivant :

$$A_s = \frac{S}{V_0} \quad (\text{I.7})$$

V_0 : échantillon de volume du pore

S : surface interne du pore

f. Conductivité thermique

Les phases solide et fluide présentes dans le milieu poreux contribuent généralement avec des proportions différentes au mode de conduction (le plus souvent $k_s > k_f$). Cette conductivité effective dépend de la porosité et des conductivités thermiques des phases solides k_s et fluide k_f . En général, les modèles proposés sont des combinaisons des modèles en série et parallèle basés sur l'analogie électrique.

- **Modèle en série**

Pour ce modèle, on considère que le flux de chaleur traverse successivement les phases solide et fluide. La résistance thermique du milieu poreux est égale à la somme des résistances thermique de chacune des phases :

$$\frac{1}{k_e} = \frac{\varepsilon}{k_f} + \frac{(1-\varepsilon)}{k_s} \quad (\text{I.8})$$

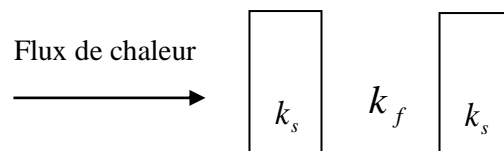


Figure I.4 : Modèle en série

- **Modèle en parallèle**

Le flux thermique traverse les phases fluide et solide en même temps. La conductivité thermique effective est alors égale à la somme pondérée des taux d'occupation d'espace des conductivités phasiques. Elle s'écrit de la manière suivante :

$$k_e = \varepsilon k_f + (1-\varepsilon) k_s \quad (\text{I.9})$$

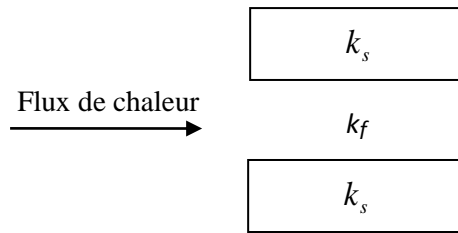


Figure I.5 : Modèle en parallèle

I.1.3 Modèles d'écoulement

Le premier modèle d'écoulement a été établi par **H. Darcy en 1856** et depuis, plusieurs autres modèles ont été proposés pour tenir compte de certains effets négligés par ce dernier.

a. Modèle de Darcy (1856)

Darcy a obtenu une relation linéaire entre la vitesse et le gradient de pression pour un écoulement unidimensionnel conduit par gravité à travers un milieu poreux non consolidé dont les particules sont à peu près de mêmes dimensions :

$$\vec{V} = -\frac{K}{\mu} (\vec{\nabla}_p + \rho \vec{g}) \quad (\text{I.10})$$

μ : viscosité dynamique du fluide (kg/m s)

$\vec{\nabla}_p$: gradient de pression (Pa / m)

$\rho \vec{g}$: forces de volume

K : perméabilité du milieu poreux (m²)

Il est important de noter que le modèle de Darcy est inadéquat pour certaines situations d'écoulement. En effet, Il ne satisfait pas la condition de non glissement sur les parois solides. Dans les problèmes de convection, la chaleur se transmet essentiellement à partir du fluide près des parois solides.

b. Modèle de Darcy – Forchheimer (1901)

Ce modèle est utilisé pour décrire l'écoulement de fluide à vitesses élevées. En effet, dans de telles situations, les effet inertiels microscopiques sont importants et doivent être pris en compte dans l'équation de mouvement. **Ward (1964)** a adapté le modèle de Darcy en

introduisant un terme représentant les forces d'inertie :

$$\bar{\nabla}P = -\frac{\mu}{K}\bar{V} + \rho\bar{g} - \rho_f \frac{C}{\sqrt{K}}|\bar{V}|\bar{V} \quad (\text{I.11})$$

Où C est une constante adimensionnelle souvent appelée coefficient inertiel. Plusieurs expressions ont été proposées pour ce terme :

- **Ergun** a proposé d'utiliser : $C = \frac{1.75(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2 d_p}$
- **Joseph, Nield et Papanicolaou** (1982) ont utilisé : $C = \frac{\varepsilon F}{\sqrt{K}}$, F étant le coefficient de Forchheimer.
- **Ward (1964)** a pensé que C peut être une constante universelle avec une valeur approximative de 0.55, mais plus tard il a trouvé que C dépendait de la nature du milieu.

c. Modèle de Darcy – Brinkman (1947)

Pour tenir compte des effets pariétaux, **Brinkman (1947)** a établi une équation d'écoulement, en combinant l'équation de Darcy et celle de Navier – Stokes. Elle s'écrit sous la forme suivante :

$$\bar{\nabla}P = -\frac{\mu}{K}\bar{V} + \rho\bar{g} + \mu_e \bar{\nabla}^2 \bar{V} \quad (\text{I.12})$$

Où μ_e est la viscosité effective du milieu poreux. La difficulté de l'utilisation de ce modèle est l'évaluation de la viscosité effective du milieu poreux qui est généralement prise égale à celle du fluide. $\mu_e \bar{\nabla}^2 \bar{V}$ est le terme de Brinkman qui représente les forces visqueuses causées par les forces de cisaillement microscopiques le long des frontières solides. Il est très significatif dans les régions près des parois solides.

d. Modèle général ou Modèle de Darcy – Brinkman – Forchheimer

Pour tenir compte de tous les effets cités auparavant, on associe à l'équation de Darcy, les termes de Brinkman et Forchheimer. Le modèle ainsi formé est connu sous le nom du modèle de Darcy – Brinkman – Forchheimer. L'équation vectorielle de conservation de la quantité de mouvement à travers le milieu poreux s'écrit alors sous la forme :

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \frac{\rho}{\varepsilon^2} \vec{\nabla} \vec{\nabla} \vec{V} = -\vec{\nabla} P + \mu_e \nabla^2 \vec{V} - \frac{\mu}{\varepsilon K} \vec{V} - \rho_f \frac{C}{\sqrt{K}} |\vec{V}| \vec{V} + \rho \vec{F}_v \quad (\text{I.13})$$

\vec{V} : vitesse moyennée sur un volume élémentaire représentatif

$\frac{\rho}{\varepsilon} \frac{\partial \vec{V}}{\partial t}$: terme instationnaire

$\frac{\rho}{\varepsilon^2} \vec{\nabla} \vec{\nabla} \vec{V}$: forces inertielles macroscopiques

$\vec{\nabla} P$: gradient de pression

$\mu_e \nabla^2 \vec{V}$: terme visqueux de Brinkman

$\frac{\mu}{\varepsilon K} \vec{V}$: terme de Darcy

$\rho_f \frac{C}{\sqrt{K}} |\vec{V}| \vec{V}$: forces inertielles microscopiques

$\rho \vec{F}_v$: forces de volume

I.1.4 Transfert de chaleur

La description du transfert de chaleur dans les milieux poreux par l'approche macroscopique peut présenter une différence par rapport au transfert réel. De ce fait, la notion d'équilibre thermique local est introduite. Cette dernière a été largement étudiée :

- **Carbonell et Whitaker (1984)** ont posé des conditions d'équilibre thermique sur la mesure du temps et de la longueur.
- **Bennacerallah (1994) et Kaviany (1995)** ont étudié la condition d'équilibre et ont trouvé qu'elle est satisfaite en régime instationnaire.
- **Chang et al. (1990)** ont trouvé que l'équation d'énergie macroscopique peut être obtenue par prise de moyenne de l'équation d'énergie dans chaque phase et dans un volume élémentaire représentatif. Elle se présente sous la forme suivante :

$$(\rho C_p)_e \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho C_p) \vec{\nabla} \vec{\nabla} T = k_e \nabla^2 T \quad (\text{I.14})$$

ρ : masse volumique du fluide

ε : porosité du milieu poreux

k_e : conductivité thermique effective

$(\rho C_p)_e = \varepsilon(\rho C_p)_f + (1 - \varepsilon)(\rho C_p)_s$: capacité calorifique effective

Cette équation décrivant le transfert de chaleur dans un milieu poreux a été obtenue en supposant les hypothèses suivantes :

- Les termes de dissipation visqueuse sont négligeables ; hypothèse justifiée si la vitesse de filtration reste relativement faible et si les fluides ne sont pas trop visqueux.
- Les caractéristiques thermiques des phases solide et fluide sont supposées constantes et indépendantes de la température.
- Pas de source interne de chaleur.

I.1.5 Transfert de masse

Le transfert de masse est le transport des constituants d'un fluide emporté par son mouvement ou suite à l'apparition d'un gradient de concentration. Le transfert de masse se fait d'une région à forte concentration vers une région à faible concentration jusqu'à établissement d'un équilibre (égalité des concentrations entre les deux régions)

Le transfert de masse se fait de deux manières différentes conditionnées par la mobilité ou l'immobilité du fluide transporteur. Si le fluide est en mouvement, le transfert massique se fait par convection solutale, dans le cas où le fluide est au repos, le transfert se fait par diffusion moléculaire.

Dans le cas d'un milieu poreux, l'écoulement du fluide se fait au travers des pores et la modélisation de ce phénomène s'effectue en introduisant la valeur de la porosité lors de l'écriture de l'équation de concentration du cas totalement fluide.

L'équation de transfert massique s'écrit comme suit :

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \nabla C = \nabla (D_e \nabla C) \quad (\text{I.15})$$

Où $D_e = \varepsilon D$ est la diffusivité massique effective dans le milieu poreux.

I.2 Réactions chimiques : mécanismes

Une réaction chimique est une transformation de la matière au cours de laquelle les espèces chimiques (atomiques, ioniques ou moléculaires) qui constituent la matière sont

modifiées : les espèces qui sont consommées sont appelées réactifs. Les réactions chimiques provoquent un changement de la nature chimique de la matière, sont donc exclues les transformations purement physiques, comme les changements d'état (fusion, solidification, évaporation, ébullition, etc.), l'usure et l'érosion, et la rupture. Une réaction peut dégager de l'énergie (en général sous forme de chaleur, mais aussi de la lumière), elle est alors dite « exothermique ». Elle peut nécessiter un apport d'énergie, sous forme de chaleur (donc « produire du froid ») ou de la lumière, elle est alors dite « endothermique ». D'une manière générale, une réaction ne peut avoir lieu que si certaines conditions sont réunies (présence de tous les réactifs, conditions de température, de pression, de lumière). Certaines réactions nécessitent ou sont facilitées par la présence d'une substance chimique appelée catalyseur.

La connaissance de la valeur de la constante d'équilibre d'une réaction nous permet de dire si la réaction est favorable ou non du point de vue thermodynamique. La constante d'équilibre cependant ne nous fournit aucune information sur la vitesse à laquelle la réaction aura lieu. Si certaines réactions, comme les réactions acide-base, sont très rapides d'autres sont très lentes. La réaction des minéraux d'une roche avec l'eau, souvent favorable du point de vue thermodynamique, se fait pendant des milliers d'années. La combustion de la matière organique, thermodynamiquement favorable, ne réagit avec l'oxygène qu'à une vitesse imperceptible. Les systèmes vivants doivent également leur existence à leur capacité de pouvoir régler la vitesse des réactions chimiques se déroulant dans l'organisme. L'étude de la vitesse d'une réaction chimique se fait par la cinétique chimique. Dans ce qui suivra on présentera quelques-uns des facteurs influençant la vitesse d'une réaction chimique.

La plupart des réactions chimiques se déroulent en plusieurs étapes, c'est-à-dire qu'elles évoluent par des réactions chimiques élémentaires successives. Par exemple, la réaction globale : $A + B + C \rightarrow D + E$ pourrait se passer en deux : (1) $A + B \rightarrow D + X$; (2) $X + C \rightarrow E$. Les deux étapes sont des réactions élémentaires. Chaque étape aura sa propre vitesse et la vitesse de la réaction globale sera une fonction de ces deux vitesses. La série d'étapes par laquelle la réaction a lieu s'appelle le mécanisme de la réaction. Dans certains cas, une des étapes sera beaucoup plus lente que les autres, la vitesse de la réaction globale sera alors essentiellement égale à la vitesse de la réaction la plus lente.

La vitesse d'une réaction chimique dépend de plusieurs paramètres :

- concentration des réactifs ;
- température ;

- solvant utilisé ;
- présence éventuelle d'un catalyseur

I.2.1 Effet de la concentration

Soit la réaction : $A + B \rightarrow C$

La vitesse V de la réaction est donnée par la variation des concentrations de A, B ou C en fonction du temps :

$$V = -d[A]/dt = -d[B]/dt = d[C]/dt \quad (\text{I.16})$$

Il a été trouvé expérimentalement que la vitesse dépendait de la concentration de réactifs selon la loi de vitesse :

$$V = -d[A]/dt = k[A]^x [B]^y \quad (\text{I.17})$$

Où k est la constante de vitesse pour la réaction considérée (k dépend de la température et du solvant), x et y sont les ordres partiels de la réaction par rapport à A et B respectivement. L'ordre global est donné par $(x + y)$. Les expressions de la loi de vitesse pour différents ordres sont alors :

Ordre zéro : $V = k$ (constante indépendante de la concentration)

Premier ordre : $V = k[A]$ ou $k[B]$

Deuxième ordre : $V = k[A].[B]$ ou $k[A]^2$ ou $k[B]^2$

Troisième ordre : $V = k[A].[B].[C]$ ou $k[A]^2[B]$

La variation de la concentration des réactifs en fonction du temps peut être obtenue en intégrant l'équation différentielle donnant la loi de vitesse.

I.2.2 Influence de la température

D'après la théorie d'Arrhénius, la température influence la constante de vitesse selon :

$$k = A_{Arrh} e^{-\left(\frac{E_a}{RT}\right)} \quad (\text{I.18})$$

A_{Arrh} : constante indépendante de la température

R : constante des gaz parfaits = (8.314 J/K mol)

T = température (K)

E_a = énergie d'activation (J / mol)

Dans la plupart des cas, la vitesse double approximativement pour une augmentation de la température de 10 K. Dans cette théorie, on considère que la réaction chimique résulte de la collision entre les molécules possédant une certaine énergie minimale appelée l'énergie d'activation E_a .

I.2.3 Les catalyseurs

Dans le but d'augmenter la vitesse d'une réaction, on utilise souvent un catalyseur chimique (Figure I.6). Métal, ion, complexe ou encore enzyme, il interagit avec les molécules des réactifs pour accélérer leur transformation et obtenir plus rapidement les produits de la réaction. Certains catalyseurs sont sélectifs et privilégient la formation d'un produit parmi d'autres possibles. On distingue trois types de catalyses : la catalyse hétérogène, la catalyse homogène et la catalyse enzymatique.

Un catalyseur modifie le mécanisme réactionnel de la réaction étudiée, c'est-à-dire la nature des étapes permettant de passer des réactifs aux produits. En aucun cas, il ne pourra modifier le sens d'évolution d'un système et son état d'équilibre. Il influence uniquement sur la cinétique de la réaction chimique considérée. Il n'est pas consommé et se retrouve inaltéré à la fin de la réaction. Il suffit alors d'une très petite quantité de catalyseur pour transformer rapidement une grande quantité de réactifs. Un même catalyseur ne peut pas être efficace pour toutes les réactions. En général, un catalyseur catalyse une réaction déterminée et une réaction donnée ne peut être catalysée que par un nombre restreint de catalyseurs. On dit qu'un catalyseur est spécifique d'un type de réaction. Un catalyseur peut également être sélectif si, à partir d'un système initial susceptible d'évoluer selon plusieurs réactions, il accélère préférentiellement l'une d'elles. La plupart des procédés de synthèse industriels emploient des catalyseurs. Leur utilisation permet une augmentation de la vitesse de réaction et évite aux entreprises des coûts énergétiques trop importants. En effet, une hausse de la température du milieu a le même effet cinétique que l'utilisation d'un catalyseur.

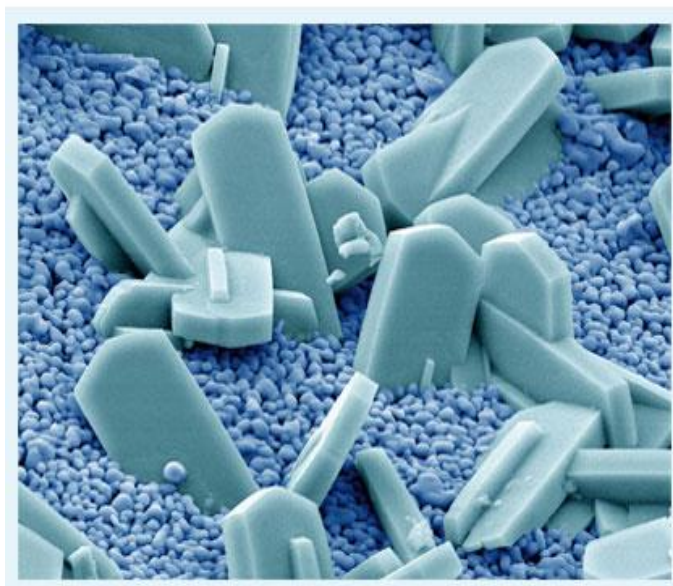


Figure I.6 : Cristaux de zéolithes sur une surface en alumine vus au microscope électronique [3]

I.2.3.1 Catalyse hétérogène

Lorsque le catalyseur est solide et que les réactifs sont gazeux ou en solution aqueuse, on parle de catalyse hétérogène. Les réactifs et le catalyseur n'évoluent alors pas dans la même phase. En catalyse hétérogène, la surface du catalyseur solide en contact avec les réactifs joue un rôle primordial dans la réaction. En effet, c'est à ce niveau que les espèces réagissent entre elles et se transforment pour finalement libérer les produits de la réaction. La surface du catalyseur en contact avec les réactifs est appelée surface active. Un catalyseur est d'autant plus efficace que sa surface active est grande. Certaines configurations permettent d'augmenter la surface active. C'est pourquoi on utilise souvent les catalyseurs sous des formes très divisées : poudres, mousses (Figure I.7) ou fils très fins tissés sous forme de toile. Dans l'industrie chimique, la synthèse de l'ammoniac NH_3 est un exemple d'utilisation de la catalyse hétérogène.

La catalyse hétérogène s'applique également à l'industrie de l'automobile. Pour lutter efficacement contre la pollution atmosphérique, les voitures sont aujourd'hui équipées de pots catalytiques. En effet, les voitures à essence contribuent à la pollution de l'air car le moteur ne réalise pas une combustion parfaite du mélange air-essence. Le moteur produit ainsi de l'eau H_2O , du dioxyde de carbone CO_2 mais aussi des gaz nocifs tels que du monoxyde de carbone CO , des hydrocarbures et des oxydes d'azote NO_x . Pour remédier à ces émissions polluantes, un mélange de catalyseurs solides, composé de palladium Pd, de platine Pt et de rhodium Rh, est ajouté sur le trajet de ces gaz, c'est-à-dire dans le pot d'échappement. Les gaz nocifs sont ainsi réduits ou oxydés, selon les cas, en gaz inoffensifs (H_2O , CO_2 , N_2).



Figure I.7 : Catalyseur mousse utilisé au niveau du pot d'échappement des automobiles [3]

I.2.3.2 Catalyse homogène

Lorsque le catalyseur et les réactifs sont tous gazeux ou tous en solution (dans l'eau ou dans un autre solvant), on parle de catalyse homogène (Figure I.8). Le catalyseur et les réactifs sont donc dans la même phase. En catalyse homogène, l'efficacité d'un catalyseur est d'autant plus grande que sa concentration en solution est élevée. Cependant, une fois la concentration limite du catalyseur atteinte, l'efficacité de celui-ci n'évolue plus. Beaucoup de réactions de chimie organique utilisent la catalyse homogène. La réaction d'hydroformylation des alcènes permet, par exemple, la préparation d'aldéhydes ($R-CO-H$) linéaires et ramifiés.

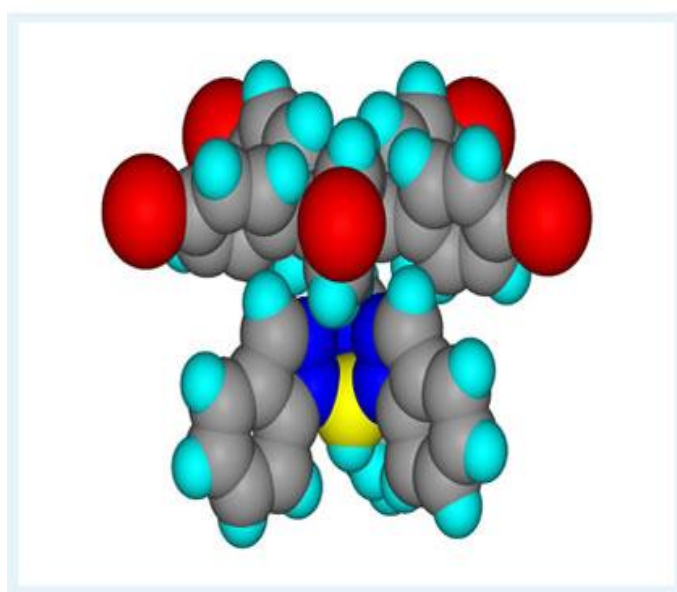


Figure I.8 : Cœur d'un complexe organo-métallique [3]

I.2.3.3 Catalyse enzymatique

Les enzymes sont des molécules biologiques agissant comme des catalyseurs. Ce sont des protéines, c'est-à-dire des molécules constituées par l'enchaînement de plusieurs centaines d'acides aminés. Lorsqu'une réaction est catalysée par une enzyme, on parle de catalyse enzymatique (Figure I.9). D'origine biologique, les enzymes sont des espèces chimiques comme les autres qui obéissent à des lois physico-chimiques. Au cours d'une réaction de catalyse enzymatique, les réactifs sont en solution dans la même phase liquide que l'enzyme. La catalyse enzymatique est donc un cas particulier de la catalyse homogène. Les réactions pouvant être catalysées par les enzymes s'effectuent dans des conditions souvent qualifiées de douces, c'est-à-dire à la température de l'organisme qui les abrite (37 °C pour l'organisme humain) et à un pH peu éloigné de la neutralité (aux alentours de pH = 7). Lorsque les conditions de température ou de pH sont trop faibles ou trop élevées, l'efficacité du catalyseur est réduite, voire nulle. Outre leur importance dans certains processus biologiques chez les êtres vivants, les enzymes sont également utilisées dans l'industrie. Elles permettent la transformation de l'amidon présent dans l'orge en acides aminés et en sucres fermentescibles. La très grande efficacité des enzymes, leur sélectivité ainsi que les conditions très douces dans lesquelles elles interviennent suscitent un grand intérêt auprès des industriels. Cependant, cet essor est pour l'instant limité par la difficulté à recycler les enzymes.



Figure I.9 : Structure cristallographique du domaine catalytique d'une enzyme appartenant à la famille des poly ADP-ribose polymérase [3]

I.2.3.4 Cycle catalytique

En catalyse de contact, la réaction se déroule généralement entre réactifs adsorbés à la surface du catalyseur. Il est évident que le nombre de molécules de réactifs consommées dans un temps donné est directement lié au nombre de sites catalytiques disponibles. Il est dès lors logique de maximiser le nombre de sites catalytiques accessibles aux réactifs en dispersant l'espèce catalytique à la surface d'un support. Plus la surface de ce dernier est élevée, meilleure est la dispersion de l'espèce catalytique active. Le cycle catalytique comporte sept étapes qui peuvent avoir une influence plus ou moins importante sur la vitesse de la transformation :

- 1) diffusion des réactifs de la phase fluide vers la surface du grain de catalyseur
- 2) diffusion des réactifs dans la porosité du catalyseur
- 3) adsorption des réactifs sur les sites actifs
- 4) interaction en surface des réactifs adsorbés
- 5) désorption des produits des sites catalytiques
- 6) diffusion des produits vers la surface externe du grain de catalyseur
- 7) diffusion des produits de la surface du grain vers le milieu entourant le catalyseur.

Les étapes 1, 2, 6 et 7 correspondent à des phénomènes physiques de transfert de matière (et de chaleur) vers le grain du catalyseur et à l'intérieur de ce grain généralement poreux. Les étapes 3, 4 et 5 correspondent à des phénomènes chimiques dont l'ensemble constitue la transformation chimique proprement dite. Il est très important de différencier ces deux types de phénomènes lorsqu'on étudie un catalyseur. En effet, suite aux phénomènes de diffusion, les conditions de concentration et de température au niveau du site actif peuvent être différentes de celles qui prévalent dans la phase fluide et qui sont les seules mesurables.

I.3 Fluides non-Newtoniens

Dans le cas d'un fluide Newtonien incompressible en écoulement laminaire, la contrainte de cisaillement est égale au produit du taux de cisaillement et de la viscosité du milieu fluide. Pour cette situation, le taux de cisaillement peut être exprimé comme étant le gradient de vitesse dans la direction perpendiculaire à la force de cisaillement :

$$\tau_{xy} = \mu \left(-\frac{du}{dy} \right) = \mu \dot{\gamma}_{xy} \quad (\text{I.19})$$

Où τ_{xy} , μ et $\dot{\gamma}_{xy}$ sont respectivement, la contrainte de cisaillement, la viscosité du fluide et le gradient de vitesse (appelé aussi taux de déformation). Le signe négatif de l'équation (I.19) indique qu'il s'agit d'une mesure de la résistance au mouvement. Le profil de la contrainte de cisaillement τ_{xy} en fonction du taux de cisaillement pour un fluide Newtonien, est une droite de pente passant par l'origine. Les gaz, les liquides organiques simples, les métaux fondus et les sels sont tous des fluides Newtoniens.

Les fluides non-Newtoniens sont des fluides dont la viscosité ne suit pas la loi de Newton exprimée par la relation (I.19). Pour ces fluides, la relation entre la contrainte de cisaillement et le taux de déformation est non linéaire. La viscosité est variable même si même la température et la pression sont constantes. On peut classer ces fluides en trois grandes catégories selon **Chhabra et Richardson [4]** (Figure I.9).

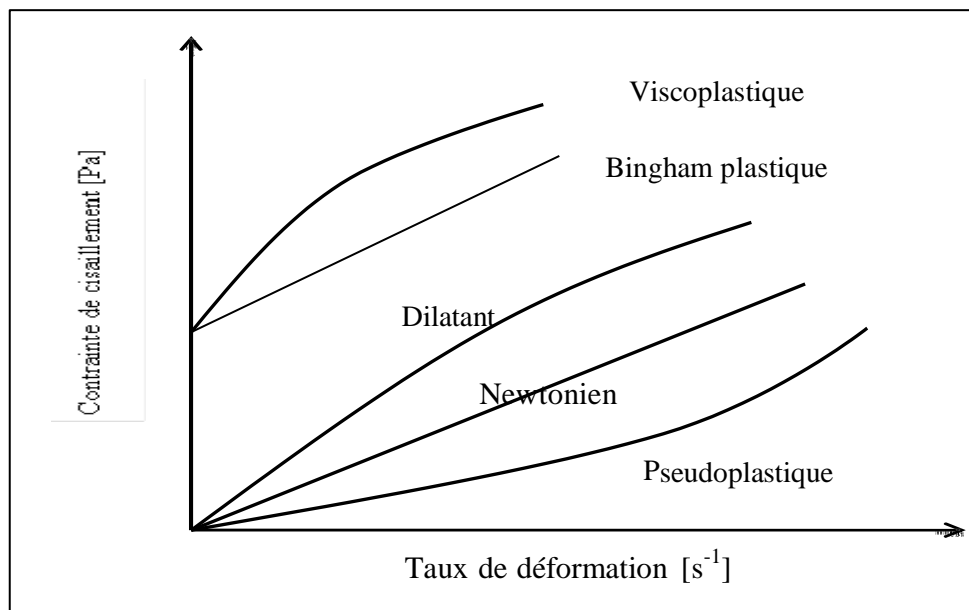


Figure I.10 : Comportement rhéologiques des fluides non-Newtoniens à comportement indépendant du temps (**Chhabra et Richardson [4]**)

I.3.1 Fluides à comportement indépendant du temps

Ce sont des fluides dont le taux de déformation dépend uniquement de la contrainte de cisaillement appliquée. Le comportement rhéologique peut être décrit par la relation :

$$\dot{\gamma}_{xy} = f(\tau_{xy}) \quad (\text{I.20})$$

Ils sont généralement appelés fluides purement visqueux. Il existe trois catégories de fluides :

I.3.1.1 Fluides pseudoplastiques ou rhéo-fluidifiants

Les fluides pseudoplastiques ou rhéo-fluidifiants sont caractérisés par une viscosité apparente (rapport entre la contrainte de cisaillement et le taux de déformation) qui diminue au fur et à mesure que la contrainte de cisaillement appliquée augmente. Autrement dit, la structure de fluide subit des modifications entre les états de repos et d'écoulement. Parmi les fluides pseudoplastiques on rencontre par exemple : les solutions et les suspensions aqueuses concentrées (certains polymères, pâte à papier, purée de fruit, moutarde, etc.).

I.3.1.2 Fluides dilatants ou rhéo-épaississants

Ce sont des fluides caractérisés par une viscosité apparente qui augmente avec la contrainte de cisaillement. En effet, le fluide mouille les particules et les colle les unes aux autres, ce qui permet d'amortir la contrainte et par conséquent d'augmenter la résistance au cisaillement. On retrouve ce type de comportement dans les suspensions solides fortement concentrées, telles que les peintures, les vernis, les colles, etc.

I.3.1.3 Fluides viscoplastiques

Ce sont des fluides caractérisés par une contrainte de cisaillement résiduelle τ_0 (contrainte interne). Pour des valeurs de la contrainte de cisaillement supérieures à τ_0 , le fluide peut s'écouler ou se déformer. Comme il a été montré par **Chhabra et Richardson** [4], ces types de fluides peuvent avoir un comportement linéaire ou non linéaire. Les fluides viscoplastiques à comportement linéaire sont appelés « fluides plastiques de Bingham », leur viscosité plastique étant constante. Exemples : solutions savonneuses, solutions de polymères, etc.

I.3.2 Fluides à comportement dépendant du temps

La viscosité de ces fluides varie en fonction du temps et dépend des traitements antérieurs. Il existe trois catégories :

I.3.2.1 Fluides thixotropes

Les fluides thixotropes ont une viscosité effective qui diminue en fonction de temps lorsqu'une contrainte (un taux de cisaillement) constante est appliquée. Comme la caractéristique du fluide dépend de son histoire, les mesures rhéologiques deviennent complexes car il existe des effets d'hystérésis (effets de mémoire). Parmi les fluides thixotropes, on peut citer le yaourt, certaines boues de forages pétroliers, certains gels, etc.

I.3.2.2 Fluides antithixotropes

L'antithixotropie est le phénomène inverse de la thixotropie : le fluide durci par agitation. C'est le cas des suspensions aqueuses de gypse.

I.3.2.3 Fluides viscoélastiques

Les fluides viscoélastiques sont très fréquents dans les solutions des polymères et dans les polymères fondus. Ces fluides présentent à la fois un aspect visqueux et un aspect élastique. Un exemple de fluide viscoélastique est la pâte de silicone. Une boule de silicone rebondit sur le sol comme une balle élastique (aux temps courts) mais s'étale comme un fluide visqueux (aux temps longs) sur une surface horizontale.

I.3.3 Modèles mathématiques

I.3.3.1 Milieux non poreux

Plusieurs modèles mathématiques ont été proposés dans la littérature pour modéliser le comportement des fluides non-Newtoniens. Dans cette thèse, on s'intéresse en particulier aux fluides à comportement indépendant du temps et plus particulièrement aux fluides dilatants et pseudoplastiques. Pour ces types de fluides, le modèle empirique de la loi en puissance proposée par **Ostwald de Waele (1925)** est le plus utilisé. Un grand nombre de modèles rhéologiques ont été proposés dans la littérature pour modéliser tous les types de fluides non-Newtoniens sous diverses conditions d'écoulement. Cependant, la majorité de ces modèles sont essentiellement de nature empirique et découlent d'exercices d'ajustement des courbes. Quelques exemples de modèles de fluides non-Newtoniens en milieux non poreux sont présentés dans le Tableau I.1.

Modèle	Equation
Power -law	$\mu = C\dot{\gamma}^{n-1}$
Ellis	$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \left(\frac{\tau}{\tau_{1/2}}\right)^{\alpha-1}}$
Carreau	$\mu = \mu_\infty + \frac{\mu_0 - \mu_\infty}{[1 + (\dot{\gamma} t_c)^2]^{\frac{1-n}{2}}}$
Herschel-Bulkley	$\tau = \tau_0 + C\dot{\gamma}^n (\tau > \tau_0)$
Maxwell	$\tau + \lambda_1 \frac{\partial \tau}{\partial t} = \mu_0 \dot{\gamma}$
Jeffreys	$\tau + \lambda_1 \frac{\partial \tau}{\partial t} = \mu_0 \left(\dot{\gamma} + \lambda_2 \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial t} \right)$
Upper Convected Maxwell	$\tau + \lambda_1 \tau^\nabla = \mu_0 \dot{\gamma}$
Oldroyd-B	$\tau + \lambda_1 \tau^\nabla = \mu_0 (\dot{\gamma} + \lambda_2 \dot{\gamma}^\nabla)$
Godfrey	$\mu(t) = \mu_i - \Delta\mu' (1 - e^{-t/\lambda'}) - \Delta\mu'' (1 - e^{-t/\lambda''})$
Modèle exponentiel ajusté	$\mu(t) = \mu_i + (\mu_{inf} - \mu_i) \left(1 - e^{-\lambda(t/\lambda_s)^c} \right)$

Tableau I.1 : Exemples de modèles rhéologiques non-Newtoniens [5]

Avec :

∇ Dérivée temporelle convective supérieure, α Paramètre rhéologique, $\dot{\gamma}$ Taux de déformation
 $\dot{\gamma}$ Tenseur du taux de déformation, λ_1 Temps de relaxation, λ_2 Temps de retardation,
 λ', λ'' Constantes du temps, μ Viscosité, μ_i Viscosité du temps initial, μ_{inf} Viscosité du temps à
infini, μ_0 Viscosité de cisaillement au point 0, μ_∞ Viscosité de cisaillement à l'infini

$\Delta\mu', \Delta\mu''$ Déficits de Viscosité, τ Contrainte, $\boldsymbol{\tau}$ Tenseur de Contrainte, $\tau_{1/2}$ Contrainte où $\mu =$
 $\mu_0/2$, τ_0 Contrainte de rendement, c constante adimensionnelle, C Facteur de consistance, n
Index du comportement de l'écoulement, t temps, t_c temps caractéristique du système
d'écoulement.

I.3.3.2 Milieux poreux

Il existe peu de modèles modélisant l'écoulement des fluides non-Newtoniens en milieux
poreux [6]. En adoptant une loi de comportement de type Ostwald, une expression
empirique de la viscosité apparente μ_a du fluide a été proposée par Pascal [7, 8], à savoir :

$$\mu_a = \hat{\varepsilon} (u^2 + v^2)^{(n-1)/2} \quad (\text{I.21})$$

L'expression du coefficient $\hat{\varepsilon}$ est donnée par la relation suivante :

$$\hat{\varepsilon} = 2\mu / \left(8^{\frac{(n+1)}{2}} (K\varepsilon)^{\frac{(n-1)}{2}} \left(\frac{n}{1+3n} \right)^n \right) \quad (\text{I.22})$$

Le paramètre $\hat{\varepsilon}$ dépend du comportement rhéologique, de la viscosité dynamique μ , de la porosité ε et de la perméabilité du milieu poreux K .

Conclusion

Ce chapitre nous a permis de définir certaines caractéristiques des milieux poreux, ainsi que des notions relatives aux réactions chimiques. Il nous a aussi permis d'opter pour le modèle en loi de puissance proposé par **Ostwald de Waele** qui est le plus utilisé dans la littérature. Le prochain chapitre sera consacré à une synthèse bibliographique sur les phénomènes de transfert dans des canaux partiellement ou totalement poreux anisotropes en écoulement oscillatoire avec ou sans réaction chimique.

RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE

Introduction

Les échanges de chaleur et de masse dans des milieux poreux sont d'un intérêt pratique certain ce qui a donné lieu à un nombre important de travaux de recherche. Ce chapitre s'oriente dans ce sens où il s'agira de présenter une revue bibliographique synthétique faisant état de l'art sur les écoulements oscillatoires des fluides non-Newtoniens dans les milieux poreux anisotropes en présence d'une réaction chimique.

II.1 Régime oscillatoire

L'écoulement en régime oscillatoire dans les milieux poreux est considéré comme un moyen d'amélioration des transferts. Ce type d'écoulement est rencontré dans de nombreuses applications industrielles telles que les systèmes de réfrigération, les régénérateurs, les échangeurs de chaleur pulsés, etc.

Plusieurs études ont été consacrées à l'effet d'un écoulement oscillatoire dans un milieu poreux. Nous pourrions citer **Sözen et Vafai**. [9] qui ont étudié numériquement l'intérêt de conditions aux limites d'entrée oscillatoires pour la pression et la température sur le transfert convectif d'un gaz. **Kim et al.** [10] ont réalisé une étude numérique des caractéristiques du transfert de chaleur, en écoulement pulsé, dans un canal totalement poreux et dont les parois sont maintenues à des températures uniformes. Les résultats sont présentés pour l'état périodique établi. Les champs dynamique et thermique sont examinés pour différentes valeurs du nombre de Darcy, de la fréquence et amplitude de pulsation, du rapport des conductivités thermiques et du rapport des capacités calorifiques. En comparaison par rapport au cas d'un écoulement non pulsé, la présence de pulsations apporte une réduction du transfert de chaleur à l'entrée du canal et une amélioration du taux de chaleur transmis dans les régions du milieu, alors que plus loin en aval l'influence de la pulsation est faible. L'effet de la pulsation sur le transfert de chaleur entre les parois du canal et le fluide est plus prononcé aux faibles fréquences et grandes amplitudes de pulsation. Une étude expérimentale a été menée par **Hall et al.** [11] avec l'eau comme fluide de travail s'écoulant dans un tube en régime oscillatoire. Le but était de voir quel effet a l'inertie temporelle sur la résistance d'un milieu granulaire. Pour décrire les phénomènes observés, les auteurs de ce papier se sont

basés sur l'équation de Forchheimer et ont fait une extrapolation des résultats obtenus en régime stationnaire pour résoudre l'équation du régime oscillatoire. L'équation de Forchheimer modifiée ($i = aq + bq^2 + C \frac{dq}{dt}$, i étant le gradient hydraulique et q la vitesse moyenne de l'écoulement) a permis de définir le coefficient d'accélération C représentatif des forces inertielles temporelles. Les résultats de ce travail montrent que l'équation précédente peut être résolue pour le mode oscillatoire sans passer par les résultats du mode stationnaire. Les résultats indiquent aussi que le coefficient d'accélération C semble être constant pour un milieu donné et la soustraction de la composante inertielle de la résistance a mené à une représentation en ligne droite de la forme : $C = a_0 + b_0|q|$. **Guo et al. [12]** ont effectué une étude numérique dans une conduite circulaire partiellement remplie d'un milieu poreux et dont la paroi est maintenue à flux constant. Le régime est supposé dynamiquement et thermiquement établi avec un gradient de pression longitudinal variant sinusoidalement dans le temps. Ils ont analysé les effets de la perméabilité, de l'épaisseur et de la conductivité thermique de la matrice poreuse ainsi que l'influence de la fréquence et de l'amplitude de pulsation sur les caractéristiques de l'écoulement et du transfert de chaleur. La plus grande valeur de la diffusivité thermique effective a été obtenue pour un écoulement pulsé dans un conduit partiellement poreux plutôt que les cas limites non poreux ou totalement poreux. Il a été aussi trouvé des valeurs optimales de l'épaisseur de la couche poreuse et de la fréquence de pulsation pour lesquelles le transfert de chaleur est maximal. Une analyse similaire à la précédente a été menée par **Guo et al. [13]** dans un espace annulaire où une couche poreuse est attachée sur la surface extérieure du tube interne. Ils ont conclu qu'une augmentation significative du transfert thermique et une réduction de la chute de pression peuvent être réalisées en remplissant partiellement d'un matériau poreux très conducteur de chaleur et en employant un écoulement pulsé. Des expériences ont été réalisées par **Fu et al. [14]** dans un canal poreux soumis à un écoulement pulsé. Ils ont constaté que le nombre de Nusselt moyen est plus important en régime oscillatoire qu'en régime stationnaire. Le travail expérimental de **Leong et Jin. [15]** est une extension de celui de **Fu et al. [14]** où il s'agit d'étudier plus particulièrement l'influence de la fréquence et de l'amplitude de pulsation. Il a été constaté une amélioration du transfert thermique par accroissement du nombre de Reynolds cinétique et de l'amplitude. En contre parti, la chute de pression est augmentée avec ces deux paramètres. Une corrélation liant le nombre de Nusselt moyen aux paramètres de l'écoulement pulsé, pouvant être d'une grande aide pour le refroidissement des composants

électroniques, a été établie. **Bhargava et al. [16]** ont présenté une solution numérique par la méthode des éléments finis pour un fluide non-Newtonien et pulsé dans un canal poreux. Il a été montré que les vitesses augmentent avec l'augmentation de la perméabilité, la réduction des effets inertiels et la diminution du comportement non-Newtonien. Ce travail illustre également que des vitesses beaucoup plus faibles sont générées en régime stationnaire en comparaison au cas de l'écoulement pulsé. Le travail de **Huang et Yang [17]** est une simulation numérique de la convection forcée en écoulement pulsé dans un canal à plaques parallèles muni sur sa paroi inférieure de deux blocs poreux chauffés localement. Les améliorations de transfert de chaleur dues à la présence d'une part, des blocs poreux et d'autre part, de l'écoulement pulsé ont été examinées. Les résultats montrent que le changement périodique de la structure de l'écoulement par la présence des blocs poreux et le régime oscillatoire a un impact direct sur les caractéristiques dynamiques et thermiques. En plus, il a été constaté que des choix judicieux de certains paramètres gouvernants liés aux blocs poreux (perméabilité et taille) et à l'écoulement (fréquence et amplitude) peuvent conduire à des améliorations significatives du transfert de chaleur. Ces auteurs ont conclu que la méthode combinant un écoulement pulsé et des blocs poreux peut être considérée comme un bon outil pour l'augmentation du refroidissement des équipements électroniques. Dans le même contexte, **Huang et al. [18]** ont utilisé un écoulement pulsé pour l'étude du refroidissement de blocs solides, simulant des composants électroniques, sur lesquels sont placés des couvercles poreux. Les résultats montrent, entre autres, que le taux d'amélioration du transfert de chaleur augmente avec l'amplitude de pulsation, la hauteur des couvercles poreux, et le rapport des conductivités thermiques, mais diminue avec la largeur des couvercles. Cependant, les évolutions avec le nombre de Darcy, le nombre de Strouhal et l'espacement entre les couvercles n'est pas monotone. Ainsi, il existe une valeur critique pour laquelle la performance thermique est minimale (pour le nombre de Darcy) et maximale (pour le nombre de Strouhal et l'espacement des blocs). En raison de l'accroissement de la chute de pression, ces auteurs ont conclu qu'il faut considérer une limite de tolérance, afin de déterminer l'amplitude de pulsation optimale en fonction des paramètres géométriques des blocs et leurs couvercles. **Pamuk et Özdemir [19]** ont présenté une étude expérimentale du transfert de chaleur dans un écoulement d'eau oscillant à travers un milieu poreux formé de billes d'acier. Pour une configuration donnée du milieu poreux, le nombre de Nusselt moyen est corrélé avec le nombre de Reynolds cinétique et le déplacement adimensionnel du fluide. Une corrélation générale du coefficient d'échange, indépendante des propriétés du fluide et du type

du milieu poreux, a été établie. Des simulations numériques ont été effectuées par **Targui et Kahalerras [20]** dans le but d'analyser l'influence de l'utilisation simultanée de chicanes poreuses et d'écoulement oscillatoire sur les performances d'un échangeur de chaleur à tubes concentriques. Les résultats révèlent que l'ajout d'une composante oscillatoire à l'écoulement moyen affecte la structure de l'écoulement, et améliore le transfert de chaleur par rapport à l'écoulement non pulsé. La performance la plus élevée de l'échangeur de chaleur est obtenue pour la configuration à écoulement du fluide chaud oscillatoire. **Dey et Sekhar [21]** ont présenté une étude du transfert de masse en écoulement oscillatoire dans un milieu poreux. Il a été trouvé qu'augmenter la fréquence angulaire ou le nombre de Womersely entraîne un accroissement du taux de transport de deux espèces différentes.

II.2 Fluides non-Newtoniens

Dans plusieurs industries où il y a présence de milieux poreux, les fluides impliqués peuvent présenter un comportement non-Newtonien. Des exemples d'applications d'ingénierie sont la récupération améliorée du pétrole, la technologie alimentaire, le traitement des matériaux, le traitement par filtration, les réacteurs à lit fixe, l'ingénierie géothermique, les systèmes d'isolation et bien d'autres. Ainsi, un grand nombre de chercheurs ont été attirés par ce sujet. **Nakayama et Shenoy [22]** ont analysé le transfert de chaleur par convection forcée, en régime non-Darcien, dans un canal limité par deux parois parallèles soumises à un flux thermique uniforme dans un milieu fortement poreux saturé d'un fluide non-Newtonien de type loi de puissance. Des simulations numériques poussées ont été réalisées dans le but d'étudier les effets de pseudoplasticité, et des termes de Brinkman et Forchheimer sur les caractéristiques de transfert de chaleur. Le problème de convection forcée dans un canal totalement poreux saturé d'un fluide obéissant au modèle en loi de puissance a été étudié par **Chen et Hadim [23]**. En régime non-Darcien, ils ont obtenu une augmentation du taux de transfert de chaleur et une réduction de la perte de charge avec la diminution de l'indice de puissance. Avec l'augmentation du nombre de Prandtl, il y a accroissement du nombre de Nusselt local ; cet effet est plus important pour les fluides à indice $n < 1$. **Al-Nimr et Aldoss [24]** ont étudié numériquement le comportement hydrodynamique transitoire d'un fluide non-Newtonien en loi de puissance dans des canaux horizontaux à plaques parallèles remplis de milieux poreux. Pour la gamme des nombres de Darcy et Forchheimer considérée, ils ont trouvé que le terme inertiel macroscopique local a un effet négligeable pour les fluides à indice de puissance inférieur à 0.5, et que cette influence devient significative pour des

valeurs de n supérieures à l'unité. Une analyse numérique de la convection forcée d'un fluide en loi de puissance dans un canal à section carrée 3D partiellement rempli d'un milieu poreux a été menée par **Nebali et Bouhadeb [25]**. Les résultats indiquent, entre autres, que le rapport de conductivités thermiques poreux-fluide a un fort impact sur l'amélioration du transfert de chaleur à grande perméabilité, alors que cet effet est significatif au-delà d'une épaisseur critique de la couche poreuse à faible perméabilité. Ils ont trouvé aussi que la présence du substrat poreux provoque une augmentation significative de la perte de charge qui s'avère plus importante avec les fluides dilatants ($n > 1$). **Chen et al. [26]** ont utilisé le modèle de Boltzmann sur réseaux pour étudier l'écoulement d'un fluide en loi de puissance dans un canal à plaques parallèles partiellement rempli d'un substrat poreux. Les résultats indiquent que la vitesse de glissement à l'interface fluide – poreux augmente avec l'indice de puissance pour un milieu poreux donné, et avec la porosité du milieu poreux pour un type de fluide donné. L'effet de la dissipation visqueuse sur les caractéristiques du transfert thermique en convection forcée dans un canal poreux saturé d'un fluide non-Newtonien de type loi de puissance a été considéré par **Chen et Tso [27]**. La comparaison par rapport à un fluide Newtonien a permis de trouver que la différence entre les nombres de Nusselt pour $n = 1$ et $n \neq 1$ est d'autant plus grande que le nombre de Brinkman est important et ceci pour une certaine plage de variation du nombre de Darcy. **Alsabery et al. [28]** ont utilisé la technique de la ligne de chaleur pour visualiser la convection naturelle dans une cavité trapézoïdale inclinée remplie partiellement d'une couche poreuse saturée d'un nanofluide et partiellement avec un fluide non-Newtonien. Il est montré que la convection augmente remarquablement par l'ajout du nanofluide argent-eau et que le taux de transfert de chaleur est affecté par l'angle d'inclinaison de la cavité. Un modèle mathématique a été proposé par **Silva et al. [29]** afin de simuler l'écoulement et le transfert de chaleur des fluides Newtonien et en loi de puissance dans des canaux poreux et non obstrués. Les résultats indiquent que la perte de charge est fonction de la porosité, du nombre de Darcy et de l'indice de comportement du fluide.

II.3 Anisotropie

Bien que les milieux poreux les plus rencontrés, soit de nature anisotrope, les études antérieures effectuées sont en particulier pour le cas isotrope. Récemment, une attention particulière a été portée aux milieux anisotropes. L'anisotropie se trouve dans de nombreux systèmes dans la nature et l'industrie comme la formation de roches, l'isolation thermique, les matériaux fibreux, etc. **Chang et Hsiao. [30]**, **Jingzhou et Ranqia. [31]** en étudiant le

problème de la convection naturelle dans des enceintes remplies de milieux poreux anisotropes, ont constaté que les rapports de perméabilité et de conductivité thermique ont des effets opposés sur le taux de transfert thermique. Le modèle de Brinkman a été utilisé par **Nithiarasu et al. [32]** dans le but d'étudier numériquement le transfert de chaleur par convection naturelle dans une enceinte horizontale remplie de milieux poreux anisotropes. Les parois inférieure et supérieure sont respectivement chauffée et refroidie, alors que les parois verticales sont adiabatiques. Ils ont trouvé qu'un rapport de perméabilités (K^*) important conduit à un faible transfert convectif. Plus grand est le rapport de conductivités thermiques (λ^*), plus importantes sont les distorsions des isothermes dans l'enceinte et une vitesse d'écoulement plus élevée près des parois. Les rapports de perméabilités et de conductivités thermiques ont des effets opposés sur le nombre de Nusselt qui tend vers l'unité dans les limite de $K^* \rightarrow \infty$ et $\lambda^* \rightarrow 0$. **Govender [33]** a étudié analytiquement le problème de la convection naturelle dans une couche poreuse anisotrope en rotation. Le modèle de Darcy associée à une équation d'énergie modifiée sont utilisés en tenant compte des effets des anisotropies centrifuge, mécanique et thermique. La théorie de la stabilité linéaire est employée pour évaluer le nombre de Rayleigh critique de naissance de la convection. Il a trouvé que la convection est stabilisée lorsque le rapport d'anisotropie thermique augmente en amplitude. Le problème de la convection naturelle a été entrepris par **Krishna et al. [34]** dans une cavité carrée bidimensionnelle contenant un milieu poreux hydrodynamiquement et thermiquement anisotrope avec génération de chaleur interne. Les résultats sont présentés en termes d'isothermes, de lignes de courant et de température maximale dans la cavité pour comprendre la physique associée. Les propriétés anisotropes ont une influence significative sur les caractéristiques de l'écoulement et du transfert de chaleur. Une solution analytique a été proposée par **Mobedi et al. [35]** en étudiant le transfert de chaleur par convection forcée laminaire et entièrement développée dans un canal horizontal à plaques parallèles rempli d'un milieu poreux de perméabilité anisotrope. Les résultats obtenus montrent que les paramètres A^* , Da et Br^* ont de forts effets sur les profils de vitesse et de température ainsi que sur le nombre de Nusselt. Pour une valeur particulière de A^* , appelée valeur critique Acr^* , le flux de chaleur externe appliqué aux parois du canal est équilibré par la génération interne de chaleur due à la dissipation visqueuse. Dans cette situation, la température moyenne s'approche de la température de la paroi, et par conséquent le nombre de Nusselt tend vers l'infini. **Negara et al. [36]** ont considéré différents scénarios d'anisotropie pour l'étude des écoulements multiphasiques dans des milieux poreux. À partir des résultats numériques,

émergent des modèles intéressants des champs d'écoulement, de pression et de saturation, qui sont significativement influencés par l'anisotropie du champ de perméabilité. Ils ont trouvé que les effets de l'orientation de l'anisotropie sur les débits et l'indice d'écoulement transversal sont significatifs. Récemment, **Hu et al. [37]** ont proposé un modèle de Boltzmann sur réseau à temps de relaxation multiple pour simuler l'écoulement et le transfert de chaleur dans un milieu poreux hydrodynamiquement et thermiquement anisotrope. Plusieurs problèmes de convection naturelle sont simulés afin de valider le modèle proposé. Les résultats numériques indiquent que l'utilisation d'une couche poreuse anisotrope avec certains paramètres optimaux peut produire un taux de transfert de chaleur plus élevé par rapport à la couche poreuse isotrope.

II.4 Réaction chimique

Durant ces dernières années, le transfert de chaleur et de masse dans les milieux poreux réactifs a reçu beaucoup d'attention de la part des chercheurs en raison de leurs applications dans les domaines de l'ingénierie chimique, du transport des contaminants dans les eaux souterraines et des réacteurs catalytiques. Dans ces processus, la réaction chimique peut se produire uniformément dans une phase donnée (réaction homogène) ou dans une région restreinte de la phase (réaction hétérogène). **Malashetty et al. [38]** ont effectué une analyse de stabilité linéaire pour étudier le début de l'instabilité convective dans une couche poreuse horizontale saturée d'un fluide subissant des réactions chimiques exothermiques d'ordre zéro. Les problèmes de valeurs propres qui en résultent ont été résolus en utilisant une méthode de Galerkin à un terme qui donne le nombre critique de Rayleigh et le nombre d'onde associé à un nombre de Frank-Kamenetskii donné. Ils ont constaté que, avec les réactions chimiques, le fluide dans le milieu poreux est plus enclin à l'instabilité que dans le cas où les réactions chimiques sont absentes. La convection naturelle le long d'une surface verticale immergée dans un milieu poreux en présence d'une réaction chimique exothermique de surface a été étudiée par **Minto et al. [39]**. Deux types de solution sont obtenues ; de similarité pour la région proche du bord d'attaque et asymptotique pour la zone loin en aval. Il a été trouvé une augmentation rapide et localisée de la température pour des faibles valeurs des paramètres de la réaction chimiques λ et ε . **Zhao et al. [40]** ont utilisé la méthode des éléments finis pour modéliser et prédire les structures dissipatives des espèces chimiques pour un système de réaction chimique hors équilibre dans un milieu poreux saturé. La comparaison des solutions numériques avec les solutions analytiques démontre que la méthode et la

stratégie numériques proposées sont suffisamment robustes pour résoudre ce type de problème. Enfin, les résultats numériques indiquent que le régime et l'amplitude de l'écoulement du fluide ont des effets significatifs sur la nature des structures dissipatives développées. Un modèle mathématique à deux dimensions a été développé par **Li et al. [41]** pour simuler les transferts couplés de chaleur et de masse dans un milieu poreux sujet à une forte réaction chimique endothermique. Les résultats numériques sont validés par comparaison avec les données expérimentales de la littérature. **Postelnicu [42]** a étudié la naissance de la convection dans une couche poreuse horizontale siège d'une réaction chimique catalytique sur la surface de la paroi inférieure. Les nombres d'ondes et les nombres de Rayleigh critiques donnant lieu à la naissance de la convection ont été déterminés pour différentes valeurs des paramètres du problème. Une analyse numérique des transferts couplés de chaleur et de masse dans un conduit cylindrique rempli d'un milieu poreux réactif en non-équilibre thermique local entre les phases solide et fluide a été réalisée par **Bousri et al. [43]**. Les effets d'un certain nombre de paramètres déterminants tels que le rapport de conductivités thermiques solide-fluide, le nombre de Reynolds, le nombre de Biot, ainsi que le nombre de Frank-Kamenetskii modifié sont étudiés. Les transferts de chaleur et de masse en régime de convection forcée pleinement développée ont été étudiés analytiquement par **Matin et Pop [44]** dans un canal poreux horizontal rempli d'un nanofluide en présence d'une réaction chimique d'ordre un localisée sur les parois. Le modèle de Darcy-Brinkman est utilisé pour décrire l'écoulement dans le milieu poreux en tenant compte de la dissipation visqueuse. Les effets de la fraction volumique des nanoparticules, des nombres de Darcy, Brinkman, Damkohler et Soret sur le nombre de Nusselt, la vitesse, la température et les distributions de concentration sont considérés. **Yang et al. [45]** ont exploré le problème des transports massique et thermique dans des milieux poreux sujets à des réactions de combustion hétérogènes. Ils ont montré que, dans les mêmes circonstances, le modèle ascendant est capable de prédire la vitesse frontale de combustion dans un écart acceptable de 1% par rapport à la solution analytique. Récemment, **Zhuang et al. [46]** ont utilisé un modèle de non-équilibre thermique local pour étudier la convection double diffusive 3D de fluides non-Newtoniens en loi de puissance avec réaction chimique dans le milieu poreux. Le paramètre de réaction chimique a une influence significative sur le transfert de masse plutôt que sur le transfert de chaleur. L'augmentation du nombre de Lewis améliore le transfert de masse mais réduit le transfert de chaleur. Le champ d'écoulement est influencé de manière significative

par l'indice de puissance, le nombre de Darcy, ainsi que le nombre de Rayleigh thermique poreux.

Conclusion

Cette recherche bibliographique, nous a permis de constater qu'il existe des travaux portant sur les transferts thermique et massique en présence soit d'écoulement oscillatoire, soit de milieux poreux anisotropes, soit de fluides non-Newtoniens, ou bien de réaction chimique. Cependant, ils sont rares les travaux qui combinent deux ou trois des phénomènes cités auparavant, et quasiment aucune étude tenant compte de tous ces phénomènes n'existe actuellement à notre connaissance ce qui fait l'objet de ce travail de thèse.

FORMULATION MATHÉMATIQUE

Introduction

Dans ce chapitre, nous allons définir le système physique étudié, nous poserons ensuite quelques hypothèses simplificatrices afin de mieux aborder la formulation mathématique. Les équations gouvernantes seront adimensionnées ainsi que les conditions aux limites associées. Enfin nous définirons les paramètres qui caractériseront les transferts de notre système.

III. 1. Domaine physique

La situation physique, représenté sur la figure III.1, consiste en un canal plan de longueur $\ell=30 H$ et constitué de deux plaques parallèles entre lesquelles circule un fluide non-Newtonien de type loi de puissance. Sur les parois du canal est placé un milieu poreux anisotrope en conductivité thermique effective et dont la porosité ε est uniforme. Le matériau poreux est disposé sous deux formes de sortes que leur volume soit identique: trois matrices poreuses d'épaisseur $e_{pm}=0.5H$ et de largeur $\ell_p=8H$ (Figure III. 1a), et une couche poreuse d'épaisseur $e_{pc}=0.4H$ (Figure III. 1b). Le fluide non-Newtonien pénètre dans le canal à une température uniforme T_e , une concentration C_e constante, et une vitesse oscillatoire $U_{osc}=U_e(1+A\sin 2\pi ft)$ ou A et f sont respectivement l'amplitude et la fréquence d'oscillation. Une réaction de surface, exothermique, est produite sur les parois et peut être représenté par une réaction d'ordre un, non-isotherme suivant la loi d'Arrhenius. A cause de la symétrie géométrique du problème, uniquement la partie inférieure du domaine physique sera considérée.

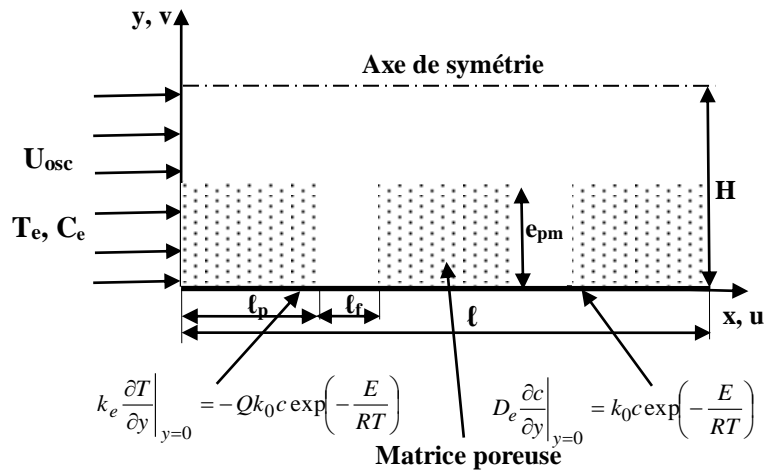


Figure III.1a : Domaine physique : matrices poreuses

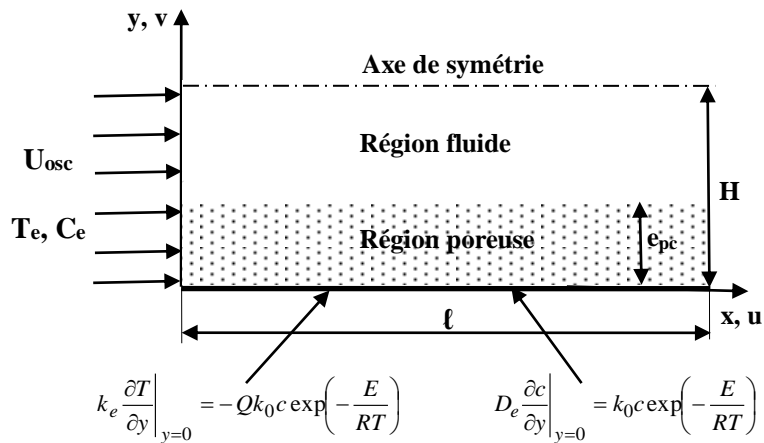


Figure III.1b : Domaine physique : couche poreuse

III.2 Modèle mathématique

III.2.1 Hypothèses de travail

Les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et de concentration sont formulées en adoptant les hypothèses de travail suivantes :

1. Le fluide est non-Newtonien et incompressible.
2. L'écoulement est bidimensionnel, laminaire et instationnaire.
3. Les propriétés thermo-physiques du fluide sont constantes sauf pour la viscosité qui dépend de la vitesse de cisaillement.

4. Le milieu poreux est supposé homogène, anisotrope en conductivité thermique effective et saturé par une seule phase fluide en équilibre thermique local avec la phase solide.
5. Les forces de volume, ainsi que les termes de compression, de génération de chaleur et de dissipation visqueuse sont négligeables.

III.2.2 Equations gouvernantes

Le mouvement du fluide dans la région poreuse est décrit par le modèle de Darcy-Brinkman- Forchheimer écrit pour les fluides en loi de puissance afin d'incorporer les effets visqueux et inertiels comme proposé par **Shenoy [47]**. Les équations gouvernantes s'expriment alors comme suit :

Equation de continuité

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{III. 1})$$

Equations de quantité de mouvement

- *Suivant la direction x*

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\rho}{\varepsilon^2} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\varepsilon^n} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{\varepsilon^n} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} - \frac{\mu^*}{K^*} |\vec{V}|^{n-1} u - \rho \frac{C}{\sqrt{K}} |\vec{V}| u \quad (\text{III.2a})$$

- *Suivant la direction y*

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\rho}{\varepsilon^2} \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\varepsilon^n} \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{1}{\varepsilon^n} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} - \frac{\mu^*}{K^*} |\vec{V}|^{n-1} v - \rho \frac{C}{\sqrt{K}} |\vec{V}| v \quad (\text{III.2b})$$

Equation d'énergie

$$\left(\rho C_p \right)_e \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{ex} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_{ey} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (\text{III.3})$$

Equation de la concentration

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} + \left(u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} \right) = D_e \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \quad (\text{III.4})$$

où $|\vec{V}| = \sqrt{u^2 + v^2}$, μ^* l'indice de consistance du fluide en loi de puissance, K^* la perméabilité

modifiée du milieu poreux pour le fluide non-Newtonien considéré, k_{ex} et k_{ey} les conductivités thermiques effectives du milieu poreux dans les directions axiale et transversale respectivement, et $D_e = \varepsilon D$. Dans la région non poreuse, $\varepsilon = 1$, $k_e = k$, $D_e = D$, $K \rightarrow \infty$ et $K^* \rightarrow \infty$.

Les composants des tenseurs de contrainte de cisaillement sont :

$$\tau_{xx} = 2\eta \frac{\partial u}{\partial x}, \tau_{yy} = 2\eta \frac{\partial v}{\partial y}, \tau_{xy} = \tau_{yx} = \eta \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (\text{III.5})$$

Pour un fluide en loi de puissance, l'expression de la viscosité apparente est donnée par :

$$\eta = \mu^* \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} \quad (\text{III.6})$$

III.2.3 Conditions initiales et aux limites

Les conditions initiales sont :

$$\text{A } t = 0 : u = U_e, v = 0, T = T_e, c = C_e \quad (\text{III.7})$$

Les conditions aux limites associées sont :

Entrée : $x = 0, 0 < y < H$

$$u = U_e [1 + A \sin(2\pi ft)]; v = 0; T = T_e; c = C_e \quad (\text{III.8})$$

Paroi inférieure : $y = 0, 0 < x < \ell$

$$u = v = 0; k_{ey} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = -Q k_0 c \exp\left(-\frac{E}{RT}\right); D_e \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{y=0} = k_0 c \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (\text{III.9})$$

Axe de symétrie : $y = H, 0 < x < \ell$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 0; v = 0; \frac{\partial T}{\partial y} = 0; \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad (\text{III.10})$$

Sortie : $x = \ell, 0 < y < H$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0; v = 0; \frac{\partial T}{\partial x} = 0; \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (\text{III.11})$$

Aux interfaces fluide - poreux : continuité de la pression, des composantes de la vitesse, des contraintes, de la température, de la concentration et des flux de chaleur et de masse.

III.2.4 Equations adimensionnelles

Les équations régissant le problème sont réécrites sous forme adimensionnelle, en utilisant les variables réduites suivantes :

$$X = \frac{x}{H}; Y = \frac{y}{H}; U = \frac{u}{\varepsilon U_e}; V = \frac{v}{\varepsilon U_e}; P = \frac{p}{\rho U_e^2}; \tau = \frac{t}{H/U_e}; \theta = \frac{T - T_e}{RT_e^2/E}; C = \frac{c}{C_e}$$

On aboutit aux équations suivantes :

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (\text{III.12})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial \tau} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = & -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial X} \left[2 \frac{\eta^*}{\text{Re}} \frac{\partial U}{\partial X} \right] + \frac{\partial}{\partial Y} \left[\frac{\eta^*}{\text{Re}} \left(\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X} \right) \right] \\ & - \frac{1}{\text{Re} Da^{\frac{n+1}{2}}} |\vec{V}|^{n-1} U - \frac{C^*}{\sqrt{Da}} |\vec{V}| U \end{aligned} \quad (\text{III.13a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial \tau} + U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} = & -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{\partial}{\partial Y} \left[2 \frac{\eta^*}{\text{Re}} \frac{\partial V}{\partial Y} \right] + \frac{\partial}{\partial X} \left[\frac{\eta^*}{\text{Re}} \left(\frac{\partial V}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} \right) \right] \\ & - \frac{1}{\text{Re} Da^{\frac{n+1}{2}}} |\vec{V}|^{n-1} V - \frac{C^*}{\sqrt{Da}} |\vec{V}| V \end{aligned} \quad (\text{III.13b})$$

$$R_{cp} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + U \frac{\partial \theta}{\partial X} + V \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{R_k}{\varepsilon \text{Pr Re}} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \lambda \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{III.14})$$

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + U \frac{\partial C}{\partial X} + V \frac{\partial C}{\partial Y} = \frac{1}{Le \text{Pr Re}} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{III.15})$$

III.2.5 Conditions aux limites adimensionnelles

L'application des variables réduites citées plus haut, permet de mettre les conditions aux limites sous la forme adimensionnelle suivante :

Entrée : $X = 0, 0 < Y < 1$

$$U = 1 + A \sin(2\pi St\tau); V = 0; \theta = 0; C = 1 \quad (\text{III.16})$$

avec $St = \frac{W_0^2}{Re}$: nombre de Strouhal et $W_0 = H \sqrt{\frac{f}{\nu}}$: nombre de Womersly

Paroi inférieure : $Y = 0, 0 < X < L$

$$U = 0; V = 0; \left. \frac{\partial \theta}{\partial Y} \right|_{Y=0} = -\frac{FK_m}{\lambda} C \exp\left(\frac{\theta}{\gamma\theta+1}\right); \left. \frac{\partial C}{\partial Y} \right|_{Y=0} = D_m C \exp\left(\frac{\theta}{\gamma\theta+1}\right) \quad (\text{III.17})$$

Axe de symétrie: $Y = 1, 0 < X < L$

$$\frac{\partial U}{\partial Y} = 0; V = 0; \frac{\partial \theta}{\partial Y} = 0; \frac{\partial C}{\partial Y} = 0 \quad (\text{III.18})$$

Sortie : $X = L, 0 < Y < 1$

$$\frac{\partial U}{\partial X} = 0; V = 0; \frac{\partial \theta}{\partial X} = 0; \frac{\partial C}{\partial X} = 0 \quad (\text{III.19})$$

Les paramètres adimensionnels apparaissant dans les équations gouvernantes ont pour expressions :

$$Re = \frac{\rho H^n U_e^{2-n}}{\mu^*}, Da = \frac{\left(\frac{K^*}{\varepsilon^n}\right)^{\frac{2}{n+1}}}{H^2}, C^* = C \frac{\left(K^*\right)^{\frac{1}{n+1}}}{K^{1/2}} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^{\frac{n}{n+1}}}, Pr = \frac{\mu^* C_p}{k} \left(\frac{U_e}{H}\right)^{n-1}, R_k = \frac{k_{ex}}{k}$$

$$\lambda = \frac{k_{ey}}{k_{ex}}, Le = \frac{k}{\rho C_p D}, FK_m = \frac{Qk_0 C_i H}{k_{ex}} \frac{E}{RT_e^2} \exp\left(-\frac{1}{\gamma}\right), D_m = \frac{k_0 H}{D_e} \exp\left(-\frac{1}{\gamma}\right), \gamma = \frac{RT_e}{E}$$

$$\eta^* = \left[2 \left(\frac{\partial U}{\partial X} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial V}{\partial Y} \right)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X} \right)^2 \right]^{\frac{n-1}{2}}$$

III.3 Nombre de Nusselt

Le transfert de chaleur est quantifié le nombre de Nusselt, dont l'expression est la suivante :

$$Nu = \frac{hH}{k} = \frac{-k_{ey} \frac{\partial T}{\partial y}}{T_p - T_m} \frac{H}{k} = -\lambda R_k \frac{\left. \frac{\partial \theta}{\partial Y} \right|_{Y=0}}{\theta_p - \theta_m} \quad (\text{III.20})$$

Avec la température moyenne du fluide ayant comme définition :

$$T_m = \frac{\int_s u T dS}{\int_s u dS} \Rightarrow \theta_m = \frac{\int_0^1 U \theta dY}{\int_0^1 U dY} \quad (\text{III.21})$$

Le nombre de Nusselt moyen est calculé comme suit :

$$Nu_m = \frac{1}{L} \int_0^L Nu dX \quad (\text{III.22})$$

III.4 Nombre de Sherwood

De même que pour le phénomène de transfert thermique, le transfert massique est exprimé par le nombre de Sherwood local :

$$Sh = \frac{-D_e \frac{\partial c}{\partial y} H}{c_p - c_m} = -\varepsilon \frac{\frac{\partial C}{\partial Y} \Big|_{Y=0}}{C_p - C_m} \quad (\text{III.23})$$

Avec la concentration moyenne du fluide ayant comme définition :

$$c_m = \frac{\int_s u c dS}{\int_s u dS} \Rightarrow C_m = \frac{\int_0^1 U C dY}{\int_0^1 U dY} \quad (\text{III.24})$$

Le nombre de Sherwood moyen est calculé comme suit :

$$Sh_m = \frac{1}{L} \int_0^L Sh dX \quad (\text{III.25})$$

III.5 Moyennes temporelles en régime oscillatoire

Pour un écoulement oscillatoire, on définit aussi des moyennes sur une période d'oscillation $\tau^* = 1/St$:

$$\langle \Phi \rangle = \frac{1}{\tau^*} \int_{\tau_0}^{\tau_0 + \tau^*} \Phi d\tau = St \int_{\tau_0}^{\tau_0 + 1/St} \Phi d\tau \quad \text{où } \Phi = \theta_p, \theta_m, C_p, C_m, Nu_m \text{ ou } Sh_m \quad (\text{III.26})$$

Conclusion

Après avoir écrit les équations gouvernantes décrivant le problème étudié, la méthode de résolution numérique utilisée sera décrite dans le prochain chapitre.

RESOLUTION NUMERIQUE

Introduction

La résolution des équations gouvernantes établies au chapitre précédent par une méthode numérique semble la plus adaptée car ces équations sont trop complexes pour envisager la méthode analytique. Parmi ces méthodes on peut citer la méthode des différences finies, la méthode des éléments finis et la méthode des volumes finis (**Patankar [48]**) qui sera utilisée dans le présent travail.

IV.1 Maillage

Dans la méthode des volumes finis, les mailles sont appelés volumes de contrôle où un nœud est placé au centre de chacun d'entre eux (Figure IV.1). Une intégration des équations gouvernantes sur le volume de contrôle permet d'avoir dans un premier temps des intégrales qui expriment la conservation des différentes grandeurs liées au problème.

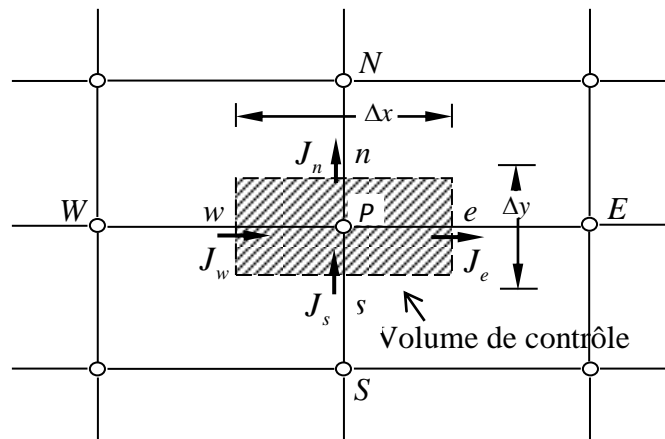


Figure IV.1 : Volume de contrôle

Pour la résolution du système d'équations établi au chapitre précédent, un maillage uniforme décalé, comme proposé par **Patankar [48]**, est utilisé. Comme l'indique la Figure IV.1, un maillage décalé est constitué de plusieurs grilles enchevêtrées les unes dans les autres ; chacune d'entre elles étant spécifiques à une ou plusieurs variables du problème. Cette procédure présente l'avantage d'assurer le couplage entre des variables sensibles telles que la pression et la vitesse. Les composantes de vitesse U et V sont calculées aux interfaces des volumes de contrôle alors que la pression, température et concentration sont déterminées au centre de ce volume.

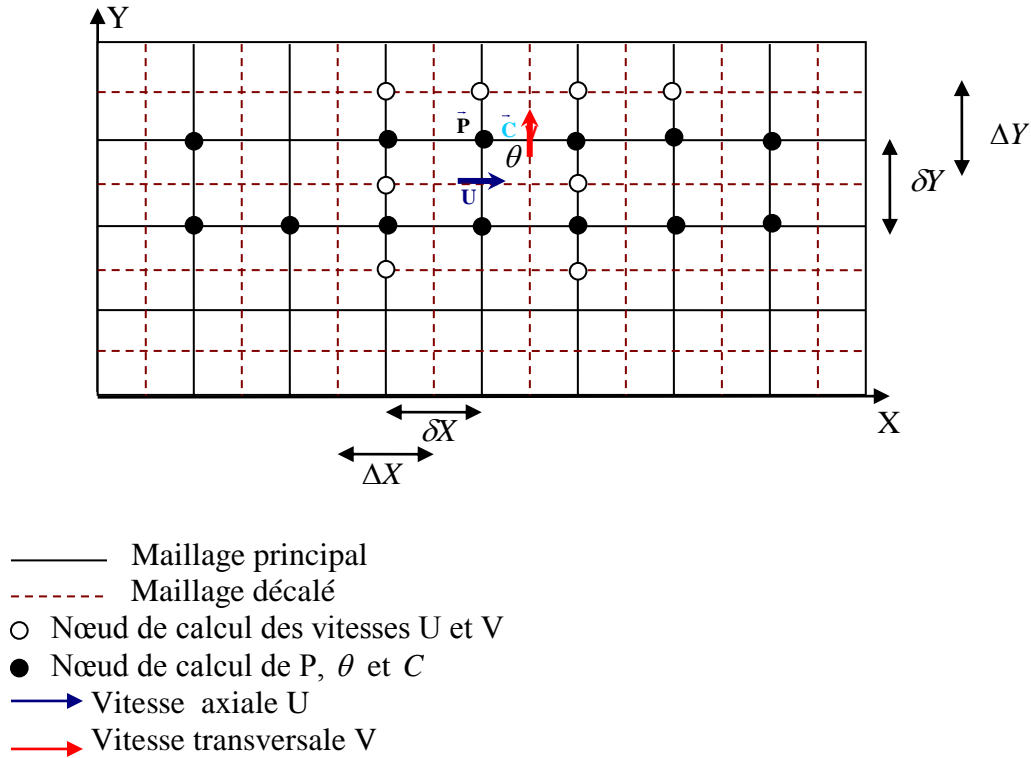


Figure IV.2 : Exemple d'un maillage uniforme décalé

Dans cette étude, nous avons opté pour un maillage non-uniforme en serrant les mailles au voisinage de la paroi inférieure, de l'axe de symétrie et aux interfaces fluide-poreux.

IV.2 Discrétisation des équations gouvernantes

Les équations de conservation décrites précédemment peuvent être mises sous la forme générale suivante :

$$\Lambda_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + \frac{\partial J_x}{\partial X} + \frac{\partial J_y}{\partial Y} = S \tag{IV.1a}$$

L'équation (IV.1) représente une combinaison des flux de convection et de diffusion suivant les directions X et Y, avec :

$$J_x = U\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial X} \tag{IV.1b}$$

$$J_y = V\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \tag{IV.1c}$$

Φ : variable dépendante étudiée (θ, U, V, C)

$\Lambda_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \tau}$: terme instationnaire

Γ : coefficient de diffusion

S : terme source

J_x : flux dans la direction axiale X

J_y : flux dans la direction transversale Y

L'équation (IV.1) s'écrit ainsi de la manière suivante :

$$\Lambda_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial X} \left[U\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right] + \frac{\partial}{\partial Y} \left[V\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right] = S \quad (IV.2)$$

Elle peut aussi se mettre sous cette forme :

$$\Lambda_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial X} (U\Phi) + \frac{\partial}{\partial Y} (V\Phi) = \frac{\partial}{\partial X} \left[\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right] + \frac{\partial}{\partial Y} \left[\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right] + S \quad (IV.3)$$

Le tableau ci-dessous résume la correspondance entre la forme générale (IV.3) et nos équations :

Equation	Φ	J_x	J_y	S
Continuité	1	U	V	0
Mouvement (X)	U	$UU - Gr_1 \eta^* \frac{\partial U}{\partial X}$	$VU - Gr_1 \eta^* \frac{\partial U}{\partial Y}$	$\frac{-\partial P}{\partial X} - Gr_2 \vec{V} ^{n-1} U - Gr_3 \vec{V} U + \frac{\partial}{\partial X} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial U}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial V}{\partial X} \right)$
Mouvement (Y)	V	$UV - Gr_1 \eta^* \frac{\partial V}{\partial X}$	$VV - Gr_1 \eta^* \frac{\partial V}{\partial Y}$	$\frac{-\partial P}{\partial Y} - Gr_2 \vec{V} ^{n-1} V - Gr_3 \vec{V} V + \frac{\partial}{\partial X} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial U}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial V}{\partial Y} \right)$
Energie	θ	$U\theta - Gr_4 \frac{\partial \theta}{\partial X}$	$V\theta - Gr_5 \frac{\partial \theta}{\partial Y}$	0
Masse	C	$UC - Gr_6 \frac{\partial C}{\partial X}$	$VC - Gr_6 \frac{\partial C}{\partial Y}$	0

Tableau IV.1 : Différents termes des équations de conservation

Les expressions des groupements adimensionnels $Gr_1, Gr_2, Gr_3, Gr_4, Gr_5$ et Gr_6 sont

représentées dans le tableau suivant :

Groupement	Gr ₁	Gr ₂	Gr ₃	Gr ₄	Gr ₅	Gr ₆
Expression	$\frac{1}{\text{Re}}$	$\frac{1}{\text{Re} Da^{(n+1)/2}}$	$\frac{C^*}{Da^{1/2}}$	$\frac{R_k}{\varepsilon \text{Re} \text{Pr}}$	$\frac{\lambda R_k}{\varepsilon \text{Re} \text{Pr}}$	$\frac{1}{Le \text{Re} \text{Pr}}$

Tableau IV.1 : Expressions des termes des équations de conservation

En Intégrant l'équation (IV.1) sur les faces du volume de contrôle représenté sur la Figure IV.3, on obtient :

$$\int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e \int_s^n \Lambda_{\Phi} \frac{\partial\Phi}{\partial\tau} d\tau dX dY + \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial J_x}{\partial X} d\tau dX dY + \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial J_y}{\partial Y} d\tau dX dY = \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \int_w^e \int_s^n S d\tau dX dY \quad (\text{IV.4})$$

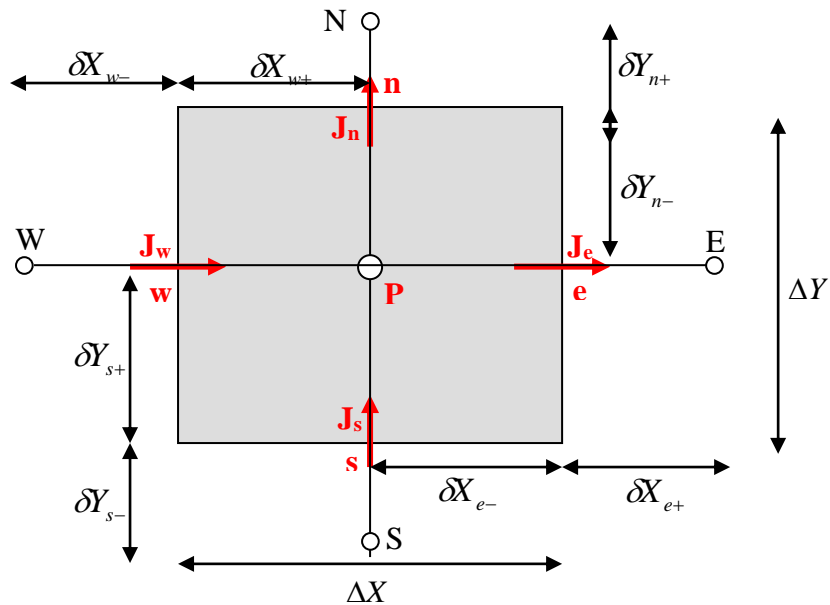


Figure IV.3 : Volume d'intégration des équations de conservation

En utilisant un schéma totalement implicite, on trouve :

$$\Lambda_{\Phi} (\Phi_P - \Phi_P^o) \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + (J_e - J_w) + (J_n - J_s) = \bar{S} \Delta X \Delta Y \quad (\text{IV.5a})$$

'o' : exposant indiquant les valeurs connues au début de l'étape temporelle τ

\bar{S} : moyenne des termes sources calculée sur la base du volume de contrôle.

$$J_e = \int_s^n (J_X)_e dY = \left[U\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right]_e \Delta Y \quad (\text{IV.5b})$$

$$J_w = \int_s^n (J_X)_w dY = \left[U\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right]_w \Delta Y \quad (\text{IV.5c})$$

$$J_n = \int_w^e (J_Y)_n dX = \left[V\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right]_N \Delta X \quad (\text{IV.5d})$$

$$J_s = \int_w^e (J_Y)_s dX = \left[V\Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right]_S \Delta X \quad (\text{IV.5e})$$

Intégrons l'équation de continuité sur le même volume de contrôle :

$$\int_w^e \int_s^n \frac{\partial U}{\partial X} dXdY + \int_w^e \int_s^n \frac{\partial V}{\partial Y} dXdY = 0 \quad (\text{IV.6})$$

On obtient :

$$(U_e - U_w)\Delta Y + (V_n - V_s)\Delta X = 0 \quad (\text{IV.7a})$$

Soit :

$$F_e = U_e \Delta Y, F_w = U_w \Delta Y, F_n = V_n \Delta X, F_s = V_s \Delta X \quad (\text{IV.7b})$$

L'équation (IV.7) devient :

$$(F_e - F_w) + (F_n - F_s) = 0 \quad (\text{IV.8})$$

Multiplions cette équation par Φ_p , on aboutit à :

$$F_e \Phi_p - F_w \Phi_p + F_n \Phi_p - F_s \Phi_p = 0 \quad (\text{IV.9})$$

D'autre part, le terme source s'exprime après linéarisation comme suit:

$$\bar{S} = S_C + S_p \Phi_p \quad (\text{IV.10})$$

En combinant les équations (IV.5), (IV.9) et (IV.10), on aboutit à :

$$\Lambda_\Phi (\Phi_p - \Phi_p^o) \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + [(J_e - F_e \Phi_p) - (J_w - F_w \Phi_p)] + [(J_n - F_n \Phi_p) - (J_s - F_s \Phi_p)] = (S_C + S_p \Phi_p) \Delta X \Delta Y \quad (\text{IV.11a})$$

En utilisant les expressions de **Patankar [48]** :

$$J_e - F_e \Phi_p = a_E (\Phi_p - \Phi_E) \quad (\text{IV.11b})$$

$$J_w - F_w \Phi_P = a_w (\Phi_w - \Phi_P) \quad (\text{IV.11c})$$

$$J_n - F_n \Phi_P = a_n (\Phi_P - \Phi_N) \quad (\text{IV.11d})$$

$$J_s - F_s \Phi_P = a_s (\Phi_P - \Phi_S) \quad (\text{IV.11e})$$

on obtient une équation discrétisée qui est une relation algébrique entre les valeurs de la variable Φ au centre de la maille et celles des nœuds voisins :

$$a_p \Phi_P = a_E \Phi_E + a_w \Phi_w + a_s \Phi_S + a_N \Phi_N + b \quad (\text{IV.12a})$$

Avec :

$$a_E = D_e A(|P_e|) + [-F_e, 0] \quad (\text{IV.12b})$$

$$a_w = D_w A(|P_w|) + [+F_w, 0] \quad (\text{IV.12c})$$

$$a_s = D_s A(|P_s|) + [+F_s, 0] \quad (\text{IV.12d})$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + [-F_n, 0] \quad (\text{IV.12e})$$

$$a_p = a_E + a_w + a_s + a_N + \Lambda_\Phi \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} - S_p \Delta X \Delta Y \quad (\text{IV.12f})$$

$$b = S_c \Delta X \Delta Y + \Lambda_\Phi \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \Phi_P^o \quad (\text{IV.12g})$$

$$D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta X_e} \Delta Y ; D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta X_w} \Delta Y ; D_n = \frac{\Gamma_n}{\delta Y_n} \Delta X ; \quad (\text{IV.12h})$$

$$D_s = \frac{\Gamma_s}{\delta Y_s} \Delta X$$

$P_i = F_i / D_i$; (i = e, w, n, s) : représente le rapport du transfert par convection au transfert par diffusion (nombre de Peclet).

F_i : débit volumique à travers les faces respectives du volume de contrôle

D_i : diffusion

Le symbole $[a, b]$ représente le maximum entre a et b et $A(|P_i|)$ la fonction d'interpolation qui diffère d'un schéma à un autre.

L'équation (IV.12) peut se mettre sous la forme générale suivante :

$$a_p \Phi_P = \sum a_{nb} \Phi_{nb} + b \quad (\text{IV.13})$$

Où nb désigne les nœuds voisins au nœud principal 'P'.

IV.3 Schémas d'interpolation

L'évaluation de la variable Φ à une interface du volume de contrôle nécessite une analyse des différents schémas d'interpolation existant dans le but de définir les expressions de la fonction $A(|P|)$. On peut citer, à titre d'exemple, ces quelques schémas :

a. Schéma aux différences centrées (Central)

La fonction d'interpolation pour ce schéma est :

$$A(|P|) = 1 - 0.5|P| \quad (\text{IV.14})$$

Ce schéma peut être utilisé uniquement pour les cas où $(|P|) \leq 2$, et il n'est pas recommandé aux nombres de Reynolds (Re) et Rayleigh (Ra) élevés.

b. Schéma décentré amont (Upwind)

La fonction d'interpolation est la suivante:

$$A(|P|) = 1 \quad (\text{IV.15})$$

Ce schéma présente l'inconvénient de surestimer la diffusion à grande valeur de $|P|$.

c. Schéma hybride

Ce schéma est une combinaison des deux schémas cités ci-dessus. Sa fonction d'interpolation est la suivante :

$$A(|P|) = [0, 1 - 0.5|P|] \quad (\text{IV.16})$$

Néanmoins, ce schéma présente un inconvénient majeur qui est une erreur maximale au voisinage de $|P|=2$.

d. Schéma exponentiel (Exact)

La fonction d'interpolation est :

$$A(|P|) = \frac{|P|}{\exp|P| - 1} \quad (\text{IV.17})$$

Ce schéma est recommandé pour les écoulements monodimensionnels mais non pour

les écoulements 2D et 3D, de plus, le terme exponentiel rend le temps de calcul élevé.

e. Schéma de la loi de puissance (Power-Law)

La fonction d'interpolation est :

$$A(|P|) = \left[0, (1 - 0.5|P|)^5 \right] \quad (\text{IV.18})$$

Ce schéma est très efficace car il approche le mieux la solution exacte et n'a pas de contraintes d'application. C'est ce schéma qui a été utilisé dans la présente étude.

IV.4 Linéarisation du terme source

Le terme source est généralement fonction de la variable dépendante, il est donc recommandé de l'écrire sous forme linéaire. Pour ce faire, la méthode de la tangente est souvent utilisée et elle consiste en l'écriture du terme source sous la forme suivante :

$$\bar{S} = S_p \Phi_p + S_c \quad (\text{IV.19})$$

Avec : $\bar{S} = \bar{S}^* + \left(\frac{d\bar{S}}{d\Phi} \right)^* (\Phi_p - \Phi_p^*)$; *: indique l'itération précédente

Le tableau ci-dessous résume les expressions des différents termes sources correspondants aux différentes équations de conservation :

Φ	S_p	S_c
U	$-\left[Gr_2 \vec{V} ^{n-1} + Gr_3 \vec{V} \right]$	$\frac{\partial}{\partial X} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial U}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial V}{\partial X} \right)$
V	$-\left[Gr_2 \vec{V} ^{n-1} + Gr_3 \vec{V} \right]$	$\frac{\partial}{\partial X} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial U}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(Gr_1 \eta^* \frac{\partial V}{\partial Y} \right)$
θ	0	0
C	0	0

Tableau IV.3 : Expressions des termes sources linéarisés

IV.5 Discrétisation des équations de quantité de mouvement

La présence du gradient de pression dans les équations de quantité de mouvement impose l'utilisation d'un maillage décalé afin de déterminer les composantes de vitesse U et V.

Les volumes de contrôle résultants du maillage décalé sont représentés sur les Figures IV.4a et IV.4b.

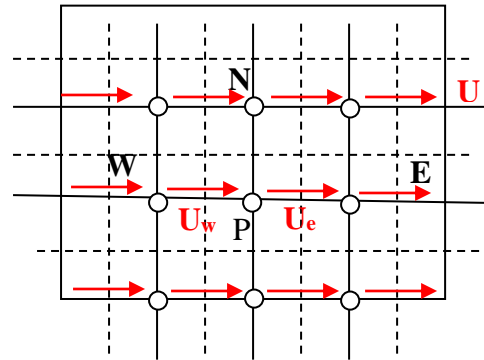


Figure IV.4a : Volume de control lié à U

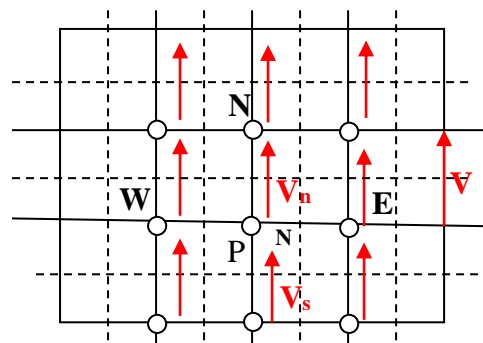


Figure IV.4b : Volume de control lié à V

L'intégration des deux équations de quantité de mouvement suivant les directions X et Y donne :

$$a_e U_e = \sum_{nb} a_{nb} U_{nb} + b + (P_P - P_E) A_e \quad (\text{IV.20a})$$

$$a_n V_n = \sum_{nb} a_{nb} V_{nb} + b + (P_P - P_N) A_n \quad (\text{IV.20b})$$

A_n et A_e : surfaces sur lesquelles agissent les forces de pression

$(P_P - P_E) A_e$: force de pression agissant sur la face verticale du volume de contrôle

$(P_P - P_N) A_n$: force de pression agissant sur la face horizontale du volume de contrôle

IV.5.1 Correction de la vitesse

Le champ de vitesse ne satisfera l'équation de continuité que si le champ de pression est correct. On doit alors, choisir une valeur initiale P^* à laquelle correspond la solution U^* et V^* .

$$a_e U_e^* = \sum_{nb} a_{nb} U_{nb}^* + b + (P_P^* - P_E^*) A_e \quad (\text{IV.21a})$$

$$a_n V_n^* = \sum_{nb} a_{nb} V_{nb}^* + b + (P_P^* - P_N^*) A_n \quad (\text{IV.21b})$$

La valeur que prendra la pression P^* est estimée de manière à ce que les vitesses U^* et V^* s'approchent progressivement (à chaque itération) des valeurs qui satisferont l'équation de continuité.

Définissons les termes P' , U' et V' comme étant les corrections de pression et des composantes de vitesse. On écrit alors :

$$\begin{aligned} P &= P^* + P' \\ V &= V^* + V' \\ U &= U^* + U' \end{aligned}$$

En soustrayant les équations (IV.20a) et (IV.21a) et en considérant l'hypothèse simplificatrice introduite par **Patankar** [48] qui stipule que le terme $\left(\sum_{nb} a_{nb} U'_{nb} \right)$ est négligeable, on arrive à écrire une équation liant les corrections de pression et les corrections de vitesses :

$$a_e U_e' = (P_P' - P_E') A_e \quad (\text{IV.22})$$

ou

$$U_e' = (P_P' - P_E') d_e \quad (\text{IV.23})$$

$$\text{Avec } d_e = \frac{A_e}{a_e}$$

On aboutit donc à l'équation suivante :

$$U_e = U_e^* + (P_P' - P_E') d_e \quad (\text{IV.24})$$

De la même manière, on peut écrire :

$$V_n = V_n^* + (P_P' - P_N') d_n \quad (\text{IV.25})$$

$$\text{Avec } d_n = \frac{A_n}{a_n}$$

IV.5.2 Equation de correction de la pression

L'équation de continuité :

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (\text{IV.26})$$

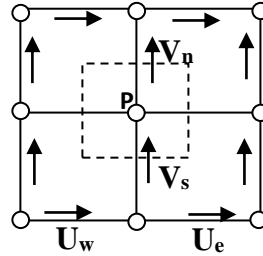


Figure IV.5 : Volume de contrôle lié à P

intégrée sur le volume de contrôle de la figure IV.5, donne :

$$[U_e - U_w] \Delta Y + [V_n - V_s] \Delta X = 0 \quad (\text{IV.27})$$

Substituons les vitesses par $V = V^* + V'$ et $U = U^* + U'$ avec : $U_i = U_i^* + (P'_P - P'_I) d_i$, on aboutit à l'équation de correction de pression :

$$a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_S P'_S + a_N P'_N + b \quad (\text{IV.28})$$

Avec :

$$\begin{aligned} a_E &= d_e \Delta Y & a_W &= d_w \Delta Y \\ a_N &= d_n \Delta X & a_S &= d_s \Delta X \\ a_P &= a_E + a_W + a_S + a_N & b &= [U_e^* - U_w^*] \Delta Y + [V_n^* - V_s^*] \Delta X \end{aligned}$$

Le terme b tend vers zéro à la convergence.

IV.6 Algorithme SIMPLE

L'algorithme SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation) consiste à corriger la pression et les composantes de vitesse à chaque itération jusqu'à ce que l'équation de continuité soit vérifiée. Les séquences de cet algorithme sont comme suit :

- 1- Initialisation du champ de pression (P^*)
- 2- Résolution de l'équation de mouvement pour obtenir les vitesses U^* et V^*
- 3- Résolution de l'équation de correction de pression pour obtenir P'
- 4- Correction de la pression ($P = P^* + P'$) et des vitesses ($V = V^* + V'$) et ($U = U^* + U'$)
- 5- Contrôler le critère de convergence:
 1. Si vérifier aller à l'étape suivante (6)
 2. Sinon : Prendre $P^* = P$ et redémarrer les calculs depuis l'étape (2)
- 6- Résolution des équations de l'énergie et de transfert de masse

Les étapes suscitées permettent d'avoir une solution pour un pas de temps dans un problème instationnaire. Pour les problèmes instationnaires, il faut en plus assurer une itération interne à chaque pas de temps. La procédure itérative pour déterminer les champs des différentes variables au pas de temps suivant (n+1) consiste essentiellement à avancer le temps d'un pas adéquat $\Delta\tau$, initialiser le champ Φ au temps n (Φ^n) et procéder à des itérations internes au pas de temps (n+1) en utilisant une estimation du champ (Φ^*) à la première itération jusqu'à convergence.

IV.7 Méthode de Résolution

Les équations auxquelles on a abouti constituent en réalité un système algébrique tridiagonal. Sa résolution se fait grâce à la méthode dite ligne par ligne basée sur l'algorithme T.D.M.A (Tri-Diagonal Matrix Algorithm) et la méthode itérative de Gauss-Seidel. Les variables dépendantes sont fixées suivant une direction en les considérant comme les coefficients des équations à résoudre. Les variables d'une ligne sont calculées en s'appuyant sur les valeurs dépendantes de la ligne précédente déjà connues, en d'autres termes, on procède par propagation de l'information prise aux limites du domaine.

La forme générale des équations à résoudre est:

$$a_{Pi,j}\Phi_{i,j} = a_{Ei,j}\Phi_{i+1,j} + a_{Wi,j}\Phi_{i-1,j} + a_{Si,j}\Phi_{i,j-1} + a_{Ni,j}\Phi_{i,j+1} + b_{i,j} \quad (\text{IV.29})$$

La méthode de résolution consiste à résoudre ces équations en bloc sur une ligne (X ou Y) qui se déplace de façon à balayer l'ensemble du domaine de calcul. Dans notre cas, le balayage est horizontal, c'est-à-dire que la résolution en bloc concerne des lignes verticales. A une itération donnée, l'équation (IV.29) donne en tout point :

$$a_{Pi,j}\Phi_{i,j} = a_{Ei,j}\Phi_{i+1,j}^* + a_{Wi,j}\Phi_{i-1,j}^* + a_{Si,j}\Phi_{i,j-1} + a_{Ni,j}\Phi_{i,j+1} + b_{i,j} \quad (\text{IV.30})$$

Les Φ^* désignent les valeurs connues à l'itération précédente. On peut ainsi former une équation sur chaque nœud suivant la direction horizontale (E: Est, W: West). En utilisant la notation indicielle, on peut écrire :

$$A_{i,j}\Phi_{i,j} = B_{i,j}\Phi_{i,j+1} + C_{i,j}\Phi_{i,j-1} + D_{i,j} \quad (\text{IV.31})$$

Avec :

$$A_{i,j} = a_{i,j} \quad B_{i,j} = a_{Ni,j} \quad C_{i,j} = a_{Si,j} \quad D_{i,j} = a_{Ei,j}\Phi_{i+1,j}^* + a_{Wi,j}\Phi_{i-1,j}^* + b_{i,j}$$

Soient $P_{i,j}$ et $\psi_{i,j}$ deux coefficients tels que :

$$\Phi_{i,j} = P_{i,j}\Phi_{i,j+1} + \psi_{i,j} \quad (\text{IV.32})$$

D'où

$$\Phi_{i,j-1} = P_{i,j-1}\Phi_{i,j} + \psi_{i,j-1} \quad (\text{IV.33})$$

En remplaçant l'équation (IV.33) dans l'équation (IV.31), on obtient :

$$\Phi_{i,j} = \left(\frac{B_{i,j}}{A_{i,j} - C_{i,j}P_{i,j-1}} \right) \Phi_{i,j+1} + \left(\frac{C_{i,j}\psi_{i,j-1} + D_{i,j}}{A_{i,j} - C_{i,j}P_{i,j-1}} \right) \quad (\text{IV.34})$$

$$P_{i,j} = \left(\frac{B_{i,j}}{A_{i,j} - C_{i,j}P_{i,j-1}} \right) \text{ et } \psi_{i,j} = \left(\frac{C_{i,j}\psi_{i,j-1} + D_{i,j}}{A_{i,j} - C_{i,j}P_{i,j-1}} \right) \quad (\text{IV.35})$$

La procédure de calcul est la suivante :

1. Calcul de $P_{i,1}$ et $\psi_{i,1}$ par la condition imposée à la frontière ($j = 1$)
2. Calcul de $P_{i,j}$ et $\psi_{i,j}$ par la relation (IV.35)
3. Calcul de $P_{i,m}$ et $\psi_{i,m}$ par la condition à la frontière ($j = m$)
4. Calcul de $\Phi_{i,j}$ de $j = m-1$ à $j = 1$ grâce à la relation (IV.32)

IV.8 Technique de relaxation

Lors de la résolution des systèmes d'équation non linéaires par des méthodes itératives,

on utilise des techniques de relaxation afin de contrôler la convergence et éviter une divergence des calculs.

En introduisant la variable Φ_p^* , correspondant à la valeur Φ_p à l'itération précédente, on peut écrire :

$$\Phi_p = \Phi_p^* + \alpha_\Phi \left[\frac{\sum a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_p} - \phi_p^* \right] \quad (\text{IV.36})$$

où α_Φ est un facteur de relaxation introduit pour amortir le changement survenu à Φ_p pendant une itération. En fonction des valeurs que prend α_Φ on définit deux types de relaxation dédiés à faire converger les calculs selon les cas suivants :

Pour $1 < \alpha_\Phi < 2$: on parle d'une sur-relaxation

Pour $0 < \alpha_\Phi < 1$: on parle de sous-relaxation

La valeur du coefficient de relaxation α_Φ est obtenue suite à plusieurs essais et sa valeur varie d'un problème à un autre et d'une variable dépendante à une autre.

IV.9 Critères de convergence

On dit qu'un processus itératif a atteint la convergence lorsqu'on ne constate plus de variations significatives sur les valeurs des variables dépendantes d'une itération à une autre. Ce point de convergence s'exprime par un test d'arrêt du processus itérative appelé "*test de convergence*". Pour nos calculs, nous avons utilisé un critère qui porte sur l'erreur relative sur Φ et qui s'écrit pour chaque variable :

$$\max \left| \frac{\Phi - \Phi^*}{\Phi^*} \right| \leq \xi \quad (\text{IV.37})$$

Φ^* est la valeur de Φ à l'itération précédente. Dans notre cas, on a fixé $\xi = 10^{-6}$ pour U, V, θ et C.

Ce critère de convergence a été utilisé pour un pas de temps donné. Pour l'arrêt du programme instationnaire, nous avons utilisé un deuxième critère qui est :

$$\tau \geq \tau_{\max} \quad (\text{IV.38})$$

τ_{\max} est choisi suffisamment grand de sorte que le régime devient périodiquement établi.

Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la présentation des différentes étapes de discrétisation des équations de conservation par la méthode des volumes finis. Les résultats obtenus par cette démarche numérique seront présentés et discutés dans le chapitre suivant.

RESULTATS ET DISCUSSION

Introduction

Dans ce chapitre vont être présentés et discutés les différents résultats obtenus en régimes stationnaire et oscillatoire pour les deux dispositions du milieu poreux. Une étude paramétrique est entamée dans le but d'analyser l'impact des différents nombres adimensionnels pertinents sur les transferts thermique et massique.

V.1 Sensibilité du maillage et résolution temporelle

Un maillage non-uniforme a été adopté en plaçant les mailles serrées au niveau de la paroi inférieure du canal, de l'axe de symétrie ainsi qu'aux interfaces poreux-fluide. Afin d'analyser l'effet de la taille des mailles sur la solution numérique, plusieurs systèmes de grilles ont été testés pour diverses combinaisons des paramètres de contrôle. Un test typique est illustré sur le Tableau V.1 et un maillage de 250 x 50 (respectivement dans les directions X et Y) est adopté puisque les erreurs relatives sur les nombres de Nusselt et Sherwood moyens sont inférieures à 0.1%.

Nombre de noeuds (X × Y)	100 x 10	150 x 20	200 x 30	250 x 50	300 x 60
Num	20.962	20.030	19.898	19.814	19.806
Erreur relative (%)	-	4.45	0.66	0.42	0.04
Sh_m	2.031	1.940	1.927	1.918	1.917
Erreur relative (%)	-	4.48	0.67	0.47	0.05

Tableau V.1 : Sensibilité du maillage pour $n = 1.5$, $Da = 10^{-2}$, $\lambda = 10$, $FK_m = 1$ et $D_m = 5$

La résolution temporelle est telle qu'une période d'oscillation est divisée en 120 pas de temps $\Delta\tau = \tau^*/120 = 1/120St$. Le régime périodiquement établi est obtenu après 3 à 5 cycles d'oscillations.

Pour confirmer ce résultat on représente sur les Figures V.1a et V.1b les diagrammes de phases vitesse – température et vitesse – concentration en deux points typiques : milieu du canal dans la zone poreuse ($X = L/2$; $Y = 0.2$) et milieu du canal dans la région fluide ($X=L/2$; $Y = 0.8$) pour la configuration couche poreuse. Au cours du temps, les courbes se referment et se rapprochent pour former à partir de la cinquième période une seule courbe qui

se répète indiquant ainsi que le régime périodiquement établi est atteint. Des courbes similaires ont été retrouvées en faisant varier les autres paramètres.

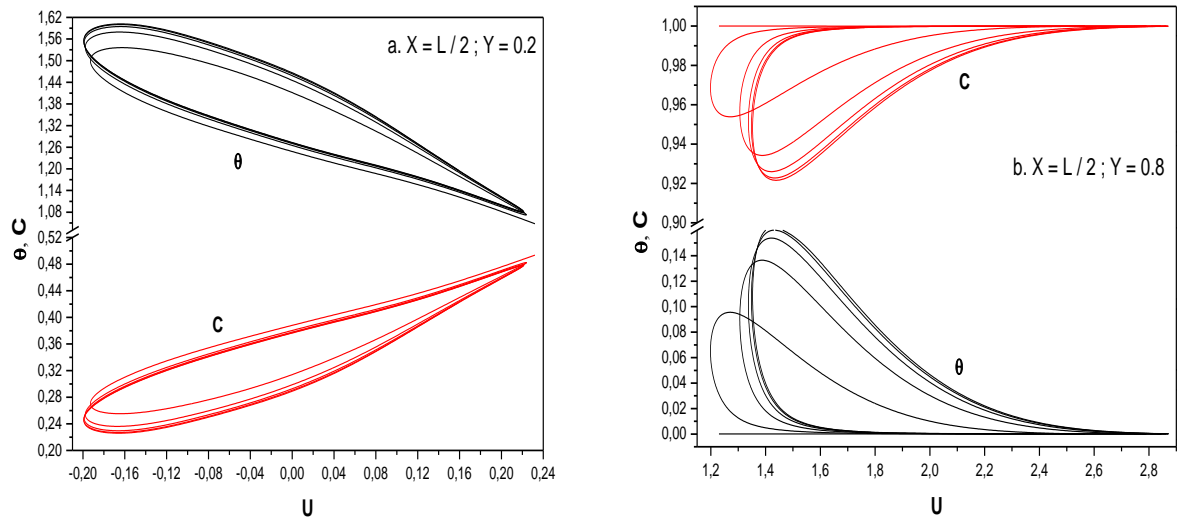


Figure V.1 : Diagrammes de phases $U - \theta$ et $U - C$ pour la configuration en couche poreuse :

$$Da = 10^{-3}, St = 0.5, A = 0.5, \lambda = 1, n = 1, FK_m = 10 \text{ et } D_m = 5$$

V.2 Validations

Le code de calcul élaboré est validé, en régime stationnaire, en comparant les profils de vitesse établis à la sortie du canal pour différentes valeurs de l'indice de loi de puissance et deux cas limites disponibles dans la littérature. La première comparaison est faite avec la solution analytique représentée par l'équation (V.1) et proposée par Nebbali et Bouhadef [49], alors que la deuxième concerne la solution numérique obtenue par Chen et Tao [50] dans un canal poreux en utilisant le modèle de Darcy-Brinkman. Les Figures V.2a et V.2b montrent un très bon agrément. En régime oscillatoire dans un canal totalement poreux avec un fluide Newtonien, une comparaison avec le travail de Kim et al. [10] est réalisée. Les résultats obtenus et illustrés sur la Figure V.3 montrent aussi un assez bon accord.

$$U(Y) = \frac{2n+1}{n+1} \left[1 - (1-Y)^{\frac{n+1}{n}} \right] \quad (V.1)$$

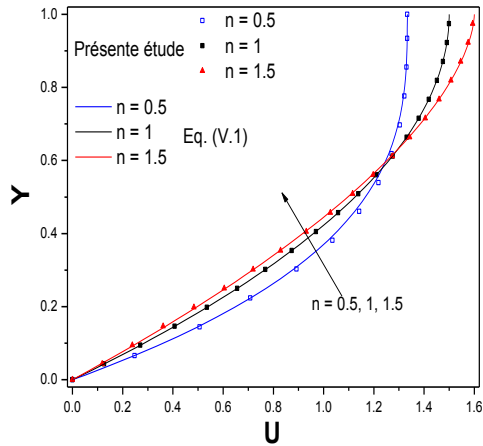


Figure V.2a : Profils de vitesse à l'établissement pour différentes valeurs de n , $Da \rightarrow \infty$ et $\varepsilon = 1$

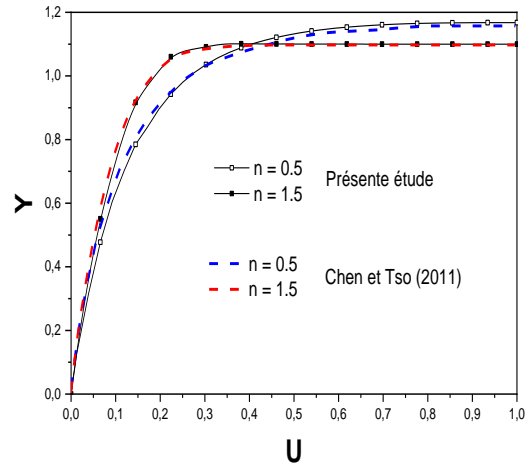


Figure V.2b : Profils de vitesse à l'établissement pour différentes valeurs de n , $Da = 10^{-2}$ et $C^* = 0$

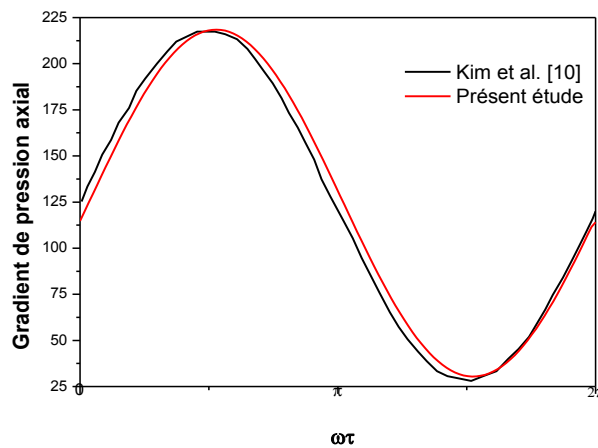


Figure V.3 : Variation temporelle, sur une période d'oscillation, du gradient de pression axial : $\varepsilon = 0.6$, $E_{pm} = 1$, $Da = 10^{-4}$, $C^* = 0.057$, $Pr = 07$, $n = 1$, $Re = 50$, $A = 0.75$ et $St = 0.16$

V.3 Résultats en régime stationnaire

Dans cette partie, les simulations numériques ont été effectuées en fixant les paramètres suivants : épaisseur du milieu poreux $E_{pc} = 0.4$ et $E_{pm} = 0.5$, porosité $\varepsilon = 0.95$, coefficient inertiel modifié $C^* = 0.1$, nombre de Prandtl $Pr = 10$, nombre de Reynolds $Re = 100$, nombre de Lewis $Le = 1$, rapport de viscosités $R_\mu = 1$ et rapport de conductivités $R_\kappa = 1$. Les résultats obtenus en variant le paramètre d'activation d'énergie γ de 0.01 à 100 ont montré un effet négligeable ; et donc sa valeur a été fixée à 0.1.

Les résultats concernant les champs thermique et massique vont être décomposés principalement en deux parties. Dans la première, sera discutée l'influence de l'anisotropie du milieu poreux en conductivité thermique ($0.1 \leq \lambda \leq 10$) pour différentes perméabilités ($10^{-6} \leq Da \leq 1$) et indices de loi de puissance caractérisant le comportement non-Newtonien du fluide ($n= 0.5, 1$ et 1.5). La deuxième partie des résultats, sera consacrée à l'analyse de l'effet des caractéristiques de la réaction chimique ($0.1 \leq FK_m \leq 20$ et $5 \leq D_m \leq 80$).

Les résultats seront présentés en termes de distributions de vitesse, température et concentration, ainsi qu'en termes de coefficients d'échange de chaleur et de masse décrits respectivement par les nombres de Nusselt et Sherwood.

V.3.1 Caractéristiques du milieu poreux

Les profils de la composante axiale de la vitesse U à la sortie du canal en configuration couche poreuse pour différentes valeurs de l'indice n à $Da = 10^{-3}$ sont illustrés sur la Figure V.4. Il apparaît que la présence d'une couche poreuse d'épaisseur finie tend à ralentir l'écoulement du fluide qui s'échappe vers la région non poreuse offrant moins de résistance à l'écoulement. Les propriétés rhéologiques du fluide semblent affecter faiblement la vitesse dans la zone poreuse avec cependant la plus grande résistance à l'écoulement obtenue pour le fluide pseudoplastique ($n = 0.5$). Ce comportement, qui s'inverse en s'éloignant de l'interface poreux-fluide, est retrouvé encore une fois en s'approchant de l'axe de symétrie où la vitesse est maximale quelle que soit la nature du fluide et elle est la plus importante pour le fluide dilatatant ($n = 1.5$).

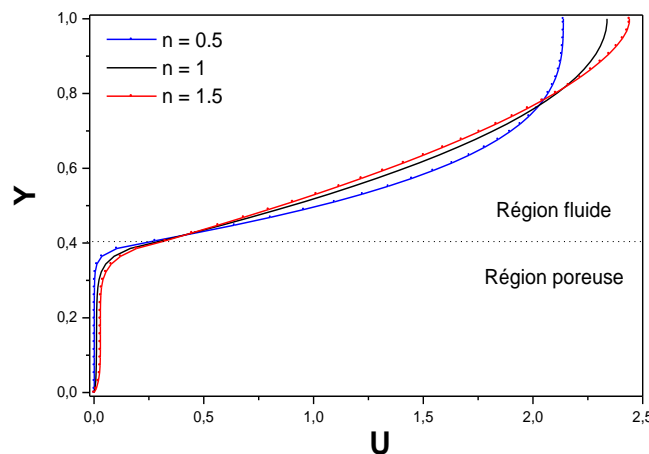


Figure V.4 : Profils de vitesse à la sortie du canal pour différentes valeurs de n à $Da = 10^{-3}$

La Figure V.5a représentant les profils de température et de concentration à la sortie du canal pour différents types de fluides non-Newtoniens, révèle des évolutions opposées pour θ et C où les plus hautes températures sont localisées au niveau de la paroi siège d'une réaction chimique exothermique dont l'effet diminue en allant vers le centre de la section où la température du fluide approche la valeur de celle-ci à l'entrée du canal, et inversement pour la concentration. Les propriétés rhéologiques du fluide influence très peu les profils de θ et C , avec respectivement des valeurs modérément plus élevées et plus faibles quand le fluide est pseudoplastique ($n = 0.5$). Pour un milieu poreux thermiquement anisotrope (Figure V.5b), des valeur de λ inférieures à l'unité correspondent à une conductivité thermique effective dans la direction transversale k_{ey} plus faible que celle dans la direction axiale k_{ex} qui est constante puisque $R_k = k_{ex} / k = 1$. Ceci va réduire le transfert de chaleur puisque la chaleur générée par la réaction chimique ne va pas être évacuée et de grandes valeurs de θ seront obtenues ce qui va accélérer la réaction et permettre la consommation des réactifs.

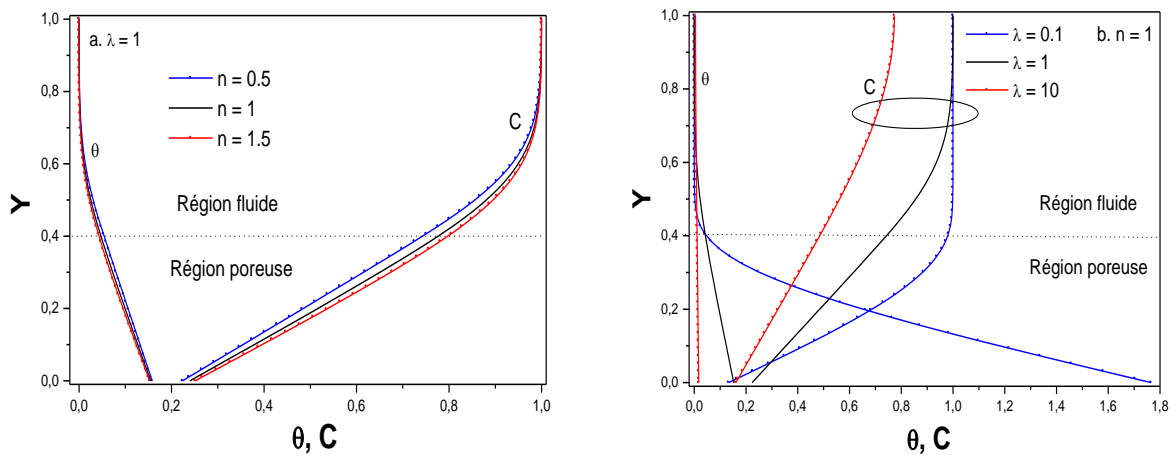


Figure V.5 : Profils de Température et de concentration pour différentes valeurs de n et λ :

$$Da = 10^{-3}, FK_m = 1 \text{ et } D_m = 5$$

Les évolutions des nombres de Nusselt et Sherwood moyens avec λ et n , pour les deux configurations du milieu poreux, sont reportées sur la Figure V.6. Le transfert de chaleur est amélioré par l'augmentation de la conductivité thermique effective suivant la direction Y ($\lambda = k_{ey}/k_{ex}$ avec k_{ex} fixe puisque $R_k = 1$). Cette situation va engendrer une réduction de la température du fluide et une augmentation de la concentration au voisinage des parois du

canal (Figure V.5b), causant une réduction du transfert de masse et donc une diminution de Sh_m avec λ . Concernant l'influence de l'indice de loi de puissance, il apparaît que les transferts thermique et massique sont améliorés en augmentant la valeur de n avec réduction de la différence entre les divers types de fluides aux grands rapports d'anisotropie thermique du milieu poreux.

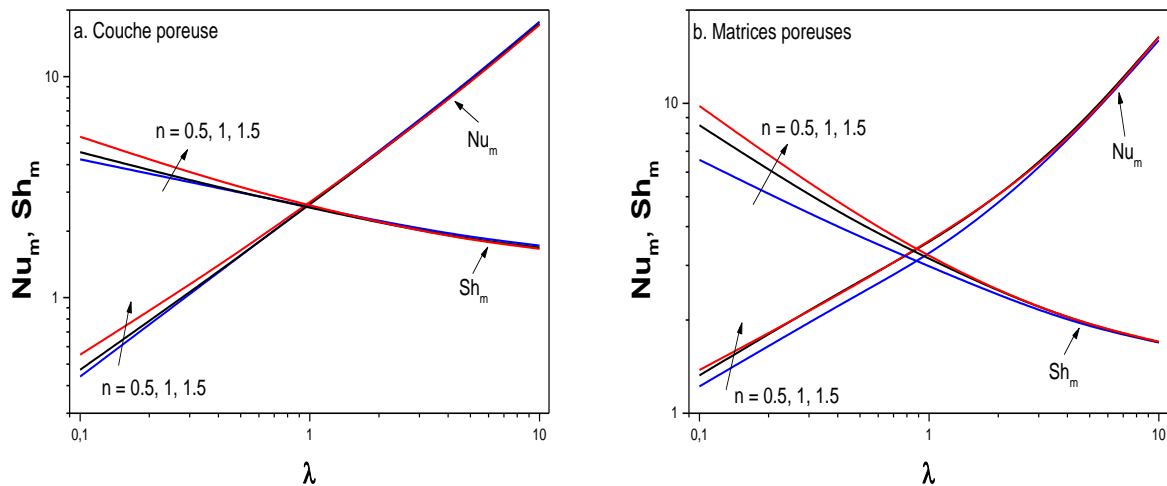


Figure V.6 : Variation de Nu_m et Sh_m avec λ : $Da = 10^{-3}$, $FK_m = 1$ et $D_m = 5$

Qu'il s'agisse d'un milieu poreux isotrope ou anisotrope, d'un fluide Newtonien ou non-Newtonien, d'une configuration en couche poreuse ou en matrices poreuses, il ressort des Figures V.7a et V.7b un accroissement des transferts thermique et massique avec le nombre de Darcy. Ce résultat pour un canal partiellement poreux a été largement retrouvé dans la littérature (Nebbali et Bouhadef [49] ; Chikh et al. [51]). Pour un milieu poreux en couche poreuse (Figure V.7a) et à faible rapport d'anisotropie ($\lambda = 0.1$), le type de fluide semble n'avoir presque pas d'effet sur les valeurs de Nu_m et Sh_m jusqu'à $Da \approx 10^{-4}$ au-delà duquel le fluide dilatant ($n = 1.5$) conduit aux meilleures performances du système. Toutefois, ce résultat n'est pas reproduit pour toutes les situations d'anisotropie du milieu poreux où les taux de transfert atteints avec le fluide dilatant n'excèdent ceux obtenus avec le fluide pseudoplastique ($n = 0.5$) qu'à partir d'une certaine perméabilité dont la valeur est fortement liée à λ ($Da \approx 6 \times 10^{-4}$ pour $\lambda = 1$ et $Da \approx 3 \times 10^{-3}$ pour $\lambda = 10$). Pour la configuration en matrices poreuses (Figure V.7b), le fluide pseudoplastique a conduit pour presque la totalité des cas en perméabilité et rapport d'anisotropie aux meilleurs taux de transferts de chaleur et de masse.

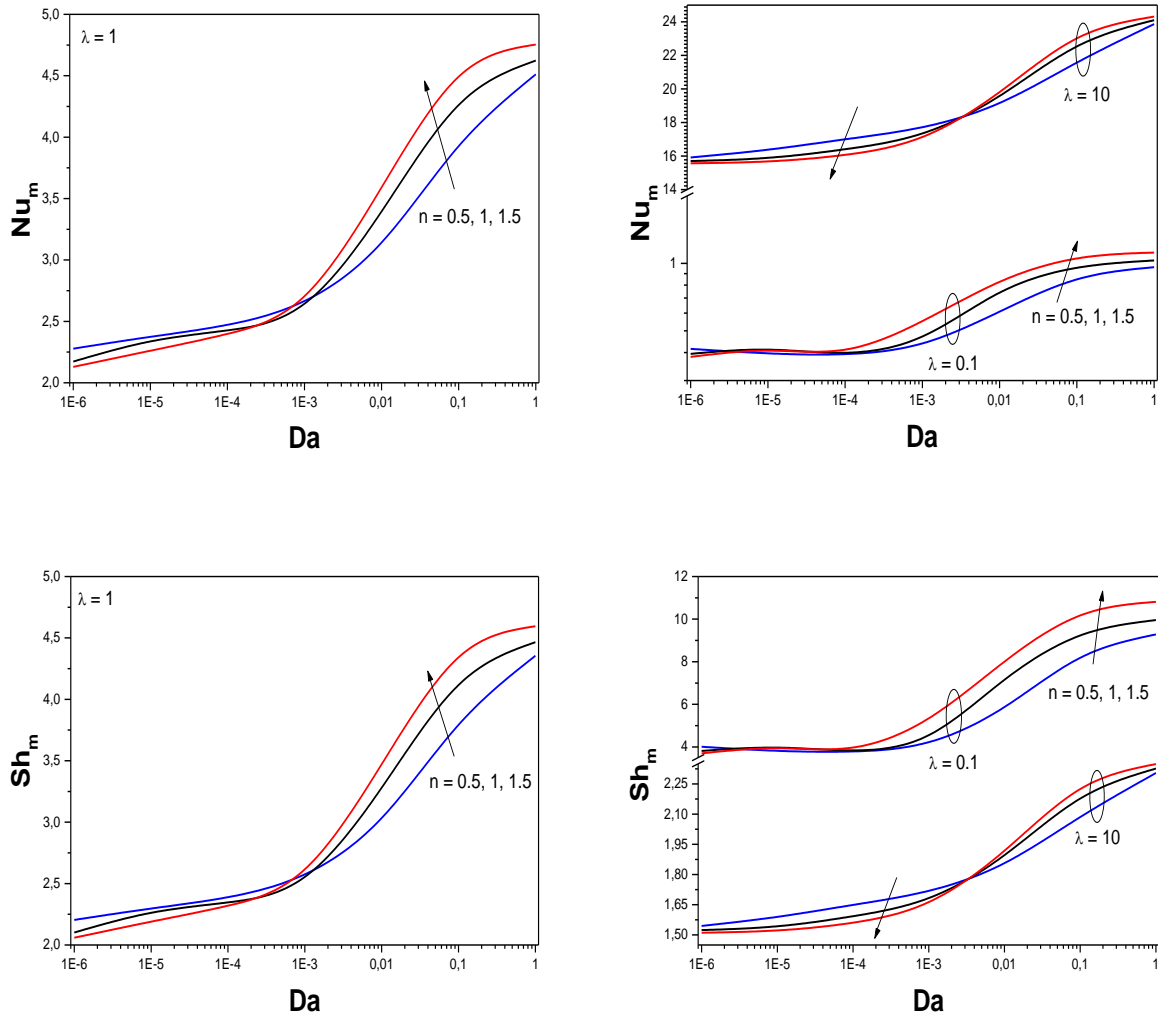
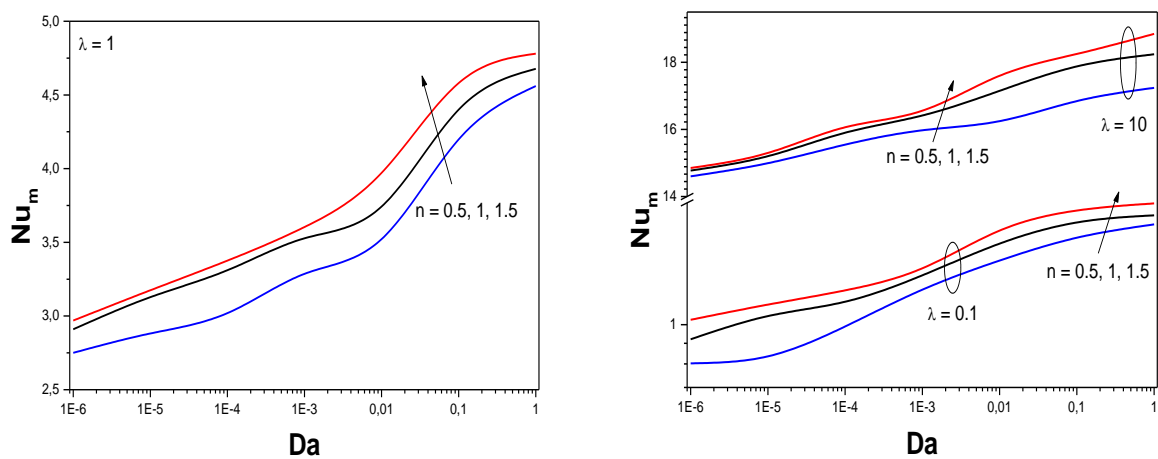


Figure V.7a : Variation de Nu_m et Sh_m avec Da pour la configuration en couche poreuse :

$$FK_m = 1 \text{ et } D_m = 5$$



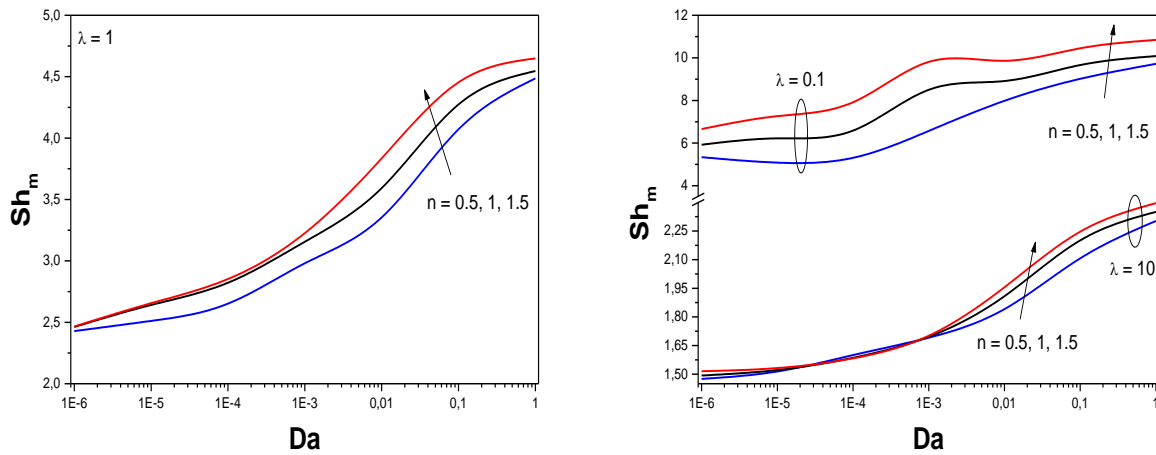


Figure V.7b : Variation de Nu_m et Sh_m avec Da pour la configuration en matrices poreuses :

$$FK_m = 1 \text{ et } D_m = 5$$

Pour mettre en évidence l'effet de l'anisotropie du milieu poreux sur les transferts de chaleur et de masse, nous avons illustré sur les Figure V.8a et V.8b l'évolution des rapports RNu_m et RSh_m , normalisés par les valeurs de Nu_m et Sh_m dans le cas isotrope ($\lambda = 1$), avec le nombre de Darcy. Quand le milieu poreux est disposé en couche poreuse (Figure V.8a), RNu_m et RSh_m augmentent à $\lambda = 0.1$, diminuent à $\lambda = 10$ pour atteindre finalement des valeurs constantes aux grandes perméabilités. Les gains en transferts thermique et massique sont obtenus respectivement pour $\lambda = 10$ et $\lambda = 0.1$, avec des valeurs maximales autour de 620% pour Nu_m et 120% pour Sh_m à $Da = 1$. La situation est inversée pour les pertes thermique et massique avec $(RNu_m)_{\min} \approx 0.16$ et $(RSh_m)_{\min} \approx 0.50$. Les plus grandes valeurs de gains et de pertes en transfert de chaleur sont obtenues avec le fluide pseudoplastique, tandis que le fluide dilatant a conduit aux plus faibles valeurs de ces derniers. Un comportement inverse est retrouvé pour le transfert de masse.

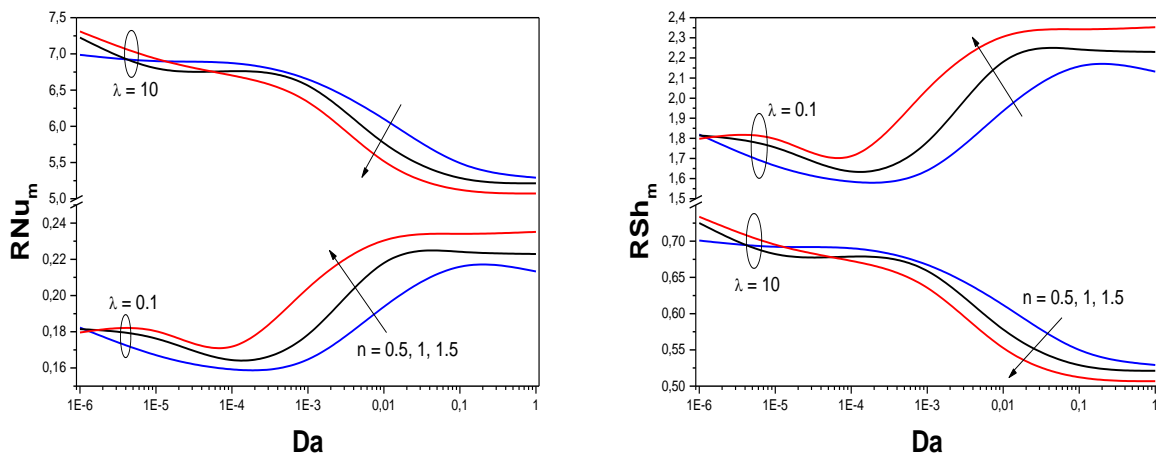


Figure V.8a : Variation de RNu_m et RSh_m avec Da pour la configuration en couche poreuse : $FK_m = 1$ et $D_m = 5$

Une évolution globalement similaire est retrouvée en configuration matrices poreuses (Figure V.8b) avec toutefois moins de gains et de pertes en transfert de chaleur, et inversement pour le transfert de masse.

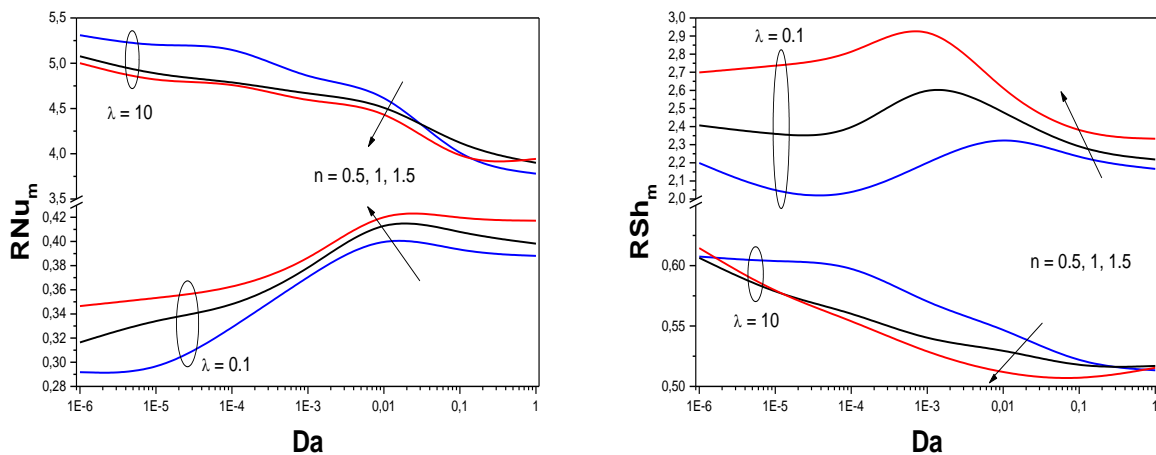


Figure V.8b : Variation de RNu_m et RSh_m avec Da pour la configuration en matrices poreuses : $FK_m = 1$ et $D_m = 5$

V.3.2 Caractéristiques de la réaction chimique

Pour étudier l'impact des paramètres caractérisant la réaction chimique sur les transferts de chaleur et de masse, un milieu poreux isotrope ($\lambda = 1$) va être considéré par la

suite, sachant que des résultats similaires ont été retrouvés quand l'anisotropie a été prise en compte.

L'influence du nombre de Frank-Kamenetskii sur les températures et concentrations pariétales et moyennes pour différentes valeurs de l'indice de loi de puissance est illustrée sur la Figure V.9a pour la disposition en couche poreuse. Il ressort de cette figure que la forme des courbes θ_p est initialement croissante le long du canal avant d'atteindre une valeur constante. Ce comportement est dû à la nature exothermique de la réaction chimique qui augmente la température jusqu'à une valeur maximale correspondant à l'effet le plus prédominant de cette réaction. Au-delà de ce pic, la température est contrôlée par le transport. Comme la réaction se produit sur la surface des parois du canal et donne naissance à la génération de chaleur, sa température augmente considérablement avec le nombre de Frank-Kamenetskii number. En effet, ce paramètre traduit directement l'influence de la réaction sur le transfert thermique ; plus FK_m est important plus la chaleur dégagée par la réaction chimique est importante, causant ainsi un accroissement de θ_p . A l'opposé de la température de paroi, les courbes de la concentration pariétale présentent plutôt une forme décroissante depuis l'entrée du canal jusqu'à un régime d'établissement. Comme pour la température, l'effet de FK_m est similaire ; son accroissement réduit C_p et accélère l'établissement. En effet, aux grandes valeurs du nombre de Frank-Kamenetskii la majorité des réactifs sont transformées en produits et ainsi la concentration pariétale décroît vers zéro. Le même comportement est retrouvé pour la température moyenne θ_m et la concentration moyenne C_m avec cependant une magnitude largement inférieure et disparition de l'établissement. L'impact de l'indice n est perceptible uniquement dans la région proche de l'entrée du canal et à faibles valeurs de FK_m avec toutefois un comportement similaire.

Bien qu'il semble globalement que l'allure des courbes de θ_p , C_p , θ_m et C_m soit la même pour les deux configurations, des différences sont perçues localement au niveau des zones non poreuses situées entre les matrices pour la deuxième disposition du milieu poreux (Figure V.9b). En effet, dans ces régions les concentrations pariétales et moyennes sont respectivement plus importantes et plus faibles par rapport à ce qui est retrouvé dans les zones poreuses. Une évolution dans le sens inverse est observé pour le champ thermique avec toutefois un faible écart de comportement entre les deux régions.

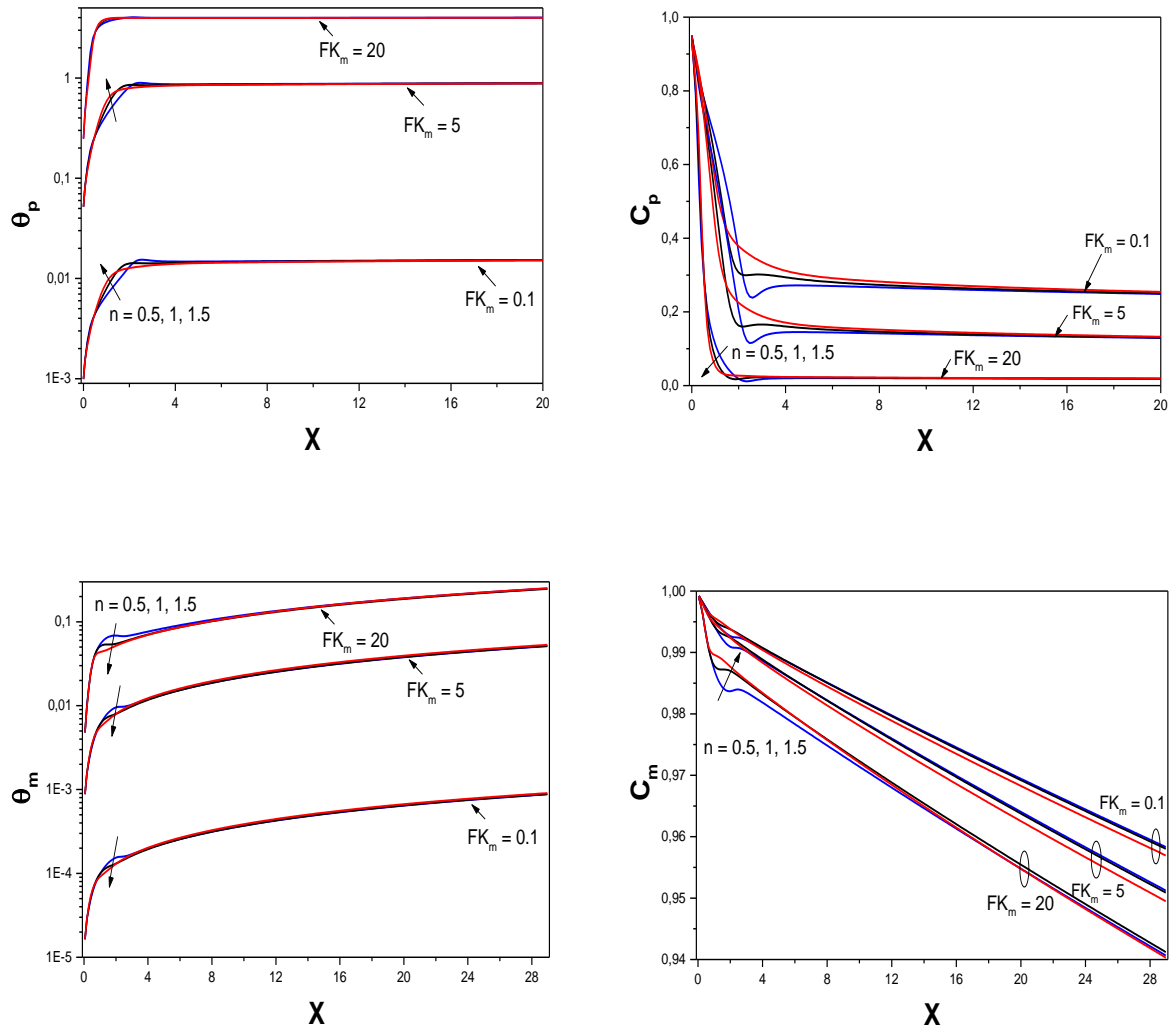


Figure V.9a : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec FK_m en configuration couche poreuse :

$$Da = 10^{-3}, \lambda = 1 \text{ et } D_m = 5$$

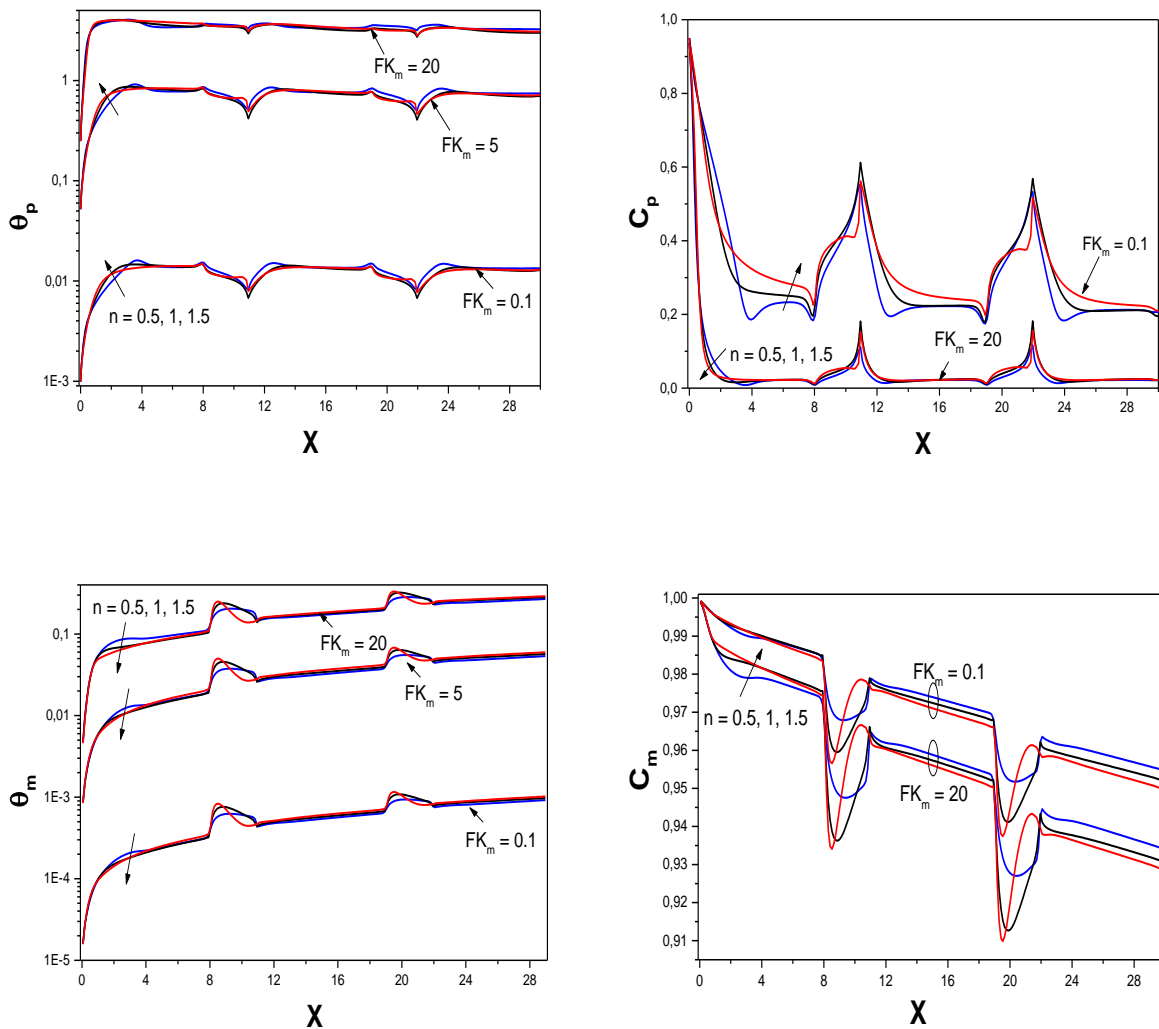


Figure V.9b : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec FK_m en configuration matrices poreuses:

$$Da = 10^{-3}, \lambda = 1 \text{ et } D_m = 5$$

L'évolution des nombres de Nusselt et Sherwood moyens avec FK_m sont représentées sur la Figure V.10 qui montre que le fluide dilatant donne les plus grands taux de transfert, et que la nature exothermique de la réaction chimique ne devient nuisible aux transferts de chaleur et de masse qu'à partir d'un nombre de Frank-Kamenetskii autour de 10 où Nu_m et Sh_m commencent à décroître. Cette figure révèle que malgré un volume poreux identique entre les deux configurations, l'alternance entre une zone partiellement poreuse (matrice) et une zone totalement fluide est plus attractive du point de vue transferts de chaleur et de masse puisque les valeurs de Nu_m et Sh_m obtenues avec la seconde configuration sont plus

importantes que celles retrouvées avec une disposition du milieu poreux en couche.

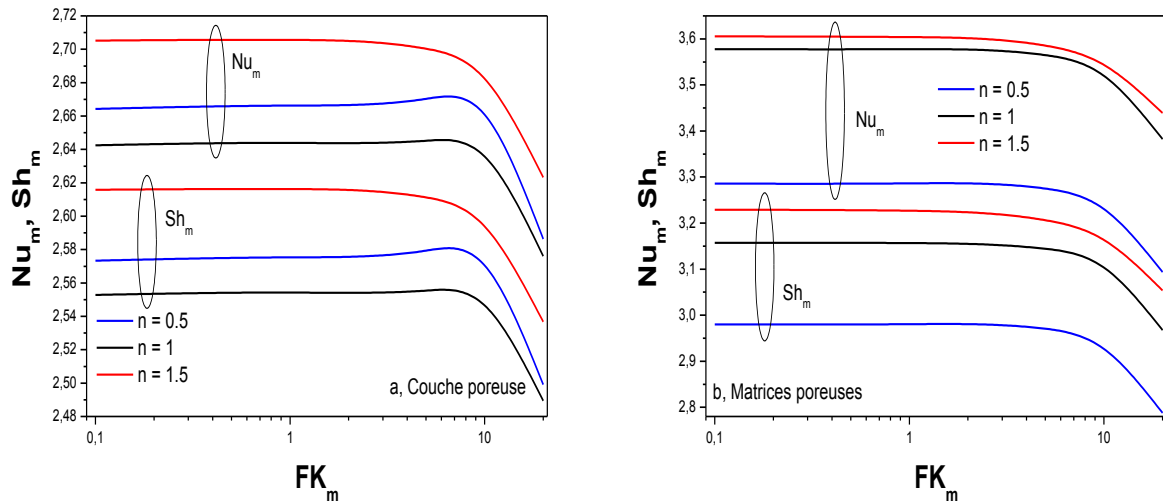


Figure V.10 : Variation de Nu_m et Sh_m avec FK_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $D_m = 5$

L'effet de la réactivité chimique, exprimée par le nombre de Damköhler modifié, sur l'évolution axiale des températures et des concentrations pariétales et moyennes est illustré sur les Figure V.11a et V.11b. Comme le nombre de Damköhler représente le rapport entre les échelles de temps de diffusion et de réaction, aux grandes valeurs de D_m la réaction est alors très rapide et la diffusion devient dominante résultant en une réduction de θ_m et C_m ainsi que les valeurs pariétales θ_p and C_p où l'effet de ce paramètre est plus apparent puisque la réaction se produit sur les parois du canal. Cette situation va conduire à une diminution des taux de transferts de chaleur et de masse avec le nombre de Damköhler modifié comme il apparaît sur la Figure V.12 où les plus grandes valeurs de Nu_m et Sh_m sont obtenues pour le fluide dilatant. Comme retrouvé en considérant l'effet de FK_m , la configuration en matrices poreuses reste la meilleure du point de vue transferts thermique et massique.

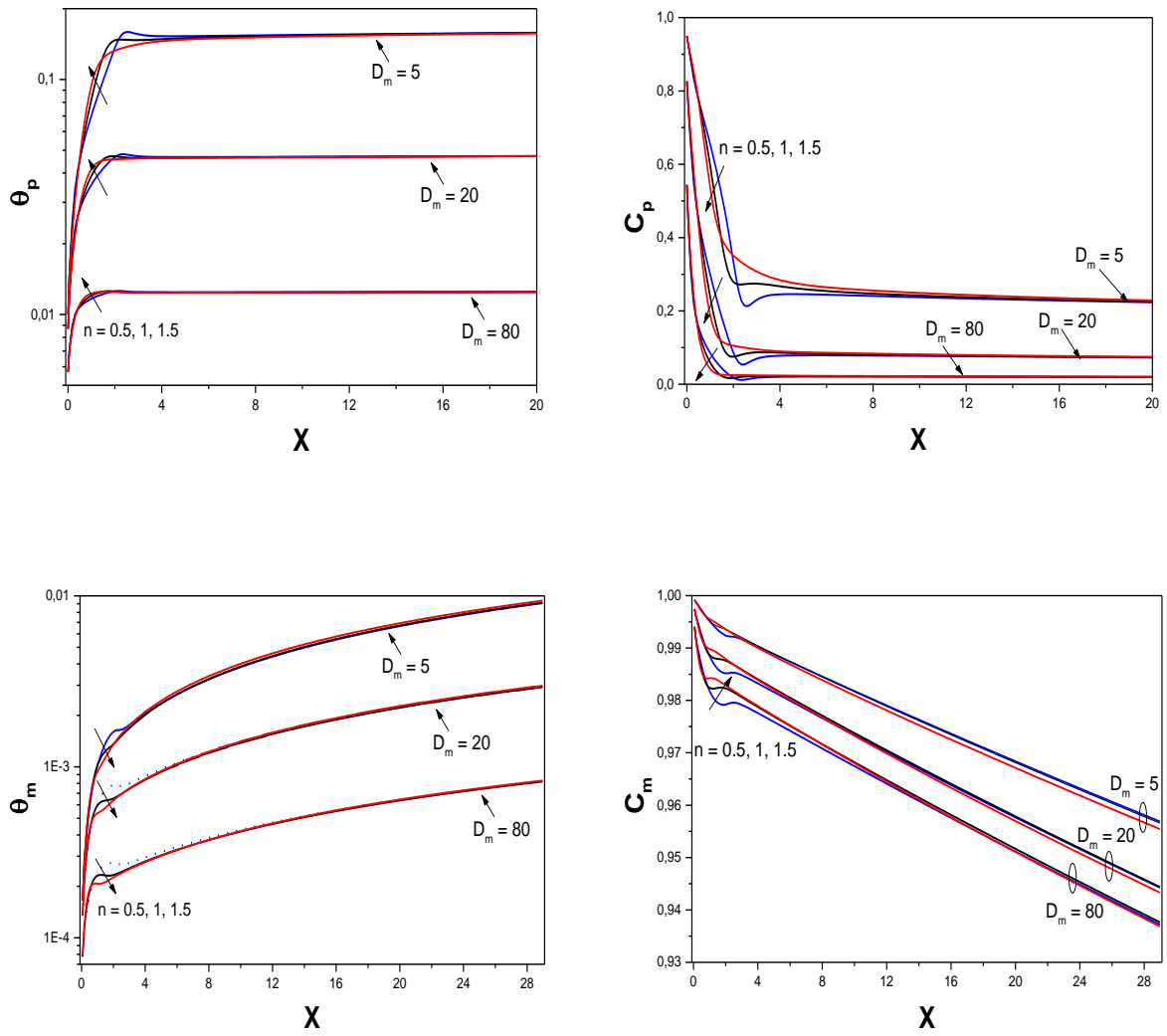


Figure V.11a : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec D_m en configuration couche poreuse :

$$Da = 10^{-3}, \lambda = 1 \text{ et } FK_m = 1$$

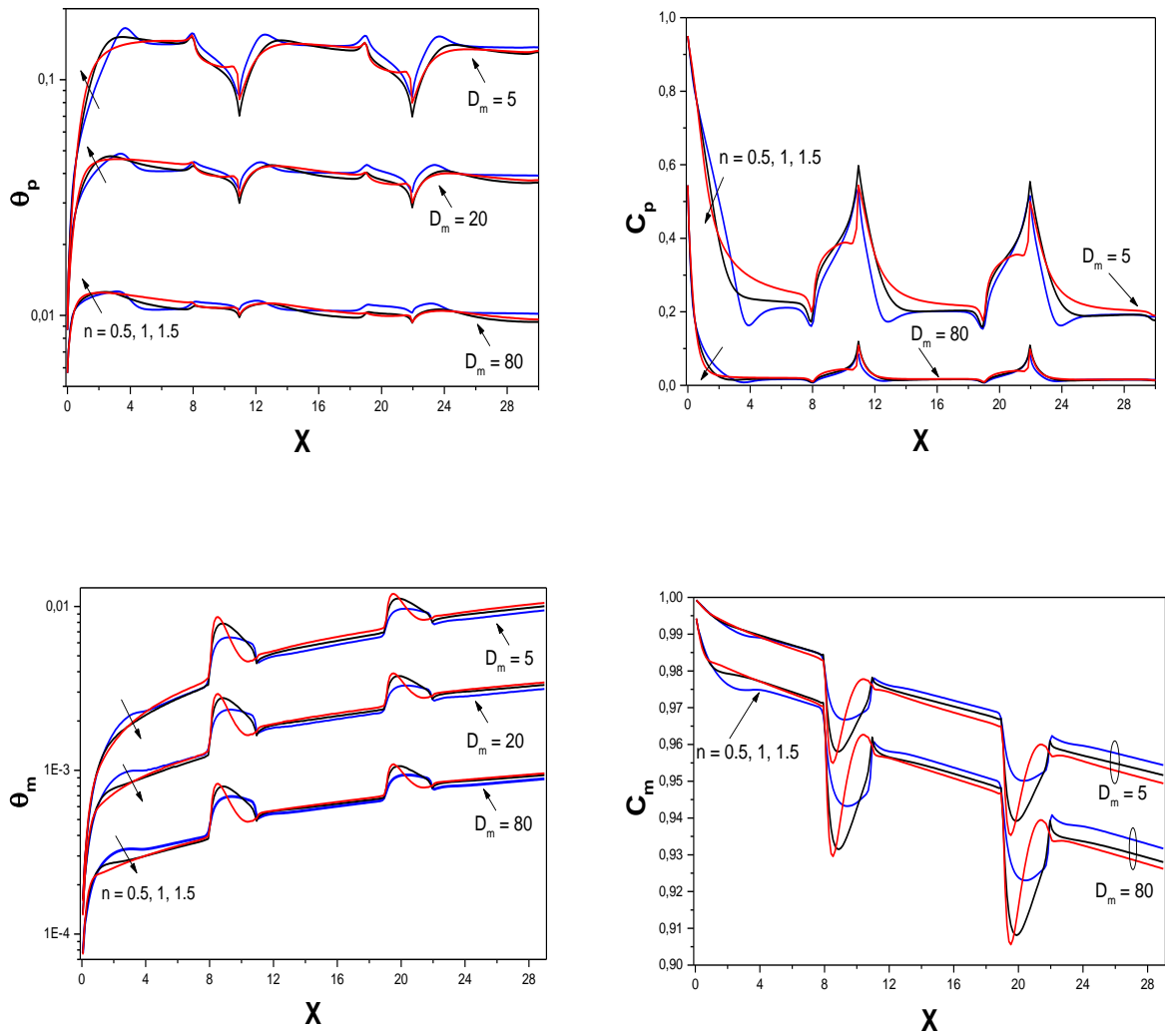


Figure V.11b : Variation de (θ_p, C_p) et (θ_m, C_m) avec D_m en configuration matrices poreuses:

$$Da = 10^{-3}, \lambda = 1 \text{ et } FK_m = 1$$

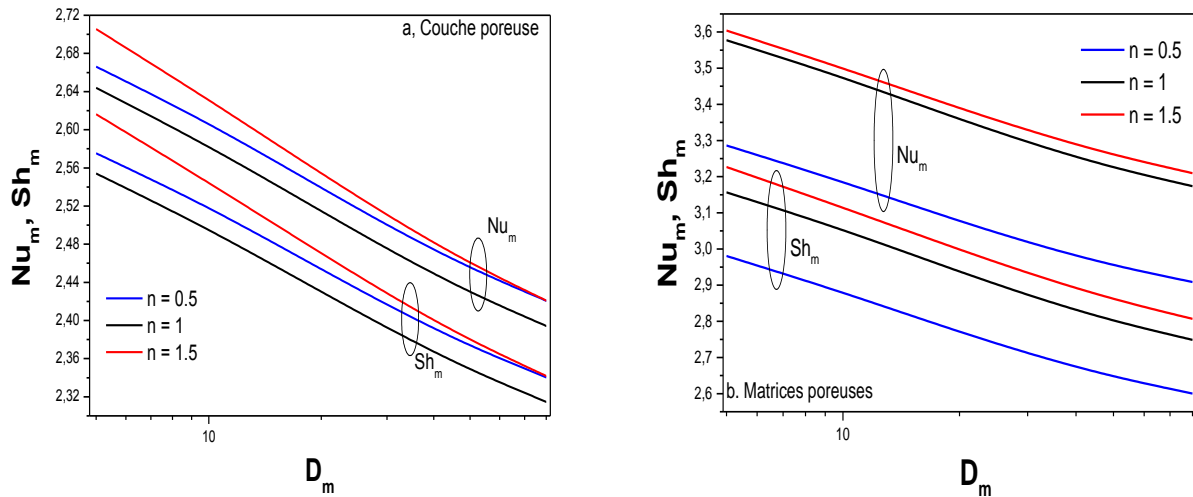


Figure V.12 : Variation de Nu_m et Sh_m avec D_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$ et $FK_m = 1$

V.4 Résultats en régime oscillatoire

La deuxième partie des résultats est consacrée à l'analyse de l'effet d'un régime oscillatoire pour le cas d'un milieu poreux isotrope disposé en couche poreuse ; sachant que des résultats similaires ont été retrouvés en tenant compte de l'anisotropie thermique et pour une configuration en matrices poreuses.

V.4.1 Amplitude d'oscillation

La première caractéristique de l'écoulement oscillatoire à étudier son effet sur les transferts de chaleur et de masse est l'amplitude d'oscillation.

Les Figures V.13a, V.13b et V.13c illustrent bien que l'aspect oscillatoire de la vitesse du fluide à l'entrée du canal est transmis aux différentes variables du problème. Pour une amplitude A différente de zéro, après une zone de transition variant entre 2 à 3 cycles d'oscillation, les courbes montrent une évolution périodique établie. Les transferts thermique et massique diminuent durant la première demi-période et augmentent durant la deuxième demi-période. L'accroissement de l'amplitude entraîne une grande oscillation sur les évolutions de θ_m et C_m qui augmentent et diminuent respectivement avec A ; ceci aura pour conséquence une amélioration des taux de transfert comme on le verra plus loin.

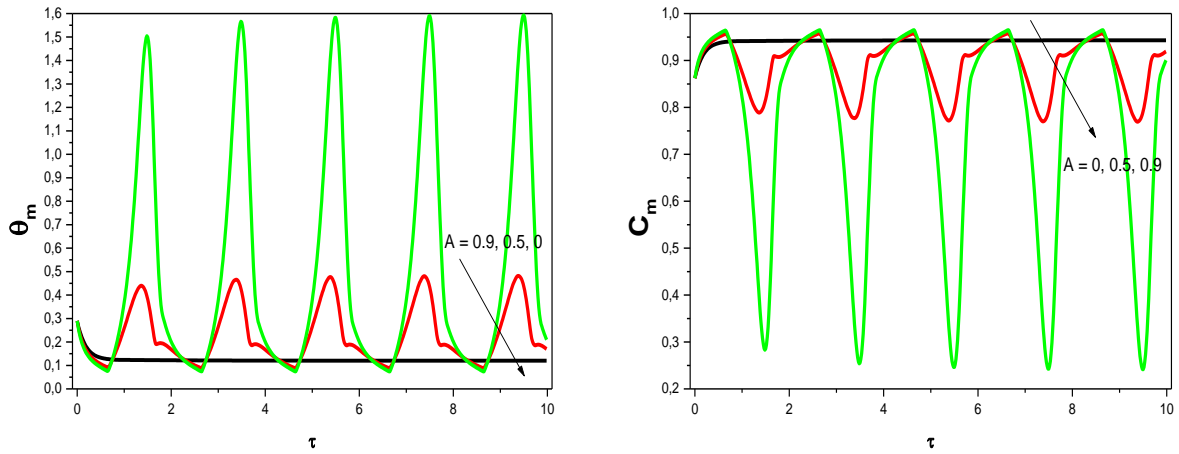


Figure V.13a : Evolution temporelle de θ_m et C_m à la sortie du canal pour différentes amplitudes d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

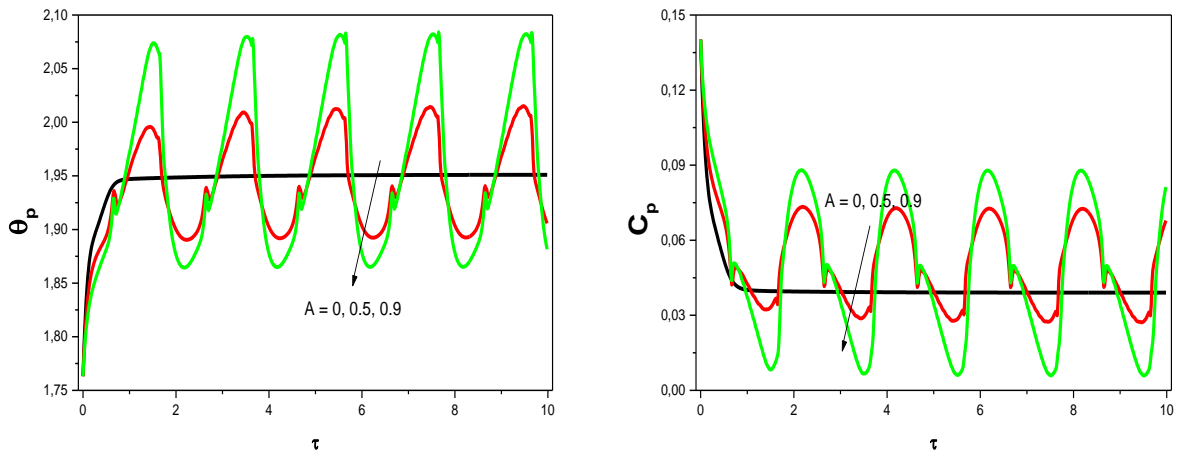


Figure V.13b : Evolution temporelle de θ_p et C_p à la sortie du canal pour différentes amplitudes d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

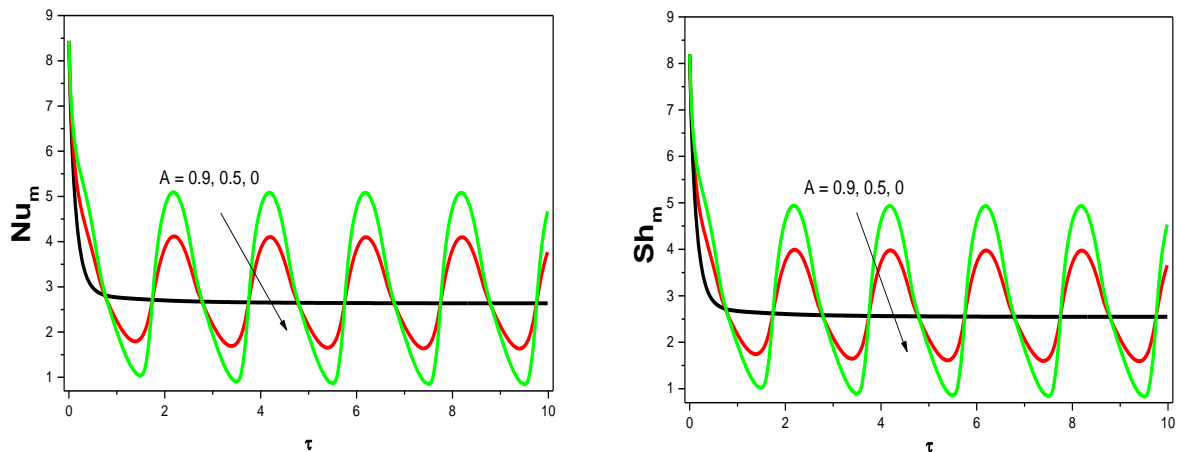


Figure V.13c : Evolution temporelle de Nu_m et Sh_m à la sortie du canal pour différentes amplitudes d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Pour l'étude des transferts globaux, nous avons représenté sur la figure V.14 l'évolution des nombres de Nusselt et de Sherwood moyens moyennés sur une période dans le régime périodiquement établi en fonction de l'amplitude d'oscillation pour divers indices de loi de puissance. L'analyse des Figures V.14 et V.15 fait ressortir d'une part, un accroissement des transferts avec l'amplitude d'oscillation et d'autre part, une amélioration par rapport au cas non oscillatoire où les plus grandes valeurs des rapports RNu_m et RSh_m , normalisés par les valeurs à $A = 0$, sont obtenues à $A = 0.9$ et $n = 0.5$ et atteignent une valeur autour de 1.25. A cause de la valeur du nombre de Lewis considérée dans cette étude ($Le = 1$), les courbes de ces deux rapports pour chaque valeur de n sont presque confondues.

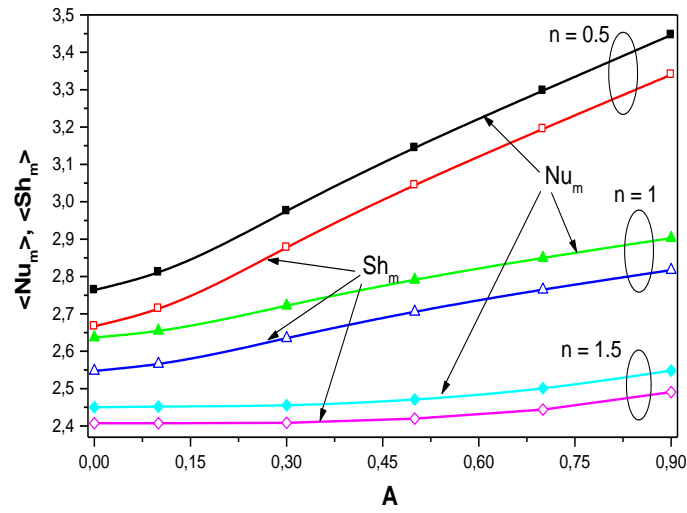


Figure V.14 : Evolutions de $\langle Nu_m \rangle$ et $\langle Sh_m \rangle$ avec l'amplitude d'oscillation : $Da=10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

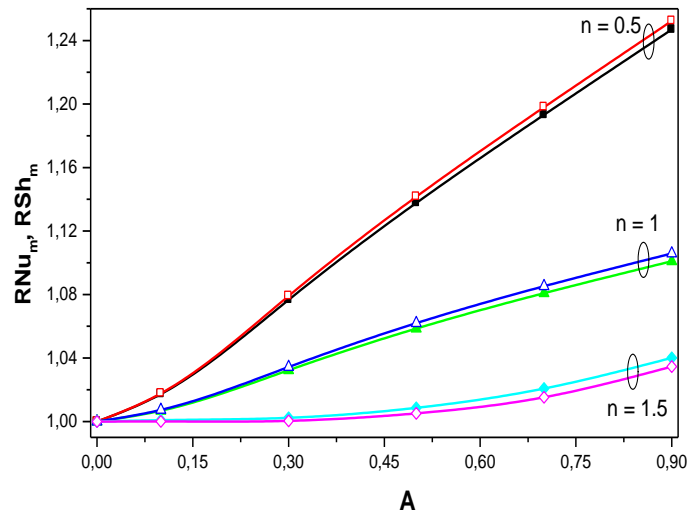


Figure V.15 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec l'amplitude d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $St = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

V.4.2 Fréquence d'oscillation

Un autre paramètre pertinent qui caractérise l'écoulement oscillatoire est la fréquence traduite sous forme adimensionnelle par le nombre de Strouhal. Les Figures V.16a, V.16b et V.16c montrent que, comme pour la vitesse, les différentes grandeurs caractérisant les transferts thermique et massique présentent un aspect oscillatoire qui s'accroît en augmentant St. Le régime périodiquement établi est obtenu après un certain nombre de périodes qui croît avec la fréquence d'oscillation. Ainsi à $St = 0.1$, l'établissement périodique est obtenu après 1 à 2 cycles, alors qu'à $St = 2$ il faut aller jusqu'à 4 périodes.

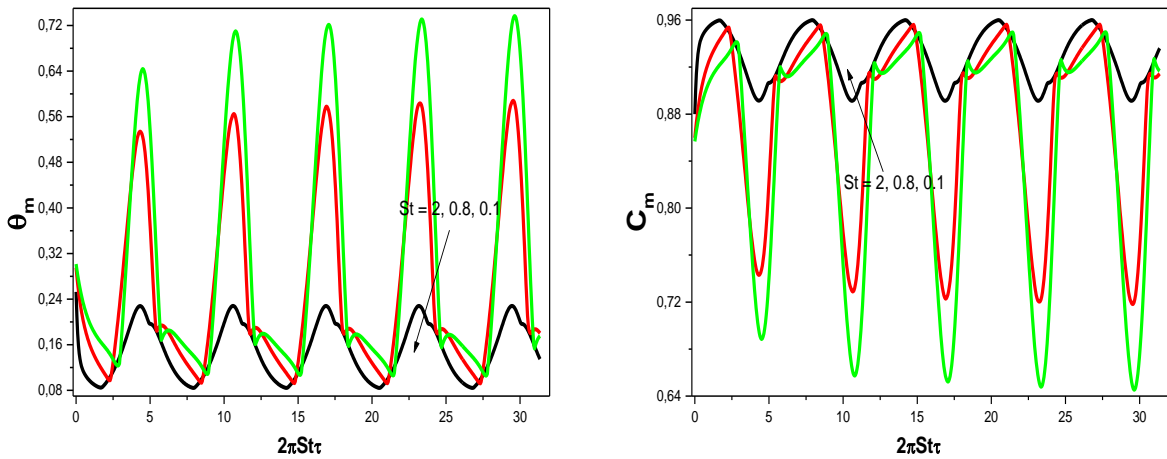


Figure V.16a : Evolution temporelle de θ_m et C_m à la sortie du canal pour différentes fréquences d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

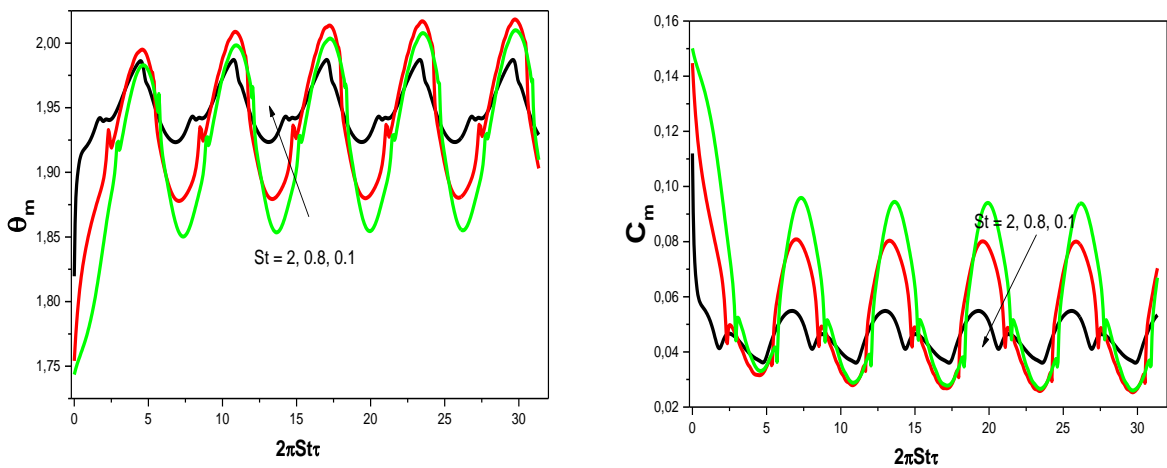


Figure V.16b : Evolution temporelle de θ_p et C_p à la sortie du canal pour différentes fréquences d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

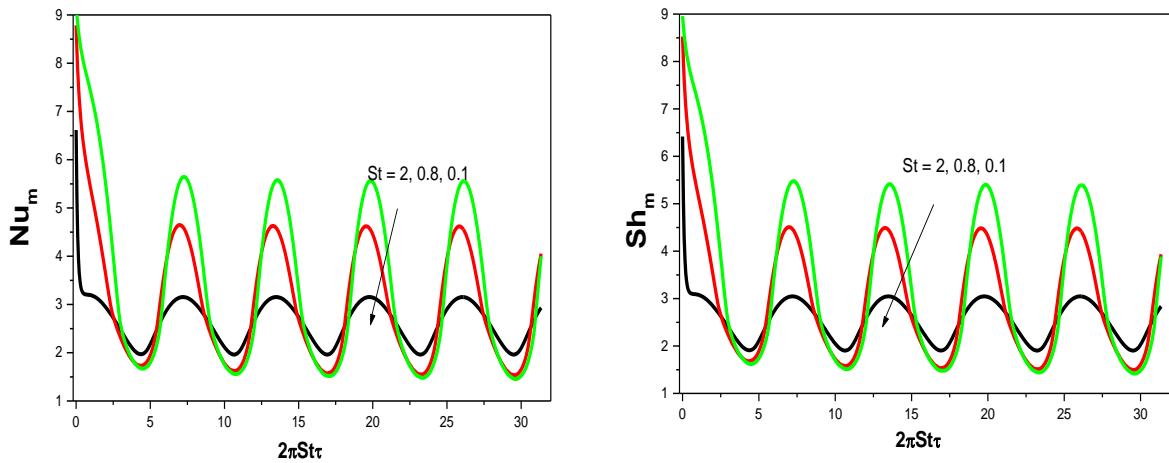


Figure V.16c : Evolution temporelle de Nu_m et Sh_m à la sortie du canal pour différentes fréquences d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

Les Figures V.17 et V.18 montrent un accroissement des taux de transfert avec le nombre de Strouhal. La comparaison par rapport au cas non oscillatoire révèle que l'ajout d'une composante oscillatoire à l'écoulement moyen améliore les échanges avec le plus grand taux de l'ordre de 25 % obtenu pour les fluides pseudoplastiques ($n = 0.5$).

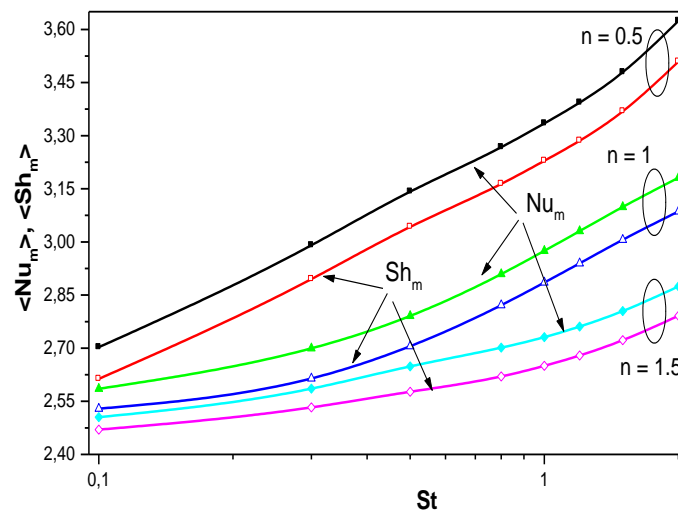


Figure V.17 : Evolutions de $\langle Nu_m \rangle$ et $\langle Sh_m \rangle$ avec la fréquence d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda=1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

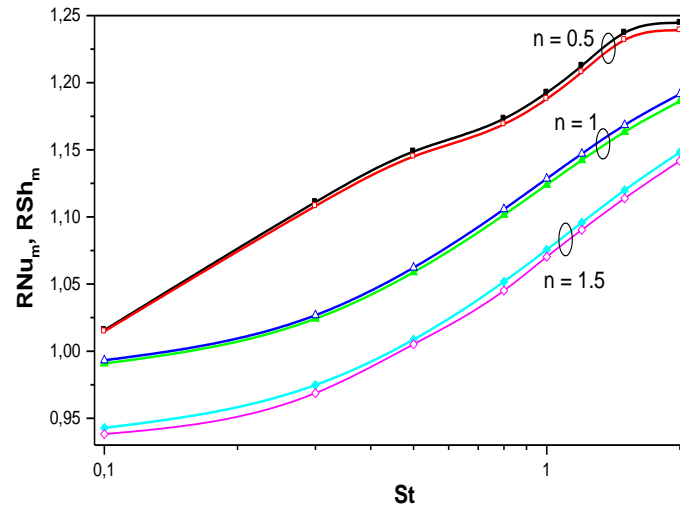


Figure V.18 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec la fréquence d'oscillation : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $D_m = 5$ et $FK_m = 10$

V.4.3 Caractéristiques de la réaction chimique

Pour mettre en évidence l'impact du régime oscillatoire en variant les paramètres de la réaction chimique, nous avons représenté sur les Figures V.19 et V.20 les évolutions de RNu_m et RSh_m avec FK_m et D_m respectivement. L'ajout d'une composante oscillatoire à l'écoulement moyen semble bénéfique aux transferts thermique et massique pour les fluides pseudoplastiques et Newtoniens (rapports supérieurs à l'unité), alors qu'il est défavorable pour les fluides dilatants (rapports inférieurs à l'unité). Toutefois, ces améliorations et réductions varient très peu avec les caractéristiques de la réaction chimique : une amélioration moyenne de l'ordre de 14 % (pour FK_m) et 5 % (pour D_m) à $n = 0.5$ et autour de 6 % (pour FK_m) et 3.5 % (pour D_m) à $n = 1$, et une réduction moyenne d'environ 1 % à $n = 1.5$.

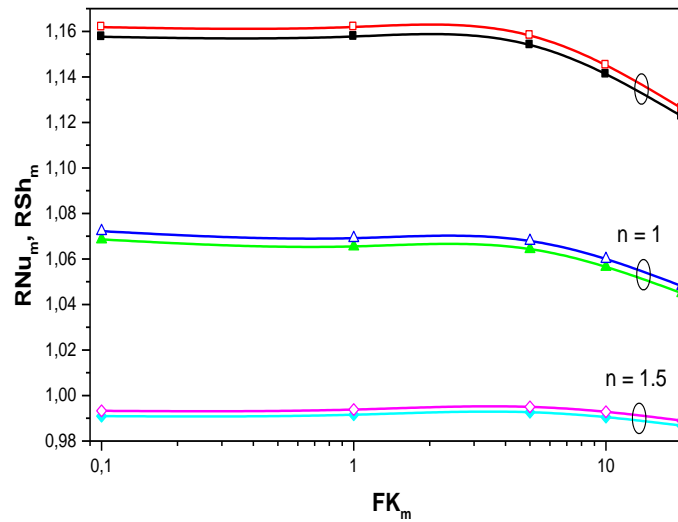


Figure V.19 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec FK_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $knSt=0.5$ et $D_m = 5$

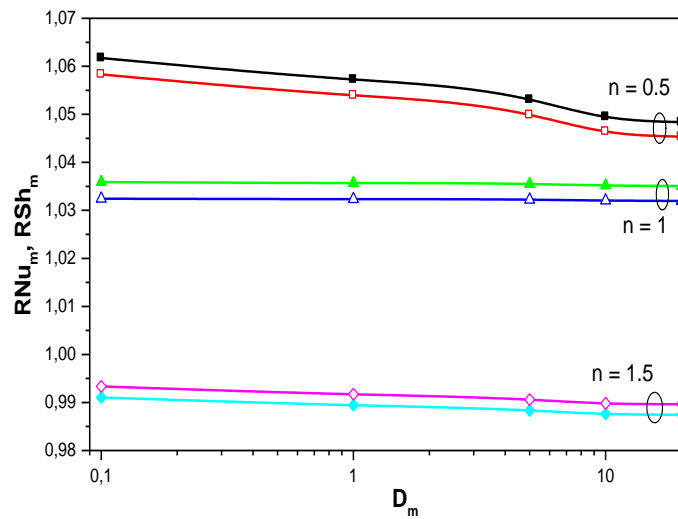


Figure V.20 : Evolutions de RNu_m et RSh_m avec D_m : $Da = 10^{-3}$, $\lambda = 1$, $n = 1$, $A = 0.5$, $St=0.5$ et $FK_m = 10$

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'impact que peut avoir un milieu poreux anisotrope saturé d'un fluide non-Newtonien sur les transferts de chaleur et de masse en présence d'une réaction chimique de surface. Les résultats des simulations numériques ont été exploités dans un premier temps en régime stationnaire, ensuite pour un régime oscillatoire. Il

a été trouvé que le système physique considéré est le plus efficace aux grandes valeurs du rapport d'anisotropie thermique, de l'amplitude et de la fréquence d'oscillation. Un effet inverse a été retrouvé avec l'accroissement des caractéristiques liées à la réaction chimique. En régime stationnaire, le fluide dilatant ($n = 1.5$) a conduit globalement aux plus grands taux de transfert, alors que le fluide pseudoplastique ($n = 0.5$) n'est intéressant qu'en régime oscillatoire.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Dans cette thèse nous avons entrepris une modélisation numérique des transferts de chaleur et de masse, en régime oscillatoire, dans un canal partiellement rempli d'un milieu poreux anisotrope en conductivité thermique et saturé d'un fluide non-Newtonien obéissant au modèle de loi de puissance en présence d'une réaction chimique. L'écoulement dans la région poreuse a été décrit par le modèle de Darcy-Brinkman-Forchheimer modifié pour les fluides en loi de puissance, et la méthode des volumes finis a été utilisée pour résoudre les équations gouvernantes. Après l'élaboration du code de calcul, basé sur l'algorithme SIMPLE, nous avons procédé à sa validation par une comparaison avec des travaux antérieurs. Les résultats obtenus ont été exploités en mettant en évidence l'influence de certains paramètres liés au type de fluide (indice de loi de puissance), aux propriétés du milieu poreux (perméabilité et rapport d'anisotropie en conductivité thermique), aux caractéristiques de la réaction chimique (nombres modifiés de Frank-Kamenetskii et Damköhler) et de l'écoulement oscillatoire (amplitude et fréquence).

L'étude paramétrique a permis de mettre en évidence les points suivants :

- L'augmentation du rapport de conductivité thermique anisotrope améliore le transfert de chaleur mais réduit le transfert de masse.
- Aux faibles nombres de Darcy, le fluide pseudoplastique ($n = 0.5$) présente les plus grands taux de transfert de chaleur et de masse, et à partir d'une certaine valeur de Da , fortement liée à λ , c'est le fluide dilatant ($n = 1.5$) qui améliore les transferts.
- La comparaison au cas d'un milieu poreux isotrope révèle que l'anisotropie thermique affecte fortement les échanges. Les gains les plus élevés de transferts de chaleur et de masse sont obtenus respectivement pour $\lambda = 10$ et $\lambda = 0,1$. Les pertes maximales sont atteintes avec $\lambda = 0,1$ pour le transfert de chaleur et avec $\lambda = 10$ pour le transfert de masse. Ces valeurs dépendent fortement de Da et n .
- Les températures et les concentrations moyennes et pariétales sont fortement affectées par la nature exothermique de la réaction chimique, ce qui entraîne une diminution des taux de transfert de chaleur et de masse avec l'augmentation des nombres modifiés de Frank-Kamenetskii et de Damköhler.

- L'ajout d'une composante oscillatoire à l'écoulement moyen est bénéfique puisque les rapports RNu_m et RSh_m sont globalement supérieurs à l'unité, et augmentent avec l'amplitude et la fréquence d'oscillation mais sont très peu sensibles aux paramètres caractérisant la réaction chimique. Les plus grands taux d'amélioration, de l'ordre de 25 %, sont obtenus pour le fluide pseudoplastique ($n = 0.5$).

Perspectives

Comme prolongation à cette étude, nous proposons les perspectives suivantes :

- Utiliser d'autres types de fluides non-Newtoniens
- Ajouter des nanoparticules aux fluides : nanofluides non-Newtoniens
- Prise en compte de la dissipation visqueuse

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] G. Marsily, Quantitative hydrogeology: groundwater hydrology for engineers, Academic Press, San Diego, 1986.
- [2] J. Bear, Dynamics of fluids in porous media, Dover publications, New York, 1972.
- [3] www.cnrs.fr/cnrs-images/chimieaulyce/THEMES/catalyse/defini.htm.
- [4] R.P. Chhabra and J.F. Richardson, non-Newtonian flow in the process industries: fundamentals and engineering applications, Butterworth-Heinemann, 1999.
- [5] H.A. Barnes, J.E. Hutton and K. Walters, An introduction to rheology, Elsevier Science Publisher, 1993.
- [6] T. Sochi, Non-Newtonian flow in Porous media, Polymer, Vol. 51, 2010, pp. 5007-5023.
- [7] H. Pascal, Nonsteady flow of non-Newtonian fluids through a porous medium, I. J. Eng. Sci., Vol. 21, 1983, pp. 199-210.
- [8] H. Pascal, Rheological behavior effect of non-Newtonian fluids on steady and unsteady flow through a porous medium, I. J. Num. Analyt. Meth. Geomech., Vol. 7, 1983, pp. 289-303.
- [9] M. Sözen and K. Vafai, Analysis of oscillating compressible flow through a packed bed, Int. J. Heat Fluid Flow, Vol. 12, 1991, pp. 130-136.
- [10] S.Y. Kim, B.H. Kang and J.M. Hyun, Heat Transfer from Pulsating Flow in a Channel Filled with Porous Media, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.37, 1994, pp. 2025-2033.
- [11] K.R. Hall, G.M. Smith and D.J. Turcke, Comparison of Oscillatory and Stationary Flow through Porous Media, Coastal Eng., Vol. 24, 1995, pp. 217-232.

- [12] Z. Guo, S.Y. Kim and H.J. Sung, Pulsating Flow and Heat Transfer in a Pipe Partially Filled with a Porous Medium, *Int. J. Heat Mass Transfer* , Vol. 40, 1997, pp. 4209-4218.
- [13] Z. Guo, H.J. Sung and J.M. Hyun, Pulsating Flow and Heat Transfer in an annulus Partially Filled with a Porous Media, *Num. Heat Transfer Part A*, Vol. 31, 1997, pp. 517-527.
- [14] H.L. Fu, K.C. Leong, X.Y. Huang and C.Y. Liu, An experimental Study of Heat Transfer of a Porous Channel Subjected to Oscillating Flow, *ASME J. Heat Transfer*, Vol. 123, 2001, pp. 163-170.
- [15] K.C. Leong and L.W. Jin, An Experimental Study of Heat Transfer in Oscillating Flow through a Channel Filled with an Aluminum Foam, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 48, 2005, pp. 243-253.
- [16] R. Bhargava, H.S. Takhar, S. Rawat, T.A. Bég and O.A. Bég, Finite Elements Solutions for non-Newtonian Pulsatile Flow in a non-Darcian Porous Medium Conduit, *Nonlinear Analysis: Modeling Control*, Vol. 12, 2007, pp. 317-327.
- [17] P.C. Huang and C.F. Yang, Analysis of Pulsating Convection from Two Heat Sources Mounted with Porous Blocks, *Int. J. Heat Mass Transfer* , Vol. 51, 2008, pp. 6294-6311.
- [18] P.C. Huang, Y.J. Chen and M.C. Tzou, Pulsating Convective Cooling across Two Porous-Covering Heated Blocks, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 52, 2009, pp. 932-951.
- [19] M. T. Pamuk and M. Özdemir, Heat transfer in porous media of steel balls under oscillating flow, *Exp. Therm. Fluid Sci.*, Vol. 42, 2012, pp.79-92.
- [20] N. Targui and H. Kahalerras, Analysis of a double pipe heat exchanger performance by use of porous baffles and pulsating flow, *Energy Conv. Manage.*, Vol. 76, 2013, pp. 43-54.
- [21] B. Dey and G.P. R. Sekhar, Mass transfer and species separation due to oscillatory flow in a Brinkman medium, *Int. J. Eng. Sci.*, Vol. 74, 2014, pp. 35-54.

- [22] A. Nakayama and A.V. Shenoy, Non-Darcy forced convective heat transfer in a channel embedded in a non-Newtonian inelastic fluid-saturated porous medium, *Canadian J. Chem. Eng.*, Vol. 71, 1993, pp. 168-173.
- [23] G. Chen and A. Hadim, Forced convection of a power-law fluid in a porous channel – numerical solutions, *Heat Mass Transfer*, Vol. 34, 1998, pp. 221-228.
- [24] M.A. Al-Nimr and T.K. Aldoss, The effect of the macroscopic local inertial term on the non-Newtonian fluid flow in channels filled with porous medium, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 47, 2004, pp. 125-133.
- [25] R. Nebbali and K. Bouhadef, Numerical study of forced convection in a 3D flow of a non-Newtonian fluid through a porous duct, *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow*, Vol. 16, 2006, pp. 870-889.
- [26] Y.L. Chen, X.D. Cao and K.Q. Zhu, A gray lattice Boltzmann model for power-law fluid and its application in the study of slip velocity at porous interface, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 159, 2009, pp. 130-136.
- [27] G.M. Chen and C.P. Tso, Effects of viscous dissipation on forced convective heat transfer in a channel embedded in a power-law fluid saturated porous medium, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, 2011, pp. 57-62.
- [28] A.I. Alsabery, A.J. Chamkha, S.H. Hussain, H. Saleh and I. Hashim, Heatline visualization of natural convection in a trapezoidal cavity partly filled with nanofluid porous layer and partly with non-Newtonian fluid layer, *Adv. Powder Technol.*, Vol. 26, 2015, pp. 1230-1244.
- [29] R.A. Silva, M. Assato and M.J.S. de Lemos, Mathematical modeling and numerical results of power-law fluid flow over a finite porous medium, *Int. J. Therm. Sci.*, Vol. 100, 2016, pp. 126-137.
- [30] W.J. Chang and C.F. Hsiao, Natural convection in a vertical cylinder filled with anisotropic porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, 1993, pp. 3361-3367.

- [31] Z. Jingzhou and S. Renqia, Non-Darcian and anisotropic effects on natural convection in horizontal porous media enclosure, *J. Therm. Sci.*, Vol. 5, 1996, pp. 122-127.
- [32] P. Nithiarasu, K.S. Sujatha, K. Ravindran, T. Sundarajan and K.N. Seethramu, Non-Darcy natural convection in a hydrodynamically and thermally anisotropic porous medium, *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, Vol. 188, 2000, pp. 413-430.
- [33] S. Govender, On the effect of anisotropy on the stability of convection in rotating porous media, *Transp. Porous Med.*, Vol. 64, 2006, pp. 413-422.
- [34] D. Jaya Krishna, Tanmay Basak. Sari and K.Das, Natural convection in a heating hydrodynamically and thermally anisotropic non-Darcien porous medium, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 51, 2008, pp. 4691-4703.
- [35] M. Mobedi, O. Cekmer and I. Pop, Forced convection heat transfer inside an anisotropic porous channel with oblique principal axes: Effect of viscous dissipation, *Int. J. Therm. Sci.*, Vol. 49, 2010, pp. 1984-1993.
- [36] A. Negara, A. Salama and S. Sun, Multiphase flow simulation with gravity effect in anisotropic porous media using multipoint flux approximation, *Comp. Fluids*, Vol. 114, 2015, pp. 66-74.
- [37] Y. Hu, D. Li, S. Shu and X. Niu, A multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for the flow and heat transfer in hydrodynamically and thermally anisotropic porous medium, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 104, 2017, pp. 544-558.
- [38] M.S. Malashetty, P.Cheng and B.H. Chao, Convective instability in a horizontal porous layer saturated with a chemically reacting fluid, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 37, 1994, pp. 2901-2908.
- [39] B.J. Minto, D.B. Ingham and I. Pop, Free convection driven by an exothermic reaction on a vertical surface embedded in porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 41, 1998, pp. 11-23.

- [40] C. Zhao, B.E. Hobbs, H.B. Muhlhauss and A. Ord, Finite element modeling of dissipative structures for non equilibrium chemical reactions in fluid-saturated porous media, *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, Vol. 184, 2000, pp. 1-14.
- [41] M. Li, Y. Wu, Y. Tian and Y. Zhai, Non-thermal equilibrium model of the coupled heat and mass transfer in strong endothermic chemical reaction system of porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 50, 2007, pp. 2936-2943.
- [42] A. Postelnicu, Onset of convection in a horizontal porous layer driven by catalytic surface reaction on the lower wall, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 52, 2009, pp. 2466-2470.
- [43] A. Bousri, K. Bouhadef, T. Langlet and H. Beji, Forced convection analysis of coupled heat and mass transfer in a channel filled with a reactive porous medium, *Prog. Comp. Fluid Dyn.*, Vol. 11, 2011, pp. 305-117.
- [44] M.H. Matin and I. Pop, Forced convection heat and mass transfer flow of a nanofluid through a porous channel with first order chemical reaction on the wall, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, Vol. 46 , 2013, pp. 134-141.
- [45] C. Yang, J.F. Thovert and G. Debenest, Upscaling of mass and thermal transports in porous media with heterogeneous combustion reactions, Vol. 84, 2015, pp. 862-875.
- [46] Y.J. Zhuang , H.Z. Yu and Q.Y. Zhu , A thermal non-equilibrium model for 3D double diffusive convection of power-law fluids with chemical reaction in the porous medium, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 115, 2017, pp. 670-694.
- [47] A.V. Shenoy, Non-Newtonian fluid heat transfer in porous media, *Adv. Heat Transfer*, Vol. 24, 1994, pp. 101-190.
- [48] S.V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, McGraw-Hill, New York, 1980.
- [49] R. Nebbali and K. Bouhadef, Non-Newtonian fluid flow in plane channels: Heat transfer enhancement using porous blocks, *Int. J. Therm. Sci.*, Vol. 50, 2011, pp. 1984-1995.

- [50] G.M Chen and C.P. Tso, Effects of viscous dissipation on forced convective heat transfer in a channel embedded in a power-law fluid saturated porous medium. *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, 2011, pp. 57-62.
- [51] S. Chikh, A. Boumedien, K. Bouhadeb and G. Lauriat, Analytical solution of non-Darcian forced convection in an annular duct partially filled with a porous medium, *Int. J. Heat Mass transfer*, Vol. 38, 1995, pp. 1543-1551.

ANNEXE