



HAL
open science

Diffusion-dispersion en milieu poreux : étude numérique du tenseur de dispersion pour quelques arrangements périodiques bidimensionnels ordonnés et désordonnés

Helio Pedro Amaral Souto

► **To cite this version:**

Helio Pedro Amaral Souto. Diffusion-dispersion en milieu poreux : étude numérique du tenseur de dispersion pour quelques arrangements périodiques bidimensionnels ordonnés et désordonnés. Matière Condensée [cond-mat]. Institut National Polytechnique de Lorraine, 1993. Français. NNT : 1993INPL097N . tel-01751235

HAL Id: tel-01751235

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01751235>

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

[M] 1993 AMARAL SOUTO, H.P.

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE
LABORATOIRE D'ÉNERGÉTIQUE ET DE MÉCANIQUE THÉORIQUE ET APPLIQUÉE

THÈSE

présentée à

L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'INPL

Spécialité: MÉCANIQUE ET ÉNERGÉTIQUE

par

Helio Pedro AMARAL SOUTO

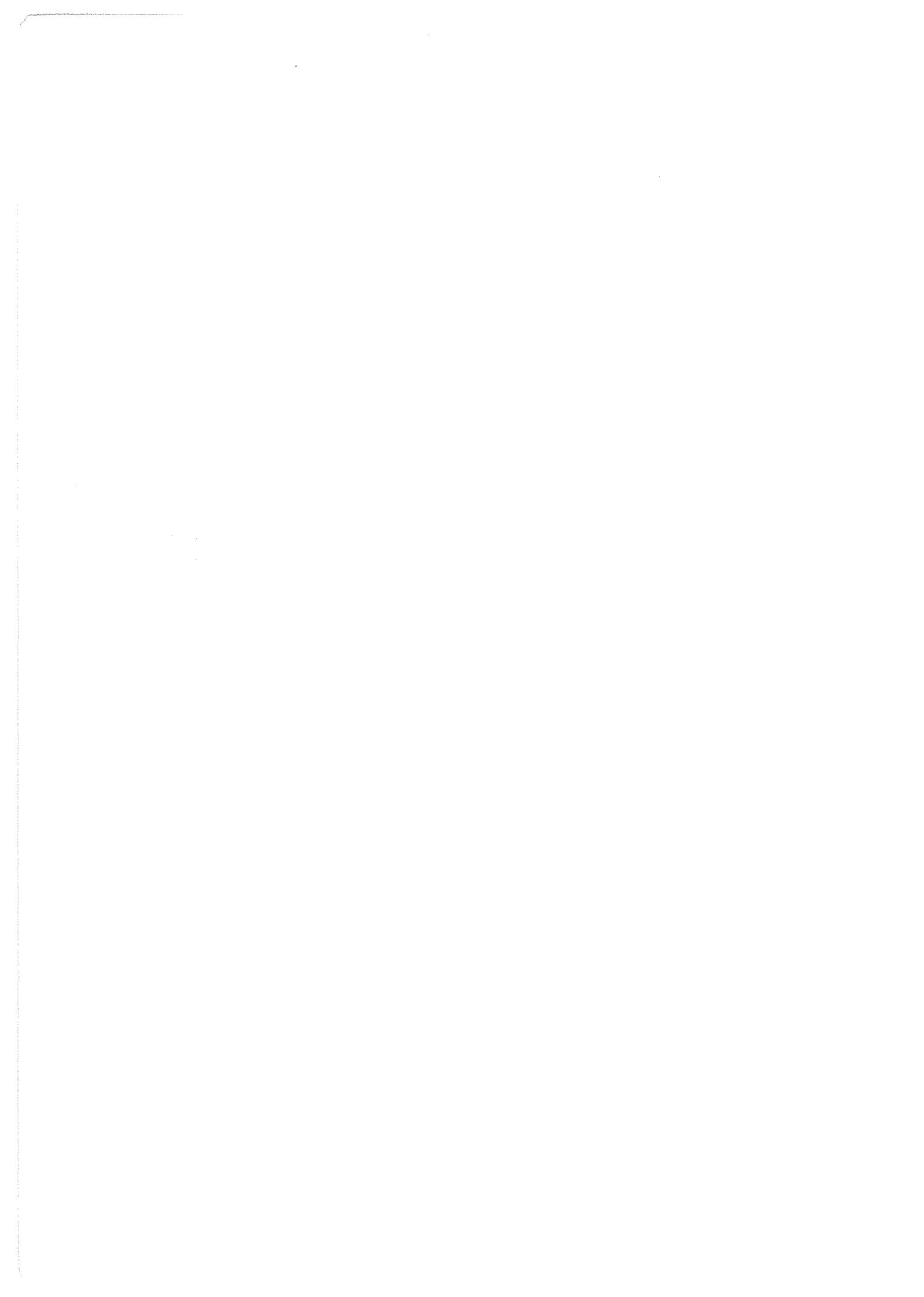
BIU NANCY
Service Commun de Documentation
INPL
2, avenue de la Forêt de Haye - B.P. 3
54501 VANDOEUVRE Cédex FRANCE

**DIFFUSION-DISPERSION EN MILIEU POREUX:
ÉTUDE NUMÉRIQUE DU TENSEUR DE DISPERSION
POUR QUELQUES ARRANGEMENTS PÉRIODIQUES BIDIMENSIONNELS
"ORDONNÉS" ET "DÉSORDONNÉS"**

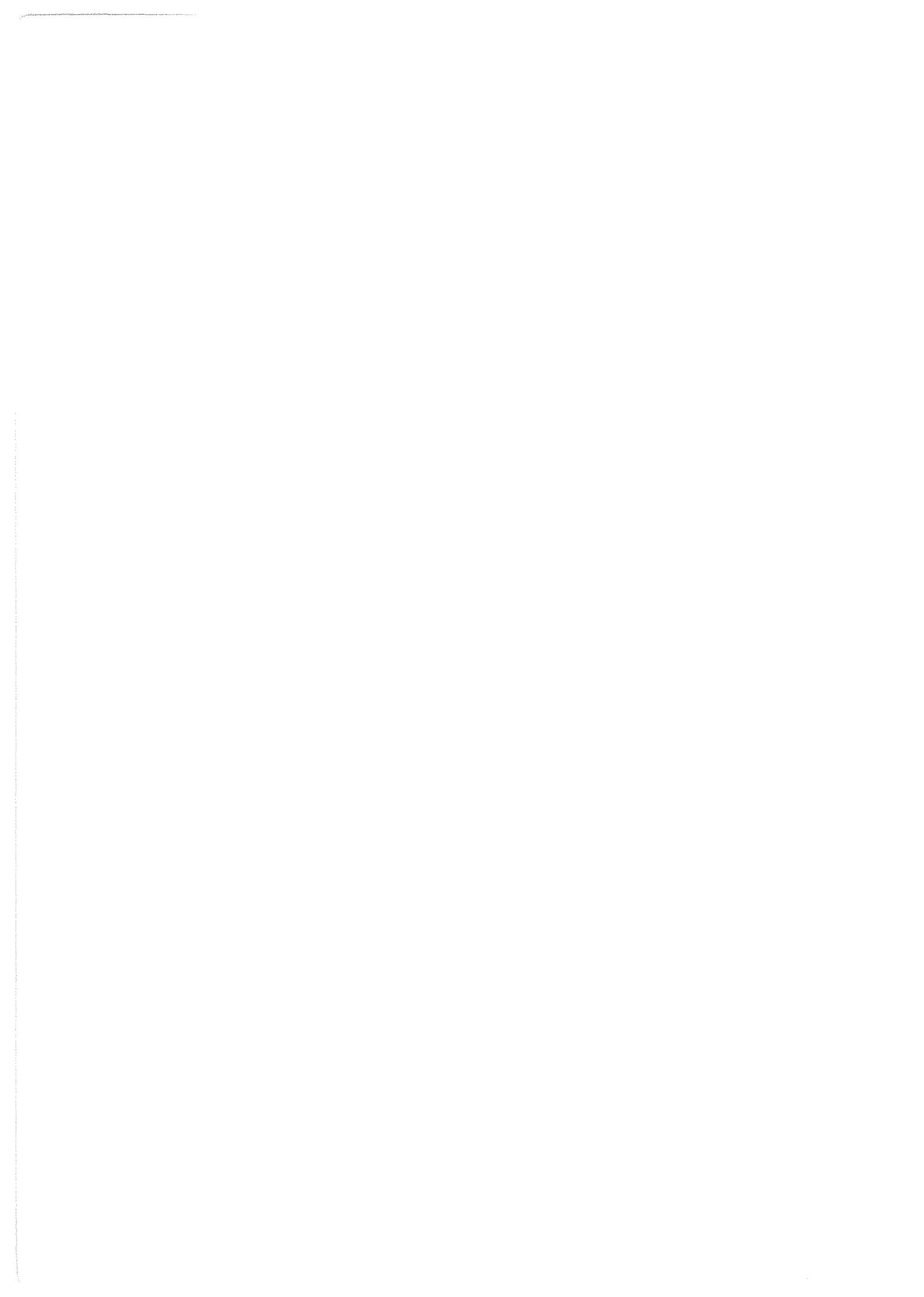
soutenue publiquement le 24 septembre 1993 à 14H00,

devant la Commission d'Examen

Président:	J.-L. AURIAULT	Professeur - L3S/IMG Grenoble
Rapporteurs:	P. M. ADLER	D. R. CNRS - LPTM Chasseneuil
	M. QUINTARD	D. R. CNRS - ENSAM Talence
Examineurs:	R. DELANNAY	Maître de Conférences - LEMTA Nancy
	C. MOYNE	D. R. CNRS - LEMTA Nancy



*A mes parents,
à mes frères et leurs épouses,
à ma famille,
et à Ulysses*



REMERCIEMENTS

Je tiens vivement à remercier le Professeur J.-L. AURIAULT d'une part d'avoir présidé mon jury de thèse et d'autre part de ses encouragements.

Je voudrais également remercier Messieurs M. QUINTARD et P. M. ADLER, Directeurs de Recherche au CNRS, d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse aussi bien que pour leurs conseils et suggestions.

Je remercie Monsieur R. DELANNAY pour toutes les discussions que nous avons eues au sujet de ma thèse ainsi que pour sa participation au jury.

Je remercie sincèrement mon Directeur de Thèse, Monsieur C. MOYNE, autant pour toutes les discussions et orientations scientifiques que pour la confiance, peut-être "exagérée", qu'il m'a accordée pendant tout mon séjour au LEMTA.

Mes plus vifs remerciements à Monsieur A. DEGIOVANNI, Directeur du LEMTA, pour l'ambiance existant au sein de l'équipe, sans laquelle je me serais senti depaysé.

Je sais gré à Monsieur M. MARTIN de m'avoir fait connaître le LEMTA et surtout de son agréable compagnie, partagée pendant toutes ces années à l'École des Mines de Nancy.

Je suis très reconnaissant à l'aide apportée sur le plan numérique par A. O. NIECKLE et W. BRAGA (PUC/BRÉSIL); H. COMBEAU (EMN/INPL); S. ANDRE, D. STEMMELEN, X. X. ZHANG et P. PERRE (LEMTA).

Je remercie Madame M. SCHWAAB, Madame J. NARANJO, Monsieur T. SENET (Service Commun Informatique de l'École des Mines) aussi bien que Monsieur B. ANTOINE (LEMTA) pour leur disponibilité et efficacité en informatique.

Le CNI/MAT et son Directeur Monsieur J. M. DUBOIS sont remerciés ici pour les moyens informatiques mis à notre disposition au CIRIL.

La réalisation de ce travail n'a été possible que grâce au financement et au soutien administratif accordés par le CNPq (BRÉSIL); le CEFI, le CROUS et le LEMTA (FRANCE).

Je remercie particulièrement Ali SAHELI, Fred PERRY et X. X. ZHANG pour leur aide précieuse dans les "derniers moments" de ce travail.

Je ne saurais finir sans remercier à tous mes collègues du LEMTA: Christine, Sylvianne, Valérie, Anne-Sophie, Sophie, Xiaojing, Isabelle, Hélène, Fabienne, Valérie, Joelle, Michel, Hakim, Thiéry, Djadmiko, Didier, Ali, Stéphane, Xin-Xin, Mohammed, Benjamin, Jean-Christophe, Patrick et Denis.

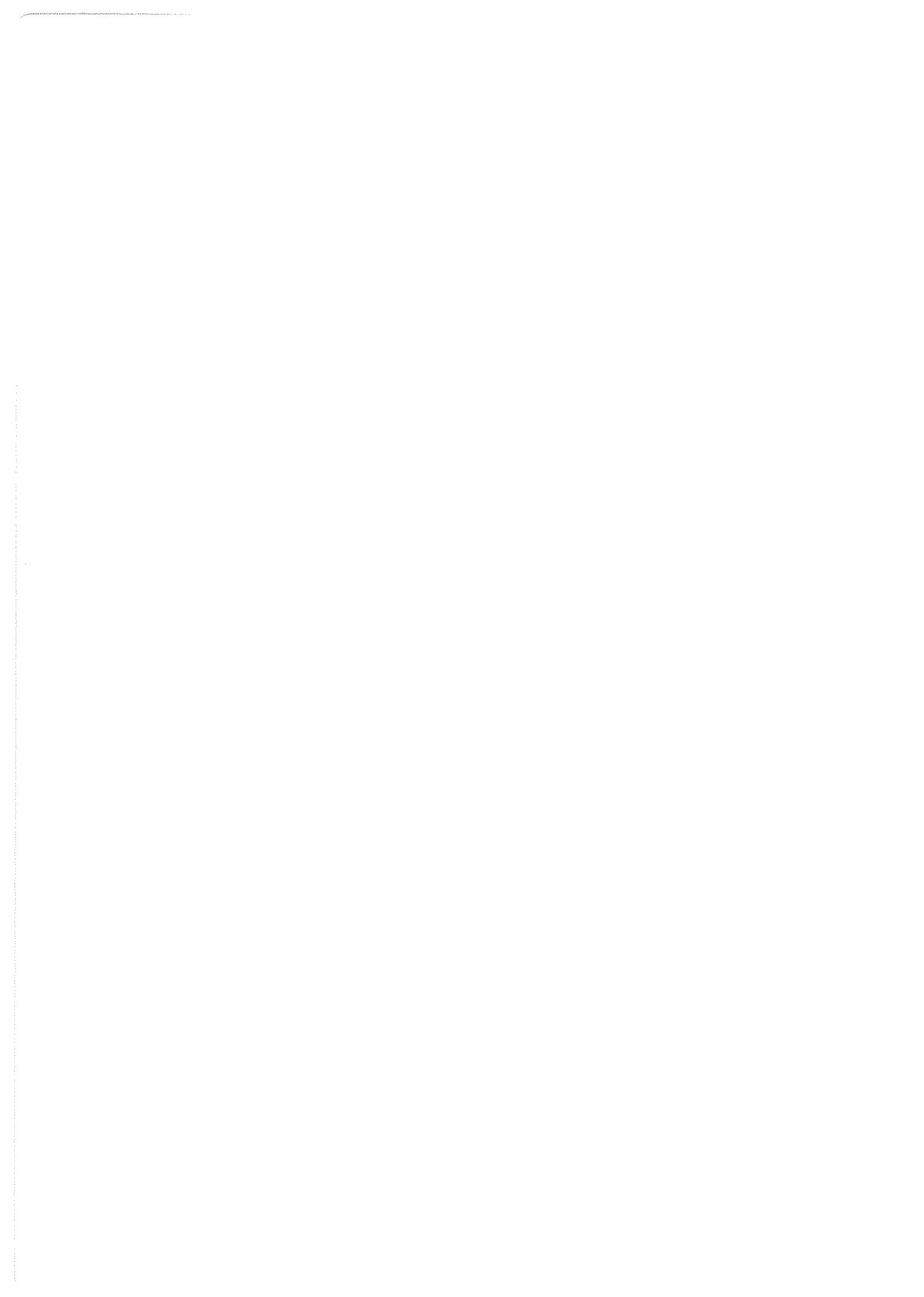


TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES

CHAPITRE 1-INTRODUCTION	1
1.1-Introduction	3
1.2-Applications	3
1.3-Structure	3
1.4-Processus de Transport	5
1.5-Dispersion	5
1.5.1-Diffusion Moléculaire	5
1.5.2-Diffusion Turbulente	6
1.5.3-Mélange dû à une Obstruction	6
1.5.4-Recirculation de l'Écoulement	6
1.5.5-Connexité du Milieu	7
1.5.6-Zone Stagnante	8
1.5.7-Adsorption	8
1.5.8-Dispersion Hydrodynamique	8
1.6-Modèles	9
1.7-But de cette Étude	11
1.8-Développement de la Thèse	11
1.9-Bibliographie	13
1.9.1-Les Premiers Travaux	13
1.9.2-Méthodes du Type "Réacteurs en Cascade"	15
1.9.3-Méthodes Stochastiques	16
1.9.4-Forme du Tenseur de Dispersion	21
1.9.5-Méthode des Moments	22
1.9.6-Méthode de Prise de Moyenne	26
1.9.6.1-Fondements de la Méthode	26
1.9.6.2-Application de la Méthode à la Dispersion	29
1.9.7-Méthodes de Moyenne d'Ensemble	32
1.9.8-Articles de Synthèse	38
1.9.9-Résultats Numériques	40
1.10-Conclusion	50
CHAPITRE 2-MÉTHODE DE PRISE DE MOYENNE	51
2.1-Introduction	53
2.2-Notion de Moyenne	53
2.2.1-Définition d'un Volume Élémentaire Représentatif	55
2.2.2-Théorème de la Prise de Moyenne	58

2.3-Équation de Transport Moyennée	61
2.4-Dispersion Massique	66
2.5-Équations de Navier-Stokes	72
2.6-Milieus Poreux Périodiques	73
2.7-Conclusion	78
CHAPITRE 3-MÉTHODE NUMÉRIQUE	79
3.1-Introduction	81
3.2-Formulation Mathématique	81
3.3-Méthodes de Discrétisation	82
3.3.1-Stabilité	84
3.3.1.1-Stabilité dans l'Espace	85
3.3.1.2-Stabilité dans le Temps	87
3.3.2-Discrétisation dans le Temps	89
3.3.3-Discrétisation dans l'Espace	91
3.3.4-Conditions aux Limites	96
3.3.5-Consistance du Schéma Implicite à Trois Points	98
3.3.6-Diffusion Numérique	100
3.3.6.1-Le Schéma Quadratique	103
3.3.6.2-Consistance du Schéma à Quatre Points	108
3.4-Algorithmes SIMPLE	112
3.4.1-L'Équation de Correction de Pression	114
3.5-Résolution du Systeme Algébrique	115
3.5.1-Analyse de Convergence de la Méthode Itérative	116
3.5.2-Méthode de Gauss-Seidel Ligne-à-Ligne	117
3.5.3-Correction par Blocs	123
3.5.4-Critère de Convergence	124
3.6-Conclusion	127
CHAPITRE 4-PROBLÈME HYDRODYNAMIQUE	129
4.1-Introduction	131
4.2-Quelques Notions d'Hydrodynamique des Milieux Poreux	132
4.3-Écoulement dans un Milieu Poreux Périodique	133
4.3.1-Equations Adimensionnelles	133
4.3.2-Conditions aux Limites	134
4.4-Méthode de Résolution de l'Écoulement Périodique	137
4.5-Validation du Code Numérique	140
4.5.1-Écoulement à l'Intérieur d'une Cavité	140
4.5.2-Écoulement Entre Deux Plans Parallèles	146
4.6-Perte de Charge et Perméabilité	147
4.7-Géométrie de la Cellule Unité	150
4.7.1-Arrangements "Ordonnés"	151
4.7.2-Arrangements "Désordonnés"	153
4.8-Calcul de la Perte de Charge	165
4.8.1-Arrangements "Ordonnés"	165
4.8.1.1-Allure Générale des Courbes de Perte de Charge	166
4.8.1.2-Arrangement en Ligne	168

4.8.1.3-Arrangement en Quinconce	175
4.8.1.4-Arrangement en Chicane	181
4.8.1.5-Analyse des Termes Non Linéaires	185
4.8.2-Influence du Schéma Numérique	197
4.8.3-Arrangements "Désordonnés"	201
4.9-Discussion - Comparaison avec Ergun	209
4.9.1-Régime de Stokes	209
4.9.2-Termes Non Linéaires	216
4.10-Conclusion	225
CHAPITRE 5-DIFFUSION EN MILIEU POREUX	227
5.1-Introduction	229
5.2-Diffusion en Milieu Poreux	229
5.2.1-Diffusion Massique	230
5.2.2-Équation de Transport Moyennée	230
5.3-Validation du Code Numérique	232
5.4-Géométrie de la Cellule Unité	233
5.5-Calcul du Tenseur Effectif de Diffusion	235
5.5.1-Arrangements "Simples"	235
5.5.2-Arrangements "Complexes"	246
5.6-Conclusion	251
CHAPITRE 6-DIFFUSION-DISPERSION EN MILIEU POREUX	253
6.1-Introduction	255
6.2-Diffusion-Dispersion en Milieu Poreux	255
6.2.1-Diffusion-Dispersion Massique	256
6.2.2-Équation de Transport Moyennée	256
6.3-Validation du Code Numérique	258
6.3.1-Transport Convectif et Diffusif d'un Scalaire	258
6.3.2-Diffusion-Dispersion entre Deux Plans Parallèles	264
6.4-Géométrie de la Cellule Unité	270
6.5-Calcul du Tenseur Effectif de Dispersion	270
6.5.1-Arrangements Ordonnés	270
6.5.1.1-Arrangement en Ligne	271
6.5.1.1.1-Influence de la Direction de l'Écoulement Principal	277
6.5.1.1.2-Influence du Nombre de Reynolds	281
6.5.1.2-Arrangement en Quinconce	287
6.5.1.2.1-Influence de la Direction de l'Écoulement Principal	290
6.5.1.2.2-Influence du Nombre de Reynolds	293
6.5.1.3-Arrangement en Chicane	298
6.5.1.3.1-Influence de la Direction de l'Écoulement Principal	298
6.5.1.3.2-Influence du Nombre de Reynolds	303
6.5.2-Arrangements Désordonnés	308

6.5.2.1-Influence de la Direction de l'Écoulement Principal	311
6.5.2.2-Influence du Nombre de Reynolds	319
6.6-Discussion et Comparaison avec d'Autres Résultats	324
6.6.1-Arrangements Ordonnés	324
6.6.1.1-Théorie de Koch et Brady	325
6.6.1.2-Comparaison avec la Théorie de Koch et Brady	327
6.6.1.3-Comparaison avec d'Autres Résultats Numériques	341
6.6.2-Comparaison avec les Milieux Réels	348
6.6.2.1-Analyse de Pfannkuch	348
6.6.2.2-Milieux Ordonnés	350
6.6.2.2.1-Arrangement en Ligne	350
6.6.2.2.2-Arrangement en Quinconce	353
6.6.2.2.3-Arrangement en Chicane	355
6.6.2.2.4-Influence du Nombre de Reynolds	358
6.6.2.3-Milieux Désordonnés	363
6.6.2.3.1-Influence de la Direction de l'Écoulement Principal	363
6.6.2.3.2-Influence du Nombre de Reynolds	366
6.7-Influence du Schéma Numérique	370
6.7.1-Confrontation des Résultats	370
6.7.2-Calcul des Valeurs Propres	375
6.8-Conclusion	376
 CHAPITRE 7-DIFFUSION-DISPERSION EN RÉGIME TRANSITOIRE	 379
7.1-Introduction	391
7.2-Équation de Fermeture en Régime Transitoire	381
7.3-Validation du Code Numérique	384
7.4-Résolution du Problème du Canal Connecté à une Cavité	388
7.4.1-Première Solution Approchée	388
7.4.2-Deuxième Solution Approchée	389
7.4.3-Résolution en Régime Permanent	391
7.4.4-Résolution en Régime Transitoire	394
7.5-Conclusion	398
 CHAPITRE 8-CONCLUSION	 399
8.1-Conclusion Générale	401
8.2-Travaux Futurs	405
 RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	 407
 ANNEXE I-ESTIMATION DE L'ORDRE DE GRANDEUR	 419
 ANNEXE II-ALGORITHME DE THOMAS	 425
 ANNEXE III-DIFFUSION - DISPERSION DE TAYLOR ENTRE DEUX PLANS PARALLÈLES	 431

ANNEXE IV-RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE FERMETURE EN RÉGIME TRANSITOIRE	439
ANNEXE V-ARRANGEMENTS GÉOMÉTRIQUES "DÉSORDONNÉS"	447
ANNEXE VI-CALCUL DE LA PERTE DE CHARGE	471
ANNEXE VII-CHAMP DE VITESSES: MILIEUX DÉSORDONNÉS	477
ANNEXE VIII-CALCUL DU TENSEUR DE DISPERSION	489
ANNEXE IX-SOLUTION APPROCHÉE DU PROBLÈME DU CANAL + CAVITÉ	497

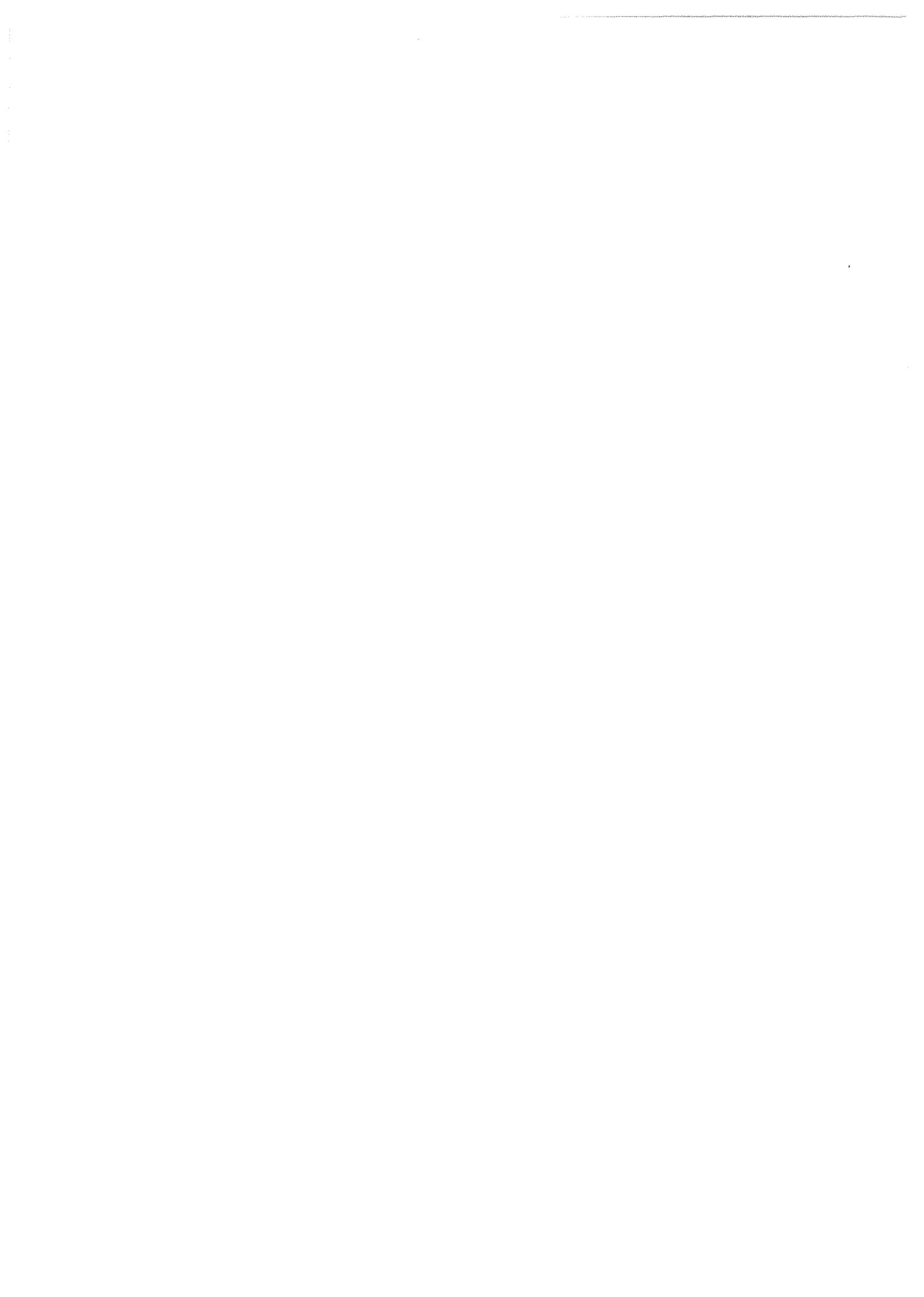


TABLE DES ILLUSTRATIONS

TABLE DES ILLUSTRATIONS

CHAPITRE 1 - INTRODUCTION

Tableau 1.1-Exemple d'applications	4
Figure 1.1-Mélange dû à une obstruction	6
Figure 1.2-Recirculation de l'écoulement	7
Figure 1.3-Connexité du milieu	7
Figure 1.4-Zone stagnante	8
Figure 1.5-Dispersion hydrodynamique	9

CHAPITRE 2 - MÉTHODE DE PRISE DE MOYENNE

Figure 2.1-Les trois échelles associées au milieu poreux	54
Figure 2.2-Volume élémentaire représentatif	55
Figure 2.3-Déplacement de la sphère sur la courbe S	58
Figure 2.4-Milieu spatialement périodique	74

CHAPITRE 3 - MÉTHODE NUMÉRIQUE

Figure 3.1-Domaine de résolution	83
Figure 3.2-Volume de contrôle	84
Figure 3.3-Distance associée à l'interface i	95
Figure 3.4-Demi-volume de contrôle à la frontière	96
Figure 3.5-Condition à la limite sur l'interface A_{σ}	98
Figure 3.6-Transport convectif d'un scalaire	101
Figure 3.7-Transport convectif d'un scalaire	102
Figure 3.8-Transport convectif d'un scalaire	111
Figure 3.9-Volume de contrôle pour la vitesse u	113
Figure 3.10-Méthode ligne-à-ligne	118

CHAPITRE 4 - PROBLÈME HYDRODYNAMIQUE

Figure 4.1-Écoulement périodique dans la direction OX	135
Figure 4.2-Écoulement périodique dans les directions OX et OY	136
Figure 4.3-Écoulement périodique dans la direction OX	138
Figure 4.4-Écoulement périodique dans les directions OX et OY	139
Figure 4.5-Cavité carrée	141
Figure 4.6-Écoulement laminaire dans une cavité carrée - $Re=400$	143
Figure 4.7-Cavité carrée - profil de vitesse $U - X/L=0,5$	144

Figure 4.8-Cavité carrée - profil de vitesse V - $Y/L=0,5$	144
Figure 4.9-Cavité carrée - profil de vitesse U - $X/L=0,5$	145
Figure 4.10-Cavité carrée - profil de vitesse V - $Y/L=0,5$	145
Figure 4.11-Écoulement entre deux plans parallèles	146
Figure 4.12-Écoulement entre deux plans parallèles - $Re=150$	148
Figure 4.13-Arrangement en ligne	151
Figure 4.14-Arrangement en quinconce	152
Figure 4.15-Arrangement en chicane	152
Figure 4.16-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 01	155
Figure 4.17-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 02	155
Figure 4.18-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 03	156
Figure 4.19-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 04	156
Figure 4.20-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 05	157
Figure 4.21-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 06	157
Figure 4.22-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 07	158
Figure 4.23-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 08	158
Figure 4.24-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 09	159
Figure 4.25-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 10	159
Figure 4.26-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 11	160
Figure 4.27-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 12	160
Figure 4.28-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 13	161
Figure 4.29-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 14	161
Figure 4.30-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 15	162
Figure 4.31-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 16	162
Figure 4.32-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 17	163
Figure 4.33-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 18	163
Figure 4.34-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 19	164
Figure 4.35-Arrangement aléatoire - cellule unité n° 20	164
Tableau 4.1-Constante de Kozeny	167
Tableau 4.2-Arrangement en ligne - constante de Kozeny	168
Figure 4.36-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_{\beta}=0,36 - \theta=0^{\circ}$	169
Figure 4.37-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_{\beta}=0,36 - \theta=11,25^{\circ}$	169
Figure 4.38-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_{\beta}=0,36 - \theta=22,5^{\circ}$	170
Figure 4.39-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_{\beta}=0,36 - \theta=45^{\circ}$	170
Figure 4.40-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_{\beta}=0,64 - \theta=0^{\circ}$	171
Figure 4.41-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_{\beta}=0,64 - \theta=11,25^{\circ}$	171
Figure 4.42-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_{\beta}=0,64 - \theta=22,5^{\circ}$	172

Figure 4.43-Arrangement en ligne - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 45^\circ$	172
Figure 4.44-Perte de charge - arrangement en ligne - $\varepsilon_B = 0,36$	174
Figure 4.45-Perte de charge - arrangement en ligne - $\varepsilon_B = 0,64$	174
Figure 4.46-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 0^\circ - Re_p = 75$	176
Figure 4.47-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 11,25^\circ - Re_p = 75$	176
Figure 4.48-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 22,5^\circ - Re_p = 75$	177
Figure 4.49-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 45^\circ - Re_p = 75$	177
Figure 4.50-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 0^\circ - Re_p = 0,0001$	178
Figure 4.51-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 11,25^\circ - Re_p = 0,0001$	178
Figure 4.52-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 22,5^\circ - Re_p = 0,0001$	179
Figure 4.53-Arrangement en quinconce - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 45^\circ - Re_p = 0,0001$	179
Figure 4.54-Perte de charge - arrangement en quinconce - $\varepsilon_B = 0,64$	180
Figure 4.55-Arrangement en chicane - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,36 - \theta \cong 22,5^\circ$	182
Figure 4.56-Arrangement en chicane - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,36 - \theta = 45^\circ$	182
Figure 4.57-Arrangement en chicane - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta \cong 22,5^\circ$	183
Figure 4.58-Arrangement en chicane - champ de vitesses $\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 45^\circ$	183
Figure 4.59-Perte de charge - arrangement en chicane - $\varepsilon_B = 0,36$	184
Figure 4.60-Perte de charge - arrangement en chicane - $\varepsilon_B = 0,64$	184
Tableau 4.3-Valeurs de γ	185
Figure 4.61-Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 0^\circ$	186
Figure 4.62-Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 5,625^\circ$	186
Figure 4.63-Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 11,25^\circ$	187
Figure 4.64-Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 22,5^\circ$	187
Figure 4.65-Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 33,75^\circ$	188
Figure 4.66-Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 45^\circ$	188
Figure 4.67-Perte de charge - arrangement en chicane - $\theta \cong 22^\circ$	189
Figure 4.68-Perte de charge - arrangement en chicane - $\theta \cong 34^\circ$	189

Figure 4.69-Perte de charge - arrangement en chicane - $\theta \cong 45^\circ$	190
Figure 4.70-Perte de charge - arrangement en ligne - $\varepsilon = 0,36$	192
Figure 4.71-Perte de charge - arrangement en ligne - $\varepsilon = 0,64$	192
Figure 4.72-Perte de charge - arrangement en quinconce - $\varepsilon = 0,64$	193
Figure 4.73-Perte de charge - arrangement en chicane - $\varepsilon = 0,36$	194
Figure 4.74-Perte de charge - arrangement en chicane - $\varepsilon = 0,64$	194
Figure 4.75-Perte de charge - milieux ordonnés - $\theta = 22,5^\circ$	195
Figure 4.76-Perte de charge - milieux ordonnés - $\theta = 33,75^\circ$	195
Figure 4.77-Perte de charge - milieux ordonnés - $\theta = 45^\circ$	196
Figure 4.78-Perte de charge - différents schémas numériques	198
Figure 4.79-Perte de charge - différents schémas numériques	198
Figure 4.80-Perte de charge - différents schémas numériques	199
Figure 4.81-Perte de charge - différents schémas numériques	200
Figure 4.82-Perte de charge - différents schémas numériques	200
Tableau 4.4-Constante de Kozeny	201
Figure 4.83-Perte de charge - milieux désordonnés - $\varepsilon_B = 0,7$	203
Figure 4.84-Perte de charge - milieux désordonnés - $\varepsilon_B = 0,7$	204
Figure 4.85-Perte de charge - milieux désordonnés - $\varepsilon_B = 0,7$	204
Figure 4.86-Perte de charge - milieux désordonnés - $\varepsilon_B = 0,7$	205
Figure 4.87-Perte de charge - milieu n° 5 - $\varepsilon_B = 0,7$	206
Figure 4.88-Perte de charge - milieu n° 11 - $\varepsilon_B = 0,7$	206
Figure 4.89-Perte de charge - milieu n° 13 - $\varepsilon_B = 0,7$	207
Figure 4.90-Perte de charge - milieu n° 16 - $\varepsilon_B = 0,7$	207
Figure 4.91-Perte de charge - milieu n° 20 - $\varepsilon_B = 0,7$	208
Figure 4.92-Perte de charge - milieu n° 5 - $\varepsilon_B = 0,7$	210
Figure 4.93-Perte de charge - milieu n° 11 - $\varepsilon_B = 0,7$	210
Figure 4.94-Perte de charge - milieu n° 13 - $\varepsilon_B = 0,7$	211
Figure 4.95-Perte de charge - milieu n° 16 - $\varepsilon_B = 0,7$	211
Figure 4.96-Perte de charge - milieu n° 20 - $\varepsilon_B = 0,7$	212
Figure 4.97-Milieu n° 7 - champ de vitesses $\varepsilon = 0,7 - \theta = 45^\circ$	213
Figure 4.98-Correction non-linéaire - arrangement en ligne - $\varepsilon_B = 0,36$	218
Figure 4.99-Correction non-linéaire - arrangement en ligne - $\varepsilon_B = 0,64$	218
Figure 4.100-Correction non-linéaire - arrangement en quinconce	219
Figure 4.101-Correction non-linéaire - arrangement en chicane - $\varepsilon_B = 0,36$	220
Figure 4.102-Correction non-linéaire - arrangement en chicane - $\varepsilon_B = 0,64$	220
Figure 4.103-Correction non-linéaire - milieux désordonnés - $\varepsilon_B = 0,7$	221
Tableau 4.5-Ordre des termes non-linéaires - milieux ordonnés	222
Tableau 4.6-Ordre des termes non-linéaires - milieux désordonnés	223
Tableau 4.7-Ordre des termes non-linéaires - milieux désordonnés	224

CHAPITRE 5 - DIFFUSION EN MILIEU POREUX

Figure 5.1-Domaine de résolution	233
Figure 5.2-Résolution du laplacien - $x=0,5L$	234
Figure 5.3-Résolution du laplacien - $y=0,5H$	234
Figure 5.4-Arrangement en quinconce	237
Tableau 5.1-Comparaison entre les différentes méthodes	238
Tableau 5.2-Comparaison entre les différentes méthodes	239
Figure 5.5-Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_B D_{xx} / \mathcal{D}$	240
Figure 5.6-Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_B D_{xx} / \mathcal{D}$	240
Figure 5.7-Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_B D_{yy} / \mathcal{D}$	241
Figure 5.8-Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_B D_{yy} / \mathcal{D}$	241
Figure 5.9-Un quart de cellule unité	243
Figure 5.10-Arrangement en ligne et en quinconce	245
Figure 5.11-Arrangement en chicane	245
Figure 5.12-Arrangement en chicane	246
Tableau 5.3-Coefficients effectifs de diffusion - $\varepsilon=0,703$	247
Tableau 5.4-Coefficients effectifs de diffusion - $\varepsilon=0,785$	248
Tableau 5.5-Coefficients effectifs de diffusion - $\varepsilon=0,868$	249
Tableau 5.6-Valeurs propres	249
Figure 5.13-Arrangement désordonné	250

CHAPITRE 6 - DIFFUSION-DISPERSION EN MILIEU POREUX

Figure 6.1-Transport convectif-diffusif d'un scalaire	259
Figure 6.2-Diffusion-dispersion d'un scalaire - $X=0,5$	260
Figure 6.3-Diffusion-dispersion d'un scalaire - $X=0,5$	260
Figure 6.4-Diffusion-dispersion d'un scalaire - $X=0,5$	261
Figure 6.5-Diffusion-dispersion d'un scalaire - $Y=0,5$	262
Figure 6.6-Diffusion-dispersion d'un scalaire - $Y=0,5$	262
Figure 6.7-Diffusion-dispersion d'un scalaire - $Y=0,5$	263
Figure 6.8-Diffusion-dispersion entre deux plans parallèles	265
Figure 6.9-Solution de l'équation de fermeture - F_x	267
Figure 6.10-Solution de l'équation de fermeture - F_x	267
Figure 6.11-Coefficient effectif de dispersion longitudinal	268
Figure 6.12-Solution de l'équation de fermeture - F_y	269
Figure 6.13-Solution de l'équation de fermeture - F_y	269
Figure 6.14-Axes propres du tenseur effectif de dispersion	271
Tableau 6.1-Comparaison du coefficient longitudinal	272
Figure 6.15-Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^* / \mathcal{D} - $\varepsilon_B = 0,36$	273
Figure 6.16-Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^* / \mathcal{D} - $\varepsilon_B = 0,64$	273
Tableau 6.2-Dépendance en Pe_p - D_{xx}^* / \mathcal{D}	274

Figure 6.17-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,36$	276
Figure 6.18-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,64$	276
Figure 6.19-Variation de l'angle $\Delta\theta - \epsilon_B=0,36$	278
Figure 6.20-Variation de l'angle $\Delta\theta - \epsilon_B=0,64$	278
Tableau 6.3-Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$	279
Figure 6.21-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,36$	280
Figure 6.22-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,64$	280
Tableau 6.4-Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$	281
Figure 6.23-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,36$	282
Figure 6.24-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,64$	282
Tableau 6.5-Influence du nombre de Reynolds	283
Figure 6.25-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - Sc=1$	284
Figure 6.26-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - Sc=100$	284
Figure 6.27-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - Sc=1$	286
Figure 6.28-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - Sc=100$	286
Tableau 6.6-Influence du nombre de Reynolds	287
Figure 6.29-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,64$	288
Figure 6.30-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,64$	288
Tableau 6.7-Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$	289
Figure 6.31-Variation de l'angle $\Delta\theta - \epsilon_B=0,64$	291
Figure 6.32-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,64$	292
Figure 6.33-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,64$	292
Tableau 6.8-Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$	293
Figure 6.34-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - Sc=1$	294
Figure 6.35-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - Sc=100$	294
Tableau 6.9-Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$	295
Tableau 6.10-Influence du nombre de Reynolds	295
Figure 6.36-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - Sc=1$	296
Figure 6.37-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - Sc=100$	296
Tableau 6.11-Influence du nombre de Reynolds	297
Figure 6.19-Variation de l'angle $\Delta\theta - \epsilon_B=0,36$	299

Figure 6.20-Variation de l'angle $\Delta\theta$ - $\varepsilon_B=0,64$	299
Figure 6.40-Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/\mathcal{D} - $\varepsilon_B=0,36$	301
Figure 6.41-Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/\mathcal{D} - $\varepsilon_B=0,64$	301
Tableau 6.12-Dépendance en Pe_p - D_{xx}^*/\mathcal{D}	303
Figure 6.42-Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - $\varepsilon_B=0,36$	302
Figure 6.43-Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - $\varepsilon_B=0,64$	302
Figure 6.44-Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/\mathcal{D} - $Sc=1$	304
Figure 6.45-Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/\mathcal{D} - $Sc=100$	304
Tableau 6.13-Influence du nombre de Reynolds	305
Figure 6.46-Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - $Sc=1$	306
Figure 6.47-Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - $Sc=100$	306
Tableau 6.14-Influence du nombre de Reynolds	307
Tableau 6.15-Dépendance en Pe_p - D_{xx}^*/\mathcal{D} - $\theta \cong 45^\circ$	309
Figure 6.48-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - $\varepsilon_B=0,7$	310
Figure 6.49-Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - $\varepsilon_B=0,7$	310
Figure 6.50-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - $\theta \cong 23^\circ$	312
Figure 6.51-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - $\theta \cong 33^\circ$	312
Figure 6.52-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - $\theta \cong 45^\circ$	313
Figure 6.53-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - $\theta \cong 57^\circ$	313
Figure 6.54-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - milieu n°5	314
Figure 6.55-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - milieu n°7	314
Figure 6.56-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - milieu n°14	315
Figure 6.57-Coefficient effectif de dispersion - D^*/\mathcal{D} - milieu n°16	315
Tableau 6.16-Dépendance en Pe_p - D_{xx}^*/\mathcal{D}	316
Figure 6.58-Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n°5	317
Figure 6.59-Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n°7	317
Figure 6.60-Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n°14	318
Figure 6.61-Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n°16	318
Figure 6.62-Coefficient effectif de dispersion D^*/\mathcal{D} - $Sc=1$	320
Tableau 6.19-Influence du nombre de Reynolds	323

XVIII

Figure 6.64-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	328
Figure 6.65-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	328
Tableau 6.20-Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$	329
Figure 6.66-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	330
Figure 6.67-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	330
Figure 6.68-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	331
Figure 6.69-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	331
Tableau 6.21-Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$	332
Figure 6.70-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	333
Figure 6.71-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	333
Figure 6.72-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	334
Figure 6.73-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	334
Figure 6.74-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	336
Figure 6.75-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	336
Figure 6.76-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	337
Figure 6.77-Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	337
Figure 6.78-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	339
Figure 6.79-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	339
Figure 6.80-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,84$	340
Figure 6.81-Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_{\beta}=0,85$	340
Figure 6.82-Comparaison du tenseur de dispersion	342
Figure 6.83-Variation de D_L^*/D en fonction de l'angle θ	344
Figure 6.84-Variation de D_L^*/D en fonction de l'angle θ	344
Figure 6.85-Variation de D_T^*/D en fonction de l'angle θ	345
Figure 6.86-Variation de D_T^*/D en fonction de l'angle θ	345
Figure 6.87-Comparaison du tenseur de dispersion	347
Figure 6.88-Comparaison du tenseur de dispersion	347
Figure 6.89-Les différents régimes de mélange	349

Figure 6.90-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,36$	351
Figure 6.91-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,64$	351
Figure 6.92-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,36$	352
Figure 6.93-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,64$	352
Figure 6.94-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,64$	354
Figure 6.95-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,64$	354
Figure 6.96-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,36$	356
Figure 6.97-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,64$	356
Figure 6.98-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,36$	357
Figure 6.99-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,64$	357
Figure 6.100-Régimes de dispersion $D_L^*/D - Sc=100$	359
Figure 6.101-Régimes de dispersion $D_T^*/D - Sc=100$	359
Figure 6.102-Régimes de dispersion $D_L^*/D - Sc=100$	360
Figure 6.103-Régimes de dispersion $D_T^*/D - Sc=100$	360
Figure 6.104-Régimes de dispersion $D_L^*/D - Sc=100$	362
Figure 6.105-Régimes de dispersion $D_T^*/D - Sc=100$	362
Figure 6.106-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 23^\circ$	364
Figure 6.107-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 33^\circ$	364
Figure 6.108-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 45^\circ$	365
Figure 6.109-Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 57^\circ$	365
Figure 6.110-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 23^\circ$	367
Figure 6.111-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 33^\circ$	367
Figure 6.112-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 45^\circ$	368
Figure 6.113-Régimes de dispersion $D_T^*/D - \varepsilon_B=0,7 - \theta \cong 57^\circ$	368

Figure 6.114-Régimes de dispersion $D_L^*/\mathcal{D} - \varepsilon_\beta=0,7 - Sc=100$	369
Figure 6.115-Régimes de dispersion $D_T^*/\mathcal{D} - \varepsilon_\beta=0,7 - Sc=100$	369
Figure 6.116-Coefficient de dispersion-différents schémas numériques	371
Figure 6.117-Coefficient de dispersion-différents schémas numériques	371
Figure 6.118-Coefficient de dispersion-différents schémas numériques	373
Figure 6.119-Coefficient de dispersion-différents schémas numériques	373
Figure 6.120-Coefficient de dispersion-différents schémas numériques	374
Figure 6.121-Coefficient de dispersion-différents schémas numériques	374

CHAPITRE 7 - DIFFUSION-DISPERSION EN RÉGIME TRANSITOIRE

Figure 7.1-Écoulement entre deux plans - régime transitoire	387
Figure 7.2-Écoulement entre deux plans - régime transitoire	387
Figure 7.3-Canal connecté à une cavité	388
Figure 7.4-Diffusion-dispersion canal + cavité	390
Tableau 7.1-Caractéristiques géométriques	391
Figure 7.5-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité	392
Figure 7.6-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 1	392
Figure 7.7-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 2	393
Figure 7.8-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 3	393
Figure 7.9-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité	395
Figure 7.10-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 1	395
Figure 7.11-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 2	396
Figure 7.12-Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 3	396

ANNEXE I - ESTIMATION DE L'ORDRE DE GRANDEUR

Figure I.1-Volume élémentaire représentatif	422
---	-----

ANNEXE III - DIFFUSION-DISPERSION DE TAYLOR ENTRE DEUX PLANS PARALLÈLES

Figure III.1-Diffusion-Dispersion entre deux plans parallèles	434
---	-----

ANNEXE IV - RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE FERMETURE EN RÉGIME TRANSITOIRE

Figure IV.1-Diffusion-Dispersion entre deux plans parallèles	441
--	-----

ANNEXE V - ARRANGEMENTS GÉOMÉTRIQUES "DÉSORDONNÉS"

Figure V.1-Arrangement désordonné - milieu n° 1 - $\varepsilon_\beta=0,785$	449
Figure V.2-Arrangement désordonné - milieu n° 2 - $\varepsilon_\beta=0,785$	450
Figure V.3-Arrangement désordonné - milieu n° 3 - $\varepsilon_\beta=0,785$	450
Figure V.4-Arrangement désordonné - milieu n° 4 - $\varepsilon_\beta=0,785$	451
Figure V.5-Arrangement désordonné - milieu n° 5 - $\varepsilon_\beta=0,785$	451

Figure V.6-Arrangement désordonné - milieu n° 6 - $\varepsilon_B=0,785$	452
Figure V.7-Arrangement désordonné - milieu n° 7 - $\varepsilon_B=0,785$	452
Figure V.8-Arrangement désordonné - milieu n° 8 - $\varepsilon_B=0,785$	453
Figure V.9-Arrangement désordonné - milieu n° 9 - $\varepsilon_B=0,785$	453
Figure V.10-Arrangement désordonné - milieu n° 10 - $\varepsilon_B=0,785$	454
Figure V.11-Arrangement désordonné - milieu n° 11 - $\varepsilon_B=0,785$	454
Figure V.12-Arrangement désordonné - milieu n° 12 - $\varepsilon_B=0,785$	455
Figure V.13-Arrangement désordonné - milieu n° 13 - $\varepsilon_B=0,785$	455
Figure V.14-Arrangement désordonné - milieu n° 14 - $\varepsilon_B=0,785$	456
Figure V.15-Arrangement désordonné - milieu n° 15 - $\varepsilon_B=0,785$	456
Figure V.16-Arrangement désordonné - milieu n° 16 - $\varepsilon_B=0,785$	457
Figure V.17-Arrangement désordonné - milieu n° 17 - $\varepsilon_B=0,785$	457
Figure V.18-Arrangement désordonné - milieu n° 18 - $\varepsilon_B=0,785$	458
Figure V.19-Arrangement désordonné - milieu n° 19 - $\varepsilon_B=0,785$	458
Figure V.20-Arrangement désordonné - milieu n° 20 - $\varepsilon_B=0,785$	459
Figure V.21-Arrangement désordonné - milieu n° 1 - $\varepsilon_B=0,868$	460
Figure V.22-Arrangement désordonné - milieu n° 2 - $\varepsilon_B=0,868$	461
Figure V.23-Arrangement désordonné - milieu n° 3 - $\varepsilon_B=0,868$	461
Figure V.24-Arrangement désordonné - milieu n° 4 - $\varepsilon_B=0,868$	462
Figure V.25-Arrangement désordonné - milieu n° 5 - $\varepsilon_B=0,868$	462
Figure V.26-Arrangement désordonné - milieu n° 6 - $\varepsilon_B=0,868$	463
Figure V.27-Arrangement désordonné - milieu n° 7 - $\varepsilon_B=0,868$	463
Figure V.28-Arrangement désordonné - milieu n° 8 - $\varepsilon_B=0,868$	464
Figure V.29-Arrangement désordonné - milieu n° 9 - $\varepsilon_B=0,868$	464
Figure V.30-Arrangement désordonné - milieu n° 10 - $\varepsilon_B=0,868$	465
Figure V.31-Arrangement désordonné - milieu n° 11 - $\varepsilon_B=0,868$	465
Figure V.32-Arrangement désordonné - milieu n° 12 - $\varepsilon_B=0,868$	466
Figure V.33-Arrangement désordonné - milieu n° 13 - $\varepsilon_B=0,868$	466
Figure V.34-Arrangement désordonné - milieu n° 14 - $\varepsilon_B=0,868$	467
Figure V.35-Arrangement désordonné - milieu n° 15 - $\varepsilon_B=0,868$	467
Figure V.36-Arrangement désordonné - milieu n° 16 - $\varepsilon_B=0,868$	468
Figure V.37-Arrangement désordonné - milieu n° 17 - $\varepsilon_B=0,868$	468
Figure V.38-Arrangement désordonné - milieu n° 18 - $\varepsilon_B=0,868$	469

Figure V.39-Arrangement désordonné - milieu n° 19 - $\varepsilon_B=0,868$	469
Figure V.40-Arrangement désordonné - milieu n° 20 - $\varepsilon_B=0,868$	470

ANNEXE VI - CALCUL DE LA PERTE DE CHARGE

Figure VI.1-Arrangement en ligne	473
----------------------------------	-----

ANNEXE VII - CHAMP DE VITESSES: MILIEUX DÉSORDONNÉS

Figure VII.1-Milieu n° 1 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	479
Figure VII.2-Milieu n° 2 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	480
Figure VII.3-Milieu n° 3 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	480
Figure VII.4-Milieu n° 4 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	481
Figure VII.5-Milieu n° 5 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	481
Figure VII.6-Milieu n° 6 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	482
Figure VII.7-Milieu n° 8 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	482
Figure VII.8-Milieu n° 9 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	483
Figure VII.9-Milieu n° 10 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	483
Figure VII.10-Milieu n° 11 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	484
Figure VII.11-Milieu n° 12 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	484
Figure VII.12-Milieu n° 13 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	485
Figure VII.13-Milieu n° 14 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	485
Figure VII.14-Milieu n° 15 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	486
Figure VII.15-Milieu n° 16 - champ de vitesses $\varepsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$	486
Figure VII.16-Milieu n° 17 - champ de vitesses	487

$\varepsilon_{\beta}=0,7 - \theta=45^{\circ}$	
Figure VII.17-Milieu n° 18 - champ de vitesses	487
$\varepsilon_{\beta}=0,7 - \theta=45^{\circ}$	
Figure VII.18-Milieu n° 19 - champ de vitesses	470
$\varepsilon_{\beta}=0,7 - \theta=45^{\circ}$	
Figure VII.18-Milieu n° 20 - champ de vitesses	470
$\varepsilon_{\beta}=0,7 - \theta=45^{\circ}$	

ANNEXE IX - SOLUTION APPROCHÉE DU PROBLÈME DU CANAL + CAVITÉ

Figure IX.1-Diffusion-dispersion canal + cavité	499
---	-----

NOMENCLATURE

NOMENCLATURE

ALPHABET ROMAN

- a_{ij} - coefficients discrétisés
 a_v - surface spécifique
 A - Surface associée au VER
 A - matrice des coefficients discrétisés
 c - concentration volumique
 d_p - diamètre équivalent de particule
 D - conductance
 D^* - tenseur de dispersion hydrodynamique
 D - tenseur effectif de dispersion
 \mathcal{D} - coefficient de diffusion moléculaire
 e_D - diffusion numérique
 e_Ω - dispersion numérique
 \mathcal{E} - critère de convergence
 f - vecteur qui lie \tilde{c} au gradient de concentration $\nabla \langle c \rangle^B$
 ℓ - rapport entre les distances des nœuds
 F - vecteur f adimensionnel
 F - débit sur les faces du volume de contrôle
 g - vecteur accélération de la pesanteur
 G - matrice amplification
 h - hauteur de la cavité
 h - hauteur adimensionnelle de la cavité
 H - hauteur entre les deux plans
 \mathcal{H} - hauteur adimensionnelle entre les deux plans
 I - tenseur identité
 k_K - constante de Kozeny
 k - vecteur maille des axes réciproques
 K - niveaux de temps
 \mathbf{K} - tenseur perméabilité
 \vec{l} - vecteur maille de la cellule unité
 ℓ - longueur caractéristique microscopique
 L - longueur caractéristique macroscopique
 L - longueur de la cellule unité
 L_ε - distance sur laquelle existent des variations de fraction volumique
 L_\emptyset - distance sur laquelle existent des variations de la moyenne $\langle \phi \rangle^B$

- \mathcal{L} - profondeur caractéristique de la zone stagnante
 m - moment local
 M_1 - moment global d'ordre 1
 M_2 - moment global d'ordre 2
 n - normale
 n - nombre d'itérations
 p - pression
 ρ - variable de Laplace
 \mathbf{p} - vecteur position d'un point sur une interface
 P - pression adimensionnelle
 \mathcal{P} - partie périodique de la pression
 q - flux de chaleur
 r - rayon du VER
 \mathbf{r} - vecteur position d'un point à l'intérieur du VER
 \mathbf{r}_0 - vecteur qui localise le centre du VER par rapport à l'origine du repère
 \vec{r} - vecteur qui représente la distance d'un point r quelconque à l'intérieur du VER par rapport au barycentre du VER
 R - résidu
 s - abscisse curviligne
 S - source volumique
 \mathcal{S} - partie linéaire du terme source de l'équation discrétisée
 t - temps
 \hat{t} - temps adimensionnel
 u - composante de la vitesse locale dans la direction OX
 U - vitesse locale adimensionnelle
 v - composante de la vitesse locale dans la direction OY
 V - vitesse locale adimensionnelle
 \mathbf{v} - vecteur vitesse locale
 V - Volume du VER
 x - abscisse spatiale
 X - abscisse spatiale adimensionnelle
 y - ordonné spatiale
 Y - ordonné spatiale adimensionnelle
 z - approximation numérique de $e^{\lambda \Delta t}$

ALPHABET GREC

- α - variable qui définit le schéma de discrétisation des termes convectifs
 $\Delta\theta$ - angle entre la première direction propre et le vecteur $\langle \mathbf{V} \rangle$
 ε - porosité
 ϕ - variable quelconque
 $\bar{\phi}$ - solution exacte
 Γ - coefficient de diffusion
 Γ' - coefficient de diffusion numérique
 λ - valeur propre
 μ - viscosité dynamique

ν - viscosité cinématique
 θ - angle entre le vecteur $\langle V \rangle$ et l'axe OX de la cellule unité
 Θ - variable qui définit le schéma de discrétisation dans le temps
 ρ - masse volumique
 τ - tenseur tortuosité
 ω - coefficient de relaxation
 Ω - phase de la solution numérique
 ξ - fonction arbitraire

ABRÉVIATIONS

ADI - Alternating Direction Implicit
 PDMA - PentaDiagonal-Matrix Algorithm
 PDS - Power Difference Scheme
 QUDS - Quadratic Upstream Difference Scheme
 QUICK - Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics
 QUICKER - QUICK Extended and Revised
 SIMPLE - Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
 SOR - Successive Overrelaxation
 SSOR - Symetric Successive Overrelaxation
 SUDS - Skew-Upwind Difference Scheme
 TDMA - TriDiagonal-Matrix Algorithm
 V.C. - volume de contrôle
 VER - volume élémentaire représentatif

OPÉRATEURS ET SYMBOLES

$A()$ - fournit le schéma dit "loi puissance"
 \diamond - moyenne volumique
 \diamond^β - moyenne intrinsèque à la phase β
 — - moyenne arithmétique
 \sim - indique la fluctuation spatiale
 \parallel - longitudinal
 \perp - transversal
 δx - distance entre deux nœuds consécutifs dans la direction OX
 δy - distance entre deux nœuds consécutifs dans la direction OY
 Δx - épaisseur du volume de contrôle dans la direction OX
 Δy - épaisseur du volume de contrôle dans la direction OY
 Δp - perte de charge
 ΔP - perte de charge adimensionnelle
 Δt - incrément de temps
 $O()$ - ordre de grandeur
 Im - partie imaginaire
 Re - partie réelle
 $\mathcal{R}()$ - rayon spectral
 $\| \cdot \|_2$ - norme dans l'espace L_2
 $\lceil \cdot \rceil$ - indique que l'on prend la valeur la plus grande

INDICES

β - associé à la phase fluide
 σ - associé à la phase solide
 $\beta\sigma$ - interface fluide-solide
 βe - surfaces d'entrée et de sortie du VER
 $\beta_{\text{extérieur}}$ - frontière du milieu poreux
 e, w, n, s - indiquent les faces du volume de contrôle
 P, E, W, N, S - indiquent les nœuds du maillage
 L - longitudinal
 T - transversal
 vo - nœuds voisins

EXPOSANTS

T - indique la matrice transposée
 o - estimé à l'instant t ou initial

m - indique la dépendance en Pe_p $\left(\frac{D^*}{D} \cong A Pe_p^m \right)$

NOMBRES ADIMENSIONNELS

C - nombre de Courant
 Pe - nombre de Péclet
 Pe_p - nombre de Péclet particulaire
 Re - nombre de Reynolds
 Re_p - nombre de Reynolds particulaire
 Sc - nombre de Schmidt

CHAPITRE 1

INTRODUCTION



CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1-INTRODUCTION

La première partie de ce premier chapitre est consacrée à une introduction aux milieux poreux et à leur modélisation. Tout d'abord, on donne quelques exemples d'applications et quelques éléments sur leur constitution. Les phénomènes de transport et la dispersion en milieux poreux sont ensuite passés en revue. Les principaux mécanismes conduisant à la dispersion sont décrits. Les objectifs de ce travail et son développement closent cette partie.

La deuxième partie consiste en une revue bibliographique du thème "dispersion en milieux poreux". On n'a pas ici l'intention d'épuiser le sujet mais plutôt de donner les principales contributions.

1.2-APPLICATIONS

De nos jours, les applications des phénomènes de transport en milieux poreux sont nombreuses. On peut citer, parmi d'autres, les industries chimique, mécanique et pétrolière, aussi bien que l'environnement, la géologie ou la médecine. Le tableau 1.1 [Bear et Buchlin, 1991; Kaviany, 1992] donne quelques exemples d'applications.

1.3-STRUCTURE

Les milieux poreux peuvent être soit d'origine naturelle (roches, sable, éponges, bois, etc.) soit d'origine industrielle (isolants,

réacteurs chimiques, filtres catalytiques, etc.). Les milieux sont habituellement classés, en homogène ou hétérogène, en isotrope ou anisotrope. Par homogène, on entend que le milieu est invariant par translation. Il est isotrope lorsqu'il est invariant par rotation.

CHIMIE	Réacteurs catalytiques et lits de particules inertes. Filtration. Séchage. Trickle beds. Chromatographie. Convertisseurs catalytiques des produits de combustion. Adsorption et désorption. Transfert de masse à travers les membranes.
ENVIRONNEMENT	Écoulement phréatique. Contamination de la nappe phréatique. Écoulement de l'air, de l'eau-vapeur et de l'eau dans les matériaux de construction. Contamination par l'eau salée de la nappe phréatique. Déchets radioactifs. Irrigation. Percolation de l'eau dans la neige.
GÉOLOGIE	Migration de l'eau. Gestion de l'énergie géothermique. Cycle thermique des roches. Transport glaciaire.
MÉCANIQUE	Isolation. Combustion. Séchage. Énergie géothermique. Accroissement du transfert de chaleur par modification de la surface. Lubrification. Réacteurs nucléaires. Fusion et solidification de mélanges binaires. Stockage de l'énergie solaire. Pots catalytiques.
PÉTROLE	Écoulement de gaz et de pétrole dans les réservoirs. Accroissement de la production de pétrole. Production de gaz naturel.
MÉDECINE	Écoulement d'un fluide ou de soluté à travers des organes tels que le poumon et les reins.

Tableau 1.1 - Exemples d'applications

Un milieu poreux est constitué par une structure solide et des espaces vides, la partie solide étant consolidée ou non-consolidée (particules). L'espace vide peut être rempli par un ou plusieurs fluides saturant le milieu. Le diamètre des pores ou particules, peut varier de quelques angströms (Å) à quelques centimètres et même davantage. La dimension du milieu poreux est en général de plusieurs ordres de grandeur supérieure au diamètre des pores ou des particules. Pourtant, dans certains cas, elle

peut être du même ordre de grandeur.

1.4-PROCESSUS DE TRANSPORT

Si l'on considère le cas le plus général, les processus de transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans un milieu poreux mettent en jeu l'écoulement d'une ou plusieurs phases fluides dans les pores ou les particules. Une phase peut être constituée d'un ou plusieurs constituants, les constituants se trouvant en équilibre chimique ou non. Ces processus peuvent prendre place dans les phases fluides mais aussi dans la phase solide, suivant la nature du processus. Finalement, notons que la partie solide peut se déformer au cours du processus dans le cas des milieux déformables.

A cela, on doit encore ajouter les transferts sur les frontières du milieu.

1.5-DISPERSION

On décrit maintenant, le phénomène de dispersion en milieu poreux qui fait l'objet de ce travail. On cherche à caractériser le phénomène de dispersion massique, quand un fluide newtonien s'écoule à travers un milieu poreux. Il s'agit alors de déterminer le champ de concentration, provenant par exemple de l'injection d'un soluté dans le milieu.

La dispersion, lors d'un écoulement de fluides miscibles, est due au mélange des fluides. Ces principaux mécanismes de mélange, au niveau microscopique, conduisant à une dispersion observable au niveau macroscopique sont maintenant discutés [Grennkorn et Kessler, 1969].

1.5.1-DIFFUSION MOLÉCULAIRE

C'est le phénomène dû à l'existence d'un gradient de concentration du soluté. Il est présent même en l'absence d'écoulement. Les échelles de temps associées à ce phénomène (le carré de la longueur de transport divisé par le coefficient de diffusion moléculaire), étant suffisamment grandes, la diffusion moléculaire mène à une dispersion macroscopique observable.

1.5.2-DIFFUSION TURBULENTE

Si l'écoulement dans le milieu poreux est turbulent, la diffusion turbulente contribue, au même titre que la diffusion moléculaire, au mélange du fluide.

1.5.3-MÉLANGE DÛ À UNE OBSTRUCTION

Ce type de mélange est lié à la tortuosité du milieu: deux particules qui à un instant donné se trouvent à une distance donnée, peuvent s'éloigner ou se rapprocher à un instant ultérieur après avoir parcouru, une partie du milieu, figure 1.1.

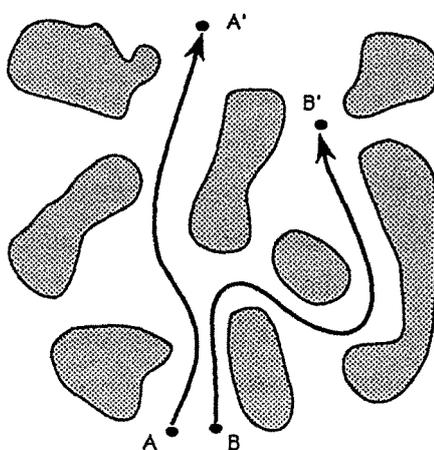


Figure 1.1 - Mélange dû à une obstruction

1.5.4-RECIRCULATION DE L'ÉCOULEMENT

La dispersion peut être causée, par une recirculation de l'écoulement due à la géométrie du milieu, comme montré sur la figure 1.2, où apparaissent des élargissements et rétrécissements des pores.

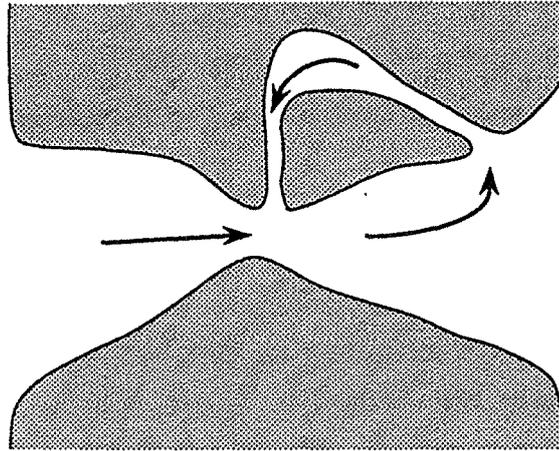


Figure 1.2 - Recirculation de l'écoulement

1.5.5-CONNEXITÉ DU MILIEU

La dispersion peut résulter du fait que tous les chemins pour le transport du soluté ne sont pas équivalents. En particulier certaines parties du milieu ne sont pas accessibles à tout le fluide traversant le milieu, comme le montre la figure 1.3.

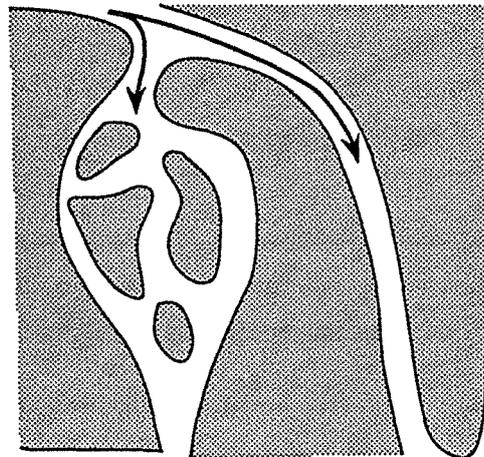


Figure 1.3 - Connexité du milieu

1.5.6-ZONE STAGNANTE

Ce phénomène est particulier au régime transitoire, quand les champs de concentration varient dans le temps. Lorsqu'un fluide, avec une concentration de soluté élevée, passe à proximité d'une zone stagnante où le fluide se trouve piégé (figure 1.4), il y a échange par diffusion moléculaire vers la zone stagnante. Après le passage du "front", le processus s'inverse et la diffusion se fait de la zone stagnante vers le fluide avec une concentration plus faible.

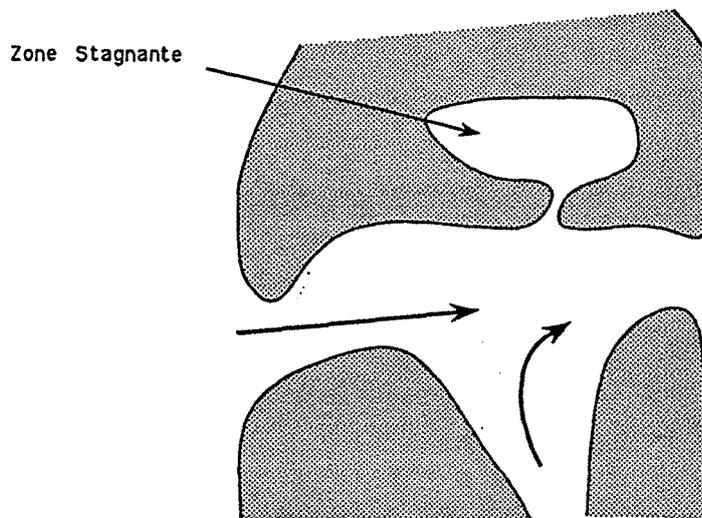


Figure 1.4 - Zone stagnante

1.5.7-ADSORPTION

C'est un autre exemple de dispersion en régime transitoire, dû au fait que la phase solide est capable de retenir en partie le soluté. Comme dans le cas précédent, le front de concentration conduira à une désorption ou une adsorption massique sur la surface solide.

1.5.8-DISPERSION HYDRODYNAMIQUE

La dispersion est alors due à la non-uniformité du champ de vitesse, du fait de la condition de non-glissement à la surface du solide.

L'existence d'un gradient de vitesse dans la phase fluide est responsable de la dispersion, même dans le cas de l'écoulement dans un capillaire, figure 1.5. C'est le cas classique de la diffusion-dispersion de Taylor [7, 46, 76, 107, 108, 113, 117, 118, 119, 132].

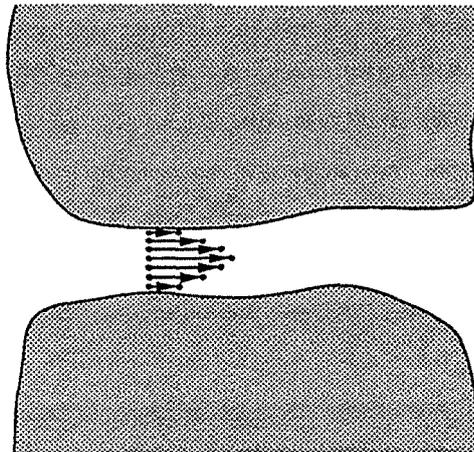


Figure 1.5 - Dispersion hydrodynamique

1.6-MODÈLES

Malheureusement, les milieux poreux réels, présentent des processus de transport et des géométries très complexes. D'où la nécessité de créer des modèles simplifiés, pour essayer de se représenter le comportement des milieux réels.

D'après Bear [14], la première étape pour constituer un modèle conceptuel, passe par le choix des points suivants:

- le domaine d'intérêt
- la dimension du domaine (uni, bi ou tridimensionnel)
- le régime permanent ou transitoire
- la constitution du milieu (solide déformable ou indéformable, phases et constituants)
- les conditions isothermes ou anisothermes
- les phases miscibles ou non-miscibles
- le processus étudié

- les variables décrivant le procédé
- l'existence de sources ponctuelles ou distribuées
- les conditions initiales
- les conditions aux limites

On peut s'apercevoir de l'énormité (sinon de la quasi-impossibilité) de la tâche pour résoudre un problème donné et pour mesurer les variables au niveau microscopique. D'autre part l'information obtenue serait alors surabondante. C'est pourquoi, généralement, l'on s'intéresse plutôt à la résolution du problème au niveau macroscopique. Encore faut-il savoir l'écrire, traiter correctement les conditions aux limites et donner un sens précis aux valeurs macroscopiques moyennes. Donc, différents modèles ont été développés dans le but de traiter le problème en terme de variables macroscopiques.

Le passage entre les niveaux microscopique et macroscopique, peut être accompli de plusieurs façons différentes (prise de moyenne sur un volume élémentaire représentatif, homogénéisation, convolution de distributions de probabilités, etc.). On peut généralement définir deux types d'approche: les modèles déterministes et les modèles stochastiques.

Une fois le modèle conceptuel achevé, on passe au modèle mathématique macroscopique, à supposer que le passage entre les deux niveaux soit possible.

Ce modèle est constitué des étapes suivantes [14]:

- Définition de la frontière du domaine représentant le milieu poreux
- Écriture des équations de bilan
- Écriture des équations constitutives
- Écriture des termes sources pour les variables correspondantes
- Écriture des conditions initiales
- Écriture des conditions aux limites

L'étape suivante consiste à résoudre le modèle mathématique. Étant donné qu'une solution analytique ne peut être obtenue que dans quelques cas simples, on fait normalement appel à une méthode numérique.

1.7-BUT DE CETTE ÉTUDE

Dans ce travail, on s'est intéressé à la dispersion massique. Le milieu poreux est saturé par une seule phase fluide. En outre, la partie solide est indéformable et imperméable. Il n'y a pas de réactions chimiques.

Le but est d'étudier l'influence des géométries utilisées, pour représenter le milieu poreux. Derrière cette étude se cache une question fondamentale, qui est de savoir si l'on peut modéliser un milieu poreux réel, c'est-à-dire désordonné à partir d'un milieu spatialement périodique quitte à recourir à une géométrie complexe pour la cellule unité.

1.8-DEVELOPPEMENT DE LA THÈSE

Le deuxième chapitre présente la méthode de prise de moyenne et les équations issues de son application. La prise de moyenne permet le passage entre les niveaux microscopique et macroscopique. On voit apparaître l'équation de fermeture et le tenseur effectif de dispersion et on introduit la notion de milieu périodique.

Le troisième chapitre aborde la méthode numérique utilisée dans la résolution des équations de Navier-Stokes et la détermination du tenseur effectif de dispersion. La formulation mathématique, les différents schémas de discrétisation et la méthode de résolution du système d'équations algébriques sont traités en détail.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude hydrodynamique de l'écoulement d'un fluide newtonien au travers d'un milieu poreux. On s'intéresse, surtout, à la perte de charge pour plusieurs arrangements géométriques de la cellule unité. Les résultats sont comparés à ceux donnés par l'équation d'Ergun.

Le cinquième chapitre traite de quelques cas de diffusion en milieu poreux. On introduit, dans ce cas, l'équation de fermeture et le tenseur effectif correspondant. Les résultats obtenus sont comparés à ceux de la littérature.

Le chapitre six aborde le phénomène de dispersion en milieu poreux. On calcule le tenseur effectif de dispersion pour plusieurs arrangements géométriques de la cellule unité. On fait varier en particulier l'angle

entre le vecteur vitesse moyenne résultante et les axes de la cellule unité.

Au chapitre sept, le traitement rigoureux de l'équation de fermeture en régime transitoire conduit à exprimer le flux macroscopique sous la forme d'une relaxation linéaire dont on calcule le tenseur effectif fonction du temps.

Le dernier chapitre, contient la conclusion générale de ce travail et des suggestions pour les travaux futurs.

1.9-BIBLIOGRAPHIE

La deuxième partie de ce chapitre, est consacrée à une revue bibliographique. Cependant, nous n'avons pas l'intention d'épuiser le sujet abordé. Nous voulons plutôt, vu l'énormité des travaux concernant la dispersion, donner quelques-uns des principaux modèles théoriques en nous intéressant surtout aux travaux traitant de la dispersion massique en milieu poreux.

D'une façon générale, les différentes méthodes peuvent être classées soit en méthodes déterministes soit en méthodes stochastiques.

Une méthode est dite déterministe lorsqu'on fait appel aux équations différentielles de bilan, décrivant les processus de transfert microscopique, afin de pouvoir déterminer les caractéristiques macroscopiques du milieu. Le milieu est donc traité comme un continuum. En générale, on moyenne ces équations et on décrit les processus à l'aide de variables moyennes. Souvent les variables sont moyennées sur un volume élémentaire, dont les dimensions se trouvent comprises entre celles du niveau microscopique (local) et du niveau macroscopique (dimension du milieu).

Les méthodes stochastiques utilisent les fonctions de distribution de probabilités et leurs moments, afin de déterminer les moyennes et les propriétés statistiques pour pouvoir ainsi prédire les processus de transfert au niveau macroscopique. En général, on fait appel à des distributions de type gaussien et on applique l'hypothèse d'ergodicité.

Afin de faciliter la lecture, les différents travaux sont regroupés d'après les approches utilisées (déterministes ou stochastiques), les méthodes employées ("réacteurs en cascade", méthode de moments, prise de moyenne, etc.), résultats (théorique ou numérique), etc.

1.9.1-LES PREMIERS TRAVAUX

On va commencer notre revue par le travail de Baron [11] (1952) qui porte sur le transfert de chaleur et de masse à l'intérieur d'un réacteur catalytique.

Baron utilise déjà la notion de volume élémentaire. Le volume

différentiel est assez grand pour pouvoir contenir un grand nombre de particules et à la fois suffisamment petit pour permettre l'uniformité des champs. Les variables sont alors moyennées sur ce volume élémentaire. En outre, Baron préconise une décomposition de la vitesse et de la concentration. Il considère que la vitesse locale peut être écrite comme la somme de la vitesse moyenne superficielle et d'une fluctuation spatiale de vitesse. De même, la concentration est considérée comme étant la somme d'une concentration moyenne (moyennée sur le volume élémentaire) plus une fluctuation locale de concentration. À partir de la prise de moyenne de l'équation différentielle de bilan massique et à l'aide de la décomposition introduite, il arrive à une équation de bilan macroscopique en termes de variables moyennes de la même forme que l'équation microscopique en remplaçant le coefficient de diffusion moléculaire par un **coefficient effectif**, calculé en utilisant des considérations statistiques. Ce coefficient varie proportionnellement au nombre de Péclet. Le nombre de Péclet donne le rapport entre le transport dû à la convection et celui dû à la diffusion moléculaire. Il est défini par $Pe = \frac{\langle u \rangle \ell}{D}$, où $\langle u \rangle$ est la vitesse moyenne de l'écoulement, ℓ une dimension caractéristique des pores du milieu et D le coefficient de diffusion moléculaire.

Sir Geoffrey Taylor [117, 118, 119], a étudié la dispersion d'un soluté lors de l'écoulement (laminaire et turbulent) à l'intérieur d'un tube capillaire. En dépit du fait que ses travaux ne concernent pas directement les milieux poreux, ils ont le mérite d'avoir introduit des notions qui ont été reprises plus tard, lors de l'étude de la dispersion en milieux poreux.

En 1953, Taylor [117] a montré que la dispersion d'un soluté dans un tube pouvait être représentée, sous certaines contraintes, comme la composition d'un mouvement convectif dû à la vitesse moyenne de l'écoulement et d'une dispersion virtuelle qui est fonction du coefficient de diffusion moléculaire. Le centre de la région qui contient le soluté se déplace avec la vitesse moyenne de l'écoulement et le champ de concentration est symétrique par rapport à ce centre. Taylor [118] a ensuite précisé (1954) les conditions de validité de son résultat, en particulier, dans quelles conditions on peut espérer avoir atteint le comportement asymptotique décrit dans son travail précédent. Finalement, en 1954, Taylor [119] a étendu les résultats de ses travaux au cas de

l'écoulement turbulent.

1.9.2-MÉTHODES DU TYPE "RÉACTEURS EN CASCADE"

Kramers et Alberda [65], en 1953, ont consacré leur étude à la distribution des "temps de séjour" de l'écoulement dans les lits de particules.

Ils ont traité spécifiquement les réponses en fréquence, résultant de la perturbation du champ de concentration à l'entrée du lit. Les variations ont été prises comme sinusoïdales et la distribution du temps de séjour est considérée d'un point de vue purement hydrodynamique. Les auteurs considèrent que le problème de la dispersion dans un lit de particules de longueur L , peut être pensé comme la composition d'un écoulement piston (avec une vitesse moyenne u) et d'une diffusion avec un coefficient effectif longitudinal D . À partir de la solution de l'équation de convection-diffusion en régime permanent, ils ont montré que les réponses en fréquences sont les mêmes que celles dues à un nombre n de mélangeurs parfaits en cascade, ayant le même temps total de séjour. L'analogie est valable pour un grand nombre de mélangeurs ou pour des temps moyens de séjour bien supérieurs à $L^2/2D$. Le coefficient introduit de cette façon, $uL/D=2(n-1)$, est inversement proportionnel au nombre de mélangeurs.

Klinkenberg et Sjenitzer [60] (1956) ont poursuivi l'analyse précédente et à l'aide de considérations statistiques ont montré, sur des bases intuitives, que le rapport $\frac{D}{uL}$ est proportionnel au nombre de Péclet.

En 1957, Aris et Amundson [8], ont traité le problème de la dispersion longitudinale à partir du modèle des cellules de mélange. Le développement est similaire à celui employé par Kramers et Alberda [65].

Les auteurs ont montré que la dispersion à l'intérieur d'un lit de particules sphériques, due à un écoulement piston, pouvait être approchée par une distribution de concentration P_p de type Poisson. Cette distribution correspond à la probabilité de trouver une particule, qui a été introduite à l'instant $t=0$, dans la même cellule à l'instant t . D'après le théorème de la limite centrale, on sait que pour un nombre suffisamment grand de cellules, cette distribution devient gaussienne. D'autre part, la solution de l'équation différentielle qui décrit le processus de dispersion massique, peut être écrite en terme d'une densité de probabilité P_d . Cette

densité de probabilité devient gaussienne, pour des valeurs de l'abscisse axiale suffisamment éloignées du point d'injection du soluté. Pour pouvoir donc représenter le processus de dispersion à partir des cellules de mélange en cascade, il faut que les deux distributions de probabilité P_p et P_d soient normales et aient les mêmes moyennes et variance. Cette égalité fournit un coefficient effectif longitudinal $\frac{D_{\parallel}}{D} = \frac{\gamma d_p}{2} Pe$, où γd_p est l'épaisseur d'une couche de sphères.

1.9.3-MÉTHODES STOCHASTIQUES

Scheidegger [103] en 1954 a traité, d'une façon statistique, le problème de la dispersion lors de l'écoulement laminaire et tridimensionnel, d'un fluide en milieu poreux. Le milieu poreux est considéré comme étant désordonné. Les moyennes et probabilités sont définies pour un ensemble des milieux, ayant les mêmes propriétés et dimensions macroscopiques. En outre, les milieux sont considérés comme isotropes et homogènes. Le mouvement d'une particule à l'intérieur du milieu, est le résultat d'une séquence de déplacements l en ligne droite d'une même durée τ . Comme les milieux sont homogènes, une particule qui se déplace à l'intérieur du milieu est sensée rencontrer (après un temps suffisamment long) toutes les conditions d'écoulement présentes dans l'ensemble des milieux. Dans ce cas, l'hypothèse d'ergodicité (égalité entre la moyenne temporelle et la moyenne de l'ensemble) permet d'interpréter la moyenne temporelle prise sur un seul trajet, comme étant la moyenne dans l'espace sur l'ensemble des trajets. Donc le problème de l'étalement d'un nuage de particules est ramené au problème du déplacement d'une seule particule à travers l'ensemble des milieux. Pour des temps $N\tau$, correspondant au déplacement des particules le long de leur trajectoires, beaucoup plus grands que le **temps pour lequel les vitesses locales sont corrélées**, on peut considérer que les déplacements élémentaires de chaque particule sont statistiquement indépendants les uns des autres. Pendant l'intervalle d'observation, les processus sont supposés ne dépendre que de l'instant présent et sont donc indépendants des instants passés (ce sont des processus de Markov).

Scheidegger a considéré que le déplacement ξ d'une particule à un instant donné suit une distribution gaussienne. Ce résultat est une

conséquence du théorème de la limite centrale, qui démontre que pour un nombre suffisamment grand de déplacements, statistiquement indépendants, la distribution de probabilité tend vers une distribution normale.

Ensuite, à partir de la microdynamique de l'écoulement visqueux, moyennée sur l'ensemble des milieux macroscopiquement identiques et de la distribution de probabilités, l'auteur calcule la variance σ^2 du déplacement d'une particule à l'instant t et détermine le coefficient de dispersion D en utilisant la relation d'Einstein: $\sigma^2=2Dt$. Le rapport $\frac{D}{\bar{D}}$ varie en Pe^2 . Cette dépendance en Pe^2 est surprenante car ce coefficient de dispersion ne tient pas compte de la diffusion moléculaire (mouvement brownien). Donc il doit être vu comme uniquement dû à la dispersion hydrodynamique. Il est important de remarquer, ici, que la dispersion est considérée comme isotrope (vu que l'auteur considère la même distribution de probabilités dans toutes les directions).

De Josselin de Jong [30], en 1958, a traité le problème de la dispersion hydrodynamique (longitudinale et latérale) pour l'écoulement d'un fluide dans un milieu désordonné. La méthode mathématique employée est les hypothèses sont similaires à celles utilisées par Scheidegger [103].

L'auteur a considéré le milieu comme étant composé de particules sphériques. D'autre part le fluide s'écoule à l'intérieur d'un réseau de capillaires et à chaque embranchement la particule a la possibilité de suivre des chemins différents, la distribution suivant chaque direction étant proportionnelle au débit de fluide suivant cette direction. L'orientation des capillaires est aléatoire, mais le réseau est distribué uniformément dans toutes les directions. Dans chaque capillaire, le gradient de pression et la vitesse sont proportionnelles à $\cos \theta$, où θ est l'angle entre la direction du capillaire et celle de l'écoulement principal. On suppose que chaque particule, à l'intérieur d'un capillaire, se déplace avec la vitesse moyenne de l'écoulement dans le capillaire. Autrement dit, le modèle ne prend en compte que le mélange aux différentes jonctions du réseau (il n'y a pas de diffusion moléculaire). Donc, contrairement à Scheidegger [103], le temps de résidence des particules dans les capillaires est une fonction de la vitesse moyenne, qui à son tour est une fonction de l'orientation du capillaire.

Les coefficients de dispersion longitudinaux et transversaux sont calculés à l'aide de la relation d'Einstein et montrent une dépendance

en Pe .

Suivant le même type d'approche, Saffman [97] en 1959 a aussi abordé la dispersion en milieu poreux. La méthode est similaire à celle employée par De Josselin de Jong [30].

L'auteur considère que le milieu est formé par un ensemble de capillaires, orientés de façon aléatoire. Le milieu est statistiquement homogène et isotrope. Les capillaires circulaires ont tous la même longueur ℓ et le même rayon R . À l'intérieur de chaque capillaire, l'écoulement est gouverné par la loi de Poiseuille (régime de Stokes). Saffman considère, comme l'a fait De Josselin de Jong, que la vitesse moyenne à l'intérieur du capillaire est une fonction de la vitesse moyenne de l'écoulement principal et de l'angle θ (l'angle entre la direction principale de l'écoulement et la direction du capillaire). La différence est que Saffman a introduit la diffusion moléculaire en comparant le temps de transport diffusif au temps de transport convectif des particules à l'intérieur du capillaire, $t_{conv}^r(r)$, temps qui est une fonction de la position r de la particule par rapport à l'axe de symétrie du capillaire. Deux temps de transport diffusifs calculés avec la diffusivité moléculaire \mathcal{D} ont été distingués: un temps de transport radial $t_{dif}^r = \frac{R^2}{8\mathcal{D}}$ et un temps de transport longitudinal $t_{dif}^l = \frac{\ell^2}{2\mathcal{D}}$ ($t_{dif}^l \gg t_{dif}^r$). Trois cas ont été envisagés pour le temps de transport d'une particule dans un capillaire:

1) $t_{conv} \leq t_{dif}^r$, alors le temps de passage est bien inférieur au temps nécessaire pour que les particules diffusent effectivement à travers la section transversale et le temps de transport de la particule est égal à t_{conv} ;

2) $t_{dif}^r < t_{conv} \leq t_{dif}^l$, le mécanisme de transport est la combinaison d'un transport convectif et d'un transport diffusif radial; le temps de transport de la particule est la somme du temps de transport convectif moyen dans le capillaire et du temps de transport diffusif radial;

3) $t_{dif}^l < t_{conv}$, le mécanisme de transport dominant est la diffusion longitudinale; le temps de transport vaut alors t_{dif}^l .

Saffman a ensuite calculé, à partir de la fonction de distribution de probabilités pour qu'une particule se trouve sur une ligne de courant déterminée et à l'intérieur de l'un des capillaires, les propriétés statistiques concernant les déplacements et les temps de séjour, ceci après

un nombre n grand de déplacements. La distribution de probabilité diffère de celle utilisée par De Josselin de Jong, **parce qu'elle prend compte le profil parabolique de vitesses à l'intérieur du capillaire.**

L'auteur montre que les déplacements latéraux ont une distribution normale avec une moyenne nulle. Le coefficient effectif latéral est alors déterminé à partir de la relation d'Einstein. Le coefficient ainsi calculé montre une dépendance en Pe . En ce qui concerne les déplacements longitudinaux, l'auteur montre qu'il s'agit d'une distribution **approximativement normale** lorsque $Pe \gg 1$. Le coefficient effectif longitudinal présente une dépendance en Pe et en $Pe \cdot \ln(Pe)$.

En 1960, Saffman [98] a donné suite à son premier travail et a traité le cas où la diffusion moléculaire et le transport dû à la convection sont du même ordre ($Pe = O(1)$). Il s'agit, comme dans le premier travail, de l'étude de la dispersion dans un réseau de capillaires circulaires de longueur l et rayon R . Cette fois, les coefficients effectifs de dispersion sont calculés à partir de la fonction de corrélation lagrangienne (covariance) des composantes de la vitesse de déplacement des particules.

Saffman considère que le temps moyen de séjour d'une particule à l'intérieur d'un capillaire est supérieur à celui nécessaire pour avoir une dispersion de type Taylor. La vitesse de déplacement d'une particule est alors décomposée en la somme de la vitesse moyenne de l'écoulement à l'intérieur du capillaire et d'une fluctuation de vitesse. La fluctuation de vitesse est prise comme étant la vitesse due à un mouvement brownien engendré par une dispersion de type Taylor dans le capillaire.

Le calcul de la covariance des composantes du vecteur vitesse de déplacement, suivi d'une intégration dans le temps, fournit les coefficients effectifs de dispersion. Les coefficients sont alors constitués de la somme de trois termes. Le premier est dû à la diffusion moléculaire, le deuxième est celui dû à la dispersion de Taylor à l'intérieur d'un capillaire et le troisième est la contribution résultant de la dispersion convective. Les résultats montrent que les coefficients longitudinal et transversal sont différents, ceci en accord avec les résultats expérimentaux. Pour des valeurs très petites du nombre de Péclet ($Pe \ll 1$), les coefficients longitudinal et transversal, montrent une dépendance en Pe^2 . Pour $1 \ll Pe \ll 8(l/R)^2$, le coefficient longitudinal présente des contributions qui sont fonctions de Pe , Pe^2 et $Pe \cdot \ln(Pe)$. Le

coefficient transversal ne présente dans ce cas qu'une dépendance en Pe et Pe^2 .

Haring et Greenkorn [49] (1970) utilisent une approche stochastique afin de traiter le problème de dispersion due à l'écoulement d'un fluide en régime de Stokes, à l'intérieur d'un milieu poreux **non-uniforme**. Le traitement employé est similaire à celui déjà utilisé par De Josselin De Jong [30]. **La diffusion moléculaire n'est pas prise en compte**. La différence est que Haring et Greenkorn utilisent un réseau aléatoire de pores non-uniformes constitué de cylindres circulaires, **ne possédant pas la même longueur et le même rayon**. Les longueurs et les rayons sont distribués selon une fonction de distribution de probabilité à deux paramètres. La probabilité pour qu'une particule emprunte l'un des pores est proportionnel au débit.

Les coefficients de dispersion longitudinal et transversal sont calculés à partir de la relation d'Einstein. Les résultats fournissent un coefficient transversal D_{\perp}^*/D qui est proportionnel au nombre de Péclet. Le coefficient longitudinal D_{\parallel}^*/D présente une variation proportionnelle au nombre de Péclet et au logarithme du nombre moyen de pores traversés. Pour un choix raisonnable des distributions de longueur et rayon, le rapport entre les deux coefficients $D_{\parallel}^*/D_{\perp}^*$ peut varier entre 3 (milieu uniforme, isotrope et non consolidé) jusqu'à plusieurs dizaines pour des milieux consolidés.

Une approche du type stochastique est aussi utilisée par Todovic [120] en 1970, ayant pour but l'étude de la dispersion longitudinale lors de l'écoulement établi d'un fluide incompressible à l'intérieur d'un milieu poreux. Le milieu poreux est macroscopiquement homogène et isotrope.

Deux hypothèses sont retenues dans ce travail en ce qui concerne le déplacement des particules: premièrement tout déplacement se fait dans la direction de l'écoulement principal; deuxièmement les déplacements se font par étapes avec des périodes entre les déplacements où les particules se trouvent au repos. Les deux hypothèses associées au fait que le milieu est homogène et isotrope et que le écoulement est établi, mènent à une distribution de probabilité des déplacements d'une particule de type Poisson.

D'après leurs résultats, ils concluent que les fonctions de

distribution des déplacements ne sont pas gaussiennes et dépendent de deux paramètres qui dépendent à leur tour de l'hydrodynamique de l'écoulement. Par conséquent, le coefficient longitudinal de dispersion dépend aussi de ces deux paramètres.

1.9.4-FORME DU TENSEUR DE DISPERSION

Jacob Bear [12], en 1961, a étudié la dispersion résultant de l'injection d'un dirac de soluté dans un écoulement uniforme bi et tridimensionnel à l'intérieur d'un milieu poreux isotrope. Le but est d'étudier la relation entre les propriétés de dispersion du milieu (coefficients de diffusion), les déplacements du soluté dus au champ de vitesses et la distribution de soluté résultante. **L'influence de la diffusion moléculaire n'est pas prise en compte.**

Bear considère que l'étalement du soluté injecté prend, approximativement, la forme d'une distribution normale 'bivariable'. C'est-à-dire que les particules du soluté s'étaient de la position moyenne ($x=x_0+L=x_0+ut$), selon l'axe OX, avec un écart type σ_x et selon l'axe OY avec un écart type σ_y est un déplacement moyen nul ($y=y_0+\Delta y=y_0$). Les écarts types sont des fonctions des coefficients de dispersion longitudinal et transversal respectivement. L'hypothèse de la distribution normale est fondée sur les travaux de De Josselin de Jong [30].

Bear a constaté que les composantes du vecteur vitesse moyenne et du vecteur déplacement moyen, ne suffisent pas pour déterminer la distribution finale de soluté. Un tel fait est dû à la nature du milieu poreux. Pour un milieu isotrope, les pores sont distribués aléatoirement selon toutes les directions d'espace et c'est le profil de vitesses à l'intérieur des pores qui est le responsable de la dispersion. Finalement, le tenseur de dispersion D_{ij} , pour un système de coordonnées général, est introduit comme le produit contracté entre un tenseur du quatrième ordre a_{ijkl} (tenseur de dispersion géométrique) et un tenseur construit à partir du vecteur vitesse moyenne du deuxième ordre, $D_{ij} = a_{ijkl} \frac{v_k v_l}{|v|}$. La même forme générale du tenseur de dispersion, a été obtenue en 1959 par Nikolaevskij¹ à partir

¹Publication en Russe

d'une l'analogie avec la théorie statistique de la turbulence.

Le même tenseur du quatrième ordre des coefficients de dispersion, est retrouvé par De Josselin de Jong et Bossen [31] en 1961. Les auteurs utilisent comme point de départ de leur développement, l'équation de convection-dispersion, en régime transitoire, écrite pour le cas de l'écoulement uniforme selon l'une des directions de l'espace. Le tenseur des coefficients est obtenu lorsqu'on réécrit la même équation aux dérivées partielles pour un système d'axes tourné d'un angle α par rapport au système d'axes précédent. Les composantes du tenseur de dispersion géométrique du quatrième ordre, obtenu pour un milieu isotrope, sont déterminées à l'aide seulement de deux coefficients de dispersion, qui sont les coefficients longitudinal et transversal.

Le tenseur de dispersion géométrique du quatrième ordre a_{ijkl} , introduit par Bear [12] dans le cas d'un milieu isotrope, est généralisée par Scheidegger [104] en 1961 pour le cas d'un milieu poreux anisotrope. À partir de considérations sur la symétrie du tenseur et du principe d'Onsager (contesté par Greenkorn et Kessler [44]), Scheidegger montre que le tenseur possède 36 composantes indépendantes. Le tenseur ainsi introduit est ramené à celui de Bear [12], lorsqu'il s'agit d'un milieu isotrope.

Poursuivant leurs travaux, Bachmat et Bear [10] (1964) ont réécrit le tenseur de dispersion géométrique pour des systèmes de coordonnées curvilignes. Ils donnent l'expression générale en coordonnées cylindriques, de l'équation aux dérivées partielles gouvernant la dispersion hydrodynamique dans un milieu poreux homogène et isotrope. Le cas particulier du système de coordonnées curvilignes orthogonales est aussi traité.

1.9.5-MÉTHODE DES MOMENTS

Les résultats obtenus par Taylor [117, 118, 119] ont été redémontrés d'une façon plus générale par Aris [7] (1956), en étudiant le comportement du centre de gravité et des moments spatiaux d'une distribution de soluté pour un tube capillaire cylindrique de section quelconque S et axe oz , et pour un champ de vitesses permanent et établi.

La méthode consiste en la détermination du comportement asymptotique des moments de la distribution de soluté injectée. La première étape se

résume à l'application de l'opérateur $m_m(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} z^m c(x,z,t) dz$ à l'équation différentielle, de type convection-diffusion, régissant le transport de masse. L'indice m indique l'ordre du moment, seuls les trois premiers moments ont été étudiés ($n=0, 1$ et 2). Le moment d'ordre 0 donne la quantité totale de soluté dans le système, le moment d'ordre 1 le déplacement du barycentre du nuage de soluté et le moment d'ordre 2 l'étalement du nuage par rapport à son barycentre. Le coefficient de dispersion longitudinal est obtenu par l'analyse asymptotique à grands temps du comportement des trois premiers moments globaux $M_m(t) \left(M_m(t) = \int_S m_m dS \right)$, où S est la section orthogonale à l'axe oz du tube.

Les résultats d'Aris montrent que le coefficient de dispersion varie avec le carré du nombre de Peclet (Pe^2) pour un l'écoulement laminaire, tandis que dans le cas de l'écoulement turbulent, la dépendance est en Pe . La différence de comportement est expliquée par le mélange latéral additionnel, dû à la diffusion turbulente.

Horn [53] (1971) a pour l'essentiel repris cette démarche et l'a appliquée aux systèmes chromatographiques.

Le coefficient de dispersion est alors calculé à partir des moments globaux centrés d'ordre 1 et 2, et est donné par $D^* = D_T^* + \bar{D}_z$, où D_T^* est la contribution de Taylor à la dispersion et \bar{D}_z est la contribution axiale due à la diffusion moléculaire.

Horn montre aussi que pour une grande classe de systèmes, le coefficient de dispersion D^* représente le maximum d'une fonctionnelle.

Brenner [19] en 1980 utilise la technique d'analyse des moments, introduite par Aris [7] en 1956 et étendue par Horn [53] en 1971, dans le développement d'une théorie rigoureuse de la dispersion pour les milieux poreux spatialement périodiques. Cette théorie décrit le comportement asymptotique de la distribution spatiale d'un soluté, injecté dans un fluide qui s'écoule à l'intérieur du milieu poreux. Le phénomène est décrit à l'aide des paramètres physiques qui caractérisent le système: le coefficient de diffusion moléculaire \mathcal{D} , la vitesse de filtration ou de Darcy, les propriétés du fluide et de la géométrie du milieu (principalement la porosité ε et la longueur microscopique caractéristique ℓ). Les résultats sont obtenus pour des milieux ordonnés (périodiques), mais Brenner espère que la théorie développée trouve aussi

des applications pour des milieux non ordonnés.

La théorie s'applique dans le cas où les particules du soluté ont des dimensions ponctuelles, ne subissent pas l'action de forces extérieures et ont des propriétés de transport qui sont les mêmes que celles des molécules du fluide interstitiel.

Brenner fait appel à la notion de périodicité spatiale pour pouvoir représenter le milieu poreux à partir d'une cellule unité. Le milieu est alors reconstitué par des translations de la cellule unité dans les trois directions de l'espace. Le choix de la cellule unité n'est pas unique, mais toutes les cellules doivent être identiques. Les dimensions et la forme des particules solides qui composent le milieu, ne varient pas en fonction du choix de la cellule unité.

Brenner montre que la vitesse de Darcy est une constante macroscopique indépendante de la cellule unité considérée. Autrement dit, le champ de vitesses locales possède la même valeur pour tous les points équivalents de chaque cellule. En outre, la théorie ne requiert pas que l'écoulement de la phase fluide soit à faible nombre de Reynolds ni que le fluide soit newtonien. La direction de l'écoulement principal peut être aussi quelconque.

Ensuite, Brenner considère le déplacement d'une particule brownienne ou molécule de soluté, qui est convectée par le fluide et diffusée par le mouvement brownien. L'intensité de ce mouvement est donnée par le coefficient de diffusion moléculaire. Comme la localisation instantanée de la particule brownienne est une variable stochastique, elle est donnée par la fonction densité de probabilité $P \equiv P(R, t | R')$. Cette fonction donne la probabilité de trouver la particule en R à l'instant t , sachant qu'elle était en R' à l'instant $t=0$. À partir de la conservation et de la continuité de la fonction densité de probabilité, on montre que l'équation qui gouverne l'évolution dans le temps de la fonction P , est une équation différentielle du type convection-diffusion ayant comme source la fonction de Dirac $\delta(R-R')\delta(t)$. L'auteur montre que cette équation avec une condition d'imperméabilité sur la paroi solide des particules, possède une solution unique. L'équation différentielle en P est ensuite réécrite sous forme locale, pour une cellule unité n fixée.

L'étape suivante consiste à obtenir les équations différentielles gouvernant les moments locaux m_m de la fonction P , par l'application de

l'opérateur $m_m(r,t|r') = \sum_n (R_n - R'_n)^m \cdot P(R_n - R'_n, r, t | r')$ ($m=0,1,2,\dots$) à l'équation différentielle locale, gouvernant l'évolution de la fonction densité de probabilité. Le système d'équations différentielles régissant l'évolution des trois premiers moments, avec les conditions aux limites, est ainsi obtenu. Les équations des moments globaux $M_m(t)$, $\left(M_m(t) = \int_{V_B} m_m dV \right)$, sont obtenues à partir de ces dernières par intégration sur le volume V_B de la phase fluide dans une cellule.

Du comportement asymptotique des moments globaux (le comportement asymptotique est atteint lorsqu'on vérifie $Dt/\ell^2 \gg 1$) on obtient à partir du moment global d'ordre zéro M_0 la condition de normalisation de la fonction densité de probabilité. Le moment global d'ordre un M_1 , donne le déplacement moyen de la particule à l'instant t . La limite pour $t \rightarrow \infty$ de $\frac{dM_1}{dt}$ donne la vitesse moyenne de déplacement de la particule de soluté. Brenner montre qu'en moyenne le soluté se déplace avec la vitesse moyenne intrinsèque de la phase fluide. Finalement, le moment global d'ordre deux M_2 fournit la variance du déplacement du soluté. Le coefficient effectif de dispersion est alors calculé à partir des moments globaux M_1 et M_2 par $D^* = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} (M_2 - M_1 M_1)$. Le résultat final pour le tenseur de dispersion s'écrit $\frac{D^*}{D} = \frac{1}{V} \int_{V_B} (\nabla f + I)^T (\nabla f + I) dV$, où V_B est le volume de la phase fluide à l'intérieur de la cellule unité et f est la solution d'un problème de fermeture. Le vecteur f est périodique et est la solution d'une équation différentielle du type convection-diffusion dont la source est la fluctuation de vitesse locale.

En plus, Brenner démontre que le tenseur D^* est symétrique, défini positif et qu'il est un invariant macroscopique. C'est-à-dire qu'il ne dépend pas du choix de la cellule unité.

En 1982, Brenner et Adler [20] ont étendu le travail développé précédemment par Brenner [19] en 1980. Il s'agit de l'étude de la dispersion de Taylor d'un soluté injecté dans un fluide qui s'écoule au travers d'un milieu spatialement périodique, en tenant compte du transport surfacique et du transport à l'intérieur des particules solides.

Contrairement au premier travail, les particules browniennes (sphériques) peuvent avoir un diamètre non nul et peuvent subir des effets

dûs aux forces extérieures. En outre, le transport par convection-diffusion à l'intérieur de la phase discontinue est envisagé et l'adsorption et le transport du soluté le long des frontières séparant les phases continues et discontinues sont traités. Enfin, la méthode des moments est étendue afin d'inclure le processus de transfert de chaleur et les réactions chimiques homogènes du premier ordre.

1.9.6-LA MÉTHODE DE PRISE DE MOYENNE

Comme ce travail utilisera comme point de départ la théorie de la prise de moyenne pour étudier la dispersion en milieu poreux, il nous a semblé intéressant de développer quelques idées générales sur l'origine de cette méthode, avant de passer en revue son application particulière au problème qui nous préoccupe.

1.9.6.1-FONDEMENTS DE LA MÉTHODE

Cette méthode rend possible l'obtention de la forme correcte des équations aux dérivées partielles macroscopiques régissant les phénomènes de transport, aussi bien que la détermination des coefficients de transport "effectifs" qui apparaissent lors de l'obtention des équations macroscopiques à partir des équations microscopiques.

L'application mathématique de cette méthode a été introduite, indépendamment, par cinq auteurs en 1967. Il s'agissait de Anderson et Jackson [6], Marle [70], Slattery [111] et Whitaker [125]. Les premiers auteurs s'en sont servis pour arriver aux équations du mouvement gouvernant l'écoulement en lits fluidisés, tandis que Slattery l'applique à l'étude de l'écoulement d'un fluide viscoélastique à travers un milieu poreux. Whitaker l'utilise pour formuler les équations macroscopiques gouvernant le transport de masse à l'intérieur d'un milieu poreux et Marle pour obtenir les équations macroscopiques régissant les phénomènes de transport en milieu poreux. Cependant, Lehner [67] en 1979, attribue à Hadamard l'origine du théorème de prise de moyenne [Carbonell et Whitaker 1984; Howes et Whitaker 1985; Quintard et Whitaker 1987].

Slattery [111] en 1967, afin de pouvoir moyenniser les équations du mouvement et continuité, s'est intéressé au problème de la variation de

l'intégrale sur $V(\Delta)$, d'une certaine quantité ϕ associée au fluide, en fonction de l'abscisse curviligne Δ mesurée sur une courbe arbitraire. À chaque point du milieu poreux on associe une surface $S(\Delta)$ (dont le volume est $V(\Delta)$ et qui contient une partie solide et fluide) en la déplaçant par translation (sans rotation) le long de la courbe arbitraire.

À partir du théorème généralisé de transport et du théorème de la divergence, l'auteur déduit le théorème de prise de moyenne:
$$\int_{V(\Delta)} \nabla \cdot \phi \, dV = \nabla \cdot \int_{V(\Delta)} \phi \, dV + \int_{S_{\sigma}} \phi n \, dS,$$
 où ϕ peut être un scalaire, un vecteur, un tenseur, n est la normale à l'interface solide-fluide et S_{σ} est la surface fluide-solide contenue dans le volume $V(\Delta)$.

À l'aide du théorème de prise de moyenne, Slattery obtient les équations moyennées de la quantité du mouvement et de continuité régissant l'écoulement d'un fluide viscoélastique en milieu poreux.

De même, le théorème de prise de moyenne est introduit et utilisé par Whitaker [125] en 1967, pour obtenir l'équation macroscopique gouvernant le transport de masse en milieu poreux. La forme du théorème est identique à celle présentée par Slattery [111] la même année.

La méthode consiste à moyenner l'équation de transport et les conditions aux limites à l'aide du théorème de prise de moyenne. Ce théorème donne la relation entre la moyenne d'une dérivée et la dérivée de la moyenne. Les moyennes sont prises sur un volume élémentaire représentatif **VER**, associé à une échelle intermédiaire du milieu. Si l'on considère ℓ l'échelle associée à la distance sur laquelle la variable microscopique subit des variations appréciables et L la longueur caractéristique du milieu poreux, l'échelle r associée au **VER** est telle que $\ell \ll r \ll L$.

En 1985, Howes et Whitaker [54] ont revu le théorème de prise de moyenne. Ils l'ont fait afin d'apporter une démonstration mathématique plus rigoureuse de ce théorème.

Quintard et Whitaker [91] en 1987 ont développé une théorie qui prend en compte les effets des hétérogénéités locales. Le milieu est dit hétérogène si les coefficients de transferts effectifs, dans les équations moyennes obtenues à partir de la prise de moyenne locale, ne sont pas indépendants de la position. Cette définition dépend donc du processus, de la dimension du volume de prise de moyenne et des caractéristiques du

milieu poreux.

La prise de moyenne locale introduite au paragraphe 1.9.6.1, permet l'obtention des équations moyennes de transfert à partir de la prise de moyenne volumique des équations ponctuelles et des conditions aux limites sur les interfaces entre les phases. Cette prise de moyenne est utilisable seulement pour des systèmes homogènes et doit être étendue par une deuxième prise de moyenne quand les hétérogénéités locales sont importantes. On l'appelle prise de moyenne à grande échelle et elle permet l'obtention des coefficients effectifs à grande échelle à partir de la prise de moyenne des coefficients issus de la prise de moyenne locale des équations de transfert.

Une autre approche est développée par Marle [70] en 1967, qui obtient les équations macroscopiques régissant les phénomènes de transport, à l'intérieur d'un milieu poreux, à partir des équations microscopiques. Comme l'auteur l'a bien précisé, ce passage peut être effectué soit à partir d'une prise de moyenne dans l'espace, soit par l'emploi de fonctions aléatoires et le passage à l'espérance mathématique. Marle utilise cette dernière méthode pour obtenir les équations macroscopiques.

Afin de pouvoir introduire les variables macroscopiques comme des espérances mathématiques, le milieu poreux est considéré comme macroscopiquement homogène et les phénomènes ayant lieu à l'intérieur du milieu sont macroscopiquement stationnaires dans l'espace. Dans ce cas, les grandeurs microscopiques qui décrivent ces phénomènes sont des réalisations particulières d'une fonction ergodique et stationnaire. La moyenne spatiale est alors un cas limite de l'espérance mathématique, en raison de l'ergodicité de la fonction aléatoire.

En outre, les grandeurs microscopiques sont considérées comme des fonctions (ou distributions) des trois variables d'espace et du temps. Les grandeurs macroscopiques sont alors obtenues par une double convolution dans le temps et l'espace.

Ensuite, Marle établit les relations entre les dérivées des grandeurs macroscopiques et celles des grandeurs microscopiques, afin de pouvoir moyenner les équations qui régissent les phénomènes à l'échelle microscopique. Comme très souvent, les grandeurs microscopiques ne sont pas des fonctions continues des variables de l'espace et du temps, elles sont donc dérivées au sens des distributions. Le résultat final donne la dérivée

d'une grandeur macroscopique comme étant l'espérance mathématique de la dérivée, prise au sens des distributions, de la grandeur microscopique. Autrement dit, elle est donnée par le produit de convolution entre la dérivée de la grandeur microscopique (au sens des distributions) et la fonction de distribution de probabilité.

À partir des relations entre les grandeurs et les dérivées macroscopiques et microscopiques, le passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique est réalisé. Marle obtient ainsi les équations macroscopiques de continuité, de bilan d'impulsion, de bilan d'énergie, du bilan d'entropie et les équations phénoménologiques.

1.9.6.2-APPLICATION DE LA MÉTHODE À LA DISPERSION

Contrairement à Bear [12], De Josselin de Jong [30], Saffman [97] et Scheidegger [103], Whitaker [125] (1967) arrive au tenseur de dispersion à partir de la prise de moyenne de l'équation différentielle de convection-diffusion régissant la dispersion. L'auteur considère le cas d'un écoulement laminaire d'un fluide incompressible au travers d'un milieu poreux anisotrope. Il n'y a ni réaction chimique ni absorption sur l'interface solide-fluide.

Afin de pouvoir intégrer les équations de transport, sur un volume contenant à la fois le fluide et le solide, Whitaker introduit le **théorème de prise de moyenne** (paragraphe 1.9.6.1). Comme résultat de l'intégration, on voit apparaître le vecteur tortuosité τ , qui traduit les chemins sinueux aussi bien que les expansions et les contractions des tubes de courant à l'intérieur du milieu.

À partir d'une décomposition du vecteur vitesse et de la concentration en la somme d'une valeur moyenne et d'une fluctuation spatiale autour de cette moyenne, Whitaker [125] fait apparaître ainsi le vecteur de dispersion $\phi = \langle \tilde{c}\tilde{v} \rangle$. Le tenseur de dispersion est alors obtenu à partir d'un développement en série de Taylor du vecteur de dispersion sous la forme d'une somme de trois termes: le premier dû à la diffusion moléculaire dominant aux faibles vitesses est constant, le deuxième varie proportionnellement à la vitesse et le troisième varie proportionnellement au carré de la vitesse.

Un traitement rigoureux des équations de transport pour des systèmes

multiphasiques est développé par Whitaker [127] en 1973.

Whitaker introduit deux types de moyennes volumiques, la moyenne spatiale $\langle \rangle$ et la moyenne intrinsèque associée à la phase α $\langle \rangle^\alpha$. La différence est que pour la moyenne intrinsèque, on utilise l'inverse du volume de la phase α à l'intérieur du VER comme fonction de pondération, tandis que pour la moyenne spatiale on utilise le volume du VER.

Afin de pouvoir aboutir à son résultat final, Whitaker préconise la décomposition des variables locales sur la forme $\phi_\alpha = \langle \phi_\alpha \rangle + \phi_\alpha$, où ϕ_α est la variable associée à la phase α , $\langle \phi_\alpha \rangle$ sa moyenne spatiale et ϕ_α sa déviation par rapport à la moyenne. Cette décomposition s'applique aussi à la vitesse locale.

Il arrive donc à l'équation de diffusion moyennée, gouvernant le transport de la concentration moyenne $\langle c_\alpha \rangle^\alpha$, à l'aide du théorème de prise de moyenne et de la décomposition introduite ci-dessus. Cette équation fait apparaître outre les termes classiques transitoire, convectif et diffusif en $\langle c_\alpha \rangle^\alpha$, un terme dû à la dispersion hydrodynamique $\nabla \cdot \langle \tilde{c}_\alpha \tilde{v}_\alpha \rangle$, un terme tenant compte de l'évaporation ou condensation, un terme de diffusion dû à la tortuosité du milieu, un terme provenant du transport diffusif entre les phases et un terme dû aux réactions chimiques.

En 1975, Gray [43] reprend le développement réalisé par Whitaker [127] en 1973. Il montre que l'introduction de la décomposition $\phi_\alpha = \langle \phi_\alpha \rangle + \phi_\alpha$, utilisée par Whitaker, mène à un terme de dispersion (le terme de tortuosité) qui n'est pas nul lorsque le champ de concentration c_α est uniforme. Cette difficulté est éliminée, d'après Gray, si l'on prend comme décomposition de la variable locale $\phi_\alpha = \langle \phi_\alpha \rangle^\alpha + \phi_\alpha$.

Les travaux initiés par Whitaker [125] en 1967, ont abouti à une approche combinée de la méthode de prise de moyenne volumique et du modèle géométrique d'un milieu spatialement périodique. Cette approche est appliquée au cas de la dispersion massique dans un milieu poreux, en 1983, par Carbonell et Whitaker [22]. La théorie traite le cas de la dispersion d'un soluté injecté dans le milieu, au travers duquel s'écoule un fluide incompressible. Il n'y a ni réactions chimiques ni absorption entre autres hypothèses.

Les équations moyennées sont obtenues en suivant les procédures déjà introduites par Whitaker [127] en 1973. Dans une première étape, on fait une prise de moyenne de l'équation différentielle de convection-diffusion

gouvernant le processus de transport du soluté, avec les conditions aux limites associées sur les interfaces fluide-solide. Le théorème de prise de moyenne [125] est utilisé pour effectuer le passage entre le niveau microscopique et le niveau macroscopique.

Afin de mettre en rapport les variables locales et moyennes, Carbonell et Whitaker utilisent la décomposition $\tilde{\phi} = \phi - \langle \phi \rangle^B$, en suivant le travail de Gray [43]. Les fluctuations spatiales sont supposées vérifier $\langle \tilde{\phi} \rangle^B = 0$.

L'équation de fermeture est obtenue à partir de l'équation gouvernant les fluctuations locales \tilde{c} . Cette dernière est obtenue en soustrayant l'équation locale différentielle de convection-diffusion en c de l'équation différentielle moyennée en $\langle c \rangle^B$. D'après une analyse d'ordre de grandeur des termes de l'équation en régime permanent ($Dt/l^2 \gg 1$) et de la condition à la limite en \tilde{c} , les auteurs arrivent à une équation où le terme source et la condition à la limite sont linéaires en $\nabla \langle c \rangle^B$.

Le champ de fluctuation spatiale de concentration est alors recherché, dans le cas où la porosité est indépendante de la position, sous la forme $\tilde{c} = \mathbf{f}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \langle c \rangle^B$ où le vecteur $\mathbf{f}(\mathbf{r})$ est la solution d'un problème de fermeture.

Les équations moyennées, issues du passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique, font intervenir deux mécanismes de dispersion macroscopique. Le premier est décrit par le tenseur de tortuosité $\tau = \frac{1}{V_B} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{n} \mathbf{f} \, dA$, où V_B est le volume de la phase fluide à l'intérieur du VER, $A_{B\sigma}$ est l'interface solide-fluide et \mathbf{n} la normale à l'interface $A_{B\sigma}$. Ce tenseur est fortement dépendant de la structure du milieu. Le deuxième mécanisme, décrit par le tenseur de dispersion hydrodynamique $\mathbf{D} = -\langle \tilde{\mathbf{v}} \mathbf{f} \rangle^B$, représente les fluctuations spatiales du champ de concentration \tilde{c} dues aux fluctuations du champ de vitesses locales.

Whitaker montre que pour les milieux spatialement périodiques, les vecteurs \mathbf{f} et \mathbf{v} sont périodiques. En outre, cette périodicité spatiale simplifie le calcul du tenseur tortuosité τ et du tenseur de dispersion hydrodynamique \mathbf{D} . Si l'on considère un milieu formé par n cellules unités, la périodicité implique l'égalité $\tau = \frac{1}{V_B} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{n} \mathbf{f} \, dA = \left\{ \frac{1}{V_B} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{n} \mathbf{f} \, dA \right\}_{\text{cellule}}$ et $\mathbf{D} = -\langle \tilde{\mathbf{v}} \mathbf{f} \rangle^B = -\langle \tilde{\mathbf{v}} \mathbf{f} \rangle_{\text{cellule}}^B$. On est donc ramené au problème de la résolution de l'hydrodynamique et de l'équation de fermeture en \mathbf{f} pour une seule cellule unité.

De même que Whitaker [127], Tompson et Gray [121] sont arrivés en 1986, à partir de la prise de moyenne spatiale des équations de bilan microscopique (paragraphe 1.9.6.1), aux équations macroscopiques gouvernant les processus de transport. Ils aboutissent ainsi aux équations macroscopiques de continuité, de transport de la quantité de mouvement et de transport du soluté.

Contrairement à d'autres travaux, Tompson et Gray ne considèrent pas, a priori, la dispersion macroscopique comme un processus fickien. Autrement dit, l'équation macroscopique n'est pas identique à l'équation microscopique, le coefficient de diffusion moléculaire étant remplacé par le tenseur effectif de dispersion. L'idée consiste, alors, à écrire une équation séparée de bilan pour le vecteur dispersion $\phi(x,t) \equiv \langle \tilde{c}\tilde{v} \rangle$. Cette équation est obtenue à partir des équations macroscopiques en $\langle v \rangle$ et $\langle c \rangle$ et des équations microscopiques en v et c . L'équation différentielle résultante en ϕ , fait intervenir cinq termes sources macroscopiques: une source convective, une due à la dispersion de la dispersion, une source diffusive, une source de pression et une source visqueuse. Les auteurs proposent, ensuite, des relations phénoménologiques pour fermer le système d'équations en $\langle c \rangle^B$ et ϕ .

Plumb et Whitaker [87] (1988a) ont traité le problème de la dispersion en milieux poreux hétérogènes à partir de la théorie de prise de moyenne locale et à grande échelle. Il s'agit de considérer maintenant un milieu poreux avec deux échelles de longueur suffisamment séparées pour que l'on puisse calculer les propriétés de chacune des zones du milieu par une prise de moyenne locale, les propriétés macroscopiques du milieu étant déduites par une seconde prise de moyenne à grande échelle.

1.9.7-MÉTHODES DE MOYENNE D'ENSEMBLE

Une prise de moyenne des équations microscopiques est aussi utilisée par Koch et Brady [61] en 1985, afin d'obtenir les équations macroscopiques de bilan massique. La moyenne est prise sur un ensemble de réalisations de lits de particules, où chaque réalisation possède un arrangement de particules différent.

Une analyse rigoureuse est faite du comportement asymptotique de la dispersion massique dans un lit désordonné de particules sphériques pour de

très grandes porosités. Le phénomène de transport macroscopique pour des temps très longs, prend la forme de la loi de Fick où le coefficient moléculaire est remplacé par un tenseur effectif de dispersion.

Le nombre de Reynolds est supposé petit et la concentration faible, de façon à ce que l'écoulement soit gouverné par l'équation de Stokes et que la loi de Fick décrive le transport de masse.

Comme l'ont déjà fait d'autres auteurs, les fluctuations sont décrites en termes de variables locales et moyennes, $\tilde{\phi} = \phi - \langle \phi \rangle_0$, où $\langle \rangle_0$ est la moyenne sur l'ensemble des configurations [61]. L'équation macroscopique de bilan massique est alors obtenue, à partir de la prise de moyenne de l'équation locale. Le flux moyen macroscopique de masse, fait intervenir différents mécanismes de dispersion macroscopique. Koch et Brady introduisent le tenseur effectif de dispersion, comme étant la somme de trois termes, $D = D^m + D^\alpha + D^*$. Le premier (D^m) est la contribution due à la diffusion moléculaire dans le fluide, le deuxième (D^α) est dû à la différence de concentration de soluté à l'intérieur des particules et dans le fluide. Finalement le dernier (D^*), est lié à la dispersion de soluté dû à l'existence des termes convectifs. Soit explicitement: $D^m \equiv D_f I$, $D^\alpha \cdot \nabla \langle c \rangle_0 \equiv -(\mathcal{D}_1 - \langle \mathcal{D}_1 \rangle_0) \nabla (c - \langle c \rangle_0(x, t)) \rangle_0$ et $D^* \cdot \nabla \langle c \rangle_0 \equiv \gamma \langle u \rangle_0 \langle c \rangle_0 - \langle \tilde{u} \tilde{c} \rangle_0$, où D_f est le coefficient de diffusion moléculaire du fluide, \mathcal{D}_1 est \mathcal{D}_f ou \mathcal{D}_p (coefficient de diffusion moléculaire dans la particule) suivant que x corresponde au fluide ou au solide et γ est une constante. Afin de pouvoir calculer le tenseur effectif de dispersion D , la connaissance du champ de fluctuation de vitesses \tilde{u} et de concentration \tilde{c} s'impose. L'introduction du tenseur effectif sous la forme donnée ci-dessus correspond à une représentation du flux moyen massique qui est linéaire en $\nabla \langle c \rangle_0$, $\langle q \rangle_0 = (1 + \gamma) \langle u \rangle_0 \langle c \rangle_0 - D \cdot \nabla \langle c \rangle_0$.

Le terme $\langle \tilde{u} \tilde{c} \rangle_0$ est calculé à partir de la valeur moyenne du terme $\langle \tilde{u} \tilde{c} \rangle_1$ qui correspond au terme précédent sachant qu'une particule se trouve centrée en $x=0$, $\langle \tilde{u} \tilde{c} \rangle_0 = \int P(r_1) \langle \tilde{u} \tilde{c} \rangle_1 dr_1$. $P(r_1)$ désignant la probabilité qu'une autre particule se trouve en $x=r_1$ (en pratique $P(r_1)$ est uniforme à l'exception d'une zone exclue du fait de la présence de la particule en $x=0$).

Koch et Brady négligent les interactions entre la vitesse du fluide et la concentration en soluté pour écrire: $\langle \tilde{u} \tilde{c} \rangle_1 = \langle \tilde{u} \rangle_1 \langle \tilde{c} \rangle_1$ avec $\langle \tilde{u} \rangle_1 = \langle u \rangle_1 - \langle u \rangle_0$ et $\langle \tilde{c} \rangle_1 = \langle c \rangle_1 - \langle c \rangle_0$. Il reste à calculer $\langle \tilde{u} \rangle_1$ et $\langle \tilde{c} \rangle_1$ sachant qu'une

particule est placée en $x=0$.

Pour le problème hydrodynamique, ils utilisent la solution proposée par Saffman [99] (1973) calculant le champ de fluctuations de vitesse créé par des points sources de quantité de mouvement dans un lit fixe.

L'équation gouvernant les déviations $\langle \tilde{c} \rangle_1$ est obtenue en soustrayant l'équation moyenne en $\langle c \rangle_1$ de l'équation moyenne macroscopique en $\langle c \rangle_0$. Une approximation de sa solution est obtenue. Les particules sont en particulier considérées comme ponctuelles, ce qui est en accord avec l'hydrodynamique simplifiée retenue.

Les formes asymptotiques du tenseur D^* sont alors déterminées. Le premier cas envisagé est celui pour des petits valeurs de $\mathcal{P} = k^{1/2} \langle u \rangle / \mathcal{D} \ll 1$, où k est la perméabilité du milieu. Dans ce cas on peut négliger termes convectifs. On obtient alors $\frac{D_{\parallel}^*}{\mathcal{D}} = \frac{\sqrt{2}}{15} \frac{Pe^2}{(1-\varepsilon)^{1/2}}$ et

$\frac{D_{\perp}^*}{\mathcal{D}} = \frac{\sqrt{2}}{60} \frac{Pe^2}{(1-\varepsilon)^{1/2}}$, où $Pe = \langle u \rangle r / \mathcal{D}$ où r est le rayon des particules solides.

De même, le comportement asymptotique est obtenu pour des $\mathcal{P} \gg 1$. Dans ce cas ce sont les termes diffusifs qui sont négligés. Il vient alors:

$\frac{D_{\parallel}^*}{\mathcal{D}} = \frac{3}{4} |Pe|$ et $\frac{D_{\perp}^*}{\mathcal{D}} = 0$. Le développement utilisé montre, sans équivoque, que

la diffusion moléculaire ne joue aucun rôle dans le comportement asymptotique du coefficient longitudinal. Le résultat nul pour le coefficient transversal, est une conséquence de la symétrie transversale des lignes de courant et du fait que la diffusion moléculaire n'est pas prise en compte. Une contribution purement "mécanique" au coefficient transversal, serait trouvée dans le cas de l'écoulement autour d'une

particule ellipsoïdale, non orientée selon la direction de l'écoulement principal. Néanmoins, les auteurs ajoutent d'autres mécanismes qui introduisent une dispersion transversale. Le premier mécanisme est la diffusion moléculaire perpendiculairement aux lignes de courant. Il mène à un coefficient

$\frac{D_{\perp}^*}{\mathcal{D}} = \frac{3\sqrt{2}}{8} (1-\varepsilon)^{1/2}$ ($\mathcal{P} \gg 1$ et $Pe \ll 1$), indépendant du nombre de Péclet ce qui n'est pas surprenant vu la nature du transport. Le deuxième mécanisme est "mécanique" et est dû à l'interaction entre les

particules. Il introduit un coefficient $\frac{D_{\perp}^*}{\mathcal{D}} = \frac{63\sqrt{2}}{320} (1-\varepsilon)^{1/2} |Pe|$ si

$(1-\varepsilon)^{1/2} |Pe| \gg 1$. Contrairement au cas de l'écoulement autour d'une seule particule, la prise en compte d'une deuxième particule peut mener à des écoulements où les lignes de courant n'ont plus une symétrie transversale.

Une contribution "non-mécanique" vient encore s'ajouter au coefficient longitudinal, sa contribution étant nulle dans le cas du coefficient transversal. Il s'agit de la rétention du soluté (voir paragraphe 1.5.7) par les particules solides, le soluté étant postérieurement libéré dans le fluide par diffusion moléculaire. Bien entendu, cette contribution est nulle dans le cas des particules impérmeables au soluté. Elle vaut $\frac{D^*_{||,h}}{D} = \frac{1}{15} \frac{1}{m} \frac{D}{D_p} f (1+\gamma)^2 (1-\varepsilon) Pe^2$, où m est le rapport de solubilité. Même dans le cas où les particules sont imperméables, on doit s'attendre à avoir des contributions du même type $O(Pe^2)$ due soit à l'existence des zones stagnantes (paragraphe 1.5.6) soit aux régions où les lignes de courant sont très proches les unes des autres autorisant le soluté à "sauter" par diffusion moléculaire.

Cependant, le cas de l'écoulement autour d'une particule sphérique ne présente ni zones stagnantes ni régions où les lignes de courant sont proches. C'est alors la condition de non-glissement à la paroi solide (paragraphe 1.5.8) qui introduit, dans ce cas, un dernier mécanisme de dispersion. Il résulte de l'existence d'une couche limite à proximité de la paroi de la particule. À partir d'une solution approchée de l'équation différentielle de convection-diffusion en $\langle \tilde{c} \rangle_1$ dans la couche limite, la contribution peut être calculée et elle est donnée par $\frac{D^*_{||,cl}}{D} = \frac{1}{6} \pi^2 (1-\varepsilon) Pe \cdot \ln(Pe) + O[(1-\varepsilon)Pe]$ et $\frac{D^*_{\perp,cl}}{D} = 0$, pour des $Pe \gg 1$. Une contribution du type $Pe \cdot \ln(Pe)$ est aussi trouvée par Saffman [97], dans son expression du coefficient longitudinal.

On peut remarquer, encore une fois, que les contributions dues aux transferts réalisés par diffusion moléculaire uniquement, sont de l'ordre de Pe^2 , tandis que celles dues aux transports convectifs sont de l'ordre de Pe et que dans le cas de la couche limite diffusive, où la convection et la diffusion moléculaire influencent simultanément le transport du soluté, elle est de l'ordre de $Pe \cdot \ln(Pe)$.

Lorsque les échelles macroscopiques de longueur et de temps associées aux processus de transport, ne sont pas plus grandes que les échelles de variations du champ de vitesses locales que voit le soluté injecté dans le milieu, l'hypothèse qui consiste à considérer le processus macroscopique de dispersion comme fickien, n'est plus applicable. Une théorie non locale est développée par Koch et Brady [62] en 1987, afin d'arriver à l'expression

généralisée du flux moyen massique. Le flux moyen est alors donné par un double produit de convolution, dans le temps et l'espace, du gradient local de la concentration moyenne et de \mathbf{D} , généralisation non locale du tenseur effectif "fickien".

Koch et Brady [63], toujours en 1987, ont étudié l'influence de l'anisotropie de la structure des grains sur les propriétés moyennes de transport d'un soluté, résultant de l'écoulement d'un fluide à travers le milieu.

Les propriétés macroscopiques sont déterminées suivant deux approches différentes. La première est une approche eulérienne (celle qu'ils ont utilisée) et la deuxième lagrangienne ou des "moments" (celle employée par Brenner). Ils montrent que les définitions du tenseur effectif de dispersion \mathbf{D} , suivant les deux approches, ne sont pas équivalentes. En fait, le tenseur effectif lagrangien correspond à la partie symétrique du tenseur eulérien, $\mathbf{D}_L = \mathbf{D}_E^S$ qui, pour un milieu périodique, est celui déjà obtenu par Brenner [19]. Le tenseur eulérien possède en plus une partie antisymétrique, \mathbf{D}_E^A .

En outre, les milieux qui ne possèdent pas trois plans orthogonaux de symétrie par réflexion, mènent à l'existence d'une partie antisymétrique non nulle ($\mathbf{D}_E^A \neq 0$). L'antisymétrie donne lieu à un flux massique qui est perpendiculaire au vecteur gradient de concentration moyenne. L'approche lagrangienne ne peut pas détecter un tel effet.

Néanmoins, les milieux désordonnés peuvent avoir une symétrie par réflexion, même si leurs grains n'en ont pas. Il suffit que la distribution de l'orientation des grains soit symétrique ou aléatoire. Dans ce cas, la partie antisymétrique du tenseur effectif est nulle ($\mathbf{D}_E^A = 0$).

Koch et al [64] en 1989, ont étudié l'importance de "l'ordre" sur la dispersion en milieux poreux. Le travail avait pour but d'élucider l'influence du caractère périodique des milieux sur la dépendance du tenseur effectif de dispersion en fonction du nombre de Péclet.

En 1985, Koch et Brady [61] ont montré que pour les milieux désordonnés, il existe trois mécanismes qui causent la dispersion pour des Pe très élevés: 1) La dispersion mécanique due au champ de vitesses stochastique, provenant de la distribution aléatoire des frontières solides. Ce mécanisme ne dépend pas de la diffusion moléculaire et mène à une variation linéaire de \mathbf{D}^*/\mathbf{D} avec le nombre de Péclet; 2) La dispersion

due à la rétention du soluté, par des régions d'où le soluté ne peut se libérer que par la diffusion moléculaire (particules perméables au soluté, zones stagnantes et aussi régions où les lignes de courant sont très proches). Ces mécanismes mènent à des variations en Pe^2 ; 3) L'existence d'une couche limite dispersive, proche de la surface solide des particules. Le transport est influencé par la convection et la diffusion moléculaire et croît en $Pe \cdot \ln(Pe)$. Les deux derniers mécanismes, rétention et couche limite, présentent le même comportement qualitatif pour les milieux ordonnés et désordonnés.

Néanmoins, la dispersion due uniquement au mouvement du fluide, est qualitativement différente pour les milieux périodiques et non périodiques.

Seule la contribution due à la dispersion mécanique a été étudiée. Dans le cas général, Koch et al [64] montrent que contrairement au milieu non-périodique où la vitesse du soluté est stochastique et décorrélée après que le soluté a traversé une grande longueur de milieu, dans un milieu périodique la structure du milieu et par conséquent la vitesse du soluté restent corrélées dans tout l'espace. Deux possibilités sont alors envisagées pour la dispersion dans un milieu périodique: 1) Toutes les lignes de courant sont équivalentes. Deux particules injectées, à l'instant $t=0$, en deux points différents à l'intérieur de la cellule, vont initialement se disperser et la distance entre elles croît d'abord linéairement avec le temps. Comme toutes les lignes de courant sont identiques, chaque particule suit la même trajectoire et les écarts entre elles n'augmentent pas aux temps très longs. La dispersion ne peut se faire sans la diffusion moléculaire et $|D^S| \sim O(D)$; 2) Il existe au moins deux lignes de courant qui ne sont pas équivalentes. La vitesse du soluté reste corrélée pour tous les temps et la distance entre deux particules de soluté, libérées sur deux lignes de courant non équivalentes, croît linéairement avec le temps. Le processus de dispersion est alors obtenu seulement si l'on considère la diffusion moléculaire entre les lignes de courant. Il en résulte ainsi une dispersion non-mécanique et D/D croît en Pe^2 , comme la dispersion de Taylor dans un tube. Il existe donc deux mécanismes possibles de dispersion pour un milieu périodique, mais aucun des deux ne ressemblerait à la dispersion mécanique rencontrée dans les milieux non périodiques.

Deux arrangements périodiques ont été considérés: l'arrangement

cubique tridimensionnel de sphères et l'arrangement carré bidimensionnel de cylindres circulaires. Dans les deux cas, l'écoulement est gouverné par l'équation de Stokes, la fluctuation de vitesse \tilde{u} induite par les particules est approchée par celle due à des points sources quand les fractions de solide sont très petites.

Les coefficients de dispersion hydrodynamique D^S , calculés pour les deux géométries, montrent une dépendance en Pe^2 pour des faibles valeurs du nombre de Péclet. Ces résultats sont donc similaires à ceux trouvés, par Koch et Brady [61], pour des milieux désordonnés. Le soluté est dispersé essentiellement par la diffusion moléculaire.

Ensuite, les auteurs obtiennent des résultats pour des nombres de Pe très élevés. Dans le cas où la vitesse de Darcy est perpendiculaire à l'un des plans de symétrie par translation et réflexion, pour l'arrangement tridimensionnel et parallèle à l'un des axes de symétrie pour l'arrangement bidimensionnel, le tenseur effectif D^S est de l'ordre de Pe^2 . Si la direction du vecteur vitesse moyenne ne coïncide pas avec l'un des axes de symétrie, les résultats calculés pour D^S prévoient, pour des $Pe \rightarrow \infty$, une valeur constante du coefficient longitudinal et transversal, indépendante du nombre de Péclet. Ce comportement asymptotique peut n'être atteint que pour des valeurs très élevées du nombre de Péclet. En fait, si $\Delta\theta$ est une petite déviation de l'angle de l'écoulement moyen, par rapport à l'un des axes de symétrie, le coefficient longitudinal (plus exactement D_{\parallel}/D) croît en Pe^2 jusqu'à un nombre de Péclet de l'ordre de $1/\Delta\theta$ et atteint, pour des $Pe \gg 1/\Delta\theta$, la valeur asymptotique de l'ordre de $1/\Delta\theta^2$.

1.9.8-ARTICLES DE SYNTHÈSE

Dans ce paragraphe, on se propose de donner une liste des principales revues sur le sujet parues dans la littérature sans les développer particulièrement à l'exception de la contribution de Pfannkuch qui permet d'introduire une typologie des différents régimes de dispersion.

Pfannkuch [85], en 1963, s'est intéressé au déplacement de fluides miscibles de même viscosité et de même densité à travers de sables non consolidés. Son travail contient une revue bibliographique des travaux théoriques et expérimentaux, ainsi que ses propres travaux de laboratoire. Il a mis en évidence l'existence de 5 régimes de mélange.

Le premier ou régime de la diffusion moléculaire pure, est caractérisé par le fait que le coefficient effectif de dispersion D^* est plus petit que le coefficient de diffusion moléculaire \mathcal{D} en milieu continu, $D^*/\mathcal{D} < 1$. C'est-à-dire que le temps de passage dans un pore est suffisamment long pour que la diffusion moléculaire effectue le transport de masse. Les effets dus à la diffusion dynamique sont négligeables dans ce régime. Il n'y a pas de dépendance en Pe ($Pe = \langle u \rangle^B \phi / \mathcal{D}$, où ϕ est le diamètre moyen des particules) dans ce cas et le rapport $\frac{D^*}{\mathcal{D}} = \alpha Pe^m$, représente ce régime avec $m=0$. La valeur de α dans le cas des milieux poreux constitués de billes de verre ou des sables non consolidés vaut approximativement $2/3$.

Le deuxième régime ou régime de superposition est celui où le mélange dû à la diffusion moléculaire et à la diffusion dynamique sont du même ordre et leurs effets sont additifs. D'après Pfannkuch, il correspond à des nombres de Péclet compris entre 0,3 et 5.

Le troisième régime est celui où la diffusion dynamique est dominante et les effets des deux mécanismes ne sont plus additifs mais il y a une interférence entre eux. À ce régime correspond une valeur $\alpha \approx 0,5$ et en général $m \approx 1,2$. L'interférence traduit le fait que le rapport D^*/\mathcal{D} n'est pas une fonction du carré du nombre de Péclet, ce qui serait le cas pour un milieu représenté par un faisceau de capillaires rectilignes avec le même diamètre et sans interconnexions.

Dans le quatrième régime ou régime de diffusion dynamique pure, les effets dus à la diffusion moléculaire deviennent négligeables devant les effets dus à la diffusion dynamique. Sur un diagramme D^*/\mathcal{D} versus Pe , il est représenté par une valeur $\alpha = 1,8 \pm 0,4$ et $m=1$. Pfannkuch a considéré le cas où la loi de Darcy était encore valable, soit le régime d'écoulement de Stokes. En outre, il précise que le nombre de Péclet critique, pour lequel on a un changement brusque de pente des courbes expérimentales est environ égal à 200, pour les granulométries les plus fines et davantage lorsque le diamètre des particules augmente.

Le dernier régime est aussi celui de la diffusion dynamique pure, mais les effets d'inertie de l'écoulement ne peuvent plus être négligés. On peut expliquer ce régime en disant que les lignes de courant changent lorsque les effets d'inertie sont pris en compte. Dans ce cas, il y a donc un nouveau changement de régime. Le rôle des effets d'inertie est équivalent à celui de la diffusion transversale. La valeur de m , dans ce régime, doit

être inférieure à l'unité.

Un certain nombre d'articles et livres de la littérature proposent également une synthèse à un moment donné des différentes manières de traiter le sujet. On peut citer les articles: Fried et Combarous [40], Greenkorn et Kessler [44], Nitsche et Brenner [74] (1989) (revue des méthodes de prise de moyenne et de leur application à des phénomènes de transfert en milieux périodiques), Quintard et Whitaker [92] et Sposito et al [114] (sur les méthodes stochastiques). En ce qui concerne les livres on peut citer parmi d'autres: Adler [1], Bear [13], Dullien [33], Kaviany [57] et Scheidegger [105]. Le lecteur intéressé pourra s'y reporter.

1.9.9-RÉSULTATS NUMÉRIQUES

En 1983 Eidsath et al [35] ont poursuivi le travail de Carbonell et Whitaker [22]. Il s'agit de la détermination numérique du tenseur effectif de dispersion $\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}^S + \frac{\mathbf{D}^S}{\mathcal{D}}$, où $\boldsymbol{\tau}^S$ et \mathbf{D}^S sont respectivement les parties symétriques du tenseur de tortuosité et du tenseur de dispersion hydrodynamique.

Le travail utilise la méthode des éléments finis. Le champ de vitesses est d'abord obtenu afin de pouvoir déterminer le champ des fluctuations de vitesse $\tilde{\mathbf{v}}$. Le problème hydrodynamique est résolu en régime permanent pour un fluide incompressible et newtonien, à l'intérieur d'un milieu poreux périodique bidimensionnel.

Trois types d'arrangements des cylindres ont été considérés. Un arrangement de cylindres carrés disposés en ligne, un arrangement de cylindres circulaires en ligne et un arrangement de cylindres circulaires en quinconce (avec éventuellement des cylindres de diamètres différents). La porosité est comprise entre $\varepsilon=0,37$ et $0,418$.

Deux nombres de Reynolds ($Re_p = \frac{\langle u \rangle^B d_p \varepsilon_B}{\nu(1-\varepsilon_B)}$) ont été utilisés dans tous les calculs, $Re_p=0,006$ et 56 . L'écoulement principal est toujours parallèle à la direction de l'axe OX.

Dans une deuxième étape, une fois connu le champ de vitesses $\tilde{\mathbf{v}}$, le problème de fermeture en f peut être résolu et le tenseur effectif de dispersion calculé.

Les pertes de charge calculées numériquement pour tous les arrangements sont comparées à celles données par l'équation modifiée

d'Ergun $\frac{\Delta P'}{L'} = \frac{180}{Re_p} + 1,8$. Tous les résultats présentent des gradients de pression deux à trois fois plus élevés que ceux prévus pour un milieu non consolidé équivalent.

Ensuite les coefficients effectifs de dispersion (longitudinal et transversal) calculés pour des arrangements de cylindres circulaires en ligne et en quinconce, avec une porosité $\varepsilon=0,37$, sont comparés aux résultats expérimentaux trouvés par différents auteurs. Les coefficients ont été obtenus pour des nombres de Péclet particuliers ($Pe_p = \langle u \rangle^B d_p \varepsilon_B / \mathcal{D}(1-\varepsilon_B)$) variant entre 1 et 10000.

Les résultats numériques concernant le coefficient effectif longitudinal pouvaient être exprimés approximativement par la relation $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}} \cong 0,7Pe_p^{1,7}$ ($Pe_p \geq 10$), tandis que la théorie de Taylor-Aris (tube capillaire) prévoit un coefficient donné par $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}} \cong 1 + \frac{1}{432}Pe_p^2$ et les résultats expérimentaux (milieu désordonné) sont à peu près représentés par $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}} \cong 0,7Pe_p^{1,2}$ ($Pe_p \geq 1$).

Les coefficients effectifs transversaux présentent des valeurs qui sont de plusieurs ordres de grandeur inférieures aux valeurs expérimentales. De plus, ils ne présentent pas le même type d'évolution que les milieux réels au fur et à mesure que le nombre de Pe_p augmente.

Pour tenter de remédier à ce problème, une application numérique de la prise de moyenne à grande échelle au problème de la dispersion est faite par Plumb et Whitaker [88] en 1988. Il s'agit de la détermination des coefficients du tenseur effectif de dispersion qui apparaissent dans l'équation de transport issue de la double prise de moyenne.

Deux cas sont considérés: le problème unidirectionnel de la dispersion en milieu stratifié périodique et le problème bidimensionnel de la dispersion en milieu poreux périodique. Dans les deux cas les milieux sont constitués par deux régions ayant des porosités différentes.

Afin de pouvoir calculer les coefficients effectifs, il faut résoudre le problème hydrodynamique et les deux problèmes de fermeture associés à la prise de moyenne à grande échelle.

Le problème hydrodynamique est résolu en utilisant la loi de Darcy plus une correction non-linéaire du type de celle proposée par Forcheimer (quadratique en $\langle v_B \rangle^B$) et de l'équation moyennée de la continuité. Les perméabilités qui interviennent dans la loi de Darcy et la correction

non-linéaire, sont déterminées à l'aide de l'équation d'Ergun sous sa forme modifiée par MacDonald et al [69].

La méthode numérique utilisée est celle des volumes finis et les coefficients effectifs calculés par Eidsath et al [35], sont utilisés comme valeurs initiales lors de la résolution du problème de fermeture à grande échelle.

Les coefficients sont obtenus pour différents rapports des porosités des deux régions. En ce qui concerne le coefficient effectif longitudinal à grande échelle D_{xx}^{**} , les résultats montrent que la constante A ($(\varepsilon_B)D^{**}/D = A Pe_p^m$) peut être ajustée selon les rapports de porosité, mais que l'on retrouve toujours la même valeur de l'exposant $m=1,2$, laquelle représente bien les données expérimentales. Selon le rapport des porosités locales des deux régions et la valeur de la fraction volumique de l'une des régions, on peut avoir différentes valeurs de A et m pour le coefficient transversal. Pour l'un des jeux de paramètres essayés, les valeurs de D_{yy}^{**} vérifient bien les résultats expérimentaux.

Edwards et al [37] font en 1991, une étude numérique de la dispersion de Taylor dans un milieu poreux périodique bidimensionnel. Il s'agit du calcul des coefficients effectifs de dispersion $\frac{D^*}{D}^{\parallel}$ et $\frac{D^*}{D}^{\perp}$, lors de l'écoulement d'un fluide incompressible à travers des arrangements de cylindres circulaires de rayon a. Le tenseur effectif caractérise le processus de transport à l'échelle de Darcy. Trois arrangements géométriques sont utilisés: 1) l'arrangement en ligne; 2) l'arrangement en quinconce; 3) l'arrangement hexagonal.

Les composantes longitudinal et transversal sont déterminées à partir du tenseur effectif de dispersion $\frac{D^*}{D} = \frac{1}{V} \int_{V_B} (\nabla f + I)^T (\nabla f + I) dV$, introduit par Brenner [19] en 1980. La méthode des éléments finis est utilisée dans la résolution du problème hydrodynamique et de fermeture en f à l'intérieur de la cellule unité.

L'influence de l'arrangement géométrique, de la porosité, du nombre de Reynolds ($Re = 2a \langle u \rangle^B / \nu$) et du nombre de Péclet ($Pe = 2a \langle u \rangle^B / D$), sont traitées.

Dans tous les cas (vecteur vitesse moyenne résultant parallèle à l'axe OX), le coefficient longitudinal est supérieur au coefficient transversal, principalement pour des nombres de Péclet Pe très élevés. Cette constatation est une conséquence du fait que les composantes du

vecteur vitesse, parallèles à la direction de l'écoulement principal, ont les plus forts gradients. Cet effet est moins accentué dans le cas des arrangements en quinconce et hexagonaux, où la direction des plus forts gradients dévie de celle de l'écoulement principal. Les lignes de courant sont plus sinueuses dans ces deux types d'arrangement. Dans les mêmes conditions, les coefficients longitudinaux des arrangements hexagonaux et surtout en quinconce, sont plus petits que ceux de l'arrangement en ligne.

La tendance opposée est vérifiée pour le coefficient transversal. La principale contribution à la dispersion, pour des nombres de Péclet $Pe \gg 1$, paraît être le mouvement latéral du fluide. Par conséquent, comme ce mouvement est plus important pour l'arrangement en quinconce, le coefficient transversal atteint ses plus grandes valeurs pour cette géométrie. Par contre, dans le cas de l'arrangement en ligne, l'écoulement latéral est confiné dans les régions isolées entre les cylindres, qui sont des zones de recirculation. La recirculation étant relativement faible, dans ce cas, la dispersion transversale est inférieure à celle de l'arrangement hexagonal.

À une diminution de fraction de solide, correspond une augmentation du coefficient longitudinal, ceci pour l'arrangement en ligne. L'explication est due à l'existence des très forts gradients de vitesse dans la région centrale de la cellule, où les vecteurs vitesses sont essentiellement dans la direction de l'écoulement principal. Au contraire pour les arrangements en quinconce et hexagonal, une diminution de la porosité mène à une diminution du coefficient longitudinal. La cause en est la réorientation du champ de vitesse locale, suivant une direction perpendiculaire à l'écoulement principal. Les coefficients transversaux présentent des divergences de comportement pour les arrangements en ligne et hexagonal. Le coefficient diminue pour l'arrangement en ligne, au fur et à mesure que la porosité diminue. Dans le cas de l'arrangement hexagonal, le coefficient augmente, d'abord, jusqu'à atteindre un maximum pour décroître ensuite. La différence de comportement peut être due à une diminution de la recirculation de l'arrangement en ligne, qui est responsable du transport transversal.

Une augmentation considérable du coefficient longitudinal avec le nombre de Reynolds, est observée pour l'arrangement en ligne. Elle peut être attribuée à la redistribution de l'écoulement à l'intérieur de la

cellule unité. On voit apparaître dans la région centrale, à mesure que le nombre de Reynolds augmente, un écoulement du type de celui entre deux plans parallèles. Ce phénomène mène à une dépendance du type Pe^2 pour le coefficient $\frac{D_{||}^*}{D}$.

L'ensemble de résultats obtenus pour le coefficient longitudinal, pour tous les arrangements, peut être représenté sous la forme $\frac{D_{||}^*}{D} = \alpha Pe^m$ ($Pe > 10$). L'arrangement en ligne fournit les valeurs moyennes $\alpha = 0,13$ et $m = 1,761$, tandis que pour l'arrangement hexagonal, $\alpha = 0,052$ et $m = 1,748$. On note, ici, que cette valeur de m correspond à peu près à celle trouvée par Eidsath et al [35] en 1983.

En ce qui concerne le coefficient transversal, l'ensemble des valeurs ne correspond ni qualitativement et ni quantitativement, à celui donné par les résultats expérimentaux. Cette divergence est sûrement liée aux faibles écoulements latéraux observés dans les trois arrangements. Donc, en réalité, le coefficient transversal est essentiellement gouverné par la diffusion moléculaire. Des travaux postérieurs, avec des arrangements géométriques plus complexes et en faisant varier la direction de l'écoulement principal, sont nécessaires d'après les auteurs, pour élucider le comportement du coefficient transversal.

Le problème de la dispersion, des particules d'un soluté lors de l'écoulement d'une seule phase fluide, est traité numériquement par Sahimi et al [102] en 1986 par une méthode de Monte Carlo pour un réseau orthogonal de pores bi et tridimensionnel.

Les diamètres des pores circulaires de même longueur sont distribués aléatoirement (distribution de Rayleigh). La distribution de pression sur les nœuds est calculée par la loi de Kirchhoff. À partir de la distribution de pression et des diamètres des pores, la vitesse moyenne sur chaque pore et la perméabilité du réseau sont calculées. Les particules sont injectées sur le réseau dans le plan $x=0$ de façon aléatoire et le chemin suivi par chaque particule obéit à une loi de probabilité. Après avoir injecté un nombre suffisamment grand de particules, la vitesse moyenne de déplacement est calculée à partir du temps de passage de chaque particule dans le plan $x=L$. Finalement, les coefficients effectifs de dispersion sont calculés à partir du carré des déplacements par une moyenne temporelle. Les mêmes coefficients sont aussi calculés à l'aide de la densité de probabilités

donnant la distribution spatiale des particules à l'intérieur du réseau: il s'agit alors d'une moyenne spatiale.

Dans une première simulation, l'écoulement principal est parallèle à l'un des axes du réseau, le mélange est parfait à chaque nœud, la vitesse est uniforme à l'intérieur de chaque pore et la probabilité pour qu'une particule emprunte un chemin donné est proportionnelle au débit des pores partant du nœud en question (mêmes hypothèses que celles utilisées par de Josselin de Jong [30]). Les résultats montrent que pour ce cas, les deux coefficients effectifs (les auteurs montrent d'après les calculs que le processus est fickien) de dispersion sont proportionnels à la vitesse moyenne de l'écoulement. Le rapport calculé entre les deux coefficients est de $6,88 \pm 0,33$. Les simulations réalisées avec un réseau bi et tridimensionnel, donnent les mêmes résultats.

Dans un autre cas, le profil de vitesses est laminaire à l'intérieur des pores (écoulement de Poiseuille) et les particules peuvent sauter d'une ligne de courant à l'autre (hypothèses du type de celles utilisées par Saffman [98]). Les particules sont toujours injectées aléatoirement dans le plan $x=0$, mais une fois le pore choisi un autre nombre aléatoire détermine la ligne de courant (par conséquent la vitesse) où va se trouver la particule. À chaque nœud, les particules qui se trouvent dans la partie inférieure du pore poursuivent leur trajectoire vers le pore vertical d'en bas, tandis que celles se trouvant dans la partie supérieure empruntent celui d'en haut. Les particules qui se déplacent dans la région centrale des pores, suivent leurs chemins vers le pore horizontal qui se trouve en face. Une fois que les particules se trouvent dans les nouveaux pores, les positions des particules sont déterminées de façon aléatoire. Pour ce dernier cas, avec les hypothèses décrites ci-dessus, on trouve que le coefficient longitudinal varie avec la vitesse moyenne de l'écoulement avec un exposant égal à $1,27 \pm 0,08$. Pour le coefficient transversal, on trouve une variation quasi-linéaire avec un exposant égal à $0,95 \pm 0,07$. Les calculs sont refaits pour une fraction de pores proche du seuil de percolation et pour un réseau tridimensionnel avec pratiquement les mêmes résultats.

Les derniers résultats numériques commentés ici, sont ceux obtenus par Salles et al [101] (1993). Il s'agit de l'étude de la dispersion de Taylor (convection + diffusion) en milieu poreux. Le tenseur effectif de dispersion est déterminé pour des géométries bi et tridimensionnelles, lors

de la dispersion d'un soluté injecté dans un fluide qui traverse le milieu en régime de Stokes.

L'expression analytique du tenseur effectif est obtenue pour un milieu homogène, par la méthode des moments et par homogénéisation. On montre que la partie symétrique du tenseur obtenu par homogénéisation est égale au tenseur obtenu par la méthode des moments.

Les calculs sont réalisés pour des structures déterministes, fractales, aléatoires et reconstituées à partir des milieux réels.

La détermination numérique du tenseur effectif de dispersion est obtenu soit par la méthode des moments ($\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \frac{1}{V} \int_{V_B} (\nabla \mathbf{f} + \mathbf{I})^T (\nabla \mathbf{f} + \mathbf{I}) dV$) via résolution de l'équation de fermeture en \mathbf{f} , soit par la méthode de marche aléatoire via une simulation de type Monte Carlo où le tenseur de dispersion est calculé à partir de l'évolution des moments de la concentration du soluté $\left[\mathbf{D}^* = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(M_2 - M_1^2 \right) \right]$.

Les premiers résultats sont obtenus pour l'arrangement en ligne des cylindres circulaires avec une porosité $\varepsilon=0,599$ et $\varepsilon=0,797$. Le tenseur est déterminé à partir de la résolution de l'équation de fermeture. Si l'on représente les résultats sous la forme $\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = A Pe^m$ ($Pe = \langle v_B \rangle^B \phi / \mathcal{D}$, où ϕ est le diamètre), on trouve pour une porosité $\varepsilon=0,599$ un exposant $m=1,87$ et pour $\varepsilon=0,797$ un m qui vaut 1,97. Le tenseur est aussi déterminé pour un arrangement cubique de sphères avec $\varepsilon=0,48$, 0,62, 0,74 et 0,82. Dans ce cas les valeurs de l'exposant sont les suivantes: 1,95, 1,96, 1,96 et 1,98 respectivement. La méthode de marche aléatoire est aussi utilisée pour $\varepsilon=0,82$. L'ensemble des résultats sont comparés aux résultats expérimentaux de Gunn et Price [45]. La comparaison montre une concordance satisfaisante entre les résultats numériques et expérimentaux.

Une dernière comparaison est faite entre les résultats numériques du coefficient longitudinal et son équivalent théorique, issu de la solution approché du problème de la dispersion pour un canal + cavité obtenue par Coats et Smith [26]. La solution numérique est obtenue dans un premier temps pour le régime permanent. Une bonne concordance est trouvée avec la théorie de Coats et Smith pour le cas traité.

Ensuite le tenseur de dispersion est calculé lorsque l'écoulement principal est parallèle à l'axe z de la cellule unité. Deux configurations

géométriques sont employées: une configuration déterministe fractale (tapis de Sierpinski) et une configuration aléatoire dérivée de la théorie de la percolation.

L'influence de la direction de l'écoulement principal sur la dispersion est étudiée pour l'arrangement bidimensionnel de cylindres en ligne avec $\varepsilon=0,59$. La méthode utilisée est la marche aléatoire. Le tenseur effectif de dispersion est calculé pour des angles entre le vecteur vitesse moyenne et l'axe x de la cellule compris entre 0° et 45° . Les résultats pour $Pe=100$ montrent que le coefficient longitudinal décroît et le coefficient transversal augmente au fur et à mesure que l'angle varie entre 0° et 45° . Un palier entre 15° et 45° est observé pour lequel les valeurs des deux coefficients ne sont pas très sensibles à la direction de l'écoulement principal.

La sensibilité de la dispersion par rapport à des irrégularités du réseau géométrique, sont étudiées dans le cas de l'arrangement de cylindres en ligne et pour $Pe=100$. L'un des 4 cylindres de la cellule unité est alors déplacé légèrement dans la direction de l'écoulement et dans la direction transversale. Dans le premier cas l'on retrouve pratiquement les mêmes résultats que le réseau régulier, tandis qu'une différence de 18% pour le coefficient longitudinal et de 170% pour le coefficient transversal sont constatées dans le deuxième cas.

Trois types de géométries fractales (bi et tridimensionnelles) déterministes sont utilisées pour la détermination du tenseur effectif de dispersion lorsque l'écoulement principal est parallèle à l'une des faces de la cellule unité. Les structures sont les suivantes: tapis de Sierpinski, fractal "foam" et éponge de Menger. Les valeurs de l'exposant m obtenu pour les trois géométries et pour trois générations sont comprises entre 1,84 et 2,00.

Le tenseur effectif de dispersion est calculé ensuite pour des milieux tridimensionnels aléatoires pour des porosités variant entre $\sim 0,3$ et $0,98$.

Pour des valeurs intermédiaires de la porosité ($0,4 \leq \varepsilon \leq 0,9$), les résultats sont obtenus à partir de la moyenne de 16 milieux ayant $10 \times 10 \times 10$ cases occupées par le solide ou le fluide selon la porosité désirée. Du fait d'un temps prohibitif de calcul, seul un cas $20 \times 20 \times 20$ est utilisé pour chaque porosité. Pour une plage de la porosité comprise entre 0,5 et 0,8, les résultats ne montrent pas une influence de la taille

de la cellule unité sur la dispersion.

Si l'on essaie de caractériser les résultats par l'exposant m dans une représentation log-log du coefficient effectif versus le nombre de Péclet ($Pe = \xi \langle v_B \rangle^B / D$, où ξ est la longueur de corrélation), on distingue trois cas. Le premier pour $\varepsilon < 0,6$, où les courbes ne sont pas linéaires et la dérivée seconde est positive. L'exposant m croît avec le nombre de Péclet et le comportement asymptotique n'est pas atteint. Dans le deuxième cas ($\varepsilon = 0,7$) la courbe est sensiblement linéaire avec $m \approx 1,21$, mais pour la plage $1 < Pe < 10^4$ elle est indiscernable d'une loi du type $Pe \cdot \ln Pe$. Enfin, pour $\varepsilon > 0,8$ les courbes possèdent une dérivée seconde négative pour des valeurs élevées du nombre de Péclet.

Proches du seuil de percolation ($\varepsilon \approx 0,3$), les valeurs du coefficient longitudinal ont été obtenues pour trois porosités différentes et moyennées sur 100 simulations. Les géométries aléatoires tridimensionnelles employées sont les suivantes: 1) 4 X 4 X 4 cases; 2) 6 X 6 X 6 cases et 3) 8 X 8 X 8 cases. Les résultats moyens donnent pour la première porosité ($\varepsilon = 0,327$) un exposant $m = 1,65$ ($10^2 \leq Pe \leq 10^3$), pour la deuxième ($\varepsilon = 0,332$) $m = 1,80$ et pour la dernière ($\varepsilon = 0,322$) $m = 1,83$ ($10 \leq Pe \leq 10^2$). Pour l'ensemble des cas, on trouve des courbes qui sont toujours linéaires dans une représentation log-log. Pour la première géométrie les exposants se trouvent compris entre 1,48 et 1,85 et pour les deux autres géométries entre 1,72 et 1,95 environ.

Finalement, pour des grandes valeurs de la porosité ($\varepsilon > 0,8$), les coefficients sont calculés pour quatre porosités ($\varepsilon = 0,805, 0,903, 0,951$ et $0,98$) et les calculs sont faits avec un milieu aléatoire constitué par 20 X 20 X 20 cases. Dans ce cas deux types de comportement asymptotiques sont espérés d'après Koch et al [64]. Pour des milieux périodiques un exposant $m = 2$ est prévu et pour les milieux non périodiques, du fait du caractère aléatoire du champ de vitesses, on devrait avoir $m = 1$. Vu que les milieux sont construits de façon aléatoire à l'intérieur de la cellule unité, mais qu'ils sont périodiques, des effets de taille finie sont attendus. Néanmoins, les résultats présentent un exposant moyen m qui s'approche de la valeur 2 au fur et à mesure que la porosité tend vers 1. Ce résultat confirme l'existence des effets de taille finie puisque pour de très fortes porosités, les cellules contenant très peu de solide, le caractère périodique l'emporte.

Les mêmes calculs sont réalisés pour 3 milieux reconstitués à partir

du sable de Fontainebleau. Les résultats pour le coefficient longitudinal sont alors obtenus pour trois porosités ($\varepsilon=0,09$, $0,21$ et $0,30$) et avec une cellule formée par $20 \times 20 \times 20$ cases. Les exposants m sont calculés par interpolation et on remarque que la porosité a une faible influence sur ces valeurs: $m=1,56$ ($\varepsilon=0,09$), $m=1,47$ ($\varepsilon=0,21$) et $m=1,34$ ($\varepsilon=0,30$).

1.10-CONCLUSION

La revue de la littérature fait apparaître un très grand nombre de contributions utilisant des méthodes d'esprit très différent et s'appliquant dans des domaines très éloignés les uns des autres, ce qui rend très difficile une synthèse du sujet.

Si l'objectif est de calculer le tenseur de dispersion, un premier travail est de résoudre effectivement ou d'approcher par des simplifications raisonnables l'hydrodynamique du milieu poreux. Ensuite, il faut recourir soit à une approche stochastique dont le principe remonte à Einstein soit à une approche déterministe utilisant les équations de la mécanique des milieux continus.

Une approche déterministe exigeant la connaissance complète de la géométrie du milieu poreux conduit naturellement à s'intéresser à des milieux poreux spatialement périodiques. Dans ce cas, la partie symétrique du tenseur calculée avec l'une ou l'autre approche coïncide.

L'effort numérique pour calculer le tenseur de dispersion étant exactement de même nature que l'effort nécessaire pour calculer l'hydrodynamique du milieu poreux, c'est l'approche déterministe que nous avons privilégiée dans cette étude. Nous allons en donner les bases, vu sous l'angle de la méthode de prise de moyenne, au deuxième chapitre.

CHAPITRE 2

MÉTHODE DE PRISE DE MOYENNE

CHAPITRE 2

MÉTHODE DE PRISE DE MOYENNE

2.1-INTRODUCTION

Ce chapitre est consacré au développement de l'équation locale macroscopique de transport obtenue à partir de l'équation locale microscopique de transport. Comme mentionné au premier chapitre, différentes possibilités existent pour effectuer ce passage. On peut citer entre autres les méthodes statistiques et stochastiques [Scheidegger, 1954; De Josselin de Jong, 1958; Saffman, 1960; Haring et Greenkorn, 1970; Todorovic, 1970; Sahimi et al, 1986], la théorie de l'homogénéisation [Bensoussan et al, 1978; Sanchez-Palencia, 1980], la méthode des moments [Horn, 1971; Brenner, 1980], la prise de moyenne volumique [Slattery, 1967; Whitaker, 1967; Whitaker, 1973; Gray, 1975] et la prise de moyenne d'ensemble [Koch et Brady, 1985]. La prise de moyenne volumique a été retenue dans ce travail.

Il s'agit, ici, de l'étude de la diffusion-dispersion massique dans un milieu poreux. On introduit d'abord le théorème de prise de moyenne et l'équation de diffusion-dispersion macroscopique, obtenue par prise de moyenne à partir de l'équation microscopique. Ensuite, on présente l'équation de fermeture associée à l'équation macroscopique et finalement les équations décrivant l'écoulement de la phase fluide saturant le milieu.

2.2-NOTION DE MOYENNE

Le but est de pouvoir définir en chaque point du milieu poreux, solide ou fluide, une moyenne volumique locale. Le volume, pour lequel cette

moyenne est définie, s'appelle **volume élémentaire représentatif** (figure 2.1). Il est choisi de façon à être un volume différentiable, auquel on peut associer une moyenne locale au sens statistique [Howes et Whitaker 1985; Kaviany 1992]. Bear [14] propose, par exemple, un critère universel afin d'estimer ce volume élémentaire représentatif.

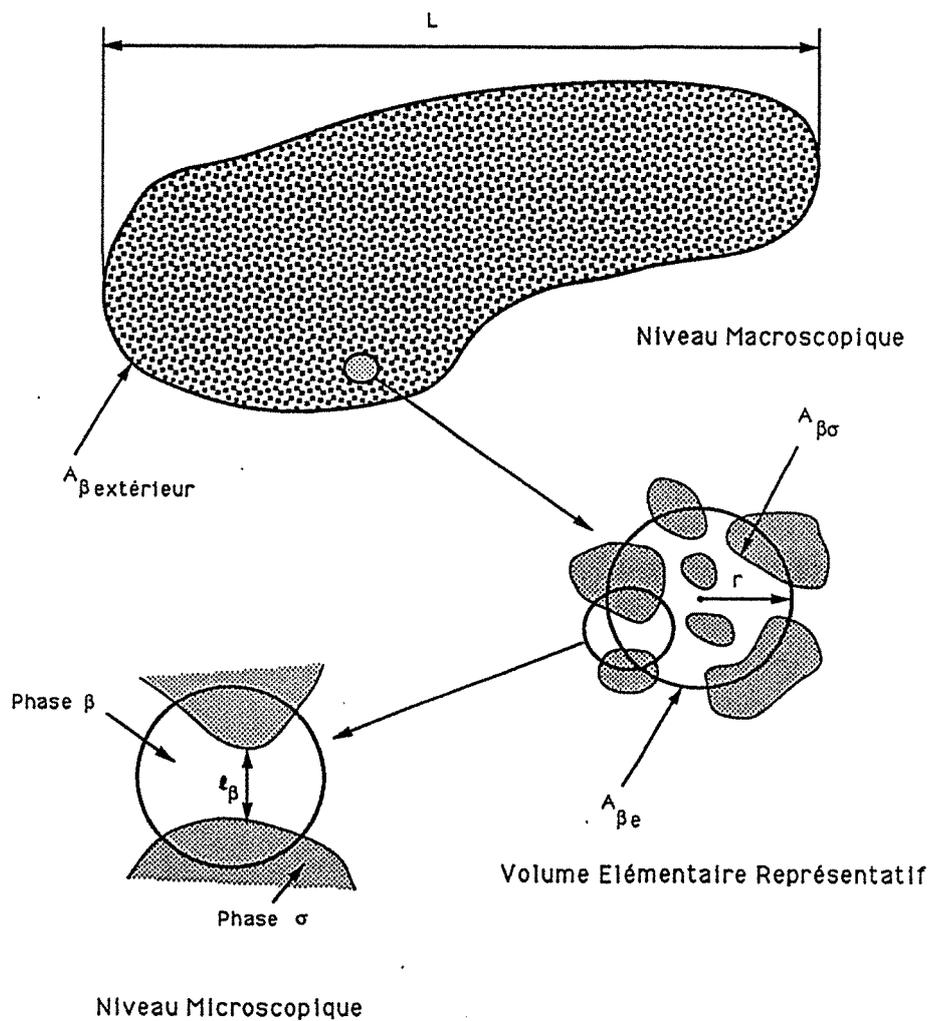


Figure 2.1 - Les trois échelles associées au milieu poreux

2.2.1-DÉFINITION D'UN VOLUME ÉLÉMENTAIRE REPRÉSENTATIF

Le volume élémentaire représentatif (VER) est représenté d'une façon schématique sur la figure 2.2. On désigne par V_β le volume correspondant à l'espace des pores supposé ici occupé par la phase β . A chaque point $P(x_1)$ du milieu, on associe par exemple une sphère de rayon r et de surface A , centrée en P . Le VER est déplacé d'un point à un autre par translation. Le vecteur r_0 localise le centre de la sphère par rapport à l'origine du repère. Le vecteur position p indique les points qui se trouvent sur les surfaces d'entrée et de sortie $A_{\beta e}$ et sur l'interface solide-fluide $A_{\beta\sigma}$. La normale extérieure pour la phase β à la surface $A_{\beta e}$ est $n_{\beta e}$ et la normale extérieure à l'interface solide-fluide $A_{\beta\sigma}$ est $n_{\beta\sigma}$. Finalement ℓ_β est une longueur caractéristique associée aux pores.

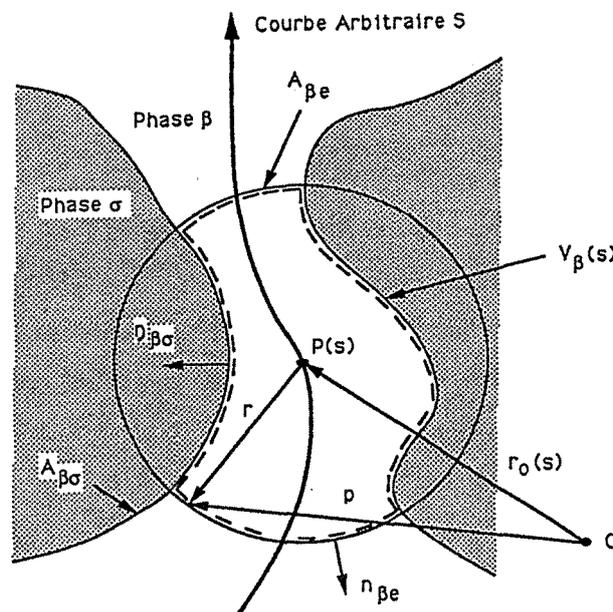


Figure 2.2 - Volume élémentaire représentatif

D'après Carbonell et Whitaker [23] le rayon r du volume représentatif doit être grand par rapport à la longueur caractéristique ℓ_β , associée aux pores, mais bien inférieur à la longueur caractéristique L associée au milieu macroscopique (figure 2.1),

$$\ell_B \ll r \ll L \quad (1)$$

de façon à pouvoir définir une moyenne volumique locale qui ait un sens statistique. Pour une grandeur ϕ_B associée à la phase β , on introduit maintenant, les deux types de moyenne qui seront utilisées: la moyenne volumique,

$$\langle \phi_B \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_B} \phi_B \, dV \quad (2)$$

et la moyenne volumique intrinsèque à la phase β ,

$$\langle \phi_B \rangle^B = \frac{1}{V_B} \int_{V_B} \phi_B \, dV = \frac{1}{\varepsilon_B} \langle \phi_B \rangle \quad (3)$$

où ε_B est la fraction volumique de la phase β définie par

$$\varepsilon_B = \frac{V_B}{V} \quad (4)$$

La condition de différentiabilité sur le volume élémentaire représentatif et la contrainte (1) étant vérifiée, on peut espérer que la moyenne volumique soit approximativement indépendante de la position, ceci pour des longueurs du même ordre que r [Slattery, 1972; Gray, 1975; Carbonell et Whitaker, 1984],

$$\langle \langle \phi_B \rangle^B \rangle^B \cong \langle \phi_B \rangle^B \quad (5)$$

Pour prouver le résultat énoncé ci-dessus, il suffit de montrer qu'on peut considérer la moyenne et la moyenne intrinsèque comme une constante sur le volume élémentaire représentatif.

Soit $\langle \phi_B \rangle_C^B$ la moyenne intrinsèque associée au centre du VER et $\langle \phi_B \rangle_\mathcal{r}^B$ la moyenne évaluée au point \mathcal{r} où le vecteur $\vec{\mathcal{r}}$ représente la distance entre le point en question et le centre. On développe ensuite $\langle \phi_B \rangle_\mathcal{r}^B$ en une série de Taylor,

$$\langle \phi_B \rangle_{\mathcal{V}}^B = \langle \phi_B \rangle_C^B + r \cdot \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B + \frac{1}{2} r r : \nabla \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B + \dots \quad (6)$$

et on prend la moyenne intrinsèque de $\langle \phi_B \rangle_{\mathcal{V}}^B$ en utilisant (6),

$$\langle \langle \phi_B \rangle_{\mathcal{V}}^B \rangle^B = \langle \langle \phi_B \rangle_C^B \rangle^B + \langle r \cdot \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B \rangle^B + \frac{1}{2} \langle r r : \nabla \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B \rangle^B + \dots \quad (7)$$

où $\langle \phi_B \rangle_C^B$ et ses gradients sont évalués au centre c du VER. Ils sont donc constants par rapport à l'intégration en (7). Il en résulte alors:

$$\langle \langle \phi_B \rangle_{\mathcal{V}}^B \rangle^B = \langle \phi_B \rangle_C^B + \langle r \rangle^B \cdot \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B + \frac{1}{2} \langle r r \rangle^B : \nabla \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B + \dots \quad (8)$$

Les ordres de grandeur des différents termes peuvent être évalués, Carbonell et Whitaker [23]:

$$\langle r \rangle^B = \mathcal{O}(r) \quad (9)$$

$$\langle r r \rangle^B = \mathcal{O}(r^2) \quad (10)$$

$$\nabla \langle \phi_B \rangle_C^B = \mathcal{O} \left[\frac{\langle \phi_B \rangle_C^B}{L_{\emptyset}} \right] \quad (11)$$

$$\nabla \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B = \mathcal{O} \left[\frac{\langle \phi_B \rangle_C^B}{L_{\emptyset}^2} \right] \quad (12)$$

où L_{ε} et L_{\emptyset} représentent les distances macroscopiques sur lesquelles existent des variations de la fraction volumique ε_B et de la moyenne intrinsèque $\langle \phi_B \rangle_C^B$. En ce qui concerne l'estimation de l'ordre de grandeur (9), Carbonell et Whitaker considèrent $\langle r \rangle^B$ comme étant de l'ordre de $\left[r \left(\frac{r}{L_{\varepsilon}} \right) \right]$. Vu que ce résultat n'est pas obtenu d'une façon mathématique rigoureuse, on a opté pour le prendre de l'ordre de r . Ce choix ne remet pas en cause les résultats trouvés par Carbonell et Whitaker [23].

Compte tenu des ordres de grandeur ci-dessus, on peut écrire:

$$\langle \langle \phi_B \rangle_{\mathcal{V}}^B \rangle^B = \langle \phi_B \rangle_C^B + \mathcal{O} \left[\frac{r \langle \phi_B \rangle_C^B}{L_{\emptyset}} \right] \quad (13)$$

Si on admet que la contrainte (1) est vérifiée, on peut finalement écrire:

$$\boxed{\langle\langle\phi_{\beta}\rangle^{\beta}\rangle^{\beta} \cong \langle\phi_{\beta}\rangle^{\beta}} \quad (14)$$

2.2.2-THÉORÈME DE PRISE DE MOYENNE

L'objectif du théorème de prise de moyenne est d'examiner comment l'opérateur prise de moyenne se comporte vis-à-vis de l'opérateur dérivée spatiale.

On considère une courbe arbitraire S , sur laquelle l'on repère par son abscisse curviligne s , le centre d'un VER que l'on déplace par translation (figure 2.3).

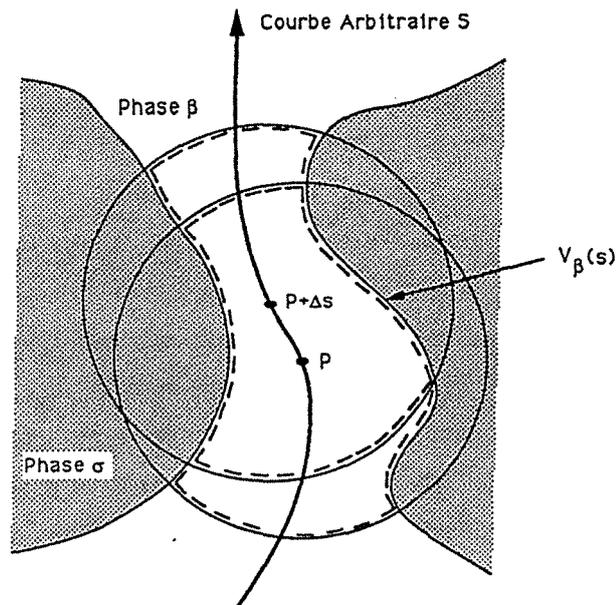


Figure 2.3 - Déplacement de la sphère sur la courbe S

La démonstration commence à partir du résultat suivant [Aris, 1962]:

$$\frac{d}{ds} \int_{V_B(s)} \phi_B dV = \int_{V_B(o)} \left[J \frac{d(\phi_B)}{ds} + \phi_B \frac{dJ}{ds} \right] dV_o \quad (15)$$

où l'indice o indique une configuration choisie comme référence et J est le Jacobien qui décrit la transformation volumique, faisant correspondre le volume de la phase β dans la configuration de référence $V_B(o)$ et dans la configuration considérée $V_B(s)$. On peut montrer que [Aris, 1962]:

$$\frac{dJ}{ds} = J \nabla \cdot \left(\frac{d\mathbf{p}}{ds} \right) \quad (16)$$

En remplaçant l'équation (16) dans l'équation (15) et en utilisant le second théorème de Green,

$$\int_V \nabla \cdot (\phi) dV = \int_A \phi \mathbf{n} dA \quad (17)$$

il résulte des équations (15)-(17), le théorème du transport:

$$\frac{d}{ds} \int_{V_B(s)} \phi_B dV = \int_{V_B(s)} \left. \frac{\partial \phi_B}{\partial s} \right|_{\mathbf{x}, \mathbf{t}} dV + \int_{A_B(s)} \phi_B \frac{d\mathbf{p}}{ds} \cdot \mathbf{n} dA \quad (18)$$

où $\left. \frac{\partial \phi_B}{\partial s} \right|_{\mathbf{x}, \mathbf{t}}$ est la dérivée par rapport à s à position et temps fixés. Comme $\phi_B = \phi_B(\mathbf{x}_1, t)$, $\left. \frac{\partial \phi_B}{\partial s} \right|_{\mathbf{x}, \mathbf{t}}$ est nul. D'autre part, la surface A_B est composée des surfaces d'entrée et de sortie A_{Be} et de l'interface solide-fluide $A_{B\sigma}$. Sur A_{Be} le vecteur \mathbf{p} est la somme vectorielle des vecteurs \mathbf{r}_o et \mathbf{r} (figure 2.2). On peut alors réécrire l'équation (18) sous la forme:

$$\frac{d}{ds} \int_{V_B(s)} \phi_B dV = \int_{A_{Be}(s)} \phi_B \left(\frac{d\mathbf{r}_o}{ds} + \frac{d\mathbf{r}}{ds} \right) \cdot \mathbf{n} dA + \int_{A_{B\sigma}(s)} \phi_B \frac{d\mathbf{p}}{ds} \cdot \mathbf{n} dA \quad (19)$$

D'autre part, le vecteur $\frac{d\mathbf{p}}{ds}$ est tangent à l'interface solide-fluide

$A_{B\sigma}$. Enfin sur la surface A_{Be} , le VER étant déplacé par translation uniquement, le vecteur $\frac{dr}{ds}$ est perpendiculaire à la normale n_{Be} . On déduit de l'équation (19) que,

$$\frac{d}{ds} \int_{V_B(s)} \phi_B dV = \frac{dr}{ds} \cdot \nabla \left(\int_{V_B(s)} \phi_B dV \right) = \frac{dr}{ds} \cdot \int_{A_{Be}(s)} \phi_B ndA \quad (20)$$

où l'on a utilisé la notion de dérivée directionnelle $\frac{d}{ds} = \frac{dr}{ds} \cdot \nabla$ et le fait que $\frac{dr}{ds}$ est indépendant de s sur l'interface A_{Be} .

Il résulte de l'équation (20), la courbe $r(s)$ étant arbitraire, que:

$$\nabla \left(\int_{V_B(s)} \phi_B dV \right) = \int_{A_{Be}(s)} \phi_B ndA \quad (21)$$

Du théorème de Green (17) et de l'équation (21), il vient:

$$\nabla \left(\int_{V_B(s)} \phi_B dV \right) = \int_{V_B(s)} \nabla \phi_B dV - \int_{A_{B\sigma}(s)} \phi_B ndA \quad (22)$$

En utilisant l'équation (22), le théorème de prise de moyenne s'écrit alors:

$$\boxed{\langle \nabla \phi_B \rangle = \nabla \langle \phi_B \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B ndA} \quad (23)$$

où ϕ_B peut être un scalaire, un vecteur ou un tenseur.

On peut obtenir, de façon analogue, pour l'opérateur divergence,

$$\boxed{\langle \nabla \cdot \phi_B \rangle = \nabla \cdot \langle \phi_B \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B \cdot ndA} \quad (24)$$

où ϕ_B peut être un vecteur ou un tenseur.

2.3-ÉQUATION DE TRANSPORT MOYENNÉE

On s'intéresse, maintenant, à un processus de transport pour la variable ϕ_β , associée à la phase β , dans un milieu poreux constitué d'une phase solide σ et d'une phase fluide β . Le processus de transport à l'échelle microscopique est décrit par l'équation:

$$\frac{\partial \phi_\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\beta \mathbf{v}_\beta) = \nabla \cdot (\Gamma_\beta \nabla \phi_\beta) + S_\beta \quad (25)$$

avec les conditions aux limites appropriées. Dans le cas du transport de quantité de mouvement $\phi_\beta = \rho \mathbf{v}_\beta$, d'énergie ϕ_β est l'enthalpie volumique du fluide, de masse ϕ_β est la concentration volumique c_β . Le premier terme dans l'équation (25), est le terme transitoire, le deuxième est le terme convectif, le troisième le terme diffusif et le dernier un terme source associé à la phase β . La vitesse \mathbf{v}_β est la vitesse locale de la phase β et Γ_β le coefficient de diffusion moléculaire associé au processus en question.

On utilise l'équation (25) pour déduire l'équation macroscopique locale moyennée. On intègre donc, cette équation, sur le volume V_β et on la divise par le volume total V pour obtenir,

$$\left\langle \frac{\partial \phi_\beta}{\partial t} \right\rangle + \langle \nabla \cdot (\phi_\beta \mathbf{v}_\beta) \rangle = \langle \nabla \cdot (\Gamma_\beta \nabla \phi_\beta) \rangle + \langle S_\beta \rangle \quad (26)$$

Comme la phase σ est constituée de la partie solide, supposée indéformable, on peut considérer que le volume V_β est indépendant du temps. Le premier terme de l'équation (26) s'écrit alors:

$$\left\langle \frac{\partial \phi_\beta}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{V} \int_{V_\beta} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{V} \int_{V_\beta} \phi_\beta dV \right) = \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi_\beta \rangle \quad (27)$$

Ensuite, on applique les résultats provenant du théorème de la prise de moyenne, aux termes convectif et diffusif. Il en résulte pour le premier,

$$\langle \nabla \cdot (\phi_B \mathbf{v}_B) \rangle = \nabla \cdot \langle \phi_B \mathbf{v}_B \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B \mathbf{v}_B \cdot \mathbf{n} dA \quad (28)$$

où \mathbf{n} est la normale extérieure au fluide à l'interface solide-fluide (figure 2.2). Du fait de la condition de non-glissement sur l'interface fluide-solide, l'intégrale du second membre de l'équation (28) est nulle.

Le terme diffusif donne:

$$\langle \nabla \cdot (\Gamma_B \nabla \phi_B) \rangle = \nabla \cdot \langle \Gamma_B \nabla \phi_B \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \Gamma_B \nabla \phi_B \cdot \mathbf{n} dA \quad (29)$$

On réapplique le théorème de prise de moyenne au premier terme du membre de droite de l'équation (29),

$$\langle \nabla \cdot (\Gamma_B \nabla \phi_B) \rangle = \nabla \cdot \left[\Gamma_B \left(\nabla \langle \phi_B \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B \mathbf{n} dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \Gamma_B \nabla \phi_B \cdot \mathbf{n} dA \quad (30)$$

où l'on a considéré que Γ_B est indépendant de la position sur des longueurs de l'ordre du rayon du VER [23].

On utilise les équations (27), (28) et (30) pour écrire l'équation (26) sous la forme:

$$\begin{aligned} \varepsilon_B \frac{\partial \langle \phi_B \rangle^B}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \phi_B \mathbf{v}_B \rangle &= \nabla \cdot \left[\Gamma_B \left(\varepsilon_B \nabla \langle \phi_B \rangle^B + \langle \phi_B \rangle^B \nabla \varepsilon_B + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B \mathbf{n} dA \right) \right] + \\ &+ \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} (\Gamma_B \nabla \phi_B) \cdot \mathbf{n} dA + \varepsilon_B \langle S_B \rangle^B \end{aligned} \quad (31)$$

Afin de pouvoir écrire l'équation (31) en fonction de la variable $\langle \phi_B \rangle^B$, on introduit la décomposition suivante [Gray, 1975; Carbonell et Whitaker, 1984],

$$\phi_B = \langle \phi_B \rangle^B + \tilde{\phi}_B \quad (32)$$

$$\mathbf{v}_B = \langle \mathbf{v}_B \rangle^B + \tilde{\mathbf{v}}_B \quad (33)$$

où les variables $\tilde{\phi}_B$ et $\tilde{\mathbf{v}}_B$ représentent les fluctuations spatiales locales autour de la moyenne. On remarquera que les fluctuations spatiales introduites par les équations (32) et (33), ne sont pas nécessairement petites devant les valeurs moyennes intrinsèques. Il suffit pour s'en persuader de considérer la vitesse de la phase β , \mathbf{v}_B , qui du fait de la condition de non-glissement sur l'interface $A_{B\sigma}$ est telle que sur cette interface $\tilde{\mathbf{v}}_B = -\langle \mathbf{v}_B \rangle^B$.

Les équations (32) et (33), nous permettent d'écrire:

$$\langle \phi_B \mathbf{v}_B \rangle = \langle \langle \phi_B \rangle^B \langle \mathbf{v}_B \rangle^B \rangle + \langle \tilde{\phi}_B \langle \mathbf{v}_B \rangle^B \rangle + \langle \langle \phi_B \rangle^B \tilde{\mathbf{v}}_B \rangle + \langle \tilde{\phi}_B \tilde{\mathbf{v}}_B \rangle \quad (34)$$

Si l'on accepte le résultat (14), on peut réécrire l'équation (34) de façon à avoir,

$$\langle \phi_B \mathbf{v}_B \rangle = \varepsilon_B \langle \phi_B \rangle^B \langle \mathbf{v}_B \rangle^B + \varepsilon_B \langle \mathbf{v}_B \rangle^B \langle \tilde{\phi}_B \rangle^B + \varepsilon_B \langle \phi_B \rangle^B \langle \tilde{\mathbf{v}}_B \rangle^B + \varepsilon_B \langle \tilde{\phi}_B \tilde{\mathbf{v}}_B \rangle^B \quad (35)$$

En utilisant la décomposition (8), on peut écrire,

$$\langle \tilde{\phi}_B \rangle^B = - \langle \mathcal{r} \rangle^B \cdot \nabla \langle \phi_B \rangle^B |_C - \frac{1}{2} \langle \mathcal{r} \mathcal{r} \rangle^B : \nabla \nabla \langle \phi_B \rangle^B |_C + \dots \quad (36)$$

et,

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_B \rangle^B = - \langle \mathcal{r} \rangle^B \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_B \rangle^B |_C - \frac{1}{2} \langle \mathcal{r} \mathcal{r} \rangle^B : \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_B \rangle^B |_C + \dots \quad (37)$$

où l'ordre des différents termes est donné par [23]:

$$\langle \mathcal{r} \rangle^B \cdot \nabla \langle \phi_B \rangle^B = \mathcal{O} \left[\left(\frac{r}{L_\phi} \right) \langle \phi_B \rangle^B \right] \quad (38)$$

$$\langle \mathcal{r} \mathcal{r} \rangle^B : \nabla \nabla \langle \phi_B \rangle^B = \mathcal{O} \left[\left(\frac{r}{L_\phi} \right)^2 \langle \phi_B \rangle^B \right] \quad (39)$$

$$\langle \mathcal{r} \rangle^B \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_B \rangle^B = \mathcal{O} \left[\left(\frac{r}{L_v} \right) \langle \mathbf{v}_B \rangle^B \right] \quad (40)$$

$$\langle \mathcal{r} \mathcal{r} \rangle^B : \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_B \rangle^B = \mathcal{O} \left[\left(\frac{r}{L_v} \right)^2 \langle \mathbf{v}_B \rangle^B \right] \quad (41)$$

L'analyse des ordres de grandeur montre donc que les moyennes des fluctuations peuvent être négligées:

$$\boxed{\langle \tilde{\phi}_B \rangle^B = \langle \tilde{v}_B \rangle^B \cong 0} \quad (42)$$

et il résulte finalement de l'équation (35),

$$\langle \phi_B v_B \rangle = \varepsilon_B \langle \phi_B \rangle^B \langle v_B \rangle^B + \varepsilon_B \langle \tilde{\phi}_B \tilde{v}_B \rangle^B \quad (43)$$

Les résultats (14) et (42) sont très importants pour le développement de l'équation moyennée. Le lecteur doit se rapporter aux travaux de Carbonell et Whitaker [22], Carbonell et Whitaker [23], Plumb et Whitaker [89], pour l'étude détaillée amenant à ces résultats.

L'équation (43), permet de réécrire l'équation (31) sous la forme:

$$\begin{aligned} \varepsilon_B \frac{\partial \langle \phi_B \rangle^B}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_B \langle \phi_B \rangle^B \langle v_B \rangle^B) = \nabla \cdot \left[\Gamma_B \left(\varepsilon_B \nabla \langle \phi_B \rangle^B + \langle \phi_B \rangle^B \nabla \varepsilon_B + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B \, ndA \right) \right] + \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} (\Gamma_B \nabla \phi_B) \, ndA - \nabla \cdot (\varepsilon_B \langle \tilde{\phi}_B \tilde{v}_B \rangle^B) + \varepsilon_B \langle S_B \rangle^B \end{aligned} \quad (44)$$

L'équation (44) peut encore être simplifiée. Si l'on utilise la décomposition (32), on peut écrire:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B \, ndA = \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \langle \phi_B \rangle^B \, ndA + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \tilde{\phi}_B \, ndA \quad (45)$$

La première intégrale du membre de gauche de l'équation (45), peut être évaluée à l'aide du développement (7),

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \langle \phi_B \rangle^B \, ndA = \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \langle \phi_B \rangle_C^B \, ndA + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} (r \cdot \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B) \, ndA + \dots \quad (46)$$

et comme précédemment on peut sortir, de l'intégrale, les termes évalués au

barycentre. Il vient alors:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \langle \phi_B \rangle^B n dA = \left(\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n dA \right) \langle \phi_B \rangle_C^B + \left(\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n r dA \right) \cdot \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B + \dots \quad (47)$$

où la première intégrale peut être évaluée à partir du théorème de prise de moyenne (23) (en posant $\phi_B=1$):

$$- \nabla \varepsilon_B = \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n dA \quad (48)$$

On remplace (48) dans l'équation (47) et on la réécrit sous la forme:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \langle \phi_B \rangle^B n dA = - \langle \phi_B \rangle_C^B \nabla \varepsilon_B + \left(\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n r dA \right) \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B + \dots \quad (49)$$

L'ordre de grandeur de la deuxième intégrale est estimée à l'aide de l'identité¹,

$$\nabla \langle r \rangle = - \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n r dA \quad (50)$$

et du résultat donné par (9), il vient alors:

$$\nabla \langle r \rangle = \mathcal{O} \left[\varepsilon_B \left(\frac{r}{L_\varepsilon} \right) \right] \quad (51)$$

Les équations (45), (49) et (51), conduisent au résultat:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \phi_B n dA = \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \tilde{\phi}_B n dA - \langle \phi_B \rangle_C^B \nabla \varepsilon_B + \mathcal{O} \left[\varepsilon_B \left(\frac{r}{L_\varepsilon} \right) \right] \nabla \langle \phi_B \rangle_C^B \quad (52)$$

où L_ε représente la distance sur laquelle il existe des variations significatives de la fraction volumique de la phase β .

¹Voir annexe I

Si l'on accepte que la contrainte (1) est vérifiée, on peut finalement écrire l'équation de transport moyennée, sous la forme suivante:

$$\varepsilon_B \frac{\partial \langle \phi_B \rangle^B}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_B \langle \phi_B \rangle^B \langle \mathbf{v}_B \rangle^B) = \nabla \cdot \left[\Gamma_B \left(\varepsilon_B \nabla \langle \phi_B \rangle^B + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \tilde{\phi}_B \mathbf{n} dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} (\Gamma_B \nabla \phi_B) \mathbf{n} dA - \nabla \cdot (\varepsilon_B \langle \tilde{\phi}_B \tilde{\mathbf{v}}_B \rangle^B) + \varepsilon_B \langle S_B \rangle^B \quad (53)$$

La prochaine étape consiste en la proposition d'une équation de fermeture pour la fluctuation spatiale $\tilde{\phi}_B$.

2.4-DISPERSION MASSIQUE

On va limiter ce travail à l'étude de la dispersion massique, sans réaction chimique ni adsorption, pour l'écoulement d'un fluide newtonien et incompressible, au travers d'un milieu poreux. En outre, les parois solides sont supposées imperméables et la concentration c en soluté faible. Le coefficient de diffusion \mathcal{D} est supposé constant. L'équation de convection-diffusion, dans ce cas précis, est donc la suivante:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \mathcal{D} \nabla^2 c \quad (54)$$

avec les conditions aux limites du type,

$$-\mathcal{D} \mathbf{n} \cdot \nabla c = 0 \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (55a)$$

$$c = \mathcal{F}(\mathbf{x}_1, t) \quad \text{sur } A_{\text{Bextérieur}} \quad (55b)$$

et la condition initiale,

$$c = \mathcal{G}(\mathbf{x}_1) \quad \text{en } t = 0 \quad (56)$$

L'équation de transport moyennée est obtenue aisément à partir de

l'équation (53),

$$\frac{\partial \langle c \rangle^B}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c \rangle^B \langle v \rangle^B) = \mathcal{D} \nabla \cdot \left(\nabla \langle c \rangle^B + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \tilde{c} \, ndA \right) - \nabla \cdot (\langle \tilde{c} v \rangle^B) \quad (57)$$

où l'on a utilisé la condition à la limite (55a) et considéré que la porosité ε_B est constante.

Si l'on soustrait maintenant l'équation (57) de l'équation (54), en utilisant les décompositions (32) et (33), on arrive à l'équation pour la fluctuation \tilde{c} ,

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + v \cdot \nabla \tilde{c} = \mathcal{D} \nabla^2 \tilde{c} - \tilde{v} \cdot \nabla \langle c \rangle^B - \mathcal{D} \nabla \cdot \left(\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \tilde{c} \, ndA \right) + \nabla \cdot \langle \tilde{c} v \rangle^B \quad (58)$$

avec les conditions aux limites,

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla \tilde{c} = \mathbf{n} \cdot \nabla \langle c \rangle^B \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (59a)$$

$$\tilde{c} = \mathcal{H}(x_1, t) \quad \text{sur } A_{\text{Extérieur}} \quad (59b)$$

issue de la décomposition (32) et de l'équation (55a) et la condition initiale,

$$\tilde{c} = \mathcal{F}(x_1) \quad \text{en } t = 0 \quad (60)$$

Pour arriver à l'équation (58), on a aussi fait usage de l'équation de continuité. Compte tenu de la nature de l'écoulement, régime permanent et fluide incompressible, on sait que $\nabla \cdot v = \nabla \cdot \langle v \rangle = \nabla \cdot \tilde{v} = 0$.

Carbonell et Whitaker [23] ont simplifié l'équation (58), vu la difficulté à la résoudre sous cette forme, en utilisant le fait que \tilde{c} varie sur des longueurs de l'ordre de ℓ tandis que les quantités moyennes varient sur des longueurs de l'ordre de L [23].

D'après ces résultats, le gradient de la fluctuation \tilde{c} peut être considéré comme étant de l'ordre:

$$\nabla \tilde{c} = \mathcal{O} \left(\frac{\tilde{c}}{\ell} \right) \quad (61)$$

et le gradient de la concentration moyenne peut être estimé par

$$\nabla \langle c \rangle^B = O \left(\frac{\langle c \rangle^B}{L} \right) \quad (62)$$

Si l'on utilise la condition (59) et les résultats (61) et (62), on peut corréler les ordres de grandeur de \tilde{c} et $\langle c \rangle^B$ par:

$$\tilde{c} = O \left(\langle c \rangle^B \frac{\ell}{L} \right) \quad (63)$$

Les estimations ci-dessus permettent d'évaluer les ordres de grandeur des termes que se trouvent dans le membre de gauche de l'équation (58), à savoir:

$$\mathcal{D}\nabla^2 \tilde{c} = O \left[\frac{\mathcal{D}\tilde{c}}{\ell^2} \right] \quad (64)$$

$$\tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla \langle c \rangle^B = O \left[\tilde{\mathbf{v}} \frac{\tilde{c}}{\ell} \right] \quad (65)$$

$$\mathcal{D}\nabla \cdot \left(\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \tilde{c} \, ndA \right) = O \left[\frac{\mathcal{D}\tilde{c}}{\ell L} \right] \quad (66)$$

$$\nabla \cdot \langle \tilde{c}\tilde{\mathbf{v}} \rangle^B = O \left[\tilde{\mathbf{v}} \frac{\tilde{c}}{L} \right] \quad (67)$$

où l'on a utilisé le fait que la longueur caractéristique associée aux moyennes est L.

Les résultats (64)-(67) montrent que si la longueur ℓ est bien inférieure à la longueur L, on peut négliger les deux derniers termes de l'équation (58) par rapport aux deux premiers. Il vient alors que l'équation (58) peut être réécrite sous la forme:

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \tilde{c} = \mathcal{D}\nabla^2 \tilde{c} - \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla \langle c \rangle^B \quad (68)$$

avec les conditions aux limites (59) et (60).

Dans un premier temps, on va traiter l'équation (68) en régime permanent. C'est-à-dire qu'on suppose que la contrainte,

$$\frac{Dt^*}{\ell^2} \gg 1 \quad (69)$$

est vérifiée [89]. On considère que le temps macroscopique t^* d'observation est suffisamment long pour que le champ de fluctuations \tilde{c} puisse être considéré en régime permanent. Le problème de fermeture, en régime transitoire, sera traité au chapitre 7.

L'équation vérifiée par \tilde{c} est une équation classique de convection-diffusion où le gradient de concentration moyenne induit un terme source volumique $(-\tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla \langle c \rangle^B)$ dans l'équation (68) et un terme source surfacique sur $A_{B\sigma}$ $(\mathbf{n} \cdot \nabla \langle c \rangle^B)$ dans l'équation (59), ces deux termes sources dépendant linéairement de $\nabla \langle c \rangle^B$. Cette remarque justifie le choix de chercher les solutions du problème en \tilde{c} sous la forme:

$$\tilde{c} = \mathbf{f} \cdot \nabla \langle c \rangle^B + \xi \quad (70)$$

où \mathbf{f} est un vecteur fonction de la position et ξ une fonction arbitraire.

En écrivant les problèmes en \mathbf{f} et ξ , on va admettre un principe de "séparation" des échelles de longueur. La longueur caractéristique de variation de \mathbf{f} et ξ est ℓ tandis que la longueur caractéristique de variation de $\nabla \langle c \rangle^B$ est L . Dès lors, on va considérer en écrivant les problèmes "microscopiques" en \mathbf{f} et ξ que le gradient de concentration moyenne $\nabla \langle c \rangle^B$, grandeur "macroscopique", est constant. En remplaçant maintenant la solution (70) proposée dans l'équation (68), on obtient

$$\left[\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{f} - \mathcal{D} \nabla^2 \mathbf{f} - \tilde{\mathbf{v}} \right] \cdot \nabla \langle c \rangle^B = -\mathbf{v} \cdot \nabla \xi + \mathcal{D} \nabla^2 \xi \quad (71)$$

avec les conditions aux limites suivantes,

$$-\mathbf{n}(\nabla \mathbf{f} + \mathbf{I}) \cdot \nabla \langle c \rangle^B = \mathbf{n} \cdot \nabla \xi \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (72a)$$

$$\mathbf{f} = \mathcal{F}(\mathbf{x}_1) + \xi \quad \text{sur } A_{\text{Bextérieur}} \quad (72b)$$

Le choix de la fonction ξ est arbitraire, on peut la prendre solution du problème suivant:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \xi = \mathcal{D} \nabla^2 \xi \quad (73)$$

avec les conditions aux limites,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \xi = 0 \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (74a)$$

$$\xi = \mathcal{J}(x_1) \quad \text{sur } A_{\text{Bextérieur}} \quad (74b)$$

On arrive alors à l'équation de fermeture du problème en f , à partir des équations (71)-(72):

$$\boxed{\mathbf{v} \cdot \nabla f = \mathcal{D} \nabla^2 f - \tilde{v}} \quad (75)$$

avec les conditions aux limites

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla f = n \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (76a)$$

$$f = \mathcal{L}(x_1) \quad \text{sur } A_{\text{Bextérieur}} \quad (76b)$$

Carbonell et Whitaker [22] ont démontré que la fonction arbitraire ξ , solution du problème (73)-(74), vaut zéro pour les milieux spatialement périodiques. Dans un travail postérieur, Crapiste, Rotstein et Whitaker [28] ont montré que la fonction arbitraire ξ peut être négligée même dans le cas d'un milieu non-homogène et non-périodique.

Enfin, l'équation de transport moyenne (57) peut être réécrite, pour un milieu homogène, en fonction de f et des quantités moyennes sous la forme:

$$\frac{\partial \langle c \rangle^B}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \rangle^B \cdot \nabla \langle c \rangle^B = \nabla \cdot \left\{ \mathcal{D} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n f dA \right] \cdot \nabla \langle c \rangle^B - \langle \tilde{\mathbf{v}} f \rangle^B \cdot \nabla \langle c \rangle^B \right\} \quad (77)$$

Le milieu étant homogène, on a utilisé le fait que la vitesse moyenne intrinsèque $\langle \mathbf{v} \rangle^B$ est à divergence nulle comme le montre l'équation de continuité moyennée.

Afin de bien montrer les contributions dues aux différents mécanismes amenant la dispersion, on introduit le **tenseur tortuosité**,

$$\tau = \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{n} f \, dA \quad (79)$$

et le **tenseur de dispersion hydrodynamique**:

$$\mathbf{D} = - \frac{1}{V} \int_{V_B} \tilde{\mathbf{v}} f \, dV = -\langle \tilde{\mathbf{v}} f \rangle^B \quad (80)$$

Pour un milieu homogène les tenseurs τ et \mathbf{D} sont indépendants de la position [22]. Il vient alors:

$$\frac{\partial \langle c \rangle^B}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \rangle^B \cdot \nabla \langle c \rangle^B = \left[\mathcal{D}(\mathbf{I} + \tau) + \mathbf{D} \right] : \nabla \nabla \langle c \rangle^B \quad (81)$$

Comme $\nabla \nabla \langle c \rangle^B$ est symétrique, seule la partie symétrique de $\mathbf{D}^* = [\mathcal{D}(\mathbf{I} + \tau) + \mathbf{D}]$ a une contribution non nulle,

$$\mathbf{D}^* = \mathcal{D} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{2} (\tau + \tau^T) \right] + \frac{1}{2} (\mathbf{D} + \mathbf{D}^T) \quad (82)$$

et l'équation de transport moyenne, pour un milieu homogène, est donnée finalement par:

$$\frac{\partial \langle c \rangle^B}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \rangle^B \cdot \nabla \langle c \rangle^B = \mathbf{D}^* : \nabla \nabla \langle c \rangle^B \quad (83)$$

où le tenseur D^* contient les contributions dues à la diffusion moléculaire et aux parties symétriques du tenseur tortuosité et du tenseur dispersion hydrodynamique.

Le champ de vitesses connu et le problème de fermeture résolu, équations (75)-(76), on peut alors calculer le tenseur effectif de dispersion D^* .

2.5-ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES

Avant de résoudre le problème de fermeture, équations (75)-(76), il faut calculer le champ de vitesses provenant de l'écoulement de la phase fluide en régime permanent. Le fluide est considéré comme incompressible et newtonien. En outre, on va considérer des écoulements dont le nombre de Reynolds peut être plus élevé que dans le cas du régime de Stokes. On utilisera donc ici les équations de Navier-Stokes [Bird, 1960; Schlichting, 1968] pour résoudre le problème hydrodynamique.

Dans le cas bi-dimensionnel, les équations qui gouvernent l'écoulement, en régime permanent, d'un fluide newtonien et incompressible sont:

-Équation de Continuité

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (84)$$

-Équations de Navier-Stokes

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (85)$$

$$\rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} = \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} \quad (86)$$

avec la condition de non-glissement sur la surface du solide,

$$u = v = 0 \quad \text{sur } A_{\sigma} \quad (87)$$

Dans les équations (84)-(87), u et v sont les composantes du vecteur

vitesse, ρ la masse volumique, μ la viscosité et p la pression.

2.6-MILIEUX POREUX PÉRIODIQUES

Pour pouvoir résoudre les équations (75)-(76) et (84)-(86), il faut connaître la géométrie du milieu poreux et les conditions aux limites du problème sur $A_{\text{Extérieur}}$. Autrement dit, pour pouvoir résoudre les équations de Navier-Stokes et de fermeture, il faut poser les conditions aux limites appropriées, sur la frontière du domaine de résolution. Les conditions concernant le problème en f sont les plus difficiles à déterminer. On ne sait pas a priori, quelles conditions pour f on doit prendre, dans le cas général.

Brenner [19] et Sanchez-Palencia [100] ont proposé de considérer le milieu poreux comme étant spatialement périodique. C'est-à-dire que le milieu est formé à partir d'une cellule unité, par reproduction de cette cellule dans les trois directions de l'espace. La figure 2.4 montre, pour le cas bi-dimensionnel, un exemple de milieu spatialement périodique. La cellule unité a comme mailles les vecteurs l_1 et l_2 , lesquels font correspondre la cellule unité avec les autres cellules. Si r est le vecteur position d'un point dans la cellule unité,

$$r' = r + l_i, \quad i=1,2 \tag{88}$$

est le vecteur position du point correspondant dans une cellule voisine.

Une conséquence importante du fait de considérer le milieu comme spatialement périodique est que l'on peut démontrer [Carbonell et Whitaker, 1983] que les tenseurs tortuosité et dispersion hydrodynamique, évalués pour une cellule unité, représentent ceux du milieu,

$$\mathbf{D} = - \langle \tilde{\mathbf{v}}\mathbf{f} \rangle^B = - \langle \tilde{\mathbf{v}}\mathbf{f} \rangle_{\text{cellule}}^B \tag{89}$$

et,

$$\tau = \frac{1}{V_B} \int_{A_{B\sigma}} n f \, dA = \left[\frac{1}{V_B} \int_{A_{B\sigma}} n f \, dA \right]_{\text{cellule}} \quad (90)$$

et que la représentation $\tilde{c} = f \cdot \nabla \langle c \rangle^B$ est unique pour le milieu périodique [22]. On ramène donc le problème à la résolution des équations de Navier-Stokes et de fermeture, avec des conditions de périodicité, dans la cellule unité.

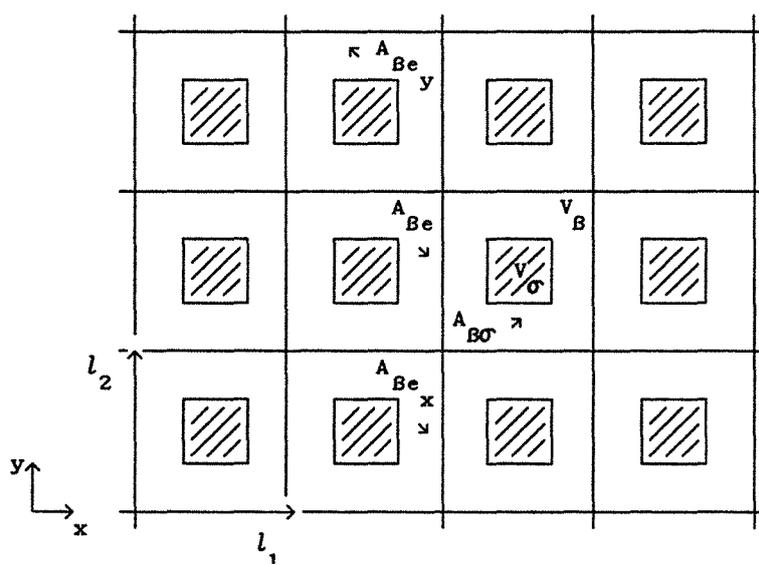


Figure 2.4 - Milieu spatialement périodique

Les conditions de périodicité dans une seule direction de l'espace, par exemple la direction de l'axe OX, sont données par,

$$v(x,y) = v(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be} \quad (91a)$$

$$n \cdot \nabla v(x,y) = n \cdot \nabla v(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be} \quad (91b)$$

$$f(x,y) = f(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be} \quad (91c)$$

$$n \cdot \nabla f(x,y) = n \cdot \nabla f(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be} \quad (91d)$$

tandis que dans le cas où la périodicité est considérée dans les deux

directions OX et OY, les conditions de périodicité sont données par:

-direction de l'axe OX

$$v(x,y) = v(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (92a)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla v(x,y) = \mathbf{n} \cdot \nabla v(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (92b)$$

$$f(x,y) = f(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (92c)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla f(x,y) = \mathbf{n} \cdot \nabla f(x+l_1,y) \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (92d)$$

direction de l'axe OY

$$v(x,y) = v(x,y+l_2) \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (93a)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla v(x,y) = \mathbf{n} \cdot \nabla v(x,y+l_2) \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (93b)$$

$$f(x,y) = f(x,y+l_2) \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (93c)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla f(x,y) = \mathbf{n} \cdot \nabla f(x,y+l_2) \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (93d)$$

Il ne reste plus qu'à choisir de façon appropriée la géométrie de la cellule unité. Malgré la simplification apportée au problème, par l'introduction de la notion de milieu périodique, le choix de la géométrie de la cellule s'avère difficile, sachant qu'elle doit contenir les mêmes mécanismes de dispersion que le milieu réel.

Avant de finir ce chapitre, on va mettre sous une autre forme le tenseur \mathbf{D}_h^* défini en (83) valable pour les milieux périodiques. On s'occupe d'abord de la contribution due à la dispersion hydrodynamique:

$$\mathbf{D}_h^* = \left[-\frac{1}{V_B} \int_{V_B} \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{v}}f + f\tilde{\mathbf{v}}) dV \right] \quad (94)$$

où la contribution hydrodynamique D_h^* a été prise comme étant la partie symétrique de $-\varepsilon_B^{-1} \langle \tilde{v}f \rangle$.

L'équation de fermeture en f en régime permanent (équation (75)) permet d'écrire pour la fluctuation de vitesse \tilde{v} :

$$-\tilde{v} = \nabla \cdot (\mathbf{v}f - \mathcal{D}\nabla f) \quad (95)$$

On remplace maintenant l'équation (95) dans l'équation (94), il vient alors:

$$D_h^* = \frac{1}{V} \int_{V_B} \frac{1}{2} \left[\nabla \cdot (\mathbf{v}f - \mathcal{D}\nabla f) f + f \nabla \cdot (\mathbf{v}f - \mathcal{D}\nabla f) \right] dV \quad (96)$$

Après intégration par parties suivie de l'application du théorème de la divergence il vient [Koch et al, 1989; Kaviany, 1992]:

$$D_h^* = \frac{\mathcal{D}}{V} \int_{V_B} (\nabla f \cdot \nabla f^T) dV + \frac{1}{V} \int_{A_B} \frac{1}{2} \left[\mathbf{v}f f - \mathcal{D}\nabla(ff) \right] n dA \quad (97)$$

où \mathbf{n} est la normale unitaire, dirigée vers l'extérieur, de la cellule unité.

La surface extérieure à la phase β A_B est la réunion de la surface $A_{B\sigma}$ et de la surface extérieure de la cellule A_{Be} . Sur la surface A_{Be} , la périodicité de la fonction f associée au fait que la normale extérieure \mathbf{n} change de signe, fait que l'intégrale de surface s'annule. Sur la surface $A_{B\sigma}$ la vitesse \mathbf{v} est nulle. D'autre part, l'utilisation de la condition à la limite (76a) conduit à:

$$D_h^* = \frac{\mathcal{D}}{V} \int_{V_B} (\nabla f \cdot \nabla f^T) dV + \frac{\mathcal{D}}{V} \int_{A_B} \frac{1}{2} (f\mathbf{n} + \mathbf{n}f) dA \quad (98)$$

On en déduit aisément que:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}^T) + \mathbf{D}_h^* = \frac{1}{V} \int_{V_B} (\nabla \mathbf{f} \cdot \nabla \mathbf{f}^T + \mathbf{I}) dV + \\ + \frac{1}{V} \int_{A_B} (\mathbf{f} \mathbf{n} + \mathbf{n} \mathbf{f}) dA \end{aligned} \quad (99)$$

L'utilisation de la périodicité de \mathbf{f} sur A_{Be} et du théorème de la divergence conduit à:

$$\boxed{\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \frac{1}{V} \int_{V_B} (\nabla \mathbf{f} + \mathbf{I})(\nabla \mathbf{f} + \mathbf{I})^T dV} \quad (100)$$

Le tenseur écrit sous cette forme correspond bien à celui proposé par Brenner en 1980 [19].

2.7-CONCLUSION

La prise de moyenne a rendu possible l'obtention de l'équation de transport moyenne. Cet équation est similaire à l'équation de transport microscopique si les variables locales sont remplacées par les variables moyennes et si le tenseur effectif de dispersion est introduit à la place du coefficient de diffusion moléculaire. Ce tenseur est constitué de la somme de trois autres, à savoir: une partie due uniquement à la diffusion moléculaire, une deuxième qui prend en compte la résistance supplémentaire à la diffusion due à la géométrie du milieu et la dernière, la dispersion, due à l'existence d'un gradient de vitesse. À partir de la connaissance du champ de vitesse et une fois le problème de fermeture résolu, le tenseur effectif de dispersion peut être calculé.

Le problème de fermeture, lorsque la géométrie de la cellule unité est connue, est un problème classique de convection-diffusion. La géométrie est la grande inconnue et son critère de choix peut être déterminant pour la réussite de la méthode. Cependant, la question qui se pose est de savoir si l'on peut trouver des arrangements géométriques simples, qui puissent représenter raisonnablement un milieu réel voire même, pour certains auteurs, si la périodicité spatiale imposée au milieux n'engendre pas des comportements spécifiques tout à fait différents des milieux réels.

L'autre objection est que malgré la simplicité de la méthode, la forme finale des équations n'est obtenue que grâce à des simplifications, fondées surtout sur une analyse des ordres de grandeurs des différents termes. Les équations ne sont donc pas issues de résultats mathématiques rigoureux. Cependant, ceci ne préjuge pas pour autant de l'intérêt de la méthode.

CHAPITRE 3

MÉTHODE NUMÉRIQUE

CHAPITRE 3

MÉTHODE NUMÉRIQUE

3.1-INTRODUCTION

Comme on l'a vu au Chapitre 2, pour calculer le tenseur effectif de dispersion, issu du passage entre le niveau microscopique et le niveau macroscopique, il faut connaître les champs du vecteur vitesse et du vecteur f à l'intérieur du volume élémentaire représentatif.

Dans le premier cas, il s'agit de la résolution des équations de Navier-Stokes en régime permanent, pour un fluide newtonien, se déplaçant à l'intérieur du VER. Dans le second cas, il faut résoudre le problème de fermeture en f introduit précédemment.

Comme le calcul analytique du tenseur effectif n'est possible que dans certains cas très simples, il est nécessaire d'utiliser une méthode numérique pour résoudre les équations mentionnées ci-dessus.

Ce chapitre traite uniquement de la résolution numérique. Aussi sa lecture n'est pas absolument nécessaire à la compréhension globale du travail.

3.2-FORMULATION MATHÉMATIQUE

D'une façon générale, on peut écrire en utilisant la notation indicielle [Aris, 1962], une équation de transport de convection-diffusion pour la variable ϕ , sous la forme suivante,

$$\frac{\partial (\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i \phi)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S_{\phi} \quad (1)$$

avec des conditions aux limites sur la frontière du domaine de normale extérieure \mathbf{n} ,

$$\mathcal{A} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} + \mathcal{B} \phi = \mathcal{C} \quad (2a)$$

et initiale du type:

$$\phi = \mathcal{F} \quad \text{à } t = 0 \quad (2b)$$

où \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{F} peuvent être des constantes ou des fonctions.

Dans les équations (1)-(2), ϕ est l'inconnue, ρ la masse volumique, u_i les composantes du vecteur vitesse, $\left(\frac{\Gamma}{\rho}\right)_\theta$ le coefficient de diffusion pour le transport de ϕ , S_θ le terme source de ϕ , t le temps et x_i les coordonnées d'espace.

Le premier terme de gauche, dans l'équation (1), est le terme transitoire et le deuxième le terme convectif. Du côté droit apparaissent le terme diffusif et le terme source.

Résoudre l'écoulement d'un fluide newtonien, c'est résoudre simultanément:

-L'équation de conservation de la masse, obtenue en prenant ϕ égal à l'unité et en annulant Γ_θ et S_θ . Soit:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

-Les équations du mouvement obtenues avec $\phi = u_j$, $\Gamma_\theta = \mu$ (viscosité dynamique du fluide) et $S_\theta = -\frac{\partial p}{\partial x_j}$ où p est la pression motrice du fluide.

Dans le cas du problème de fermeture en f , il faut résoudre l'équation (1) pour $\rho=1$, $\phi=f_j$, $\Gamma_\theta = \mathcal{D}$ (coefficient de diffusion moléculaire) et $S_\theta = \tilde{u}_j$ où \tilde{u}_j est la fluctuation de vitesse autour de la vitesse moyenne.

3.3-MÉTHODES DE DISCRÉTISATION

L'équation (1) avec ses conditions aux limites, doit être résolue après avoir été intégrée sur un volume de contrôle. On fait usage ici de la méthode des volumes finis développée par Patankar [80]. Le domaine de résolution est constitué de plusieurs volumes de contrôle, comme le montre la figure 3.1. Les inconnues ϕ sont calculées sur les nœuds placés au

centre de chaque volume de contrôle, tandis que les vitesses sont calculées sur les faces de chacun de ces volumes (figure 3.1). On utilise donc un maillage décalé pour la vitesse. Sa finalité est d'éviter les solutions qui n'ont pas de sens physique [Patankar, 1980]. Les volumes de contrôle qui se trouvent sur les limites du domaine, ont leurs faces qui coïncident avec la frontière. C'est-à-dire que les conditions aux limites sont exprimées directement avec les nœuds qui se trouvent sur la frontière. Le volume de contrôle correspondant à ces noeuds a donc un volume nul. À propos de la figure 3.1, les lettres en majuscule (P, W, E, S et N) indiquent les nœuds, tandis que les lettres en minuscules (e, w, n et s) indiquent les faces du volume de contrôle.

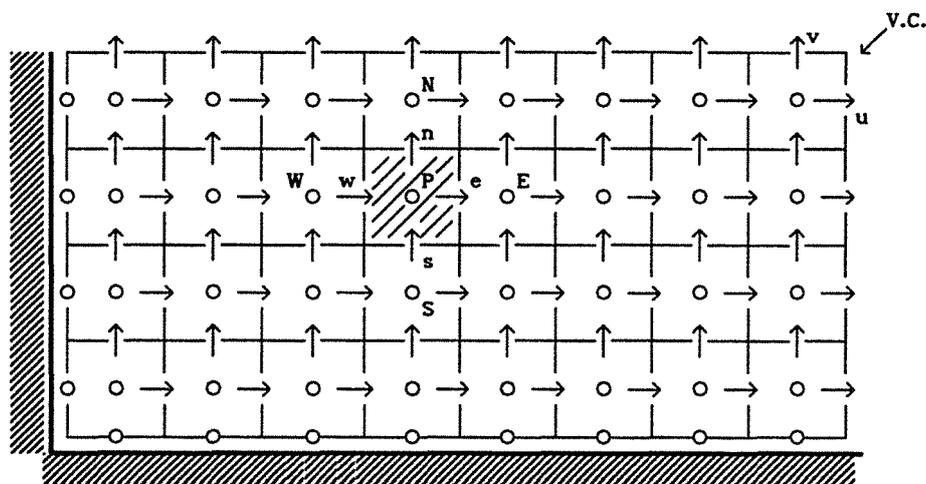


Figure 3.1 - Domaine de résolution

En intégrant l'équation (1) sur le volume de contrôle représenté sur la figure 3.2, il en résulte dans le cas bidimensionnel,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} = & \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\rho u \phi - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(\rho u \phi - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right] + \\ & + \frac{1}{\Delta y} \left[\left(\rho v \phi - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(\rho v \phi - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right] + \bar{S}_{\phi} \end{aligned} \quad (4)$$

où \bar{S}_{ϕ} est la valeur moyenne de S_{ϕ} sur le volume de contrôle.

Le problème qui se pose est de savoir comment évaluer les termes

convectifs et diffusifs, sur les faces du volume de contrôle. Mais avant de traiter le problème de discrétisation de ces termes dans le temps et l'espace, on abordera d'abord la question de la stabilité des schémas de discrétisation.

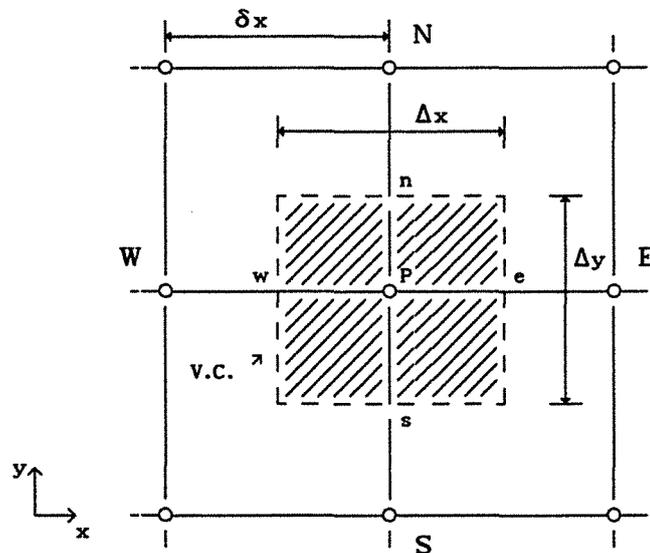


Figure 3.2 - Volume de contrôle

3.3.1-STABILITÉ

La littérature sur le sujet, entre autres [2, 18, 32, 39, 47, 51, 52, 55, 66, 68, 73, 78, 80-83, 90, 93, 94, 109, 110], nous montre les différentes possibilités de discrétisation pour les termes convectifs et diffusifs. Le schéma est choisi suivant le type de l'équation à discrétiser, en examinant sa consistance, stabilité et convergence.

La consistance exprime le fait que l'équation discrétisée tend vers l'équation différentielle qu'elle est sensée représenter, quand les incréments Δt et Δx_1 tendent vers zéro. La stabilité, signifie que le schéma de discrétisation, ne doit pas permettre l'amplification illimitée de l'erreur numérique. Enfin, la convergence implique que la solution numérique tend vers la solution exacte, quand Δt et Δx_1 tendent vers zéro.

Les conditions de consistance, stabilité et convergence pour des systèmes linéaires, sont liées entre elles. C'est le théorème d'équivalence de Lax [Hirsch, 1988] qui établit cette relation:

"Pour un problème à valeur initiale, bien posé et consistant, la

$$\bar{\phi}(t) = \sum_{i=1}^n \left[\phi_{0_i} e^{\lambda_i t} + \frac{S_i}{\lambda_i} \left(e^{\lambda_i t} - 1 \right) \right] \cdot V_i \quad (7)$$

où ϕ_{0_i} est donnée par la condition initiale et V_i est le vecteur propre associé à la valeur propre λ_i de la matrice A. La solution exacte est donc la somme de la contribution de tous les modes de la solution initiale, qui se sont propagés ou ont diffusé, plus celle due aux termes sources. Le système d'équations différentielles (5) est dit stable si la solution $\bar{\phi}$ demeure bornée [52]. Par conséquent, la partie réelle des valeurs propres doit être négative ou égale à zéro.

$$\text{Re}(\lambda_i) \leq 0 \quad (8)$$

L'inconvénient est qu'il n'est pas toujours facile de calculer le spectre de la matrice A, surtout quand les coefficients ne sont pas des constantes. Par exemple une partie des méthodes que l'on peut trouver dans la littérature [2, 18, 32, 39, 47, 51, 52, 55, 66, 68, 73, 78, 80-84, 90, 93, 94, 109, 110], utilisent des coefficients qui sont fonctions du nombre de Reynolds ou de Péclet.

Le fait de connaître où se trouvent dans le plan complexe les valeurs propres de la matrice A, suffit à déterminer la stabilité du schéma. On utilise, ainsi, le théorème de Gershgorin [Varga, 1962; Stoer, 1980; Golub, 1983]:

"La réunion de tous les disques

$$K_1 \equiv \left\{ \eta \in \mathbb{C} \mid |\eta - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i}^n |a_{ij}| \right\} \quad (9)$$

contient toutes les valeurs propres de la matrice complexe $A=[a_{ij}] n \times n$."

Autrement dit, les valeurs propres de A, se trouvent dans la réunion des disques associés à chaque ligne de la matrice et définies par l'équation (9). Le centre de chaque cercle est donné par l'élément a_{ii} de la diagonale et le rayon par la somme des valeurs absolues, des éléments hors diagonale.

Du théorème de Gershgorin, on peut conclure que le meilleur cas de

figure, est celui où l'on a,

$$a_{11} < 0 \tag{10}$$

et

$$|a_{11}| \geq \sum_{j=1}^n |a_{1j}| \tag{11}$$

On verra par la suite comment les schémas de discrétisation, peuvent vérifier les contraintes (10) et (11).

3.3.1.2-STABILITÉ DANS LE TEMPS

L'analyse de stabilité dans le temps, est faite à partir de l'équation (5). On a pu vérifier, d'après l'équation (7), que la solution de cette équation est constituée de la somme de la contribution de plusieurs modes, chacun associé à une valeur propre. Néanmoins, pour l'étude du comportement transitoire, on considère d'abord un seul de ces modes [52], appelé ici ϕ :

$$\frac{d\phi}{dt} = \lambda\phi + s \tag{12}$$

La forme générale de la discrétisation de l'équation modale (12) à un instant t , est donnée par [52],

$$\sum_{k=0}^K \gamma_k \phi^{t+k\Delta t} = \Delta t \sum_{k=0}^K \beta_k (\lambda\phi + s)^{t+k\Delta t} \tag{13}$$

avec un schéma explicite pour $\beta_k=0$, pour tout $k \neq 0$. Dans tous les autres cas, le schéma est dit implicite. Les variables γ_k et β_k , doivent satisfaire les conditions de consistance suivantes [52]:

$$\sum_{k=0}^K \gamma_k = 0 ; \quad \sum_{k=0}^K k\gamma_k = \sum_{k=0}^K \beta_k \tag{14}$$

En outre, il est aisé de constater que pour l'analyse transitoire, il suffit de considérer la partie homogène de l'équation (12) [52]. En réécrivant l'équation (13),

$$\sum_{k=0}^K (\gamma_k - \Delta t \beta_k \lambda) \Phi^{t+k\Delta t} = 0 \quad (15)$$

Introduisant en (16), un facteur d'amplification numérique z , défini par,

$$\Phi^{t+k\Delta t} = z^k \Phi^t \quad (16)$$

on arrive, finalement, à la condition:

$$P(z)\Phi^t = \left(\sum_{k=0}^K (\gamma_k - \Delta t \beta_k \lambda) z^k \right) \Phi^t = 0 \quad (17)$$

D'où z est la solution du polynôme caractéristique,

$$P(z) = 0 \quad (18)$$

La solution de l'équation modale (12) est donnée par [52]:

$$\Phi^{t+k\Delta t} = \Phi_0^t e^{\lambda k \Delta t} + \frac{S}{\lambda} (e^{\lambda k \Delta t} - 1) \quad (19)$$

À partir de la solution de la partie homogène de l'équation (12) ainsi que de l'équation (16), on voit que $z(\lambda)$ est l'approximation numérique de $e^{\lambda \Delta t}$,

$$z(\lambda) \approx e^{\lambda \Delta t} = 1 + \lambda \Delta t + \frac{1}{2} (\lambda \Delta t)^2 + \frac{1}{6} (\lambda \Delta t)^3 + \dots \quad (20)$$

Donc, la solution numérique est donnée par:

$$\Phi^{t+k\Delta t} = \Phi_0^t z^k(\lambda) + \frac{S}{\lambda} (z^k(\lambda) - 1) \quad (21)$$

La solution générale, est constituée par la contribution de tous les modes:

$$\Phi^{t+k\Delta t} = \sum_{i=1}^n \left[\phi_{0_i}^t z^k(\lambda_i) + \frac{S_i}{\lambda_i} (z^k(\lambda_i) - 1) \right] \cdot V_i \quad (22)$$

La condition de stabilité est déterminée, de façon à avoir un facteur d'amplification borné (la partie réelle de λ étant nécessairement inférieure à zéro), c'est-à-dire que la solution Φ ne peut pas augmenter indéfiniment, pour un nombre d'itérations n tendant vers l'infini, ceci pour un Δt fixé. D'après la condition (8) et l'équation (20), cette limitation se traduit par [52],

$$|z_k| \leq 1 \tag{23}$$

pour toutes les racines $k=1,2,\dots,K$.

Par comparaison à l'équation (7), on peut définir l'erreur d'amplitude ou "diffusion numérique", qui donne le rapport entre le module de la solution numérique $|z|$ et le module de la solution exacte $e^{-\text{Re}(\lambda)\Delta t}$,

$$e_D = |z| e^{-\text{Re}(\lambda)\Delta t} \tag{24}$$

et l'erreur de phase ou "dispersion numérique", qui donne le rapport entre la phase provenant de la solution numérique et celle de la solution exacte $\text{Im}(\lambda)\Delta t$,

$$e_\Omega = \frac{\Omega}{\text{Im}(\lambda)\Delta t} \tag{25}$$

où $|z|$ est le module et Ω la phase de $z=|z|e^{i\Omega}$. Re représente la partie réelle et Im la partie imaginaire. On voit donc que la solution numérique peut être amplifiée et/ou décalée par rapport à la solution exacte.

Les conditions (8) et (20), sont nécessaires pour que le schéma de discrétisation soit stable, dans l'espace et le temps.

3.3.2-DISCRÉTISATION DANS LE TEMPS

On va se limiter, dans ce travail, à deux niveaux de temps, soit $K=1$ dans l'équation (13). On intègre, alors, l'équation (1) entre les instants t et $t+\Delta t$ et on obtient l'équation discrétisée (26) où $\bar{S}^* = \theta \bar{S}^{t+\Delta t} + (1-\theta)\bar{S}^t$. On a considéré dans l'intégration du terme

transitoire, que la valeur de $(\rho\phi)$, sur le nœud, prévaut sur tout le volume de contrôle. La variable Θ a été introduite de façon à permettre le choix de plusieurs types d'interpolation. L'équation (26) par rapport à la formulation générale (13), correspond au choix des valeurs suivantes: $\gamma_1=1$, $\gamma_0=-1$, $\beta_0=(1-\Theta)$ et $\beta_1=\Theta$. Ce jeu de valeurs, vérifie bien, les conditions de consistance (14).

$$\begin{aligned}
 \frac{(\rho\phi)|_t^{t+\Delta t}}{\Delta t} \cdot \Delta x \Delta y = & \Theta \left[\left(\rho u \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(\rho u \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right]^{t+\Delta t} \Delta y + \\
 & + \Theta \left[\left(\rho v \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(\rho v \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right]^{t+\Delta t} \Delta x + \\
 & + (1-\Theta) \left[\left(\rho u \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(\rho u \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right]^t \Delta y + \\
 & + (1-\Theta) \left[\left(\rho v \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(\rho v \phi - \Gamma_\emptyset \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right]^t \Delta x + \bar{S}^* \Delta x \Delta y
 \end{aligned} \tag{26}$$

Suivant la valeur de Θ , on obtient les différents schémas de discrétisation des équations paraboliques. Pour $\Theta=0$, on a le schéma dit explicite, $\Theta=0,5$ correspond au schéma de Crank-Nicolson et $\Theta=1$ amène au schéma purement implicite.

Les valeurs de γ_k et β_k , données ci-dessus, conduisent, d'après l'équation (17) au polynôme caractéristique suivant:

$$P(z) = (1 - \Theta\lambda\Delta t)z - (1 + (1-\Theta)\lambda\Delta t) = 0 \tag{27}$$

et finalement au facteur d'amplification,

$$z = \frac{1+(1-\Theta)\lambda\Delta t}{1-\Theta\lambda\Delta t} = 1 + \lambda\Delta t + \Theta(\lambda\Delta t)^2 + \Theta^2(\lambda\Delta t)^3 + \dots \tag{28}$$

Il est facile de voir que la condition de stabilité (23) est vérifiée pour tous les schémas de discrétisation dans l'espace tels que $\text{Re}(\lambda) \leq 0$ avec des

schémas de discrétisation dans le temps tels que $\Theta \geq 1/2$. Ce sont alors des schémas inconditionnellement stables [Fletcher, 1988; Hirsch, 1988].

Le schéma implicite, $\Theta=1$, est souvent adopté en raison de sa stabilité, de sa simplicité et de son comportement physique [80]. C'est un schéma d'ordre 1 en Δt comme on peut le constater d'après l'équation (20). L'équation (26), peut alors être réécrite sous la forme:

$$\frac{(\rho\phi)^{t+\Delta t} - (\rho\phi)^t}{\Delta t} \Delta x \Delta y = \left[\left(\rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - \left(\rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right] \Delta y + \left[\left(\rho v \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - \left(\rho v \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \right] \Delta x + \bar{S}^{t+\Delta t} \Delta x \Delta y \quad (29)$$

3.3.3-DISCRÉTISATION DANS L'ESPACE

Un premier schéma de discrétisation possible, pour la formulation des volumes finis, est celui à trois points. On se bornera, dans la suite, au traitement d'une seule direction d'espace en considérant que le même schéma s'applique également dans les autres directions [80].

On cherche, donc, une représentation de la variable ϕ , sous la forme d'un schéma de différences centrées plus des termes supplémentaires:

$$\phi_{i+(1/2)} = \frac{1}{2} (\phi_i + \phi_{i+1}) + a\phi_i + b\phi_{i+1} \quad (30)$$

Le schéma des différences centrées est connu pour être instable, pour la discrétisation des termes convectifs, pour des valeurs élevées du nombre de Reynolds ou de Péclet [2, 18, 32, 39, 47, 51, 52, 55, 66, 68, 73, 78, 80-84, 90, 93, 94, 109, 110].

Il résulte du développement en série de Taylor, pour des points espacés régulièrement:

$$\phi_i = \phi_{i+1/2} - \frac{1}{2} \Delta x \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} + \frac{1}{8} \Delta x^2 \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{i+1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (31)$$

et

$$\phi_{i+1} = \phi_{i+1/2} + \frac{1}{2} \Delta x \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} + \frac{1}{8} \Delta x^2 \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{i+1/2} + O(\Delta x^3) \quad (32)$$

En multipliant la première équation par $(\frac{1}{2} + a)$, la deuxième par $(\frac{1}{2} + b)$ et en les additionnant, on peut réécrire l'équation (30) sous la forme suivante:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i+1}) + a\phi_i + b\phi_{i+1} &= (1+a+b)\phi_{i+1/2} + \frac{1}{2}(b-a)\Delta x \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} + \\ &+ \frac{1}{8}(1+a+b)\Delta x^2 \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{i+1/2} + O(\Delta x^3) \end{aligned} \quad (33)$$

En multipliant maintenant, l'équation (31) par a et l'équation (32) par b et en les additionnant, il en résulte:

$$\begin{aligned} a\phi_i + b\phi_{i+1} &= (a+b)\phi_{i+1/2} + \frac{1}{2}(b-a)\Delta x \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} + \\ &+ \frac{1}{8}(a+b)\Delta x^2 \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{i+1/2} + O(\Delta x^3) \end{aligned} \quad (34)$$

En imposant dans l'équation (33), pour $(1+a+b)=1$ et en posant $a=\frac{\alpha}{2}$, il vient alors:

$$\phi_{i+(1/2)} = \frac{1-\alpha}{2} \phi_{i+1} + \frac{1+\alpha}{2} \phi_i + \frac{\alpha}{2} \Delta x \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} + O(\Delta x^2) \quad (35)$$

De même:

$$\phi_{i-(1/2)} = \frac{1-\alpha}{2} \phi_i + \frac{1+\alpha}{2} \phi_{i-1} + \frac{\alpha}{2} \Delta x \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1/2} + O(\Delta x^2) \quad (36)$$

où l'on a introduit volontairement le paramètre α . Les schémas (35) et (36) sont valables pour $u>0$, aussi bien que pour $u<0$ [Braga, 1990].

De même, si l'on cherche une représentation de la dérivée première sous la forme:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i+(1/2)} = a\phi_i + b\phi_{i+1} \quad (37)$$

on obtient alors, en prenant $(b-a)=2$ et $(a+b)=0$, les formes suivantes:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i+(1/2)} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (38)$$

et de même:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i-(1/2)} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (39)$$

Les équations (38)-(39), représentent le schéma classique des différences centrées, pour les termes diffusifs. Dans les équations (38) et (39), on considère que le schéma est approprié pour les termes diffusifs. C'est-à-dire que la discrétisation des termes diffusifs par le schéma des différences centrées, n'est pas une source d'instabilité. On s'est appuyé, pour cela, sur les travaux de Braga [18], Leonard [68] et Patel et Markatos [83].

On va se concentrer, maintenant, sur les possibilités de choix du paramètre α dans les équations (36) et (37). Plusieurs schémas, tirés de la littérature, sont obtenus selon la valeur de α choisie [18]. Pour une valeur de $\alpha=0$ on obtient le schéma dit des différences centrées et pour $\alpha=1$ le "upwind". Comme premier choix on va utiliser, dans ce travail, celui introduit par Patankar [80], soit:

$$\alpha = 1 - \frac{2}{Pe} \left[1 + \left[0, (1 - 0.1|Pe|)^5 \right] + D^{-1} \left[0, \mp F \right] \right]^1 \quad (40)$$

où Pe est le nombre de Péclet, D la conductance et F le débit qui sont définis ci-dessous. Ce schéma est une approximation du schéma exponentiel, lequel donne la solution exacte dans le cas unidimensionnel [80].

En suivant le développement, dont les détails se trouvent dans

¹Le symbole $\left[\right]$ signifie qu'on prend la valeur la plus grande

l'ouvrage de Patankar [80], on arrive à la forme finale discrétisée de l'équation générale (29), pour le cas bidimensionnel considéré dans cette étude,

$$\boxed{(a_p - \mathcal{F})\phi_p = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + b} \quad (41)$$

où,

$$a_E = D_e A \left(|Pe_e| \right) + \left[-F_e, 0 \right] \quad (42a)$$

$$a_W = D_w A \left(|Pe_w| \right) + \left[+F_w, 0 \right] \quad (42b)$$

$$a_N = D_n A \left(|Pe_n| \right) + \left[-F_n, 0 \right] \quad (42c)$$

$$a_S = D_s A \left(|Pe_s| \right) + \left[+F_s, 0 \right] \quad (42d)$$

$$a_p^o = \rho_p^o \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (43)$$

$$b = S_C \Delta x \Delta y + a_p^o \phi_p^o \quad (44)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (45)$$

$$\mathcal{F} = a_p^o - S_P \Delta x \Delta y \quad (46)$$

où les termes ϕ_p^o et ρ_p^o sont estimés à l'instant t , tandis que toutes les autres valeurs sont à évaluer à l'instant $t+\Delta t$. Les débits sur les faces du volume de contrôle, F_i , sont donnés par:

$$F_i = (\rho u)_i \Delta \quad (47)$$

où Δ est l'aire de la face en question. Quant aux conductances, D_i , elles sont déterminées par:

$$D_1 = \frac{\Gamma_1 \Delta}{\delta x_1} \quad (48)$$

où δx_1 est la distance entre deux nœuds consécutifs, figure 3.2.

Les coefficients Γ_1 sont calculés, à partir des valeurs de Γ sur les nœuds voisins, par interpolation:

$$\Gamma_1 = \left(\frac{1-f}{\Gamma_{I-1}} + \frac{f}{\Gamma_{I+1}} \right)^{-1} \quad (49)$$

où f est le rapport entre les distances des nœuds à la surface des volumes de contrôle, figure 3.3,

$$f = \frac{\delta x^-}{\delta x^+} \quad (50)$$

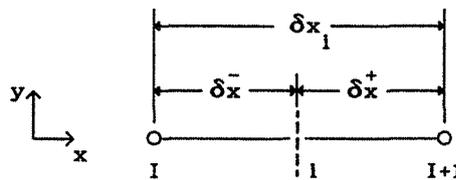


Figure 3.3 - Distance associée à l'interface i

La fonction $A()$, fournit le schéma dit "loi puissances". Résultant de l'expression de α suivant (40),

$$A(|Pe|) = \left[0, (1 - 0.1|Pe|)^5 \right] \quad (51)$$

où Pe est le nombre de Péclet, défini par $Pe_1 = \frac{F_1}{D_1}$. Finalement, le terme source \bar{S} est linéarisé:

$$\bar{S} = S_C + S_P \phi_P \quad (52)$$

Patankar [80] préconise quatre critères pour la réussite de la méthode, à savoir:

- I. Consistance du flux sur les faces du volume de contrôle.
- II. Positivité des coefficients (a_w , a_e , a_s et a_n).
- III. La variable S_p , doit être inférieure ou égale à zéro.
- IV. Le coefficient a_p , doit être égal à la somme des coefficients voisins.

On voit que ces critères nous mènent à vérifier les contraintes (10) et (11), du paragraphe 3.3.1. D'autre part on a $\Theta=1 \geq 1/2$. Il s'agit donc d'un schéma stable dans l'espace et le temps.

3.3.4-CONDITIONS AUX LIMITES

Les conditions aux limites sont obtenues à partir de l'intégration de l'équation (1), sur le demi-volume de contrôle de la figure 3.4. On ne considère ici que le régime permanent et le cas unidimensionnel, la même démarche étant valable dans l'autre direction de l'espace.

Le résultat suivant est obtenu en intégrant l'équation (1):

$$(\rho u \phi)_i - (\rho u \phi)_F = \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_i + q_F + \bar{S} \Delta x \quad (53)$$

où l'indice i indique la face du demi volume de contrôle, F le nœud sur la frontière et q_F le flux sur la frontière.

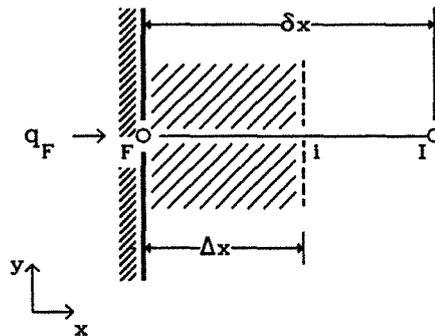


Figure 3.4 - Demi-volume de contrôle à la frontière

Si on évalue les termes sur la face du volume de contrôle de la façon suivante,

$$\phi_i = \frac{1}{2} (\phi_I + \phi_F) \quad (54)$$

$$\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_i = \frac{\Gamma_i}{\delta x} (\phi_I - \phi_F) \quad (55)$$

on arrive à l'équation discrétisée suivante:

$$a_F \phi_F = a_I \phi_I + b \quad (56)$$

avec les coefficients,

$$a_I = D_I - \frac{F_I}{2} \quad (57)$$

$$a_F = a_I + (F_I - F_F) - S_P \Delta x \quad (58)$$

$$b = q_F + S_C \Delta x \quad (59)$$

où $F \equiv \rho u$ et $D \equiv \frac{\Gamma}{\delta x}$.

Comme on a choisi de mailler de façon à avoir un volume de contrôle d'épaisseur nulle sur la frontière (figure 3.1), on obtient l'équation finale en faisant Δx tendre vers zéro, d'où le résultat

$$\phi_F = \phi_I + \frac{q_F}{a_I} \quad (60)$$

Le développement ci-dessus s'applique aux nœuds qui se trouvent sur les frontières du domaine de résolution. Lorsqu'il s'agit d'une condition du type flux imposé, - sur une surface solide-fluide $A_{\beta\sigma}$ se trouvant à l'intérieur du domaine de résolution (chapitres 5, 6 et 7) par exemple -, on remplace la condition de flux surfacique par une source volumique. Autrement dit, on considère une condition de flux nul sur la surface et on ajoute une source volumique équivalente, dans les volumes de contrôle voisins de l'interface:

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \phi) \times \text{Surface} = \text{Source volumique} \times \text{Volume} \quad (61)$$

La condition de flux nul est obtenue, en annulant les Γ_1 pour les nœuds voisins de l'interface solide-fluide du côté solide.

La figure 3.5 montre, d'une façon schématisée, le cas où la normale \mathbf{n} est parallèle à l'axe OX.

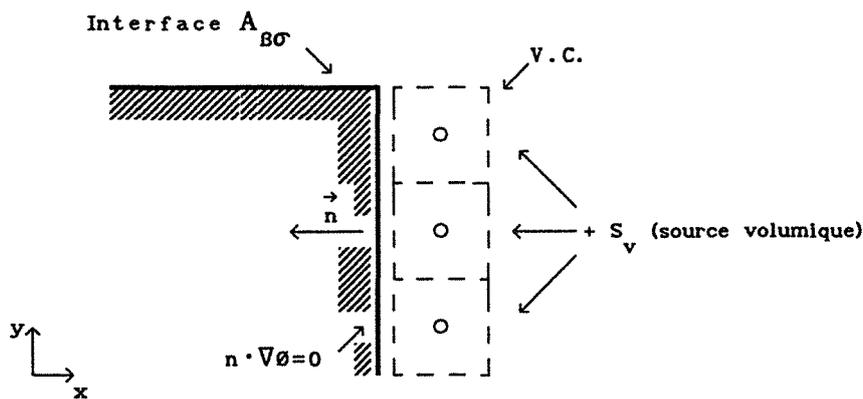


Figure 3.5 - Condition à la limite sur l'interface $A_{B\sigma}$

3.3.5-CONSISTANCE DU SCHÉMA IMPLICITE À TROIS POINTS

Les schémas de discrétisation dans le temps et l'espace étant établis, on peut procéder à l'analyse de consistance de l'équation discrétisée. L'équation discrétisée est dite être consistante si en faisant tendre Δt , Δx et Δy vers zéro, on obtient l'équation différentielle qui a été discrétisée. En outre, l'analyse de consistance fait apparaître les termes de troncature, permettant ainsi d'écrire l'équation modifiée qui est l'équation que l'on résoud effectivement par la méthode numérique pour obtenir la solution de l'équation aux dérivées partielles (équation (1)), qui décrit le phénomène physique.

L'équation (29) avec les termes convectifs représentés par les relations (35)-(36) et les termes diffusifs par les relations (38)-(39), peut être mise sous la forme suivante:

$$\begin{aligned}
 \phi_{ij}^{k+1} - \phi_{ij}^k &= \left[\left(\frac{1+\alpha}{2} \right) C_w + D_x \right] \phi_{i-1j}^{k+1} - \left[\left(\frac{1-\alpha}{2} \right) C_e - D_x \right] \phi_{i+1j}^{k+1} + \\
 &+ \left[\left(\frac{1-\alpha}{2} \right) (C_w + C_s) - \left(\frac{1+\alpha}{2} \right) (C_e + C_n) - 2(D_x + D_y) \right] \phi_{ij}^{k+1} + \\
 &+ \left[\left(\frac{1+\alpha}{2} \right) C_s + D_y \right] \phi_{ij-1}^{k+1} - \left[\left(\frac{1-\alpha}{2} \right) C_n - D_y \right] \phi_{ij+1}^{k+1}
 \end{aligned} \tag{62}$$

où l'on a introduit le nombre de Courant C, défini par:

$$C_x = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \tag{63}$$

et

$$C_y = v \frac{\Delta t}{\Delta y} \tag{64}$$

De façon analogue, on redéfinit D par:

$$D_x = \left(\frac{\Gamma}{\rho} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \tag{65}$$

et

$$D_y = \left(\frac{\Gamma}{\rho} \right) \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \tag{66}$$

Ensuite, pour arriver à l'équation modifiée, on développe ϕ en série de Taylor autour du point k+1, i et j. Lors du développement, on considère que u, v, ρ et $\Gamma = \Gamma_x = \Gamma_y$ sont localement des constantes. Ceci étant, on arrive à la forme finale de l'équation modifiée:

$$\begin{aligned}
 \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} &= (\Gamma'_x + \Gamma) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + (\Gamma'_y + \Gamma) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \Gamma'_{xy} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} - \\
 &- \left[\Gamma C_x \Delta x - \rho u \frac{\Delta x^2}{6} (C_x^2 - 1) \right] \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + \left[\Gamma C_y \Delta y - \rho v \frac{\Delta y^2}{6} (C_y^2 - 1) \right] \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} + \dots
 \end{aligned} \tag{67}$$

où Γ'_x et Γ'_y sont des **coefficients de diffusion numérique** agissant selon les directions OX et OY et Γ'_{xy} le **coefficient de diffusion numérique** dû aux termes des dérivées croisées. Dans l'équation (67), les termes aux dérivées partielles par rapport aux variables d'espace d'ordre impair sont liés à la

dispersion, tandis que les termes d'ordre pair sont liés à la diffusion [39]. Ces coefficients, introduits par les schémas de discrétisation, sont donnés explicitement par:

$$\Gamma'_x = \Gamma_x^t + \Gamma_x^e = 0,5\rho u_p C_x \Delta x + 0,5 \left[\left(\frac{1+\alpha}{2} \right) \rho u_w - \left(\frac{1-\alpha}{2} \right) \rho u_e \right] \Delta x \quad (68)$$

$$\Gamma'_y = \Gamma_y^t + \Gamma_y^e = 0,5\rho v_p C_y \Delta y + 0,5 \left[\left(\frac{1+\alpha}{2} \right) \rho v_s - \left(\frac{1-\alpha}{2} \right) \rho v_n \right] \Delta y \quad (69)$$

où Γ^t et Γ^e indiquent les termes introduits par la discrétisation dans le temps et l'espace respectivement. Pour arriver à l'équation (67) on a utilisé aussi l'équation (1), afin de pouvoir expliciter les dérivées par rapport au temps à l'aide de celles par rapport aux coordonnées d'espace.

En outre, on voit que l'équation (67) est consistante avec les équations (1) et (3), lorsque Δt , Δx et Δy tendent vers zéro.

3.3.6-DIFFUSION NUMÉRIQUE

Malgré la simplicité et la stabilité, du schéma à 3 points présenté, la discrétisation des termes convectifs et transitoire introduit une diffusion numérique [Raithby, 1976; Leonard, 1979; Patankar, 1980; Pollard et Siu, 1982; Hassan et al, 1983; Huang et al, 1985; Patel et Markatos, 1986; Braga, 1990; Peterson, 1992]. En regardant l'équation (67), on constate que au coefficient de diffusion physique Γ , s'ajoute un coefficient numérique Γ' . La solution donnée pour un tel schéma, correspond donc à celle d'un coefficient de diffusion Γ_{num} , où $\Gamma_{num} = \Gamma + \Gamma'$. Pour essayer de combler ce manque de précision, plusieurs alternatives ont été proposées [18, 51, 55, 68, 84, 90, 94, 109]. La plupart du temps, il s'agit de prendre en compte la direction de propagation de l'information [51, 55, 94, 109] ou bien d'élaborer un schéma d'ordre supérieur à 4 ou 5 points [18, 55, 68, 90].

Un exemple classique [18, 51, 55, 93, 94], illustrant bien la diffusion numérique, est celui du transport convectif d'un scalaire. Il s'agit de résoudre l'équation (1) en régime permanent, avec un coefficient de diffusion physique égal à zéro, $\Gamma=0$. Soit:

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \tag{70}$$

avec les conditions aux limites,

$$\phi = 1 \text{ en } x = 0 \text{ et } y = H \tag{71}$$

$$\phi = 0 \text{ en } x = L \text{ et } y = 0 \tag{72}$$

où L est la longueur et H la hauteur du domaine de résolution, figure 3.6.

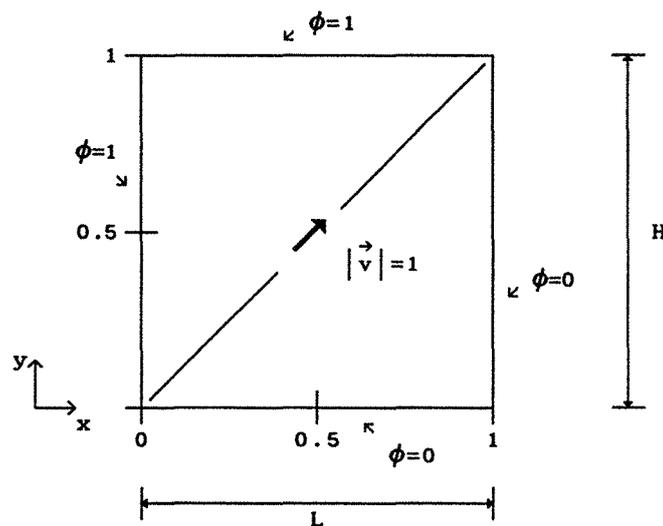


Figure 3.6 - Transport convectif d'un scalaire

Ce problème, est résolu pour un vecteur vitesse orienté à 45° par rapport à l'axe OX et de module unitaire, $|\vec{v}|=1$. Le vecteur vitesse à 45° représente, pour ce schéma, le cas le plus défavorable [18, 55, 80]. La figure 3.7, nous montre le résultat $\phi(y)$ obtenu pour une abscisse $\frac{x}{L}=0,5$ et un maillage de 21 X 21 volumes de contrôle avec le code numérique PDS, équations 4.41-46.

On voit clairement sur la figure 3.7 que le code numérique PDS, n'arrive pas à reproduire la solution théorique. On remarque aussi que les valeurs calculées, sont bien comprises entre 0 et 1.

Transport Convectif d'un scalaire
Maillage: 21 X 21

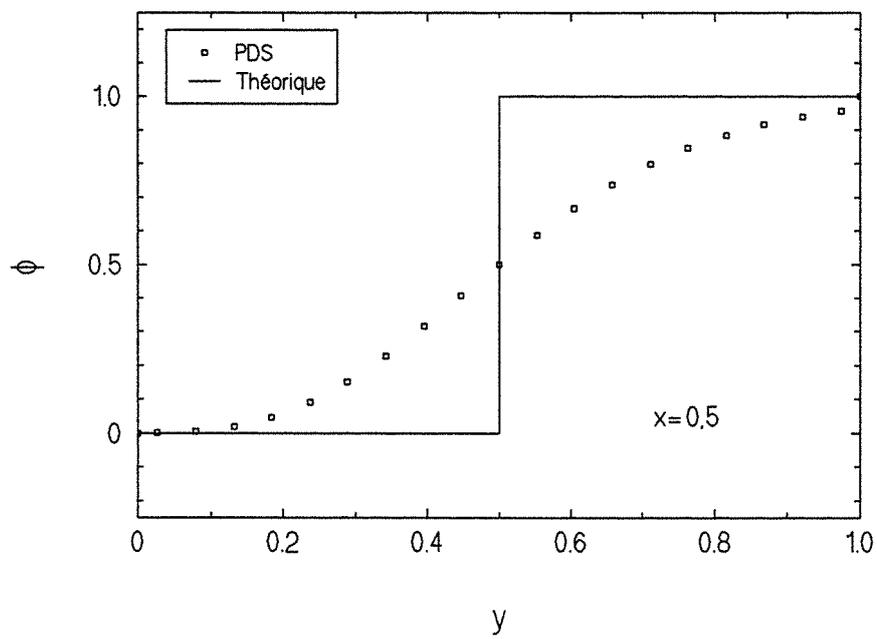


Figure 3.7 - Transport convectif d'un scalaire

3.3.6.1- LE SCHÉMA QUADRATIQUE

Parmi les diverses possibilités de traitement du problème de la diffusion numérique, on a retenu celle introduite par Leonard [68], le schéma "QUICK". C'est un schéma à 4 points et d'ordre 2 en Δx_1 . En réalité, le schéma qu'on utilise, est issu des modifications faites par Pollard et Siu [90] et de la démarche employée par Braga [18] qui ont permis de rendre le schéma QUICK stable et donnent la possibilité d'avoir, dans certains cas, un schéma d'ordre 3 en Δx_1 .

Pour le schéma de discrétisation dans le temps, une solution pour éviter la diffusion numérique due à la discrétisation en temps est l'utilisation du schéma de Crank-Nicolson. Ce schéma correspond à une valeur $\Theta=1/2$ dans l'équation (26) et est d'ordre 2 en Δt , d'après l'équation (20).

On cherche maintenant, une représentation de la variable ϕ , non plus à 3 points mais à 4 points. On considère, d'abord, le cas où la vitesse est inférieure à zéro, $u < 0$:

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i+1}) + a\phi_i + b\phi_{i+1} + c\phi_{i+2} \quad (73)$$

En suivant la démarche donnée au paragraphe 3.3.3, il vient:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i+1}) + a\phi_{i+1} + b\phi_i + c\phi_{i+2} &= (1+a+b+c)\phi_{i+1/2} + \\ &+ \frac{1}{2}(a-b+3c)\Delta x \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} + \frac{1}{8}(1+a+b+9c)\Delta x^2 \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{i+1/2} + O(\Delta x^3) \end{aligned} \quad (74)$$

Afin d'écrire l'équation (74) sous la forme de l'équation (73), on prend $(1+a+b+c)=1$, $(a-b+3c)=0$ et on pose $b=-\frac{\alpha}{3}$. D'où:

$$\begin{aligned} \phi_{i+(1/2)} &= \frac{\phi_i + \phi_{i+1}}{2} - \frac{\alpha}{3} (\phi_{i+2} + \phi_i - 2\phi_{i+1}) + \\ &+ \left(\frac{1}{8} - \frac{\alpha}{3} \right) \Delta x^2 \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{i+1/2} + O(\Delta x^3) \end{aligned} \quad (75)$$

et

$$\begin{aligned} \phi_{i-(1/2)} &= \frac{\phi_i + \phi_{i-1}}{2} - \frac{\alpha}{3} \left(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i \right) + \\ &+ \left(\frac{1}{8} - \frac{\alpha}{3} \right) \Delta x^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{i+1/2} + O(\Delta x^3) \end{aligned} \quad (76)$$

Le choix de b a été fait de façon à pouvoir écrire les équations (75)-(76), sous la forme trouvée dans la littérature, pour les différences finies [18, 39].

De même pour le cas $u > 0$,

$$\phi_{i+(1/2)} = \frac{\phi_i + \phi_{i+1}}{2} - \frac{\alpha}{3} \left(\phi_{i-1} + \phi_{i+1} - 2\phi_i \right) + O(\Delta x^2) \quad (77)$$

et

$$\phi_{i-(1/2)} = \frac{\phi_i + \phi_{i-1}}{2} - \frac{\alpha}{3} \left(\phi_i + \phi_{i-2} - 2\phi_{i-1} \right) + O(\Delta x^2) \quad (78)$$

où, pour $\alpha = \frac{3}{8}$, on récupère le schéma **QUICK** de Leonard [68].

L'utilisation des équations (75)-(78) dans l'équation (29), amène à l'équation discrétisée:

$$\boxed{(a_P - \mathcal{J})\phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b} \quad (79)$$

où les coefficients sont donnés par:

$$a_E = M_e^+ \left[D_e - \left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{3} \right) F_e \right] + M_e^- \left[D_e - \left(\frac{1}{2} + \frac{2\alpha}{3} \right) F_e - \frac{\alpha}{3} F_w \right] \quad (80a)$$

$$a_W = M_w^+ \left[D_w + \left(\frac{1}{2} + \frac{2\alpha}{3} \right) F_w + \frac{\alpha}{3} F_e \right] + M_w^- \left[D_w + \left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{3} \right) F_w \right] \quad (80b)$$

$$a_N = M_n^+ \left[D_n - \left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{3} \right) F_n \right] + M_n^- \left[D_n - \left(\frac{1}{2} + \frac{2\alpha}{3} \right) F_n - \frac{\alpha}{3} F_s \right] \quad (80c)$$

$$a_s = M_s^+ \left[D_s + \left(\frac{1}{2} + \frac{2\alpha}{3} \right) F_s + \frac{\alpha}{3} F_n \right] + M_s^- \left[D_s + \left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{3} \right) F_s \right] \quad (80d)$$

$$a_P = \Theta(a_E + a_W + a_N + a_S) \quad (81)$$

$$a_P^o = \rho_P^o \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (82)$$

$$b' = S_C \Delta x \Delta y - \frac{\alpha}{3} \left[M_w^+ F_w \phi_{ww} + M_s^+ F_s \phi_{ss} - M_e^- F_e \phi_{ee} - M_n^- F_n \phi_{nn} \right] \quad (83)$$

$$b^o = S_C^o \Delta x \Delta y - \frac{\alpha}{3} \left[M_w^+ F_w^o \phi_{ww}^o + M_s^+ F_s^o \phi_{ss}^o - M_e^- F_e^o \phi_{ee}^o - M_n^- F_n^o \phi_{nn}^o \right] + \quad (84)$$

$$+ \left(a_E^o \phi_E^o + a_W^o \phi_W^o + a_S^o \phi_S^o + a_N^o \phi_N^o \right) - \left(a_E^o + a_W^o + a_S^o + a_N^o - \varphi^o \right) \phi_P^o$$

$$\varphi^o = - S_P^o \Delta x \Delta y - \frac{\alpha}{3} \left[M_e^+ F_e^o + M_n^+ F_n^o - M_w^- F_w^o - M_s^- F_s^o \right] \quad (85)$$

$$b = a_P^o \phi_P^o + \Theta b' + (1-\Theta) b^o \quad (86)$$

$$\varphi = a_P^o - \Theta \left\{ S_P \Delta x \Delta y + \frac{\alpha}{3} \left[M_e^+ F_e + M_n^+ F_n - M_w^- F_w - M_s^- F_s \right] \right\} \quad (87)$$

où,

$$M_i^+ = \frac{F_i + |F_i|}{2F_i}, \quad i = w, e, s, n \quad (88)$$

$$M_i^- = \frac{F_i - |F_i|}{2F_i}, \quad i = w, e, s, n \quad (89)$$

Sous cette forme, on voit que pour certaines valeurs de D et de F , on peut avoir des coefficients négatifs. En outre, il existe aussi la possibilité d'avoir une valeur de φ supérieure à zéro. Dans ce cas, on

n'est pas sûr de vérifier les quatre critères du paragraphe 3.3.3, lesquels assurent la stabilité dans l'espace [18, 47, 82, 90].

Pollard et Siu [90] ont réécrit les coefficients provenant du schéma **QUICK**, équations (81)-(88), de façon à le rendre stable. Ils l'ont appelé **QUICKER**.

On suit, ici, la même démarche que celle utilisée par Pollard et Siu [90], mais en gardant la variable α . On arrive donc à un schéma stable et d'ordre 2 ou 3 en Δx_1 , selon la valeur de α choisie.

La forme finale discrétisée **stable**, de l'équation (26), utilisant un schéma à 4 points pour les termes convectifs, est la suivante:

$$\boxed{(a_p - \varphi)\phi_p = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + b^*} \quad (90)$$

où les coefficients sont donnés par:

$$a_E = \left[\left(D_e + \zeta F_e \right), \left(D_e - \zeta F_e - \frac{\alpha}{3} F_w \right), \left(D_e - \zeta F_e \right), \left(D_e + \zeta F_e - \frac{\alpha}{3} F_w \right) \right] \quad (91a)$$

$$a_W = \left[\left(D_w - \zeta F_w \right), \left(D_w + \zeta F_w + \frac{\alpha}{3} F_e \right), \left(D_w + \zeta F_w \right), \left(D_w - \zeta F_w + \frac{\alpha}{3} F_e \right) \right] \quad (91b)$$

$$a_N = \left[\left(D_n + \zeta F_n \right), \left(D_n - \zeta F_n - \frac{\alpha}{3} F_s \right), \left(D_n - \zeta F_n \right), \left(D_n + \zeta F_n - \frac{\alpha}{3} F_s \right) \right] \quad (91c)$$

$$a_S = \left[\left(D_s - \zeta F_s \right), \left(D_s + \zeta F_s + \frac{\alpha}{3} F_n \right), \left(D_s + \zeta F_s \right), \left(D_s - \zeta F_s + \frac{\alpha}{3} F_n \right) \right] \quad (91d)$$

$$a_p = \Theta(a_E + a_W + a_N + a_S) \quad (92)$$

$$a_p^o = \rho_p^o \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (93)$$

$$b' = S_c \Delta x \Delta y - \frac{\alpha}{3} \left[M_w^+ F_w \phi_{ww} + M_s^+ F_s \phi_{ss} - M_e^- F_e \phi_{ee} - M_n^- F_n \phi_{nn} \right] - \chi \left[M_e^+ F_e \phi_E + M_n^+ F_n \phi_N - M_w^- F_w \phi_W - M_s^- F_s \phi_S \right] \quad (94)$$

$$\begin{aligned}
 b^{\circ} = & S_c^{\circ} \Delta x \Delta y - \frac{\alpha}{3} \left[M_w^+ F_w^{\circ} \phi_{ww}^{\circ} + M_s^+ F_s^{\circ} \phi_{ss}^{\circ} - M_e^- F_e^{\circ} \phi_{ee}^{\circ} - M_n^- F_n^{\circ} \phi_{nn}^{\circ} \right] - \\
 & - \chi \left[M_e^+ F_e^{\circ} \phi_E^{\circ} + M_n^+ F_n^{\circ} \phi_N^{\circ} - M_w^- F_w^{\circ} \phi_W^{\circ} - M_s^- F_s^{\circ} \phi_S^{\circ} \right] + \quad (95) \\
 & + \left(a_E^{\circ} \phi_E^{\circ} + a_W^{\circ} \phi_W^{\circ} + a_S^{\circ} \phi_S^{\circ} + a_N^{\circ} \phi_N^{\circ} \right) - \left(a_E^{\circ} + a_W^{\circ} + a_S^{\circ} + a_N^{\circ} - \mathcal{Y}^{\circ} \right) \phi_P^{\circ}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Y}^{\circ} = & - S_P^{\circ} \Delta x \Delta y - \frac{\alpha}{3} \left[M_w^+ F_w^{\circ} + M_s^+ F_s^{\circ} - M_e^- F_e^{\circ} - M_n^- F_n^{\circ} \right] - \quad (96) \\
 & - \chi \left[M_s^+ F_s^{\circ} + M_w^+ F_w^{\circ} - M_e^- F_e^{\circ} - M_n^- F_n^{\circ} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Y} = & a_P^{\circ} - \Theta \left\{ S_P^{\circ} \Delta x \Delta y + \frac{\alpha}{3} \left[M_w^+ F_w^{\circ} + M_s^+ F_s^{\circ} - M_e^- F_e^{\circ} - M_n^- F_n^{\circ} \right] \right\} - \quad (97) \\
 & - \Theta \left\{ \chi \left[M_s^+ F_s^{\circ} + M_w^+ F_w^{\circ} - M_e^- F_e^{\circ} - M_n^- F_n^{\circ} \right] \right\}
 \end{aligned}$$

$$b^* = a_P^{\circ} \phi_P^{\circ} + \Theta b' + (1-\Theta) b^{\circ} + \mathcal{Y} \phi_P^* \quad (98)$$

$$\mathcal{Y} = 0 \quad (99)$$

où ϕ^* est la valeur calculée à l'itération précédente et les variables ζ et χ sont données par:

$$\zeta = \left(\frac{3+4\alpha}{6} \right) \quad (100)$$

$$\chi = \left(\frac{6+4\alpha}{6} \right) \quad (101)$$

La décomposition du terme source retenue (équations (98) et (99)) assure que le critère III est vérifié. Les coefficients écrits sous la forme (91a)-(91d) vérifient les quatre critères énoncés antérieurement. Le schéma sous cette forme, est stable dans l'espace et le temps.

3.3.6.2-CONSISTANCE DU SCHEMA QUADRATIQUE

On passe maintenant, comme au paragraphe 3.3.5, à l'analyse de la consistance du schéma quadratique. On suit la même démarche déjà employée pour l'analyse du schéma implicite à trois points.

On évalue dans l'équation (26) les termes convectifs à l'aide des équations (77)-(78), les termes diffusifs en utilisant les équations (38) et (39) afin de pouvoir écrire l'équation discrétisée pour u et v positifs, sous la forme:

$$\begin{aligned}
\phi_{ij}^{k+1} - \phi_{ij}^k = & \Theta \left\{ \left[\left(\frac{3+4\alpha}{6} \right) C_w + \frac{\alpha}{3} C_e + D_x \right] \phi_{i-1j}^{k+1} - \left[\left(\frac{3-2\alpha}{6} \right) C_e - D_x \right] \phi_{i+1j}^{k+1} - \right. \\
& - \frac{\alpha}{3} C_w \phi_{i-2j}^{k+1} + \left[\left(\frac{3-2\alpha}{6} \right) (C_w + C_s) - \left(\frac{3+4\alpha}{6} \right) (C_e + C_n) - 2(D_x + D_y) \right] \phi_{ij}^{k+1} + \\
& + \left. \left[\left(\frac{3+4\alpha}{6} \right) C_s + \frac{\alpha}{3} C_n + D_y \right] \phi_{ij-1}^{k+1} - \left[\left(\frac{3-2\alpha}{6} \right) C_n - D_y \right] \phi_{ij+1}^{k+1} - \frac{\alpha}{3} C_s \phi_{ij-2}^{k+1} \right\} + \\
& + (1-\Theta) \left\{ \left[\left(\frac{3+4\alpha}{6} \right) C_w + \frac{\alpha}{3} C_e + D_x \right] \phi_{i-1j}^k - \left[\left(\frac{3-2\alpha}{6} \right) C_e - D_x \right] \phi_{i+1j}^k - \right. \\
& - \frac{\alpha}{3} C_w \phi_{i-2j}^k + \left[\left(\frac{3-2\alpha}{6} \right) (C_w + C_s) - \left(\frac{3+4\alpha}{6} \right) (C_e + C_n) - 2(D_x + D_y) \right] \phi_{ij}^k + \\
& + \left. \left[\left(\frac{3+4\alpha}{6} \right) C_s + \frac{\alpha}{3} C_n + D_y \right] \phi_{ij-1}^k - \left[\left(\frac{3-2\alpha}{6} \right) C_n - D_y \right] \phi_{ij+1}^k - \frac{\alpha}{3} C_s \phi_{ij-2}^k \right\}
\end{aligned} \tag{102}$$

où les nombres de Courant C , D_x et D_y sont définis comme au paragraphe 3.3.5.

On arrive à l'équation modifiée, correspondant à l'équation discrétisée (102), en développant d'abord en série de Taylor autour du point i, j et $k+1/2$, les variables ϕ évaluées aux points voisins. Ensuite on utilise l'équation (1), afin de pouvoir exprimer les dérivées par rapport au temps en fonction des dérivées par rapport aux coordonnées d'espace. Les vitesses sur les nœuds du maillage sont supposées être

constantes dans le développement.

On arrive donc à l'équation modifiée:

$$\begin{aligned}
 \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} &= (\Gamma'_x + \Gamma) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + (\Gamma'_y + \Gamma) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \Gamma'_{xy} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} - \\
 &- (\Theta - 0,5) \left[\left(\frac{u_w + u_e}{2} \right) \Gamma \Delta t + \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} \alpha \right) \rho \left(\frac{u_w - u_e}{2} \right) u_p \Delta x \Delta t \right] \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \\
 &- \rho \left\{ \left[\frac{3}{2} (u_w + u_e) + u_p \right] C_x^2 \frac{\Delta x^2}{24} + \rho \left(\frac{u_w + u_e}{2} - 2\alpha u_w \right) \frac{\Delta x^2}{6} \right\} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \quad (103) \\
 &- (\Theta - 0,5) \left[\left(\frac{v_s + v_n}{2} \right) \Gamma \Delta t + \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} \alpha \right) \rho \left(\frac{v_s - v_n}{2} \right) v_p \Delta y \Delta t \right] \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} - \\
 &- \rho \left\{ \left[\frac{3}{2} (v_s + v_n) + v_p \right] C_y^2 \frac{\Delta y^2}{24} + \rho \left(\frac{v_s + v_n}{2} - 2\alpha v_s \right) \frac{\Delta y^2}{6} \right\} \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} + \dots
 \end{aligned}$$

où,

$$\Gamma'_x = \Gamma_x^t + \Gamma_x^e = (\Theta - 0,5) \rho \left(\frac{u_w + u_e}{2} \right) C_x \Delta x + \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} \alpha \right) \rho \left(\frac{u_w - u_e}{2} \right) \Delta x \quad (104)$$

$$\Gamma'_y = \Gamma_y^t + \Gamma_y^e = (\Theta - 0,5) \rho \left(\frac{v_s + v_n}{2} \right) C_y \Delta y + \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} \alpha \right) \rho \left(\frac{v_s - v_n}{2} \right) \Delta y \quad (105)$$

Tout d'abord, on voit clairement que l'équation (103) est consistante avec les équations (1) et (3) lorsque Δx , Δy et Δt tendent vers zéro.

En outre, on peut constater que dans le cas de la méthode des différences finies ($u_p = u_w = u_e$ et $v_p = v_s = v_n$), appliquée à la résolution de l'équation non transitoire, il n'y a pas de diffusion numérique. C'est-à-dire que les coefficients de diffusion numérique sont nuls, $\Gamma'_x = \Gamma'_y = 0$. Pour cette méthode, une valeur de $\alpha = 0,5$ mène à un schéma de discretisation d'ordre 3. Cependant, une telle valeur n'implique pas,

nécessairement, le même résultat s'il s'agit de la méthode des volumes finis. Il s'applique au cas où l'on aurait $u_w \cong u_e$ et $v_s \cong v_n$. Autrement la valeur plus indiquée serait $\alpha=0,75$. Néanmoins, les essais numériques réalisés, montrent que les deux valeurs occasionnent des résultats presque identiques.

On montre ci-dessous, figure 3.8, les résultats du problème (70)-(72), utilisant cette fois le schéma quadratique. Les schémas **QUDS1**, **QUDS2** et **QUDS3**, correspondent aux valeurs suivants de la variable α (équation (103)): $\alpha=0,375$ (valeur originellement proposée par Leonard [68]), 0,5 et 0,75 respectivement. On remarque pourtant qu'aucun schéma, parmi les schémas présentés, ne reproduit la solution théorique. Il existe des schémas qui reproduisent la solution exacte, comme par exemple le **SUDS** de Raithby [94], mais ceci n'est réalisé que pour un angle de 45° . Néanmoins, un gain de précision est acquis avec l'introduction du schéma quadratique. On note aussi que les valeurs calculées, contrairement au schéma à trois points, ne se trouvent plus comprises entre 0 et 1.

Transport Convectif d'un scalaire
 Maillage: 21 X 21

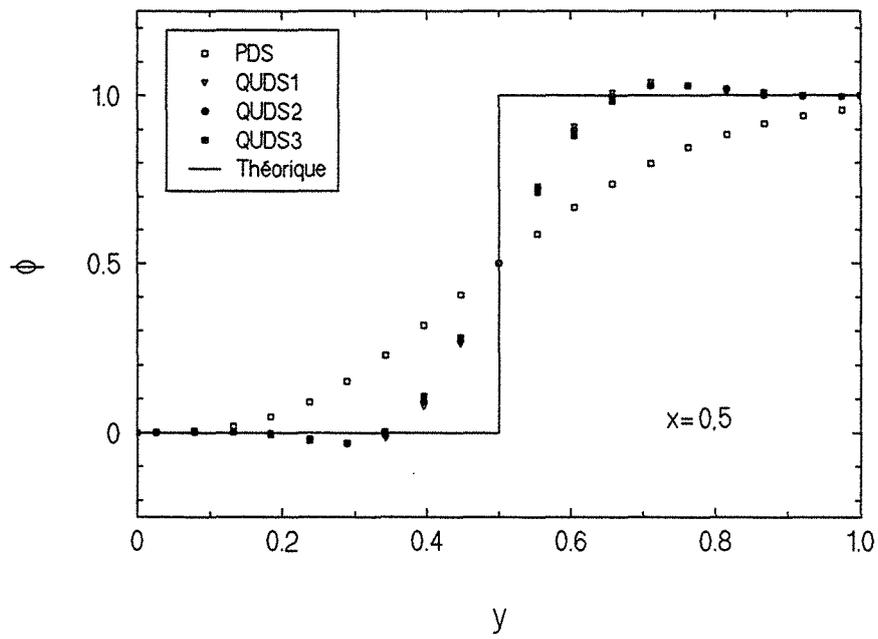


Figure 3.8 - Transport convectif d'un scalaire

3.4-ALGORITHME SIMPLE

Dans la résolution des équations de Navier-Stokes, il existe, en plus des termes transitoire, convectif et diffusif, un terme moteur qui est le gradient de pression:

$$\frac{\partial (\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_1 u_j)}{\partial x_1} = - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\mu \frac{\partial (u_j)}{\partial x_1} \right) + S_\phi \quad (106)$$

Le gradient de pression peut être considéré comme un terme source de l'équation (106).

Pour pouvoir résoudre l'équation (106), il faut connaître le champ de pression. Comme a priori on ne le connaît pas, puisqu'il dépend du champ de vitesses, on doit l'estimer numériquement. Malheureusement, il n'y a pas de façon bien déterminée pour le calculer. On utilisera, ici, l'algorithme **SIMPLE** (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) développé par Patankar et Spalding [78]. On va présenter, d'une façon résumée, l'algorithme mentionné ci-dessus. Les lecteurs désireux d'obtenir plus d'informations, pourront les trouver dans Patankar [80], Patankar et Spalding [78] et Patankar [81].

Le terme de gradient de pression de l'équation (106), peut être intégré sans difficulté sur le volume de contrôle de la figure 3.9. En ajoutant ce terme aux équations (41), (80) ou (91), pour $\phi=u_j$ et $\Gamma=\mu$, il vient:

$$a_p u_p = \sum_{vo} a_{vo} u_{vo} + b + \Delta p A_p \quad (107)$$

où par commodité de notation, on a écrit a_p au lieu de $(a_p - \mathcal{G})$. L'indice vo représente les voisins, Δp la différence de pression sur le volume de contrôle considéré et A_p la surface sur laquelle s'applique cette différence de pression.

On introduit, a priori, une estimation de la pression p^* . En résolvant les équations (107) on obtient alors, un champ de vitesse u^* qui ne vérifie pas l'équation de continuité. La procédure consiste alors à corriger le champ de pression estimé, de façon à ce qu'il vérifie l'équation de continuité et à fournir ainsi, le champ de vitesse solution des équations

du mouvement.

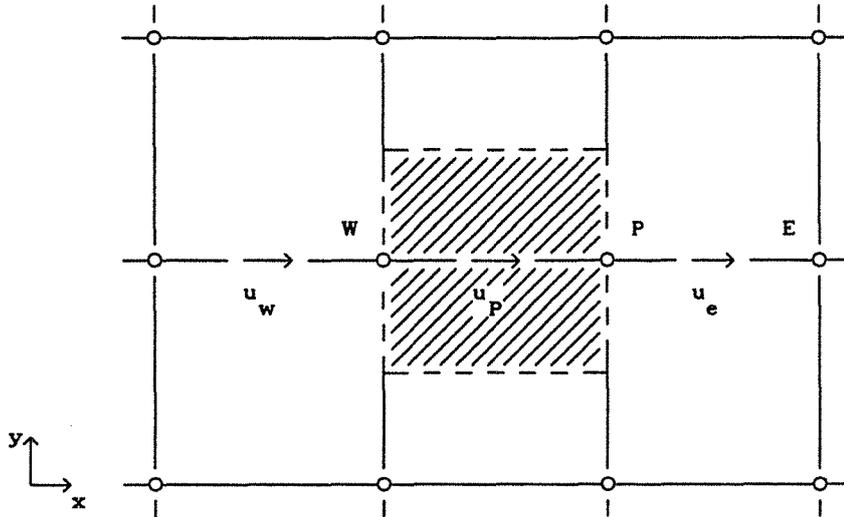


Figure 3.9 - Volume de contrôle pour la vitesse u

On écrit donc l'équation (107) pour u^* et p^* ,

$$a_p u_p^* = \sum a_{vo} u_{vo}^* + b + \Delta p^* A_p \quad (108)$$

La pression p et la vitesse u sont liées aux valeurs estimées par:

$$p = p^* + p' \quad (109)$$

$$u = u^* + u' \quad (110)$$

En soustrayant l'équation (107) de l'équation (108), il vient:

$$a_p u_p' = \sum a_{vo} u_{vo}' + \Delta p' A_p \quad (111)$$

Dans la suite, on considère qu'on peut négliger le terme $\sum a_{vo} u_{vo}'$, les conséquences de cette hypothèse sont discutées dans Patankar [80]. Donc, d'après (111),

$$u_p' = \left(\frac{A_p}{a_p} \right) \Delta p' \quad (112)$$

Une fois connue la correction de pression, on peut donc calculer la correction de vitesse. Le même raisonnement s'applique à la composante v du vecteur vitesse.

3.4.1-L'ÉQUATION DE CORRECTION DE PRESSION

L'équation de correction de pression, est issue de l'équation de continuité (3). En suivant le développement introduit dans les paragraphes précédents, on arrive à l'équation discrétisée de continuité,

$$\frac{(\rho_p - \rho_p^o)}{\Delta t} \Delta x \Delta y + [(\rho u)_e - (\rho u)_w] \Delta y + [(\rho v)_n - (\rho v)_s] \Delta x = 0 \quad (113)$$

où on a considéré que ρ ne varie pas en fonction de la pression et que la densité ρ_p prévaut sur tout le volume de contrôle. A partir des équations (109), (110) et (112), on arrive finalement à l'équation de correction de pression,

$$\boxed{a_p p'_p = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b} \quad (114)$$

où,

$$a_E = \rho_e \left(\frac{A_e}{a_e} \right) \Delta y \quad (115a)$$

$$a_W = \rho_w \left(\frac{A_w}{a_w} \right) \Delta y \quad (115b)$$

$$a_N = \rho_n \left(\frac{A_n}{a_n} \right) \Delta x \quad (115c)$$

$$a_S = \rho_s \left(\frac{A_s}{a_s} \right) \Delta x \quad (115d)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (116)$$

et

$$b = \frac{(\rho_P^o - \rho_P)}{\Delta t} \Delta x \Delta y + \left[(\rho u^*)_w - (\rho u^*)_e \right] \Delta y + \left[(\rho v^*)_s - (\rho v^*)_n \right] \Delta x \quad (117)$$

Les valeurs de ρ sur les faces du volume de contrôle sont déterminées par interpolation, à partir des valeurs connues sur les nœuds. On remarque, ici, que le terme b apparaissant dans l'équation (114) est l'équivalent, au signe près, de l'équation discrétisée de continuité. Il doit disparaître, quand le champ de vitesse vérifiera les équations discrétisées (107) et (113). Ceci peut être utilisé comme critère de convergence [80, 81].

L'algorithme **SIMPLE** se déroule suivant la séquence:

1. Estimer un champ de pression p^*
2. Résoudre les systèmes discrétisés pour la conservation de la quantité de mouvement. Le résultat étant u^* et v^* .
3. Résoudre l'équation de correction de pression, le résultat étant p' .
4. Calculer le nouveau champ de pression $p = p^* + p'$
5. Calculer les corrections de vitesses u' et v' et corriger les vitesses $u = u^* + u'$ et $v = v^* + v'$.
6. Résoudre éventuellement les équations discrétisées correspondant aux grandeurs scalaires ϕ_i .
7. Avec cette nouvelle valeur du champ de pression, faire $p^* = p$ et retourner en 2 jusqu'à obtenir la convergence.

3.5-RÉSOLUTION DU SYSTÈME ALGÈBRE

Ayant choisi les schémas de discrétisation amenant aux équations discrétisées (41), (79) et (90), il ne reste qu'à choisir la méthode de résolution du système algébrique. Les méthodes se divisent en deux: celles appelées directes et celles dites itératives. Quand il s'agit d'un système non-linéaire, on utilise une méthode itérative. L'idée est d'approcher la solution, par une séquence d'opérations successives, amenant à la solution exacte au bout d'un nombre théoriquement infini d'itérations. La méthode

directe, par contre, donne la solution exacte, après un nombre fini d'opérations.

Considérons le système linéaire d'équations algébriques, écrit sous la forme matricielle,

$$A\phi = S \quad (118)$$

où A est la matrice des coefficients, ϕ le vecteur des inconnues et S le vecteur représentant les termes non-homogènes. La méthode directe, préconise l'obtention de la solution par inversion de la matrice A, soit:

$$\phi = A^{-1}S \quad (119)$$

En pratique, le nombre d'opérations nécessaires pour inverser A peut être très élevé. En outre, les matrices des coefficients, issues de la discrétisation des équations aux dérivées partielles, sont des matrices bandes. Ceci favorise l'application d'une méthode itérative, plutôt que directe.

On cherche, donc, à remplacer la matrice A, par un autre opérateur, qui soit plus facile à inverser. Soit, d'une façon générale pour l'itération n

$$M\phi^{n+1} = S^n - N\phi^n \quad (120)$$

où l'on a remplacé A par la matrice (M+N). Les choix de M et N sont arbitraires, à condition que la méthode soit convergente et que la matrice M soit inversible. Le cas particulier où M=A et N=0, redonne la méthode directe.

3.5.1-ANALYSE DE CONVERGENCE DE LA MÉTHODE ITÉRATIVE

La méthode itérative est dite convergente, si l'erreur tend vers zéro au bout d'un nombre infini d'opérations. Soit $\bar{\phi}$ la solution exacte, alors l'erreur e^n à l'itération n est définie par:

$$e^n = \phi^n - \bar{\phi} \quad (121)$$

Si l'on soustrait du côté droit de l'équation (120), la relation $(M+N)\bar{\phi} - S$ et si l'on considère S indépendant de ϕ , il en résulte,

$$Me^{n+1} = -Ne^n \quad (122)$$

ou alors,

$$e^{n+1} = (-M^{-1}N)e^n = (-M^{-1}N)^n e^1 = (I-M^{-1}A)^n e^1 \quad (123)$$

où e^1 est l'erreur initiale et l'exposant n indique la puissance (n)ième de la matrice $(I-M^{-1}A)$.

La méthode itérative est convergente, si la matrice amplification G , $G=(I-M^{-1}A)$, est une matrice convergente [52]. C'est-à-dire, que le spectre de la matrice amplification vérifie:

$$\mathcal{R}(G) \leq 1 \quad (124)$$

où $\mathcal{R}(G)$ est le rayon spectral de la matrice G . Cette condition implique que toutes les valeurs propres de G doivent être inférieures ou égales à 1.

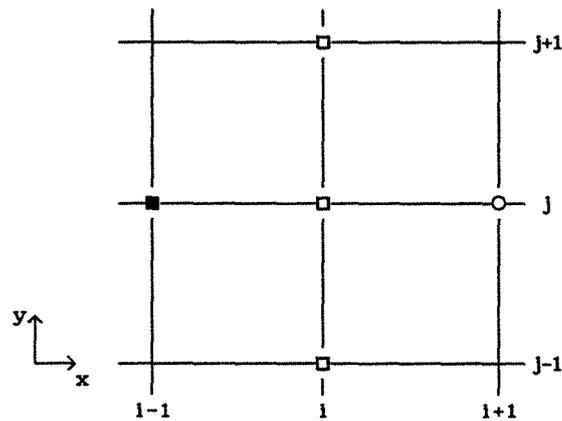
3.5.2-MÉTHODE DE GAUSS-SEIDEL LIGNE-À-LIGNE

On a vu qu'une fois vérifiée la condition (124), le choix de M et N est arbitraire. Une méthode possible est la méthode de Gauss-Seidel ligne-à-ligne [52]. L'avantage par rapport à la méthode point-à-point est que l'information en provenance des conditions aux limites est propagée plus rapidement. En plus, elle permet l'utilisation de l'algorithme de Thomas **TDMA** (TriDiagonal-Matrix Algorithm) pour la résolution du système tridiagonal le long de chaque ligne. Un balayage peut être réalisé: de la gauche vers la droite, du bas vers le haut et vice-versa, de façon à accélérer encore plus la propagation de l'information.

On va considérer, ici, le cas de la résolution le long d'une ligne verticale i du maillage (figure 3.10), soit:

$$a_{ij} \phi_{ij}^{n+1} = b_{ij} \phi_{ij+1}^{n+1} + c_{ij} \phi_{ij-1}^{n+1} + \left[d_{ij} \phi_{i+1j}^n + e_{ij} \phi_{i-1j}^{n+1} + f_{ij} \right] \quad (125)$$

où le terme entre crochets est considéré comme un terme non-homogène, lors de la résolution par TDMA, le long d'une ligne verticale. Les indices i et j se trouvent compris entre 1 et l et 1 et m respectivement, où l et m indiquent les nombres des nœuds dans les directions des l'axes OX et OY.



- Inconnu à l'iteration n+1
- Connu de l'iteration n
- Connu de l'iteration n+1

Figure 3.10 - Méthode ligne-à-ligne

En écrivant sous forme d'opérateur, on a pour le choix de M et N ,

$$M = D + V + H_I \quad (126)$$

$$N = H_S \quad (127)$$

La solution approchée pour ϕ^{n+1} à l'itération n est donnée par:

$$[D + V + H_I] \phi^{n+1} = S^n - H_S \phi^n \quad (128)$$

où D est une matrice diagonale par blocs,

$$D = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & D_2 & & & \cdot \\ \cdot & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & D_m \end{bmatrix} \quad (129)$$

où les matrices D_j sont données par,

$$D_j = \begin{bmatrix} a_{1j} & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & a_{2j} & & & \cdot \\ \cdot & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & a_{lj} \end{bmatrix} \quad (130)$$

H est une matrice diagonale par blocs, dans laquelle les éléments de la diagonale principale ont été enlevés. Les indices i et s qui portent sur H, dans l'équation (128), indiquent respectivement les éléments au-dessous et au-dessus de la diagonale,

$$H = \begin{bmatrix} H_1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & H_2 & & & \cdot \\ \cdot & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & H_m \end{bmatrix} \quad (131)$$

où,

$$H_j = \begin{bmatrix} 0 & -d_{1j} & \cdot & \cdot & 0 \\ -e_{2j} & 0 & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -d_{l-1j} \\ 0 & \cdot & \cdot & -e_{lj} & 0 \end{bmatrix} \quad (132)$$

et la matrice V contient les blocs hors de la diagonale,

$$V = \begin{bmatrix} 0 & V_{S1} & \cdot & \cdot & 0 \\ V_{I2} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & V_{Sm-1} \\ 0 & \cdot & \cdot & V_{Im} & 0 \end{bmatrix} \quad (133)$$

ou explicitement,

$$V_{IJ} = \begin{bmatrix} -c_{1j} & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & -c_{2j} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -c_{lj} \end{bmatrix} \quad (134)$$

$$V_{Sj} = \begin{bmatrix} -b_{1j} & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & -b_{2j} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -b_{lj} \end{bmatrix} \quad (135)$$

Chaque bloc $l \times l$, représente les coefficients de l'équation discrétisée (125), associés à une ligne horizontale j pour les blocs se trouvant sur la diagonale et ceux associés à une ligne verticale i , pour les blocs hors diagonale.

La matrice itération G , associée à la méthode de Gauss-Seidel ligne-à-ligne est d'après (123),

$$G = I - [D + V + H_I]^{-1}A \quad (136)$$

laquelle doit vérifier la condition $\mathcal{R}(G) \leq 1$. À partir des propriétés des matrices, on peut montrer [Stoer, 1980; Golub, 1983; Hirsch, 1988] que la méthode de Gauss-Seidel est convergente si la matrice A est à **diagonale dominante**. En principe, plus la matrice A est à diagonale dominante, plus la convergence est rapide [42]. Une matrice est dite à diagonale dominante

si $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ pour tous les i [42]. On voit que les critères duparagraphe 3.3.3, n'assurent pas toujours cette condition. Néanmoins, un critère appelé "faible" existe, dont l'énoncé est [116]:

"Si A est irréductible et

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \tag{137}$$

mais $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ pour au moins un i , la méthode de Gauss-Seidel converge."

La matrice A est dite irréductible si la solution du système $A\phi=S$, ne peut pas être obtenue à partir de la résolution de deux systèmes d'équations découplés [Varga, 1962].

Les critères du paragraphe 3.3.3, vérifient les conditions décrites ci-dessus, d'après Patankar [80].

Cependant, en pratique, on peut rencontrer des matrices G , ayant un rayon spectral proche de l'unité. Comme on a vu d'après (123), que l'erreur tend vers zéro suivant la valeur de $\mathcal{R}(G)^n$, on aura dans ce cas une convergence très lente [42]. On voit que les valeurs propres les plus petites sont amorties rapidement, tandis que celles proches de l'unité demeurent pour des valeurs très grandes du nombre d'itérations [52].

Afin de surmonter cette difficulté, on utilise les méthodes dites de relaxation, comme la SOR (Successive Overrelaxation) lors de l'application de la méthode de Gauss-Seidel [52]. La méthode est formulée de la façon suivante,

$$\overline{\phi}^{n+1} = \omega \overline{\phi}^{n+1} + (1+\omega)\phi^n \tag{138}$$

où $\overline{\phi}^{n+1}$ est la valeur obtenue en utilisant la méthode de Gauss-Seidel et ω le coefficient de relaxation.

En utilisant (138) en (128), il en résulte,

$$\boxed{[D + V + \omega H_I] \phi^{n+1} = \omega S^n + [(1-\omega)(D+V) - \omega H_S] \phi^n} \tag{139}$$

où pour la valeur $\omega=1$, on récupère la méthode de Gauss-Seidel ligne-à-ligne. Au lieu de (136), la matrice amplification est donnée dans ce cas par:

$$G = I - \omega[D + V \omega H_I]^{-1}A \quad (140)$$

Évidemment, le choix de ω est conditionné par la condition $\mathcal{R}(G) \leq 1$. La valeur optimale de ω n'est connue que dans certains cas classiques. L'effort de détermination du spectre de la matrice G peut être comparable, dans certains cas, à celui de la résolution du système algébrique (118). Par conséquent, la détermination de ω n'est pas toujours facile.

Jusqu'à présent, tous les résultats annoncés sont vérifiés dans le cas d'un système linéaire. Le cas du problème **non-linéaire**, peut être traité par linéarisation du système d'équations [52].

Soit le système non-linéaire,

$$A(\phi) = S \quad (141)$$

On utilise la méthode de Newton pour ϕ^{n+1} , en négligeant les termes d'ordre supérieur:

$$A(\phi^{n+1}) = A(\phi^n) + \left(\frac{\partial A}{\partial \phi} \right)_n \Delta \phi^n = S^n \quad (142)$$

avec $\Delta \phi^n = \phi^{n+1} - \phi^n$ et $(\partial A / \partial \phi)_n$ est évalué avec les valeurs de ϕ^n . De l'équation précédente, il résulte,

$$\left(\frac{\partial A}{\partial \phi} \right)_n \Delta \phi^n = R^n \quad (143)$$

où $R^n = S - A(\phi^n)$ est le résidu à l'itération n . Si l'on admet que l'équation (143) remplace l'équation (141) et si l'on utilise une méthode directe pour la résoudre [52], alors:

$$\bar{\phi} = \phi^n + \left(\frac{\partial A}{\partial \phi} \right)_n^{-1} R^n \quad (144)$$

d'où l'erreur,

$$e^n = \left(\frac{\partial A}{\partial \phi} \right)_n^{-1} R^n \quad (145)$$

Si maintenant on utilise une méthode itérative avec relaxation dans la résolution de l'équation (143) [52],

$$M\Delta\phi^n = \omega R^n \quad (146)$$

et l'erreur e^{n+1} peut être déterminée par:

$$e^{n+1} = e^n + \Delta\phi = \left[I - \omega M^{-1} \left(\frac{\partial A}{\partial \phi} \right) \right] e^n \quad (147)$$

Donc, dans le cas du système non-linéaire, la matrice amplification G est donnée par:

$$G = \left[I - \omega M^{-1} \left(\frac{\partial A}{\partial \phi} \right) \right] \quad (148)$$

et la méthode itérative est convergente si $\mathcal{R}(G) \leq 1$. En réalité, comme le jacobien de A par rapport à ϕ vaut A pour les systèmes linéaires, l'équation (148) est la plus générale pour une méthode itérative, utilisant l'opérateur M^{-1} , appliquée à un système linéaire ou non-linéaire. Excepté le cas où le jacobien peut être déterminé, une analyse sur la convergence de la méthode ne peut pas être réalisée.

3.5.3-CORRECTION PAR BLOCS

Une dernière technique, visant à accélérer la convergence de la méthode Gauss-Seidel ligne-à-ligne, est présentée. Il s'agit de la correction par blocs [Patankar, 1981]. L'idée consiste à corriger la solution ϕ_{ij}^* obtenue par résolution de l'équation discretisée (118), en lui additionnant une correction uniforme ϕ' . La correction est faite le long d'une ligne constante. On prend, comme exemple, le cas de la correction selon une ligne i constante:

$$\phi_{iJ} = \phi_{iJ}^* + \phi'_i \quad (149)$$

En remplaçant (149) dans (125), on déduit le système d'équations donnant la correction ϕ' :

$$\boxed{A_i \phi'_i = B_i \phi'_{i+1} + C_i \phi'_{i-1} + D_i} \quad (150)$$

avec,

$$A_i = \sum_j (a_{ij} - b_{ij} - c_{ij}) \quad (151a)$$

$$B_i = \sum_j d_{ij} \quad (151b)$$

$$C_i = \sum_j e_{ij} \quad (151c)$$

et,

$$D_i = \sum_j \left(b_{ij} \phi_{iJ+1}^* + c_{ij} \phi_{iJ-1}^* + d_{ij} \phi_{i+1J}^* + e_{ij} \phi_{i-1J}^* + f_{ij} - a_{ij} \phi_{iJ}^* \right) \quad (152)$$

On note que D_i représente la sommation des résidus pour le bloc en question. Donc, la correction ϕ' est sensée réduire ce résidu à zéro.

La même démarche peut être développée pour la correction selon une ligne j constante. L'équation (150) est résolue par la méthode de Gauss-Seidel ligne-à-ligne en employant l'algorithme TDMA¹.

3.5.4-CRITÈRE DE CONVERGENCE

En pratique, lorsqu'on ne connaît pas la solution du problème à résoudre, c'est le résidu qui est utilisé comme critère de convergence de la méthode. En général, on utilise un résidu normé $\|R\|$ et on considère que la convergence est atteinte quand cette norme décroît d'un certain ordre de

¹L'algorithme de Thomas est donné dans l'annexe II

grandeur. Dans ce travail on utilise la norme L_2 ,

$$\|R\|_2^n = \left[\sum R_{1j}^2 \right]^{1/2} \quad (153)$$

où $\| \cdot \|$ signifie la norme du résidu à l'itération n et,

$$R_{1j} = b_{1j} \phi_{1j+1} + c_{1j} \phi_{1j-1} + d_{1j} \phi_{1+1j} + e_{1j} \phi_{1-1j} + f_{1j} - a_{1j} \phi_{1j} \quad (154)$$

On arrête les itérations quand,

$$\frac{\|R\|_2^n}{\|N\|_2^{n-1}} \leq \varepsilon \quad (155)$$

où $\|N\|_2 = \sqrt{[\sum (a_{1j} \phi_{1j})^2]}$ est plus petit que le critère ε adopté.

La même procédure est utilisée, lors de la résolution du système d'équations (114) pour la correction de pression, ainsi que le suggère Van Doormaal et Raithby [122]. Le système d'équations est résolu jusqu'à vérification du critère suivant:

$$\frac{\|r\|_2^n}{\|r\|_2^0} \leq \gamma \quad (156)$$

où l'indice 0 indique que la norme est calculée à partir de la première estimation de la correction de pression et l'indice n à partir de sa valeur connue à une itération donnée n,

$$\|r\|_2 = \left[\sum (a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b_P - a_P p'_P)^2 \right]^{1/2} \quad (157)$$

et,

$$\|r\|_2^0 = \sqrt{[\sum (b_P)^2]} \quad (158)$$

La valeur de γ est comprise dans l'intervalle $0,05 \leq \gamma \leq 0,25$, d'après [122]. Ce critère, dans le cas de la résolution des équations de Navier-Stokes, est sensé conduire à une diminution du nombre d'itérations pour un même critère de convergence.

3.6-CONCLUSION

On a utilisé pour la réalisation de ce travail, deux codes de calcul: le **PDS** (Power Difference Scheme) utilisant le schéma **loi de puissance** pour le terme convectif et le **QUDS** (Quadratic Upstream Difference Scheme) employant un schéma **quadratique** pour le terme convectif.

L'avantage du premier, on a pu le constater, est sa simplicité, sa stabilité et sa convergence rapide. Son inconvénient provient de l'introduction de la **diffusion numérique**.

Le deuxième code, donne la possibilité d'avoir un schéma de discrétisation du terme convectif, d'ordre 2 ou 3 en Δx_i selon la valeur de la variable α . Le principal avantage est la diminution de l'erreur d'amplitude. Cependant, dans certains cas, on rencontre de très grandes difficultés de convergence. Ces difficultés sont dues, surtout, au choix du coefficient de relaxation ω . Dans l'avenir, une façon de diminuer ce problème, serait l'utilisation d'un algorithme adapté aux matrices pentadiagonales **PDMA** (PentaDiagonale-Matrix Algorithm) au lieu du **TDMA**. D'autres solutions sont envisageables, comme l'utilisation de techniques d'accélération: **SSOR** (Symmetric Successive Overrelaxation) associée à la technique d'accélération de **Chebyshev** ou celle du **Gradient Conjugué** ou même l'utilisation d'autres techniques itératives: **ADI** (Alternating Direction Implicit) ou la méthode **Multigrid** [Phillips et Schmidt, 1985; Fletcher, 1988; Hirsch 1988; Rhodes et Acharya, 1993].

CHAPITRE 4

PROBLÈME HYDRODYNAMIQUE

CHAPITRE 4

PROBLÈME HYDRODYNAMIQUE

4.1-INTRODUCTION

Avant de résoudre le problème de fermeture présenté au chapitre 2, qui permet de calculer le tenseur effectif de dispersion, il faut résoudre le problème hydrodynamique. Outre la nécessité de connaître le champ de vitesse, la volonté de traiter l'hydrodynamique dans un chapitre à part a été motivée par le désir de déterminer l'influence de la géométrie du milieu sur la perte de charge.

On peut constater dans la littérature [Eidsath et al, 1983; Coulaud, 1988; Edwards et al, 1990; Jaiswal, 1991] que les arrangements géométriques bidimensionnels réguliers du type en ligne, quinconce, hexagonal, etc., ne présentent pas une relation perte de charge-débit comparable à celle que l'on obtient pour des milieux réels. Pour cette raison, on étudiera quelques arrangements un peu plus "complexes" (**désordonnés**), afin de pouvoir les comparer aux arrangements "réguliers" (**ordonnés**) ainsi qu'aux milieux réels.

Dans ce chapitre, apparaît la notion de milieu spatialement périodique et de cellule unité. Les mêmes concepts seront utilisés dans les chapitres 5, 6 et 7.

La méthode numérique de résolution d'un problème avec des conditions aux limites périodiques est abordée. La même démarche sera adoptée par la suite, pour la résolution de "**problèmes de type périodique**".

Les codes de calcul développés sont validés à partir de cas tests trouvés dans la littérature.

4.2-QUELQUES NOTIONS D'HYDRODYNAMIQUE DES MILIEUX POREUX

D'après le travail de Dybbs et Edwards [34], qui ont étudié l'écoulement tridimensionnel des liquides au travers d'arrangements géométriques complexes, on peut définir quatre régimes d'écoulement dans un milieu poreux en fonction du nombre de Reynolds, défini par $Re = \frac{\rho U d}{\mu}$, où ρ est la masse volumique, μ la viscosité dynamique du fluide, d est une longueur caractéristique "microscopique" de la structure interne du milieu poreux (taille des pores) et U la vitesse moyenne macroscopique superficielle du fluide.

- $Re < 1$, Régime de Darcy

C'est le régime où l'écoulement est dominé par les forces de viscosité et la nature exacte de l'écoulement est déterminée par la géométrie locale. Pour un $Re \sim 1$, des couches limites commencent à se développer à proximité de la frontière solide des pores.

- $1-10 < Re < 150$, Régime Laminaire Inertiel

L'écoulement devient de plus en plus un écoulement de type couche-limite avec le développement d'un noyau inertiel à l'extérieur de la couche-limite. La relation perte de charge-débit devient alors non linéaire. Au fur et à mesure que le nombre de Reynolds augmente, les couches-limites s'amincissent, les noyaux inertiels augmentent. Ce régime persiste jusqu'à $Re \sim 150$.

- $150 < Re < 300$, Régime Laminaire Non-Permanent

Pour un $Re \sim 150$ on commence à observer des oscillations temporelles de l'écoulement au niveau des pores. Ces oscillations se propagent sous forme d'onde et sont caractérisées par des périodes, amplitudes et taux de croissance bien déterminés. Des vortex se forment à partir d'un nombre de Reynolds valant approximativement 250 et persistent jusqu'à un nombre de Reynolds ~ 300 .

- $300 < Re$, Régime Fortement Non-Permanent et Chaotique

Le régime est alors qualitativement turbulent. On observe un mélange du fluide de type turbulent et la perte de charge, pour des valeurs du nombre de Reynolds très élevées ($Re > \sim 1000$), présente un comportement asymptotique en devenant proportionnelle au carré de la vitesse moyenne.

Si l'on veut ne considérer que des régimes laminaires permanents, il faut se limiter à des écoulements ayant, comme limite supérieure, un nombre de Reynolds autour de 150.

4.3-ÉCOULEMENT DANS UN MILIEU POREUX PÉRIODIQUE

On doit donc résoudre les équations de Navier-Stokes, ayant comme domaine de résolution une cellule unité avec aux frontières des conditions aux limites périodiques. On ne traitera en ce qui concerne l'hydrodynamique que le cas bidimensionnel et le régime permanent.

4.3.1-ÉQUATIONS ADIMENSIONNELLES

On reprend les équations du mouvement, présentées au chapitre 2 et on les rend adimensionnelles en choisissant comme variables adimensionnelles,

$$U = \frac{u}{\nu} L \quad (1)$$

$$V = \frac{v}{\nu} L \quad (2)$$

$$P = \frac{(p + \rho\phi)}{\rho\nu^2} L^2 \quad (3)$$

$$X = \frac{x}{L} \quad (4)$$

$$Y = \frac{y}{L} \quad (5)$$

où ν est la viscosité cinématique du fluide, L la longueur de la cellule unité et ϕ la fonction potentielle définie par $\phi = -g \cdot r$ à une constante près, g étant l'accélération de la pesanteur et r le vecteur position.

Les équations adimensionnelles du mouvement sont alors données par:

-Équation de continuité

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (6)$$

-Équations de Navier-Stokes

$$U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial X} \quad (7)$$

$$U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial Y} \quad (8)$$

4.3.2-CONDITIONS AUX LIMITES

Dans le déroulement de ce travail, deux cas d'écoulement périodique sont envisagés. Le premier cas est celui d'une cellule rectangulaire d'axes OX et OY, symétrique par rapport à l'un des axes (que l'on choisira être l'axe OX) et d'un écoulement moyen parallèle à cet axe OX. On a alors affaire à des conditions aux limites périodiques en x. Le second cas est le cas général en géométrie bidimensionnelle valable quelle que soit la géométrie de la cellule-unité (rectangulaire) et quelle que soit la direction de l'écoulement. Les conditions de périodicité doivent alors être exprimées suivant les deux directions d'espace.

Lors du premier cas, figure 4.1, les conditions aux limites s'écrivent:

$$U(X, Y) = U(X+1, Y) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (9a)$$

$$\frac{\partial U(X, Y)}{\partial X} = \frac{\partial U(X+1, Y)}{\partial X} \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (9b)$$

$$V(X, Y) = V(X+1, Y) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (10a)$$

$$\frac{\partial V(X, Y)}{\partial X} = \frac{\partial V(X+1, Y)}{\partial X} \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (10b)$$

$$\frac{\partial U}{\partial n} = 0 \quad \text{sur } A_{\beta s} \quad (11)$$

$$V = 0 \quad \text{sur } A_{BS} \quad (12)$$

et

$$U = V = 0 \quad \text{sur } A_{BS'} \quad (13)$$

où A_{Be} est la surface d'entrée et de sortie de la phase fluide, A_{BS} la surface sur laquelle on a des conditions de symétrie et $A_{BS'}$ la surface du solide.

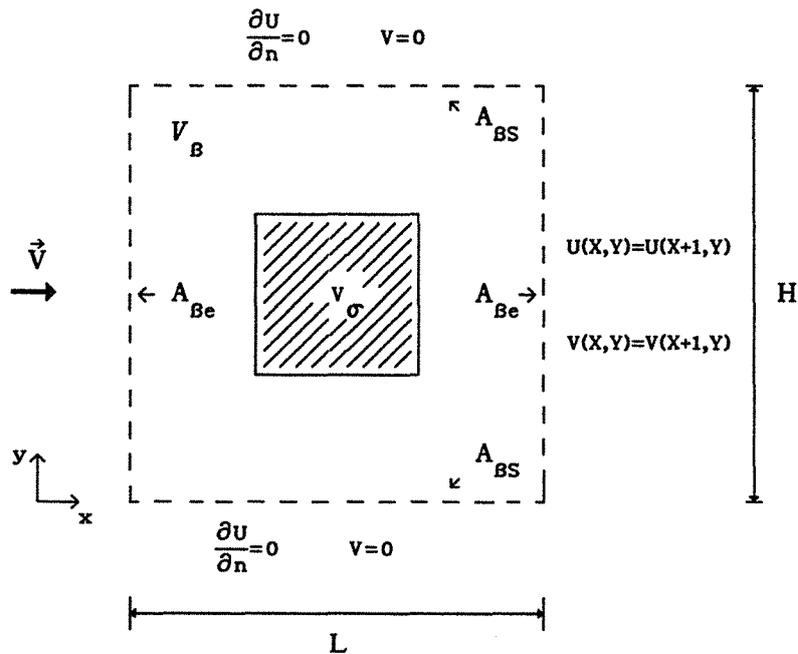


Figure 4.1 - Écoulement périodique dans la direction de l'axe OX

Dans le deuxième cas l'écoulement est périodique dans les deux directions d'espace, figure 4.2. Les conditions aux limites s'écrivent:

$$U(X,Y) = U(X+1,Y) \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (14a)$$

$$\frac{\partial U(X,Y)}{\partial X} = \frac{\partial U(X+1,Y)}{\partial X} \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (14b)$$

$$V(X,Y) = V(X+1,Y) \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (15a)$$

$$\frac{\partial V(X, Y)}{\partial X} = \frac{\partial V(X+1, Y)}{\partial X} \quad \text{sur } A_{Be_x} \quad (15b)$$

$$U(X, Y) = U(X, Y + \frac{H}{L}) \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (16a)$$

$$\frac{\partial U(X, Y)}{\partial Y} = \frac{\partial U(X, Y + \frac{H}{L})}{\partial Y} \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (16b)$$

$$V(X, Y) = V(X, Y + \frac{H}{L}) \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (17a)$$

$$\frac{\partial V(X, Y)}{\partial Y} = \frac{\partial V(X, Y + \frac{H}{L})}{\partial Y} \quad \text{sur } A_{Be_y} \quad (17b)$$

et

$$U = V = 0 \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (18)$$

où A_{Be_x} et A_{Be_y} désignent les surfaces d'entrée et sortie du liquide, suivant les directions des axes respectivement x et y .

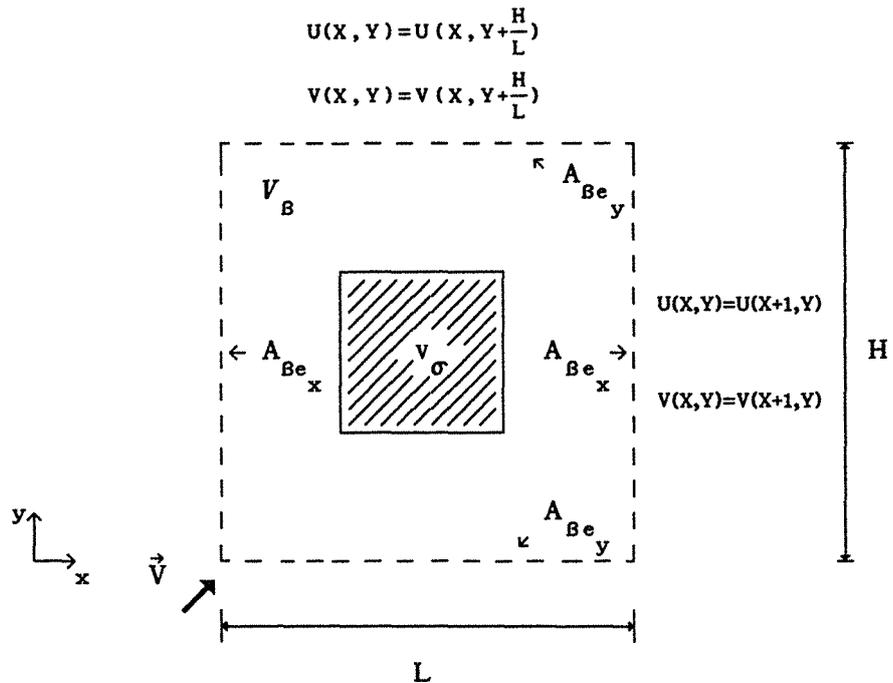


Figure 4.2 - Écoulement périodique dans les directions OX et OY

4.4-MÉTHODE DE RÉOLUTION DE L'ÉCOULEMENT PÉRIODIQUE

L'étape suivante consiste à proposer une méthode de résolution des équations (6)-(8) avec des conditions aux limites périodiques, équations (9)-(13) ou (14)-(18).

Une première possibilité est celle proposée par Patankar, Liu et Sparrow [79] en 1977, qui préconise une décomposition de la pression. La pression est alors la somme d'une partie linéaire et d'une partie périodique. Dans le cas d'un écoulement périodique dans la direction de l'axe OX:

$$P(X,Y) = -\beta X + \mathcal{P}(X,Y) \quad (19)$$

où β est une constante liée au débit massique et \mathcal{P} est la partie périodique de la pression. La partie linéaire introduit un terme source dans l'équation (7). Lors de la résolution, on considère des conditions de périodicité en U, V et \mathcal{P} . Cela permet l'utilisation des techniques de résolution développées pour des matrices cycliques, comme par exemple la méthode TDMA cyclique [79]. On peut citer, parmi d'autres, les travaux de Eidsath et al [35], Kelkar et Patankar [58] et Webb et Ramadhyani [124] comme exemples d'utilisation de cette technique. Tous ces travaux ne concernent que l'écoulement périodique dans une seule direction d'espace.

Une autre possibilité est d'imposer un débit massique à partir d'un profil initial de vitesse au lieu d'imposer le gradient de pression. La pression n'est donc pas décomposée.

Plus précisément, la technique ajoute au domaine de résolution, une colonne supplémentaire de volumes de contrôle correspondant à la cellule voisine. On peut mieux le comprendre si l'on regarde la figure 4.3.

Du fait des conditions de périodicité, la colonne rajoutée correspond ainsi à la première colonne du domaine de résolution. En outre, comme on utilise un maillage décalé pour la vitesse (paragraphe 3.3, chapitre 3) les vitesses que se trouvent sur la ligne EF doivent être les mêmes que celles se trouvant sur la ligne AB. De même pour celles qui se trouvent sur les lignes CD et GH.

La méthode démarre par le choix d'un profil de vitesse en AB, on impose ainsi un débit à l'entrée de la cellule. Ensuite on calcule les

vitesse sur tous les nœuds du domaine de résolution en utilisant les méthodes numériques décrites au chapitre 3. Une fois les vitesses connues, on remplace celles sur la ligne AB par celles en EF et les vitesses en GH par celles obtenues en CD . Avant de poursuivre on utilise l'équation de continuité afin de corriger les vitesses sur la frontière, de façon à avoir toujours le même débit. Les composantes v du vecteur vitesse, en AB et GH , sont calculées par interpolation linéaire ou quadratique (schéma à trois points ou à quatre points) à partir des vitesses connues aux nœuds $n, n+1, 1$ et 2 respectivement.

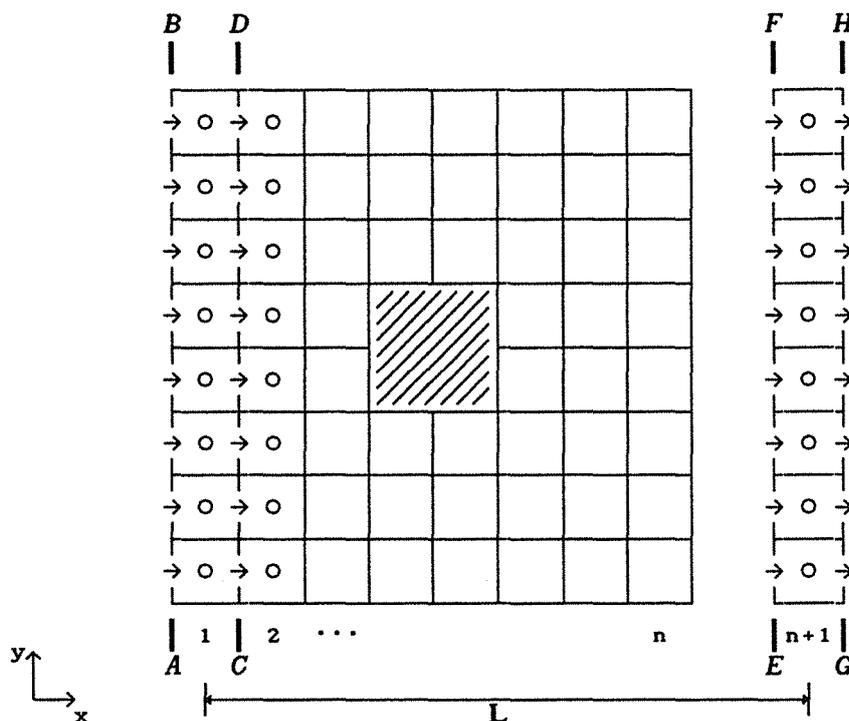


Figure 4.3 - Écoulement périodique dans la direction OX

Mis à part quelques détails, cette technique est celle employée par Amano [3], Amano et al [4], Pang, Tao et Zhang [77] et Xin et Tao [131]. Comme précédemment ils n'ont traité que l'écoulement périodique dans une seule direction de l'espace.

Il faut remarquer ici que le solide fait partie du domaine de résolution. Le solide est simulé en prenant une valeur très grande pour la viscosité des nœuds en question. Cette démarche est tout à fait correcte puisqu'on utilise une moyenne harmonique pour le calcul des coefficients de

transport Γ introduits au chapitre 3 (ici $\Gamma=\mu$), sur les faces d'un volume de contrôle. Cette procédure, détaillée dans Patankar [80], permet de traiter le cas de grandes discontinuités en Γ . Traiter le solide de cette façon donne une grande souplesse au code numérique, puisqu'on peut placer aisément le solide où l'on veut dans le domaine de résolution.

La même technique a été étendue au cas de l'écoulement périodique dans deux directions d'espace. Par rapport au cas précédent, on rajoute cette fois deux lignes et deux colonnes de volumes de contrôle, comme le montre la figure 4.4.

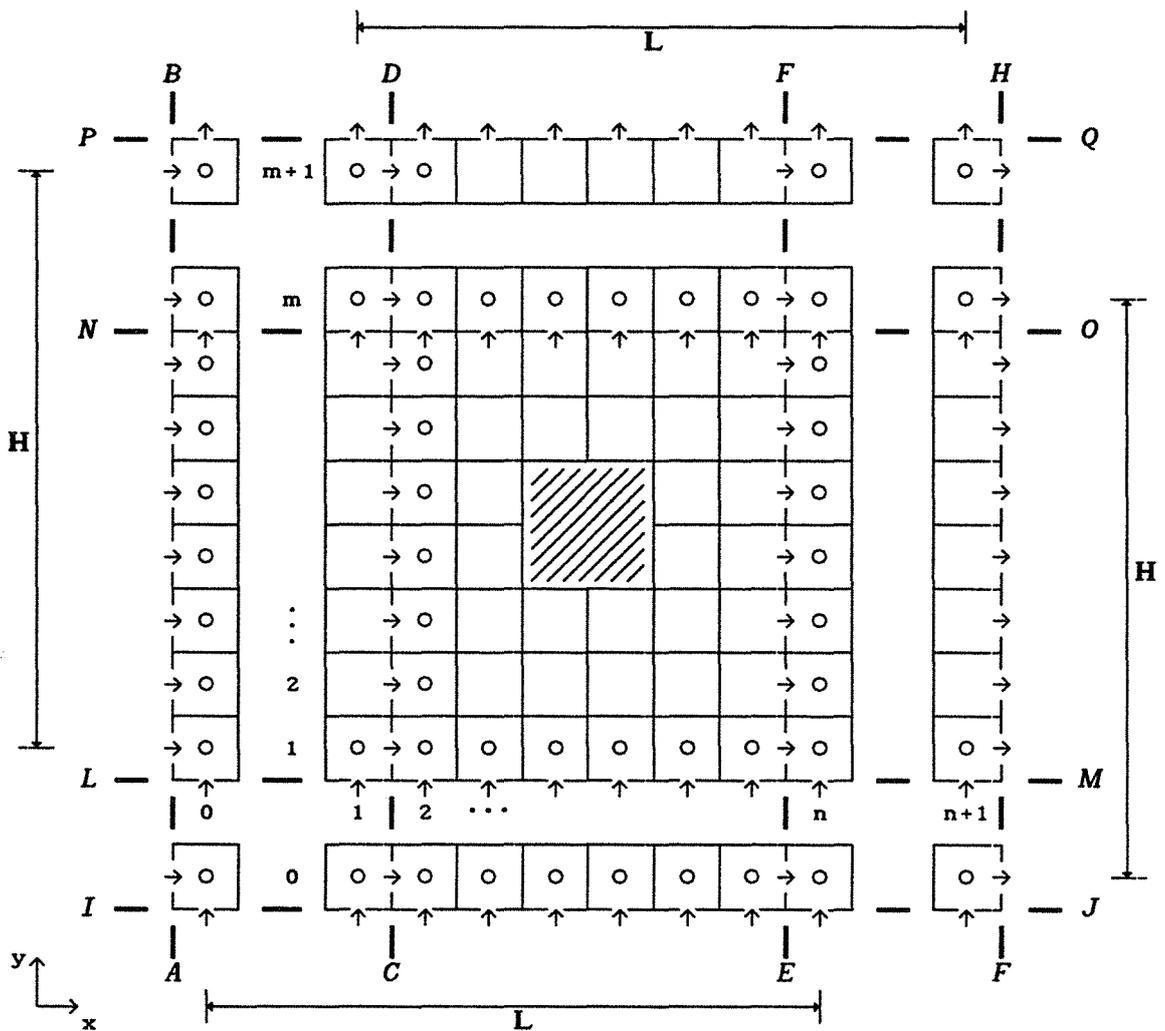


Figure 4.4 - Écoulement périodique dans les directions OX et OY

Les débits d'entrée en AB et IJ sont donnés par le choix d'un profil de vitesse initial. À chaque itération, les conditions de périodicité

permettent de remplacer les vitesses en AB par celles calculées en EF et les vitesses à la sortie du domaine de solution en FH par celles calculées en CD . Dans l'autre direction de l'espace, de façon analogue, on remplace les vitesses à l'entrée IJ par les vitesses que se trouvent sur la ligne NO et à la sortie PQ par celles se trouvant sur la ligne LM . Les profils de vitesse sont corrigés, dans les deux directions, afin d'assurer les mêmes débits d'entrée et de sortie. La procédure est poursuivie jusqu'à obtenir la convergence. Les composantes v sur les sections AB et FH , ainsi que les composantes u en IH et PQ , sont calculées par interpolation linéaire ou quadratique (schéma à trois points ou à quatre points) à partir des valeurs connues sur les nœuds voisins.

4.5-VALIDATION DU CODE NUMÉRIQUE

Maintenant le code numérique va être testé dans deux situations. La première est un cas devenu classique pour la validation des codes numériques [Burggraf, 1966; Han et al, 1981; Pollard et Siu, 1982; Huang et al, 1985; Phillips et Schmidt, 1985; Patel et Markatos, 1985; Miller et Schmidt, 1988]. C'est celui de l'écoulement à l'intérieur d'une cavité. L'autre cas, plus simple à résoudre, permet l'utilisation des conditions aux limites du type périodique, décrites au paragraphe précédent. Il s'agit de l'écoulement entre deux plans parallèles.

Le but est de vérifier l'exactitude des solutions, par rapport à celles trouvées dans la littérature.

4.5.1-ÉCOULEMENT À L'INTERIEUR D'UNE CAVITÉ

Il s'agit de calculer le champ de vitesse d'un fluide contenu dans une cavité carrée, et mis en mouvement sur sa face supérieure avec une vitesse constante U_p , comme le montre la figure 4.5.

On résout donc les équations de continuité et de Navier-Stokes (6)-(8) avec les conditions aux limites:

$$U = U_p \quad \text{en } Y = 1 \quad (20)$$

$$U = V = 0 \quad \text{sur le solide} \quad (21)$$

Les résultats ont été obtenus pour un nombre de Reynolds $Re = \rho U_P L / \mu = 400$. On a utilisé deux maillages: un de 30×30 et un autre de 60×60 volumes de contrôle et comme critère de convergence (paragraphe 3.5.4, chapitre 3) $\epsilon = 1,0 \cdot 10^{-5}$. Le calcul a été réalisé en utilisant les 3 schémas de discrétisation du terme convectif; à savoir: le PDS (Power Difference Scheme) et deux schémas quadratiques QUDS (Quadratic Upstream Difference Scheme) : QUDS1 et QUDS2. Le premier (PDS) correspond à une valeur de α défini par l'équation (40) du chapitre 3, les deux autres (QUDS) à une valeur de α égale à 0,375, et 0,5 respectivement (paragraphe 3.3.5.1, chapitre 3).

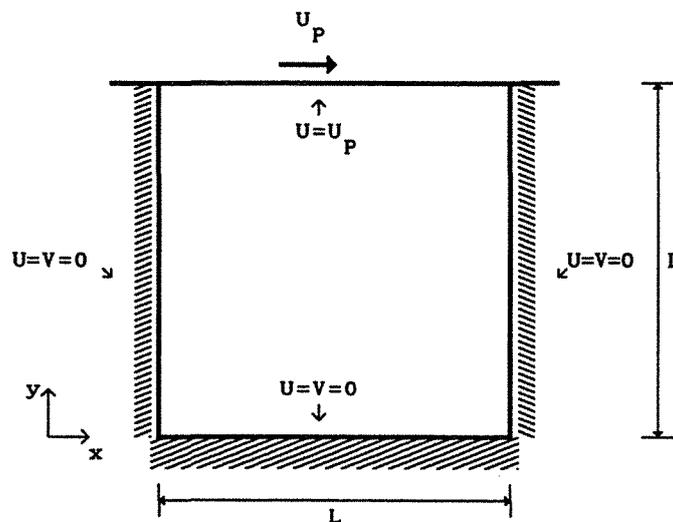


Figure 4.5 - Cavité carrée

La figure 4.6 montre, à titre d'illustration, le champ des vecteurs vitesses, à l'intérieur de la cavité, obtenu avec le schéma QUDS2 et un maillage de 60×60 volumes de contrôle.

La figure 4.7 présente le profil de vitesse U , pour une section qui se trouve en $X=L/2$. Le profil de vitesse V , correspondant à une section $Y=L/2$, est montré sur la figure 4.8. Les résultats obtenus avec un maillage de 30×30 volumes de contrôle et utilisant les schémas QUDS1 et QUDS2, présentent une très bonne concordance avec ceux trouvés¹ par Han et al [47]

¹Valeurs obtenues par interpolation graphique.

et Pollard et Siu [90]. Les premiers ont utilisé un maillage de 22 X 22 volumes de contrôle, tandis que Pollard et Siu en ont employé un de 30 X 30. Cependant, les résultats obtenus avec le schéma **PDS**, comme on devait s'y attendre, diffèrent de façon significative des deux autres schémas.

Les mêmes profils de vitesse ont été obtenus, avec un maillage de 60 X 60 volumes de contrôle. Ces résultats sont confrontés à ceux de Miller et Schmidt [72], obtenus avec un maillage de 66 X 66 volumes de contrôle, figures 4.9 et 4.10. Comme dans le cas précédent, les résultats issus des schémas **QUDS1** et **QUDS2** vérifient bien leurs résultats. Les profils sont identiques pour les deux schémas en question. Le schéma **PDS** présente des profils de vitesse différents des autres schémas. On peut néanmoins remarquer que cette fois, ils diffèrent de façon moins significative. On peut espérer que la diffusion numérique soit de moins en moins importante, au fur et à mesure qu'on augmente le maillage [80].

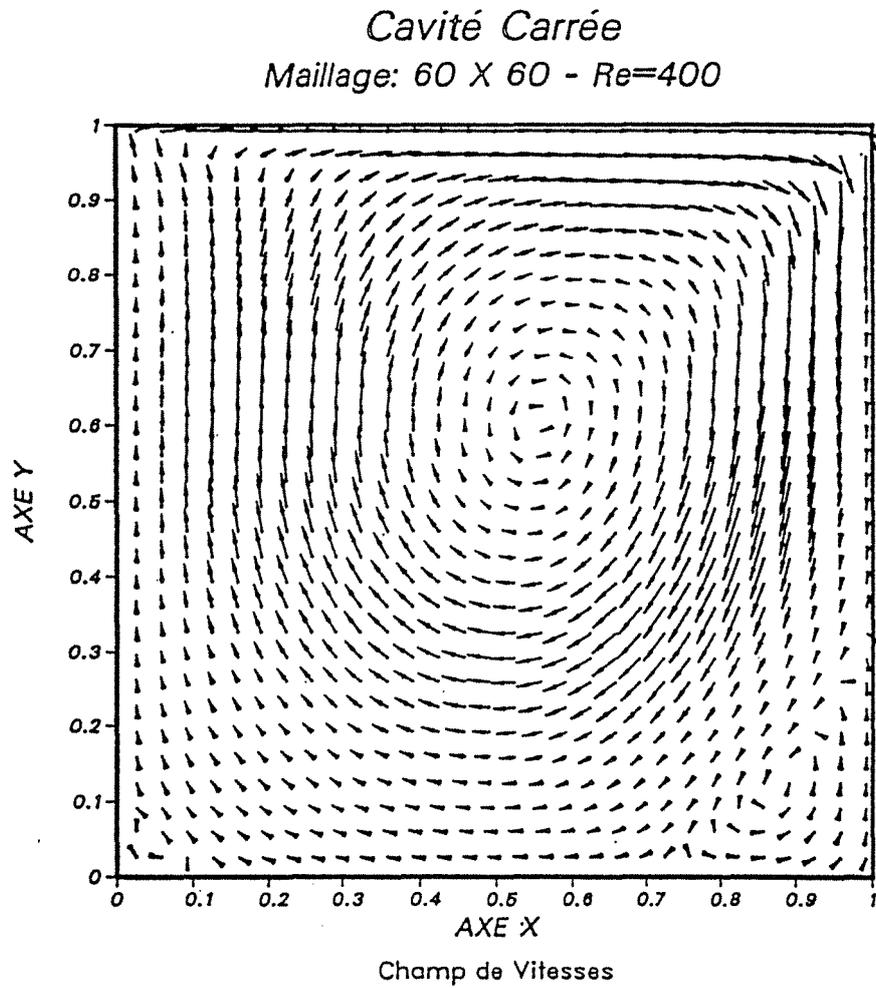


Figure 4.6 - Écoulement laminaire dans une cavité carrée - $Re=400$

Écoulement Laminaire dans une Cavité Carrée

Maillage: 30 X 30

Re= 400

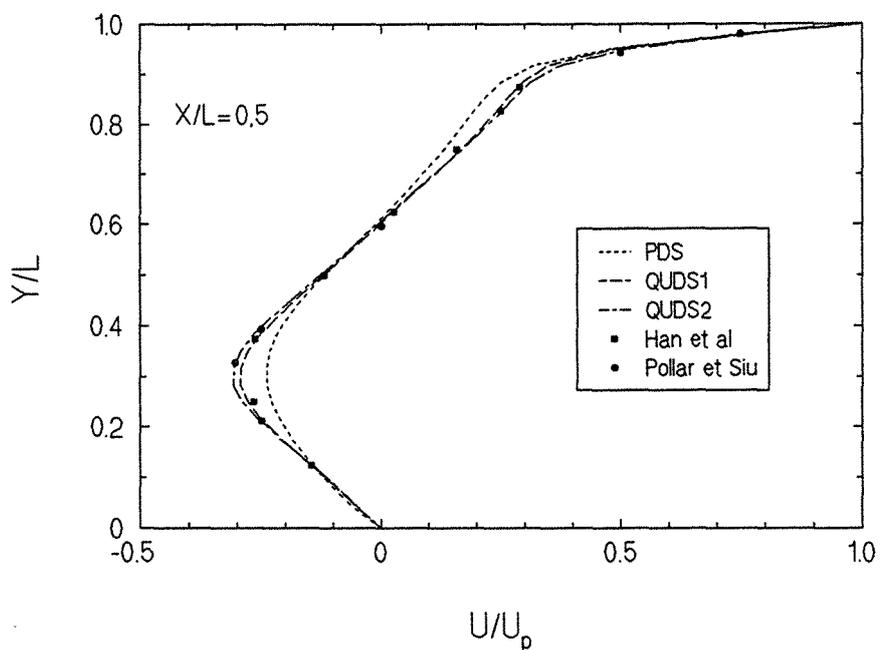


Figure 4.7 - Cavité carrée - profil de vitesse U - X/L=0,5

Écoulement Laminaire dans une Cavité Carrée

Maillage: 30 X 30

Re= 400

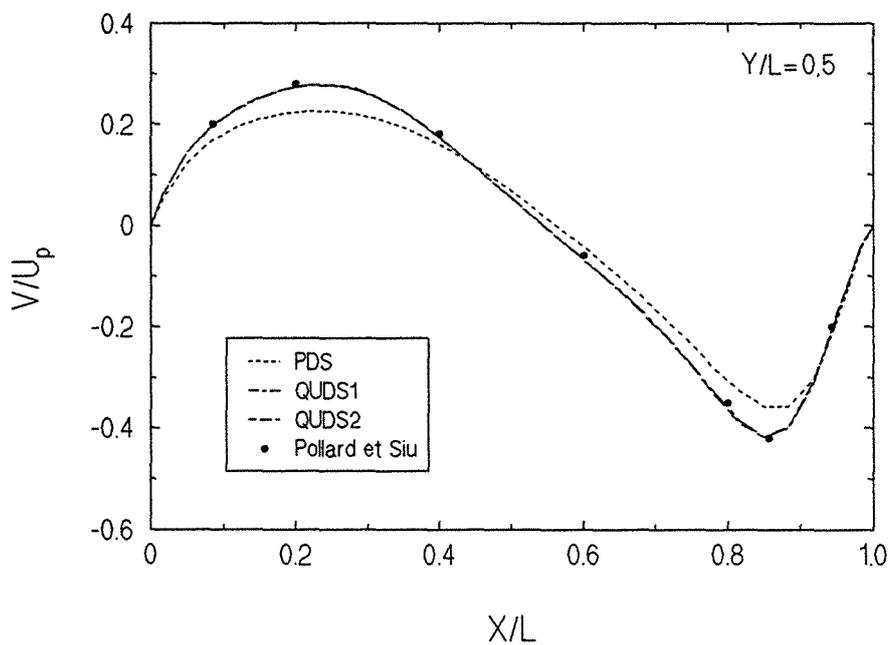


Figure 4.8 - Cavité carrée - profil de vitesse V - Y/L=0,5

Écoulement Laminaire dans une Cavité Carrée

Maillage: 60 X 60

Re= 400

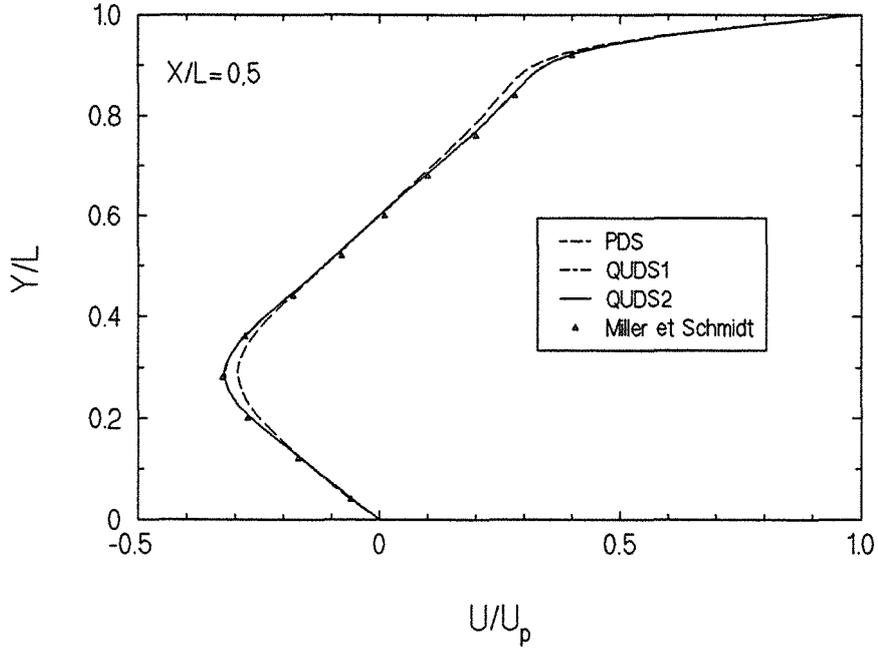


Figure 4.9 - Cavité carrée - profil de vitesse U - X/L=0,5

Écoulement Laminaire dans une Cavité Carrée

Maillage: 60 X 60

Re= 400

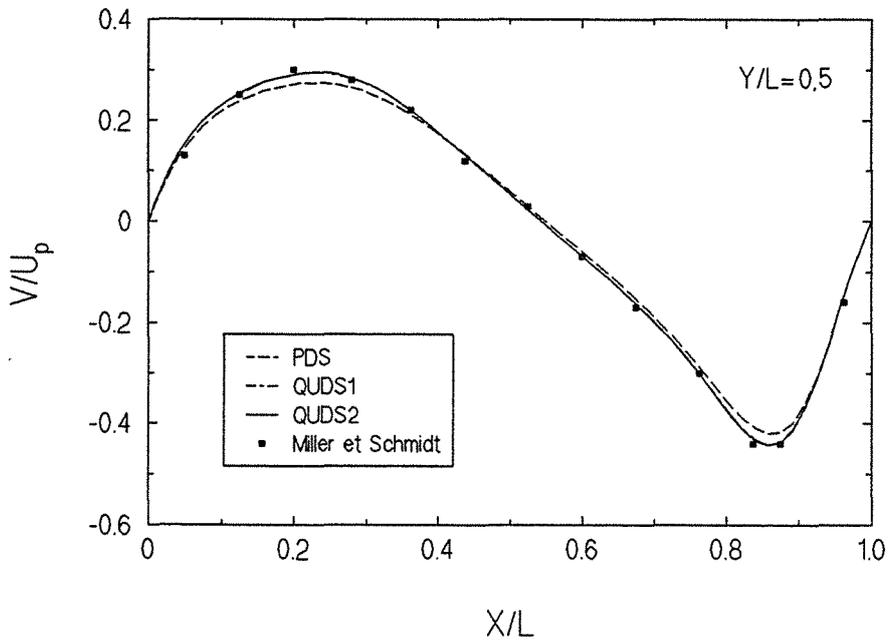


Figure 4.10 - Cavité carrée - profil de vitesse V - Y/L=0,5

4.5.2-ÉCOULEMENT ENTRE DEUX PLANS PARALLÈLES

Pour la résolution de l'écoulement établi, entre deux plans parallèles, on a utilisé la première technique de résolution d'un écoulement périodique décrite au paragraphe 4.4 du présent chapitre. Du point de vue numérique, ce cas est plus facile à résoudre que celui de la cavité, puisqu'on n'a pas de recirculation de fluide. Néanmoins, il rend possible la validation de la technique mise au point pour la résolution des écoulements périodiques.

La solution analytique de l'écoulement établi entre deux plans parallèles, ou écoulement de Couette, est bien connue et donnée par [106]:

$$U = -6 \langle U \rangle^B \left(Y^2 - Y \right) \tag{22}$$

où $\langle U \rangle^B$ est la vitesse moyenne du fluide. L'équation (22) est écrite sous sa forme adimensionnelle, paragraphe 4.3.1.

Le calcul démarre à partir d'un profil de vitesse constante U_0 , imposé à l'entrée, comme on peut le voir sur la figure 4.11. Le profil initial impose le débit Q . Ensuite on applique la technique de résolution de l'écoulement périodique, jusqu'à avoir le même profil de vitesse à l'entrée et à la sortie du domaine de résolution.

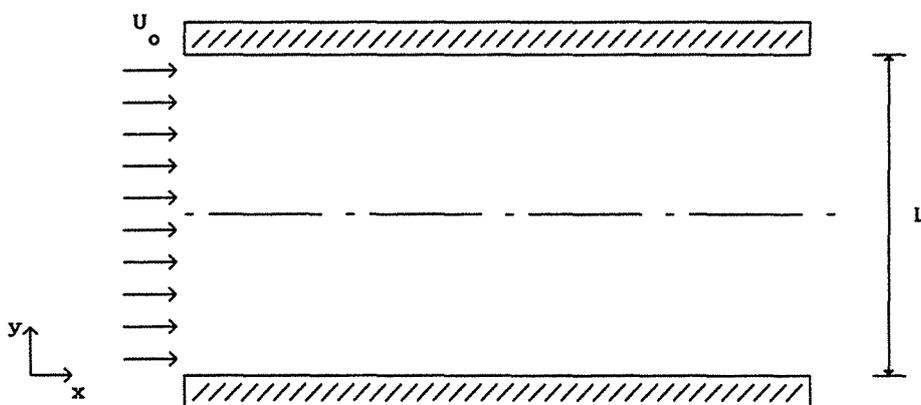


Figure 4.11 - Écoulement entre deux plans parallèles

La figure 4.12 montre le profil de vitesse obtenu avec un maillage de 10 X 30 volumes de contrôle et un critère de convergence $\varepsilon=1,0 \cdot 10^{-8}$. Les résultats correspondent à un Reynolds de 150 où le nombre de Reynolds est défini par $Re=U_{\max} L/\nu$, U_{\max} étant la vitesse maximale de l'écoulement, correspondant à $Y=L/2$. Les quatre schémas, à savoir: QUDS1, QUDS2, QUDS3 et PDS, donnent le même résultat et une très bonne concordance avec la solution analytique. La solution numérique donne un gradient de pression adimensionnel qui vaut 1197 à comparer avec la valeur analytique de 1200.

4.6-PERTE DE CHARGE ET PERMÉABILITÉ

Historiquement, on doit à Darcy en 1856 l'introduction de la notion de perméabilité. La perméabilité permet de relier le vecteur vitesse de filtration $\langle u \rangle$ et le vecteur gradient de pression ∇p , pour l'écoulement au travers d'un milieu poreux. Cette loi n'est valable que pour des écoulements à faible vitesse, c'est-à-dire en régime de Stokes. Pour un milieu anisotrope où ces deux vecteurs, dans le cas général, ne sont pas nécessairement parallèles, la loi de Darcy est donnée par:

$$\nabla \langle p \rangle^B = - \mu K^{-1} \langle u \rangle \quad (23)$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide et K le tenseur perméabilité intrinsèque du deuxième ordre. Le tenseur K dépend uniquement des propriétés géométriques de la matrice solide qui constitue le milieu poreux.

Il est intéressant de mentionner, ici, qu'à partir de l'équation de transport moyennée (53) du chapitre 2, on peut déduire la loi de Darcy (23) à partir des équations de Stokes. Le développement théorique, conduisant à la loi de Darcy, à partir de la prise de moyenne de l'équation de continuité et de Stokes, peut être trouvé dans Whitaker [128].

La loi de Darcy peut aussi être obtenue, à partir de l'équation de continuité et de Stokes, par la méthode d'homogénéisation [100]. Il s'agit d'appliquer la méthode à un écoulement en régime de Stokes, au travers d'un arrangement géométrique périodique. Cette démarche a été introduite par Sanchez-Palencia en 1980. Ultérieurement, Wodie et Lévy [130] ont utilisé la méthode de l'homogénéisation pour apporter des corrections non linéaires

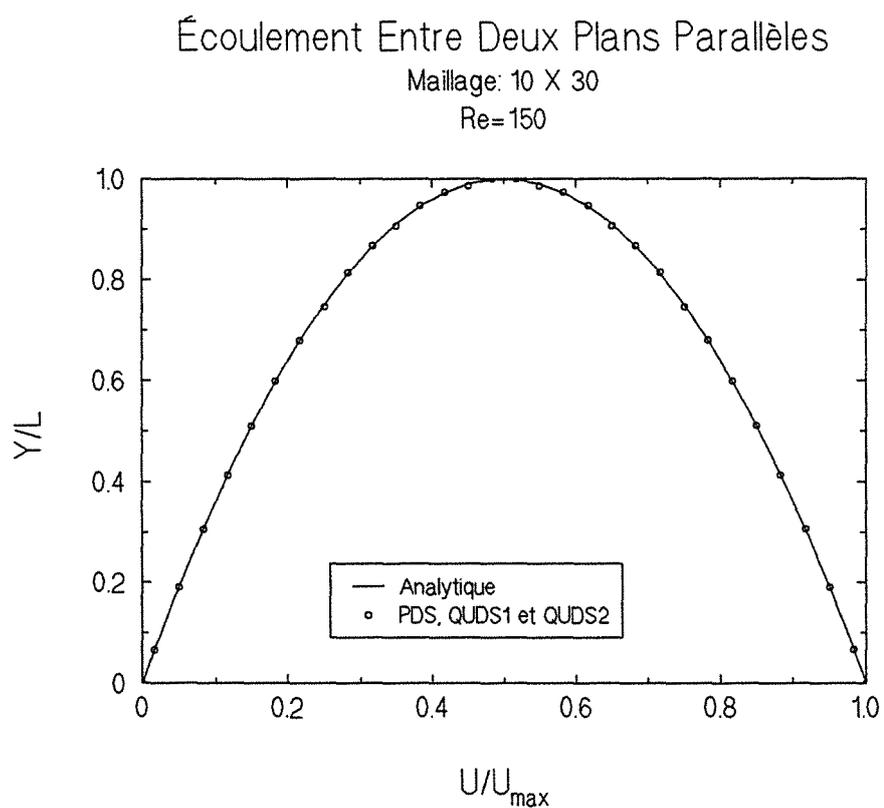


Figure 4.12 - Écoulement entre deux plans parallèles -Re=150

à la loi de Darcy pour l'écoulement d'un fluide newtonien, en régime stationnaire, dans un milieu poreux périodique.

L'écoulement dans un milieu poreux peut être considéré, suivant les approches, comme le déplacement d'un fluide à l'intérieur d'un réseau de capillaires ou comme l'écoulement autour d'objets immergés dans le fluide. On peut encore ajouter l'approche semi-heuristique basée sur le diamètre hydraulique [57]. D'après Bird et al [17], cette dernière approche allie au mieux simplicité et efficacité pour décrire les phénomènes. On ne rappellera ici que quelques résultats concernant à cette approche. Les lecteurs désireux de connaître les autres approches se reporteront à Bird et al [17], Happel et Brenner [48] et Kaviany [57].

Le premier résultat, valable pour des écoulements laminaires et quand les effets d'inertie sont négligeables, est celui de Blake-Kozeny. Il est obtenu à partir de l'écoulement à l'intérieur d'un faisceau de capillaires sinueux de section circulaire dont la direction générale est parallèle à la vitesse de filtration. La notion de tortuosité, rapport entre la longueur d'un capillaire à la longueur L de milieu traversé, est introduite pour décrire le fait qu'à l'intérieur du milieu le fluide suit des chemins tortueux. L'équation de Blake-Kozeny est donnée par [17]:

$$\frac{\Delta p}{L} = k_K \frac{36\mu (1-\varepsilon_B)^2}{d_p^2 \varepsilon_B^3} \langle u \rangle \quad (24)$$

où k_K est la constante de Kozeny, ε_B la porosité et d_p le diamètre équivalent des particules, défini par:

$$d_p = \frac{6}{a_v} \quad (25)$$

où a_v est la surface spécifique, c'est-à-dire la surface totale des particules divisée par le volume des particules.

Dans le cas des écoulements turbulents (à relier avec le paragraphe 4.2), on utilise à la place de l'équation de Blake-Kozeny (24), l'équation de Burke-Plummer [17]:

$$\frac{\Delta p}{L} = 1,75 \frac{\rho \langle u \rangle^2 (1-\epsilon_B)}{d_p \epsilon_B^3} \quad (26)$$

Ultérieurement, Ergun [38] en 1952 a unifié ces deux résultats en les ajoutant,

$$\frac{\Delta p}{L} = 150 \frac{\mu \langle u \rangle}{d_p^2} \frac{(1-\epsilon_B)^2}{\epsilon_B^3} + 1,75 \frac{\rho \langle u \rangle^2 (1-\epsilon_B)}{d_p \epsilon_B^3} \quad (27)$$

L'équation (27) valable pour les régimes laminaire et turbulent est connue comme l'équation d'Ergun. On voit qu'à l'équation (27) correspond une constante de Kozeny $k_K=150/36$. Dans les deux cas limites, à savoir le régime de Stokes et le régime turbulent, on récupère les équations de Blake-Kozeny (24) et de Burke-Plummer à partir de l'équation d'Ergun, le terme correspondant étant alors largement prépondérant devant l'autre.

Finalement, Mcdonald et al [69] en 1979 ont revu l'équation d'Ergun et ont proposé pour des milieux constitués des particules avec des surfaces lisses:

$$\frac{\Delta p}{L} = 180 \frac{\mu \langle u \rangle}{d_p^2} \frac{(1-\epsilon_B)^2}{\epsilon_B^3} + 1,8 \frac{\rho \langle u \rangle^2 (1-\epsilon_B)}{d_p \epsilon_B^3} \quad (28)$$

et pour ceux constitués des particules avec des surfaces rugueuses:

$$\frac{\Delta p}{L} = 180 \frac{\mu \langle u \rangle}{d_p^2} \frac{(1-\epsilon_B)^2}{\epsilon_B^3} + 4,0 \frac{\rho \langle u \rangle^2 (1-\epsilon_B)}{d_p \epsilon_B^3} \quad (29)$$

Leurs résultats correspondent à une constante de Kozeny $k_K=5$.

4.7-GÉOMÉTRIE DE LA CELLULE UNITÉ

On a convenu de distinguer, dans ce travail, les arrangements géométriques de la cellule unité "ordonnés" et "désordonnés". Un arrangement est dit ordonné quand il présente une structure simple prédéterminée, tandis que les arrangements désordonnés possèdent une

structure distribuée de façon aléatoire. Par une structure simple on entend que les particules solides sont distribuées d'une façon régulière à l'intérieur de la cellule unité.

4.7.1-ARRANGEMENTS "ORDONNÉS"

Les arrangements géométriques simples, choisis pour représenter la cellule unité, sont les suivants: en ligne , en quinconce et en chicane.

L'arrangement en ligne est formé par des cylindres carrés, disposés en ligne et alignés, suivant les deux directions de l'espace. La cellule unité en deux dimensions, montrée sur la figure 4.13, possède une symétrie spatiale par rapport aux axes de la cellule.

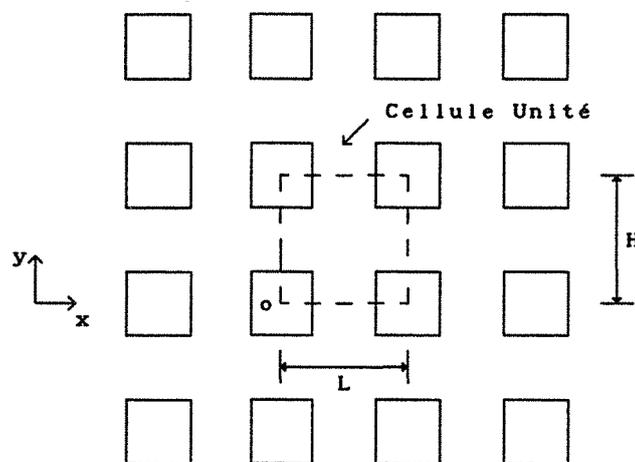


Figure 4.13- Arrangement en ligne

L'arrangement en quinconce est aussi formé par des cylindres carrés, mais au contraire du cas précédent, ceux-ci sont décalés suivant la direction de l'axe OX. La cellule unité, figure 4.14, est ainsi symétrique par rapport aux axes OX et OY de la cellule.

Le dernier arrangement géométrique simple est celui en chicane. Il est constitué par des cylindres rectangulaires dont le côté parallèle à l'axe OX est la moitié du côté parallèle à OY et décalés dans la direction de l'axe OY, comme montré sur la figure 4.15. Contrairement aux deux cas précédents, il existe un axe de symétrie parallèle à OY et il n'existe plus

d'axe de symétrie parallèle à l'axe OX.

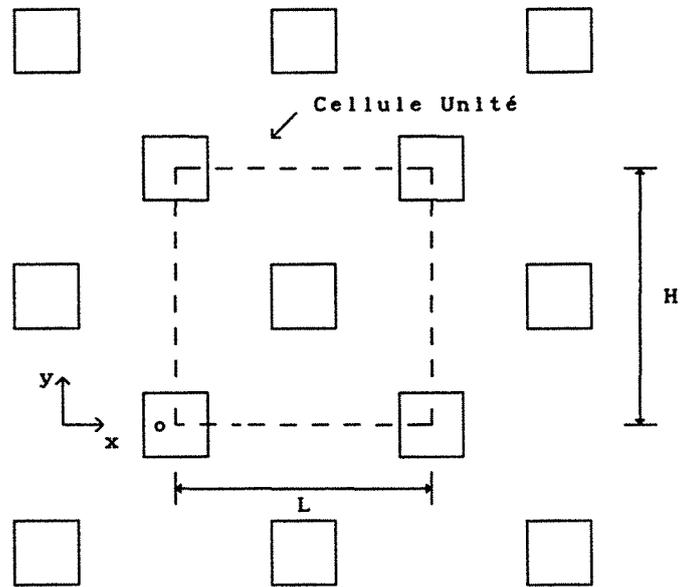


Figure 4.14 - Arrangement en quinconce

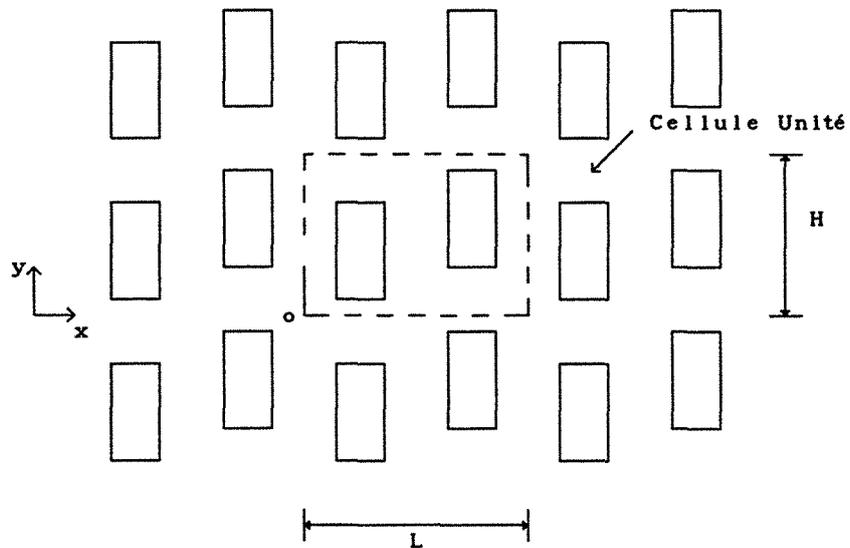


Figure 4.15 - Arrangement en chicane

4.7.2-ARRANGEMENTS "DÉSORDONNÉS"

Les arrangements géométriques, dits désordonnés, sont formés de cylindres carrés. La distribution de ces cylindres est obtenue d'une façon pseudo-aléatoire. On dit pseudo-aléatoire, parce qu'une certaine contrainte (détaillée ci-dessous) doit être vérifiée, lors de l'obtention de la distribution géométrique des cylindres à l'intérieur de la cellule unité.

Les arrangements désordonnés ont été produits à l'aide d'un programme informatique, utilisant un générateur des nombres aléatoires². Au départ, le nombre de cases d'un tableau $n \times n$ et la porosité ε_B sont fournis. Ensuite, le programme détermine le nombre de cases "solides" à remplir, de façon à obtenir la porosité désirée. Les coordonnées i et j des cases représentant le "solide", sont déterminées en utilisant le générateur de nombres aléatoires. Au cas où les mêmes coordonnées apparaissent plus d'une fois, une autre paire (i, j) est déterminée.

Une contrainte est introduite, afin d'éviter la possibilité d'avoir une case "fluide", entourée par des cases "solides". C'est-à-dire qu'on ne veut pas que le "fluide" soit piégé.

En ce qui concerne le choix de la porosité, comme on veut que le fluide percole la cellule, ses valeurs doivent être supérieures à 0,6. La valeur $\varepsilon_B \cong 0,6$ est la porosité critique pour qu'on ait la percolation, ceci dans le cas d'un treillis carré en deux dimensions infinies [115]. Pour une valeur de la porosité inférieure à 0,6, il aurait fallu un trop grand nombre de tirages pour obtenir des milieux différents avec percolation.

Tous les cas ont été obtenus avec un tableau de 10×10 cases et pour une porosité $\varepsilon_B = 0,64$. Les figures 4.16 à 4.35, montrent les 20 cas retenus parmi les arrangements qui ont été produits. En dessous de chaque figure, on a indiqué le diamètre équivalent des particules d_p (équation (25)) correspondant.

La cellule unité, pour des raisons numériques, est prise comme montrée sur les figures 4.16 à 4.35. Autrement dit, la frontière de la cellule ne coïncide pas avec les faces des cylindres carrés. Elle est prise de façon à

² Fonction intrinsèque RAN1 de la bibliothèque Fortran libF77.

laisser une distance correspondante à la moitié du coté d'un carré, ceci dans les deux directions de l'espace. Ceci amène à une augmentation de la porosité, soit $\epsilon_B \cong 0,7$ au lieu de $\epsilon_B = 0,64$. La cellule unité, prise sous cette forme, permet l'obtention d'un gradient de pression vérifiant numériquement les conditions de périodicité.

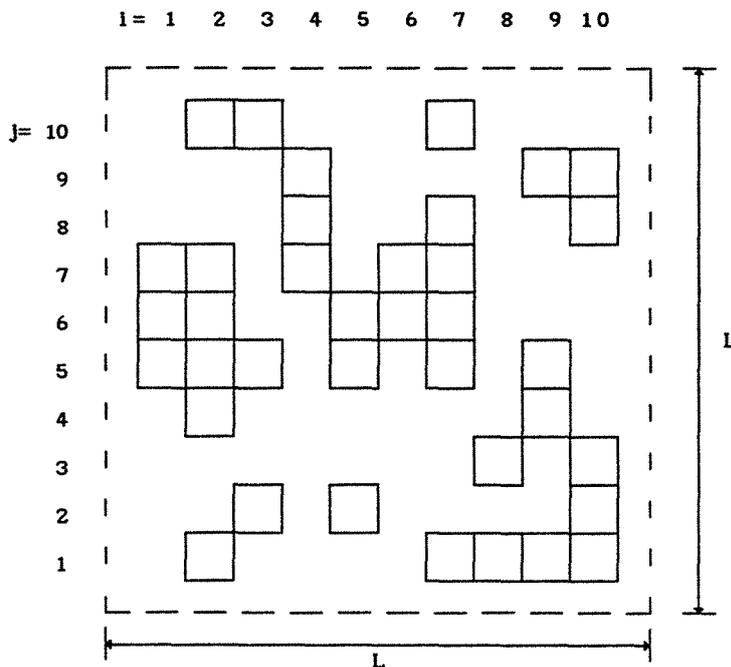


Figure 4.16 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 01 ($d_p=0,2135$)

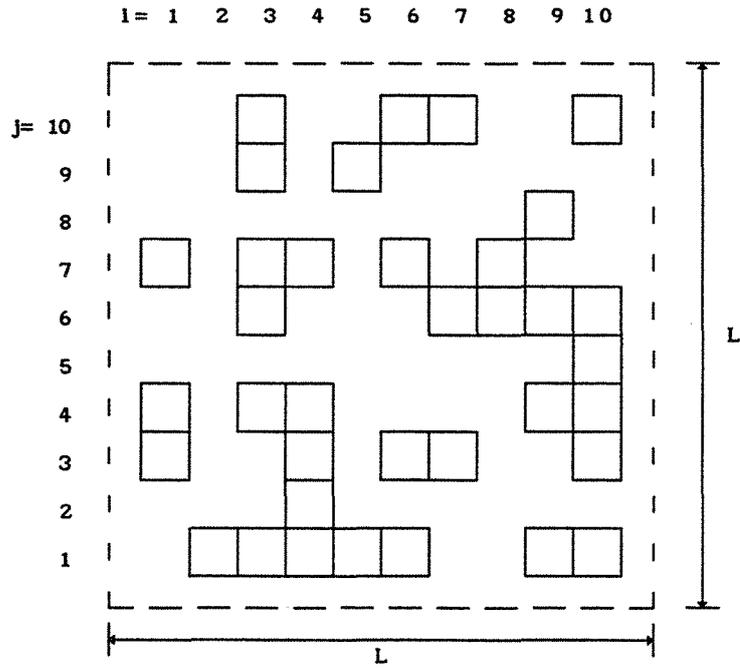


Figure 4.17 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 02 ($d_p=0,2004$)

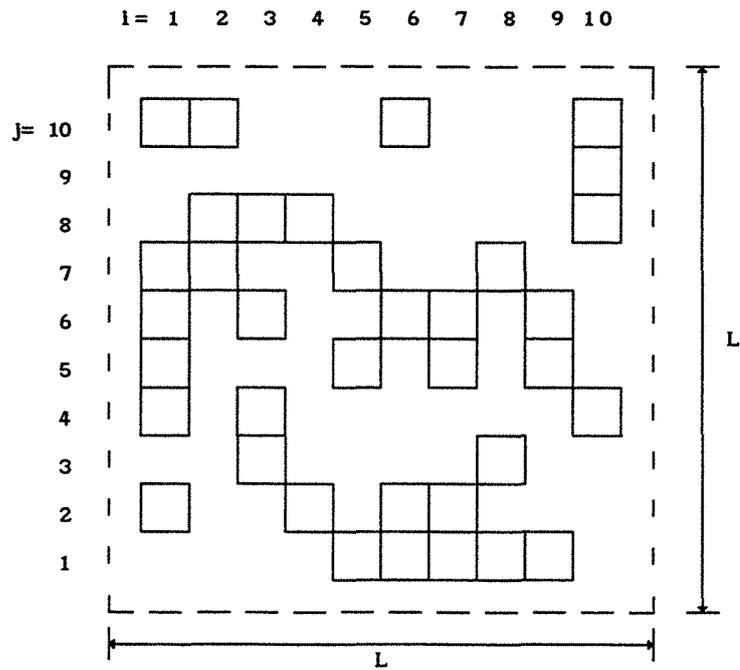


Figure 4.18 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 03 ($d_p=0,1888$)

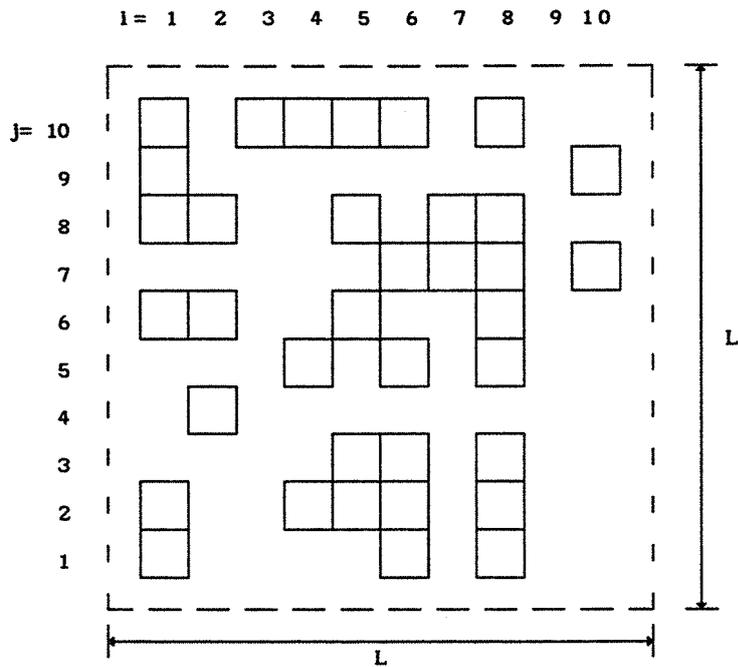


Figure 4.19 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 04 ($d_p=0,2004$)

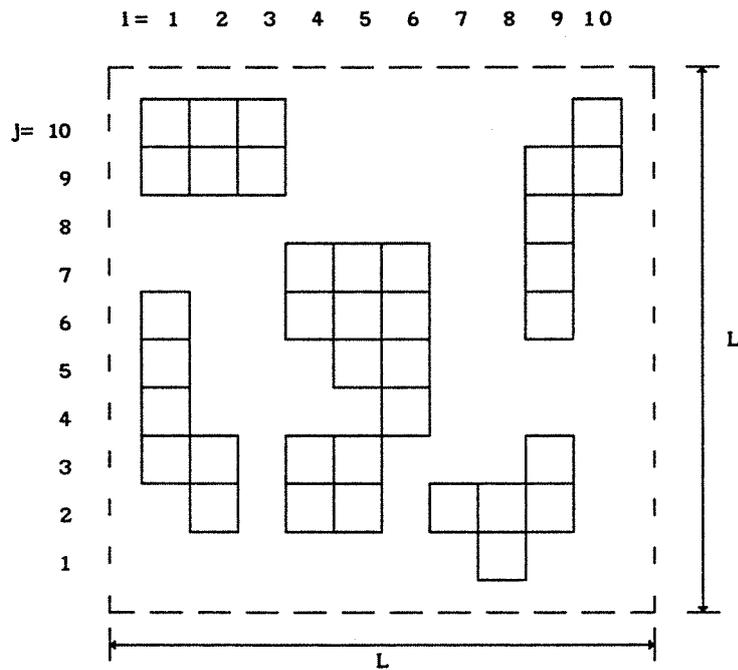


Figure 4.20 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 05 ($d_p=0,2727$)

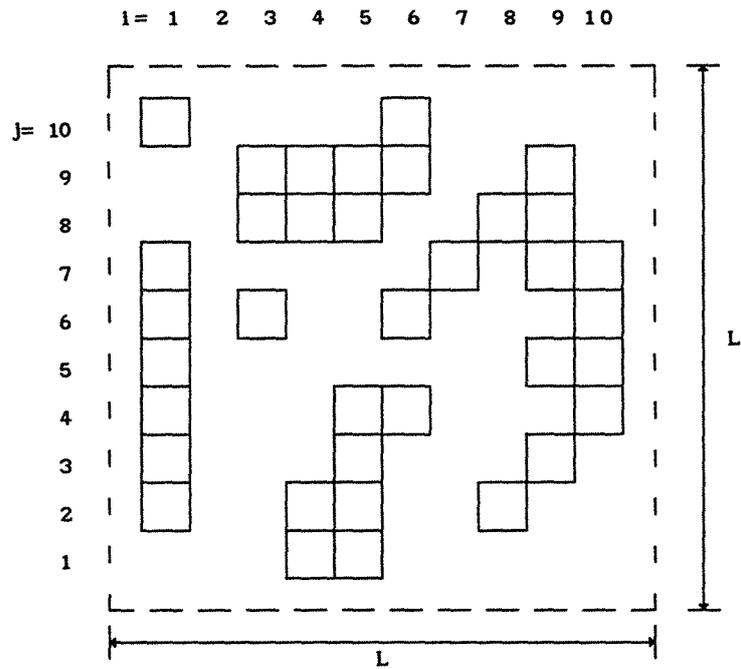


Figure 4.21 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 06 ($d_p=0,2283$)

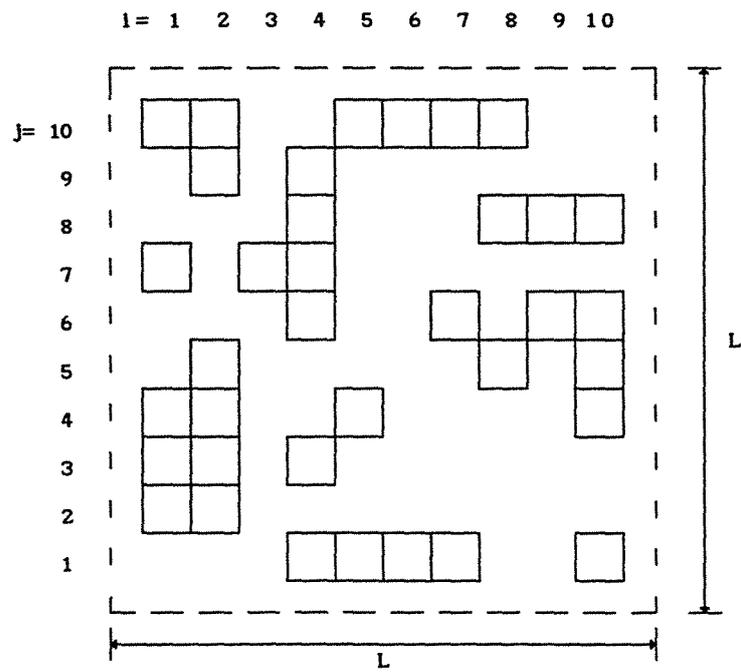


Figure 4.22 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 07 ($d_p=0,2089$)

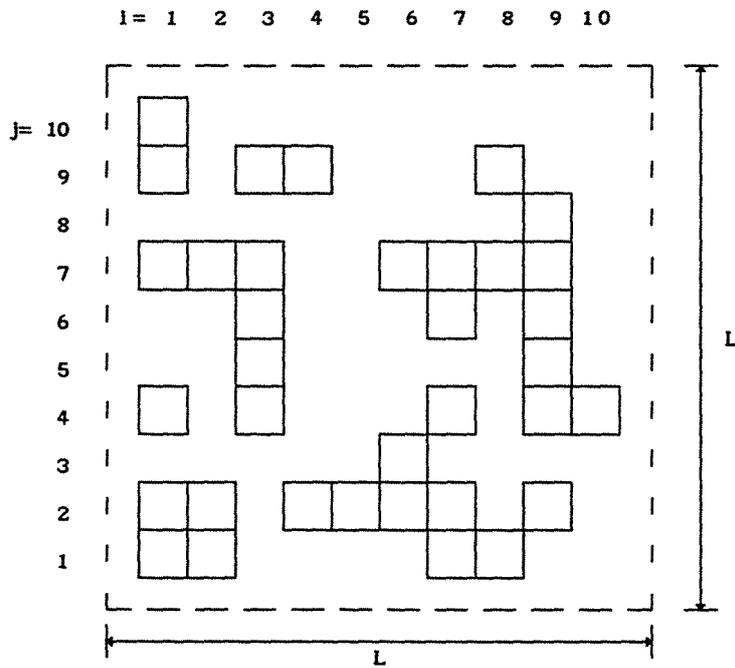


Figure 4.23 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 08 ($d_p=0,2182$)

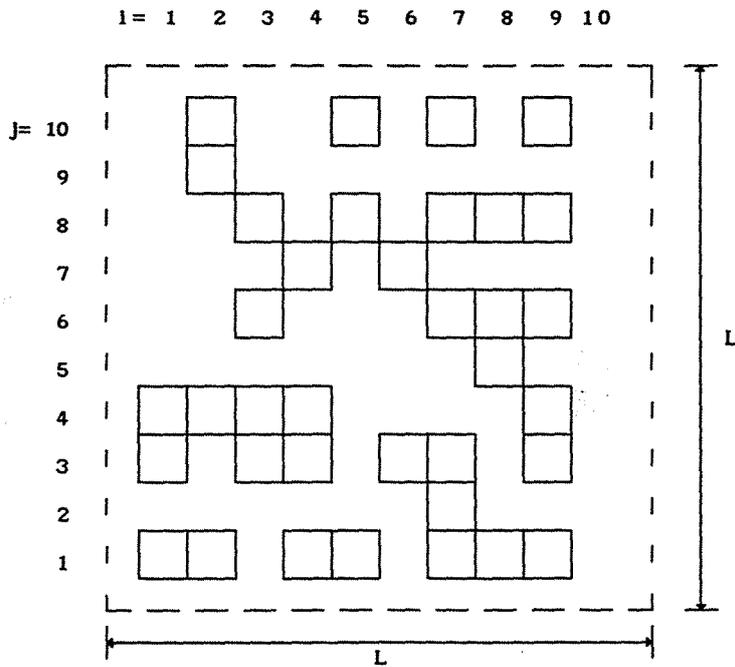


Figure 4.24 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 09 ($d_p=0,1925$)

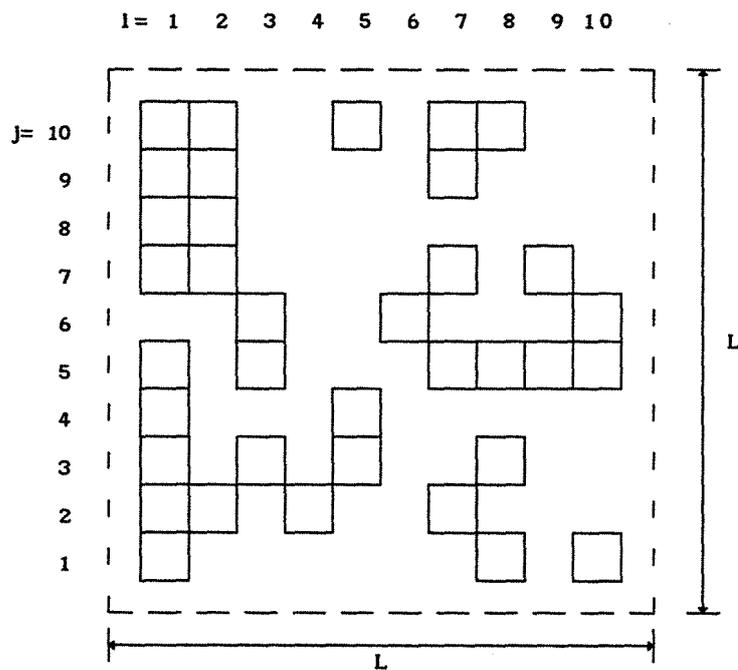


Figure 4.25 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 10 ($d_p=0,2004$)

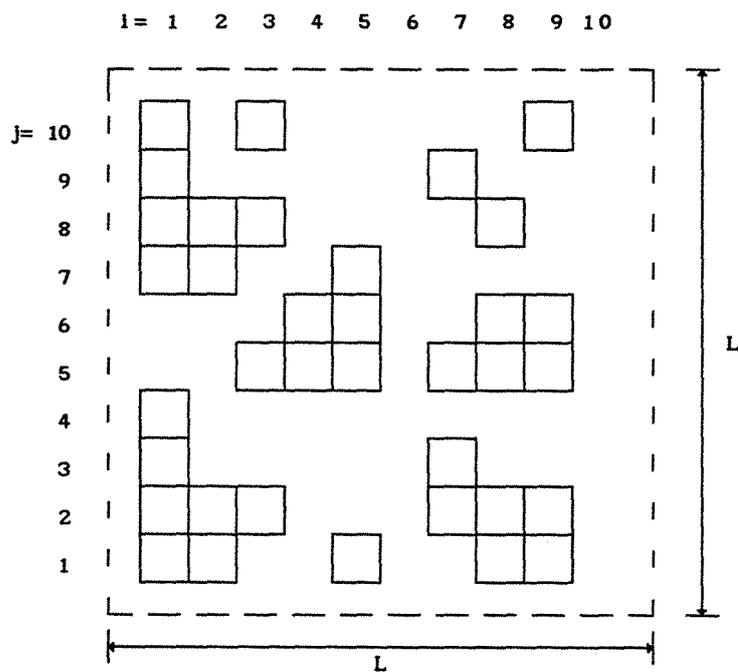


Figure 4.26 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 11 ($d_p=0,2395$)

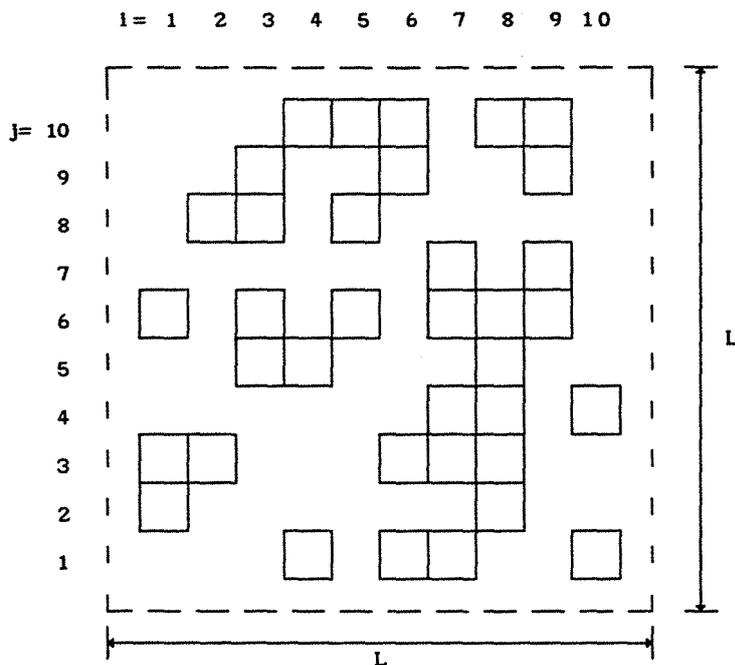


Figure 4.27 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 12 ($d_p=0,2046$)

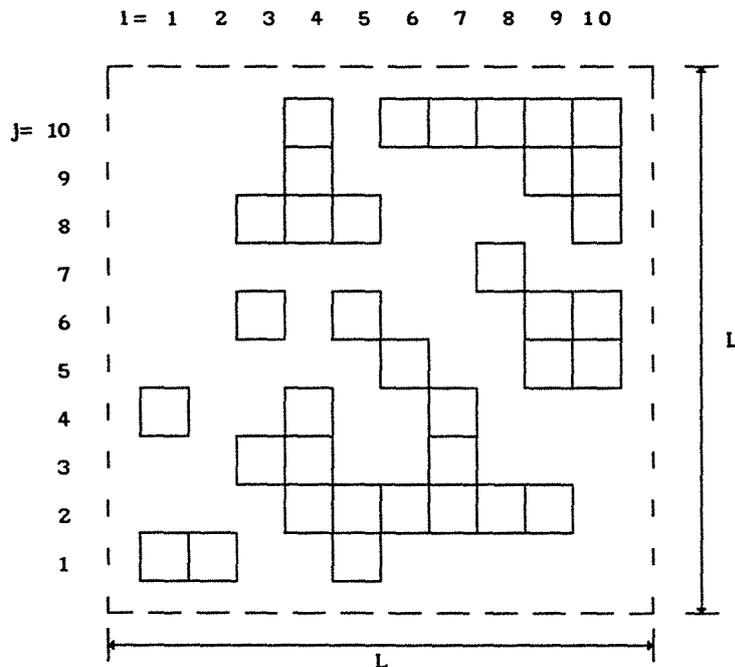


Figure 4.28 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 13 ($d_p=0,2232$)

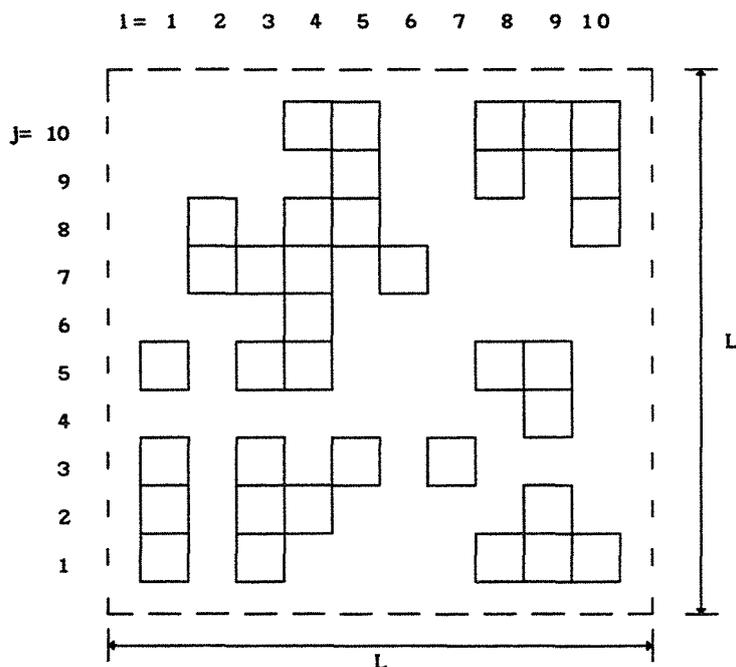


Figure 4.29 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 14 ($d_p=0,2135$)

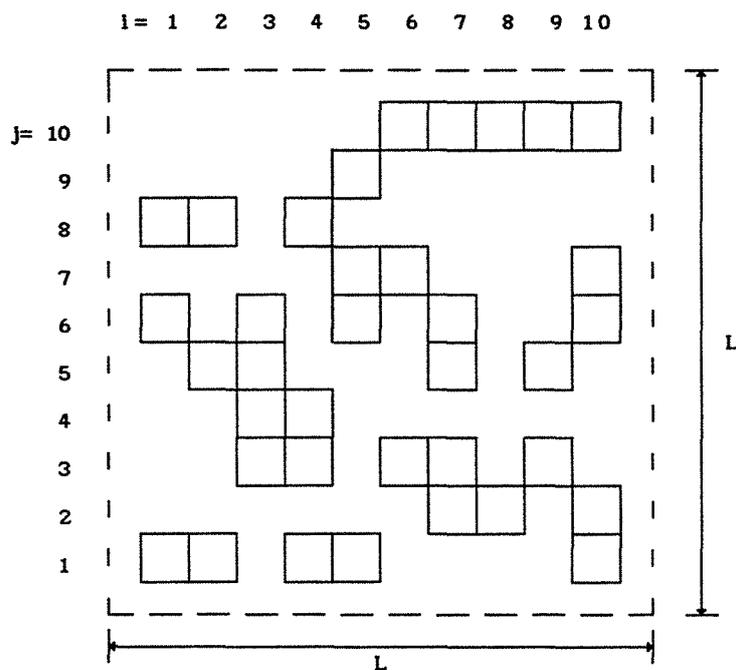


Figure 4.30 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 15 ($d_p=0,1963$)

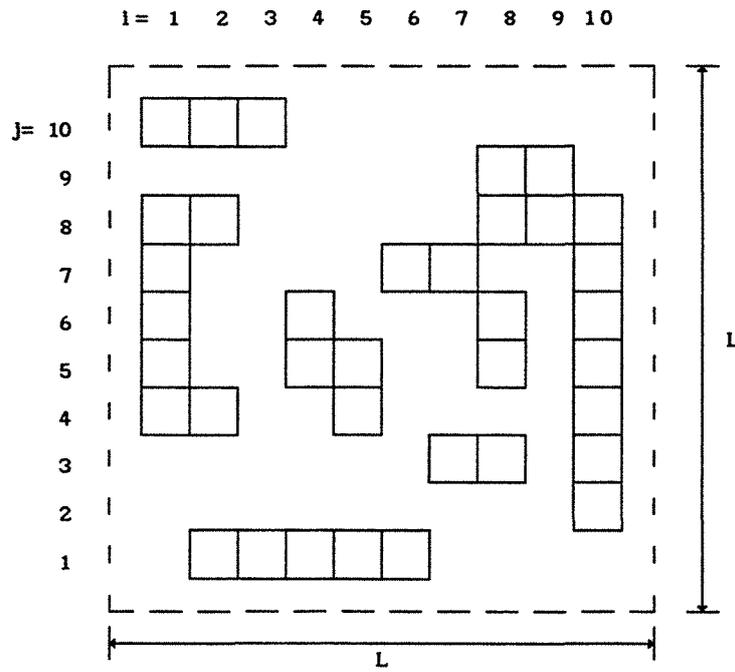


Figure 4.35 - Arrangement aléatoire - cellule unité n° 20 ($d_p=0,2283$)

4.8-CALCUL DE LA PERTE DE CHARGE

On passe ensuite à la présentation des résultats concernant la perte de charge, due à l'écoulement de la phase fluide au travers de la cellule unité. Dans la première partie on traite les arrangements de cylindres carrés disposés en ligne, en quinconce et des cylindres rectangulaires dans le cas de l'arrangement en chicane. La deuxième partie montre les résultats pour les arrangements désordonnés.

4.8.1-ARRANGEMENTS "ORDONNÉS"

Dans tous les cas traités, les cellules unités sont prises comme étant carrées ($L=H$). La hauteur du cylindre rectangulaire, lorsqu'il s'agit de l'arrangement en chicane, vaut deux fois sa longueur. Deux porosités ($\varepsilon_B=0,36$ et $\varepsilon_B=0,64$) ont été étudiées pour les arrangements en ligne et en chicane. Une seule porosité est traitée ($\varepsilon_B=0,64$) dans le cas de l'arrangement en quinconce. Ceci est une conséquence du choix d'une cellule carrée et de l'impossibilité d'avoir alors une porosité inférieure à 0,5.

Les résultats sont comparés à ceux donnés par l'équation d'Ergun modifiée (29), mise sous la forme adimensionnelle:

$$\frac{\Delta P'}{L'} = \frac{180}{Re_p} + 1,8 \quad (30)$$

où

$$\Delta P' = \frac{\Delta p}{\rho \left(\langle u \rangle^B \right)^2} \quad (31)$$

$$L' = \frac{L(1-\varepsilon_B)}{\varepsilon_B d_p} \quad (32)$$

$$Re_p = \frac{\varepsilon_B \langle u \rangle^B d_p}{(1-\varepsilon_B) \nu} \quad (33)$$

où les variables (adimensionnelles) sont celles introduites au paragraphe 4.3.1. Le nombre de Reynolds particulaire Re_p est proposé par

Whitaker [126], comme le mieux adapté dans le cas d'un milieu poreux.

L'équation (30) a la vocation (sans doute excessive) d'être universelle ne dépendant ni de la porosité et ni du type d'arrangement géométrique choisi.

Les maillages utilisés, pour le calcul de la perte de charge, ont été choisis de façon à avoir une différence en $\Delta P'/L'$ inférieure à 5%, par rapport à la valeur calculée avec le maillage le plus fin. Lors de ce choix, on a testé les maillages suivants: 40 X 40, 50 X 50, 60 X 60, 70 X 70, 80 X 80, 90 X 90 et 100 X 100 volumes de contrôle. Trois critères de convergence (§ 3.5.4) ont été vérifiés, à savoir $\varepsilon=1,0 \cdot 10^{-3}$, $1,0 \cdot 10^{-4}$ et $1,0 \cdot 10^{-5}$. Tous les calculs ont été réalisés pour de nombres de Reynolds compris entre 0 et 150 et pour le vecteur vitesse moyenne incliné d'un angle θ variant de 0° et 45° par rapport à l'axe OX de la cellule unité. Ont été retenus, finalement, pour l'arrangement en ligne un maillage uniforme de 70 X 70 volumes de contrôle et pour les deux autres cas (en quinconce et en chicane) un maillage uniforme de 80 X 80 volumes de contrôle. En ce qui concerne le critère de convergence, tous les cas ont été calculés pour $\varepsilon=1,0 \cdot 10^{-5}$.

4.8.1.1-ALLURE GÉNÉRALE DES COURBES DE PERTE DE CHARGE

Les courbes de perte de charge possèdent trois zones qui définissent bien la nature de l'écoulement. Dans la première zone, on a un comportement du type linéaire et la perte de charge est proportionnelle à la vitesse moyenne $\langle u \rangle$. Cette zone est caractérisée par la constante de Kozeny et la loi de Darcy est valable. Les équations de Stokes gouvernent l'écoulement. Ensuite on a une zone de transition où les termes d'inertie ne sont plus négligeables devant les termes visqueux. La loi de Darcy doit être corrigée afin de prendre en compte les variations non linéaires. Les corrections non linéaires sont discutées en détail au paragraphe 4.9. Finalement on atteint asymptotiquement, pour des valeurs du nombre de Reynolds très élevées, un régime de type turbulent où les pertes de charge sont proportionnelles à $\langle u \rangle^2$. Dans les deux derniers cas, l'écoulement est gouverné par les équations de Navier-Stokes.

Au paragraphe 4.6, on a vu que l'équation (30) amène à une constante de Kozeny $k_K=5$, tandis que l'équation (27) correspond à une constante qui

vaut $k_K=4,17$. Le tableau 4.1 montre les constantes de Kozeny calculées dans ce travail et celles trouvées par Eidsath et al [35] pour des arrangements de cylindres carrés disposés en ligne. Pour un milieu isotrope vis-à-vis de la perméabilité (arrangement en ligne et en quinconce), conformément à la théorie, elles sont indépendantes de la direction de l'écoulement; pour un milieu anisotrope (arrangement en chicane), ce n'est plus le cas (voir §4.9.1).

Arrangement	ε_B	k_K
En Ligne	0,36	6,2
	0,36	6,2 [†]
	0,37	6,3 [*]
	0,64	7,1
En Quinconce	0,64	20,7
En Chicane	0,36	3,9
	0,64	5,7

[†] Stark, cité par Eidsath et al [58]

^{*} Eidsath et al [58]

Tableau 4.1 - Constante de Kozeny

On note que les résultats obtenus pour l'arrangement en ligne avec une porosité de 0,36, sont en accord avec les résultats de Stark, Eidsath et al [35]. Néanmoins, à part le cas de l'arrangement en chicane avec une porosité $\varepsilon_B=0,36$, tous les autres cas présentent des valeurs supérieures à celles préconisées par la théorie. Le cas où la différence est la plus accentuée est pour une porosité $\varepsilon_B=0,64$, notamment avec l'arrangement en quinconce.

L'étape suivante consiste en la présentation des résultats obtenus pour la perte de charge, avec les différents types d'arrangements géométriques montrés sur les figures 4.13, 4.14 et 4.15. Les résultats sont présentés dans l'ordre suivant: arrangement en ligne, en quinconce et en chicane.

4.8.1.2-ARRANGEMENT EN LIGNE

Avant de poursuivre, on souhaiterait écrire sous la forme de l'équation (30) la perte de charge pour l'arrangement en ligne, utilisant le gradient de pression provenant de l'écoulement entre deux plans parallèles. On peut, ainsi, avoir une idée de l'ordre de grandeur de la perte de charge et l'utiliser à titre de comparaison. Tout calcul fait¹, il vient:

$$\frac{\Delta P'}{L'} = \frac{\gamma}{Re_p} \tag{34}$$

où $\gamma=36k_K$ est donné par:

$$\gamma = 27 \cdot \frac{\epsilon_B^3}{(1-\epsilon_B)} \cdot \frac{1}{\left(1-\sqrt{1-\epsilon_B}\right)^3} \tag{35}$$

Le tableau 4.2 contient les valeurs de γ , calculées à partir de l'équation (35), et celles trouvées numériquement. On note que les résultats numériques sont du même ordre de grandeur et présentent la même tendance que ceux obtenus théoriquement, γ augmentant avec la porosité.

Arrangement	ϵ_B	γ		k_K	
		Approché	Numérique	Approché	Numérique
En Ligne	0,36	246	223	6,8	6,2
	0,64	307	256	8,5	7,1

Tableau 4.2 - Arrangement en ligne - constante de Kozeny

Sur les figures 4.36 à 4.43 sont représentés les champs de vitesses ($Re_p=75$), pour l'arrangement en ligne ($\epsilon_B=0,36$ et $0,64$) et pour un vecteur

¹ Voir Annexe VI

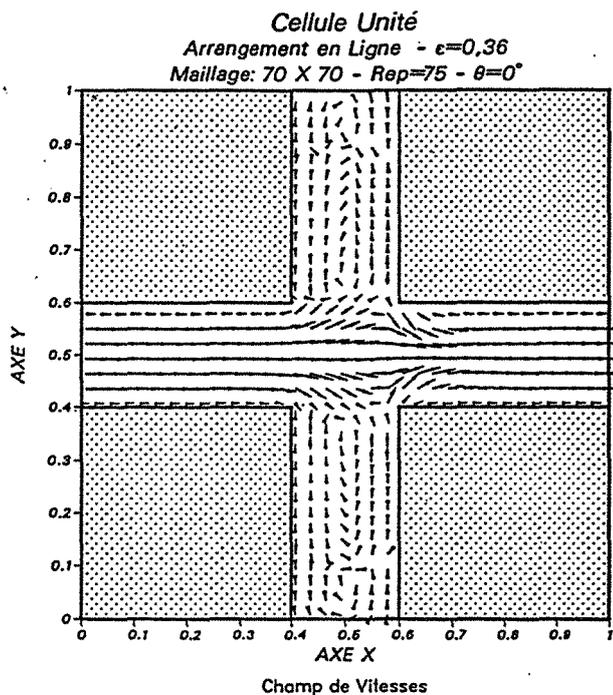


Figure 4.36 - Arrangement en ligne - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,36 - \theta = 0^\circ$$

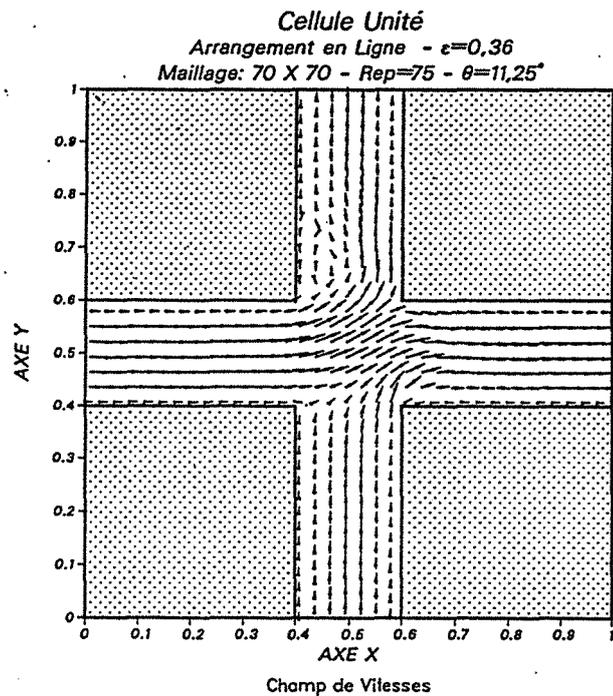


Figure 4.37 - Arrangement en ligne - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,36 - \theta = 11,25^\circ$$

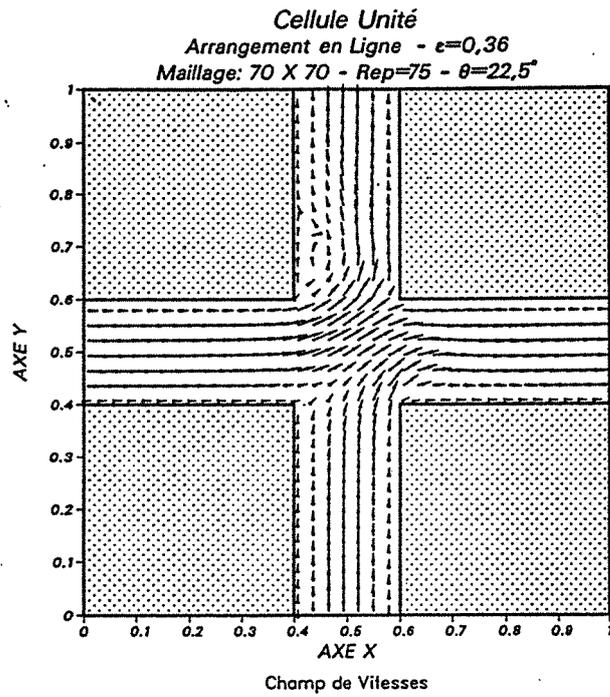


Figure 4.38 - Arrangement en ligne - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,36 - \theta = 22,5^\circ$$

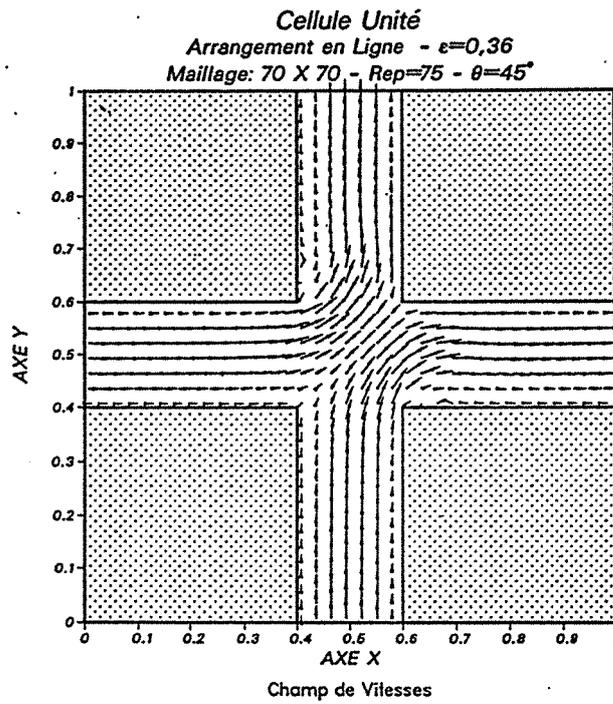


Figure 4.39 - Arrangement en ligne - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,36 - \theta = 45^\circ$$

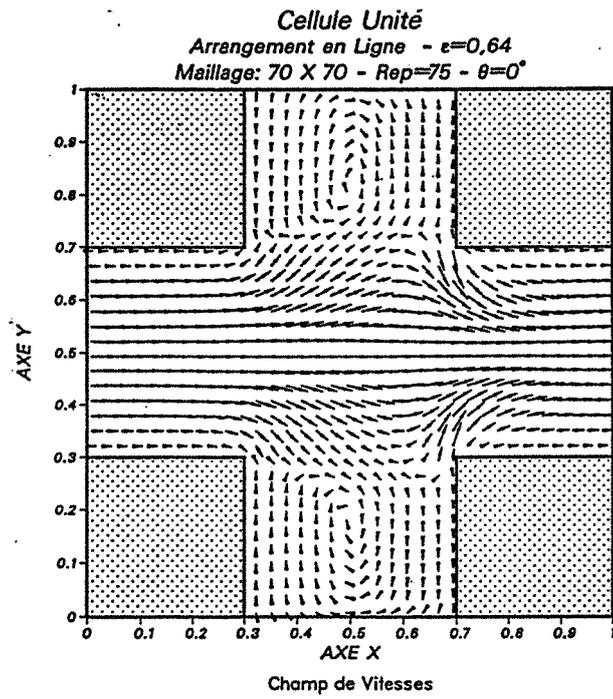


Figure 4.40 - Arrangement en ligne - champ de vitesses
 $\epsilon_B = 0,64 - \theta = 0^\circ$

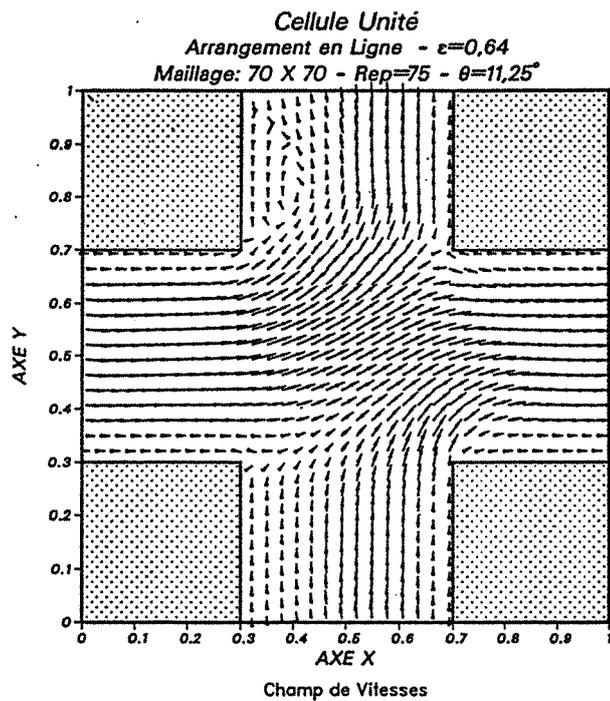


Figure 4.41 - Arrangement en ligne - champ de vitesses
 $\epsilon_B = 0,64 - \theta = 11,25^\circ$

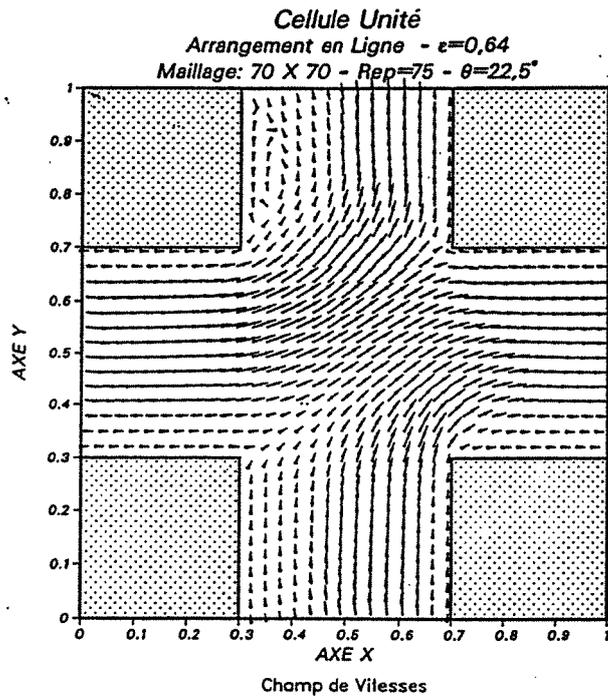


Figure 4.42 - Arrangement en ligne - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,64 - \theta = 22,5^\circ$$

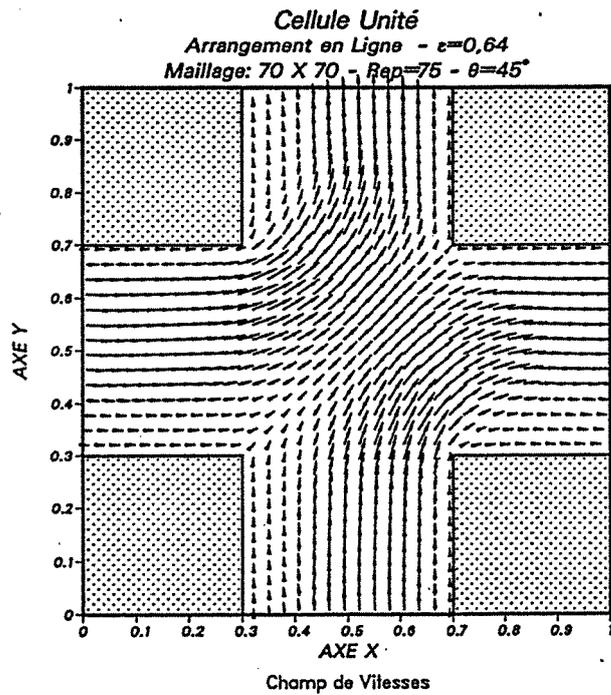


Figure 4.43 - Arrangement en ligne - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,64 - \theta = 45^\circ$$

vitesse moyenne à 0° , $11,25^\circ$, $22,5^\circ$ et 45° par rapport à l'axe OX.

Comme on devait s'y attendre, les résultats correspondant à une porosité égale à 0,36 s'approchent le plus de ceux issus de l'écoulement entre deux plans parallèles. Pour ce type de géométrie, on voit sur les figures 4.36 et 4.40 que pour un angle $\theta=0^\circ$, l'écoulement prédominant se fait dans la direction de l'axe OX et se trouve confiné dans la partie centrale de la cellule unité. On voit apparaître d'ailleurs des zones de recirculation. Plus on augmente la porosité plus naturellement l'écoulement diffère d'un écoulement établi entre deux plans parallèles.

Ensuite, sur la figure 4.44, sont représentées les différentes courbes de $\Delta P'/L'$ en fonction de Re_p , déterminées pour 6 valeurs de l'angle θ entre le vecteur vitesse moyenne et l'axe OX de la cellule unité ($\theta=0^\circ$, $5,625^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$, $33,75^\circ$ et 45°) et pour $\varepsilon_g=0,36$. Lors du calcul de $\Delta P'/L'$, le vecteur ∇P est projeté selon la direction du vecteur vitesse moyenne. Ceci s'applique à tous les calculs et à tous les types d'arrangements géométriques.

On vérifie qu'en régime de Darcy ($Re_p < 20$), les résultats sont indépendants de θ . Les effets non linéaires, inexistant pour $\theta=0^\circ$ - conformément à ce que l'on attend pour un écoulement entre plans parallèles -, sont d'autant plus marqués que l'angle θ est différent de 0° . Pour les plus grandes valeurs de l'angle ($22,5^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$), les courbes présentent une inflexion, indice peut-être d'un comportement asymptotique pour des nombres de Reynolds très élevés (vu les conditions de symétrie par rapport aux deux axes de la cellule, on a pour des angles supérieurs à 45° , une inversion de valeurs des composantes ∇P_x et ∇P_y du vecteur gradient de pression).

L'allure des courbes reste très différente de la loi d'Ergun, laquelle est sensée être représentative d'un milieu réel. Une des raisons est certainement l'existence de cheminements rectilignes privilégiés où l'écoulement se fait en ligne droite, ce qui n'est sûrement pas représentatif d'un milieu réel.

De même dans le cas où la porosité vaut $\varepsilon_g=0,64$, les mêmes tendances sont observées, comme on peut le vérifier sur la figure 4.45. Hormis les cas $\theta=0^\circ$ et $5,625^\circ$, les effets non linéaires se font sentir d'une façon plus significative que dans le cas précédent. On note aussi que les valeurs sont maximales pour $\theta=45^\circ$. Ces résultats ne sont pas non plus en accord

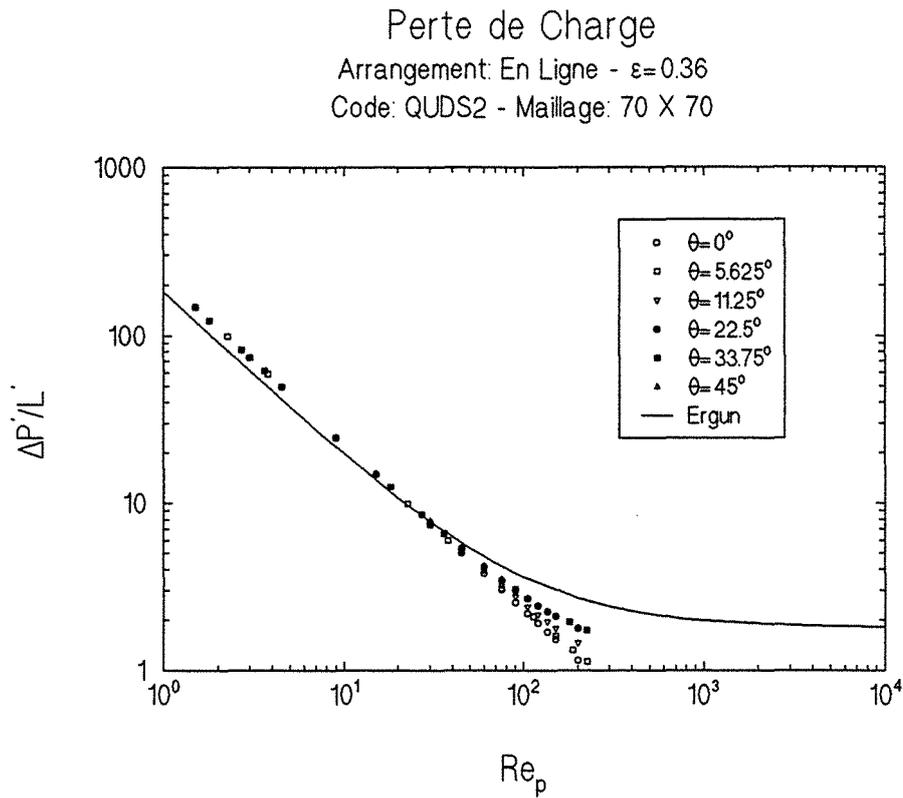


Figure 4.44 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\varepsilon_B=0,36$

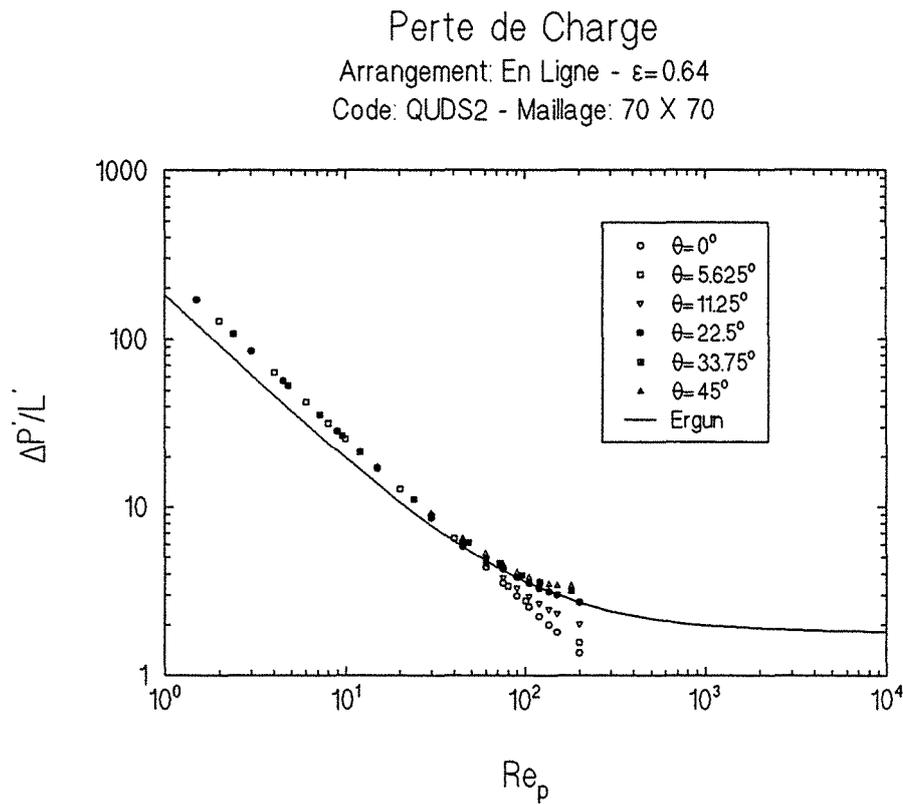


Figure 4.45 - Perte de charge arrangement en ligne - $\varepsilon_B=0,64$

avec l'équation d'Ergun.

4.8.1.3-ARRANGEMENT EN QUINCONCE

Sur les figures 4.46 à 4.49 sont montrés, pour un nombre de Reynolds particulaire égal à 75, les champs de vitesses calculés pour des angles $\theta=0^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$ et 45° respectivement. Sont aussi montrés sur les figures 4.50 à 4.53, à titre de comparaison, les champs de vitesses équivalents obtenus cette fois-ci pour un nombre de Reynolds particulaire égal à 0,0001, c'est-à-dire en régime de Stokes. Le choix de ne les montrer que pour l'arrangement en quinconce, est dû aux grands changements subis par le champ de vitesses (figures 4.47 à 4.50) dans ce cas. L'objectif est de pouvoir donner une idée de l'importance des termes d'inertie sur la forme du champ de vitesses.

On note, par exemple, l'absence de zones de recirculation, lorsque l'écoulement est en régime de Stokes. En outre, les champs de vitesses, correspondant aux différentes valeurs de l'angle θ , ne sont pas trop différents les uns des autres.

Les résultats calculés de la perte de charge, pour un arrangement en quinconce avec une porosité $\varepsilon_p=0,64$, sont montrés sur la figure 4.54.

En ce qui concerne l'influence de la direction du vecteur vitesse moyenne, la même tendance est retrouvée. La différence est que, contrairement aux cas précédents, les termes non linéaires sont déjà présents même pour un angle $\theta=0^\circ$. En outre, les pertes de charge sont bien plus élevées que pour l'arrangement en ligne, plus élevées même que l'équation d'Ergun. Ceci est apparemment lié à la nature de l'écoulement. On observe clairement sur la figure 4.46, pour un nombre de Reynolds particulaire égal à 75, l'existence de régions avec de très forts élargissements et rétrécissements. La courbe $\theta=45^\circ$ présente, comme pour l'arrangement en ligne, les valeurs les plus élevées de la perte de charge. Il faut mentionner ici que les valeurs pour un angle $\theta=45^\circ$, n'ont pas été calculées pour des nombres de Reynolds particuliers supérieurs à 100 du fait d'une très grande difficulté à obtenir la convergence numérique. Pour cette même valeur de angle θ , en plus des rétrécissements et des élargissements brusques, on observe de grandes zones de recirculation (figure 4.49).

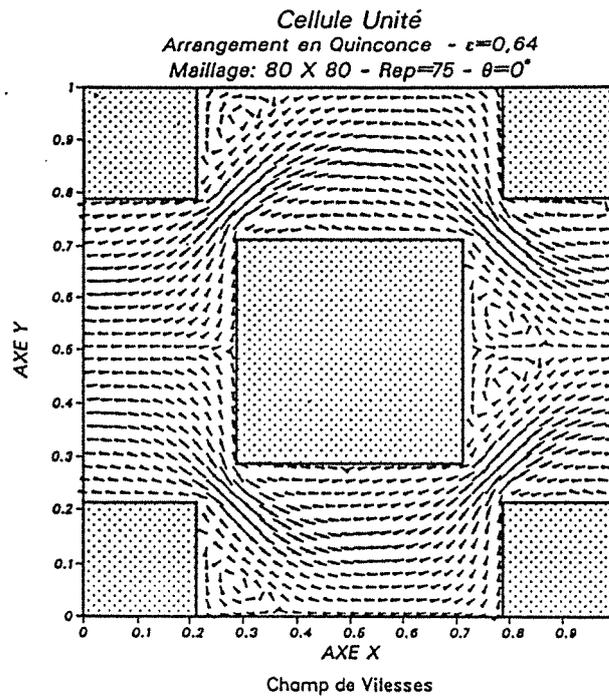


Figure 4.46 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 0^\circ - Re_p = 75$$

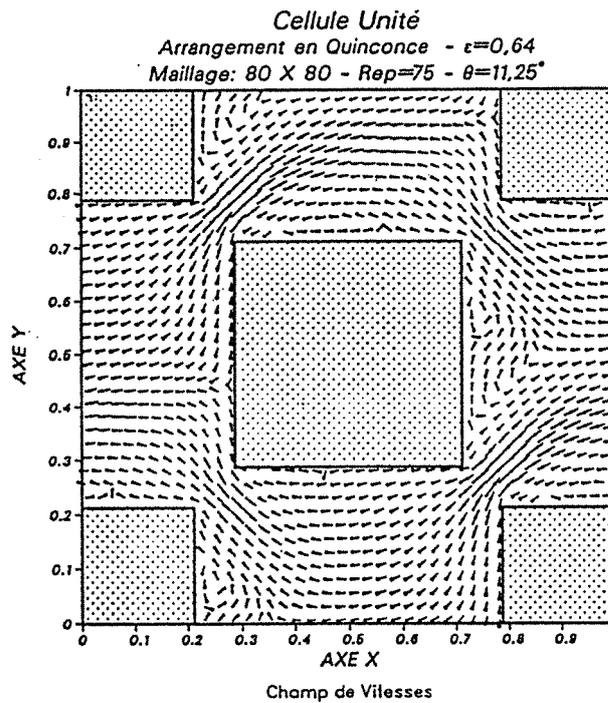


Figure 4.47 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 11,25^\circ - Re_p = 75$$

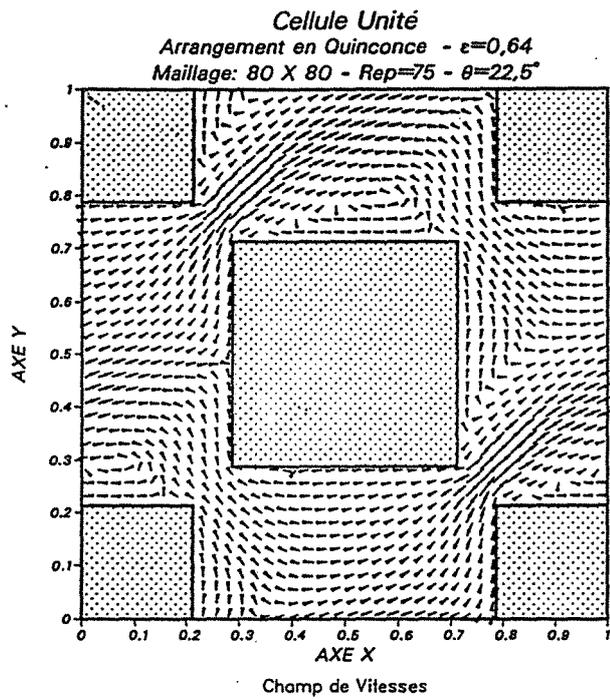


Figure 4.48 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,64 - \theta = 22,5^\circ - Re_p = 75$$

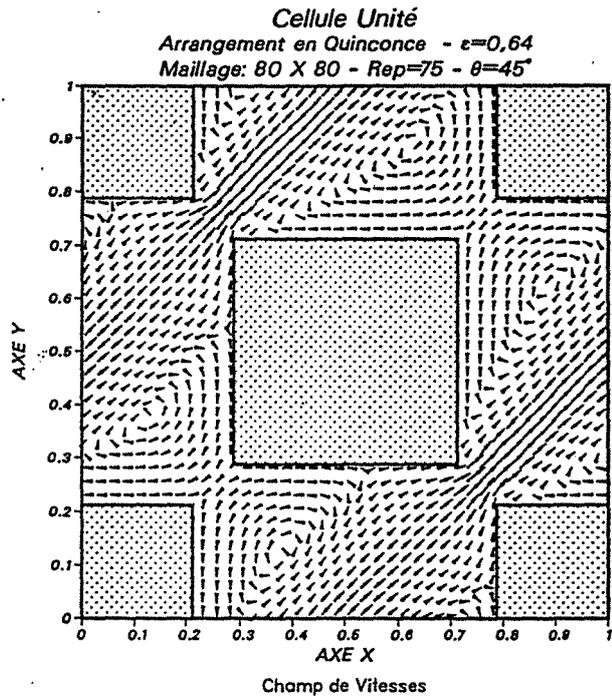


Figure 4.49 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,64 - \theta = 45^\circ - Re_p = 75$$

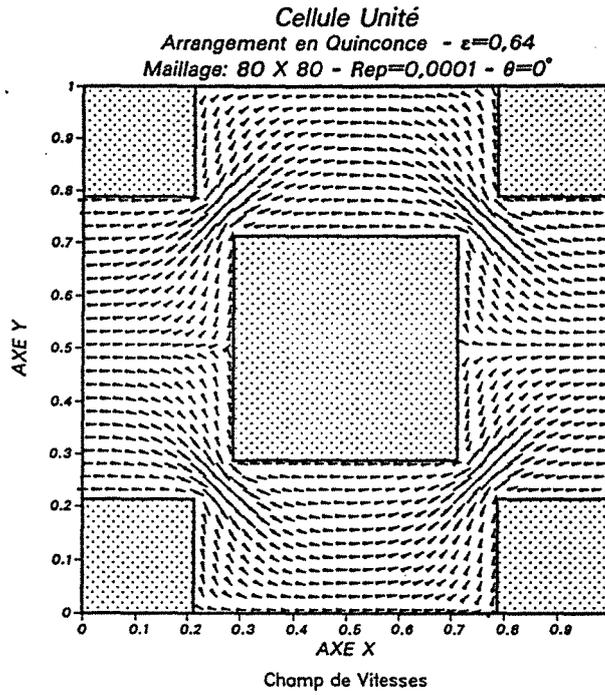


Figure 4.50 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 0^\circ - Re_p = 0,0001$$

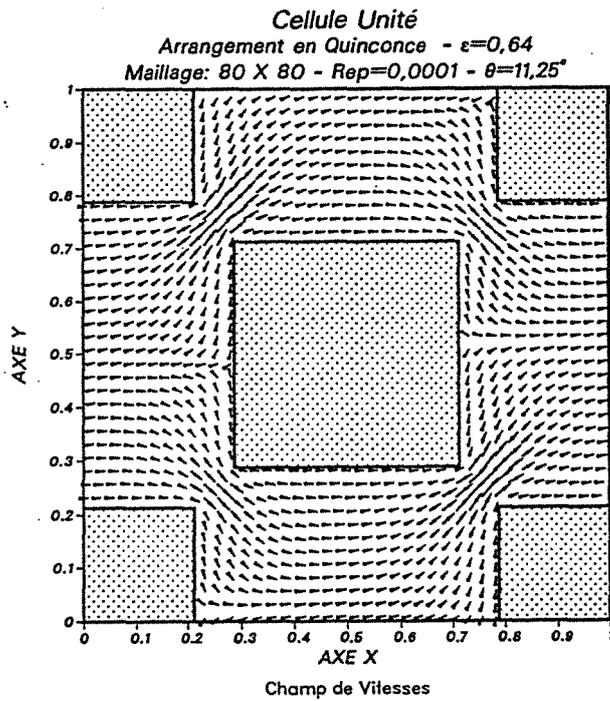


Figure 4.51 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,64 - \theta = 11,25^\circ - Re_p = 0,0001$$

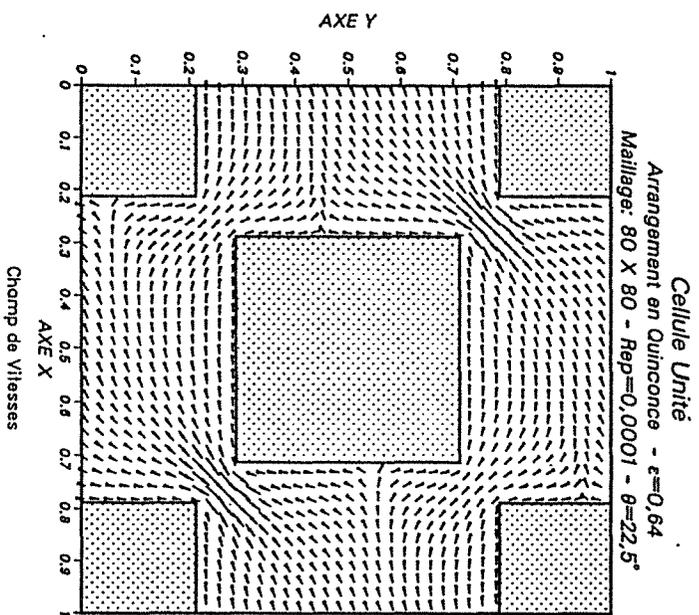


Figure 4.52 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses
 $\epsilon=0,64$ - $\theta=22,5^\circ$ - $Re = 0,0001$
 ϵ_p

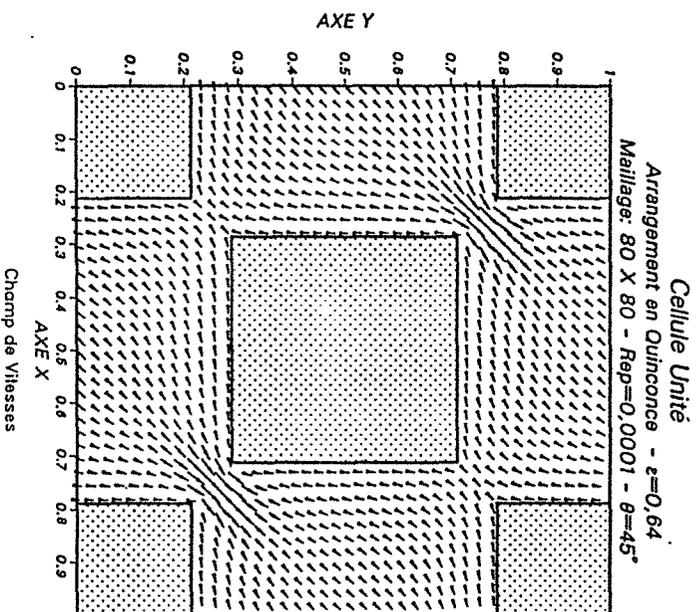


Figure 4.53 - Arrangement en quinconce - champ de vitesses
 $\epsilon=0,64$ - $\theta=45^\circ$ - $Re = 0,0001$
 ϵ_p

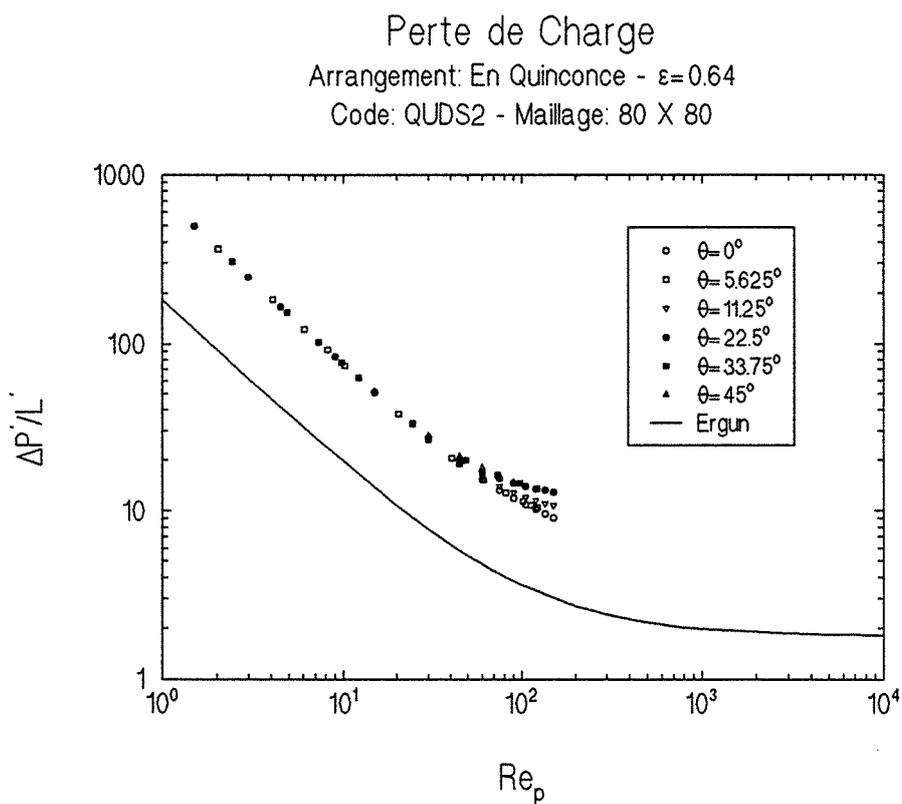


Figure 4.54 - Perte de charge arrangement en quinconce - $\varepsilon_B=0,64$

4.8.1.4-ARRANGEMENT EN CHICANE

Comme pour les arrangements précédents, les figures 4.55 et 4.56 montrent pour un nombre de Reynolds particulière égal à 75, les champs de vitesses obtenus pour l'arrangement en chicane pour des angles $\theta \cong 22,5^\circ$ et 45° et avec une porosité égale à 0,36. De même, sur les figures 4.57 et 4.58, sont montrés les champs de vitesses calculés cette fois-ci pour une porosité égale à 0,64.

Il est intéressant de remarquer ici que pour l'écoulement principal faisant un angle de $22,5^\circ$ environ par rapport à l'axe x et pour $\varepsilon_B = 0,64$, il n'existe pas de zones de recirculation importantes. Au contraire, pour un angle $\theta = 45^\circ$, on observe l'apparition de deux zones de forte recirculation.

Les pertes de charge, calculées pour l'arrangement en chicane et pour des porosités $\varepsilon_B = 0,36$ et 0,64, sont représentées sur les figures 4.59 et 4.60. Seules trois valeurs de l'angle θ ont été étudiées pour cet arrangement géométrique, à savoir $\theta \cong 22^\circ$, 34° et 45° . Encore une fois, cette limitation a été imposée par la résolution numérique. Au dessous de ces valeurs, les conditions de périodicité ne sont pas vérifiées d'une façon satisfaisante, pour des nombres de Reynolds particuliers trop grands.

En outre, les valeurs de l'angle θ ne correspondent pas, exactement, à celles des autres arrangements du fait de la non-symétrie de l'arrangement en chicane. L'angle θ est imposé par le rapport entre les débits dans les deux directions de l'espace. Dans le cas de l'arrangement en chicane, même pour $\theta = 0^\circ$ la non-symétrie mène à une vitesse moyenne volumique non nulle dans la direction OY. Le milieu ne vérifie pas la règle de Dupuit.

Comme pour les arrangements géométriques déjà présentés (en ligne et en quinconce), la perte de charge (figures 4.59 et 4.60) croît à mesure que l'angle θ augmente de 22° à 45° . Une autre caractéristique retrouvée est d'obtenir les plus grandes valeurs de $\Delta P' / L'$ pour une porosité $\varepsilon_B = 0,64$.

Dans ce cas où l'écoulement suit des chemins sinueux (figures 4.55 à 4.58), les pertes de charge sont en accord meilleur que qualitatif avec les résultats donnés par l'équation d'Ergun.

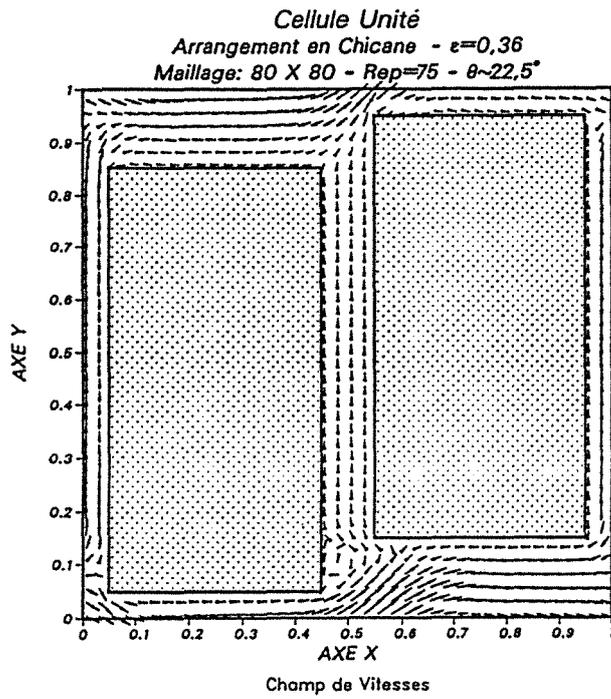


Figure 4.55 - Arrangement en chicane - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,36 - \theta \cong 22,5^\circ$$

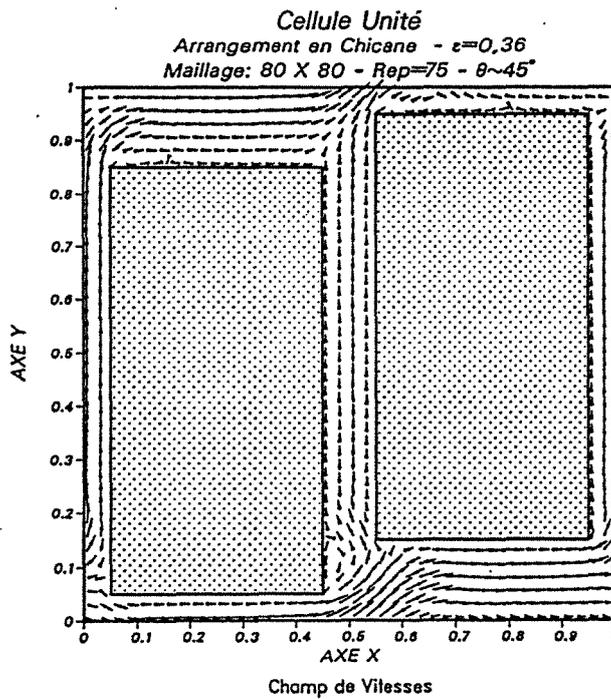


Figure 4.56 - Arrangement en chicane - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,36 - \theta \cong 45^\circ$$

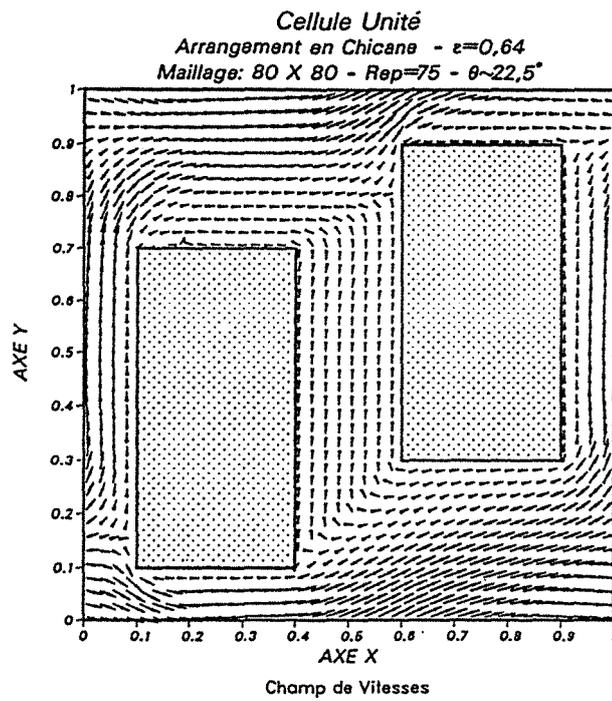


Figure 4.57 - Arrangement en chicane - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,64 - \theta \approx 22,5^\circ$$

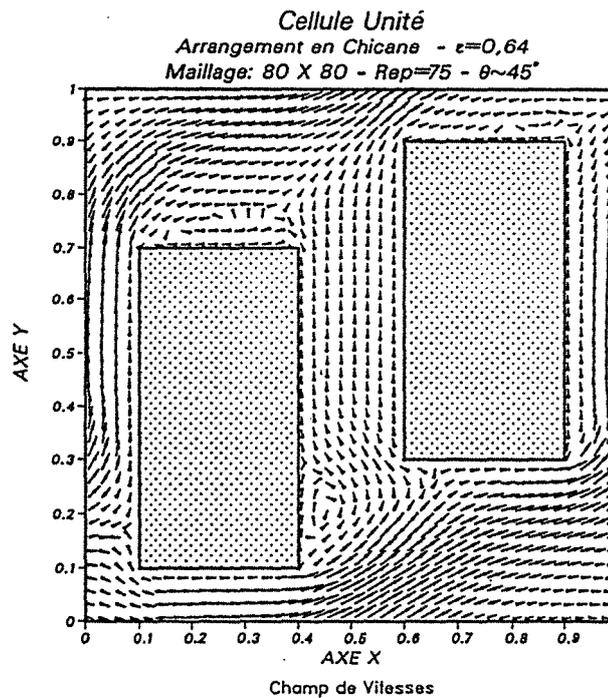


Figure 4.58 - Arrangement en chicane - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,64 - \theta \approx 45^\circ$$

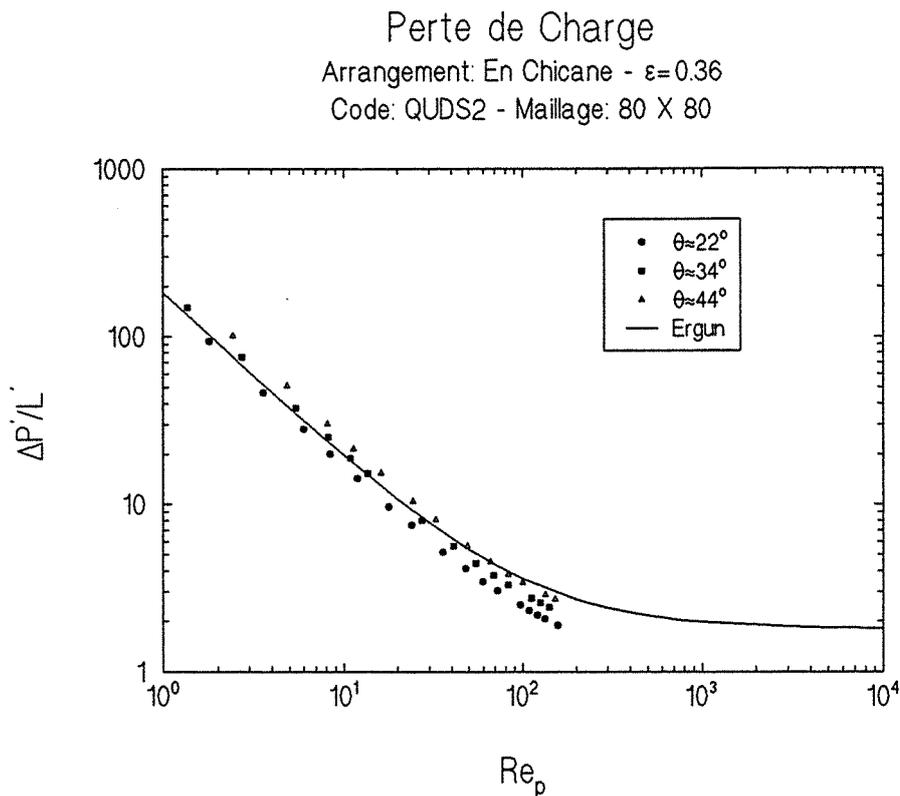


Figure 4.59 - Perte de charge - arrangement en chicane - $\epsilon_B = 0,36$

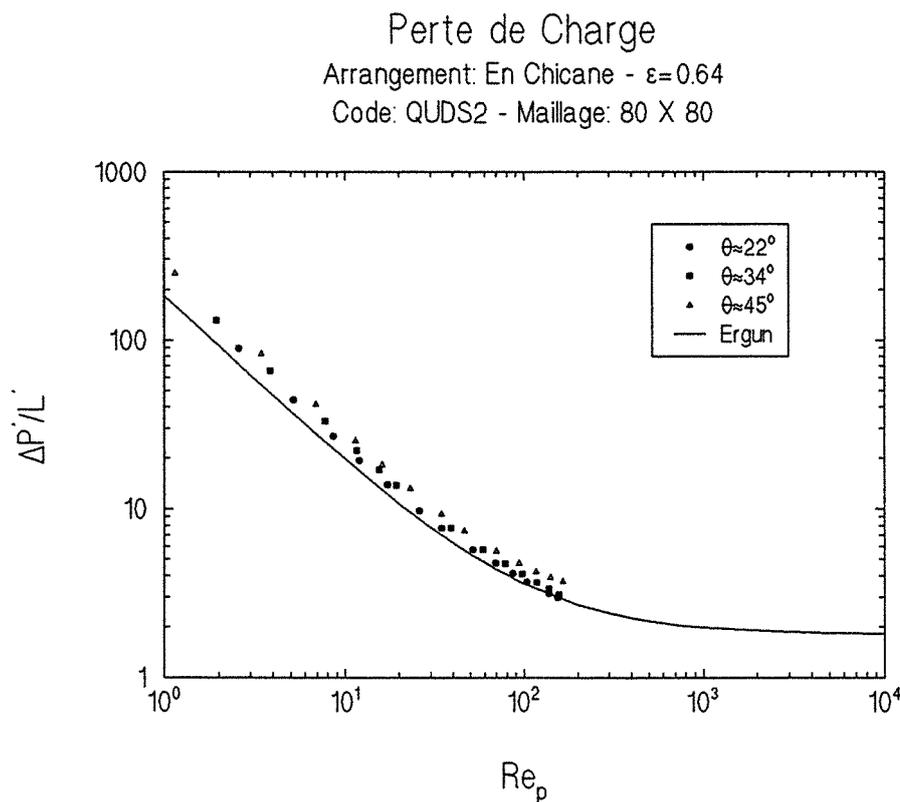


Figure 4.60 - Perte de charge - arrangement en chicane - $\epsilon_B = 0,64$

4.8.1.5-ANALYSE DES TERMES NON LINÉAIRES

Afin de pouvoir mettre en évidence l'influence de la porosité, de la direction du vecteur vitesse moyenne et de la géométrie sur les termes non linéaires, on va réécrire l'équation (30) sous une autre forme, proposée par Coulaud et al [27]:

$$\frac{\Delta P'}{L'} \cdot Re_p = \gamma + \lambda Re_p \tag{36}$$

Dans le but de pouvoir comparer les différents résultats, on va normer l'équation (36) en la divisant par γ . La variable γ correspond à la valeur de $\Delta P' \cdot Re_p / L'$, lorsque Re_p tend vers zéro. Le tableau 4.3 fournit les valeurs de γ pour les trois types d'arrangements ordonnés.

Arrangement	ϵ_B	γ
En Ligne	0,36	223
	0,64	256
En Quinconce	0,64	745
En Chicane †	0,36	169
		209
		246
	0,64	229
		253
		286

† Les valeurs correspondent aux trois angles (22°, 34° et 45°)

Tableau 4.3 - Valeurs de γ

Contrairement aux cas précédents, les valeurs de γ (équations (34) et (35)) pour l'arrangement en chicane, c'est-à-dire de la constante de Kozeny, varient avec la direction de l'écoulement. Le comportement anisotrope de l'arrangement vis-à-vis de l'hydrodynamique explique bien entendu ce comportement. Pour que γ soit indépendant de θ , il faut que le tenseur perméabilité soit sphérique. Autrement dit, il faut que le milieu soit isotrope vis-à-vis de la perméabilité.

Sur les figures 4.61 à 4.69, on montre l'influence de la porosité sur

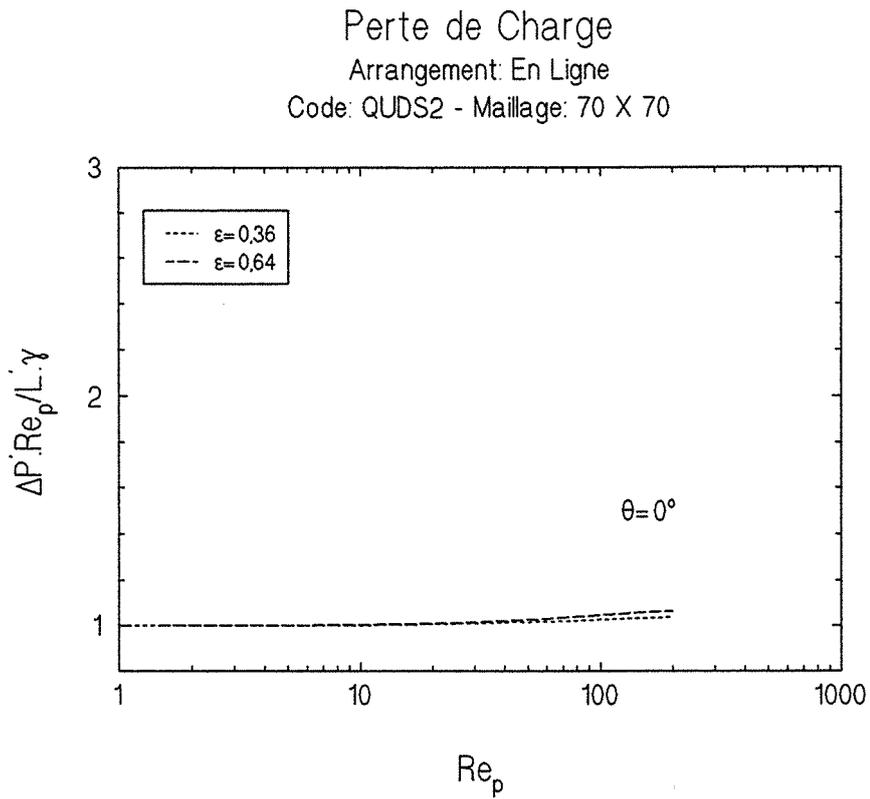


Figure 4.61 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta=0^\circ$

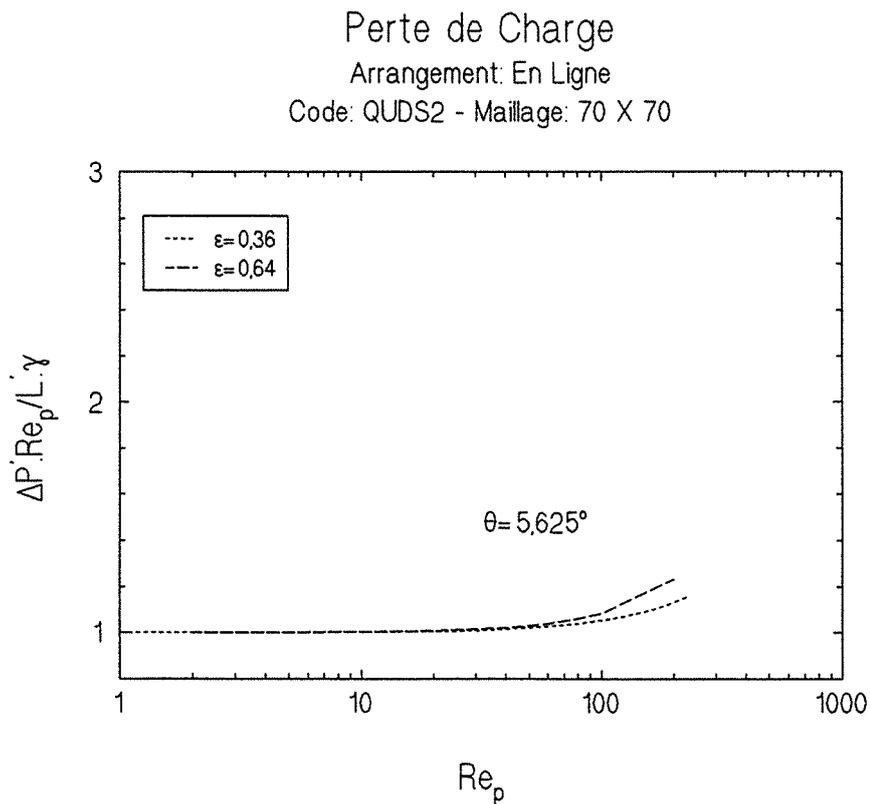


Figure 4.62 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta=5,625^\circ$

Perte de Charge
 Arrangement: En Ligne
 Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

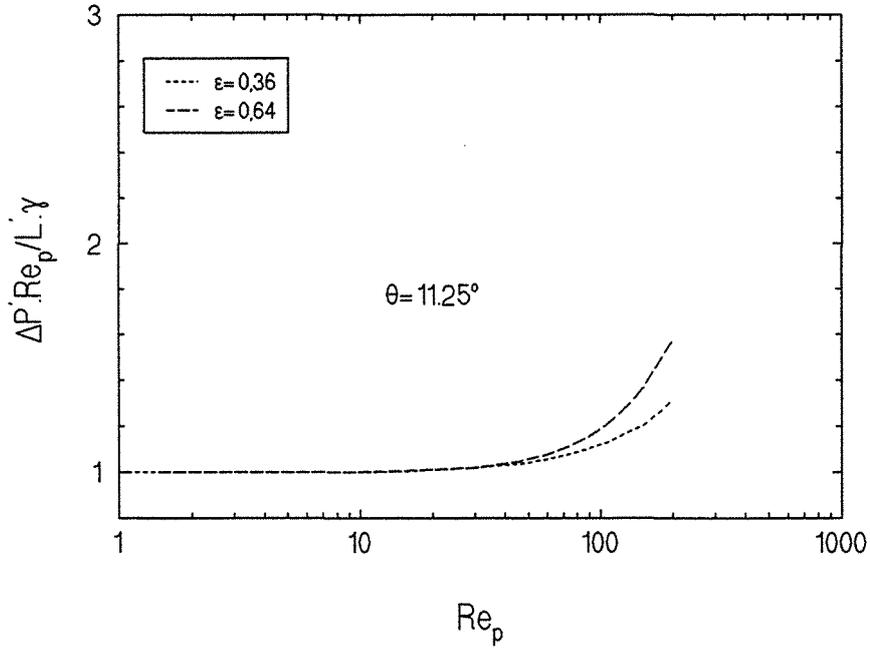


Figure 4.63 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta=11,25^\circ$

Perte de Charge
 Arrangement: En Ligne
 Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

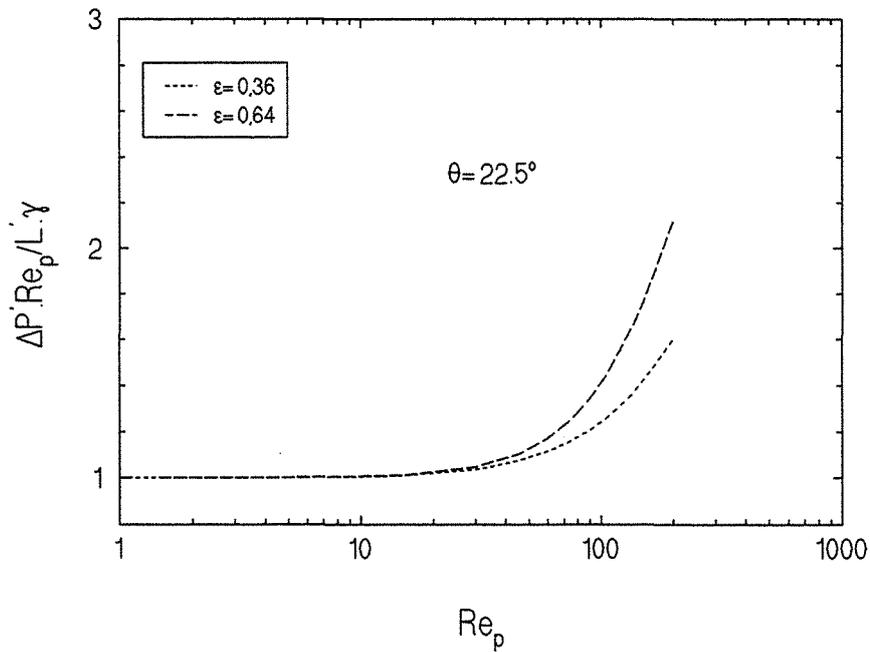


Figure 4.64 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta=22,5^\circ$

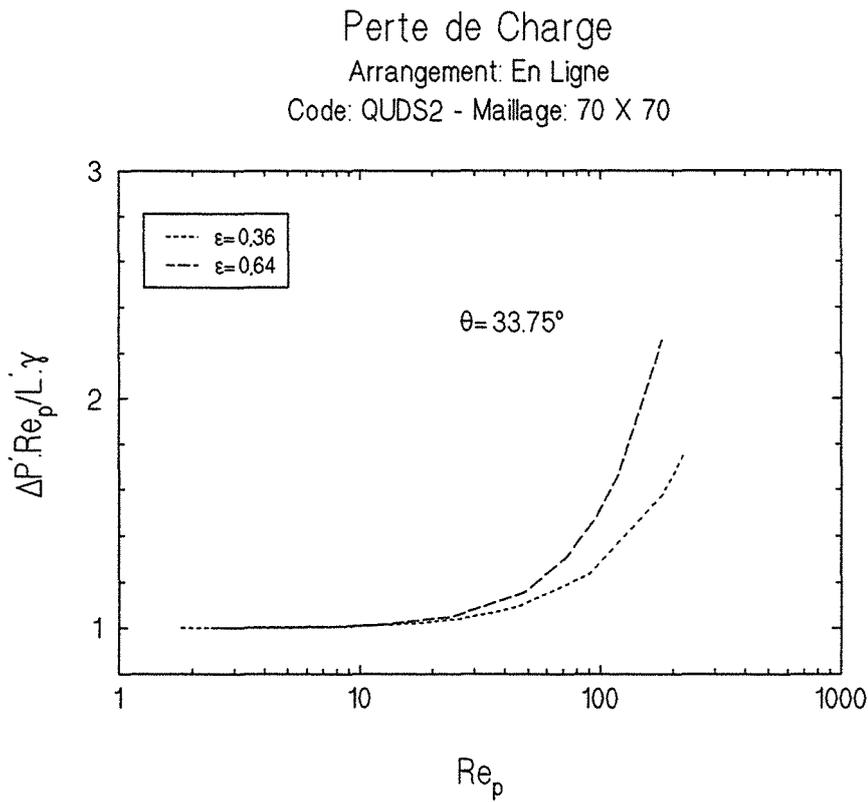


Figure 4.65 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 33,75^\circ$

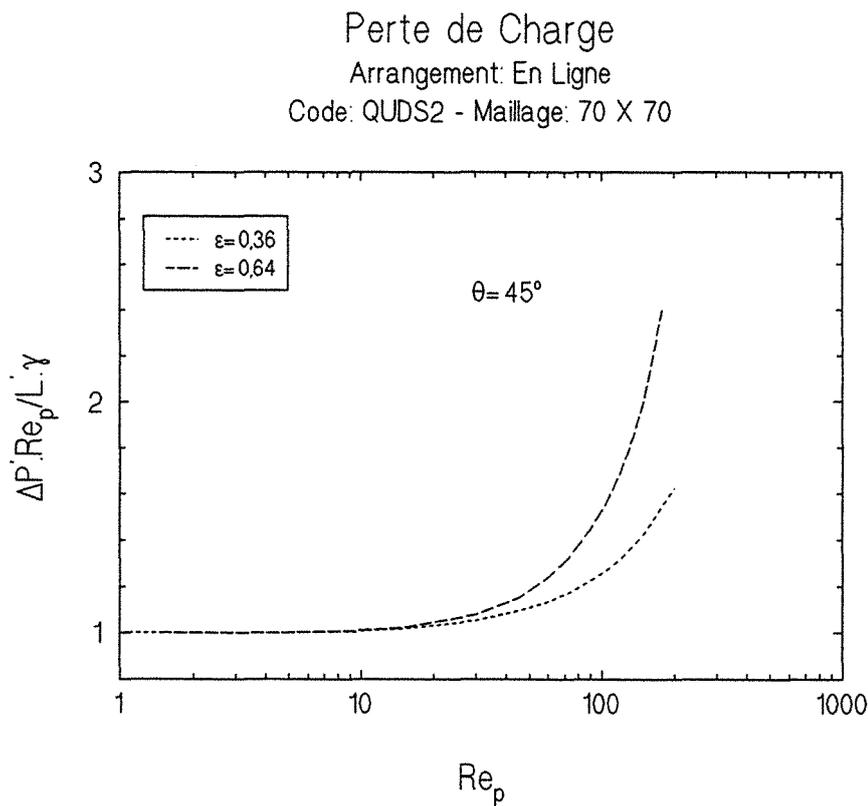


Figure 4.66 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\theta = 45^\circ$

Perte de Charge
 Arrangement: En Chicane
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

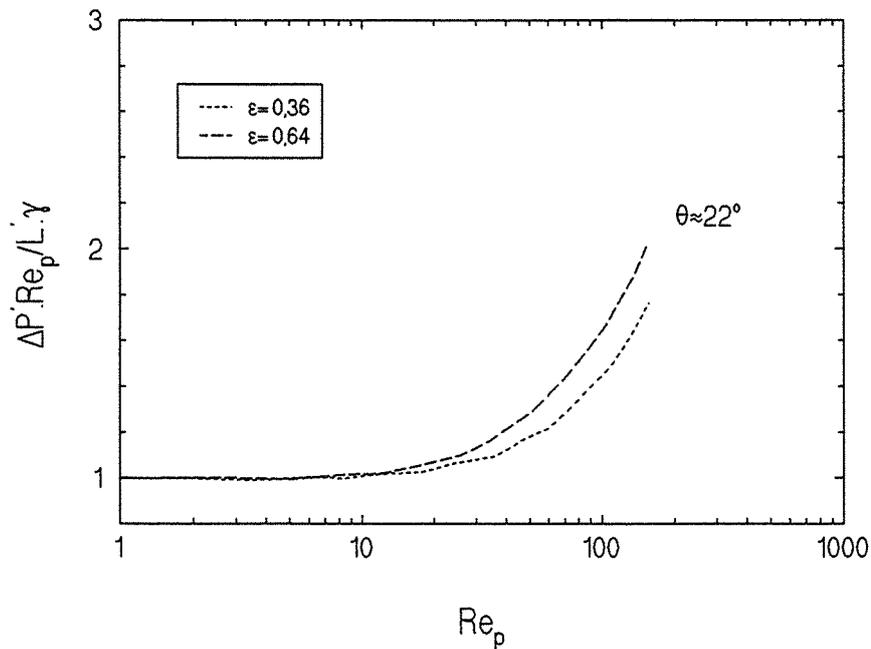


Figure 4.67 - Perte de charge - arrangement en chicane - $\theta \approx 22^\circ$

Perte de Charge
 Arrangement: En Chicane
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

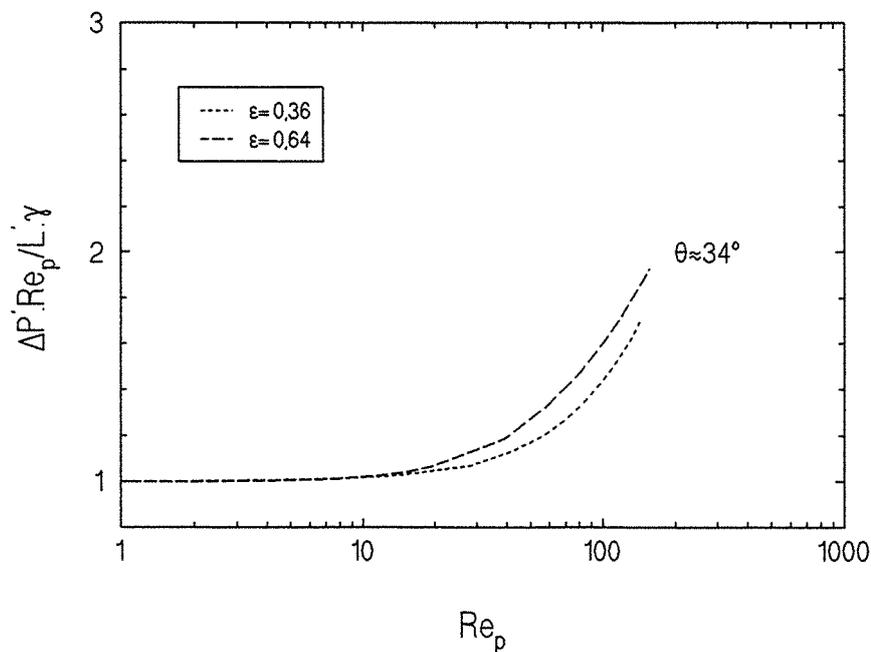


Figure 4.68 - Perte de charge - arrangement en chicane - $\theta \approx 34^\circ$

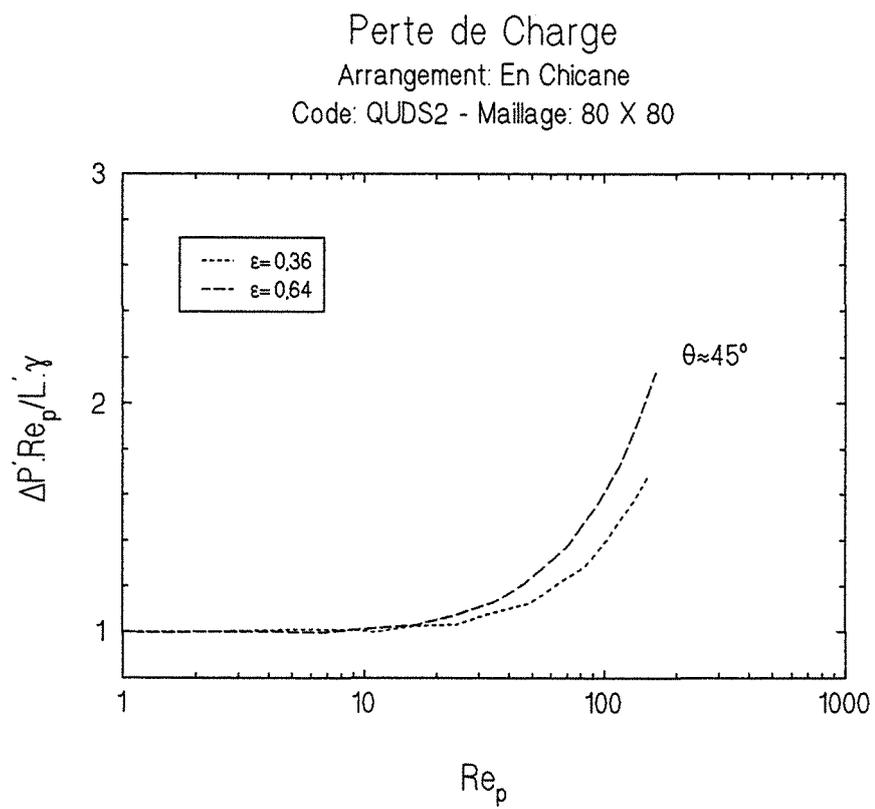


Figure 4.69 - Perte de charge - arrangement en chicane - $\theta \approx 45^\circ$

les courbes de $\Delta P' \cdot Re_p / L' \cdot \gamma$ versus le nombre de Reynolds particulière Re_p , ceci pour les arrangements en ligne et en chicane et pour les deux porosités étudiées $\varepsilon_B = 0,36$ et $0,64$.

Dans tous les cas présentés, on voit clairement que les résultats obtenus pour $\varepsilon_B = 0,64$, possèdent des valeurs de la fonction $\Delta P' \cdot Re_p / L' \cdot \gamma$ supérieures à celles obtenues pour $\varepsilon_B = 0,36$.

Ces résultats sont en accord avec ceux de Coulaud et al [27], qui ont étudié l'écoulement d'un fluide incompressible à travers des arrangements de cylindres circulaires.

Néanmoins, dans le travail de Coulaud et al [27], l'influence de la direction du vecteur vitesse moyenne sur la perte de charge n'a pas été envisagée. Les figures 4.70 à 4.74 montrent cette influence sur la fonction $\Delta P' \cdot Re_p / L' \cdot \gamma$, pour les arrangements en ligne ($\varepsilon_B = 0,36$ et $0,64$), en quinconce ($\varepsilon_B = 0,64$) et en chicane ($\varepsilon_B = 0,36$ et $0,64$).

Dans le cas de l'arrangement en ligne (figures 4.70 et 4.71), les termes non linéaires jouent de façon appréciable pour des nombres de Reynolds particuliers d'autant plus petits ($20 \leq Re_p \leq 40$) que la valeur de l'angle θ ($0 \leq \theta \leq 45^\circ$) est grande.

L'arrangement en quinconce (figure 4.72) présente, pour toutes les valeurs de θ , des déviations significatives de la loi de Darcy pour des nombres de Reynolds particuliers supérieurs à 20 environ.

Pour les arrangements en ligne et en quinconce la fonction $\Delta P' \cdot Re_p / L' \cdot \gamma$ croît au fur et à mesure qu'on augmente la valeur de θ entre 0° et 45° . Les courbes obtenues pour les plus grandes valeurs de θ ($22,5^\circ < \theta < 45^\circ$) sont presque confondues.

Dans le cas de l'arrangement en chicane, les déviations de la loi linéaire de Darcy se manifestent pour des nombres de Reynolds particuliers supérieurs à 20 environ avec une porosité $\varepsilon_B = 0,36$ (figure 4.73) et pour des Reynolds particuliers supérieurs à 10 environ avec une porosité égale à $0,64$ (figure 4.74). Les trois courbes, pour différentes valeurs de l'angle θ , sont presque confondues dans les deux cas.

Finalement, sur les figures 4.75 à 4.77 on compare l'influence du type d'arrangement (en ligne, en quinconce et en chicane) sur les pertes de charge, ceci pour une porosité $\varepsilon_B = 0,64$ et pour trois valeurs de l'angle θ ($\theta = 22,5^\circ, 33,75^\circ$ et 45°).

D'une façon générale on peut dire que les valeurs de $\Delta P' \cdot Re_p / L' \cdot \gamma$ dues

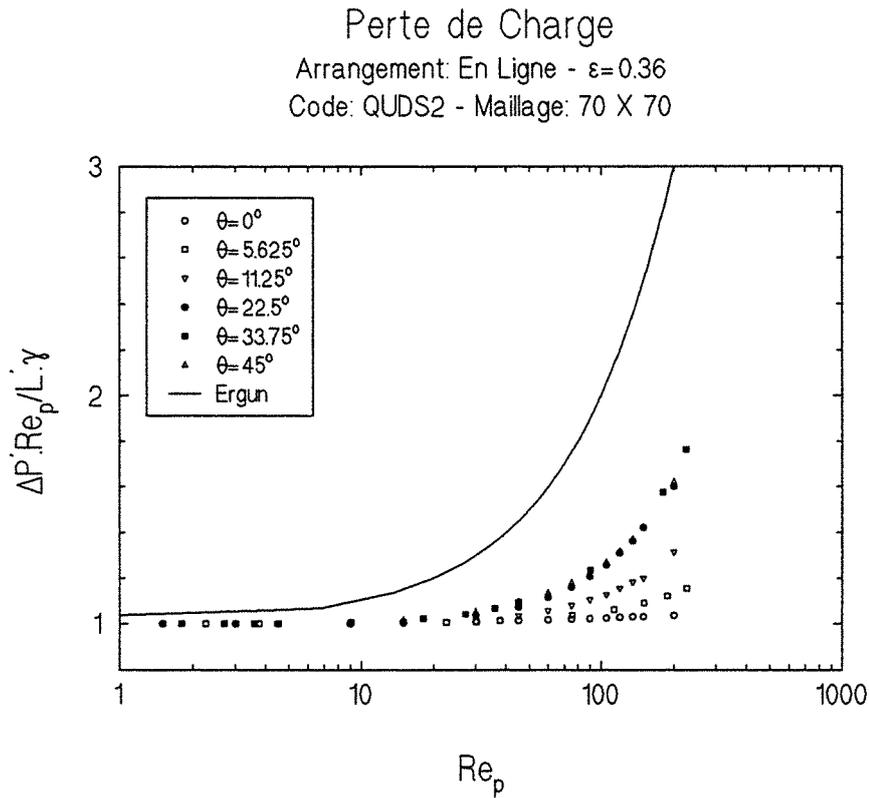


Figure 4.70 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\varepsilon_B=0,36$

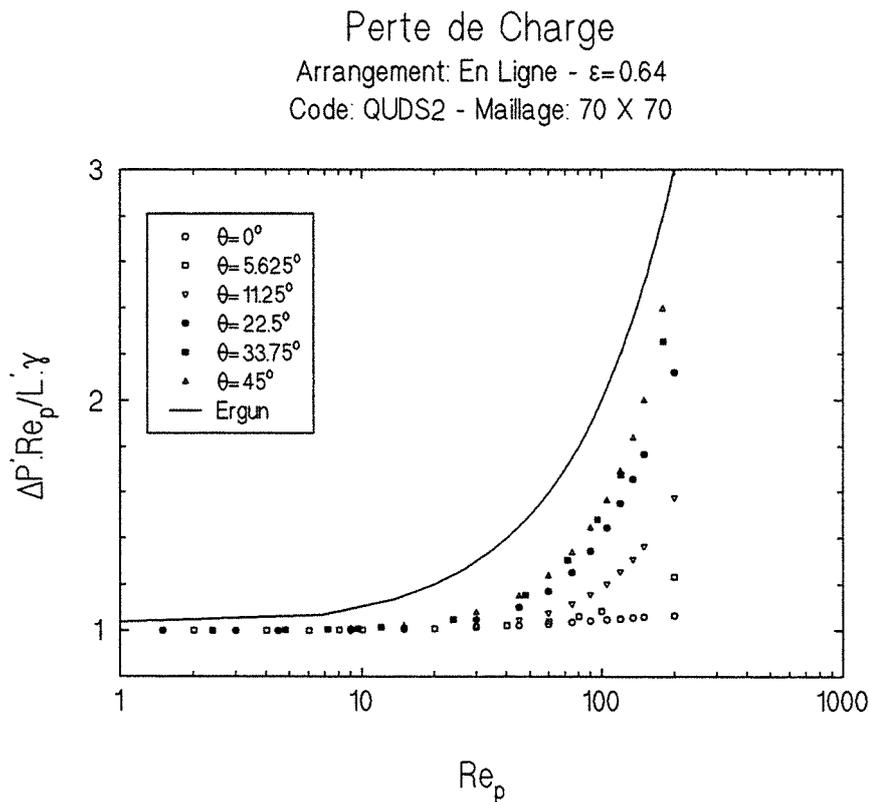


Figure 4.71 - Perte de charge - arrangement en ligne - $\varepsilon_B=0,64$

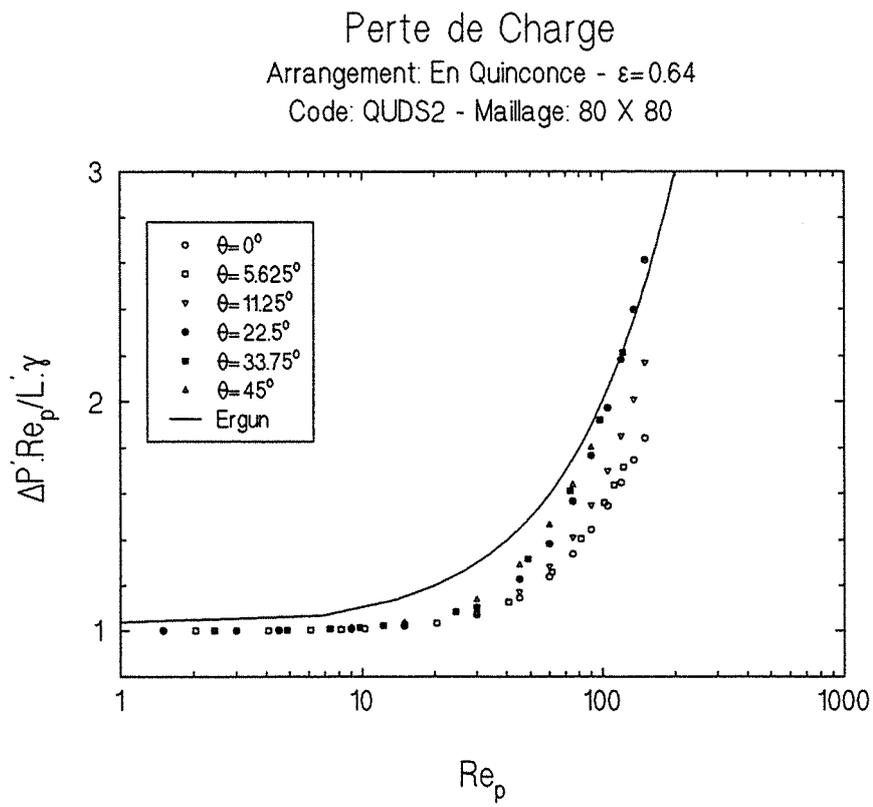


Figure 4.72 - Perte de charge - arrangement en quinconce - $\epsilon_B=0,64$

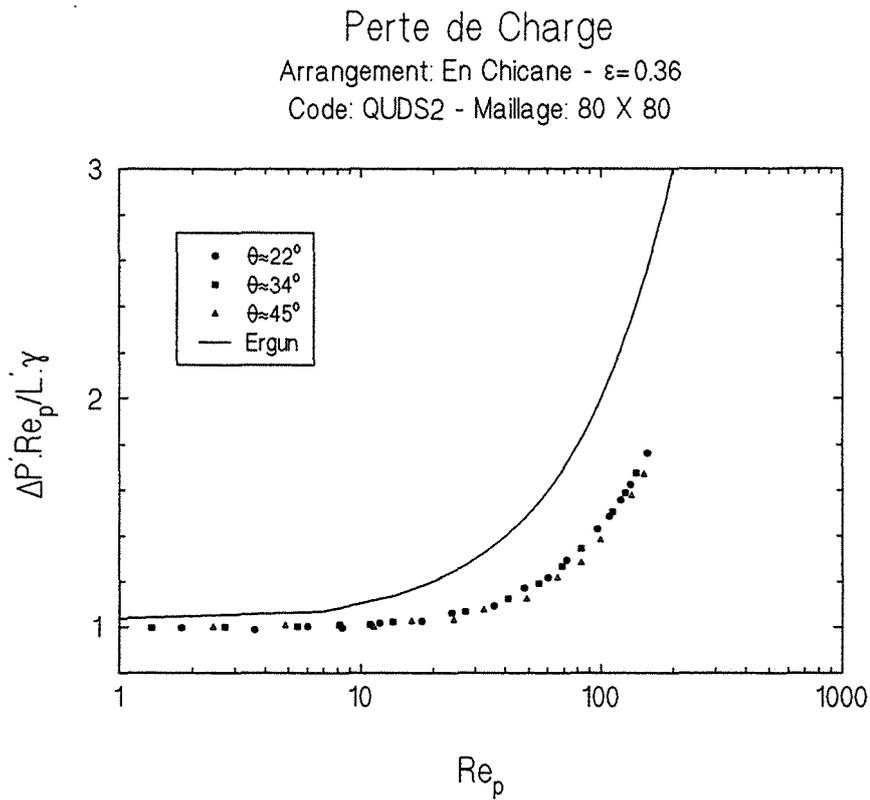


Figure 4.73 - Perte de charge - arrangement en chicane - $\varepsilon_B=0,36$

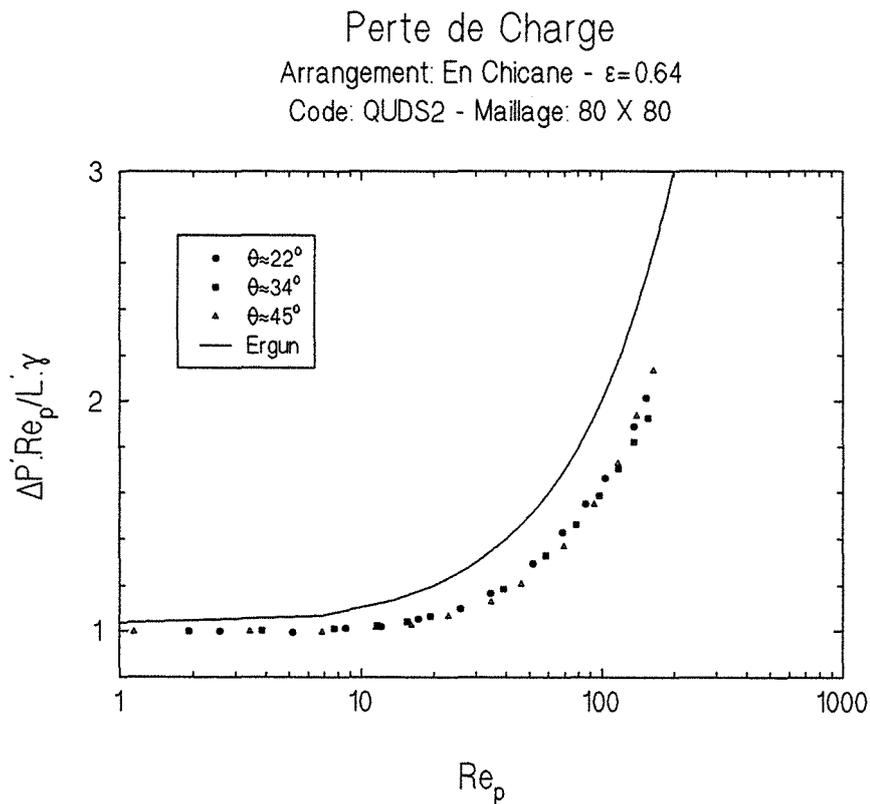


Figure 4.74 - Perte de charge - arrangement en chicane - $\varepsilon_B=0,64$

Perte de Charge

Porosité: $\epsilon=0,64$

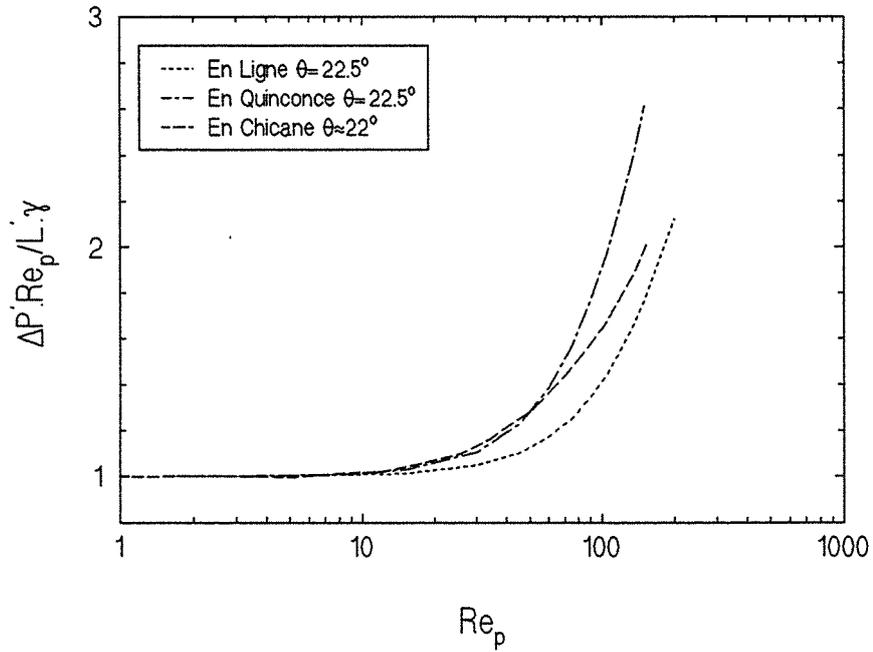


Figure 4.75 - Perte de charge - milieux ordonnés - $\theta=22,5^\circ$

Perte de Charge

Porosité: $\epsilon=0,64$

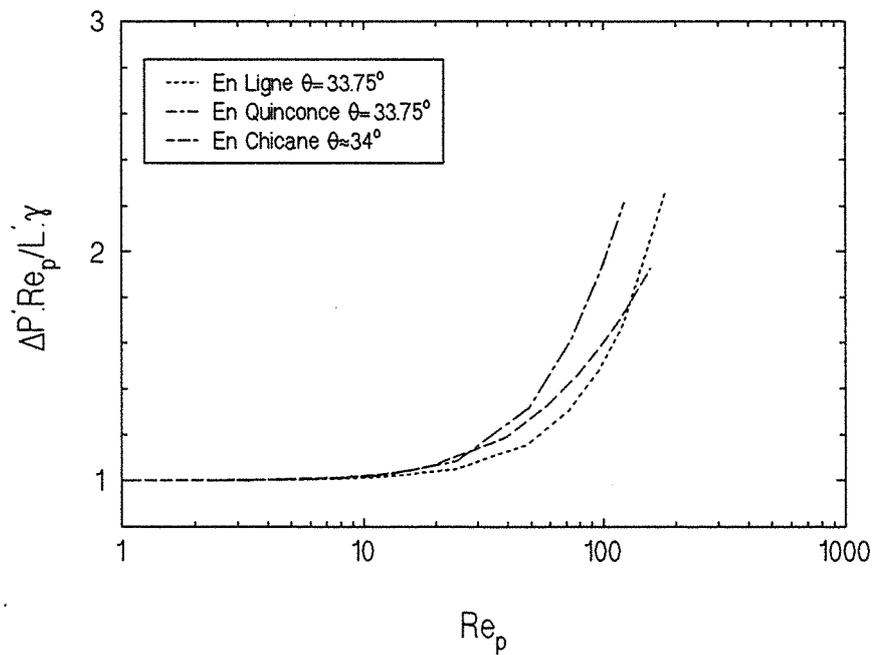


Figure 4.76 - Perte de charge - milieux ordonnés - $\theta=33,75^\circ$

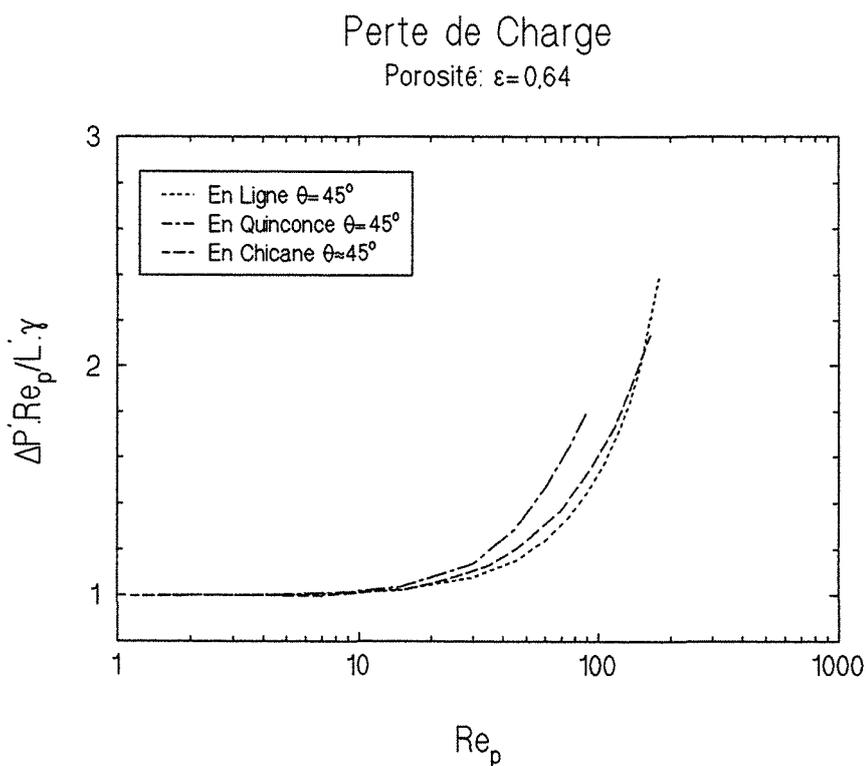


Figure 4.77 - Perte de charge - milieux ordonnés - $\theta=45^\circ$

aux cylindres disposés en quinconce sont plus élevées que celles de l'arrangement en ligne et en chicane.

L'arrangement en chicane, par contre, présente des valeurs de $\Delta P' \cdot Re_p / L' \cdot \gamma$ intermédiaires à celles des deux autres arrangements pour des nombres de Reynolds modérés. L'étendue de cette zone varie suivant l'angle θ , atteignant des nombres de Reynolds particuliers plus élevés lorsque l'angle θ diminue.

Pour des très grands nombres de Reynolds particuliers Re_p , la tendance paraît s'inverser et l'arrangement en chicane a des valeurs de la fonction $\Delta P' \cdot Re_p / L' \cdot \gamma$ plus petites que les deux autres arrangements.

4.8.2-INFUENCE DU SCHEMA NUMERIQUE

Ce paragraphe est consacré à l'influence, sur le calcul de la perte de charge, des différents schémas de discrétisation des termes convectifs (paragraphe 3.3.6 du chapitre 3). Les résultats issus des trois codes de calcul: **PDS**, **QUDS2** ($\alpha=0,5$) et **QUDS3** ($\alpha=0,75$), sont comparés entre eux.

Les figures 4.78 et 4.79 contiennent les résultats obtenus pour l'arrangement en ligne avec les porosités 0,36 et 0,64. Sur la figure 4.80, sont représentés les résultats obtenus pour l'arrangement en quinconce avec une porosité égale à 0,64. Enfin, les figures 4.81 et 4.82 comparent les résultats concernant l'arrangement en chicane avec les porosités 0,36 et 0,64.

Tous les cas ont été calculés pour une valeur de l'angle θ égale à 45° . Cette valeur de l'angle θ est la plus défavorable en ce qui concerne l'erreur introduite par la diffusion numérique (paragraphe 3.3.6). Les mêmes résultats, obtenus cette fois pour un angle $\theta=0^\circ$, présentent les mêmes valeurs pour les trois codes de calcul et pour toute la plage du nombre de Reynolds particulière étudiée.

On peut conclure que les différents schémas, donnent des résultats sensiblement équivalents à peu près dans tous les cas, ceci pour des nombres de Reynolds particuliers inférieurs à 200.

Perte de Charge
 Arrangement: En Ligne - $\varepsilon=0.36$
 Maillage: 70 X 70

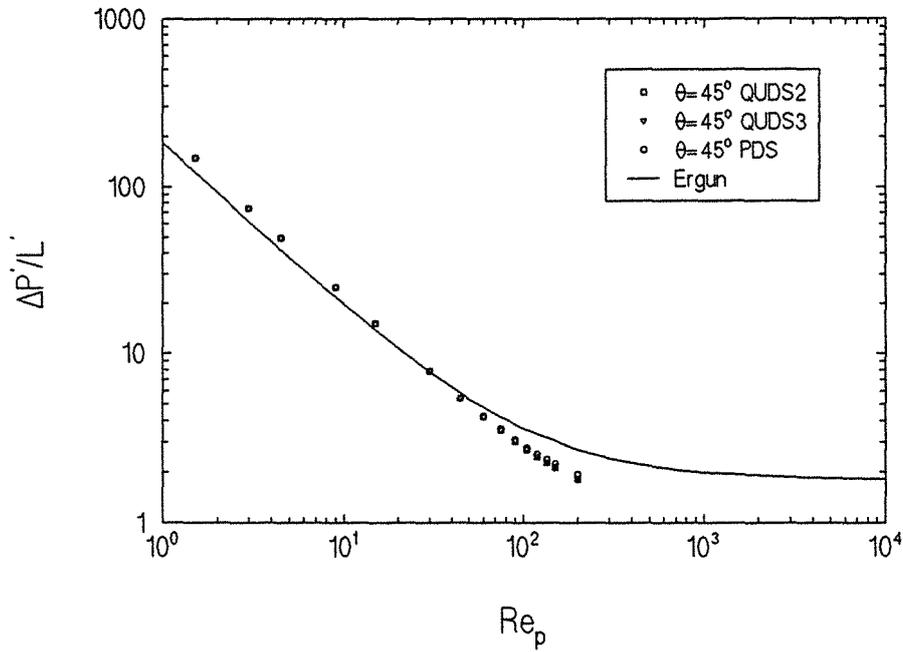


Figure 4.78 - Perte de charge - différents schémas numériques

Perte de Charge
 Arrangement: En Ligne - $\varepsilon=0.64$
 Maillage: 70 X 70

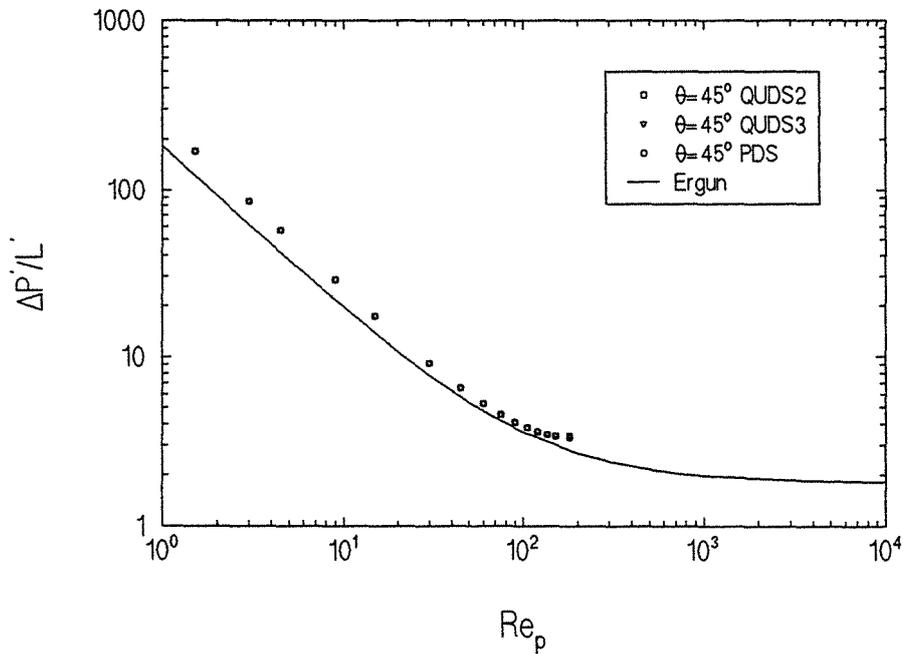


Figure 4.79 - Perte de charge - différents schémas numériques

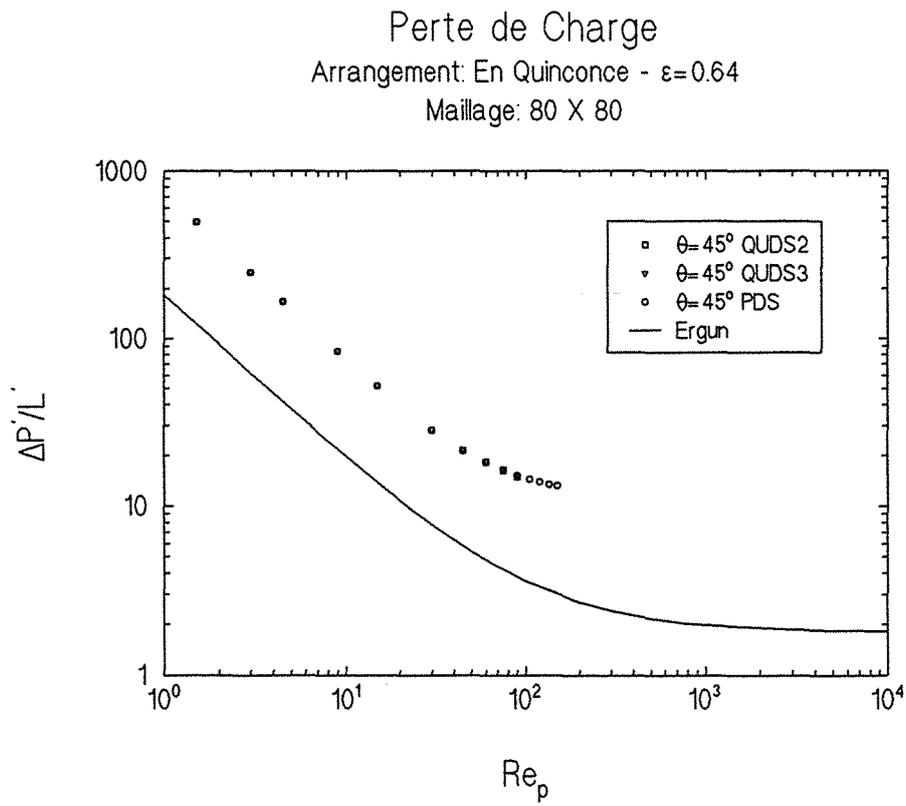


Figure 4.80 - Perte de charge - différents schémas numériques

Perte de Charge
 Arrangement: En Chicane - $\varepsilon=0.36$
 Maillage: 80 X 80

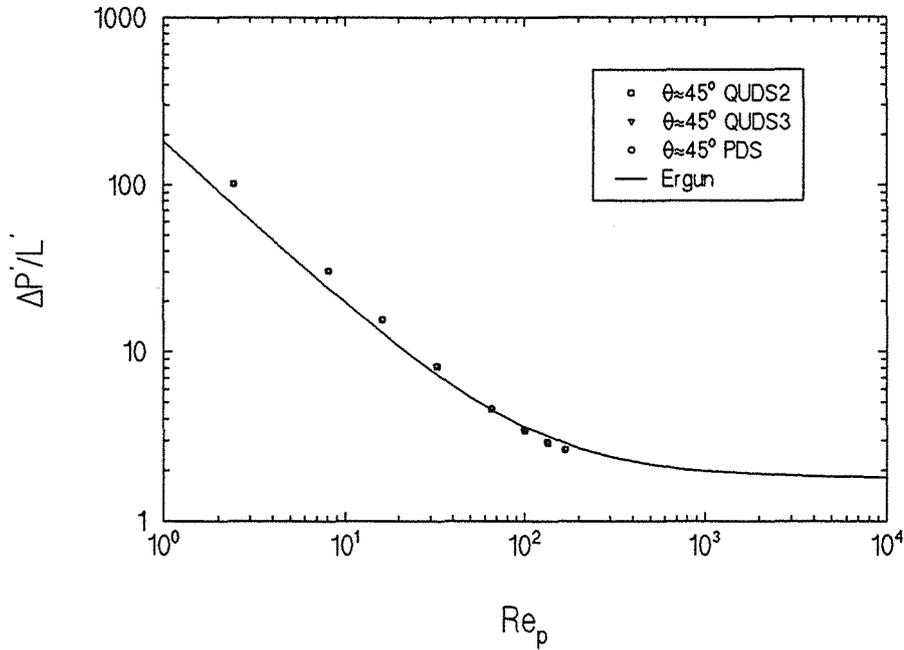


Figure 4.81 - Perte de charge - différents schémas numériques

Perte de Charge
 Arrangement: En Chicane - $\varepsilon=0.64$
 Maillage: 80 X 80

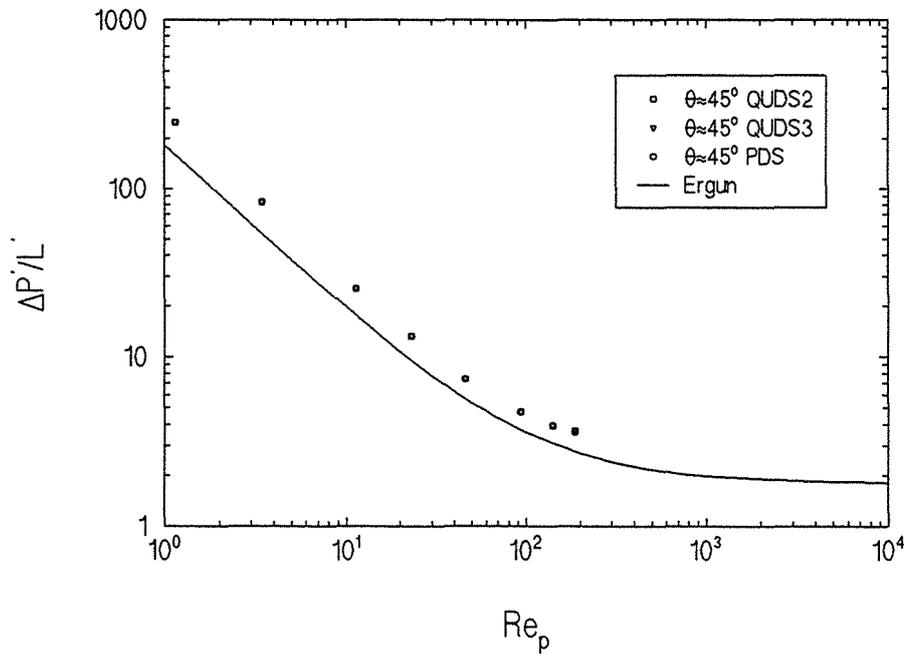


Figure 4.82 - Perte de charge - différents schémas numériques

4.8.3-ARRANGEMENTS "DÉSORDONNÉS"

Comme dans le cas des arrangements ordonnés, les cellules unités utilisées sont carrées ($L=H$). Une seule porosité a été étudiée $\varepsilon_B \cong 0,7$. Les arrangements géométriques, composés de cylindres carrés, ont été montrés sur les figures 4.16 à 4.35.

Le maillage uniforme qui a été retenu (conformément au paragraphe 4.8.1) est de 110 X 110 volumes de contrôle. Chaque carré (figures 4.16 à 4.35) dans le plan XY est donc constitué de 10 X 10 volumes de contrôle. Le même critère de convergence que pour les arrangements ordonnés est adopté ici ($\varepsilon=1,0 \cdot 10^{-5}$).

On commence par présenter, sur le tableau 4.4, les constantes de Kozeny k_K ou valeurs de γ (équation (36)) calculées pour les 20 milieux désordonnés pour un angle $\theta \cong 45^\circ$.

Milieu	γ	k_K
01	419	11,6
02	444	12,3
03	540	15,0
04	324	9,0
05	350	9,7
06	333	9,3
07	375	10,4
08	354	9,8
09	384	10,7
10	460	12,8
11	371	10,3
12	332	9,2
13	385	10,7
14	281	7,8
15	459	12,8
16	439	12,2
17	303	8,4
18	311	8,6
19	470	13,1
20	250	6,9

Tableau 4.4 - Constante de Kozeny

La diversité d'arrangements employés mène à une dispersion des résultats, les valeurs de γ variant du simple au double.

Néanmoins l'ensemble des résultats se trouve compris entre ceux donnés pour les arrangements en ligne et en quinconce avec une porosité $\varepsilon_B = 0,64$. Comme pour le cas des arrangements ordonnés (en ligne et en quinconce), les valeurs sont plus élevées que celles prédites par les équations (27) et (30).

On poursuit avec la présentation de la perte de charge corrigée $\Delta P'/L'$ versus le nombre de Reynolds corrigé Re_p . La figure 4.83 contient l'ensemble des résultats et l'équation d'Ergun. On voit que les courbes se trouvent bien au-dessus des valeurs prévues par l'équation d'Ergun.

De manière à mieux visualiser, les variations de $\Delta P'/L'$ en fonction du nombre de Reynolds particulaire Re_p , on a représenté sur les figures 4.84 et 4.85 les résultats des milieux en deux groupes en les distinguant d'après la valeur de la constante de Kozeny k_K .

Les effets d'inertie pour l'ensemble des résultats, responsables de la déviation de la loi de Darcy, peuvent être observés sur la figure 4.86.

Les effets non linéaires deviennent importants dès que le nombre de Reynolds particulaire Re_p est plus grand que 10 environ. La correction non linéaire de la loi d'Ergun (courbe en trait continu), décrit nos résultats numériques de manière assez satisfaisante.

On a voulu aussi, pour les cas des arrangements désordonnés, étudier l'influence de l'angle du vecteur vitesse moyenne sur la perte de charge. Pour ce faire, vu l'étendue du travail demandé et le temps nécessaire à l'exécution des simulations numériques, on a choisi au hasard cinq milieux parmi les vingt milieux désordonnés étudiés (milieux numéros: 5, 11, 13, 16 et 20).

Les résultats pour ces cinq milieux et pour trois valeurs de l'angle θ ($\theta \cong 22^\circ, 34^\circ$ et 45°), sont montrés sur les figures 4.87 à 4.91. On n'a pas considéré des angles inférieurs à ceux utilisés, parce que sinon les conditions de périodicité dans les deux directions de l'espace, n'étaient pas vérifiées numériquement de manière satisfaisante.

L'influence de l'angle θ pour les valeurs étudiées reste faible sur la perte de charge, ce qui corrobore l'idée d'un milieu aléatoire isotrope.

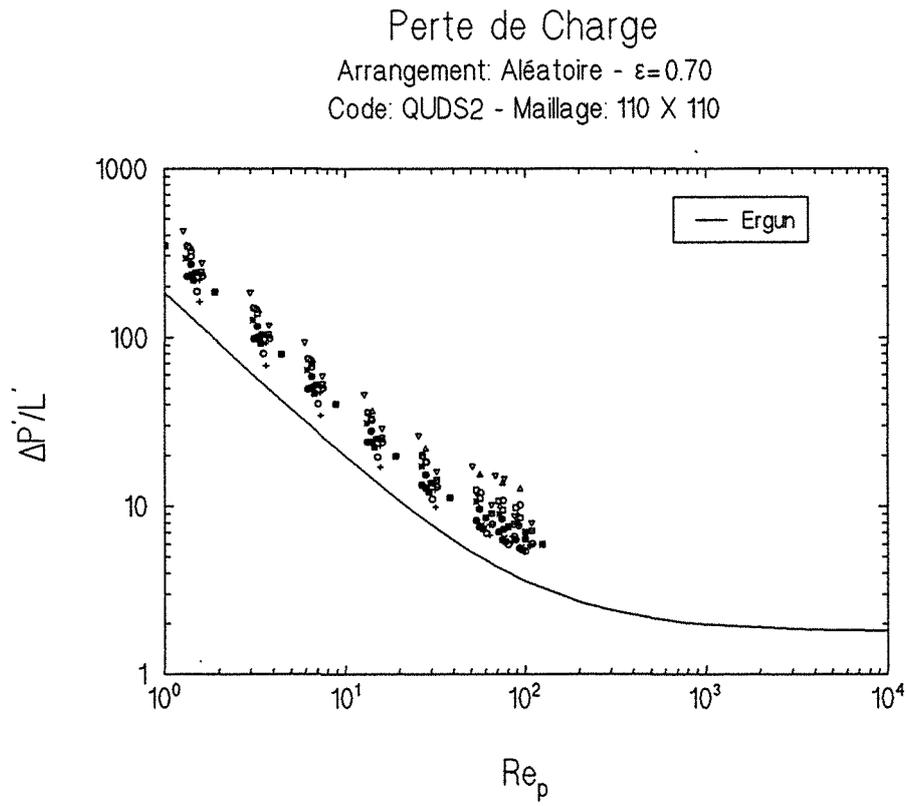


Figure 4.83 - Perte de charge - milieux désordonnés - $\epsilon_p=0,7$

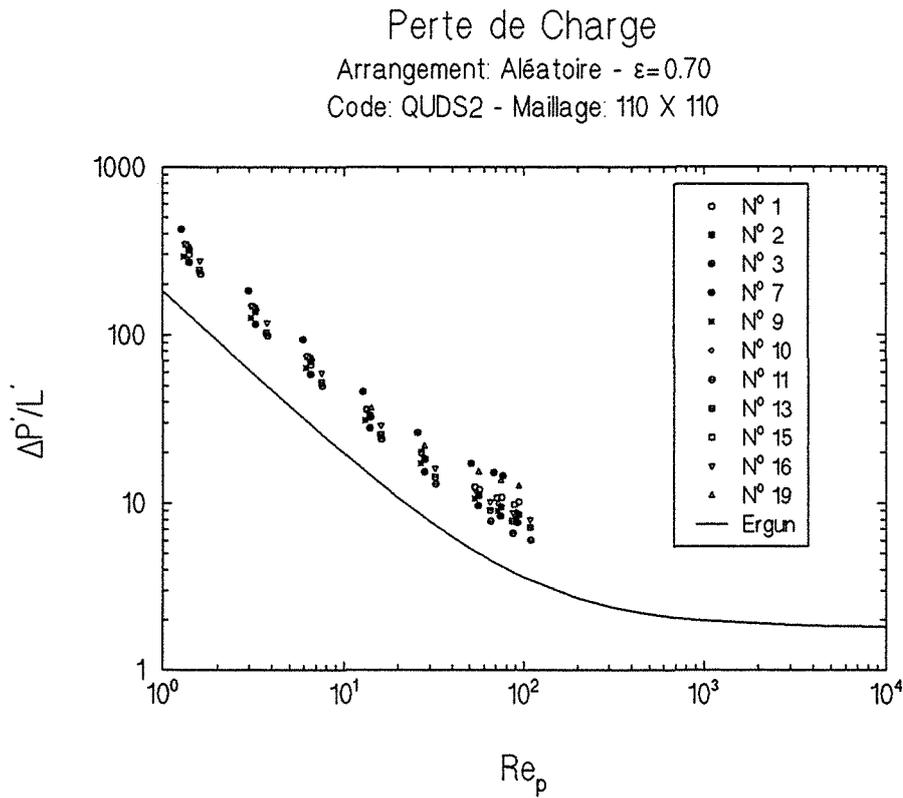


Figure 4.84 - Perte de charge - milieux désordonnés - $\varepsilon_B=0,7$

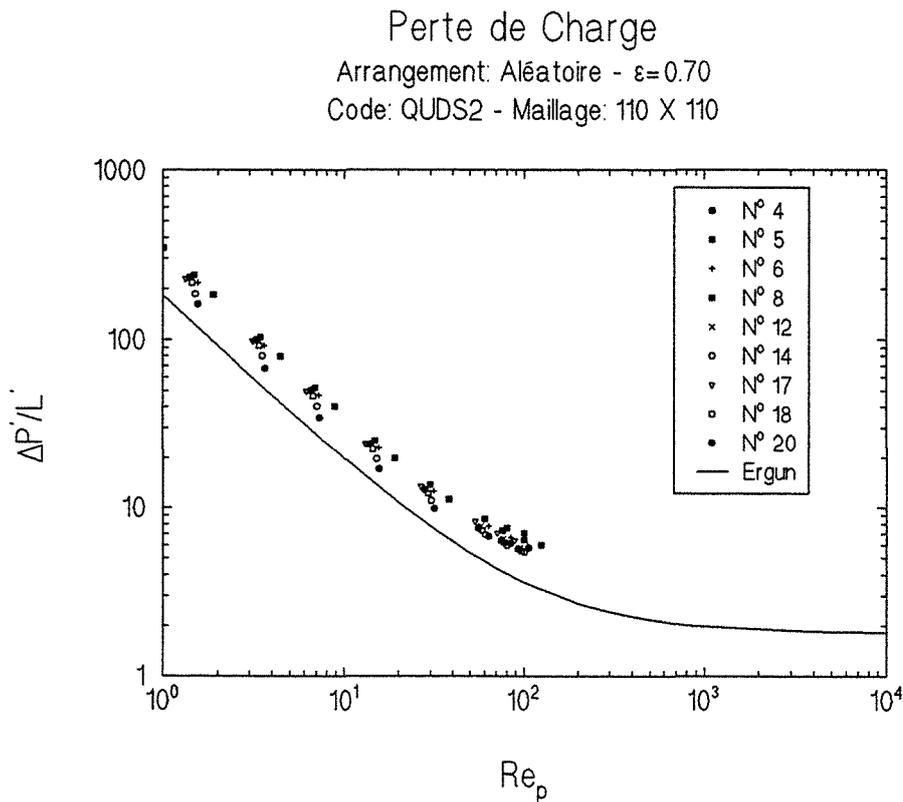


Figure 4.85 - Perte de charge - milieux désordonnés - $\varepsilon_B=0,7$

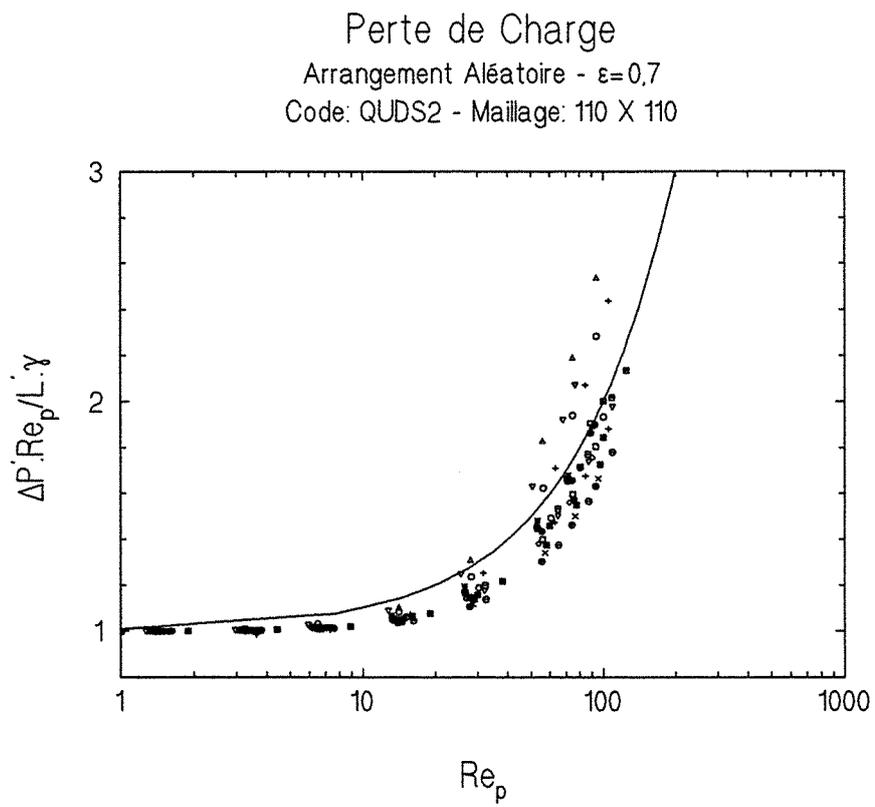


Figure 4.86 - Perte de charge - milieux désordonnés - $\varepsilon_g=0,7$

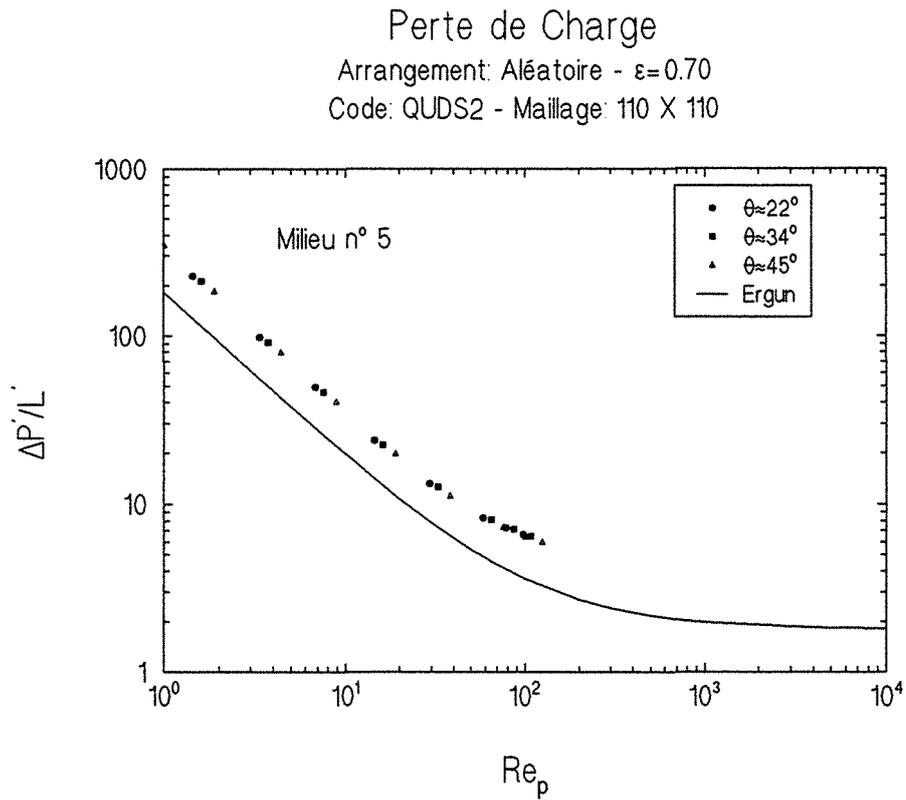


Figure 4.87 - Perte de charge - milieu n° 5 - $\epsilon_B=0,7$

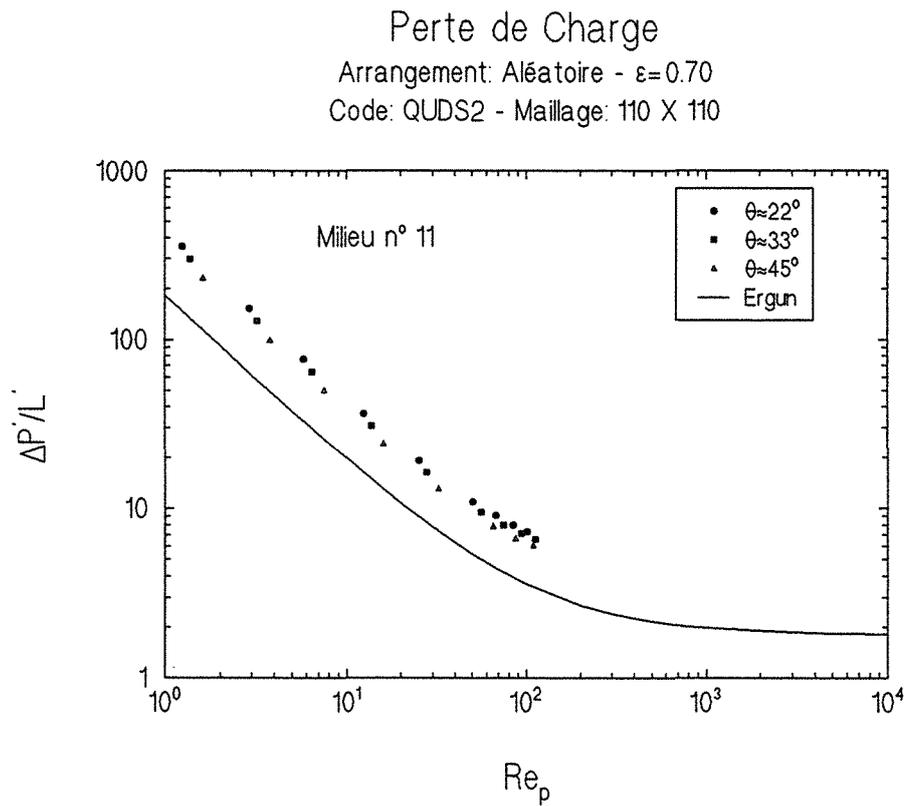


Figure 4.88 - Perte de charge - milieu n° 11 - $\epsilon_B=0,7$

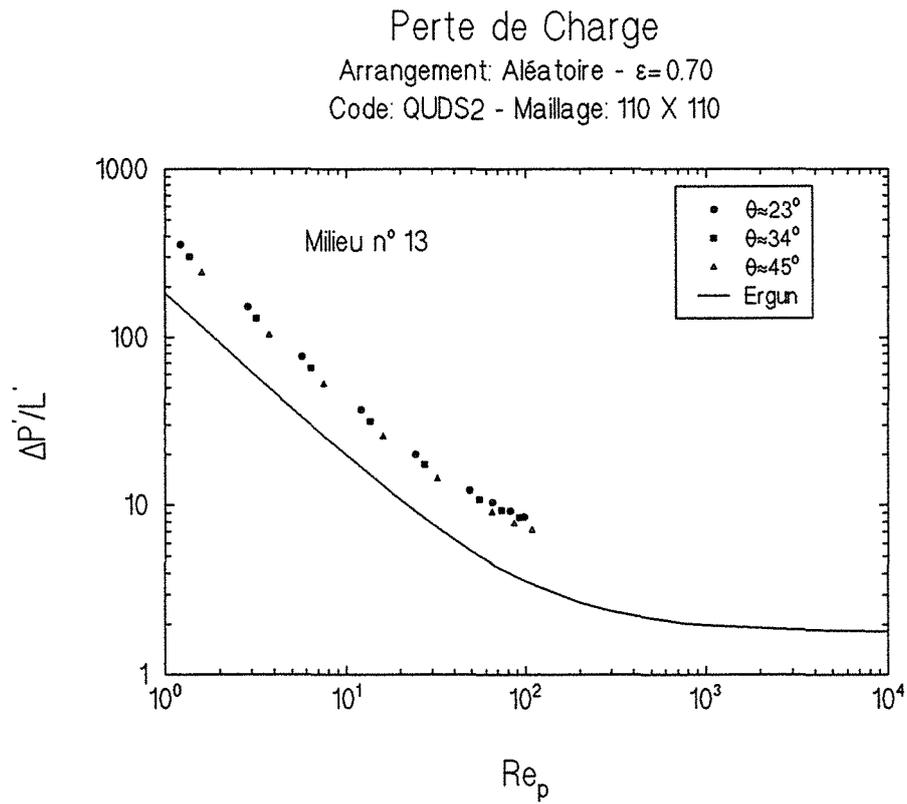


Figure 4.89 - Perte de charge - milieu n° 13 - $\epsilon_B=0,7$

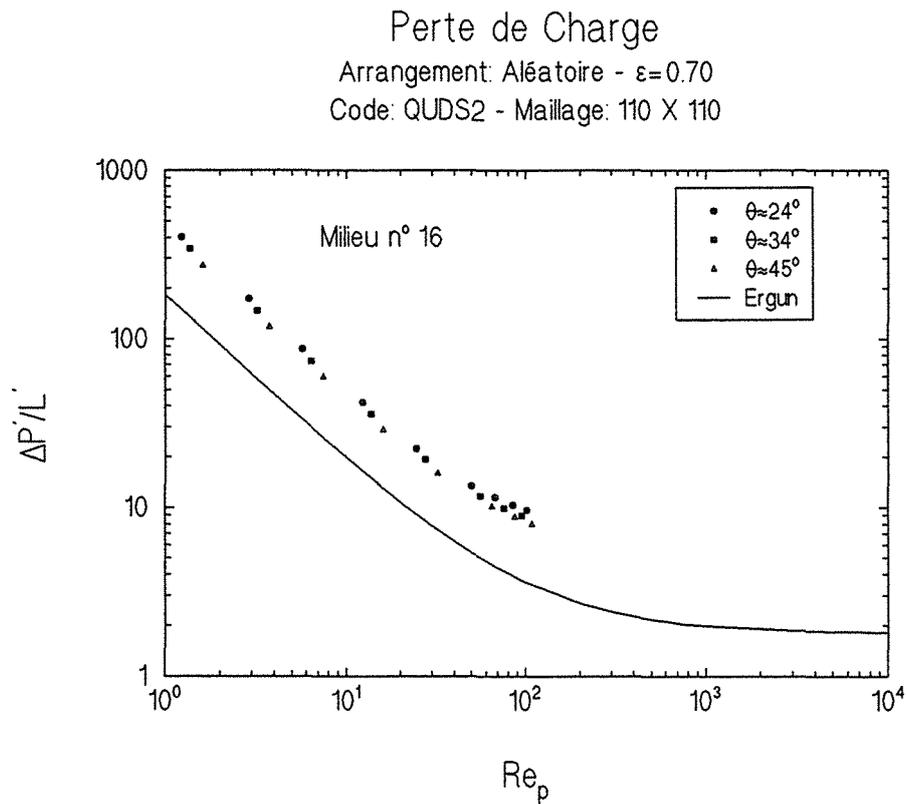


Figure 4.90 - Perte de charge - milieu n° 16 - $\epsilon_B=0,7$

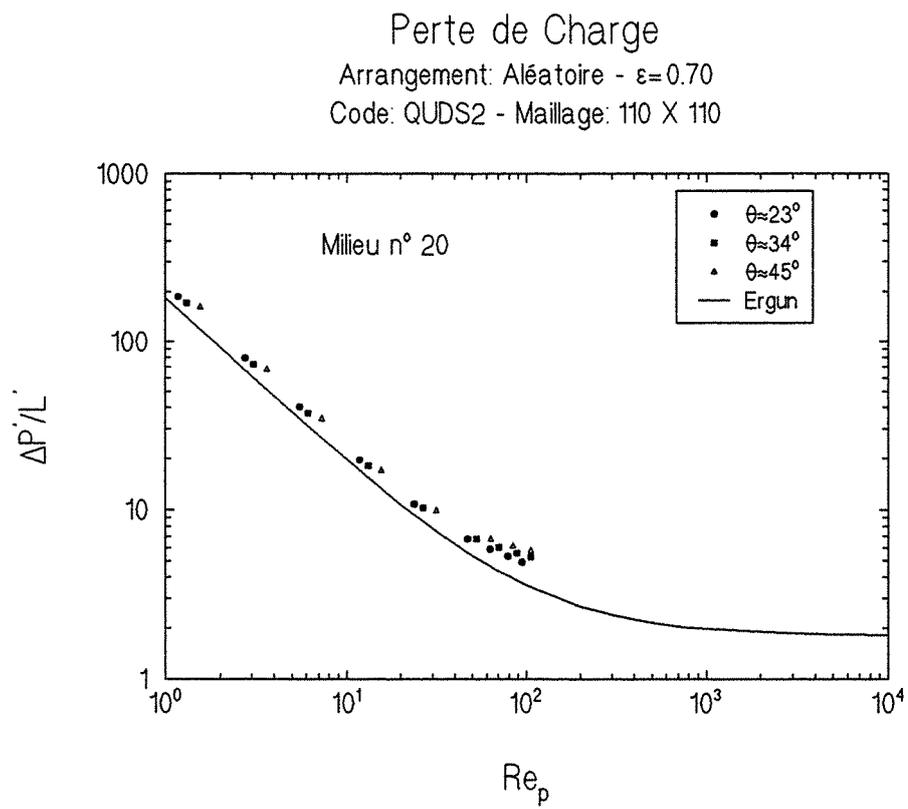


Figure 4.91 - Perte de charge - milieu n° 20 - $\varepsilon_B=0,7$

En ce qui concerne l'influence de l'angle θ sur les termes non linéaires, on peut voir sur les figures 4.92 à 4.96 que les courbes sont presque confondues.

Finalement, sur la figure 4.97 on a pour le milieu n° 07², un aperçu de la complexité de l'écoulement qui résulte d'un tel arrangement.

4.9-DISCUSSION - COMPARAISON AVEC ERGUN

On discute ensuite l'ensemble des résultats obtenus pour les arrangements ordonnés (en ligne, en quinconce et en chicane) et désordonnés en tentant de les comparer à l'équation d'Ergun.

4.9.1-RÉGIME DE STOKES

On commence par regarder les tendances de l'ensemble pour l'écoulement en régime de Stokes. La perte de charge $\Delta P' / L'$ est décrite, dans ce régime, par l'équation de Blake-Kozeny (équation 24).

Les arrangements en ligne et en quinconce étant symétriques par rapport aux deux axes de la cellule, les axes principaux du tenseur perméabilité coïncident avec ces deux axes. La valeur de la perméabilité suivant chaque axe étant identique, le tenseur perméabilité est sphérique. La valeur de la constante de Kozeny est donc indépendante de θ , ce que vérifie le calcul numérique.

En ce qui concerne les arrangements en chicane et désordonnés, les axes propres ne sont pas connus a priori. Dans le cas de l'arrangement en chicane, on note que la constante de Kozeny varie d'une façon plus significative pour $\varepsilon_p = 0,36$ que pour une porosité de 0,64. Dans le premier cas ($\varepsilon_p = 0,36$), la variation de γ entre $\theta \approx 22^\circ$ et 45° est de 46% environ, tandis que dans le deuxième cas ($\varepsilon_p = 0,64$) elle n'est que de 25% environ. Les milieux désordonnés ($\varepsilon_p \approx 0,7$) présentent pour la constante de Kozeny sur la même plage de θ des variations très faibles. Elle est de $\sim 7\%$ pour le milieu n° 5, $\sim 16\%$ pour le n° 11, $\sim 11\%$ pour les milieux n° 13 et n° 16 et $\sim 16\%$ pour le milieu numéro 20.

² Pour les autres milieux, voir annexe VII.

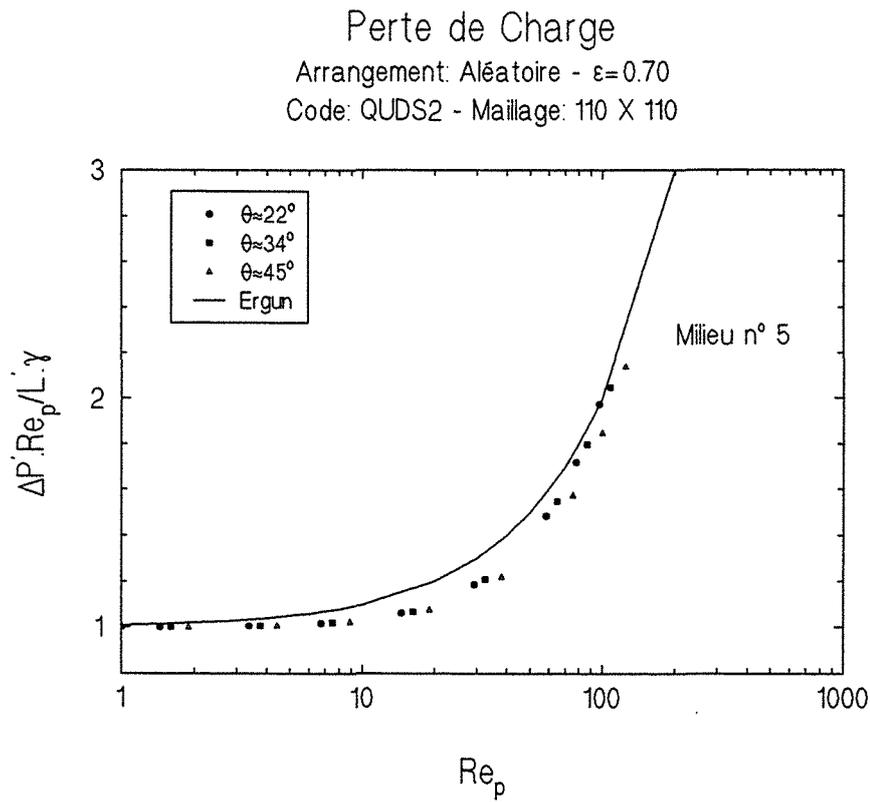


Figure 4.92 - Perte de charge - milieu n° 5 - $\varepsilon_B=0,7$

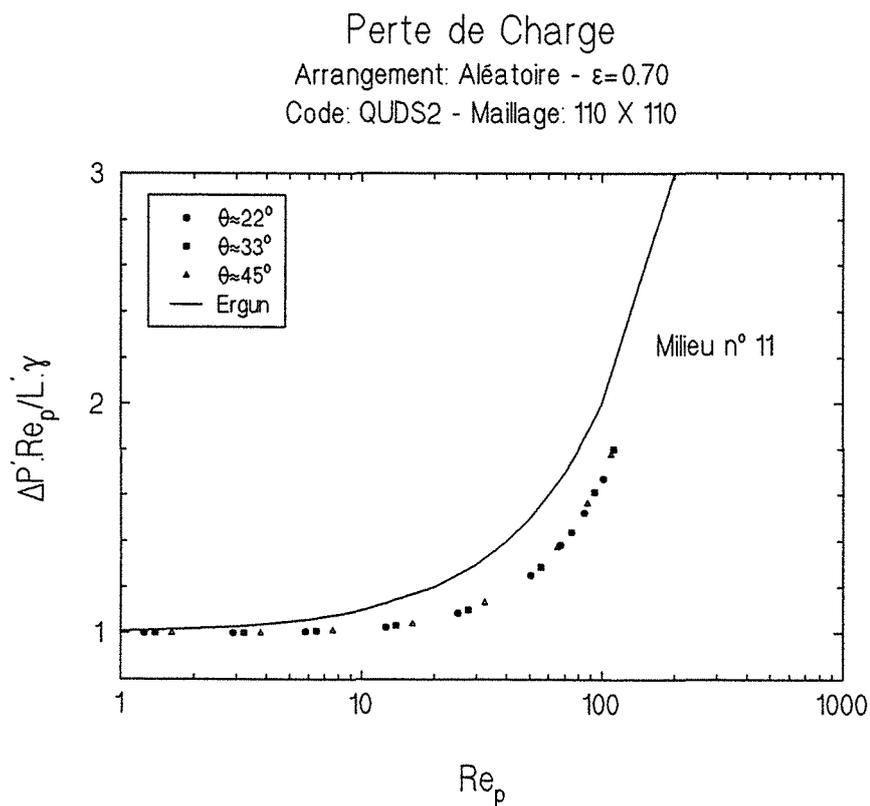


Figure 4.93 - Perte de charge - milieu n° 11 - $\varepsilon_B=0,7$

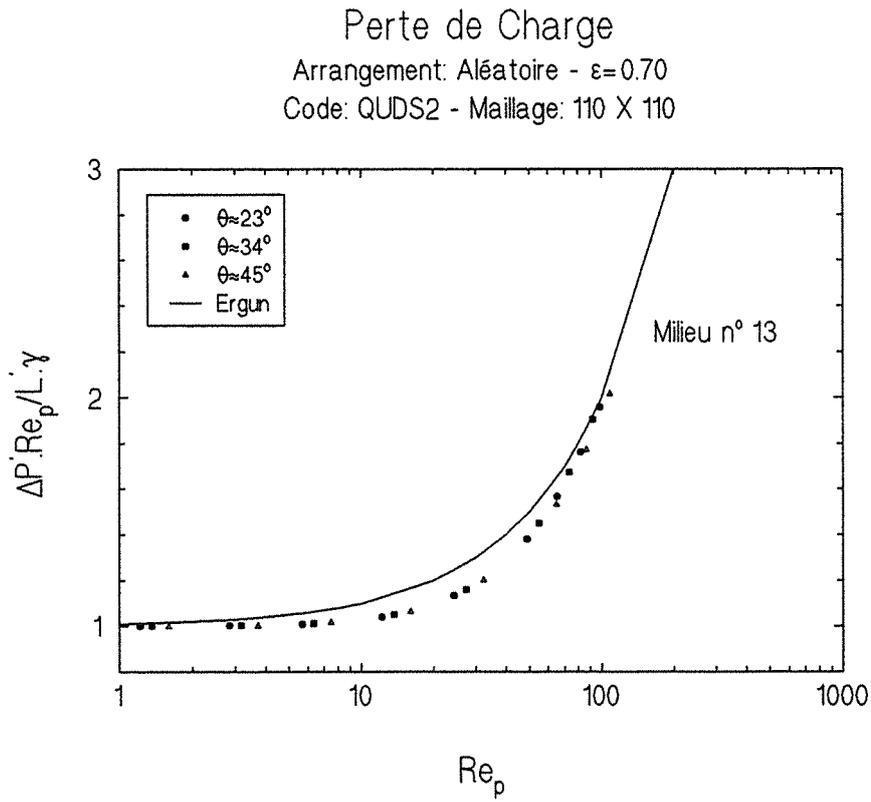


Figure 4.94 - Perte de charge - milieu n° 13 - $\epsilon_B=0,7$

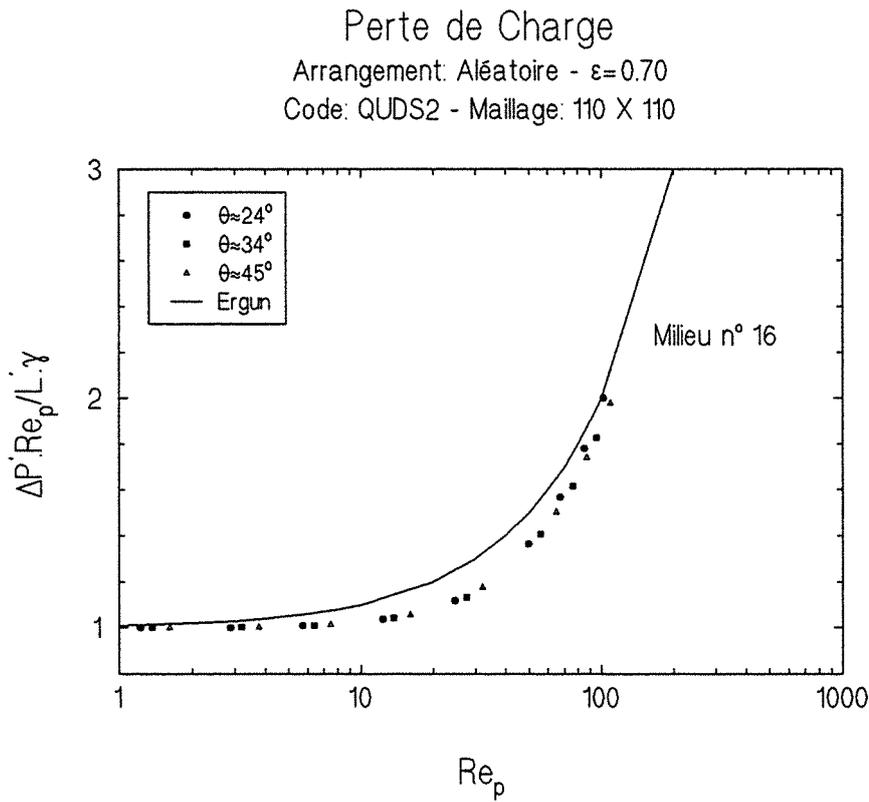


Figure 4.95 - Perte de charge - milieu n° 16 - $\epsilon_B=0,7$

Perte de Charge
 Arrangement: Aléatoire - $\varepsilon=0.70$
 Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

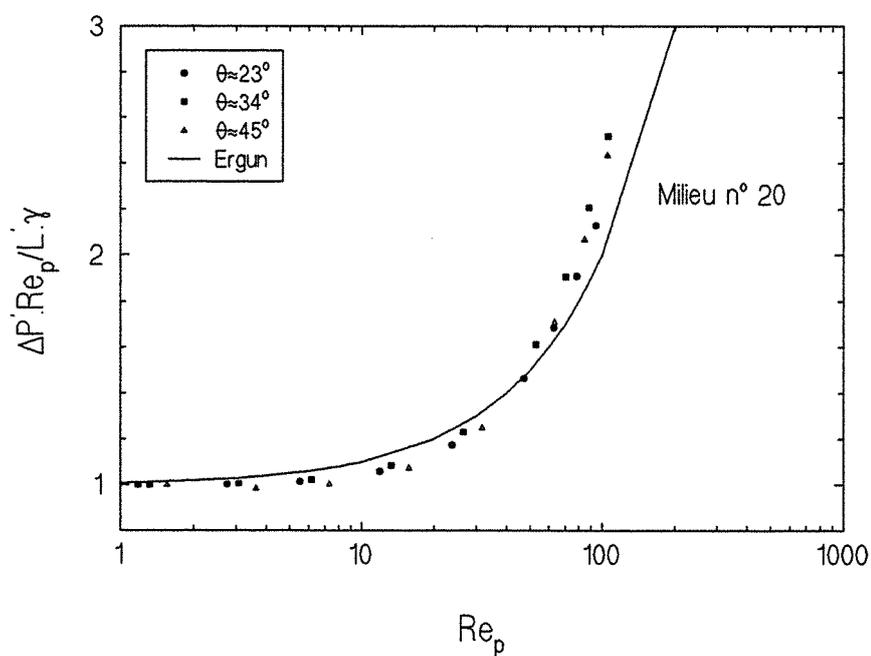


Figure 4.96 - Perte de charge milieu n° 20 - $\varepsilon_B = 0,7$

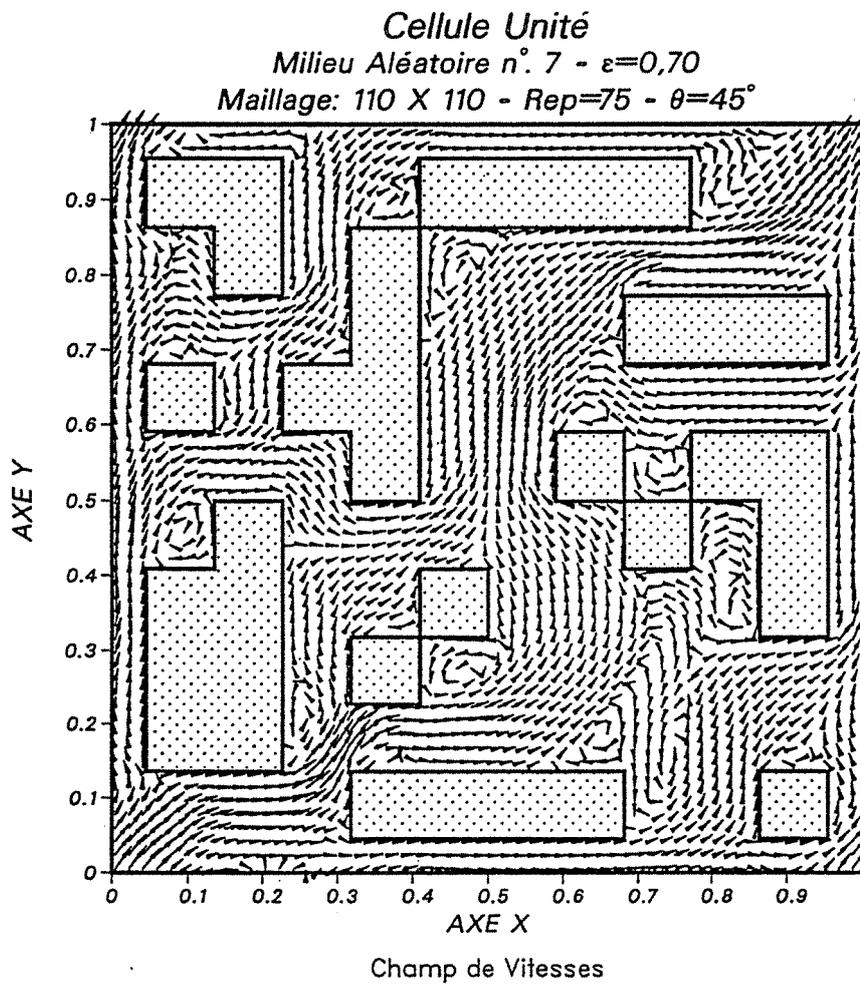


Figure 4.97 - Milieu n° 7 - champ de vitesses

$\epsilon_B=0,7 - \theta=45^\circ$

On a pu aussi observer que d'une manière générale, l'ensemble des résultats présentent des valeurs de la perte de charge supérieures à celles données par l'équation d'Ergun.

En ce qui concerne ce décalage, il faut d'abord remarquer que l'allure des courbes est satisfaisante mais que c'est peut-être un problème de décalage de la constante de Kozeny k_K ou γ . De ce point de vue, il est important de rappeler que le calcul est effectué dans un espace à deux dimensions et non dans l'espace physique réel à trois dimensions. Essayons d'appréhender l'influence de la dimension de l'espace sur le résultat.

En trois dimensions, on sait que:

$$k_{K_{3D}} = \frac{\varepsilon_B^3}{(1-\varepsilon_B)^2} \frac{1}{2\tau_{3D}^2} \frac{1}{a_v^2} \quad (37)$$

avec,

$$a_v = \frac{6}{d_{p_{3D}}} \quad (38)$$

où dans les équations (37) et (38), ε_B est la porosité, τ la tortuosité, a_v la surface spécifique et d_p le diamètre des particules.

La formule de Kozeny s'écrit avec les notations (31)-(33), sous la forme:

$$\left(\frac{\Delta P'}{L'}\right)_{3D} = \frac{72\tau_{3D}^2}{Re_{P_{3D}}} \quad (39)$$

En deux dimensions, le raisonnement conduisant à l'élaboration de la formule de Kozeny, qui fait passer de l'écoulement de Poiseuille dans un tuyau cylindrique circulaire à l'écoulement autour de particules sphériques de diamètre $d_{p_{3D}}$, peut être repris en partant de l'écoulement laminaire entre deux plans pour aller vers l'écoulement perpendiculaire à un treillis de cylindres circulaires de diamètre $d_{p_{2D}}$. On obtient alors sans difficulté [5]:

$$k_{K_{2D}} = \frac{\varepsilon_B^3}{(1-\varepsilon_B)^2} \frac{1}{3\tau_{2D}^2} \frac{1}{a_v^3} \quad (40)$$

avec,

$$a_v = \frac{4}{d_{p_{2D}}} \quad (41)$$

La formule de Kozeny correspondante s'écrit donc,

$$\left(\frac{\Delta P'}{L'}\right)_{2D} = \frac{48\tau_{2D}^2}{Re_{P_{2D}}} \quad (42)$$

Si maintenant, on interprète cette relation obtenue en dimension 2 en dimension 3, moyennant (32) et (33):

$$L'_{3D} = \frac{d_{p_{2D}}}{d_{p_{3D}}} L'_{2D} = \frac{2}{3} L'_{2D} \quad (43)$$

et,

$$Re_{P_{3D}} = \frac{d_{p_{3D}}}{d_{p_{2D}}} Re_{P_{2D}} = \frac{3}{2} Re_{P_{2D}} \quad (44)$$

il vient alors,

$$\boxed{\left(\frac{\Delta P'}{L'}\right)_{3D} = \frac{108\tau_{2D}^2}{Re_{P_{3D}}}} \quad (45)$$

Au lieu d'utiliser dans la formule d'Ergun la valeur $k_K = 72\tau_{3D}^2$, il faudrait donc lui préférer la valeur $108\tau_{2D}^2$, valeur notablement supérieure d'autant que la tortuosité en 2D est sûrement plus grande qu'en 3D, puisqu'en 2D on perd la possibilité de trouver un chemin moins tortueux dans une dimension de l'espace.

4.9.2-TERMES NON LINÉAIRES

L'étape suivante a pour but de déterminer l'ordre de variation des termes non linéaires. La littérature [105] montre que le premier à proposer une correction à la loi de Darcy, Forcheimer, préconisait que les variations du gradient de pression pouvaient être décrites en ajoutant un terme du deuxième ordre à cette loi:

$$\nabla p = C_1 \langle u \rangle + C_2 \langle u \rangle^2 \quad (46)$$

où C_1 et C_2 sont fonctions des caractéristiques du milieu (permeabilité, porosité, etc.) et $\langle u \rangle$ est la vitesse moyenne de l'écoulement.

Ensuite cette équation a été modifiée afin de mieux représenter les résultats expérimentaux [105]. Un terme du troisième ordre est venu s'ajouter aux deux autres termes,

$$\nabla p = C_1 \langle u \rangle + C_2 \langle u \rangle^2 + C_3 \langle u \rangle^3 \quad (47)$$

Récemment, Wodie et Levy [130] ont appliqué la méthode de l'homogénéisation, au cas d'un écoulement incompressible gouverné par les équations de Navier-Stokes dans un milieu spatialement périodique, afin de déterminer la correction non linéaire de la loi de Darcy. Les résultats obtenus montrent que pour les écoulements macroscopiquement monodimensionnels ou isotropes, lorsque les termes d'inertie sont petits devant les termes de viscosité, le gradient de pression doit être décrit par:

$$\nabla p = C_1 \langle u \rangle + C_3 \langle u \rangle^3 \quad (48)$$

Afin de pouvoir déterminer si nos résultats présentent des variations quadratiques (équation d'Ergun) ou cubiques (équation 4.48), on les réécrit d'une façon que se prête bien à cette analyse:

$$\frac{\Delta P'}{L'} \cdot \frac{Re_p}{\gamma} - 1 = B(Re_p)^A \quad (49)$$

Les coefficients A et B sont alors déterminés à partir de la

représentation de l'équation (49) sous forme logarithmique, la constante A étant la pente de la droite:

$$\text{Ln} \left(\frac{\Delta P'}{L'} \cdot \frac{Re_p}{\gamma} - 1 \right) = A \text{Ln}(Re_p) + \text{Ln}(B) \quad (50)$$

Dans le cas de l'équation d'Ergun, on voit facilement que $A=1$ et $B=0,01$. Une valeur de A égale à l'unité conduit donc à des termes quadratiques, tandis que $A=2$ est caractéristique d'une variation cubique.

Sur les figures 4.98 à 4.103 sont représentées les courbes décrites par l'équation (50). Les figures 4.98 et 4.99 montrent les résultats pour l'arrangement en ligne ($\epsilon_B=0,36$ et $0,64$), la figure 4.100 pour l'arrangement en quinconce ($\epsilon_B=0,64$), les figures 4.101 et 4.102 pour l'arrangement en chicane ($\epsilon_B=0,36$ et $0,64$) et la figure 4.103 pour l'ensemble des milieux désordonnés ($\epsilon_B \approx 0,7$).

On est amené à conclure à l'existence des deux types de corrections non linéaires de la loi de Darcy.

Pour des Reynolds particulières inférieurs à 1 environ, la loi de Darcy est valide: le gradient de pression est proportionnel à la vitesse moyenne de l'écoulement, soit $\nabla p \propto \langle u \rangle$.

Pour une plage intermédiaire du nombre de Reynolds particulière Re_p , disons $1 < Re_p < 100$, la correction non-linéaire est d'un ordre supérieur à une variation quadratique, donc proportionnelle à $\langle u \rangle^n$ où n est supérieur à 2.

Une valeur de l'exposant $n=3$ semble correcte sur une plage de nombre de Reynolds particuliers modérés où les termes d'inertie ne sont pas prépondérants devant les termes visqueux. Cette constatation est en accord avec les résultats théoriques prévus par Wodie et Lévy [130].

Enfin, pour des nombres de Reynolds particuliers supérieurs à 100, on s'approche asymptotiquement d'une variation uniquement quadratique et la correction est proportionnelle à $\langle u \rangle^2$.

L'existence d'une correction non linéaire d'ordre 3 dans l'équation (47) peut surprendre. Mais elle est raisonnable si l'on pense pouvoir développer le problème hydrodynamique en fonction du nombre de Reynolds à partir du régime de Stokes. En effet, il est légitime de supposer que le renversement géométrique de l'écoulement laisse l'hydrodynamique inchangée au moins à l'échelle macroscopique. Dès lors

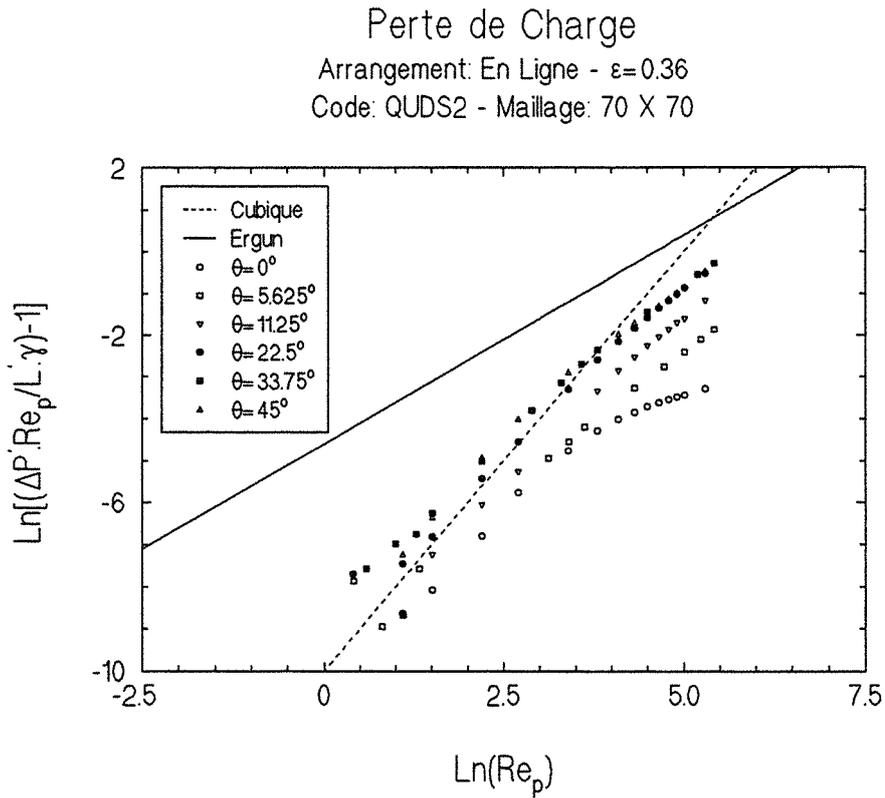


Figure 4.98 - Correction non-linéaire - arrangement en ligne - $\epsilon_B = 0,36$

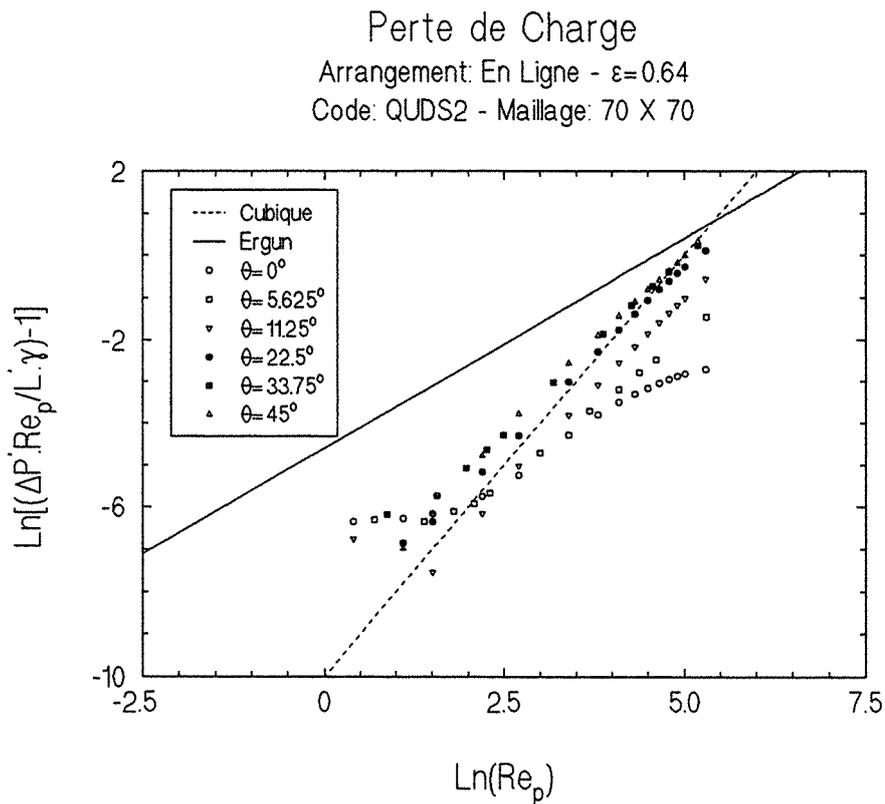


Figure 4.99 - Correction non-linéaire - arrangement en ligne - $\epsilon_B = 0,64$

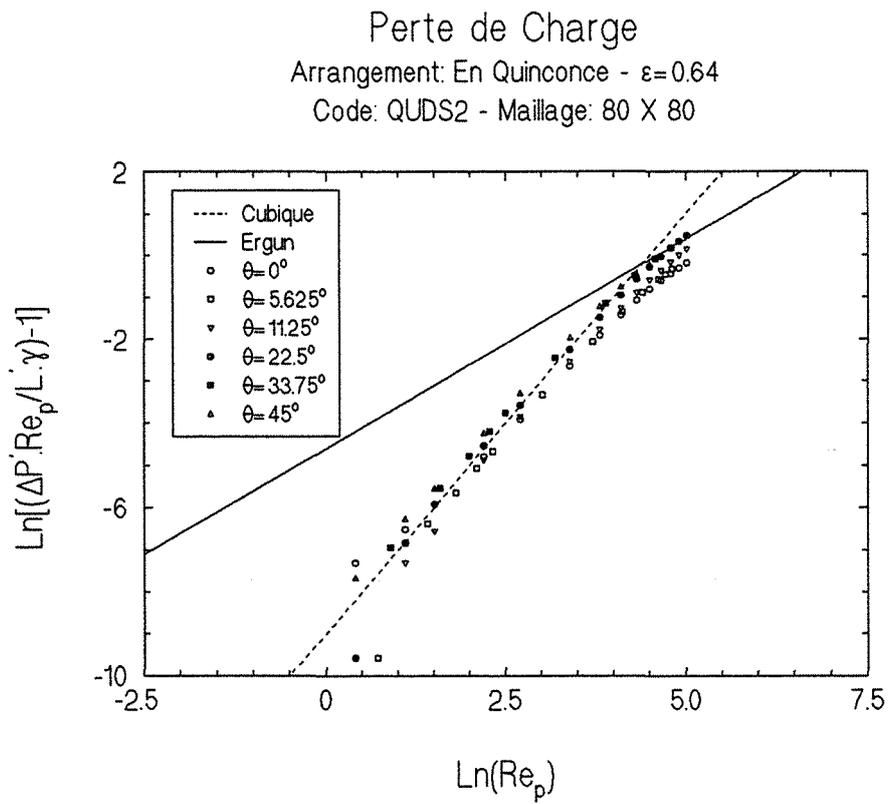


Figure 4.100 - Correction non-linéaire - arrangement en quinconce - $\epsilon_p=0,64$

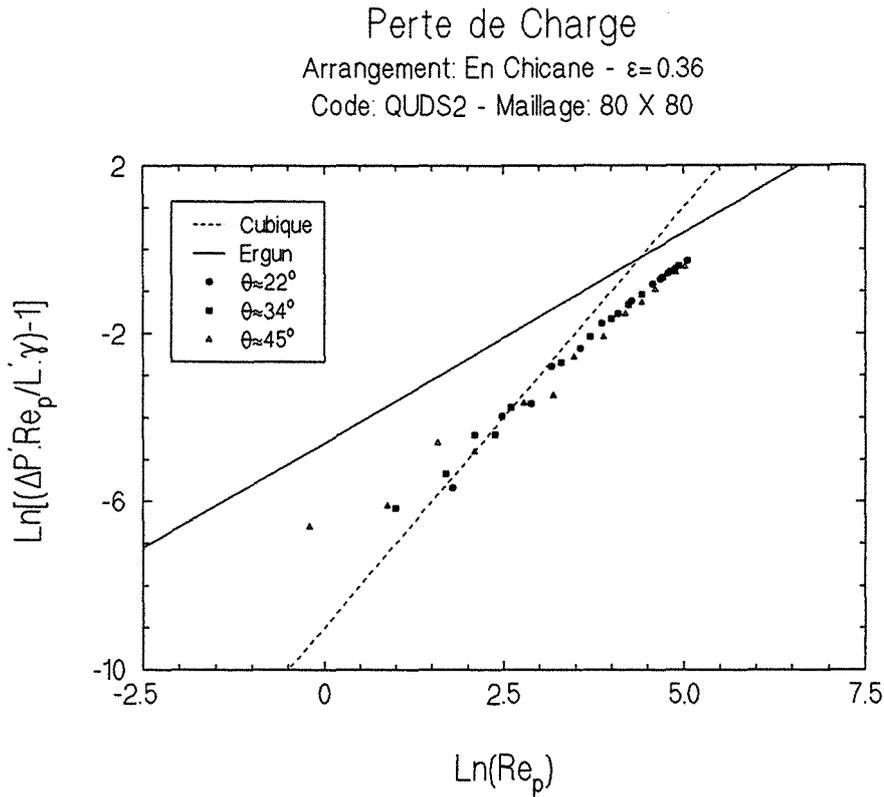


Figure 4.101 - Correction non-linéaire - arrangement en chicane - $\varepsilon_B=0,36$

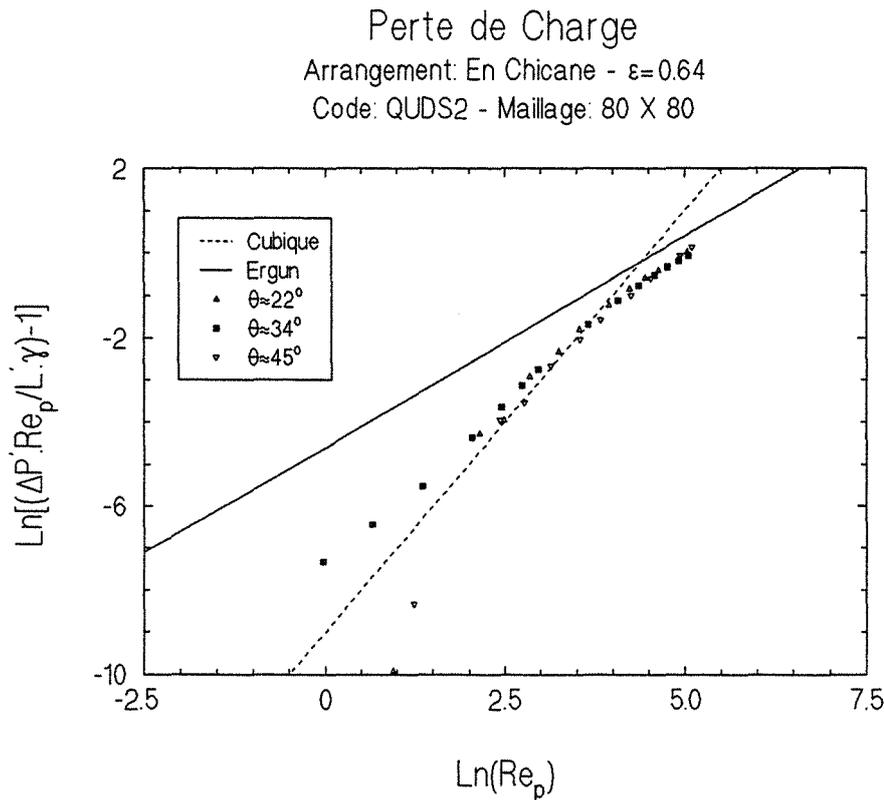


Figure 4.102 - Correction non-linéaire - arrangement en chicane - $\varepsilon_B=0,64$

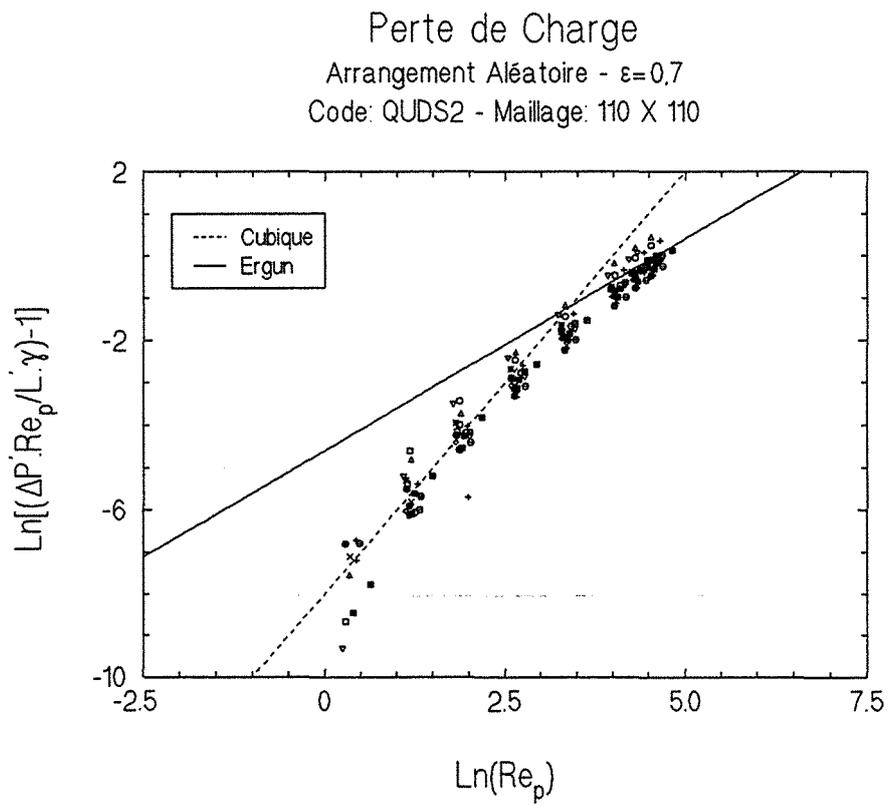


Figure 4.103 - Correction non-linéaire - milieux désordonnés - $\epsilon_g=0,7$

l'apparition d'un terme proportionnel au carré de la vitesse moyenne de l'écoulement ($\langle u \rangle^2$) dans l'équation (47) apparaît improbable.

Le tableau 4.5 contient les valeurs de A et ln(B) calculées par interpolation (pour $Re_p \geq 7,5$), pour toutes les géométries ordonnées étudiées. On remarque que l'ensemble des résultats ne présente pas de variations purement quadratiques ou cubiques, ce qui confirme l'observation des figures 4.86-4.90.

Arrangement	ϵ_B	θ	A	Ln(B)	Variance	
En Ligne	0,36	0°				
		5,625°	1,32	-9,03	8,37e-4	
		11,25°	1,60	-9,51	0,00704	
		22,5°	1,60	-8,82	0,00964	
		33,75°	1,45	-8,01	0,015	
	45°	1,40	-7,83	0,0098		
	0,64	0°				
		5,625°	1,39	-8,86	9,43e-4	
		11,25°	1,80	-9,97	0,00452	
		22,5°	1,74	-8,96	0,00483	
33,75°		1,68	-8,41	0,00269		
45°	1,67	-8,32	0,00394			
En Quinconce	0,64	0°				
		5,625°	1,76	-8,71	0,00712	
		11,25°	1,79	-8,68	0,00780	
		22,5°	1,80	-8,40	0,00595	
		33,75°	1,77	-8,15	0,0107	
45°	1,78	-8,10	0,00726			
En Chicane	0,36	22°	1,48	-7,64	0,0168	
		34°	1,49	-7,66	0,0136	
		45°	1,53	-8,01	0,0192	
	0,64	22°	1,51	-7,38	0,0414	
		34°	1,42	-7,06	0,0201	
		45°	1,55	-7,66	0,0156	

Tableau 4.5 - Ordre des termes non linéaires - milieux ordonnés

De même le tableau 4.6 contient les valeurs de A (qui détermine la loi puissance en $\langle u \rangle$) et de ln(B), calculés pour l'ensemble des milieux aléatoires pour des nombres de Reynolds particuliers Re_p supérieurs ou égaux à 7,5.

Milieu	A	Ln(B)	Variance
01	1,43	-6,24	1,15e-4
02	1,45	-6,79	5,62e-4
03	1,38	-5,91	8,40e-4
04	1,50	-7,26	4,04e-4
05	1,48	-6,99	0,00377
06	1,34	-6,35	0,00184
07	1,61	-7,36	0,00287
08	1,53	-7,06	5,81e-5
09	1,33	-6,06	0,00246
10	1,45	-6,79	0,00232
11	1,55	-7,46	0,00561
12	1,52	-7,27	0,00366
13	1,55	-7,15	0,0183
14	1,43	-6,59	0,00284
15	1,48	-6,72	0,00123
16	1,58	-7,33	0,0121
17	1,44	-6,57	0,00456
18	1,48	-7,03	0,00364
19	1,44	-6,05	0,00527
20	1,55	-6,81	0,00452

Tableau 4.6 - Ordre des termes non linéaires - milieux désordonnés

Finalement, le tableau 4.7 montre ces valeurs, déterminées pour les cinq milieux choisis (5, 11, 13, 16 et 20) avec les trois valeurs de l'angle θ retenues ($\theta \cong 22^\circ$, 34° et 45°). On s'aperçoit que dans tous les cas, l'on retrouve quasiment la même pente pour chaque milieu pris séparément à l'exception peut-être du milieu 20 pour $\theta \cong 45^\circ$.

On a pu vérifier par des interpolations sur l'ensemble de nos résultats, milieux ordonnés et désordonnés, que l'hydrodynamique des milieux dans cette zone de transition devait et pouvait être bien représentée par une relation du type l'équation (47) (de préférence à l'équation (46) ou (48)).

On a essayé d'abord de les représenter par une équation contenant seulement les termes linéaire et quadratique. Ensuite on a ajouté les termes cubiques et finalement des termes à la puissance 4. Enfin on a essayé simplement des termes linéaire et cubique. Les meilleures interpolations sont données par des polynômes contenant des coefficients aux puissances d'ordre un, deux et trois. Les coefficients du terme d'ordre

4 sont pratiquement nuls. Toutes les conclusions s'appliquent, évidemment, pour des nombres de Reynolds particuliers compris entre 7,5 et 150 environ.

Milieu	γ	θ	A	Ln(B)	Variance
05	328	22°	1,44	-6,61	0,0016
	341	33°	1,48	-6,82	0,0044
	350	45°	1,48	-6,96	0,00329
11	442	23°	1,53	-7,42	0,00228
	412	34°	1,51	-7,32	8,16e-4
	371	45°	1,58	-7,60	0,00913
13	432	24°	1,50	-6,86	0,00472
	411	34°	1,50	-6,86	0,00271
	385	45°	1,53	-7,05	0,0144
16	493	24°	1,56	-7,15	0,0021
	468	34°	1,54	-7,15	0,00264
	439	45°	1,58	-7,33	0,0121
20	219	23°	1,41	-6,24	0,00189
	223	34°	1,40	-6,07	6,17e-4
	250	45°	1,55	-6,83	0,00476

Tableau 4.7 - Ordre des termes non linéaires - milieux désordonnés

4.10-CONCLUSION

Plutôt que de regarder en détail les différences entre les différentes géométries (ordonnées et désordonnées), les différentes porosités et les différentes directions du vecteur vitesse moyenne, on va tenter de dégager, en conclusion de ce chapitre, les points communs pour l'hydrodynamique des milieux périodiques bidimensionnels étudiés.

On note tout d'abord que les résultats présentent, à part peut-être l'arrangement en chicane avec $\varepsilon_B=0,36$, des constantes de Kozeny qui sont plus grande que la constante habituelle. Comme on l'a vu au paragraphe 4.9, ce décalage peut être dû au fait que les calculs sont réalisés pour des géométries bidimensionnelles, tandis que l'équation de Blake-Kozeny s'applique à des milieux réels tridimensionnels.

D'une manière générale, les termes non linéaires sont non négligeables pour un nombre de Reynolds particulière compris entre 10 et 20, selon l'arrangement. Pour des nombres de Reynolds particuliers supérieurs à ~ 100 , les courbes laissent prévoir un comportement de type asymptotique, la perte de charge étant quadratique en $\langle u \rangle$. Par contre, pour des valeurs du nombre de Reynolds particulières comprises entre 10 et 100 environ, l'hydrodynamique se trouve dans une zone de transition évoluant progressivement du régime de Stokes où la perte de charge est linéaire en $\langle u \rangle$ vers le régime où la perte de charge est quadratique. L'ensemble de nos résultats (milieux ordonnés et désordonnés) est bien représenté si l'on ajoute en plus des termes linéaire et quadratique (équation d'Ergun), un terme cubique à l'équation donnant la perte de charge corrigée $\Delta P' / L'$.

Dans ce chapitre en se référant aux régimes d'écoulement distingués expérimentalement par Dybbs et Edwards [34] (§ 4.2), on a traité uniquement du régime de Darcy et du régime laminaire inertiel. L'étude numérique de l'hydrodynamique pour des nombres de Reynolds particuliers supérieurs à ~ 150 reste un problème ouvert et un formidable défi dans la mesure où il faudra alors considérer un écoulement non permanent.

CHAPITRE 5

DIFFUSION EN MILIEU POREUX

CHAPITRE 5

DIFFUSION EN MILIEU POREUX

5.1-INTRODUCTION

Dans ce chapitre, on a choisi d'étudier d'abord le problème de diffusion massique, avant d'aborder le problème plus général de diffusion-dispersion massique dans un milieu poreux. Le problème de diffusion est en effet un cas particulier de celui de diffusion-dispersion quand il n'y a pas d'écoulement de la phase fluide.

Comme dans le chapitre 4, on va étudier quelques arrangements "ordonnés" (en ligne, quinconce, en chicane) et ensuite quelques autres arrangements "désordonnés" (pseudo-aléatoires). Les codes de calcul sont validés et les résultats sont comparés à ceux trouvés dans la littérature, mais aussi confrontés à des résultats approchés.

5.2-DIFFUSION EN MILIEU POREUX

On a vu au chapitre 2, paragraphe 2.4, comment on peut obtenir l'équation de transport moyennée (53), déduite à l'aide du théorème de prise de moyenne. Cette équation fait apparaître le tenseur effectif de dispersion (83) et le problème de fermeture en f , équations (76)-(78).

Le problème de diffusion est simplement obtenu en faisant disparaître les termes convectifs.

5.2.1-DIFFUSION MASSIQUE

On considère ici la diffusion massique, sans réaction chimique, à l'intérieur d'un milieu poreux. Lorsque les variations de température et de pression peuvent être négligées et que la concentration du soluté c est petite, le phénomène de transport diffusif est décrit par:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla c) \quad (1)$$

avec comme conditions aux limites,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla c = 0 \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (2)$$

une condition à préciser sur la surface $A_{B\text{ext}}$ et la condition initiale,

$$c = \mathcal{F} \quad \text{en } t=0 \quad (3)$$

où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion moléculaire, \mathbf{n} la normale à la surface solide $A_{B\sigma}$ et \mathcal{F} la concentration à l'instant initial. La condition au limite (2) reflète le fait que le solide est imperméable au soluté.

5.2.2-ÉQUATION DE TRANSPORT MOYENNÉE

L'équation de transport moyennée est obtenue de l'application du théorème de prise de moyenne à l'équation (1). Cette démarche est détaillée au paragraphe 2.3 du chapitre 2. On obtient donc:

$$\frac{\partial \langle c \rangle^B}{\partial t} = \mathbf{D}^* : \nabla \nabla \langle c \rangle^B \quad (4)$$

Il reste à préciser la condition à la limite sur $A_{B\text{ext}}$ et la condition initiale,

$$\langle c \rangle^B = \mathcal{G} \quad \text{à } t=0 \quad (5)$$

Le tenseur effectif de diffusion est défini dans ce cas par:

$$\mathbf{D}^* = \mathcal{D} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \frac{1}{2} (\mathbf{n}\mathbf{f} + \mathbf{f}\mathbf{n}) dA \right] \quad (6)$$

Dans le cas de la diffusion pure, on peut de toute façon montrer que le tenseur $\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}\mathbf{f} dA$ est symétrique.

Dans la littérature, l'usage est plutôt d'utiliser le tenseur "effectif" défini par [23],

$$\varepsilon_{\beta} \mathbf{D}^* = \varepsilon_{\beta} \mathcal{D} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \frac{1}{2} (\mathbf{n}\mathbf{f} + \mathbf{f}\mathbf{n}) dA \right] \quad (7)$$

où ε_{β} est la fraction volumique occupée par la phase β .

Les équations adimensionnelles de fermeture pour le problème de diffusion, pour un milieu spatialement périodique, sont données d'après les équations (76)-(78), du chapitre 2, par:

$$\nabla^2 \mathbf{F} = 0 \quad (8)$$

avec les conditions aux limites,

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{F} = \mathbf{n} \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (9)$$

et de périodicité,

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{F}(\mathbf{r}), \quad i=1,2 \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (10a)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{F}(\mathbf{r}), \quad i=1,2 \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (10b)$$

où \mathbf{n} est la normale à l'interface solide-liquide $A_{\beta\sigma}$ dirigée du fluide vers le solide, \mathbf{r} est le vecteur position spatiale d'un point à l'intérieur de la cellule unité et \mathbf{l}_i les mailles de la cellule unité (paragraphe 4.2).

Dans les équations (8)-(10), le vecteur \mathbf{f} et les coordonnées de l'espace x et y ont été rendues adimensionnelles en les divisant par L , une longueur de référence de la cellule unité.

Le vecteur F solution du problème (8)-(10) est défini à une constante près sans importance pour le calcul du tenseur effectif de diffusion D^* . On peut si l'on veut lever l'indétermination en lui imposant la condition $\langle F \rangle^B = 0$.

5.3-VALIDATION DU CODE NUMÉRIQUE

Afin de pouvoir tester l'exactitude des solutions numériques, lors de la résolution des équations du type de l'équation (8), on a choisi un cas dont on connaît la solution analytique. C'est la résolution du laplacien de la variable ϕ , dans un rectangle.

Il s'agit de résoudre l'équation (11) en ϕ en régime permanent, avec des conditions aux limites du type de Dirichlet. Soit:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (11)$$

avec les conditions aux limites (figure 5.1):

$$\phi = 1 \text{ en } y = 0, 0 < x < L \quad (12)$$

$$\phi = 0 \text{ en } y = H, 0 < x < L \quad (13)$$

$$\phi = 0 \text{ en } x = 0, 0 < y < H \quad (14)$$

$$\phi = 0 \text{ en } x = L, 0 < y < H \quad (15)$$

La solution analytique du problème posé est connue et donnée par Carslaw et Jaeger [24]:

$$\phi = \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)} \sin \left[\frac{(2n+1)\pi x}{L} \right] \sinh \left[\frac{(2n+1)\pi(H-y)}{L} \right] \sinh^{-1} \left[\frac{(2n+1)\pi H}{L} \right] \quad (16)$$

où L est la longueur du rectangle et H sa hauteur.

Les solutions analytique¹ et numérique sont montrées sur les figures 5.2 et 5.3. La figure 5.2, montre les résultats pour ϕ obtenus pour la section $x=L/2$, tandis que la figure 5.3 montre ceux obtenus en $y=H/2$. On rappelle ici que les quatre codes de calcul (PDS, QUDS1, QUDS2 et QUDS3) utilisent le même schéma de discrétisation pour le terme diffusif: celui des différences centrées (paragraphe 3.3.3). Par conséquent, les quatre codes de calcul donnent les mêmes résultats. Les résultats numériques vérifient la solution analytique d'une façon très satisfaisante.

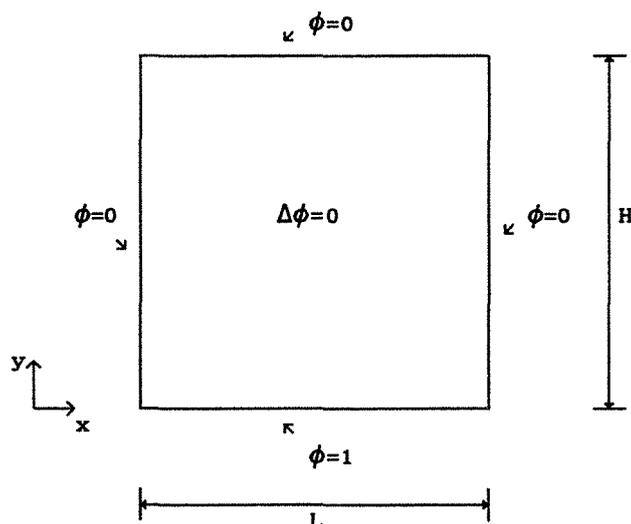


Figure 5.1 - Domaine de résolution

5.4-GÉOMÉTRIE DE LA CELLULE UNITÉ

En ce qui concerne les arrangements géométriques "ordonnés" (en ligne, en quinconce et en chicane), les cellules déjà présentées au chapitre 4, ont été retenues. La porosité ε_B est comprise, pour ces géométries entre 0,27 et 0,94.

Pour le cas des arrangements "désordonnés" (solide distribué d'une façon aléatoire), les cellules montrées au chapitre précédent (figures 4.15-34), ont été utilisées pour la porosité $\varepsilon_B=0,703$. En plus,

¹ La solution a été obtenue numériquement, avec 100 termes de la série.

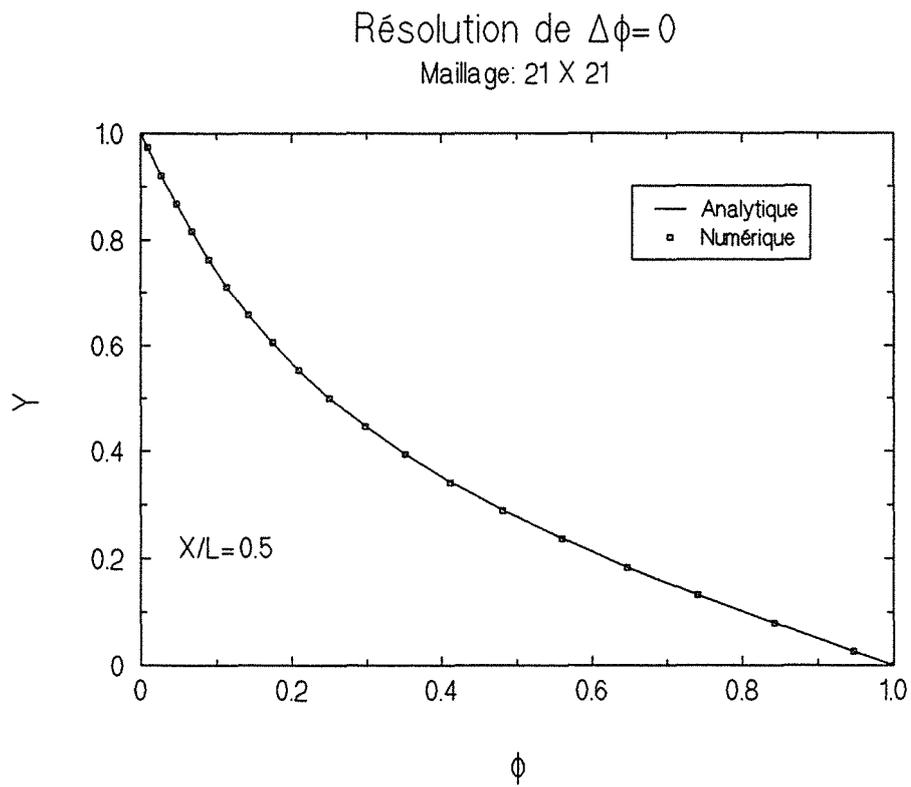


Figure 5.2 - Résolution du laplacien - $x = 0,5L$

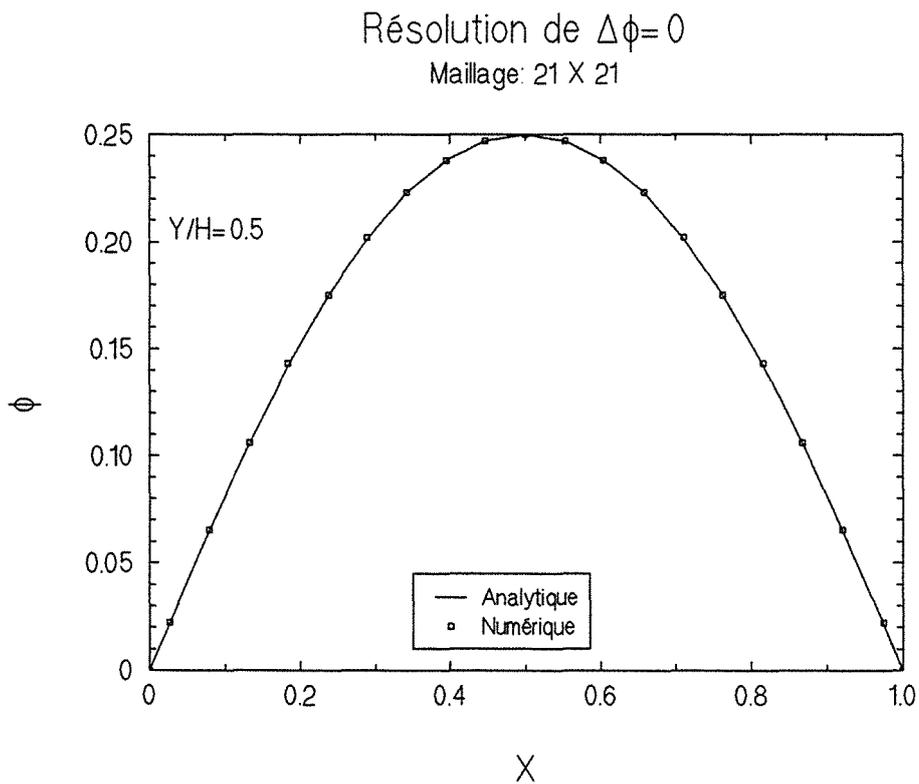


Figure 5.3 - Résolution du laplacien - $y = 0,5H$

deux autres cas ont été étudiés, à savoir: $\varepsilon_{\beta}=0,785$ et $\varepsilon_{\beta}=0,868$. Dans tous les cas, vingt cellules ont été choisies. Les cellules unités correspondant aux porosités $\varepsilon_{\beta}=0,785$ et $\varepsilon_{\beta}=0,868$, réalisées suivant la procédure décrite au paragraphe 4.7.2, se trouvent dans l'annexe V.

5.5-CALCUL DU TENSEUR EFFECTIF DE DIFFUSION

Ensuite on passe à la présentation, en deux parties, de l'ensemble des coefficients effectifs de diffusion calculés. Tous les résultats sont obtenus à partir de l'équation (8) du présent chapitre.

La première partie est dédiée aux résultats concernant les géométries appelées ici "ordonnées" (en ligne, en quinconce et en chicane). La dernière partie est consacrée aux résultats calculés pour les géométries dénommées "désordonnées" (aléatoires).

Dans les deux parties, les coefficients sont comparés à des résultats théoriques approchés, ainsi qu'à d'autres résultats numériques trouvés dans la littérature.

5.5.1-ARRANGEMENTS "ORDONNÉS"

Les premiers cas étudiés, arrangements géométriques "ordonnés", sont bien connus dans la littérature. Ils ont été aussi employés, par certains auteurs, lors de la détermination du coefficient effectif de diffusion [Bell et Crank, 1973; Ryan et al, 1980; Chang, 1982; Kim et al, 1987; Gabitto, 1991]. Ils serviront, ici, comme un moyen de vérifier l'exactitude des résultats obtenus par rapport à ceux trouvés dans la littérature.

Depuis Maxwell en 1873 [71], un très grand nombre de corrélations ont été proposées, afin de déterminer le coefficient effectif de conductivité thermique ou de diffusion massique. Parmi plusieurs ouvrages de référence, on aimerait citer Adler, P.M. [1], Crank, J. [29] et Kaviany, M. [57] où le lecteur pourra trouver une partie des travaux réalisés sur le sujet.

On va utiliser ici, à titre de comparaison, quatre résultats qui concernent plus directement les arrangements réguliers périodiques et bidimensionnels.

Le premier cas utilisé pour la validation des résultats est la

détermination du coefficient effectif de diffusion pour un arrangement de type quinconce. Les résultats sont comparés à ceux obtenus numériquement par Kim, Ochoa et Whitaker [59] et à ceux déterminés à l'aide d'une approximation, utilisant un calcul du type résistance équivalente [29].

Les coefficients effectifs approchés sont calculés en considérant que le milieu est constitué de plusieurs parties, disposées en série ou en parallèle. On détermine le coefficient effectif de diffusion, pour un arrangement en série, par la relation suivante:

$$\frac{l}{D} = \frac{l_1}{D_1} + \frac{l_2}{D_2} + \cdots + \frac{l_n}{D_n} \quad (17)$$

où l est l'épaisseur totale de la cellule unité, D le coefficient effectif de diffusion, l_i et D_i les épaisseurs et les coefficients de diffusion associés à chaque couche. Pour un arrangement en parallèle, le coefficient effectif de diffusion est déterminé par:

$$lD = l_1 D_1 + l_2 D_2 + \cdots + l_n D_n \quad (18)$$

où l_i , D_i , l et D sont définis de façon analogue au cas précédent. Les équations (17) et (18) ne sont valables rigoureusement que pour le cas d'un flux unidirectionnel, sinon il s'agit d'une approximation [29].

On applique maintenant les équations (17) et (18) à l'arrangement de la figure 5.4. On doit remarquer, ici, que le cas présenté se prête bien à cette démarche, puisque les axes principaux connus a priori coïncident avec les axes de la cellule unité. Ceci justifie de considérer en première approximation les flux comme étant unidirectionnels selon les deux directions.

Afin de pouvoir déterminer le coefficient moyen longitudinal (suivant OX) de diffusion, on divise la cellule unité en plusieurs bandes parallèles à l'axe OY. On trouve le coefficient équivalent pour chaque bande à l'aide de la formule (18) concernant le "cas en parallèle" puis les différentes bandes sont mises en série suivant l'axe OX et le coefficient équivalent est déterminé à l'aide la formule (17). Il vient alors:

-Pour $a \leq L_a$

$$\frac{\epsilon_B D_{\parallel}^*}{\mathcal{D}} = \left[\frac{\left(\frac{a}{L_a} \right)}{\left(1 - \frac{b}{L_b} \right)} + \left(1 - \frac{a}{L_a} \right) \right]^{-1} \quad (19)$$

-Pour $a > L_a$

$$\frac{\epsilon_B D_{\parallel}^*}{\mathcal{D}} = \left[\frac{\left(2 - \frac{a}{L_a} \right)}{\left(1 - \frac{b}{L_b} \right)} + \frac{\left(\frac{a}{L_a} - 1 \right)}{\left(1 - 2\frac{b}{L_b} \right)} \right]^{-1} \quad (20)$$

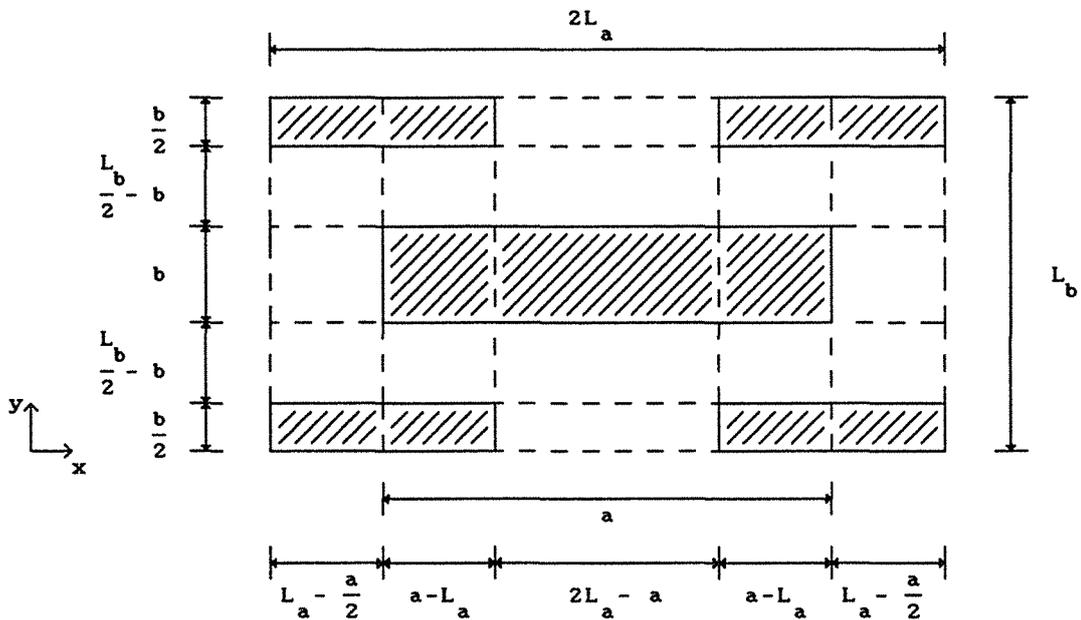


Figure 5.4 - Arrangement en quinconce (cas $a > L_a$)

Pour la détermination du coefficient moyen transversal suivant OY on a choisi le même découpage en bandes parallèles à OY (les résistances sont alors en série) que l'on va alors mettre en parallèle. Ce choix arbitraire et contraire au choix précédent est dicté par le fait que l'on va travailler avec des particules de grand élanement (a/b grand) en nous

intéressant plus particulièrement aux porosités élevées. Dans ce cas comme $a < L_a$, il vient:

$$\frac{\varepsilon_B D_{\perp}^*}{D} = 1 - \frac{a}{L_a} \quad (21)$$

Les coefficients effectifs de diffusion trouvés par Kim, Ochoa et Whitaker [59], sont calculés de la même façon que ceux présentés dans ce travail en utilisant aussi la méthode de prise de moyenne des équations macroscopiques. Leurs résultats ont été obtenus pour plusieurs porosités et divers rapports entre la longueur a et la hauteur b des cylindres rectangulaires (figure 5.4).

On présente d'abord les résultats pour le coefficient longitudinal correspondant aux rapports $L_a = L_b$ et $a = b$. Ces résultats ont été calculés avec un maillage de 40 X 80 volumes de contrôle et un critère de convergence $\varepsilon = 1,0 \times 10^{-6}$.

ε_B	$\varepsilon_B D_{xx}^* / D$		
	BEM	FDM	CVM
0,36	0,213	0,212	0,213
0,51	0,326	0,327	0,330
0,64	0,451	0,449	0,453
0,75	0,583	0,576	0,580
0,84	0,712	0,703	0,706
0,91	0,828	0,820	0,821

Tableau 5.1 - Comparaison entre les différentes méthodes

On peut constater que les résultats trouvés dans ce travail, **CVM** (Control Volume Method), se comparent de façon très satisfaisante avec les résultats obtenus par la méthode **BEM** (Boundary Element Method) et par la méthode de différences finies **FDM** (Finite Difference Method) par Kim, Ochoa et Whitaker [59]. Les résultats correspondant à la méthode **BEM** ont été calculés avec un maillage constitué de 256 éléments, tandis que ceux de la méthode **FDM** ont été déterminés en utilisant un maillage régulier de 60 X 60 points.

Le tableau 5.2 montre les résultats calculés pour les rapports $L_a=15L_b$ et $a=15b$, obtenus à l'aide d'un maillage de 80 X 40 volumes de contrôle et un critère de convergence $\mathcal{E}=1,0X10^{-7}$. Dans ce tableau FEM (Finite Element Method) est l'abrégé de la méthode des éléments finis, les résultats ayant été obtenus avec un maillage de 448 éléments.

ϵ_B	$\epsilon_B D_{xx}^* / \mathcal{D}$			$\epsilon_B D_{yy}^* / \mathcal{D}$		
	BEM	FEM	CVM	BEM	FEM	CVM
0,19	0,114	0,109	0,109	0,100	0,102	0,100
0,36	0,240	0,235	0,236	0,200	0,205	0,200
0,64	0,526	0,523	0,521	0,403	0,411	0,402
0,70	0,600	0,596	0,594	0,456	0,462	0,454
0,84	0,788	0,788	0,784	0,608	0,622	0,605
0,91	0,884	0,886	0,882	0,711	0,725	0,707

Tableau 5.2 - Comparaison entre les différentes méthodes

Finalement, les figures 5.5-5.8, comparent les résultats de ce travail avec ceux de Kim, Ochoa et Whitaker [59] et les valeurs approchées déterminées par l'emploi de la méthode approchée (équations (19)-(21)). Quatre configurations géométriques ont été considérées. Elles correspondent aux rapports: $a/b=15$ et $L_a/L_b=1, 5, 10$ et 15 . Les résultats concernant le coefficient longitudinal ($\epsilon_B D_{xx}^* / \mathcal{D}$) sont montrés sur les figures 5.5 et 5.6, tandis que le coefficient effectif transversal ($\epsilon_B D_{yy}^* / \mathcal{D}$) est montré dans les figures 5.7 et 5.8. Les coefficients ont été calculés, suivant les rapports L_a/L_b , en utilisant des maillages: 64 X 80, 80 X 40 et 80 X 60, avec un critère de convergence $\mathcal{E}=1,0X10^{-6}$.

On aperçoit que, d'une façon générale, les résultats numériques de Kim, Ochoa et Whitaker [59], ceux de ce travail et ceux déterminés à partir du calcul approché, présentent une très bonne concordance.

Ce bon accord ne saurait signifier que l'approche "résistances équivalentes" est une approche fiable pour évaluer le coefficient de diffusion. On a bien vu que les règles de calcul dans les deux directions OX et OY n'étaient pas identiques mais choisies sur les bases d'une intuition raisonnable en fonction de la géométrie étudiée. Cette manière de faire n'est pas parfaite; il suffit pour s'en persuader d'observer le cas

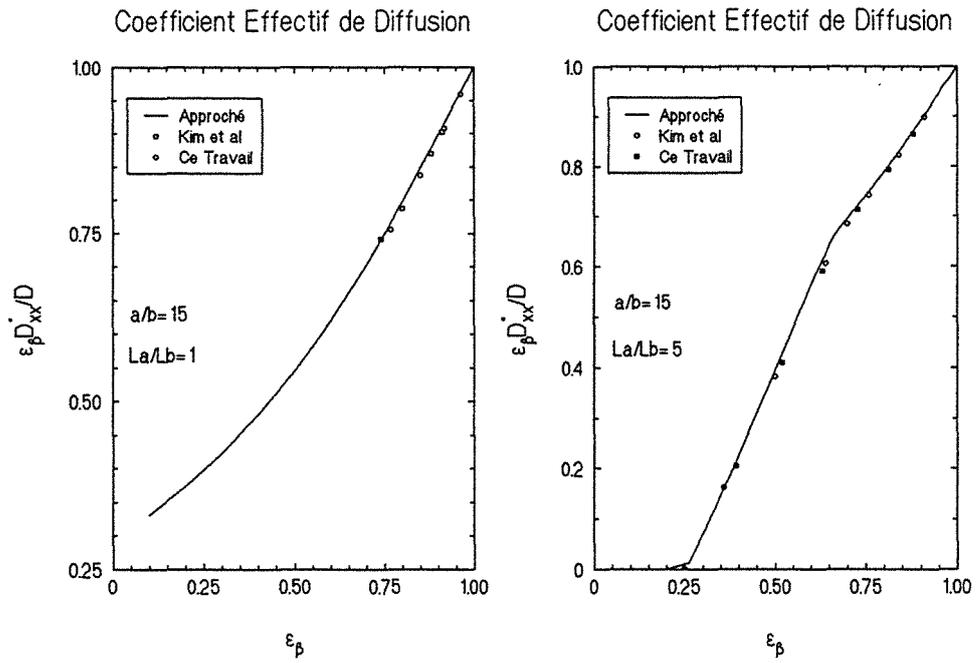


Figure 5.5 - Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_p D_{xx}^*/D$

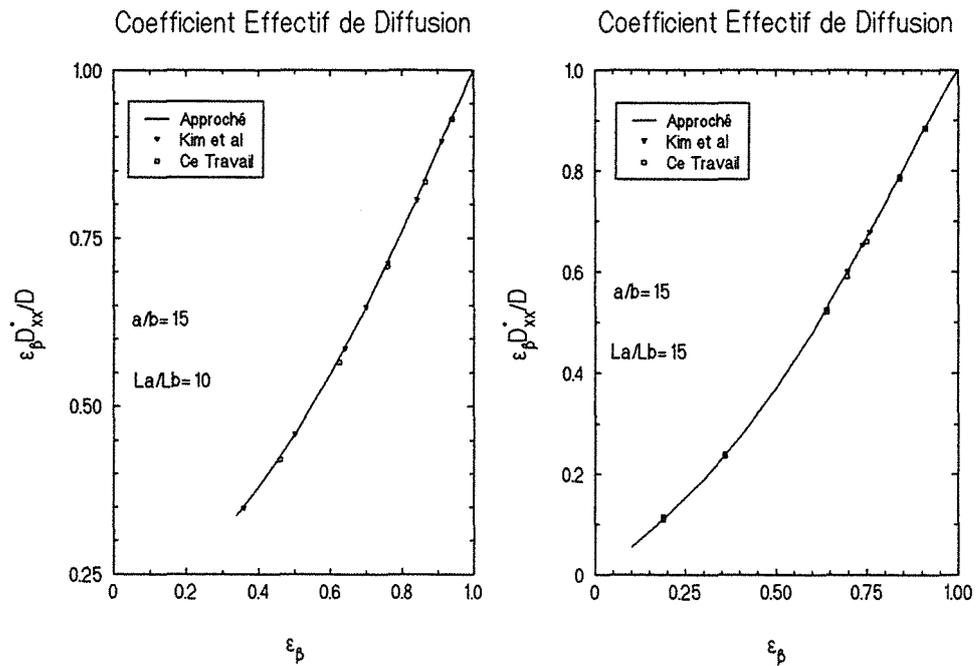


Figure 5.6 - Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_p D_{xx}^*/D$

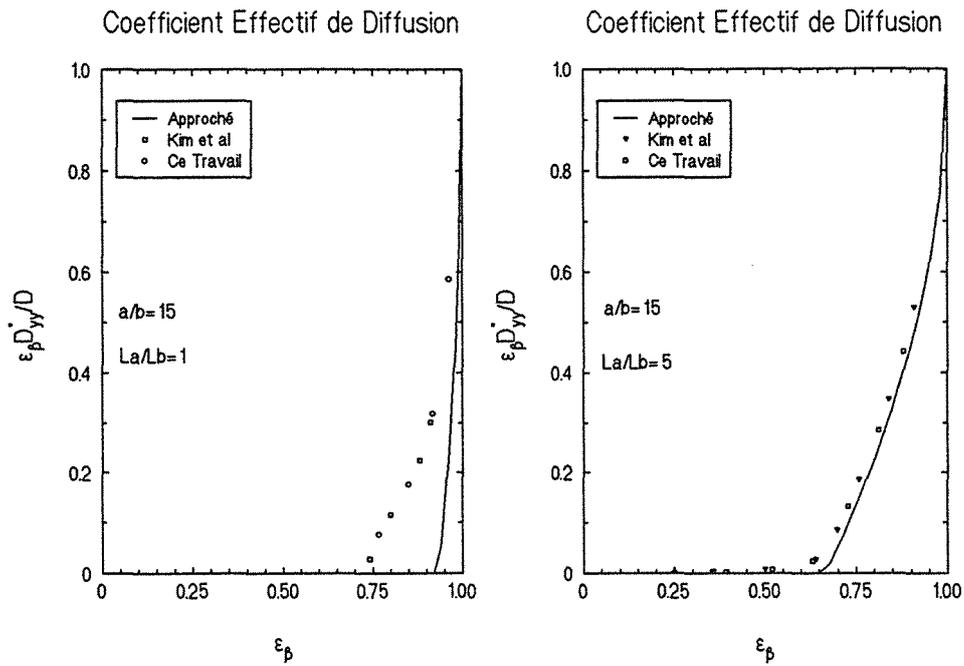


Figure 5.7 - Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_{\beta} D_{yy}^*/D$

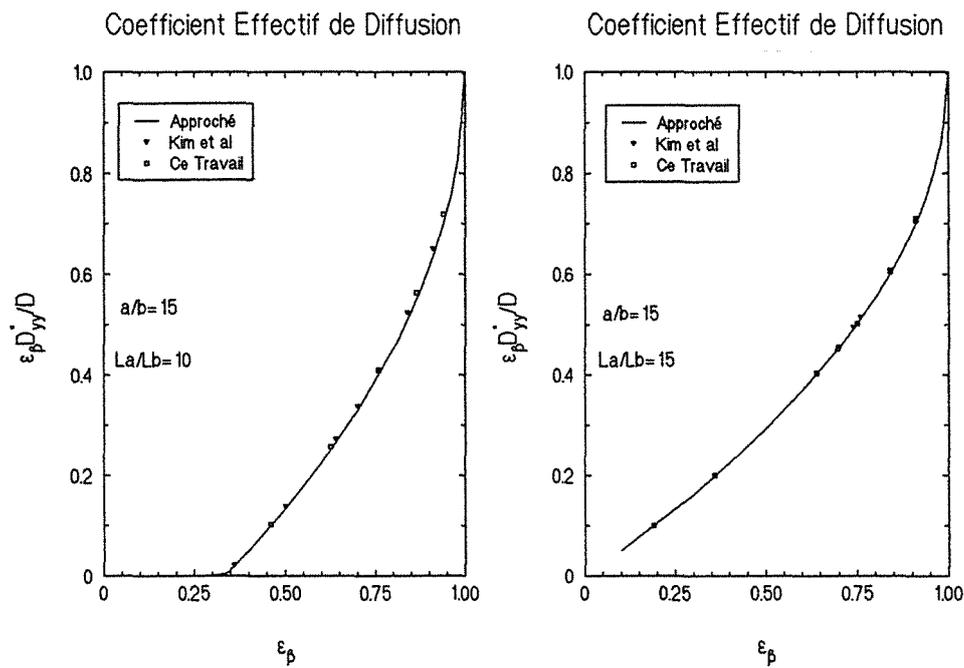


Figure 5.8 - Coefficient effectif de diffusion - $\varepsilon_{\beta} D_{yy}^*/D$

$L_a/L_b=1$ et $a/b=15$ pour le coefficient effectif transversal.

Le deuxième travail est celui de Bell et Crank [15], qui ont étudié le processus de diffusion en régime permanent, pour des arrangements bidimensionnels de cylindres rectangulaires, disposés en ligne et en quinconce. Les auteurs ont calculé numériquement le coefficient moyen de diffusion, à partir de la résolution du laplacien de la concentration avec les conditions aux limites appropriées. Les résultats ne sont pas fournis, mais les auteurs préconisent le calcul du coefficient effectif à partir d'une approche unidirectionnelle de type résistance équivalente. D'après les auteurs, les résultats ainsi déterminés vérifient ceux obtenus numériquement avec une erreur inférieure à 10% (au moins dans les cas qui ont été considérés). Un premier calcul considère que les résistances sont placées en série, tandis qu'un second les considère en parallèle.

On obtient alors dans les deux cas pour des cylindres carrés disposés en ligne, les résultats suivants:

$$\frac{\varepsilon_B D_{\parallel}}{\mathcal{D}} = \frac{1}{1 + \frac{a^2}{hl}} = \frac{1}{1 + \frac{a^2}{l(1-a)}} \quad (22)$$

$$\frac{\varepsilon_B D_{\perp}}{\mathcal{D}} = \frac{h}{l} = 1 - \frac{a}{l} \quad (23)$$

où a est la moitié du côté du carré, h la distance entre la surface supérieure du carré et l'axe de symétrie et l est la hauteur et la longueur de la cellule. La figure 5.9 montre le schéma correspondant au cas de l'arrangement en ligne.

Le coefficient effectif de diffusion est alors calculé à partir des deux coefficients équivalents:

$$\frac{\varepsilon_B D^*}{\mathcal{D}} = \varphi \frac{\varepsilon_B D_{\parallel}}{\mathcal{D}} + (1-\varphi) \frac{\varepsilon_B D_{\perp}}{\mathcal{D}} \quad (24)$$

où φ est déterminé en termes de a et de h :

$$\varphi = 0,56 - 0,5 \frac{a}{l} + 0,4 \frac{h}{l} = 0,96 - 0,9 \frac{a}{l} \quad (25)$$

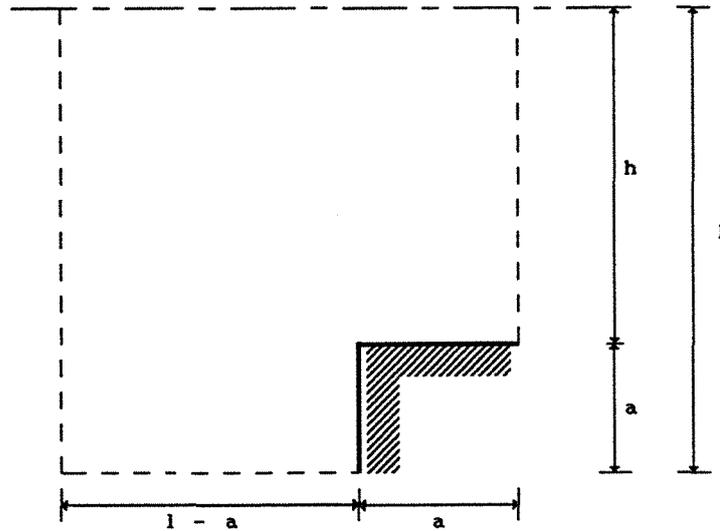


Figure 5.9 - Un quart de cellule unité

La relation (24) est sensée donner les meilleurs résultats pour les deux types d'arrangements (ligne et quinconce) étudiés par Bell et Crank [15].

Le troisième travail est celui de Chang [25], qui a utilisé la méthode de perturbation, afin d'obtenir une solution analytique du problème de diffusion dans le cas des arrangements géométriques périodiques. Dans le cas où la phase solide est formée par des cylindres circulaires disposés en ligne, le coefficient effectif de diffusion, pour des particules solides impérmeables, est donné par:

$$\frac{D^*}{D} = \frac{1}{2 - \epsilon_B} \quad (26)$$

Le dernier travail est l'étude numérique de Ryan et al [96]. Les résultats² ont été aussi obtenus à partir de l'équation (7), pour des arrangements géométriques en ligne et en quinconce.

Whitaker [23, 59, 129] a vérifié que les valeurs des composantes du tenseur effectif trouvées par Ryan et al [96], hors de la diagonale, étaient nulles. De plus, les composantes D_{xx} et D_{yy} sont égales pour

²Tableau 5.1, résultats dus à la méthode FDM.

l'arrangement en ligne et diffèrent seulement de 1 à 2% dans le cas de l'arrangement en quinconce. D'autre part, les valeurs de D_{xx} et D_{yy} sont à peu près les mêmes pour les deux arrangements.

Tous les calculs concernant les arrangements ordonnés ont été réalisés avec comme critère de convergence $\varepsilon=1.0 \times 10^{-5}$ et les maillages uniformes suivants: 1) Arrangement en ligne: 70 X 70 V.C.; 2) Arrangement en quinconce: 80 X 80 V.C. et 3) Arrangement en chicane: 80 X 80 volumes de contrôle.

La figure 5.10 compare les résultats trouvés dans ce travail, ceux déterminés à l'aide de équations (24) et (26) ainsi que ceux du tableau 5.1. Tout d'abord on peut vérifier que les résultats fournis par Bell et Crank [15], Chang [25], Ryan et al [96], déterminés par des méthodes différentes, présentent une très bonne concordance.

Sur la figure 5.10, l'arrangement en quinconce 1 est celui dont les résultats ont été obtenus avec une cellule unité carrée (longueur=hauteur). Le deuxième arrangement (quinconce 2, $\varepsilon_{\beta} D_{xx}^*$ (■) et $\varepsilon_{\beta} D_{yy}^*$ (+)) correspond à une cellule unité dont la hauteur vaut la moitié de la longueur.

Les résultats calculés pour les arrangements en ligne et en quinconce 2 ($\varepsilon_{\beta} D_{xx}^*$), vérifient d'une façon très satisfaisante les résultats prévus par les auteurs cités ci-dessus. Une différence comprise entre 13% ($\varepsilon_{\beta}=0,36$) et 0,4% ($\varepsilon_{\beta}=0,91$) a été constatée entre les valeurs de D_{xx}^* et D_{yy}^* pour le cas de l'arrangement en quinconce 2. Ces valeurs ne correspondent pas à celles données par Whitaker [129], mais sont en accord avec celles données par Kim, Ochoa et Whitaker [59]: 9,7% ($\varepsilon_{\beta}=0,35$) et 1,7% ($\varepsilon_{\beta}=0,90$). Cependant, les résultats pour l'arrangement en quinconce 1 ($D_{xx}^*=D_{yy}^*$) diffèrent d'une manière significative des précédents. Ce résultat ne saurait surprendre. Dans ce cas pour la porosité minimale possible ($\varepsilon_{\beta}=0,5$), les coefficients de diffusion tendent vers zéro. Au fur et à mesure où l'on approche de cette valeur, le processus devient de plus en plus tortueux, la constriction des lignes de flux prenant une importance de plus en plus considérable. Ainsi la géométrie locale du milieu influence alors fortement les résultats, ce qui rend inadéquat les formulations obtenues de manière générale ou fondées sur des géométries "approchées".

Finalement, on montre sur la figure 5.11 les résultats concernant l'arrangement en chicane. Les résultats numériques montrent que le tenseur effectif est anisotrope et que les axes propres coïncident numériquement à

Coefficient Effectif de Diffusion

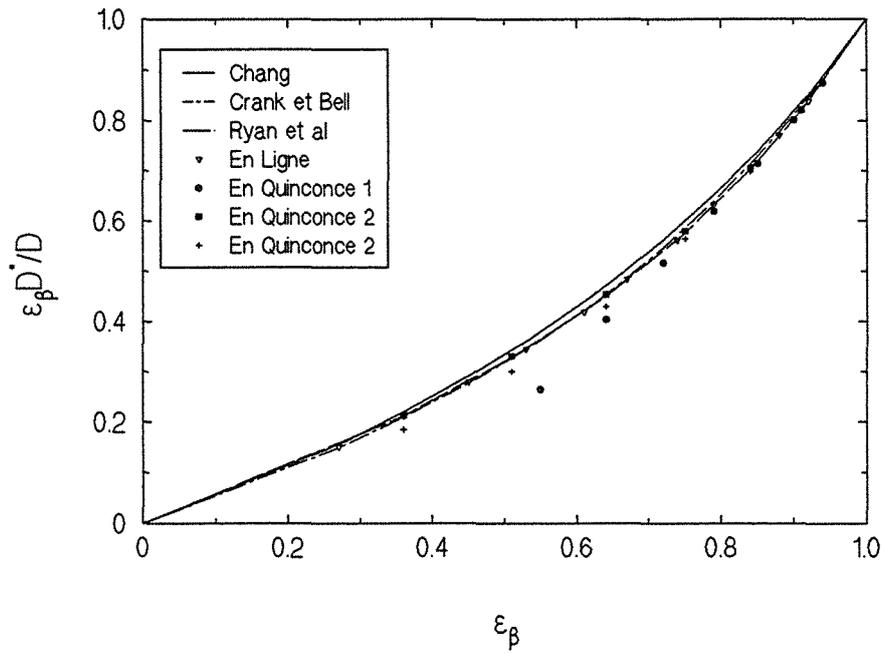


Figure 5.10 - Arrangements en ligne et en quinconce

Coefficient Effectif de Diffusion

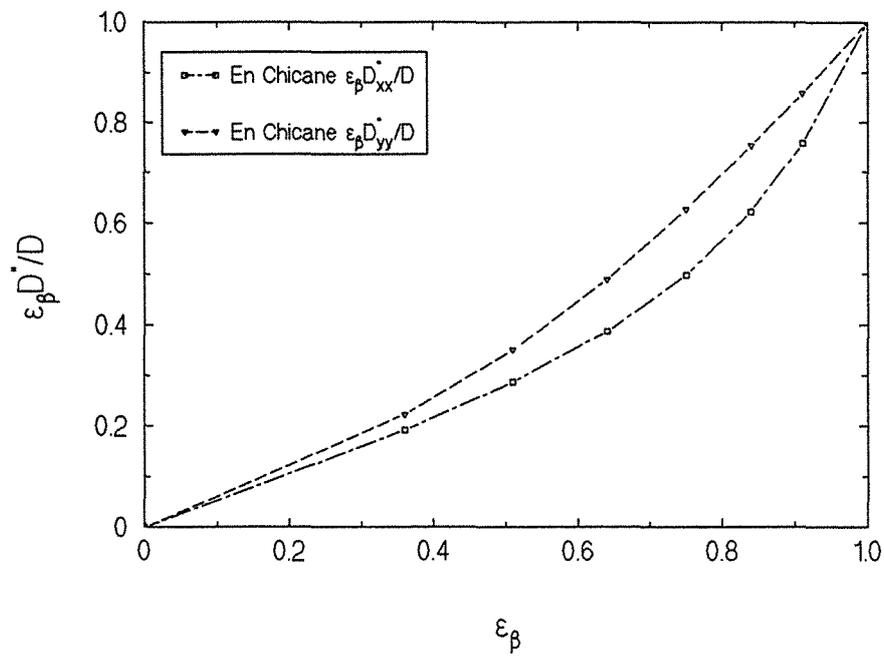


Figure 5.11 - Arrangement en chicane

peu près avec ceux de la cellule unité.

En théorie, l'axe OY étant un axe de symétrie (figure 5.12), la direction OY et par suite la direction orthogonale OX sont les directions propres du tenseur de diffusion.

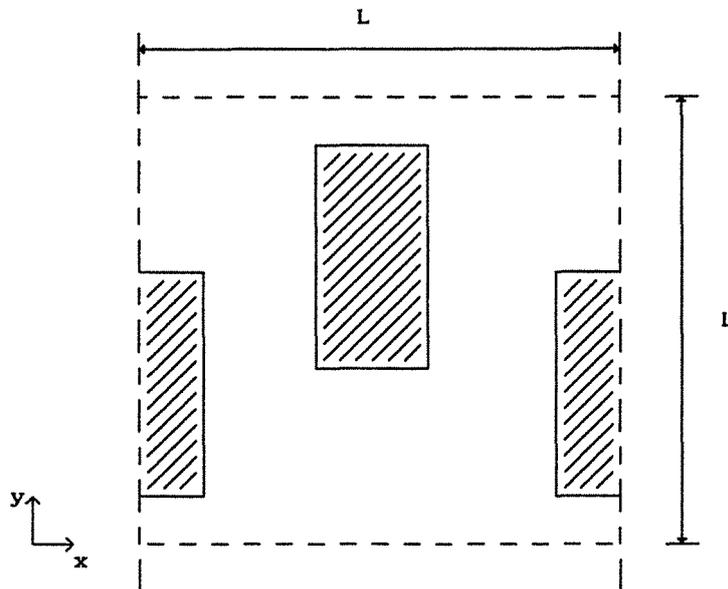


Figure 5.12 - Arrangement en chicane

5.5.2-ARRANGEMENTS "DÉSORDONNÉS"

Les cas aléatoires, arrangements géométriques "désordonnés", ont été étudiés pour des porosités supérieures à 0,7. Cette valeur est due au seuil de percolation d'un milieu bidimensionnel (paragraphe 4.7.2). Vingt cas ont été considérés pour chacune des trois valeurs de la porosité: $\varepsilon_B = 0,703$, 0,785 et 0,868. Les calculs ont été effectués, dans tous les cas, avec un critère de convergence $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-5}$ (§ 3.5.4) et un maillage uniforme de 110 X 110 volumes de contrôle.

Le tableau 5.3 contient les résultats calculés pour la porosité $\varepsilon_B = 0,703$. On doit espérer, vu le processus de construction de ces milieux désordonnés, que le milieu soit en moyenne isotrope vis-à-vis du processus de diffusion, c'est-à-dire $\bar{D}_{xx}^* \cong \bar{D}_{yy}^*$ et que $\bar{D}_{xy}^* \cong 0$.

Pour moyenner le tenseur effectif de diffusion, nous avons choisi de nous placer dans le système d'axes fixe (OX,OY) et de faire la moyenne arithmétique des trois composantes du tenseur. Cette méthode présente au

moins l'avantage d'être indépendante du choix de la base.

Milieu N°	D_{xx}^*/\mathcal{D}	D_{yy}^*/\mathcal{D}	D_{xy}^*/\mathcal{D}
01	0,4746	0,5485	-0,0671
02	0,5437	0,5603	-0,0453
03	0,4640	0,1755	-0,0006
04	0,5666	0,6151	0,0116
05	0,5273	0,6805	0,0187
06	0,4695	0,5868	0,0309
07	0,5679	0,5230	0,0434
08	0,5258	0,5294	-0,0492
09	0,4881	0,4408	-0,1035
10	0,4253	0,4786	-0,0180
11	0,5897	0,6735	-0,0370
12	0,4504	0,6095	0,0665
13	0,5367	0,5269	-0,0453
14	0,5153	0,6166	0,0307
15	0,4623	0,4398	0,0007
16	0,5102	0,5176	0,0190
17	0,6210	0,5030	0,0352
18	0,4258	0,3722	0,2164
19	0,5531	0,3122	-0,0573
20	0,5533	0,5403	-0,0217
Moyenne	0,5135	0,5125	0,0014
Écart Type	0,0532	0,1184	0,0649

Tableau 5.3 - Coefficients effectifs de diffusion - $\varepsilon_B=0,703$

Si l'on analyse les résultats numériques, on observe que les éléments diagonaux D_{xx}^* et D_{yy}^* sont sensiblement égaux à 0,2% près et que le coefficient hors diagonale D_{xy}^* est approximativement nul puisque il ne vaut que 0,3% des coefficients diagonaux.

Si l'on regarde la distribution de la phase solide, dans les cas où les rapports des coefficients sont les plus éloignés de l'unité³ où les valeurs de D_{xy}^*/\mathcal{D} sont les plus élevées (milieux 3, 9, 18 et 19), on constate que ces arrangements présentent un aspect particulier: la cellule unité est pratiquement coupée en deux.

Les tableaux 5.4 et 5.5, montrent respectivement, les résultats

³ On considère le rapport entre la plus grande valeur et la plus petite.

obtenus pour les porosités $\varepsilon_{\beta}=0,785$ et $0,868$. Par rapport au cas précédent, les résultats reproduisent les mêmes tendances, les éléments sur la diagonale sont en moyenne égaux à 2% près et la moyenne des éléments hors de la diagonale vaut 0,2% des coefficients diagonaux pour $\varepsilon_{\beta}=0,785$ et respectivement 2% et 2,5% pour $\varepsilon_{\beta}=0,868$.

Milieu N°	D_{xx}^* / \mathcal{D}	D_{yy}^* / \mathcal{D}	D_{xy}^* / \mathcal{D}
01	0,6811	0,5986	-0,0424
02	0,6307	0,7025	0,0664
03	0,5757	0,5805	-0,0378
04	0,6236	0,6860	-0,0604
05	0,7226	0,6953	0,0035
06	0,5090	0,4920	0,0198
07	0,6764	0,7479	-0,0103
08	0,7148	0,6119	-0,0042
09	0,7295	0,6686	0,0500
10	0,6806	0,7242	0,0245
11	0,6128	0,6172	-0,0266
12	0,5733	0,6456	0,0904
13	0,6833	0,5316	0,0961
14	0,6015	0,5684	0,0379
15	0,6317	0,7030	0,0002
16	0,6390	0,6208	0,0358
17	0,6470	0,6286	-0,0210
18	0,6243	0,5868	-0,0433
19	0,6519	0,5619	-0,0822
20	0,6693	0,6434	-0,0672
Moyenne	0,6439	0,6307	0,0015
Écart Type	0,0531	0,0655	0,0496

Tableau 5.4 - Coefficients effectifs de diffusion - $\varepsilon_{\beta}=0,785$

Finalement les valeurs moyennes trouvées, pour l'ensemble des milieux désordonnés, sont confrontées aux valeurs numériques données par Adler [1]⁴ pour les mêmes conditions géométriques bidimensionnelles.

La figure 5.13 montre les résultats prévus par Adler [1] et les valeurs propres trouvées à partir de \bar{D}_{xx}^* , \bar{D}_{yy}^* et \bar{D}_{xy}^* , fournies par les tableaux 5.3, 5.4 et 5.5. La barre indique la moyenne arithmétique. Les

⁴ Valeurs obtenues par interpolation graphique

valeurs propres sont montrées sur le tableau 5.6.

Milieu N°	D_{xx}^*/\mathcal{D}	D_{yy}^*/\mathcal{D}	D_{xy}^*/\mathcal{D}
01	0,8186	0,6249	0,0758
02	0,7810	0,7830	0,0290
03	0,8146	0,8307	-0,0127
04	0,8025	0,7680	0,0407
05	0,8224	0,7664	0,0629
06	0,7999	0,7916	0,0207
07	0,7914	0,7730	0,0004
08	0,8187	0,7970	-0,0056
09	0,8156	0,7477	0,0052
10	0,8157	0,8553	0,0149
11	0,7811	0,8691	-0,0365
12	0,7697	0,7145	0,0473
13	0,8239	0,8123	-0,0339
14	0,8244	0,8425	0,0163
15	0,8261	0,8009	0,0020
16	0,8288	0,8422	0,0057
17	0,8217	0,8065	0,0246
18	0,7845	0,7526	-0,0306
19	0,7389	0,7954	0,0333
20	0,7464	0,6964	-0,0622
Moyenne	0,8013	0,7835	0,0099
Écart Type	0,0261	0,0566	0,0336

Tableau 5.5- Coefficients effectifs de diffusion - $\epsilon_B=0,868$

On peut considérer que l'accord est raisonnable pour les deux porosités les plus grandes ($\epsilon_B \cong 0,79$ et $0,87$). En revanche les points pour $\epsilon_B \cong 0,7$ diffèrent sans qu'il soit possible de fournir une explication satisfaisante.

ϵ_B	D_{xx}^*/\mathcal{D}	D_{yy}^*/\mathcal{D}
0,703	0,5145	0,5115
0,785	0,6441	0,6305
0,870	0,8077	0,7771

Tableau 5.6 - Valeurs propres

Coefficient Effectif de Diffusion

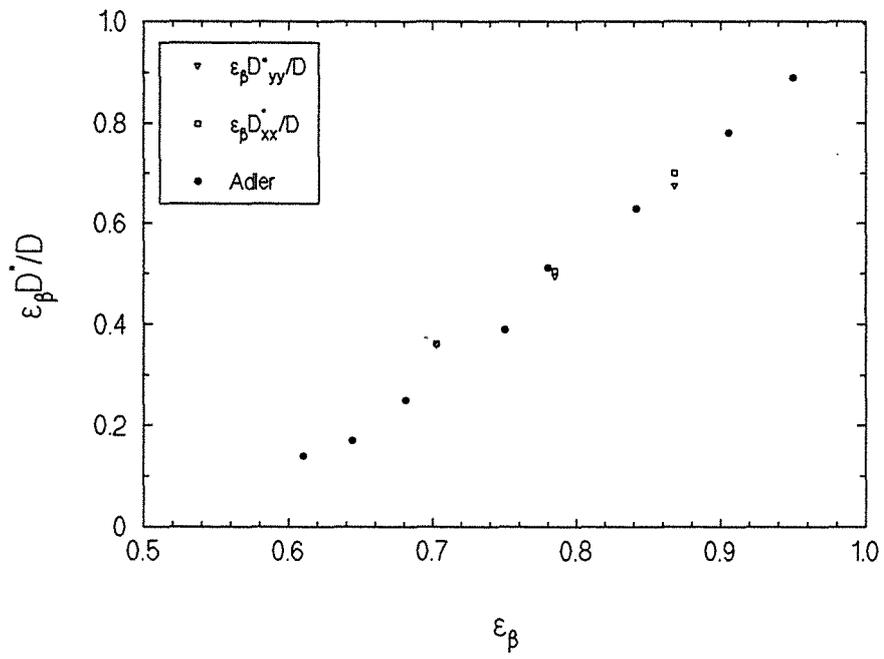


Figure 5.13 - Arrangement desordonné

5.6-CONCLUSION

Une très bonne concordance existe entre les résultats numériques, calculés pour l'arrangement de cylindres carrés disposés en ligne et en quinconce, et ceux déterminés numériquement par Bell et Crank [15] et Kim, Ochoa et Whitaker [59]. Les coefficients effectifs de diffusion s'accordent, aussi, de façon satisfaisante avec ceux prévus par la solution de Chang [25]. Une méthode approchée du type résistance équivalente fournit des valeurs qui correspondent bien à celles calculées numériquement si elle est convenablement guidée par l'intuition.

Toutes ces constatations indiquent une bonne fiabilité du code de calcul, au moins en ce qui concerne le processus de diffusion pour les arrangements "ordonnés".

Pour ce qui est des arrangements désordonnés, le nombre limité de cas étudiés laisse espérer qu'un comportement de type milieu infini aléatoire, peut être atteint. On s'attend à ce qu'un tel milieu soit isotrope vis-à-vis du processus de diffusion. Néanmoins, un nombre plus important de cas et de porosités devrait être essayé afin d'obtenir une telle confirmation. En particulier l'influence de la taille de la cellule considérée pour prédire les porosités de l'amas infini devrait être nécessairement étudiée pour les valeurs ε_p proches du seuil de percolation [1].

Toutefois, les résultats moyens pour les coefficients effectifs de diffusion $\bar{D}_{xx}^*/\mathcal{D}$ et $\bar{D}_{yy}^*/\mathcal{D}$ vérifient raisonnablement ceux prévus, pour des milieux aléatoires, par Adler [1].

CHAPITRE 6

DIFFUSION-DISPERSION EN MILIEU POREUX

CHAPITRE 6

DIFFUSION-DISPERSION EN MILIEU POREUX

6.1-INTRODUCTION

Au chapitre 4, le problème hydrodynamique à l'intérieur de la cellule unité a été traité. Ensuite, le chapitre 5 a abordé le problème de diffusion massique pure. Dans ce chapitre, les processus de transport par convection et diffusion moléculaire, seront maintenant pris en compte simultanément. Pour la cellule unité, on utilisera les géométries déjà présentées au chapitre 4.

Au préalable le code de calcul sera validé à l'aide de deux problèmes simples: le transport convectif-diffusif d'un scalaire et le cas classique de la dispersion de Taylor pour l'écoulement entre deux plans parallèles.

6.2-DIFFUSION-DISPERSION EN MILIEU POREUX

Le problème de diffusion-dispersion massique à l'intérieur d'un milieu poreux peut être abordé à partir de la résolution du problème hydrodynamique et de l'équation de fermeture en suivant la démarche exposée au chapitre 2. Lorsqu'il s'agit d'un milieu périodique, le problème est ramené à leur résolution à l'intérieur de la cellule unité (paragraphe 2.6).

Une fois les problèmes hydrodynamique et de fermeture résolus, le tenseur effectif de dispersion D^* peut alors être calculé à l'aide des équations présentées au paragraphe 2.4.

6.2.1-DIFFUSION-DISPERSION MASSIQUE

L'équation qui gouverne les transports convectifs et diffusifs de masse, à l'intérieur du milieu, est donnée par:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla c) \quad (1)$$

où c est la concentration volumique de soluté et \mathcal{D} le coefficient de diffusion moléculaire. Les variations de pression et de température sont négligeables. Il n'y a pas de réactions chimiques et le fluide est incompressible.

Les conditions aux limites, si l'on suppose que le solide est imperméable au soluté, sont données par:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla c = 0 \quad \text{en } A_{\text{so}} \quad (2)$$

et la condition à la limite sur la surface extérieure A_{Bext} , avec la condition initiale,

$$c = \mathcal{F} \quad \text{en } t=0 \quad (3)$$

où \mathbf{n} est la normale à la surface solide-liquide A_{so} et \mathcal{F} la concentration à l'instant initial.

6.2.2-ÉQUATION DE TRANSPORT MOYENNÉE

Si l'on applique le théorème de prise de moyenne aux équations (1)-(3) et si l'on suit le développement introduit au chapitre 2, on arrive à la forme finale de l'équation de transport moyennée (équation (84) du chapitre 2):

$$\frac{\partial \langle c \rangle^B}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \rangle^B \cdot \nabla \langle c \rangle^B = \mathbf{D}^* : \nabla \nabla \langle c \rangle^B \quad (4)$$

avec les conditions aux limites sur A_{Bext} et la condition initiale,

$$\langle c \rangle^B = \mathcal{F} \quad \text{en } t=0 \quad (5)$$

Le tenseur effectif de dispersion \mathbf{D}^* , dans l'équation (4), est donné dans ce cas par:

$$\mathbf{D}^* = \mathcal{D} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}^T) \right] + \frac{1}{2}(\mathbf{D} + \mathbf{D}^T) \quad (6)$$

où le tenseur tortosité $\boldsymbol{\tau}$ est défini par (paragraphe 2.4):

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{\bar{V}} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{n} \mathbf{f} \, dA \quad (7)$$

tandis que le tenseur de dispersion hydrodynamique \mathbf{D} (paragraphe 2.4) s'écrit :

$$\mathbf{D} = - \frac{1}{\bar{V}} \int_{V_B} \tilde{\mathbf{v}} \mathbf{f} \, dV \quad (8)$$

L'équation **adimensionnelle** de fermeture en régime permanent du problème de diffusion-dispersion massique dans un milieu périodique peut être obtenue à partir de l'équation (76) du chapitre 2:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{F} = \left(\frac{1}{Sc} \right) \nabla^2 \mathbf{F} - \tilde{\mathbf{v}} \quad (9)$$

où Sc est le nombre de Schmidt, défini par $Sc = \nu / \mathcal{D}$. Dans l'équation (9) $\mathbf{V} = \mathbf{v}L/\nu$ et $\mathbf{F} = \mathbf{f}/L$ (L est la longueur de la cellule unité) sont des vecteurs et par conséquent l'équation de fermeture (9) est une équation vectorielle. Les variables adimensionnelles sont les mêmes que celles déjà utilisées au paragraphe 4.3.1 pour la vitesse et au paragraphe 5.2.2 pour le vecteur \mathbf{f} .

Les conditions aux limites de l'équation (9) sont:

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{F} = \mathbf{n} \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (10)$$

et

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{F}(\mathbf{r}), \quad i=1,2 \quad \text{sur } A_{Be} \quad (11)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla F(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{n} \cdot \nabla F(\mathbf{r}), \quad i=1,2 \quad \text{sur } A_{Be} \quad (12)$$

où A_{Be} est la surface extérieure de la cellule unité, \mathbf{n} la normale extérieure au fluide, \mathbf{r} le vecteur position spatiale d'un point à l'intérieur de la cellule unité et \mathbf{l}_i les vecteurs des mailles de la cellule unité (paragraphe 2.6).

6.3-VALIDATION DU CODE NUMÉRIQUE

Comme aux chapitres 4 et 5, avant de passer aux calculs qui nous concernent directement (calcul du tenseur effectif), on a voulu tester l'exactitude des solutions fournies par le code de calcul par la résolution de deux problèmes où les équations gouvernant les phénomènes de transport sont équivalentes à l'équation (9). Dans le premier cas, il s'agit du transport convectif-diffusif d'un scalaire. Le deuxième cas consiste en la détermination du tenseur effectif de dispersion, lors de l'écoulement établi entre deux plans parallèles, ce dernier étant un cas classique de la diffusion-dispersion de Taylor [Taylor, 1953].

6.3.1-TRANSPORT CONVECTIF-DIFFUSIF D'UN SCALAIRE

On commence par résoudre un cas modèle bidimensionnel [Braga, 1990], dont on connaît la solution exacte. Il s'agit de trouver la solution, dans un domaine de résolution carré $[0,1] \times [0,1]$ (figure 6.1), de l'équation adimensionnelle de transport:

$$\lambda_1 \frac{\partial \phi}{\partial X} + \lambda_2 \frac{\partial \phi}{\partial Y} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} + S(X, Y) \quad (13)$$

où λ_1 et λ_2 sont des constantes et la source S est choisie de façon à ce que la solution exacte ϕ_e soit donnée par:

$$\phi_e = 2X(X-1)(\cos 2\pi Y - 1) \quad (14)$$

Il est facile de vérifier que la source $S(X, Y)$ est donnée par:

$$S = \lambda_1(4X-2)(\cos 2\pi Y-1) - \lambda_2 \left[2X(X-1)2\pi \sin 2\pi Y \right] -$$

$$- 4(\cos 2\pi Y-1) + 2X(X-1)4\pi^2 \cos 2\pi Y$$
(15)

D'après la solution exacte (14), on voit que les conditions aux limites du problème s'écrivent:

$$\phi = 0 \quad \text{en } X=0 \text{ et } X=1$$
(16)

$$\phi = 0 \quad \text{en } Y=0 \text{ et } Y=1$$
(17)

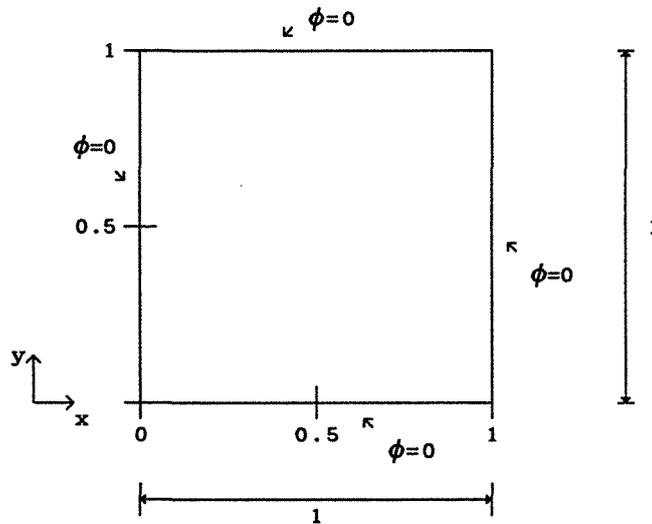


Figure 6.1 - Transport convectif-diffusif d'un scalaire

Les figures 6.2 à 6.7 montrent les résultats calculés utilisant les jeux de valeurs suivantes: $\lambda_1 = \lambda_2 = 1, 100$ et 1000 . Les résultats correspondent, figures 6.2-6.4, à ceux trouvés pour une section transversale en $X=0,5$. Les figures 6.5 à 6.7, montrent la solution numérique ϕ , pour une section longitudinale $Y=0,5$. Les résultats ont été obtenus avec un maillage de 41×41 volumes de contrôle et un critère de convergence $\mathcal{E}=1,0 \cdot 10^{-6}$.

D'une façon générale, les résultats numériques suivent les courbes représentant la solution exacte (équation (14)). Cependant, au fur et à mesure que les valeurs de λ_1 et λ_2 augmentent, on note que les valeurs ne

Diffusion-Dispersion d'un scalaire

$\lambda_1 = \lambda_2 = 1$ - Maillage: 41 X 41

$\phi = 2X(X-1)(\cos 2\pi Y - 1)$

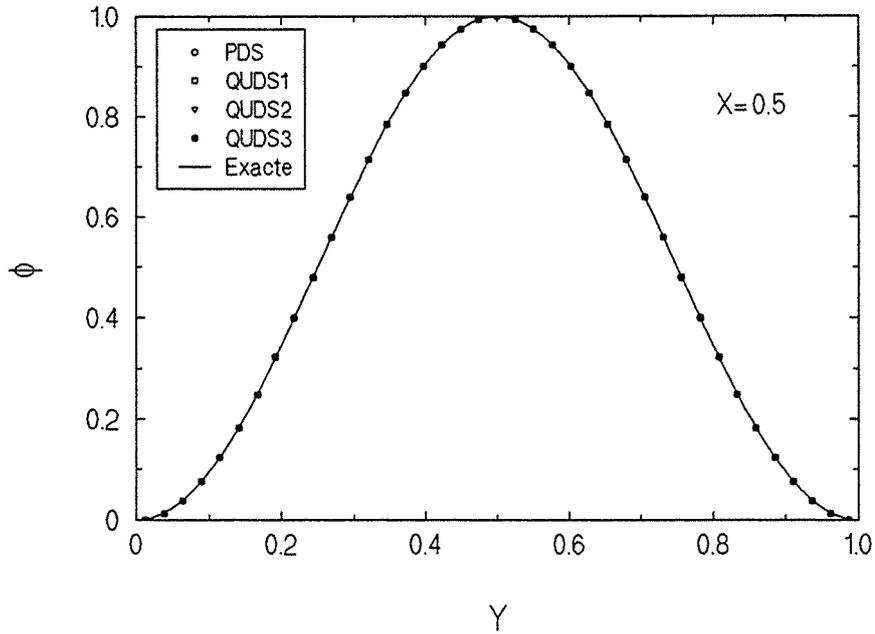


Figure 6.2 - Diffusion-dispersion d'un scalaire - X = 0,5

Diffusion-Dispersion d'un scalaire

$\lambda_1 = \lambda_2 = 100$ - Maillage: 41 X 41

$\phi = 2X(X-1)(\cos 2\pi Y - 1)$

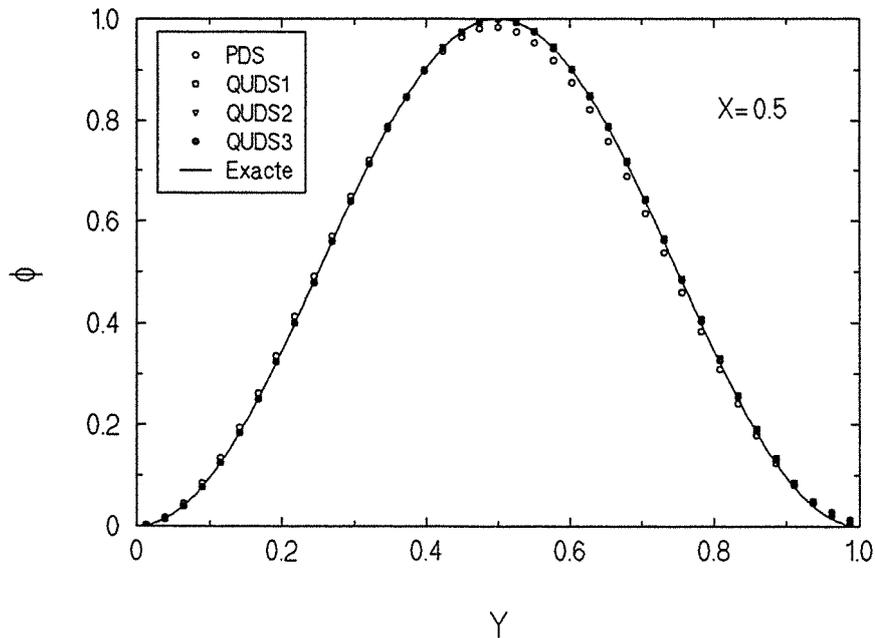


Figure 6.3 - Diffusion-dispersion d'un scalaire - X = 0,5

Diffusion-Dispersion d'un scalaire

$\lambda_1 = \lambda_2 = 1000$ - Maillage: 41 X 41

$$\phi = 2X(X-1)(\cos 2\pi Y - 1)$$

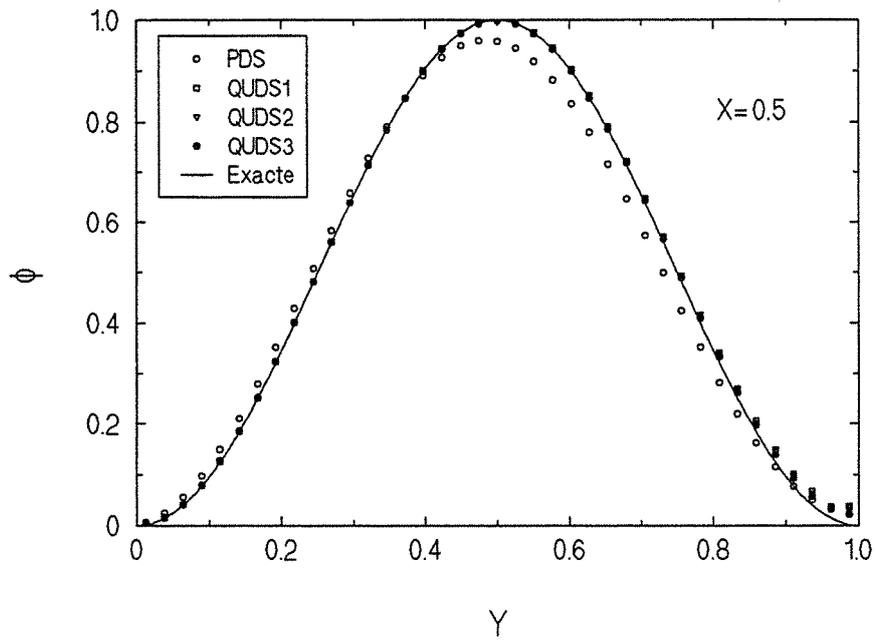


Figure 6.4 - Diffusion-dispersion d'un scalaire - X = 0,5

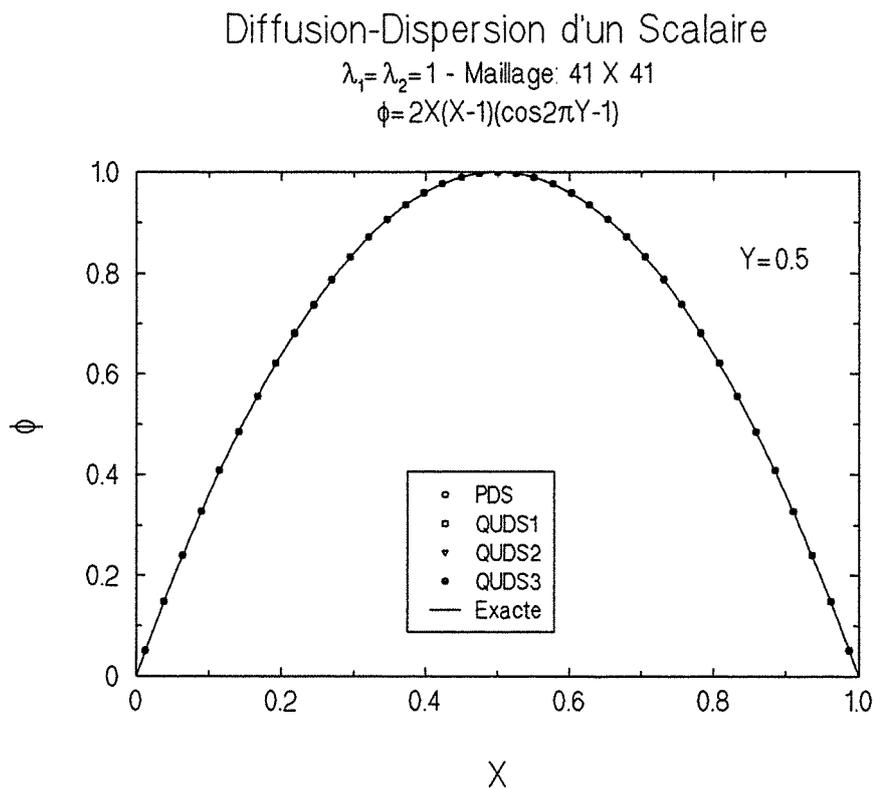


Figure 6.5 - Diffusion-dispersion d'un scalaire - Y = 0,5

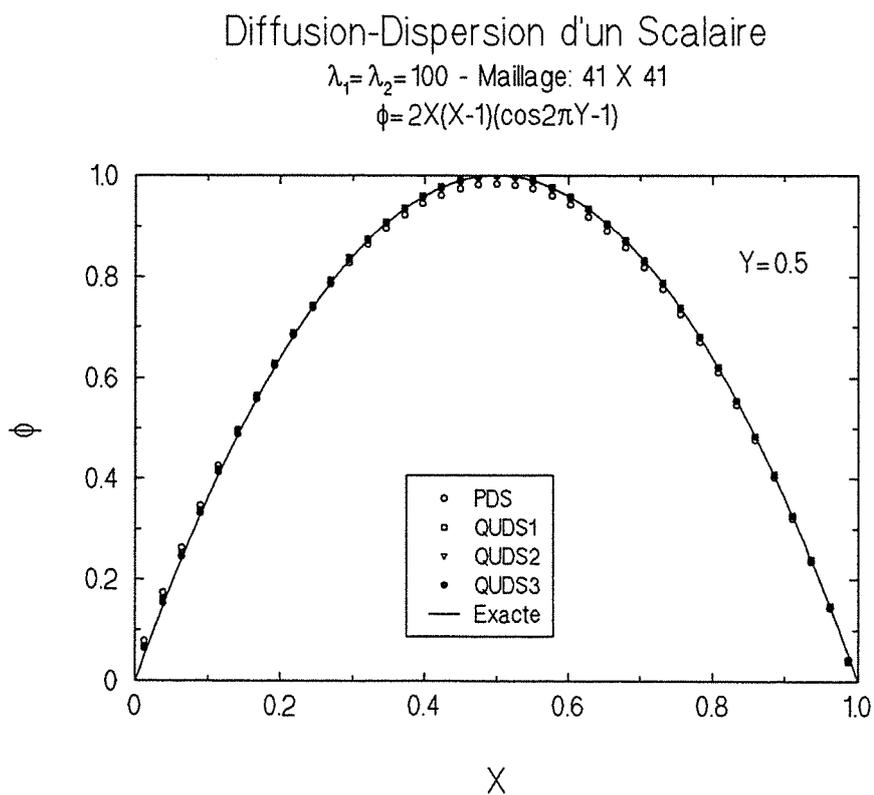


Figure 6.6 - Diffusion-dispersion d'un scalaire - Y = 0,5

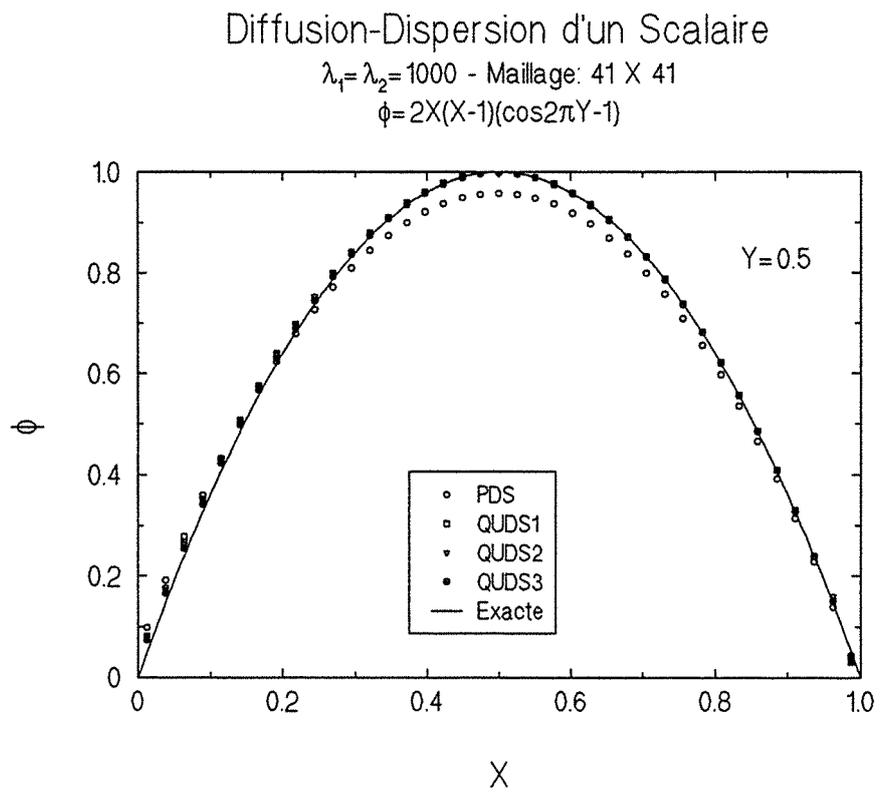


Figure 6.7 - Diffusion-dispersion d'un scalaire - Y = 0,5

vérifient plus, avec la même exactitude, la solution théorique. On sait, d'après les paragraphes 3.3.5 et 3.3.6.2, que ceci est dû surtout à la dispersion et à la diffusion numériques. Ces effets sont beaucoup plus accentués lorsqu'il s'agit des résultats obtenus avec le code **PDS**. L'explication tient à ce que les schémas d'un tel code, introduisent un coefficient de diffusion numérique.

Pour des nombres de Reynolds (ou de Péclet) pas trop élevés (λ_1 et λ_2 peuvent être interprétés comme des nombres de Reynolds ou de Péclet), les codes **PDS** et **QUDS** donnent sensiblement le même résultat. Pour des valeurs plus élevées, il sera nécessaire d'utiliser le code **QUDS**.

6.3.2-DIFFUSION-DISPERSION ENTRE DEUX PLANS PARALLÈLES

Le deuxième cas où l'obtention d'une solution exacte du problème de diffusion-dispersion massique est possible, à partir de la théorie présentée au chapitre 2, est le cas de la diffusion-dispersion de Taylor pour l'écoulement établi entre deux plans parallèles (figure 6.8).

La fluctuation de vitesse \tilde{V} est donnée par la solution classique de l'écoulement établi entre deux plans parallèles:

$$\tilde{V} = 0 \quad (18)$$

$$\tilde{U} = \langle U \rangle^B \left[6 (Y - Y^2) - 1 \right] \quad (19)$$

De l'équation de fermeture (10), appliquée à l'écoulement établi entre deux plans parallèles, on peut arriver à la solution exacte du problème¹, à savoir:

$$F_x = Sc \langle U \rangle^B \left[Y^3 - \frac{1}{2} (Y^4 + Y^2) + \frac{1}{60} \right] \quad (20)$$

$$F_y = \frac{1}{2} - Y \quad (21)$$

¹Le développement détaillé se trouve dans l'annexe II

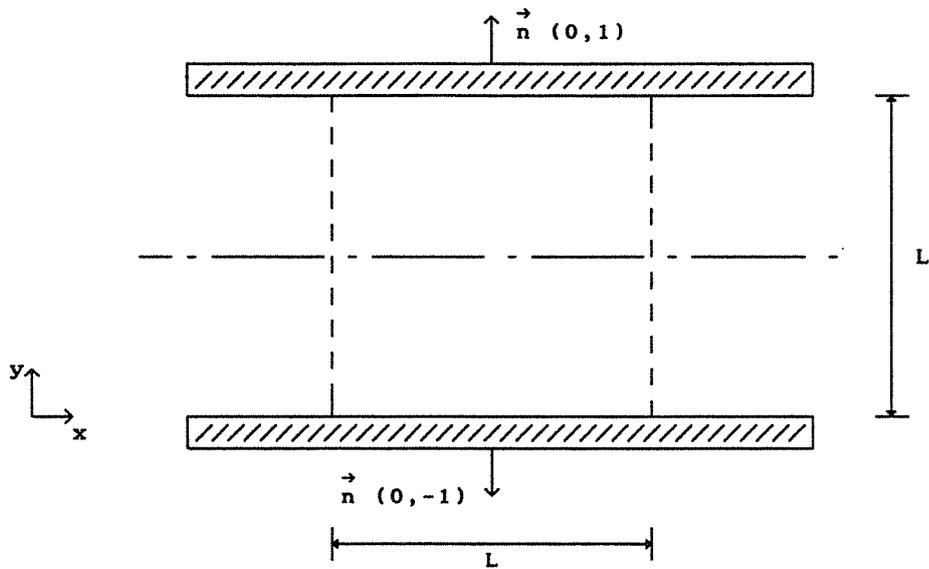


Figure 6.8 - Diffusion-dispersion entre deux plans parallèles

Les solutions F_x et F_y connues, on peut calculer les tenseurs tortuosité τ et hydrodynamique D , à l'aide des équations (7) et (8). Les composantes du tenseur hydrodynamique sont alors données par:

$$\frac{D_{xx}}{\mathcal{D}} = \frac{Pe^2}{210} \tag{22}$$

$$D_{yy} = 0 \tag{23}$$

$$D_{xy} = D_{yx} = 0 \tag{24}$$

où Pe , dans l'équation (22), est le nombre de Péclet $Pe = \langle u \rangle^B L / \mathcal{D}$.

Alors que les composantes du tenseur tortuosité sont données par:

$$\tau_{xx} = 0 \tag{25}$$

$$\tau_{yy} = -1 \tag{26}$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = 0 \tag{27}$$

Finalement, le tenseur effectif de dispersion D^* déterminé à partir de l'équation (7) s'écrit:

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}} = \left(1 + \frac{Pe^2}{210} \right) \quad (28)$$

$$D_{yy}^* = 0 \quad (29)$$

$$D_{xy}^* = D_{yx}^* = 0 \quad (30)$$

Les résultats numériques sont confrontés aux résultats théoriques dans les figures 6.9 à 6.13. On a considéré des écoulements pour des nombres de Reynolds allant de 1 jusqu'à 600. Dans tous les cas, le nombre de Schmidt vaut 1. On a utilisé un maillage de 20 X 41 volumes de contrôle et un critère de convergence $\mathcal{E}=1,0 \cdot 10^{-6}$.

Les solutions numériques pour la composante F_x du vecteur F , sont montrées sur les figures 6.9 et 6.10. Elles montrent, respectivement, les résultats obtenus avec le code PDS et QUDS2 ($\alpha=0,5$). En ce qui concerne le code QUDS, les mêmes résultats ont été obtenus pour les valeurs: $\alpha=0,375$ et $\alpha=0,75$. On remarque que les solutions numériques vérifient la solution théorique (18), à une constante près. Ceci est dû au fait que l'on n'impose pas que la moyenne intrinsèque soit nulle ($\langle F \rangle^B=0$), lors de la résolution de l'équation de fermeture (10). Mais cette constante n'interfère pas dans le calcul du tenseur effectif, comme on peut le vérifier à l'aide des équations (7) et (8) et comme l'attestent les résultats obtenus pour D_{xx}^*/\mathcal{D} , montrés sur la figure 6.11.

Finalement, les figures 6.12 et 6.13 montrent les résultats concernant la composante F_y . Les résultats numériques sont en très bon accord avec les résultats théoriques prévus par l'équation (19).

On rappelle, ici, que le champ de vitesses pour l'écoulement entre deux plans parallèles a été déterminé numériquement, plutôt que d'utiliser les solutions théoriques (18) et (19).

Solution de l'Équation de Fermeture - Composante F_x
 Code PDS - Maillage: 20 X 41
 Sc=1

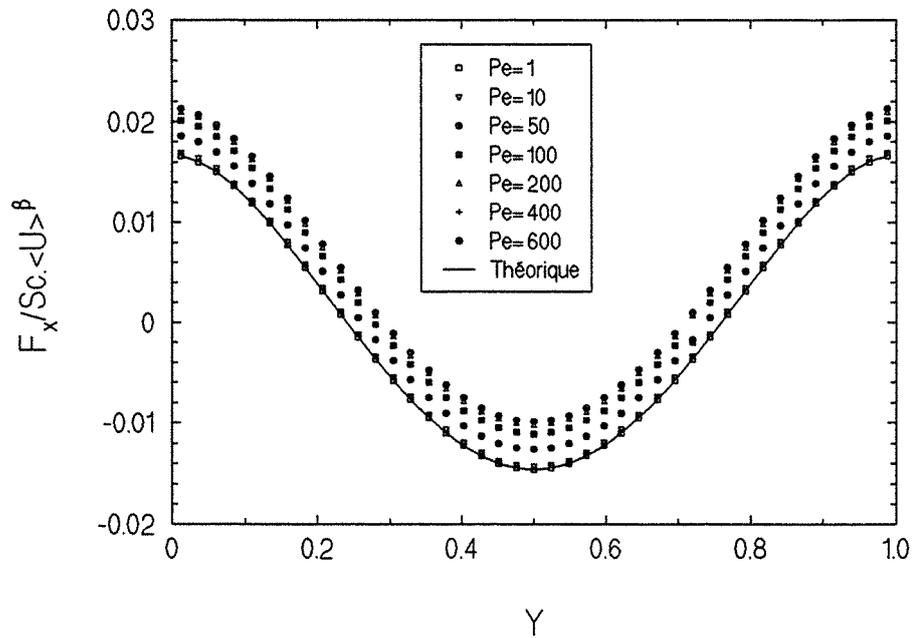


Figure 6.9 - Solution de l'équation de fermeture - F_x

Solution de l'Équation de Fermeture - Composante F_x
 Code QUDS2 - Maillage: 20 X 41
 Sc=1

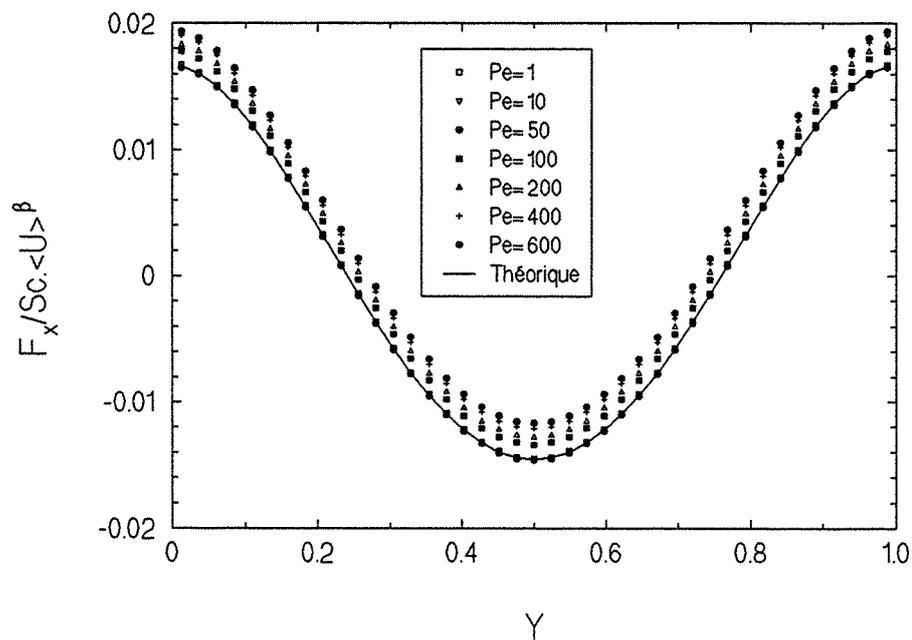


Figure 6.10 - Solution de l'équation de fermeture - F_x

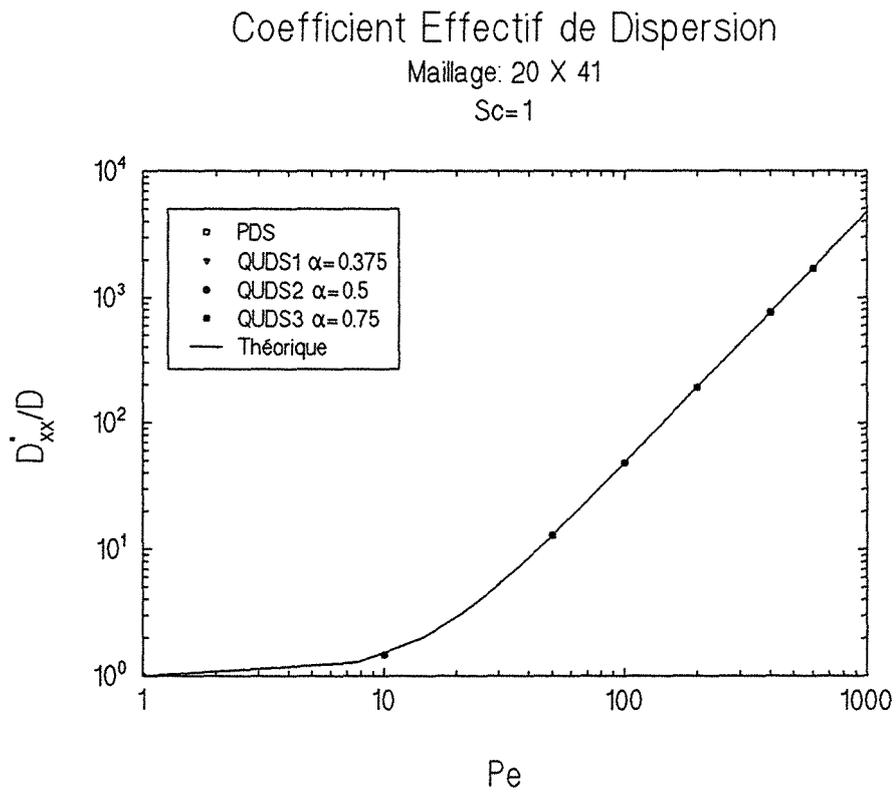


Figure 6.11 - Coefficient effectif de dispersion longitudinal

Solution de l'Équation de Fermeture - Composante F_y
 Code PDS - Maillage: 20 X 41
 $Sc=1$

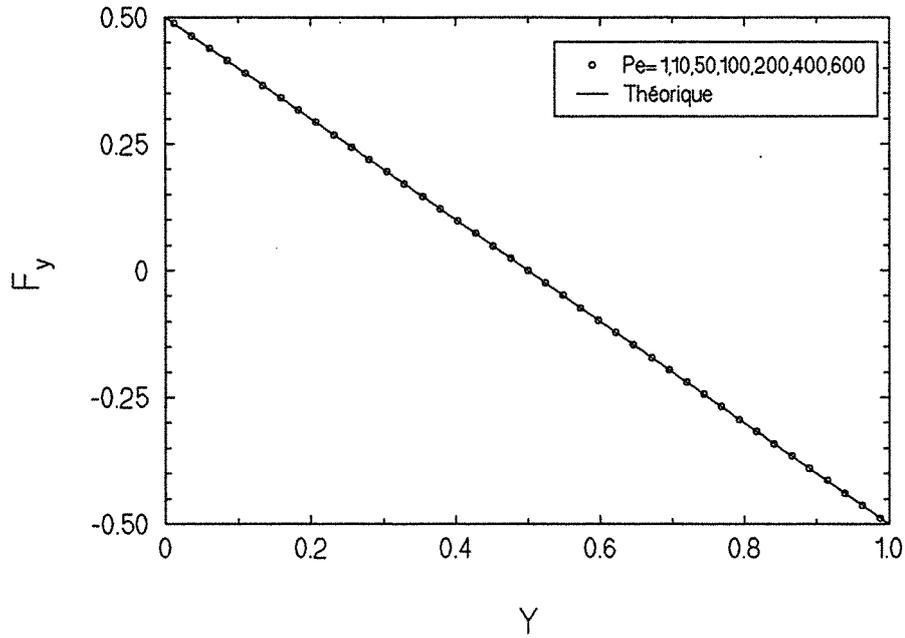


Figure 6.12 - Solution de l'équation de fermeture - F_y

Solution de l'Équation de Fermeture - Composante F_y
 Code QUDS2 - Maillage: 20 X 41
 $Sc=1$

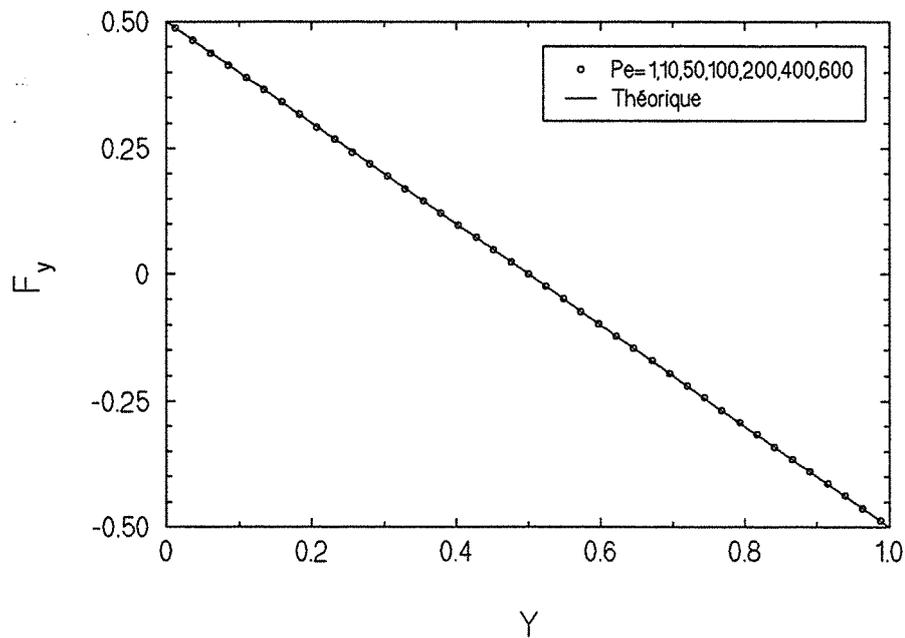


Figure 6.13 - Solution de l'équation de fermeture - F_y

6.4-GÉOMÉTRIE DE LA CELLULE UNITÉ

Les arrangements géométriques employés sont les mêmes que ceux déjà utilisés au chapitre 4. Il s'agit de l'arrangement de cylindres carrés disposés en ligne et en quinconce (figures 4.13 et 4.14). Trois porosités sont étudiées pour l'arrangement en ligne ($\varepsilon_B=0,36, 0,64$ et $0,84$) et deux ($\varepsilon_B=0,64$ et $0,85$) pour l'arrangement en quinconce. Le dernier arrangement ordonné est constitué de cylindres rectangulaires (hauteur égale à deux fois la largeur) disposés en chicane (figure 4.15). Deux porosités sont aussi considérées pour cette géométrie ($\varepsilon_B=0,36$ et $0,64$).

En ce qui concerne les arrangements géométriques désordonnés, les vingt cas montrés au chapitre 4 (figures 4.16 à 4.35) sont ici utilisés lors de la résolution du problème de fermeture afin de calculer le tenseur effectif de dispersion. Ces arrangements ont une porosité $\varepsilon_B \approx 0,7$.

Dans tous les cas considérés, ordonnés et désordonnés, les cellules unités sont carrées.

6.5-CALCUL DU TENSEUR EFFECTIF DE DISPERSION

Dans ce paragraphe on va présenter successivement les résultats pour les différentes géométries étudiées, en commençant par les arrangements ordonnés (en ligne, en quinconce et en chicane).

6.5.1-ARRANGEMENTS ORDONNÉS

Lors de la résolution du problème hydrodynamique et de fermeture en f pour les arrangements ordonnés, les maillages uniformes employés sont les suivants: 1) Arrangement en ligne: 70 X 70 V.C.; 2) Arrangement en quinconce: 80 X 80 V.C. et 3) Arrangement en chicane: 80 X 80 volumes de contrôle. Les maillages ont été choisis de façon à assurer une variation inférieure à 5% sur les coefficients effectifs de dispersion calculés, ceci par rapport aux valeurs obtenues avec un maillage plus fin. Le critère de convergence adopté, dans tous les cas, est $\varepsilon=1.0 \cdot 10^{-5}$ (paragraphe 3.5.4).

6.5.1.1-ARRANGEMENT EN LIGNE

La figure 6.14 représente le milieu poreux formé d'un arrangement en ligne de cylindres carrés où (OX,OY) désignent les axes de la cellule unité. Le vecteur vitesse moyenne de l'écoulement $\langle V \rangle$ fait un angle θ avec l'axe Ox du réseau ($\theta=(OX,\langle V \rangle)$). Les directions propres du tenseur de diffusion-dispersion sont Ox et Oy . La première direction propre (Ox) est, on le verra plus loin, celle qui coïncide avec la direction du vecteur vitesse moyenne $\langle V \rangle$ aux grands nombres de Péclet particulières Pe_p ($Pe_p = \langle u \rangle^B dp \varepsilon_B / \mathcal{D}(1-\varepsilon_B)$) et que l'on suit dans son déplacement. Cette première direction propre (Ox) fait un angle $\Delta\theta$ avec le vecteur vitesse moyenne $\langle V \rangle$ ($\Delta\theta=(Ox,\langle V \rangle)$).

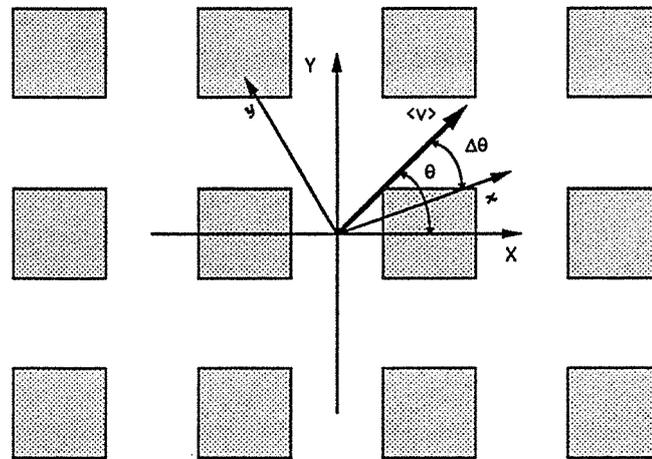


Figure 6.14 - Axes propres du tenseur effectif de dispersion

On commence par présenter les résultats des coefficients longitudinal et transversal, obtenus pour l'arrangement en ligne avec une porosité $\varepsilon_B = 0,36, 0,64$ et $0,84$. Trois nombres de Schmidt, à savoir $Sc=1, 100$ et 1000 , sont utilisés lors de la résolution du problème de fermeture en f. La variation du nombre de Péclet particulière ($Pe_p = Re Sc$) est obtenue en faisant varier le nombre de Reynolds particulière pour un nombre de Schmidt fixé.

Sur le tableau 6.1, sont montrées trois valeurs calculées du coefficient longitudinal, pour l'arrangement de cylindres carrés disposés en ligne avec une porosité égale à 0,36 et un nombre de Schmidt égal à 1000. Les résultats sont comparés à ceux de Eidsath et al [35], déterminés pour le même type d'arrangement, mais pour une porosité $\varepsilon_{\beta}=0,37$ (le nombre de Schmidt n'est pas fourni). La direction du vecteur vitesse moyenne de l'écoulement est parallèle à l'axe OX ($\theta=0^{\circ}$).

Pe_p	D_{xx}^*/\mathcal{D}	
	Eidsath et al	Ce Travail
6,4	3,5	3,7 †
318	$3,0 \cdot 10^3$	$4,5 \cdot 10^3$
636	$1,0 \cdot 10^4$	$1,4 \cdot 10^4$

† Obtenus par interpolation

Tableau 6.1 - Comparaison du coefficient longitudinal

On note qu'à part le résultat pour $Pe_p=6,4$, nos résultats diffèrent d'à peu près 50% environ. Vu que les méthodes numériques et le maillage ne sont pas les mêmes, et qu'on ne connaît pas le nombre de Schmidt utilisé, on estime que cette différence est raisonnable.

Les figures 6.15 à 6.20 contiennent les valeurs calculées des coefficients effectifs longitudinal et transversal en fonction du nombre de Péclet particulière, ceci pour deux valeurs de l'angle θ ($\theta=0^{\circ}$ et 45°), pour les deux porosités ($\varepsilon_{\beta}=0,36$ et $0,64^2$) et pour un nombre de Schmidt égal à 1000. Ces deux valeurs de l'angle θ sont les seules pour lesquelles les directions propres du tenseur de dispersion sont connues a priori et coïncident avec la direction du vecteur vitesse moyenne de l'écoulement et avec la direction perpendiculaire. Les courbes pour les autres valeurs de l'angle θ , qui possèdent d'ailleurs un comportement différent, seront

² Les résultats pour $\varepsilon_{\beta}=0,84$ sont présentés au paragraphe 6.6.1.1 qui traite de la comparaison de nos résultats numériques avec la théorie approchée développée par Koch et Brady [64].

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

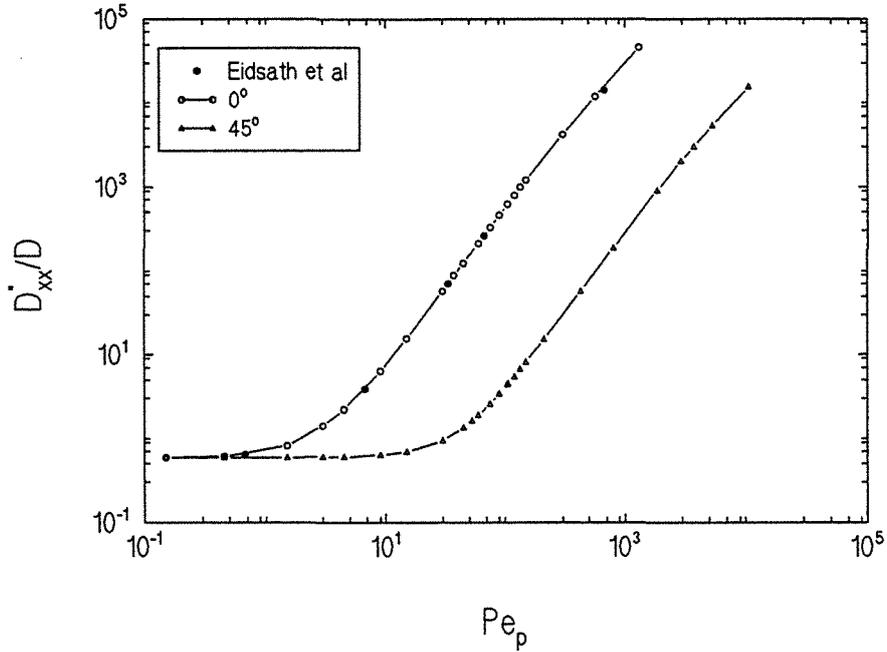


Figure 6.15 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

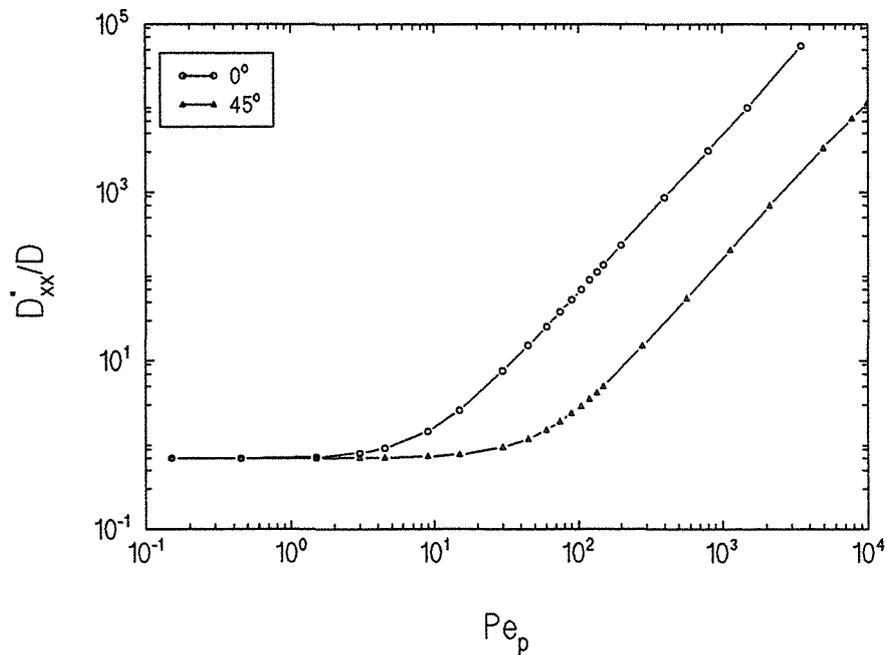


Figure 6.16 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,64$

présentées au paragraphe 6.5.1.1.1.

Dans le cas où $\theta=0^\circ$ et 45° , on retrouve les résultats déjà connus de la littérature [Eidsath et al, 1983; Edwards et al, 1991; Kaviany, 1992; Adler, 1992], pour les arrangements ordonnés. Koch et Brady [64] à l'aide d'une théorie approchée ont démontré que pour l'écoulement d'un fluide en régime de Stokes au travers d'un milieu périodique présentant des symétries spatiales "par translation", la dispersion est similaire à celle de Taylor-Aris pour un tube capillaire, c'est-à-dire que le coefficient de dispersion devrait être proportionnel au carré du nombre de Péclet.

Cependant nos résultats, comme ceux d'autres avant nous [35, 37, 101], ne présentent pas exactement cette variation quadratique. Si l'on représente les résultats du coefficient longitudinal (figures 6.15 et 6.16) pour les grands valeurs du nombre de Péclet, sous la forme

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}} = A Pe_p^m \quad (31)$$

une interpolation du type des moindres-carrés fournit, dans la partie linéaire du diagramme log-log, les valeurs de m . Le tableau 6.2 montre les valeurs de m calculées pour l'arrangement en ligne. On remarque que pour les deux valeurs de l'angle θ ($\theta=0^\circ$ et 45°), on trouve à peu près la même pente pour chaque porosité considérée séparément.

ϵ_B	θ	m
		$Sc=1000$
0,36	0°	1,88
	45°	1,86
0,64	0°	1,89
	45°	1,87
0,84	0°	1,99
	45°	1,87

Tableau 6.2 - Dépendance en Pe_p - D_{xx}^*/\mathcal{D}

Les coefficients m ne sont pas très éloignés de la valeur 2, mais suffisamment pour mettre en défaut la théorie.

De même sur la figure 6.15, on observe que les derniers points aux grands valeurs de Pe_p dévient quelque peu du comportement linéaire. Ces points étant calculés aux limites de la stabilité du code numérique, on ne peut pas assurer avec certitude s'il s'agit d'un comportement physique ou d'un problème numérique.

En ce qui concerne le coefficient transversal, figures 6.17 et 6.18, celui-ci présente un comportement particulier différent de celui du coefficient longitudinal. Lorsque l'écoulement est parallèle à l'axe OX ($\theta=0^\circ$), le coefficient varie à peine pour $\varepsilon_B=0,36$ et d'une façon négligeable pour $\varepsilon_B=0,64$ pour des Pe_p très élevés. Par contre à 45° , il connaît des variations appréciables surtout pour une porosité de 0,36. Les courbes pour les deux porosités ont la même allure et laissent entrevoir l'existence de deux zones de croissance. Une première comprise entre $\sim 1 < Pe_p < \sim 40$ et une deuxième, $Pe_p > \sim 40$, qui est caractérisée par une croissance plus lente. Pour des $Pe_p > 10^4$, on ne peut que s'interroger s'il y a une troisième zone de croissance ou si la courbe tend vers une valeur asymptotique.

Ces résultats peuvent être compris en regardant le type des écoulements rencontrés (figures 4.36-43). Dans la direction du vecteur vitesse moyenne, l'écoulement présente des lignes de courant sensiblement parallèles et est qualitativement équivalent à l'écoulement entre deux plans parallèles. C'est bien le cas lorsque l'écoulement principal est parallèle à l'axe OX ($\theta=0^\circ$). Pour une valeur de θ égale à 45° , l'écoulement peut être pensé comme étant similaire à celui confiné entre deux plans parallèles autour d'un cylindre carré tourné de 45° . Dans ces deux cas, l'écoulement se fait essentiellement le long de l'un des axes de symétrie et présente du fait de la symétrie spatiale une vitesse moyenne nulle dans la direction transversale. On ne doit donc pas être étonné de trouver que le coefficient longitudinal évolue approximativement comme Pe_p^2 .

Dans la direction transversale, la vitesse du fluide est toujours très faible, la diffusion moléculaire étant le seul mode de transport actif si cette vitesse est nulle. La différence entre les cas $\theta=0^\circ$ et 45° est alors

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\epsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

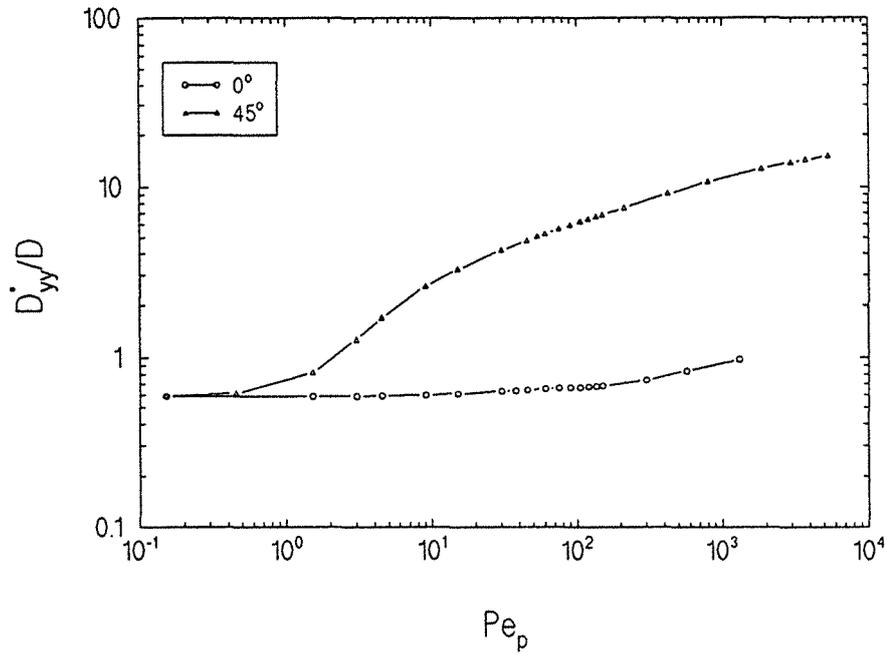


Figure 6.17- Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - $\epsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

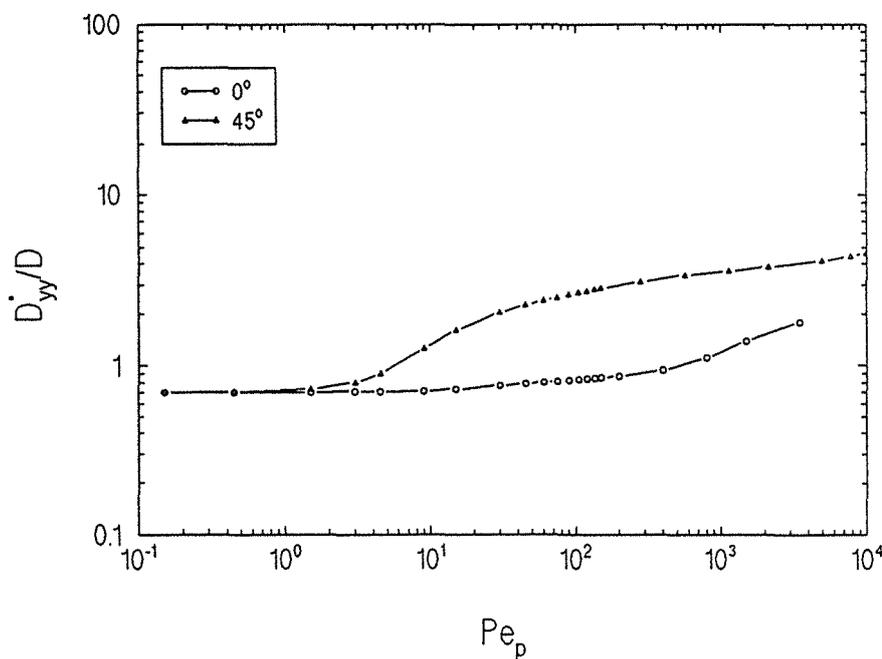


Figure 6.18- Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - $\epsilon_B = 0,64$

facile à comprendre: le premier cas ($\theta=0^\circ$) présente entre les particules solides des zones de faible recirculation où la contribution hydrodynamique à la dispersion est très faible et la dispersion est gouvernée par le processus lent de la diffusion moléculaire. Cependant, l'écoulement à 45° mène à un déplacement latéral du fluide beaucoup plus important, ce qui explique la variation plus significative du coefficient transversal.

6.5.1.1.1-INFLUENCE DE LA DIRECTION DE L'ÉCOULEMENT PRINCIPAL

On commente ensuite les résultats obtenus pour les valeurs de $\theta=5,625^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$ et $33,75^\circ$ pour un nombre de Schmidt égal à 1000 avec des porosités $\varepsilon_B=0,36$ et $\varepsilon_B=0,64$.

Maintenant, les directions propres du tenseur de diffusion-dispersion ne sont pas connues a priori. Les figures 6.19 et 6.20 donnent l'évolution de l'angle $\Delta\theta$ entre la première direction propre et le vecteur vitesse moyenne en fonction du nombre de Péclet particulaire. Cette première direction propre est choisie comme celle coïncidant avec la direction du vecteur vitesse moyenne aux grandes valeurs de Pe_p que l'on suit dans son déplacement en partant des valeurs les plus élevées de Pe_p . Dans ce cas, on est sûr ne pas se tromper, puisque pour des Pe_p très élevés les deux coefficients possèdent un rapport très grand entre eux.

On remarque que pour ce type d'arrangement on a un écart $\Delta\theta$ qui vaut à peu près le double de l'angle θ pour $0 < Pe_p < \sim 100$ environ. Ensuite, cette valeur diminue rapidement, d'autant plus vite que l'angle θ est grand pour atteindre une valeur proche de zéro dès que $Pe_p > 10^3$.

Sur les figures 6.19 et 6.20, les courbes pour $\theta=45^\circ$ ont une allure particulière. En fait, dans ce cas du fait des symétries du système, on passe en faisant varier le nombre de Péclet particulaire par un état isotrope pour lequel on pourrait interchanger les directions propres (pour $\varepsilon_B=0,36$, $Pe_{iso}=131$; pour $\varepsilon_B=0,64$, $Pe_{iso}=97$; pour $\varepsilon_B=0,84$, $Pe_{iso}=85$). La courbe sur les figures aurait alors l'allure d'une marche ($\Delta\theta=90^\circ$ pour $Pe_p < Pe_{iso}$ et $\Delta\theta=0^\circ$ pour $Pe_p > Pe_{iso}$).

Les figures 6.21 et 6.22 représentent les coefficients longitudinaux pour les porosités $\varepsilon_B=0,64$ et $0,64$.

On observe clairement pour les deux porosités, le changement de comportement par rapport au cas où $\theta=0^\circ$ ou 45° , les résultats étant

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: En Ligne - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.36$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X70

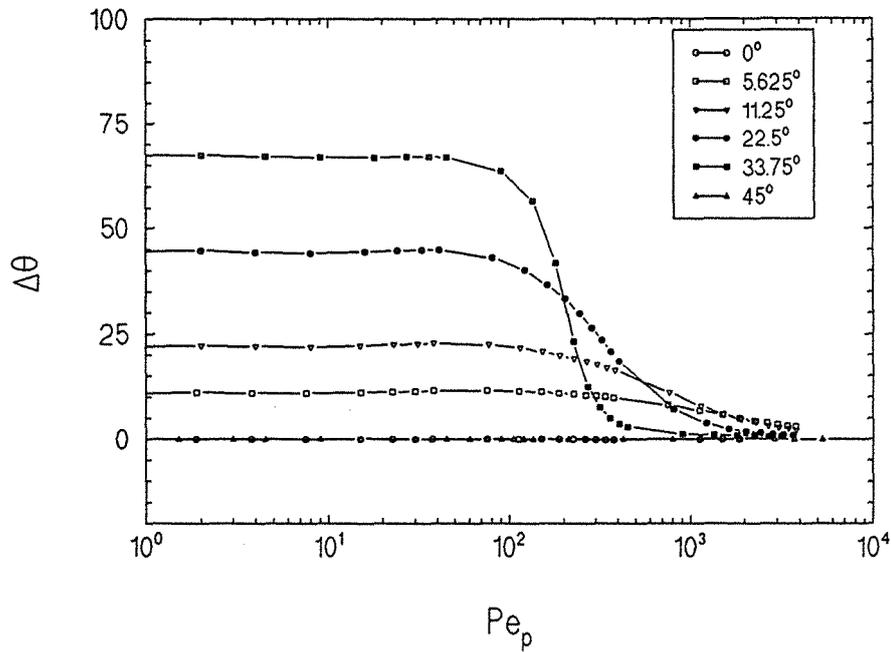


Figure 6.19 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - $\epsilon_B=0,36$

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: En Ligne - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X70

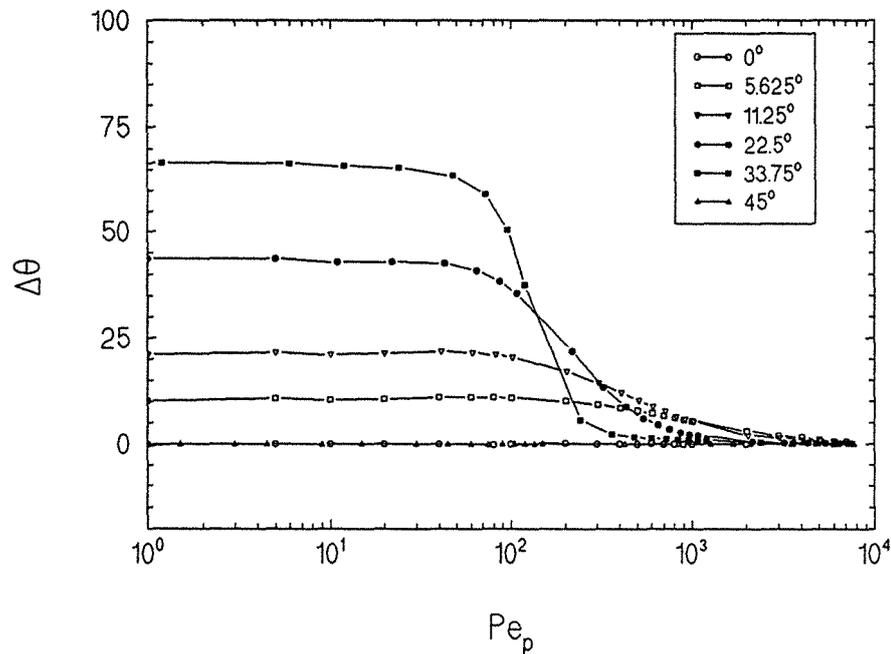


Figure 6.20 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - $\epsilon_B=0,64$

fortement influencés par la direction du vecteur vitesse moyenne. En outre, on vérifie l'existence de deux zones de transition. Dans la première zone, $\sim 10 < Pe_p < \sim 200$, les courbes suivent au début la courbe correspondant à $\theta=0^\circ$ et vont dévier de cette dernière avec une pente plus faible. Cette transition a lieu pour des Pe_p de plus en plus petits à mesure qu'on augmente la valeur de l'angle θ . Dans la deuxième zone, $200 < Pe_p < 1000$, les courbes s'infléchissent; cette zone correspond à la rotation des directions propres constatées sur les figures 6.19 et 20. Pour des $Pe_p > 1000$, on a à nouveau un changement et les courbes semblent toutes avoir une même valeur de la pente de l'ordre de $m \approx 1,2$ ou $1,3$. Les valeurs du coefficient longitudinal diminuent au fur et à mesure qu'on augmente la valeur de l'angle θ . Le tableau 6.3 montre les valeurs des pentes m (d'après l'équation 31) obtenues par interpolation pour les différents valeurs de θ ($\theta=5,625^\circ, 11,25^\circ, 22,5^\circ$ et $33,75^\circ$). Ces pentes sont déterminées pour des nombres de Péclet particuliers, Pe_p , supérieurs à 1000.

ϵ_B	θ	m
		Sc= 1 000
0,36	0°	1,88
	5,625°	1,00
	11,25°	1,25
	22,5°	1,28
	33,75°	1,22
	45°	1,86
0,64	0°	1,89
	5,625°	1,23
	11,25°	1,31
	22,5°	1,13
	33,75°	1,38
	45°	1,87
0,84	0°	1,99
	5,625°	1,14
	11,25°	1,28
	22,5°	1,08
	33,75°	1,40
	45°	1,87

Tableau 6.3 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^* / \mathcal{D}$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

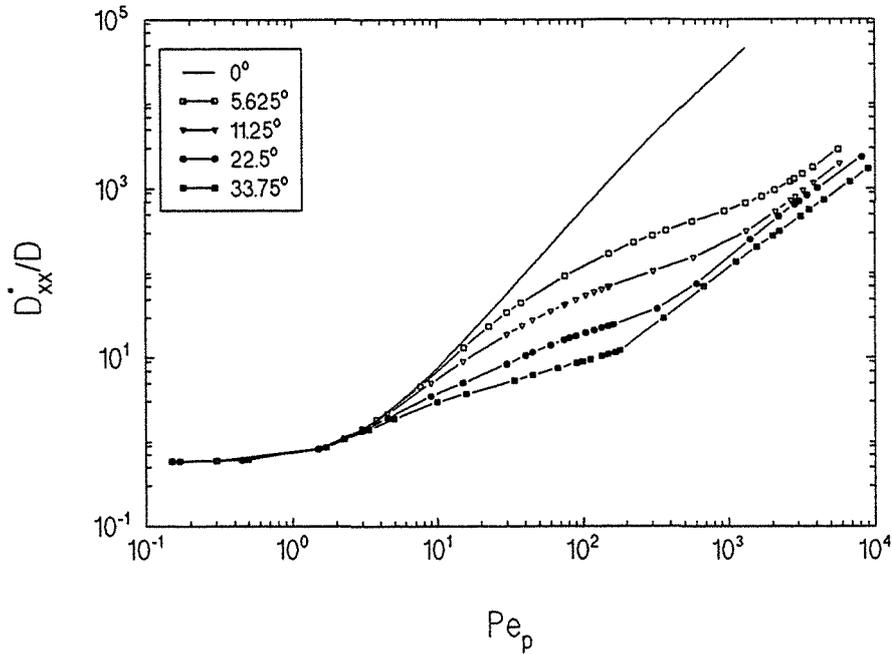


Figure 6.21 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/\mathcal{D} - \epsilon_{\beta} = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

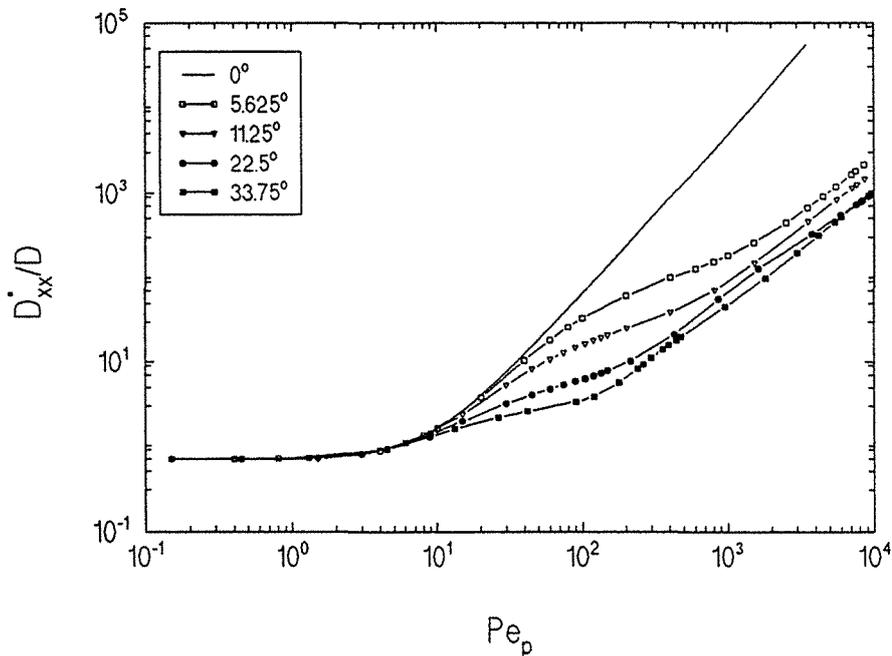


Figure 6.22 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/\mathcal{D} - \epsilon_{\beta} = 0,64$

On remarque que le comportement singulier des valeurs $\theta=0^\circ$ et 45° pour lequel m est légèrement inférieur à 2; des essais au voisinage de $\theta=45^\circ$ ont montré que si le cas $\theta=44^\circ$ était proche de 45° , le cas de l'angle $\theta=40^\circ$ en était éloigné. Pour les autres valeurs de θ , la valeur moyenne de la pente est très nettement différente et vaut $m \approx 1,2$.

En ce qui concerne les coefficients transversaux, les résultats sont montrés sur les figures 6.23 et 6.24 pour un nombre de Schmidt égal à 1000. De même que pour le cas du coefficient longitudinal, les coefficients longitudinaux présentent aussi une zone de transition qui s'étale approximativement pour $\sim 10 < Pe_p < \sim 1000$. Contrairement au cas du coefficient longitudinal, comme on devait s'y attendre, la valeur du coefficient transversal augmente au fur et à mesure qu'on augmente la valeur de l'angle θ et donc le transport convectif latéral. On note l'existence d'un palier, pour des Péclet particulières compris entre 10^3 et 10^4 . On ne saurait dire si par la suite, les coefficients atteignent des valeurs limites ou s'il agit d'une nouvelle zone de transition.

6.5.1.1.2-INFLUENCE DU NOMBRE DE REYNOLDS

Finalement, afin de montrer l'influence du nombre de Reynolds particulière Re_p sur le calcul du tenseur effectif de dispersion, on a refait l'ensemble des calculs avec un nombre de Schmidt égal à 1 et 100. Seul le cas d'une porosité égale à 0,64 a été envisagé.

Le tableau 6.4 donne la valeur des pentes m calculées pour $\theta=0^\circ$ et 45° dans le cas $Sc=100$.

ϵ_B	θ	m
		Sc=100
0,64	0°	1,88
	45°	1,98

Tableau 6.4 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/\mathcal{D}$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon= 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

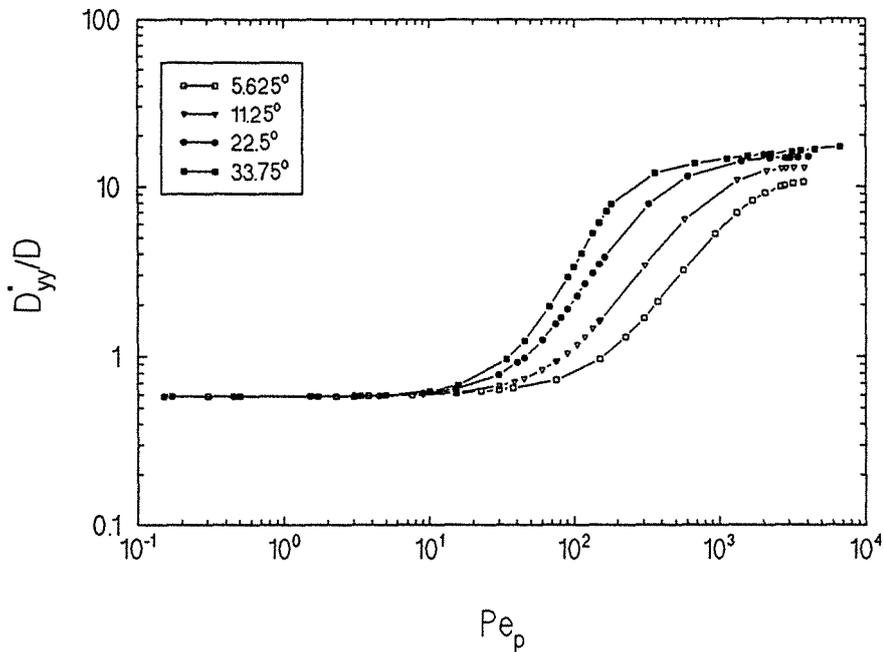


Figure 6.23 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon= 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

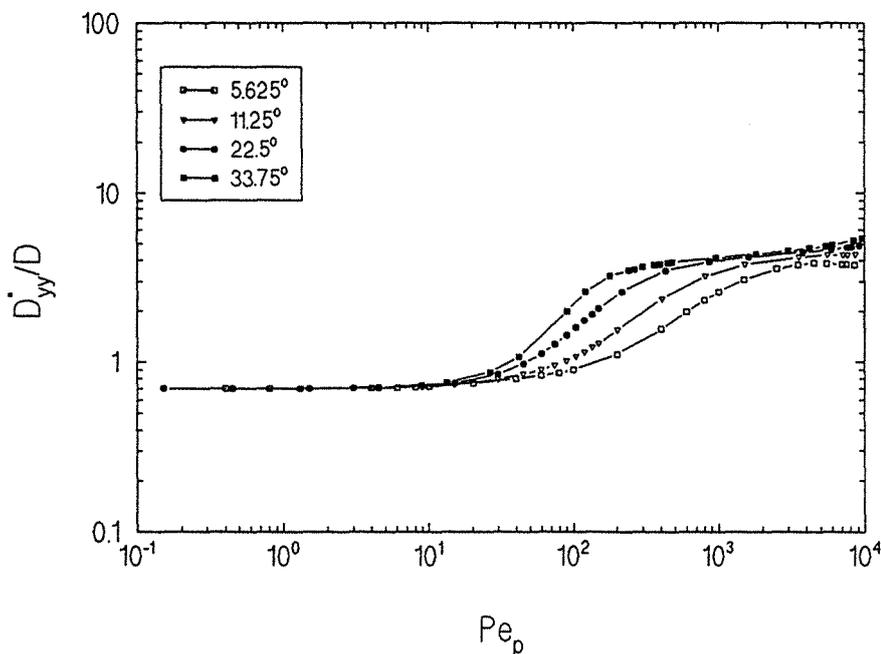


Figure 6.24 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,64$

La figure 6.25 montre les résultats pour le coefficient longitudinal déterminés pour $Sc=1$ et pour différentes valeurs de l'angle θ . La limite supérieure du nombre de Péclet Pe_p (~ 200) est une conséquence de l'obtention d'un l'écoulement laminaire en régime permanent (§ 4.2). De même sur la figure 6.26 sont montrés les résultats obtenus pour $Sc=100$.

La comparaison de l'ensemble des résultats montre que l'hydrodynamique et donc le nombre de Reynolds particulière Re_p explique bien les variations constatées. Pour $Re_p < \sim 20$ les courbes en fonction du nombre de Péclet particulière sont parfaitement superposables. Le passage dans le régime laminaire inertiel pour $Re_p > \sim 20$ se traduit en général par une augmentation du coefficient de dispersion, ce qui est cohérent avec l'image physique que l'on peut avoir d'un tel écoulement. L'apparition d'un noyau inertiel et la formation de couches limites allant en s'amincissant tendent à augmenter l'hétérogénéité des vitesses du fluide.

Pe_p	Re_p	$D_{xx}^* / \mathcal{D}^\dagger$					
		0°	$5,625^\circ$	$11,25^\circ$	$22,5^\circ$	$33,75^\circ$	45°
10	0,01	1,62	1,63	1,59	1,47	1,36	0,74
	0,1	1,67	1,71	1,67	1,47	1,36	0,74
	10,0	1,66	1,63	1,59	1,47	1,33	0,74
40	0,04	12,3	10,4	7,30	3,88	2,58	1,12
	0,4	12,5	10,4	7,10	3,81	2,58	1,12
	40,0	13,4	11,2	7,68	3,98	2,54	1,26
100	0,1	63,6	33,1	16,1	6,23	3,57	2,72
	1,0	64,9	33,3	16	6,33	3,55	2,73
	100	77,6	39,3	20,9	9,97	6,14	5,48
1.000	1,0	4266	184	92,7	67,6	47,5	165
	10,0	4705	188	92,6	69,8	48,5	165
	-	-	-	-	-	-	-
4.000	4,0	-	782	530	352	294	2230
	40,0	-	1360	866	497	367	2660
	-	-	-	-	-	-	-

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.5 - Influence du nombre de Reynolds - D_{xx}^* / \mathcal{D}

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc=1 - $\epsilon=0.64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

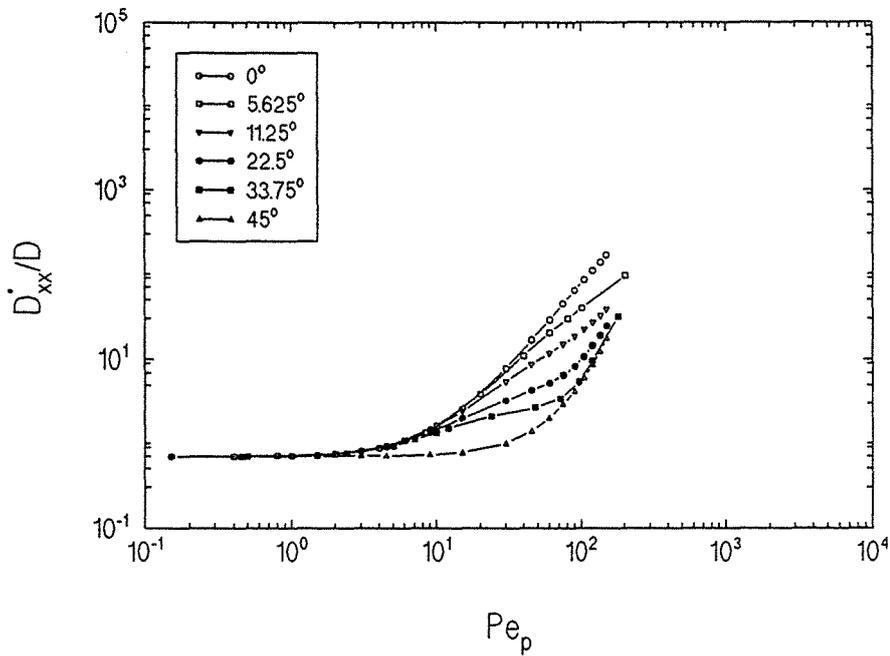


Figure 6.25 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=1

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 100 - $\epsilon= 0.64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

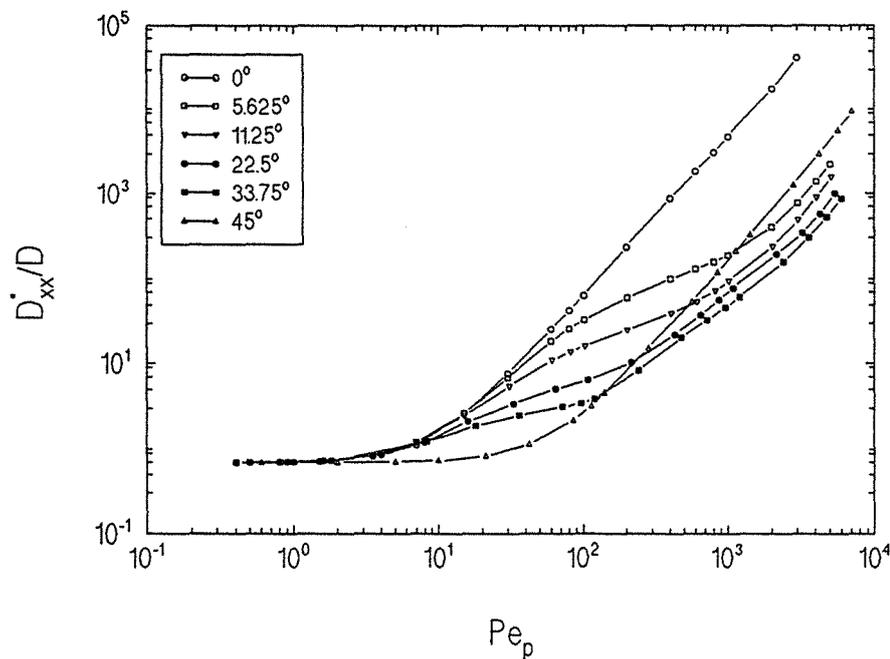


Figure 6.26 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=100

À titre de comparaison, vu la difficulté de pouvoir les estimer sur les figures, on montre sur le tableau 6.5 les valeurs du coefficient longitudinal calculées pour cinq valeurs du nombre de Péclet particulaire ($Pe_p = 10, 40, 100, 1000$ et 4000).

D'après les résultats montrés sur le tableau 6.5 on peut conclure que le nombre de Reynolds particulaire a une très forte influence sur le calcul du coefficient longitudinal.

On constate que tous les résultats sont à peu près égaux pour un nombre de Péclet Pe_p égal à 40. Pour un nombre de Péclet particulaire de 100, on vérifie que les résultats obtenus avec $Sc=1$ diffèrent de façon significative de deux autres cas ($Sc=100$ et 1000) pour toutes les valeurs de l'angle θ . Les résultats calculés avec $Sc=100$ et 1000 , sont pratiquement identiques pour un nombre de Péclet particulaire égal à 1000. Par contre, pour $Pe_p=4000$, la valeur du coefficient effectif longitudinal est fortement influencée par l'hydrodynamique. Dans le cas d'un angle $\theta=5,625^\circ$, la différence entre les deux résultats, $Re_p=4$ et 40 , atteint 74% environ.

De même que pour le cas du coefficient transversal, le tableau 6.6 montre les différentes valeurs du coefficient transversal obtenues pour les trois nombres de Schmidt étudiés.

L'influence du nombre de Reynolds Re_p , sur le calcul du coefficient transversal, paraît être moins significative. Les figures 6.27 et 6.28 montrent respectivement les résultats obtenus pour des nombres de Schmidt égaux à 1 et 100. On retrouve les tendances déjà dégagées dans le cas $Sc=1000$ (figure 6.24). En plus, les derniers points des courbes $\theta=33,75^\circ$ et 45° nous laissent croire à l'existence d'une nouvelle zone de croissance.

Comme précédemment, les résultats issus du calcul avec les trois nombres de Schmidt, sont équivalents tant que $Re_p < \sim 20$. Pour un nombre de Péclet particulaire égal à 100, une différence maximale d'à peu près 59% est constatée pour le cas du l'angle $\theta=22,5^\circ$, quand le Reynolds particulaire Re_p varie de 1 à 100 alors que les résultats pour $Re_p=1$ et 10 sont quasi identiques. Cependant on ne retrouve plus de grandes différences, comme c'était le cas pour le coefficient longitudinal, entre les valeurs correspondant à des nombres de Reynolds particulières égaux à 4 et 40 pour $Pe_p=4000$. La plus grande différence ($\theta=33,75^\circ$) est de l'ordre de

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc=1 - $\epsilon=0.64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

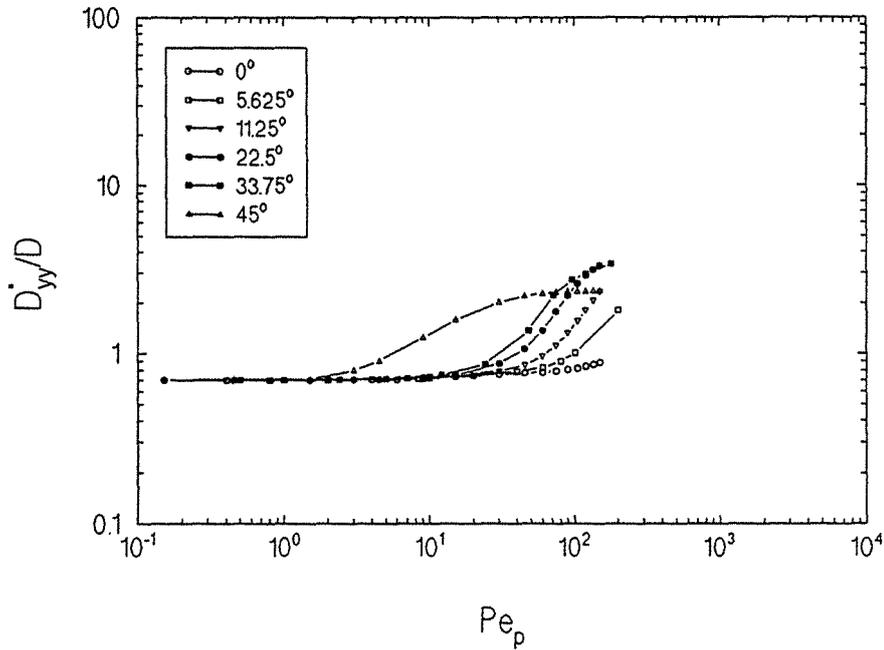


Figure 6.27 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=1

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 100 - $\epsilon= 0.64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

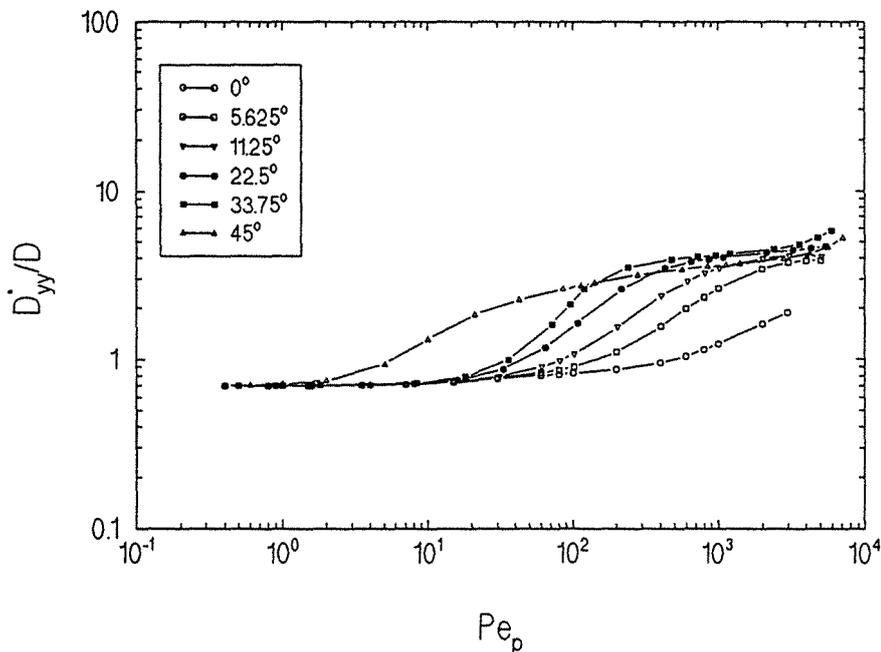


Figure 6.28 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=100

7% environ.

Pe _p	Re _p	D _{yy} [*] /D [†]					
		0°	5,625°	11,25°	22,5°	33,75°	45°
10	0,01	0,72	0,72	0,72	0,73	0,737	1,32
	0,1	0,72	0,72	0,72	0,73	0,743	1,32
	10,0	0,72	0,72	0,72	0,73	0,735	1,32
40	0,04	0,79	0,80	0,83	0,94	1,05	2,22
	0,4	0,79	0,80	0,84	0,95	1,07	2,22
	40,0	0,77	0,78	0,84	1,01	1,22	2,14
100	0,1	0,83	0,90	1,07	1,55	2,19	2,67
	1,0	0,83	0,90	1,07	1,56	2,21	2,67
	100	0,82	1,01	1,49	2,47	2,77	2,32
1.000	1,0	1,21	2,60	3,42	3,99	4,15	3,61
	10,0	1,20	2,62	3,47	4,01	4,18	3,61
	-	-	-	-	-	-	-
4.000	4,0	-	3,83	4,21	4,49	4,64	4,08
	40,0	-	3,88	4,15	4,54	4,96	4,20
	-	-	-	-	-	-	-

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.6 - Influence du nombre de Reynolds - D_{yy}^{*}/D

6.5.1.2-ARRANGEMENT EN QUINCONCE

On passe maintenant à l'ensemble des résultats obtenus pour l'arrangement en quinconce avec $\epsilon_B = 0,64^3$ et pour un nombre de Schmidt égal à 1000.

Tout d'abord, comme dans le cas de l'arrangement en ligne, on traite les cas $\theta = 0^\circ$ et 45° . Les résultats pour le coefficient effectif longitudinal peuvent être vus sur la figure 6.29 et les résultats pour le coefficient effectif transversal sur la figure 6.30.

³ Les résultats pour $\epsilon_B = 0,85$ sont présentés au paragraphe 6.6.1.1

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

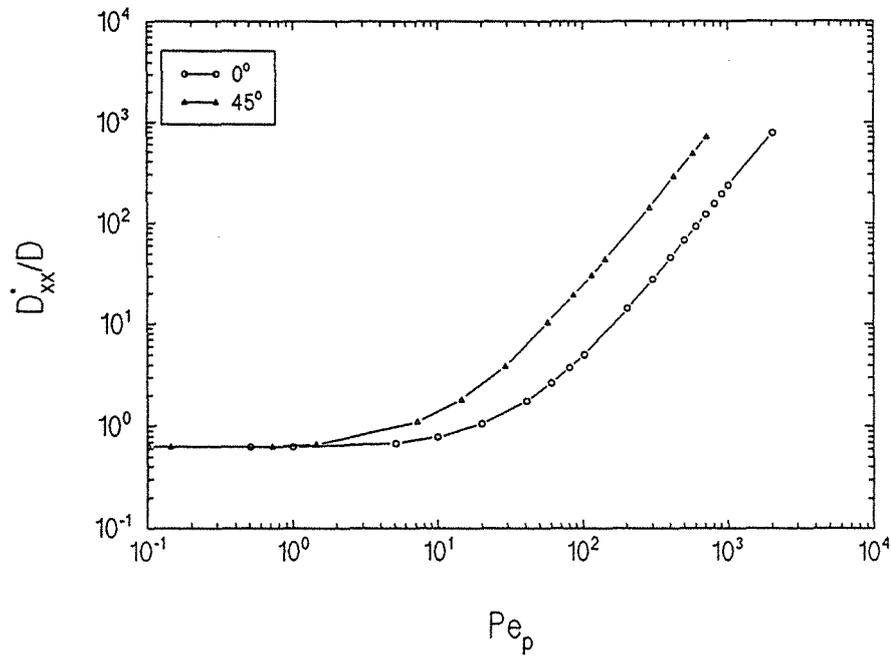


Figure 6.29 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,64$

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

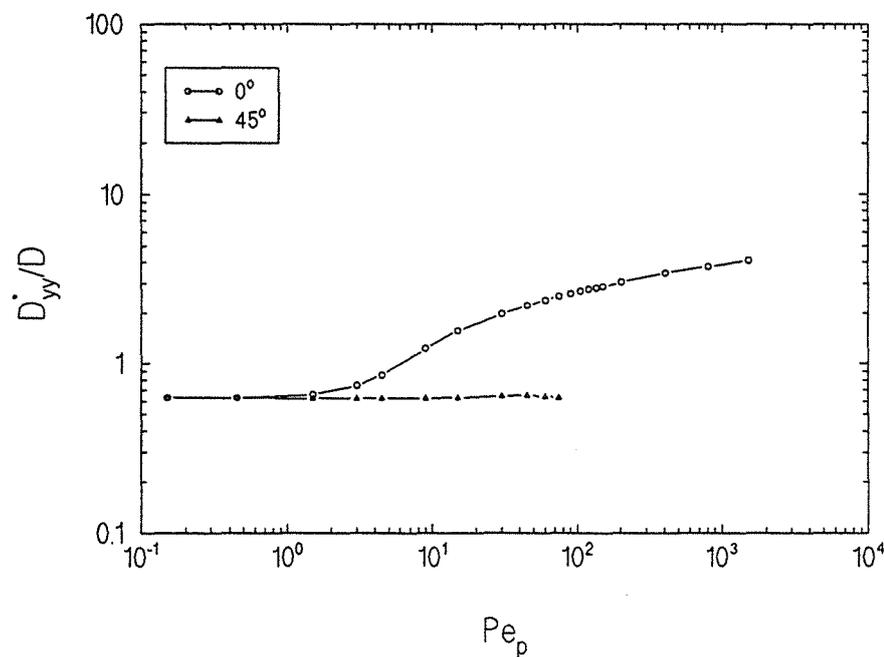


Figure 6.30 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,64$

On observe que les résultats pour $\theta=45^\circ$, fournissent des valeurs plus élevées du coefficient longitudinal que $\theta=0^\circ$. Les valeurs des pentes m (équation (31)) déterminées pour les deux courbes, sont données sur le tableau 6.7. Par rapport à l'arrangement en ligne, l'exposant m est plus nettement différent de 2.

ϵ_B	θ	m
		$Sc = 1\,000$
0,64	0°	1,75
	45°	1,71
0,85	0°	1,86
	45°	1,91

Tableau 6.7 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^* / D$

Les coefficients effectifs transversaux (figure 6.30) montrent contrairement au cas de l'arrangement en ligne, une variation appréciable pour l'angle $\theta=0^\circ$ et pratiquement aucun changement pour un angle $\theta=45^\circ$. Par ailleurs, la détermination du coefficient transversal pour $\theta=45^\circ$, pose de grands problèmes sur le plan numérique (voir paragraphe 6.7.2).

Une explication possible de ce type de comportement, peut être avancée si l'on considère la nature de l'écoulement (figures 4.46 et 4.49). Pour l'écoulement parallèle à l'axe OX, on voit que le fluide est obligé de contourner le cylindre qui se trouve au milieu de la cellule unité. On voit donc apparaître un écoulement latéral plus important que dans le cas de l'arrangement en ligne pour l'angle $\theta=0^\circ$. Par contre, pour l'angle $\theta=45^\circ$, l'écoulement se fait essentiellement dans la direction de l'un des axes propres et l'écoulement latéral est dû uniquement à l'existence de zones de recirculation (figure 4.49). Il ressemble alors qualitativement à celui de l'arrangement en ligne avec l'écoulement principal parallèle à l'axe OX ($\theta=0^\circ$).

6.5.1.2.1-INFLUENCE DE LA DIRECTION DE L'ÉCOULEMENT PRINCIPAL

Comme pour le cas de l'arrangement en ligne, la figure 6.31 montre la variation de $\Delta\theta$ en fonction du nombre de Péclet Pe_p , où $\Delta\theta$ ($\Delta\theta=(Ox, \langle V \rangle)$) est l'angle entre la première direction propre (Ox) et le vecteur vitesse moyenne. Pour des nombres de Péclet particuliers inférieurs à 100, on note que contrairement au cas de l'arrangement en ligne, les rotations se font dans le sens horaire à l'exception des angles $\theta=5,625^\circ$ et $11,25^\circ$, pour lesquels on a une rotation anti-horaire pour un nombre de Péclet supérieur respectivement à 60 et 90. Le comportement asymptotique est retrouvé pour des valeurs très élevées du nombre de Péclet. C'est-à-dire que $\Delta\theta$ tend vers zéro au fur et à mesure que le nombre de Péclet augmente, ceci pour toutes les valeurs de l'angle θ . En outre, on observe que pour $Pe_p < 10^2$, $\Delta\theta$ vaut approximativement $(2\theta-90^\circ)$. L'allure particulière de la courbe $\theta=0^\circ$ est la réplique du problème déjà constaté dans le cas de l'écoulement en ligne pour $\theta=45^\circ$ avec passage pour un nombre de Péclet Pe_{iso} par un état isotrope du système (pour $\varepsilon_B=0,64$, $Pe_{iso}=43$; pour $\varepsilon_B=0,85$, $Pe_{iso}=61$).

Contrairement aux résultats de l'arrangement en ligne, $\Delta\theta$ tend rapidement vers zéro pour les angles $\theta=5,625^\circ$ et $11,25^\circ$. C'est ce qui explique sans doute la moindre étendue de la zone de transition pour le coefficient longitudinal, pour ces deux valeurs de l'angle θ .

De même que pour le cas de l'arrangement en ligne, on peut distinguer aussi une zone de transition, quoique moins importante, pour les autres valeurs de l'angle θ ($\theta=5,625^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$ et $33,75^\circ$). Cette zone est située à peu près entre $\sim 10 < Pe_p < \sim 200$. Par rapport au cas de l'arrangement en ligne, on note que les variations du coefficient longitudinal (figure 6.32) sont moins sensibles à la direction de l'écoulement si l'on compare les courbes pour $\theta=5,625^\circ$ et $33,75^\circ$. Néanmoins, le comportement global pour $Pe_p > \sim 10^3$ est bien différent de celui d'un angle $\theta=0^\circ$ ou 45° , comme l'attestent les valeurs des pentes m calculées pour les différentes valeurs de l'angle θ (tableau 6.8).

Un comportement tout à fait différent de celui de l'arrangement en ligne est constaté pour le coefficient latéral (figure 6.33). Pour des nombres de Péclet particuliers Pe_p , compris entre 10 et 200 environ, il y a une zone de transition où les coefficients sont d'autant plus grands que les valeurs de θ sont petites.

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse
 Arrangement: En Quinconce - $Sc=1000$ - $\varepsilon=0.64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

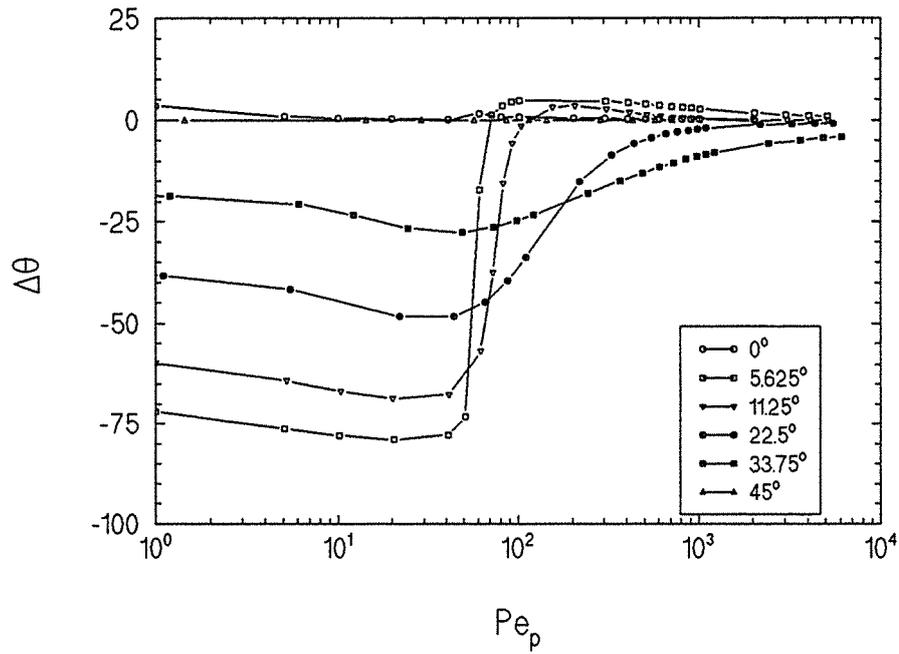


Figure 6.31 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - $\varepsilon_B=0,64$

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

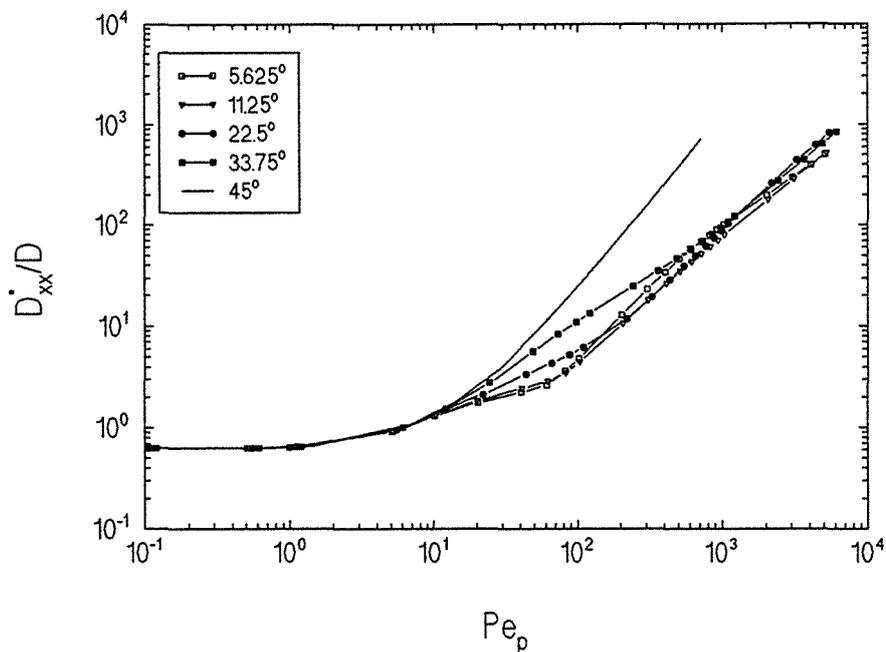


Figure 6.32 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,64$

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

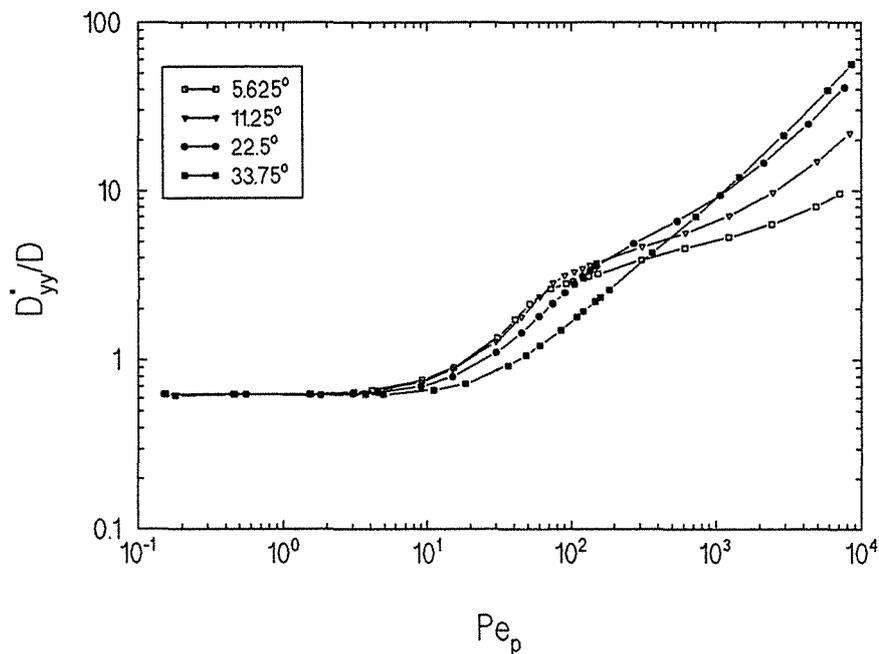


Figure 6.33 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,64$

ε_B	θ	m
		Sc= 1 000
0,64	0°	1,75
	5,625°	1,00
	11,25°	1,17
	22,5°	1,30
	33,75°	1,20
	45°	1,71
0,84	0°	1,86
	5,625°	1,08
	11,25°	1,36
	22,5°	1,15
	33,75°	1,26
	45°	1,91

Tableau 6.8 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$

Ensuite on a une deuxième zone, $\sim 200 < Pe_p < \sim 4000$, où l'on a une croissance plus lente, surtout pour les angles θ les plus petits. On ne retrouve plus, comme pour l'arrangement en ligne, le palier pour $Pe_p > 10^3$ et les coefficients continuent à croître. La courbe $\theta=33,75^\circ$ présente une allure singulière semblable à celle des courbes pour le coefficient longitudinal pour $\theta=0^\circ$ et 45° , mais avec un pente $m \approx 0,82$.

6.5.1.2.2-INFLUENCE DU NOMBRE DE REYNOLDS

Afin de pouvoir évaluer, comme au paragraphe 6.5.1.1.2, l'influence du nombre de Reynolds Re_p , les coefficients effectifs de dispersion sont obtenus pour trois valeurs du nombre de Schmidt (Sc=1, 100 et 1000).

On constate sur les figures 6.34 et 6.35 (coefficient effectif longitudinal) que de façon semblable à l'arrangement en ligne, les résultats sont fortement influencés par le nombre de Reynolds particulaire Re_p dès que celui-ci est supérieur à ~ 20 . Les courbes se redressent alors considérablement et les valeurs du coefficient effectif longitudinal, pour le même nombre de Péclet particulaire, sont alors plus élevées pour Sc=100 que pour Sc=1000.

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - Sc= 1 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

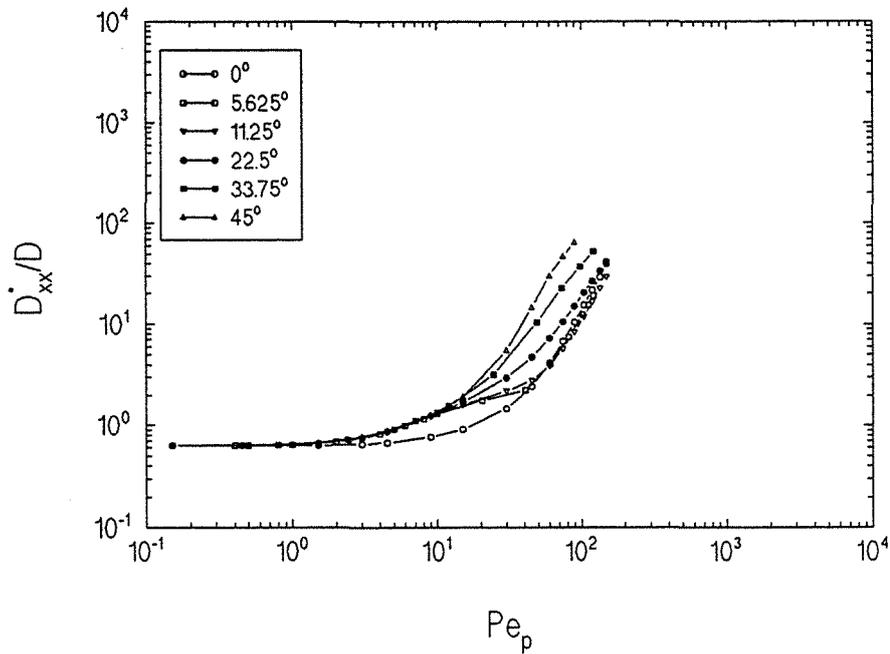


Figure 6.34 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=1

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - Sc= 100 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

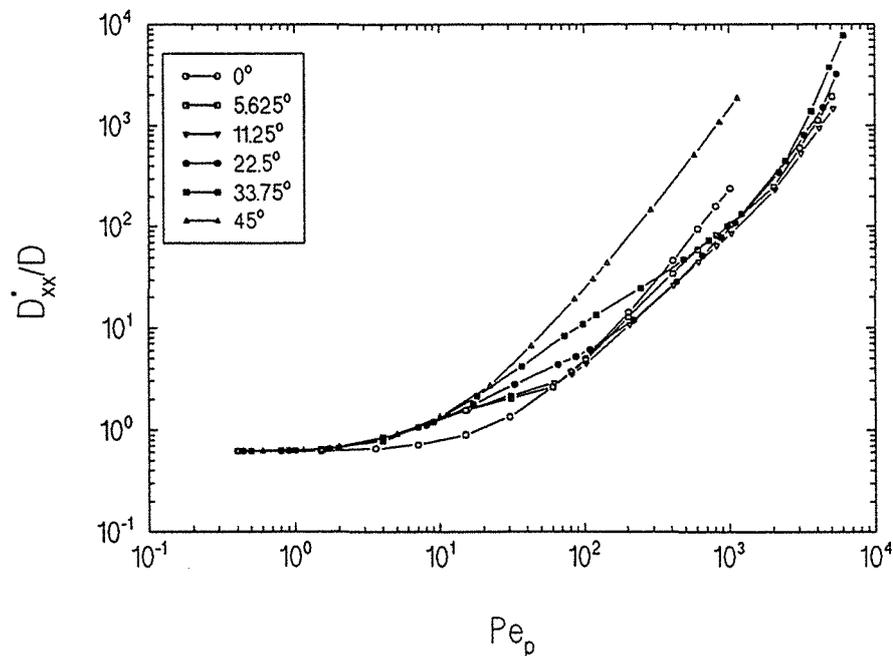


Figure 6.35 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=100

Les valeurs des pentes m sont aussi recalculées et fournies, pour un nombre de Schmidt égal à 100 et pour deux valeurs de l'angle θ ($\theta=0^\circ$ et 45°), dans le tableau 6.9.

ϵ_B	θ	m
		Sc=100
0,64	0°	1,76
	45°	1,77

Tableau 6.9 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/\mathcal{D}$

Les mêmes conclusions s'appliquent au cas du coefficient effectif transversal, montré sur les figures 6.36 et 6.37.

Pe_p	Re_p	$D_{xx}^*/\mathcal{D}^\dagger$					
		0°	5,625°	11,25°	22,5°	33,75°	45°
10	0,01	0,79	1,29	1,30	1,35	1,37	1,39
	0,1	0,81	1,30	1,30	1,30	1,33	1,37
	10,0	0,79	1,31	1,31	1,34	1,34	1,39
40	0,04	1,73	2,23	2,43	3,18	4,57	6,13
	0,4	1,78	2,25	2,43	3,16	4,55	6,17
	40,0	2,10	2,23	2,62	4,15	7,35	11,0
100	0,1	4,92	4,70	4,30	5,77	11,1	24,4
	1,0	4,95	4,74	4,29	5,82	11,2	24,5
	100	13,7	11,9	10,7	18,5	38,7	-
1.000	1,0	227	97,5	76,6	88,7	95,8	-
	10,0	-	104	83,4	96,6	103	1430
	-	-	-	-	-	-	-
4.000	4,0	-	387,6	383,6	556,8	498,1	-
	40,0	-	1080	874	1230	1890	-
	-	-	-	-	-	-	-

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.10 - Influence du nombre de Reynolds - D_{xx}^*/\mathcal{D}

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - Sc= 1 - ε= 0,64

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

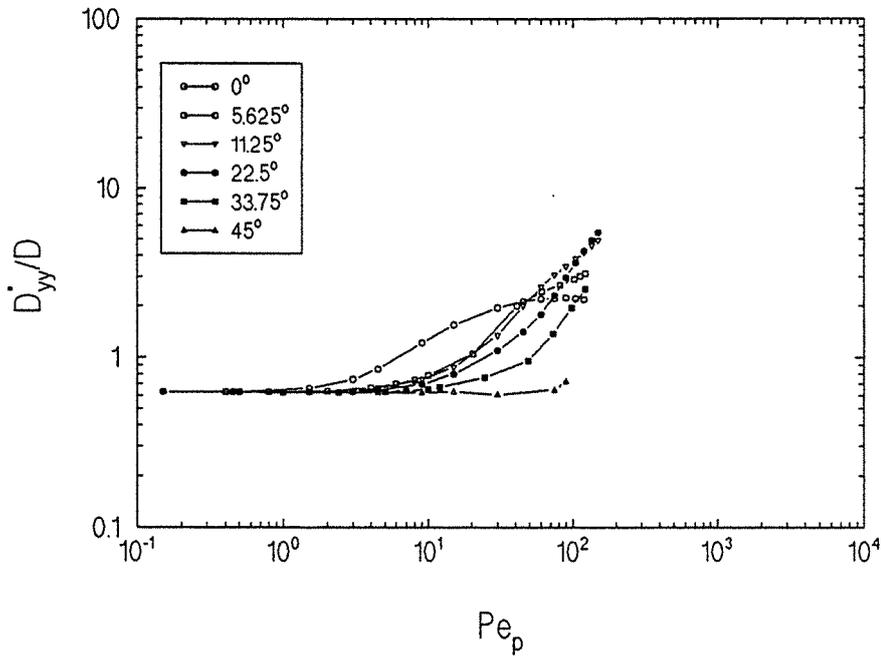


Figure 6.36 - Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - Sc=1

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - Sc= 100 - ε= 0,64

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

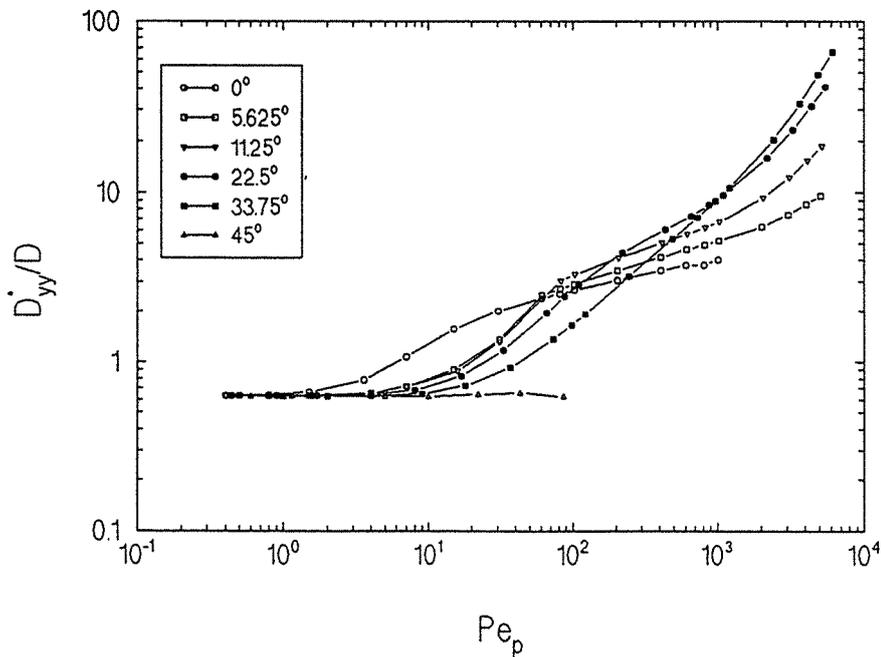


Figure 6.37 - Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/\mathcal{D} - Sc=100

Le lecteur peut avoir une idée plus précise des différences mentionnées ci-dessus en se rapportant aux tableaux 6.10 et 6.11, qui montrent les valeurs calculées des deux coefficients pour un nombre de Péclet particulière $Pe_p = 10, 40, 100, 1000$ et 4000 avec nombre de Schmidt $Sc = 1, 100$ et 1000 . Le premier tableau montre les résultats obtenus pour le coefficient effectif longitudinal, le deuxième tableau pour le coefficient effectif transversal.

Pe_p	Re_p	$D_{yy}^* / \mathcal{D}^\dagger$					
		0°	5,625°	11,25°	22,5°	33,75°	45°
10	0,01	1,29	0,79	0,77	0,72	0,66	0,63
	0,1	1,29	0,80	0,78	0,72	0,66	0,63
	10,0	1,29	0,784	0,77	0,72	0,66	0,63
40	0,04	2,16	1,70	1,63	1,35	0,97	0,65
	0,4	2,15	1,71	1,66	1,35	0,96	0,65
	40,0	2,08	1,96	1,79	1,33	0,90	0,62
100	0,1	2,67	2,90	3,27	2,71	1,68	-
	1,0	2,66	2,89	3,27	2,71	1,67	-
	10,0	2,22	2,89	3,72	3,41	2,01	-
1.000	1,0	3,87	5,10	6,61	9,01	8,95	-
	10,0	-	5,16	6,64	9,11	9,04	-
	-	-	-	-	-	-	-
4.000	4,0	-	7,47	13,0	23,4	28,06	-
	40,0	-	8,47	15,02	28,47	36,87	-
	-	-	-	-	-	-	-

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.11 - Influence du nombre de Reynolds - D_{yy}^* / \mathcal{D}

Les résultats pour le coefficient effectif longitudinal apparaissent beaucoup plus sensibles à l'hydrodynamique que dans le cas de l'écoulement en ligne.

Pour s'en convaincre, on pourra par exemple, comparer pour $Pe_p = 40$ les résultats pour $Re_p = 0,04$ ou $0,4$ aux résultats calculés pour $Re_p = 40$, pour $Pe_p = 100$ les résultats obtenus pour $Re_p = 0,1$ ou $1,0$ aux résultats calculés

pour $Re_p = 100$; pour $Pe_p = 4000$, les résultats pour $Re_p = 4$ et $Re_p = 40$ varient d'un facteur 2 à 4 environ, les angles $\theta = 5,625^\circ$ et $\theta = 33,75^\circ$ présentant les plus grands écarts.

Les coefficients transversaux paraissent être moins sensibles que les coefficients longitudinaux à l'hydrodynamique de l'écoulement.

Pour un nombre de Péclet particulaire $Pe_p = 40$ entre le régime de Stokes ($Re_p < 1$) et $Re_p = 40$, seules les valeurs pour les angles $\theta = 5,625^\circ$ et $11,25^\circ$ présentent une augmentation significative de l'ordre de 10%. Pour $Pe_p = 4000$, entre $Re_p = 4$ et $Re_p = 40$, la plus grande augmentation observée, obtenue pour un angle $\theta = 33,75^\circ$ est de l'ordre de 30%.

6.5.1.3-ARRANGEMENT EN CHICANE

Les résultats obtenus pour le dernier arrangement régulier (arrangement en chicane), sont présentés et commentés ci-dessous.

Cette géométrie, ne présente plus de symétrie géométrique par rapport à l'axe OX de la cellule unité, en particulier le milieu n'est plus isotrope en diffusion pure. Il n'y a donc plus lieu ici de distinguer des directions particulières du vecteur vitesse moyenne pour lesquelles les directions propres du tenseur de dispersion sont connues a priori. D'autre part, cette non-symétrie induit que la règle de Dupuit n'est plus nécessairement vérifiée pour ce milieu. Même si le débit imposé dans la direction OY sur les faces de la cellule unité est nul, la non-symétrie amène à l'existence d'une moyenne volumique sur la cellule différente de zéro dans cette direction. L'écoulement résultant présente, pour une valeur nulle du débit en OY, une valeur de l'angle $\theta \approx 6,4^\circ$ pour une porosité $\varepsilon_p = 0,36$ et $\theta \approx 3^\circ$ pour une porosité égale à 0,64.

6.5.1.3.1-INFLUENCE DE LA DIRECTION DE L'ÉCOULEMENT PRINCIPAL

On va d'abord présenter l'ensemble des résultats obtenus pour deux porosités $\varepsilon_p = 0,36$ et $\varepsilon_p = 0,64$ pour un nombre de Schmidt $Sc = 1000$ et pour l'ensemble des valeurs de l'angle θ étudiées (l'étude a été arbitrairement limitée à $0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$).

Les figures 6.38 et 6.39 montrent l'angle entre la première direction propre et le vecteur vitesse moyenne. Ce n'est que pour des nombres de

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: En Chicane Sc=1000 - $\epsilon=0.36$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

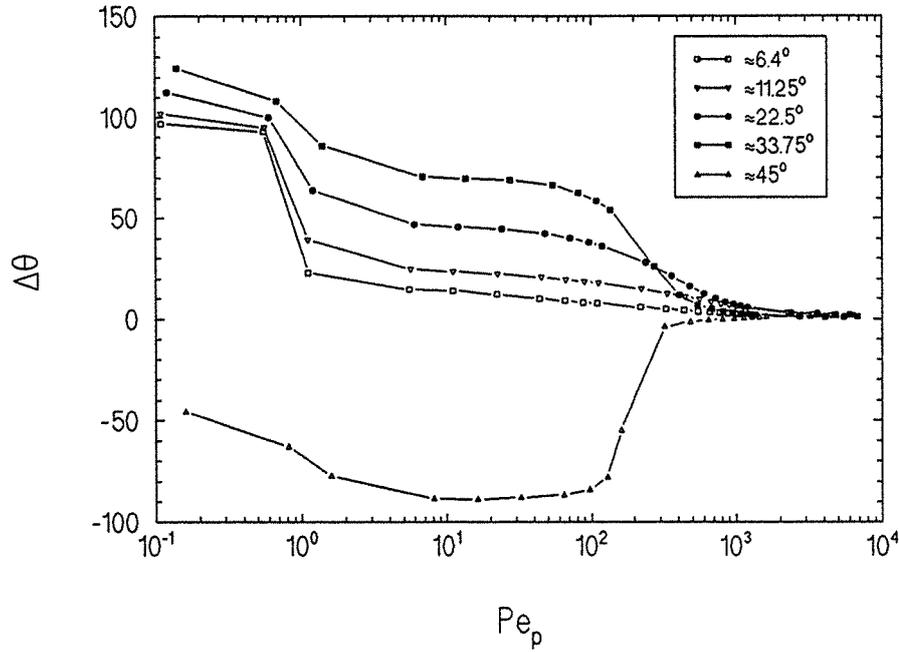


Figure 6.38 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - $\epsilon_B=0,36$

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: En Chicane Sc=1000 - $\epsilon=0.64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

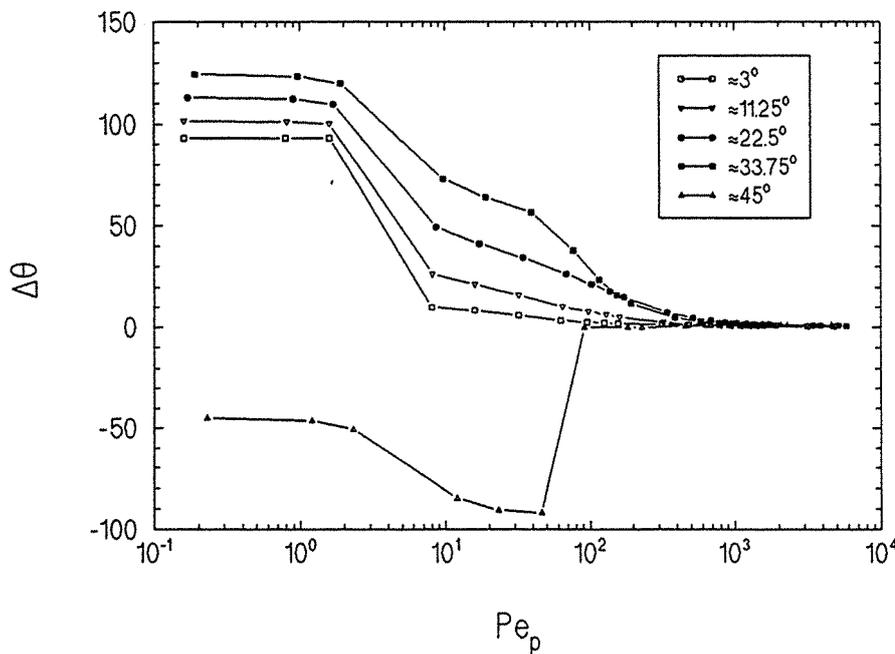


Figure 6.39 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - $\epsilon_B=0,64$

Péclet particulières supérieures à 10^3 que les directions propres du tenseur coïncident avec la direction du vecteur vitesse et la direction orthogonale. Puis pour une gamme modérée de Péclet $\sim 10 < Pe_p < \sim 10^2$ l'angle $\Delta\theta$ va marquer un palier au voisinage de 2θ modulo (π) . Enfin quand le nombre de Péclet particulière tend vers zéro, les directions propres vont finalement coïncider avec les axes propres calculés en diffusion pure, la première direction propre étant confondue avec l'axe OY de la cellule unité.

Les figures 6.40 et 6.41 donnent les valeurs de D_{xx}^*/\mathcal{D} en fonction du nombre de Péclet particulière pour les différentes valeurs de l'angle θ étudiées.

Le cas $\varepsilon_B = 0,36$ (figure 6.40) présente une allure générale qui ressemble beaucoup aux courbes calculées pour l'arrangement en ligne de même porosité. La courbe $\theta \cong 6,4^\circ$ hésite à épouser le comportement singulier de la courbe $\theta = 0^\circ$ pour l'écoulement en ligne, mais présente pour $Pe_p > \sim 10^2$ un début d'inflexion semblable à celui observé pour les autres valeurs de l'angle θ . On peut dire que pour $\sim 10 < Pe_p < \sim 200$, les courbes ralentissent leur taux de croissance d'autant plus que l'angle θ est grand. Ensuite les courbes se trouvent dans une zone de croissance plus rapide, surtout pour les valeurs de $\theta \cong 22,5^\circ$ et $33,75^\circ$. Finalement, pour $10^3 < Pe_p < 10^4$, on a un régime du type $\frac{D^*}{\mathcal{D}} = A Pe_p^m$ où A et m sont des constantes.

L'allure des courbes pour $\varepsilon_B = 0,64$ (figure 6.41) apparaît très différente et difficile à analyser. On ne distingue guère de régions de transition, surtout dans le cas d'un angle $\theta \cong 11,25^\circ$. Pour cette valeur de l'angle θ on pourrait penser, comme dans le cas d'une porosité plus faible, que les valeurs de la courbe sont comprises entre celles données par les courbes ayant un angle $\theta \cong 3^\circ$ et celle où $\theta \cong 22,5^\circ$, mais à l'évidence ce n'est pas le cas.

Le tableau 6.12 récapitule néanmoins les valeurs des pentes m calculées sur la partie linéaire des courbes si elle existe. Elles sont toutes très inférieures à 2.

Il ne reste plus qu'à commenter les résultats trouvés pour le coefficient effectif transversal. Ces résultats sont montrés sur la figure 6.42 pour une porosité égale à 0,36 et sur la figure 6.43 pour une porosité égale à 0,64.

On peut décrire, pour un nombre de Péclet particulière $Pe_p > \sim 1$, l'évolution du coefficient effectif transversal D_{yy}^*/\mathcal{D} ($\varepsilon_B = 0,36$) en faisant

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

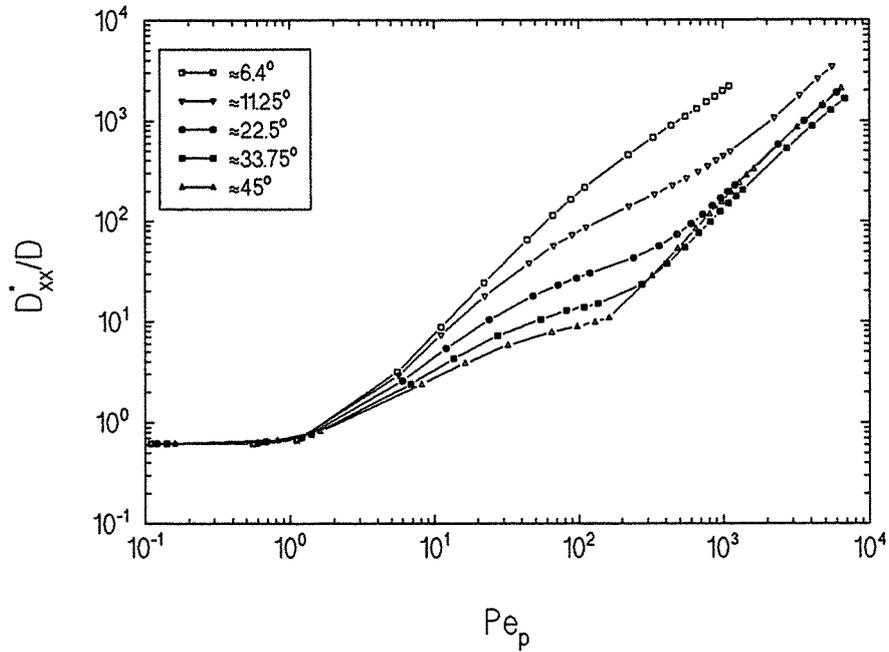


Figure 6.40 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

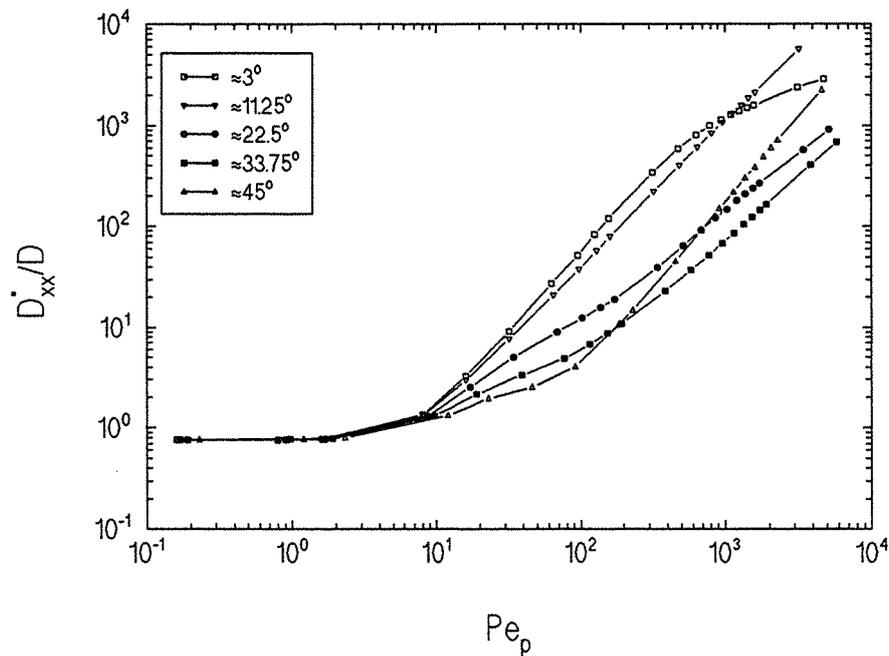


Figure 6.41 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,64$

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,36$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

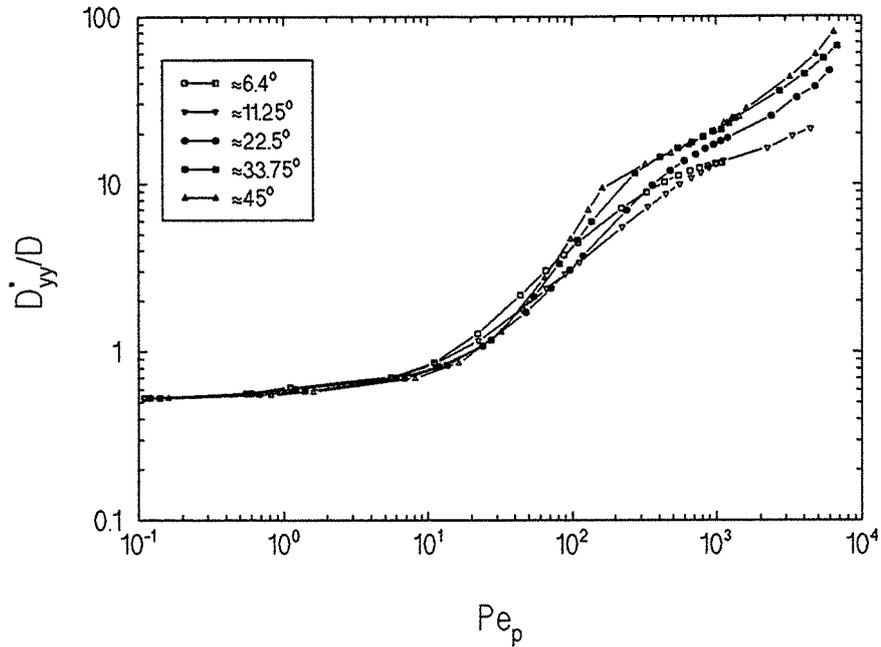


Figure 6.42 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

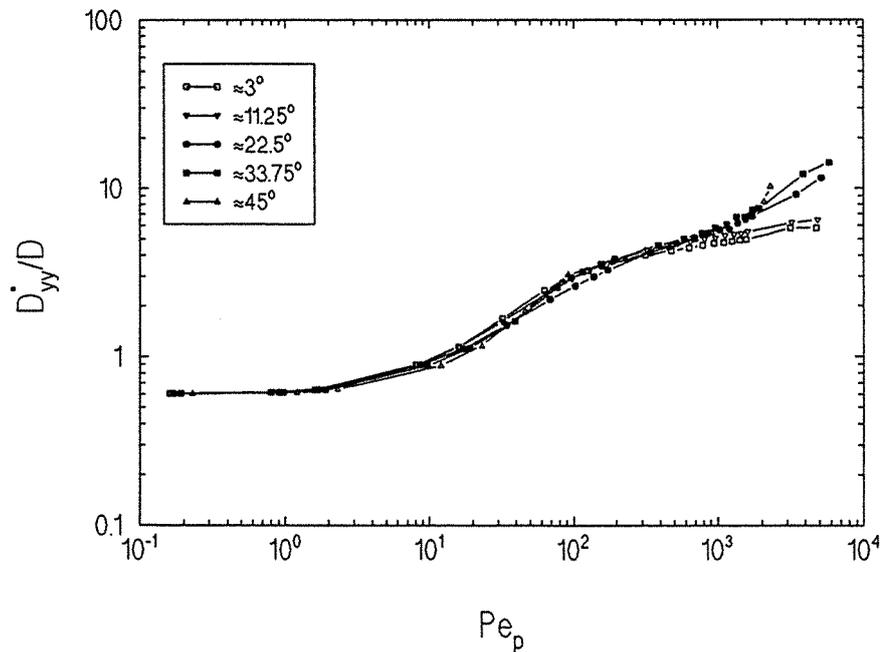


Figure 6.43 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,64$

appel à l'existence de deux zones de transition. La première se trouve comprise entre $\sim 10 < Pe_p < \sim 200$ et la dernière entre $\sim 200 < Pe_p < \sim 1000$. La première est une zone à croissance rapide, surtout pour les grandes valeurs de l'angle θ ($\theta \approx 22,5^\circ$ et $33,75^\circ$). Ensuite on note un changement de pente dans la deuxième zone, les courbes possédant alors une pente plus faible. Pour des nombres de Péclet particuliers supérieurs à 10^3 on a visiblement à nouveau un changement de régime. Cependant, les résultats ne permettent pas d'assurer qu'il s'agit d'une croissance à pente constante. Dans le cas où la porosité vaut 0,64, on remarque que les transitions sont moins nettes, surtout pour les plus petites valeurs de l'angle θ . On a sûrement un changement de comportement pour $Pe_p > 10^3$, mais le fait de n'avoir que peu de points pour des nombres de Péclet particuliers Pe_p très élevés, empêche toute conclusion.

ϵ_B	θ	m
		Sc= 1 000
0,36	11,25°	1,29
	22,5°	1,30
	33,75°	1,30
	45°	1,53
0,64	11,25°	1,40
	22,5°	1,15
	33,75°	1,26
	45°	1,67

Tableau 6.12 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^* / \mathcal{D}$

En outre, on observe que l'influence de la direction de l'écoulement principal, lorsque les termes d'inertie sont négligeables ($Pe_p < \sim 10^3$), est peu accentuée dans le cas de l'arrangement en chicane. C'est surtout le cas pour une porosité égale à 0,64.

6.5.1.2.2-INFLUENCE DU NOMBRE DE REYNOLDS

Pour étudier l'influence du régime d'écoulement (nombre de Reynolds particulière) sur le tenseur effectif de dispersion, on se reportera aux

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1 - ε= 0,64

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

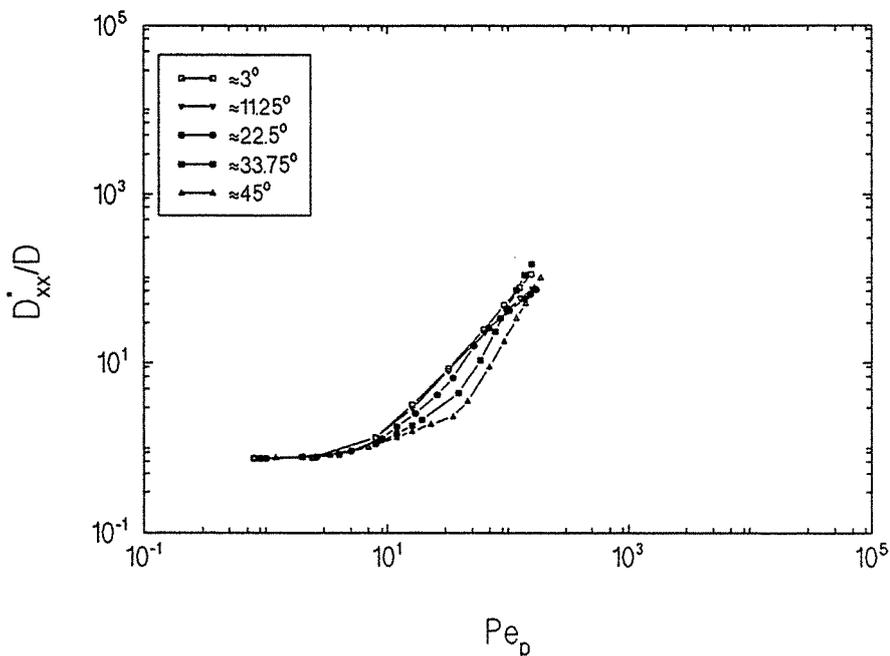


Figure 6.44 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=1

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 100 - ε= 0,64

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

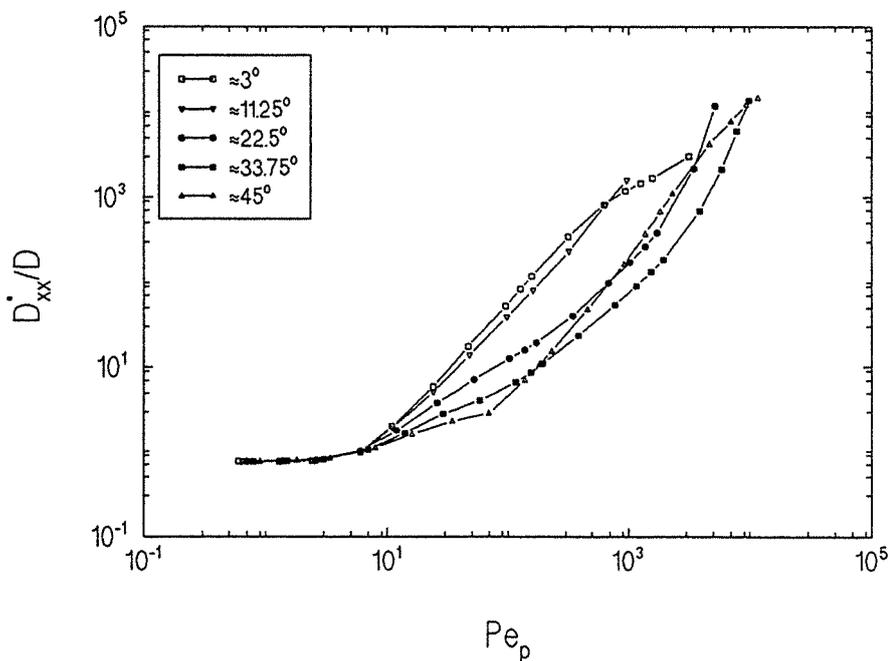


Figure 6.45 - Coefficient effectif de dispersion D_{xx}^*/D - Sc=100

figures 6.44 (Sc=1) et 6.45 (Sc=100) pour le coefficient effectif longitudinal, sur les figures 6.46 (Sc=1) et 6.47 (Sc=100) pour le coefficient effectif transversal ainsi qu'aux tableaux 6.13 et 6.14 présentant les différentes valeurs obtenues pour les coefficients longitudinal et transversal, pour les trois valeurs du nombre de Schmidt et les quatre valeurs du nombre de Péclet déjà retenues.

En régime de Stokes ($Re_p < \sim 10$) les valeurs sont pratiquement indépendantes du nombre de Schmidt. Au delà dans la région du régime laminaire inertiel, les valeurs du coefficient effectif longitudinal et dans une moindre mesure celles du coefficient effectif transversal augmentent avec le nombre de Reynolds particulière. D'une façon générale, ces résultats viennent renforcer les constatations déjà faites lors de la présentation des résultats obtenus pour les deux autres arrangements ordonnés.

Pe_p	Re_p	D_{xx}^* / D^\dagger				
		$\cong 3^\circ$	11,25°	22,5°	33,75°	45°
10	0,01	1,80	1,70	1,50	1,33	0,86
	0,1	1,80	1,73	1,52	1,32	0,87
	1,0	1,79	1,73	1,46	1,30	0,86
40	0,04	13,0	10,40	5,66	3,34	1,72
	0,4	13,5	10,70	5,65	3,37	1,72
	40,0	12,07	11,42	9,06	4,70	2,87
100	0,1	57,0	39,3	12,2	5,99	4,56
	1,0	57,4	40,7	12,3	6,04	4,69
	100	53,22	42,56	40,11	46,05	22,05
1.000	1,0	1190	1110	1437	71,1	172
	10,0	1220	-	1696	75,6	197
	-	-	-	-	-	-
4.000	4,0	2670	8150	683	421	1790
	40,0	-	-	4110	746	3180
	-	-	-	-	-	-

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.13 - Influence du nombre de Reynolds - D_{xx}^* / D

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1 - ε= 0,64

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

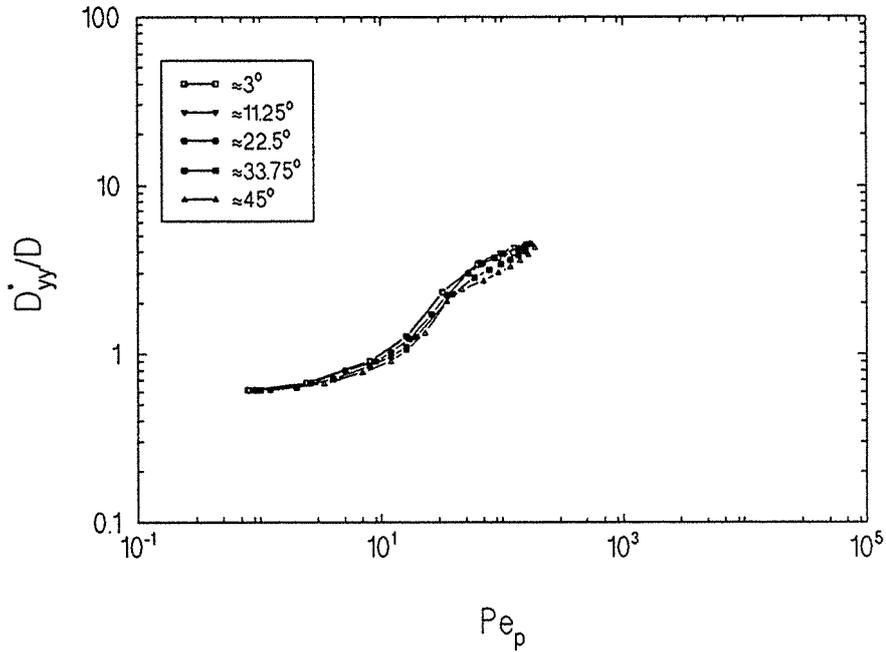


Figure 6.46 - Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/D - Sc=1

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 100 - ε= 0,64

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

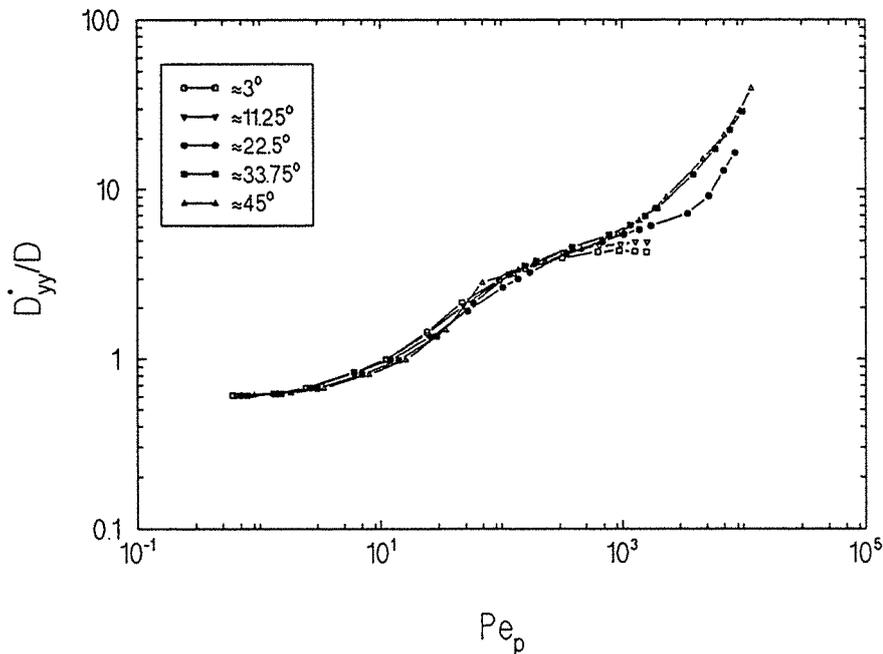


Figure 6.47 - Coefficient effectif de dispersion D_{yy}^*/D - Sc=100

Pour un nombre de Péclet particulaire Pe_p égal à 100, on note que les résultats obtenus pour un nombre de Reynolds particulaire $Re_p=100$ diffèrent d'une façon appréciable pour les plus grandes valeurs de l'angle θ ($\theta \cong 22,5^\circ, 33,75^\circ$ et 45°), la différence pouvant atteindre 700% environ pour l'angle $\theta \cong 33,75^\circ$. Les résultats ne sont pas trop différents entre eux dans le cas $Pe_p=1000$ le nombre de Reynolds ne dépassant pas 10 ($Sc=100$), mais il y a des écarts non négligeables pour $Pe_p=4000$, le nombre de Reynolds particulaire étant égal à 40 ($Sc=100$). Dans ce cas les différences sont comprises entre 180% et 600% environ pour les trois valeurs de l'angle θ étudiées ($\theta \cong 22,5^\circ, 33,75^\circ$ et 45°).

De même que pour le coefficient effectif longitudinal, les résultats du coefficient effectif transversal (tableau 6.14) ne présentent pas de variations significatives en fonction du nombre de Reynolds particulaire en régime de Stokes.

Pe_p	Re_p	$D_{yy}^* / \mathcal{D}^\dagger$				
		$\cong 3^\circ$	$11,25^\circ$	$22,5^\circ$	$33,75^\circ$	45°
10	0,01	0,97	0,97	0,94	0,90	1,26
	0,1	0,97	0,97	0,95	0,90	1,25
	1,0	1,02	1,01	0,95	0,91	1,22
40	0,04	1,91	1,84	1,67	1,65	2,41
	0,4	1,95	1,86	1,68	1,69	2,41
	40,0	2,62	2,64	2,46	2,30	2,22
100	0,1	2,99	2,92	2,6	2,95	3,15
	1,0	3,01	2,95	2,61	2,93	3,13
	100	3,80	3,98	3,87	3,40	3,10
1.000	1,0	4,72	5,06	5,58	5,82	5,66
	10,0	4,37	4,75	5,41	5,89	5,70
	-	-	-	-	-	-
4.000	4,0	-	-	9,93	12,21	-
	40,0	-	-	7,85	12,39	13,53
	-	-	-	-	-	-

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.14 - Influence du nombre de Reynolds - D_{yy}^* / \mathcal{D}

Dans le régime laminaire inertiel, on peut remarquer des différences entre les valeurs calculées utilisant les trois nombres de Schmidt. Cependant ces différences sont moins importantes que pour le coefficient effectif longitudinal. Une différence maximale de 27% environ est constatée pour $Pe_p = 4000$ et l'angle $\theta \cong 22,5^\circ$.

6.5.2-ARRANGEMENTS DÉSORDONNÉS

Tous les arrangements désordonnés utilisés dans ce chapitre sont ceux montrés au chapitre 4 (figures 4.16 à 4.35).

Les calculs numériques effectués lors de la résolution du problème hydrodynamique et de fermeture en f , emploient des maillages uniformes ayant 110 X 100 volumes de contrôle. Chaque cylindre carré est constitué de 10 X 10 volumes de contrôle. Le critère de convergence, choisi pour tous les cas, est $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-5}$ (§ 3.5.4).

Les coefficients effectifs de dispersion (longitudinal et transversal) sont calculés pour une seule porosité $\varepsilon_p \cong 0,7$ et pour quatre valeurs de la direction de l'écoulement principal ($\theta \cong 23^\circ, 33^\circ, 45^\circ$ et 57°). Trois nombres de Schmidt ($Sc=1, 100$ et 1000) sont étudiés pour l'angle $\theta \cong 45^\circ$. Des valeurs de l'angle θ plus petites que 23° n'ont pas été envisagées du fait de la difficulté numérique à satisfaire les conditions de périodicité de façon satisfaisante.

Tout d'abord, l'ensemble des résultats obtenus pour $\theta \cong 45^\circ$ est présenté. Du fait de la nature désordonné de l'arrangement géométrique des cellules unités utilisées, on peut espérer une quasi-indépendance des résultats vis-à-vis de la direction de l'écoulement principal. Afin de vérifier cette probable invariance par rotation du vecteur vitesse moyenne de l'écoulement, trois autres valeurs de l'angle θ sont étudiées ($\theta \cong 23^\circ, 33^\circ$ et 57°).

La figure 6.48 montre les valeurs des coefficients effectifs (longitudinal et transversal) calculées pour un nombre de Schmidt égal à 1000 ($0 < Re_p < \sim 10$). En dépit de la multitude des géométries étudiées, on constate que l'ensemble des résultats présente à peu près le même comportement qualitatif et quantitatif. On le vérifie aisément, en regardant sur le tableau 6.15, les valeurs des pentes calculées pour le coefficient longitudinal. Les pentes sont déterminées par interpolation du

type des moindres carrés pour $Pe_p > 20$. En ce qui concerne les coefficients transversaux, les valeurs des pentes ne sont pas déterminées puisque pour la plage du nombre de Péclet particulière étudiée, les allures du coefficient transversal ne correspondent pas à une droite comme le montre la figure 6.49. On peut conclure, d'après ces résultats, que les variations des deux coefficients ne correspondent pas à celles prévues par la littérature. Il y a un consensus général sur une valeur $m \approx 1,2$ pour le coefficient longitudinal et $m \approx 1,0$ pour le coefficient transversal pour des milieux "réels" tridimensionnels. On voit donc (tableau 6.15) que si l'on devait représenter l'ensemble de nos résultats sous la forme de l'équation (31), on aurait pour le coefficient longitudinal $m = 1,62$ et pour le coefficient transversal une valeur $m \approx 0,4$ bien inférieure à l'unité.

Milleu	m
	Sc= 1000
01	1,74
02	1,54
03	1,65
04	1,71
05	1,62
06	1,45
07	1,63
08	1,52
09	1,70
10	1,70
11	1,38
12	1,74
13	1,70
14	1,65
15	1,67
16	1,60
17	1,52
18	1,49
19	1,67
20	1,79
Moyenne	1,62
Écart Type	0,11

Tableau 6.15 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^* / \mathcal{D} - \theta \approx 45^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

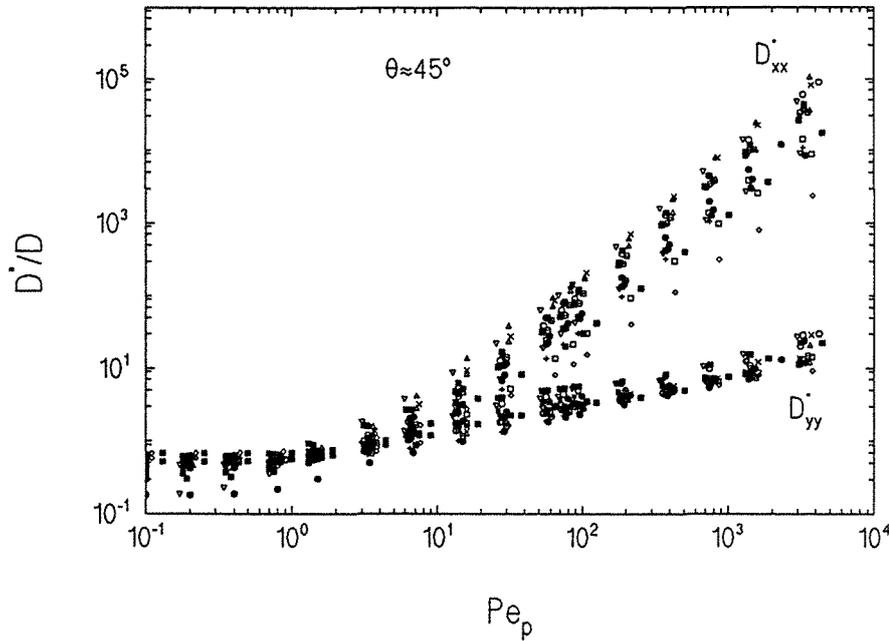


Figure 6.48 - Coefficients effectifs de dispersion D^*/D - $\epsilon_B=0,7$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

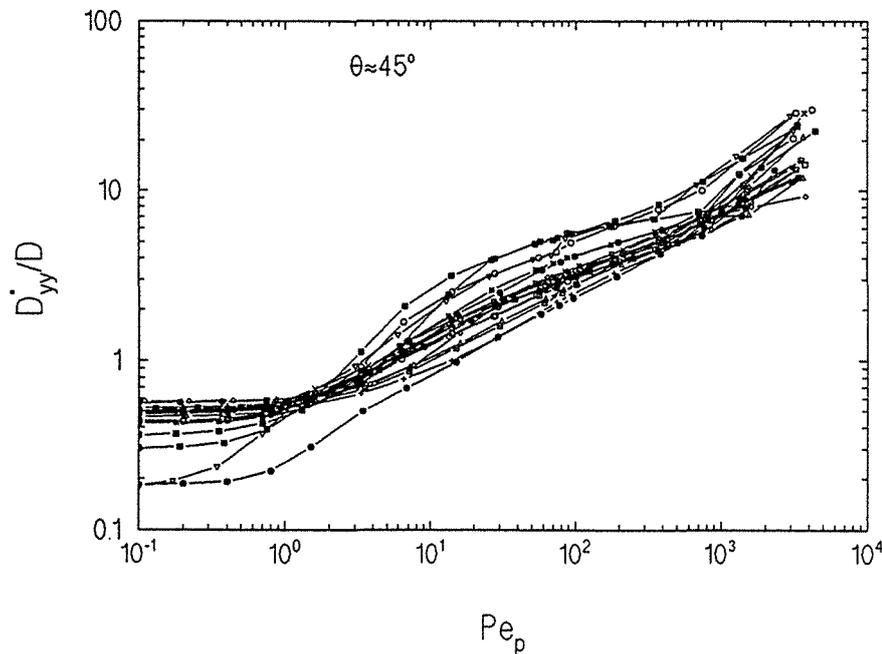


Figure 6.49 - Coefficient effectif de dispersion D^*/D - $\epsilon_B=0,7$

De façon à mieux visualiser l'évolution du coefficient transversal, celui-ci est représenté séparément sur la figure 6.49. L'analyse de l'ensemble des courbes permet d'une manière générale de distinguer trois zones. Pour $Pe_p \leq 1$, le transport a lieu par diffusion pure; pour $1 \leq Pe_p \leq 10^3$, le coefficient croît avec le nombre de Péclet particulaire en présentant soit une allure approximativement linéaire, soit une forme en S; finalement pour $Pe_p > 10^3$ les courbes se redressent.

6.5.2.1-INFLUENCE DE LA DIRECTION DE L'ÉCOULEMENT PRINCIPAL

Ensuite, on passe aux résultats obtenus pour les autres valeurs de l'angle θ ($\theta \approx 23^\circ$, 33° et 57°). Dans le cas de l'arrangement désordonné, une valeur de l'angle θ supérieure à 45° est souhaitable puisque la non-symétrie spatiale n'implique plus, comme c'était le cas des arrangements symétriques, une égalité des résultats pour $\theta - 45^\circ$ et $\theta + 45^\circ$ à condition d'inverser les axes OX et OY.

Les résultats sont montrés pour les deux coefficients et pour un nombre de Schmidt égal à 1000 sur les figures: 6.50 pour $\theta \approx 23^\circ$, 6.51 pour $\theta \approx 33^\circ$, 6.52 pour $\theta \approx 45^\circ$ et 6.53 pour $\theta \approx 57^\circ$. Seuls dix cas, parmi les vingt utilisés pour un angle $\theta \approx 45^\circ$, sont retenus pour étudier l'influence de la direction de l'écoulement principal sur le comportement des coefficients effectifs. Tout d'abord on note que par rapport aux résultats obtenus pour le coefficient longitudinal pour les arrangements réguliers, les zones de transition constatées précédemment, n'existent plus à l'exception d'un ou deux cas.

Maintenant, pour apprécier la variation des coefficients de dispersion longitudinal et transversal en fonction de la direction de l'écoulement principal, les résultats pour quatre milieux (milieu n° 5, 7, 14 et 16) sont représentés sur les figures 6.54 à 6.57. L'allure des courbes ne semble pas trop sensible à la direction de l'écoulement, même si la représentation log-log peut cacher des différences significatives.

Sur la figure 6.54 (milieu n° 5), on observe que les courbes représentant le coefficient transversal, diffèrent d'une façon significative pour $Pe_p > \sim 10^3$. Dans le cas du coefficient longitudinal, les différences sont prononcées pour $Pe_p > \sim 10$. Ensuite, sur la figure 6.55 (milieu n° 7) au contraire, les courbes sont très proches les unes des

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - Sc=1000 - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

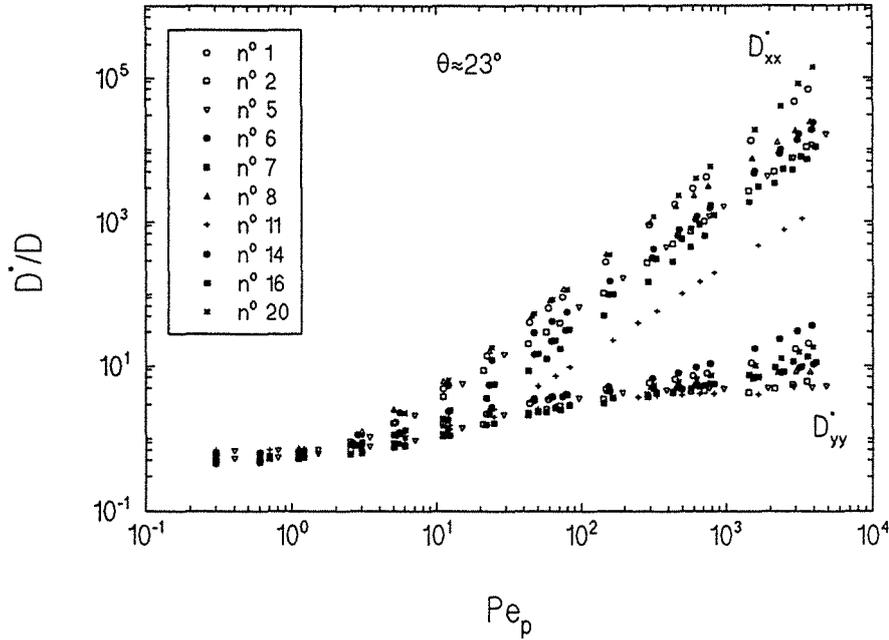


Figure 6.50 - Coefficients effectifs de dispersion D^*/D - $\theta \approx 23^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - Sc=1000 - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

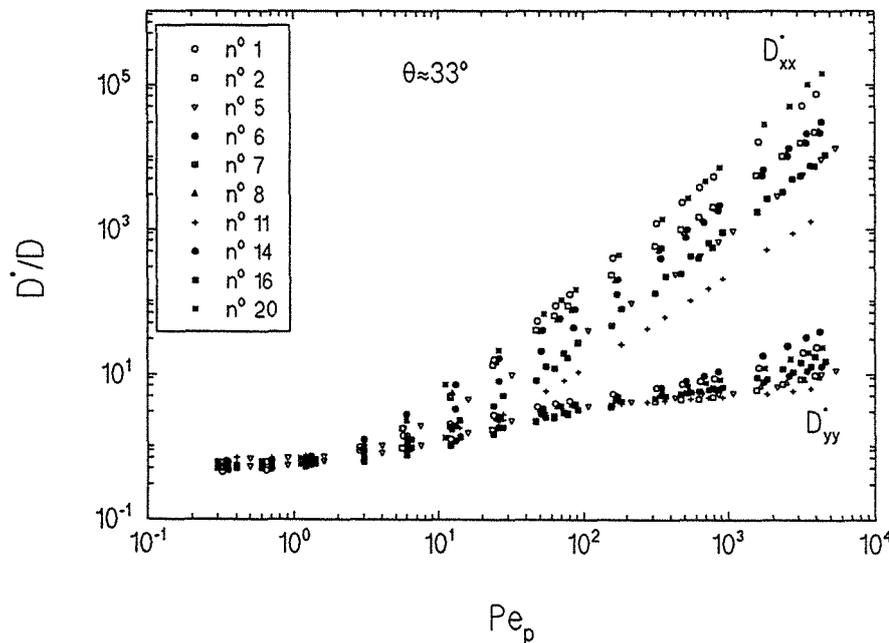


Figure 6.51 - Coefficient effectif de dispersion D^*/D - $\theta \approx 33^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\varepsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

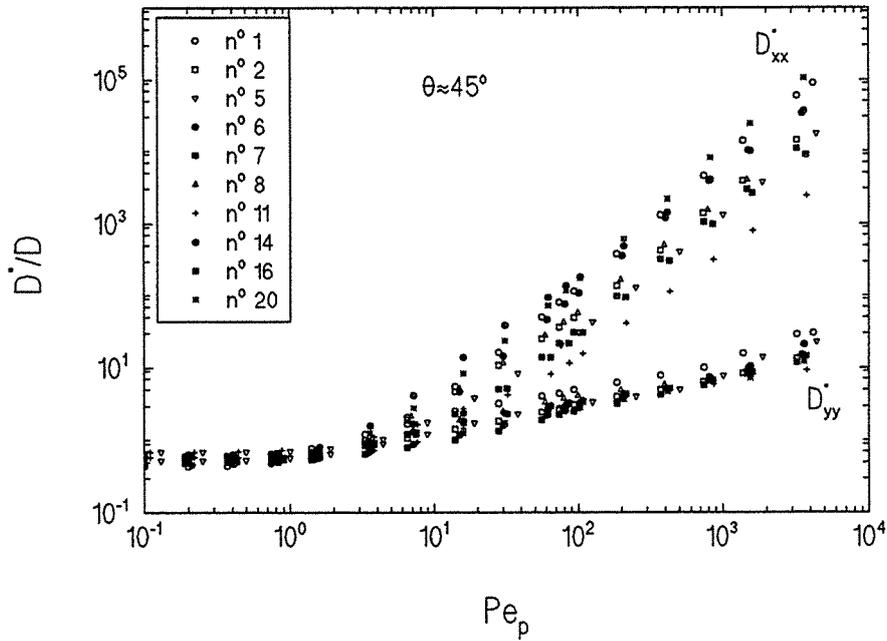


Figure 6.52 - Coefficients effectifs de dispersion D^*/D - $\theta \approx 45^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\varepsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

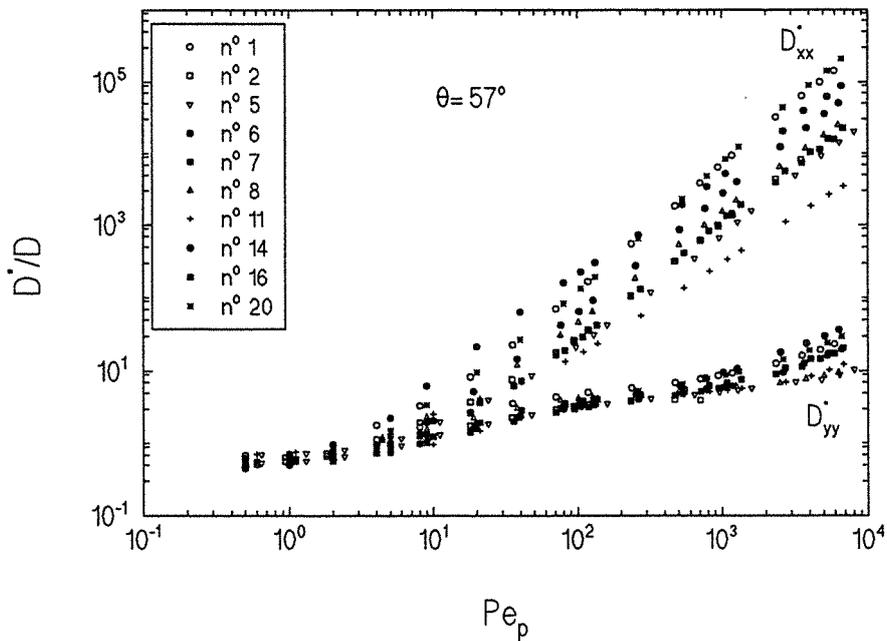


Figure 6.53 - Coefficient effectif de dispersion D^*/D - $\theta \approx 57^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

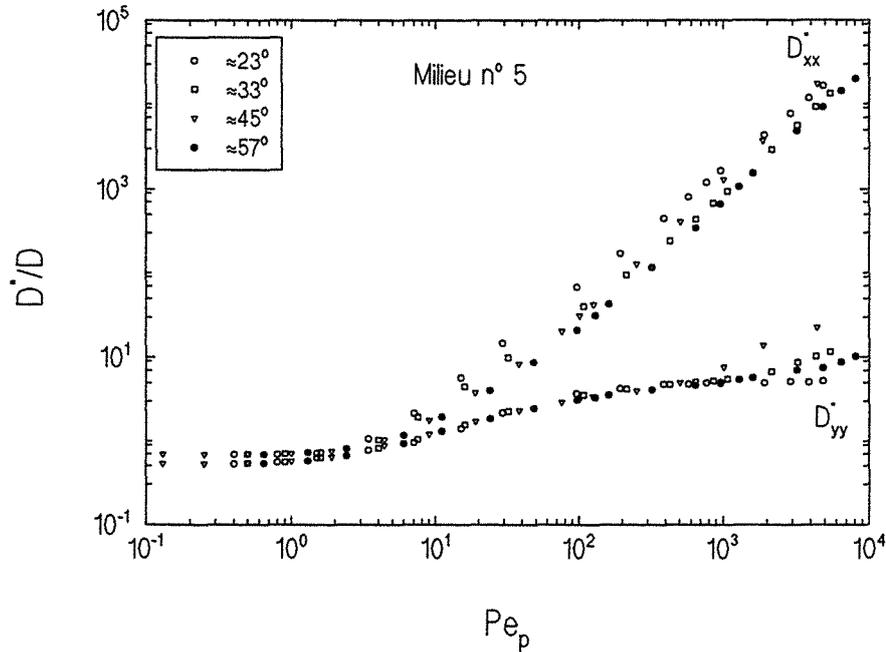


Figure 6.54 - Coefficients effectifs de dispersion D^*/D - milieu n° 5

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

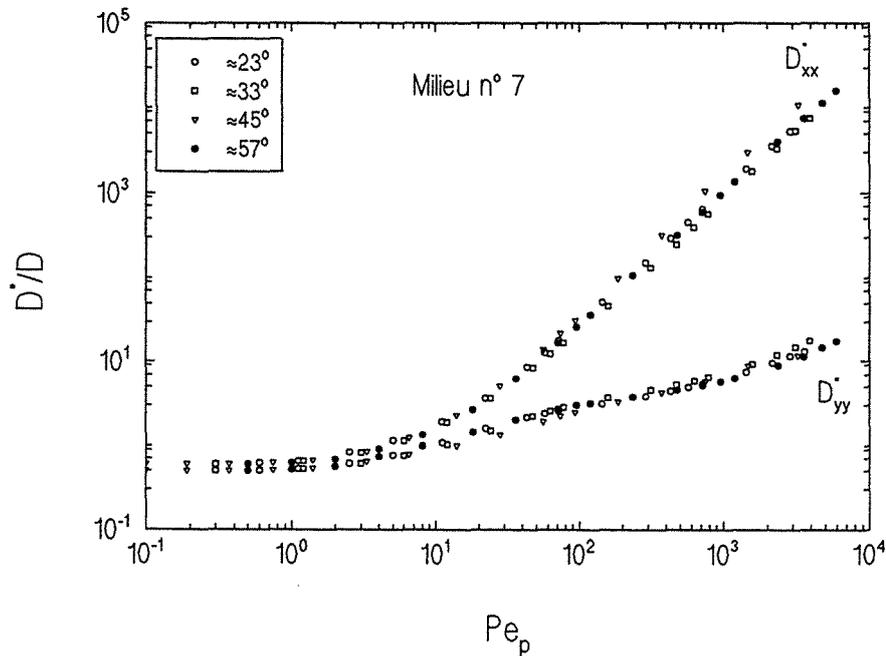


Figure 6.55 - Coefficient effectif de dispersion D^*/D - milieu n° 7

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\varepsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

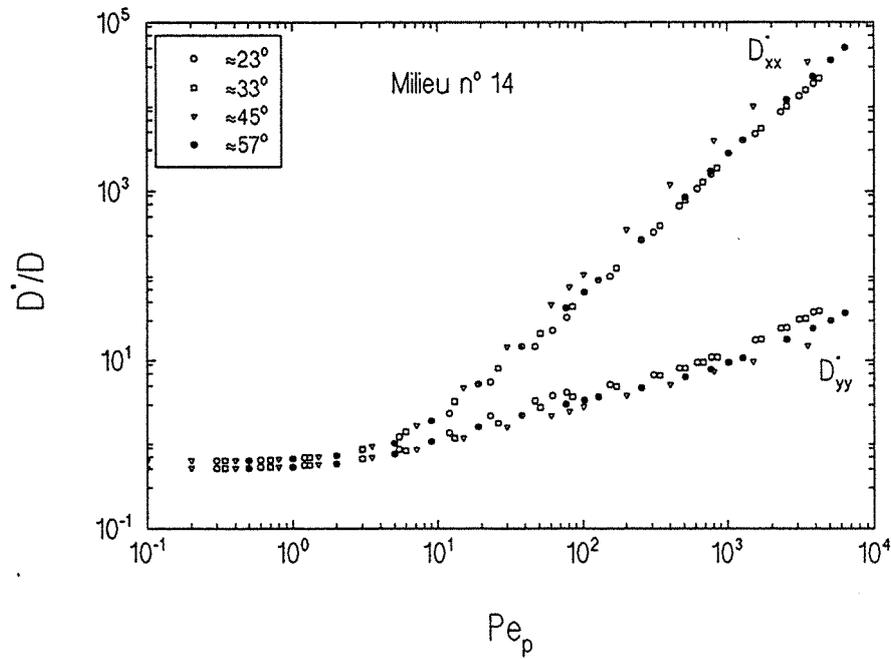


Figure 6.56 - Coefficients effectifs de dispersion D^*/D - milieu n° 14

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\varepsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

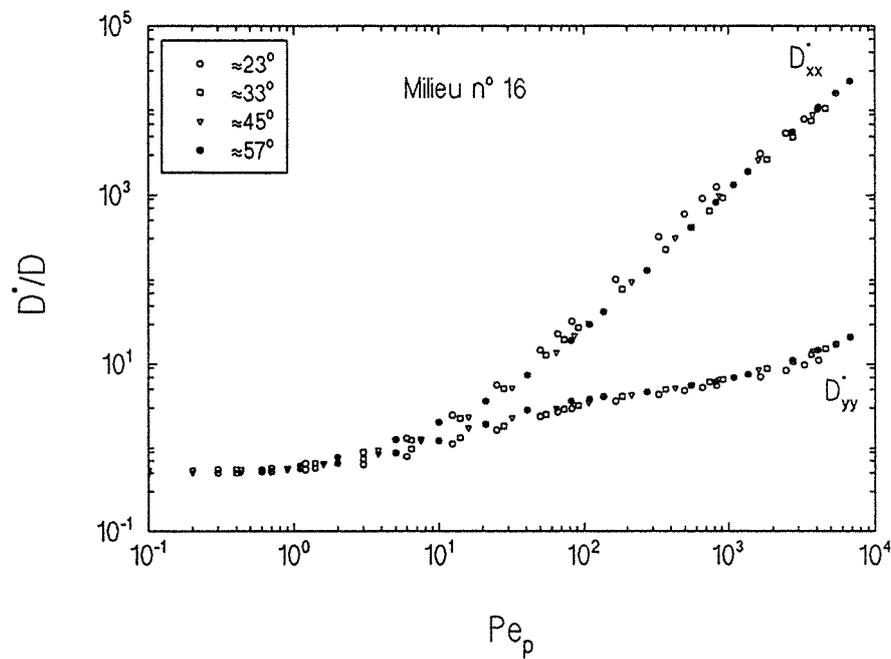


Figure 6.57 - Coefficient effectif de dispersion D^*/D - milieu n° 16

autres, à l'exception peut-être du cas $\theta \cong 45^\circ$. La figure 6.56 (milieu n° 14) est analogue à la figure précédente (milieu n° 7): pour le coefficient longitudinal les résultats sont sensiblement les mêmes pour les angles $\theta \cong 23^\circ$, 33° et 57° , pour $\theta \cong 45^\circ$ les valeurs sont cependant nettement supérieures à celles des autres angles. En ce qui concerne le coefficient transversal, on observe que les courbes $\theta \cong 23^\circ$ et 33° sont presque confondues pour $Pe_p > 10^3$, et que, pour les deux autres angles θ , on obtient des valeurs un peu inférieures aux précédentes. Enfin, sur la figure 6.57 (milieu n°16) on remarque pour les deux coefficients une quasi-invariance des résultats par rapport à la direction de l'écoulement principal. Seul le cas $\theta \cong 23^\circ$ et $\sim 10 < Pe_p < 10^3$ pour le coefficient longitudinal s'écarte légèrement des autres courbes.

On peut quantifier ces variations si l'on compare les différentes pentes calculées pour les quatre valeurs de l'angle θ montrées sur le tableau 6.16.

Milieu	Exposant m			
	23°	33°	45°	57°
01	1,66	1,64	1,74	1,72
02	1,40	1,42	1,54	1,54
05	1,38	1,43	1,62	1,51
06	1,49	1,48	1,45	1,42
07	1,53	1,52	1,63	1,55
08	1,41	1,44	1,52	1,51
11	1,27	1,27	1,38	1,21
14	1,63	1,59	1,67	1,61
16	1,50	1,51	1,60	1,57
20	1,73	1,72	1,79	1,77
Moyenne	1,50	1,50	1,59	1,54
Écart Type	0,14	0,12	0,12	0,15

Tableau 6.16 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$

L'examen du tableau 6.16 laisse à penser que la dispersion des résultats pour le coefficient effectif de dispersion, entre les différents milieux est au moins aussi grande que la dispersion pour le même milieu entre les différents angles. La variation moyenne des pentes, par rapport à

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

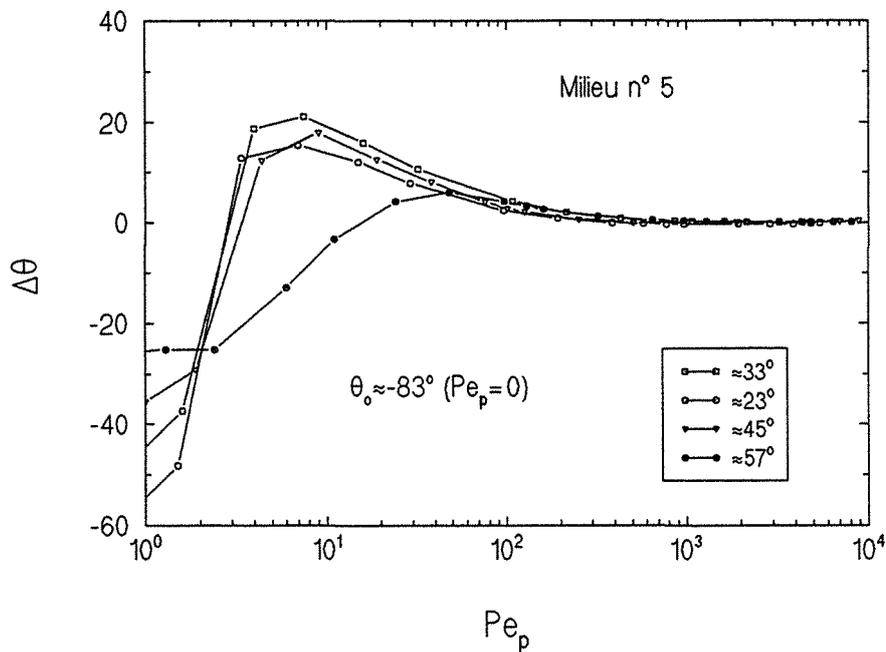


Figure 6.58 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n° 5

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

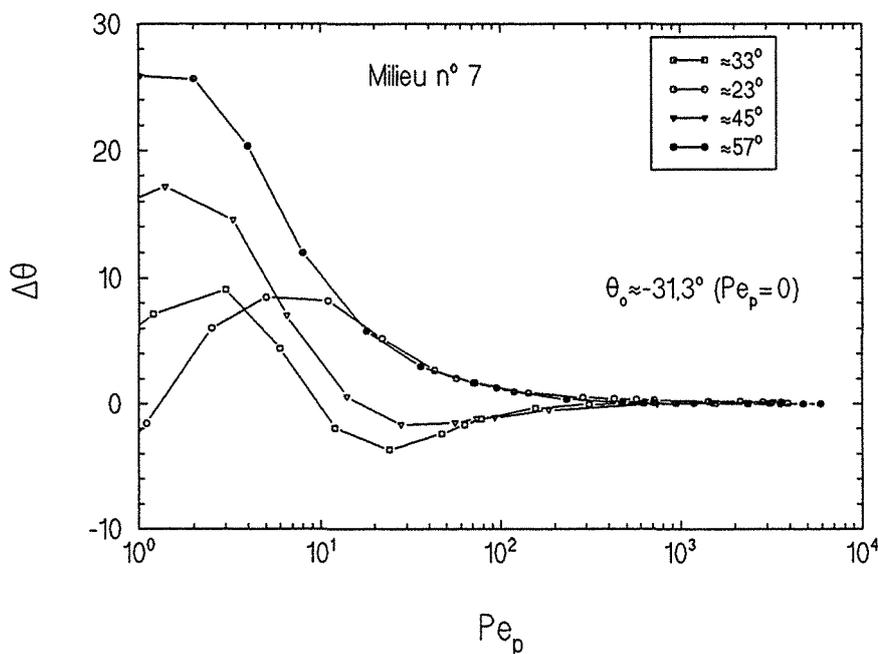


Figure 6.59 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n° 7

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

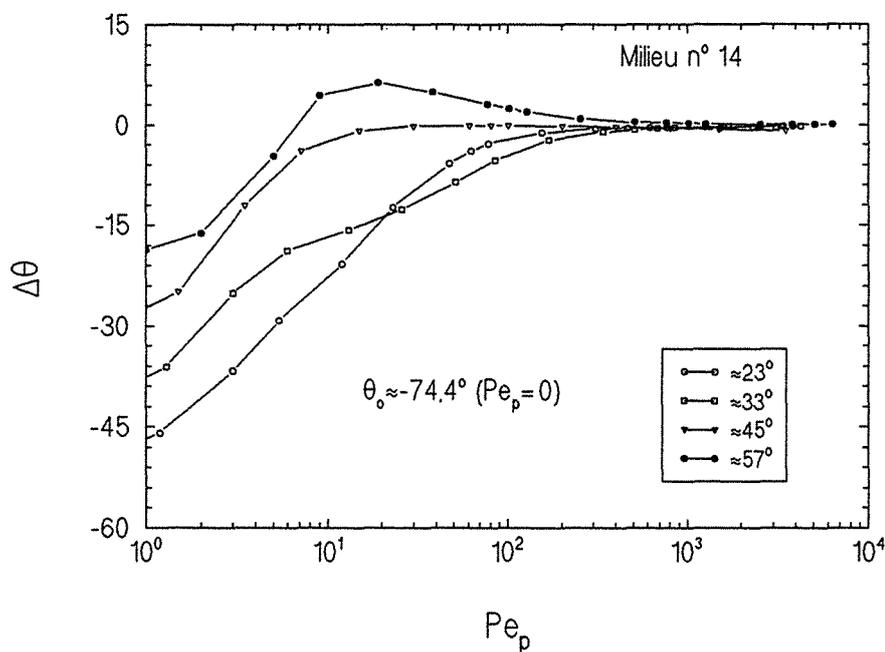


Figure 6.60 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n° 14

Angle entre la Première Direction Propre et le Vecteur Vitesse

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

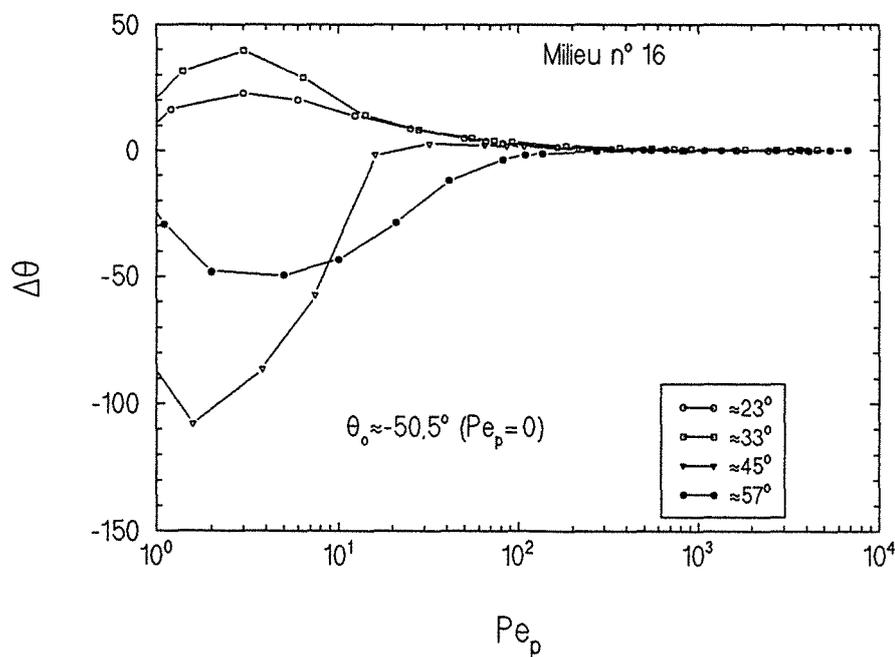


Figure 6.61 - Variation de l'angle $\Delta\theta$ - milieu n° 16

la plus grande valeur, est de l'ordre de 8%. Le plus grand écart en pourcentage (milieu n° 5) vaut 17% environ. On peut dire que l'ensemble des résultats n'est pas en moyenne fortement influencé par la direction du vecteur vitesse moyenne de l'écoulement.

Les derniers résultats présentés (milieux n° 5, 7, 14 et 16) dans ce paragraphe sont montrés sur les figures 6.58 à 6.61. Il s'agit de la variation de l'angle $\Delta\theta$ entre la première direction propre et la direction de l'écoulement principal en fonction du nombre de Péclet particulaire.

Alors que pour les arrangements ordonnés il faut attendre un nombre de Péclet particulaire Pe_p de l'ordre de 10^3 pour que la première direction propre coïncide avec la direction de l'écoulement moyen, dans le cas des milieux désordonnés, il suffit d'atteindre $Pe_p \approx 10^2$ pour obtenir ce résultat. Un autre point intéressant à remarquer est la manière dont les directions propres tendent vers les directions propres du problème de diffusion pure quand le nombre de Péclet particulaire tend vers zéro. Si θ_0 désigne l'angle entre le premier axe propre en diffusion pure et l'axe OX de la cellule, l'angle $\Delta\theta$ doit alors se comporter comme $\theta + \theta_0$, ce qui se vérifie bien pour les quatre figures.

6.5.2.2-INFLUENCE DU NOMBRE DE REYNOLDS

Les figures 6.62 et 6.63 contiennent, pour la même valeur de l'angle θ ($\theta \approx 45^\circ$), les résultats obtenus pour les deux coefficients effectifs de dispersion avec un nombre de Schmidt égal à 1 et 100. Les résultats concernent les dix milieux déjà utilisés lors de l'étude de l'influence de la direction de l'écoulement principal.

D'après les résultats obtenus pour les trois nombres de Schmidt ($Sc=1$, 100 et 1000), il est difficile d'apprécier avec précision l'effet d'une augmentation du nombre de Reynolds particulaire sur la valeur de la pente m .

Le tableau 6.17 montre pour l'angle $\theta \approx 45^\circ$, les valeurs des pentes m déterminées pour $Sc=100$ et 1000 et un nombre de Péclet particulaire $Pe_p > 20$. On voit d'après les valeurs moyennes qu'on a à peu près la même pente pour l'ensemble des résultats calculés pour $Sc=100$ et 1000.

Finalement, le tableau 6.18 fournit pour trois nombres de Péclet particuliers Pe_p ($Pe_p = 1, 50$ et 1000), les résultats calculés du

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

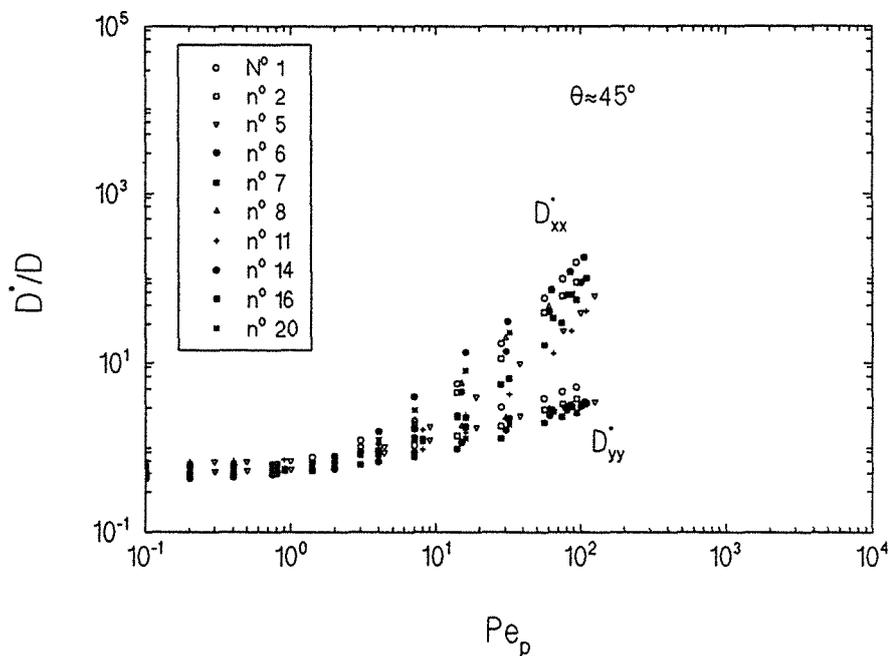


Figure 6.62 - Coefficients effectifs de dispersion D^*/D - $Sc=1$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=100$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

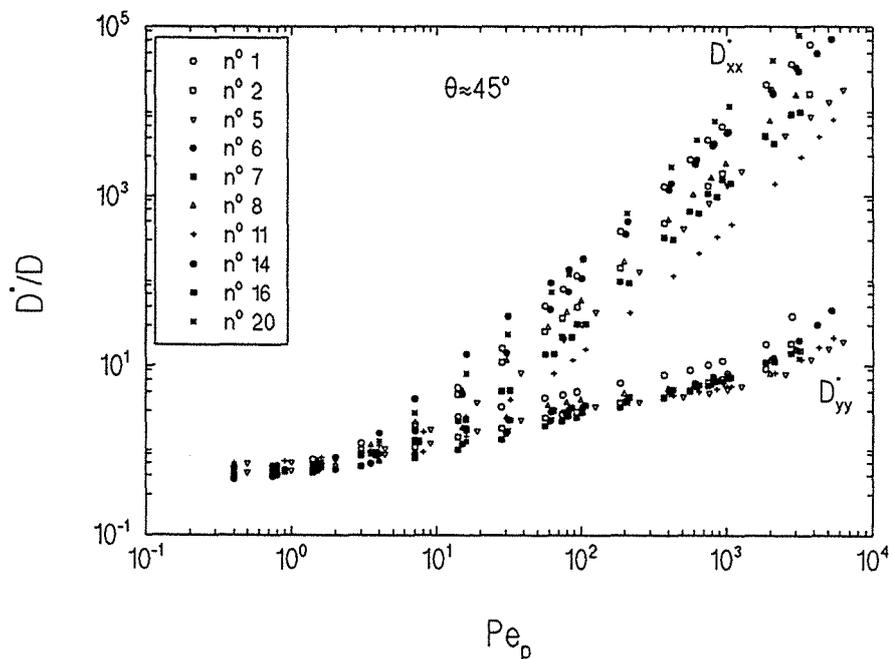


Figure 6.63 - Coefficient effectif de dispersion D^*/D - $Sc=100$

coefficient effectif D_{xx}^*/D pour les trois nombres de Schmidt étudiés. D'une façon générale, on peut dire qu'on obtient pratiquement les mêmes résultats pour les 10 milieux, lorsque l'écoulement est en régime de Stokes ($Re_p \leq \sim 10$), d'après les résultats du paragraphe 4.8.3.

Globalement, pour un nombre de Péclet particulière $Pe_p = 50$, le coefficient effectif longitudinal augmente pour un nombre de Reynolds particulière $Re_p = 50$, assez nettement pour sept milieux désordonnés sur 10; deux milieux (milieux n° 14 et 20) sont peu affectés par l'hydrodynamique; seul le milieu 6 baisse nettement. Une explication possible du comportement singulier du milieu 6 est sans doute à chercher dans l'existence d'une zone préférentielle orientée à 45° permettant un passage facile du fluide (voir annexe VII). Enfin pour un nombre de Péclet particulière $Pe_p = 1000$, le passage de Re_p de 1 à 10 est assez peu sensible, seuls deux milieux (milieux n° 7 et 14) présentant une augmentation significative du coefficient effectif longitudinal.

Milieu	Sc=100	Sc=1000
01	1,70	1,74
02	1,52	1,54
05	1,55	1,62
06	1,48	1,45
07	1,67	1,63
08	1,59	1,52
11	1,50	1,38
14	1,70	1,67
16	1,71	1,60
20	1,77	1,79
Moyenne	1,62	1,59
Écart Type	0,10	0,12

Tableau 6.17 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$

Le coefficient transversal D_{yy}^*/D est présenté dans le tableau 6.19 avec le même jeu de valeurs. Il est difficile d'en tirer des conclusions définitives.

Néanmoins le coefficient effectif transversal semble beaucoup moins affecté par l'hydrodynamique que le coefficient effectif longitudinal.

Milieu	Pe p	Coefficient D_{xx}^* / D^\dagger		
		Sc=10 ⁰	Sc=10 ²	Sc=10 ³
01	1,0	0,7042	0,7036	0,7043
	50,0	48,8	41,4	41,7
	1.000	-	7510	7670
02	1,0	0,6506	0,6494	0,6494
	50,0	33,0	21,9	21,9
	1.000	-	2100	2210
05	1,0	0,7042	0,7036	0,7043
	50,0	14,2	11,8	11,9
	1.000	-	1320	1290
06	1,0	0,6925	0,690	0,6972
	50,0	57,3	72,0	71,4
	1.000	-	5560	5260
07	1,0	0,6398	0,6396	0,6389
	50,0	14,0	11,8	11,9
	1.000	-	2020	1650
08	1,0	0,6553	0,671	0,6681
	50,0	38,5	23,0	22,8
	1.000	-	2480	2210
11	1,0	0,7371	0,7411	0,7455
	50,0	8,70	6,27	6,36
	1.000	-	413	393
14	1,0	0,6633	0,6679	0,6681
	50,0	30,6	33,2	33,8
	1.000	-	6820	5490
16	1,0	0,5804	0,5827	0,5878
	50,0	18,8	9,67	9,70
	1.000	-	1320	1240
20	1,0	0,6277	0,6354	0,6324
	50,0	49,9	51,7	51,0
	1.000	-	11000	11200

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.18 - Influence du nombre de Reynolds - D_{xx}^* / D

Milieu	Pe _p	Coefficient D_{yy}^*/D †		
		Sc=10 ⁰	Sc=10 ²	Sc=10 ³
01	1,0	0,5192	0,5192	0,5191
	50,0	3,77	3,89	3,89
	1.000	-	11,88	12,21
02	1,0	0,5833	0,5825	0,5830
	50,0	2,62	2,33	2,33
	1.000	-	7,23	7,21
05	1,0	0,5634	0,5642	0,5640
	50,0	2,62	2,52	2,52
	1.000	-	5,20	7,52
06	1,0	0,5212	0,5210	0,5238
	50,0	2,62	2,70	2,70
	1.000	-	7,09	7,68
07	1,0	0,5257	0,5252	0,5254
	50,0	1,87	1,81	1,81
	1.000	-	7,00	6,85
08	1,0	0,5415	0,5499	0,5505
	50,0	2,78	3,18	3,18
	1.000	-	6,12	7,26
11	1,0	0,5957	0,5968	0,5982
	50,0	2,59	2,77	2,78
	1.000	-	5,61	6,35
14	1,0	0,5369	0,5402	0,5406
	50,0	2,16	2,02	2,02
	1.000	-	7,47	8,05
16	1,0	0,5595	0,5685	0,5657
	50,0	2,56	2,69	2,70
	1.000	-	6,39	7,07
20	1,0	0,5733	0,5765	0,5751
	50,0	2,45	2,11	2,13
	1.000	-	7,37	7,07

† valeurs obtenues par interpolation

Tableau 6.19 - Influence du nombre de Reynolds - D_{yy}^*/D

6.6-DICUSSION ET COMPARAISON AVEC D'AUTRES RÉSULTATS

À notre connaissance, il n'y a ni résultats expérimentaux ni résultats numériques disponibles pour la même géométrie que la nôtre, et qui couvrent toute la plage de l'angle θ étudiée dans ce travail. Les seuls résultats pour le coefficient effectif de dispersion passibles d'être comparés aux nôtres, sont ceux issus du développement théorique approché réalisé par Koch et Brady [64] (sans tenir compte de la tortuosité) et les résultats numériques de Edwards et al [37] et Salles et al [101].

Il s'agit, dans le premier cas, de la détermination théorique du tenseur effectif de dispersion lors de l'écoulement bidimensionnel ou tridimensionnel d'un fluide en régime de Stokes au travers d'un arrangement spatialement périodique. L'arrangement est constitué par un réseau de sphères à très faible fraction de solide.

Dans le deuxième et troisième cas, il s'agit essentiellement de la détermination numérique du tenseur de dispersion pour des milieux périodiques bidimensionnels [37, 101] et tridimensionnels [101], lors de l'écoulement d'un fluide au travers du milieu, en régime de Stokes [101] ou gouverné par l'équation de Navier-Stokes [37]. Les arrangements géométriques de la cellule unité sont ordonnés [37, 101] ou désordonnés [101].

6.6.1-ARRANGEMENTS ORDONNÉS

En dépit du fait que les résultats théoriques obtenus par Koch et Brady [64] en 1989 ne sont valables que pour des arrangements ayant une très faible fraction de solide, on les utilise ici afin de montrer le comportement qualitatif du tenseur effectif prévu par la théorie. Koch et Brady [61] l'ont par exemple utilisé afin de comparer leurs résultats à ceux obtenus expérimentalement par Gunn et Price [45], pour un arrangement cubique de sphères avec une porosité égale à 0,48.

On l'applique donc dans ce travail au cas des arrangements en ligne avec $\varepsilon_p=0,84$ et en quinconce avec une porosité égale à 0,85. Il s'agit de notre plus faible fraction de solide.

6.6.1.1-THÉORIE DE KOCH ET BRADY

Le développement théorique est fait à partir du calcul de la partie symétrique du tenseur effectif de dispersion,

$$\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} - \text{Pe} \int_{\mathbf{V}_B} \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{F} \, dV \quad (32)$$

où Pe est le nombre de Péclet défini par $\text{Pe} = \langle \mathbf{V} \rangle L / \mathcal{D}$, \mathbf{V} est la vitesse adimensionnelle $\mathbf{V} = \mathbf{v} / \langle \mathbf{V} \rangle$, \mathbf{F} le vecteur adimensionnel $\mathbf{F} = \mathbf{f} / L$ et L la longueur de la cellule unité. On note, par rapport à l'équation (7), que la contribution due à la tortuosité n'est pas prise en compte.

On a eu l'opportunité de vérifier au chapitre 2 (§ 2.6) que la partie symétrique du tenseur de dispersion hydrodynamique (équation (32)) n'est rien d'autre que le tenseur de dispersion introduit par Brenner [19] à partir d'une approche lagrangienne:

$$\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \int_{\mathbf{V}_B} \nabla \mathbf{F} \cdot \nabla \mathbf{F}^T \, dV \quad (33)$$

Afin de pouvoir déterminer le tenseur de dispersion (équation 33), il faut connaître les solutions du problème hydrodynamique et de fermeture en \mathbf{F} . Une solution hydrodynamique approchée est fournie par Hasimoto [50], qui a résolu le problème de l'écoulement d'un fluide en régime de Stokes au travers d'un arrangement périodique de sphères ou de cylindres avec une très faible fraction de solide. La solution est fournie en termes d'un développement en série de Fourier.

On ne montre, ici, que la solution du problème bidimensionnel équivalent, c'est-à-dire la forme du tenseur effectif lors de l'écoulement au travers d'un arrangement de cylindres circulaires. La solution est obtenue à partir du problème tridimensionnel en remplaçant la force de traînée due à une sphère par celle due à un cylindre circulaire [50]. La forme exacte des particules solides n'a pas grande importance, celles-ci étant remplacées par des points sources de quantité de mouvement et l'écoulement occupe tout l'espace. Du point de vue du problème de fermeture ceci a notamment pour effet de faire disparaître les termes sources à la

surface des particules solides (équation (10)) qui en moyenne pour chaque particule isolée sont bien nuls. Il n'est donc pas étonnant, vu les simplifications adoptées, qu'au moins les termes de tortuosité disparaissent. Les conséquences de ce mépris des effets dus à la géométrie locale, d'autant plus importantes que la fraction de solide est grande, doivent d'autre part être examinées attentivement.

Koch et Brady [64] obtiennent ainsi la forme finale du tenseur effectif¹:

$$\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \frac{1}{16\pi^4} \left(\frac{4\pi}{\ln \frac{L}{r} - 1,3015} \right)^2 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{\left[\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right) \right]^2}{k^2 \left[4\pi^2 \frac{k^4}{Pe^2} + (\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \mathbf{k})^2 \right]} \quad (34)$$

où L est la longueur de la cellule unité, r le rayon du cylindre, $\langle \mathbf{V} \rangle$ la vitesse adimensionnelle moyenne de l'écoulement donnée par,

$$\langle \mathbf{V} \rangle = \cos\theta \mathbf{i} + \sin\theta \mathbf{j} \quad (35)$$

et \mathbf{k} est le vecteur adimensionnel vérifiant,

$$\mathbf{k} \cdot \vec{l}_i = n_i \quad i=1,2 \quad (36)$$

où \vec{l}_i sont les mailles de la cellule unité et n_i les "coordonnées" du centre \mathbf{x}_n des cylindres,

$$\mathbf{x}_n = n_1 \vec{l}_1 + n_2 \vec{l}_2 \quad (n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (37)$$

Avant de passer à l'application, certaines conséquences sur le comportement du tenseur effectif, calculé à l'aide de l'équation (34), peuvent être prédites [Koch et Brady, 1989].

Dans le cas où la contribution des termes convectifs à la dispersion peut être négligée ($Pe \rightarrow 0$), l'équation (34) prévoit une dépendance du

¹ Le développement détaillé est fourni dans l'annexe VIII

tenseur effectif en Pe^2 . Ce résultat est similaire à celui trouvé pour les milieux non périodiques [61]. En fait, pour les petites valeurs du nombre de Péclet, le transport du soluté est dû quasiment à la diffusion moléculaire et ceci est valable pour les milieux périodiques et non périodiques.

Pour les grands nombres de Péclet, s'il existe un vecteur \mathbf{k} tel que dans l'équation (34) $\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \mathbf{k} = 0$, c'est-à-dire si la vitesse moyenne est parallèle à l'un des axes de symétrie par translation de la cellule, le tenseur \mathbf{D}^*/\mathcal{D} varie alors proportionnellement au carré du nombre de Péclet (à la condition que le terme au numérateur de la relation (34) ne soit pas nul). Ce résultat est indépendant de la géométrie de la cellule unité, pourvu qu'elle ait une symétrie spatiale par rapport à ses deux axes. D'un point de vue mathématique, l'existence de \mathbf{k} , tel que $\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \mathbf{k} = 0$ est équivalente pour les arrangements bidimensionnels en ligne et en quinconce à ce que $\tan \theta$ (où θ est l'angle $(Ox, \langle \mathbf{V} \rangle)$) soit rationnel. Le comportement de la série (34) n'est sans doute pas très raisonnable d'un point de vue physique. À titre d'exemple les figures 6.64 et 6.65 comparent pour les deux arrangements (en ligne et en quinconce), les résultats pour $\theta = 22,5^\circ$, $\tan \theta = \sqrt{2} - 1 \approx 0,41$ et $\theta \approx 21,8^\circ$, $\tan \theta = 0,4$. On vérifie que pour des valeurs très élevées du nombre de Péclet, les résultats présentent des comportements différents. On voit mal comment une différence de moins de 1° pourrait physiquement mener à des telles variations.

Finalement, si le produit scalaire $\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \mathbf{k}$ est différent de zéro pour tous les vecteurs \mathbf{k} , les deux coefficients (longitudinal et transversal) sont indépendants du nombre de Péclet, ceci pour des valeurs très élevées de ce dernier.

6.6.1.2-COMPARAISON AVEC LA THÉORIE DE KOCH ET BRADY

Tout d'abord on présente les valeurs théoriques et numériques des deux coefficients (longitudinal et transversal) calculées pour les angles $\theta = 0^\circ$ et 45° pour lesquels on s'attend, d'après la discussion précédente, à une dépendance en Pe^2 du tenseur effectif de dispersion aux grandes valeurs du nombre de Péclet. De manière à rester du point de vue hydrodynamique dans le régime de Stokes, nos résultats ont été calculés pour un nombre de Schmidt égal à 1000.

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $\epsilon=0,84$

Koch et Brady

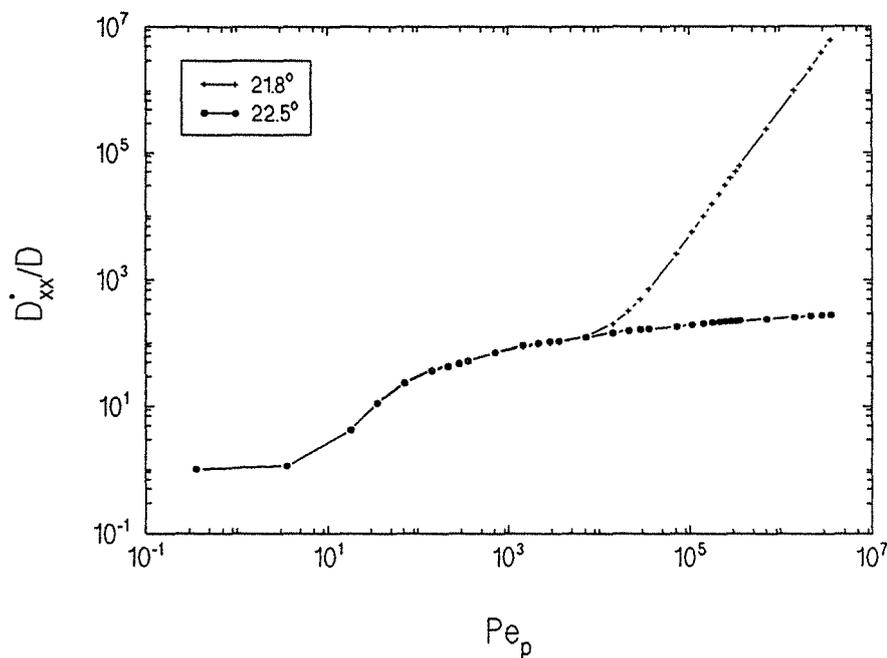


Figure 6.64 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - $\epsilon=0,85$

Koch et Brady

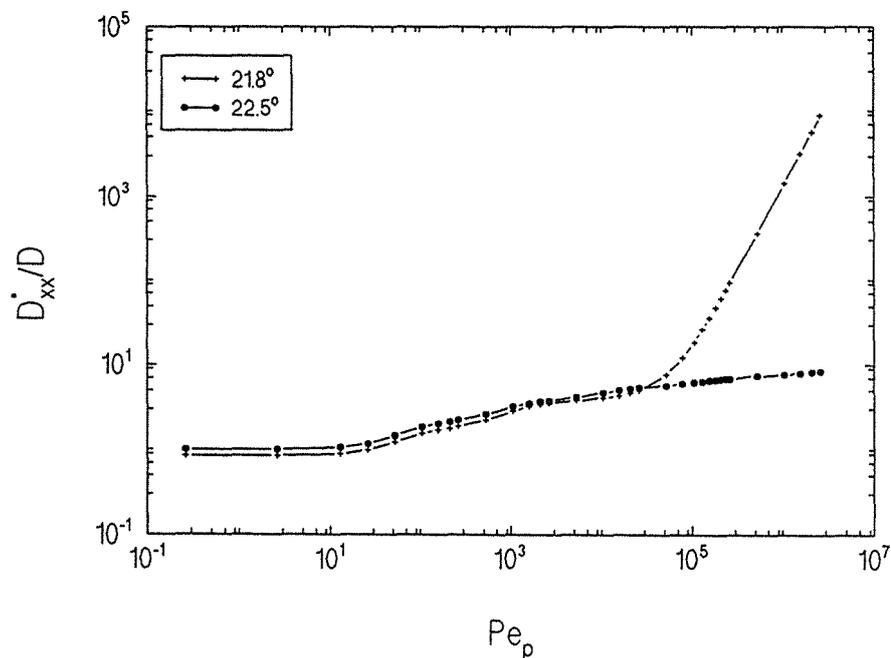


Figure 6.65 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,85$

Les résultats théoriques pour le coefficient longitudinal sont montrés pour l'arrangement en ligne sur la figure 6.66 et sur la figure 6.67 pour l'arrangement en quinconce.

On peut constater que pour l'arrangement en ligne, les valeurs du coefficient longitudinal obtenus pour $\theta=0^\circ$ sont supérieures à celles calculées pour $\theta=45^\circ$. Par contre, dans le cas de l'arrangement en quinconce, cette tendance est inversée et les valeurs les plus grandes du coefficient longitudinal sont obtenues pour $\theta=45^\circ$.

Les résultats numériques (figures 6.68 et 6.69) présentent le même type de comportement qualitatif. Sur le plan quantitatif, nos résultats possèdent un taux de croissance plus faible, à l'exception du cas $\theta=0^\circ$ pour l'arrangement en ligne. Cette constatation ne surprend pas puisque nos résultats varient en Pe_p^m où m est inférieur à 2, tandis que les coefficients longitudinaux issus du calcul théorique varient en Pe_p^2 .

Sur le tableau 6.20 on montre les valeurs des pentes obtenues cette fois-ci pour l'arrangement en ligne avec une porosité égale à 0,84.

ε_B	θ	m
		Sc=1000
0,84	0°	1,99
	45°	1,87

Tableau 6.20 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$

On remarque que par rapport aux résultats obtenus pour des porosités plus faibles ($\varepsilon_B=0,36$ et $0,64$), la pente pour $\theta=0^\circ$ est la plus grande pour la porosité $\varepsilon_B=0,84$ et pratiquement égale à 2.

De même, le tableau 6.21 présente les résultats obtenus pour l'arrangement en quinconce. Les pentes sont calculées de façon analogue à celles de l'arrangement en ligne, à condition d'inverser les conditions utilisées pour les angles $\theta=0^\circ$ et 45° .

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $\epsilon = 0,84$

Koch et Brady

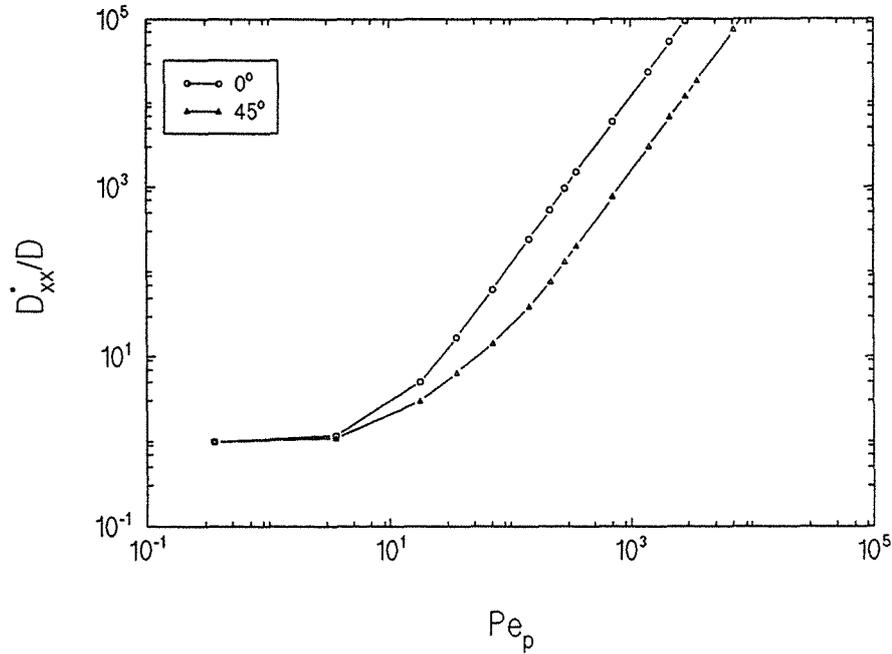


Figure 6.66 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta} = 0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - $\epsilon = 0,85$

Koch et Brady

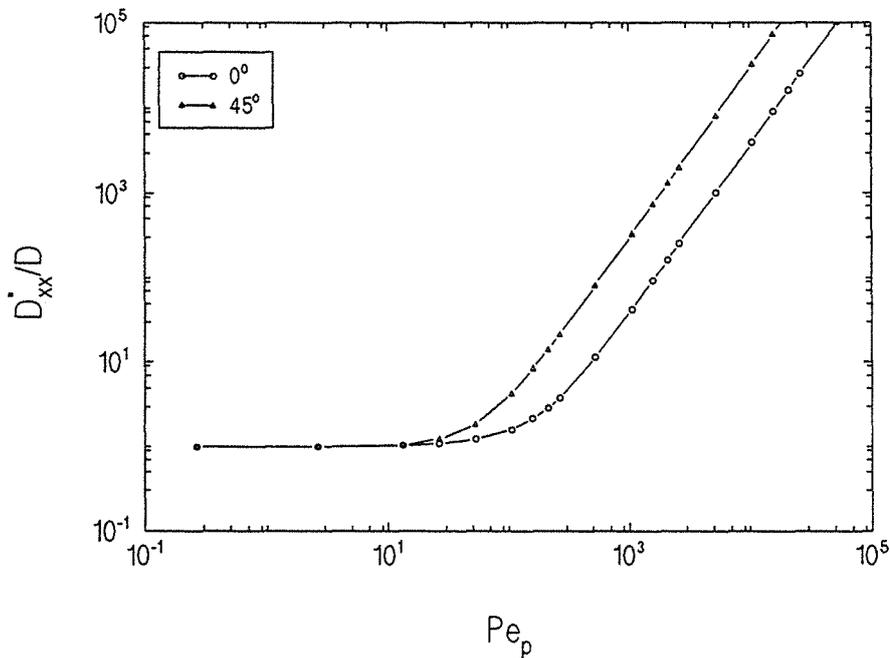


Figure 6.67 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_{\beta} = 0,85$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,84$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

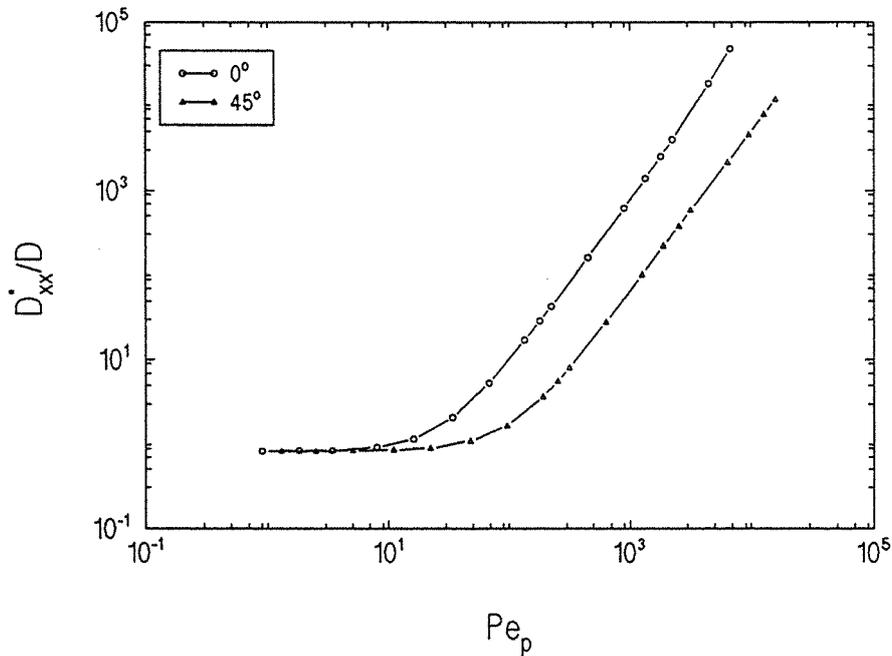


Figure 6.68 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,85$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

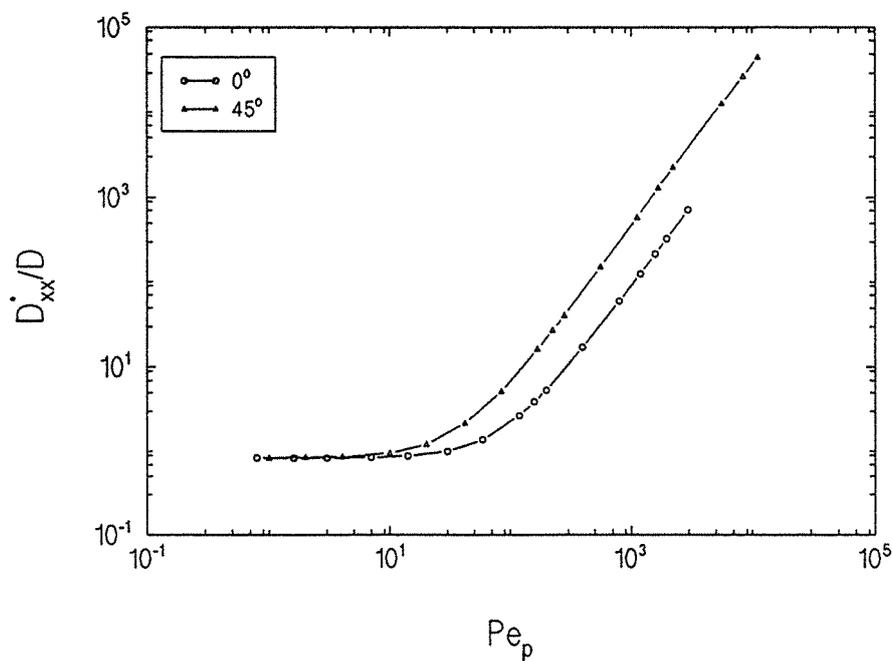


Figure 6.69 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B = 0,85$

ε_B	θ	m
		Sc=1 000
0,85	0°	1,86
	45°	1,91

Tableau 6.21 - Dépendance en $Pe_p - D_{xx}^*/D$

En ce qui concerne le coefficient transversal, les résultats théoriques sont présentés sur la figure 6.70 pour l'arrangement en ligne et sur la figure 6.71 pour l'arrangement en quinconce.

On note que pour l'arrangement en ligne, la théorie prévoit pour les grands nombres de Péclet que le coefficient effectif transversal tende vers une valeur limite 3,5 pour $\theta=0^\circ$ et 8,1 pour $\theta=45^\circ$ (cas signalé où $\langle V \rangle \cdot k=0$ avec un numérateur nul).

Nos résultats pour l'arrangement en ligne (figure 6.72) présentent d'abord un comportement qualitatif similaire à celui prévu par la théorie. Cependant, au fur et à mesure que le nombre de Péclet particulière augmente, on ne peut pas dire avec certitude s'ils tendent vers une valeur asymptotique. Nos résultats pour $\theta=0^\circ$ sont aussi inférieurs à ceux obtenus pour $\theta=45^\circ$ et on ne peut pas non plus, prédire le comportement pour des nombres de Péclet Pe_p très élevés. On est plutôt enclin à dire, compte tenu de l'ensemble de nos résultats ($\varepsilon_B=0,36, 0,64$ et $0,84$) qu'au moins pour $\theta=45^\circ$ on n'a pas un comportement de type asymptotique.

Pour l'arrangement en quinconce, la théorie fournit le même type de comportement asymptotique que celui de l'arrangement en ligne. La différence est que les valeurs les plus grandes du coefficient transversal sont obtenues pour $\theta=0^\circ$ et l'ensemble des résultats est inférieur au cas de l'arrangement en ligne.

Dans le cas de l'arrangement en quinconce (figure 6.73), nos valeurs calculées pour $\theta=0^\circ$ sont les plus grandes et on n'a guère de variations pour le coefficient transversal pour $\theta=45^\circ$. Les valeurs calculées sont supérieures à celles prévues par la théorie. On voit clairement que pour $\theta=45^\circ$ on ne retrouve pas le comportement asymptotique prévu par la théorie.

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $\epsilon = 0,84$

Koch et Brady

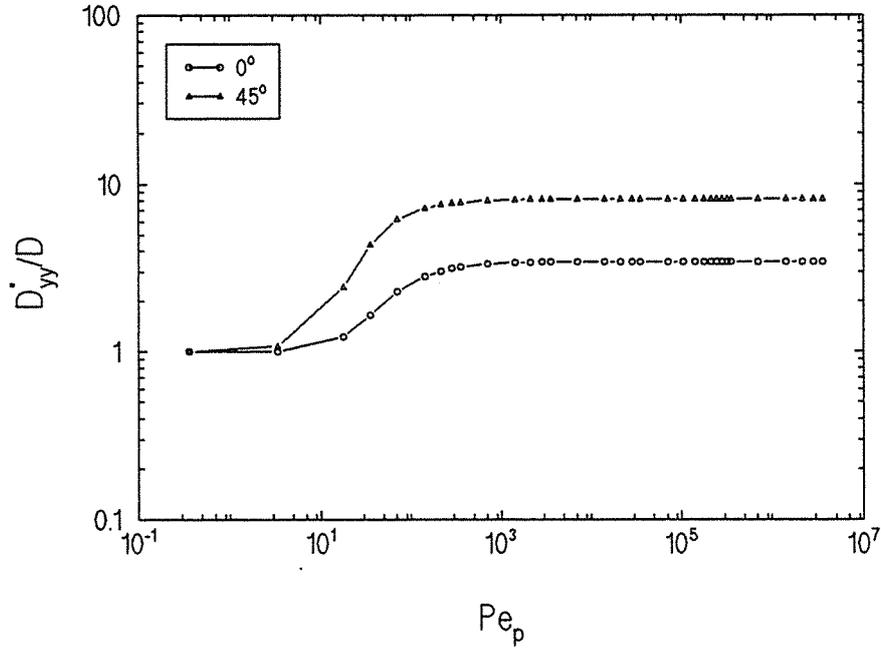


Figure 6.70 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - $\epsilon = 0,85$

Koch et Brady

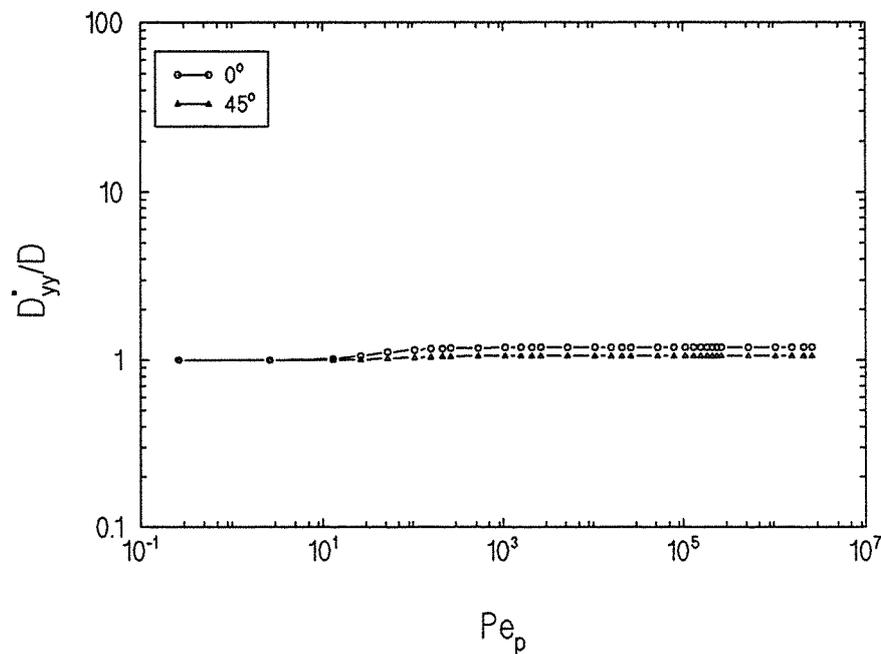


Figure 6.71 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,85$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - ε= 0,84

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

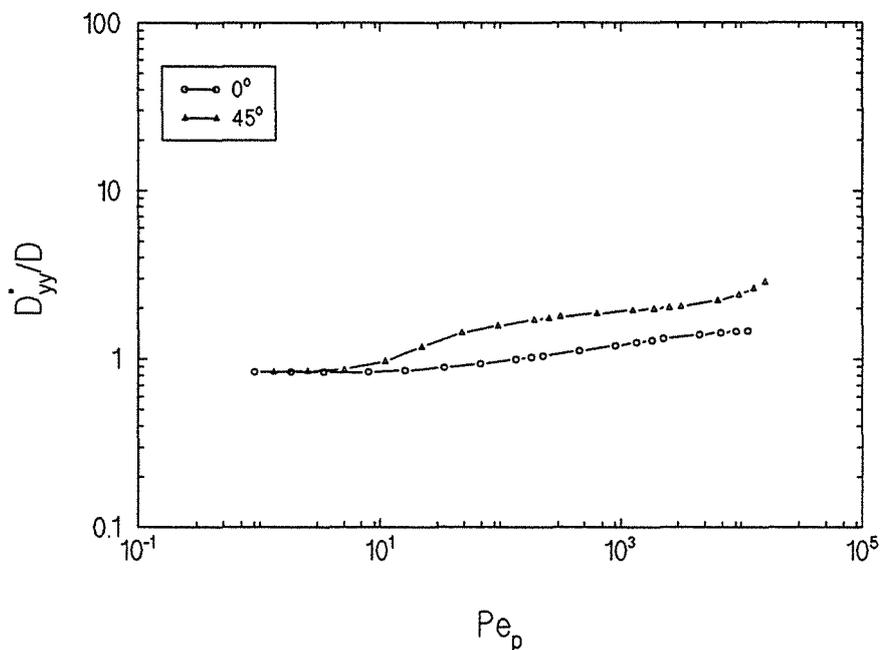


Figure 6.72 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - ε= 0,85

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

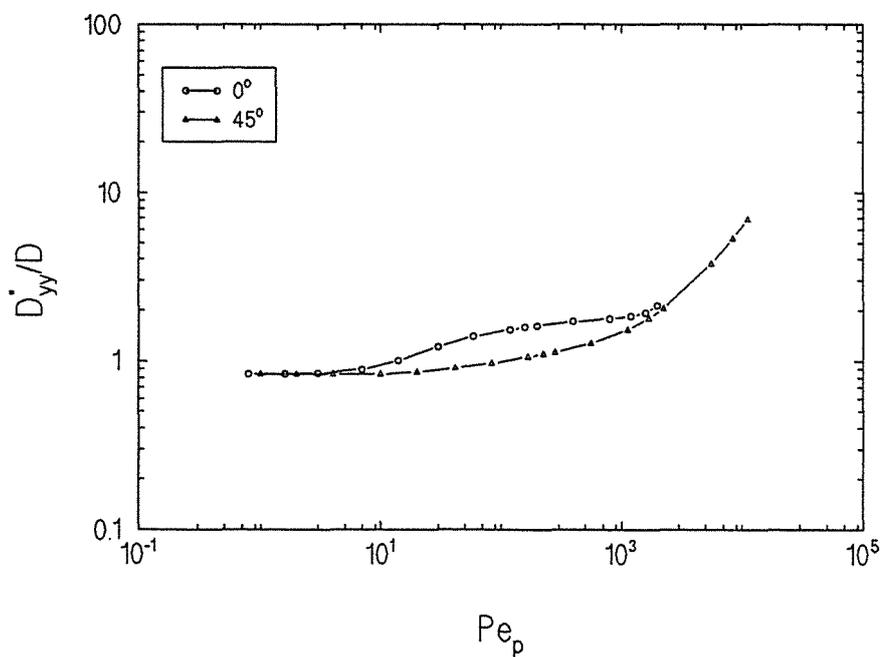


Figure 6.73 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B=0,85$

Ensuite on passe à la présentation de l'ensemble des résultats obtenus pour les autres valeurs de l'angle θ ($\theta=5,625^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$ et $33,75^\circ$). Les résultats sont montrés sur les figures 6.74-75 (théoriques) et sur les figures 6.76-77 (numériques).

On commence par montrer les résultats théoriques pour le coefficient longitudinal calculés pour l'arrangement en ligne. La figure 6.74 montre les résultats déterminés à l'aide de l'équation (34) pour les angles $\theta=5,625^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$ et $33,75^\circ$. On observe que pour des nombres de Péclet pas trop élevés, les courbes suivent de près la courbe $\theta=0^\circ$. C'est notamment le cas pour les plus petites valeurs de l'angle θ . Au fur et à mesure que le nombre de Péclet augmente, ces courbes dévient de la courbe $\theta=0^\circ$. Évidemment, plus l'angle θ est petit, plus grande est la valeur du nombre de Péclet pour lequel la séparation a lieu. Une deuxième zone est repérée, comprise entre $\sim 10^2 < Pe_p < \sim 10^3$, où l'on a une croissance très lente des coefficients. C'est surtout le cas des courbes $\theta=5,625^\circ$ et $\theta=22,5^\circ$. Pour $Pe_p > 10^3$, on observe que les valeurs du coefficient longitudinal ne changent guère pour $\theta=5,625^\circ$ et $\theta=22,5^\circ$, et que les courbes $\theta=11,25^\circ$ et $33,75^\circ$ connaissent à nouveau une croissance rapide. Pour des valeurs du nombre de Péclet encore plus grandes ($Pe_p > 10^5$) que celles montrées sur la figure 6.74, on peut vérifier que les courbes $\theta=11,25^\circ$ et $33,75^\circ$ atteignent une valeur constante.

Si l'on regarde maintenant les résultats obtenus pour l'arrangement en quinconce (figure 6.75), on aperçoit un comportement qui est un peu différent de celui présenté par l'arrangement en ligne. Tout d'abord, on remarque que les courbes sont moins écartées les unes des autres. Dans le cas de l'arrangement en quinconce, c'est la courbe $\theta=11,25^\circ$ qui présente les plus grandes valeurs du coefficient longitudinal (au lieu de la courbe $\theta=33,75^\circ$ pour l'arrangement en ligne) pour des valeurs très élevées du nombre de Péclet particulière. Enfin, en ce qui concerne le comportement de l'ensemble, on note aussi l'existence de deux zones de transition et l'allure des courbes est la même que celle présentée pour l'arrangement en ligne.

Comparés aux résultats théoriques, on peut dire que nos résultats numériques ne présentent pas le même type de comportement. Si l'on considère d'abord l'arrangement en ligne (figure 6.76), on remarque que jusqu'à $Pe_p \approx 10^2$ on a à peu près le même type de comportement. Au-delà de

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $\epsilon=0,84$

Koch et Brady

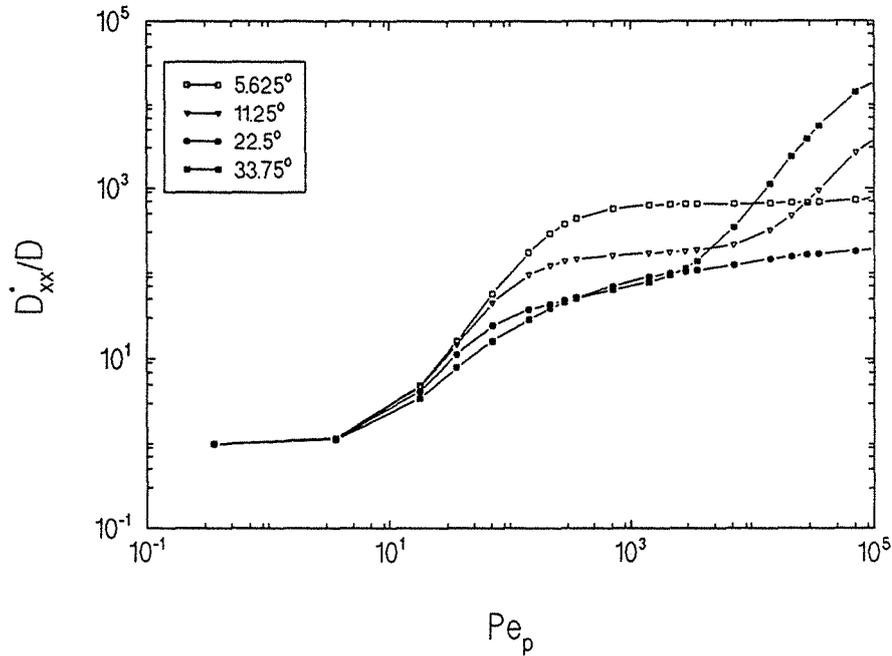


Figure 6.74 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - $\epsilon=0,85$

Koch et Brady

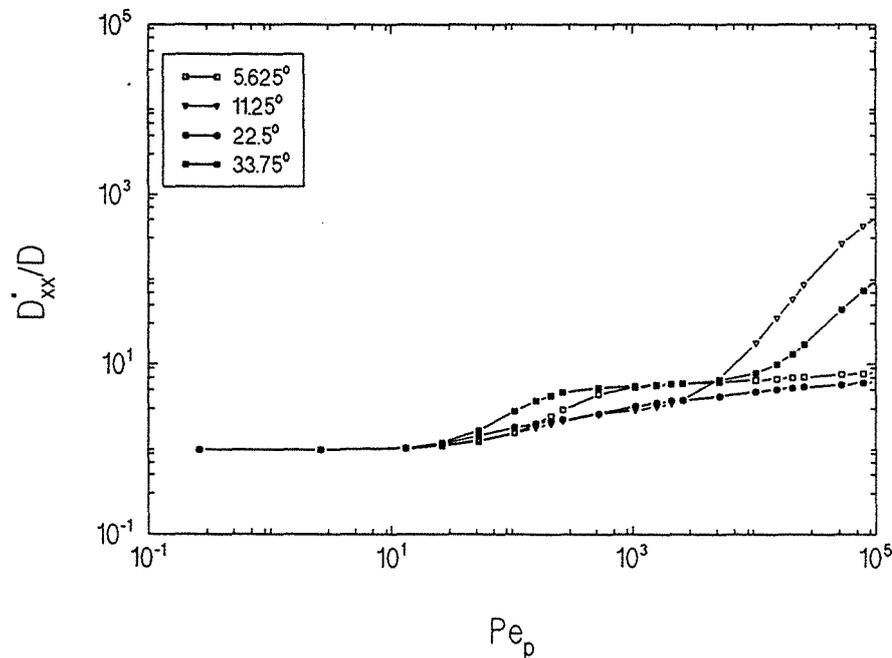


Figure 6.75 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,85$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc= 1000 - \epsilon= 0,84$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

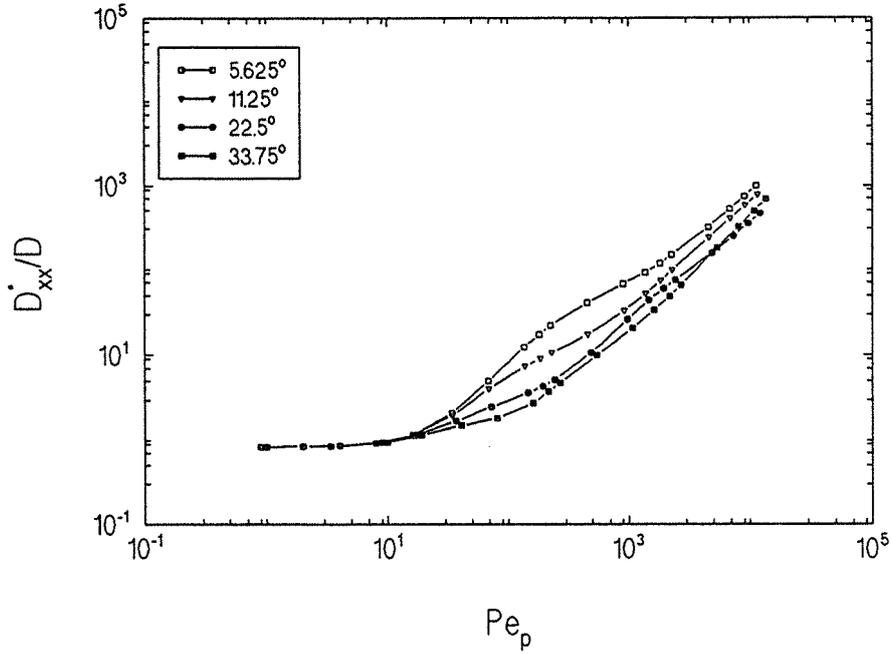


Figure 6.76 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - $Sc= 1000 - \epsilon= 0,85$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

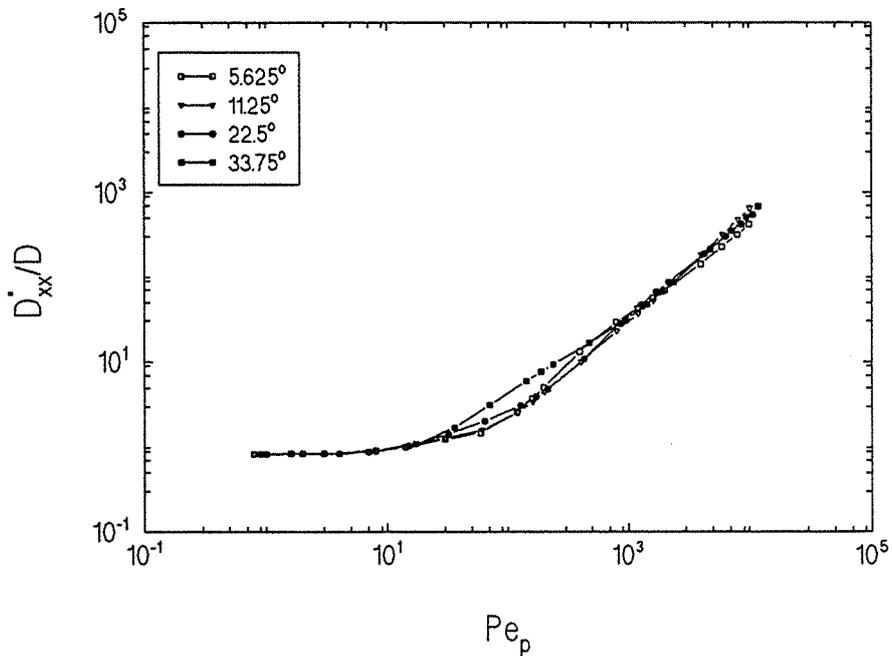


Figure 6.77 - Coefficient effectif de dispersion $D_{xx}^*/D - \epsilon_B=0,85$

cette valeur, toutes nos courbes tendent vers le même type de comportement. Autrement dit, elles ont pour $\sim 10^3 < Pe_p < 10^4$ une croissance avec une pente m pratiquement constante. Par ailleurs, on note que pour $\theta \cong 22,5^\circ$ et pour $Pe_p > 10^3$, la courbe semble s'infléchir.

Quant à l'arrangement en quinconce (figure 6.77), le comportement n'est pas non plus similaire à la prédiction théorique. On remarque néanmoins que les courbes se trouvent plus proches les unes des autres, par rapport à l'arrangement en ligne, ce qui est en accord avec les résultats théoriques. Nos résultats présentent aussi un comportement similaire avec la prédiction théorique jusqu'à $Pe_p \cong 10^2$. Pour des valeurs plus élevées du nombre de Péclet particulière, nos résultats diffèrent de la théorie car les courbes ne tendent pas non plus vers une valeur asymptotique. Comme dans le cas de l'arrangement en ligne, pour $\sim 10^3 < Pe_p < 10^4$, on a une croissance avec une pente m pratiquement constante.

Examinons maintenant le cas des coefficients transversaux. Pratiquement, pour les coefficients transversaux, les résultats théoriques obtenus pour les deux types d'arrangement (figures 6.78 et 6.79) se ressemblent qualitativement. Toutes les courbes tendent vers une valeur asymptotique (qui dépend de la valeur θ) ~ 10 pour l'arrangement en ligne et $\sim 1,2$ pour celui en quinconce). La différence entre le cas en ligne et en quinconce est que pour des valeurs du nombre de Péclet intermédiaires, les courbes correspondant aux plus grandes valeurs de θ ($22,5^\circ$ et $33,75^\circ$) sont au-dessus des autres courbes pour l'arrangement en ligne, tandis que pour l'arrangement en quinconce cette tendance est inversée.

En ce qui concerne l'arrangement en ligne, nos résultats (figure 6.80) sembleraient être en accord qualitatif avec les résultats théoriques. Cependant les derniers points calculés ($\theta = 22,5^\circ$ et $33,75^\circ$) laissent entrevoir une augmentation du coefficient effectif avec le nombre Péclet, liée vraisemblablement au changement de régime hydrodynamique (que le modèle de Koch et Brady ne prend pas en compte).

Il en est autrement des résultats obtenus pour l'arrangement en quinconce (figure 6.81). Pour des nombres de Péclet particuliers ne dépassant pas 100, les résultats ne sont pas trop différents de ceux prévus par la théorie. Néanmoins pour $Pe_p > \sim 10^2$, nos résultats, contrairement aux théoriques, continuent à croître avec une pente d'autant plus forte que l'angle θ est grand. Elle atteint, dans le cas $\theta = 33,75^\circ$, une valeur proche

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $\epsilon = 0,84$

Koch et Brady

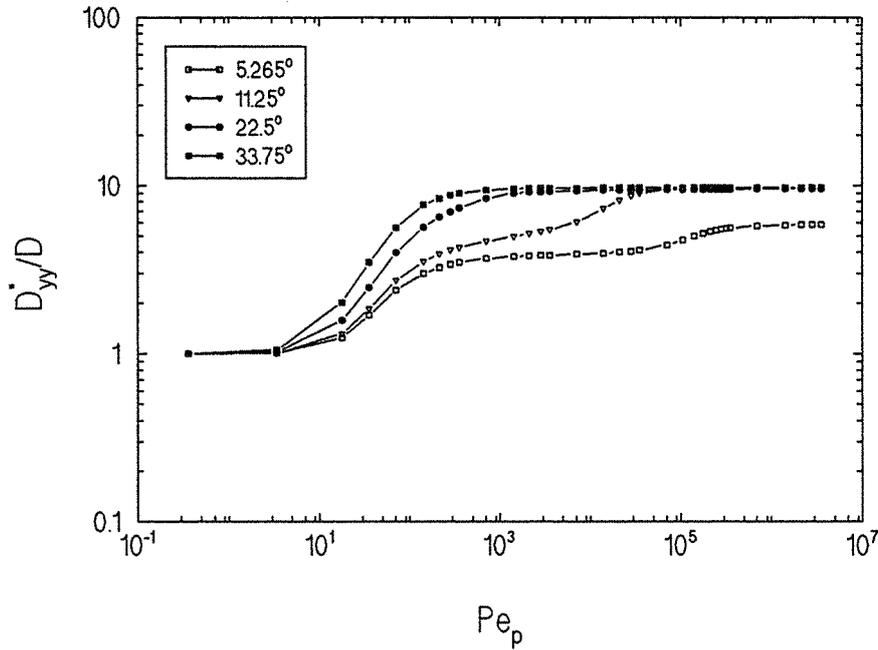


Figure 6.78 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - $\epsilon = 0,85$

Koch et Brady

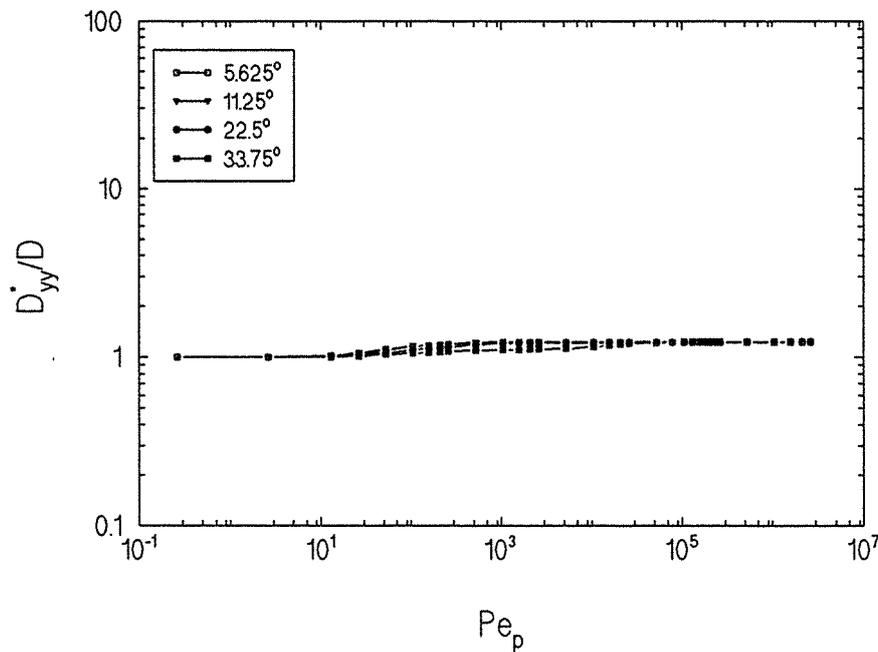


Figure 6.79 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,85$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,84$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

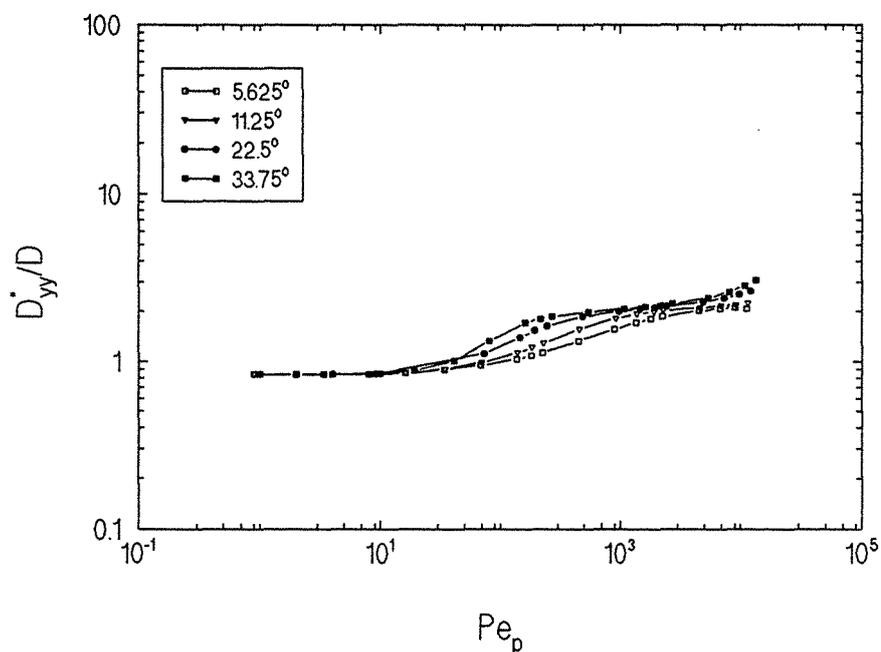


Figure 6.80 - Coefficients effectifs de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,84$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,85$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

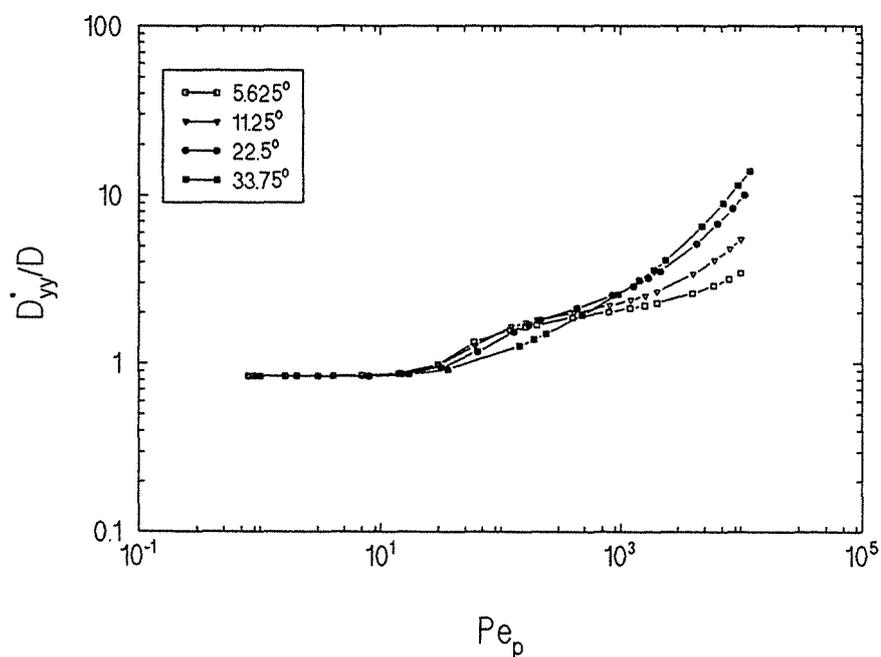


Figure 6.81 - Coefficient effectif de dispersion $D_{yy}^*/D - \epsilon_B = 0,85$

de 0,8 pour $Pe_p > 10^3$. Comme déjà mentionné lors de la présentation des coefficients longitudinaux, une telle différence résulte certainement de l'influence de l'interaction entre particules sur l'hydrodynamique de l'écoulement. La présence du cylindre au milieu de la cellule unité assure l'existence d'un transport latéral de fluide non négligeable.

En conclusion, la théorie approchée de Koch et Brady [64] contient des hypothèses trop sévères pour représenter de façon satisfaisante la réalité: la dépendance des coefficients longitudinaux en Pe^2 suppose en particulier des fractions de solide très faibles; sinon, l'interaction entre les particules ne peut plus être négligée. Cette théorie fournit donc le comportement limite du système quand la porosité tend vers l'unité.

6.6.1.3-COMPARAISON AVEC D'AUTRES RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Malgré le fait que les arrangements géométriques ordonnés utilisés par Edwards et al [37] et Salles et al [101] sont constitués par des cylindres circulaires, pour des faibles valeurs de la fraction de solide une comparaison au moins qualitative est possible, puisque la forme des particules semble avoir moins d'influence sur l'hydrodynamique lorsque la porosité ε_B est grande. Ces deux travaux, sont à notre connaissance les seuls à fournir des résultats numériques complets pour le tenseur de dispersion pour des grandes valeurs de la porosité.

Nos résultats sont comparés pour deux types d'arrangement (en ligne et en quinconce) et pour deux porosités ($\varepsilon_B = 0,6$ et $0,8$). On ne considère que les résultats obtenus pour l'écoulement en régime de Stokes.

Sur la figure 6.82 sont montrés les résultats pour les coefficients effectifs longitudinal et transversal pour l'arrangement en ligne avec une porosité égale à $\varepsilon_B = 0,6$ (Edwards et al, 1991 et Salles et al, 1993)² et $\varepsilon_B = 0,64$ (nos résultats). Les résultats ont été obtenus pour un vecteur vitesse moyenne parallèle à l'axe OX de la cellule unité. On peut dire que nos résultats pour le coefficient effectif longitudinal sont en bon accord

²Le rapport entre le nombre de Péclet particulaire (Pe_p) et celui utilisé par Edwards et al [37] et Salles et al [101] (Pe) est le suivant:

$$Pe_p = \frac{3}{2} Pe \frac{\varepsilon_B}{1 - \varepsilon_B}.$$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc= 1000$ - $\epsilon= 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

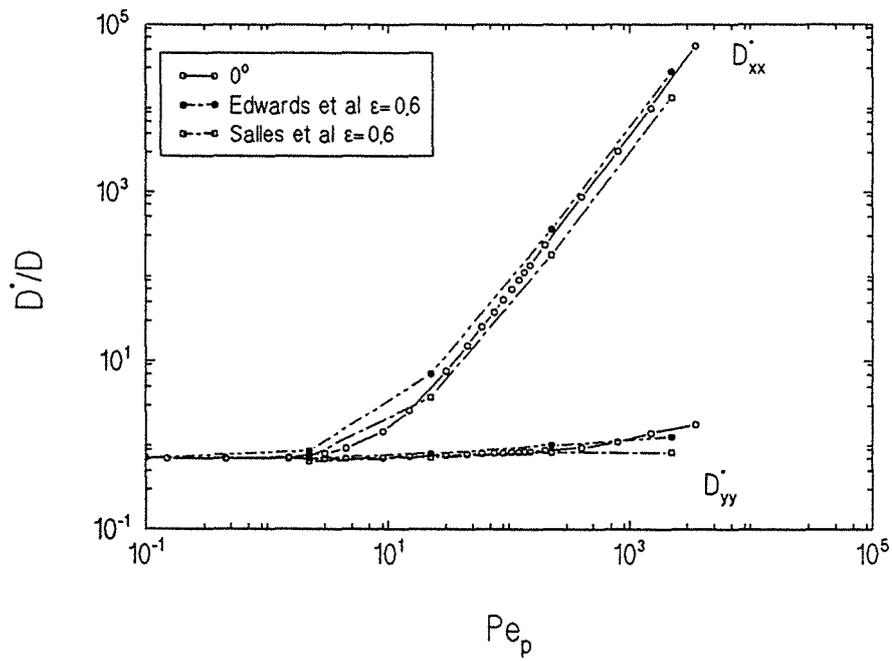


Figure 6.82 - Comparaison du tenseur de dispersion

avec les résultats de Edwards et al [37] et Salles et al [101] et sont compris entre les valeurs de ces deux travaux.

Quant au coefficient effectif transversal, nos valeurs vérifient bien ceux des deux autres travaux jusqu'à un nombre de Péclet particulaire Pe_p de l'ordre de 10^2 . Cependant, nos résultats sont légèrement supérieurs pour un nombre de Péclet particulaire $Pe_p > 10^3$.

En ce qui concerne encore l'arrangement en ligne avec $\varepsilon_B = 0,6$, Salles et al [101] ont calculé le tenseur de dispersion pour différentes valeurs de l'angle θ compris entre 0° et 45° .

On montre sur les figures 6.83 et 6.84 les résultats calculés pour le coefficient effectif longitudinal dans la direction du vecteur vitesse moyenne de l'écoulement, ceci pour différentes valeurs de l'angle θ .

Sur la figure 6.83, on compare nos résultats ($\varepsilon_B = 0,64$) à ceux de Salles et al [101] ($\varepsilon_B = 0,6$) pour un nombre de Péclet particulaire $Pe_p \approx 224$ ($Pe = 100$), les résultats pour $Pe_p \approx 2241$ sont montrés sur la figure 6.84.

On peut dire que nos résultats sont en accord meilleur que qualitatif avec les résultats de Salles et al [101]. Les mêmes tendances sont retrouvées dans les deux études.

Les courbes correspondantes sont montrées sur les figures 6.85 et 6.86 pour le coefficient effectif transversal. Encore une fois, nos résultats sont en très bon accord avec les résultats de Salles et al [101]. Cette constatation vient renforcer nos conclusions (§ 6.6.1.2) sur la théorie approchée de Koch et Brady [64].

Une dernière comparaison des résultats pour l'arrangement en ligne est montrée sur la figure 6.87 pour une porosité $\varepsilon_B = 0,84$ (nos résultats) et $\varepsilon_B = 0,8$ (Edwards et al, 1991; Salles et al, 1993).

Nos résultats pour le coefficient effectif longitudinal ont une pente $m = 1,99$ qui est légèrement supérieure à celle des résultats de Salles et al [101]³ ($m = 1,97$) et plus grande que celle trouvée par Edwards et al [37] ($m = 1,734$). Comme nos résultats ont été calculés pour une porosité plus élevée, une pente m plus proche de la valeur 2 semble correcte.

En ce qui concerne le coefficient effectif transversal, les résultats

³ Les valeurs montrées sur la figure sont obtenues par interpolation graphique sur la figure n° 7 du travail de Salles et al [101].

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc=1000$ - $\epsilon=0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

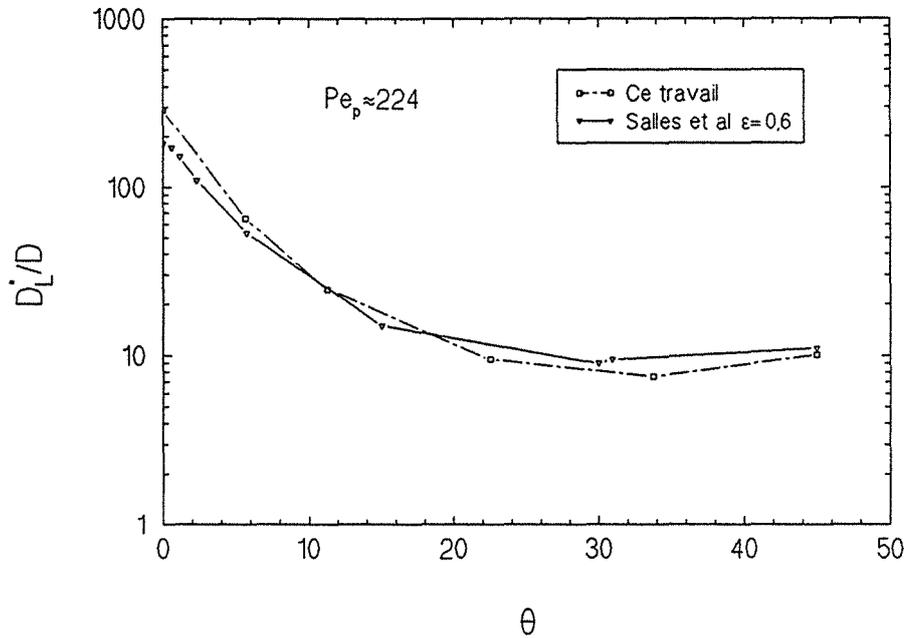


Figure 6.83 - Variation de D_L^*/D en fonction de l'angle θ

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc=1000$ - $\epsilon=0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

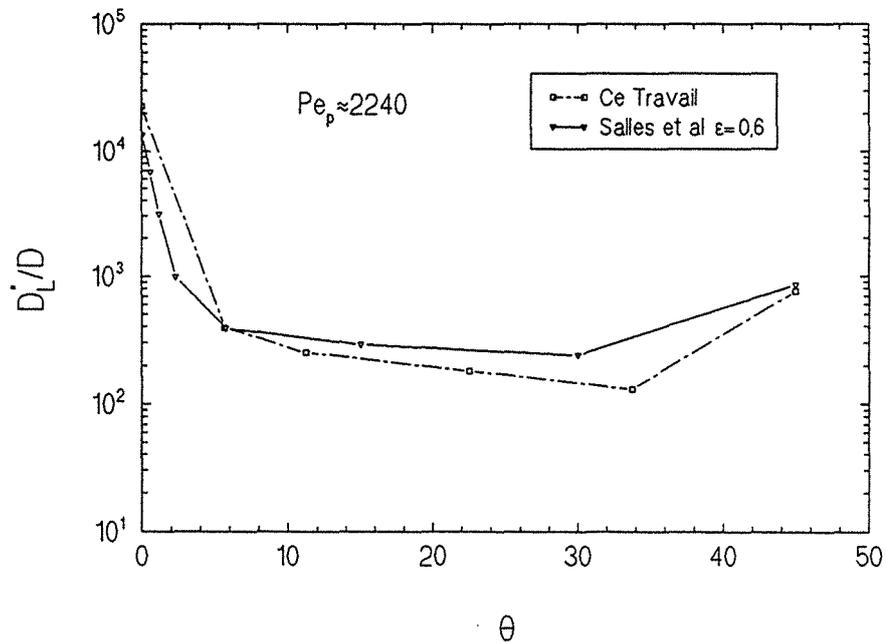


Figure 6.84 - Variation de D_L^*/D en fonction de l'angle θ

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc=1000$ - $\epsilon=0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

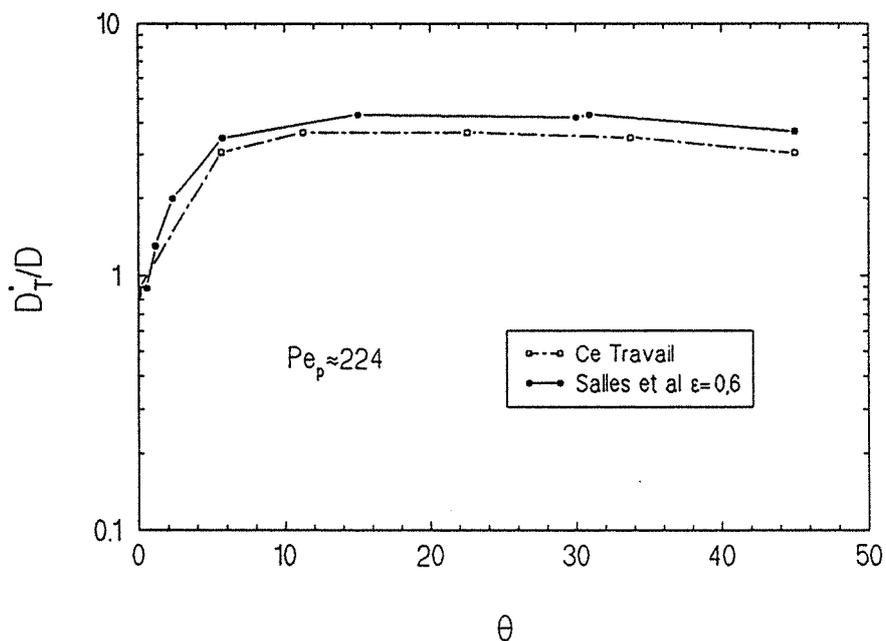


Figure 6.85 - Variation de D_T^*/D en fonction de l'angle θ

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc=1000$ - $\epsilon=0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

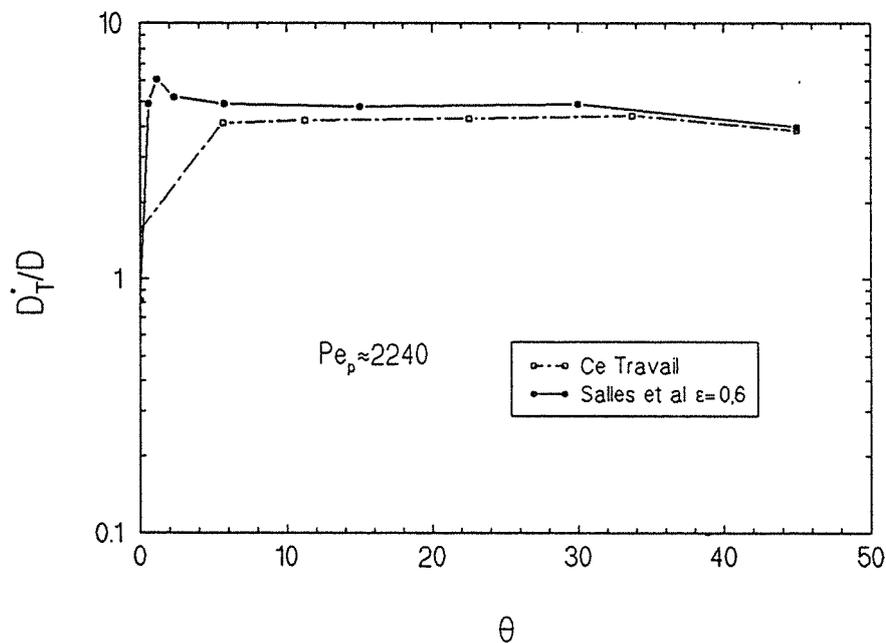


Figure 6.86 - Variation de D_T^*/D en fonction de l'angle θ

des trois travaux sont pratiquement identiques.

Finalement on traite le cas de l'arrangement en quinconce pour $\varepsilon_B=0,6$ (Edwards et al [37] et Salles et al [101]) et $\varepsilon_B=0,64$ (ce travail). Les résultats de Salles et al [101] correspondent en fait à ceux calculés pour l'arrangement en ligne avec un angle $\theta=45^\circ$. Pour un arrangement de cylindres circulaires, ce cas est équivalent à un arrangement en quinconce pour un angle $\theta=0^\circ$.

Les résultats pour les deux coefficients (longitudinal et transversal) sont montrés sur la figure 6.88. En dépit de la différence de géométrie des particules, nos résultats sont encore en très bon accord qualitatif et quantitatif avec les résultats de Salles et al [101], ceci pour les deux coefficients effectifs. Néanmoins, malgré le bon accord obtenu pour le coefficient transversal, les résultats de Edwards et al [37] pour le coefficient longitudinal sont nettement supérieures aux nôtres et par conséquent à ceux de Salles et al [101].

Il est intéressant d'observer que pour les trois travaux on a, notamment pour $\sim 2 < Pe_p < \sim 70$, le coefficient effectif transversal qui est plus grand que le coefficient longitudinal. Une très bonne concordance est à remarquer pour les trois travaux en ce qui concerne le coefficient effectif transversal.

On peut conclure en disant qu'à part pour l'arrangement en quinconce pour les résultats de Edwards et al [37] concernant le coefficient longitudinal, nos résultats sont remarquablement en accord plus que qualitatif avec les travaux de Edwards et al [37] et Salles et al [101].

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc= 1000$ - $\epsilon= 0,84$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

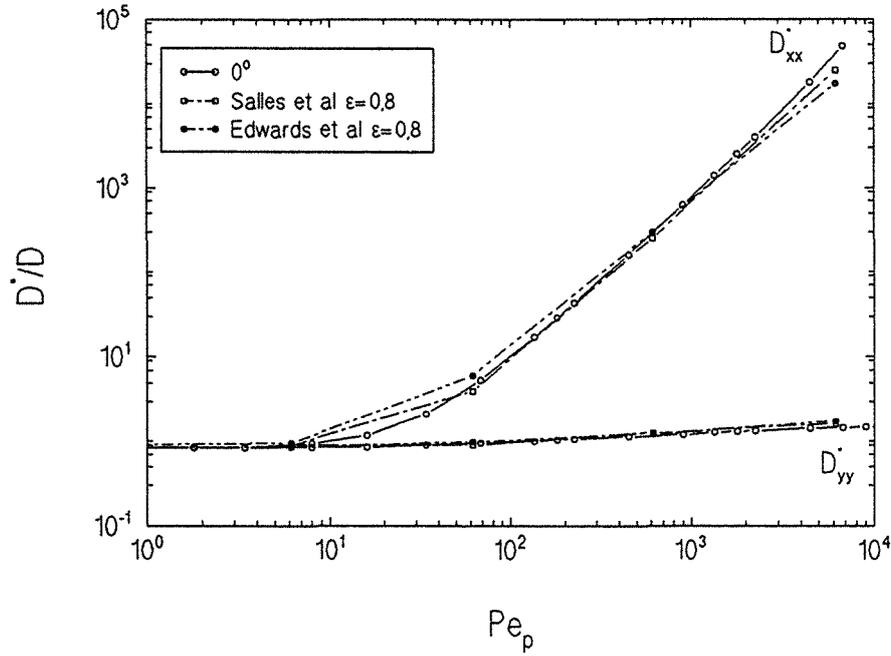


Figure 6.87 - Comparaison du tenseur de dispersion

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Quinconce - $Sc= 1000$ - $\epsilon= 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

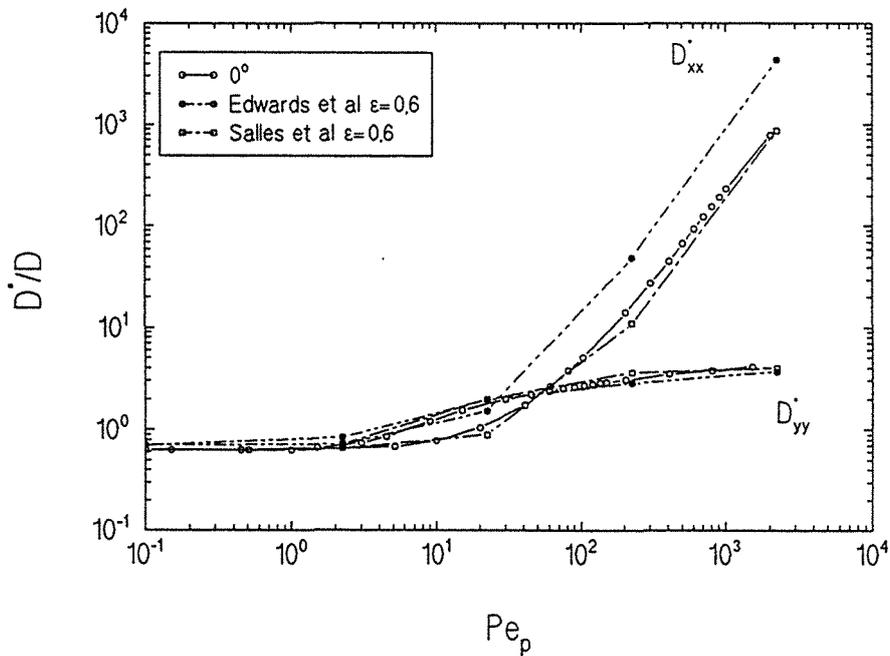


Figure 6.88 - Comparaison du tenseur de dispersion

6.6.2-COMPARAISON AVEC LES MILIEUX RÉELS

Afin de pouvoir comparer nos résultats (et surtout ceux pour les milieux désordonnés) avec les milieux réels on utilise comme point de départ les différents régimes de mélange introduits par Pfannkuch [85] (paragraphe 1.9.8) pour un milieu poreux non-consolidé. L'auteur distingue 5 régimes de mélange pour la dispersion d'un soluté dans un milieu poreux. La figure 6.89 présente les différents régimes sur un schéma ayant pour ordonnée $D^*/(\mathcal{D}Pe)$ et le nombre de Péclet Pe comme abscisse. D'une façon générale, on peut essayer de représenter les différents régimes à l'aide de l'équation,

$$\left(\frac{D^*}{\mathcal{D}} \right) \frac{1}{Pe} = \frac{B}{Pe} + A Pe^{(m-1)} \quad (38)$$

où A , B et m sont des constantes. Les différents types de régimes de mélange existent pour les deux coefficients (longitudinal et transversal).

6.6.2.1-ANALYSE DE PFANNKUCH

Le régime I est celui de la diffusion moléculaire pure, donc $A=0$ dans l'équation (38) et D^*/\mathcal{D} est égal à une constante. Ce régime existe lorsque la vitesse moyenne de l'écoulement est très petite et le seul mécanisme responsable de la dispersion est la diffusion moléculaire. Il est caractérisé sur la figure 6.82 par une droite de pente -1. Le régime II est un régime de superposition des effets, c'est-à-dire que les effets dus à la diffusion moléculaire et à la dispersion hydrodynamique sont du même ordre de grandeur et leurs effets additifs. De toute évidence, on a pour ce régime $m < 1$. Le troisième régime est celui où la contribution de la dispersion hydrodynamique est prédominante, mais où la contribution due à la diffusion moléculaire ne peut être négligée. Il existe une interférence entre les deux mécanismes et on a pour les milieux réels $1 < m \leq 1,2$. Le quatrième régime est celui de la dispersion hydrodynamique pure, les effets dus à la diffusion moléculaire peuvent être négligés devant ceux dus à la dispersion hydrodynamique. Ce régime est caractérisé par un exposant $m=1$, donc par une valeur constante de l'ordonnée sur la figure 6.82. Le régime V

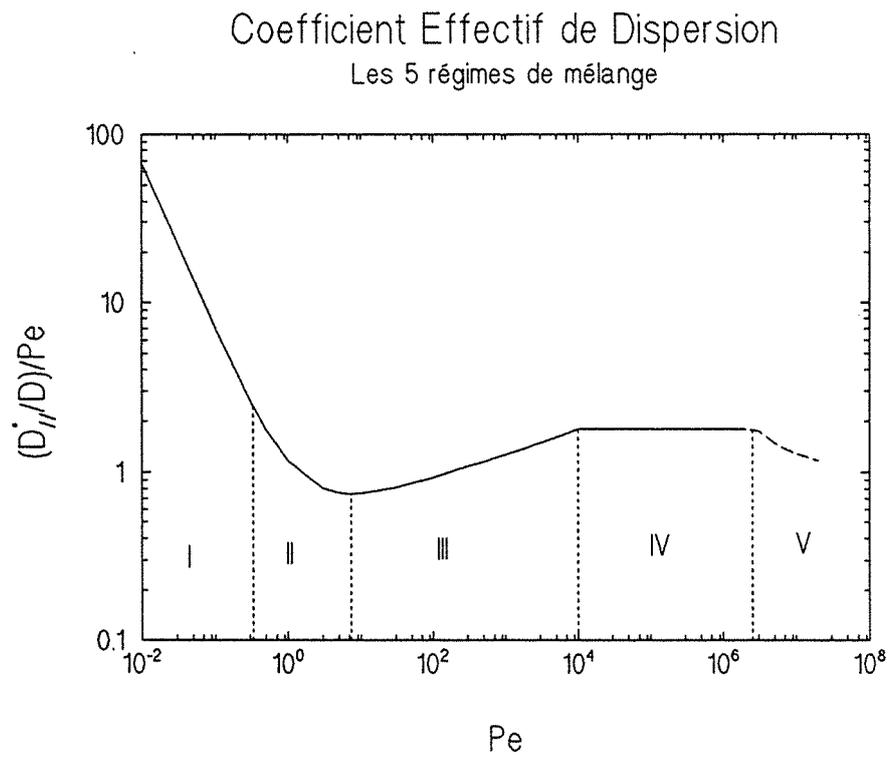


Figure 6.89 - Les différents régimes de mélange

est aussi un régime de dispersion hydrodynamique pure, mais les effets d'inertie deviennent très importants.

6.6.2.2-MILIEUX ORDONNÉS

Après cette description des cinq régimes de mélange introduits par Pfannkuch [85], on va tenter d'analyser nos résultats numériques à partir de ces critères. Comme il s'agit d'une confrontation avec l'expérience, on a choisi de travailler en terme de coefficient longitudinal et transversal projetés dans la direction du vecteur vitesse moyenne de l'écoulement et dans la direction orthogonale.

6.6.2.2.1-ARRANGEMENT EN LIGNE

Le premier cas à être traité est celui de l'arrangement en ligne avec une porosité égale à 0,36 et 0,64. Les résultats des deux coefficients pour les deux porosités sont montrés sur les figures 6.90 à 6.93. Comme le même type de comportement est retrouvé pour les deux porosités, on se limitera à une seule analyse.

Tout d'abord on va considérer le cas du coefficient longitudinal (figures 6.90 et 6.91). On observe pour les angles $\theta=0^\circ$ et 45° l'existence de trois régimes de mélange. Le premier, bien entendu, est celui de la diffusion pure, et on note que pour $\theta=45^\circ$ ce régime s'étend jusqu'à un nombre de Péclet de l'ordre de la dizaine. Ensuite on a le régime de superposition et finalement le régime d'interférence où la dispersion hydrodynamique est prédominante. Pour ces valeurs de l'angle θ , on a un exposant m qui est proche de 2. Par conséquent, il existe quant même une forte influence de la diffusion moléculaire. En outre, on note que pour la porosité $\varepsilon_p=0,36$ les courbes ($\theta=0^\circ$ et 45°) s'infléchissent pour des nombres de Péclet très élevés.

Un comportement tout à fait différent est retrouvé pour les autres valeurs de l'angle θ . Pour $\theta=5,625^\circ$ et $11,25^\circ$, on constate l'existence des régimes I et II suivis d'abord d'un régime d'interférence. La différence est que pour un nombre de Péclet particulière de l'ordre de 100, on remarque une nette diminution de l'influence de la diffusion moléculaire, avant d'atteindre ensuite à nouveau un régime d'interférence avec un

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\varepsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

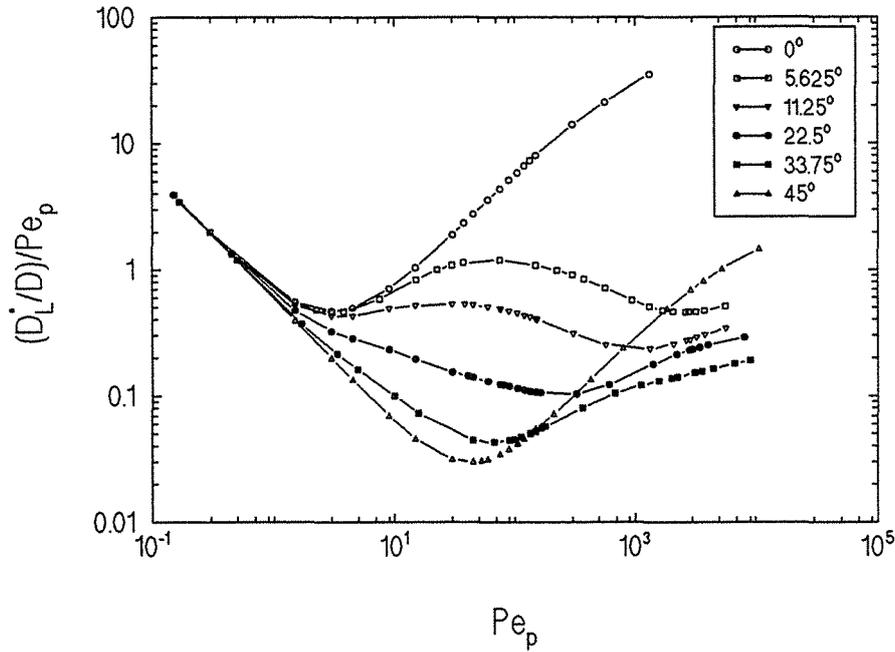


Figure 6.90 - Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\varepsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

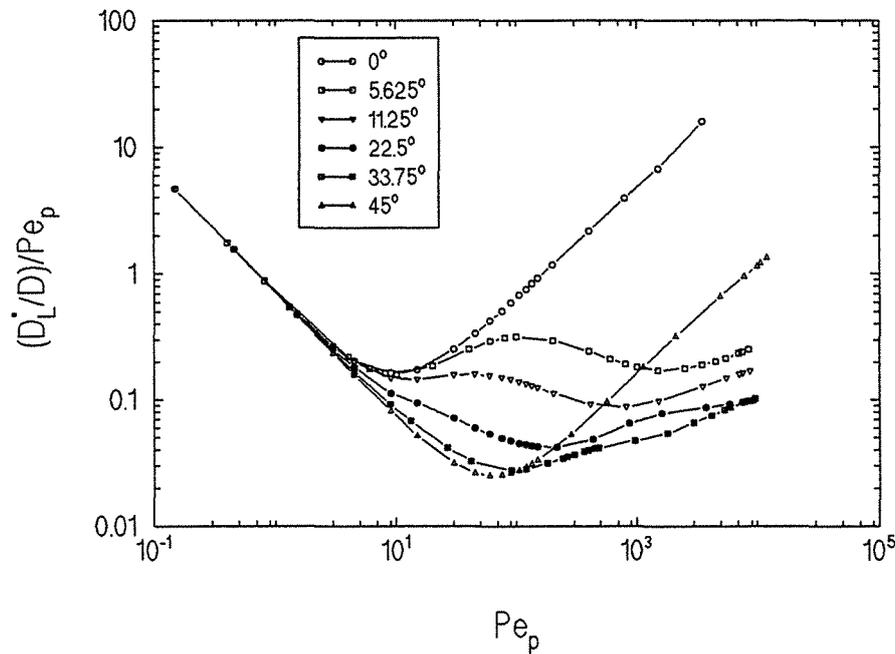


Figure 6.91 - Régimes de dispersion $D_L^*/D - \varepsilon_B = 0,64$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\epsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

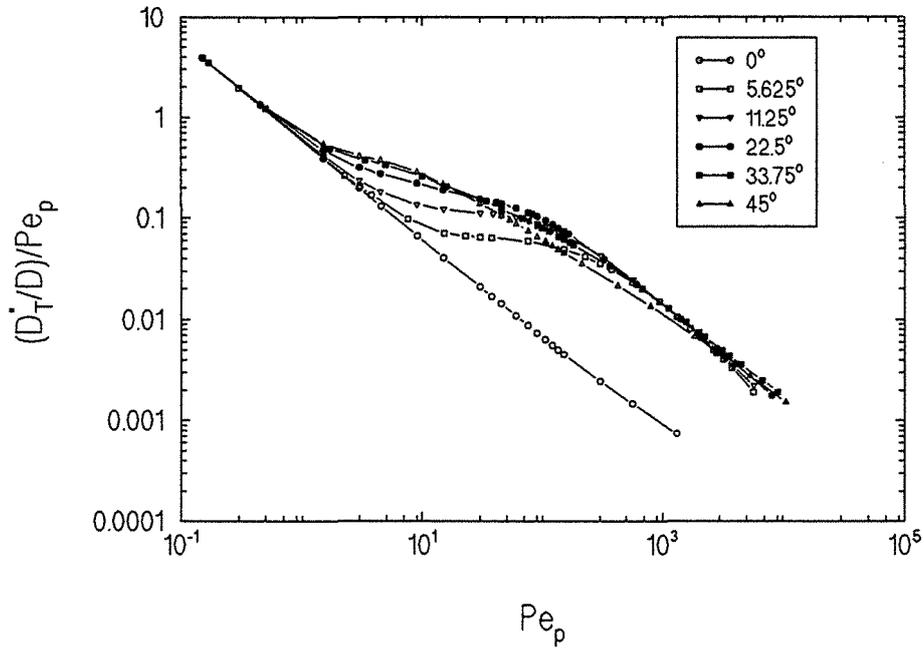


Figure 6.92 - Régimes de dispersion $D_T^*/D - \epsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

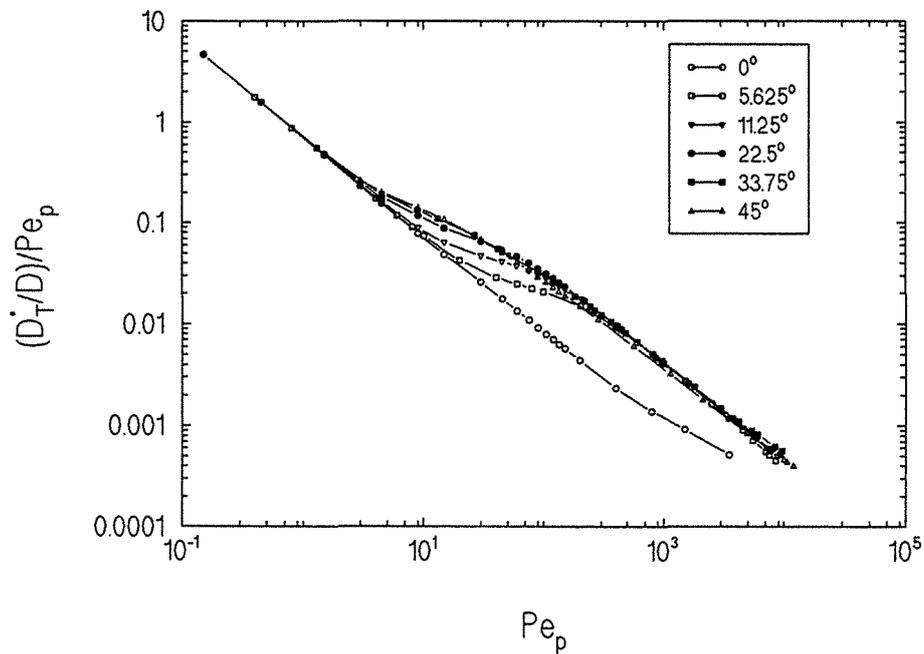


Figure 6.93 - Régimes de dispersion $D_T^*/D - \epsilon_B = 0,64$

exposant m qui n'est pas très supérieur à l'unité. Pour les angles $\theta=22,5^\circ$ et $33,75^\circ$, à part le régime de diffusion moléculaire pure, on voit apparaître un régime de type superposition ($m < 1$) qui se prolonge jusqu'à $Pe_p \sim 10^2$. Ensuite on a un régime d'interférence ($m > 1$) avec m compris entre 1,2 et 1,4 environ. Cependant dans aucun cas on ne retrouve une variation caractéristique d'un milieu réel.

Les coefficients transversaux présentent des régimes de mélange qui sont encore plus éloignés de ceux typiques d'un milieu réel.

On vérifie sur les figures 6.92 et 6.93 que pour $\theta=0^\circ$ on a quasiment un régime de diffusion pure, ce n'est que pour $Pe_p \sim 10^3$ que l'on note pour $\varepsilon_B = 0,64$ une inflexion qui traduit l'existence d'un régime de superposition. Pour les autres valeurs de l'angle θ , on observe deux régimes de diffusion pure (droites de pente -1) séparés par une zone de transition pour $\sim 10 < Pe_p < \sim 400$.

Dans le cas $\theta=0^\circ$, la résistance au transfert transversal est localisée dans les zones fluides quasi stagnantes entre les cylindres parallèlement à l'écoulement. Le mécanisme de transfert est de la diffusion pure (pente -1). L'inflexion constatée pour les derniers points est attribuée au changement de l'hydrodynamique.

Pour tous les autres angles, la résistance au transfert transversal se situe aux intersections entre les canaux où les lignes de courant sont parallèles à la direction du vecteur vitesse moyenne. Le mécanisme de mélange transversal est donc toujours de la diffusion pure caractérisée sur les figures 6.92 et 6.93 par une pente -1 avec toutefois une zone de transition correspondant simplement à l'influence de la convection et donc du nombre de Péclet sur le transfert, influence d'autant plus précoce que l'angle θ est proche de 45° .

6.6.2.2.2-ARRANGEMENT EN QUINCONCE

L'étape suivante consiste en la présentation des résultats pour l'arrangement en quinconce (figures 6.94 et 6.95).

On retrouve pour $\theta=0^\circ$ et 45° , à l'exception de la valeur de l'exposant m , les mêmes régimes de mélange et le même type de comportement que pour l'arrangement en ligne. Par contre, pour les autres valeurs de l'angle θ et pour le coefficient longitudinal (figure 6.94) les courbes

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - ε= 0,64
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

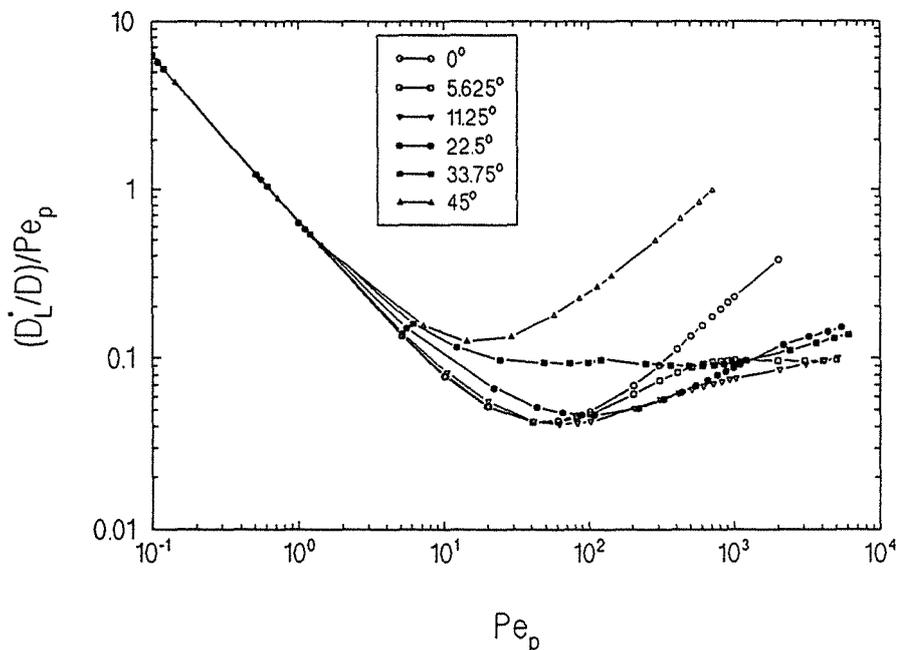


Figure 6.94 - Régimes de dispersion $D_L^*/D - \epsilon_B=0,64$

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - ε= 0,64
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

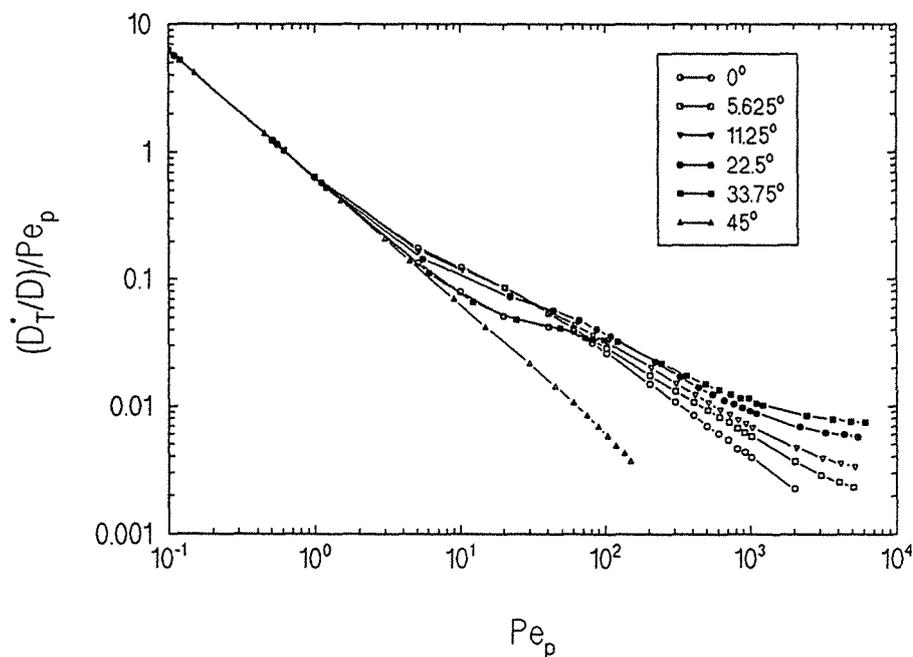


Figure 6.95 - Régimes de dispersion $D_T^*/D - \epsilon_B=0,64$

sont différentes de celles de l'arrangement précédent. Pour $\theta=5,625^\circ$ on remarque l'existence des quatre premiers régimes de mélange, à savoir: le régime de diffusion pure, le régime de superposition, le régime d'interférence et pour $Pe_p > 10^3$ le régime de dispersion hydrodynamique pure ($m=1$). La courbe $\theta=11,25^\circ$ possède les mêmes régimes à l'exception du dernier, remplacé par le régime IV avec un exposant $m \approx 1,2$. Pour $\theta=22,5^\circ$ on a ces mêmes régimes, mais lors du dernier (régime d'interférence) m vaut 1,30 environ. La courbe $\theta=33,75^\circ$ est une exception, puisque après le régime de diffusion pure on a une zone étendue où m est proche de l'unité, avant d'atteindre le régime d'interférence avec $m \approx 1,20$.

Quant au coefficient transversal (figure 6.95), pour les angles θ inférieures à 45° , après une zone correspondant à un transfert par diffusion pure aux petits nombres de Péclet, apparaît une transition où les effets convectifs commencent à se manifester (comme dans le cas de l'arrangement en ligne). Puis l'on se trouve dans un régime de superposition d'autant plus marqué que l'angle θ est loin de 0° , le transfert convectif latéral étant toujours important. L'infléchissement des courbes pour $Pe_p > \sim 10^3$ peut être attribué au changement de l'hydrodynamique (voir §4.8.1.3).

Le cas $\theta=45^\circ$ est singulier. L'écoulement est symétrique par rapport à la première diagonale, empêchant tout transfert convectif transversal. Aussi la courbe reste toujours dans le régime de diffusion pure. L'inflexion de la courbe constatée pour $Pe_p > \sim 100$ est due à l'imprécision du calcul pour le coefficient transversal (voir §6.7).

6.6.2.2.3-ARRANGEMENT EN CHICANE

Le dernier arrangement ordonné abordé est celui en chicane. Les figures 6.96 à 6.99 présentent l'évolution du coefficient effectif longitudinal et transversal avec une porosité $\varepsilon_B = 0,36$ et 0,64 respectivement. Toutes les courbes pour le coefficient longitudinal (figures 6.96 et 6.97) présentent un régime de diffusion pure suivi d'un régime de superposition des effets. Pour $\theta=45^\circ$, suit une zone d'interférence très marquée, prolongée dans le cas $\varepsilon_B = 0,36$ pour $Pe_p > 10^3$ par une inflexion qui laisse espérer un régime hydrodynamique pur. Pour des valeurs plus faibles de l'angle θ ($\varepsilon_B = 0,36$, $\theta=11,25^\circ$, $22,5^\circ$ et $33,75^\circ$;

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

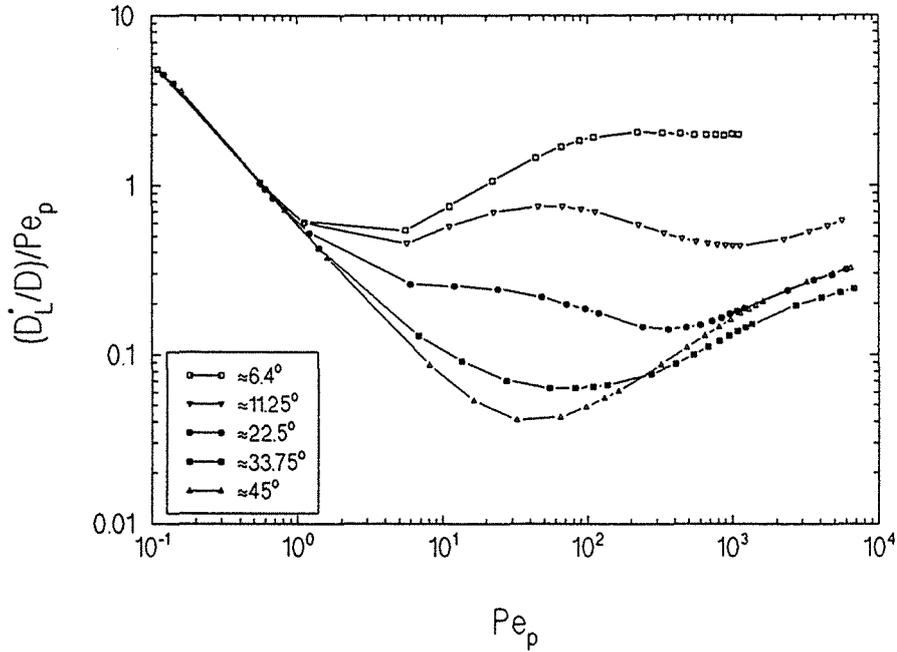


Figure 6.96 - Régimes de dispersion $D_L^*/D - \epsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

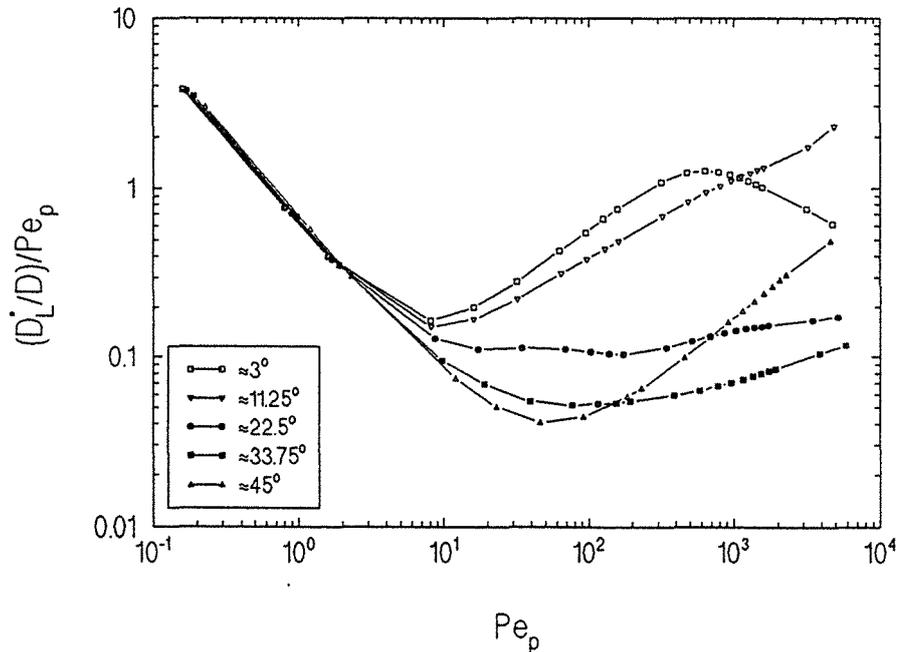


Figure 6.97 - Régimes de dispersion $D_L^*/D - \epsilon_B = 0,64$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,36$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

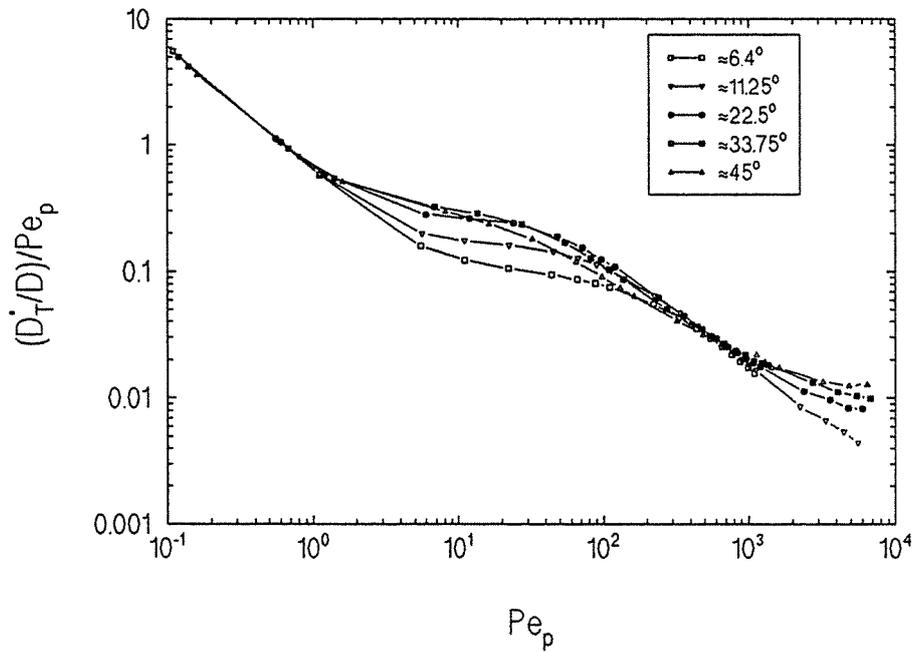


Figure 6.98 - Régimes de dispersion $D_T^*/D - \epsilon_B = 0,36$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

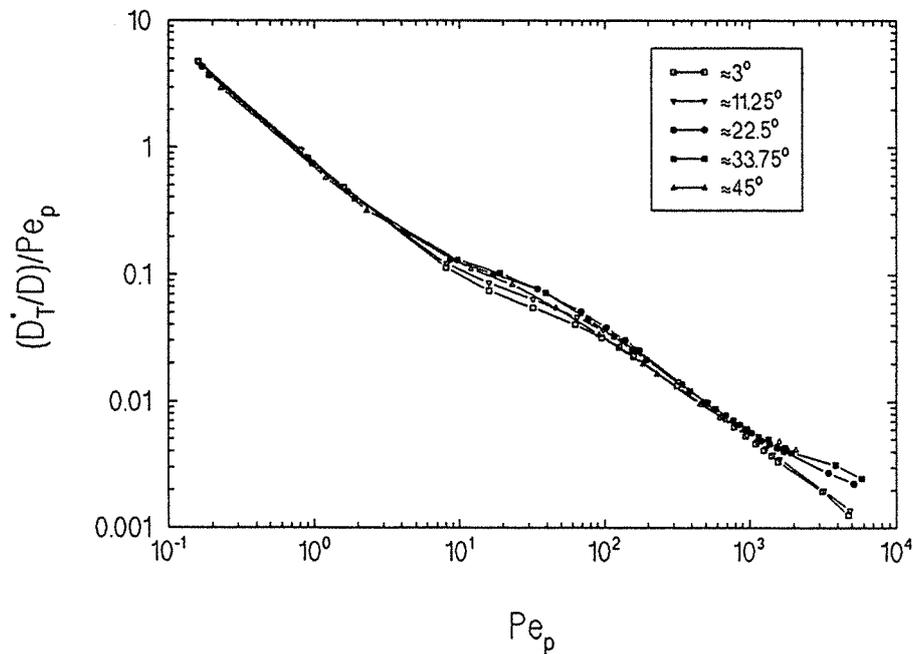


Figure 6.99 - Régimes de dispersion $D_T^*/D - \epsilon_B = 0,64$

$\varepsilon_B=0,64$, $\theta=22,5^\circ$ et $33,75^\circ$) au régime de superposition qui se maintient pour des nombres de Péclet plus élevés, succède un régime d'interférence assez peu marqué. Pour les petites valeurs de l'angle θ ($\varepsilon_B=0,36$, $\theta=6,4^\circ$; $\varepsilon_B=0,64$, $\theta=3^\circ$ et $11,25^\circ$) on retrouve un régime net d'interférence suivi éventuellement par un régime hydrodynamique pur ($\varepsilon_B=0,36$, $\theta=6,4^\circ$) voire par une zone où la diffusion moléculaire contribue d'une manière importante au mélange ($\varepsilon_B=0,64$, $\theta=3^\circ$).

En ce qui concerne le coefficient transversal (figures 6.98 et 6.99), on observe deux régimes de diffusion pure séparés par une zone de transition (plus importante pour $\varepsilon_B=0,36$). L'évolution pour $Pe_p > \sim 10^3$, constatée surtout pour $\varepsilon_B=0,36$ pourrait être expliquée par l'hydrodynamique.

6.6.2.2.4-INFLUENCE DU NOMBRE DE REYNOLDS

On reprend pour les trois arrangements ordonnés avec une porosité égale à 0,64, l'étude des différents régimes de mélange, cette fois-ci appliqué au cas d'un nombre de Schmidt égal à 100, ce qui équivaut à augmenter le nombre de Reynolds particulaire.

La figure 6.100 montre les résultats obtenus pour le coefficient longitudinal et l'arrangement en ligne. Par rapport aux courbes calculées pour $Sc=1000$ (figure 6.91), on observe que les résultats sont les mêmes jusqu'à $Pe_p \cong 2.10^3$. Pour des valeurs supérieures du nombre de Péclet particulaire, hormis peut-être $\theta=0^\circ$ et 45° , on a pour les autres valeurs de l'angle θ , dans le régime d'interférence (régime III), une pente m plus forte que la précédente. Les variations sont sûrement dues à un changement de la nature de l'écoulement, une fois que l'écoulement n'est plus en régime de Stokes.

En ce qui concerne le coefficient transversal (figure 6.101), l'influence du nombre de Reynolds est moindre. L'explication est que la dispersion dans ce cas est essentiellement due à la diffusion moléculaire, donc l'hydrodynamique n'interfère pas de façon appréciable sur le processus de mélange.

L'arrangement en quinconce présente des variations encore plus accentuées du coefficient longitudinal (figure 6.102) que celles de l'arrangement en ligne. À croire nos résultats, on a pour Pe_p de l'ordre de

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 100 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

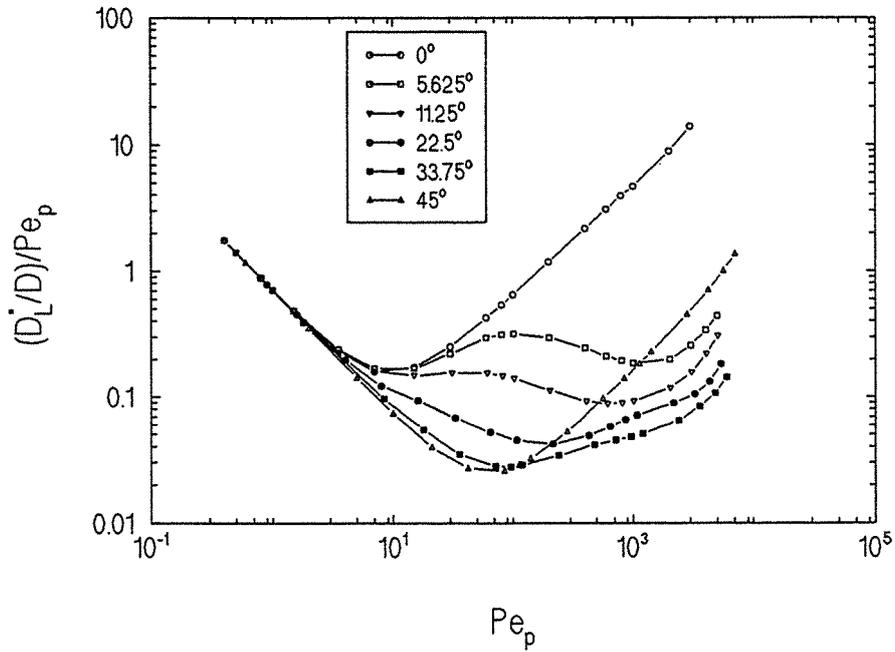


Figure 6.100 - Régimes de dispersion D_L^*/D - Sc=100

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - Sc= 100 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 70 X 70

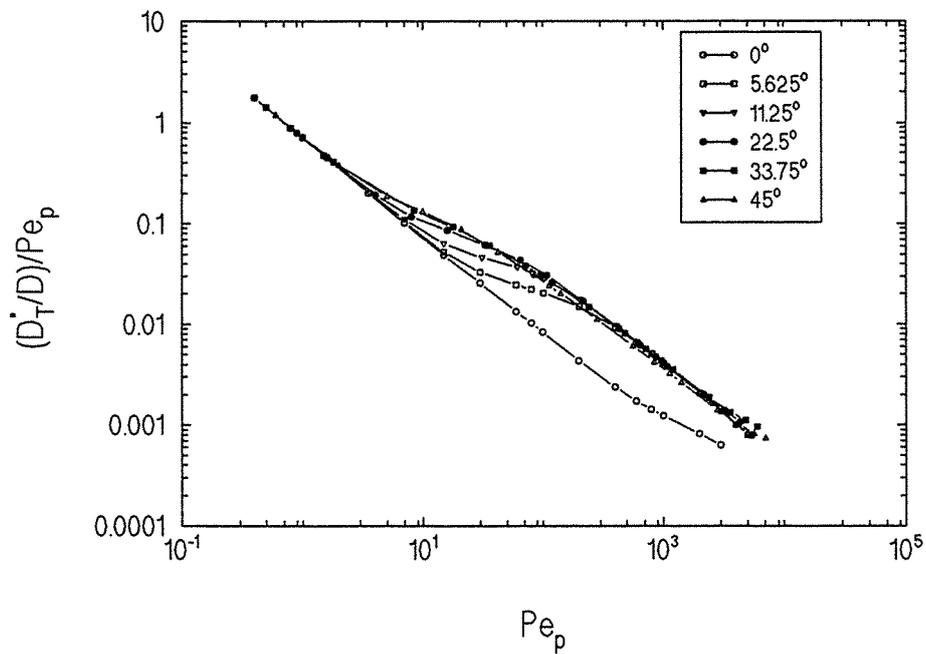


Figure 6.101 - Régimes de dispersion D_T^*/D - Sc=100

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 100 - $\epsilon= 0,64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

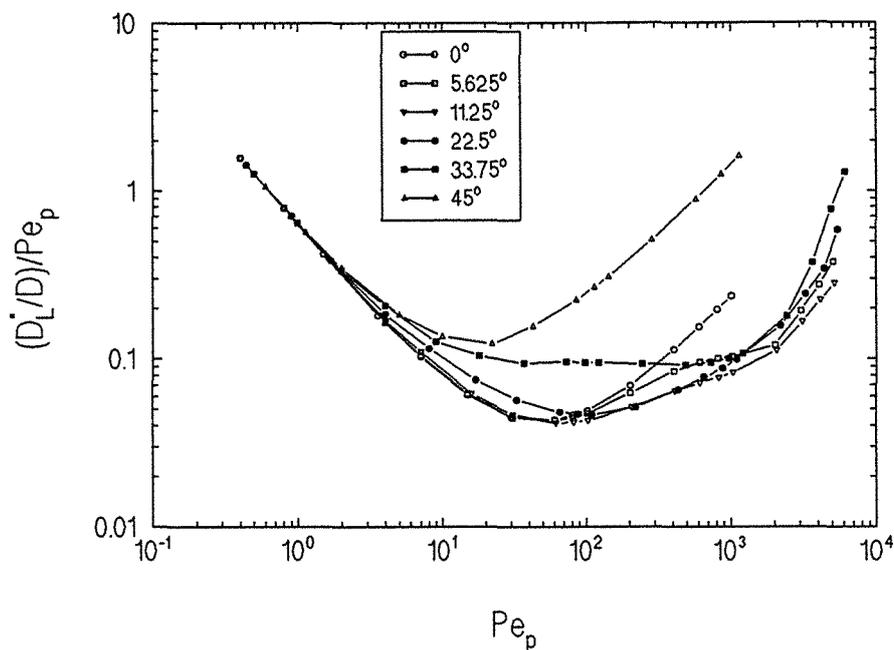


Figure 6.102 - Régimes de dispersion D_L^*/\mathcal{D} - Sc=100

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 100 - $\epsilon= 0,64$
 Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

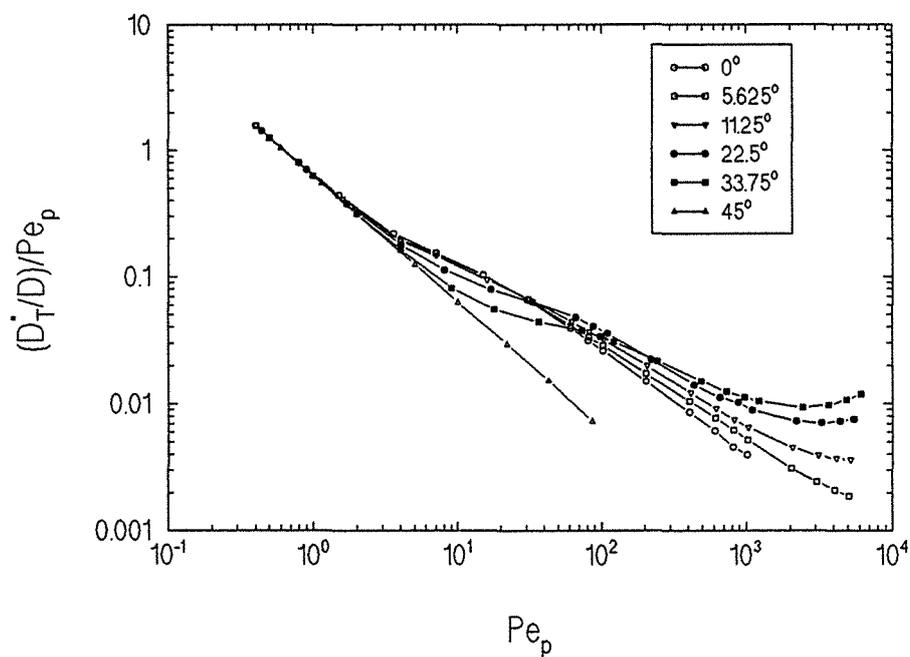


Figure 6.103 - Régimes de dispersion D_T^*/\mathcal{D} - Sc=100

2000 une augmentation importante de la pente dans le régime d'interférence.

Au contraire du cas de l'arrangement en ligne, l'hydrodynamique semble présenter des effets plus importants sur le coefficient transversal (figure 6.103) (sauf toujours $\theta=0^\circ$ et 45°) ce qui est cohérent avec le fait que le régime n'est plus de diffusion pure. Ces effets sont manifestes dès que $Pe_p > 2.10^3$ et peuvent même provoquer un passage du régime de superposition au régime d'interférence (cas $\theta=22,5^\circ$ et $33,75^\circ$).

De même que pour les deux arrangements précédents, pour l'arrangement en chicane le coefficient longitudinal (figure 6.104) varie de façon appréciable pour $\theta \cong 22,5^\circ$ et $33,75^\circ$. Particulièrement, dans ces deux cas, on a une valeur de l'exposant m très grande pour le régime d'interférence. C'est-à-dire que la dispersion est aussi fortement dépendante de la diffusion moléculaire. Pour $\theta \cong 3^\circ$ et $11,25^\circ$ on retrouve les mêmes régimes de mélange et une influence moins prononcée du nombre de Reynolds particulière vis-à-vis des cas $\theta \cong 22,5^\circ$ et $33,75^\circ$. On constate aussi, pour $Pe_p > 2.10^3$, une inflexion de la courbe $\theta=45^\circ$ et par conséquent une diminution des effets dus à la diffusion moléculaire.

On distingue clairement pour $Pe_p > 2.10^3$, les effets de la dispersion hydrodynamique sur le coefficient effectif transversal (figure 6.105). Apparemment on a comme dernier régime de mélange pour $\theta \cong 22,5^\circ$, $33,75^\circ$ et 45° , une dispersion hydrodynamique pure ($m=1$). Cependant on n'a pas pu obtenir pour $\theta \cong 3^\circ$ et $11,25^\circ$, des valeurs pour des nombres de Péclet particuliers supérieurs à 2000. À propos des ces deux valeurs de l'angle θ , tout ce que l'on peut dire est que les derniers points se trouvent dans le régime de superposition.

Les conclusions pour l'arrangement en chicane sont donc analogues aux arrangements précédents. Le coefficient effectif longitudinal augmente nettement dès que $Pe_p > 2.10^3$ avec une pente m très élevée. En ce qui concerne le coefficient effectif transversal, l'hydrodynamique affecte les derniers points de la figure 6.105 pour lesquels on semble s'acheminer vers un régime de dispersion hydrodynamique pure.

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 100 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

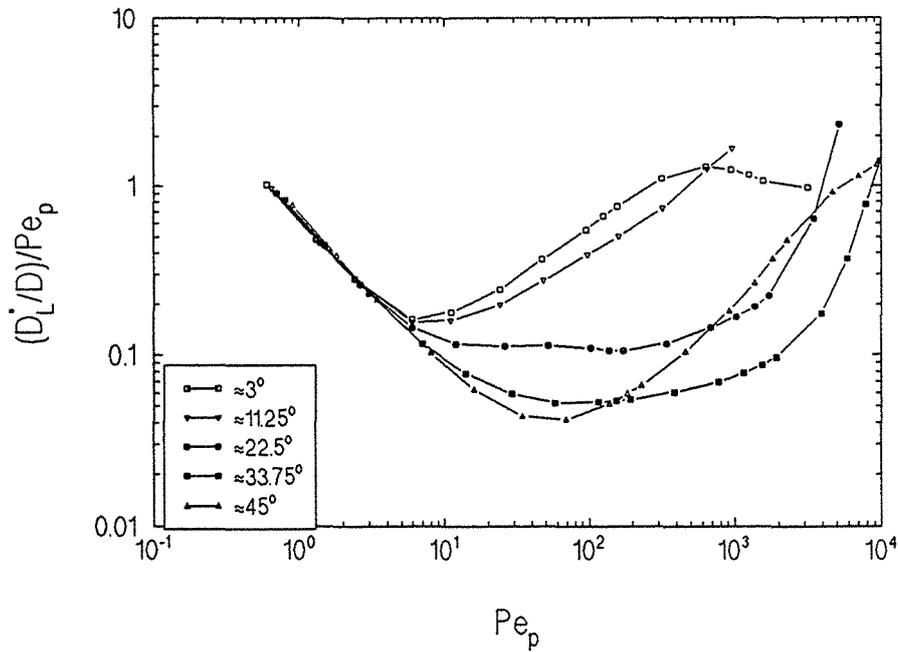


Figure 6.104 - Régimes de dispersion D_L^*/D - Sc=100

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Chicane - Sc= 100 - $\epsilon = 0,64$

Code: QUDS2 - Maillage: 80 X 80

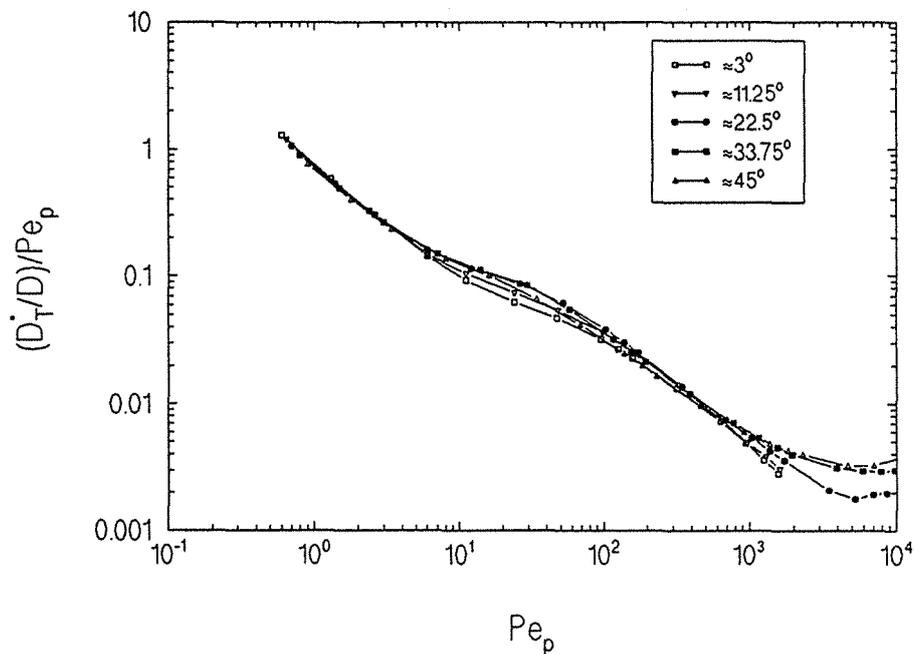


Figure 6.105 - Régimes de dispersion D_T^*/D - Sc=100

6.6.2.3-MILIEUX DÉSORDONNÉS

L'utilisation de l'équation (34) (théorie de Koch et Brady, 1989) s'avère impraticable pour le cas de l'arrangement désordonné pour deux motifs. Premièrement, la détermination du vecteur \mathbf{k} est sans doute fort laborieuse. Deuxièmement, même dans le cas où la fraction de solide est faible, on voit mal comment ne prendre pas en compte l'interaction entre les particules. On va donc se limiter à une analyse des résultats obtenus en ce qui concerne les différents régimes de mélange.

6.6.2.3.1-INFLUENCE DE LA DIRECTION DE L'ÉCOULEMENT PRINCIPAL

On traitera d'abord les résultats concernant le coefficient longitudinal (figures 6.106 à 6.109) et ensuite on abordera les résultats pour le coefficient transversal (figures 6.110. à 6.113). Dans tous les cas les calculs ont été réalisés pour un nombre de Schmidt $Sc=1000$.

Sur la figure 6.106 ($\theta \cong 23^\circ$) on a pour toutes les courbes les trois premiers régimes. Dans certains cas, on constate une inflexion des courbes pour des valeurs élevées du nombre de Péclet. Ce comportement indiquerait peut-être une diminution des effets dus au processus de diffusion moléculaire et une prédominance des effets de dispersion hydrodynamique.

Les résultats suivants (figure 6.107) correspondent à un angle $\theta \cong 33^\circ$. Tout d'abord on remarque l'absence d'inflexion pour des nombres de Péclet élevés, comme c'était le cas pour l'angle $\theta \cong 23^\circ$. On constate aussi pour certains milieux un changement de comportement par rapport au cas précédent. D'une façon générale toutes les courbes présentent les trois premiers régimes de mélange.

À noter aussi, pour le milieu n° 20, les fluctuations des derniers points sur la courbe dus à la méthode numérique.

Ensuite, sur la figure 6.108, sont montrés les résultats pour l'angle $\theta \cong 45^\circ$. Comme pour les angles $\theta \cong 23^\circ$ et 33° , on retrouve les trois premiers régimes de mélange. On retrouve aussi pour certains milieux et pour des nombres de Péclet élevés, une inflexion des courbes.

Finalement, sur la figure 6.109 on peut voir les résultats pour le coefficient longitudinal calculés pour l'angle $\theta \cong 57^\circ$. À l'exception du

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - Sc=1000 - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

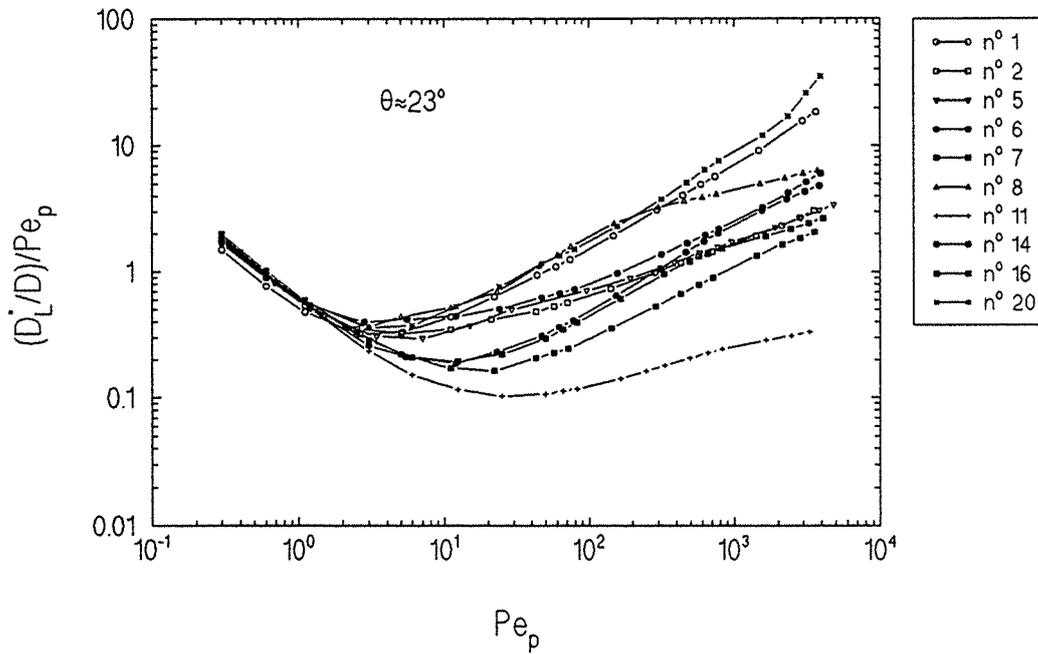


Figure 6.106 - Régimes de dispersion D_L^*/D - $\epsilon \approx 0,7$ - $\theta \approx 23^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - Sc=1000 - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

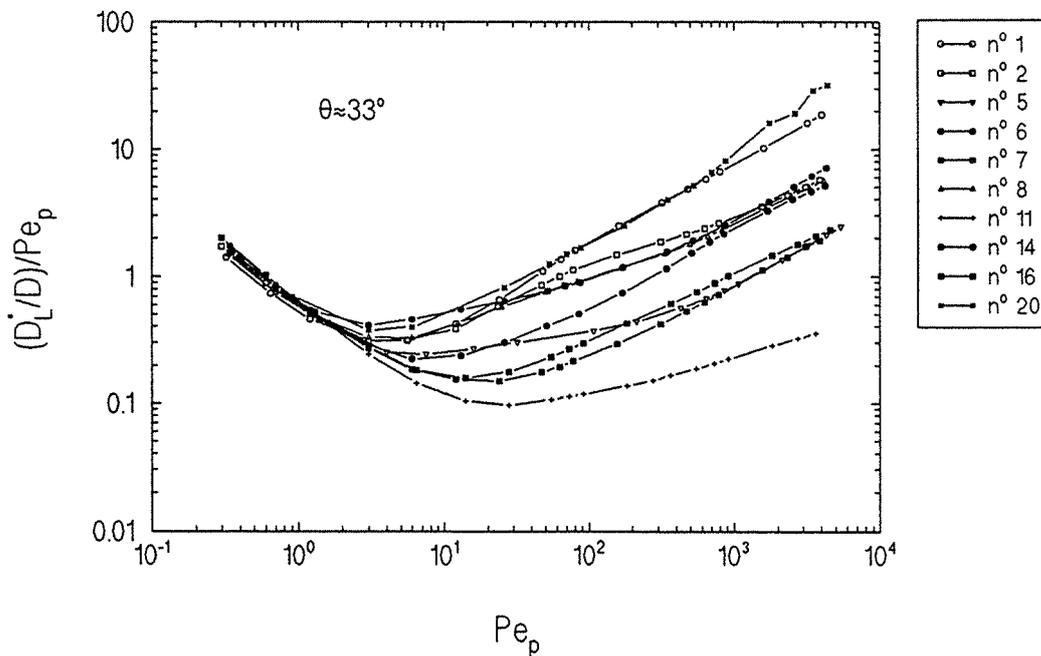


Figure 6.107 - Régimes de dispersion D_L^*/D - $\epsilon \approx 0,7$ - $\theta \approx 33^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - Sc=1000 - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

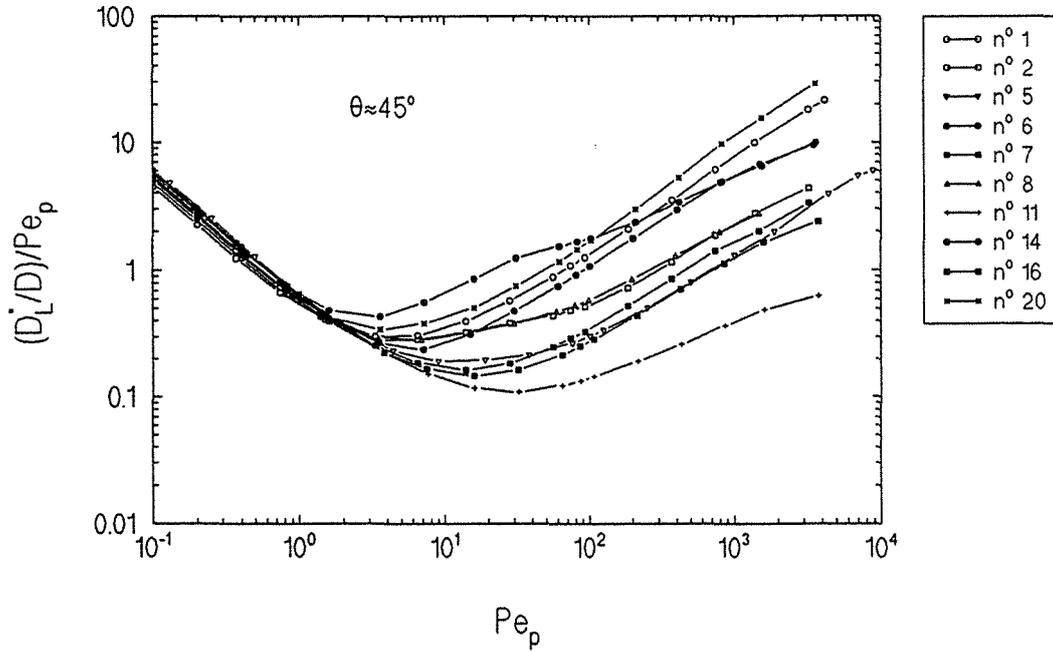


Figure 6.108 - Régimes de dispersion $D_L^*/D - \epsilon_B \cong 0,7 - \theta \cong 45^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - Sc=1000 - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

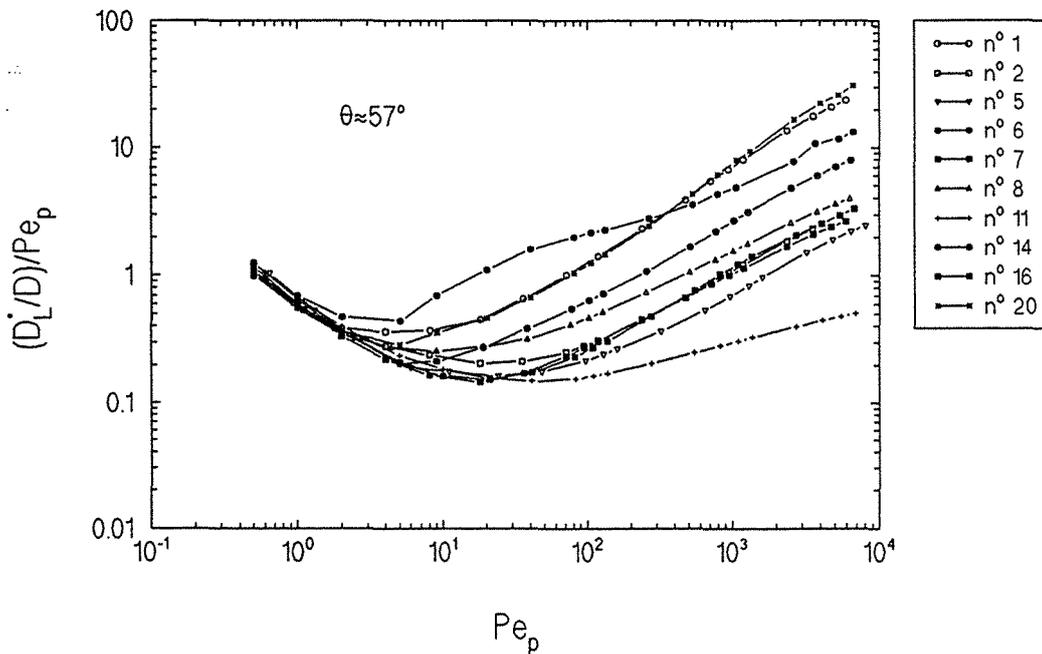


Figure 6.109 - Régimes de dispersion $D_L^*/D - \epsilon_B \cong 0,7 - \theta \cong 57^\circ$

milieu n° 6, les trois premiers régimes de mélange sont bien distingués pour l'ensemble des courbes.

Si l'on devait caractériser le comportement de l'ensemble des courbes pour les différentes valeurs de l'angle θ , on pourrait dire qu'elles présentent toutes les trois premiers régimes de mélange: diffusion pure, superposition et interférence. Dans le cas du régime d'interférence, les effets dûs à la diffusion moléculaire sont loin d'être négligeables vu que les milieux présentent une pente moyenne m proche de 1,6. Enfin, pour certains milieux, on peut constater des variations appréciables avec la variation de la direction de l'écoulement principal.

Les résultats pour le coefficient transversal (figures 6.110 à 6.113) montrent surtout l'existence de deux régimes de mélange, à savoir le régime de diffusion pure et le régime de superposition.

Néanmoins, pour des nombres de Péclet particuliers supérieurs à 10^3 , on observe pour certains milieux une inflexion des courbes. Ce changement de comportement est surtout prononcé pour un angle $\theta \cong 57^\circ$ et il est peut-être dû à la dispersion hydrodynamique.

On peut alors conclure pour le coefficient effectif transversal que la dispersion est due principalement à la diffusion moléculaire et que le transport convectif ne l'emporte pas sur le transport diffusif.

6.6.2.3.1-INFLUENCE DE LA DIRECTION DE L'ÉCOULEMENT PRINCIPAL

Il ne reste plus qu'à commenter l'influence du nombre de Reynolds particulière sur le calcul des coefficients de dispersion.

La figure 6.114 montre les résultats pour le coefficient effectif longitudinal pour l'angle $\theta \cong 45^\circ$ et pour un nombre de Schmidt égal à 100. Les trois premiers régimes de mélange sont toujours présents sur l'ensemble des courbes. D'autre part, les résultats se superposent aux résultats calculés pour $Sc=1000$ jusqu'à un nombre de Péclet particulière de l'ordre de 10^3 . Pour des valeurs du nombre de Péclet supérieurs à 10^3 , on a pour certains milieux une augmentation du coefficient de dispersion, pour d'autres milieux une diminution. On retrouve aussi pour certaines courbes une inflexion pour des valeurs élevées de Pe_p , comme déjà signalé pour le cas équivalent pour $Sc=1000$. Il est donc difficile de dégager une tendance générale pour l'ensemble des milieux.

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

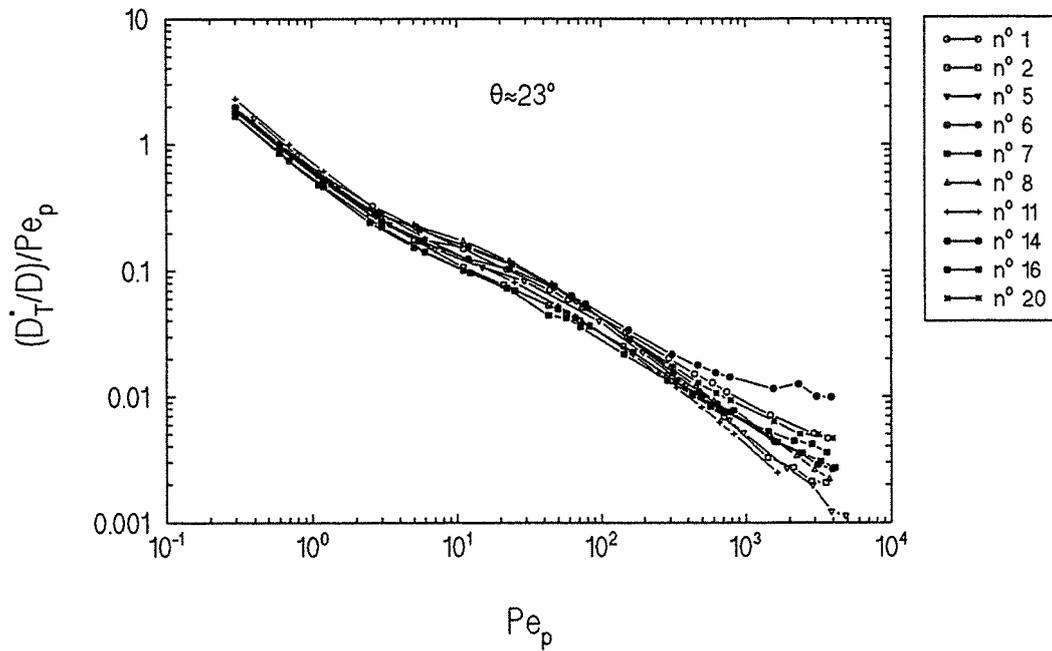


Figure 6.110 - Régimes de dispersion D_T^*/D - $\epsilon_B \approx 0,7$ - $\theta \approx 23^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

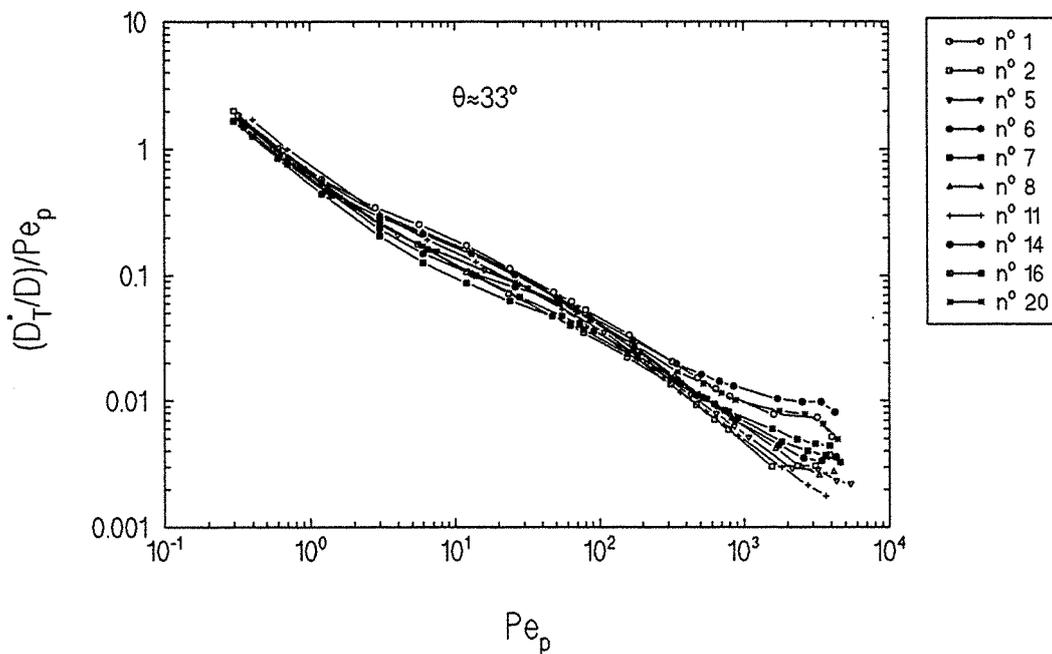


Figure 6.111 - Régimes de dispersion D_T^*/D - $\epsilon_B \approx 0,7$ - $\theta \approx 33^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

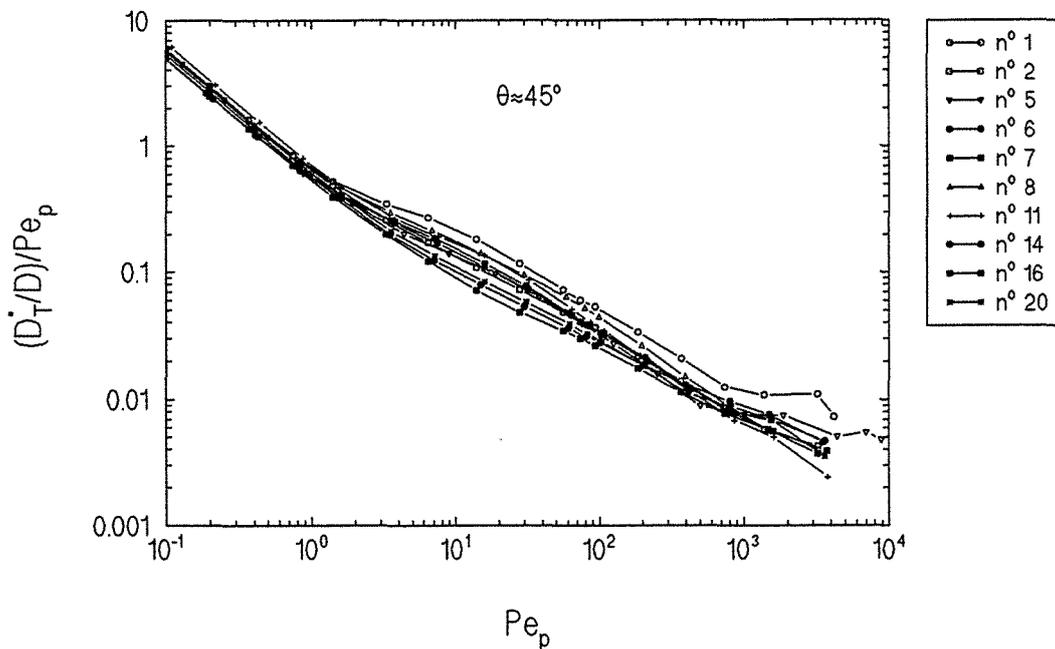


Figure 6.112 - Régimes de dispersion $D_T^*/D - \epsilon_B \approx 0,7 - \theta \approx 45^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=1000$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

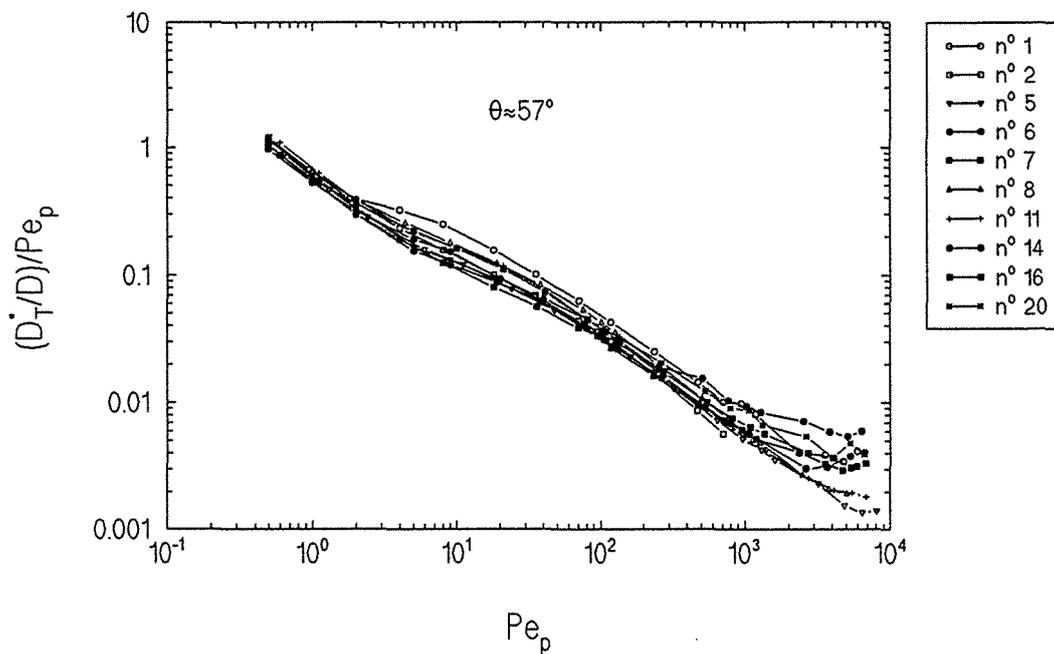


Figure 6.113 - Régimes de dispersion $D_T^*/D - \epsilon_B \approx 0,7 - \theta \approx 57^\circ$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=100$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

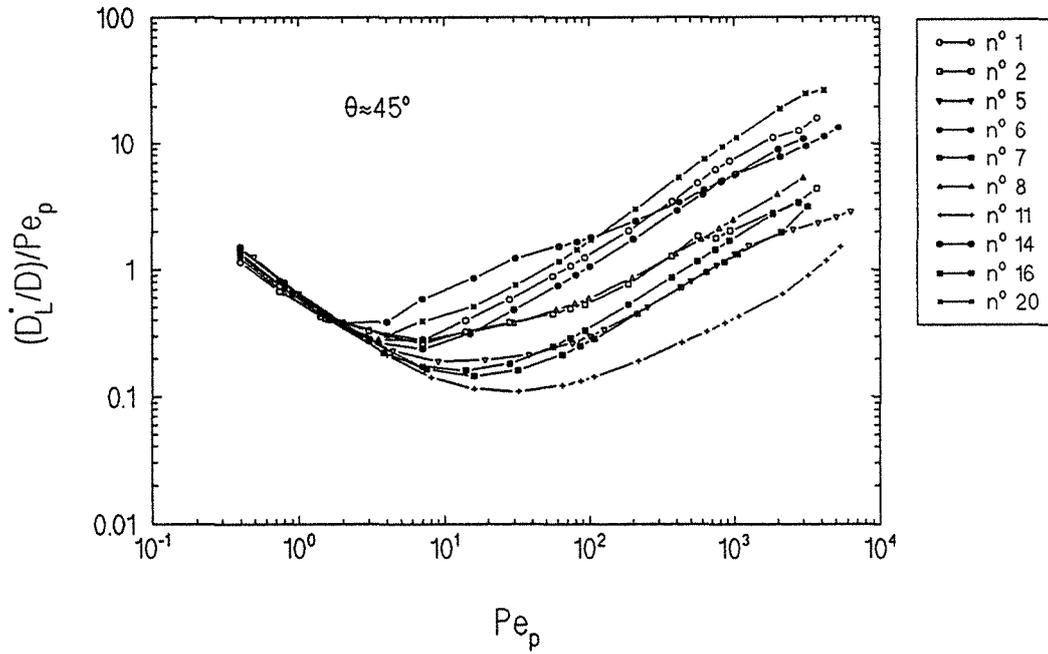


Figure 6.114 - Régimes de dispersion D_L^*/D - $\epsilon \approx 0,7$ - $Sc=100$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: Aléatoire - $Sc=100$ - $\epsilon=0.7$

Code: QUDS2 - Maillage: 110 X 110

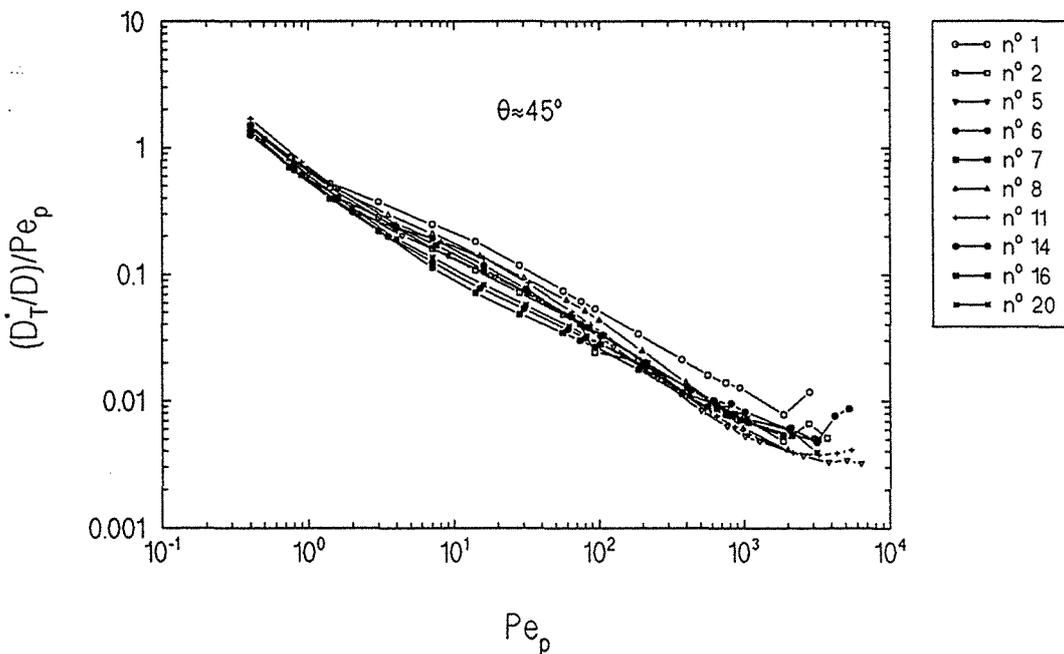


Figure 6.115 - Régimes de dispersion D_T^*/D - $\epsilon \approx 0,7$ - $Sc=100$

En ce qui concerne le coefficient effectif transversal (figure 6.115), on peut dire qu'on retrouve surtout les deux premiers régimes de mélange (diffusion pure et superposition) pour $Pe_p < 10^3$. Pour $Pe_p > 10^3$ on note pour certains milieux une inflexion des courbes due sûrement à l'hydrodynamique. Par rapport aux résultats calculés pour $\theta \cong 45^\circ$ et $Sc=1000$, on note un changement de comportement pour les derniers points, mais les incertitudes numériques empêchent toute conclusion.

6.7-INFLUENCE DU SCHÉMA NUMÉRIQUE

Ce paragraphe est consacré aux erreurs induites par le schéma numérique principalement par la discrétisation des termes convectifs.

Dans une première étape, on montre pour les trois arrangements ordonnés l'influence sur le calcul du tenseur de dispersion, de l'utilisation des schémas à trois (PDS) et quatre points (QUDS). La dernière partie présente les difficultés associées à la détermination des valeurs propres du tenseur de dispersion dues à l'imprécision du calcul.

6.7.1-CONFRONTATION DES RÉSULTATS

Les résultats numériques obtenus pour les coefficients longitudinal et transversal pour l'angle $\theta=0^\circ$ et 45° sont présentés. On a choisi ces deux valeurs de l'angle puisqu'elles conduisent en principe aux erreurs minimums et maximums pour la diffusion numérique. Tous les résultats montrés correspondent aux arrangements en ligne, en quinconce et en chicane avec une porosité égale à 0,64.

On commence par montrer sur la figure 6.116 et 6.117 les résultats calculés pour les coefficients longitudinal et transversal avec l'arrangement en ligne. On observe que l'on vérifie bien les prévisions des paragraphes 3.3.5 et 3.3.6, qui montrent que la diffusion numérique est une fonction de la vitesse et de la direction de l'écoulement par rapport aux axes du maillage.

En ce qui concerne le coefficient longitudinal pour $\theta=0^\circ$ et pour un nombre de Reynolds particulière inférieur à l'unité, les trois schémas (PDS, QUDES2 ($\alpha=0,5$) et QUDES3 ($\alpha=0,75$)) donnent à peu près les mêmes résultats. On trouve, comme attendu, un écart significatif pour $Pe_p > 10^3$

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\varepsilon = 0,64$

Maillage: 70 X 70

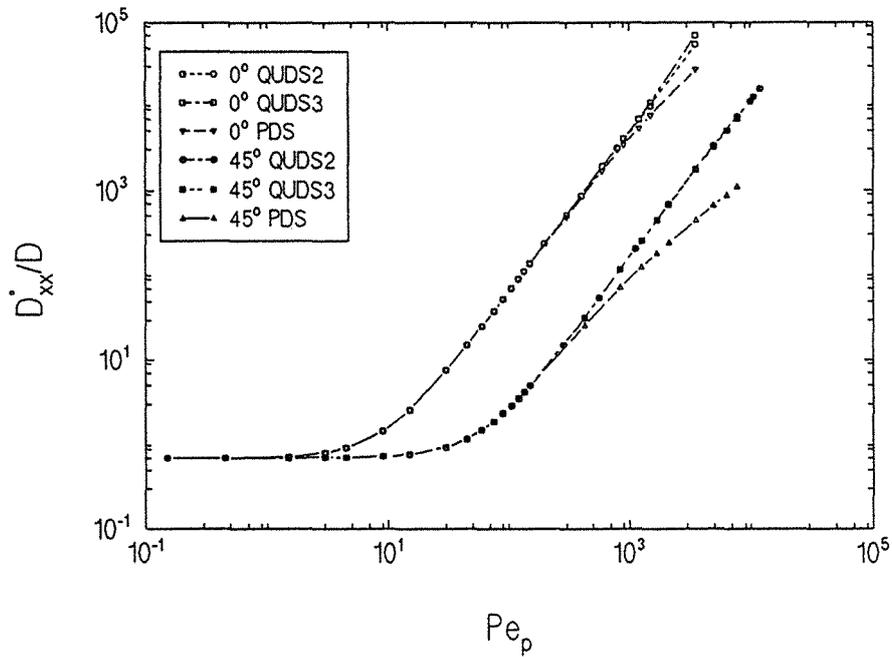


Figure 6.116 - Coefficient de dispersion - différents schémas numériques

Coefficient Effectif de Dispersion

Arrangement: En Ligne - $Sc = 1000$ - $\varepsilon = 0,64$

Maillage: 70 X 70

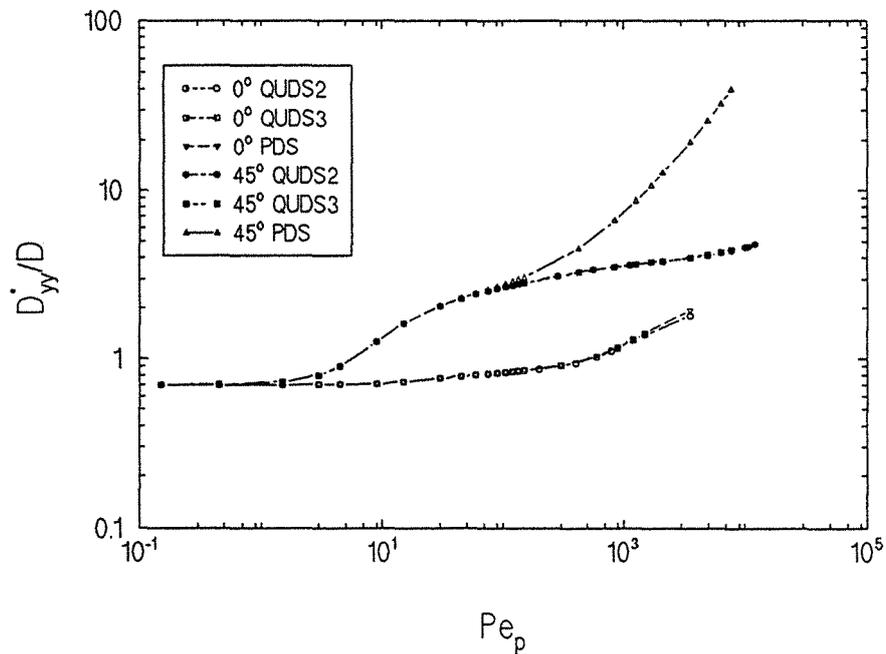


Figure 6.117 - Coefficient de dispersion - différents schémas numériques

puisque les termes convectifs deviennent importants. L'angle $\theta=45^\circ$ correspond bien au cas plus défavorable et les résultats du schéma PDS dévient des résultats du schéma quadratique (QUDS) à partir de $Pe_p \approx 200$ et l'on observe que l'écart pour $Pe_p > 10^3$ est bien supérieur à celui pour $\theta=0^\circ$.

Sur la figure 6.117 on montre cette fois-ci les résultats obtenus pour le coefficient transversal. On remarque que pour $\theta=0^\circ$ les résultats des trois schémas (PDS, QUDS2 et QUDS3) restent toujours presque confondus. L'explication est que les termes convectifs ne sont pas importants par rapport aux termes diffusifs lors du calcul du coefficient transversal pour $\theta=0^\circ$. Par contre, pour un angle $\theta=45^\circ$, la différence est très significative. Il est donc très important d'utiliser un schéma à quatre points pour les termes convectifs pour le calcul du tenseur de dispersion.

L'influence du code numérique pour l'arrangement en quinconce et sur les coefficients longitudinal et transversal, est montrée sur les figures 6.118 et 6.119. Le coefficient longitudinal (figure 6.118), fourni par le schéma PDS s'écarte du résultat du schéma QUDS pour $Pe_p > \sim 200$, ceci pour les angles $\theta=0^\circ$ et 45° .

En ce qui concerne le coefficient transversal (figure 6.119) et pour $\theta=45^\circ$, seuls les termes diffusifs sont importants et les trois schémas donnent le même résultat. On verra au paragraphe suivant pourquoi on ne présente pas des valeurs pour le coefficient transversal avec le schéma quadratique pour $Pe_p > \sim 10^2$. Pour $\theta=0^\circ$ les termes convectifs deviennent importants et on a, comme pour le coefficient longitudinal, des valeurs calculées par le schéma PDS qui diffèrent des celles calculées par le schéma QUDS pour $Pe_p > \sim 200$.

On passe maintenant à la présentation des résultats concernant le dernier arrangement ordonné qui est celui en chicane. Ils sont montrés sur la figure 6.120 pour le coefficient longitudinal et 6.121 pour le coefficient transversal.

On peut constater que pour l'angle $\theta \approx 3^\circ$ les trois schémas de discrétisation donnent des résultats qui sont à peu près équivalents pour le coefficient longitudinal. Au contraire, pour l'angle $\theta=45^\circ$, la courbe correspondant au schéma PDS s'écarte des courbes du schéma quadratique dès que $Pe_p > \sim 200$. C'est pour l'arrangement en chicane et pour $\theta=45^\circ$, que l'on rencontre les plus grandes différences entre les résultats du schéma QUDS2 et QUDS3.

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$
 Maillage: 80 X 80

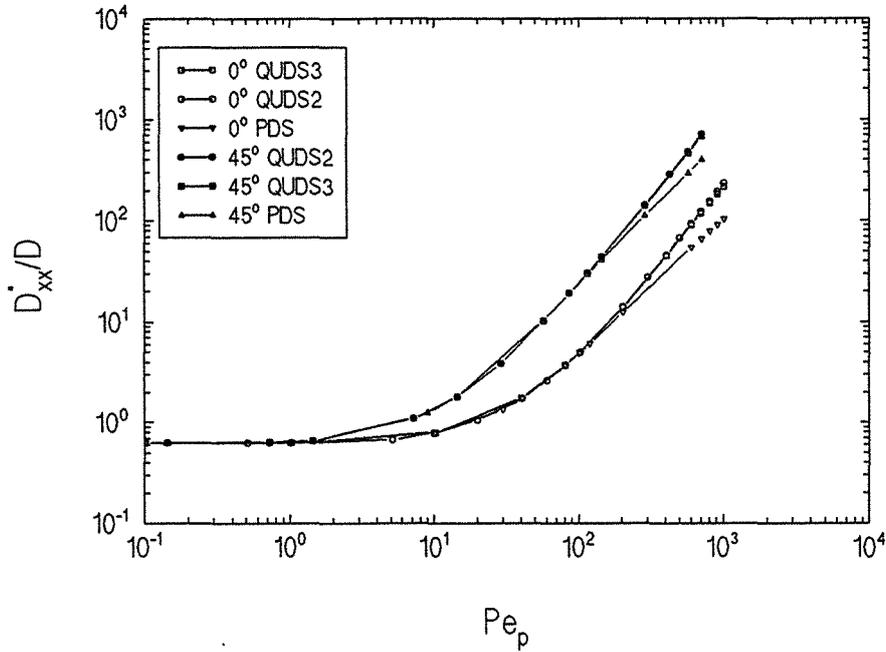


Figure 6.118 - Coefficient de dispersion - différents schémas numériques

Coefficient Effectif de Dispersion
 Arrangement: En Quinconce - Sc= 1000 - $\epsilon = 0,64$
 Maillage: 80 X 80

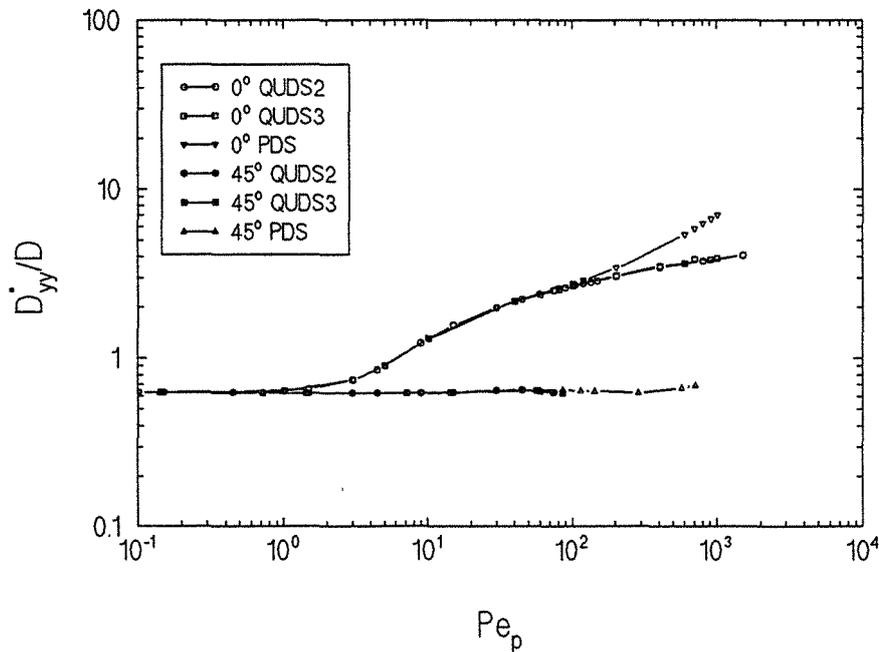


Figure 6.119 - Coefficient de dispersion - différents schémas numériques

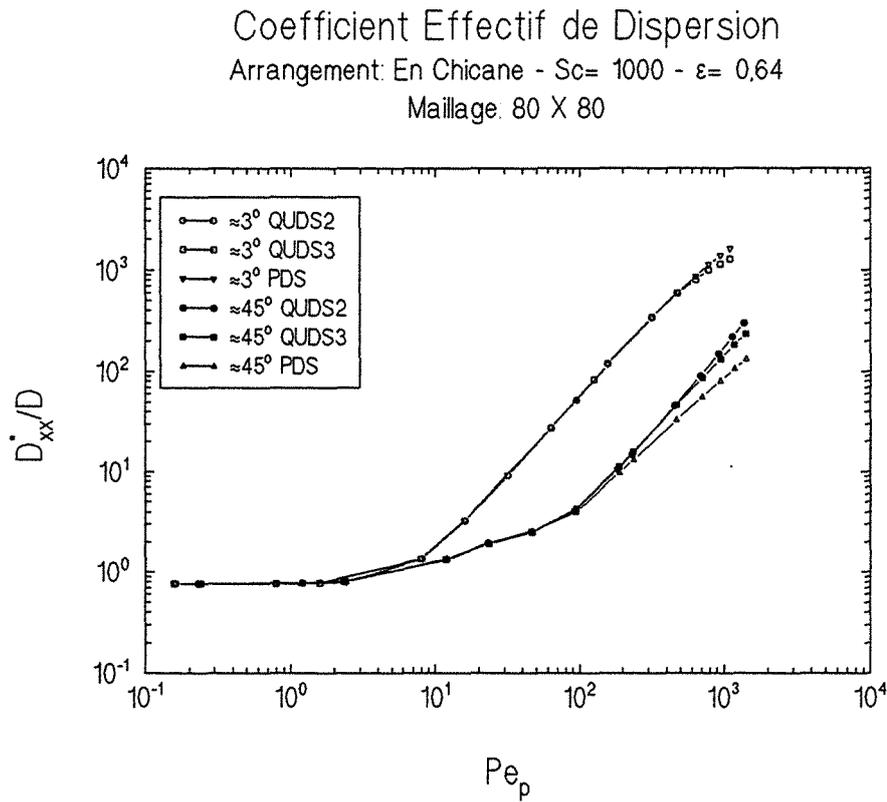


Figure 6.120 - Coefficient de dispersion - différents schémas numériques

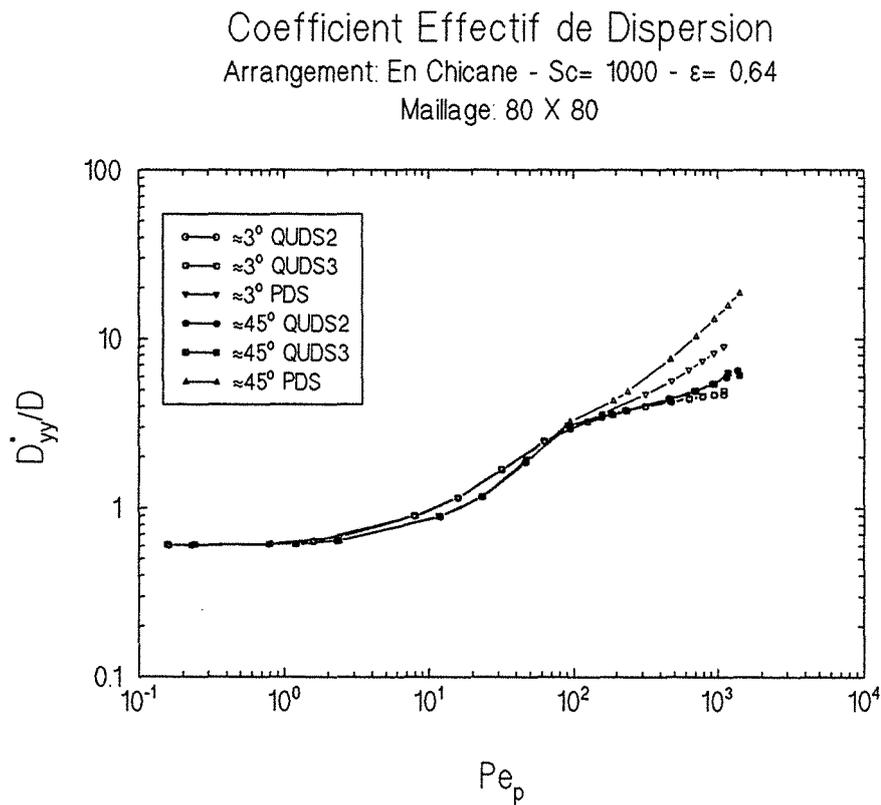


Figure 6.121 - Coefficient de dispersion - différents schémas numériques

Pour le cas du coefficient transversal, on voit que pour les deux valeurs de l'angle θ ($\theta \approx 3^\circ$ et 45°) les résultats obtenus avec les schéma à trois points (PDS) et à quatre points (QUDS) diffèrent de façon significative.

6.7.2-CALCUL DES VALEURS PROPRES

On peut montrer que les valeurs propres du tenseur de dispersion, sont très sensibles à la précision des coefficients du tenseur calculés dans les axes de la cellule unité. La plus petite valeur propre, celle associée généralement au coefficient transversal est la plus sensible à l'imprécision du calcul numérique.

À titre d'illustration on rappelle que:

$$2D_{xx,yy} = (D_{xx} + D_{yy}) \pm \sqrt{(D_{xx} - D_{yy})^2 + 4D_{xy}^2} \quad (39)$$

Par exemple, dans le cas $\theta=45^\circ$, pour le milieu en quinconce, du fait de la symétrie spatiale, on a même numériquement $D_{xx}=D_{yy}$, d'où:

$$D_{xx,yy} = D_{xx} \pm D_{xy} \quad (40)$$

Comme pour les grands nombres de Péclet, D_{xx} et D_{yy} sont très différents, D_{xy} est alors de l'ordre de D_{xx} et une petite erreur de calcul peut conduire à trouver une valeur négative (physiquement absurde) pour la plus petite valeur propre.

6.8-CONCLUSION

Le chapitre 6 contient l'ensemble des résultats présentés pour le problème de diffusion-dispersion. Les conclusions devant être reprises au chapitre 8 qui dresse un bilan plus complet de l'étude, nous nous contenterons d'un rapide résumé.

Après une validation du code de calcul, nous présentons les résultats obtenus pour les différents milieux "ordonnés" (en ligne, en quinconce et en chicane) et "désordonnés" en faisant varier la direction de l'écoulement (angle θ) et le nombre de Reynolds particulière. A chaque fois, nous examinons soigneusement les valeurs propres du tenseur ainsi que la direction de la première direction propre.

Pour les grandes valeurs du nombre de Péclet ($Pe_p \gg 1000$ pour les milieux "ordonnés", $Pe_p \gg 100$ pour les milieux "désordonnés") la première direction propre coïncide bien avec la direction du vecteur vitesse moyenne. On peut alors clairement distinguer dispersion longitudinale et transversale.

Pour les milieux "ordonnés" (cellules unités carrées) les valeurs du coefficient longitudinal pour $\theta=0^\circ$ et 45° présentent un comportement particulier avec une pente m un peu inférieure à 2, tandis que les autres cas présentent une valeur de $m \sim 1,2$. Pour le coefficient transversal, les résultats sont fortement dépendants de l'arrangement.

Pour les milieux "désordonnés", les résultats sont quasi indépendants de l'angle θ et les pentes moyennes valent $m \sim 1,6$ pour le coefficient longitudinal et $m \sim 0,4$ pour le coefficient transversal aux grands nombres de Péclet.

Le passage de l'hydrodynamique du régime de Stokes au régime laminaire inertiel se traduit généralement (il y a quelques exceptions) par une augmentation des coefficients de dispersion beaucoup plus sensible pour le coefficient longitudinal que pour le coefficient transversal.

Les résultats pour les milieux "ordonnés" sont en suite confrontés à la théorie approchée de Koch et Brady [64] dont on peut dire qu'elle fournit essentiellement et uniquement le comportement asymptotique quand la porosité tend vers l'unité. Cette conclusion est confortée par le fait que nos calculs se comparent tout à fait favorablement avec d'autres

résultats numériques publiés pour quelques cas simples (Salles et al [101]).

L'ensemble des résultats (milieux "ordonnés" et "desordonnés") est finalement comparé à l'analyse théorique et expérimentale effectuée pour les milieux réels par Pfannkuch [85]. Le cas "ordonné" est davantage une question de cas d'espèce et demande une étude attentive arrangement par arrangement. Dans le cas "désordonné", le coefficient longitudinal présente les trois premiers régimes de Pfannkuch [85] (diffusion pure, superposition et interférence) mais on n'atteint jamais vraiment le régime hydrodynamique pur attendu. Pour le coefficient transversal, on échappe guère aux deux premiers régimes.

CHAPITRE 7

DIFFUSION-DISPERSION EN RÉGIME TRANSITOIRE

CHAPITRE 7

DIFFUSION-DISPERSION EN RÉGIME TRANSITOIRE

7.1-INTRODUCTION

Le chapitre 7 considère le tenseur effectif D^* comme étant une fonction du temps. C'est-à-dire qu'on résout l'équation de fermeture en f en régime transitoire. La motivation qui nous a amené à traiter le régime transitoire, est le fait que certains milieux réels présentent des zones stagnantes. Comme l'on a vu au paragraphe 1.5.6, le fluide se trouve piégé dans ces zones et les processus de mélange, entre ces régions et l'extérieur, sont dus principalement au phénomène de diffusion.

Afin de valider le code de calcul, le cas de la diffusion-dispersion de Taylor entre deux plans parallèles est revu. Cette fois l'équation de fermeture est prise sous sa forme transitoire.

Finalement le cas d'un arrangement géométrique judicieusement choisi, afin de mettre en évidence les effets dus aux zones stagnantes, est traité.

7.2-ÉQUATIONS DE DISPERSION EN RÉGIME TRANSITOIRE

La méthode de prise de moyenne avec fermeture rend l'extension au problème transitoire (l'hydrodynamique étant indépendante du temps) particulièrement simple et naturelle. Supposons momentanément que le milieu à l'instant initial ($t=0$) est vierge de tout soluté ($c=0$ partout). Notre point de départ est l'équation moyenne (57) et l'équation de fermeture transitoire (68) du chapitre 2 que nous allons écrire ici après transformation de Laplace en temps, p désignant la variable de Laplace, le symbole ' indiquant qu'il s'agit de la fonction transformée. Il vient alors

pour l'équation moyenne:

$$\rho \langle c' \rangle^B + \langle v \rangle^B \cdot \nabla \langle c' \rangle^B = \nabla \cdot \left(\mathcal{D} \nabla \langle c' \rangle^B + \frac{\mathcal{D}}{V} \int_{A_{B\sigma}} \tilde{c}' \, ndA \right) - \nabla \cdot (\langle \tilde{c}' \tilde{v} \rangle^B) \quad (1)$$

L'équation de fermeture s'écrit:

$$\rho \tilde{c}' + v \cdot \nabla \tilde{c}' = \mathcal{D} \nabla^2 \tilde{c}' - \tilde{v} \cdot \nabla \langle c' \rangle^B \quad (2)$$

avec pour \tilde{c}' des conditions aux limites d'imperméabilité sur la surface $A_{B\sigma}$ des particules:

$$-\mathbf{n}_{B\sigma} \cdot \nabla \tilde{c}' = \mathbf{n}_{B\sigma} \cdot \nabla \langle c' \rangle^B \quad (3)$$

Par analogie et avec les mêmes arguments qu'en régime permanent (voir chapitre 2), on cherche la solution du problème de fermeture en \tilde{c}' sous la forme:

$$\tilde{c}' = \mathbf{f}' \cdot \rho \nabla \langle c' \rangle^B \quad (4)$$

où le vecteur \mathbf{f}' dans l'espace de Laplace vérifie dans V_B :

$$\rho \mathbf{f}' + v \cdot \nabla \mathbf{f}' = \mathcal{D} \nabla^2 \mathbf{f}' - \frac{\tilde{v}}{\rho} \quad (5)$$

avec la condition à la limite sur $A_{B\sigma}$:

$$-\mathbf{n}_{B\sigma} \cdot \nabla \mathbf{f}' = \frac{1}{\rho} \mathbf{n}_{B\sigma} \quad (6)$$

Pour un milieu spatialement périodique, on impose de plus à \mathbf{f}' des conditions de périodicité spatiale sur les frontières A_{Be} de la cellule unité.

Après retour de l'espace de Laplace, le problème de fermeture pour un milieu spatialement périodique revient à trouver \mathbf{f} sur une cellule unité, spatialement périodique sur les frontières de la cellule unité, vérifiant:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = \mathcal{D} \nabla^2 f - \tilde{\mathbf{v}} \quad \text{dans } V_B \quad (7)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla f = n \quad \text{sur } A_{B\sigma} \quad (8)$$

et satisfaisant à la condition initiale:

$$f = 0 \quad \text{à } t=0 \quad (9)$$

Il s'agit donc simplement d'une version transitoire du problème en f (équation (75) du chapitre 2) avec une condition initiale nulle.

L'équation moyenne dans l'espace de Laplace s'écrit alors après utilisation de la conjecture (4):

$$\rho \langle c' \rangle^B + \langle \mathbf{v} \rangle^B \cdot \nabla \langle c' \rangle^B = \nabla \cdot \left\{ \left[\mathcal{D} \left(\frac{1}{\rho} \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n f' \, dA \right) + \langle f' \tilde{\mathbf{v}} \rangle^B \right] \cdot \rho \nabla \langle c' \rangle^B \right\} \quad (10)$$

Le retour dans l'espace réel conduit à la relation:

$$\frac{\partial \langle c \rangle^B}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \rangle^B \cdot \nabla \langle c \rangle^B = \nabla \cdot \left\{ \int_{\tau=0}^{\tau=t} \mathbf{D}^*(t-\tau) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \langle c \rangle^B \right)_{\tau} \, d\tau \right\} \quad (11)$$

où

$$\mathbf{D}^*(t) = \mathcal{D} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n f \, dA + \langle f \tilde{\mathbf{v}} \rangle^B \right) \quad (12)$$

Il s'agit donc d'un problème de relaxation linéaire qui est l'extension naturelle du problème permanent traité au chapitre 6. Cette approche rejoint par exemple les approches de diffusion retardée de Smith [113] ou non-locale de Koch et Brady [62] de la littérature.

On vérifie aisément à partir de la relation (12) que $\mathbf{D}^*(0) = \mathcal{D}$ et que $\mathbf{D}^*(t \rightarrow \infty)$ fournit la solution du problème permanent. Enfin si l'on souhaite supprimer la condition d'équilibre $c=0$ et plus généralement éviter d'imposer une condition initiale à l'équation (11), il suffit d'étendre la convolution pour $-\infty < \tau < t$.

L'écriture sous forme adimensionnelle du problème de fermeture (7)-(9)

s'écrit:

$$\boxed{\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla F = \nabla^2 F - \tilde{V}} \quad (13)$$

où $\mathbf{V} = \mathbf{v}L/\mathcal{D}$ est le vecteur vitesse adimensionnelle, $F = f/L$, $t = t\mathcal{D}/L^2$ est le temps adimensionnel où L est la longueur de la cellule unité.

Les conditions aux limites de l'équation (13) sont:

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla F = n \quad \text{sur } A_{\text{so}} \quad (14)$$

$$F(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = F(\mathbf{r}), \quad i=1,2 \quad (15)$$

et l'on ajoute la condition initiale,

$$F = 0 \quad \text{à } t=0 \quad (16)$$

où \mathbf{n} est la normale à l'interface solide-fluide A_{so} dirigée du fluide vers le solide, \mathbf{r} est le vecteur position spatiale d'un point à l'intérieur de la cellule unité et \mathbf{l}_i les mailles de la cellule unité.

On considère désormais que le temps caractéristique du processus de diffusion est du même ordre de grandeur que le temps caractéristique associé aux processus de transfert à l'intérieur de la cellule unité,

$$\frac{\mathcal{D}t}{l^2} \approx 1 \quad (17)$$

7.3-VALIDATION DU CODE NUMÉRIQUE

On a choisi de reprendre le problème de la diffusion-dispersion de Taylor entre deux plans parallèles, présenté au paragraphe 6.3.2, afin de valider le code numérique. Il s'agit de déterminer le tenseur effectif \mathbf{D}^* , en utilisant cette fois l'équation de fermeture en F sous la forme donnée par l'équation (13).

Comme dans les cas déjà traités, il est possible d'obtenir la solution

exacte du problème.

De la résolution de l'équation (13), dans le cas de l'écoulement établi d'un fluide newtonien entre deux plans parallèles (figure 6.8), on peut arriver à la solution exacte¹ pour les deux composantes du vecteur F:

$$F_x(Y,t) = 12Pe \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t}\right) \frac{\cos \beta_m Y}{\beta_m^4} (\cos \beta_m + 1) \quad (18)$$

où $Pe = \langle u \rangle^B L / \mathcal{D}$, et:

$$F_y(Y,t) = -2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t}\right) \frac{\cos \beta_m Y}{\beta_m^2} (\cos \beta_m - 1) \quad (19)$$

où $\beta_m = m\pi$, pour $m=1,2,3,\dots$

À partir des résultats (18) et (19), de la fluctuation de vitesse \tilde{V} (équations (20) et (21) du chapitre 6) et des définitions du tenseur de tortuosité τ et du tenseur hydrodynamique D (équations (8) et (9) du chapitre 6), on peut déterminer les composantes du tenseur effectif de dispersion D^* .

Le calcul du tenseur de tortuosité amène aux résultats suivants:

$$\tau_{xx} = \tau_{xy} = \tau_{yx} = 0 \quad (20)$$

et

$$\tau_{yy} = -2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t}\right) \frac{(\cos^2 \beta_m Y - 2 \cos \beta_m + 1)}{\beta_m^2} \quad (21)$$

En ce qui concerne le tenseur hydrodynamique, ses composantes sont données par:

¹Le développement détaillé se trouve dans l'annexe IV

$$\frac{D_{xx}}{\mathcal{D}} = 72Pe^2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t}\right) \frac{(\cos\beta_m + 1)^2}{\beta_m^6} \quad (22)$$

et

$$D_{xy} = D_{yx} = D_{yy} = 0 \quad (23)$$

Le tenseur effectif de dispersion s'écrit donc:

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}} = 1 + 72Pe^2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t}\right) \frac{(\cos\beta_m + 1)^2}{\beta_m^6} \quad (24)$$

$$\frac{D_{yy}^*}{\mathcal{D}} = 1 - 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t}\right) \frac{(\cos^2\beta_m - 2\cos\beta_m + 1)}{\beta_m^2} \quad (25)$$

et

$$D_{xy}^* = D_{yx}^* = 0 \quad (26)$$

On peut vérifier que tous les résultats trouvés pour la résolution de l'équation de fermeture en régime permanent, sont retrouvés en faisant tendre t vers infini.

Sur la figure 7.1 on montre la solution de l'équation (24)² et la solution numérique, présentées sous la forme $(D_{xx}^*/\mathcal{D} - 1)/Pe^2$ en fonction du temps adimensionnel t . Les résultats calculés pour le coefficient transversal, indépendants du nombre de Péclet sous cette forme, sont confrontés avec la solution théorique (équation (25)) sur la figure 7.2. Les résultats sont obtenus avec un maillage uniforme de 20 X 60 volumes de contrôle et un pas de temps $\Delta t = 1.0 \cdot 10^{-4}$.

Les résultats numériques sont en très bon accord avec les résultats prévus par la théorie.

²Obtenue avec 100 termes de la série

Coefficient Effectif de Dispersion
 Écoulement Entre Deux Plans Parallèles
 Maillage: 20 X 60 - $\Delta t = 1.10^{-4}$

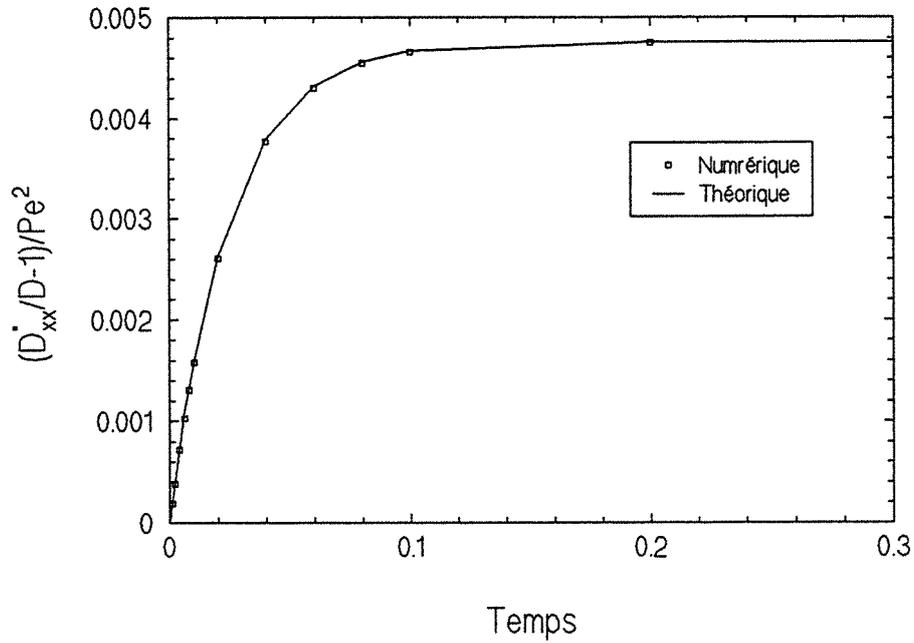


Figure 7.1 - Écoulement entre deux plans - régime transitoire

Coefficient Effectif de Dispersion
 Écoulement Entre Deux Plans Parallèles
 Maillage: 20 X 60 - $\Delta t = 1.10^{-4}$

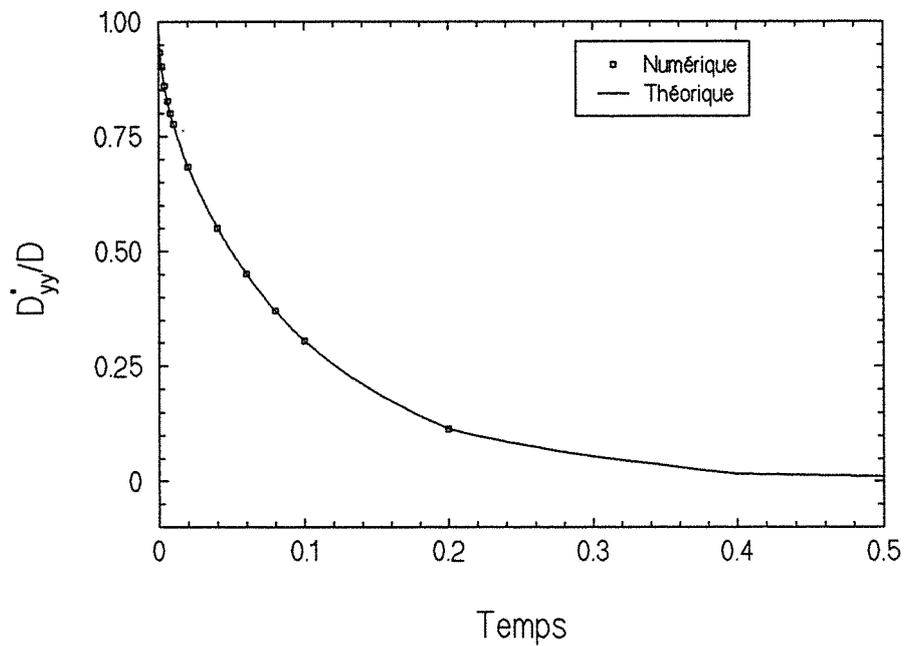


Figure 7.2 - Écoulement entre deux plans - régime transitoire

7.4-RÉSOLUTION DU PROBLÈME DU CANAL CONNECTÉ À UNE CAVITÉ

On a choisi, comme application du problème de la dispersion en régime transitoire, de traiter le problème de l'écoulement d'un fluide newtonien à l'intérieur d'un canal connecté à une cavité (figure 7.3).

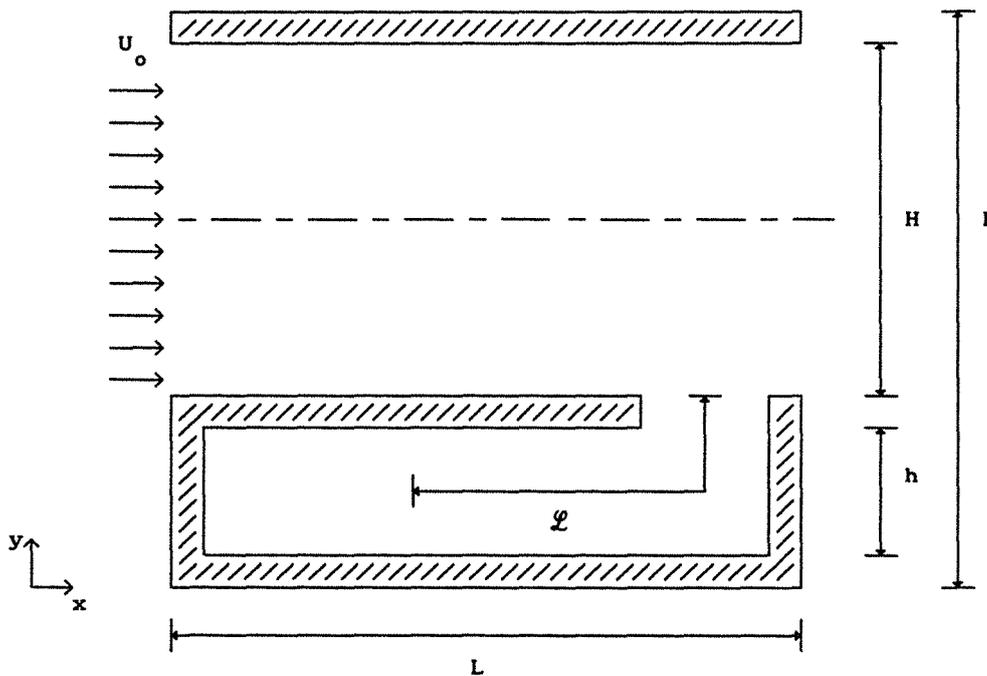


Figure 7.3 - Canal connecté à une cavité

Le but ici est d'introduire le problème de la dispersion en régime transitoire, dans un cas simple, mais fondamental pour la compréhension de l'influence des zones stagnantes (paragraphe 1.5.6) sur le calcul du coefficient effectif de dispersion.

7.4.1-PREMIÈRE SOLUTION APPROCHÉE

Le problème de la dispersion d'un soluté lors de l'écoulement d'un fluide à l'intérieur d'un canal connecté à une cavité, peut être traité par le modèle classique de Coats et Smith [26]. Le modèle traite le problème de la dispersion lorsque une fraction $(1-f)$ du volume de fluide d'un pore est stagnante.

À partir des équations du modèle, gouvernant le transport de masse en régime transitoire, on peut arriver à une expression du coefficient effectif de dispersion [Salles et al, 1993]:

$$\frac{D^*}{\mathcal{D}} = 1 + \left[\frac{1}{210} + (1-f) \left(\frac{\mathcal{L}}{H} \right)^2 \right] \cdot Pe^2 \cdot \left(1 - e^{-t\mathcal{D}/f\mathcal{L}^2} \right) \quad (27)$$

où f est la fraction volumique de fluide mobile, H la hauteur du canal, \mathcal{L} est la distance du centre de la cavité jusqu'au canal (figure 7.3) et $Pe = \langle u \rangle H / \mathcal{D}$ est le nombre de Péclet.

De l'équation (27) on peut obtenir la forme du coefficient effectif en régime permanent, en faisant tendre le temps vers infini. Il vient alors:

$$\frac{D^*}{\mathcal{D}} = 1 + \left[\frac{1}{210} + (1-f) \left(\frac{\mathcal{L}}{H} \right)^2 \right] \cdot Pe^2. \quad (28)$$

On note que pour $(1-f)$ égal à zéro (sans cavité), on récupère la solution du problème de la dispersion entre deux plans parallèles (paragraphe 6.3.2).

7.4.2-DEUXIÈME SOLUTION APPROCHÉE

Afin de pouvoir obtenir une solution approchée du problème de la dispersion d'un soluté lors de l'écoulement d'un fluide à l'intérieur du canal connecté à la cavité, on va supposer que l'on puisse le modéliser par la résolution de l'équation de fermeture pour l'écoulement à l'intérieur du canal quand une fraction du volume de fluide est immobile (figure 7.4). Autrement dit, on considère que le fluide contenu dans la partie supérieure du canal ($h \leq Y \leq 1$) est en mouvement et que dans la partie inférieure ($0 \leq Y \leq h$) il est immobile (toutes les longueurs sont rendues adimensionnelles en les divisant par L). En outre, on considère que sur l'interface "fluide-fluide" on a une condition de non-glissement pour la vitesse.

On peut alors obtenir le coefficient effectif longitudinal si l'on résoud l'équation de fermeture (13) avec les conditions aux limites,

$$\frac{\partial F}{\partial Y}^x = 0 \quad \text{en } Y=0 \text{ et } Y=1 \quad (29)$$

et la condition initiale:

$$F_x = 0 \quad \text{en } t=0 \quad (30)$$

Le terme source dans l'équation de fermeture (13) est dans ce cas donné par:

$$\tilde{U} = -\langle U \rangle \quad 0 < Y < h \quad (31a)$$

avec $U = uL/\nu$, et:

$$\tilde{U} = \langle U \rangle \left\{ \frac{6}{\mathcal{H}} \left[\left(\frac{Y-h}{\mathcal{H}} \right) - \left(\frac{Y-h}{\mathcal{H}} \right)^2 \right] - 1 \right\} \quad h < Y < 1 \quad (31b)$$

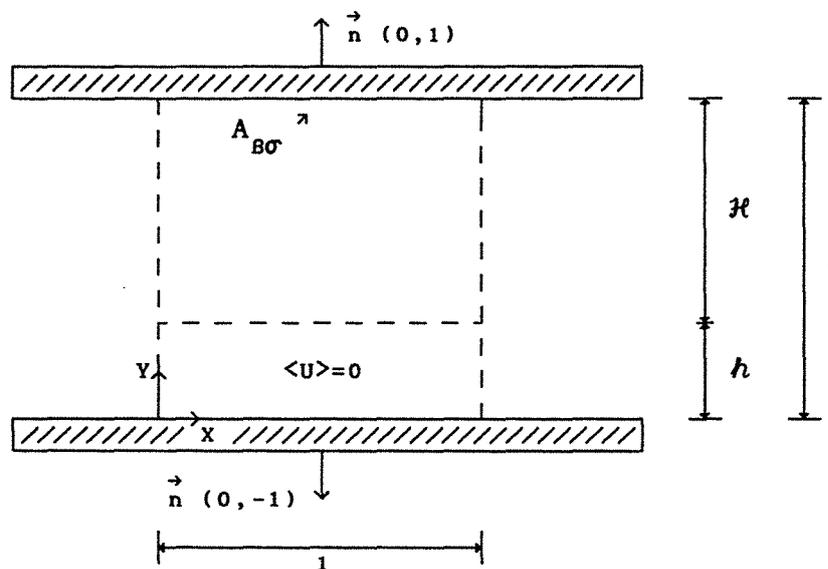


Figure 7.4 - Diffusion-dispersion canal + cavité

La solution F_x du problème de fermeture connue, on peut calculer le coefficient longitudinal par la relation $D_{xx} = -\langle F_x \tilde{U} \rangle$. Le coefficient effectif longitudinal est alors donné par:

$$\frac{D_{xx}^*}{D} = 1 + 72 \frac{(Sc \langle U \rangle \mathcal{H})^2}{\mathcal{H}^6} \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{1}{\beta_m^6} \left(\frac{2 \sin \beta_m h}{\mathcal{H} \beta_m} + \cos \beta_m + \cos \beta_m h \right)^2 \quad (32)$$

où $\beta_m = m\pi$, $t = tD/L^2$ et l'on obtient la solution pour le régime permanent en faisant t tendre vers l'infini³.

On peut aisément vérifier qu'en première approximation le rapport entre la constante de temps donnée par la solution approchée de Coats et Smith [26] (équation (27)) et la première constante de temps donnée par la notre solution approchée (équation (32)), vaut en moyenne à peu près 2,6 pour l'ensemble des trois cavités. On doit donc s'attendre à ce que le régime asymptotique soit atteint plus rapidement par notre modèle (équation (32)). L'explication est bien sûr que ce dernier considère une longueur de diffusion pour la zone stagnante beaucoup plus courte de l'ordre de h alors que le modèle de Coats et Smith [26] retient \mathcal{L} (voir figure 7.3).

7.4.3-RÉSOLUTION EN RÉGIME PERMANENT

On a calculé le coefficient effectif de dispersion pour trois rapports H/h différents, où h est la hauteur de la cavité (figure 7.3). Le tableau 7.1 contient les caractéristiques géométriques des cas étudiés.

Cavité	\mathcal{H}	h	$(1-f)$	\mathcal{L}
1	0,8875	0,075	0,0713	0,5125
2	0,8125	0,15	0,1425	0,55
3	0,7375	0,225	0,2137	0,5875

Tableau 7.1 - Caractéristiques géométriques

Ensuite, sur les figures 7.5 à 7.8, on montre les résultats numériques obtenus en régime permanent, pour les trois géométries du canal+cavité étudiées. Les résultats ont été obtenus avec un maillage uniforme de 40 X 80 volumes de contrôle, un critère de convergence $\mathcal{E}=1\cdot 10^{-5}$ et un nombre de Schmidt égal à 1000.

³ Le développement détaillé se trouve dans l'annexe IX

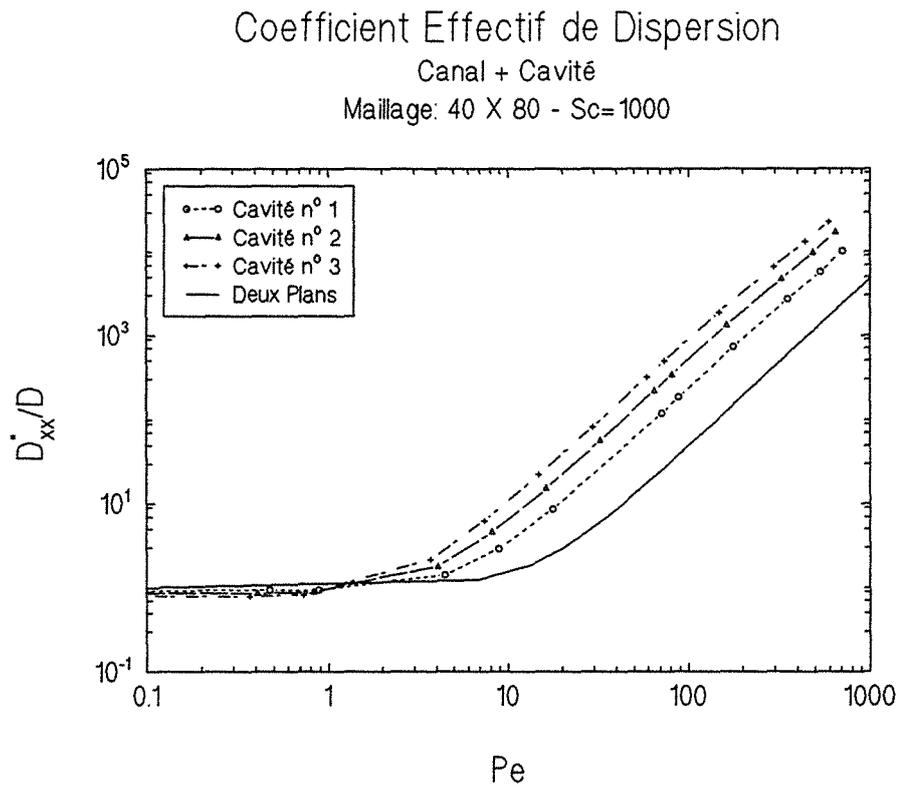


Figure 7.5 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité

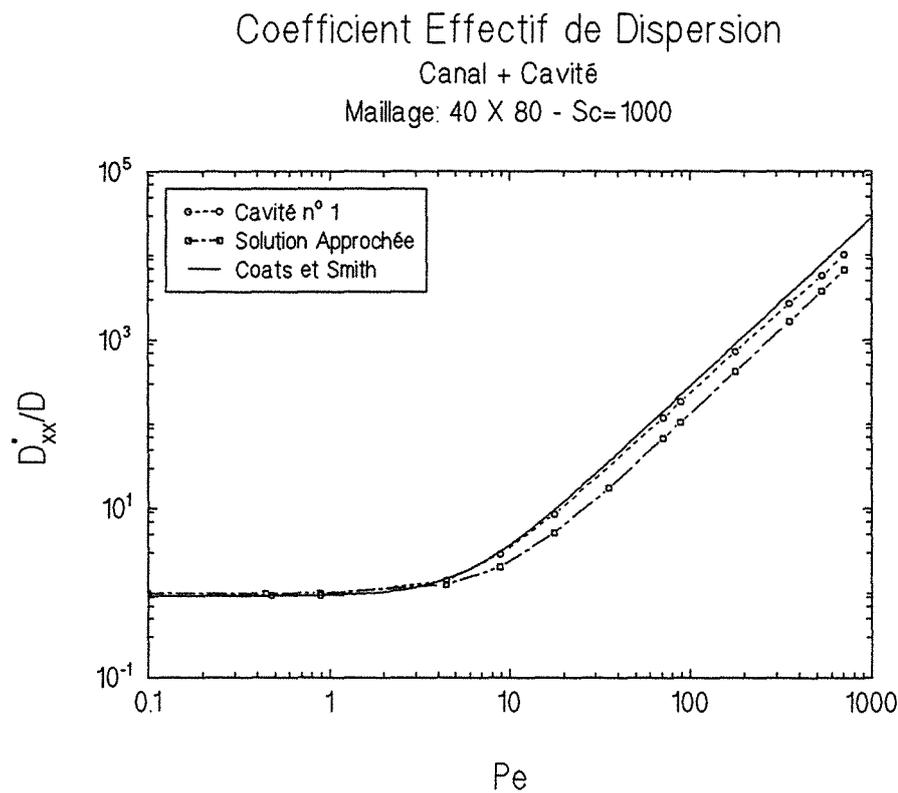


Figure 7.6 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 1

Coefficient Effectif de Dispersion

Canal + Cavité

Maillage: 40 X 80 - Sc=1000

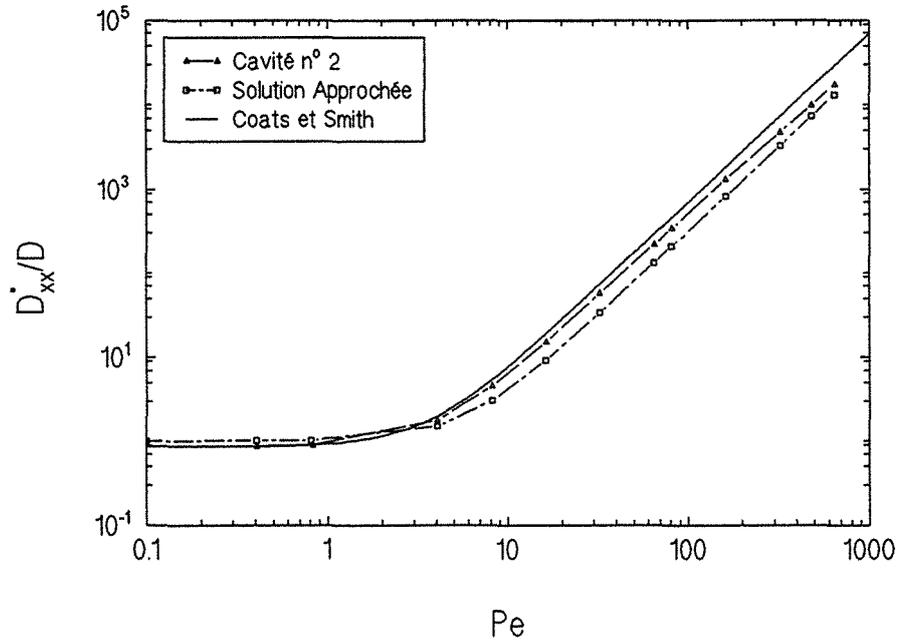


Figure 7.7 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 2

Coefficient Effectif de Dispersion

Canal + Cavité

Maillage: 40 X 80 - Sc=1000

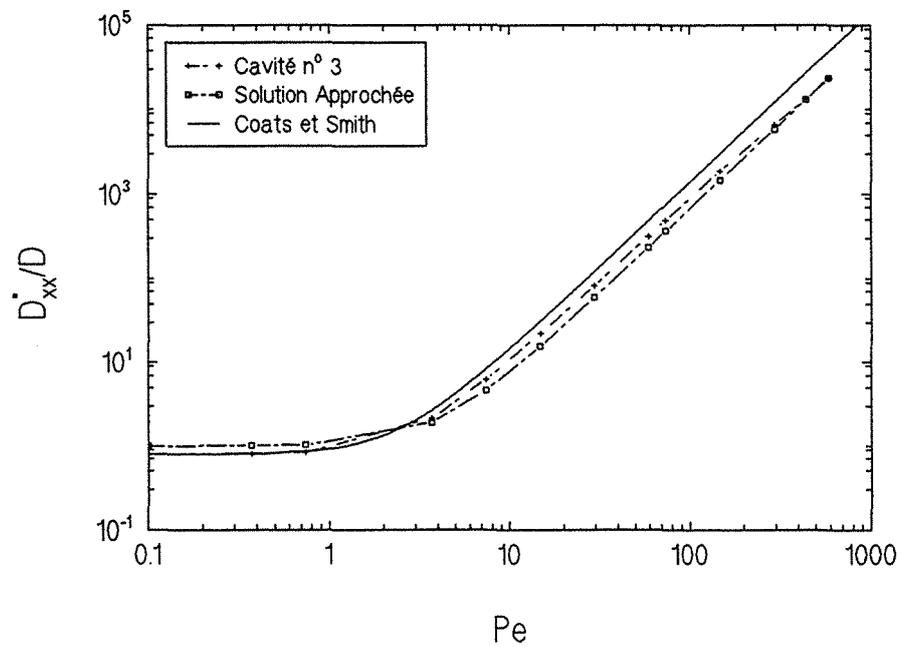


Figure 7.8 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 3

La figure 7.5 montre les résultats numériques obtenus pour les troiscavités et en trait continu la solution du problème de dispersion entre deux plans parallèles. On peut donc avoir une idée de l'augmentation, par rapport au cas des deux plans parallèles, du coefficient effectif de dispersion due à l'introduction de la cavité.

Sur les figures 7.6 à 7.8, on compare nos résultats numériques à ceux prédits par les équations (28) et (32)⁴. Tout d'abord on remarque que nos résultats numériques ne présentent pas une variation en Pe^2 ($Pe = \langle u \rangle H / \mathcal{D}$), surtout pour les point calculés pour des nombres de Péclet proches de 10^3 , déviation dont on ne connaît pas l'origine. D'une façon générale, l'ensemble des résultats se trouvent compris entre les valeurs prévues par les équations (28) et (32). Les résultats calculés à partir de la théorie approchée de Coats et Smith [26] semblent représenter de façon raisonnable les résultats obtenus pour la cavité n° 1, tandis que les résultats approchés issus de l'équation (32) sont plus proches des résultats calculés pour la cavité n° 3.

7.4.3-RÉSOLUTION EN RÉGIME TRANSITOIRE

Finalement, on a résolu le problème de fermeture (équations (1)-(4)) en régime transitoire, pour les trois géométries du canal+cavité étudiées (tableau 7.1).

Les résultats numériques $(D_{xx}^* / \mathcal{D} - 1) / Pe^2$ en fonction du temps adimensionnel t , sont montrés pour les trois cavités sur les figures 7.9 à 7.12. Le maillage et le nombre de Schmidt sont les mêmes que ceux déjà utilisés pour la résolution du problème en régime permanent. Un pas de temps Δt variable est employé afin de pouvoir calculer le coefficient effectif pour la plage $10^{-3} < t < 10$. Les résultats ont été calculés pour les trois cavités avec $\langle u \rangle L / \mathcal{D} = 100$.

On a pu vérifier que pour t de l'ordre de 10, les résultats correspondent à la résolution du problème en régime permanent. D'autre part, D^* / \mathcal{D} vaut 1 lorsque t tend vers zéro. En plus, pour les trois cavités, la valeur asymptotique est atteint pour un temps t de l'ordre de 1

⁴ Calculés avec 100 termes de la série.

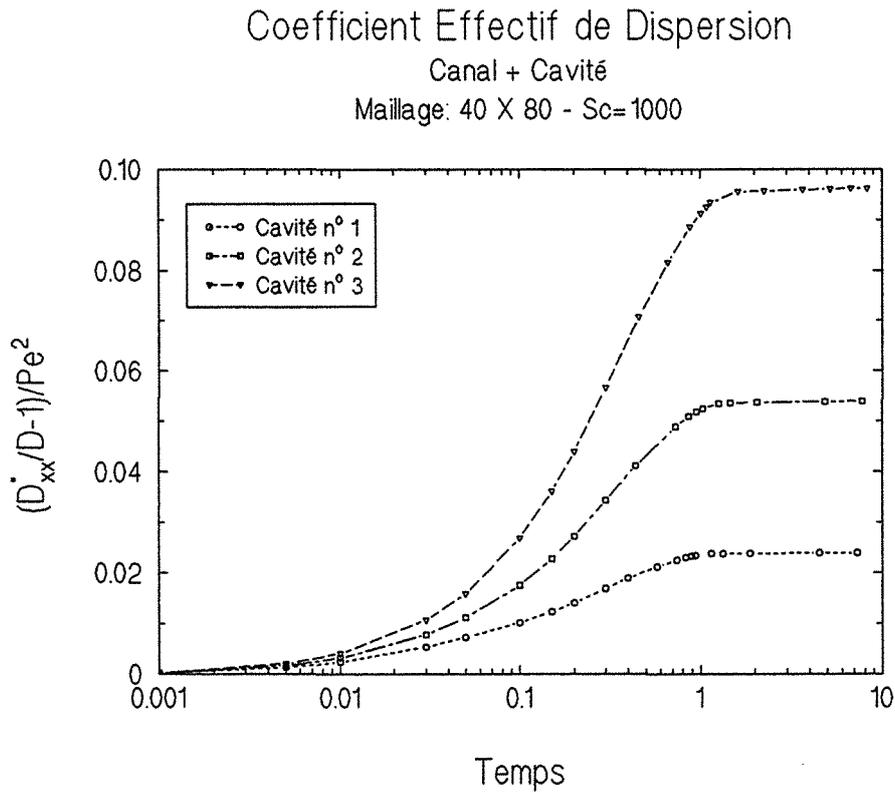


Figure 7.9 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité

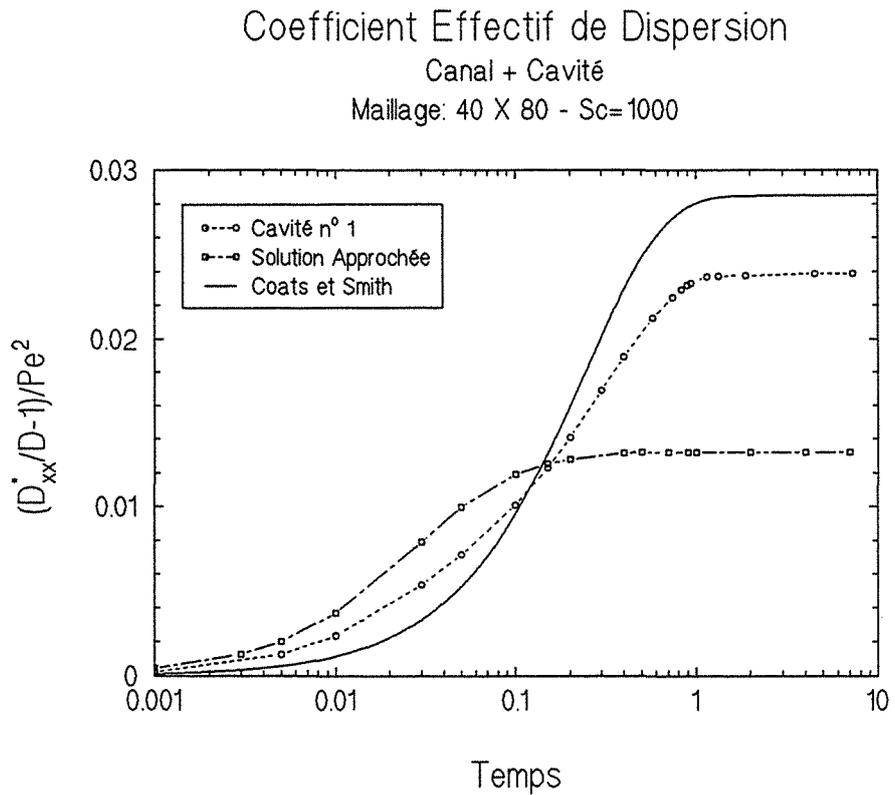


Figure 7.10 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 1

Coefficient Effectif de Dispersion

Canal + Cavité

Maillage: 40 X 80 - Sc=1000

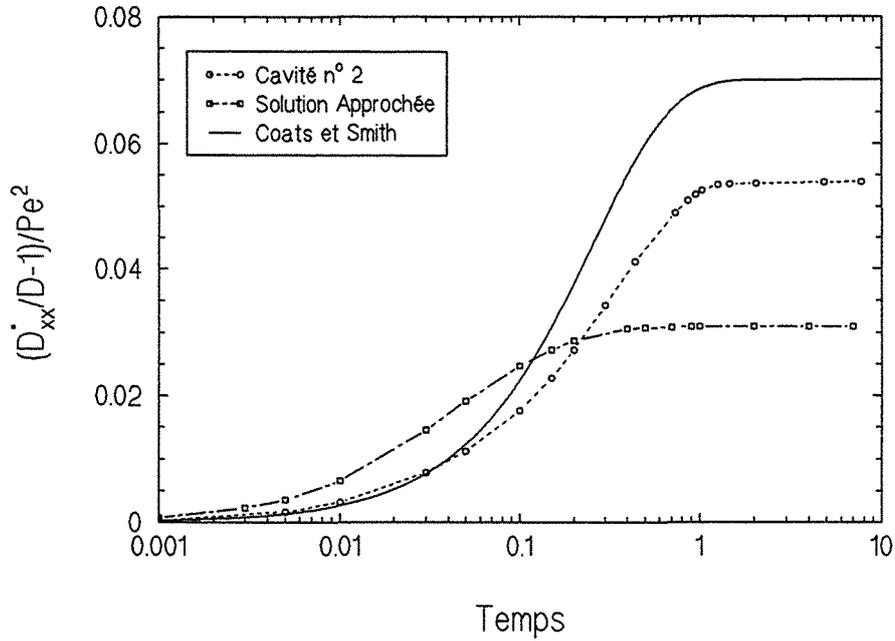


Figure 7.11 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 2

Coefficient Effectif de Dispersion

Canal + Cavité

Maillage: 40 X 80 - Sc=1000

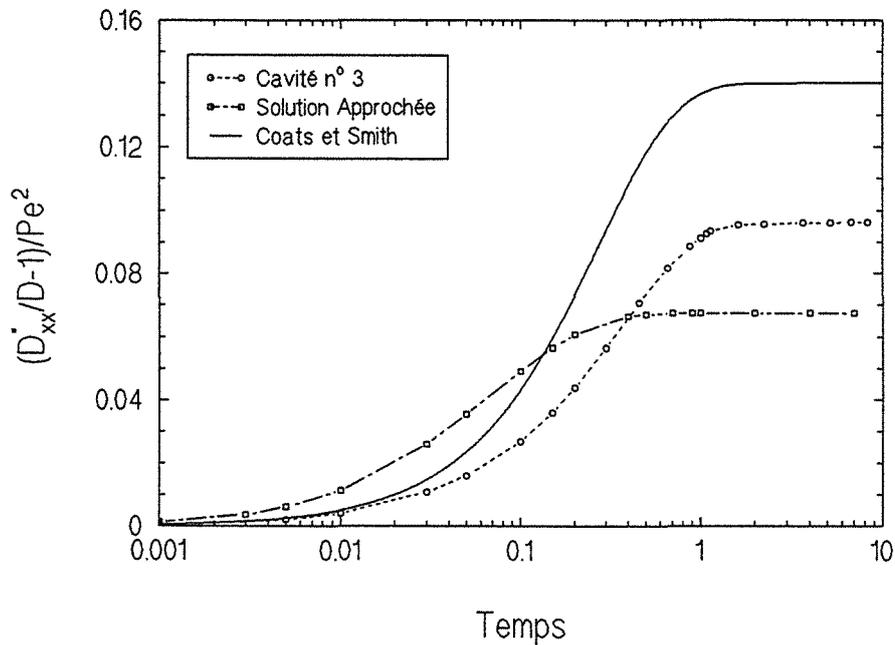


Figure 7.12 - Coefficient effectif de dispersion - canal + cavité n° 3

(figure 7.9).

Sur les figures 7.10 à 7.12, on compare nos résultats avec ceux prévus par la théorie approchée de Coats et Smith [26] (équation (27)) et par notre solution approchée (équation (32)).

Comme l'on s'y attendait déjà, vu que l'on n'obtient pas les mêmes valeurs en régime permanent (figures 7.6 à 7.8), les courbes ne sont pas en accord quantitatif. Néanmoins, sur le plan qualitatif, on note que le régime permanent est aussi atteint pour $t \approx 1$ dans le cas de la théorie approchée de Coats et Smith [26], ce qui indique un bon accord entre la constante de temps prévue par cette théorie et par les résultats numériques. Le cas où les résultats semblent être les mieux représentés est celui de la cavité n° 1, comme c'était déjà le cas pour le régime permanent. En ce qui concerne notre solution approchée, on atteint le régime asymptotique pour $t \approx 0,4$, ce qui nous donne comme prévu un rapport 2,5 environ entre les constantes de temps des équations (27) et (32).

7.5-CONCLUSION

On a voulu simplement, dans ce chapitre, étendre la solution du problème de dispersion-diffusion au régime transitoire pour attirer ainsi l'attention sur l'importance des processus transitoires pour le calcul du coefficient effectif de dispersion. On n'a pas envisagé une étude approfondie du problème, mais plutôt voulu montrer que l'équation de fermeture issue de la prise de moyenne volumique, se prête bien à l'étude de la dispersion en régime transitoire.

La solution théorique du problème de la dispersion en régime transitoire conduit à un modèle de relaxation linéaire. Un essai de résolution entre deux plans parallèles sert à la validation du code de calcul numérique. Une très bonne concordance est obtenue entre les résultats théoriques et les résultats numériques.

Enfin, le cas de la dispersion d'un soluté lors de l'écoulement d'un fluide à l'intérieur d'un canal connecté à une cavité a été traité. La solution du problème est obtenue pour les régimes permanent et transitoire. Les résultats sont comparés à ceux prévus par la solution approchée de Coats et Smith [26] et par une deuxième solution approchée basée sur un modèle simplifié. Un accord qualitatif raisonnable est obtenu, mais les résultats diffèrent de façon significative d'un point de vue quantitatif.

La résolution du problème de fermeture en régime transitoire peut s'avérer nécessaire pour la détermination des coefficients effectifs de dispersion dans des milieux "désordonnés" où l'on a pu constater la présence de zones stagnantes d'assez grande envergure spatiale où les processus de transport doivent être traités en régime transitoire.

CHAPITRE 8

CONCLUSION

CHAPITRE 8

CONCLUSION

8.1-CONCLUSION GÉNÉRALE

Ce travail avait pour but (peut-être ambitieux) d'étudier l'influence, sur le calcul du tenseur de dispersion, de la géométrie des arrangements, de la direction de l'écoulement moyen et de la condition de périodicité.

Dans un premier temps les mécanismes qui mènent au processus de dispersion sont introduits et les principales difficultés rencontrées pour créer un modèle simplifié représentant les processus complexes de transport qui ont lieu dans un milieu réel sont commentées.

Ensuite, dans une brève revue de la littérature, les principales approches mathématiques qui permettent de traiter le problème de dispersion en milieu poreux sont exposées. On a retenu pour la réalisation de ce travail une approche déterministe. Les équations macroscopiques gouvernant les processus de transport sont alors obtenues à partir des équations de bilan microscopique par une prise de moyenne volumique à l'aide du théorème de prise de moyenne. Le problème de fermeture est introduit afin de rendre possible la détermination du tenseur effectif de dispersion.

Une étude hydrodynamique de l'écoulement d'un fluide incompressible (gouverné par l'équation de Navier-Stokes) au travers d'arrangements de cylindres ordonnés (en ligne, en quinconce et en chicane) aussi bien qu'au travers des arrangements désordonnés a été entreprise.

L'objectif est d'évaluer la pertinence de l'utilisation des arrangements bidimensionnels afin de représenter l'hydrodynamique d'un milieu réel donc tridimensionnel. On s'est surtout intéressé au calcul de la perte de charge. En outre, on a essayé de déterminer le type de

correction non linéaire à la loi de Darcy pour les différents régimes d'écoulement. On a pu montrer, calcul à l'appui, que les arrangements géométriques bidimensionnels présentent des pertes de charge qui sont supérieures à celles prévues par l'équation d'Ergun [38] ou plutôt par sa forme modifiée donnée par MacDonald et al [69].

En ce qui concerne la correction non linéaire de la loi de Darcy, on a constaté que pour des nombres de Reynolds particuliers intermédiaires ($\sim 4 < Re_p < \sim 40$), une correction proportionnelle au cube de la vitesse de Darcy paraît bien décrire l'évolution de la perte de charge. Pour des nombres de Reynolds particuliers élevés, une variation quadratique semble la plus appropriée pour la représentation de la perte de charge. Ce type de variation est en accord avec d'autres travaux que nos résultats viennent renforcer.

Le problème de la diffusion pure est étudié pour les mêmes types d'arrangements. Les coefficients effectifs de diffusion sont confrontés, dans le cas des arrangements ordonnés et pour diverses porosités, aux résultats de Maxwell, à des résultats analytiques approchés de type résistance équivalente et à d'autres résultats numériques. Une très bonne concordance est trouvée et la méthode semble bien adaptée pour la détermination du coefficient effectif de diffusion pour les arrangements ordonnés. Les arrangements désordonnés sont étudiés pour trois valeurs de la porosité ($\varepsilon_{\beta} \cong 0,7, 0,79$ et $0,87$). Tout d'abord on montre qu'en moyenne les milieux sont à peu près isotropes vis-à-vis du processus de diffusion. Ce résultat est encourageant dans la mesure où l'on s'attend à une isotropie des milieux aléatoires vis-à-vis du processus de diffusion. Nos résultats sont aussi confrontés à ceux de Adler [1] pour des arrangements bidimensionnels de cylindres distribués de façon aléatoire. Une concordance raisonnable est trouvée avec ses résultats.

La diffusion-dispersion en milieu poreux est ensuite abordée. On calcule pour les mêmes arrangements "ordonnés" et "désordonnés" le tenseur effectif de dispersion.

On commence par étudier l'influence des différents arrangements ordonnés sur le tenseur effectif de dispersion. Puis on fait varier la direction de l'écoulement moyen d'un angle θ par rapport à l'axe OX de la cellule unité, l'angle θ variant entre 0° et 45° .

On constate que dans le cas en ligne et en quinconce pour un

écoulement parallèle à l'axe OX ($\theta=0^\circ$) ou parallèle à la première bissectrice ($\theta=45^\circ$), le coefficient longitudinal présente des valeurs de l'exposant m ($D^*/D \cong A Pe_p^m$) différentes des autres angles. Suivant le type d'arrangement, on note une dépendance plus ou moins accentuée en Pe_p . Au fur et à mesure que l'on augmente la porosité ε_p , on constate pour $\theta=0^\circ$ et 45° , une valeur de l'exposant m qui s'approche de 2.

Les résultats calculés pour des valeurs de l'angle θ autres que 0° et 45° , montrent un comportement différent. Pour les trois types d'arrangement "ordonnés", on observe un exposant m pour le coefficient longitudinal qui est nettement différent de la valeur 2 et des valeurs trouvées pour $\theta=0^\circ$ et 45° . En moyenne les résultats pour les autres valeurs de l'angle θ ($\theta=5,625^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$, $33,75^\circ$ et 45°) peuvent être caractérisés par un exposant $m \cong 1,2$. On voit donc que la direction de l'écoulement moyen a une importance considérable sur le calcul du tenseur effectif de dispersion.

Le coefficient transversal quant à lui présente des valeurs très faibles par rapport aux valeurs attendus. Dans le cas en ligne, il semble tendre vers une valeur asymptotique; dans le cas en quinconce, le comportement est très dépendant de l'angle θ .

Enfin on a pu étudier aussi l'importance du nombre de Reynolds particulière sur le calcul du tenseur effectif de dispersion. En régime de Stokes les résultats sont indépendants du nombre de Schmidt. Le nombre de Péclet particulière est alors l'unique nombre adimensionnel approprié pour décrire les variations du tenseur de dispersion. Au delà, pour des nombres de Reynolds particulières de l'ordre de 20, on remarque un changement important du comportement du coefficient longitudinal, surtout pour des valeurs de l'angle θ différentes de 0° et 45° .

En ce qui concerne les arrangements "désordonnés", l'ensemble des milieux étudiés présentent un comportement assez uniforme vis-à-vis de la variation de l'exposant m . On trouve pour le coefficient effectif longitudinal un exposant moyen $m=1,62$ avec un écart type de 0,11, ceci pour les vingt arrangements désordonnés employés pour un angle $\theta=45^\circ$. On retrouve à peu près les mêmes valeurs de m pour quatre valeurs de l'angle θ ($\theta \cong 23^\circ$, 33° , 45° et 57°). De toute manière, les valeurs de m calculées sont supérieures à la valeur prévue par l'expérience ($m \cong 1,2$) pour les milieux réels mais tridimensionnels.

L'influence du nombre de Reynolds particulière sur le calcul du tenseur de dispersion est moins accentuée pour les arrangements désordonnés. On trouve approximativement les mêmes exposants moyens pour l'ensemble des dix milieux étudiés avec les nombres de Schmidt égaux à 100 ou 1000.

Une confrontation est faite entre nos résultats calculés pour les arrangements en ligne et en quinconce avec les résultats prévus par la théorie approchée de Koch et Brady [64]. On ne considère que les résultats obtenus pour $Sc=1000$ pour un angle θ compris entre 0° et 45° . Un assez bon accord est trouvé pour le coefficient longitudinal pour les angles $\theta=0^\circ$ et 45° . Dans ce cas la théorie prévoit un exposant $m=2$ pour les milieux périodiques avec de faibles fractions de solide. Néanmoins, les résultats diffèrent pour le coefficient transversal, où la théorie prévoit que le coefficient de dispersion tende vers une valeur limite. Les résultats diffèrent encore davantage pour les autres valeurs de l'angle θ ($\theta=5,625^\circ$, $11,25^\circ$, $22,5^\circ$, $33,75^\circ$ et 45°). La théorie approchée prédit soit une valeur de l'exposant $m=2$ soit une valeur limite du coefficient de dispersion selon les différentes valeurs de l'angle θ . Nos résultats pour le coefficient longitudinal ont en moyenne $m \approx 1,2$ et l'ensemble des courbes ne semblent pas tendre vers un comportement de type asymptotique. De même, le comportement pour le coefficient transversal ne suit pas celui prévu par la théorie approchée.

Nos résultats sont aussi confrontés aux résultats numériques de Edwards et al [37] et Salles et al [101]. On compare les valeurs des coefficients effectifs calculés pour les arrangements en ligne et en quinconce et pour différentes valeurs de l'angle θ . Un très bon accord est trouvé pour $\theta=0^\circ$ et les porosités $\varepsilon_B=0,64$ et $0,84$, à l'exception des résultats pour le coefficient longitudinal de Edwards et al pour l'arrangement en quinconce. Les différentes valeurs des coefficients longitudinal et transversal obtenus en faisant varier la direction de l'écoulement moyen, sont en accord meilleur que qualitatif avec les résultats correspondants calculés par Salles et al [101].

Sur le plan numérique, on montre l'importance de la discrétisation des termes convectifs pour le calcul du tenseur effectif de dispersion. On peut conclure que l'utilisation de schémas qui minimisent les erreurs dues à diffusion numérique sont nécessaires afin d'éviter des fausses tendances

que l'on peut trouver par l'emploi de schémas non appropriés.

Enfin, on étend le problème de diffusion-dispersion au régime transitoire. Le terme diffusif de l'équation moyenne se transforme alors en un terme de relaxation linéaire. Le problème de fermeture traité en régime transitoire permet de calculer le tenseur de relaxation fonction du temps. La démarche est appliquée au cas d'un écoulement avec une zone stagnante et les résultats sont confrontés au modèle de Coats et Smith [26].

Au bilan, nous avons mis au point un code de calcul bidimensionnel performant permettant de traiter l'hydrodynamique et les transferts convectifs en géométrie périodique.

Sur le plan hydrodynamique, aussi bien pour les milieux "ordonnés" que "désordonnés", nous avons obtenu un bon accord qualitatif pour le régime de Stokes et laminaire inertiel par rapport à l'image que l'on a des milieux réels. Le passage à un accord quantitatif exigerait certainement de passer de deux à trois dimensions d'espace.

L'examen de la littérature montre que pour un problème de diffusion pure un modèle périodique bien choisi permet de retrouver des résultats proches des milieux réels. Les quelques calculs effectués, notamment pour les milieux aléatoires, confirment ce point de vue.

Le problème de diffusion-dispersion apparaît beaucoup plus exigeant que les deux problèmes précédents. Bien que le comportement des milieux ordonnés et désordonnés soient différents, aucun des deux ne permet de reproduire de façon tout à fait satisfaisante le comportement des milieux réels. On peut s'interroger pour savoir si le passage à trois dimensions d'espace améliorerait les résultats. En ce qui concerne les conditions de périodicité imposée, leur influence sur les résultats obtenus, même pour les milieux "ordonnés" semble plus faible que celle prédite par les travaux théoriques. La complexité introduite avec les milieux "désordonnés" semble également de nature à contrebalancer cette influence mais sans toutefois permettre d'atteindre les résultats attendus pour des milieux réels.

8.2-TRAVAUX FUTURS

La compréhension des différents processus de transport en milieu poreux exige encore des nombreuses études approfondies s'appuyant sans doute pour une large part sur des confrontations théorie-expérience

rigoureuses.

Le succès relatif obtenu pour la description de l'hydrodynamique des milieux poreux donnerait envie de poursuivre l'étude au-delà du régime laminaire inertiel pour atteindre le régime laminaire instationnaire. Mais il s'agit sans doute d'un objectif très ambitieux à court terme.

La diffusion pure, du fait de la complexité modeste des calculs à mettre en œuvre, est vraisemblablement un bon laboratoire pour tenter d'élucider l'influence de la taille finie des arrangements "désordonnés" étudiés et la manière dont la statistique observée pour les coefficients de diffusion "converge" vers l'amas infini. La littérature incline à penser que cette convergence est d'autant plus difficile que l'on est au voisinage du seuil de percolation.

Les mêmes remarques valent bien sûr aussi pour le problème de diffusion-dispersion mais avec une lourdeur numérique beaucoup plus grande.

Enfin, le calcul du tenseur de relaxation en régime transitoire dans des géométries plus réalistes que le canal connecté à une cavité serait profitable à l'étude de la dispersion en milieu poreux.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [01] Adler, P. M., **Porous Media, Geometry and Transports**, Butterworth-Heinemann Series in Chemical Engineering, 1992.
- [02] Aggarwal, S.K., **Numerical Study of Convection-Diffusion-Reaction Equations for Large Damkohler and Cell Reynolds Number**, Numerical Heat Transfer, vol. 11, pg. 143-164, 1987.
- [03] Amano, R.S., **A Numerical Study of Laminar and Turbulent Heat Transfer in a Periodically Corrugated Wall Channel**, Journal of Heat Transfer, vol. 107, pg. 564-569, 1985.
- [04] Amano R.S., Bagherlee, A., Smith, R. J. et Niess, T. G., **Turbulent Heat Transfer in Corrugated-Wall Channels with and without Fins**, Journal of Heat Transfer, vol. 109, pg. 62-67, 1987.
- [05] Amaral Souto, H. P., **Diffusion-Dispersion en Milieux Poreux**, D.E.A., Institut National Polytechnique de Lorraine, 1989.
- [06] Anderson, T. B. et Jackson, R., **A Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds**, Ind. Eng. Chem. Fundam., vol. 6, 4, pg. 527-539, 1967.
- [07] Aris, R., **On the Dispersion of a Solute in a Fluid Flow through a Tube**, Proc. Roy. Soc., A 235, pg. 67-77, 1956.
- [08] Aris, R. et Amundson, N. R., **Some Remarks on Longitudinal Mixing or Diffusion in Fixed Beds**, AIChE Journal, vol. 3, 2, pg. 280-282, 1957.
- [09] Aris, R., **Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1962.
- [10] Bachmat, Y. et Bear, J., **The General Equation of Hydrodynamic Dispersion in Homogeneous, Isotropic, Porous Mediums**, Journal of Geophysical Research, vol. 69, 12, pg. 2561-2567, 1964.

- [11] Baron, T., **Generalized Graphical Method for the Design of Fixed Bed Catalytic Reactors**, Chemical Engineering Progress, vol. 48, 3, pg. 118-124, 1952.
- [12] Bear, J., **On the Tensor Form of Dispersion in Porous Media**, Journal of Geophysical Research, vol. 66, 4, pg. 1185-1197, 1961.
- [13] Bear, J., **Dynamics of Fluids in Porous Media**, Dover, 1988.
- [14] Bear, J., **Eight Lectures on Mathematical Modeling Transport in Porous Media**, Theory and Applications of Transport in Porous Media, Bear, J. et Buchlin, J-M. Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [15] Bell, G. E. et Crank, J., **Influence of Imbedded Particles on Steady-State Diffusion**, J. Chem. Soc. Faraday Trans. II, 70, pg. 1259-1273, 1974.
- [16] Bensoussan, A., Lions, J. L. et Papanicolau, G., **Asymptotic Analysis for Periodic Structures**, North Holland, Amsterdam, 1978.
- [17] Bird, R. B., Stewart, W. E. et Lightfoot, E. N., **Transport Phenomena**, John Wiley & Sons, 1960.
- [18] Braga, W., **On the Use of Some Weighted Upwind Schemes for Strongly Convective Flows**, Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 17, pg. 43-62, 1990.
- [19] Brenner, H., **Dispersion Resulting from Flow through Spatially Periodic Porous Media**, Phil. Trans. Roy. Soc., vol. 297, pg. 81-133, 1980.
- [20] Brenner, H. et Adler, P. M., **Dispersion Resulting from Flow through Spatially Periodic Porous Media, II. Surface and Intraparticle Transport**, Phil. Trans. R. Soc. Lond., A 307, pg. 149-200, 1982.
- [21] Burggraf, O.R., **Analytical and Numerical Studies of the Structure of Steady Separated Flows**, J. Fluid Mech., vol. 24, 1, pg. 113-151, 1966.
- [22] Carbonell, R.G., et Whitaker, S., **Dispersion in Pulsed Systems II**, Chemical Engineering Science, vol. 38, 11, pg. 1795-1802, 1983.
- [23] Carbonell, R. G. et Whitaker, S., **Heat and Mass Transfer in Porous Media**, Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media, Martinus Nijhoff Publishers, pg. 123-198, Dordrecht, The Netherlands, 1984.
- [24] Carslaw, H. S. et Jaeger, J. C., **Conduction of Heat in Solids**, Oxford at Clarendon Press, 1959.
- [25] Chang, H.-C., **Multi-Scale Analysis of Effective Transport in Periodic Heterogeneous Media**, Chem. Eng. Commun., vol. 15, pg. 83-91, 1982.

- [26] Coats, K. H. et Smith, B. D., **Dead-End Pore Volume and Dispersion in Porous Media**, Society of Petroleum Engineers Journal, vol. 4, pg. 73-84, 1964.
- [27] Coulaud, O, Morel, P. et Caltagirone, J.P., **Numerical Modelling of Nonlinear Effects in Laminar Flow through a Porous Medium**, J. Fluid Mech., vol. 190, pg. 393-407, 1988.
- [28] Crapiste, G.H., Rotstein, E. et Whitaker, S., **A General Closure Scheme for the Method of Volume Averaging**, Chemical Engineering Science, vol. 41, pg. 227-235, 1986.
- [29] Crank, J., **The Mathematics of Diffusion**, Clarendon Press, Oxford, 1975.
- [30] De Josselin de Jong, G., **Longitudinal and Transverse Diffusion in Granular Deposits**, Transactions American Geophysical Union, vol. 39, 1, pg. 67-74, 1958.
- [31] De Josselin de Jong et Bossen, M. J., **Discussion of Paper by Jacob Bear "On the Tensor Form of Dispersion in Porous Media"**, Journal of Geophysical Research, vol. 66, 10, pg. 3623-3624, 1961.
- [32] De Vahl Davis, G. et Mallinson, G. D., **An Evaluation of Upwind and Central Difference Approximations by a Study of Recirculating Flow**, Computers and Fluids, vol. 4, pg. 29-43, 1976.
- [33] Dulien, F. A. L., **Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure**, Academic Press, 1979.
- [34] Dybbs, A. et Edwards R. V., **A New Look at Porous Media Fluid Mechanics - Darcy to Turbulent**, Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media, Martinus Nijhoff Publishers, pg. 199-256, Dordrecht, The Netherlands, 1984.
- [35] Eidsath, A., Carbonell, R.G., Whitaker, S. et Hermann, L.R., **Dispersion in Pulsed Systems III**, Chemical Engineering Science, vol. 38, 11, pg. 1803-1816, 1983.
- [36] Edwards, D.A., Shapiro, M., Bar-Yoseph, P. et Shapira, M., **The Influence of Reynolds Number Upon Apparent Permeability of Spatially Periodic Arrays of Cylinders**, Phys. Fluids, A 2, 1, pg. 45-55, 1990.
-  [37] Edwards, D. A., Shapiro M., Brenner H. et Shapira M., **Dispersion of Inert Solutes in Spatially Periodic, Two-Dimensional Model Porous Media**, Transport in Porous Media, vol. 6, pg. 337-358, 1991.
- [38] Ergun, S., **Fluid Flow through Packed Columns**, Chem. Eng. Prog., vol. 43, 2, pg. 89-94, 1952.

- [39] Fletcher, C. A. J., **Computational Techniques for Fluid Dynamics**, vol. 1 et 2, Springer-Verlag, 1988.
- [40] Fried, J. J. et Combarous, M. A., **Dispersion in Porous Media**, *Adv. Hydrosci.*, 7, pg. 169-282, 1971.
- [41] Gabitto, J.F., **Effect of the Microstructure on Anisotropic Diffusion in Porous Media**, *Int. Comm. Heat Transfer*, vol. 18, pg. 459-466, 1991.
- [42] Golub, G. H. et Van Loan, C. F., **Matrix Computations**, Johns Hopkins University Press, 1983.
- [43] Gray, W.G., **A Derivation of the Equations for Multi-Phase Transport**, *Chemical Engineering Science*, vol. 30, pg. 229-233, 1975.
- [44] Greenkorn, R.A. et Kessler, D.P., **Dispersion in Heterogeneous Nonuniform Anisotropic Porous Media**, *Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 61, 9, pg. 14-32, 1969.
- [45] Gunn, D.J. et Pryce, C., **Dispersion in Packed Beds**, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, vol. 47, pg. 341-350, 1969.
- [46] Gupta, V.K. et Bhattacharya, R.N., **A New Derivation of the Taylor-Aris Theory of Solute Dispersion in a Capillary**, *Water Resources Research*, vol. 19, 4, pg. 945-951, 1983.
- [47] Han T., Humphrey, J.A.C. et Launder, B.E., **A Comparison of Hybrid and Quadratic-Upstream Differencing in High Reynolds Number Elliptic Flows**, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 29, pg. 81-95, 1981.
- [48] Happel, J. et Brenner, H., **Low Reynolds Number Hydrodynamics**, Martinus Nijhoff Publishers, 1986.
- [49] Haring, R. E. et Greenkorn, R. A., **A Statistical Model of a Porous Medium with Nonuniform Pores**, *AIChE Journal*, vol. 16, 3, pg. 477-483, 1970.
- [50] Hasimoto, H., **On the Periodic Fundamental Solutions of the Stokes Equations and their Application to Viscous Flow Past a Cubic Array of Spheres**, *J. Fluid Mech.*, 5, pg. 317-328, 1959.
- [51] Hassan, Y.A., Rice, J.G. et Kim, J.H., **A Stable Mass-Flow-Weighted Two-Dimensional Skew Upwind Scheme**, *Numerical Heat Transfer*, vol. 6, pg. 395-408, 1983.
- [52] Hirsch, C., **Numerical Computation of INTERNAL and EXTERNAL FLOWS**, vol. 1, John Wiley & Sons, 1988.
- [53] Horn, F. J. M., **Calculation of Dispersion Coefficients by Means of Moments**, *AIChE Journal*, vol. 17, 3, pg. 613-620, 1971.

- [54] Howes, F.A. et Whitaker, S., **The Spatial Averaging Theorem Revisited**, *Chemical Engineering Science*, vol. 40, 8, pg. 1387-1392, 1985.
- [55] Huang, P.G., Launder, B.E. et Leschziner, M.A., **Discretisation of Nonlinear Convection Processes: A Broad-Range Comparison of Four Schemes**, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 48, pg. 1-24, 1985.
- [56] Jaiswal, A.K., Sundarajan, T; et Chhabra, R.P., **Hydrodynamics of Newtonian Fluid Flow through Assemblages of Rigid Spherical Particles in Intermediate Reynolds Number Regime**, *Int. J. Engng. Sci.*, vol. 29, 6, pg. 693-708, 1991.
- [57] Kaviany, M., **Principles of Heat Transfer in Porous Media**, *Mechanical Engineering Series*, Springer-Verlag, 1992.
- [58] Kelkar, K.M. et Patankar, S.V., **Numerical Prediction of Flow and Heat Transfer in Parallel Plate Channel with Staggered Fins**, *Journal of Heat Transfer*, vol. 109, pg. 25-30, 1987.
- [59] Kim, J-H., Ochoa J.A. et Whitaker, S., **Diffusion in Anisotropic Porous Media**, *Transport in Porous Media*, vol. 2, pg. 327-356, 1987.
- [60] Klinkenberg, A. et Sjenitzer, F., **Holding-Time Distributions of the Gaussian Type**, *Chemical Engineering Science*, vol. 5, pg. 258-270, 1956.
- [61] Koch, D.L. et Brady, J.F., **Dispersion in Fixed Beds**, *J. Fluid Mech.*, vol. 154, pg. 399-427, 1985.
- [62] Koch, D.L. et Brady, J.F., **A Non-Local Description of Advection-Diffusion with Application to Dispersion in Porous Media**, *J. Fluid Mech.*, vol. 180, pg. 387-403, 1987.
- [63] Koch, D.L. et Brady, J.F., **The Symmetry Properties of the Effective Diffusivity Tensor in Anisotropic Porous Media**, *Phys. Fluids*, vol. 3, 30, pg. 642-650, 1987.
- [64] Koch, D.L., Cox, R.G., Brenner, H. et Brady, J.F., **The Effect of Order on Dispersion in Porous Media**, *J. Fluid Mech.*, vol. 200, pg. 173-188, 1989.
- [65] Kramers, H. et Alberda, G., **Frequency Response Analysis of Continuous Flow Systems**, *Chemical Engineering Science*, vol. 2, pg. 173-181, 1953.
- [66] Lai, C.H. Boadvarsson, G.S. et Witherspoon, P.A., **Second-Order Upwind Differencing Method for Nonisothermal Chemical Transport in Porous Media**, *Numerical Heat Transfer*, vol. 9, pg. 453-471, 1986.
- [67] Lehner, F. K., **A Derivation of the Field Equations for Slow Viscous Flow through a Porous Medium**, *Ind. Chem. Chem. Fundam.*, vol. 18, 1, pg. 41-45, 1979.

- [68] Leonard, B.P., **A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation**, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 19, pg. 59-98, 1979.
- [69] MacDonald, I. F., El-Sayed, M. S. et Dullien, F. A. L., **Flow through Porous Media - The Ergun Equation Revisited**, *Ind. Eng. Chem., Fundamentals*, vol. 18, 3, pg. 199, 1979.
- [70] Marle, C., **Écoulements Monophasiques en Milieu Poreux**, *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, XXII, 10, pg. 1471-1509, 1967.
- [71] Maxwell, C., **Treatise on Electricity and Magnetism**, vol. 1, 1873.
- [72] Miller, T.F. et Schmidt, F.W., **Use of Pressure-Weighted Interpolation Method for the Solution of the Incompressible Navier-Stokes Equations on Nonstaggered Grid System**, *Numerical Heat Transfer*, vol. 14, pg. 213-233, 1988.
- [73] Mincowycz, W. J., Sparrow, E. M., Schneider, G. E., Pletcher, R. H., **Handbook of Numerical Heat Transfer**, John Wiley & Sons, 1988.
- [74] Nitsche L. C. et Brenner, H., **Eulerian Kinematics of Flow through Spatially Periodic Models of Porous Media**, *ARMA*, 107, pg. 225-292, 1989.
- [75] Ozisik, M. N., **Heat Conduction**, John Willey & Sons, 1980.
- [76] Paine, M.A., Carbonell, R.G. et Whitaker, S., **Dispersion in Pulsed Systems I**, *Chemical Engineering Science*, vol. 38, 11, pg. 1781-1793, 1983.
- [77] Pang, K., Tao, W.Q. et Zhang, H.H., **Numerical Analysis of Fully Developed Fluid and Heat Transfer for Arrays of Interrupted Plates Positioned Convergently-Divergently Along the Flow Direction**, *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. 18, pg. 309-324, 1990.
- [78] Patankar, S.V. et Spalding, D.B., **A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows**, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 15, pg. 1787-1806, 1972.
- [79] Patankar, S.V., Liu, C.H. et Sparrow, E.M., **Fully Developed Flow and Heat Transfer in Ducts Having Streamwise-Periodic Variations of Cross-Sectional Area**, *Journal of Heat Transfer*, vol. 99, pg. 180-186, 1977.
- [80] Patankar, S. V., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [81] Patankar, S.V., **A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations**, *Numerical Heat Transfer*, vol. 4, pg. 409-425, 1981.

- [82] Patel, M.K., Markatos, N.C. et Cross, M.; **A Critical Evaluation of Seven Discretisation Schemes for Convection-Diffusion Equations**, *Int. J. Meth. Fluids*, vol. 5, pg. 225-244, 1985.
- [83] Patel, M.K. et Markatos, N.C., **An Evaluation of Eight Discretisation Schemes for Two-Dimensional Convection-Diffusion Equations**, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, vol. 6, pg. 129-154, 1986.
- [84] Peterson, P.F., **A Method for Predicting and Minimizing Numerical Diffusion**, *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 21, pg. 343-366, 1992.
- [85] Pfannkuch, H.O., **Contribution a l'Étude des Déplacements de Fluides Miscibles dans un Milieu Poreux**, *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, XVIII, 2, pg. 215-270, 1963.
- [86] Phillips, R.E. et Schmidt, F.W., **A Multilevel-Multigrid Technique for Recirculating Flows**, *Numerical Heat Transfer*, vol. 8, pg. 573-594, 1985.
- [87] Plumb, O.A. et Whitaker, S., **Dispersion in Heterogeneous Porous Media**, Part 1, *Water Resources Research*, vol. 24, 7, pg. 913-926, 1988a.
- [88] Plumb, O.A. et Whitaker, S., **Dispersion in Heterogeneous Porous Media**, Part 2, *Water Resources Research*, vol. 24, 7, pg. 927-938, 1988b.
- [89] Plumb, O. A. et Whitaker, S., **Diffusion, Adsorption and Dispersion in Heterogeneous Porous Media: Small-Scale Averaging, Local volume Averaging, and Large-Scale Averaging**, *Hierarchy of Scales in Subsurface Transport*, J. H. Cushman, Academic Press, London.
- [90] Pollard, A. et Siu, L-W., **The Calculations of Some Laminar Flows Using Various Discretisation Schemes**, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 35, pg. 293-313, 1982.
- [91] Quintard, M. et Whitaker, S., **Écoulement Monophasique en Milieu Poreux: Effet des Hétérogénéités Locales**, *J. Méca. Théorique et Appliquée*, 6(5), pg. 691-726, 1987.
- [92] Quintard, M. et Whitaker, S., **Transport in Ordered and Disordered Porous Media: Volume-Averaged Equations Closure Problems, and Comparison with Experiment**, *Chemical Engineering Science*, vol. 48, 14, pg. 2537-2564, 1993.
- [93] Raithby, G.D., **A Critical Evaluation of Upstream Differencing Applied to Problems Involving Fluid Flow**, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 9, pg. 75-103, 1976.
- [94] Raithby, G.D., **Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow**, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 9, pg. 153-164, 1976.

- [95] Rhodes, T. et Acharya, S., **An Adaptive Differencing Scheme for Flow and Heat Transfer Problems**, Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 23, pg. 153-173, 1993.
- [96] Ryan, D., Carbonell, R.G. et Whitaker, S., **Effective Diffusivities for Catalyst Pellets under Reaction Conditions**, Chemical Engineering Science, vol. 35, pg. 10-16, 1980.
- [97] Saffman, P.G., **A Theory of Dispersion in a Porous Medium**, J. Fluid Mech., vol. 6, pg. 321-349, 1959.
- [98] Saffman, P.G., **Dispersion Due to Molecular Diffusion and Macroscopic Mixing in Flow through a Network of Capillaries**, J. Fluid Mech., vol. 7, pg. 194-208, 1960.
- [99] Saffman, P. G., **On the Settling Speed of Free and Fixed Suspension**, Stud. Appl. Maths., 52, pg. 115-127, 1973.
- [100] Sanchez-Palencia, E., **Non-Homogeneous Media and Vibration Theory**, Lectures Notes in Physics, Springer-Verlag, 1980.
- [101] Salles, J., Thovert, J-F., Delannay, R., Prevors, L., Auriault, J-L. et Adler, P. M., **Taylor Dispersion in Porous Media. Determination of the Dispersion Tensor**, Physics of Fluids A, sous presse.
- [102] Sahimi, M., Hughes, B. D., Scriven, L. E. et Davis, H. T., **Dispersion in Flow through Porous Media-I, One-Phase Flow**, Chemical Engineering Science, vol. 41, 8, pg. 2103-2122, 1986.
- [103] Scheidegger, A. E., **Statistical Hydrodynamics in Porous Media**, Journal of Applied Physics, vol. 25, 8, pg. 994-1001, 1954.
- [104] Scheidegger, A. E., **General Theory of Dispersion in Porous Media**, Journal of Geophysical Research, vol. 66, 10, pg. 3273-3278, 1961.
- [105] Scheidegger, A. E., **The Physics of Flow through Porous Media**, University of Toronto Press, 1974.
- [106] Schlichting, H., **Boundary-Layer Theory**, McGraw-Hill, 1968.
- [107] Shapiro, M. et Brenner, H., **Taylor Dispersion in the Presence of Time-Periodic Convection Phenomena, Part 1**, Phys. Fluids, A 2, 10, pg. 1731-1743, 1990.
- [108] Shapiro, M. et Brenner, H., **Taylor Dispersion in the Presence of Time-Periodic Convection Phenomena, Part 2, Transport of Transversely Oscillating Brownian in a Plane Poiseuille Flow**, Phys. Fluids, A 2, 10, pg. 1744-1753, 1990.
- [109] Sharif M. A. R., **An Evaluation of the Bounded Directional Transportive Upwind Differencing Scheme for Convection-Diffusion Problems**, Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 23, pg. 201-219, 1993.

- [110] Shyy, W., Tong, S.S. et Correa, S.M., **Numerical Recirculating Flow Calculation Using a Body-Fitted Coordinated System**, Numerical Heat Transfer, vol. 8, pg. 99-113, 1985.
- [111] Slattery, J. C., **Flow of Viscoelastic Fluids through Porous Media**, AIChE Journal, vol. 13, pg. 1066-1071, 1967.
- [112] Slattery, J. C., **Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua**, McGraw-Hill, 1972.
- [113] Smith, R., **A Delay-Diffusion Description for Contaminant Dispersion**, J. Fluid Mech., vol. 105, pg. 466-486, 1981.
- [114] Sposito, G., Jury, W. A. et Gupta, V. K., **Fundamental Problems in the Stochastic Convection-Dispersion Model of Solute Transport in Aquifers and Field Soils**, Water Resources Research, vol. 22, 1, pg. 77-88, 1986.
- [115] Stauffer, D., **Introduction to Percolation Theory**, Taylor & Francis, 1985.
- [116] Stoer, J. et Bulirsch, R., **Introduction to Numerical Analysis**, Springer-Verlag, 1980.
- [117] Taylor, G., **Dispersion of Soluble Matter in Solvent Flowing Slowly through a Tube**, Proc. Roy. Soc., A 219, pg. 186-203, 1953.
- [118] Taylor, G., **The Dispersion of Matter in Turbulent Flow through a Pipe**, Proc. Roy. Soc., A 223, pg. 446-468, 1954.
- [119] Taylor, G., **Conditions under which Dispersion of a Solute in a Stream of Solvent can be used to Measure Molecular Diffusion**, Proc. Roy. Soc., A 225, pg. 473-477, 1954.
- [120] Todorovic, P., **A Stochastic Model of Longitudinal Diffusion in Porous Media**, Water Resources Research, vol. 6, 1, pg. 211-22, 1970.
- [121] Tompson, A.F.B. et Gray, W.G., **A Second-Order Approach for the Modeling of Dispersive Transport in Porous Media, Part 1**, Water Resources Research, vol. 22, 5, pg. 591-599, 1986.
- [122] Van Doormaal, J.P. et Raithby, G.D., **Enhancements of Simple Method for Predicting Incompressible Fluid Flows**, Numerical Heat Transfer, vol. 7, pg. 147-163, 1984.
- [123] Varga, R. S., **Matrix Iterative Analysis**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1962.
- [124] Webb, B.W. et Ramadhyani, S., **Conjugate Heat Transfer in a Channel with Staggered Ribs**, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 28, 9, pg. 1679-1687, 1985.

- [125] Whitaker, S., **Diffusion and Dispersion in Porous Media**, *AICHE Journal*, vol. 13, 3, pg. 420-427, 1967.
- [126] Whitaker, S., **Forced Convection Heat Transfer Correlations for Flow in Pipes, Past Flat Plates, Single Cylinders, Single Spheres, and for Flow in Packed Beds and Tube Bundles**, *AICHE Journal*, vol. 18, 2, pg. 361-371, 1972.
- [127] Whitaker, S., **The Transport Equations for Multi-Phase Systems**, *Chemical Engineering Science*, vol. 28, pg. 139-147, 1973.
- [128] Whitaker, S., **Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law**, *Transport in Porous Media*, vol. 1, pg. 3-25, 1986.
- [129] Whitaker, S., **Transport Processes with Heterogeneous Reaction**, *Chemical Reactors Analysis: Concepts and Design*, Edited by Whitaker, S. et Cassano, G., Gordon and Breach, pg. 1-42, 1986.
- [130] Wodie, J.C. et Levy, T., **Correction Non Linéaire de la Loi de Darcy**, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t.312, Série II, pg. 157-161, 1991.
- [131] Xin, R.C. et Tao, W.Q., **Numerical Prediction of Laminar Flow and Heat Transfer in Wavy Channels of Uniform Cross-Sectional Area**, *Numerical Heat Transfer*, vol. 14, pg. 465-481, 1988.
- [132] Young, W.R. et Jones, S., **Shear Dispersion**, *Phys. Fluids*, A 3, 5, pg. 1087-1101, 1991.

ANNEXE I

ESTIMATION DE L'ORDRE DE GRANDEUR

ANNEXE I

ESTIMATION DE L'ORDRE DE GRANDEUR

I.1-CALCUL DE L'INTÉGRALE DE SURFACE

Cette annexe est dédiée à l'obtention d'une estimation d'ordre de grandeur de l'intégrale de surface,

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{y} \mathbf{n} \, dA \quad (1)$$

présentée au chapitre 2, équation (50), où le vecteur \mathbf{y} possède comme origine c le centre du VER et comme extrémité un point sur la surface $A_{B\sigma}$.

En appliquant le théorème de prise de moyenne (paragraphe 2.2.2):

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{y} \mathbf{n} \, dA = \frac{1}{V} \int_{V_B} \nabla \mathbf{y} \, dV - \nabla \left(\frac{1}{V} \int_{V_B(\mathbf{x})} \mathbf{y} \, dV \right) \Bigg|_{\vec{\mathbf{x}}=0} \quad (2)$$

où $\vec{\mathbf{x}}$ désigne le vecteur $\vec{c}c'$.

Comme c est considéré ici comme un point fixe,

$$\frac{1}{V} \int_{V_B} \nabla \mathbf{y} \, dV = \frac{1}{V} \int_{V_B} \mathbf{I} \, dV = \varepsilon_B \mathbf{I} \quad (3)$$

et de la deuxième intégrale il résulte:

$$\frac{1}{V} \int_{V_B(\mathbf{x})} \mathbf{y} \, dV = \varepsilon_B (\mathbf{x} + \langle \mathbf{y}_B \rangle^B) \quad (4)$$

Le vecteur \mathbf{x} désigne le vecteur $\vec{cc'}$ et $\langle \mathbf{y} \rangle^B$ le vecteur $\vec{c'c'_B}$, où c'_B est le barycentre de la phase V_B contenue dans le VER centré en c' (figure I.1).

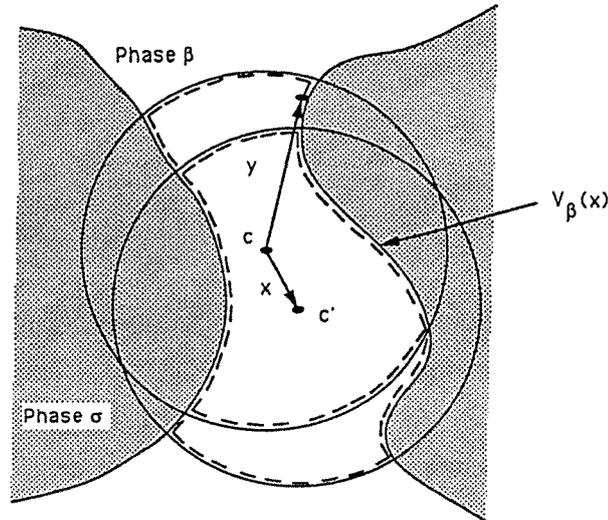


Figure I.1 - Volume élémentaire représentatif

Donc, on peut réécrire l'équation (2) sous la forme,

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{y} n \, dA = \varepsilon_B \mathbf{I} - \nabla \left[\varepsilon_B (\mathbf{x} + \langle \mathbf{y} \rangle^B) \right] \Big|_{\vec{x}=0} \tag{5}$$

et on obtient:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{y} n \, dA = \varepsilon_B \mathbf{I} - \varepsilon_B \nabla \mathbf{x} - \mathbf{x} \nabla \varepsilon_B \Big|_{\vec{x}=0} - \nabla (\varepsilon_B \langle \mathbf{y} \rangle^B) \Big|_{\vec{x}=0} \tag{6}$$

I.2-ESTIMATION DE L'ORDRE DE GRANDEUR

Du résultat de l'intégrale de surface (1) et du fait que $\mathbf{x}=0$, il en résulte finalement:

$$-\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} \mathbf{y} n \, dA = \nabla (\varepsilon_B \langle \mathbf{y} \rangle^B) \tag{7}$$

D'autre part, à partir de l'ordre de grandeur de $\langle \nu \rangle^B$ (équation (9) du chapitre 2) et sachant que les variables moyennes varient significativement sur des distances L (où L est une échelle de longueur macroscopique associée au milieu poreux), on peut estimer l'ordre de grandeur de l'intégrale (7):

$$-\frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} n \nu \, dA = \mathcal{O} \left[\varepsilon_B \left(\frac{r}{L} \right) \right] \quad (8)$$

ANNEXE II

ALGORITHME DE THOMAS

ANNEXE II

ALGORITHME DE THOMAS

II.1-ALGORITHME DE THOMAS

L'algorithme de Thomas [Patankar, 1980; Fletcher, 1988; Hirsch, 1988], ou TDMA (TriDiagonal-Matrix Algorithm), est utilisé lorsqu'on veut résoudre des systèmes algébriques du type $A\phi=d$, où la matrice A est tridiagonale. La méthode est une adaptation de la méthode de Gauss [39].

En dépit du fait qu'on a traité des problèmes bidimensionnels, on ne montrera, ici, que la version unidirectionnelle de la méthode. Ceci est dû au découplage du problème bidimensionnel, paragraphe 3.5.2, qui permet la résolution du système algébrique, comme s'il s'agissait de deux problèmes unidirectionnels.

Les équations discrétisées du chapitre 3 peuvent être représentées, d'une façon générale, par l'équation algébrique:

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \quad (1)$$

où les points du maillage sont numérotés de 1 jusqu'à n dans la direction de l'axe OX. On ne traitera ici que cette direction, la démarche étant aussi applicable à l'autre direction d'espace.

Le système algébrique $A\phi=d$, où A est la matrice tridiagonale $n \times n$, ϕ la matrice $n \times 1$ des inconnues et d la matrice $n \times 1$ des termes non-homogènes, est représenté sous forme matricielle par:

II.3-DEUXIÈME ÉTAPE

La deuxième étape consiste à résoudre le système, de manière récursive, à partir de $i=n$ jusqu'à $i=1$. Les valeurs de P_n et Q_n sont données par:

$$P_n = 0 \quad (8)$$

$$Q_n = \phi_n \quad (9)$$

puisque $b_n=0$.

Afin que la méthode soit convergente, il faut que la matrice A soit à diagonale dominante [39]:

$$|a_i| > |c_i| + |b_i| \quad (10)$$

en conformité avec la théorie présentée au chapitre 3.

ANNEXE III

DIFFUSION-DISPERSION DE TAYLOR ENTRE DEUX PLANS PARALLÈLES

ANNEXE III

DIFFUSION-DISPERSION DE TAYLOR ENTRE DEUX PLANS PARALLÈLES

III.1-RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE FERMETURE

Dans cette annexe, on considère l'application de l'équation (10) chapitre 6,

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{F} = \left(\frac{1}{Sc} \right) \nabla^2 \mathbf{F} - \tilde{\mathbf{v}} \quad (1)$$

avec la condition à la limite (11),

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{F} = \mathbf{n} \quad \text{sur } A_{BC} \quad (2)$$

et la condition de périodicité (12),

$$\mathbf{F}(X+L) = \mathbf{F}(X) \quad (3)$$

au problème de dispersion entre deux plans parallèles (figure A.1), dans le cas d'un écoulement laminaire et établi d'un fluide newtonien.

À partir de l'équation vectorielle (1), les équations pour les deux composantes F_x et F_y sont données par:

$$\tilde{U} + U \frac{\partial F_x}{\partial X} + V \frac{\partial F_x}{\partial Y} = \frac{1}{Sc} \left[\frac{\partial^2 F_x}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 F_x}{\partial Y^2} \right] \quad (4)$$

$$\tilde{V} + U \frac{\partial F}{\partial X}^y + V \frac{\partial F}{\partial Y}^y = \frac{1}{Sc} \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2}^y + \frac{\partial^2 F}{\partial Y^2}^y \right] \quad (5)$$

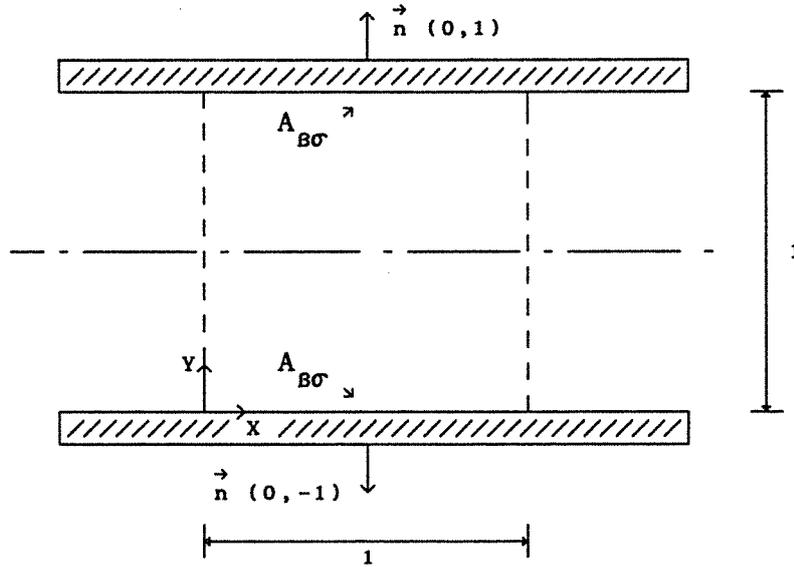


Figure III.1 - Diffusion-dispersion entre deux plans parallèles

Les conditions aux limites (2) s'écrivent:

$$\frac{\partial F}{\partial Y}^x = 0 \quad \text{en } Y=0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial F}{\partial Y}^x = 0 \quad \text{en } Y=1 \quad (7)$$

$$\frac{\partial F}{\partial Y}^y = -1 \quad \text{en } Y=0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial F}{\partial Y}^y = -1 \quad \text{en } Y=1 \quad (9)$$

La condition de périodicité (3) implique ici que:

$$\frac{\partial F_x}{\partial X} = \frac{\partial F_y}{\partial X} = 0 \quad (10)$$

puisque la longueur L de la cellule unité est arbitraire.

La solution de l'écoulement de Couette entre deux plans est classique [106]. On déduit aisément que:

$$V = \langle V \rangle^B = \tilde{V} = 0 \quad (11)$$

$$\tilde{U} = \langle U \rangle^B \left[6 (Y - Y^2) - 1 \right] \quad (12)$$

Les résultats (10)-(12), nous amènent à la forme finale des équations (4) et (5):

$$\frac{d^2 F_x}{dY^2} = Sc \cdot \tilde{U} \quad (13)$$

$$\frac{d^2 F_y}{dY^2} = 0 \quad (14)$$

L'intégration de l'équation (13) moyennant l'application des conditions aux limites (6) et (7) avec la condition $\langle F_x \rangle^B = 0$, donne la solution unique:

$$F_x = Sc \cdot \langle U \rangle^B \left[Y^3 - \frac{1}{2} (Y^4 + Y^2) + 1/60 \right] \quad (15)$$

De même pour l'équation (14),

$$F_y = \frac{1}{2} - Y \quad (16)$$

où l'on a utilisé les conditions aux limites (8) et (9) et la condition $\langle F_y \rangle^B = 0$.

III.2-CALCUL DU TENSEUR EFFECTIF

Les solutions exactes pour F_x et F_y étant connues, on peut déterminer les composantes du tenseur tortuosité et hydrodynamique, à partir des équations (8) et (9) du chapitre 6, dont les expressions sont rappelées ci-dessous:

-Tenseur tortuosité

$$\tau = \frac{1}{V} \int_{A_{B\sigma}} nF \, dA \quad (17)$$

-Tenseur hydrodynamique

$$D = - \frac{Sc}{V} \int_{V_B} \tilde{V}F \, dV \quad (18)$$

De l'équation (17) et du fait que la normale n n'a pas de composante suivant la direction OX,

$$\tau_{xx} = 0 \quad (19)$$

L'utilisation de solution exacte (16) dans (17), permet d'arriver à la deuxième composante du tenseur tortuosité:

$$\tau_{yy} = -1 \quad (20)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = 0 \quad (21)$$

La composante D_{xx} du tenseur hydrodynamique est déterminée à son tour, à partir des équations (12), (15) et (18):

$$D_{xx} = \frac{(Sc \langle U \rangle^B)^2}{210} \quad (22)$$

L'équation (11), $\tilde{V}=0$, permet de déterminer directement la composante D_{yy} du tenseur hydrodynamique:

$$D_{yy} = 0 \quad (23)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = 0 \quad (24)$$

Finalement, on peut calculer les composantes du tenseur effectif de dispersion D^* , si on utilise l'équation (7) du chapitre 6:

$$D_{xx}^* = 1 + \frac{(Sc\langle U \rangle^B)^2}{210} \quad (25)$$

$$D_{yy}^* = 0 \quad (26)$$

$$D_{xy}^* = D_{yx}^* = 0 \quad (27)$$

ANNEXE IV

RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE FERMETURE EN RÉGIME TRANSITOIRE

ANNEXE IV

RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE FERMETURE EN RÉGIME TRANSITOIRE

IV.1-RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE FERMETURE

On veut résoudre dans cette annexe le problème de diffusion-dispersion de Taylor, entre deux plans parallèles (figure IV.1), lorsque l'équation de fermeture est prise sous sa forme transitoire (équation 13 du chapitre 7).

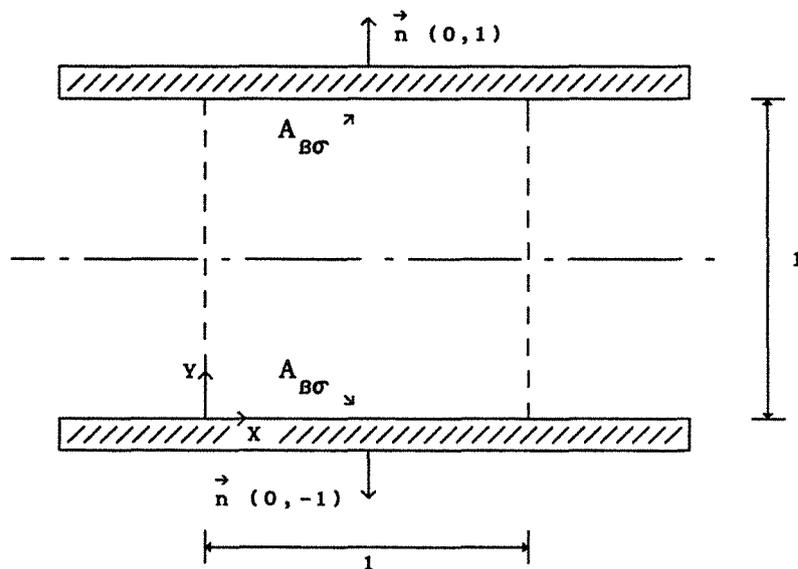


Figure IV.1 - Diffusion-dispersion entre deux plans parallèles

L'équation de fermeture en régime transitoire est donc donnée par:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F = \nabla^2 F - \tilde{V} \quad (1)$$

avec la condition à la limite,

$$- \mathbf{n} \cdot \nabla F = n \quad \text{sur } A_{\text{BO}} \quad (2)$$

la condition de périodicité,

$$F(X+L) = F(X) \quad (3)$$

et la condition initiale,

$$F = 0 \quad \text{à } t=0 \quad (4)$$

Si l'on applique les conditions aux limites et initiale et compte tenu du caractère unidirectionnel de l'écoulement entre deux plans parallèles, il résulte pour les deux composantes du vecteur F :

-Problème en F_x

$$\frac{\partial F_x}{\partial t} = \frac{\partial^2 F_x}{\partial Y^2} - \tilde{U} \quad (5)$$

avec les conditions aux limites,

$$\frac{\partial F_x}{\partial Y} = 0 \quad \text{en } Y=0 \text{ et } Y=1 \quad (6)$$

et la condition initiale,

$$F_x = 0 \quad \text{à } t=0 \quad (7)$$

-Problème en F_y

$$\frac{\partial F_y}{\partial t} = \frac{\partial^2 F_y}{\partial Y^2} \quad (8)$$

avec les conditions aux limites,

$$\frac{\partial F}{\partial Y}^y = -1 \quad \text{en } Y=0 \text{ et en } Y=1 \quad (9)$$

et la condition initiale,

$$F_y = 0 \quad \text{à } t=0 \quad (10)$$

La solution du problème (5), avec la condition à la limite (6) et la condition initiale (7), est donnée par:

$$F_x(Y,t) = - \int_{\tau=0}^t d\tau \int_0^1 G(Y,t|Y',\tau) \tilde{U} dY' \quad (11)$$

où \tilde{U} est la fluctuation de vitesse (équation (21) du chapitre 6) et $G(Y,t|Y',\tau)$ est la fonction de Green du problème. C'est-à-dire la solution du problème homogène pour une source ponctuelle instantanée, d'intensité 1, placée au point Y' à l'instant τ [Ozisk, 1980]. Ici, la fonction de Green est donnée par [75]:

$$G(Y,t|Y',\tau) = 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\beta_m^2(t-\tau)} \cos\beta_m Y \cdot \cos\beta_m Y' \quad (12)$$

où

$$\beta_m = m\pi \quad m=1,2,3,\dots \quad (13)$$

Il en résulte donc de l'intégration en (11),

$$F_x(Y,t) = 12Sc\langle U \rangle^\beta \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{\cos\beta_m Y}{\beta_m^4} (\cos\beta_m + 1) \quad (14)$$

La solution du problème en F_y (équations (8)-(10)), est donnée par:

$$F_y(Y,t) = \int_{\tau=0}^t d\tau G(Y,t|Y',\tau) \Big|_{Y'=0}^{(+1)} + \int_{\tau=0}^t d\tau G(Y,t|Y',\tau) \Big|_{Y'=1}^{(-1)} \quad (15)$$

où la fonction de Green est la même que celle de l'équation (12).

De la résolution des intégrales en (15), il résulte la solution en F_y :

$$F_y(Y,t) = -2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t}\right) \frac{\cos \beta_m Y}{\beta_m^2} (\cos \beta_m - 1) \quad (16)$$

On peut aisément vérifier que l'on retrouve bien les solutions du problème de fermeture en régime permanent, équations (15) et (16) de l'annexe II, lorsque t tend vers l'infini.

IV.2-CALCUL DU TENSEUR EFFECTIF

On passe maintenant au calcul du tenseur tortuosité τ et du tenseur hydrodynamique D , définis par les équations (17) et (18) de l'annexe II.

On obtient pour le tenseur tortuosité τ , d'après les résultats (14) et (16) et du fait que la normale n n'a pas de composante suivant la direction OX:

-Composante τ_{xx}

$$\tau_{xx} = \frac{1}{V} \int_A \frac{1}{2} (n_x F_x + F_x n_x) dA = 0 \quad (17)$$

-Composante τ_{xy}

$$\tau_{xy} = \frac{1}{V} \int_A \frac{1}{2} (n_x F_y + F_x n_y) dA = 0 \quad (18)$$

-Composante τ_{yx}

$$\tau_{yx} = \frac{1}{V} \int_A \frac{1}{2} (n_y F_x + F_y n_x) dA = 0 \quad (19)$$

-Composante τ_{yy}

$$\tau_{yy} = \frac{1}{V} \int_A \frac{1}{2} (n_y F_y + F_y n_y) dA = 0 \quad (20)$$

donc,

$$\tau_{yy} = -2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{(\cos^2 \beta_m Y - 2 \cos \beta_m + 1)}{\beta_m^2} \quad (21)$$

En ce que concerne le tenseur hydrodynamique, on obtient les résultats suivants:

-Composante D_{xx}

$$D_{xx} = - \frac{1}{V} \int_V \frac{1}{2} (\tilde{U} F_x + F_x \tilde{U}) dV \quad (22)$$

donc,

$$D_{xx} = 72 (\text{Sc} \langle U \rangle^\beta)^2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{(\cos \beta_m + 1)^2}{\beta_m^6} \quad (23)$$

-Composante D_{xy}

$$D_{xy} = - \frac{1}{V} \int_V \frac{1}{2} (\tilde{U} F_y + F_x \tilde{V}) dV = 0 \quad (24)$$

-Composante D_{yx}

$$D_{yx} = -\frac{1}{V_B} \int_{V_B} \frac{1}{2} (\tilde{V} F_x + F_y \tilde{U}) dV = 0 \quad (25)$$

-Composante D_{yy}

$$D_{yy} = -\frac{1}{V_B} \int_{V_B} \frac{1}{2} (\tilde{V} F_y + F_y \tilde{V}) dV = 0 \quad (26)$$

Finalement on peut écrire le tenseur effectif de dispersion, équation (7) du chapitre 6, comme étant donné par les composantes suivantes:

$$D_{xx}^* = 1 + 72Pe^2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{(\cos \beta_m + 1)^2}{\beta_m^6} \quad (27)$$

$$D_{yy}^* = 1 - 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{(\cos^2 \beta_m - 2 \cos \beta_m + 1)}{\beta_m^2} \quad (28)$$

et,

$$D_{xy}^* = D_{yx}^* = 0 \quad (29)$$

ANNEXE V

ARRANGEMENTS GÉOMÉTRIQUES "DÉSORDONNÉS"

ANNEXE V

ARRANGEMENTS GÉOMÉTRIQUES "DÉSORDONNÉS"

V.1-ARRANGEMENTS DÉSORDONNÉS - $\varepsilon=0,785$

Ensuite on montre sur les figures V.1 à V.20, les arrangements géométriques des cellules unités, utilisées lors du calcul du tenseur effectif de diffusion (chapitre 5).

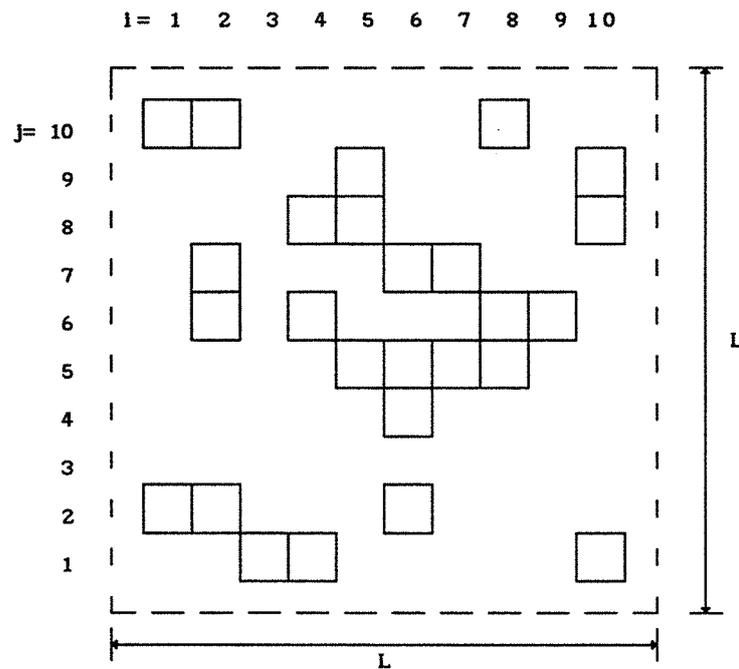


Figure V.1 - Arrangement désordonné - milieu n° 01 - $\varepsilon_{\beta}=0,785$

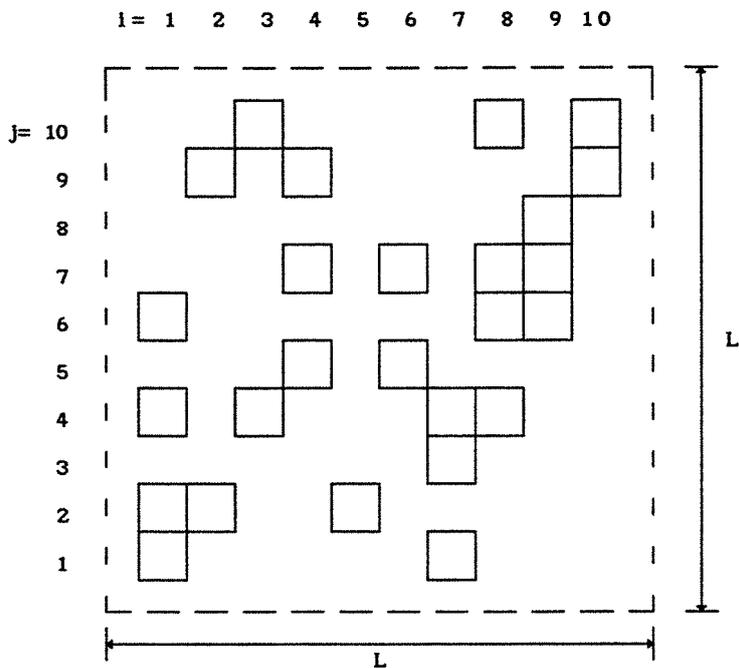


Figure V.2 - Arrangement désordonné - milieu n° 02 - $\epsilon_{\beta}=0,785$

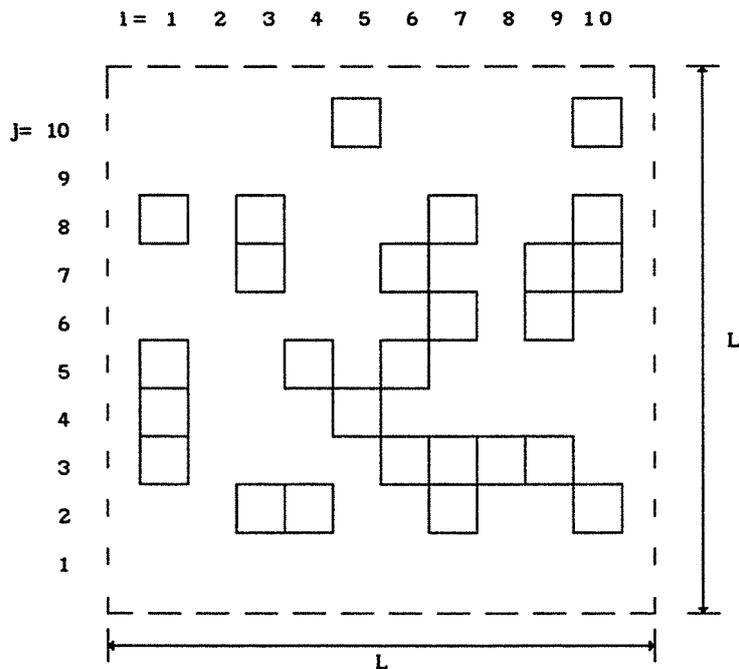


Figure V.3 - Arrangement désordonné - milieu n° 03 - $\epsilon_{\beta}=0,785$

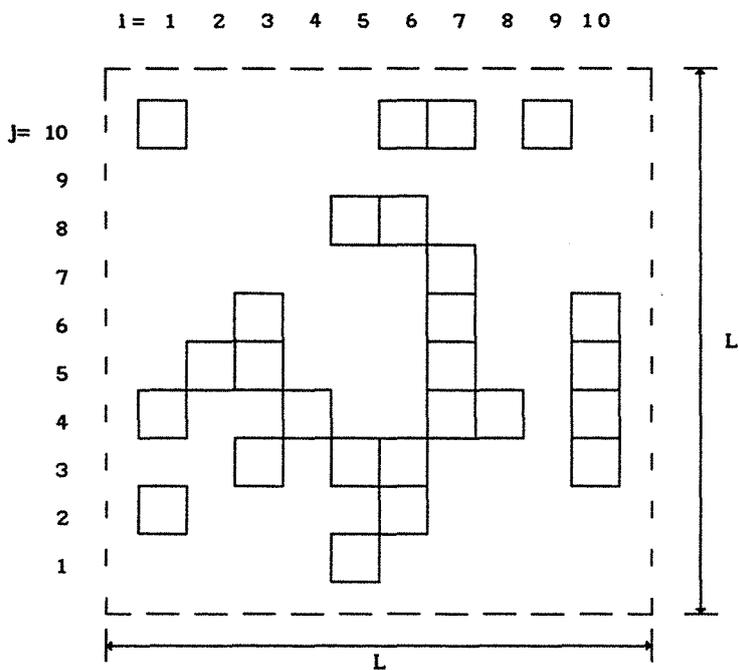


Figure V.6 - Arrangement désordonné - milieu n° 06 - $\epsilon_B = 0,785$

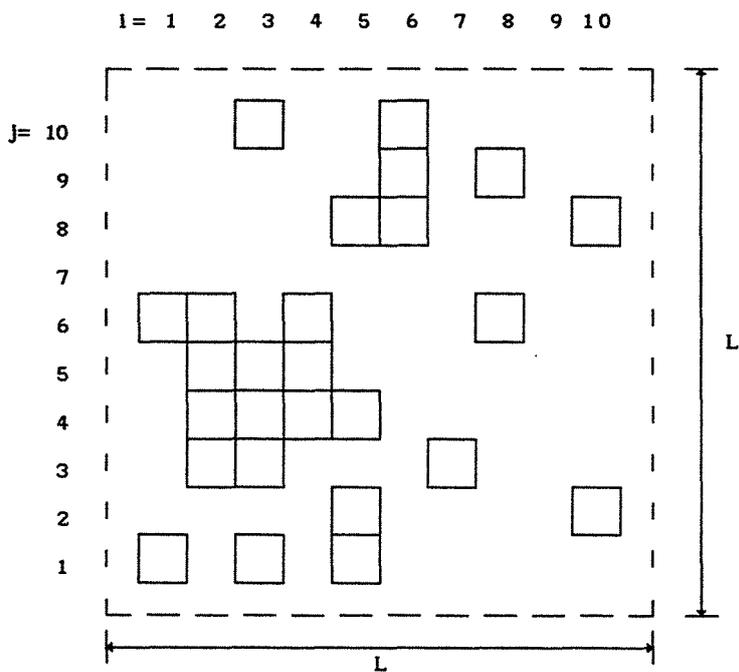


Figure V.7 - Arrangement désordonné - milieu n° 07 - $\epsilon_B = 0,785$

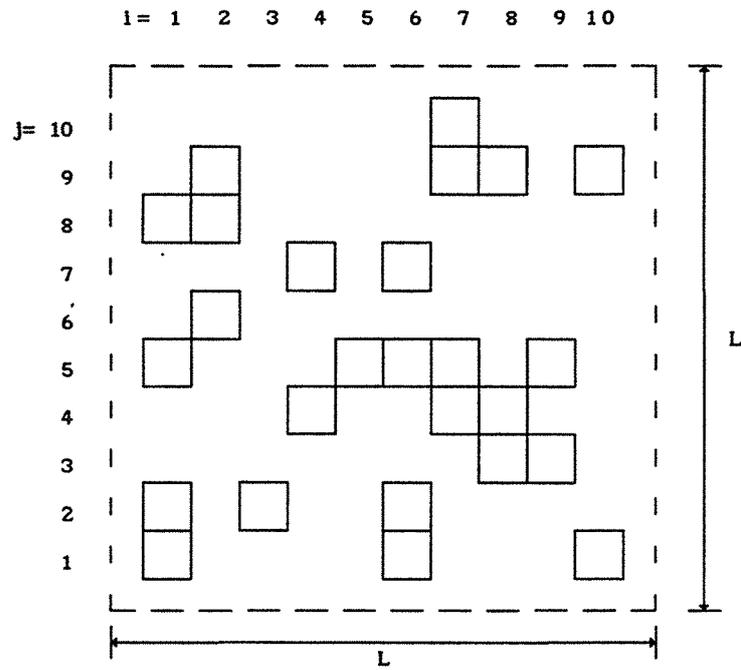


Figure V.8 - Arrangement désordonné - milieu n° 08 - $\varepsilon_B = 0,785$

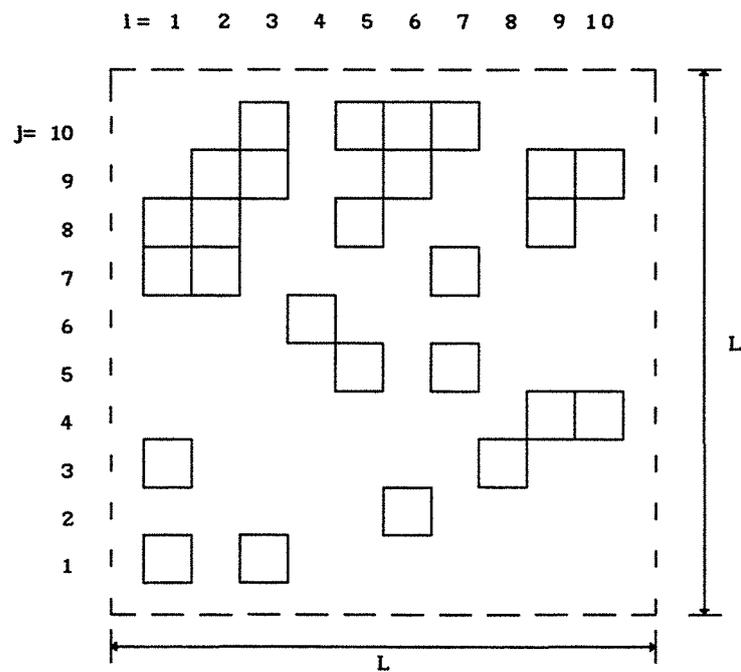


Figure V.9 - Arrangement désordonné - milieu n° 09 - $\varepsilon_B = 0,785$

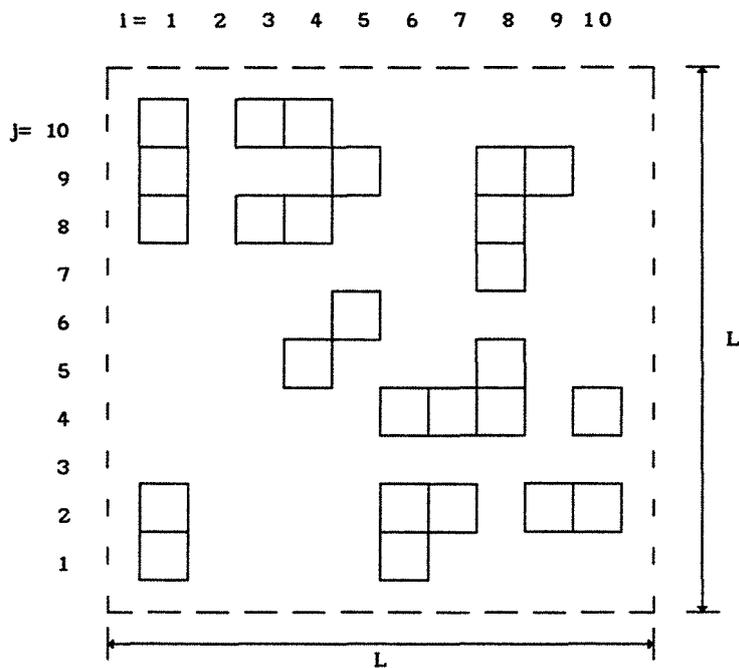


Figure V.10 - Arrangement désordonné - milieu n° 10 - $\epsilon_B = 0,785$

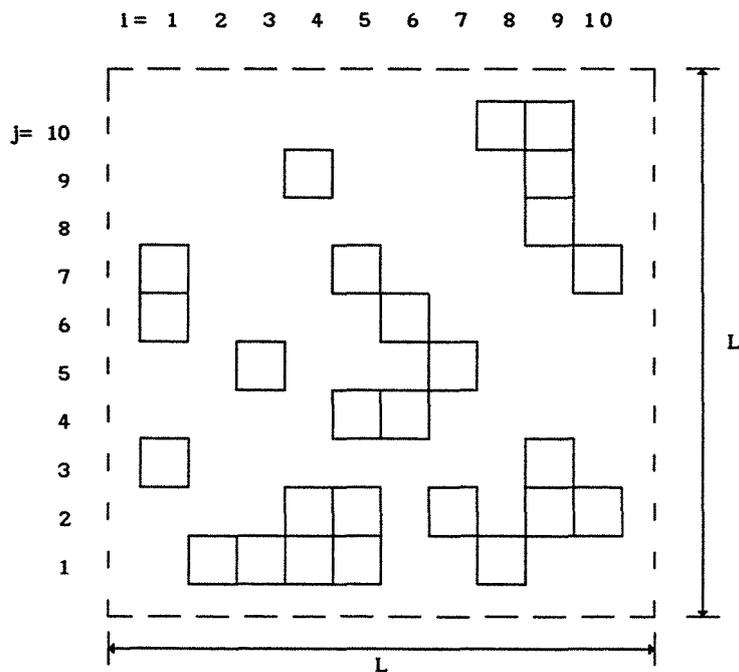


Figure V.11 - Arrangement désordonné - milieu n° 11 - $\epsilon_B = 0,785$

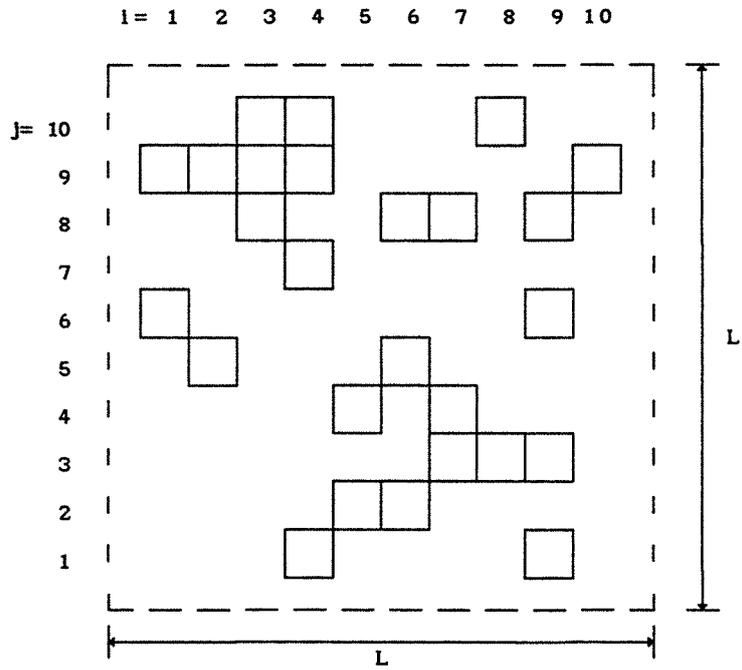


Figure V.14 - Arrangement désordonné - milieu n° 14 - $\epsilon_B=0,785$

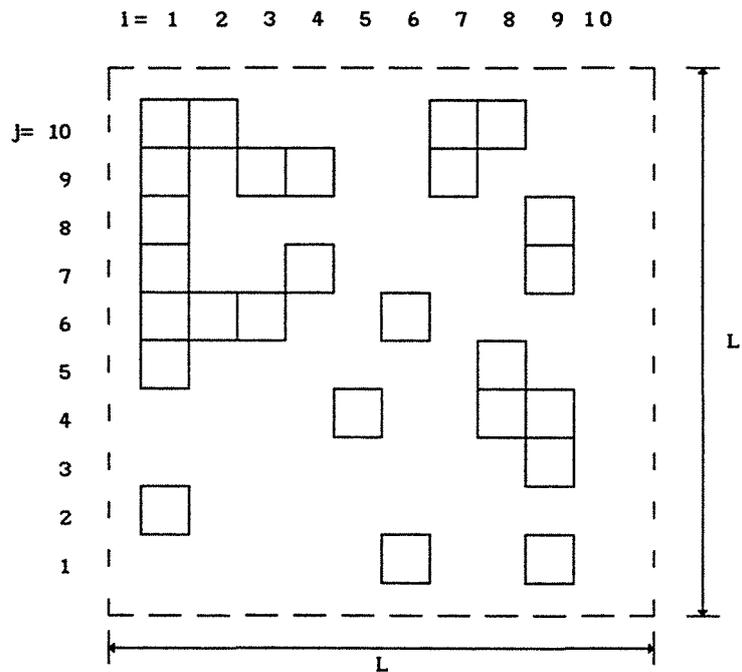
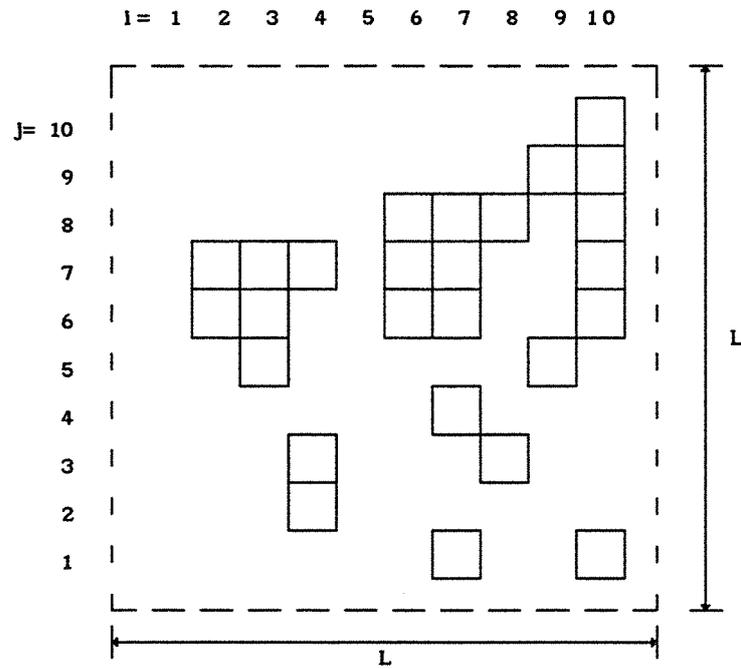
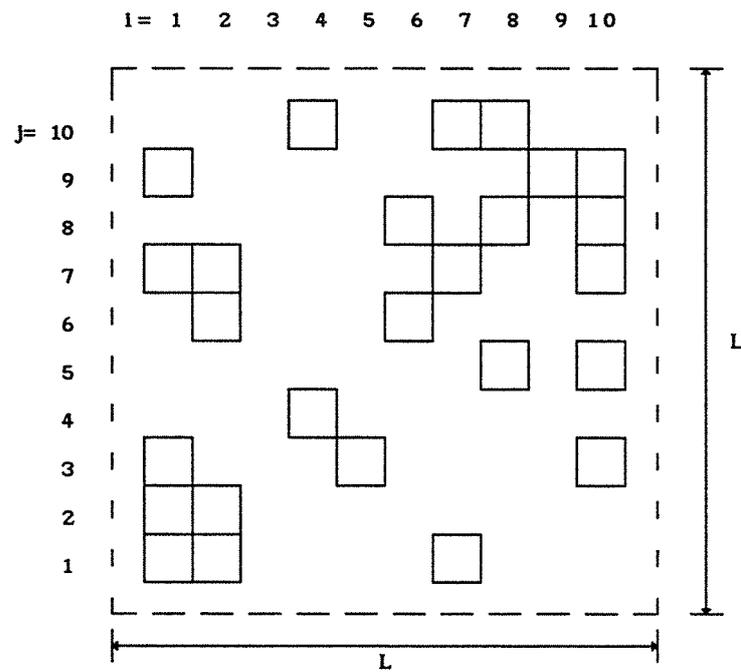


Figure V.15 - Arrangement désordonné - milieu n° 15 - $\epsilon_B=0,785$

Figure V.16 - Arrangement désordonné - milieu n° 16 - $\varepsilon_B=0,785$ Figure V.17 - Arrangement désordonné - milieu n° 17 - $\varepsilon_B=0,785$

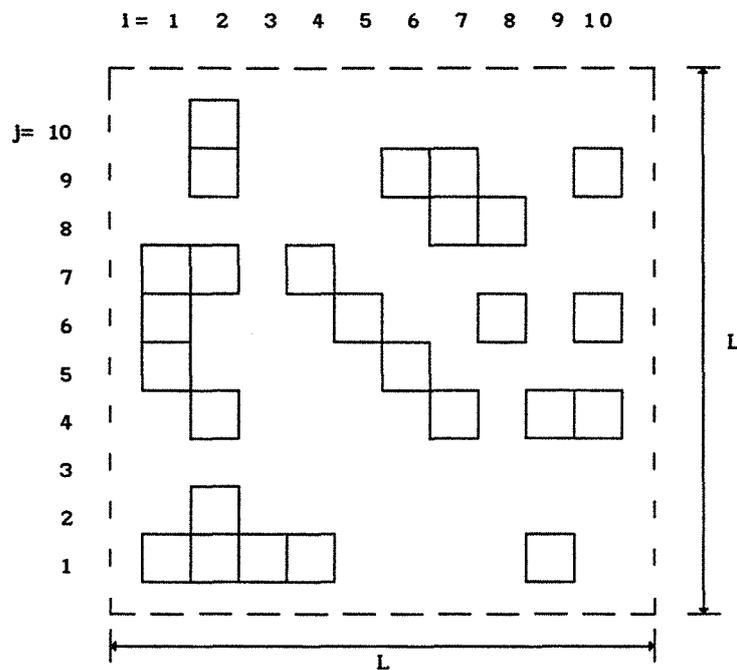


Figure V.20 - Arrangement désordonné - milieu n° 20 - $\epsilon_B = 0,785$

V.2-ARRANGEMENTS DÉSORDONNÉS - $\epsilon=0,868$

Les arrangements géométriques des cellules unit, utilisées lors du calcul du tenseur effectif de diffusion (chapitre 5), correspondant à une porosité $\epsilon=0,868$, sont montrés ci-dessous sur les figures V.21 à V.41.

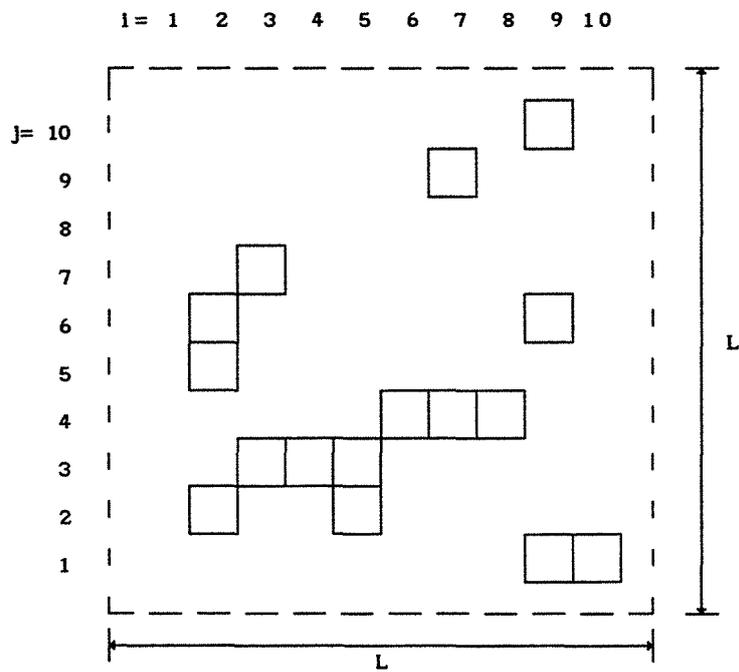


Figure V.21 - Arrangement désordonné - milieu n° 1 - $\epsilon_B=0,868$

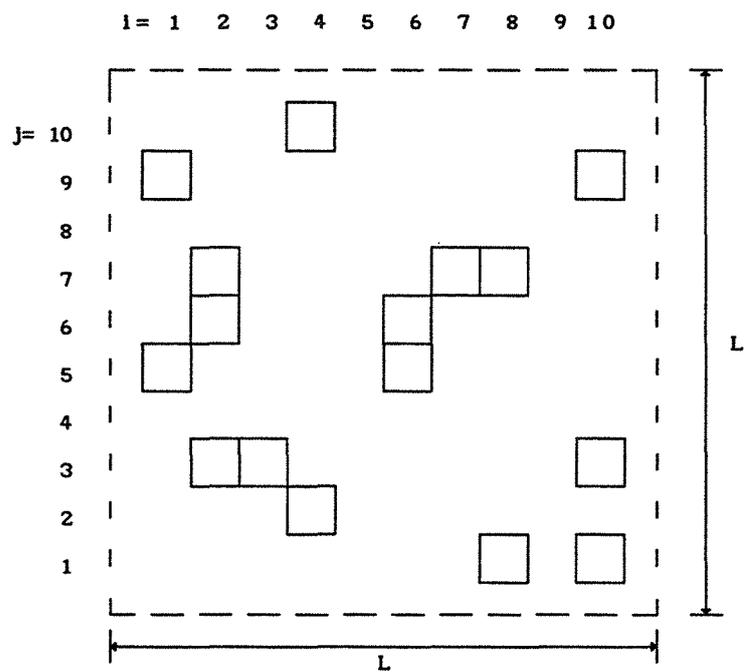


Figure V.22 - Arrangement désordonné - milieu n° 2 - $\varepsilon_B = 0,868$

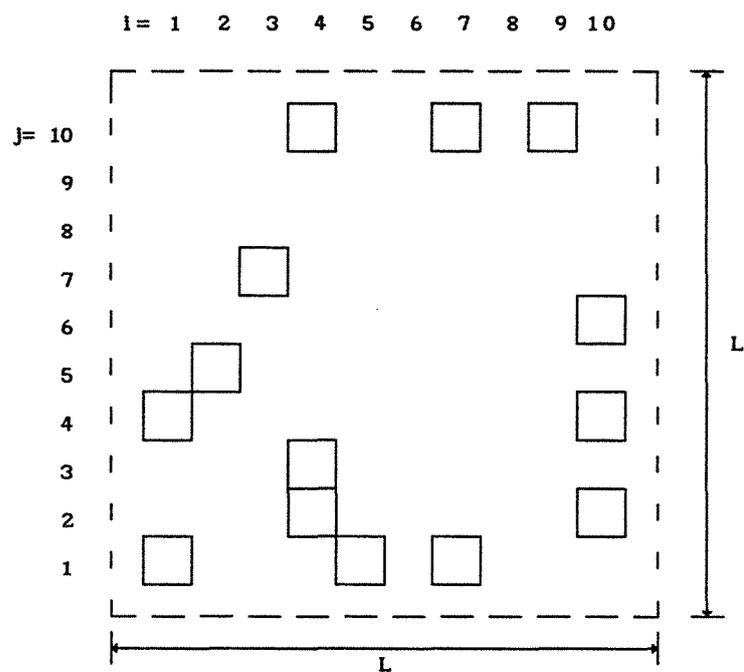


Figure V.23 - Arrangement désordonné - milieu n° 3 - $\varepsilon_B = 0,868$

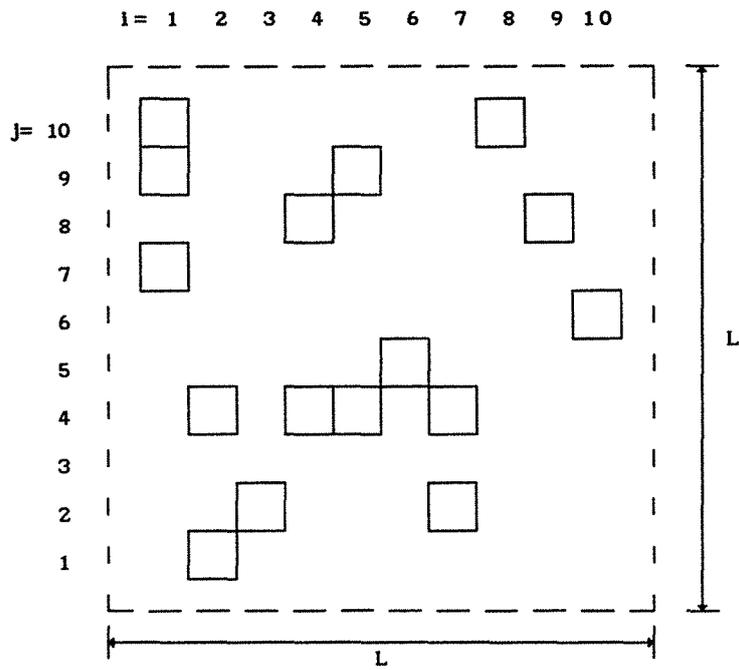


Figure V.24 - Arrangement désordonné - milieu n° 4 - $\epsilon_B = 0,868$

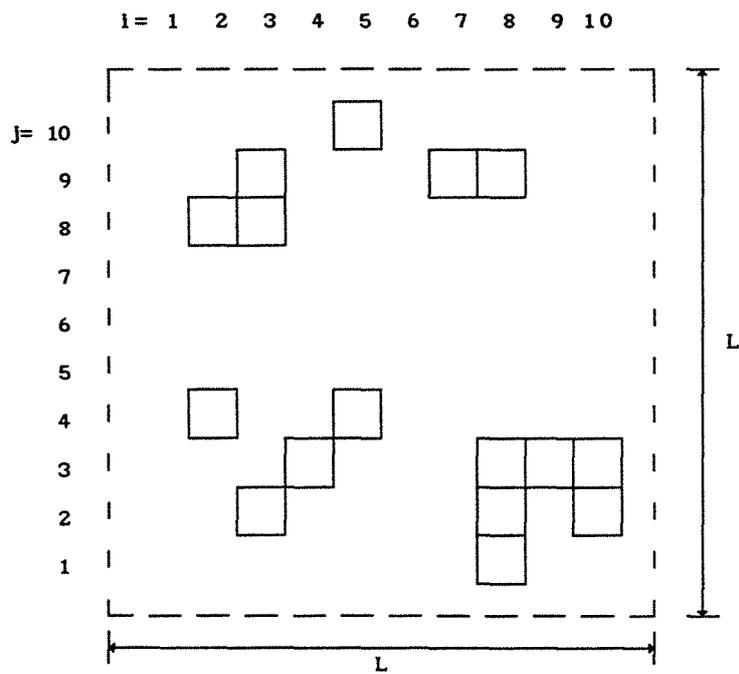


Figure V.25 - Arrangement désordonné - milieu n° 5 - $\epsilon_B = 0,868$

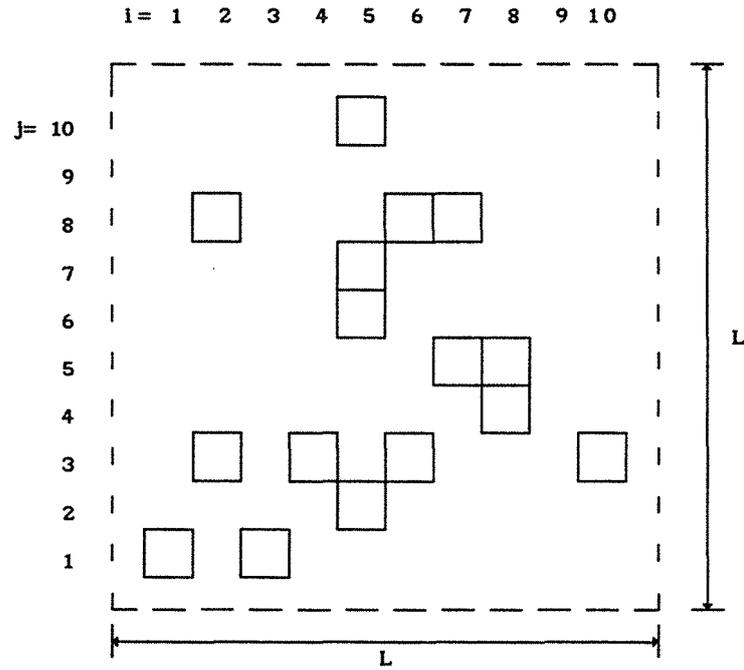


Figure V.26 - Arrangement désordonné - milieu n° 6 - $\varepsilon_B = 0,868$

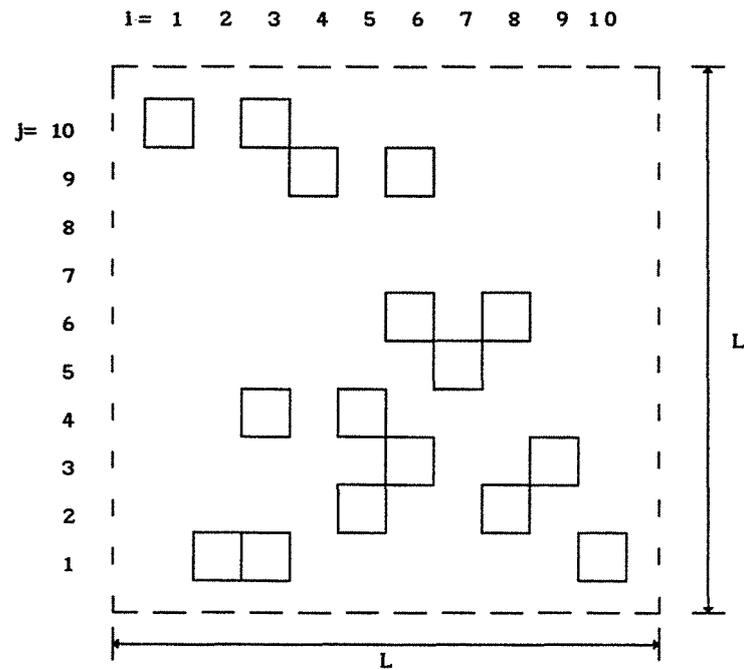


Figure V.27 - Arrangement désordonné - milieu n° 7 - $\varepsilon_B = 0,868$

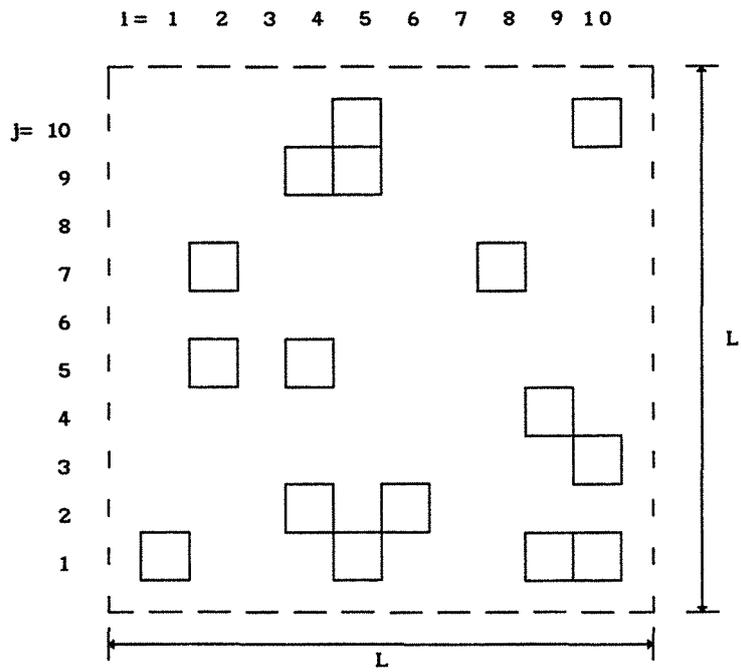


Figure V.28 - Arrangement désordonné - milieu n° 8 - $\epsilon_B = 0,868$

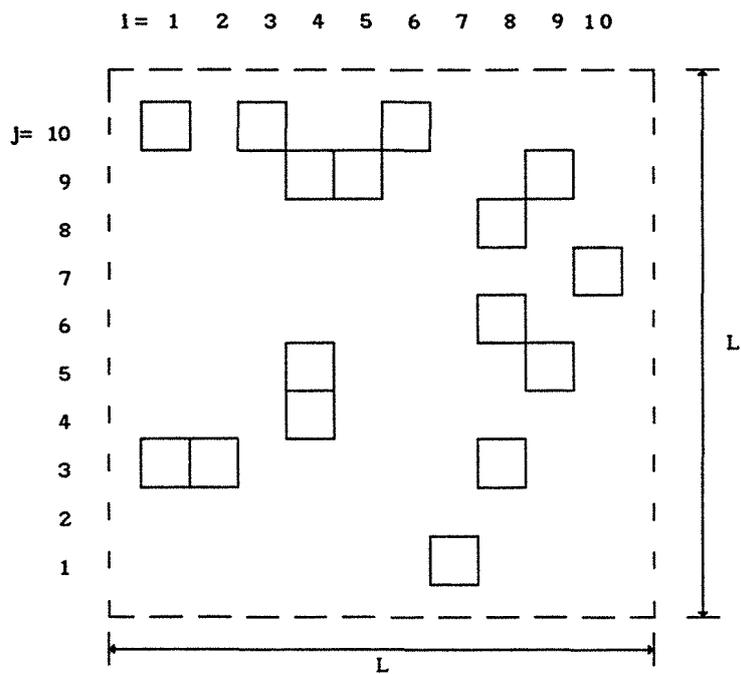


Figure V.29 - Arrangement désordonné - milieu n° 9 - $\epsilon_B = 0,868$

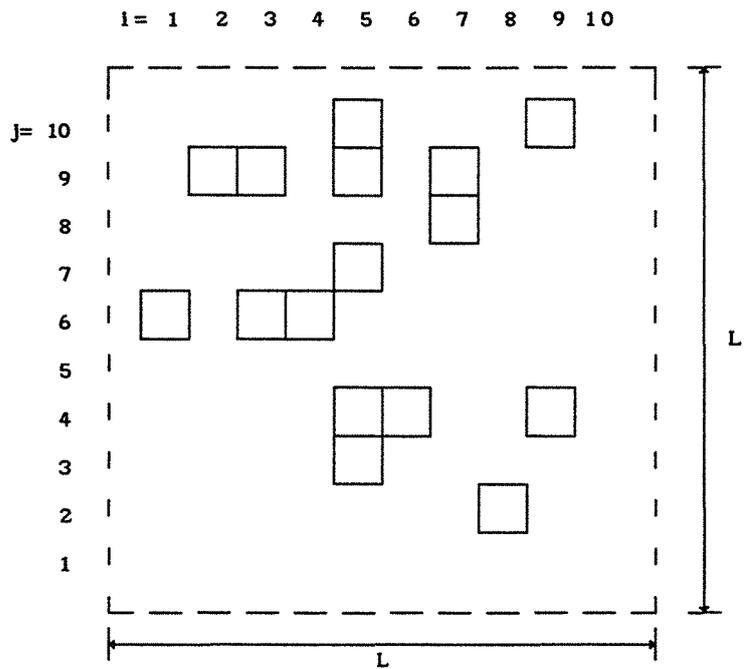


Figure V.30 - Arrangement désordonné - milieu n° 10 - $\epsilon_B = 0,868$

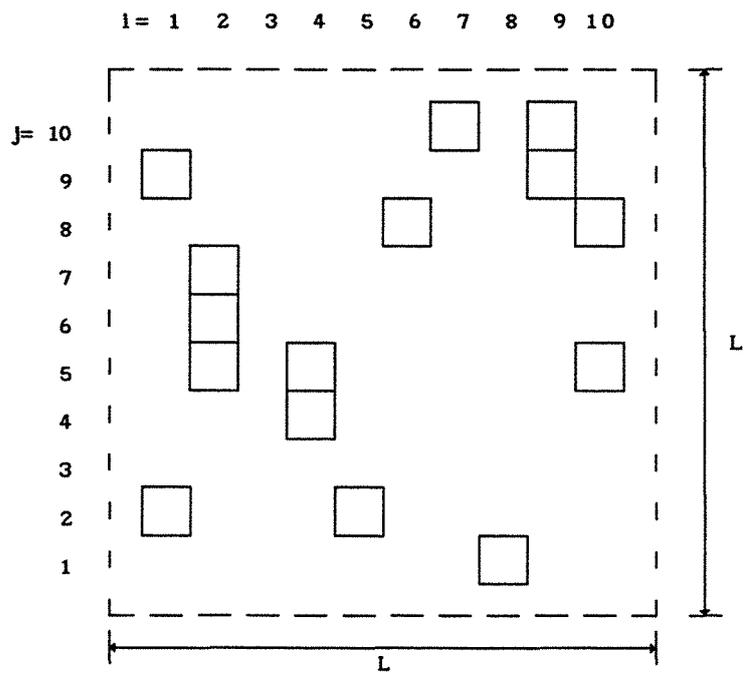


Figure V.31 - Arrangement désordonné - milieu n° 11 - $\epsilon_B = 0,868$

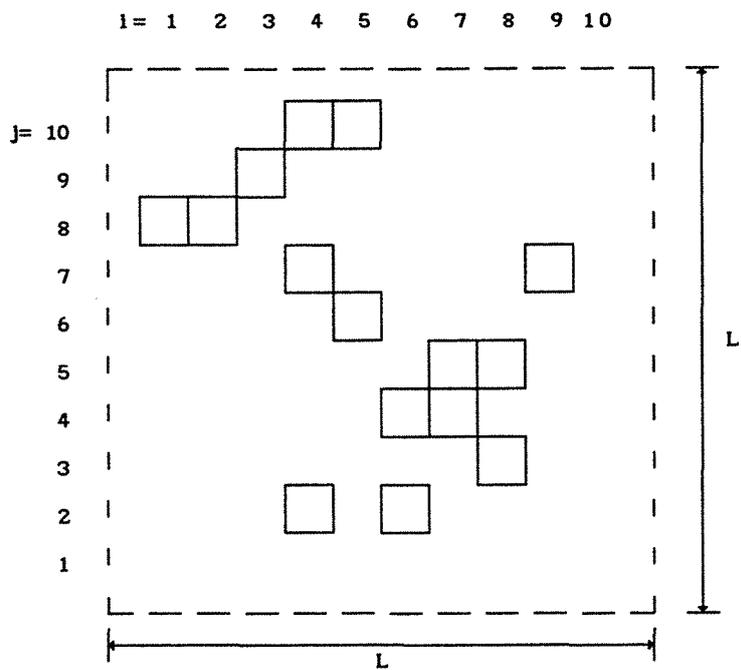


Figure V.32 - Arrangement désordonné - milieu n° 12 - $\epsilon_B = 0,868$

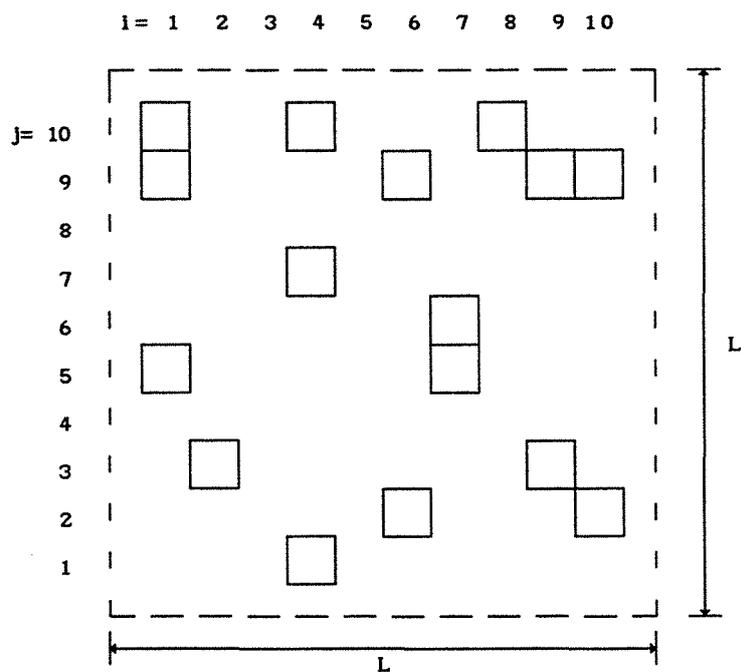


Figure V.33 - Arrangement désordonné - milieu n° 13 - $\epsilon_B = 0,868$

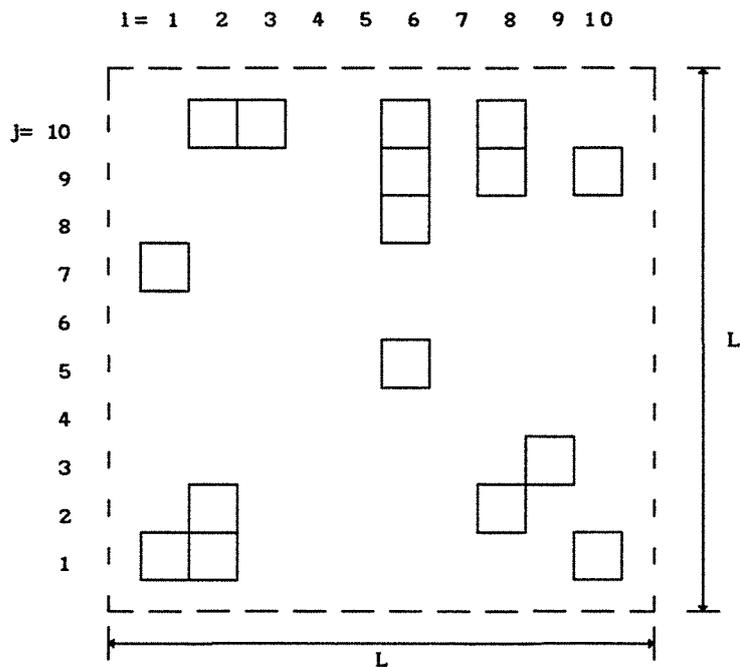


Figure V.34 - Arrangement désordonné - milieu n° 14 - $\epsilon_B = 0,868$

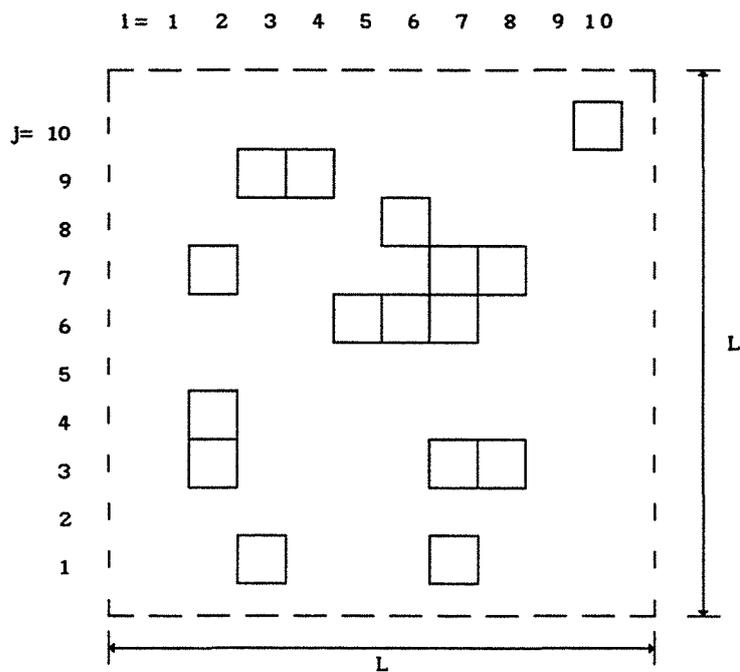


Figure V.35 - Arrangement désordonné - milieu n° 15 - $\epsilon_B = 0,868$

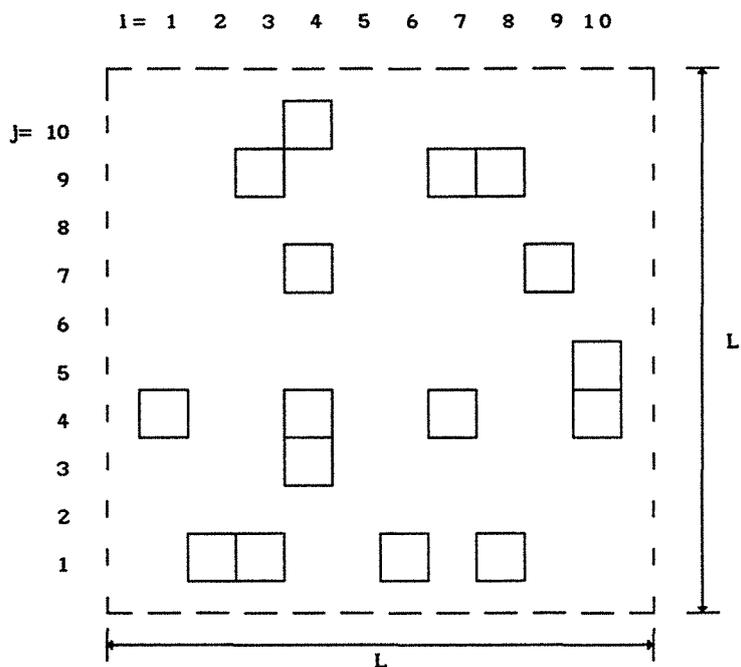


Figure V.36 - Arrangement désordonné - milieu n° 16 - $\epsilon_B=0,868$

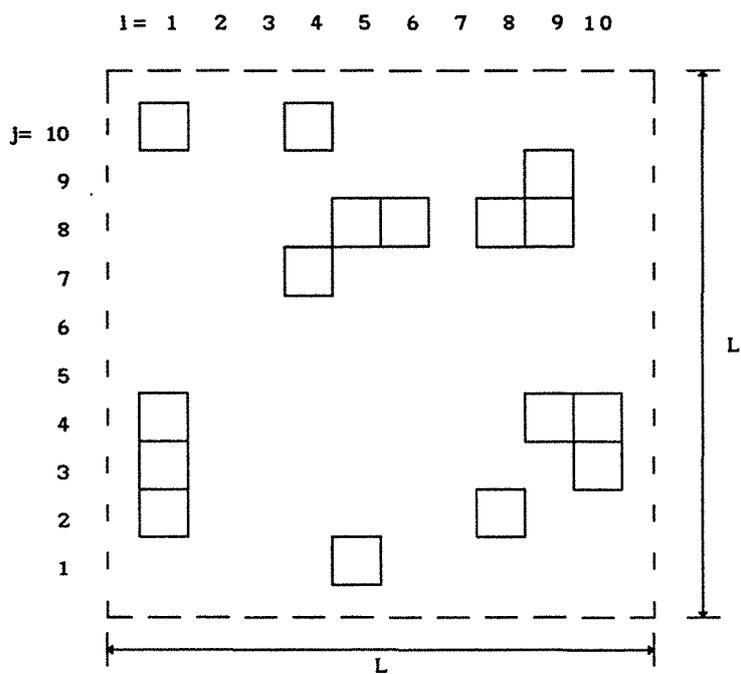


Figure V.37 - Arrangement désordonné - milieu n° 17 - $\epsilon_B=0,868$

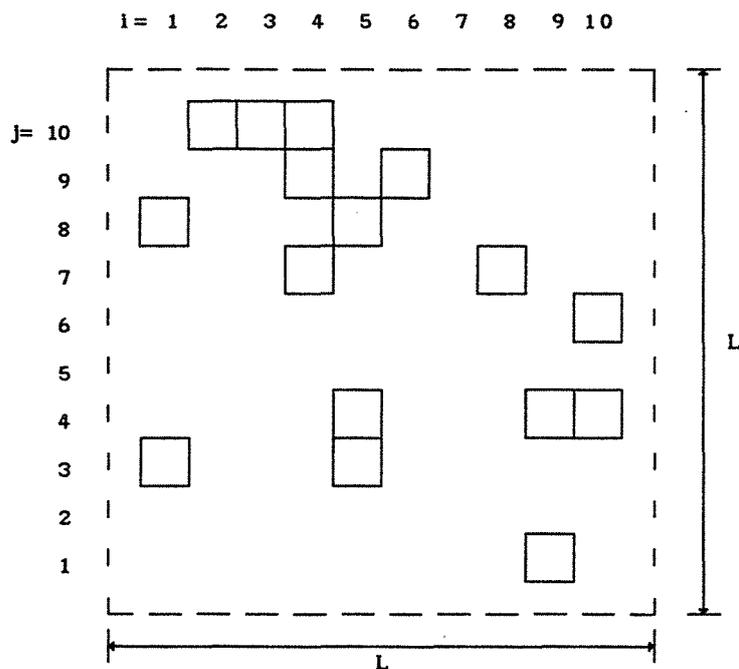


Figure V.38 - Arrangement désordonné - milieu n° 18 - $\epsilon_B=0,868$

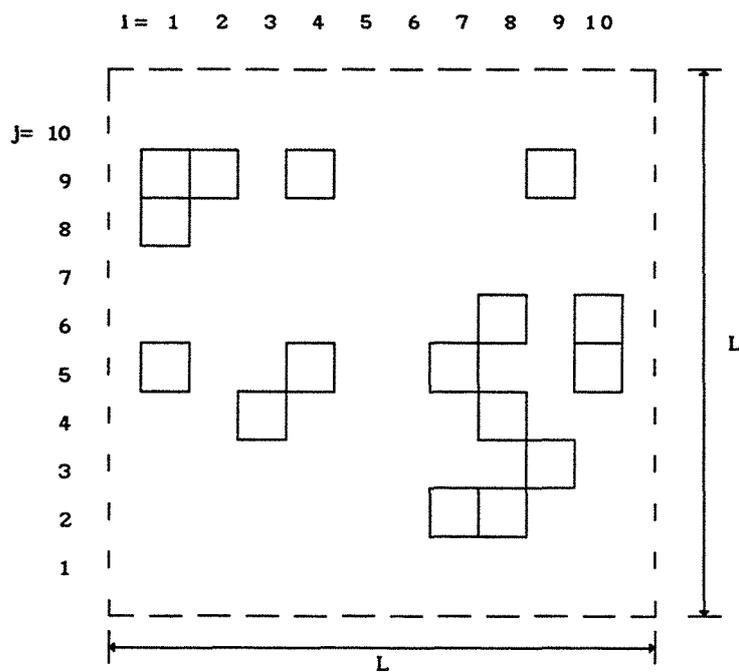


Figure V.39 - Arrangement désordonné - milieu n° 19 - $\epsilon_B=0,868$

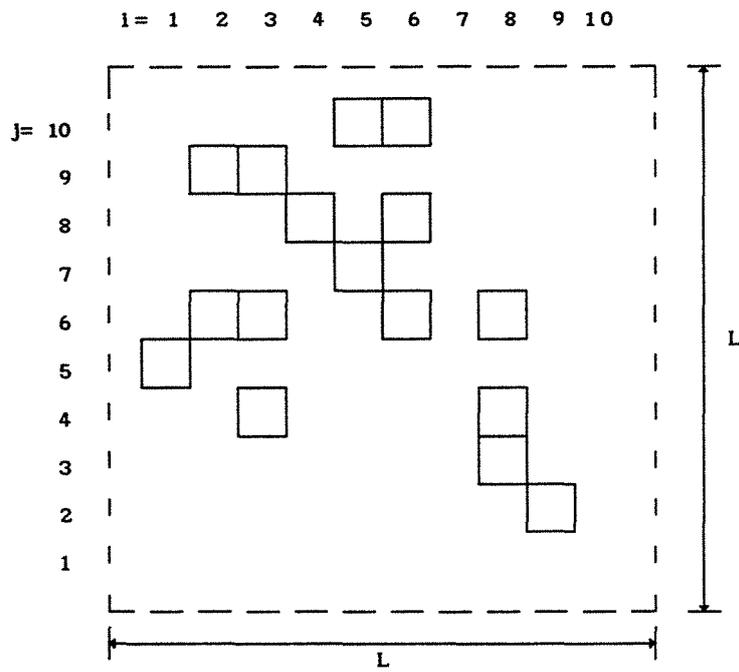


Figure V.40 - Arrangement désordonné - milieu n° 20 - $\epsilon_{\beta}=0,868$

ANNEXE VI

CALCUL DE LA PERTE DE CHARGE

ANNEXE VI

CALCUL DE LA PERTE DE CHARGE

On veut écrire, en utilisant le gradient de pression calculé pour l'écoulement entre deux plans parallèles, l'équation de la perte de charge $\Delta P'/L'$, pour l'arrangement en ligne. La figure VI.1 montre les dimensions associées au problème.

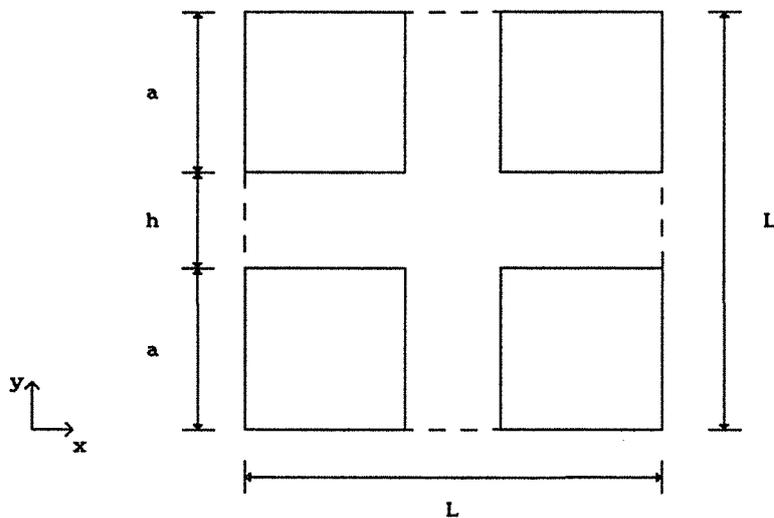


Figure VI.1 - Arrangement en ligne

De la résolution de l'écoulement entre deux plans parallèles [106], il résulte:

$$\frac{dp}{dx} = - \frac{12\mu}{h^3} \cdot Q \quad (1)$$

où Q est le débit par unité de longueur dans la direction de l'axe OZ .

De l'intégration de l'équation (1), il vient:

$$\frac{\Delta p}{L} = \frac{12\mu}{h^3} \cdot Q \quad (2)$$

Si on utilise la définition de la moyenne volumique, introduite au chapitre 2,

$$\langle u \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_B} u \, dV = \frac{Q}{L} \quad (3)$$

Donc, après substitution de Q dans l'équation (2):

$$\frac{\Delta p}{L} = \frac{12\mu}{h^3} \cdot \langle u \rangle L \quad (4)$$

On exprime, maintenant, $\Delta P'/L'$ en fonction de $\Delta p/L$,

$$\frac{\Delta P'}{L'} = \frac{\Delta p}{L} \cdot \frac{1}{\rho \left(\langle u \rangle^B \right)^2} \cdot \frac{\varepsilon d_p}{(1-\varepsilon)} \quad (5)$$

soit,

$$\frac{\Delta P'}{L'} = \frac{\Delta p}{L} \cdot \frac{1}{\mu \langle u \rangle^B} \cdot \left(\frac{\varepsilon d_p}{(1-\varepsilon)} \right)^2 \cdot \frac{1}{Re_p} \quad (6)$$

De l'équation (4), utilisée dans l'équation (6), il vient:

$$\frac{\Delta P'}{L'} = \frac{12}{h^3} \cdot \varepsilon L \cdot \left(\frac{\varepsilon d_p}{(1-\varepsilon)} \right)^2 \cdot \frac{1}{Re_p} \quad (7)$$

où les variables h et d_p , peuvent être exprimées à l'aide de la porosité:

$$\frac{h}{L} = 1 - \sqrt{1-\varepsilon} \quad (8)$$

$$\frac{d_p}{L} = \frac{3}{2} \sqrt{1-\varepsilon} \quad (9)$$

Finalement, on peut écrire la perte de charge sous la forme recherchée:

$$\frac{\Delta P'}{L'} = 27 \cdot \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)} \cdot \frac{1}{\left(1 - \sqrt{1-\varepsilon}\right)^3} \cdot \frac{1}{\text{Re}_p} \quad (10)$$

ANNEXE VII

CHAMP DE VITESSES: MILIEUX DÉSORDONNÉS

ANNEXE VII

CHAMP DE VITESSES: MILIEUX DÉSORDONNÉS

L'annexe VII contient les champs de vitesses obtenus lors de la résolution du problème hydrodynamique (chapitre 4). Les résultats sont montrés pour 19 milieux (le milieu n° 7 est montré au chapitre 4) pour un vecteur vitesse moyenne à 45° par rapport à l'axe OX de la cellule unité et pour un nombre de Reynolds particulière égal à 75.

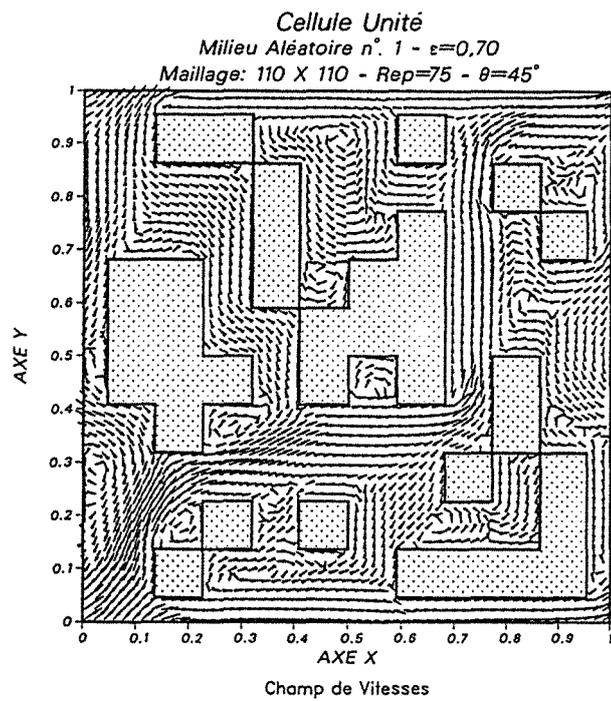


Figure VII.1 - Milieu n° 1 - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

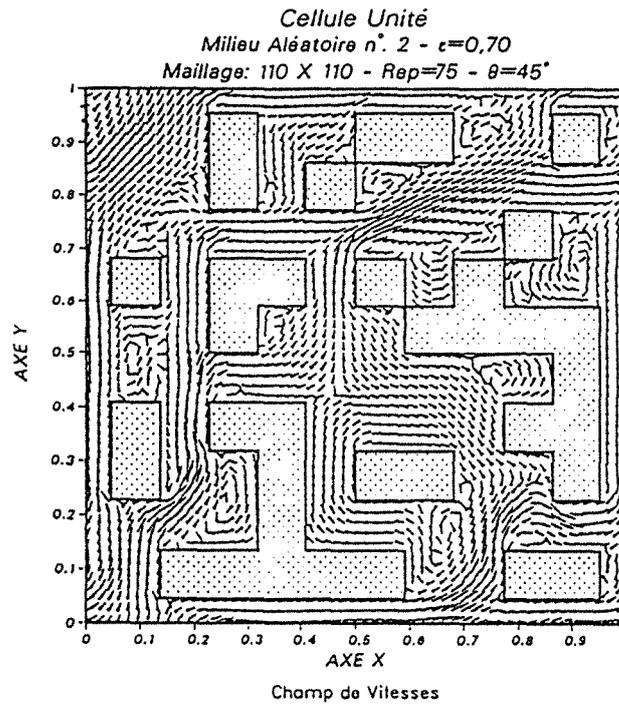


Figure VII.2 - Milieu n° 2 - champ de vitesses

$$\epsilon_{\beta}=0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

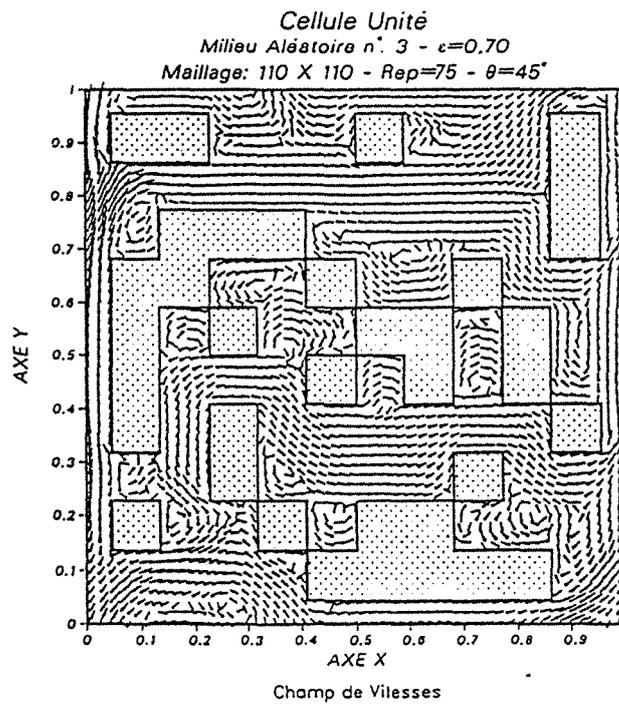


Figure VII.3 - Milieu n° 3 - champ de vitesses

$$\epsilon_{\beta}=0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

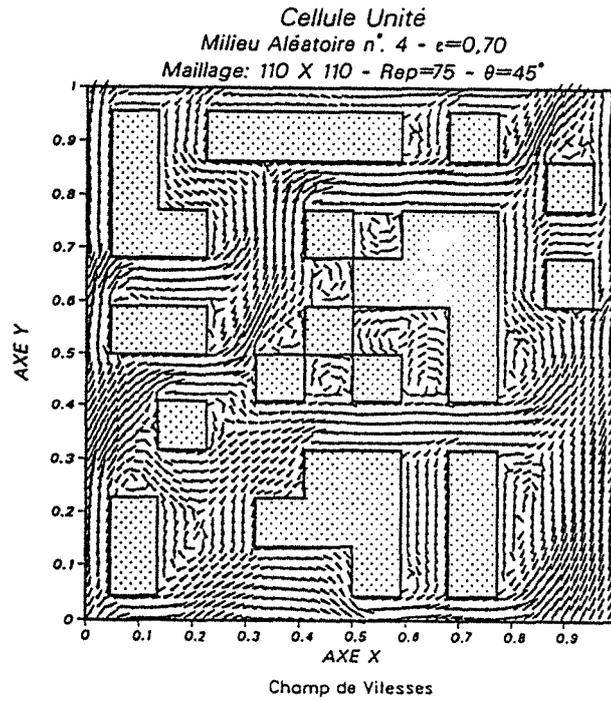


Figure VII.4 - Milieu n° 4 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

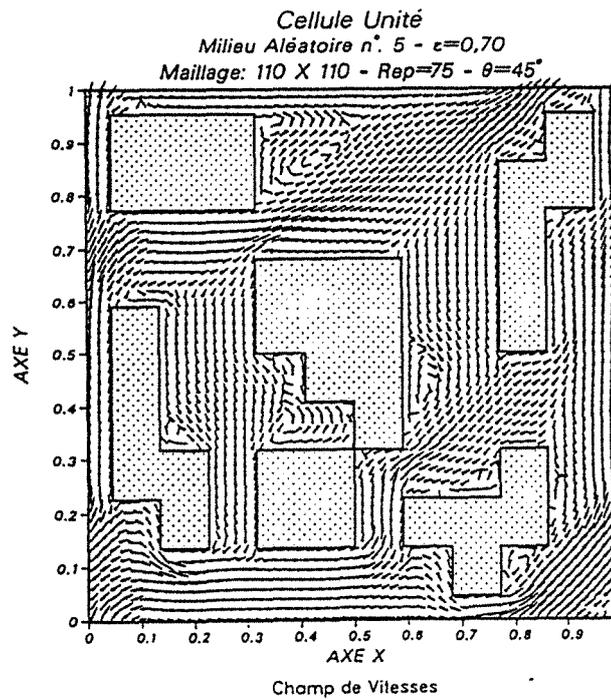


Figure VII.5 - Milieu n° 5 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

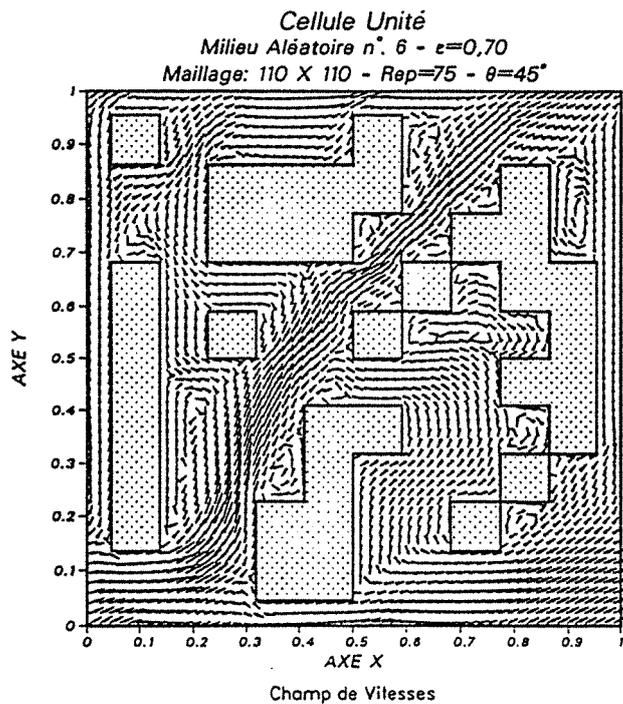


Figure VII.6 - Milieu n° 6 - champ de vitesses
 $\epsilon_B=0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$

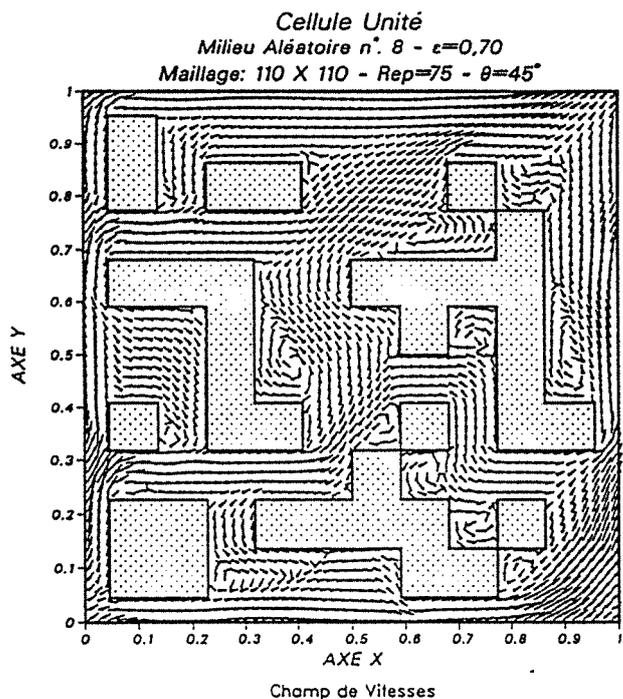


Figure VII.7 - Milieu n° 8 - champ de vitesses
 $\epsilon_B=0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$

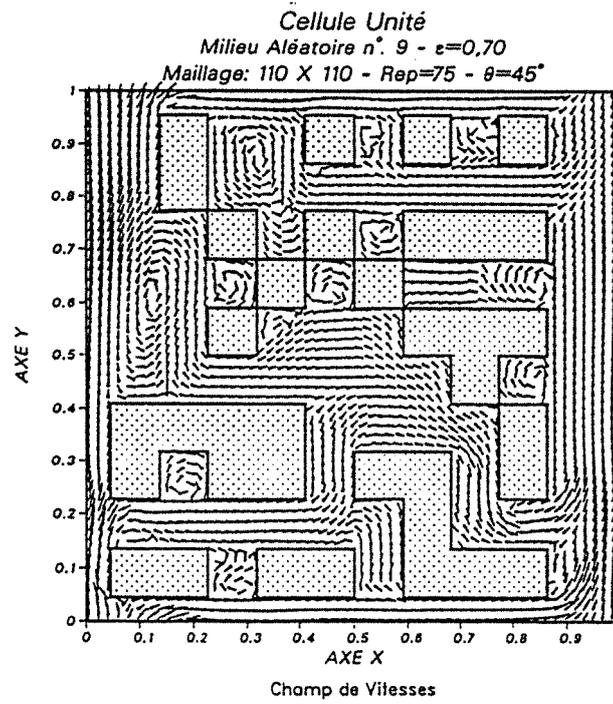


Figure VII.8 - Milieu n° 9 - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

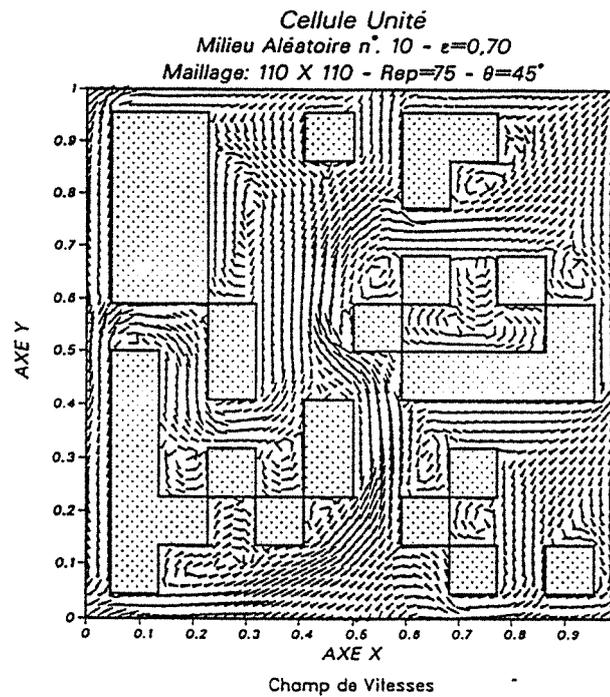


Figure VII.9 - Milieu n° 10 - champ de vitesses

$$\varepsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

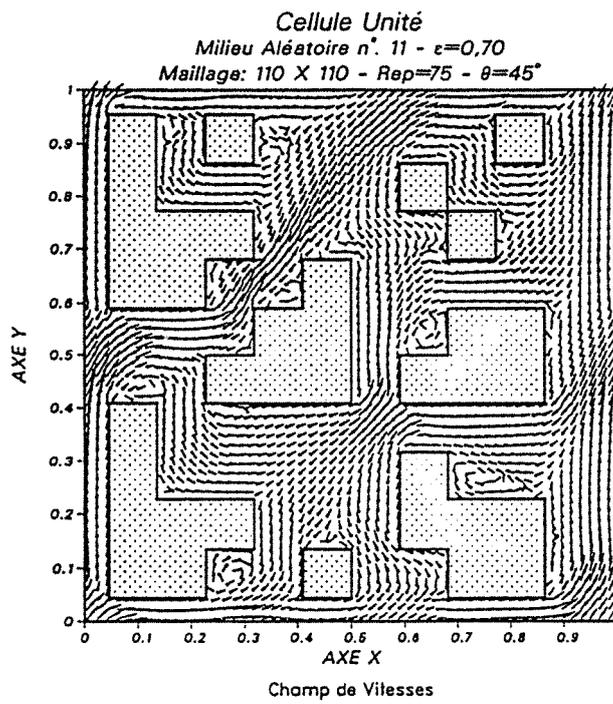


Figure VII.10 - Milieu n° 11 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

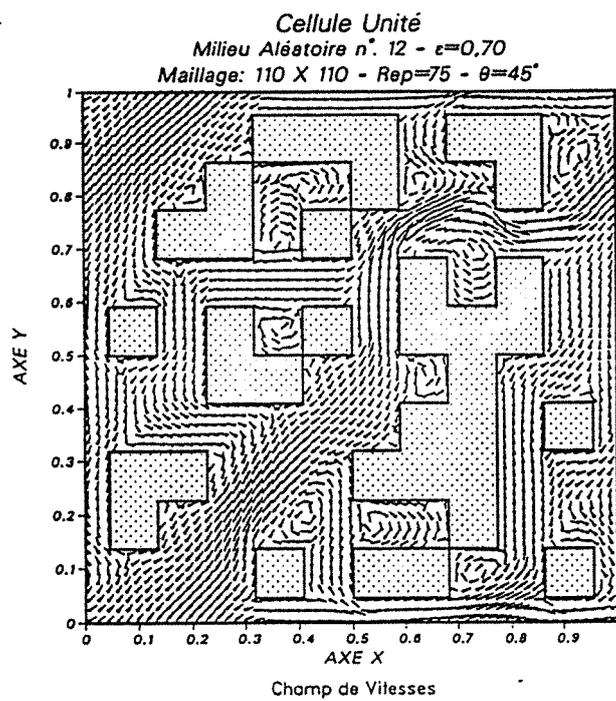


Figure VII.11 - Milieu n° 12 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

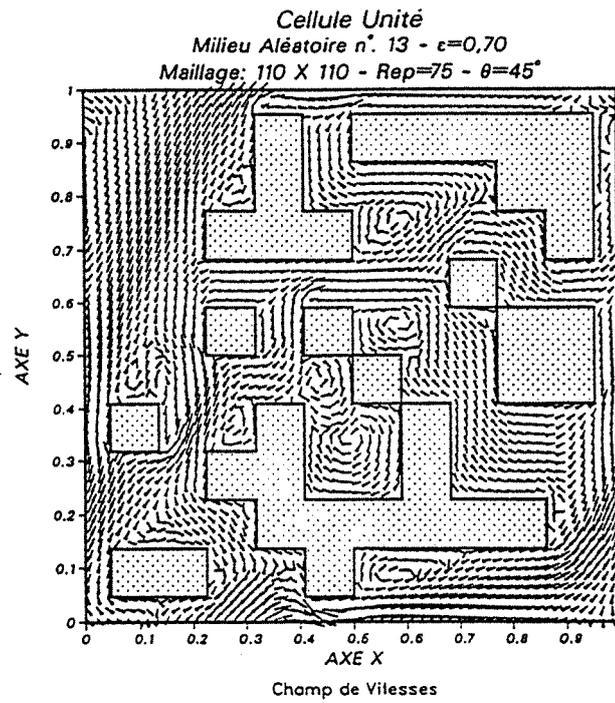


Figure VII.12 - Milieu n° 13 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

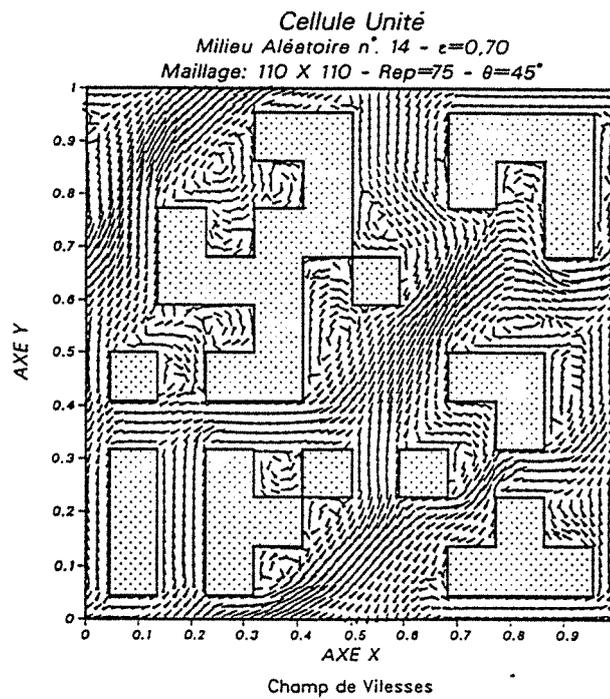


Figure VII.13 - Milieu n° 14 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

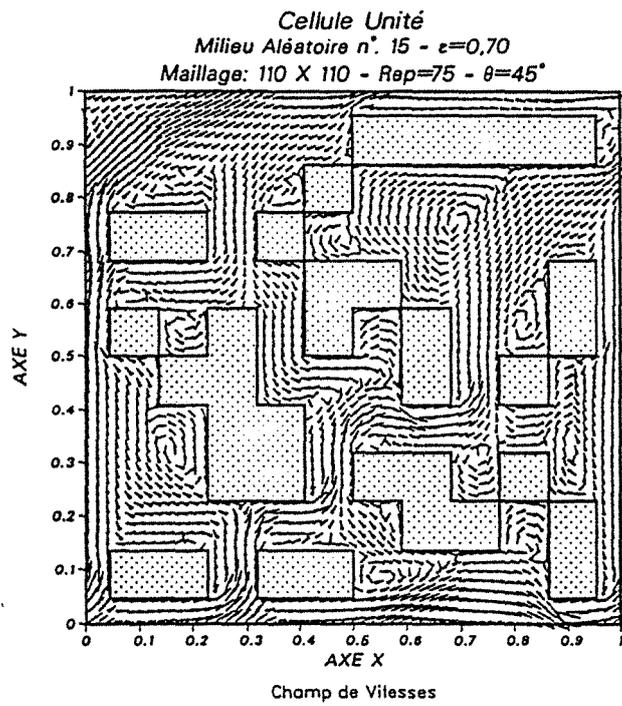


Figure VII.14 - Milieu n° 15 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

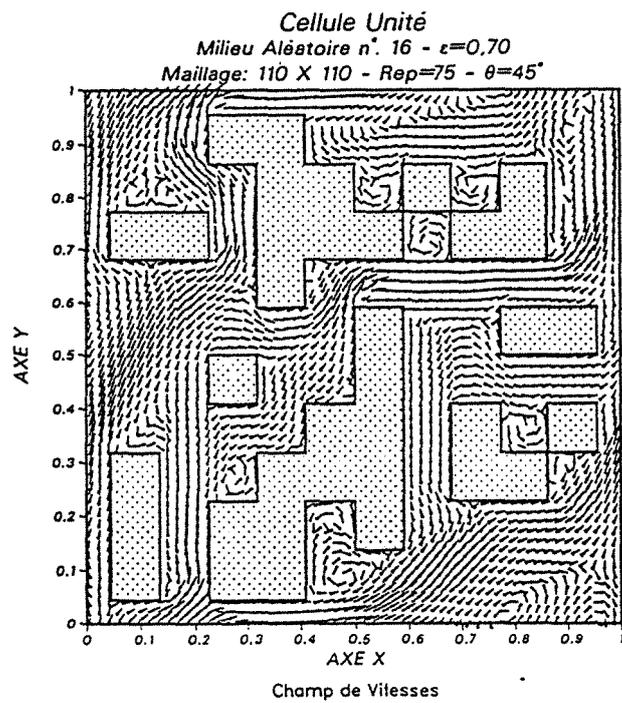


Figure VII.15 - Milieu n° 16 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

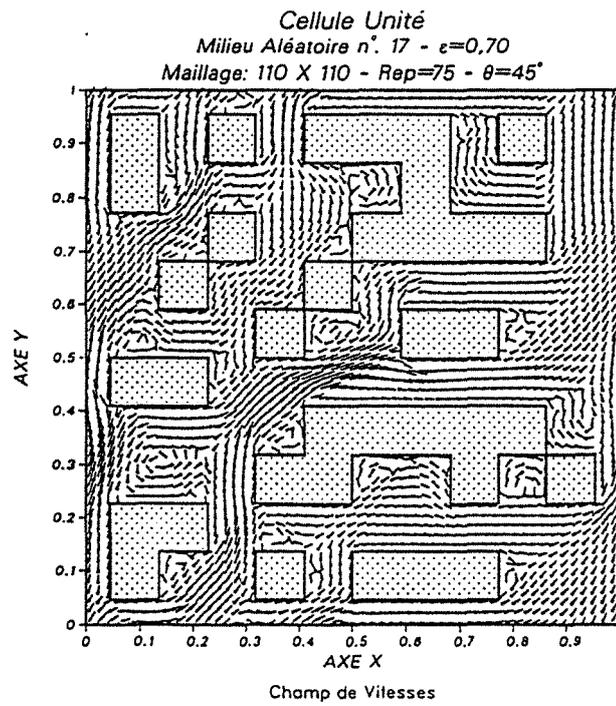


Figure VII.16 - Milieu n° 17 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

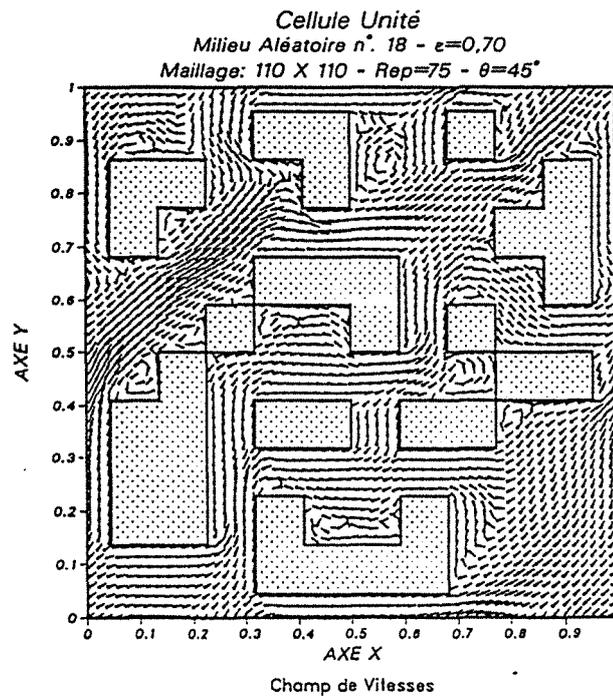


Figure VII.17 - Milieu n° 18 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

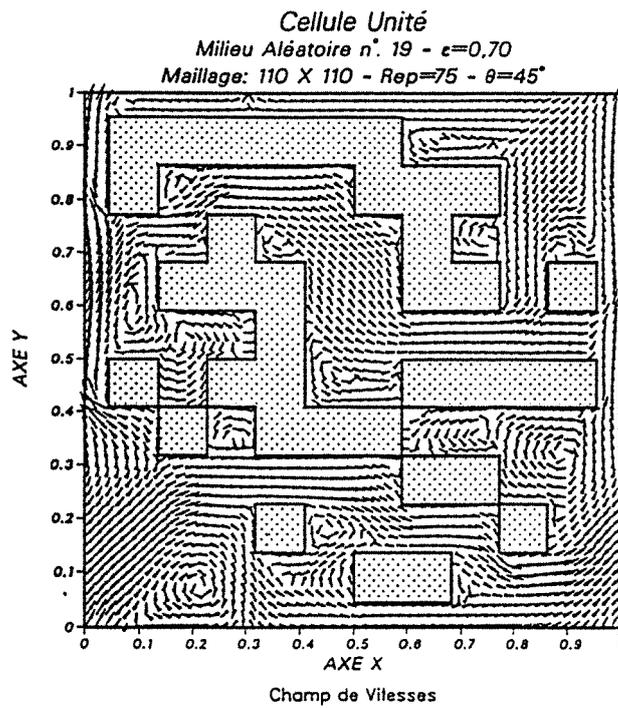


Figure VII.18 - Milieu n° 19 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

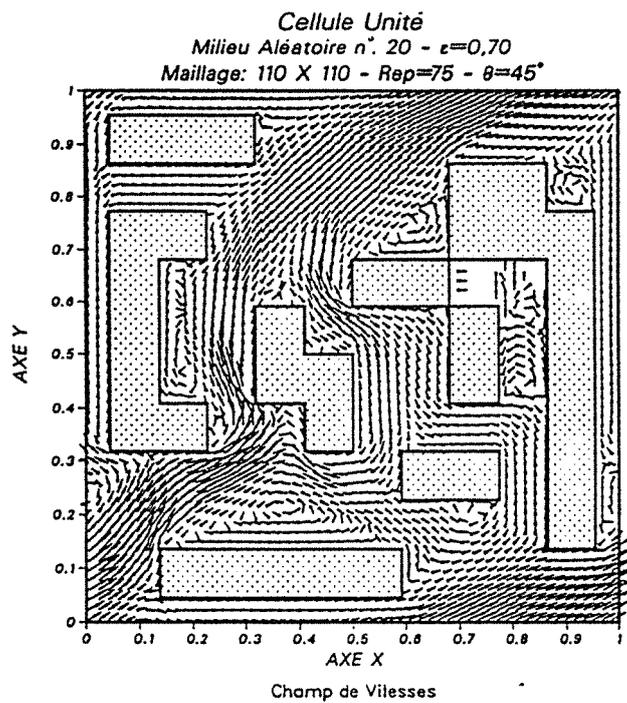


Figure VII.19 - Milieu n° 20 - champ de vitesses

$$\epsilon_B = 0,7 - \theta \cong 45^\circ - Re_p = 75$$

ANNEXE VIII

CALCUL DU TENSEUR DE DISPERSION

ANNEXE VIII

CALCUL DU TENSEUR DE DISPERSION

On développe ici de façon resumée, les calculs amenant à l'équation (33) du chapitre 6. La forme du tenseur effectif donné par cette équation a été obtenue par Koch et Brady [64] en 1989. Les calculs sont réalisés à l'aide de la résolution de l'équation de Stokes, lors de l'écoulement d'un fluide visqueux au travers d'un arrangement cubique de sphères. La solution du problème hydrodynamique a été obtenue par Hasimoto [50] en 1959.

Il s'agit donc d'obtenir analytiquement la forme du tenseur effectif de dispersion,

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \int_{V_B} \nabla \mathbf{F} \cdot \nabla \mathbf{F}^T dV \quad (1)$$

où le vecteur adimensionnel \mathbf{F} est la solution du problème de fermeture dans le domaine de résolution tridimensionnel périodique:

$$\nabla \cdot \left(\nabla \mathbf{F} - \frac{1}{S_C} \nabla \mathbf{F} \right) = - \tilde{\mathbf{V}} \quad (2)$$

La solution du problème hydrodynamique est obtenu pour l'écoulement au travers d'un arrangement spatialement périodique de sphères dont le centre est localisée par:

$$\mathbf{x}_n = n_1 \vec{l}_1 + n_2 \vec{l}_2 + n_3 \vec{l}_3 \quad (n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (3)$$

Hasimoto [50] fourni cette solution en termes d'une série de

Fourier [Kaviany, 1992]:

$$\tilde{v} = -\frac{3}{2} \frac{1}{\pi} \frac{r}{L} \frac{\langle v \rangle \cdot \left(I - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right)}{k^2}, \quad k \neq 0 \quad (4)$$

où r/L est bien inférieur à l'unité, \tilde{v} est la transformée de Fourier du champ de fluctuations de vitesse \tilde{V} et \mathbf{k} est le vecteur,

$$\mathbf{k} = n_1 \mathbf{c}_1 + n_2 \mathbf{c}_2 + n_3 \mathbf{c}_3 \quad (5)$$

qui vérifie l'égalité:

$$\mathbf{k} \cdot \vec{l}_i = n_i, \quad i=1, 2, 3 \quad (6)$$

À l'aide de ces deux dernières relations, on peut déterminer c_1 , c_2 et c_3 ,

$$c_1 = \frac{\vec{l}_2 \times \vec{l}_3}{V} \quad (7a)$$

$$c_2 = \frac{\vec{l}_3 \times \vec{l}_1}{V} \quad (7a)$$

$$c_3 = \frac{\vec{l}_1 \times \vec{l}_2}{V} \quad (7a)$$

où V est le volume d'une cellule unité ($V=l_1 \cdot (l_2 \times l_3)$).

Dans le cas de l'arrangement cubique simple, le vecteur \mathbf{k} adimensionnel est donné par [Hasimoto, 1959]:

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix} \quad (8)$$

S'il s'agit d'un arrangement cubique face-centrée, il est donné par [50]:

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} n_1 - n_2 + n_3 \\ n_1 + n_2 - n_3 \\ n_1 + n_2 + n_3 \end{bmatrix} \quad (9)$$

Comme la solution du problème hydrodynamique est connue sous sa forme transformée, les équations (1) et (2) sont réécrites à l'aide des transformées de Fourier [Koch et Brady, 1989]:

$$\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \sum_{\mathbf{k}} 4\pi^2 k^2 \mathcal{F}(\mathbf{k})\mathcal{F}(-\mathbf{k}) \quad (10)$$

et

$$4\pi^2 \frac{k^2}{\text{Pe}} \mathcal{F}(\mathbf{k}) + 2\pi \sum_{\mathbf{k}'} [\mathbf{V}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot i\mathbf{k}'] \mathcal{F}(\mathbf{k}') = -\tilde{\mathcal{V}}(\mathbf{k}) \quad (11)$$

où \mathcal{F} est la transformée de Fourier du vecteur \mathbf{F} .

À partir de l'expression de la fluctuation de vitesse (équation 4), de l'équation de fermeture en \mathcal{F} et de l'équation (10), on arrive à la forme finale du tenseur de dispersion:

$$\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \frac{9}{4\pi^2} \left(\frac{r}{L} \right)^2 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{\left[\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right) \right]^2}{k^2 \left[4\pi^2 \frac{k^4}{\text{Pe}^2} + (\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \mathbf{k})^2 \right]} \quad (12)$$

Il est important de mentionner ici que pour arriver à la forme finale du tenseur effectif de dispersion (équation (12)), le champ de vitesses \mathbf{V} dans l'équation (2) est approché par la vitesse moyenne de l'écoulement $\langle \mathbf{V} \rangle$.

La solution du problème bidimensionnel équivalent, qui n'est rien d'autre que l'écoulement au travers d'un arrangement périodique de cylindres circulaires, est obtenue en remplaçant la force de traînée d'une sphère ($6\pi L \langle u \rangle / r$) par la force de traînée, par unité de longueur, résultant de l'écoulement autour d'un cylindre de section circulaire. Cette force de traînée est calculée par Hasimoto et vaut $4\pi \langle u \rangle / [\ln(L/r) - 1,3015]$. On

obtient ainsi la forme du tenseur effectif de dispersion dans le cas bidimensionnel:

$$\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \frac{1}{16\pi^4} \left(\frac{4\pi}{\ln \frac{L}{r} - 1,3015} \right)^2 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{\left[\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right) \right]^2}{k^2 \left[4\pi^2 \frac{k^4}{Pe^2} + (\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \mathbf{k})^2 \right]} \quad (13)$$

Le vecteur \mathbf{k} , dans le cas bidimensionnel, est donné pour l'arrangement en ligne par,

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \end{bmatrix} \quad (14)$$

et dans le cas de l'arrangement en quinconce par:

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} n_1 - n_2 \\ n_1 + n_2 \end{bmatrix} \quad (15)$$

On peut encore réécrire l'équation (13) explicitement en fonction des variables n_1 et n_2 . Il vient pour le dénominateur,

$$k^2 \left[4\pi^2 \frac{k^4}{Pe^2} + (\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \mathbf{k})^2 \right] = N^3 \left[4\pi^2 \frac{N^2}{Pe^2} + (N_1 \cos\theta + N_2 \sin\theta)^2 \right] \quad (16)$$

où $N = N_1^2 + N_2^2$, et pour le numérateur:

$$\left[\langle \mathbf{V} \rangle \cdot \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right) \right]^2 = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{bmatrix} \quad (17)$$

où les coefficients de la matrice sont donnés par:

$$D_{11} = (N_2^2 \cos\theta - N_1 N_2 \sin\theta)^2 \quad (18a)$$

$$D_{12} = D_{21} = (N_2^2 \cos\theta - N_1 N_2 \sin\theta)(N_1^2 \sin\theta - N_1 N_2 \cos\theta) \quad (18b)$$

$$D_{22} = (N_1^2 \sin\theta - N_1 N_2 \cos\theta)^2 \quad (18c)$$

Les variables N_1 et N_2 prennent pour l'arrangement en ligne les valeurs n_1 et n_2 , tandis que pour l'arrangement en quinconce elles valent respectivement $n_1 - n_2$ et $n_1 + n_2$.

ANNEXE IX

SOLUTION APPROCHÉE DU PROBLÈME DU CANAL + CAVITÉ

ANNEXE IX

SOLUTION APPROCHÉE DU PROBLÈME DU CANAL + CAVITÉ

IX.1-RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE FERMETURE

On veut déterminer le coefficient effectif longitudinal pour le problème de la dispersion d'un soluté quand de l'écoulement d'un fluide à l'intérieur d'un canal connecté à une cavité (figure 7.1). On propose de remplacer le problème par celui de la dispersion d'un soluté à l'intérieur du canal lorsqu'une partie du volume de fluide est immobile (figure IX.1).

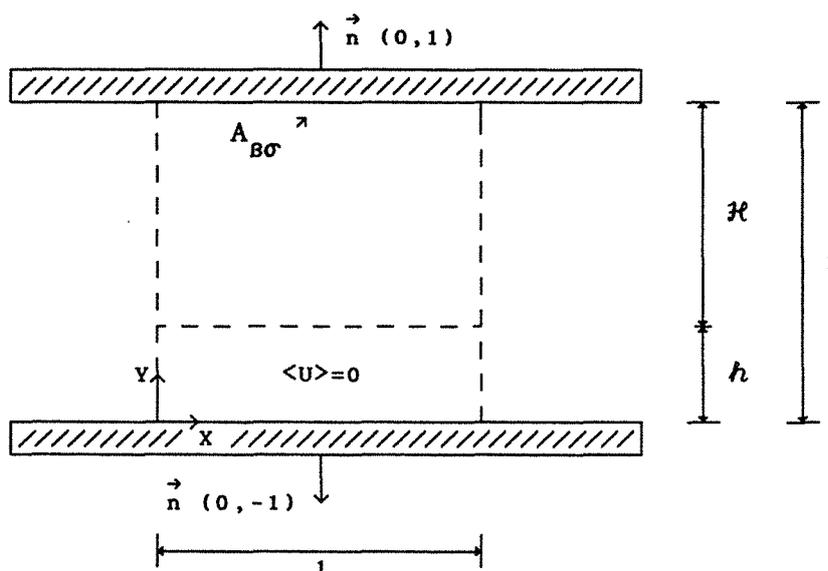


Figure IX.1 - Diffusion-dispersion canal + cavité

Dans la partie supérieure ($h < Y < 1$) on a l'écoulement de type entre deux plans parallèles puisqu'on considère une condition de non-glissement sur

l'interface "fluide-fluide". Le fluide stagnant se trouve donc confiné dans la partie inférieure du canal ($0 < Y < h$).

Pour arriver à la forme finale du coefficient effectif longitudinal, il faut résoudre le problème de fermeture suivant:

$$\frac{\partial F}{\partial t}^x = \frac{\partial^2 F}{\partial Y^2}^x - \tilde{U} \quad (1)$$

avec les conditions aux limites,

$$\frac{\partial F}{\partial Y}^x = 0 \quad \text{en } Y=0 \text{ et } Y=1 \quad (2)$$

et la condition initiale,

$$F_x = 0 \quad \text{en } t=0 \quad (3)$$

Le terme source dans l'équation (1) est donné par:

$$\tilde{U} = -\langle U \rangle \quad 0 < Y < h \quad (4)$$

et

$$\tilde{U} = \langle U \rangle \left\{ \frac{6}{\mathcal{H}} \left[\left(\frac{Y-h}{\mathcal{H}} \right) - \left(\frac{Y-h}{\mathcal{H}} \right)^2 \right] - 1 \right\} \quad h < Y < 1 \quad (5)$$

La solution du problème (1), avec la condition à la limite (2), la condition initiale (3) et le terme source donné par (4) et (5) est déterminée par:

$$F_x(Y,t) = - \int_{\tau=0}^t d\tau \int_0^1 G(Y,t|Y',\tau) \tilde{U} dY' \quad (11)$$

où $G(Y,t|Y',\tau)$ est la fonction de Green du problème et donnée par [Ozisik, 1980]:

$$G(Y,t|Y',\tau) = 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\beta_m^2(t-\tau)} \cos \beta_m Y \cdot \cos \beta_m Y' \quad (12)$$

où

$$\beta_m = m\pi \quad m=1,2,3,\dots \quad (13)$$

De l'intégration en (11) il vient:

$$F_x(Y,t) = 12 \frac{Sc \langle U \rangle \mathcal{H}}{\mathcal{H}^4} \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{\cos \beta_m Y}{\beta_m^4} \left(\frac{2 \sin \beta_m h}{\mathcal{H} \beta_m} + \cos \beta_m + \cos \beta_m h \right) \quad (14)$$

IX.2-CALCUL DU TENSEUR EFFECTIF

On calcule ensuite le coefficient effectif longitudinal à partir de la relation $D_{xx} = -\langle F_x \tilde{U} \rangle$. On obtient ainsi à l'aide des équations (4), (5) et (14) la forme finale du coefficient de dispersion:

$$D_{xx}^* = 1 + 72 \frac{(Sc \langle U \rangle \mathcal{H})^2}{\mathcal{H}^6} \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - e^{-\beta_m^2 t} \right) \frac{1}{\beta_m^6} \left(\frac{2 \sin \beta_m h}{\mathcal{H} \beta_m} + \cos \beta_m + \cos \beta_m h \right)^2 \quad (15)$$

On vérifie que pour $h=0$ et $\mathcal{H}=1$, on retrouve la solution pour le problème de la dispersion de Taylor pour l'écoulement entre deux plans parallèles, montrée au chapitre 7 et dans l'annexe IV.

**AUTORISATION DE SOUTENANCE DE THESE
DU DOCTORAT DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE
DE LORRAINE**

o o o

BIU NANCY
Service Commun de Documentation
INPL
2, avenue de la Forêt de Haye - B.P. 3
54501 VANDOEUVRE Cédex FRANCE

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :

Monsieur ADLER P., Dir. Rech., LPTM/CNRS - CHASSENEUIL
Monsieur QUINTARD M., Dir. Rech., LEPT/ENSAM - TALENCE

Le Président de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, autorise :

Monsieur AMARAL SOUTO Hélio Pedro

à soutenir devant l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE,
une thèse intitulée :

**"Diffusion-dispersion en milieu poreux : étude numérique du tenseur
de dispersion pour quelques arrangements périodiques
bidimensionnels "ordonnés" et désordonnés"**

en vue de l'obtention du titre de :

**DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE
LORRAINE**

Spécialité : **"MECANIQUE ET ENERGETIQUE"**

Fait à Vandoeuvre le, **10 septembre 1993**

Le Président de l'I.N.P.L.,

M. LUCIUS



NANCY BRABOIS
2, AVENUE DE LA
FORET-DE-HAYE
BOITE POSTALE 3
F - 5 4 5 0 1
VANDOEUVRE CEDEX

MOTS CLÉS

Diffusion, Dispersion, Étude Numérique, Milieu Périodique,
Milieu Poreux, Prise de Moyenne Volumique

RÉSUMÉ

L'objet du travail est le calcul et l'étude du tenseur de diffusion-dispersion d'un milieu poreux saturé dans quelques géométries bidimensionnelles spatialement périodiques. Le premier chapitre introduit les mécanismes physiques de dispersion et fait la synthèse des principaux travaux sur le sujet. La méthode utilisée de prise de moyenne avec fermeture est exposée au deuxième chapitre. Puis la technique numérique (volumes finis avec un schéma quadratique de discrétisation des termes convectifs) est décrite. Quatre types de milieux poreux périodiques bidimensionnels (arrangements de cylindres rectangulaires: "ordonnés" en ligne, en quinconce, en chicane; arrangements "désordonnés" aléatoires) ont été considérés en faisant varier la direction du vecteur vitesse moyenne et le nombre de Reynolds particulaire. L'écoulement du fluide au travers des milieux (équations de Navier-Stokes) est ensuite résolu. La correction non-linéaire à apporter à la loi de Darcy est discutée. Le cinquième chapitre traite du problème de la diffusion pure. Puis le tenseur de diffusion-dispersion est calculé pour les différentes géométries. Les résultats sont alors confrontés à divers modèles de la littérature ainsi qu'aux résultats obtenus pour des milieux réels. Le dernier chapitre prolonge l'étude en examinant le problème de dispersion en régime transitoire.

ABSTRACT

The aim of this work is to calculate and to study the dispersion tensor in a saturated porous medium for various two-dimensional spatially periodic systems. The first chapter is an introduction to the physical mechanisms of dispersion and a review of the main studies of the literature. The averaging method with closure which is used here is described in the second chapter. The numerical technique (finite volumes with a quadratic discretization for the convective terms) is explained. Four types of two-dimensional periodic porous media made of rectangular cylinders ("ordered": in square or staggered and in zigzag; "disordered": distributed at random) are tested by varying the direction of the average velocity vector and the particle Reynolds number. The fluid flow through the media (Navier Stokes equations) is computed. The non-linear correction to Darcy's law is then discussed. The fifth chapter deals with the pure diffusion problem. Then the dispersion tensor is calculated for the various systems. The results are compared with several models of the literature and with results obtained for real media. The last chapter extends the study by examining the dispersion problem in the unsteady state.