

NOMENCLATURE

Lettres latines

Symboles	dénomination	unités
C	Concentration adimensionnelle	
C_e	Concentration du traceur à l'entrée	$(\text{kg}.\text{m}^{-3})$
C_1	Concentration du constituant du traceur	$(\text{kg}.\text{m}^{-3})$
D	Coefficient de diffusion dans le fluide	$(\text{m}^2.\text{s}^{-1})$
$\bar{\bar{D}}$	Tenseur de diffusion moléculaire	
\vec{g}	Vecteur champ de pesanteur	
k_p	Constante de la vitesse de la réaction hétérogène à la paroi	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
L	Longueur de la conduite	(m)
P	Pression	(P_a)
\mathcal{P}_1	Terme de production de la concentration	$(\text{kg}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1})$
R	Rayon de la conduite	(m)
r	Coordonnée radiale	(m)
\mathcal{R}_1	Constante de la vitesse de la réaction homogène d'ordre 1	(s^{-1})
t	Temps	(s)
U_e	Vitesse d'entrée	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
U_x	Composante longitudinale de la vitesse	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
U_r	Composante radiale de la vitesse	$(\text{m}.\text{s}^{-1})$
\vec{v}	vecteur du champ des vitesses	

x	Coordonnée longitudinale	(m)
---	--------------------------	-----

Lettres grecques

Symboles	dénomination	unités
α_j	Coefficient à gauche de la diagonale principale	
β_j	Coefficient de la diagonale principale	
γ_j	Coefficient à droite de la diagonale principale	
δr	Pas adimensionnel de discrétisation suivant la direction radiale	
δx	Pas adimensionnel de discrétisation suivant la direction axiale	
$\delta \varphi$	Pas de discrétisation de la direction azimutale	
μ	Viscosité dynamique	$(kgm.s^{-1})$
ρ	Masse volumique du fluide	(kgm^{-3})
ν	viscosité cinématique du fluide	(m^2s^{-1})

Nombres caractéristiques

Symboles	Dénominations
Da	Nombre de Damköhler
m_T	Nombre de Thiele
P_e	Nombre de Peclet
P_r	Nombre de Prandtl

Opérateurs

Δ	Laplacien
----------	-----------

∇	Nabla
∂	Opérateur dérivation partielle
div.	Opérateur divergence

INDICES

* Relatif aux grandeurs adimensionnelles

n, s : faces Nord et Sud du volume de contrôle

e, w : faces Est et Ouest du volume de contrôle

i et j : relatifs respectivement aux directions longitudinale et radiale

Liste des figures

Figure1 : Représentation graphique du modèle physique et du système d'axes.....	4
Figure2 : Maillage du domaine physique en (i, j).....	8
Figure 2. 1 : Distributions de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x. $\mathcal{P}^* = 0$	14
Figure 2.2 : Distributions de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x. $\mathcal{P}^* = 1$	15
Figure 2.3 : Distributions de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x. $\mathcal{P}^* = 1.5$	16
Figure 2. 4 : Distribution de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x. $Pe = 20$	17
Figure 2.5 : Distribution de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x. $Pe = 100$	17
Figure 2.6 : Variation de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x. $m_T = 10$	18
Figure 2.7 : Variation de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x. $m_T = -0.15$	19
Figure 2. 8 : Dispersion de l'espèce en fonction du rayon à différentes abscisses x. $Pe=20$.	
Figure 2.9 : Dispersion de l'espèce en fonction du rayon à différentes abscisses x. $Pe=100$..	20
Figure 2.10 : Dispersion de l'espèce en fonction du rayon à différentes abscisses x. $Pe=200$	21

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GÉNÉRALE	1
CHAPITRE I : MODELISATION MATHEMATIQUE ET FORMULATION NUMERIQUE.....	3
1. Modélisation mathématique.....	3
1.1. Description du système et position du problème.....	4
1.2. Adimensionnalisation des équations.....	6
1.3. Conditions aux limites adimensionnelles.....	7
2. Formulation numérique du problème.....	7
2.1. Maillage du domaine.....	7
2.2. Discrétisation de l'équation de la concentration.....	8
3. Conclusion.....	12
CHAPITRE II : ANALYSE DES RESULTATS.....	13
1. Conditions de calcul	13
2. Résultats et interprétations.....	13
2. 1. Analyse des influences des paramètres internes.....	13
2.1.1. Influence du nombre de Damkohler Da et du taux de création \mathcal{P}^*	13
2.1.2. Influence du nombre de Peclet Pe	16
2.2. Analyse des influences du paramètre pariétal m_T	18
2.3. Analyse de la dispersion.....	19
3. Conclusion.....	22
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES.....	23

Introduction générale

Les écoulements des fluides dans les conduites ont fait l'objet de très nombreux travaux aussi bien sur le plan expérimental, théorique que numérique. Cela s'explique par leur importance dans plusieurs domaines, notamment dans les domaines industriel (injecteurs diphasiques tels que les moteurs automobiles et aéronautiques, réacteur nucléaire, turbopropulseur, diffusion d'un traceur dans un fluide entre les composants électroniques compacts), médical (prolifération des bactéries, circulation sanguine, . . .), domestique (circuits hydrauliques dans les habitations, ...), dans les phénomènes naturels comme la circulation de la sève dans les végétaux et les mécanismes de transport dans les systèmes biologiques (le contrôle des niveaux de concentrations et la régulation des flux de matière, le fonctionnement d'organes artificiels tels que les machines de dialyse du rein, les cœurs, les foies, les oxygénateurs à membrane : poumon artificiel). On s'aperçoit donc très vite qu'ils peuvent donner naissance à des phénomènes très complexes et que leur modélisation n'est pas aisée.

Vraisemblablement, c'est le physiologiste français **Jean L. M. Poiseuille** (1797-1869) qui le premier dégagea en 1844 une loi heuristique sur les écoulements visqueux en régime laminaire dans les tubes capillaires, loi qui sera plus tard exprimée sous sa forme théorique par l'allemand **Hagen** (1860) mais d'une manière très approximative. Par la suite, **Osborne Reynolds** (1842-1912) un ingénieur irlandais qui fit d'importantes contributions à l'hydrodynamique et à la dynamique des fluides, dans une expérience devenue aujourd'hui classique mais incontournable en écoulement dans les conduites, caractérisa les différents régimes d'écoulement selon les valeurs d'un nombre adimensionnel qui porte aujourd'hui son nom.

Cependant il faut attendre le XXIème siècle, avec la convergence de connaissances mathématiques et expérimentales et l'utilisation de calculateurs de plus en plus puissants, pour que soient véritablement abordés des problèmes aussi complexes que les écoulements dans des tuyaux cylindriques, et que soient expliquées les différences entre les écoulements laminaires - étudiés par **J. L. M. Poiseuille**- et turbulents. Ces domaines d'études, ainsi que les problèmes de couche limite développés par l'allemand **L. Prandtl** ou ceux d'écoulements turbulents traités par **Osborne Reynolds** en 1883 et **Von Théodore Karman** (1881-1963), font aujourd'hui l'objet d'intenses recherches tant sur le plan purement théorique qu'expérimental. Après avoir maîtrisé le problème hydrodynamique tant du point de vue théorique qu'expérimental, les auteurs se sont alors penchés sur les phénomènes de transport

en biologie. Des résultats prometteurs ont déjà été obtenus en synthèse d'os, de cartilages, de vaisseaux sanguins, ... Les phénomènes de transport jouent un rôle déterminant en ingénierie tissulaire. Ce sont eux qui vont contrôler et limiter la prolifération des cellules au sein du biomatériau.

C'est ainsi qu'en 1883 l'allemand **L. Graetz** avait fixé comme objectif d'obtenir la distribution de la concentration stable $C(r, x)$ dans un fluide et de calculer pour la même occasion le taux de diffusivité entre fluides dans la paroi. Il arrive à montrer qu'au-delà d'une certaine longueur dite longueur d'entrée le coefficient de diffusion reste constant.

De nos jours, le besoin d'améliorer les techniques pour la diffusion des fluides combinée avec les interactions chimiques entre les molécules ou particules et la paroi (membrane) a poussé les chercheurs à mener des recherches dans le but d'étudier la variation de la concentration d'un traceur dans une conduite cylindrique.

C'est dans cette optique que nous avons mené notre travail dont l'objectif est d'étudier numériquement le comportement de la concentration massique d'un fluide visqueux, homogène, isotrope et incompressible à l'intérieur d'une conduite cylindrique d'axe horizontal pour un régime hydrodynamiquement établi.

Le présent manuscrit s'organise autour de deux chapitres et une conclusion :

Faisant suite à cette introduction, le chapitre premier de ce mémoire, consacré à la modélisation théorique, débute par la description du système, l'établissement des équations de fonctionnement puis par une écriture des équations qui régissent les transferts sous forme adimensionnelle et se termine par la modélisation numérique qui consiste à ramener notre domaine continu en un domaine discret.

Cette étude théorique sera suivie d'une interprétation des résultats de la simulation numérique. Enfin la conclusion de ce manuscrit sera accompagnée d'un ensemble de perspective à retenir pour des développements futurs.

CHAPITRE I : MODELISATION MATHEMATIQUE ET FORMULATION NUMERIQUE

Introduction

Les déplacements d'interfaces via la propagation de fronts apparaissent dans de nombreux domaines, cinétique chimique, pollution, biologie, combustion etc. (C. Besnaci, 2012 ; B. Bradu et al. 2004 ; C. Conan, 2007 ; A. I. F. Hipolito, 2010 ; J. P. Sauty, 1977). Le point commun de l'ensemble de ces études provient des équations qui régissent leur modélisation. En effet, celles-ci sont très proches ce qui implique que, sous certaines conditions, tous ces thèmes peuvent se réduire à un seul système équivalent et plus précisément en l'étude d'un certain type d'équations différentielles appelé système d'advection-diffusion-réaction. Dès lors, on devine que la résolution ou l'étude d'un tel système dans un contexte particulier permet une transposition quasi-immédiate à un autre domaine. Toutefois, même dans un cas simplifié de couplage entre la propagation d'un front, sa forme et les éléments extérieurs, la description rigoureuse de son évolution peut s'avérer trop ardue.

L'évolution du système est donnée en toute rigueur par les équations de Navier-Stokes réactives. Néanmoins on se place dans l'hypothèse de *dilution* qui consiste à découpler d'une part la dynamique du fluide, d'autre part les concentrateurs des espèces. En d'autres termes les champs dynamiques sont calculés ou paramétrés et sont utilisés comme données connues dans l'équation des traceurs.

1. Modélisation mathématique

Nous considérons l'écoulement d'un fluide de masse volumique ρ constitué de (n) espèces pouvant réagir dans (r) réactions chimiques homogènes. On pose ρ_i la masse volumique du constituant (i) et $C_i = \frac{\rho_i}{\rho}$ la fraction massique du constituant (i) .

Dans ces conditions l'évolution de la fraction massique C_i de l'espèce indicé par (i) obéit à l'équation suivante

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} C_i) = \vec{\nabla} \cdot (\bar{\bar{D}} \cdot \vec{\nabla} C_i) + \chi_i + S_i \quad (1.1)$$

Avec \vec{v} le champ de la vitesse barycentrique du fluide et $\bar{\bar{D}}$ est le tenseur de diffusion moléculaire. S_i est le terme source pour l'espèce modélisant l'émission par source fixe. Il peut correspondre par exemple à une source ponctuelle de pollution. En se plaçant dans l'hypothèse dite de «*production- consommation* » alors le terme de production χ_i de l'espèce (i) se met sous la forme

$$\chi_i = \mathcal{P}_i - \mathcal{R}_i C_i. \quad (1.2)$$

où \mathcal{P}_i et \mathcal{R}_i représentent respectivement les termes (positifs ou nuls) de production et consommation. Pour déterminer la distribution de la masse volumique de l'espèce, il vaudra alors trouver le champ des vitesses solution des équations de Navier- Stokes suivantes

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{v}) = 0 \quad (1.3)$$

$$\rho \left\{ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla}(\vec{v} \otimes \vec{v}) \right\} = -\vec{\nabla} p + \mu \Delta(\vec{v}) + \rho \cdot \vec{g} \quad (1.4)$$

1.1. Description du système et position du problème

La configuration géométrique tridimensionnelle de notre système est schématisée sur la figure 1. On considère une conduite cylindrique circulaire de rayon R uniforme, de longueur L et de génératrice horizontale. La paroi latérale du cylindre est considérée comme une surface réactive imperméable. Le fluide pénètre dans la conduite avec une vitesse \vec{u}_e . On considère que l'écoulement est incompressible et le fluide isotherme.

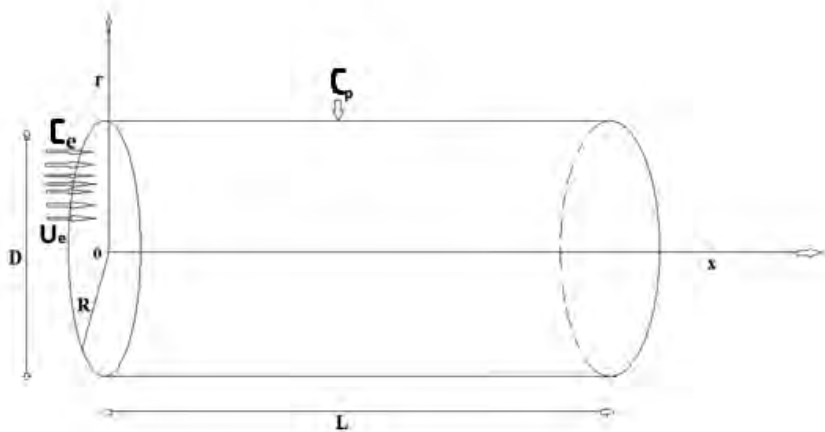


Figure 1 : Schématisation du modèle physique

Afin de simplifier la formulation du modèle mathématique, nous allons considérer les hypothèses simplificatrices suivantes.

- L'écoulement est permanent, laminaire.
- Le fluide est composé de deux constituants dont l'un est en très faible quantité $C_1 \ll C_2$.
- La longueur de la conduite est grande devant son diamètre
- Le tenseur de diffusion moléculaire est une constante.
- L'écoulement est bidimensionnel et admet une symétrie axiale.
- A l'entrée l'écoulement est supposé établi et le champ de la vitesse est donné par

$$\vec{u}_e = U_x(r) \cdot \vec{e}_x \quad (1.1.1)$$

avec

$$U_x = U_m \left[1 - \frac{r^2}{R^2} \right] \quad (1.1.2)$$

-Le fluide est considéré comme newtonien et à propriétés physiques constantes.

En utilisant les coordonnées cylindriques les équations algébriques qui gouvernent les transferts au regard des hypothèses simplificatrices ci-dessus s'écrivent

$$U_x \frac{\partial C_1}{\partial x} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_1}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} \right] + \mathcal{P}_1 - \mathcal{R}_1 \cdot C_1 \quad (1.1.3)$$

C_1 est la concentration du constituant du traceur et D son coefficient de diffusion dans le fluide.

Les conditions aux limites associées à cette équation sont

A l'entrée :

$$C_1(0, r) = C_e \quad (1.1.4)$$

Conditions sur l'axe de symétrie $r = 0$

$$\frac{\partial C_1(x, 0)}{\partial r} = 0 \quad \text{Symétrie axiale} \quad (1.1.5)$$

Condition sur la paroi latérale $r = R$

Nous admettons que la paroi est une surface réactive siège de réactions hétérogènes d'ordre (p) modélisée par

$$D \cdot \frac{\partial C(x, R)}{\partial r} = \pm k_p (C_p)^p \quad (1.1.6)$$

1.2. Adimensionnalisation des équations

Dans le but de généraliser notre étude, nous allons adimensionnaliser les équations de fonctionnement ce qui nous permet de résoudre toute une classe de problèmes similaires.

Dans notre problème les grandeurs de référence caractéristiques sont le rayon R et la longueur L de la conduite, la vitesse maximale U_m et la concentration à l'entrée C_e . Nous admettons que les réactions chimiques homogènes et hétérogènes sont d'ordre 1. Dans ces conditions $p=1$ et \mathcal{R}_1 est une constante.

En posant

$$r^* = \frac{r}{R}, \quad x^* = \frac{x}{L}, \quad U_x^* = \frac{U_x}{U_m} \quad \text{et} \quad C = \frac{C_1}{C_e} \quad (1.2.1)$$

alors l'équation (1.1.3) devient

$$U_x^* \frac{\partial C}{\partial x^*} = \frac{1}{Pe} \left[(Fact)^2 \cdot \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^* \frac{\partial C}{\partial r^*} \right) + \frac{\partial^2 C}{\partial x^{*2}} \right] + \mathcal{P}^* - Da \cdot C \quad (1.2.2)$$

avec $Pe = \frac{U_m R}{D} = Re \cdot Sc$, $Re = \frac{U_m R}{\nu}$, $Sc = \frac{\nu}{D}$ et $\mathcal{P}^* = \frac{\mathcal{P}_1 \cdot C_e L}{U_m}$

Re , Pe et Sc représentent respectivement les nombres de Reynolds, de Peclet et de Schmidt.

Le nombre de Damköhler défini par $Da = \frac{\mathcal{R}_1 L}{U_m}$ compare la vitesse de réaction chimique et la vitesse de transfert du traceur.

$Fact = \frac{L}{R}$ est le facteur de forme géométrique.

Puisque nous nous plaçons dans le cadre où $Fact \gg 1$ alors nous pouvons négliger la diffusion suivant la direction longitudinale et l'équation adimensionnelle du bilan de la concentration du traceur se ramène à

$$U_x^* \frac{\partial C}{\partial x^*} = \frac{1}{Pe} \left[(Fact)^2 \cdot \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^* \frac{\partial C}{\partial r^*} \right) \right] + \mathcal{P}^* - Da \cdot C \quad (1.2.3)$$

1.3. Conditions aux limites adimensionnelles

A l'entrée :

$$C(0, r^*) = 1 \quad (1.2.5)$$

Sur l'axe de symétrie $r^* = 0$

$$\frac{\partial C(x^*, 0)}{\partial r^*} = 0 \quad \text{Symétrie axiale} \quad (1.2.6)$$

Sur la paroi latérale $r^* = 1$

Nous admettons que la réaction hétérogène à la paroi est d'ordre 1. Dans ces conditions nous obtenons

$$\left. \frac{\partial C(x^*, r^*)}{\partial r^*} \right|_{r^*=1} = \pm m_T \cdot C(x^*, 1); \quad m_T = \frac{k_p \cdot R}{D} \quad (1.2.7)$$

avec m_T le nombre de Thiele qui compare la vitesse de réaction hétérogène par rapport au flux de diffusion du réactif vers la surface. Ce nombre de Thiele est analogue au nombre de Sherwood qui compare le transfert massique total et le transfert massique par diffusion.

2. Formulation numérique du problème

La méthode numérique que nous avons choisie dans notre présente étude est une représentation par différences finies. L'application du schéma de résolution à notre modèle mathématique conduit à des équations aux mailles définies dans un espace discret que nous allons résoudre grâce à l'algorithme de Thomas (**J. C. Tannehill et all.**, 1997 ; **S. V. Patankar**, 1980).

Pour ne pas alourdir les écritures nous allons omettre dans ce qui suit les astérisques (*)

2.1. Maillage du domaine

Notre géométrie étant cylindrique, on construit une grille de discrétisation en différence finies par quadrillage selon les deux directions d'axes.

On notera

$\delta x = x_{i+1} - x_i$ le pas de discrétisation suivant la direction longitudinale x

et

$\delta r = r_{j+1} - r_j$ le pas de discrétisation suivant la direction radiale r . On obtient ainsi aux intersections des lignes du quadrillage les nœuds de coordonnées (x_i, r_j) du maillage en différences finies comme le montre **la figure 2**. On posera i_m et j_m les nombres maximum de nœuds respectivement suivant les axes x et r .

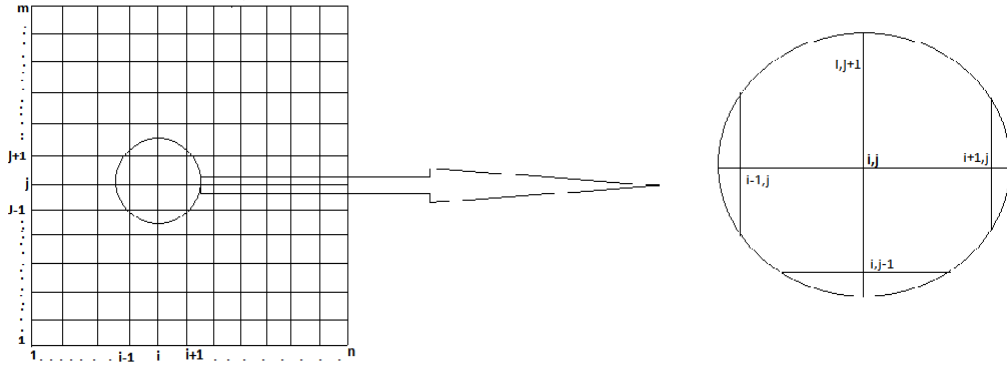


Figure 2: Maillage du domaine de calcul en (i , j)

2.2. Discretisation de l'équation de la concentration massique

Intégrons l'équation de la concentration obtenue en régime établi dans le volume élémentaire de contrôle ΔV_C défini par :

$$\Delta V_C = r \delta \varphi \cdot \delta r \cdot \delta x \quad (2.2.1)$$

$\delta \varphi$ est le pas suivant la direction ortho-radiale.

Il vient alors :

$$\int \frac{\partial}{\partial x} [U_x C] dV_C - \frac{1}{P_e} \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right) dV_C + \int D_a \cdot C dV_C = \int \mathcal{P} \cdot dV_C \quad (2.2.2)$$

Puisque C et U_x^* ne dépendent de l'angle φ on a :

$$\int \frac{\partial}{\partial x} [U_x C] r dr \cdot dx - \frac{1}{P_e} \delta x \left[\left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right)_n - \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right)_s \right] + D_a \int C \cdot r \cdot dr \cdot dx = r_j \cdot \delta r \cdot \delta x \cdot \mathcal{P} \quad (2.2.3)$$

Les indices s et n repèrent les faces du bas et du haut du volume de contrôle de largeur unité.

Puisque la concentration au nœud $(i + 1, j)$ situé à droite du nœud principal (i, j) n'est pas connue, nous allons alors approcher le terme d'advection de la matière suivante

$$\int \frac{\partial}{\partial x} [U_x C] r dr \cdot dx = r_j \delta r \cdot U_{xj} \cdot (C_{i,j} - C_{i-1,j}) + O[(\delta x)^2] \quad (2.2.4)$$

En posant

En posant

$$\begin{aligned}\left(r \frac{\partial C}{\partial r}\right)_n &= r_n \left(\frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\delta r}\right) \\ \left(r \frac{\partial C}{\partial r}\right)_s &= r_s \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{\delta r}\end{aligned}$$

alors il vient

$$\int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r}\right) dV_C = \frac{r_n C_{i,j+1} - r_j C_{i,j} + r_s C_{i,j-1}}{\delta r} + O[(\delta r)^3] \quad (2.2.5)$$

avec

$$r_n = r_j + \frac{\delta r}{2} \quad \text{et} \quad r_s = r_j - \frac{\delta r}{2}$$

En admettant que la concentration ne varie pas dans le volume de contrôle nous avons

$$\int C \cdot r \cdot dr \cdot dx = r_j \cdot \delta \varphi \cdot \delta r \cdot \delta x \quad (2.2.6)$$

Après arrangement notre relation ci- dessus se ramène à :

$$\begin{aligned}& - \left\{ \frac{\delta x}{\delta r^2} \cdot \frac{(Fact)^2}{Pe} * r_{j-\frac{1}{2}} \right\} \cdot C_{i,j-1} + \\ & r_j \cdot \left\{ U_x + \frac{2\delta x}{r^2} \frac{(Fact)^2}{Pe} + \delta x \cdot D_a \right\} \cdot C_{i,j} + \\ & - \left\{ \frac{\delta x}{\delta r^2} \frac{(Fact)^2}{Pe} \cdot r_{j+\frac{1}{2}} \right\} \cdot C_{i,j+1} = r_j \cdot \{ \delta x * \mathcal{P} + U_x \cdot C_{i-1,j} \}\end{aligned} \quad (2.2.7)$$

avec $1 < j < j_m \quad \forall i > 1$

Eu égard aux différentes approximations ci- dessus, le système (2.2.7) approche le problème continu avec une erreur $\varepsilon_{disc,inter}$ de l'ordre de

$$\varepsilon_{disc,inter} = \max\{\delta x; (\delta r)^2\} \quad (2.2.8)$$

Le système ci- dessus doit être fermé par les conditions aux limites.

Pour avoir un schéma avec une erreur de discrétisation globalement de l'ordre de $(\delta r)^2$, l'erreur de discrétisation des conditions aux limites $\varepsilon_{disc,cal}$ doit être du même ordre de grandeur que $\varepsilon_{disc,inter}$. Ainsi les conditions aux limites sur l'axe de symétrie $r = 0$ correspondant à $j = 1$ et sur la paroi latérale $r = 1$ repéré par $j = j_m$ sont approchées par des schémas décentrés utilisant trois nœuds consécutifs. Après calcul et arrangement nous obtenons :

Sur l'axe de symétrie : $j = 1, \forall i > 1$

$$3C_{i,1} - 4C_{i,2} + C_{i,3} = 0 \quad (2.2.9)$$

Sur la paroi latérale : $j = j_m, \forall i > 1$

$$(3 \pm 2 \cdot \delta r \cdot m_T) C_{i,j_m} - 4C_{i,j_m-1} + C_{i,j_m-2} = 0 \quad (2.2.10)$$

Le système algébrique que nous nous proposons de résoudre s'écrit alors formellement

$$i = 1 \quad , \quad C_{1,j} = 1$$

$$\begin{cases} j = 1 & \forall i > 1 & a_{ini} \cdot C_{i,1} + b_{ini} \cdot C_{i,2} + c_{ini} \cdot C_{i,3} = 0 & (2.2.10. a) \\ 1 < j < j_m & & \alpha_j \cdot C_{i,j-1} + \beta_j \cdot C_{i,j} + \gamma_j \cdot C_{i,j+1} = \delta_j & (2.2.10. b) \\ j = j_m & & a_f \cdot C_{i,j_m-2} + b_f \cdot C_{i,j_m-1} + c_f \cdot C_{i,j_m} = 0 & (2.2.10. c) \end{cases}$$

Pour résoudre ce système d'équations nous allons utiliser la méthode de double parcours. Cependant pour utiliser l'algorithme de Thomas, il faut que la première et la dernière ligne de la matrice ne contiennent au plus que deux termes consécutifs non nuls. Afin de ne pas recourir à un schéma itératif, il faut alors reconditionner notre système pour qu'il se présente sous forme tri- diagonal.

Particularisons (2.2.10. b) pour $j = 2$. On a

$$\alpha_2 \cdot C_{i,1} + \beta_2 \cdot C_{i,2} + \gamma_2 \cdot C_{i,3} = \delta_2$$

En combinant cette équation avec la condition aux limites (2.2.10. a) et en éliminant l'inconnue $C_{i,1}$ il vient alors pour $j = 2$

$$(\beta_2 \cdot a_{ini} - \alpha_2 \cdot b_{ini}) \cdot C_{i,2} + (a_{ini} \cdot \gamma_2 - \alpha_2 \cdot c_{ini}) \cdot C_{i,3} = \delta_2 \cdot a_{ini} \quad (2.2.11. a)$$

En utilisant le même procédé pour $j = j_m - 1$ nous obtenons

$$(c_j \cdot \alpha_{j_m-1} - \gamma_{j_m-1} \cdot a_f) \cdot C_{i,j_m-2} + (c_f \cdot \beta_{j_m-1} - \gamma_{j_m-1} \cdot b_f) \cdot C_{i,j_m-1} = \delta_{j_m-1} \cdot c_f \quad (2.2.11. b)$$

Le nouveau système que nous allons résoudre est alors

$$\begin{cases} j = 2 & \alpha_j \cdot C_{i,j-1} + \beta_j \cdot C_{i,j} + \gamma_j \cdot C_{i,j+1} = \delta_j & (2.2.12. a) \\ 2 < j < j_m - 1 & & \alpha'' \cdot C_{i,j_m-2} + \beta'' \cdot C_{i,j_m-1} = \delta'' & (2.2.12. b) \\ j = j_m - 1 & & & (2.2.12. c) \end{cases}$$

avec

$$\begin{aligned} &= \beta_2 \cdot a_{ini} - \alpha_2 \cdot b_{ini} \quad ; \quad \gamma = a_{ini} \cdot \gamma_2 - \alpha_2 \cdot c_{ini} \quad ; \quad \delta = \delta_2 \cdot a_{ini} \\ \alpha'' &= c_f \cdot \alpha_{j_m-1} - \gamma_{j_m-1} \cdot a_f \quad ; \quad \beta'' = c_f \cdot \beta_{j_m-1} - \gamma_{j_m-1} \cdot b_f \quad ; \quad \delta'' = \delta_{j_m-1} \cdot c_f \end{aligned}$$

Ce type de système matriciel admet une solution récursive de la forme

$$C_{i,j} = p_j \cdot C_{i,j+1} + q_j \quad j = j_m - 2, j_m - 3, \dots, 3, 2 \quad (2.2.13)$$

En remplaçant par $C_{i,j-1}$

$$C_{i,j-1} = p_{j-1} \cdot C_{i,j} + q_{j-1}$$

dans la relation (2.2.12. b) on obtient après calcul

dans la relation (2.2.12.b) on obtient après

$$\text{calcul} \quad \begin{cases} p_j = -\frac{j}{j^+ - j \cdot p_{j-1}} \\ q_j = \frac{\delta_j - \alpha_j \cdot q_{j-1}}{\beta_j + \alpha_j \cdot p_{j-1}} \end{cases} \quad (2.2.14)$$

avec $j \in [3 ; j_m - 1]$, $\forall i \geq 2$.

Comme la relation générale (2.2.13) vérifie la condition aux limites (2.2.12. a) alors on a

$$\begin{cases} p_2 = -\frac{\gamma}{\beta_2 \cdot \alpha_{ini} - \alpha_2 \cdot b_{ini}} = -\frac{\alpha_{ini} \cdot \gamma_2 - \alpha_2 \cdot C_{ini}}{\beta_2 \cdot \alpha_{ini} - \alpha_2 \cdot b_{ini}} \\ q_2 = \frac{\delta}{\beta_2 \cdot \alpha_{ini} - \alpha_2 \cdot b_{ini}} = \frac{\delta_2 \cdot \alpha_{ini}}{\beta_2 \cdot \alpha_{ini} - \alpha_2 \cdot b_{ini}} \end{cases} \quad (2.2.15)$$

Pour trouver le champs des concentrations $C_{i,j}$ en appliquant la relation récursive (2.2.16), il faut au préalable déterminer C_{i,j_m-1} . En éliminant C_{i,j_m-2} entre les deux équations ci- dessous

$$\begin{cases} \alpha'' \cdot C_{i,j_m-2} + \beta'' \cdot C_{i,j_m-1} = \delta'' \\ C_{i,j_m-2} = p_{j_m-2} \cdot C_{i,j_m-1} + q_{j_m-2} \end{cases}$$

on obtient :

$$C_{i,j_m-1} = \frac{\delta'' - \alpha'' \cdot q_{j_m-2}}{\beta'' + \alpha'' \cdot p_{j_m-2}} \quad (2.2.17)$$

Pour que le processus de calcul soit le plus stable possible, il faut

- d'une part que la diagonale principale du système matriciel soit fortement dominante c'est- à- dire

$$|\beta_j| > |\alpha_j| + |\gamma_j| \quad (2.2.18)$$

et

- d'autre part s'assurer que

$$|\beta_j| > |\gamma_j| \quad (2.2.19)$$

Si l'analyse de la relation (2.2.14) permet de montrer que la condition de diagonale dominante est toujours vérifiée $\forall j \in [3 ; j_m - 1]$, par contre le respect de l'inégalité (2.2.18) peut être soumis à certaines restrictions au niveau des pas d'espace. En effet puisque les β_j sont tous positifs et les γ_j tous négatifs alors nous devons avoir

$$\begin{aligned} & > 0 ; \quad \gamma < 0 \\ \text{et} \quad & > -\gamma \end{aligned}$$

Le calcul montre les deux premières inégalités sont vérifiées pour tout δr et pour tout δx . On vérifie aussi que la dernière condition est respectée car pour qu'il n'en soit pas ainsi il faudrait que

$$1 - \delta r + \delta x.Da \leq 0 \quad (2.2.20)$$

ce qui entraînerait

$$1 + \delta x.Da \leq \delta r \quad (2.2.21)$$

En conclusion le schéma utilisé remplit toutes les conditions de forte stabilité.

3. Conclusion

Dans ce chapitre, après avoir posé et décrit le problème nous avons établi les équations qui nous permettent de suivre le front du traceur qui est advecté et dispersé dans le fluide en écoulement. Dans le but de généraliser le problème et de pouvoir comparer les différents effets, nous avons adimensionnalisé l'équation du bilan de la concentration de notre traceur ainsi que ses conditions aux limites associées ce qui a fait apparaître des grandeurs caractéristiques.

L'équation de type parabolique obtenu est discrétisée grâce à un schéma de type « Euler » décentré au premier ordre pour le terme d'advection. Ce faisant nous sommes affranchis de conditions supplémentaires dans la direction longitudinale. Par contre le terme de dispersion a été approché par un schéma centré d'ordre deux. Les conditions de symétrie et la condition aux limites au niveau de la paroi sont approchées par des schémas d'ordre deux ce qui nous permet d'avoir une erreur globale dans la direction radiale de l'ordre deux.

Le système algébrique qui approche notre problème continu a été conditionné de telle sorte que dans notre domaine d'étude le système tri-diagonale obtenu présente une diagonale principale fortement dominante. Pour le résoudre nous avons utilisé l'algorithme de Thomas qui repose sur la méthode de double balayage.

CHAPITRE II : ANALYSE DES RESULTATS

1. Conditions de calcul

Les résultats qui suivent sont relatifs au comportement d'une substance qui peut réagir dans des réactions chimiques homogènes dans un fluide en écoulement dans une conduite cylindrique de facteur de forme $\frac{L}{R} = 25$. Les nombres de Peclet considérés sont 20 et 200.

Pour avoir une erreur globale de l'ordre de δr^2 il faut que le pas de discrétisation suivant la direction longitudinale δx soit de δr^2 car on rappelle que le terme d'advection est approché avec une erreur de l'ordre de δx . Par conséquent si le nombre de nœuds total suivant la direction radiale est fixé à j_m le nombre minimal de points suivant x est

$$i_m = 1 + (j_m - 1)^2$$

Dans ce qui suit nous fixons le nombre de nœuds suivant la direction radiale à $j_m = 51$. Dans ces conditions le nombre de nœuds minimal suivant la direction longitudinale est $i_m = 301$. Notre code de calcul a été validé avec les résultats de **A. CISSE** qui a étudié la détermination numérique de la longueur d'entrée thermique dans un cylindre.

2. Résultats et interprétations

2.1. Analyse des influences des paramètres internes

Dans cette partie la concentration à l'entrée de la conduite $C(0, r^*)$ est égale à 1 et la paroi est considérée comme inerte ($m_T = 0$).

2. 1.1. Influences du nombre de Damköhler Da et du taux de création \mathcal{P}^*

Les courbes des figures 2.1 - 2.3 montrent l'influence du taux de création \mathcal{P}^* pour des nombres de Damköhler et de Peclet respectivement fixés à 1 et à 200. Lorsque le taux de création augmente de 0 à 1, les maxima des concentrations se déplacent vers la zone voisine de la paroi mais le processus de destruction est encore prépondérant. A partir de $\mathcal{P}^* > 1$, nous observons une inversion dans la distribution des concentrations. En effet lorsque $\mathcal{P}^* = 1,5$ au fur et à mesure que l'on progresse dans la conduite, les concentrations augmentent et les maxima qui étaient situés dans la zone contiguë à la paroi se déplacent vers la zone centrale de la conduite à cause de l'effet de création qui neutralise la destruction de l'espèce.

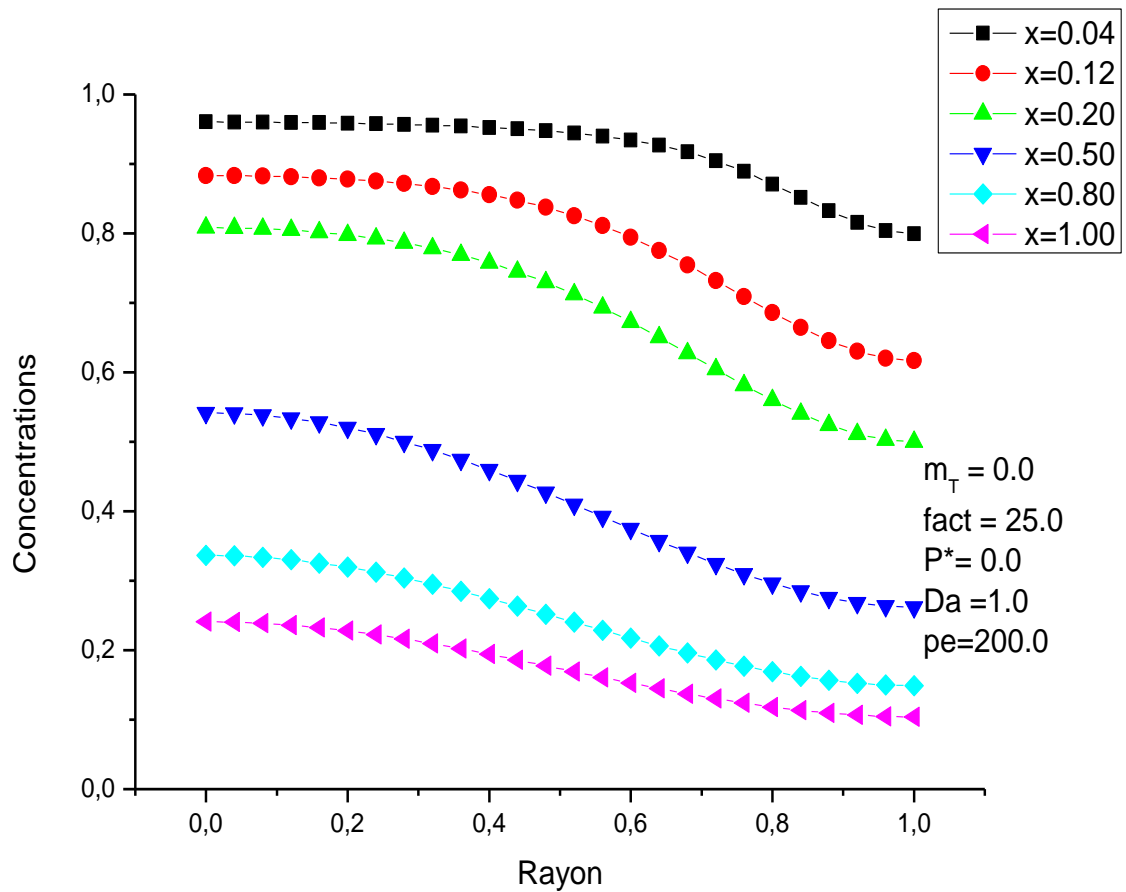


Figure 2. 1. : Distributions de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x . $\mathcal{P}^* = 0$.

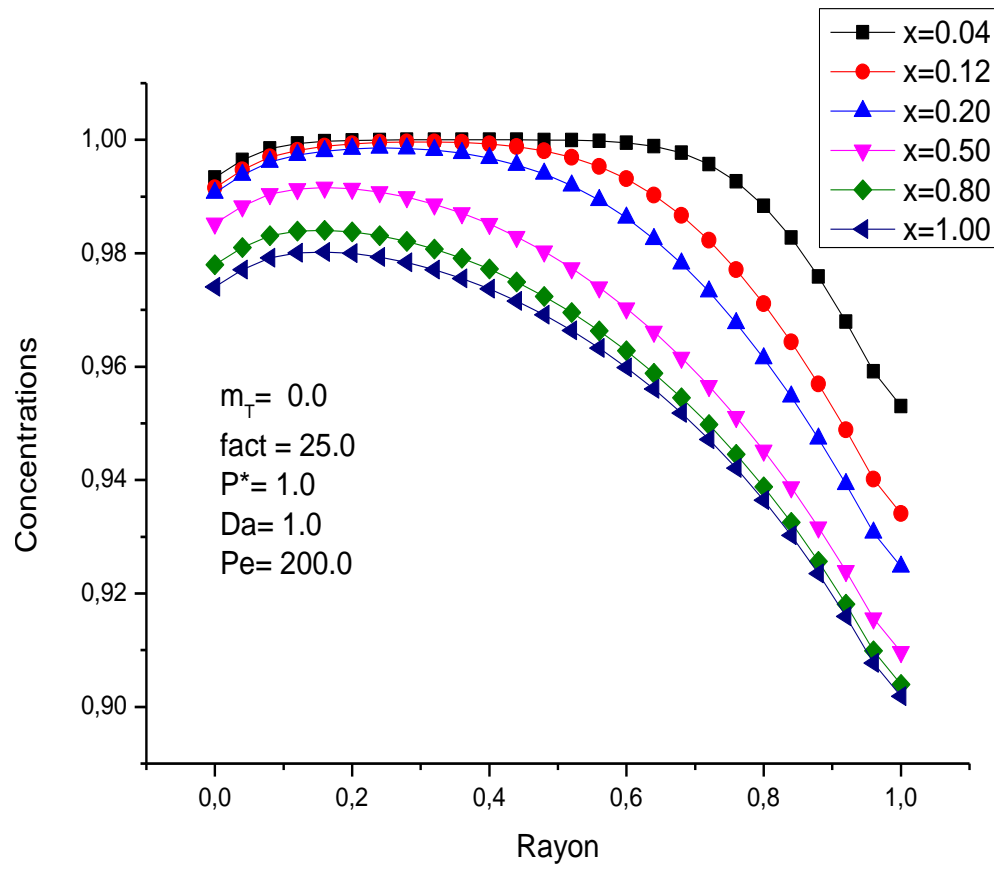


Figure 2.2 : Distributions de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x . $\mathcal{P}^* = 1$.

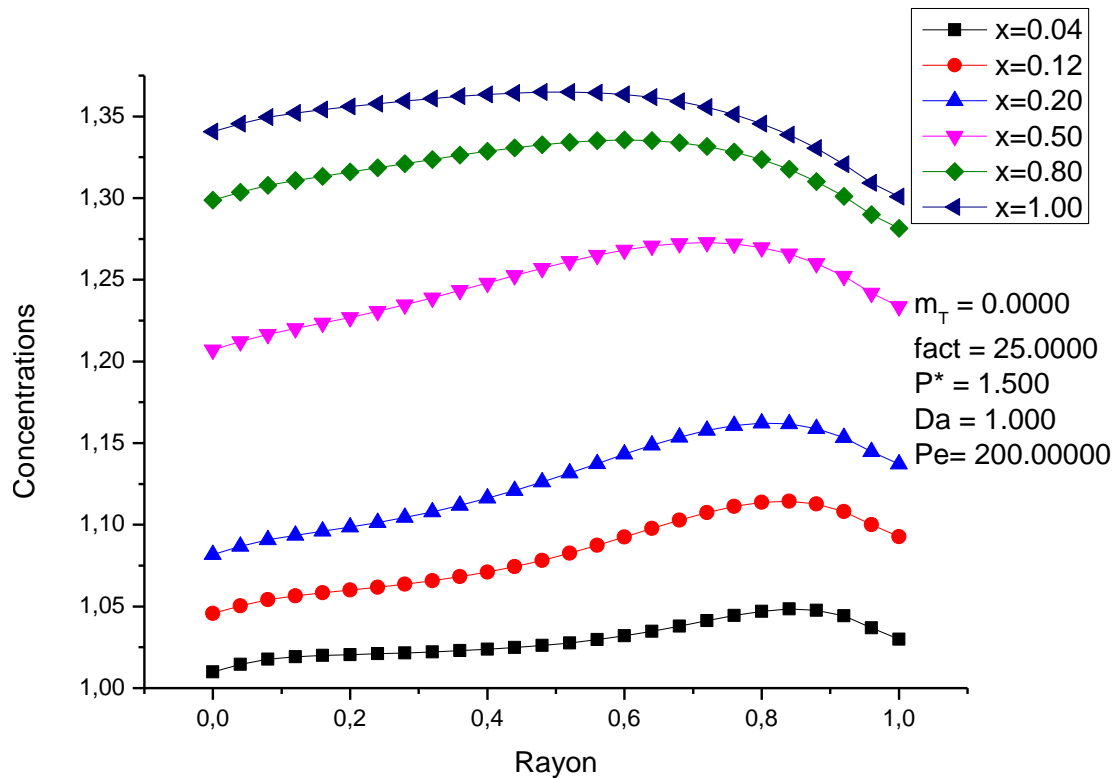


Figure 2.3 : Distributions de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x . $\mathcal{P}^* = 1.5$.

2.1.2. Influence du nombre de Peclet Pe

Aux faibles valeurs du nombre de Peclet ($Pe = 20$), les courbes donnant les variations de la concentration en fonction du rayon sont quasi- parallèles ce qui montre que ce sont les effets de diffusion qui sont plus importants que ceux du transport (voir figure 2. 4). Le fluide étant faiblement entraîné donc les temps de séjour de l'espèce dans la conduite sont plus lents. Lorsque le nombre de Pe augmente (voir figure 2. 5 et 2. 3) on assiste à de forts gradients de concentration dans la zone contiguë à la paroi et le profil de la concentration à la sortie tend vers un profil de type linéaire caractéristique d'un écoulement établi dans une conduite cylindrique (en l'absence de chute de pression). Lorsque le nombre de Pe augmente, le phénomène de transport prend de plus en plus d'ampleur et arrive à contrecarrer le processus de destruction. C'est ce qui explique que les valeurs des concentrations augmentent avec l'augmentation du nombre de Peclet.

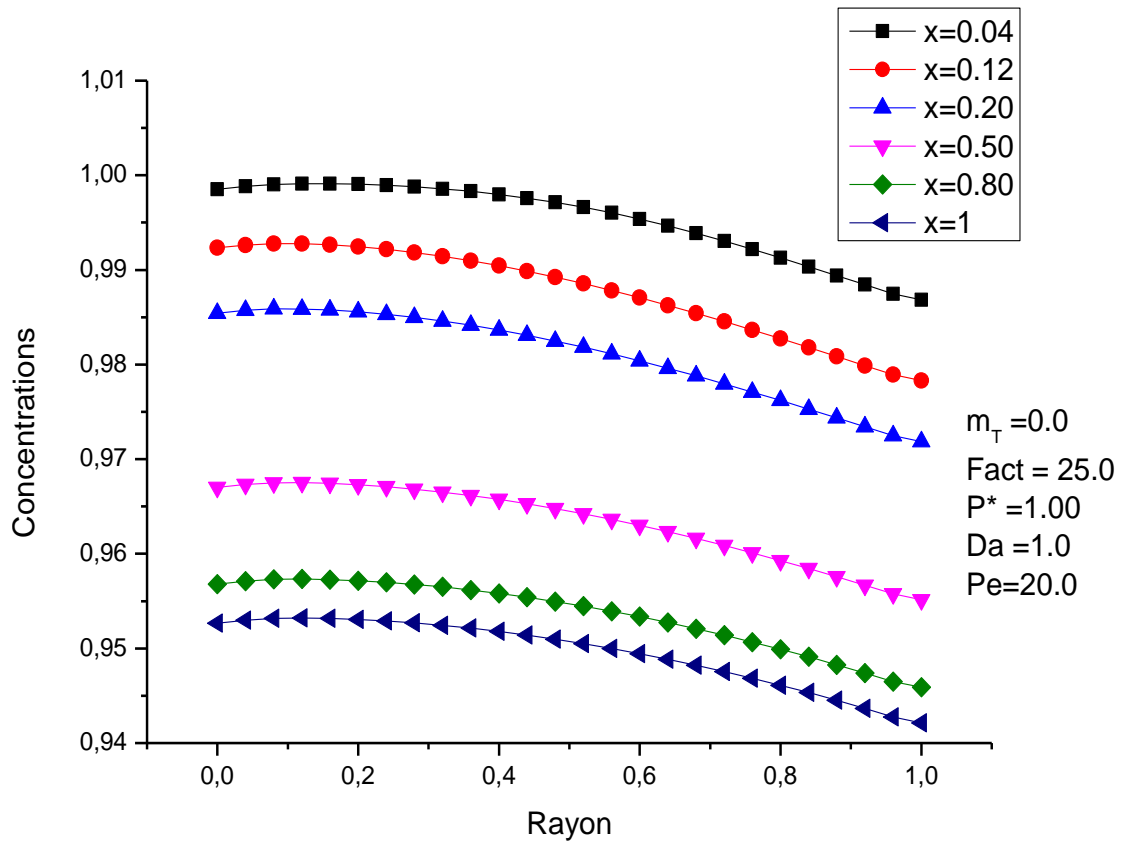


Figure 2.4 : Distribution de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x . $Pe = 20$

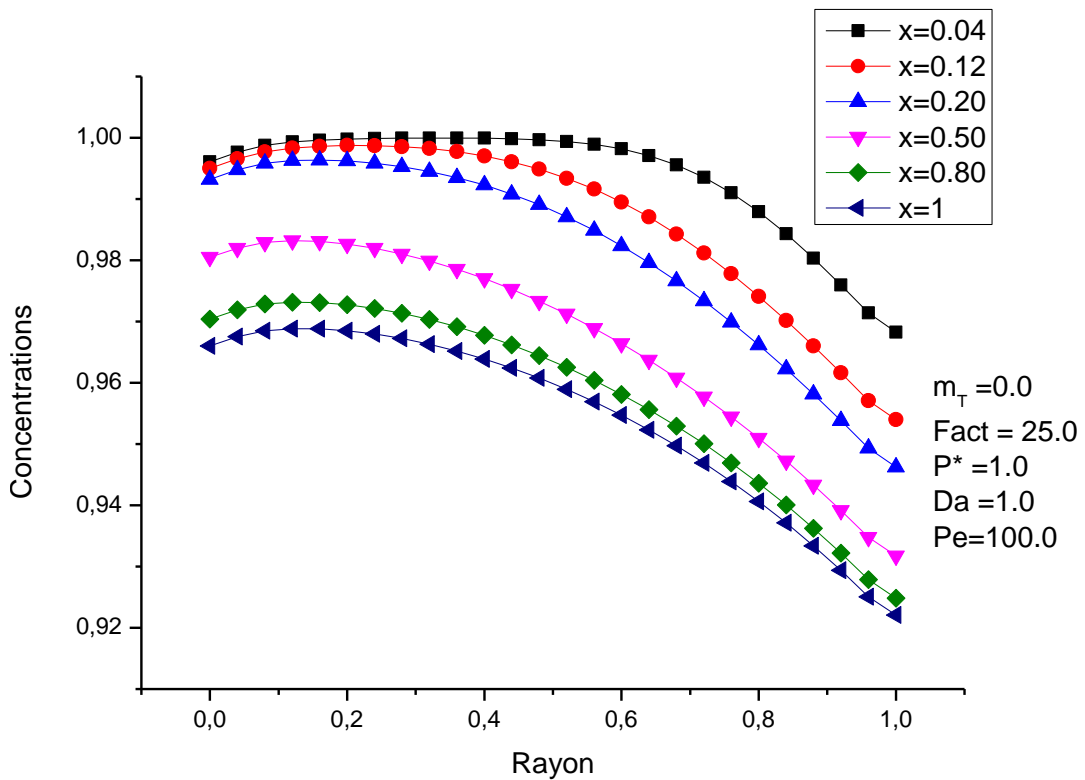


Figure 2.5 : Distribution de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x . $Pe = 100$

2.2. Analyse des influences du paramètre pariétal m_T

Les courbes des figures (2. 6) et (2.7) montrent l'effet de la surface réactive sur la concentration de l'espèce pour un nombre de Peclet relativement faible ($Pe = 20$). Dans le cas où la surface réactive détruit l'espèce $\left(\frac{\partial C(x^*, r^*)}{\partial r^*}\right)\bigg|_{r^*=1} = -m_T \cdot C(x^*, 1)$ malgré la présence de la source de production ($\mathcal{P}^* = 1$) au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'entrée la réaction hétérogène conduit à une répartition homogène de la concentration (figure 2. 6) . Par contre si nous imposons sur la paroi la conduite de Robin suivante $\frac{\partial C(x^*, r^*)}{\partial r^*}\bigg|_{r^*=1} = m_T \cdot C(x^*, 1)$ les courbes changent de concavité mais leur structure ordonnée n'est pas altérée (voir figures 2. 7 et 2.1).

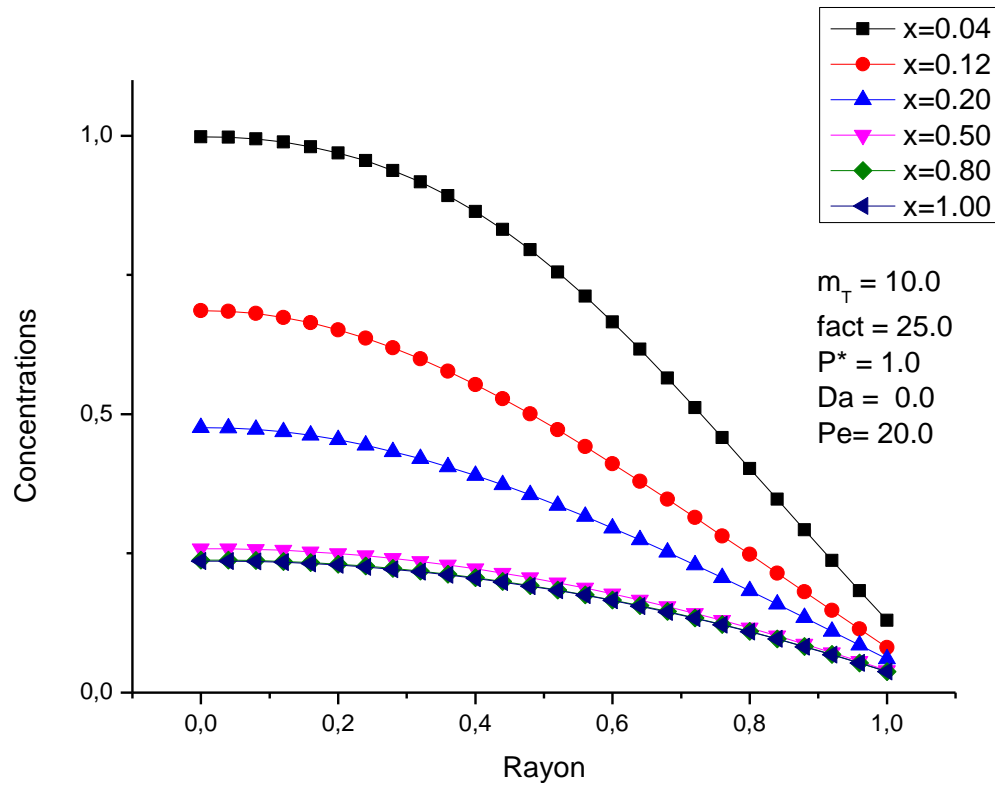


Figure 2. 6. : Variations de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x . $m_T = 10$

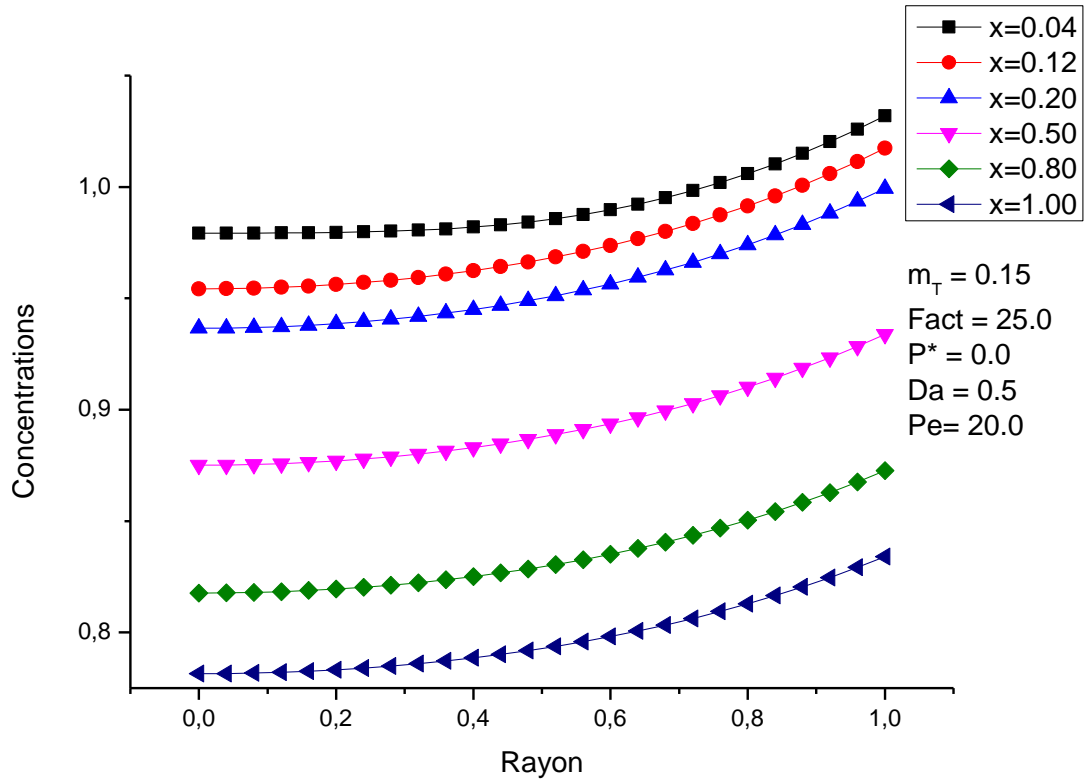


Figure 2.7 : Variations de la concentration normalisée en fonction du rayon à différentes abscisses x . $m_T = 0.150$.

2. 3. Analyse de la dispersion

Pour analyser la dispersion du traceur nous avons pris un profil de la concentration à l'entrée de la forme

$$\begin{cases} C(0, r^*) = 1 & \text{si } r^* = 0 \\ \text{et} \\ C(0, r^*) = 0 & \text{si } r^* \neq 0 \end{cases}$$

Les courbes des figures (2. 8) - (2. 10) montrent que dès l'entrée le traceur est dispersé dans toute la section de la conduite. Lorsqu'on se déplace dans la conduite la zone de plus forte concentration se déplace vers la région adjacente à la paroi. A l'entrée la concentration du traceur augmente à cause de la prépondérance de l'effet du taux de production. Au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'entrée la distribution de la concentration tend à s'homogénéiser. Lorsque le nombre de Peclet augmente, le front du traceur se meut vers la paroi car la zone centrale est celle où les effets de destruction sont plus importants.

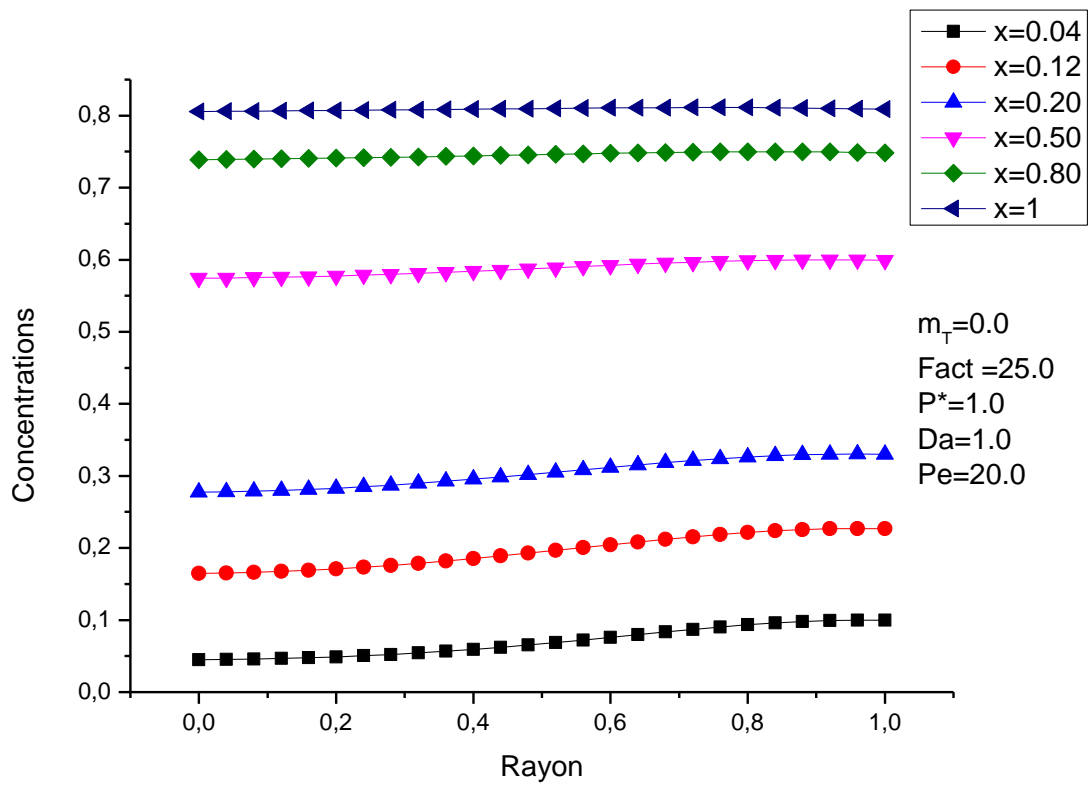


Figure 2.8. : Dispersion de l'espèce en fonction du rayon à différentes abscisses x. Pe=20.

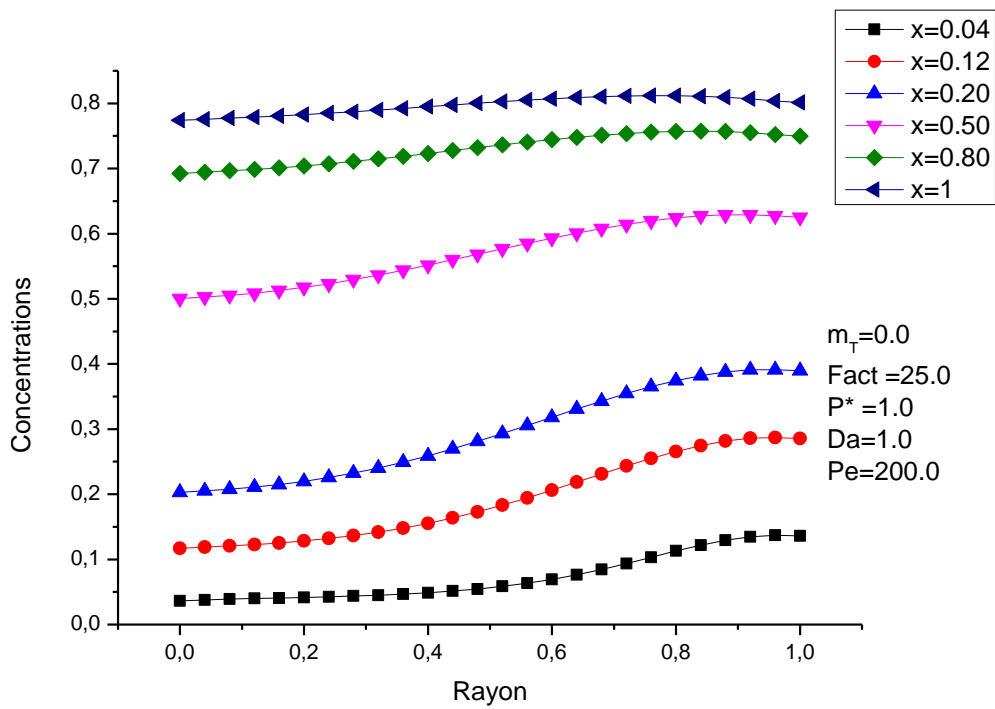


Figure 2.9 : Dispersion de l'espèce en fonction du rayon à différentes abscisses x. Pe=100.

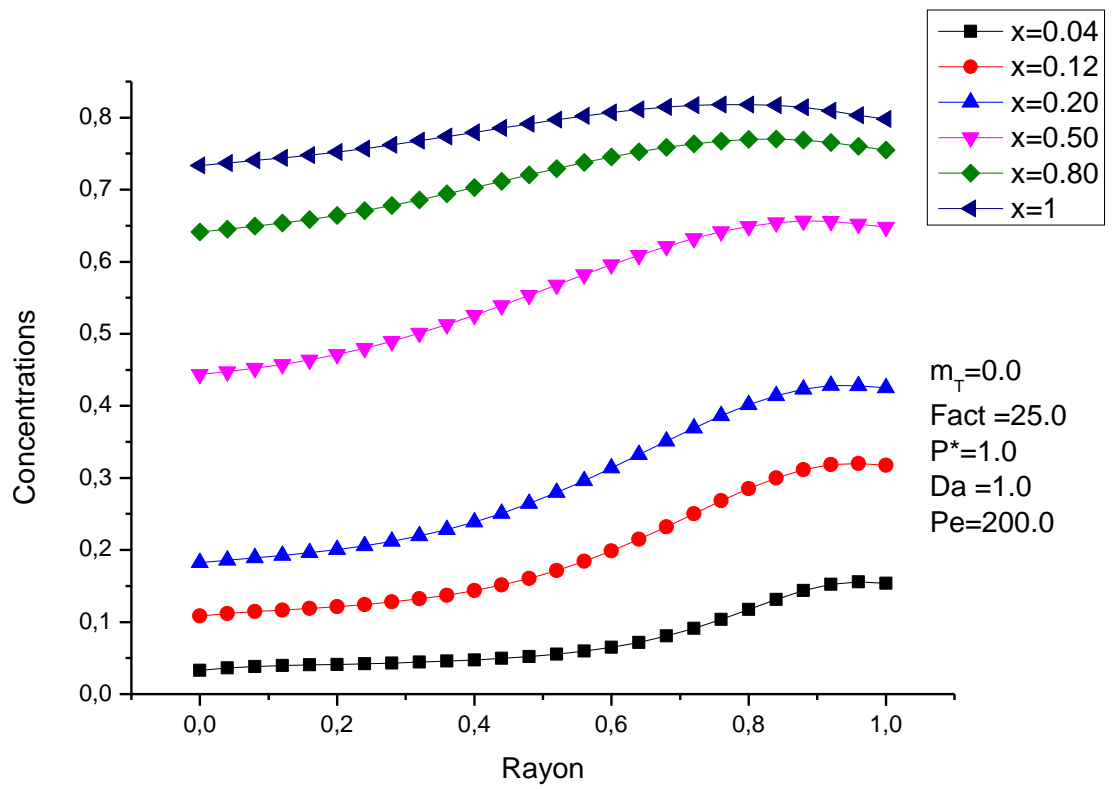


Figure 2.10 : Dispersion de l'espèce en fonction du rayon à différentes abscisses x . $Pe=200$.

3. Conclusion

Nous avons analysé dans ce chapitre les influences des nombres de Damköhler, de Peclet et de Thiele sur les distributions de la concentration du traceur. Il ressort des simulations numériques que la zone située vers la paroi est celle où l'on observe les plus grandes valeurs de concentration. Cela montre que les effets de destruction sont plutôt localisés dans la région axiale et que la zone contiguë à la paroi est très sensible à la source interne de production de l'espèce. Lorsque le taux de création augmente de 0 à 1, les maxima des concentrations se déplacent vers la zone voisine de la paroi mais le processus de destruction est encore prépondérant.

Le nombre de Peclet joue un rôle très important car d'un côté son augmentation peut contrecarrer l'effet de destruction de l'espèce et de l'autre il peut contrôler l'action de la source interne de production de l'espèce.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Après avoir posé et décrit notre problème nous avons établi les équations qui nous permettent de suivre le front du traceur qui est advecté et dispersé dans le fluide en écoulement en présence de réactions homogènes et hétérogènes. Dans le but de généraliser le problème et de pouvoir comparer les différents effets, nous avons adimensionnalisé l'équation du bilan de la concentration de notre traceur ainsi que ses conditions aux limites associées ce qui a fait apparaître des grandeurs caractéristiques.

En discrétisant l'équation de la concentration grâce à un schéma de type « Euler » décentré au premier ordre pour le terme d'advection nous sommes affranchis de conditions supplémentaires dans la direction longitudinale. Dans le but d'obtenir une erreur globale dans la direction radiale de l'ordre deux, les conditions de symétrie et la condition aux limites au niveau de la paroi sont approchées par des schémas décentrés avec trois nœuds. Le système algébrique approchant notre problème continu a été conditionné de telle sorte que dans notre domaine d'étude le système tri-diagonale obtenu présente une diagonale principale fortement dominante et est résolu grâce à l'algorithme de Thomas.

Nous avons analysé les influences des nombres de Damköhler, de Peclet et de Thiele sur les distributions de la concentration du traceur. Il ressort des simulations numériques que pour un plan vertical donné ($x=\text{constante}$) on distingue deux zones :

- une zone située vers la paroi est celle où l'on observe les plus grandes valeurs de concentration.
- une région localisée vers l'axe de la conduite qui présente de faibles valeurs de concentration.

Cela montre que les effets de destruction sont plutôt localisés dans la région axiale et que la zone contigüe à la paroi est très sensible à la source interne de production de l'espèce.

Le nombre de Peclet joue un rôle très important car d'un côté son augmentation peut contrecarrer l'effet de destruction de l'espèce et de l'autre il peut contrôler l'action de la source interne de production de l'espèce.

Cette étude vue son importance mériterait d'être complétée et les résultats affinés car son champ d'application est très vaste. On pourrait introduire la diffusion moléculaire axiale et le terme temporel. Cela permettrait de connaître la durée de vie de la substance (des bactéries par exemple) dans la conduite, de suivre plus précisément le comportement du traceur (dispersion d'une entité dans le sang).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

C. Besnaci : Mélange induit par un écoulement au travers un réseau d'obstacles » Thèse de Doctorat de l'Université de Toulouse". , Soutenue le 17 janvier 2012.

B. Bradu, B. Ayache, C. Tanquerel : "Simulation du comportement d'un traceur sanguin dans le réseau vasculaire cérébral". Rapport Projet I3, Chambre de Commerce et d'Industrie d'Amiens, Juin 2004.

A. Cissé : " Détermination numérique de la longueur d'entrée thermique dans un cylindre"

C. Conan : " Etude expérimentale et modélisation des écoulements liquide- liquide en conduite horizontale". Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, Soutenue le 23 mars 2007.

L. Graetz: *Ann. Phys. (N.F.)*, 18, 79-94 (1883), 25, 337-357 (1885).

A. I. F. Hipolito : " Etude des phénomènes de transport dans un réacteur catalytique pilote de type « filaire ». Thèse de Doctorat de l'Université Claude Bernard Lyon 1, Soutenue le 26 novembre 2010.

A. Lévêque : "les lois de la transition de chaleur par convection". Annale des mines ou recueil de mémoires sur l'exploitation des mines et sur les sciences et les arts qui s'y rattachentMémoires, Tome XIII (13) : 201- 239,1928. Paris.

F. Lybaert, E. Duvier, V. Feldom : "Etude du transfert de chaleur convectif à la surface d'un barreau de section carrée placé dans un écoulement longitudinal de gaz". La Thermique : trait d'union entre Sciences et Technologies. Colloque annuel de la Société Française des Thermiciens, pp 219-223, Université de Pau et des Pays de l'Adour 1993.

S. V. Patankar : "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow". Francis and Taylor, 1980, Washington D.C.

J.L.M Poiseuille: Recherches Expérimentales sue le mouvement des liquids de natures différentes dans les tubes de très pet its diameters, **C.R** de l'académie des Sciences Paris **1847**

O. Reynolds (1883): "An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels", *Phi. Transe. R. Soc.*, 174, 935.

J. P. Sauty : " Identification des paramètres du transport hydro dispersif dans les aquifères par interprétation de traçages en écoulement cylindrique convergent ou divergent". Rapport 77 SGN 175 HYD, Bureau de Recherches Géologiques et Minières, Novembre 1977.

J. C. Tannehill, D. A. Anderson, R. H. Fletcher: "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer". Francis and Taylor, 1997 2nd Edition, Washington D.C

ETUDE DE LA CONCENTRATION D'UN TRACEUR DANS UN ECOULEMENT HYDRODYNAMIQUEMENT ETABLI DANS UNE CONDUITE CYLINDRIQUE D'AXE HORIZONTAL

**Mémoire présenté par
Monsieur Cheikh KEBE**

Pour l'obtention du Diplôme de Master II

Mention : Mécanique des Fluides et Applications

Soutenu le 12 octobre 2013 devant le jury composé de :

Président : Joseph SARR

Professeur FST - UCAD

Membres :

Soussou SAMBOU

Maître de Conférences FST - UCAD

Mamadou Lamine SOW

Maître de Conférences FST - UCAD

Cheikh MBOW

Maître – Assistant FST - UCAD

Résumé

L'auteur étudie le comportement d'un traceur dans un fluide newtonien en écoulement établi dans une conduite cylindrique d'axe horizontal dont la paroi est réactive.

Après avoir décrit le système physique, l'auteur écrit l'équation du bilan de la concentration du traceur et les équations de Navier- Stokes dans le système de coordonnées cylindriques. Les équations sont ensuite adimensionnalisées générant ainsi des groupements adimensionnels comme les nombres de Péclet massique, de Damköhler et de Thiele et le facteur de forme géométrique dont les valeurs donnent des renseignements sur le comportement du traceur.

L'équation du bilan de la concentration du traceur est intégrée numériquement grâce à une différence finie décentrée pour le terme d'advection et centrée pour le terme de diffusion. Le système algébrique issu de la discrétisation est résolu par la méthode de double parcours.

Les influences des paramètres physiques et géométriques sur la distribution de la concentration du traceur sont analysées.

Ce mémoire se termine par une conclusion et des suites logiques à donner à ce travail.

Mots clés : Concentration, Ecoulement en Conduite, Fluide Newtonien, Nombres Adimensionnels, Polluant, Surface Réactive, Traceur