

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Abou Bekr BELKAID Tlemcen

Faculté de Technologie



Mémoire présenté pour l'Obtention du Diplôme de
Magister en Génie Mécanique
Spécialité: Énergétique, Dynamiques des Transferts

Par

Zakaria AOUF

Thème

**Contribution à L'étude des Phénomènes de la
Thermodiffusion (effet Soret) Lors de la Convection
Naturelle dans un Milieu Poreux**

Membres du Jury

Mr. O. SEBBANE	Maître de conférences	U. Abou Bekr Belkaid	Président
Mr. R. SAIM	Maître de conférences	U. Abou Bekr Belkaid	Examineur
Mr. N. KORTI	Maître de conférences	U. Abou Bekr Belkaid	Examineur
Mr. A. BENMOUSSAT	Maître de conférences	U. Abou Bekr Belkaid	Examineur
Mr. C. SELADJI	Maître de conférences	U. Abou Bekr Belkaid	Rapporteur

2012/2013

Remerciements

Premièrement et avant tout, je remercie Allah pour TOUT, mais spécialement de m'avoir accordé la force et la conscience pour atteindre cette station, dans le long chemin du Savoir.

Ça fut pour moi un grand honneur, et une chance inestimable d'avoir Mr. Chakib SELADJI, comme un exemple du professeur prospère, d'un fort communicateur et enfin d'un promoteur exceptionnel; Qu' il trouve ici toutes les expressions de ma gratitude et de mon respect, pour ses conseils, ses orientations, et ses encouragements pour aller plus loin.

Mes remerciements s'adressent aux Docteurs: O. SEBBANE, N. KORTI, R. SAIM, et A. BENMOUSSAT pour leur disponibilité et leurs orientations, et l'honneur qu'il me font en acceptant d'évaluer ce travail.

Les premiers pas de ce travail n'auraient pas du avancer sans le soutien que j'ai eu à Dar El-Imam (centre de chercheurs à Guerrara); Que son personnel, et notamment Mr. HAMID OUDJANA Kassem trouvent ici l'expression de ma reconnaissance.

Les traces empreintés dans ce travail, par les orientations et les suggestions de mes confrères étudiants ne peuvent pas passer inaperçues; Je cite spécialement messieurs: BEN AMEUR Ben Ameer; ABDELAZIZ Brahim; KORTI Choukri. Que leur bien soit assez remercié dans ce passage.

Pour toutes les personnes ayant contribué de près ou de loin, dans la réalisation de ce travail, je dirai du fond de mon cœur: Merci!

Et enfin, un merci particulier est réservé à toute ma grande famille pour leur patience, leur soutien et leurs encouragements.

"Fazakoum Allaho Khayran"

Aouf Faki

À mes parents

À mon grand-père

Résumé

Dans ce travail de recherche nous étudions l'influence de la thermodiffusion sur la convection naturelle dans une cavité verticale poreuse, saturé par un mélange binaire gazeuse de méthane et n-butane. L'analyse de ce phénomène est contrôlé par la distribution de la masse volumique de mélange, les lignes de courants et les isoconcentrations.

En fonction du facteur de séparation, la perméabilité optimale du milieu poreux a été identifié. Aussi, nous étudions l'effet d'une fracture sur la séparation des mélanges. Les résultats obtenus font apparaître l'influence du rapport de perméabilités, la taille de la fracture, l'inclinaison, et sa position sur la convection thermosolutal en présence de l'effet Soret.

Mots clés : milieux poreux – effet Soret – thermodiffusion – convection thermosolutal – perméabilité optimal – fracture.

Abstract

In this research, we investigate the thermal diffusion effect on the natural convection, in a vertical porous cavity saturated by a binary gas mixture of methane and n-butane. The analyse is controlled by density distribution of the mixture, flow pattern, and isoconcentrations.

Depending on the separation factor, the optimum permeability of porous media was identified. Also we studied the fracture effect on the separation of mixtures. The results show the influence of the relative permeabilities, the fracture size, the fracture inclination, and its position on the thermosolutal convection in the presence of Soret effect.

Keywords: porous media - Soret effect - thermal diffusion - thermosolutal convection - optimal permeability - fracture.

ملخص

في هذه المذكرة، قمنا بدراسة تأثير الانتشار بالحرارة (الترموديفيزيون) على الحمل الحراري، في تجويف عمودي نفوذ، مملوء بمزيج ثنائي من غازي الميثان والبيتان العادي. تحليل هذه الظاهرة يتعلق بتوزيع الكتلة الحجمية للمزيج داخل التجويف، خطوط التيار، وتوزيع التراكيز. السماحية المثلى للوسط النفوذ، والموافقة لأحسن فصل للمزيج حددت بدلالة عامل الفصل. كما قمنا كذلك بدراسة تأثير الصدع على فصل مكونات المزيج. أظهرت النتائج تأثير كل من الفرق في السماحية (بين الوسط النفوذ والصدع)، حجم الصدع، توضع الصدع، وكذلك ميل الصدع على الحمل الحراري الحلولي في تواجد ظاهرة سوريه.

الكلمات المفتاحية : وسط نفوذ، تأثير سوريه، الترموديفيزيون، الحمل الحراري الحلولي، السماحية المثلى، صدع

NOMENCLATURE

Variables		
A	Rapport d'aspect, $A = \frac{H}{L}$	
c_p	La capacité calorifique du mélange à pression constante	
D, D_M	Le coefficient de diffusion mutuelle	$m^2.s^{-1}$
D_T	Le coefficient de thermodiffusion	$m^2.s^{-1}.K^{-1}$
g, \vec{g}	Accélération et vecteur accélération de la pesanteur	$m.s^{-2}$
\vec{j}	Le flux de diffusion molaire	
k	perméabilité intrinsèque de milieu poreux	m^2
k_k	Constante de kozeny	
k_n	Le nombre de knudsen	
k_{Ti}	Rapport de thermodiffusion de constituant i	
L_c	Longueur caractéristique	
P	Pression	Pa
q	Rapport de séparation	
S_T	Coefficient de Soret, $S_T = \frac{D_T}{D_M x(1-x)}$	K^{-1}
T	Température	K
t	Temps	S
u	Composant de vitesse sur la direction x	$m.s^{-1}$
v	Composant de vitesse sur la direction y	$m.s^{-1}$
\vec{V}	Le vecteur de vitesse de fluide (u, v)	$m.s^{-1}$
x_i	La fraction molaire du constituant i, (le méthane)	
L_e	Nombre de Lewis, $L_e = \frac{a}{D_M}$	
R_{aT}	Nombre de Rayleigh thermique, $R_{aT} = \frac{g\beta_T \nabla T L_c k}{\nu a}$	
w_i	La fraction massique du constituant i (le méthane)	
Symboles grec		
a	La diffusivité thermique, $a = \frac{\lambda_e}{(\rho c_p)_f}$	$m^2.s^{-1}$
α_T	Le facteur de thermodiffusion $\alpha_T = T * S_T$	
β_c	Coefficient d'expansion de volume solutale	
β_T	Coefficient d'expansion de volume thermique	K^{-1}
θ_d	Le temps caractéristique de la thermodiffusion	s
θ_T	Le temps de relaxation	s
ε	Porosité de milieu poreux	
λ	La conductivité thermique	$W.m^{-1}.K^{-1}$
λ_s	La conductivité thermique de la phase solide	$W.m^{-1}.K^{-1}$
μ	La viscosité dynamique de mélange	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ν	La viscosité cinématique de mélange	$m^2.s^{-1}$
ρ	La masse volumique du mélange	$kg.m^3$
ρ_m	La masse volumique du mélange	$mol.m^3$

Indices

<i>e</i>	Effective
F	Fracture
<i>f</i>	Mélange fluide
<i>m</i>	Quantité molaire
mp	Milieu poreux
k	Knudsen
visc	Viscouse
s	Surface
<i>p</i>	Milieu poreux
'	Réel

SOMMAIRE

Introduction générale	1
Objectif de l'étude	2
Organisation du travail	3
Analyse bibliographique et positions du problème	4
Chapitre I : Généralités sur l'effet Soret dans les milieu poreux	
I.1. Introduction	13
I.2. Présentation de l'effet Soret	14
I.2.1. L'intérêt de l'effet Soret	15
I.2.2. Les coefficient déterminent la thermodiffusion	17
I.2.3. Les temps caractéristiques	19
I.2.4. Les méthodes expérimentales	19
I.2.4.1. Méthode à Deux ampoules « <i>Two-bulb method</i> »	20
I.2.4.2. La colonne thermogravitationnelle « <i>The Thermogravitational Column</i> »	21
I.2.4.3. Fractionnement thermique de flux « <i>Thermal Field-Flow Fractionation</i> »	22
I.3. Les méthodes de mise en échelle théorique	23
I.3.1. Multi-échelles, système hiérarchique	24
I.3.2. Les outils de mise en échelle pour les milieux poreux	25
I.3.3. Le volume élémentaire représentatif	26
I.4. Propriété des Milieux Poreux	27
I.4.1. Porosité	27
I.4.2. Perméabilité intrinsèque d'un milieu poreux	27
I.4.3. La tortuosité	29
I.5 Diffusion en milieu poreux	30
a) Diffusion de Knudsen	31
b) Diffusion visqueuse	32
c) Diffusion ordinaire ou Fickienne	33
d) Diffusion de surface	33
I.6 conclusion	35
Chapitre II : Modélisation de l'effe Soret dans les milieux poreux	
II.1. Introduction	36
II.2. Modèles théorique de la thermodiffusion	38
II.3. Modèles appliqués dans la simulation numérique	43
II.3.1. Dérivation théorique du modèle de Firoozabadi	43
II.3.2. Transfert de masse dans un mélange multicomposants	50
II.3.3. Procédures pour le calcul des coefficients de diffusions	51
II.3.4. L'entropie et la thermodiffusion	52
II.4 Conclusion	52

Chapitre III : Géométrie du problème et Modèle Mathématique adopté

III.1 Introduction	53
III.2 Formulation Mathématique	54
III.2.1 Equations de conservation	54
III.2.1.1 Théorèmes fondamentaux	54
III.2.1.2 Equation de conservation de la masse	56
III.2.1.3 Equation de conservation de la quantité de mouvement	56
III.2.1.4 Equation de conservation de l'énergie	57
III.2.1.5 Equation de conservation des espèces	60
III.2.1.6 Approximation de Boussinesq	62
III.2.2 Modèles d'écoulements en milieu poreux	63
III.2.2.1 Equation de continuité	63
III.2.2.2 Loi de Darcy	63
III.2.2.3 Ecoulement unidirectionnel à basse vitesse	63
III.2.2.4 Equation de Darcy généralisée	64
III.2.2.5 Limites de validité de la loi de Darcy	65
III.2.3 Transfert de chaleur en milieu poreux	66
III.2.3.1 Les deux modes de description adoptés	67
III.2.4 Transfert de masse en milieu poreux	70
III.3 Géométrie et modèle mathématique	71
III.3.1 Description et géométrie du problème	71
III.3.2 Hypothèses simplificatrice	72
III.3.3 Modèles mathématique	73
III.3.4 Les conditions aux limites	74
III.4 conclusion	75

Chapitre IV : Simulation Numérique

IV.1 Introduction	76
IV.2 Présentation du code CFD	77
IV.3 Etapes essentielles dans l'analyse CFD	78
IV.4 Démarche numérique du solveur	79
IV.5 Les condition aux limites	85
IV.6 Génération des calculs par Fluent	86
IV.7 La Thermodiffusion dans fluent	87
IV.8 Le schéma numérique et la procédure de résolution	88
IV.9 Le choix du maillage	88
IV.10 conclusion	90

Chapitre V : Résultats et Discussion

V.1 Introduction	91
V.2 Validation des résultats	92
V.3 Analyse de l'effet soret dans un milieu poreux homogène	96
V.3.1 Influence de l'effet soret	96
V.3.2 l'effet de la convection	97
V.3.3 l'effet de la perméabilité	99
V.4 Analyse de l'effet soret dans un milieu poreux hétérogène	101
V.4.1 l'influence de la perméabilité de la fracture	102
V.4.2 l'influence de la taille de la fracture	107
V.4.3 l'influence du nombre des fractures	108
V.4.4 l'influence de la position de la fracture	109
V.4.5 l'influence de l'inclinaison de la fracture	111
V.5 conclusion	112
Conclusion générale	113
Références bibliographique	115

LISTE DES FIGURES

Chapitre 1 : Présentation Générale		
Fig.1.1	Schéma Représentatif de la thermodiffusion (l'effet Soret)	15
Fig.1.2	schéma de l'appareil de deux ampoules	21
Fig.1.3	Le Principe de La colonne thermogravitationnelle	22
Fig.1.4	le Principe de Fractionnement Thermique de Flux	23
Fig.1.5	les différentes échelles pour l'étude des phénomènes de transport	24
Fig.1.6	Représentation du volume élémentaire représentatif	26
Fig.1.7	détermination de la tortuosité du Milieu Poreux	29
Fig.1.8	Les différents modes de transport diffusif dans un milieu poreux	31
Fig.1.9	Analogie électrique pour la combinaison des différents modes de transport diffusif dans un milieu poreux	35
Chapitre 3 : Géométrie et Modèle Mathématique		
Fig.3.1	Un élément de volume du domaine fluide	55
Fig.3.2	Géométrie du modèle physique	71
Chapitre 4 : Simulation Numérique		
Fig.4.1	L'organigramme CFD	79
Fig.4.2	Tracé des résidus	83
Fig.4.3	Tracé de l'historique d'une variable	83
Fig.4.4	Le choix de modèle correspond au transport des mélanges	87
Fig.4.5	La thermodiffusion et le modèle des espèces « Species Model »	87
Fig.4.6	variation du nombre de Nu en fonction de maillage	

Chapitre 5 : Résultats et Discussion

Fig.5.1	Les isoconcentration de méthane CH ₄ (Charles et al. (2006))	82
Fig.5.2	Les isoconcentration de méthane CH ₄ (cette étude)	83
Fig.5.3	Les lignes de courants (Charles et al. (2006))	84
Fig.5.4	Les vecteurs de vitesse (cette étude)	85
Fig.5.5	L'influence de l'effet Soret ($k_{mp} = 10^{-13} \text{ m}^2$)	86
Fig.5.6	L'influence de l'effet Soret ($k_{mp} = 10^{-10} \text{ m}^2$)	88
Fig.5.7	Les vecteurs de vitesse dans un section horizontale	89
Fig.5.8	La séparation en fonction de Ra (El Hajjar 2008)	90
Fig.5.9	Variation du rapport de séparation q en fonction de Perméabilité k	99
Fig.5.10	Isoconcentrations et lignes de courants pour ($k_{mp} = 10^{-17} \text{ m}^2$)	100
Fig.5.11	Isoconcentrations et lignes de courants pour ($k_{mp} = 10^{-13} \text{ m}^2$)	100
Fig.5.12	Isoconcentrations et lignes de courants pour ($k_{mp} = 10^{-10} \text{ m}^2$)	101
Fig.5.13	Géométrie et positionnement de la fracture	102
Fig.5.14	Influence de la perméabilité de la fracture sur la séparation	102
Fig.5.15	Les lignes de courants pour ($k_{mp} = 10^{-14} \text{ m}^2$)	106
Fig.5.16	Les lignes de courants pour ($k_{mp} = 10^{-15} \text{ m}^2$)	106
Fig.5.17	Influence de la taille de la fracture sur la séparation	107
Fig.5.18	Les lignes de courants pour ($k_{mp} = 10^{-13} \text{ m}^2$)	108
Fig.5.19	Influence du nombre des fractures sur la séparation	109
Fig.5.20	Influence d'une fracture horizontale sur la séparation	110
Fig.5.21	Influence d'une fracture verticale sur la séparation	110
Fig.5.22	Géométrie et positionnement de la fracture inclinée	111
Fig.5.23	L'influence de l'inclinaison de la fracture sur la séparation	112

LISTE DES TABLEAUX

Chapitre 1 : Présentation Générale

Tab.1.1	couplage entre Force et Flux de la chaleur et de la masse	15
Tab.1.2	porosité de quelques milieux poreux	27
Tab.1.3	perméabilité de quelques milieux poreux	29

Chapitre 3 : Géométrie et Modèle Mathématique

Tab.3.1	Les paramètres du modèle physique	72
---------	-----------------------------------	----

Chapitre 4 : Simulation Numérique

Tab.4.1	Sensibilité du maillage	72
---------	-------------------------	----

Introduction Générale

L'étude, présentée dans ce mémoire, s'inscrit dans le cadre d'une analyse macroscopique des phénomènes de transferts de chaleur, de masse, et de quantités de mouvement, dans les processus se caractérisant par la présence simultanée, d'un milieu fluide et d'une couche poreuse, vu leur importance fondamentale et leur applications extrêmement variées (océanographie, métallurgie, les écoulements géophysique, l'isolation thermique, les procédés de séchage, pollution de l'air, ...etc.).

Lorsqu' un mélange de plusieurs fluides liquides ou gazeux est soumis à un gradient de température, leurs constituants vont se séparer spontanément après un temps caractéristique, et le constituant le plus lourd migre généralement vers les zones froides, cette séparation relative des composés

est appelée effet thermodiffusif, diffusion thermique ou encore thermodiffusion. En phase condensée, ce processus est aussi appelé effet Soret ou Ludwig-Soret, Ludwig (1856), et Soret (1879).

La convection par double diffusion est essentiellement caractérisée par les phénomènes de transfert de chaleur et de masse, qui sont à l'origine de la production d'entropie, dus à la compétition des forces volumiques d'origine thermique et solutale (El Hajjar 2008). De plus, lorsque les processus de transfert de chaleur et de masse ont lieu simultanément, ils interfèrent entre eux et produisent ce qu'on appelle les effets de diffusion croisés. Le flux de chaleur induit par un gradient de concentration et le flux de matière induit par un gradient de température sont respectivement, connus sous les noms des effets, Dufour et Soret, Galliéro (2003).

Le couplage entre, le transfert de chaleur par convection et l'effet Soret connu sous le nom de la thermogravitation. Vu intérêt industrielle de ce dernier, particulièrement dans la séparation des isotopes, il fait l'objet de plusieurs recherches et études en milieu fluide ou poreux ces dernières années, Galliéro (2003). Il est donc pertinent, pour définir la distribution des transferts de tels systèmes, de caractériser les écoulements de convection double diffusif dans les milieux Poreux.

Objectif de L'étude

Dans cette présente étude, nous nous proposons d'analyser un phénomène de couplage entre le transfert de chaleur, et le transport de masse « la thermodiffusion », pour un fluide binaire dans une cavité rectangulaire, entièrement occupée par une matrice poreuse homogène.

Notre objectif est d'étudier l'importance de l'effet Soret couplé avec la convection naturelle, de déterminer la perméabilités optimale du milieu poreux correspond à une séparation maximale.

Une attention particulière sera consacrée dans ce travail aux milieux poreux fracturés, caractérisé par des perméabilités et porosité distinctes.

Afin d'entreprendre l'étude de façon structurée, le plan de travail suivant a été adopté :

Premièrement une synthèse bibliographique des travaux théoriques, expérimentaux et numériques ayant trait à la convection thermique et/ou solutale en cavité entièrement poreuse, pour diverses configurations et pour différentes conditions aux limites.

Le premier chapitre est consacré pour une présentation générale sur les notions de base caractérisent le phénomène étudié (la thermodiffusion), et le milieu au se développe (les milieux poreux). Le modèle physique choisi, les équations gouvernantes ainsi que les conditions aux limites associées constituent le deuxième chapitre.

Le troisième chapitre est attribué à la modélisation de la thermodiffusion dans les milieux poreux, et avec contribution de la convection naturelle. La simulation numérique, la procédure de résolution, et les paramètres choisis sont l'objet du quatrième chapitre.

Nous rassemblons dans le chapitre cinq les principaux résultats par simulation numériques de cette étude. Les commentaires, interprétations et analyse des divers résultats sont présentés à partir des distributions de certaines grandeurs physiques. Enfin nous terminons ce travail par une conclusion générale qui résume les principaux résultats obtenus.

Analyse Bibliographique

Dans cette section nous effectuons une revue bibliographique sur : la thermodiffusion et la convection thermosolutale, en milieux confinés remplis par un milieu poreux saturé par un mélange fluide. Une synthèse des travaux disponibles sur les approches théoriques, expérimentales, et numériques de la thermodiffusion est présentée dans l'article de Costesèque et al (2011), ainsi le concept des équations de flux de masse pour les mélanges binaires, ternaires, et multiconstituants.

La découverte du processus de thermodiffusion est attribuée à Ludwig, qui étudiait des solutions sodium-sulfate en 1856, Ludwig (1856). Charles Soret, a identifié de manière plus rigoureuse cet effet dans l'eau salée, Soret (1879). Weaver et al. (1991), ont étudié l'influence des effets : Soret et Dufour en

convection naturelle thermosolutale dans une cavité carrée. Ils ont montré que la contribution de l'effet Soret au flux total de masse peut atteindre 10 à 15%.

En ce qui concerne les gaz, l'effet de thermodiffusion fut prédit théoriquement par Enskog en 1911, et Chapman en 1916 indépendamment, et les premières études expérimentales ont été menées par Chapman et Dootson en 1917, Galliéro (2003).

Dans ce qui suit, nous nous attèlerons à mettre en relief les différentes axes de recherches liées à ce phénomène.

1) Analyse de la stabilité des écoulements :

L'étude de stabilité permet de définir l'intervalle des valeurs de Rayleigh (Ra) où l'écoulement monocellulaire reste stable. Cela veut dire que l'intervalle des valeurs de Ra pour lesquelles nous pouvons procéder à la séparation des constituants d'un mélange binaire (El Hajjar 2008).

En 1983, Brand et al. (Boutana 2002), ont fait l'étude des instabilités dans un milieu poreux saturé par un fluide binaire en fonction du signe et de l'amplitude du coefficient de Soret (S_T). Ils ont montré que quand le coefficient d'expansion volumique est supérieur à zéro, une instabilité oscillante apparaît si le chauffage se fait par le bas, et le paramètre de Soret est négatif. Pour des valeurs positives de la conductivité thermique, et le chauffage se faisant par le haut, il n'y a pas d'instabilité. Ainsi, ils ont montré que pour certains paramètres du fluide binaire, une possibilité d'oscillations peut apparaître quand le chauffage se fait par le haut.

Dans le même ordre d'idées, les mêmes auteurs, en 1984 (Boutana 2002) ont examiné le cas d'une couche poreuse horizontale saturée par un fluide binaire. Ils ont considéré la convection au voisinage du point d'intersection de la ligne de la stabilité neutre et celle de la stabilité oscillante.

Taslim et al en 1986 (Ouazaa 2008), ont étudié la convection double diffusion d'un fluide binaire en milieu poreux, l'effet Soret étant pris en considération. Ils ont montré l'existence d'un régime d'ébullition où la surface de chauffage est couverte d'un film de vapeur, d'épaisseur très mince. La période du contact liquide-solide diminue avec l'augmentation du flux de chaleur. Le transfert de masse par convection thermique à grands nombres de Rayleigh (50-2000) dans un milieu poreux chauffé par le bas a été traité théoriquement et numériquement en 1987, par Trevisan et al (Ouazaa 2008). Les prédictions d'une analyse d'échelles proposée par ces auteurs se sont avérées en bon accord avec leurs résultats numériques.

Traoré et al (1994) ont analysé l'effet Soret en convection thermosolutale. Ils ont montré que pour des valeurs très faibles du rapport de thermodiffusion, la situation de repos peut être modifiée pour donner naissance à un écoulement de type thermodiffusion. De plus l'augmentation de ce coefficient conduit à une augmentation du taux de transfert de chaleur et à une diminution du taux de transfert de masse.

En 1998, Straughan et al., (Malashetty et al. (2008)) ont étudié la stabilité structurale en double diffusion incorporant l'effet Soret dans un milieu de Darcy-Brinkman. Ils ont développé une analyse où ils établissent la dépendance des solutions à l'égard des changements du coefficient de Soret. Ils ont montré que cette dépendance est en fonction de la structure et la géométrie du domaine.

En 1998, Marcoux et al. (Boutana 2002), ont étudié la naissance de la thermogravitation dans une cavité verticale poreuse saturée par un mélange binaire. Ils ont remarqué que dans le cas où le rapport des forces thermiques et solutales vaut moins un (-1), l'existence d'un état purement diffusif est possible. La transition du régime purement diffusif au régime convectif est caractérisée par un nombre de Rayleigh critique. Dans le cas d'une cellule carrée, ils ont montré que l'existence des régimes oscillatoires centro-

symétriques et asymétriques ne favorise pas la séparation des espèces chimiques.

En 2000, Joly et al.(Bahloul, et al. 2006) ont étudié l'influence de l'effet de Soret sur la convection naturelle dans une cavité verticale saturée par un fluide binaire. Ils ont montré que l'effet Soret est maximum quand le nombre de Lewis tend vers zéro. Ces auteurs ont montré aussi que pour des grands nombres de Rayleigh, la solution numérique indique l'apparition d'une bifurcation de Hopf.

En 2001, Sovran et al. (El Hajjar 2008) ont étudié la naissance de la convection thermo-solutale dans une couche poreuse infinie avec l'effet Soret. Les parois horizontales imperméables à la matière, sont maintenues à des températures constantes et différentes. L'investigation a été faite sur les paramètres de contrôle tels que le nombre de Lewis, le facteur de séparation, et la porosité normalisée. Cette étude a permis de mettre en évidence deux zones d'écoulements, l'une stationnaire, et l'autre oscillante. Pour une cellule chauffée par le bas, la solution d'équilibre perd sa stabilité via une bifurcation stationnaire lorsque le facteur de séparation est supérieur à la valeur critique. Lorsque ce dernier est inférieur à la valeur critique, la solution perd sa stabilité via une bifurcation de Hopf. Dans le cas d'une cellule chauffée par le haut, la solution d'équilibre est stable lorsque le facteur de séparation est supérieur à la valeur critique ; alors qu'elle perd sa stabilité, via une bifurcation stationnaire, lorsque le facteur de séparation est inférieur à la valeur critique.

En 2003, Bahloul et al.(Ouazaa 2008), ont examiné les écoulements dans une cavité horizontale, soumise à des flux verticaux de chaleur et de masse en présence de l'effet Soret. Ils ont démontré que la solution prend la forme d'une bifurcation qui peut être sous critique ou fourche, dépendamment du rapport des forces de volume (N) et du nombre de Lewis (Le).

Mansour et al. (2007), ont étudié la stabilité de la convection double diffusif dans une couche poreuse horizontale exposée à des flux de chaleur et de masse par le bas, et exposée à un flux de chaleur latéral. Ils se préoccupent de cas d'équilibre entre le flux de masse induit par le coefficient Soret et le flux de chaleur imposé, où (le produit de coefficient Soret, et le rapport de flottabilité égale à l'unité $Sr.N = 1$). La solution analytique faite par l'approximation de l'écoulement parallèle et validée numériquement. Dans le plan $(\frac{1}{Sr} - Le)$, ils distinguent cinq régions d'écoulement différentes, leur localisation dépend du rapport de flux de chaleur horizontal et vertical α . Les bifurcation supercritique ou subcritique sont possibles pour des valeurs spécifiques de $\frac{1}{Sr}$, et de Le . De plus ils examinent l'effet de α , et de $\frac{1}{Sr}$ sur le paramètre de Rayleigh critique correspondant au début de convection. Ils ont conclu que le paramètre α affecte l'écoulement et le transfert de chaleur d'une façon considérable, mais son effet sur le transfert de masse est négligeable.

Mansour et al. (2008), ont utilisé la même géométrie dans l'étude précédente, ils ont étudié l'effet de la thermodiffusion sur la multiplicité des solutions, en fonction des paramètres adimensionnelles qui gèrent le phénomène. Ils ont conclu que le flux de chaleur est affecté considérablement par l'effet Soret. Ainsi, ils ont démontré que le plan du rapport de flottabilité en fonction de rapport de séparation $(\varphi - N)$ peut être divisé en quatre régions d'écoulement différentes.

Srinivasa Rao et al.(2011), ont examiné l'effet de la thermodiffusion sur la double convection d'un fluide visqueux incompressible, dans une canal verticale remplie par un milieu poreux. Les parois de cette canal sont exposées à des températures non-uniformes, ils ont travaillé avec un nombre de Prandtl ($P = 0.71$), et ont trouvé que la composante de vitesse verticale augment avec le nombre de Rayleigh, mais son augmentation est conditionnée par $|N| < 0$ au voisinage des parois.

En 1987, Mehta et al. (Ouazaa 2008) ont étudié l'effet de l'hétérogénéité du milieu dans le cas de la convection naturelle dans une couche poreuse verticale. Les écoulements sont engendrés par des flux de chaleur et de masse uniformes, imposés le long des deux parois verticales de la couche poreuse. Ils ont trouvé que l'effet de l'hétérogénéité est sensible pour des variations importantes de perméabilité et de grandes valeurs du nombre de Rayleigh, du nombre de Lewis et du rapport de forces de volume. Les estimations des nombres de Nusselt et de Sherwood dans de telles conditions sont très différentes de celles obtenues pour un milieu homogène.

2) Recherches sur l'étude des colonnes thermogravitationnelles :

La diffusion thermogravitationnelle quant à elle est la combinaison de deux phénomènes, la convection et la thermodiffusion. Le couplage de ces deux phénomènes conduit à la séparation des espèces d'un mélange. Clusius et al. (1938), ont les premiers, réalisé avec beaucoup de succès, un procédé de séparation des espèces d'un mélange gazeux dans une cavité verticale (De Groot 1942). Furry, Jones et Onsager ont développé la théorie de thermodiffusion (théorie de FJO), et de même consacré une étude approfondie à la séparation des gaz (De Groot 1942). Par la suite, de nombreux travaux ont été effectués visant à justifier les hypothèses, ou à étendre les résultats de la théorie de FJO, aux cas des mélanges liquides (De Groot 1942). Lorenz et Emery (1959), ont introduire un garnissage fin (milieu poreux) dans la cavité, pour réduire les courants de convection, et de pouvoir travailler avec des épaisseurs de colonnes thermogravitationnelles plus élevées.

En 1999, Benano-Melly et al. (Galliéro (2003)) ont fait la modélisation de la convection thermogravitationnelle en milieu poreux. Ils ont mis en évidence, une formulation permettant, de prédire le processus de dégénérescence pour un fluide multiconstituant, et de connaître la répartition de la composition du fluide dans le cas par exemple d'un champ pétrolier. Une loi représentative des nombreux phénomènes auxquels sont soumis ces fluides a été établie par ces auteurs.

D'autres travaux ont été consacrés à l'amélioration des dispositifs expérimentaux pour accroître la séparation, Le couplage optimal entre la thermodiffusion et la convection (séparation maximale) correspondent à une épaisseur optimale de la cellule dans un milieu libre (moins d'un millimètre pour les liquides usuels), et une perméabilité optimale dans un milieu poreux, Marcoux et Charrier-Mojtabi (1998). Les mêmes auteurs ont remarqué que la thermodiffusion (l'effet Soret), correspond à un transfert horizontal de matière, puisqu' un gradient de température associé un gradient de concentration. L'équilibre entre ces deux phénomènes est fonction du nombre de Rayleigh. Pour de très faibles nombres de Rayleigh, les transferts de masse sont horizontaux, l'effet Soret est la seule force intervenant dans la cellule. Pour des grands nombres de Rayleigh, le régime convectif prend le dessus et tend à entraîner le mélange dans un mouvement d'ensemble, réduisant ainsi la séparation. Ils ont noté aussi que la variation de la porosité normalisée n'a d'influence que sur le régime transitoire. Le régime stationnaire est obtenu d'autant plus rapidement que la porosité est élevée.

L'effet d'inclination de la colonne thermogravitationnelle a été étudié par (Platten 2003), il est remarqué que la séparation peut être sensiblement augmentée. Récemment, Elhajjar et al. (2010), ont étudié dans la même configuration la stabilité de l'écoulement monocellulaire, ils ont démontré que la séparation dans cette configuration est supérieur, ainsi que la valeur de Rayleigh critique est supérieur à celle de séparation maximale.

Charles-Guobing et al. (2004), ont examiné numériquement l'effet de la convection naturelle dans une cavité verticale d'un rapport d'aspect $A = 10$, chauffée latéralement. Ils utilisent le modèle mathématique de Shukla et Firoozabadi pour calculer les coefficients de thermodiffusion, de diffusion moléculaire, et de diffusion de pression en fonction de température, pression, et d'autre propriétés physiques de mélange binaire. Différentes perméabilités sont testées en fonction de facteur de séparation, leurs résultats indiquent

que d'autant la perméabilité augmente la séparation augment jusqu'atteindre son pic à 10 milli-darcy (md), puis décroît. Charles-Guobing et al. (2006), ont examiné par le même modèle mathématique l'effet de l'hétérogénéité de milieu dans une cavité verticale poreuse stratifiée. Ils ont constaté que l'effet Soret dépend fortement de l'hétérogénéité de milieu, et la séparation est toujours supérieure que dans un milieu homogène. Une perméabilité optimale de milieu poreux dans la colonne thermogravitationnelle a été proposée par Marcoux et Costeseque, en 2007 (Davarzani 2010).

Elhajjar et al. (2008), ont utilisé une cavité horizontale soumise à des gradients verticales pour séparer les constituants du mélange dans certaines gammes des paramètres physiques du problème. Une nouvelle procédure diffère de celle habituellement utilisée, configurée par, Elhajjar et al. (2009), consiste à obtenir la séparation thermogravitationnelle dans une cellule horizontale, soumise à des gradients horizontaux de température imposés sur les deux parois horizontales, pour séparer les constituants du mélange dans certaines gammes des paramètres physiques du problème. L'avantage de cette procédure est d'avoir une épaisseur plus supérieure par rapport à la cellule verticale, pour des séparations du même ordre de grandeur.

Alloui et al. (2010), ont étudié analytiquement et numériquement les effets combinés de Soret et thermosolutale sur la convection naturelle, dans une cavité rectangulaire verticale remplie d'un mélange binaire. Des conditions à la frontière de type Neumann pour la température et le soluté ont été appliquées aux parois verticales de la cavité, tandis que les deux parois horizontales sont supposées imperméables et isolées. En fonction des paramètres fondamentaux du problème, ils trouvent une bonne accorde entre l'étude analytique basée sur l'approximation de l'écoulement parallèle¹, et l'étude numérique basée sur la méthode de volume de contrôle.

¹ L'écoulement est considéré unidirectionnel, et la composante de vitesse horizontale doit être négligée.

Analyse Bibliographique

A travers cette analyse bibliographique, qui faut rappeler est une émanation de plusieurs recherches trouvées dans des thèses de doctorat, et des articles, fait ressortir l'influence des paramètres thermiques et dynamiques sur l'évolution de la migration des solutés dans les solutions binaires.

La majorité des études ont été menées sur un milieu poreux considéré comme monocouche, de ce point de vue, il nous semble très pertinent d'entamer une analyse sur les paramètres influents dans le cas d'étude de la convection thermodiffusif, ceci en tenant compte d'un milieu hétérogène ordonné (stratifié ou autre).

Chapitre I

Généralités Sur L'effet Soret Dans Les Milieux Poreux

I.1 Introduction

On appelle communément par le milieu poreux, un milieu qui se compose d'une matrice solide, à l'intérieur de la matrice solide se trouvent des cavités interconnectées appelées pores. L'espace poreux peut être occupé par un ou plusieurs fluides. Dans la plupart des cas, la matrice solide est rigide mais peut dans certains cas être légèrement déformable (Jean-François 2010).

Dans notre étude nous nous limiterons aux cas d'une matrice solide non déformable, totalement remplie (saturée) par une seule phase de deux gaz totalement miscibles. De plus, nous admettons l'hypothèse qu'il n'y a pas d'échange de matière entre les phases fluides et la matrice solide.

Les milieux poreux naturels sont largement existants, exemples : sable, le calcaire, la chaux, le bois et les tissus humains. Dans l'industrie certains milieux poreux moins compacts sont fabriqués pour leurs différents usages. On rencontre des milieux poreux dans de nombreux secteurs industriels tels que le génie des procédés, le génie pétrolier, le génie chimique, l'hydrologie, la géothermie et le génie civil.

La formulation phénoménologique de la thermodiffusion est décrite par des coefficients qui sont déterminés théoriquement ou expérimentalement. Ces coefficients, ainsi que les différentes méthodes expérimentales pour les calculer sont exposés dans ce premier chapitre.

I.2 Présentation de l'effet Soret

Soit un mélange de fluides (liquides ou gazeux) homogène : Lorsqu'on applique un gradient de température sur ce mélange on observe que leurs constituants vont se séparer spontanément après un temps caractéristique créant des gradients de concentration, et le mélange sera inhomogène. Le constituant le plus lourd se déplace généralement vers les zones froides (voir Fig.1.1). Cette séparation relative des composants appelée : effet thermodiffusif, thermodiffusion ou encore l'effet Soret, Galliéro (2003).

La convection par double diffusion est essentiellement commandée par les phénomènes de transfert de chaleur et de masse, Paszkuta (2005). Lorsque les processus de transfert de chaleur et de masse ont lieu simultanément, ils interfèrent entre eux et produisent ce qu'on appelle les effets de diffusion croisés, Paszkuta (2005). Le flux de chaleur induit par un gradient de concentration et le flux de matière induit par un gradient de température sont respectivement, connus sous les noms des effets, Dufour et Soret Galliéro (2003) (voir Tab.1.1).

Tab.1.1 : couplage entre Force et Flux de la chaleur et de la masse
Paszkuta (2005)

Force \ Flux	∇T	∇C
Chaleur	Conduction (Loi de Fourier)	L'effet Dufour
Masse	L'effet Soret	Diffusion (Loi de Fick)

Les éléments diagonaux du (Tab.1.1) correspondent aux phénomènes de transports primaires. Car les effets Dufour et Soret sont d'un ordre de grandeur plus petite que les effets décrits par les lois de Fourier et de Fick, ils ont été négligés dans de nombreuses études.

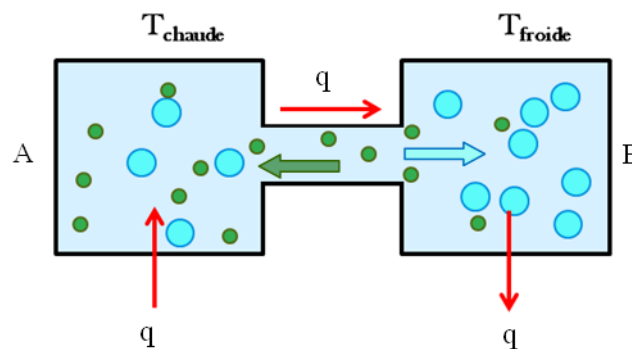


Fig.1.1 : Schéma représentatif de la thermodiffusion (l'effet Soret)

I.2.1 L'intérêt de l'effet Soret

- Le processus de thermodiffusion contribue dans de très nombreux cas naturels et industriels. Pour un mélange soumis à un gradient de température pour un temps caractéristique de thermodiffusion n'est pas trop grand par rapport à celui lié à la convection thermique, dans ce cas la thermodiffusion pourra influencer de manière non négligeable sur ce mélange (G. Galliéro 2003). Ainsi en géologie, la thermodiffusion est utilisée pour expliquer l'évolution du cœur de la terre, Majewski et Walker, 1998 (G. Galliéro 2003), et pour comprendre certains mécanismes de cristallisation des magmas, Schott, 1983 (G. Galliéro 2003).

La thermodiffusion modifie la répartition de certains isotopes dans la glace et permet ainsi de mieux appréhender les brusques changements climatiques Grachev et Severinghaus, 2003 (G. Galliéro 2003). Elle est par ailleurs impliquée dans des phénomènes aussi divers que la météorologie ou l'astrophysique. De plus, son influence sur le comportement de la combustion semble être relativement importante, Rosner et al. (G. Galliéro 2003). Certains lui attribuent également une influence dans le transport biologique à l'intérieur du corps humain, Bonner et Sundelof, 1984 (G. Galliéro 2003). Elle est même évoquée comme un possible mécanisme pour l'évolution prébiotique¹, Braun et Libchaber, 2002 (G. Galliéro 2003). En ce qui nous concerne, elle nous permis d'estimer la répartition des hydrocarbures dans les réservoirs pétroliers, Costeseque et al., 1987 (G. Galliéro 2003).

- La thermodiffusion peut également avoir un intérêt économique et servir dans différents procédés industriels. La plus importante des applications de ce processus croisé en phase gazeuse est la séparation des isotopes (Dupuis 1983), par une méthode de colonne thermogravitationnelle, qui couple convection et thermodiffusion, proposée par (Clusius et Dickel 1938). De la même manière elle a servit à l'enrichissement isotopique de l'uranium pendant la seconde guerre mondiale. Par ailleurs, de par son rendement assez faible, elle n'est utilisée que pour la séparation de produits à haute valeur ajoutée, comme certains produits pharmaceutiques ou pétroliers, Jones, 1955 (G. Galliéro 2003).

- Enfin, la thermodiffusion peut s'avérer être aussi une très bonne sonde de potentiel d'interactions entre molécules d'espèces différentes (G. Galliéro 2003).

¹Type de sucres qui échappent à la digestion intestinale

I.2.2 Les coefficients déterminants la thermodiffusion

À partir des formulations phénoménologiques de la thermodiffusion (chapitre 02), les flux de masse et de chaleur (J_q et J_1 respectivement) peuvent s'écrire, pour un mélange binaire sous pression uniforme, en utilisant la loi de Fick et la loi de Fourier et en tenant compte de la thermodiffusion (G. Galliéro 2003):

$$J_q = -\lambda \nabla T - \rho \frac{\partial \mu_1}{\partial w_1} T D_T \nabla w_1 \quad (I.1)$$

$$J_1 = -\rho w_1 w_2 D_T \nabla T - \rho D \nabla w_1 \quad (I.2)$$

avec :

ρ : la masse volumique du système ;

λ : la conductivité thermique ;

D : le coefficient de diffusion mutuelle ;

D_T : le coefficient de thermodiffusion ;

w_i : la fraction massique de constituant i ;

et T : la température de référence.

À l'état stationnaire, le flux thermodiffusif et le flux de diffusion de masse Fickienne se compensent et le flux de masse s'annule, soit $J_1 = 0$. Ainsi, en utilisant (I.2), il vient que dans un mélange binaire (G. Galliéro 2003):

$$w_1 w_2 D_T \nabla T + D \nabla w_1 = 0 \quad (I.3)$$

De cette relation, on définit l'expression du coefficient de Soret S_T , qui quantifie la séparation à l'état stationnaire, dans un mélange binaire comme:

$$S_T = \frac{D_T}{D} = - \frac{1}{w_1(1-w_1)} \frac{\nabla w_1}{\nabla T} \quad (I.4)$$

Une autre grandeur pour caractériser la thermodiffusion lors des différentes simulations numérique est le facteur de thermodiffusion α_T , qui s'écrit simplement comme (G. Galliéro 2003):

$$\alpha_T = T * S_T \quad (I.5)$$

Dans un mélange multi-constituants, le facteur de thermodiffusion d'un composé i dans ce mélange s'écrit comme (Charles-Guobing 2005) :

$$\alpha_{T_i} = -\frac{T}{x_i(1-x_i)} \frac{\nabla x_i}{\nabla T} \quad (I.6)$$

Avec : x_i : la fraction molaire de constituant \square

Le facteur de thermodiffusion α_T est plus utilisé que le coefficient de Soret S_T car, d'une part, il intègre la valeur de la température moyenne à laquelle est effectuée la mesure et est de ce fait adimensionnel, et d'autre part, beaucoup des modèles décrivant la thermodiffusion sont basés sur l'étude du facteur de thermodiffusion.

De la théorie thermodynamique (Rutherford et Roof 1959), l'équation (1.2) s'écrit en fonction des fractions molaires comme suit:

$$J_1 = -\rho D (\nabla x_1 + \frac{\alpha_T x_1 (1-x_1)}{T} \nabla T) \quad (I.7)$$

Cette équation définit le facteur de thermodiffusion tel que:

$$\alpha_T = -\frac{\ln\left(\frac{(x_1/(1-x_1))_C}{(x_1/(1-x_1))_f}\right)}{\ln\left(\frac{T_C}{T_f}\right)} = -\frac{\ln q}{\ln\left(\frac{T_C}{T_f}\right)} \quad (I.8)^1$$

$q = \frac{(x_1/(1-x_1))_C}{(x_1/(1-x_1))_f}$ Désigne le rapport de séparation qui permet de comprendre la procédure de transfert de masse (Charles-Guobing 2005).

Avec : x_1 la fraction molaire de constituant le plus léger, C \square la fraction molaire maximale dans la paroi chaude, et f \square la fraction molaire minimale dans la paroi froide.

Le transport thermodiffusif est aussi caractérisé par le rapport de thermodiffusion $\square_{\square\square}$ d'un composé i , qui est défini comme (G. Galliéro 2003):

$$k_{T_i} = x_i(1-x_i)\alpha_{T_i} = -T \frac{\nabla x_i}{\nabla T} \quad (I.9)$$

¹Le calcul du facteur de thermodiffusion par l'équation (1.8) est valable pour la convection naturelle en régime stationnaire, on peut ne pas tenir compte de la force de gravité.

Ce dernier coefficient de transport permet, pour un composé donné, de quantifier et par la même de comparer, son aptitude à migrer par thermodiffusion relativement aux autres espèces. C'est une grandeur qui est utilisée parfois pour appréhender dans certains mélanges l'amplitude de la thermodiffusion.

I.2.3 Les temps caractéristiques

(de Groot 1945), a montré qu'il était possible, comme pour tout phénomène diffusif, d'associer à la thermodiffusion un temps caractéristique θ_D correspondant à l'atteinte de l'état stationnaire, et défini comme :

$$\theta_D = \frac{d^2}{\pi^2 D} \quad (\text{I. 10})$$

où d est la distance entre les deux murs, aux températures différentes.

L'établissement du gradient de fraction molaire se fait suivant une loi classique exponentielle du type e^{-t/θ_D} , (G. Galliéro 2003), de nombreuses améliorations quant à l'appréhension de la forme de la loi décrivant l'évolution du gradient de fraction molaire existent. De plus dans le cadre de la thermodynamique irréversible étendue, il est possible de montrer qu'il faut introduire un nouveau temps de relaxation θ_T , très court, Jou et al., 2001 (G. Galliéro 2003) :

$$\theta_T = \frac{d^2}{a} \quad (\text{I. 11})$$

$$\text{où } a \text{ est la diffusivité thermique, } a = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (\text{I. 12})$$

I.2.4 Les méthodes expérimentales

Pour déterminer les coefficients de thermodiffusion dans un mélange fluide binaire, il existe plusieurs méthodes expérimentales. Pour une vue détaillée sur toutes les techniques qui existent et les avantages et les inconvénients de chacune, le lecteur peut consulter (Srinivasan et Saghir 2011). On cite ci-dessous trois méthodes :

I.2.4.1 Méthode à Deux ampoules « *Two-bulb method* »

La technique de deux ampoules est la méthode la plus largement utilisée pour déterminer les coefficients de diffusion, Yabsley et Dunlop, 1976(Davarzani 2010) et de thermodiffusion des gaz, Grew et Ibbs, 1952(Davarzani 2010). L'arrangement de base d'une cellule à deux ampoules, est constitué de deux chambres de volumes relativement grands reliés par un tube de diffusion de petits volumes. Initialement, les deux chambres sont remplies avec des mélanges fluides de composition différente à la même pression, qui sont autorisés à s'approcher d'une composition uniforme par diffusion à travers le tube.

Les études expérimentales de la thermodiffusion sont en général basées sur la détermination de la différence de composition des deux parties d'un mélange de fluide qui sont à des températures différentes. Un gradient de température est mis en place dans le tube, en amenant les ampoules à des températures différentes, uniforme sur chaque ampoule. À condition que le rapport du volume des ampoules soit connu, la séparation peut être trouvée à partir de la modification de la composition qui se produit dans une seule ampoule. L'appareil à deux ampoules utilisées pour déterminer les coefficients de thermodiffusion est illustré sur la (Fig.1.2). Dans ce type d'appareil en raison du rapport important du volume des deux ampoules, presque tout changement de composition du mélange gazeux se produit dans le bas du bulbe.

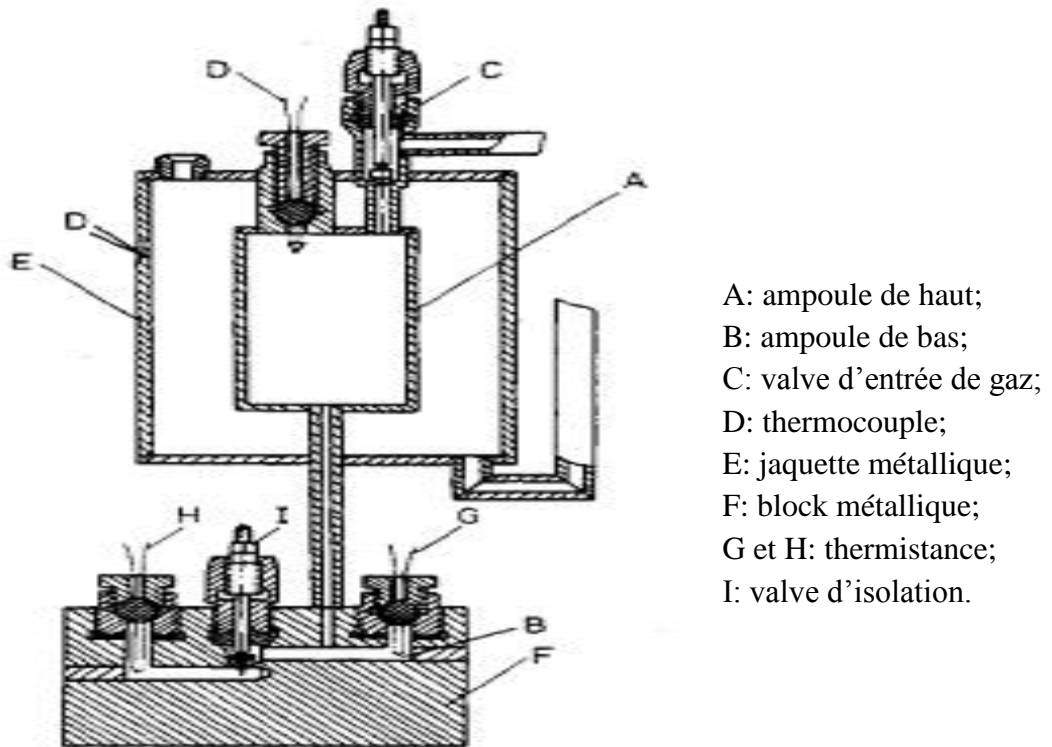


Fig.1.2 : schéma de l'appareil de deux ampoules utilisé pour déterminer le coefficient de thermodiffusion dans un mélange binaires gazeuse (Saxena et Mason 1959).

I.2.4.2 La colonne thermogravitationnelle « *The Thermogravitational Column* »

Une autre méthode de mesure de coefficients de thermodiffusion est celle de la colonne thermogravitationnelle qui se compose de deux plaques verticales séparées par un espace étroit sous un gradient thermique horizontale (Lorenz et Emery, *The packed thermodiffusion column* 1959) ou vertical, Fargue, et al. 2004 (Davarzani 2010) (voir Fig.1.3). Le principe est d'utiliser un gradient thermique pour produire simultanément un flux de masse par thermodiffusion et un flux de convection. À partir d'un mélange de composition homogène, le couplage des deux mécanismes de transport conduit à une séparation des composants. Dans la plupart des dispositifs expérimentaux, le gradient thermique appliqué est horizontal et le gradient de composition finale est globalement vertical. Le taux de séparation dans ce système correspond à la différence de concentration entre le haut et le bas de

la cellule. La colonne thermogravitationnelle a été conçue par (Clusius et Dickel 1938). La phénoménologie de transport thermogravitationnelle a été exposée par Furry et al., 1939(Davarzani 2010), et a été validée par de nombreuses expériences.

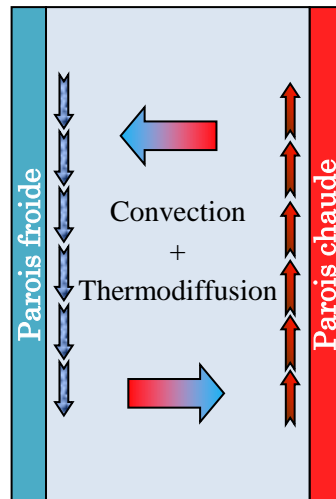


Fig.1.3 : Le Principe de La colonne thermogravitationnelle avec un gradient thermique horizontal

I.2.4.3 Fractionnement thermique de flux « *Thermal Field-Flow Fractionation (ThFFF)* » (Davarzani 2010)

Le Fractionnement thermique de flux est une technique qui repose sur un gradient de température (créer une force de thermodiffusion) pour caractériser et séparer les polymères et les particules. Un schéma du système est montré dans la (Fig.1.4). La séparation des particules en suspension est généralement effectuée dans un solvant. Les particules de poids moléculaire supérieur à réagir plus avec le gradient thermique et compactés plus étroitement avec le froid.

En raison du profil de vitesse parabolique du support, les particules de poids moléculaire inférieur aura une plus grande vitesse moyenne. La différence entre les vitesses moyennes cause une séparation spatiale et temporelle le long du canal. Le système de Fractionnement thermique de flux possède des caractéristiques uniques rendant plus adapté à certaines

séparations que le système conventionnel, Caldwell, 1973 (Davarzani 2010). C'est une excellente technique de mesure des coefficients de Soret en particulier pour les polymères dissous et les particules en suspension, Schimpf 1998 (Davarzani 2010).

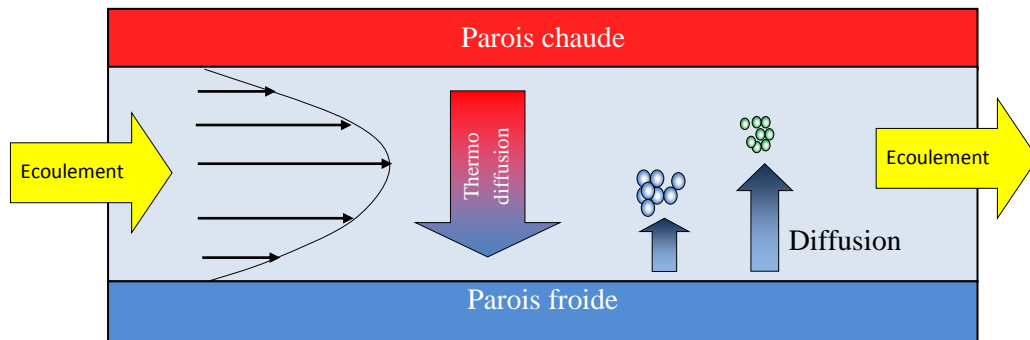


Fig.1.4 : le Principe de Fractionnement Thermique de Flux.

I.3 Les méthodes de mise en échelle théorique

La compréhension et la prédiction du comportement de l'écoulement des fluides multiphasique ou multi-constituant dans les milieux poreux dépend fortement des hétérogénéités, soit la discontinuité lithologique à grande échelle soit ou localisation exacte des phénomènes, Ewing 1997 (Davarzani 2010). On peut gagner des informations Considérables sur la physique des écoulements multiphasique à travers les milieux poreux par des expériences de laboratoire et des modèles réduits de pores, mais les longueurs d'échelles de ces données sont très différentes de celles exigées à l'échelle de terrain. La présence d'hétérogénéités dans le milieu complique aussi beaucoup l'écoulement (Jean-François 2010). Par conséquent, nous devons comprendre les effets des hétérogénéités et des coefficients, sur différentes longueurs d'échelle.

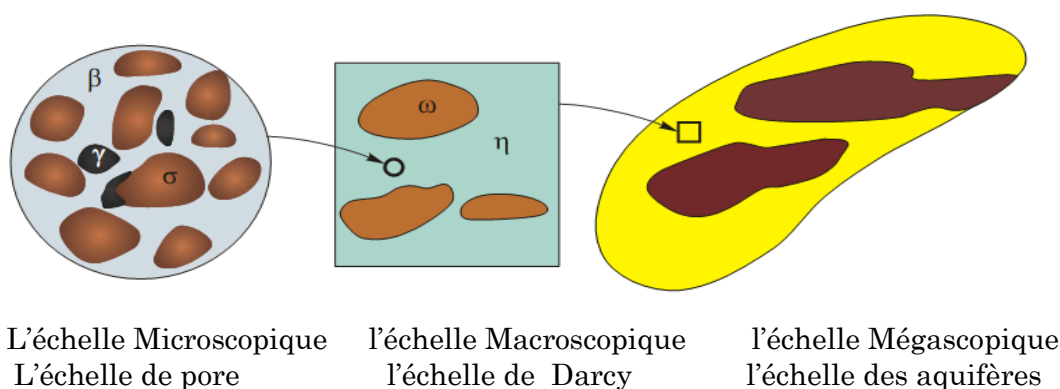
I.3.1 Multi-échelles, système hiérarchique

Les échelles d'observation et de modélisation (Fig.1.5) peuvent être classées comme :

- L'échelle microscopique ou échelle des pores.
- L'échelle macroscopique ou Darcy.
- L'échelle mésoscopique, où les hétérogénéités sont à l'échelle macroscopique.
- L'échelle mégascopique ou l'échelle de l'aquifère, réservoir, etc.

La description physique des deux premières échelles a fait l'objet de nombreuses études. De nombreux problèmes non résolus se posent lorsque l'on tient compte de l'effet de l'hétérogénéité, généralement lorsque le niveau de description du modèle utilisé, est trop grand ; par exemple, un modèle de maillage numérique trop grand par rapport aux hétérogénéités.

Dans un milieu poreux, les équations de la mécanique des milieux continus permettent de décrire les processus de transport dans les pores. Pour un grand nombre de pores, la description détaillée des processus microscopiques est généralement peu pratique. Il est donc nécessaire de passer d'une description microscopique à l'échelle des pores vers une description macroscopique à travers un certain volume de milieu poreux, y compris un grand nombre de pores.



L'échelle Microscopique: β = phase liquide, σ = phase solide, γ = phase organique.
L'échelle Macroscopique: η et ω sont des milieux poreux de différentes caractéristiques.
L'échelle Mégascopique : un aquifère contient deux hétérogénéités mésoscopique

Fig.1.5 : les différentes échelles pour l'étude des phénomènes de transport

I.3.2 Les outils de mise en échelle pour les milieux poreux

Dans la description macroscopique de transfert de masse et de chaleur dans un milieu poreux, les phénomènes de convection-diffusion (ou dispersion) sont généralement analysés en utilisant une méthode d'augmentation d'échelle, dans la quel la situation locale complexe (transport par convection et diffusion à l'échelle du pore) est enfin, décrit à l'échelle macroscopique par des tenseurs efficaces, Moyne, et al., 2000 (Davarzani 2010). Pour modéliser les phénomènes de transport dans les milieux poreux, il existe plusieurs méthodes. Le lecteur peut consulter, Cushman, et al., 2002 (Davarzani 2010) pour une brève description des différents types d'hierarchies et des outils recommandés qui peuvent être appliqués.

Entre autres, la méthode des moments, Brenner 1980 (Davarzani 2010), la méthode du volume élémentaire représentative, Carbonell et Whitaker 1984 (Davarzani 2010) et la méthode d'homogénéisation, Mei 1991 (Davarzani 2010) sont les techniques les plus utilisées.

Dans la suite, nous allons expliquer la méthode du volume élémentaire représentative, qui est peut être utilisée pour obtenir les équations macro-échelle qui décrivent la diffusion thermique dans un milieu poreux homogène, Cushman, et al., 2002 (Davarzani 2010). Il a été largement utilisé pour prédire les propriétés de transport efficaces pour de nombreux processus, y compris le transport en milieux poreux hétérogènes, Quintard et Whitaker 1993 (Davarzani 2010), et pour des mélanges multi-composants Quintard, et al., 2006 (Davarzani 2010).

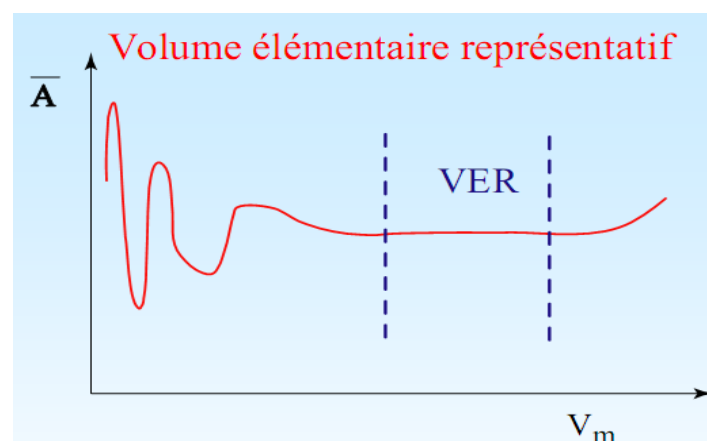
I.3.3 Le volume élémentaire représentatif

Lorsqu'on étudie les écoulements en milieu poreux, deux échelles s'imposent pour la description des phénomènes (Bories 1985).

- L'échelle des pores, ou microscopique, à l'intérieur de laquelle les grandeurs locales peuvent très largement varier. En général cette échelle est associée au diamètre moyen des pores, d .
- L'échelle du milieu poreux, ou macroscopique, caractéristique de variations significatives de ces mêmes grandeurs, définies en moyennes, sur un certain volume de milieu poreux. Cette échelle macroscopique est associée à une dimension géométrique du milieu, L .

Les grandeurs macroscopiques, caractérisant le milieu poreux, ont donc des moyennes de grandeurs microscopiques correspondantes, sur une taille grande devant l'échelle de leurs fluctuations microscopiques, mais petite devant celle des variations à l'échelle macroscopique. Ainsi si l désigne la dimension caractéristique du V.E.R., l doit satisfaire la double inégalité suivante : $d < l < L$. (fig.1.6).

Les paramètres caractérisant le milieu poreux sont donc obtenus par prise de moyenne sur le V.E.R. Cependant, dans ce qui suit nous présentons une définition macroscopique de ces paramètres qui apparaissent dans ces différents modèles empiriques.



V_m faible : fluctuations associées à la structure microscopique.

V_m élevé: variations dues à la structure macroscopique.

Fig.1.6 : Schéma représentatif de volume élémentaire représentatif V_m , sur lequel est moyennée le paramètre A .

I.4 Propriété des milieux poreux

Les phénomènes se développant dans un milieu poreux dépendent des propriétés du fluide et de la géométrie de la matrice solide. Celle-ci est caractérisée par un certain nombre de grandeurs moyennes, géométriques ou statistiques. On définit les différentes caractéristiques qui apparaissent au niveau des différents modèles empiriques de description macroscopique des écoulements en milieu poreux.

I.4.1 La Porosité

La porosité d'un milieu poreux, notée ε désigne la fraction volumique de vide :

$$\varepsilon = \frac{\text{volume des pores}}{\text{volume total du milieu poreux}} \quad (1.13)$$

Nous présentons dans le tableau (2.1) les valeurs de la porosité pour différents matériaux poreux, tirées de l'ouvrage de (Muhammad 2011).

Tab .1.2: Porosité de quelques milieux poreux

Matériau	porosité ε (%)
Poudre de l'ardoise noir	57-66
Poudre de silice	37-49
garnissage aléatoire des sphères	36-43
Sable	37-50
Pierre de sable, grès	8-38
Calcaire (dolomite)	4-10
Charbon	2-12
Béton	2-7

I.4.2 La perméabilité intrinsèque d'un milieu poreux

La perméabilité traduit la facilité avec laquelle le fluide s'écoule dans le milieu poreux sous l'effet d'un gradient de pression, la perméabilité k dépend uniquement de la porosité et de la géométrie de la matrice solide. Plusieurs évaluations de la perméabilité k en fonction de et d'une dimension caractéristique de la matrice poreuse à l'échelle du pore ont été proposées. Les différentes expressions donnant la perméabilité dépendent de la

géométrie du milieu poreux. On cite quelques relations pour déterminer la valeur de perméabilité, d'autre relation sur (Glover Paul).

- La relation de Kozeny (1927) -Carman (1937), donne une estimation de la perméabilité k pour un milieu poreux non consolidé constitué d'éléments identiques de géométrie simple (Kaviany 1995, 33):

$$k = \frac{d^2 \varepsilon^2}{36k_k(1 - \varepsilon)^2} \quad (1.14)$$

d désigne une dimension caractéristique des éléments constituant la matrice poreuse (Diamètre pour des billes, arrête pour des cubes. . .)

k_k une constante de Kozeny, dépendant de la forme des grains ($3.6 < k_k < 5$) et en particulier $k_k = 4.84$ pour des grains sphériques.

- (Ergun 1952), établit une expression semblable à celle de Kozeny-Carman en considérant l'écoulement unidirectionnel d'un fluide incompressible au sein d'une colonne poreuse constituée de particules sphériques, de diamètre d , et soumise à un gradient de pression :

$$k = \frac{d^2 \varepsilon^2}{150(1 - \varepsilon)^2} \quad (1.15)$$

Ce qui correspond à une valeur de constant de Kozeny, $k_k = 4.16$.

- La modélisation des pores par des fissures capillaires de largeur w et distantes de D , conduit à une perméabilité :

$$k = \frac{w^3}{12(w + D)} = \frac{w^2}{12} \varepsilon \quad (1.16)$$

- La modélisation de la matrice poreuse comme un faisceau de tubes capillaires parallèles conduit à l'expression suivante de la perméabilité:

$$k = \varepsilon \frac{d^2}{32}, \quad \varepsilon = \frac{n(\pi d^2)}{4} \quad (1.17)$$

n est le nombre de capillaires par unité de surface perpendiculaire au sens de l'écoulement, et d est le diamètre des capillaires.

Nous présentons dans le tableau (1.3) les valeurs de la perméabilité pour différents matériaux poreux, tirées de l'ouvrage de (Bejan et Nield 1998).

Tab .1.3: Perméabilité de quelques milieux poreux

Matériau	perméabilité K (m^2)
ardoise	4.9×10^{-14} à 4.4×10^{-13}
Brique	4.8×10^{-15} à 1.2×10^{-13}
Béton	1.0×10^{-13} à 2.3×10^{-11}
Cuir	9.5×10^{-14} à 1.2×10^{-13}
Calcaire	2.0×10^{-15} à 4.5×10^{-14}
Sable	2.0×10^{-11} à 1.8×10^{-10}
Grès	5.0×10^{-16} à 3.0×10^{-12}
Silice	1.3×10^{-14} à 5.1×10^{-14}

I.4.3 La tortuosité

La description de la géométrie des pores fait intervenir la notion de connectivité, correspondant à la complexité d'un chemin continu à travers l'espace des pores. Il faut également tenir compte des "bras morts" qui sont nombreux dans les milieux peu poreux et très hétérogènes (Fig.1.7). Pour décrire ces différents aspects, on introduit le paramètre τ désignant la tortuosité, que l'on définit de la manière suivante:

$$\tau = \left(\frac{L'}{L}\right)^2 \quad (1.18)$$

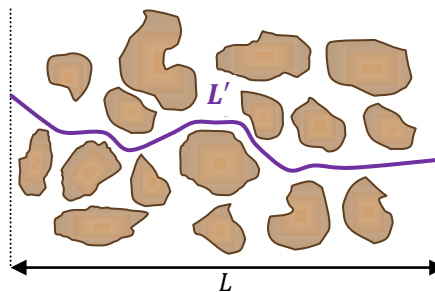


Fig.1.7 : Détermination de la tortuosité du Milieu Poreux

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

I.5 Diffusion en milieu poreux

L'introduction d'un milieu poreux modifie fortement le comportement diffusif et convectif d'un fluide (Bejan et Nield 1998). Il existe maintenant de nombreuses approches macroscopiques théoriques des écoulements en milieu poreux essayant d'intégrer au mieux la structure, même de la phase solide : changement d'échelle, de volume représentatif élémentaire, etc.

D'un point de vue macroscopique, pour ce qui concerne le régime purement diffusif, plusieurs cas de figures peuvent être envisagés en fonction de la masse volumique du fluide et de la taille des pores considérés.

Il est possible de définir quatre modes de transport diffusif différents (en fait trois plus un lié aux interfaces fluide-solide) en phase gazeuse, outre la thermodiffusion et les autres effets induits par des champs externes. Ces différents flux diffusifs deviennent plus ou moins prépondérant en fonction du nombre de Knudsen K_n , définit comme :

$$K_n = \frac{l}{d} \quad (1.19)$$

où l est le libre parcours moyen des molécules au sein du pore, et d est le diamètre moyen des pores.

Nous allons maintenant définir ces quatre modes principaux de transport diffusif qui peuvent intervenir dans plusieurs types d'écoulement fluide, Les différents modes de transport diffusif dans un milieu poreux, est présenté dans (Ho et al., 2006) (Fig.1.8).

1) Diffusion de Knudsen :

La diffusion de Knudsen, pour laquelle la densité du gaz est tellement faible que les collisions intermoléculaires peuvent être négligées par rapport aux collisions des molécules avec les parois poreuses.

2) Diffusion visqueuse :

La diffusion visqueuse, dans laquelle le fluide se comporte comme un continuum guidé par la perte de charge (gradient de pression). Les collisions intermoléculaires sont prédominantes par rapport aux collisions molécules-murs poreux.

3) Diffusion ordinaire ou Fickienne :

La diffusion Fickienne, où les espèces migrent les unes par rapport aux autres en fonction des gradients de concentration. Elle a lieu dans le régime continu, comme la diffusion visqueuse.

4) Diffusion de surface :

En fin la diffusion de surface, qui, bien que souvent négligée, peut parfois être importante. Elle correspond à un mouvement moléculaire le long des parois solides dans la couche adsorbée.

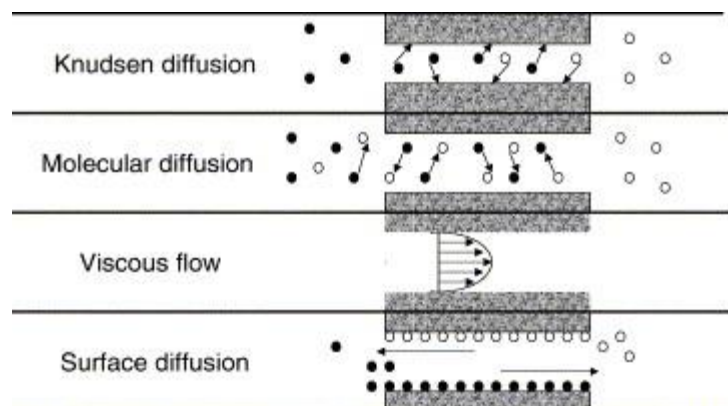


Fig.1.8 : Les différents modes de transport diffusif dans un milieu poreux (Ho et Webb 2006)

a) Diffusion de Knudsen (G. Galliéro 2003)

Dans le cas où $K_n \gg 1$, le libre parcours moyen des particules devient très grand devant le diamètre moyen des pores. Les interactions entre molécules n'existent plus et le phénomène de viscosité disparaît. Dès lors, chaque constituant du mélange gazeux diffuse indépendamment des autres

espèces et est fonction uniquement de son gradient de masse volumique. Cette diffusion moléculaire ou de Knudsen est donc uniquement gouvernée par les chocs avec la paroi solide et le flux associé, J_{iK} peut s'écrire :

$$J_{iK} = -D_{iK}\nabla\rho_i \quad (1.20)$$

Où D_{iK} est le coefficient de diffusion de Knudsen et ρ_i est la masse volumique partielle du composé i . Ce coefficient ne dépend que des paramètres géométriques et de la vitesse moléculaire moyenne \bar{V}_i . Il est souvent utile de définir un coefficient de perméabilité K_0 qui est relié au coefficient de diffusion de Knudsen par :

$$D_{iK} = (4/3)K_0\bar{V}_i \quad (1.21)$$

La valeur de K_0 ne dépend que de la géométrie du pore, de la nature de la surface et des interactions du gaz avec celle ci.

b) Diffusion visqueuse

Ce mode de transport intervient quand l'écoulement est induit par un gradient de pression ∇_p et que K_n est proche ou inférieur à 1, ce qui correspond à un régime continu contrairement au cas précédent. La description d'un tel transport diffusif peut être assimilée à la loi de Darcy (Bejan et Nield 1998). L'expression de ce flux qui est basée sur un équilibre entre les forces de type dissipation visqueuse et celles induites par le gradient de pression peut s'écrire pour un fluide pur comme :

$$J_{visc} = -\frac{\rho B_0}{\eta}\nabla_p \quad (1.22)$$

où η est la viscosité cinématique et B_0 le paramètre de flux visqueux, il est caractéristique de la nature géométrique du pore. Cette expression du flux visqueux impose, qu'il y ait condition d'adhérence aux parois afin de retrouver les résultats de la mécanique des fluides.

Par ailleurs, dans le cas d'un mélange, le flux visqueux d'une espèce i est proportionnel à sa fraction molaire x_i et peut s'écrire :

$$J_{i visc} = x_i * J_{visc} \quad (1.23)$$

c) Diffusion ordinaire ou Fickienne

De la même manière que pour le flux de diffusion visqueuse, la diffusion Fickienne induite par une différence de concentration des espèces au sein du pore devient importante dans le cas où K_n est proche ou inférieur à 1 (G. Galliéro 2003). L'expression du flux de diffusion ordinaire peut s'écrire de la même manière que celle décrite par l'équation (1.2) sans gradient de température, soit, dans un mélange binaire concernant le composé 1,

$$J_{1D} = -D^P \rho_1 \quad (1.24)$$

Où D^P est l'équivalent du coefficient de diffusion mutuelle en fluide libre D mais pondéré par la présence du milieu poreux qui induit une résistance au transfert diffusif. Il est possible de relier ce coefficient à celui utilisé en fluide libre en utilisant :

$$D^P = \frac{\varepsilon}{\tau} D \quad (1.25)$$

Où le rapport $\frac{\varepsilon}{\tau}$ est appelé le facteur de porosité-tortuosité (Bejan et Nield 1998). Ce terme de frein peut être modélisé par d'autres approches plus complexes, Mason et Malinauskas, 1983 (G. Galliéro 2003). Dans la majorité des cas il est très difficile d'en obtenir des valeurs, excepté sur des modèles simples.

d) Diffusion de surface

Du fait de la nature même de la structure des surfaces solides en contact avec le fluide, il existe parfois des effets de type diffusif aux interfaces fluide-solide qui doivent être traités indépendamment, Roldughin et Zhdanov, 2002 (G. Galliéro 2003). Ainsi les effets de mouillabilité, Almeras et al., 2000 (G. Galliéro 2003), d'adsorption différentielle, Talbot et al., 2000 (G. Galliéro 2003), liés à la nature même de l'adsorption du fluide sur les surfaces des pores induisent parfois un transport diffusif qui n'est pas pris en compte par les trois modes de transports cités précédemment. En supposant que la couche d'adsorption n'interagit pas avec le fluide « libre » du pore, excepté pour maintenir un équilibre local d'adsorption pour chaque espèce, le flux de surface peut s'écrire comme, par analogie avec la loi de Fick :

$$J_{iS} = -D_{iS}\nabla\rho_i \quad (1.26)$$

Où D_{iS} est le coefficient de diffusion de surface, qui prend en compte tous les effets liés à la géométrie du milieu poreux, à la structure de la surface ou encore à l'équilibre d'adsorption.

Il est à noter également que lorsque la diffusion de surface est couplée à un autre mode de transport diffusif, elle modifie alors fortement les conditions aux limites des écoulements étudiés et engendre différents types de glissement près des parois : *diffusive slip*, *viscous slip* ou encore *thermal creep*, Mason et Malinauskas, 1983 (G. Galliéro 2003). Ce dernier qui nous intéresse plus particulièrement correspond au fait que sous l'action d'un gradient de température parallèle aux parois du milieu poreux, un glissement thermique, le *thermal creep*, va s'établir et ainsi modifiera fondamentalement le comportement global du fluide confiné.

Le problème principal d'une telle approche décomposant les différentes contributions pouvant intervenir lors du transport diffusif de matière à travers d'un milieu poreux, est que, excepté pour quelques géométries et conditions bien particulières, il est très difficile d'évaluer séparément les différents coefficients de transport qui interviennent dans les équations (1.20), (1.22), (1.24) et (1.26).

Une analogie avec un système électrique représenté sur la (fig.1.9) peut fixer les idées quant à la manière avec laquelle ces différents modes de transport se couplent. Par ailleurs, il existe ce que l'on pourrait appeler une généralisation du formalisme qui a été présenté précédemment, qui sépare le transport diffusif en milieu poreux en seulement deux contributions : la diffusion en phase gazeuse et la diffusion de surface, Reyes et al., 2000 (G. Galliéro 2003). En fait cette approche regroupe au sein d'un seul mode de transport, la diffusion de Knudsen, la diffusion ordinaire et la diffusion visqueuse. Pour ce faire, il suffit d'exprimer la diffusion en phase gazeuse comme une fonction du gradient de potentiel chimique, qui « intègre » les différentes contributions. Il est néanmoins nécessaire de définir également

un coefficient de diffusion effectif qui peut être très différent de celui en fluide libre. Dans ce modèle la grandeur décisive qui détermine lequel des deux processus de transport est prédominant, est le rapport de la surface sur le volume total des pores considérés, Reyes et al., 2000 (G. Galliéro 2003).

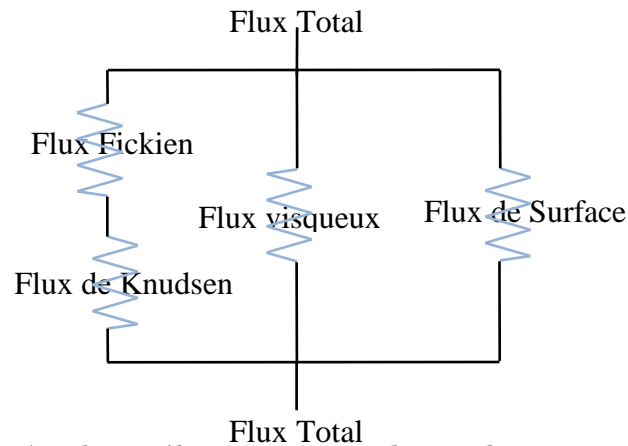


Fig.1.9 : Analogie électrique pour la combinaison des différents modes de transport diffusif dans un milieu poreux(G. Galliéro 2003).

I.6 Conclusion

Dans ce présent chapitre l'occasion nous a été présentée afin de mettre la lumière sur les différents concepts et phénomènes intervenant dans la thermodiffusion, incluant ainsi les différents paramètres décrivant ce phénomène. Dans un second temps, la description de la thermodiffusion dans les milieux poreux ont fait l'objet d'un descriptif détaillé. Ainsi, les différents modes de transport diffusif qui peuvent avoir lieu dans les milieux poreux, sont présentés. Dans le chapitre suivant nous allons présenter les modèles de la thermodiffusion dans les milieux poreux qui existent dans la littérature.

Chapitre II

Modélisation de l'effet Soret dans les Milieu Poreux

II.1 Introduction

Afin de parvenir aux lois de comportement qui gouvernent les transferts en milieux poreux, deux grandes types de démarche sont existes : L'une consiste à traiter le milieu par prise de moyenne volumique (V.E.R.), ou par une autre méthode d'homogénéisation, et l'autre est fondé sur la thermodynamique des processus irréversibles (Jean-François 2010).

Les différentes études sur l'effet Ludwig-Soret, mettent en évidence la relation entre, le coefficient de Soret, et le facteur de thermodiffusion. le coefficient de Soret est égal au facteur de thermodiffusion divisée par la température en Kelvin. Une valeur précise du coefficient de thermodiffusion est nécessaire afin de prédire l'effet de thermodiffusion correctement. Très nombreux modèles théoriques cherchant à évaluer le facteur de la

thermodiffusion ont été proposés, que se soit pour les mélanges liquides ou gazeux : la théorie phénoménologique de la thermodynamique irréversible par Haase en 1950, la théorie cinétique de la thermodynamique irréversible par Rutherford en 1954, et Dougherty et Drickamer en 1955, la théorie de la transition élémentaire d'état par Mortimer et Eyring en 1980, la cinétique des sphères dures denses et ses révisions par Lopez de Haro et al. En 1983, l'enthalpie partielle excessive et le coefficient d'activité par Guy en 1986, le mouvement brownien et la chaleur du transport par Bearman et al., en 1988, et la maximisation de la fonction de partition de deux ampoules idéalisées par Kempers en 1989(Charles-Guobing 2005). L'expression du facteur de thermodiffusion peut être obtenue en utilisant différentes combinaisons des méthodes ci-dessus. Cependant, l'écart entre les résultats expérimentaux et la prédiction théorique du facteur de thermodiffusion est très large, la prédiction théorique pourrait être considérée qualitativement correcte, (Charles-Guobing 2005).

En 1998, un nouveau modèle a été proposé sur la base de la théorie thermodynamique des processus irréversibles par Shukla et Firoozabadi en 1998(Charles-Guobing 2005). Sur la base de l'approche de Dougherty et Drickamer en 1955, Firoozabadi et al.,(2000) ont développé des relations analytiques entre les coefficients : de thermodiffusion, de diffusion moléculaire et de diffusion de pression, et les propriétés des fluides, y compris la température, la pression, la masse volumique, la fugacité, ainsi que la viscosité. Dans leur modèle, les propriétés du mélange fluide sont évaluées à l'état d'équilibre avec une équation d'état(Peng et Robinson 1976), et les propriétés de non-équilibre du mélange de fluide sont calculées sur la base des données de viscosité. Ce nouveau modèle est non seulement utilisé pour les mélanges binaires comme tous les anciens modèles, mais aussi, pour la première fois, a été étendu aux mélanges multi-composants. Il a été signalé que ce modèle est quantitativement fiable, et nettement amélioré dans la prédiction du processus de thermodiffusion dans des mélanges d'hydrocarbures, par rapport aux modèles précédents. La comparaison avec

les résultats expérimentaux ont montré des résultats prometteurs dans ce domaine de recherche, (Charles-Guobing 2005).

II.2 Modèles théoriques de la thermodiffusion

Nombreuses approches théoriques ont été proposées au cours des dernières années, principalement: l'approche thermostatique et l'approche cinétique. Les deux modèles sont basés sur des postulats de la théorie de la phénoménologie de non-équilibre thermodynamique. Dans l'approche phénoménologique, l'équation de la thermodynamique irréversible a été utilisée pour dériver une expression du facteur de thermodiffusion, comme indiqué ci-dessous:

$$\alpha_T = \frac{Q_2^* - Q_1^*}{x_1 \frac{\partial \mu_1}{\partial x_1}} \quad (2.1)$$

Où: α_T le facteur de thermodiffusion dans un mélange binaire, x_1 la fraction molaire du composant 1, μ_1 le potentiel chimique de composant 1, $Q_k^* = Q_k - H_k$, la chaleur nette du transport du composant, $k = 1,2$, H_k est l'enthalpie molaire partielle de composant k , et Q_k est la chaleur de transport de composant k . La chaleur de transport est interprétée comme étant la différence entre l'énergie requise quand une molécule de composant k se déplace sur sa position dans un champ de température et l'énergie donnée quand son trou vide est rempli par une de ses molécules voisines. Différentes expressions pour α_T étaient fondées sur des hypothèses différentes. Cependant, le concept physique de base utilisé est le même et toutes les expressions sont semblables à l'équation (2.1).

Parmi les approches thermostatiques, le modèle de Hasse et le modèle de Kempers sont représentatifs. Une brève description de ces deux modèles est présentée ci-dessous :

Dans le modèle de Hasse, 1950(Charles-Guobing 2005), la chaleur nette de transport est interpolée avec l'enthalpie molaire dans un système de masse

conservé. Avec cette hypothèse, la chaleur nette de transport est exprimée dans le format suivant avec les valeurs de l'enthalpie thermostatiques

$$Q_2^* - Q_1^* = \frac{M_1 M_2}{M_1 x_1 + M_2 x_2} \left(\frac{H_2}{M_2} - \frac{H_1}{M_1} \right) \quad (2.2)$$

Avec: H_k est l'enthalpie molaire partial du composant k, M_k est le poids moléculaire du composant k, $k = 1,2$.

Alors, l'expression du facteur de la thermodiffusion dans le modèle de Hasse peut avoir la forme suivante :

$$\alpha_T^H = \frac{M_1 H_2 - M_2 H_1}{(M_1 x_1 + M_2 x_2) x_1 \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial x_1} \right)} \quad (2.3a)$$

Puisque la limite d'un fluide idéal est donnée par:

$$\alpha_T^0 = \frac{M_1 H_2^0 - M_2 H_1^0}{(M_1 x_1 + M_2 x_2) RT} \quad (2.3b)$$

Avec R constant des gaz, le modèle de Hasse peut s'écrire sous la forme:

$$\alpha_T^H = \frac{\alpha_T^0 RT (M_1 x_1 + M_2 x_2) + M_1 (H_2 - H_2^0) - M_2 (H_1 - H_1^0)}{(M_1 x_1 + M_2 x_2) x_1 \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial x_1} \right)} \quad (2.3c)$$

L'approche de Kempers, 1989 (Charles-Guobing 2005) est basée sur une description statistique d'un système de deux ampoules, qui est similaire à un système avec un volume fixe à une pression uniforme, sans forces extérieures. Cette hypothèse est équivalente à l'expression suivante:

$$Q_2^* - Q_1^* = \frac{V_1 V_2}{V_1 x_1 + V_2 x_2} \left(\frac{H_2}{V_2} - \frac{H_1}{V_1} \right) \quad (2.4)$$

Avec V_k est le volume molaire partiel du composant $k = 1,2$

Le facteur de thermodiffusion dans le modèle de Kempers est défini comme:

$$\alpha_T^K = \frac{V_1 H_2 - V_2 H_1}{(V_1 x_1 + V_2 x_2) x_1 \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial x_1} \right)} \quad (2.5)$$

Dans les deux modèles, le facteur de thermodiffusion est exprimé en terme de l'enthalpie molaire partielle du composant, ainsi que la fraction molaire, le potentiel chimique, et le volume molaire des composants. Les deux modèles ont été testés avec l'équation d'état Soave-Redlich-Kwong (SRK), 1972 et plus tard avec l'équation d'état de Peng-Robinson, Firoozabadi, 1998 (Charles-Guobing 2005). En général, la comparaison entre les prédictions théoriques et les données expérimentales ont montré que les prédictions des modèles à la fois de Hasse et Kempers sont qualitativement correcte.

Dans l'approche cinétique, le facteur de thermodiffusion est en fonction de la chaleur de transport comme dans l'approche thermostatique. Cependant, l'hypothèse basée sur l'interpolation avec l'énergie d'activation du mouvement moléculaire, qui peut être obtenu à partir de la viscosité du mélange, donc, un calcul précis de l'énergie d'activation du mouvement est la clé de cette approche. Le modèle de Rutherford et le modèle de Dougherty et Drichamer représentent cette approche.

En raison de l'approximation inhérente affectée à la dérivation de Rutherford (1963), leur modèle est identique au modèle Hasse :

$$\alpha_T^R = \alpha_T^H \quad (2.6)$$

Dougherty et Drichamer (1955) définissent une variable, W_{Hi} , qui représente l'énergie transportée quand une molécule se déplace d'une position d'équilibre vers une autre position d'équilibre. Alors, ils ont montré que :

$$\begin{cases} Q_1^* = W_{H1} - \frac{V_1}{V_2} W_{H2} \\ Q_2^* = W_{H2} - \frac{V_2}{V_1} W_{H1} \end{cases} \quad (2.7)$$

L'énergie de transport, W_{Hi} , est évaluée à partir de l'énergie d'activation du mouvement moléculaire, ΔU_i^* , et le facteur de thermodiffusion et obtenu comme suit:

$$\alpha_T^D = \frac{(M_1V_2 + M_2V_1)(\Delta U_2^*/V_2 - \Delta U_1^*/V_1)}{2(M_1x_1 + M_2x_2)x_1 \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial x_1} \right)} \quad (2.8)$$

L'énergie d'activation ΔU_i^* est en fonction de viscosité et des propriétés thermodynamiques du composant pur i .

Les deux modèles de Dougherty et Drichamer, 1955(Charles-Guobing 2005) portent deux défauts majeurs: (1) afin d'éviter les calculs de propriétés de mélange, le facteur de thermodiffusion a été présenté en terme des propriétés de composant pur et des paramètres de solubilité, (2) les propriétés thermodynamiques des composants ont été obtenues à partir de l'approximation de la théorie de Scatchard-Hildebrand, 1950(Charles-Guobing 2005). Il est connu que les paramètres de solubilité des composants ne peuvent être estimés avec précision et la théorie de Scatchard-Hildebrand n'est pas fiable dans le traitement des mélanges non idéaux dans des conditions différentes.

Le nouveau modèle développé par Shukla et Firoozabadi, 1998, est basé sur l'approche de Dougherty et Drichamer. Afin de gagner d'exactitude, le volume traduit de l'équation d'état Peng-Robinson est utilisé pour obtenir plus de précision sur les propriétés thermodynamiques des mélanges. En raison de la difficulté d'évaluer la chaleur de transport, cette variable est liée à l'énergie nécessaire pour détacher une molécule de ses voisines dans la région de mélange, et à l'énergie abandonnée dans cette région où une molécule remplit un trou, et qui sont exprimées en termes d'énergie interne molaire partielle, et de rapport de l'énergie de vaporisation sur l'énergie de l'écoulement visqueux du composant :

$$\begin{cases} Q_1^* = W_{H1} - \Psi_1 (x_1W_{H1} + x_2W_{H2}) \\ Q_2^* = W_{H2} - \Psi_2 (x_1W_{H1} + x_2W_{H2}) \end{cases} \quad (2.9)$$

Où Ψ_i représente la fraction volumique des molécules se déplaçant dans un trou laissé par une molécule de type i dans le mélange, qui peut être évaluée en utilisant la fraction molaire et les volumes molaires partiels.

L'énergie d'activation est donnée par:

$$\begin{cases} W_{H1} = -\frac{U_1}{\tau_1} \\ W_{H2} = -\frac{U_2}{\tau_2} \end{cases} \quad (2.10)$$

Où U_i est l'énergie molaire interne partielle du composant i , et τ_i est le rapport d'énergie de vaporisation, ΔU^{vap} , par l'énergie de l'écoulement visqueuse, ΔU^{visc} .

$$\tau_i = \frac{\Delta U_i^{vap}}{\Delta U_i^{visc}} \quad (2.11)$$

Par conséquent, le facteur de thermodiffusion dans le nouveau modèle est défini par:

$$\alpha_T^F = \frac{(U_1/\tau_1 - U_2/\tau_2)}{x_1 \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial x_1}\right)} + \frac{(V_2 - V_1)(x_1 U_1/\tau_1 + x_2 U_2/\tau_2)}{(V_1 x_1 + V_2 x_2) x_1 \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial x_1}\right)} \quad (2.12)$$

Il s'agit d'une fonction explicite de l'énergie molaire interne partielle, les volumes, le rapport entre les énergies de vaporisation et d'écoulement visqueux, avec le potentiel chimique. La valeur du rapport, τ_i , est estimé à 4,0 (τ_i varie de plus de 3,5 ~ 5,0) pour la plupart des liquides non associés et des hydrocarbures.

Sur la base de ce modèle pour un mélange binaire, la chaleur nette de transport pour le composant i dans le mélange a été proposée par (Firoozabadi et al, 2000.) Comme suit:

$$Q_i^* = -\frac{\Delta \bar{U}_i}{\tau_i} + \left(\sum_{j=1}^n \frac{x_j \Delta \bar{U}_j}{\tau_j} \right) \frac{V_i}{\sum_{j=1}^n x_j V_j} \quad (2.13)$$

Le modèle de Firoozabadi a été le premier proposé pour la thermodiffusion dans les mélanges multi-composants.

Parmi tous les modèles, les performances du modèle Firoozabadi est, en général, beaucoup plus proche des données expérimentales pour différents mélanges non idéaux. L'implication des propriétés de non-équilibre du

mélange dans le modèle, ainsi que les propriétés d'équilibre contribuent pour une meilleure compréhension physique des phénomènes complexes de thermodiffusion.

II.3 Modèles appliqués dans la simulation numérique

La théorie de transports de Bird et al., 2002, et la théorie de non-équilibre thermodynamique (de Groot et Mazur, 1984) sont les bases fondamentales pour l'étude des phénomènes de thermodiffusion (Charles-Guobing 2005). La chaleur des transports, introduit par Denbigh en 1951, est un concept clé nécessaire pour comprendre l'approche physique de modélisation de la thermodiffusion, et nous adoptons l'interprétation de Firoozabadi (1998, 2000) pour la chaleur de transport dans notre simulation. Cela conduit à des expressions mathématiques pour tous les coefficients de diffusion, pour les mélanges à plusieurs composants. Toute la théorie à été développée et présentée antérieurement dans la littérature, mais pour bien comprendre et effectuer des analyses de convection thermo-solutale dans les applications milieux poreux, la dérivation théorique fondamentale est donnée ci-dessous.

II.3.1 Dérivation théorique du modèle de Firoozabadi

Les équations de bilan de masse, de mouvement, et d'énergie sont les expressions mathématiques générales pour toutes les lois de conservation physique, sur lesquelles la théorie de thermodiffusion peut être construite. L'équation de conservation générale, pour toute quantité Ψ_k d'une composante k dans un mélange fluide avec la masse volumique ρ_k , la vitesse \vec{V}_k , le flux J_k , et une source ϕ_k s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial \rho_k \Psi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}_k \rho_k \Psi_k) = -\nabla \cdot J_k + \rho_k \phi_k \quad (2.14)$$

Le premier terme de l'équation (2.14) sur le côté gauche est le taux de variation de la quantité Ψ_k par unité de volume, et le second terme est le taux de convection par unité de volume. Dans le côté droite, le premier terme est la source de flux de surface et le second est la source de volume, cité par Ishii, 1975 (Charles-Guobing 2005).

La transformation suivante d'un dérivé substantiel est utile pour la dérivation des équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie,

$$\frac{Da}{Dt} = \frac{\partial \rho a}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho a \vec{V}) \quad (2.15)$$

Où: a est une propriété locale arbitraire, qui peut être un scalaire ou un vecteur ou un tenseur. \vec{V} est la moyenne ("barycentrique") de vitesse, $\vec{V} = \sum_{k=1}^n \rho_k \vec{V}_k / \rho$, ρ_k est la masse volumique du composant k dans le mélange multi-composants, \vec{V}_k est la vitesse du composant k , n est le nombre total des composants, et ρ est la masse volumique du mélange, $\rho = \sum_{k=1}^n \rho_k$

En appliquant les lois de conservation de base à la masse, la quantité de mouvement, et l'énergie, les équations suivantes peuvent être obtenues:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{V} \quad (2.16)$$

$$\rho \frac{Dx_k}{Dt} = -\nabla \cdot J_k + \sum_{j=1}^r v_{kj} R_j \quad (2.17)$$

$$\rho \frac{DU}{Dt} = -\nabla \cdot J_q - P \nabla \cdot \vec{V} - \pi : \nabla \vec{V} + \sum_{k=1}^n J_k \cdot \vec{F}_k \quad (2.18)$$

Avec : x_k est la fraction du composant, $x_k = \rho_k / \rho$ et $\sum_{k=1}^n x_k = 1$;

J_k est le flux de diffusion de composant k , $J_k = \rho_k (\vec{V}_k - \vec{V})$ et $\sum_{k=1}^n J_k = 0$;

R_j est le taux de la réaction chimique j ;

$v_{kj} R_j$ est le taux de production du composant k par unité de volume dans la réaction chimique j , ainsi que $\sum_{k=1}^n v_{kj} = 0$ pour $j = 1, 2, \dots, r$;

U est l'énergie interne de fluide;

J_q est le flux de chaleur;

P est la pression scalaire;

π est le tenseur total de pression; et

F_k est le champs des forces agissant sur le composant k .

À partir de la théorie de non-équilibre thermodynamique, on peut obtenir pour un petit élément dans un système l'équation suivant l'entropie:

$$T \frac{Ds}{Dt} = \frac{DU}{Dt} + P \frac{DV}{Dt} - \sum_{j=1}^n \mu_j \frac{Dc_j}{Dt} \quad (2.19)$$

Donc, le taux de production d'entropie, σ , peut être écrite sous la forme suivante:

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} \left[J_q - \sum_{k=1}^n \frac{H_k}{M_k} J_k \right] \cdot \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n J_k \cdot \left\{ \frac{\nabla_T \mu_k}{M_k} - F_k \right\} - \frac{1}{T} \pi : \nabla \vec{V} - \frac{1}{T} \sum_{j=1}^r R_j A_j \quad (2.20)$$

Avec: J_q est le flux de chaleur totale;

T est la température de référence;

H_k est l'enthalpie de $k^{ième}$ composant;

M_k est le poids moléculaire de $k^{ième}$ composant;

μ_k est le potentiel chimique de $k^{ième}$ composant;

A_j est l'affinités chimique des réactions j ($j = 1, 2, \dots, r$), définie comme:

$$A_j = \sum_{k=1}^n \nu_{kj} \mu_k,$$

et $\nu_{kj} J_j$ est le taux de production chimique de $k^{ième}$ composant due au $J^{ième}$ réaction;

R_j est le taux de $J^{ième}$ réaction chimique;

r est le nombre totale des réactions chimiques.

Pour la simplicité,

$$J'_q = J_q - \sum_{k=1}^n \frac{H_k}{M_k} J_k \quad (2.21)$$

A partir de l'équation (2.20), il existe quatre forces motrices thermodynamiques, le gradient de température, le gradient de potentiel chimique et des forces externes, le gradient de vitesse et le taux de réaction chimique. Evidemment, ces quatre forces sont dans trois différents ordres tensoriels. Les deux premières forces appartiennent au même ordre 1, mais la troisième force est d'ordre 2, et le quatrième est d'ordre 0 (scalaire).

Dans la théorie de transport, il ya quatre postulats, appelés les postulats du Curie:

(1) La relation d'équilibre thermodynamique s'applique aux systèmes qui ne sont pas en équilibre, à condition que les gradients ne sont pas trop grands (postulat de quasi-équilibre).

(2) Tous les flux dans le système peuvent être écrits comme une relation linéaire impliquant toutes les forces (postulat linéaire).

(3) Aucun couplage de flux et des forces ne se produit si la différence dans les ordres tensoriels du flux et de la force est un nombre impair (postulat de Curie).

(4) En l'absence de champs magnétiques, la matrice des coefficients dans les relations flux-force est symétrique (relations réciproques d'Onsager).

Selon le postulats de Curie, chacun de la J_k doit dépendre linéairement de tous les $\nabla_T \mu_k$ ainsi que tous les ∇T , et J'_q doit dépendre linéairement de ∇T ainsi que tous les $\nabla_T \mu_k$, mais ni J_k ni J'_q peut dépendre de $\nabla \vec{V}$ ou R_k . De même, le tenseur de pression visqueuse π sera dépendant du tenseur $\nabla \vec{V}$, et aussi sur les forces motrices scalaires R_k multiplié par le tenseur unitaire. Le «couplage» entre π et les réactions chimiques n' a pas été étudié, et il n'a pas d'intérêt à la recherche de thermodiffusion. Le taux de production d'entropie dans la recherche de thermodiffusion est simplifié comme suit:

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} J'_q \cdot \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^{n-1} J_k \cdot \left\{ \frac{\nabla_T \mu_k}{M_k} - \frac{\nabla_T \mu_n}{M_n} \right\} \quad (2.22)$$

La force thermodynamique conjuguant à J'_q est le gradient de température. La force thermodynamique conjuguant à J_k est le gradient de potentiel chimique à une température constante, T , et de la force externe, ne contenant pas de terme de gradient de température. On note que J'_q est le flux conjuguant le gradient de température, et non J_q . A partir de l'équation. (2.21), il est clair que la différence entre les deux J'_q et J_q représente un

transfert de chaleur du à la diffusion de masse. Par conséquence, la quantité J'_q représente également un flux de chaleur irréversible.

Si seulement la force gravitationnelle externe existe, le terme F_k est éliminé parce que la somme totale de J_k est égal à zéro.

A partir des hypothèses de la théorie des processus irréversibles, les équations d'Onsager sont données comme suit (Onsager, 1931).

$$J'_q = -L_{qq} \frac{1}{T^2} \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^{n-1} L_{qk} \left\{ \frac{\nabla_T \mu_k}{M_k} - \frac{\nabla_T \mu_n}{M_n} \right\} \quad (2.23)$$

$$J_i = -L_{iq} \frac{1}{T^2} \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \left\{ \frac{\nabla_T \mu_k}{M_k} - \frac{\nabla_T \mu_n}{M_n} \right\} \quad (2.24)$$

Où: L_{qq} , L_{qk} , L_{iq} , L_{ik} sont les coefficients phénoménologiques, et il existe une relation symétrique entre eux, sur la base de la troisième hypothèse de la théorie des processus irréversible.

En appliquant l'expression de Gibbs-Duhem et la relation entre le potentiel chimique, la fugacité et le volume molaire partiel, le flux dans l'équation. (2.24) peut s'écrire en termes de toutes les variables thermodynamiques qui sont définies correctement:

$$J_i = -\frac{R L_{ii}}{M_i x_i M_n x_n} \left\{ \frac{M_i x_i}{L_{ii}} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{M_j x_j + M_n x_n \delta_{jk}}{M_j} \sum_{l=1}^{n-1} \frac{\partial \ln f_j}{\partial x_l} \right\}_{x_l, T, P} \nabla x_l$$

$$+ \frac{M_i x_i}{R T L_{ii}} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \left[\sum_{j=1}^{n-1} x_j \bar{V}_j + \frac{M_n x_n}{M_k} \bar{V}_k - \frac{1}{\rho_m} \right] \nabla P$$

$$+ \frac{M_i x_i M_n x_n L_{iq}}{R L_{ii}} \frac{\nabla T}{T^2} \quad (2.25)$$

Si les flux sont écrits sous la forme vectorielle réduite:

$$\vec{J} = -\rho(D^M \nabla X + D^T \nabla T + D^P \nabla P) \quad (2.26)$$

avec:

D^M le tenseur des coefficients de diffusion moléculaire;

D^T le tenseur des coefficients de thermodiffusion;

D^P le tenseur des coefficients de diffusion de pression;

∇X le tenseur des les gradient de fraction molaire;

∇P le vecteur de gradient de pression;

∇T le vecteur de gradient de température; et

\vec{J} tenseur des flux massiques de tous les composants, J_i .

De l'équation (2.25) les coefficients de diffusion peuvent être donnés par :

$$\left. \begin{aligned} D_{ij}^M &= \frac{R}{\rho_m x_n M_n} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{x_j M_j + x_n M_n \delta_{jk}}{M_j} \sum_{l=1}^{n-1} \frac{\partial \ln f_j}{\partial x_l} \Big|_{x_l, T, P} \\ D_i^T &= \frac{L_{iq}}{\rho_m T^2} \\ D_i^P &= \frac{R}{\rho_m T x_n M_n} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \left[\sum_{j=1}^{n-1} x_j \bar{V}_j + \frac{x_n M_n}{M_k} \bar{V}_k - \frac{1}{\rho_m} \right] \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

Avec: $M = \sum_{i=1}^n M_i x_i$, et δ_{ik} est la fonction delta, $\delta_{ik} = 1$, si $i = k$, et $\delta_{ik} = 0$, si $i \neq k$.

Par conséquence, les trois coefficients de diffusion sont définis en fonction des propriétés thermodynamiques de mélange et des coefficients d'Onsager. Puisque le flux de masse pour une répartition uniforme de la température a été bien développé, les coefficients d'Onsager, L_{ij} , Peuvent être déterminés (Taylor et Krishna 2003). les coefficients d'Onsager, L_{iq} , qui représentent l'effet Soret et ont été la cible de tous les modèles de thermodiffusion, peut être déterminés à partir de la dérivation suivante, qui est basée sur la théorie de Denbigh, 1951 et l'approche de Firoozabadi (2000).

Le flux de chaleur, J_q , est basée sur la thermodynamique irréversible et la théorie cinétique moléculaire impliquant la chaleur de transport Denbigh, 1951, et peut être donnée par:

$$J_q = \sum_{k=1}^n \frac{Q_k}{M_k} J_k \quad (2.28)$$

Avec Q_k est la chaleur de transport de composant k .

De plus, on a:

$$J'_q = J_q - \sum_k \frac{H_k}{M_k} J_k = \sum_{k=1}^n \frac{Q_k - H_k}{M_k} J_k = \sum_k \frac{Q_k^*}{M_k} J_k \quad (2.29)$$

Avec: $Q_k^* = Q_k - H_k$ la chaleur nette de transport de composant k .

On remplace l'équation (2.29) dans l'équation de production d'entropie (2.22) et on applique la théorie des processus irréversibles, on obtient:

$$J_i = - \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \left(\frac{Q_k^*}{M_k} - \frac{Q_n^*}{M_n} \right) \frac{1}{T^2} \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \left\{ \frac{\nabla_T \mu_k}{M_k} - \frac{\nabla_T \mu_n}{M_n} \right\} \quad (2.30)$$

On Compare l'équation (2.30) avec l'équation (2.24), il est clair que :

$$L_{iq} = \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \left(\frac{Q_k^*}{M_k} - \frac{Q_n^*}{M_n} \right) \quad (2.31)$$

Shukla et Firoozabadi (2000) modélisent la chaleur nette de transport de composant i dans un mélange comme suit:

$$Q_i^* = - \frac{\Delta \bar{U}_i}{\tau_i} + \left(\sum_{j=1}^n \frac{x_j \Delta \bar{U}_j}{\tau_j} \right) \frac{V_i}{\sum_{j=1}^n x_j V_j} \quad (2.32)$$

Où τ_i est le rapport de l'énergie de vaporisation sur l'énergie de l'écoulement visqueux du composant i ; V_i est le volume molaire du constituant i et $\Delta \bar{U}_j$ est l'énergie molaire interne partielle du composant i . Par conséquence, le modèle Firoozabadi est complètement établi, théoriquement.

Pour un système binaire sans présence de diffusion de pression, - le cas de cette étude - le flux molaire d'un composant peut être représenté comme suit:

$$\vec{J}_{m1} = -\rho_m(D^M \nabla x_1 + D^T \nabla T) \quad (2.33)$$

De cette manière, le coefficient de Soret peut être défini comme :

$$S_T = \frac{D^T}{D^M x_1 (1 - x_1)} \quad (2.34)$$

La diffusion de pression est généralement ignorée dans les approches expérimentales, en raison de leur importance de contribution qui est d'environ 3 fois plus petit que celle de la thermodiffusion.

II.3.2 Transfert de masse dans un mélange multicomposants

Pour un gaz parfait, les coefficients de diffusion moléculaire peuvent être obtenus par une approche théorique. Toutefois, en cas d'un mélange réel, des expressions empiriques sont généralement utilisées (Taylor et Krishna, 1993). Pour un mélange binaire d'hydrocarbure, l'expression donnée par Hayduk-Minhas en 1982 (Taylor et Krishan, 1993) s'est révélée la meilleure.

$$D_{ij}^0 \simeq 13.3 \times 10^{-8} V_i^{-0.71} \eta_j^{(10.2/V_i - 0.791)} T^{1.47} \quad (2.35)$$

Où D_{ij}^0 est le coefficient de diffusion moléculaire du $i^{\text{ème}}$ composant infiniment dilué dans un mélange binaire [cm^2/s]; V_i est le volume molaire spécifique du composant i , [cm^3/mol]; η_j est la viscosité de la $j^{\text{ème}}$ composant, [cp ou mPa.s], et T est la température du mélange, [K]. Pour un mélange multi-composants, le coefficient de diffusion moléculaire est calculé sur la base des coefficients binaires. L'expression utilisée ici est basée sur l'approche de Taylor et Krishana (1993),

$$\tilde{D}_{ij} \simeq (D_{ij}^0)^{x_j} (D_{ji}^0)^{x_i} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^n (D_{ik}^0 D_{jk}^0)^{x_k/2} \quad (2.36)$$

Où: \tilde{D}_{ij} est le coefficient de diffusion moléculaire du $i^{\text{ème}}$ composant dans le mélange multi-composants.

À partir de la théorie de transfert massique multi-composants, le flux de masse est donné par:

$$\vec{J}_m = -\rho_m B^{-1} \Gamma \nabla x \quad (2.37)$$

Où B et Γ sont des matrices, dont les éléments sont définis par les formules suivantes:

$$\begin{aligned}
 B_{ij} &= -x_i \left(\frac{1}{\bar{D}_{ij}} - \frac{1}{\bar{D}_{in}} \right), & i \neq j \\
 B_{ij} &= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x_k}{\bar{D}_{ik}} + \frac{x_i}{\bar{D}_{in}}, & i = j
 \end{aligned}
 \tag{2.38}$$

et

$$\Gamma_{ij} = x_i \frac{1}{f_i} \frac{\partial f_i}{\partial x_j}
 \tag{2.39}$$

De la loi de Fick, le flux de masse peut être écrit comme suit:

$$\vec{J}_m = -\rho_m D^M \nabla x
 \tag{2.40}$$

En comparant l'équation (2.40) avec l'équation (2.37), nous avons,

$$D^M = B^{-1} \Gamma
 \tag{2.41}$$

Par conséquent, les coefficients de diffusion, D_{ij}^M , peuvent être déterminées sur la base des éléments des matrices B et Γ .

II.3.3 Procédures pour le calcul des coefficients des diffusions

Après la dérivation du modèle de Firoozabadi pour un mélange multi-constituants, la détermination du coefficient de transfert de masse, et le coefficient de thermodiffusion et le coefficient de diffusion de pression peut être effectuée selon la procédure suivante:

1. Spécifier un mélange, et fournir les paramètres de chaque composant pur;
2. Spécifier les paramètres environnementaux connus, T , P et x_i .
3. Calculer la masse volumique, l'enthalpie molaire partielle, l'énergie, et la fugacité, etc.
4. Calculer les coefficients de diffusion moléculaire, (les matrices (B_{ij}) et (Γ_{ij}));
5. Calculer les coefficients de diffusion de Fick, la matrice D (D_{ij}^M);

6. Calculer les coefficients de Onsager, la matrice L (L_{ij});
7. Calculer les coefficients de thermodiffusion et tous les termes de flux de masse.
8. Résoudre le système d'équation pour obtenir de nouveaux paramètres T , P et x_i .

II.3.4 L'entropie et la thermodiffusion

Dans un mélange binaire, sans aucune réaction chimique, mais avec une force uniforme externe (le champ de gravité), de l'équation (2,22) la vitesse de production d'entropie, peut être simplifiée comme suit:

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} J'_q \cdot \nabla T - \frac{1}{T} J_1 \cdot \nabla_T (\mu_1 - \mu_2) \quad (2.42)$$

Basant sur le principe variationnel d'Onsager, la production totale d'entropie du système s'approche d'une valeur minimale pendant le processus de thermodiffusion après l'application d'un champ de gradient de température et l'atteinte d'état d'équilibre, ce qui est démontré par Prigogine en 1947.

$$\int_V \sigma dV = - \int_V \left[\frac{1}{T^2} J'_q \cdot \nabla T + \frac{1}{T} J_1 \cdot \nabla_T (\mu_1 - \mu_2) \right] dV \quad (2.43)$$

L'équation (2.43) peut être utilisée pour répondre pourquoi une composante se déplace vers le côté chaud dans le gradient de température de la cavité et l'autre va en sens inverse, Charles-Guobing(2006).

II.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenter les modèles de la thermodiffusion en milieux poreux, et les meilleurs méthodes d'estimation des coefficients de diffusion et de thermodiffusion dans ses milieux, que se soit pour un mélange binaire (notre cas), ou un mélange multi-constituants.

Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les modèles physiques et mathématiques, et les équations qui gèrent le phénomène de la thermodiffusion dans un milieu poreux.

Chapitre 3

Géométrie du problème et Modèle Mathématique adopté

III.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons rappeler les différentes équations de conservation en milieu libre. On présente dans un premier temps, les équations de continuité, de Navier-Stokes et de l'énergie, et l'équation de conservation des espèces pour un fluide multi-constituants, ou pour un fluide binaire. Nous présentons ensuite les modèles d'écoulements en milieu poreux, finalement on explique le modèle physique et mathématique choisi.

III.2 Formulation mathématique

III.2.1 Equations de conservation

Pour obtenir les équations fondamentales de la mécanique des fluides plusieurs méthodes sont existes. Nous considérons un volume de contrôle élémentaire pour analyser les variations au cours du temps de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces. Cette méthode qui consiste à faire un bilan des quantités transportées et produites au cours du temps dans un volume élémentaire de contrôle a été largement étudiée et peut aisément se retrouver dans des ouvrages de référence, Platten et Legros, 1984, et Bird et al., 1960.(El Hajjar 2008)

III.2.1.1 Théorèmes fondamentaux

Soit D un domaine de contrôle de volume V et de surface Σ pris dans le milieu continu Ω que l'on étudie (Fig. 2.1). Soit M la position d'un élément de volume élémentaire du fluide dV appartenant à D , que l'on suit au cours du temps. Soit f une fonction définie et continue sur D , désignant une grandeur intensive.

Le taux de variation de l'intégrale de f sur le volume V en fonction du temps est défini par :

$$\frac{d}{dt} \int_D f dV = \int_D \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{\Sigma} f \vec{V} \cdot \vec{n} d\Sigma \quad (3.1)$$

Où \vec{V} désigne la vitesse locale à la surface de contrôle et \vec{n} la normale sortante du volume de contrôle considéré.

$\frac{d}{dt}$ désigne la dérivée particulière c'est-à-dire la dérivée obtenue lorsqu'on suit le domaine D de fluide dans son mouvement.

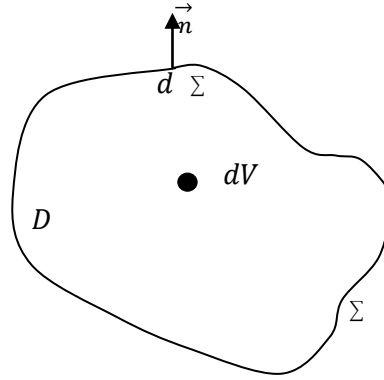


Fig.3.1: Un élément de volume du domaine fluide

On peut également transformer le dernier terme de l'équation précédente en intégrale de volume en utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky, autrement appelé théorème de la divergence :

$$\int_{\Sigma} f \vec{V} \cdot \vec{n} d\Sigma = \int_D \vec{\nabla} \cdot (f \vec{V}) dV \quad (3.2)$$

En combinant (3.1) et (3.2), on peut alors écrire le théorème de transport (ou règle de Leibnitz)

Sous la forme:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D f dV = \int_D \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (f \vec{V}) \right] dV \quad (3.3)$$

On utilisera également un autre lemme fondamental utilisé en mécanique des fluides qui permet d'obtenir une équation locale à partir de la connaissance d'une relation intégrale pour tous les domaines D appartenant à une famille dense d'ouverts de Ω :

$$\int_D f(\vec{X}, t) dV = 0 \quad \forall D \in \Omega \quad \Rightarrow \quad f(\vec{X}, t) = 0 \quad \forall M \in \Omega \quad (3.4)$$

Où \vec{X} est le vecteur de position.

III.2.1.2 Equation de conservation de la masse

La masse contenue dans le volume de contrôle D , où ρ désigne la masse volumique locale (i.e. masse par unité de volume), est donnée par :

$$m = \int_D \rho(\vec{X}, t) dV \quad (3.5)$$

Dans le cas où, il n'y a ni création, ni disparition de matière dans D au cours de son mouvement et ce quel que soit le volume considéré, on peut donc écrire :

$$\frac{d}{dt} \int_D \rho(\vec{X}, t) dV = 0 \quad (3.6)$$

En appliquant successivement (3.3) et (3.4) à l'équation précédente, on obtient l'équation locale suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (3.7)$$

Cette équation traduit la conservation de la masse au cours du temps dans le volume de contrôle D . Cette équation est également appelée : équation de continuité.

III.2.1.3 Equation de conservation de la quantité de mouvement

La quantité de mouvement du fluide contenu dans un volume de contrôle D est :

$$\int_D \rho \vec{V} dV \quad (3.8)$$

On va appliquer la deuxième loi de Newton, aussi appelée principe fondamental de la dynamique pour étudier la variation de la quantité de mouvement au cours du temps. D'après ce principe fondamental, la variation de la quantité de mouvement du fluide contenu dans D au cours du temps est égale à la somme des forces extérieures qui lui sont appliquées :

$$\frac{d}{dt} \int_D \rho \vec{V} dV = \int_D \vec{f} dV + \int_{\Sigma} \vec{T} d\Sigma \quad (3.9)$$

Si on se restreint à notre problème, il faudrait remplacer \vec{f} par $\rho \vec{g}$ donc $\vec{f} = -\rho g \vec{e}_z$ et \vec{T} par $\bar{\sigma} \cdot \vec{n}$. Si on développe le terme $\bar{\sigma}$ on obtient : $\bar{\sigma} = -P\bar{I} + 2\mu\bar{D} + \gamma(\vec{\nabla} \cdot \vec{V})\bar{I}$, $\bar{D} = \frac{1}{2}[\vec{\nabla}\vec{V} + {}^t(\vec{\nabla}\vec{V})]$. μ est le coefficient de viscosité de cisaillement pur (ou viscosité dynamique) et γ le coefficient de viscosité volumique. L'hypothèse de Newton-Stokes, est valable pour les liquides et les gaz monoatomiques, conduit à $\gamma = -23\mu$ selon Bird et al., 1960.(El Hajjar 2008).

Dans la suite, nous aurons recours au théorème de Reynolds (Chassaing 2000) : $\frac{d}{dt} \int_D \rho \vec{V} dV = \int_D \rho \frac{d\vec{V}}{dt} dV$ pour établir les équations de Navier-Stokes.

Dans le cas où $\mu = cste$, si on transforme l'intégrale de surface de l'équation (3.9) en une intégrale de volume à partir du théorème de divergence (3.2) et que l'on applique successivement les lemmes (3.3) et (3.4), on peut écrire :

$$\rho \frac{d\vec{V}}{dt} = \rho \vec{g} - \vec{\nabla}P + (\gamma + \mu) \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (3.10)$$

III.2.1.4 Equation de conservation de l'énergie

On cherche à établir un bilan d'énergie interne U pour le fluide contenu dans le domaine D que l'on suit dans son mouvement.

On doit tenir compte de l'énergie cinétique E_C et de l'énergie interne U du fluide monoconstituant, ou du fluide multi-constituants, contenu dans D . On écrit alors le premier principe de la thermodynamique, appliqué au fluide contenu dans D . Ce premier principe est énoncé de la façon suivante : la dérivée particulière, à chaque instant t , de la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie interne, est égale à la somme de la puissance mécanique P_e

fournie à D par les forces extérieures (actions : de contact, et à distance) et de la puissance calorifique \dot{Q} fournie à D par l'extérieur :

$$\frac{d(E_c + U)}{dt} = P_e + \dot{Q} \quad (3.11)$$

Pour obtenir un bilan sur l'énergie interne U , on introduit le théorème de l'énergie cinétique, qui se déduit de la conservation de la quantité de mouvement et s'énonce de la façon suivante: à chaque instant, la dérivée particulière de l'énergie cinétique d'un domaine fluide D que l'on suit au cours du temps, est égale à la puissance de toutes les forces extérieures P_e et intérieures P_i appliquées à D .

$$\frac{dE_c}{dt} = P_e + P_i \quad (3.12)$$

En combinant les relations (3.11) et (3.12), on trouve la relation (3.13)

$$\frac{dU}{dt} = \dot{Q} - P_i \quad (3.13)$$

Si on décompose les différents termes qui composent cette équation on a :

$$*) U = \int_D \rho e \, dV$$

où e représente l'énergie interne par unité de masse.

$$*) \dot{Q} = \int_{\Sigma} q(\vec{X}, t, \vec{n}) \, d\Sigma + \int_D r(\vec{X}, t) \, dV$$

où $q = -\vec{q} \cdot \vec{n}$ représente la densité surfacique du flux de chaleur reçue par conduction et où r représente la puissance volumique dissipée localement sous forme de chaleur.

$$*) P_i = - \int_D [\bar{\sigma} : (\vec{\nabla} \vec{V})] \, dV \quad \text{où} \quad [\bar{\sigma} : (\vec{\nabla} \vec{V})] = \sigma_{ik} V_{i,k} = -P(\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) + (\bar{\tau} : \vec{\nabla} \vec{V})$$

En explicitant les différents termes, l'équation (3.13) devient :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_D \rho e \, dV &= \int_{\Sigma} q(\vec{X}, t, \vec{n}) \, d\Sigma + \int_D r(\vec{X}, t) \, dV - \int_D P(\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \, dV \\ &+ \int_D [\bar{\tau} : (\vec{\nabla} \vec{V})] \, dV \end{aligned} \quad (3.14)$$

En appliquant successivement à l'équation que nous venons d'obtenir, le théorème de la divergence (3.2) et le lemme (3.4), on obtient l'équation locale suivante :

$$\rho \frac{de}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q} + r - P \vec{\nabla} \cdot \vec{V} + (\bar{\tau} : \vec{\nabla} \vec{V}) \quad (3.15)$$

où d'après la loi de Fourier :

$$\vec{q} = -\lambda \vec{\nabla} T \quad (3.16)$$

Cette relation relie de façon linéaire le vecteur de densité de flux de chaleur par conduction q avec le gradient de température. Le coefficient de proportionnalité entre ces deux termes étant la conductivité thermique λ du fluide, ou du mélange fluide, étudié.

Finalement, nous avons donc :

$$\rho \frac{de}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) + r - P \vec{\nabla} \cdot \vec{V} + (\bar{\tau} : \vec{\nabla} \vec{V}) \quad (3.17)$$

L'équation de conservation de l'énergie (3.17) est plus souvent exprimée en fonction de la température du fluide et de sa capacité calorifique à pression constante plutôt qu'en fonction de son énergie interne massique. Il nous faut donc exprimer e en fonction de T et P . Pour ceci on introduit l'enthalpie massique : $h = e + \frac{P}{\rho}$ qui s'exprime de la façon suivante Platten et Legros, 1984 (El Hajjar 2008):

$$dh = C_p dT + \frac{1}{\rho} (1 - \beta_T) dP \quad (3.18)$$

où : $-\beta_T$ est le coefficient d'expansion thermique.

$-C_p = \left(\frac{dh}{dT}\right)_P$ est la chaleur spécifique par unité de masse à pression constante.

A partir de la relation d'enthalpie massique, on peut retrouver l'expression de e . La relation (3.18) permet ensuite d'exprimer la dérivée particulière de e en fonction de $\frac{dT}{dt}$ et $\frac{dP}{dt}$.

Enfin, en identifiant la dérivée particulière de e et l'équation (3.17), on obtient finalement l'équation de conservation de l'énergie d'un fluide incompressible sous la forme générale :

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} - \beta_T T \frac{dP}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) + r + (\bar{\tau} : \vec{\nabla} \vec{V}) \quad (3.19)$$

Il est maintenant possible de simplifier cette équation. On peut notamment supposer pour notre cas d'étude que r soit négligeable. En effet, le terme r représente la somme des puissances calorifiques dissipées par l'ensemble des sources de chaleur présentes au sein du fluide. Ces sources d'énergie peuvent être de diverses natures (radiative, nucléaire, électromagnétique, etc.). Dans notre problème, la seule source d'énergie à prendre en compte est la différence entre les flux de chaleur absorbés. c-à-d, le faible écart de température imposé dans la cellule d'étude, on peut considérer que cet écart soit suffisamment faible pour justifier le fait que r soit négligeable. La puissance volumique liée aux variations de pression $\beta_T \frac{dP}{dt}$ et de la dissipation visqueuse $(\bar{\tau} : \vec{\nabla} \vec{V})$ sont négligeables devant le terme diffusif $\vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T)$.

III.2.1.5 Equation de conservation des espèces

Considérons le mélange fluide comme un système composé de N espèces parfaitement miscibles et distinctes. La concentration massique ρ_k de l'espèce k , contenue dans le volume de contrôle D est définie de la façon suivante : $\rho_k = \frac{m_k}{V}$ où m_k désigne la masse de l'espèce k contenue dans le volume total V du mélange, on déduit alors :

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (3.20)$$

Où ρ est la masse volumique du mélange.

La variation de masse de l'espèce k contenue dans le volume de contrôle D est produite par le flux de matière de l'espèce (k) traversant la surface Σ pour pénétrer dans D et par la réaction chimique produisant de la masse $\dot{\omega}_k$ par unité de volume et de temps. Cette variation, valable pour tout $k = 1, N$, s'exprime mathématiquement par la relation :

$$\int_D \frac{d\rho_k}{dt} dV = - \int_{\Sigma} \rho_k \vec{V}_k \cdot \vec{n} d\Sigma + \int_D \dot{\omega}_k dV \quad (3.21)$$

Où \vec{V}_k est la vitesse moyenne locale de l'espèce (k).

On peut ignorer le terme dû aux réactions chimiques dans notre cas, d'où $\dot{\omega}_k = 0$.

En appliquant à l'équation (3.21), valable pour tout $k = 1, N$, (3.2) et le lemme (3.4), on retrouve simplement l'équation du bilan de l'espèce (k) :

$$\frac{d\rho_k}{dt} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{V}_k) = 0 \quad (3.22)$$

On peut également reformuler cette équation en faisant intervenir le flux convectif qui apparaît si on exprime le vecteur densité de flux de diffusion massique de l'espèce (k) :

$$\vec{J}_k = \rho_k (\vec{V}_k - \vec{V}) \quad (3.23)$$

$$\text{Avec: } \sum_{k=1}^N \vec{V}_k = \vec{0}$$

On définit ensuite la fraction massique C_k de l'espèce (k) comme étant : $C_k = \frac{\rho_k}{\rho}$, pour tout $k = 1, N$, tel que : $\sum_{k=1}^N C_k = 1$ et on obtient à partir de l'équation (3.22) et la loi de conservation de la masse (3.7) :

$$\rho \frac{dC_k}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_k \quad (3.24)$$

Cette relation traduit la conservation de la masse de l'espèce k en absence de réaction chimique.

Dans le cas qui nous intéresse, on est en présence d'un fluide binaire pour lequel on tient compte de l'effet Soret (i.e. gradient de température qui induit un gradient de concentration). Le vecteur flux de matière du constituant de fraction massique C est donné par :

$$\vec{J} = -\rho D \vec{\nabla} C - \rho C(1 - C) D_T \vec{\nabla} T \quad (3.25)$$

Avec ;

- C : fraction massique du constituant le plus dense du mélange.
- D_T : coefficient de thermodiffusion.
- D : coefficient de diffusion de Fick ou coefficient de diffusion isotherme du constituant considéré dans le mélange.

Finalement, l'équation (3.24) valable pour l'espèce (k) donne dans le cas d'un mélange binaire :

$$\rho \frac{dC}{dt} = \vec{\nabla} \cdot [\rho D \vec{\nabla} C + \rho C(1 - C) D_T \vec{\nabla} T] \quad (3.26)$$

III.2.1.6 Approximation de Boussinesq

Nous reprenons ici ce que l'on entend par l'approximation de Boussinesq :

- La masse volumique ρ d'un fluide (liquide, gaz, mélange liquide ou gazeux) est considérée comme étant constante dans tous les termes des équations de conservation, c'est-à-dire $\rho(T, P) = \rho(T_0, P_0) = \rho_0 = c^{ste}$ (T_0 et P_0 sont la température et la pression de référence) sauf dans le terme générateur de la convection (c'est-à-dire dans le terme de poussée d'Archimède). Dans ce terme ρ est alors une fonction de la température et de la fraction massique :

$$\rho(T, C) = \rho_0 [1 - \beta_T(T - T_0) - \sum_k \beta_k(C - C_{0k})] \text{ où :}$$

- ρ_0 est la masse volumique à la température et aux fractions massiques de référence.
- T_0 et C_{0k} sont des valeurs de référence (valeurs initiales ou moyennes).
- k variant de 1 à N correspondant au nombre d'espèces en présence.
- β_T est le coefficient d'expansion thermique du fluide (mélange fluide): $\beta_T = -\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{C_k}$

$-\beta_k$ est le coefficient d'expansion massique de l'espèce k : $\beta_k = -\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial C} \right)_{T, C_{j \neq k}}$

– Les autres propriétés thermophysiques du fluide ($\mu, \gamma, \lambda, C_p$) sont supposées constantes.

III.2.2 Modèles d'écoulements en milieu poreux

III.2. 2.1 Equation de continuité

La méthode de prise de moyenne permet d'établir une équivalence entre le milieu dispersé réel et le milieu continu fictif. On introduit la notion de vitesse de filtration \vec{V} , qui correspond à la vitesse moyenne du fluide prise sur un V.E.R. (voir chapitre 01). En comparant cette vitesse à la vitesse moyenne du fluide dans les pores, \vec{V}_p , ou vitesse interstitielle, on a la relation :

$$\vec{V} = \varepsilon \vec{V}_p \quad (3.27)$$

L'équation de conservation de la masse s'écrit alors sous la forme :

$$\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (3.28)$$

Où ρ est la masse volumique du fluide saturant.

III.2.2.2 Loi de Darcy

La formulation adoptée dans notre étude repose sur la validité de la loi de Darcy pour décrire l'écoulement au sein d'un milieu poreux. Comme nous allons le voir dans cette section, cette loi n'est valable que pour des écoulements à basses vitesses et pour des milieux de porosité pas trop élevée. Si les écarts de température imposés ne sont pas trop importants, les vitesses du fluide sont suffisamment faibles pour que les écoulements puissent être considérés comme darcéens, la porosité des milieux poreux utilisés dans la plupart de nos études ne dépasse pas les limites de validité de cette loi.

III.2.2.3 Ecoulement unidirectionnel à basse vitesse

Si l'écoulement se fait à une vitesse faible, on peut admettre en écoulement stationnaire, que les gradients de pression sont proportionnels à la vitesse

d'écoulement dans les pores. Cette relation de proportionnalité, valable pour tous les pores pris séparément, se conserve si on fait la moyenne du débit et des gradients de pression sur un volume grand devant la taille des pores.

Pour un échantillon de longueur L et de section S , le débit volumique Q_v , vérifie la relation :

$$Q_v = \frac{K}{\mu} S \frac{\Delta P}{L} \quad (3.29)$$

Le rapport du débit volumique total par unité de surface du matériau : $\frac{Q_v}{S}$ représente la vitesse de filtration du fluide \vec{V} , qui correspond à la vitesse moyenne du fluide prise sur un V.E.R.

Cette vitesse de filtration, \vec{V} , vitesse macroscopique, est à distinguer de la vitesse interstitielle, notée \vec{V}_p qui correspond à une vitesse moyenne du fluide dans les pores.

Cette vitesse réelle \vec{V}_p à l'intérieur des pores peut être très supérieure à \vec{V} , car seule une partie du volume total du matériau poreux est disponible pour le transport du fluide.

Dans la relation (3.29), μ représente la viscosité dynamique du fluide saturant, et K représente la perméabilité du milieu poreux.

III.2.2.4 Equation de Darcy généralisée

A trois dimensions, l'équation (3.29) se généralise, pour un milieu isotrope à :

$$\vec{V} = -\frac{K}{\mu} (\vec{\nabla}P + \rho \vec{g}) \quad (3.30)$$

Où ρ désigne la masse volumique du fluide saturant le milieu poreux.

III.2.2.5 Limites de validité de la loi de Darcy

Pour les écoulements en milieu poreux, on définit un nombre de Reynolds de pore basé sur la vitesse interstitielle \vec{V}_p et une longueur d , caractéristique de la dimension des pores soit :

$$Re = V_p \frac{d}{\nu} \quad (3.31)$$

où $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ désigne la viscosité cinématique du fluide. On prend souvent $d = K^{1/2}$, pour le calcul du nombre de Reynolds de pore.

Dybbs et Edwards, 1984 à l'aide des mesures de vitesse, distinguent plusieurs régimes d'écoulement que l'on peut classifier de la manière suivante (El Hajjar 2008):

1. Pour des nombres de Reynolds de pore inférieurs à 1, le régime d'écoulement est laminaire, les forces visqueuses sont prédominantes et la loi de Darcy est applicable.

2. Lorsque Re est compris entre 1 et 10, les couches limites au niveau des parois solides des pores se développent. En dehors de ces couches limites apparaît un régime d'écoulement inertiel. Les forces d'inertie deviennent alors importantes et il n'y a plus de proportionnalité entre le gradient de pression et la vitesse de filtration : la loi de Darcy n'est plus applicable. Ce régime d'écoulement stationnaire laminaire, persiste jusqu'à un nombre de Reynolds de 150 environ.

3. Pour des nombres de Reynolds de pore compris entre 150 et 300, un régime d'écoulement laminaire instationnaire se développe. Ce régime est d'abord oscillatoire résultant de la superposition de plusieurs modes de période et d'amplitude distinctes.

4. Au-delà de Re de l'ordre de 300, le régime d'écoulement devient chaotique, et présente les caractéristiques d'un écoulement turbulent.

III.2.3 Transfert de chaleur en milieu poreux

Tout comme l'équation de Darcy décrivant l'écoulement du fluide au sein du milieu poreux, l'équation de l'énergie, traduisant le transfert de chaleur dans le milieu poreux fait appel au concept de milieu continu fictif, équivalent au milieu poreux réel.

Pour établir l'équation de transfert de chaleur, la démarche est la suivante:

- Formulation des équations microscopiques à l'échelle du pore.
- Prises de moyennes effectuées sur les équations microscopiques qui permettent le passage de l'échelle du pore à celle du milieu homogène.

Avant de formuler ces équations de description du transfert de chaleur nous précisons les hypothèses:

- Les termes de dissipation visqueuse sont supposés négligeables, hypothèse justifiée si les vitesses de filtration restent relativement faibles.
- Les caractéristiques thermiques des phases solide et fluide telles que les capacités calorifiques volumiques et les conductivités thermiques, sont supposées constantes et donc indépendantes de la température.

A l'échelle du pore, le système décrivant le transfert de chaleur est le suivant :

En tout point M du milieu poreux, à l'exception de la surface de contact entre le solide et le fluide, la loi de Fourier s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}[(\rho c)_i T_i] + \vec{v} \cdot [(\rho c)_i T_i \vec{V}_i] = \vec{v} \cdot (\lambda_i \vec{\nabla} T_i) \quad (3.32)$$

Où $i = f$ si M appartient à la phase fluide et $i = s$ s'il appartient à la phase solide. Donc $\vec{V}_s = 0$ et \vec{V}_f désigne la vitesse locale du fluide à l'échelle du pore.

Les conditions aux limites associées à l'interface solide-fluide, sont les suivantes :

$$\begin{cases} T_s = T_f \\ (\lambda_s \vec{\nabla} T_s) \cdot \vec{n} = (\lambda_f \vec{\nabla} T_f) \cdot \vec{n} \\ \vec{V}_f = 0 \end{cases} \quad (3.33)$$

où n désigne le vecteur normal à l'interface, λ_i la conductivité thermique de la phase i et $(\rho c)_i$ la capacité calorifique volumique de la phase i .

Après avoir écrit ces équations à l'échelle microscopique, on définit des grandeurs moyennes qui permettent de décrire le transfert de chaleur à l'échelle du milieu homogène par l'équation classique des milieux continus fluides à savoir :

$$\frac{\partial}{\partial t} [(\rho c)_m T_m] + \vec{\nabla} \cdot [(\rho c)_m T_m \vec{V}_m] = \vec{\nabla} \cdot (\lambda_m \vec{\nabla} T_m) \quad (3.34)$$

La détermination de ces grandeurs moyennes, $(\rho c)_m$, T_m , λ_m s'effectue alors par identification de l'équation (3.34) avec celles obtenues par prise de moyenne sur un V.E.R., des équations (3.32) [69, 26].

Cette identification conduit aux relations suivantes :

$$(\rho c)_m = \epsilon (\rho c)_f + (1 - \epsilon)(\rho c)_s \quad (3.35)$$

$$\vec{V}_m = \frac{(\rho c)_f}{(\rho c)_m} \vec{V} \quad (3.36)$$

Où \vec{V} est la vitesse de filtration.

III.2.3.1 Les deux modes de description adoptés

Deux modèles de description du transfert de chaleur en milieu poreux sont alors proposés : Combarous et Bories, 1974, et Combarous, 1970 (El Hajjar 2008) selon que l'on retient l'une des deux hypothèses suivantes :

- La première utilise le concept de conductivité thermique globale équivalente.
- La seconde conduit à distinguer les températures moyennes des phases solide et fluide et à introduire un coefficient d'échange fini entre les deux phases.

a) Concept de conductivité thermique équivalente

Cette hypothèse qui assimile le milieu poreux à un milieu fictif unique consiste à admettre que dans tout le volume élémentaire sur lequel on effectue un bilan énergétique, les températures moyennes des phases solide \bar{T}_s et fluide \bar{T}_f sont égales soit :

$$\bar{T}_s = \bar{T}_f = T \quad (3.37)$$

Cette hypothèse, qui implique un coefficient de transfert infini entre les deux phases, conduit à l'équation de l'énergie suivante analogue à (3.34) :

$$\frac{\partial}{\partial t} [(\rho c)^* T] + \vec{\nabla} \cdot [(\rho c)_f T \vec{V}] = \vec{\nabla} \cdot (\lambda^* \vec{\nabla} T) \quad (3.38)$$

Où \vec{V} est la vitesse de filtration.

$(\rho c)^* = \varepsilon (\rho c)_f + (1 - \varepsilon)(\rho c)_s$ est la capacité calorifique volumique du milieu poreux équivalent. λ^* est la conductivité thermique globale, elle dépend, de manière complexe, des conductivités des phases solide et fluide et de la texture du milieu poreux.

De nombreux modèles de conductivité thermique ont été développés qui permettent l'estimation de λ^* , tels que $\lambda^* = \varepsilon \lambda_f + (1 - \varepsilon)\lambda_s$ ou $\frac{1}{\lambda^*} = \frac{\varepsilon}{\lambda_f} + \frac{(1-\varepsilon)}{\lambda_s}$ dans le cas de milieu poreux constitués par des éléments très réguliers tels que des sphères par exemple. Mais il est généralement indispensable de recourir à la détermination expérimentale pour une évaluation précise de λ^* .

b) Emploi du coefficient de transfert fini entre les phases solide et fluide

Cette hypothèse consiste à distinguer les températures moyennes des phases solide \bar{T}_s et fluide \bar{T}_f définies au paragraphe précédent, moyennes prises dans un volume élémentaire de référence. On introduit un coefficient d'échange, h , fini entre les deux phases Combarous et Bories, 1975, (El Hajjar 2008). Le milieu est alors considéré comme équivalent à deux milieux continus. Le modèle mathématique correspondant comprend deux équations

de transfert de chaleur obtenues en faisant un bilan énergétique propre à chacune des phases :

Pour la phase fluide :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon(\rho c)_f \bar{T}_f] + \vec{\nabla} \cdot [(\rho c)_f \bar{T}_f \vec{V}] = \vec{\nabla} \cdot (\lambda_f \vec{\nabla} T) + h (\bar{T}_s - \bar{T}_f) \quad (3.39)$$

Pour la phase solide :

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \varepsilon)(\rho c)_s \bar{T}_s] = \vec{\nabla} \cdot (\lambda_s \vec{\nabla} \bar{T}_s) + h (\bar{T}_f - \bar{T}_s) \quad (3.40)$$

Ce système d'équations (3.39) et (3.40) introduit la quantité de chaleur transmise par le fluide au solide sous la forme: $h (\bar{T}_f - \bar{T}_s)$. Le coefficient h n'est pas constant et ses variations ne sont pas à priori connues.

c) Choix entre les deux modèles

Le premier modèle (3.38) est le plus couramment utilisé dans la littérature. Il est satisfaisant pour décrire le transfert de chaleur au sein d'un milieu poreux lorsque les vitesses de filtration sont faibles. Il est de plus, considéré comme le plus acceptable pour les milieux poreux de faible granulométrie.

Le deuxième modèle (3.39) et (3.40) est utile lorsque les vitesses de filtration sont importantes (mouvements convectifs développés) ainsi que les écarts initiaux de températures entre les deux phases. Cependant, ce modèle est difficile à utiliser vu les difficultés rencontrées pour l'estimation, en particulier du coefficient d'échange convectif h . La détermination expérimentale du coefficient d'échange h reste difficile.

III.2.4 Transfert de masse en milieu poreux

Nous nous intéressons ici au transport de chacun des constituants d'un mélange fluide saturant un milieu poreux. En tenant compte du fait que le transfert de matière ne s'effectue qu'à travers la phase fluide, l'équation de conservation de la masse de chacun des constituants est obtenue, par prise de moyenne sur un V.E.R., lorsqu'il n'y a pas de production interne. Elle s'écrit sous la forme suivante :

$$\rho \left[\varepsilon \frac{\partial x_k}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{V}) x_k \right] = -\vec{V} \cdot (\vec{J}_k) \quad k = 1 \dots N - 1 \quad (3.41)$$

N est le nombre total des constituants, $x_k = \frac{\rho_k}{\rho}$ est la fraction massique du $k^{\text{ième}}$ constituant et $\rho = \sum_k \rho_k$. Dans le cas d'une matrice poreuse saturée par un fluide binaire, les coefficients de diffusion moléculaire D^p et D_T^p intervenant dans le vecteur densité de flux massique \vec{J}_k dépendent des propriétés du milieu poreux. Différents travaux ont montré que le coefficient de diffusion moléculaire équivalent D^* est similaire à celui présent dans l'expression du flux de diffusion massique en milieu fluide avec une dépendance par rapport à la tortuosité du milieu de la forme $D^p = \frac{D}{\tau^2}$, Galliéro (2003). Ces auteurs proposent une relation analogue pour le coefficient de thermodiffusion, soit $D_T^p = \frac{D_T}{\tau^2}$. D'autres relations permettent d'évaluer ces coefficients équivalents, mais la meilleure méthode pour déterminer les coefficients D^p et D_T^p reste la mesure directe dans le milieu poreux étudié.

Pour un fluide binaire, ce vecteur densité de flux massique \vec{J}_1 de l'un des constituants ayant la fraction massique x est de la forme :

$$\vec{J}_1 = -\rho D^p \vec{V} x - \rho x(1-x) D_T^p \vec{V} T \quad (3.42)$$

III.3 Géométrie et Modèle Mathématique

III.3.1 Description et géométrie du problème

La configuration géométrique bidimensionnelle de notre étude est montrée dans la (fig.3.2). Nous considérons le cas d'une cavité rectangulaire de hauteur H et de longueur L contenant un milieu poreux saturé par un fluide binaire gazeux (le méthane et le n-butane). Les axes de coordonnées spatiales X et Y sont respectivement orientés suivant les directions horizontale et verticale.

Les deux parois latérales de la cavité sont exposées à des températures constantes $T_c = 344 K$ et $T_f = 334 K$, tandis que les parois horizontales sont considérées comme adiabatiques et imperméables. À l'état initial, le mélange binaire dans la cavité est constitué de 20% du méthane (CH_4) et 80% du n-butane (nC_4H_{10}), et maintenir sous une pression uniforme de 11.14 MPa, et une distribution linéaire de température dans la direction de x . Les paramètres utilisés dans ce modèle sont cités dans le (Tab.3.1).

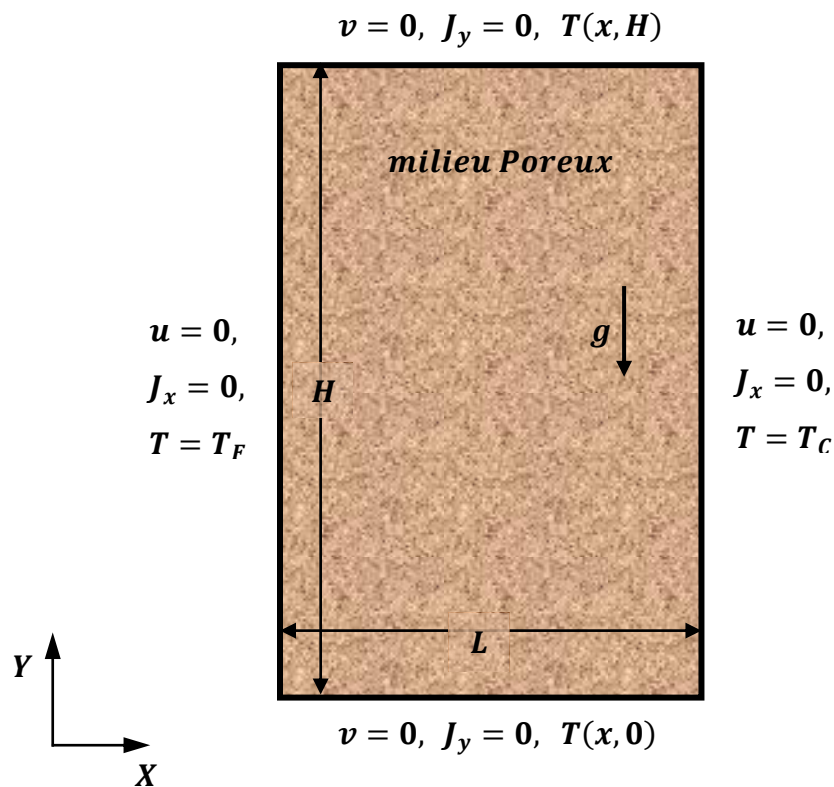


Fig.3.2. Géométrie du modèle physique

Tab 3.1 : Les paramètres du modèle physique

La largeur L de la cavité	0.5 m
La hauteur H de la cavité	5.0 m
La longueur caractéristique $L_c = \sqrt{(H^2 + L^2)}$	5.025 m
La composition du mélange fluide (molaire)	(0.2) méthane + (0.8) n-butane
La chaleur spécifique du fluide, $(C_p)_f$	2746.42 J/kg/K
La conductivité thermique du fluide, λ_f	0.095 J/m/s/K
Porosité du milieu, ε	0.2
Perméabilité, k	10^{-1} , 1, 10, 100 md
La chaleur spécifique du MP, $(C_p)_s$	1840.0 J/kg/K
La conductivité thermique du MP, λ_s	1 J/m/s/K
La masse volumique du MP ρ_s	2050.0 kg/m ³
La température chaude T_c	344 K
La température de référence T_0	339 K
Différence de température entre les parois ΔT	10 °C
La pression de référence P_0	11.14 MPa

III.3.2 Hypothèses simplificatrices

Pour simplifier le modèle mathématique, on considère les hypothèses les plus couramment utilisées dans ce type de problèmes. Nous supposons alors que :

1. La vitesse transversale suivant la direction z est supposée négligeable par rapport aux composantes de la vitesse suivant x et y , ceci nous amène à un problème bidimensionnel.
2. la solution est un fluide newtonien et compressible.
3. La matrice poreuse est perméable, et les parois sont supposées rigides.
4. L'écoulement est supposé laminaire.
5. il n'y a ni réaction chimique ni source de chaleur et de masse.
6. Le transfert de chaleur par rayonnement est négligeable.
7. Pas des forces interactives superficielles agissant entre les particules de milieu poreux et le mélange liquide.

III.3.3 Modèle mathématique :

Le phénomène de la thermodiffusion dans cette matrice poreuse hétérogène est modélisé par ce système d'équation :

Equation de conservation de la masse :

Dans un milieu à deux dimensions, l'équation de conservation de la masse est écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (3.43)$$

Avec : ρ la masse volumique ; $V = u i + v j$ le vecteur de vitesse, u et v sont les composants de vitesse horizontale et verticale respectivement.

puisque on utilise un mélange binaire, une autre équation de conservation de masse doit être résolue :

$$\frac{\partial(\rho u x_1)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v x_1)}{\partial y} = -\nabla \cdot J_1 \quad (3.44)$$

Avec x_1 la fraction molaire d'espèce 1 (méthane) ; et J_1 le flux massique de soluté donné par :

$$J_1 = -\rho (D \nabla x_1 + D_T \nabla T) \quad (3.45)$$

Avec T la température, P la pression, D , et D_T , sont les coefficients de la diffusion moléculaire, et de la thermodiffusion, respectivement.

Equation de mouvement :

Dans les milieux poreux, la matrice poreuse est considérée homogène et isotrope, donc la loi de Darcy est appliquée et exprimée sous la forme suivante :

$$\vec{V} = -\frac{k}{\mu}(\nabla P + \rho \vec{g}) = 0 \quad (3.46)$$

Avec \vec{g} le vecteur d'accélération gravitationnelle, k , et μ , sont la perméabilité, la viscosité dynamique, et la porosité du milieu poreux respectivement.

On remplace la relation de Darcy (3.46) dans l'équation de conservation de la masse (3.43), l'équation différentielle de pression devient :

$$\frac{k}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{k}{\mu} \frac{\partial}{\partial y} \rho \left(\frac{\partial P}{\partial y} - \rho g \right) = 0 \quad (3.47)$$

L'équation de conservation d'énergie :

L'équation de conservation d'énergie est de la forme suivante :

$$u \frac{\partial}{\partial x} ((\rho C_p)_f T) + v \frac{\partial}{\partial y} ((\rho C_p)_f T) = k_e \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] \quad (3.48)$$

Avec $(\rho C_p)_e$ c'est la chaleur spécifique volumique effective du système étudié, et k_e la conductivité thermique effective de système, ces paramètres physiques effectives sont liés aux propriétés physiques du fluide et de la matrice solide comme suit :

$$(\rho C_p)_e = \varepsilon(\rho C_p)_f + (1 - \varepsilon)(\rho C_p)_s \quad (3.49)$$

$$k_e = \varepsilon k_f + (1 - \varepsilon) k_s \quad (3.50)$$

III.3.4 Les conditions aux limites

III.3.4.1 Conditions aux frontières hydrodynamiques

$$\left. \begin{array}{l} x = 0, L ; \quad u = v = 0 \\ y = 0, H ; \quad u = v = 0 \end{array} \right\}$$

III.3.4.2 Conditions aux frontières thermiques et massiques

$$\left. \begin{array}{l} x = 0, L ; \quad T = T_f, T_c, \quad J_x = 0 \\ y = 0, H ; \quad T(x, 0), T(x, H), \quad J_y = 0 \end{array} \right\}$$

III.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté les équations qui gèrent le phénomène de la convection-thermodiffusion (l'effet Soret) dans un milieu poreux, et le modèle mathématique adopté pour ce problème. Le modèle physique avec ses hypothèses, et condition aux limites font partie de ce chapitre.

Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les différentes étapes de simulation sur Fluent avec des illustrations afin de mieux expliquer la méthode.

Chapitre 4

Simulation Numérique

IV.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons rappeler les différentes étapes de simulation numérique, utilisant le software Fluent, par lequel notre travail a été réalisé, pour plus de détail sur ce dernier le lecteur peut consulter le ANSYS FLUENT 12.0 User's Guide. Le software Fluent, est un code commercial de la famille CFD, programmé en langage C, et basé sur la méthode numérique des volumes finis.

Pour la modélisation numérique, on a utilisé les deux softwares de CFD : Gambit (le mailleur) et Fluent (le solveur et le postproceseur).

Gambit et Fluent sont des logiciels, permettant de réaliser des simulations 2D ou 3D en mécanique des fluides allant de la construction du maillage avec Gambit à la résolution des équations de Navier Stokes et au post-traitement avec Fluent.

Largement répandus dans l'industrie (automobile, aéronautique, espace... etc.) en raison de leur interface graphique puissante et de l'abondance de leurs options, ils permettent de réaliser des simulations sur tous types de géométries complexes (fixes ou mobiles) associées à des maillages fixes ou adaptatifs et avec des modèles physiques variés (diphasique, turbulent, etc.).

IV.2 Présentation du code CFD

« Fluent » est un code de calcul qui permet de simuler les écoulements des fluides avec et sans transfert thermique dans des géométries complexes. Il peut résoudre des problèmes d'écoulement avec des mailles structurées et non structurées, quelque soit la complexité de la géométrie, avec une facilité relative.

Les mailles supportées en 2D sont de types triangulaires ou quadrilatéraux, elles sont tétraédriques, hexaédriques ou pyramidales en 3D, ou des mailles (hybrides) mélangées. Le code « Fluent » est écrit en langage C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offertes par ce langage (allocation de l'espace mémoire dynamique). En outre, il utilise une architecture qui lui permet de s'exécuter en tant que plusieurs processus simultanés sur un seul PC de travail ou sur des machines en parallèles, pour une exécution plus efficace.

« Fluent » facilite à l'utilisateur sa manipulation à travers la simplicité de son interface graphique. Le code n'est limité uniquement par ces propres fonctions, mais il offre à l'utilisateur la possibilité d'y injecter sa propre fonction et définir toutes particularités de son problème. L'utilisateur avancé peut adapter ou augmenter aux besoins l'interface en programmant en langage C ou C++ ces propres macros et fonctions de menu, afin

d'automatiser certaines procédures (ex. de conditions aux limites, périodiques ou autres) ou de spécifier certaine fonction de propriété de fluide (dans notre cas), par le moyens des UDF (User Defined Functions) sous forme de programme écrits en langage C, qui va être compilé par le compilateur intégré du code «Fluent », pour être exécuté après.

IV.3. Etapes essentielles dans l'analyse CFD:

Le processus complet dit CFD est composé des étapes suivantes :

a). Formulation du problème :

La physique du problème affecte les équations à résoudre, c'est-à-dire un problème compliqué nécessite un modèle de turbulence sophistiqué, généralement il est nécessaire de recourir à des simplifications pour simplifier le problème sans affecter la précision de la solution.

b). Maillage :

C'est une étape critique dans une analyse CFD, car le problème peut changer en fonction des nombres et types des mailles utilisées. Généralement, les régimes d'écoulement à fort gradient de pression doivent être raffinés et encore plus recommandés au voisinage proche de parois.

c). Spécification d'écoulement :

Une fois le maillage élaboré on passe à la troisième étape d'analyses de stage **pre-processing** dans une analyse CFD. C'est une application des conditions aux limites et l'initialisation, ainsi l'introduction des propriétés du fluide.

d). La solution numérique :

C'est la phase de la solution numérique des équations après discrétisation, en utilisant des critères de convergence après le choix de la méthode de résolution.

e). Analyse des résultats :

Les résultats obtenus de l'étape (d) seront vérifiés avec l'aspect physique recherché et les différents paramètres d'écoulement seront représentés sous formes de graphes, contour...etc.

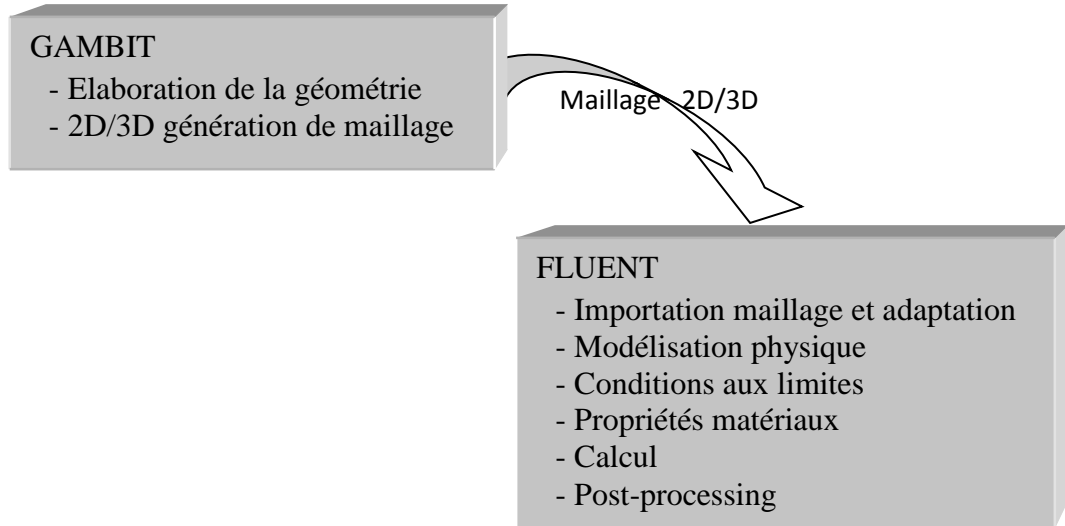


Fig.4.1 : L'organigramme CFD

IV.4. Démarche numérique du solveur :

La procédure de simulation par le logiciel « Fluent » s'effectue suivant les étapes de l'algorithme ci-dessous, qui décrit les différents paramètres de la solution.

-[Etape 1](#) : Choix du solveur

Les possibilités offertes sur « Fluent » pour définir le type du solveur sont :

Solveur basé sur la masse volumique « *Density-based solver* », et un autre solveur son algorithme basé sur le calcul de pression « *Pressure-based solver* ». On note que le solveur est basé sur la masse volumique « *Density-based solver* » il ne convient pas avec la résolution d'un problème de thermodiffusion, le cas de notre étude. Après on fait le choix de formulation adéquate, la

formulation du solveur peut être l'un de ces types : *Coupled-Implicit*, *Coupled-Explicit*, ou *Segregated-Implicite*.

Les « *Coupled solvers* » sont recommandés si une forte interdépendance existe entre la masse volumique, l'énergie, les moments, et/ou les espèces. (Ex. écoulement compressible à haute vitesse ou les écoulements réactifs).

Le solveur « *coupled-implicit* » résout toutes les variables (les inconnues) dans toutes les cellules au même temps, mais le solveur « *coupled-explicit* » résout toutes les variables (les inconnues) dans une cellule au même temps. En général, le solveur « *coupled-implicit* » est recommandé par rapport au solveur « *coupled-explicit* ».

En grosso modo, il est à noter que le temps nécessaire pour le solveur implicite est deux fois plus rapide et il nécessite une capacité mémoire deux fois plus que du « *coupled-explicit* » ou « *segregated-implicit* ». Il faut noter aussi que, le solveur « *coupled-explicit* » doit être utilisé uniquement pour les écoulements instationnaires.

Par contre, le solveur « *segregated-implicit* » est préférable dans tous les autres cas, car l'approche ségréguée offre de la flexibilité dans le traitement de la solution et nécessite moins de mémoire que le solveur « *coupled-implicit* ».

- [Etape 2](#) : Schéma de discrétisation (Méthodes d'interpolation)

Les variables \emptyset (stockées au centre des cellules) doivent être interpolées aux faces des volumes de contrôle, « **Fluent** » propose de nombreux schémas d'interpolation:

- Schéma « *Upwind* » du 1^{er} Ordre: Facile à converger mais seulement au premier ordre.

- Schéma « *Power Law* » loi de puissance: Plus précis que le premier ordre quand $Re_{cell} < 5$ (Écoulement de type bas Reynolds).

- Schéma « *Upwind* » du 2nd ordre: Utilise des plus grands stencils pour une précision au 2^{ème} ordre, essentiel avec tri/tet maillage ou quand l'écoulement n'est pas aligné avec le maillage.

- Schéma « *Quadratique Upwind Interpolation* » (QUICK): Appliquer avec le maillage quad /hex et hybrides (pas aux tri.), utile pour les écoulements en rotation, précis à l'ordre 3 sur un maillage régulier.

- Schéma «*Bounded Central Differencing* » : Appliquer au maillage mixte et non uniforme des géométries complexes.

-[Etape 3](#) : Méthodes d'interpolation pour la pression

Des options supplémentaires sont disponibles sur le code « Fluent » pour calculer la pression aux faces en utilisant le solveur « *segregated* ». Les schémas des méthodes d'interpolation pour les pressions aux faces sont:

- Standard : Schéma par défaut, précision réduite pour les écoulements avec forts gradients de pression normaux à la surface près des frontières.

- Linear : à utiliser quand les autres options ont des difficultés de convergence ou des comportements non physiques.

- Second-Order : à utiliser pour les écoulements compressibles; ne pas utiliser dans les matériaux poreux, discontinuités, turbines ou méthodes VOF.

- Body Force Weighted : à utiliser quand les forces de gravité sont importantes, (ex. convection naturelle à Ra élevé ou écoulements fortement swirlés).

- Presto : utiliser avec les écoulements turbulents, les milieux poreux ou les domaines fortement courbés.

Etape 4 : Couplage pression vitesse

Le couplage pression-vitesse se réfère à la manière dont la conservation de la masse est prise en compte quand on utilise le solveur «*segregated*». On a trois méthodes possibles:

- SIMPLE : schéma par défaut, robuste.
- SIMPLEC : utilisée dans le cas des maillages complexes non uniformes, convergence plus rapide pour les problèmes simples.
- PISO : schéma utile pour les écoulements instationnaires ou pour les schémas contenant des cellules avec des biais plus élevé que la moyenne.

Etape 5 : Initialisation

La procédure d'itération nécessite que toutes les variables soient initialisées avant le démarrage du calcul. Une initialisation 'réaliste' améliore la stabilité et la vitesse de convergence. Dans certains cas, une solution initiale correcte est nécessaire (ex. le champ de température permettant l'initialisation d'une réaction chimique).

Etape 6 : Convergence d'équation de transport de ϕ se présente simplement:

$$a_p + \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} = b_p$$

Les coefficients a_p, a_{nb} dépendent de la solution et mis à jour à chaque itération. Au début de chaque itération, l'égalité est fautive. Le décalage est appelé le résidu, R_p , avec:

$$R_p = a_p \phi_p + \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} - b_p$$

R_p doit devenir négligeable au fur et à mesure des itérations. Les résidus que vous suivez sont sommés sur toutes les cellules :

$$R = \sum_{mailles} |R_p|$$

A la convergence, Toutes les équations de conservation discrétisées (momentum, énergie, etc.) se conforment dans chaque cellule à une tolérance spécifiée et la solution ne change plus avec le temps.

-[Etape 7](#) : Suivi de la Convergence

Le Suivi de la convergence se fait avec les résidus. Le tracé des résidus montre quand ceux-ci atteignent le seuil de tolérance (fig.4.2). En général, une décroissance d'un ordre 10^{-3} en magnitude des résidus indique une convergence au moins qualitative et les caractéristiques principales de l'écoulement sont établies. Les résidus de l'énergie doivent atteindre 10^{-6} et des espèces 10^{-5} afin d'obtenir la conservation.

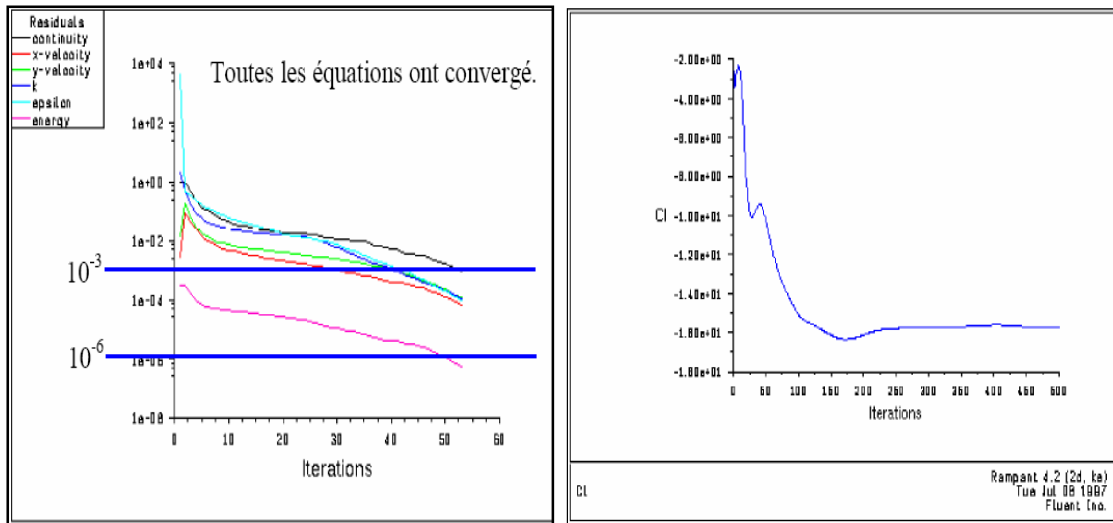


Fig.4.2: Tracé des résidus Fig.4.3: Tracé de l'historique d'une variable

En plus des résidus, on peut aussi suivre des variables ou fonctions (ex. surface intégrale) à une frontière ou n'importe quelle surface définie et tracé l'historique d'une variable conservative (Fig.4.3).

Nous pouvons vérifier la conservation de la masse et de l'énergie par le rapport minimum entre les flux entrants et sortants. Le déséquilibre doit être moins de 1% des plus faibles flux aux travers la frontière du domaine.

-[Etape 8](#) : Stabilité

Des instabilités numériques peuvent apparaître avec un problème mal posé, un mauvais maillage et/ou un mauvais réglage du solveur. Cela est détecté par des résidus qui augmentent ou restent « bloqué », indiquant une divergence des résidus. C'est-à-dire qu'il y a un déséquilibre dans les équations de conservation.

Les solutions possibles pour remédier ce problème sont:

- Vérifier que le problème est bien posé.
- Calculer une première solution avec un schéma à l'ordre 1.
- Diminuer la sous-relaxation pour les équations ayant des problèmes de convergence (ségrégee).
- Réduire le nombre de courant (couplée).
- Remailler ou raffiner le maillage.

-[Etape 9](#) : Réglage des facteurs sous-relaxation

Le facteur de sous-relaxation, α , est utilisé pour stabiliser le processus itératif du solveur « ségrégee ».

$$\phi_p = \phi_{p,old} + \alpha \Delta \phi_p$$

Si vos moniteurs indiquent que la solution est convergée, mais la solution change toujours ou a un déséquilibre de masse ou d'énergie! Il y a une possibilité de réduire le critère de convergence ou désactiver 'Test Convergence'.

Diminuer les facteurs de la relaxation pour les 'momentum' aide à converger. Les réglages appropriés sont connus via les testées et l'expérience, alors calculer jusqu'à ce que la solution converge.

IV.5. Les conditions aux limites :

En plus d'un maillage adéquat, les conditions aux limites sont très importantes pour obtenir une solution précise avec une convergence rapide. Ce paragraphe présente de façon succincte les conditions aux limites disponibles.

Afin de définir un problème avec une solution unique, on doit fournir des informations sur les variables aux frontières du domaine. Spécifier les flux de masse, quantité de mouvement, énergie, etc. Définir les conditions aux limites implique :

- ✓ Identifier la position des frontières (ex. entrées, parois, symétrie).
- ✓ Donner les informations sur ces frontières.

Les données dépendent du type de conditions aux limites et des modèles employés. On doit connaître l'information nécessaire aux frontières et positionner ces frontières où l'information est connue ou peut être correctement approchée.

Les mauvaises conditions aux limites ont toujours un impact sur les résultats.

Les types de conditions aux limites disponibles sur le code des calculs Fluent sont comme suit :

- Types de conditions limites pour les surfaces externes « External Faces »

- ✓ Générale: "Pressure inlet, Pressure outlet"
- ✓ Incompressible: "Velocity inlet, Outflow"
- ✓ Écoulement compressible: "Mass flow inlet, Pressure far-field"
- ✓ Spécial: "Inlet vent, outlet vent, intake fan, exhaust fan"
- ✓ Autre: "Wall, Symmetry, Periodic, Axis"

- Types de conditions limites pour les cellules « Cell Boundaries »

- ✓ Fluide et Solide

Le logiciel « Fluent » offre la possibilité de changer le type de conditions aux limites et de régler les données suivant nos besoins (ex. définir par des UDFs).

IV.6. Génération des calculs par FLUENT :

La génération du calcul dans «FLUENT» passe par les étapes suivantes :

- 1- Charger la géométrie par Fluent. *File- Read- Case*
- 2- Vérification du maillage. *Grid- Check*
- 3- Afficher le maillage. *Display- Grid*
- 4- Définir le Model de solution. *Define- Solver*
- 5- Définir le Model de Turbulence. *Define- Models- Viscous*
- 6- Définir la Matière. *Define- Materials*
- 7- Définir les conditions aux limites. *Define- Boundary- Conditions*
- 8- Choix du contrôle de solution. *Solve- Controls- Solution*
- 9- Enregistrer les informations liées au problème. *File- write- Case & dat*

Le fichier Case (regroupe toutes informations liées à la géométrie).
Le fichier dat (contient tous les paramètres et données des calculs).
- 10- Initialiser le calcul. *Solve- Initialize- Initialize*
- 11- Vérifier les résidus des calculs. *Solve- Monitors- Residual*
- 12- Choisir du nombre des itérations et lancer les calculs. *Solve- Iterate*
- 13- Post traitement des résultats. (*Display, Plot, Repport -etc*)

IV.7 La Thermodiffusion dans Fluent

Ce logiciel « Fluent » offre aussi la possibilité pour traiter les problèmes de double diffusion tenant compte de la thermodiffusion « *l'effet Soret* », (*Define, Models, Species, Transport & Reactions*) les figures Fig.4.4 et Fig.4.5 montrent comment on définit la thermodiffusion dans Fluent, pour étudier un problème de transfert double diffusif en présence de l'effet Soret.

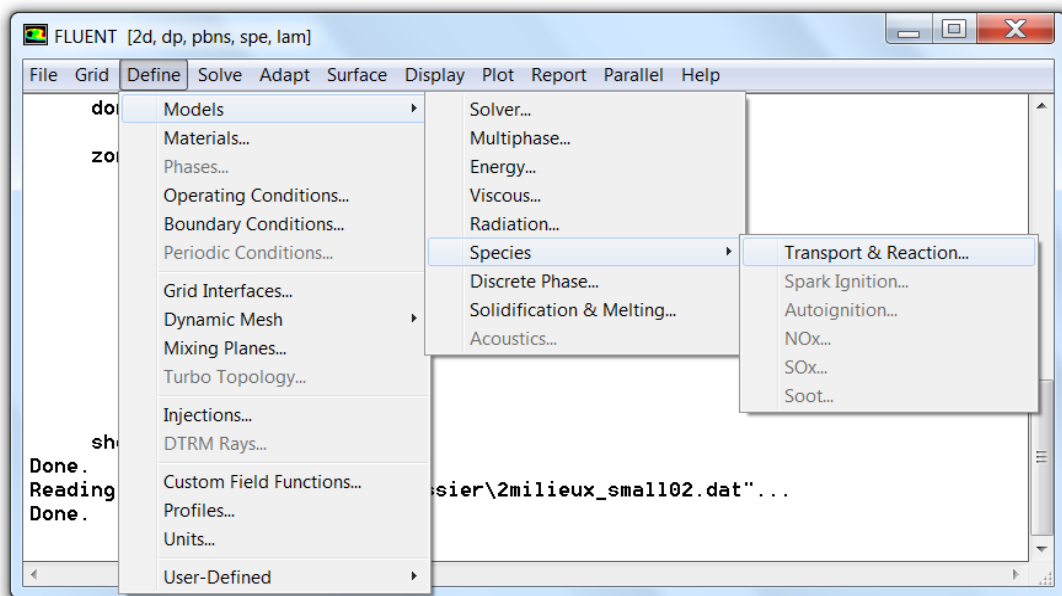


Fig.4.4: Le choix de modèle correspond au transport des mélanges

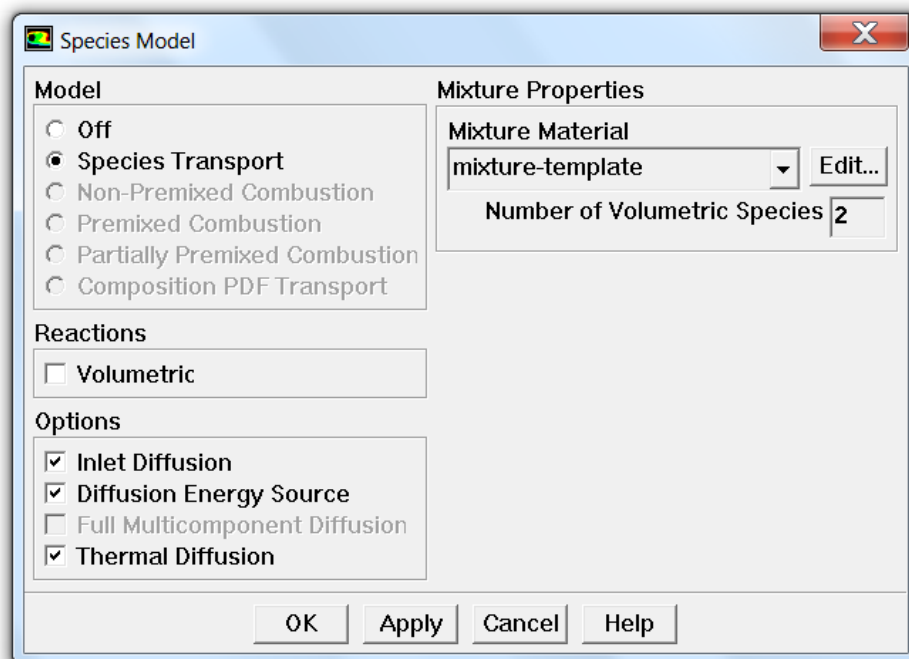


Fig.4.5: La thermodiffusion et le modèle des espèces *Species Model*

IV.8 Le schéma numérique et la procédure de résolution

Les équations (3.43), (3.44), (3.47) et (3.48) avec les conditions aux limites correspondent sont résolu numériquement par la méthode de volume de contrôle avec un maillage rectangulaire. Les résultats sont obtenus quand le système satisfait les critères de convergence. La masse volumique du mélange fluide est calculée par la loi de mélange (**volume-weighted-mixing-law**) en fonction de température, pression, et la composition du mélange. La viscosité de mélange, et le coefficient de diffusion moléculaire sont considérés constants, tandis que le coefficient de thermodiffusion est calculé par la théorie cinétique des gaz (**kinetic-theory**).

La procédure de résolution est commencée lorsqu'on fournit des valeurs initiales de température, pression, et de composition de mélange. La masse volumique de mélange, et les coefficients de thermodiffusion (D_T) sont évalués pour chaque volume de contrôle à la base des températures, pressions, et compositions données à chaque itération. Une fois les propriétés de mélange et les coefficients de diffusion sont obtenus, les équations de continuité (3.43), (3.44), l'équation de pression (3.47), et l'équation d'énergie (3.48) sont résolues avec les conditions aux limites. Le champ de vitesse est mis à jour par l'équation (3.46), les nouvelles valeurs de température, pression, et concentration sont utilisées pour évaluer les propriétés du mélange ainsi que les coefficients de diffusion pour la prochaine itération.

IV.9 Le choix du maillage

Le maillage choisi est basé sur la limite du nombre de Nusselt moyen, (Nu), pendant le raffinement de maillage. Le nombre de Nusselt (Nu) est calculé quand l'écoulement atteint l'état d'équilibre pour chaque cas de maillage. Le nombre de Nusselt moyen est représenté le flux de chaleur non-dimensionnel moyen obtenu à la paroi chaude ou froide de la cavité. Il est défini par la relation suivante, Charles-Guobing (2004):

$$N_U = \frac{1}{H} \int \left(\frac{L}{\Delta T} \frac{\partial T}{\partial X} \right)_{paroi} dy \quad (5.1)$$

Le Tab.5.1 et la Fig.5.1 représente les valeurs de nombre de Nu moyenne obtenir pour différentes dimension de maillage avec une perméabilité de 100 md ($1\text{md} = 0.987\text{e}^{-15} \text{ m}^2$). La valeur de nombre de Nu s'approche a une valeur asymptotique, 3.1 avec l'augmentation du nombre de maillage. Si on accepte une erreur relative de 5%. Le nombre de maillage minimale accepté est de 52×52 . On a choisi un maillage de 72×72 .

Tab.4.1 Sensibilité du maillage

Type	Nombre de nœuds	Nu
1	12×12	2.816421
2	22×22	2.842225
3	32×32	2.8737
4	42×42	2.929425
5	52×52	3.048074
6	62×62	3.061446
7	72×72	3.071273
8	82×82	3.078735
9	92×92	3.084577
10	102×102	3.097276

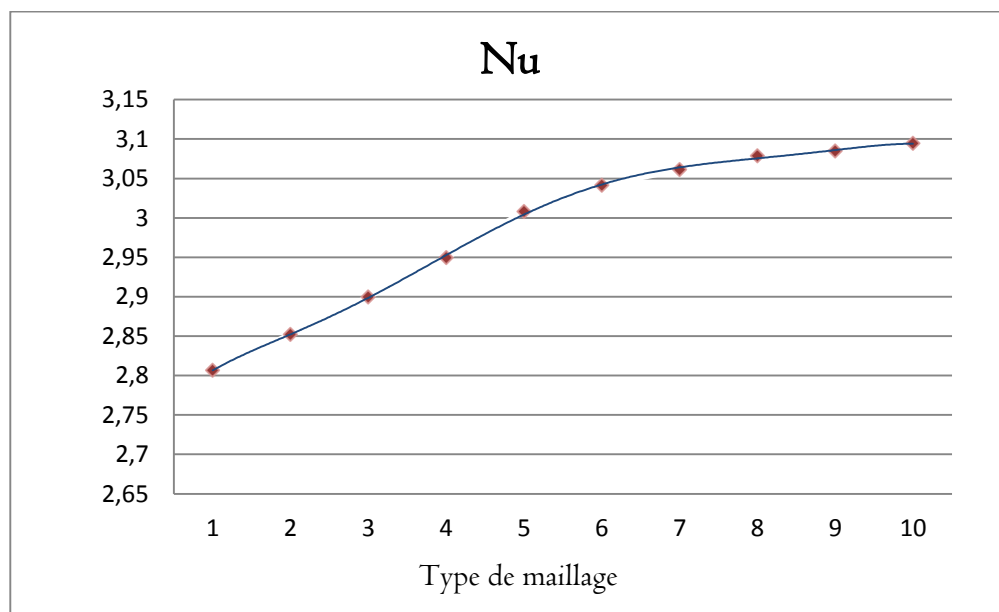


Fig.4.6 variation du nombre de Nu en fonction de maillage

IV.10 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons détaillé la procédure de simulation numérique afin d'apporter aux lecteurs une bonne explication.

Il ne reste que de présenter l'extrait de ce mémoire. Dans le prochain chapitre, nous allons effectuer des simulations à l'aide du code de calcul Fluent, en présentant les résultats obtenus pour chaque cas d'étude et leurs interprétations.

Chapitre 5

Résultats et Discussion

V.1 Introduction

Notre objectif, est d'étudier l'importance de l'effet Soret sur la convection thermosolutale, d'un mélange binaire gazeux (méthane et n-butane) dans un milieu poreux présentant une fracture. En première lieu, nous présenterons la différence entre un écoulement thermosolutale tenant compte de l'effet Soret, et celle sans l'effet Soret.

En deuxième lieu, la perméabilité correspond à la séparation optimale sera déterminée en fonction du facteur de séparation.

Selon plusieurs auteurs, Charles et al (2006), la séparation dans les milieux hétérogènes est toujours supérieurs à celle en milieux homogènes, il semblerait que l'hétérogénéité est un facteur favorisant la séparation.

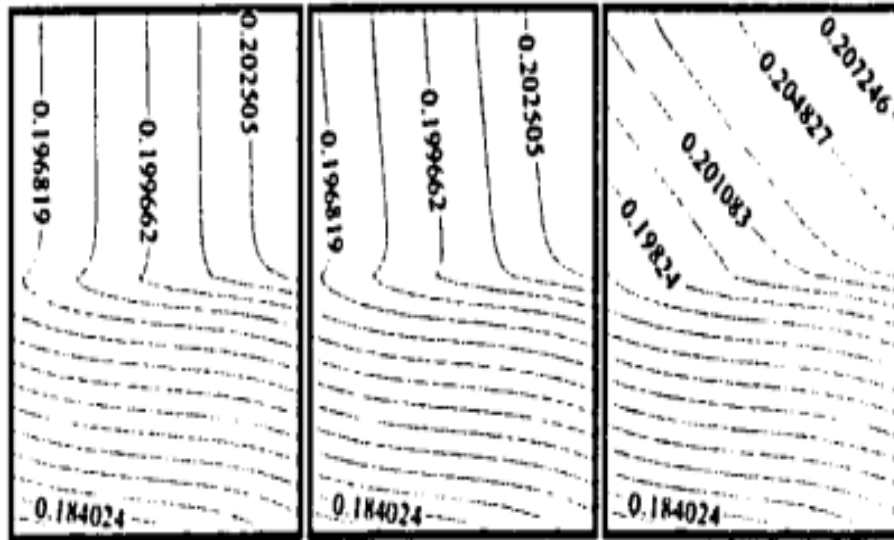
Dans cette logique, nous nous proposons d'étudier l'influence d'une fracture (qui peut être considéré comme un autre milieu poreux) pour cela, différents cas seront analysés.

V.2 validation des résultats

Afin de valider nos calculs et simulations, un cas correspondant aux études de Charles et al (2006) a été analysé. Il s'agit d'un problème de séparation dans une cavité poreuse stratifié de dimensions (0.5m × 5m) ayant des perméabilités respectives de 10 md pour la couche inérieur, et une valeur variant de 0.001 md jusqu' à 10.000 md. Pour l'autre.

La comparaison des s'est fait pour :

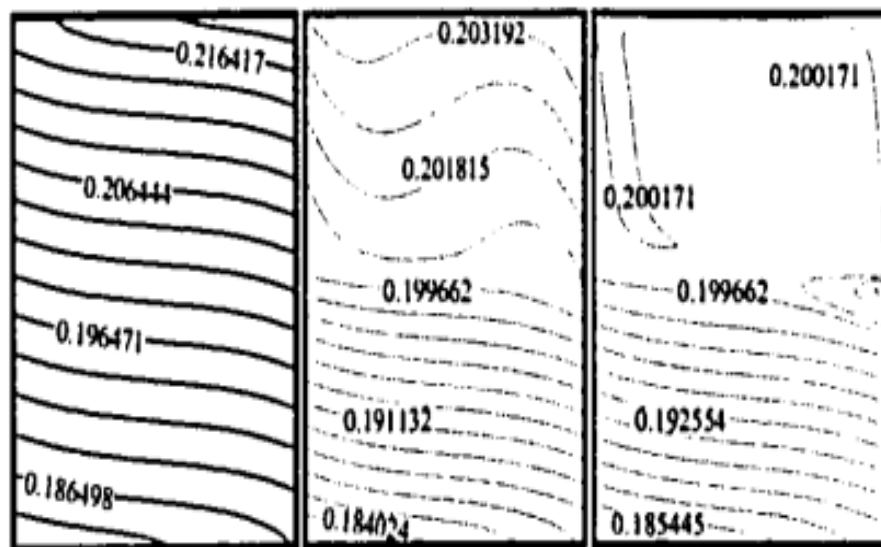
- a) La distrébuton de la fraction molaire de méthane CH₄ :
 - résultats de (Charles-Guobing, Saghir et Kawaji, Numerical Analysis of Thermal-Solutal Convection in heterogeneous Porous Media 2006)



(a) 0.001/10

(b) 0.1/10

(c) 1/10



(d) 10/10

(e) 100/10

(f) 10000/10

Fig.5.1 Les isoconcentrations de méthane CH₄, Charles et al (2006)

➤ résultats de cette étude

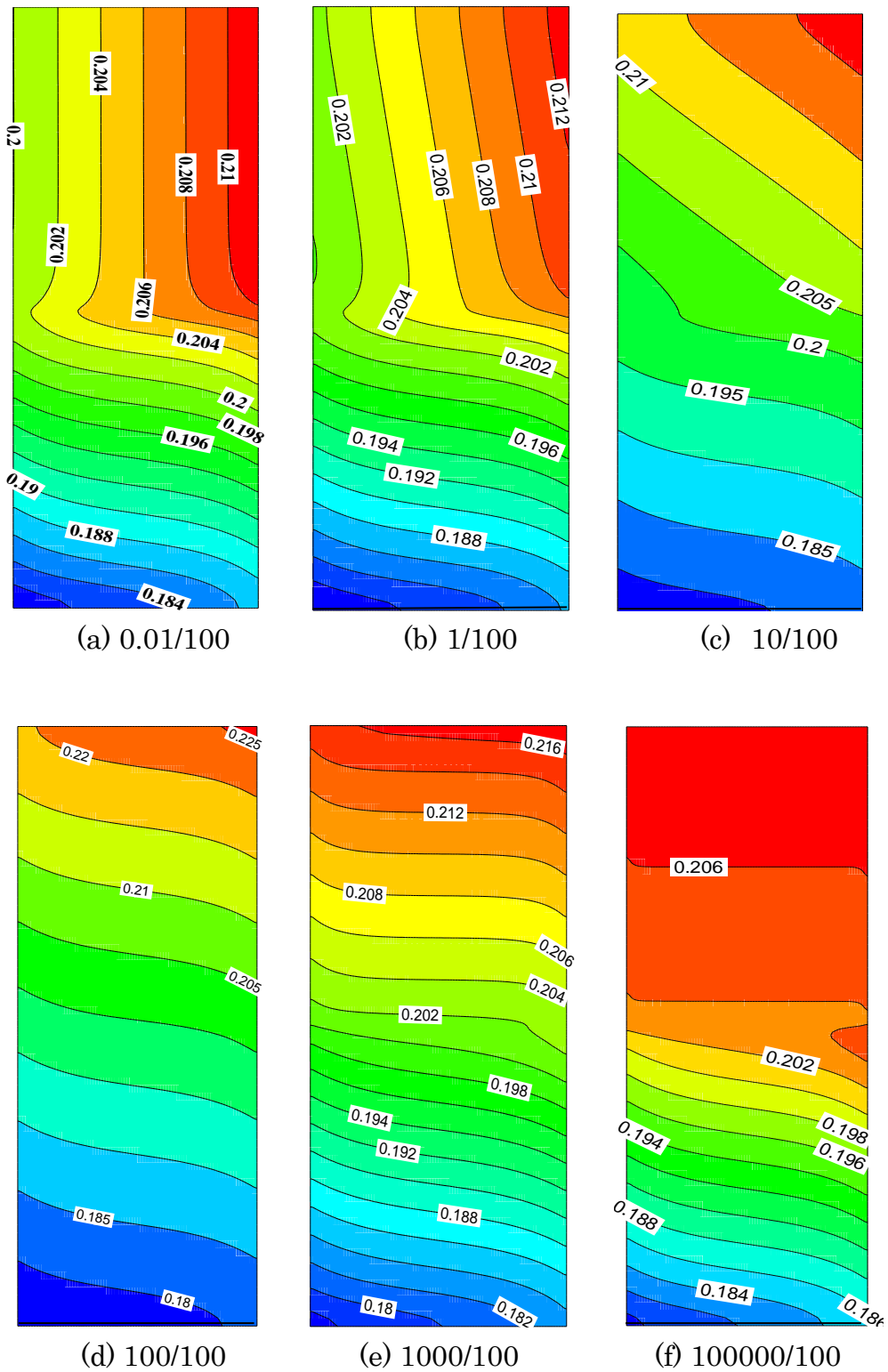
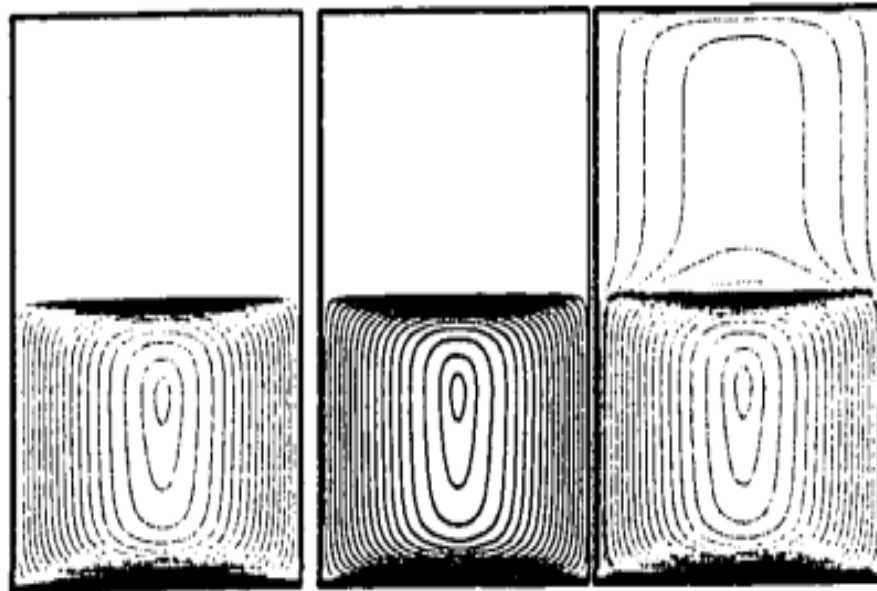


Fig.5.2 Les isoconcentrations de méthane CH₄ (résultats de cette étude)

b) Les lignes de courants :

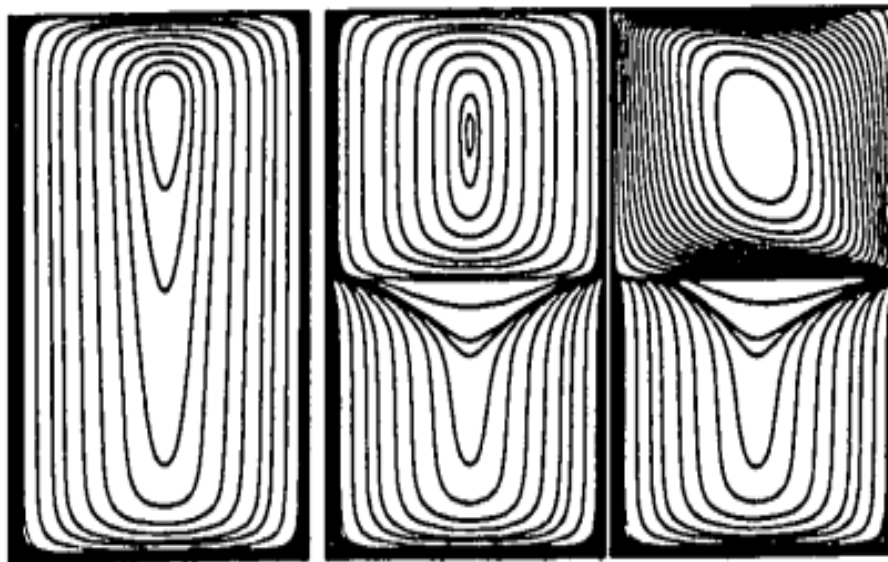
- résultats de (Charles-Guobing, Saghir et Kawaji, Numerical Analysis of Thermal-Solutal Convection in heterogeneous Porous Media 2006)



(a) 0.001/10

(b) 0.1/10

(c) 1/10



(d) 10/10

(e) 100/10

(f) 10000/10

Fig.5.3 : Les lignes de courants (Charles et al 2006)

➤ résultats de cette étude

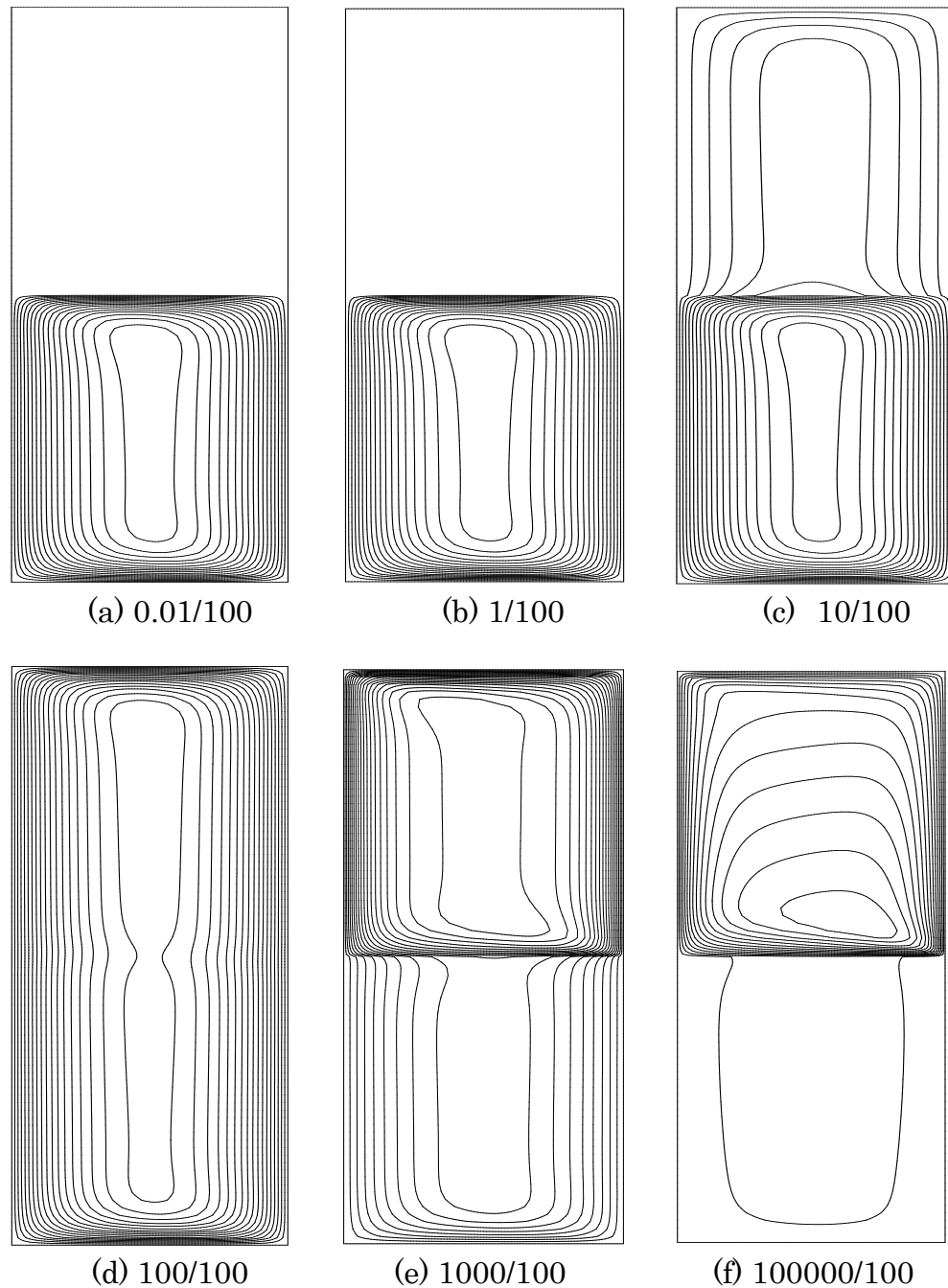


Fig.5.4 : Les lignes de courants (résultats de cette étude)

Il ressort de cette comparaisons, que les résultats obtenues sont en concordance avec celles de l'auteur, mais pour des valeurs de perméabilités multipliés par 10. L'explication a cette difference est probablement liée à la conversion des unités, du m^2 au milli-darcy, telle que présentée par les auteurs Charles et al (2006) en effet ils posent $1 \text{ md} = 9.87e^{-15} m^2$, ce qui est pas en conformité avec la littérature, qui pose $1 \text{ md} = 0.987e^{-15} m^2$.

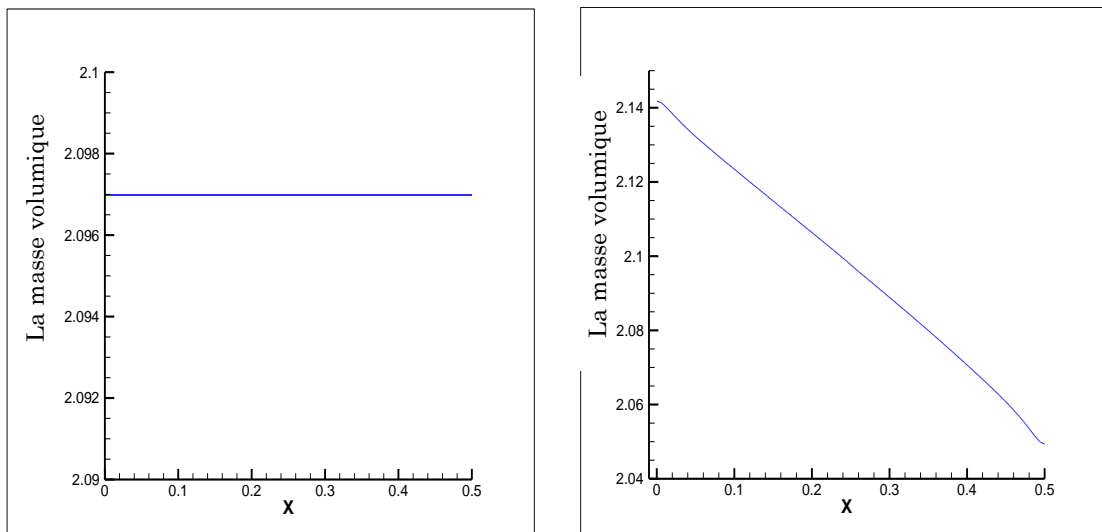
En égard à cette différence d'échelle, la perméabilité optimale de séparation est 100 md au lieu de 10 md comme présenté par les auteurs Charles et al (2006). Dans ce qui suit nous présentons nos analyses : pour un milieu poreux homogène, puis pour un milieu poreux hétérogène (avec des fractures).

V.3 Analyse de l'effet Soret dans un milieu poreux homogène

V.3.1 l'influence de l'effet Soret

La thermodiffusion (l'effet Soret) à un effet remarquable sur la séparation des mélanges. Pour présenter cet effet, nous prenons à titre d'exemple le cas d'une perméabilité de milieu poreux égale à 10^{-13}m^2 . Nous comparons la distribution de la masse volumique le long de la diagonale qui passe par (0,0) et (0.5,5) entre deux cas (Fig.5.5.a,b):

- a) Cas 01 : on néglige l'effet de thermodiffusion
- b) Cas 02 : on tenant compte de la thermodiffusion

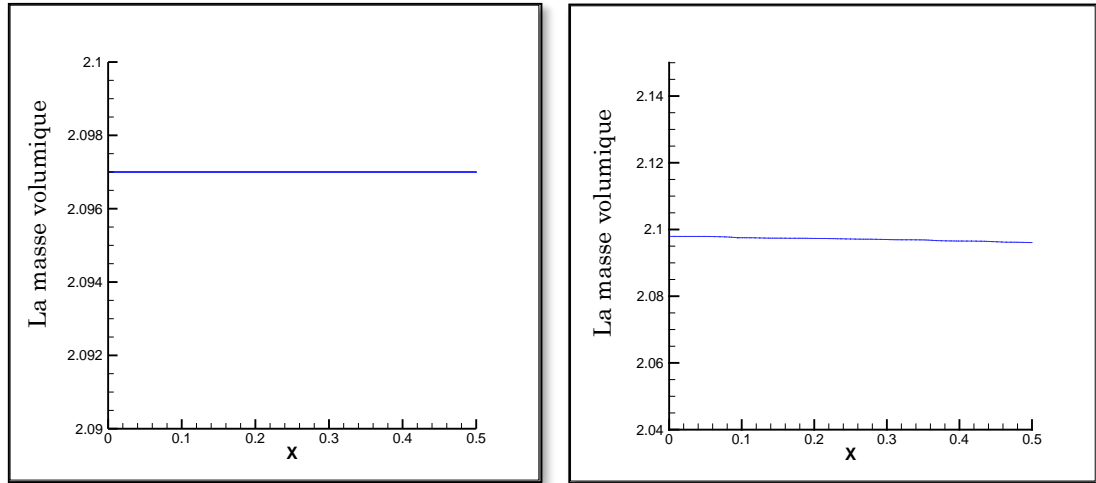


a) l'effet de la thermodiffusion négligé b) avec l'effet de la thermodiffusion

Fig.5.5 : l'influence de l'effet Soret pour une perméabilité de 10^{-13}m^2

La Fig.5.5.a : montre une valeur constante de la masse volumique du mélange le long de la diagonale, ce qui explique une homogénéité du mélange binaire (méthane et n-butane). Par contre dans la Fig.5.5.b la masse volumique du mélange varie le long de la diagonale. A ($x = 0$), sa valeur représente la masse volumique de n-butane pur qui s'accumule à côté de la paroi froide, puis elle décroît jusqu' à atteindre sa valeur minimale à ($x = 0.5$), à ce point elle représente la masse volumique de méthane pur, qui migre vers la paroi chaude.

La même analyse est entreprise pour une valeur de la perméabilité égale à 10^{-10}m^2 (Fig.5.6). La distribution de la masse volumique dans le cas où nous tenons compte de l'effet Soret est presque homogène. Cette homogénéité est due à l'effet de la convection, qui sera expliqué par la suite.



a) l'effet de la thermodiffusion négligé b) avec l'effet de la thermodiffusion

Fig.5.6 : l'influence de l'effet Soret pour une perméabilité de 10^{-10}m^2

V.3.2 l'effet de la convection

La convection naturelle a un effet crucial dans l'analyse de la thermodiffusion (effet Soret). Dans le champ d'écoulement (Fig.5.7), la convection due à la flottabilité se manifeste par un déplacement du fluide vers le haut de la cavité le long de la paroi chaude (paroi droite), et vers le bas le long de la paroi froide (paroi gauche).

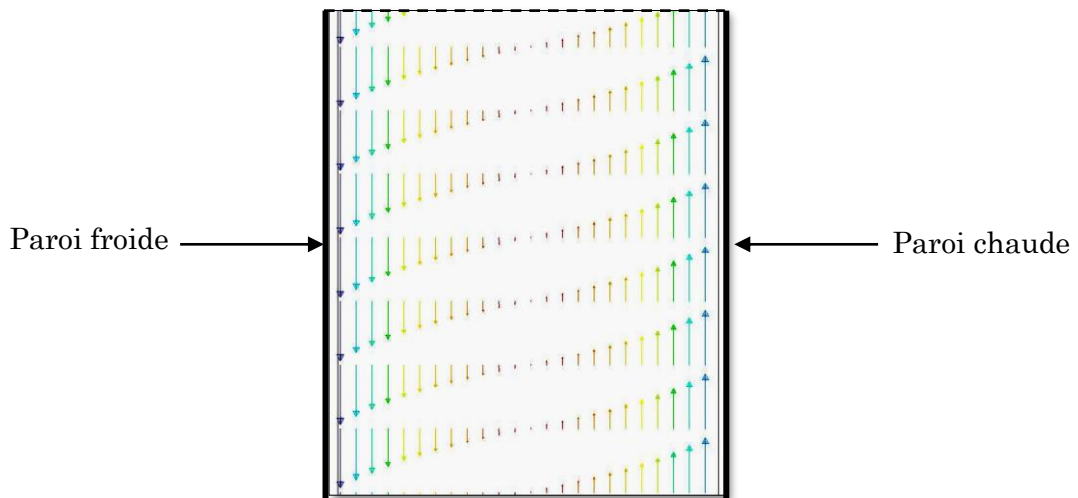


Fig.5.7: Les vecteurs de vitesse dans une section horizontale de la cavité

La convection naturelle est contrôlée par le nombre adimensionnel de Rayleigh thermique, Elhajjar et al (2008) ont étudié la séparation (S) en fonction du nombre de Ra pour différentes valeurs du nombre de Lewis. Ces mêmes auteurs ont démontré que la séparation due à l'effet Soret est importante lorsque la convection est faible. Autrement dit, pour des valeurs croissantes de Ra, la séparation décroît (Fig.5.8).

Notons que le nombre de Ra est défini par $R_{aT} = \frac{g\beta_T\Delta TL_c\kappa}{\nu a}$, Charles et al (2006), avec :

g : Le vecteur d'accélération gravitationnelle ($m.s^{-2}$)

β_T : Coefficient d'expansion de volume thermique (K^{-1})

ΔT : Différence de température

L_c : Longueur caractéristique

κ : Perméabilité intrinsèque de milieu poreux (m^2)

ν : La viscosité cinématique de mélange ($m^2.s^{-1}$)

a : La diffusivité thermique ($m^2.s^{-1}$)

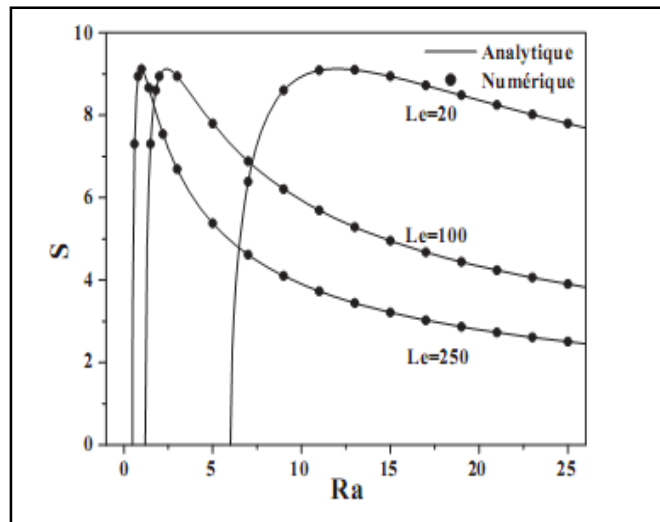


Fig.5.8 : La séparation en fonction de Ra pour différentes valeurs du nombre de Lewis, Elhajjar et al (2008)

De ce point de vue, et tenant compte que le nombre de Ra est proportionnel à la perméabilité de milieu poreux κ , il nous semble très pertinent de déterminer la perméabilité optimale de milieu poreux, qui correspond à une séparation maximale.

V.3.3 l'effet de la perméabilité

Pour étudier la convection thermosolutale avec l'effet Soret nous avons choisi le rapport de séparation, (q), comme variable, tel que défini ci-dessous:

$$q = \frac{(x_1/(1-x_1))_c}{(x_1/(1-x_1))_f}$$

Avec : x_1 la fraction molaire du constituant le plus léger, C la fraction molaire maximale dans la paroi chaude, et f la fraction molaire minimale dans la paroi froide.

En augmentant la perméabilité du milieu poreux, en présence de l'effet Soret, différents comportements de convection thermosolutale se produisent. La (Fig.5.9) présente la variation du rapport de séparation en fonction de la perméabilité.

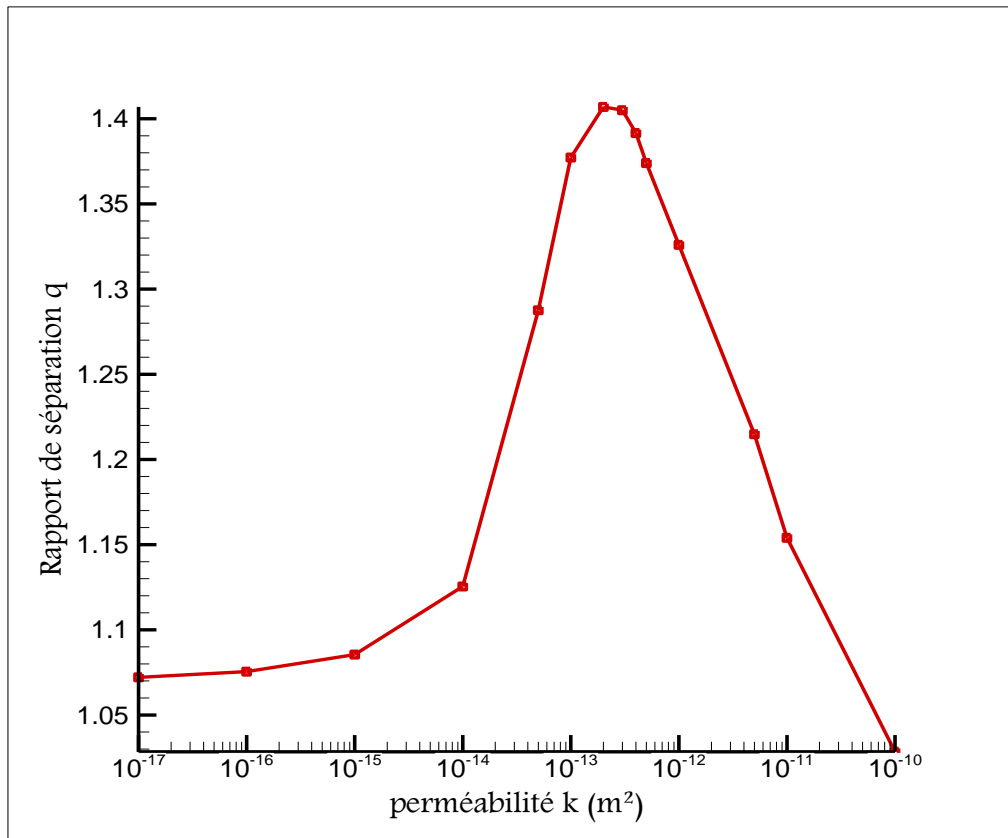
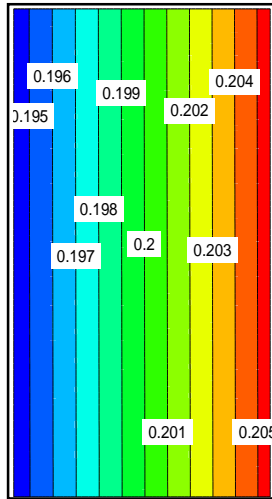


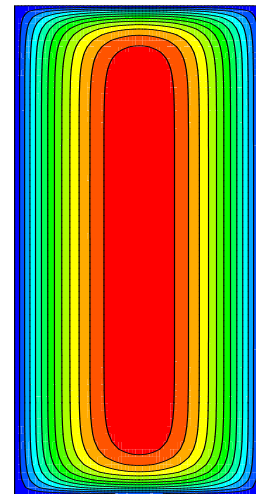
Fig.5.9 : variation du facteur de séparation q en fonction de la perméabilité κ

1) À faible perméabilité, 10^{-17} m^2 (Fig.5.10), la présence de l'effet Soret est évidente, le constituant le plus léger (CH_4) migre vers la paroi chaude (droite), et la convection à une faible valeur. Cette importance de l'effet Soret continue à être apparente jusqu' à ce que la valeur de la perméabilité atteint 10^{-14} m^2 .

2) Pour une gamme de perméabilités entre 10^{-14} et 10^{-12} m^2 , on observe un pic dans le rapport de séparation. La séparation optimale correspond à une perméabilité d'environ 10^{-13} m^2 . la (Fig.5.11), explique la contribution harmonique entre la convection et la thermogravitation (la thermogravitation).

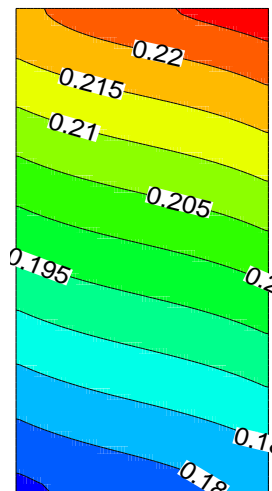


a) Les isoconcentrations de CH_4

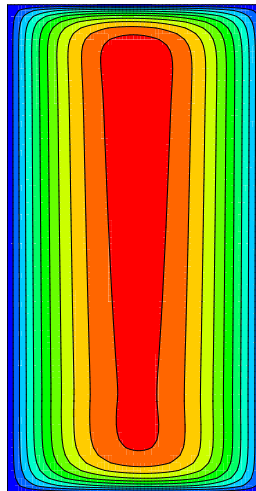


b) Les lignes de courants

Fig.5.10 : résultats pour $k = 10^{-17} \text{ m}^2$



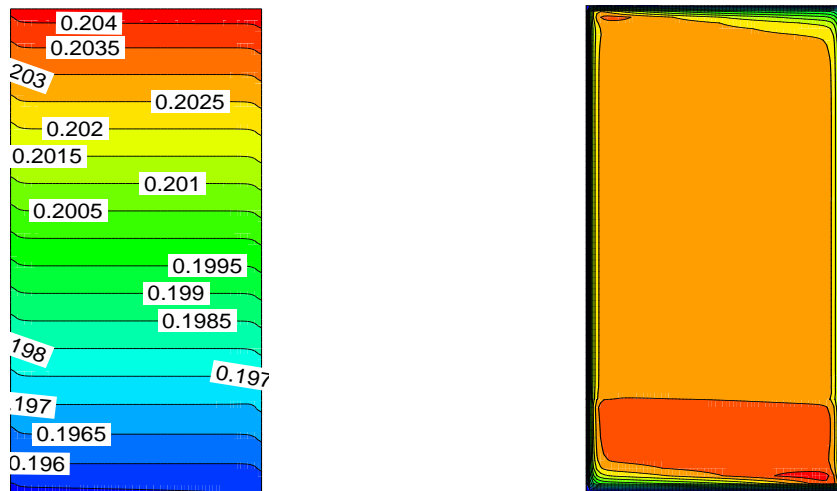
a) Les isoconcentrations de CH_4



b) Les lignes de courants

Fig.5.11 : résultats pour $k = 10^{-13} \text{ m}^2$

3) Il a été constaté qu'au-delà d'une valeur de la perméabilité de 10^{-12} m^2 , la convection exerce un effet négatif sur la séparation des constituants. Quand la perméabilité dépasse une valeur de 10^{-10} m^2 , le mélange sera homogène et la séparation n'a pas lieu. Les isoconcentrations de CH_4 (Fig.5.12) sont dues principalement à la différence de la masse volumique du mélange binaire (pas de migration vers les zones chaudes). Pour les lignes de courants, on observe que le centre de l'écoulement change lorsque la perméabilité du milieu poreux augmente.



a) Les isoconcentrations de CH_4 b) Les lignes de courants

Fig.5.12 : résultats pour $k = 10^{-10} \text{ m}^2$

V.4 Analyse de l'effet Soret dans un milieu poreux hétérogène

Dans cette partie d'analyse, nous proposons d'introduire une fracture (qui peut être considérée comme un autre milieu poreux, avec des perméabilités légèrement supérieures) dans la cavité poreuse de dimensions ($0.5 \text{ m} \times 5 \text{ m}$), et voir l'influence de ses caractéristiques (perméabilité, positionnement, inclinaison, ...) sur la séparation, qui sera calculée par le facteur de séparation q .

V.4.1 l'influence de la perméabilité de la fracture

Plusieurs cas sont analysés sur la base du rapport de perméabilité entre le milieu poreux et la fracture. Nous considérons un milieu poreux d'une perméabilité k_{mp} , avec une fracture horizontale ou verticale, (Fig.5.13), d'épaisseur $e = 5\text{cm}$. Pour chaque perméabilité k_{mp} , plusieurs valeurs de perméabilité de fracture k_F (supérieures à celle du milieu poreux), sont analysées :

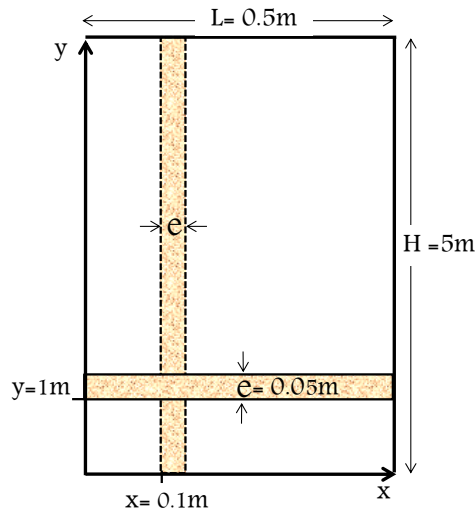


Fig.5.13 : Géométrie et positionnement de la fracture.

Dans les figures suivantes, nous présentons les courbes de séparation q en fonction de la perméabilité de la fracture k_F , pour chaque perméabilité du milieu poreux k_{mp} :

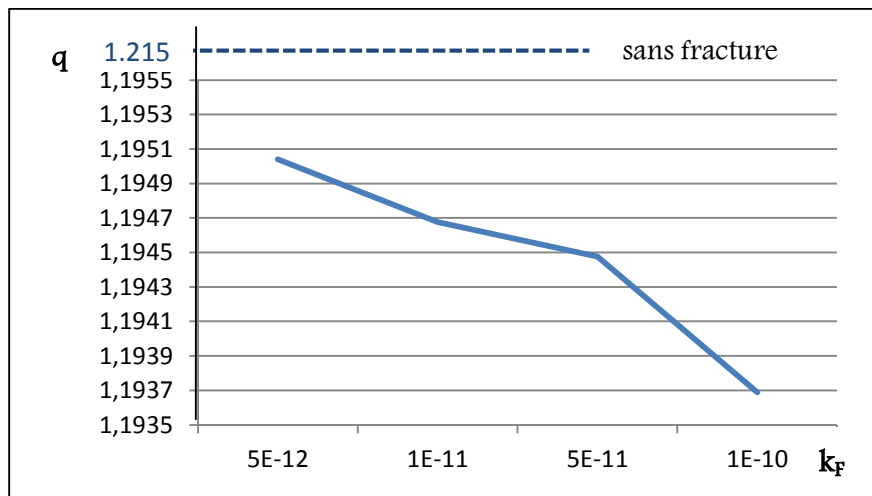


Fig.5.14 : l'influence de la perméabilité de la fracture k_F sur la séparation
a) fracture horizontale, $k_{mp}=10^{-12}\text{m}^2$.

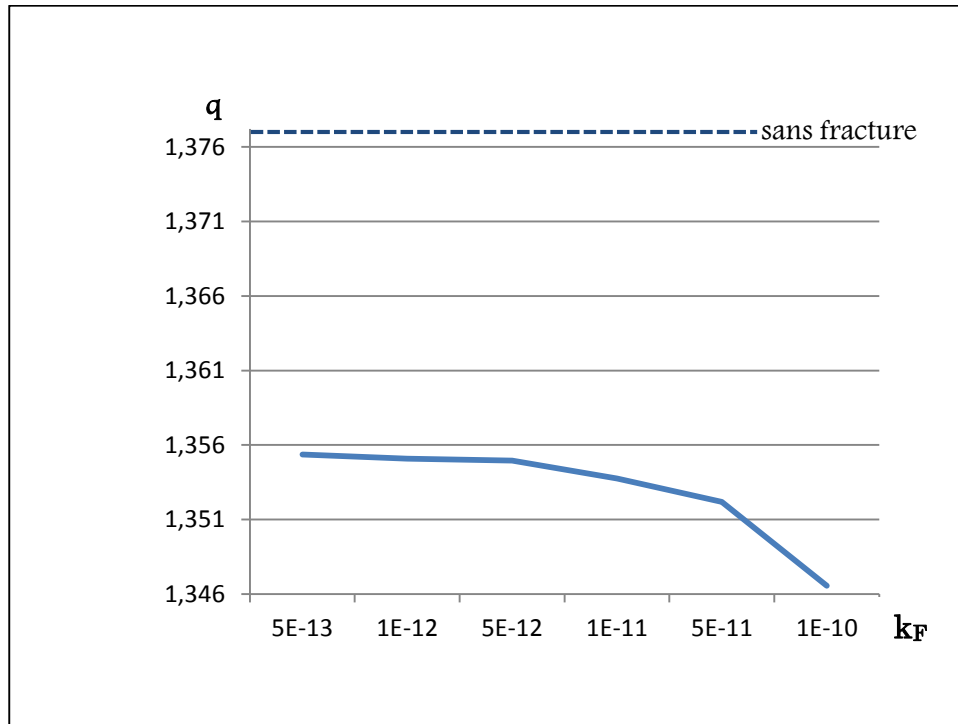


Fig.5.14 : l'influence de la perméabilité de la fracture k_F sur la séparation
b) fracture horizontale, $k_{mp} = 10^{-13} m^2$ (k_{mp} optimale).

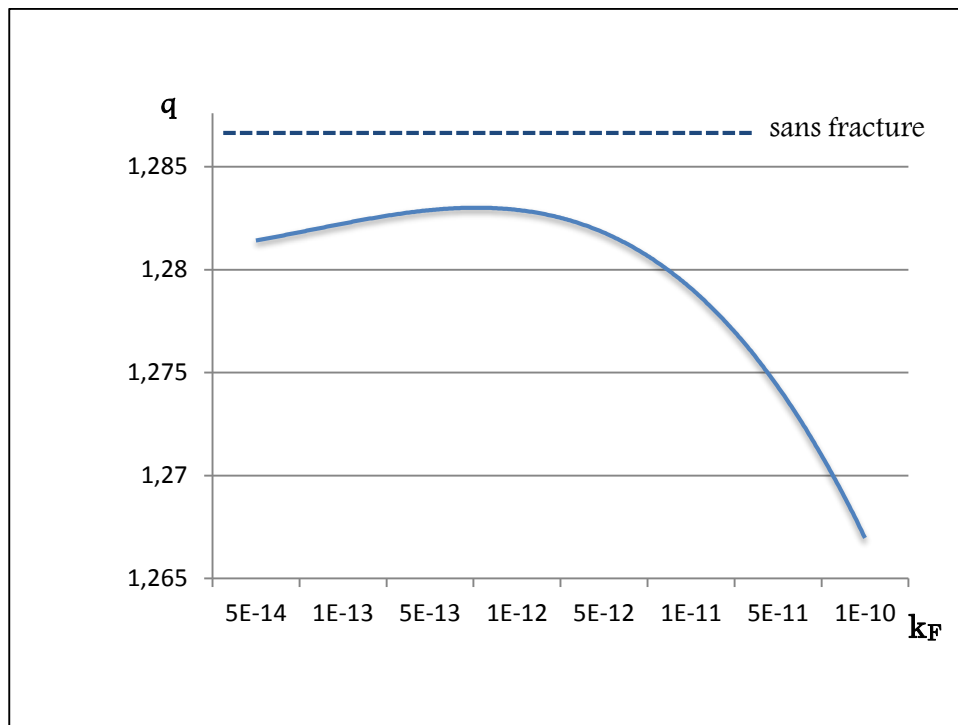


Fig.5.14 : l'influence de la perméabilité de la fracture k_F sur la séparation
c) fracture horizontale, $k_{mp} = 10^{-14} m^2$.

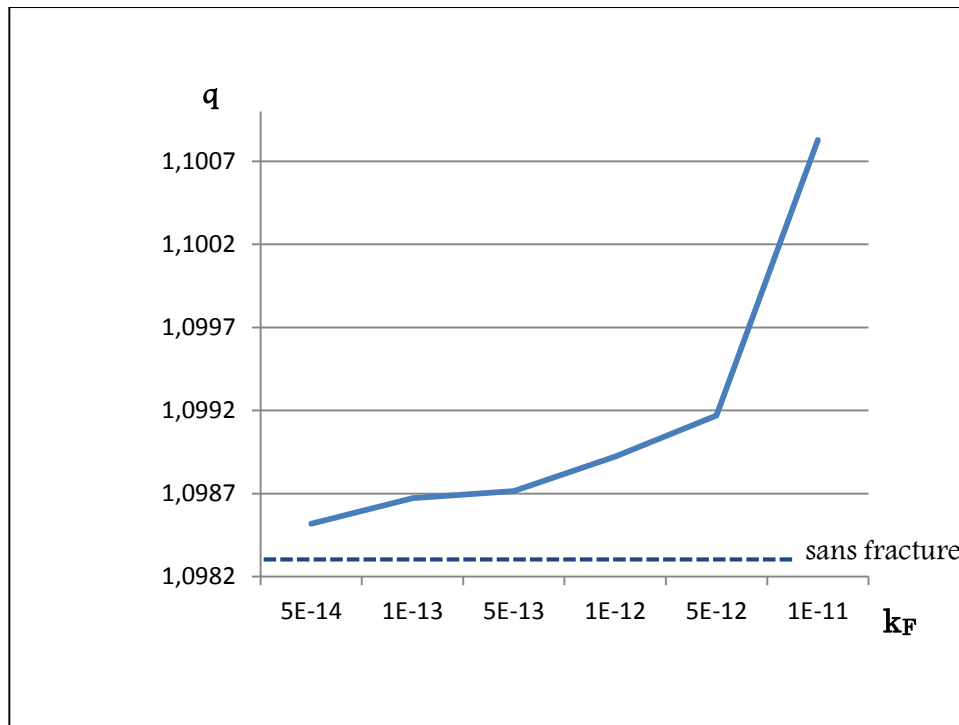


Fig.5.14 : l'influence de la perméabilité de la fracture k_F sur la séparation
d) fracture horizontale, $k_{mp} = 10^{-15} m^2$.

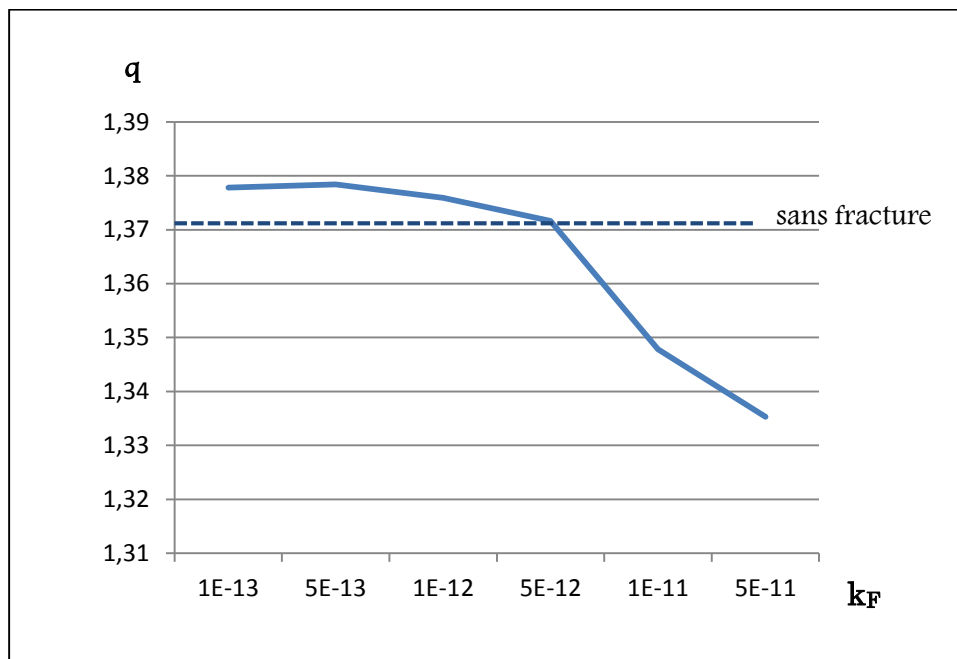


Fig.5.14 : l'influence de la perméabilité de la fracture k_F sur la séparation
e) fracture verticale, $k_{mp} = 5 \cdot 10^{-14} m^2$.

La (Fig.5.14. a) représente le cas d'une perméabilité de milieu poreux supérieure à celle de l'optimale, donc si nous introduisons une fracture, (d'une perméabilité supérieure à celle du milieu poreux) la perméabilité effective du milieu poreux fracturé augmente, ce qui conduit à une mauvaise séparation. De ce même point de vue, on peut expliquer le cas où la perméabilité de milieu poreux fracturé est optimale (Fig.5.14. b).

Pour le cas où la perméabilité du milieu poreux est légèrement inférieure à celle de l'optimale (Fig.5.14. c), le fait d'introduire une fracture horizontale dans ce milieu, l'écoulement convectif sera perturbé, ce qui provoque une diminution relative de séparation par rapport au milieu poreux homogène, et la fracture dans ce cas (horizontal) peut être considérée comme un obstacle.

L'augmentation de la perméabilité de la fracture k_F , contribue à l'augmentation de la perméabilité du milieu poreux effectif, ce qui conduit à une séparation légèrement supérieure, jusqu' à ce que la valeur de perméabilité soit $k_F = 10^{-12} \text{ m}^2$. Au-delà de cette valeur, le rapport de perméabilité entre la fracture, et le milieu poreux sera plus grand, ce qui limite l'écoulement convectif seulement dans la fracture, ce qui explique la chute du rapport de séparation. Pour mieux comprendre l'effet de la perméabilité de la fracture, les lignes de courants sont présentées - pour différentes perméabilités de fracture k_F - dans la (Fig.5.15).

Pour le cas où la perméabilité du milieu poreux $k_{mp}=10^{-15}\text{m}^2$ (Fig.5.14. e), l'écoulement convectif est faible. L'introduction d'une fracture contribue à l'augmentation de la perméabilité effectif du milieu poreux. D'autre part, la perméabilité de la fracture, peut être considérée -cette fois- comme un moteur d'écoulement, et assure des vitesses relativement plus élevées, permettent une meilleure séparation. La (Fig.5.16) nous montre les lignes de courants dans les deux cas (avec et sans fracture).

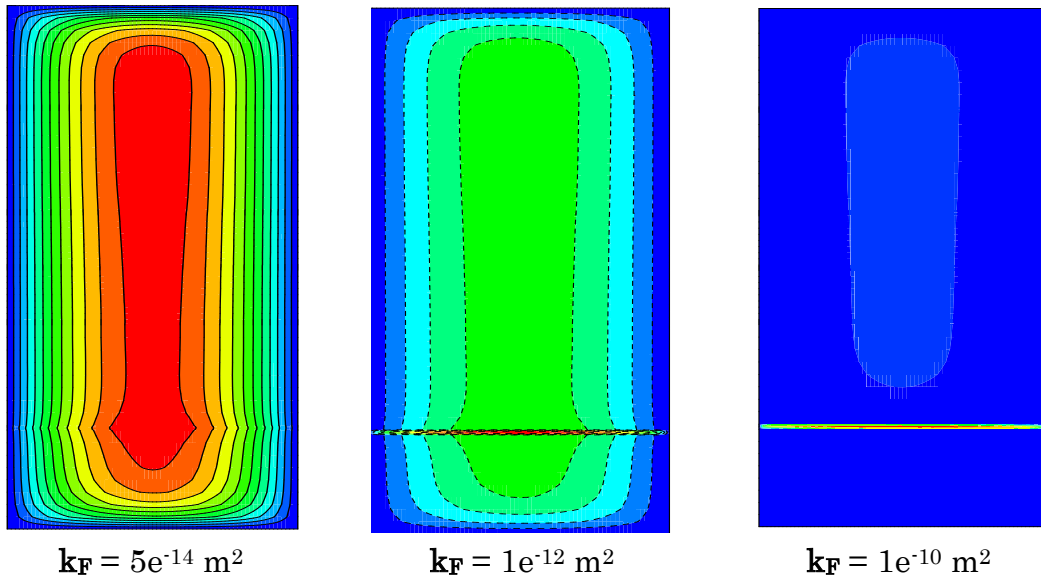


Fig.5.15 : les lignes de courants pour $k_{mp}=10^{-14}m^2$

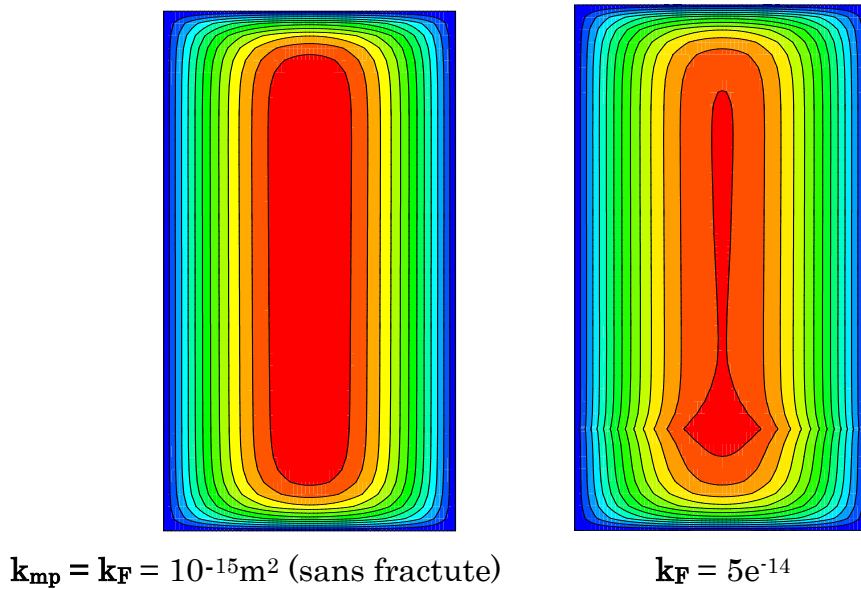


Fig.5.16 : les lignes de courants pour $k_{mp}=10^{-15}m^2$

Il s'agit pour le dernier cas de cette analyse (Fig.5.14.e), d'une fracture verticale. Dans ce cas nous pouvons constater que la séparation est supérieure à celle du milieu homogène. Si nous comparons ce cas avec celui d'une fracture horizontale (Fig.5.14.c), nous pouvons constaté que la fracture verticale favorise la séparation. A la lumière de la (Fig.5.7) on trouve que l'orientation de la fracture verticale est dans le sens de l'écoulement. Nous concluons que la fracture horizontale peut être considérée comme un obstacle dans la plupart des cas. Nous constatons à travers la (Fig.5.14.e) que

l'augmentation de la perméabilité de la fracture, réduit la séparation. Enfin, il est utile de noter que pour une valeur de perméabilité de la fracture k_F égale à $5 \cdot 10^{-12} \text{m}^2$, cette dernière n'a aucun effet sur la séparation.

V.4.2 l'influence de la taille de la fracture

Dans certains cas, comme nous l'avons expliqué précédemment, la fracture contribue à la perméabilité totale équivalente du milieu poreux. Pour vérifier cette logique, une analyse de l'influence de la taille de la fracture sur la séparation a été faite. Nous faisons varier la perméabilité de la fracture k_F pour chaque épaisseur, tandis que la perméabilité du milieu poreux k_{mp} est égale à 10^{-13}m^2 (optémale). Comme a été constaté dans les (Fig.5.14.a,et b), la perméabilité du milieu poreux fracturé (équivalent), dans ce cas, cause une diminution de la séparation. Les résultats obtenus sont présentés dans la (Fig.5.17).

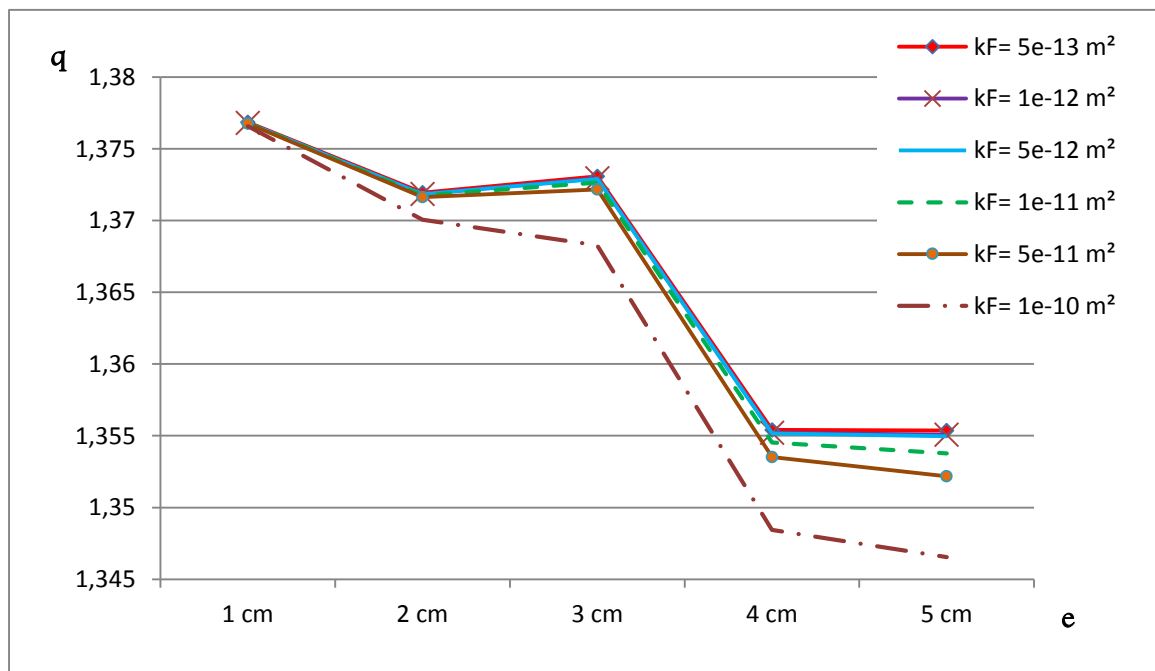


Fig.5.17 : l'influence de la taille de la fracture sur la séparation

Il est clair que l'augmentation de la taille de la fracture (Fig.5.17). donne plus d'importance à son effet de perméabilité. Nous remarquons que l'effet de la taille de la fracture sur la séparation devient visible, lorsque ce dernier

augmente. Toutefois, il est possible que le cas optimale ne soit pas rencontré dans cette analyse.

Pour des valeurs de la perméabilité de fracture, inférieures à $1e^{-10}m^2$, on observe une augmentation légère de la séparation à une épaisseur $e= 3cm$. Afin de comprendre cet effet, on présente pour le cas d'une fracture de perméabilité égale à $1e^{-12}m^2$, les lignes de courants correspondantes aux épaisseurs 1cm, 2cm, et 3cm, et pour le cas d'une fracture de perméabilité égale à $1e^{-10}m^2$, nous présentons les lignes de courants correspondantes à une épaisseur de 3cm (Fig.5.18). Il semblerait que pour $k_F < 1e^{-10}m^2$ l'épaisseur $e = 3cm$, permet d'avoir une meilleure distribution du champ de la vitesse dans la cavité, ce qui favorise la séparation.

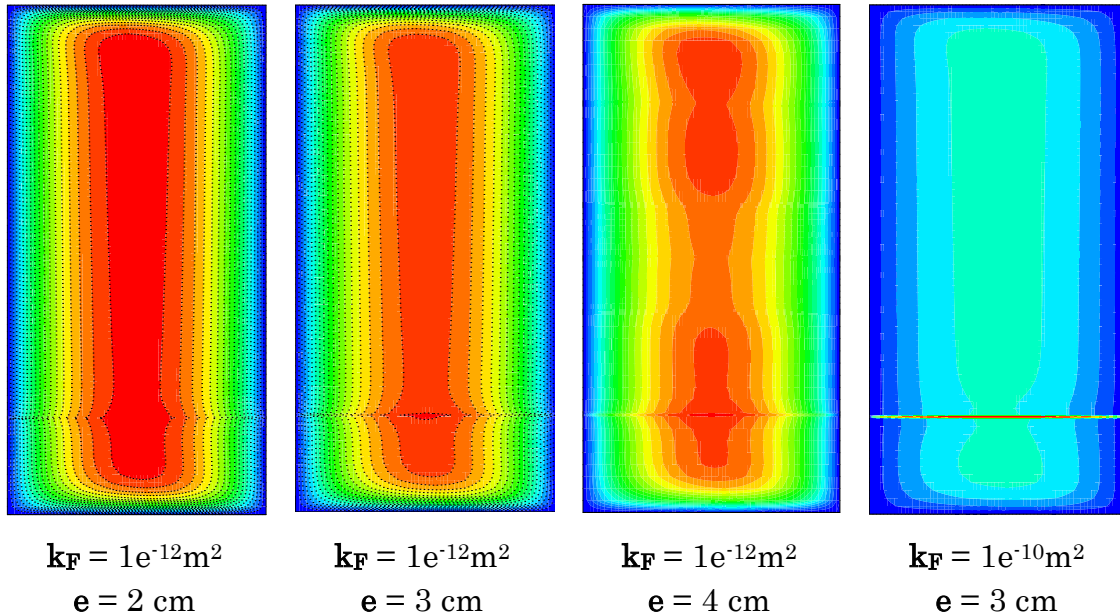


Fig.5.18 : les lignes de courants pour $k_{mp} = 1e^{-13}m^2$, et k_F , et e varié

V.4.3 l'influence du nombre des fractures

Dans cette partie d'analyse, afin de confirmer les résultats précédents, nous avons choisi une perméabilité du milieu poreux égale à $1e^{-14}m^2 (< k_{optimale})$, et des fractures horizontales d'épaisseurs de 5cm pour chacune, distribuées le long de la hauteur de la cavité. Les résultats de cette analyse (Fig.5.19) indique que la perméabilité de la fracture contribue à l'augmentation de la perméabilité totale (effective) du milieu poreux. D'autre

part, elle peut défavoriser la séparation (le cas d'une, ou de deux fractures de perméabilité $k_F = 1e^{-13}m^2$).

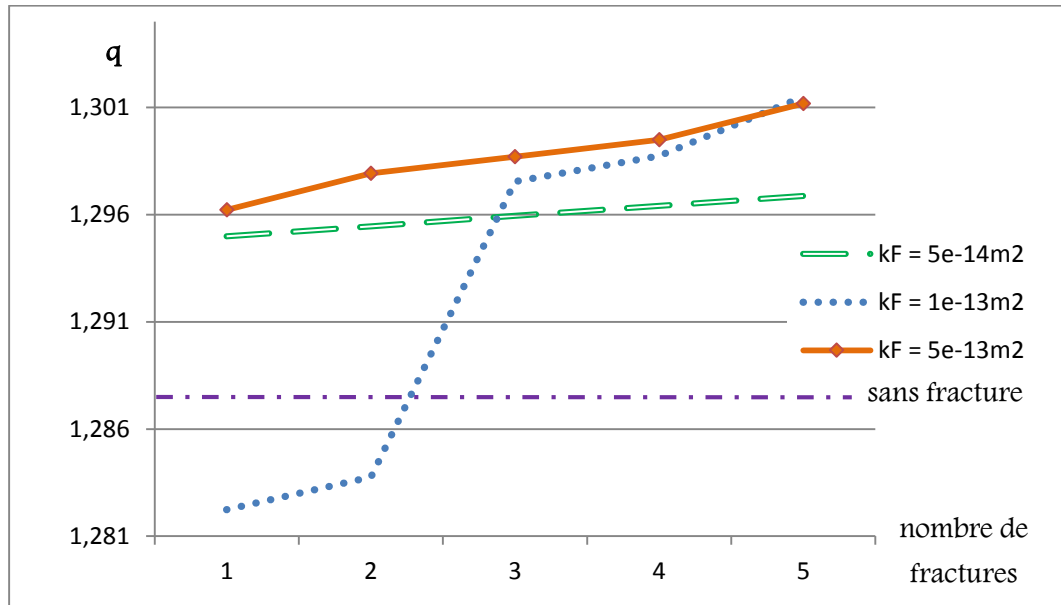


Fig.5.19 : l'influence du nombre des fractures sur la séparation

V.4.4 l'influence de la position de la fracture

Comme discuté précédemment, la position de la fracture joue un rôle très important dans la séparation des constituants. Pour mieux appréhender cet effet, nous prenons le cas d'une fracture horizontale (verticale) d'épaisseur de 5cm, et de perméabilité de $1e^{-12}m^2$, tandis que la perméabilité du milieu poreux est égale à $5e^{-13}m^2$. L'influence de la position de la fracture (dans l'axe des coordonnées "y" (abscisse "x")) sur la séparation est présentée dans les (Fig.5.20), (Fig.5.21).

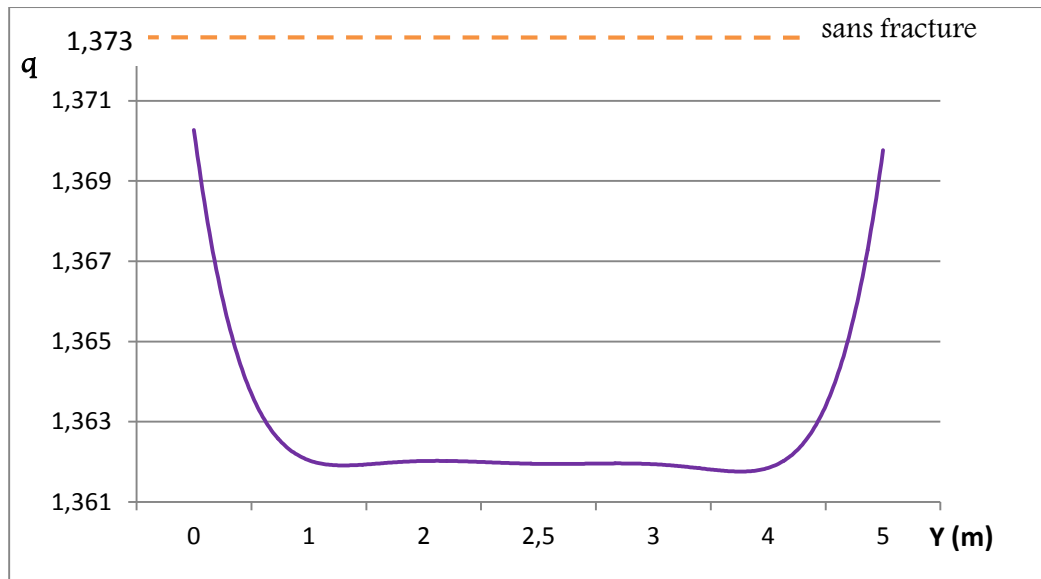


Fig.5.20 : l'influence de la position d'une fracture horizontale sur la séparation.

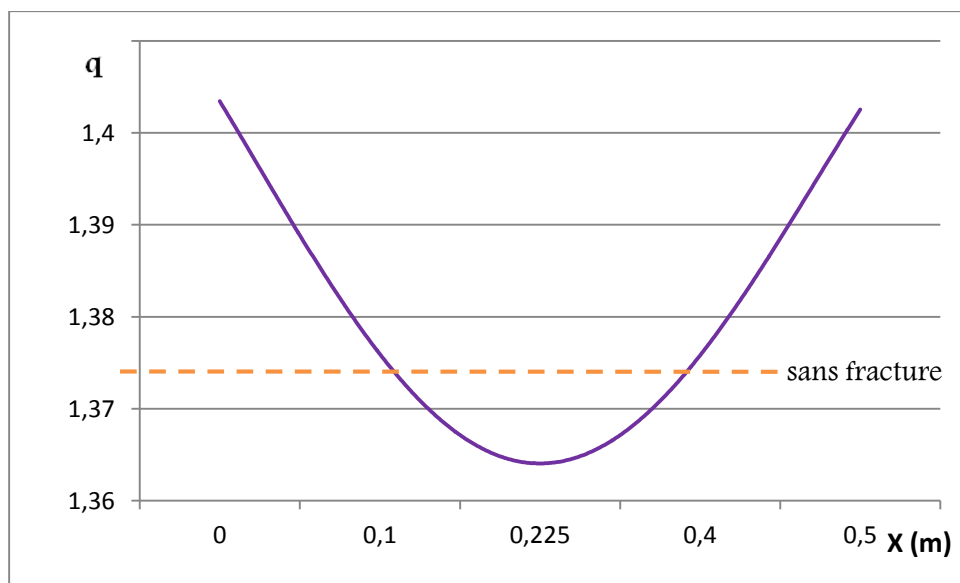


Fig.5.21 : l'influence de la position d'une fracture verticale sur la séparation.

D'après ces résultats, il est clair que la position d'une fracture à l'extrémité de la cavité permet d'avoir des valeurs de séparation supérieures à celle positionnée au milieu. D'autre part, la fracture verticale exerce un effet positif sur la séparation, due à son orientation proportionnelle aux lignes de courants (cavité verticale).

V.4.5 l'influence de l'inclinaison de la fracture

Afin d'avoir une idée sur l'influence de l'inclinaison d'une fracture sur la séparation, nous considérons un milieu poreux d'une perméabilité $k_{mp} = 5e^{-13}m^2$, avec une fracture d'une perméabilité $k_F = 1e^{-13}m^2$, et d'épaisseur $e = 3cm$, inclinée par un angle a variant de 0° jusqu'à 180° , (Fig.5.22). Pour chaque angle d'inclinaison a , on calcule le facteur de séparation q . Plusieurs cas sont analysés :

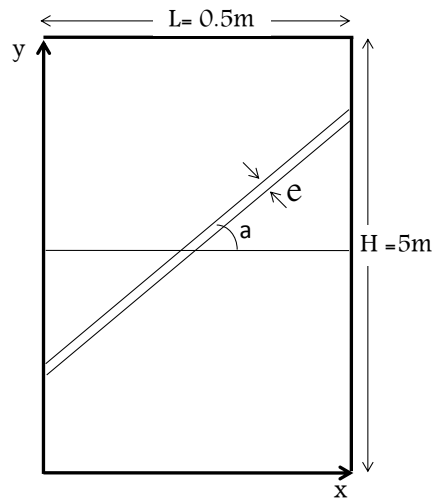


Fig.5.22 : Géométrie et positionnement de la fracture inclinée.

Les résultats de cette analyse, représentés dans la (Fig.5.23) montrent que pour des valeurs d'angle d'inclinaison a inférieures à 90° (située au milieu de la figure), l'augmentation de ce dernier exerce un effet négatif sur la séparation, tandis que pour des valeurs d'angle d'inclinaison a supérieures à 90° , l'augmentation d'angle d'inclinaison favorise la séparation. D'une autre façon, on peut conclure que dans un milieu poreux fracturé (fracture inclinée), la séparation augmente si $|\cos(a)| \rightarrow 1$. On note que les fractures symétriques à la verticale ont les mêmes surfaces, pour cela on compare les valeurs de séparation pour les angles symétriques à la verticale.

Il nous semble que lorsque l'inclinaison se situe vers le côté chaud, la séparation est relativement inférieure à celle inclinée vers le côté froid.

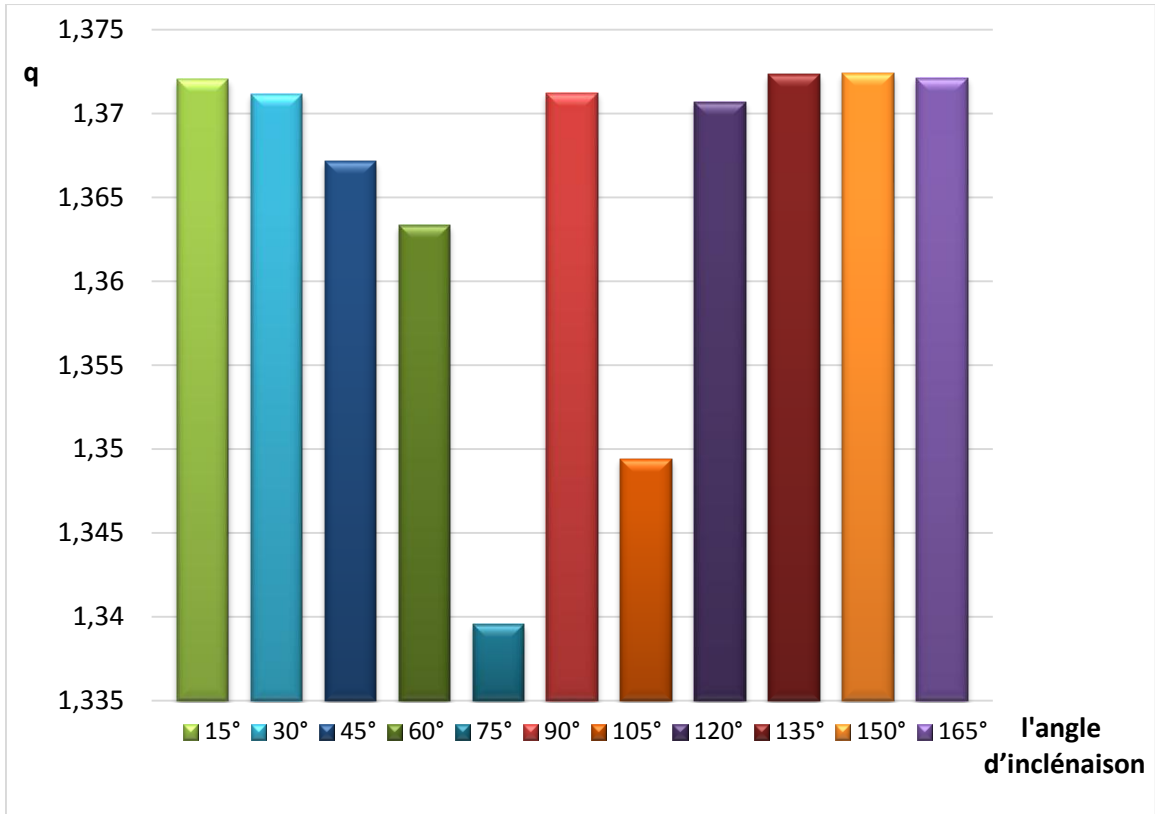


Fig.5.23 : l'influence de l'inclinaison des fractures sur la séparation

V.5. Conclusion

A travers toute l'analyse entreprise dans ce chapitre, nous pouvons conclure que la convection thermosolutale dans les milieux poreux est significativement affectée par l'effet Soret, où la perméabilité est le paramètre dominant.

La perméabilité optimale du milieu poreux (correspond à une séparation maximale) correspond à une perméabilité égale à 100 md (10^{-13}m^2) approximativement.

L'existence d'une fracture dans le milieu poreux, influe fortement sur l'écoulement convectif, ce dernier influe de son part sur la séparation. En d'autres termes la fracture contribue à la perméabilité effective de milieu poreux, ce qui change l'influence des forces de flotabilités de la convection, qui modifie la séparation.

Finalement, nous constatons que l'augmentation de la séparation dans un milieu fracturé est liée à plusieurs paramètres tel que le rapport de perméabilité entre la fracture et le milieu poreux, l'épaisseur, la taille, et la positionnement de la fracture.

Conclusion Générale

Au terme de cette étude, plusieurs analyses ont été élaborées afin de quantifier l'effet de la thermodiffusion ou effet Soret -dans un mélange binaire d'hydrocarbure monophasique- sur la convection naturelle en milieu poreux. Le modèle mathématique a été validé et comparé avec les résultats de Charles et al (2006).

L'analyse du comportement de l'effet Soret a été faite sur la base : des répartitions de la masse volumique du mélange, de la concentration en méthane dans la cavité poreux, et des taux de séparation, q . Les résultats ont montré des phénomènes couplés consistants.

La principale conclusion de cette étude est que l'effet de la thermodiffusion sur la convection dans un système binaire d'hydrocarbures, est contrôlé par un paramètre clé, c'est la perméabilité du milieu poreux. Pour de faibles perméabilités du milieu poreux, l'effet Soret atteint sa plus grande signification. Pour des valeurs des perméabilités voisines de 100 md, la séparation atteint sa valeur maximale. D'autant la perméabilité du milieu poreux augmente, d'autant la convection prend plus d'importance, jusqu'à ce que les forces de flottabilités de la convection dominent le domaine, et

Conclusion Générale

l'effet Soret sera stoppée complètement. Cela correspond à des valeurs de perméabilités proches de 100.000 md.

L'existence d'une fracture dans le milieu poreux, change fortement le comportement de l'écoulement thermogravitationnel. Pour des perméabilités des milieux poreux k , inférieurs à k_{optimal} la fracture peut contribuer à l'augmentation de la séparation (selon sa perméabilité, position, taille, ...). Mais pour des perméabilités des milieux poreux supérieures ou égales à k_{optimal} , l'existence d'une fracture exerce des effets négatifs sur la séparation.

Au terme de ce mémoire, nous estimons que notre travail peut être complété par d'autres analyses, dans les milieux poreux hétérogènes. Cela pourrait être entamé dans le futur.

Références bibliographie

- Alloui, Z., A. Merabtine, et P. Vasseur. «Soret and thermosolutal effects on natural convection in a vertical cavity filled with a binary mixture.» *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 88 (2010): 718-727.
- Bahloul, A., M. A. Yahiaoui, P. Vasseur, R. Bennacer, et H. Beji. «Natural Convection of a Two-Component Fluid in Porous Media Bounded by Tall Concentric Vertical Cylinders.» *Journal of Applied Mechanics (ASME)* 73 (2006): 26-33.
- Bejan, A., et D. A. Nield. *Convection in Porous Media*. Amsterdam: Springer Verlag, 1998.
- Bories, S. A. *Fragment de description de la physique des transferts thermiques dans le sous – sol*. Vol. 3. La Houille Blanche, 1985.
- Boutana, M. N. «CONVECTION NATURELLE DANS UN MILIEU POREUX SOUMIS À L’EFFET SORET.» Mémoire de maîtrise des sciences appliquées, Université de Montréal, 2002.
- Charles-Guobing, J. «modeling of thermo-solutal convection in porous media.» thèse de doctorat, Toronto, 2005.
- Charles-Guobing, J., M. Z. Saghir, et M. Kawaji. «Numerical Analysis of thermal-Solutal Convection in Heterogeneous Porous Media.» *Journal of Applied Mechanics (ASME)* 73 (2006): 21-25.
- Charles-Guobing, J., M. Z. Saghir, M. Kawaji, et K. Ghorayeb. «Two-dimensional numerical simulation of thermo-gravitational convection in a vertical porous column filled with a binary fluid mixture.» *International Journal of Thermal Sciences* 43 (2004): 1057–1065.
- Chassaing, P. *Mécanique des fluides, éléments d’un premier parcours*. Collection Poplytech, 2000.
- Clusius, K., et G. Dickel. «New Process for separation of gas mixtures and isotopes,» *Naturwissenschaften* 26 (1938): 546.

Références bibliographie

- Costesèque, P., A. Mojtabi, et J. K. Platten. «Thermodiffusion phenomena.» *Comptes Rendus Mecanique*, n° 339 (2011): 275–279.
- Davarzani, H. «Déterminations Théorique et Expérimentale des Coefficients de Diffusion et de Thermodiffusion en Milieu Poreux.» thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, 2010.
- de Groot, S. R. «L'Effet Soret. Diffusion thermique dans les phases condensées.» Thèse de Doctorat, Amsterdam, 1945.
- De Groot, S. R. «Theorie phenomenologique du procede thermo-gravitationnel de separation dans un liquide.» *Physica IX*, n° 8 (1942): 801-816.
- Dupuis, A. «Diffusion thermique.» *Génie des procédés chimiques: transferts de chaleur et de matière, Techniques de l'Ingénieur*, 1983.
- El Hajjar, B. «sur le couplage thermodiffusion-convection: séparation et instabilités induit par de nouvelles configuration géométriques et thermiques.» Thèse de doctorat, (IMFT) Toulouse, 2008.
- Elhajjar, B., A. Mojtabi, M. Marcoux, et M. C. Charrier-Mojtabi. «Etude de la thermogravitation dans une couche fluide horizontale.» article, Université Paul Sabatier, Toulouse, 2009.
- Elhajjar, B., A. Mojtabi, P. Costesèque, et M. C. Charrier-Mojtabi. «Separation in an inclined porous thermogravitational cell.» *International Journal of Heat and Mass Transfer* 53 (2010): 4844 – 4851.
- Elhajjar, B., M. C. Charrier-Mojtabi, et A. Mojtabi. «Separation of a binary fluid in a porous horizontal cavity.» *Physical Review E* 77, n° 2 (2008): 026310.
- Ergun, S. «Fluid flow through packed columns.» *Chem. Eng. Progr.* 48 (1952): 88-94.
- Firoozabadi, A., K. Ghorayeb, et k. Shukla. «Theoretical Model of Thermal Diffusion Factors in Multicomponent Mixtures.» *AIChE* 46, n° 5 (2000): 892-900.
- Galliéro, Guillaume. «thermodiffusion dans les fluides de LENNARD-JONES par dynamique moléculaire.» thèse de doctorat, 2003.
- Glover, Paul. «Petrophysics MSc Course Notes, Permeability.» comptes rendus du cours, Paul.
- Ho, C. K., et S. W. (Eds.) Webb. *Theory and Applications of Transport in Porous Media: Gas Transport in Porous Media*. Vol. 20. 2006.
- Jean-François, Daïan. *Equilibre et transferts en milieux poreux*. Vol. 1. 2010.
- Kaviany, M. *principles of heat transfer in porous media*. Springer, 1995.
- Lorenz, M., et A. H. Emery. «The packed thermodiffusion column.» *Chemical Engineering Science* 11 (1959): 16–23.

Références bibliographie

- Lorenz, M., et A. H. JR. Emery. «The packed thermal diffusion column.» *Chemical Engineering Science* 11 (1959): 16-23.
- Ludwig, C. «Diffusion zwischen ungleich erwärmten Orten gleich zusammengesetzter.» *Akad. Wien. Math. Naturwiss.* 20 (1856): 539.
- Malashetty, M.S., M. Swamy, et R. Heera. «Double diffusive convection in a porous layer using a thermal non-equilibrium model.» *International Journal of Thermal Sciences* 47 (2008): 1131–1147.
- Mansour, A., A. Amahmid, et M. Hasnaoui. «Soret effect on thermosolutal convection developed in a horizontal shallow porous layer salted from below and subject to cross fluxes of heat.» *International Journal of Heat and Fluid Flow* 29 (2008): 306–314.
- Mansour, A., A. Amahmid, M. Hasnaoui, et M. Mamou. «Onset of thermosolutal convection in a shallow porous layer heated and salted from below and subject to a horizontal heat flux balanced by a Soret mass flux.» *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50 (2007): 2148–2160.
- Marcoux, M., et M. C. Charrier-Mojtabi. «Etude paramétrique de la thermogravitation en milieu poreux.» *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences.* 1998. 539–546.
- Muhammad, Sahimi. *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock.* Second Edition. University of Southern California: WILEY-VCH, 2011.
- Ouazaa, N. «Etude de la convection thermosolutale dans les milieux poreux confinés.» Mémoire de magister, Université Mentouri, Constantine, 2008.
- Paszruta, M. «Phénomènes de transport couplés dans les argiles du callovo-oxfordien.» thèse de doctorat, Paris, 2005, 11.
- Peng, Ding Yu, et Donald B. Robinson. «A New Two-Constant Equation of State.» *Ind. Eng. Chem., Fundam.* 15, n° 1 (1976): 59-64.
- Platten, J. K. «Enhanced molecular separation in inclined thermogravitational columns.» *The Journal of Physical Chemistry B* 107, n° 42 (2003): 11763–11767.
- Rutherford, W. M., et J. G. Roof. «thermal diffusion in methane-n-butane mixture in the critical region.» *Chem*, n° 63 (1959): 1506.
- Saxena, S. C., et E. A. Mason. «Thermal diffusion and the approach to the steady state in gases II.» *Molecular Physics* 2 (4) (1959): 379–396.
- Soret, C. «Sur l'état d'équilibre que prend au point de vue de sa concentration une dissolution saline primitivement homogène dont deux parties sont portées à des températures différentes.» *Arch. Sci. Phys. Nat.* 2 (1879): 187.
- Soret, C. «Sur l'état d'équilibre que prend au point de vue de sa concentration une dissolution saline primitivement homogène dont deux parties sont portées à des températures différentes.» *Arch. Sci. Phys. Nat.* 2 (1879): 187.

Références bibliographie

Srinivasa Rao, P, P Reddaiah, et G. Sreenivas. «THERMO-DIFFUSION EFFECT ON MIXED CONVECTIVE HEAT AND MASS TRANSFER FLOW OF A VISCOUS DISSIPATIVE FLUID THROUGH A POROUS MEDIUM IN A NON-UNIFORMLY HEATED VERTICAL CHANNEL.» *Int. J. of Appl. Math and Mech.* 7, n° 9 (2011): 75-95.

Srinivasan, S., et M. Z. Saghir. «Experimental approaches to study thermodiffusion - A review.» *International Journal of Thermal Sciences* 50 (2011): 1125-1137.

Taylor, R., et R. Krishna. *MULTICOMPONENT MASS TRANSFER*. JOHN WILEY & SONS, INC., 2003.

Traoré, Ph., et A. Mojtabi. «Analyse de l'effet Soret en convection thermosolutale.» *Entropie* 184 (1994): 185.

Weaver, et R. Viskanta. «Natural convection due to horizontal temperature and concentration- 2. Species interdiffusion, Soret and Dufour effects.» *Int. J. of Heat and Mass Transfer* 34 (1991): 3121-3133.

Résumé

Dans ce travail de recherche nous étudions l'influence de la thermodiffusion sur la convection naturelle dans une cavité verticale poreuse, saturé par un mélange binaire gazeuse de méthane et n-butane. L'analyse de ce phénomène est contrôlé par la distribution de la masse volumique de mélange, les lignes de courants et les isoconcentrations.

En fonction du facteur de séparation, la perméabilité optimale du milieu poreux a été identifié. Aussi, nous étudions l'effet d'une fracture sur la séparation des mélanges. Les résultats obtenus font apparaître l'influence du rapport de perméabilités, la taille de la fracture, l'inclinaison, et sa position sur la convection thermosolutal en présence de l'effet Soret.

Mots clés : milieux poreux – effet Soret – thermodiffusion – convection thermosolutal – perméabilité optimal – fracture.

Summary

In this research, we investigate the thermal diffusion effect on the natural convection, in a vertical porous cavity saturated by a binary gas mixture of methane and n-butane. The analyse is controlled by density distribution of the mixture, flow pattern, and isoconcentrations.

Depending on the separation factor, the optimum permeability of porous media was identified. Also we studied the fracture effect on the separation of mixtures. The results show the influence of the relative permeabilities, the fracture size, the fracture inclination, and its position on the thermosolutal convection in the presence of Soret effect.

Keywords: porous media - Soret effect - thermal diffusion - thermosolutal convection - optimal permeability - fracture.

ملخص

في هذه المذكرة، قمنا بدراسة تأثير الانتشار بالحرارة (الترموديفيزيون) على الحمل الحراري، في تجويف عمودي نفوذ، مملوء بمزيج ثنائي من غازي الميثان والبيتان العادي. تحليل هذه الظاهرة يتعلق بتوزيع الكتلة الحجمية للمزيج داخل التجويف، خطوط التيار، وتوزيع التراكيز.

السماحية المثلى للوسط النفوذ، والموافقة لأحسن فصل للمزيج حددت بدلالة عامل الفصل. كما قمنا كذلك بدراسة تأثير الصدع على فصل مكونات المزيج. أوضحت النتائج تأثير كل من الفرق في السماحية (بين الوسط النفوذ والصدع)، حجم الصدع، توضع الصدع، وكذلك ميل الصدع على الحمل الحراري الحلولي في تواجد تأثير سوريه.

الكلمات المفتاحية : وسط نفوذ، تأثير سوريه، الترموديفيزيون، الحمل الحراري الحلولي، السماحية المثلى، صدع.