

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de Constantine 3
Faculté de Génie des Procédés Pharmaceutiques
Département de Génie de l'environnement



MÉMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de Magister en Génie de l'environnement

**OPTION : « Génie des procédés appliquée à la résolution des
problèmes de l'environnement »**

Intitulé :

**Détermination numérique de la Distribution du
Temps de Séjour dans un réacteur réel**

Par

BETINA MOUNDJIA

JURY :

Président: M^r M.BOUHELASSA Professeur université de Constantine 3

Rapporteur: M^r S. BOUDEBOUS Professeur université de Constantine 3

Examineur:
M^r O.KHOLAI Professeur université de Constantine1

Septembre 2016

Sommaire

ABSTRACT	i
RESUME	ii
ملخص	iii
Remerciements	iv
Dédicaces	v
Nomenclature	ix
<i>Liste des figures</i>	xi
Liste des tableaux	xvi
Introduction générale	1
Chapitre I: Généralités et revue bibliographique	3
I.1 Généralités	3
I.1.1 Notion de distribution du temps de séjour (DTS)	3
I.1.1.1 Définitions	4
I.1.1.2 Détermination expérimentale du temps de séjour	5
I.1.1.3 Paramètres associés à la DTS	7
I. 2 Revue Bibliographique	8
Références bibliographiques	28
Chapitre II: Formulation mathématique	31
II.1 Introduction	31
II.2 Equation de conservation de la quantité de mouvement	31
II.3 Forme générale d'une équation de transport	34
II.3.1 Notion de bilan	34
II.3.2 Principe de conservation	36
II.4 Equation fondamentale de conservation	37
II.4.1 Conservation de masse (Equation de continuité)	37
II.4.2 Conservation de la quantité de mouvement	38

II .5 Modèle mathématique	38
II.5.1 Equation de continuité	38
II.5.2 Equation de quantité de mouvement suivant la direction horizontale X	39
II.5.3 Equation de quantité de mouvement suivant la direction verticale Y	39
II.5.4 Equation de la concentration	39
II.6 Formulation fonction de courant ψ – vortacité ω	39
II.6.1 Equation de la fonction de courant ψ	39
II.6.2 Equation de vortacité	40
II.7 Equation de pression	42
II.8 Modèle mathématique	43
Références bibliographiques	44
	45

Chapitre III: Formulation numérique

III.1 Introduction	45
III.2 Méthode des différences finies	45
II.2.1 Approximation en différences finies	46
III.2.1.1 Termes convectifs	47
III.2.2 Schémas explicite et implicite	47
III.3 Discrétisation des équations du problème	48
III.3.1 Discrétisation de l'équation de transport	49
III.3.2 Discrétisation de l'équation de poisson	49
III.3.3 Discrétisation des composantes de la vitesse	50
III.4 Présentation du problème	50
III.5 Conditions initiales et aux limites	51
III.6 Algorithme	52
Références bibliographiques	54

Chapitre IV: Résultats et discussions

IV.1 Introduction	55
IV.2 Maillage	56
IV.3 Validation	57
IV.4 Résultats	59
IV.4.1 Caractérisation de l'écoulement pour $Re=10$	59

IV.4.2 Détermination de la fonction de distribution du temps de séjour	62
IV.4.2.1 Injection impulsion	62
IV.4.2.2 Injection échelon	68
IV.4.3 Conclusion	71
Références bibliographiques	71
Conclusion générale	72

ABSTRACT

The behavior of chemical reactors is most often described as ideal by assuming two simple flow types: plug flow (same residence time for all molecules) or a flowing perfect mix (concentration and other physicochemical properties identical in entire volume).

In practice, at the laboratory scale and especially on an industrial scale, the reactors rarely behave as ideal reactors. Consequently the performances of such reactors are so different from those predicted by the ideal models

This is what led to introduce the concept of Residence Time Distribution (RTD). This allows to characterize the hydrodynamics of a reactor and determine which reactor model best describes the installation studied (continuous reactor or tubular reactor).

Our study concern the numerical characterization of the hydrodynamic flow of a fluid in a reactor modeled by a square cavity and determining the concentration of a tracer injected at the reactor inlet to access to the RTD.

Hydrodynamics of flow is studied through the resolution of the Navier-Stokes equations and the transport equation of the concentration by a Fortran program by using numerical methods of finite differences.

Key- words:

Tank-2D, velocity fields, distribution of residence time, language FORTRAN.

RESUMÉ

Le comportement des réacteurs chimiques est décrit le plus souvent comme étant idéal en supposant deux types d'écoulement simples : un écoulement piston (même temps de séjour pour toutes les molécules) ou un écoulement en mélange parfait (concentration et autres propriétés physico chimiques identiques dans tout le volume)

Dans la pratique, à l'échelle du laboratoire et surtout à l'échelle industrielle, les réacteurs se comportent rarement comme des réacteurs idéaux. En conséquence les performances de tels réacteurs sont alors différentes de celles prédites par les modèles idéaux

C'est ce qui a mené d'introduire la notion de Distribution du Temps de séjour (DTS). Celle-ci permet de caractériser l'hydrodynamique d'un réacteur et de déterminer quel modèle de réacteur définit le mieux l'installation étudiée (réacteur continu ou réacteur tubulaire).

Notre étude concerne la caractérisation numérique de l'hydrodynamique de l'écoulement d'un fluide dans un réacteur modélisé par une cavité carrée et la détermination de la concentration d'un traceur injecté à l'entrée du réacteur pour accéder à la DTS.

L'hydrodynamique de l'écoulement est étudiée à travers la résolution des équations de Navier-Stokes et l'équation de transport de la concentration par un Programme en langage Fortran en utilisant les méthodes numériques des différences finies.

Mots clés:

Réservoir-2D, champs de vitesse, Distribution du temps de séjour, Langage Fortran.

ملخص

في غالب الأحيان يوصف سلوك المفاعلات الكيميائية بأنه مثالي على افتراض نوعين بسيطين من التدفق: تدفق قابس (زمن البقاء نفسه لجميع الجزيئات) أو تدفق مزيج مثالي (التركيز والخصائص الفيزيائية الأخرى متطابقة في الحجم بأكمله).



في الممارسة العملية، سواء على نطاق المختبر وخصوصاً على النطاق الصناعي، المفاعلات نادراً ما تتصرف كمفاعلات مثالية. وبالتالي فإن أداء هذه المفاعلات يختلف كثيراً عن ذلك الذي تنبأ به النماذج المثالية

وهذا ما أدى إلى إدخال مفهوم توزيع وقت الإقامة (RTD). الذي يسمح بوصف هيدروديناميكية المفاعل و يحدد أي نموذج من المفاعلات يقدم أفضل وصف للتركيب المدروس (مفاعل مستمر أو مفاعل أنبوبي).

دراستنا تتمثل في الوصف العددي لهيدروديناميكية تدفق سائل في مفاعل ممثل بتجويف مربع وذلك لتحديد تركيز المتتبع المحقون في مدخل المفاعل للحصول على توزيع وقت الإقامة.

يتم دراسة هيدروديناميكية التدفق من خلال حل معادلات نافبي ستوكس و معادلة نقل التركيز وهذا في برنامج فورتران باستخدام الطرق العددية ذات الفروق المحدودة

كلمات البحث:

مفاعل ثنائي الأبعاد، حقول السرعة، توزيع وقت الإقامة، لغة فورتران

Remerciements

En préambule, je souhaite rendre grâce à Dieu, le clément et miséricordieux de m'avoir donné la force, le courage et la patience de mener à bien ce modeste travail.

*Je tiens à remercier sincèrement mon encadreur Mr. **BOUDEBOUS SAADOUNE**, Professeur à l'Université de Constantine 3, de m'avoir beaucoup aidé et dirigée tout au long de la réalisation de ce mémoire. Aussi, je le remercie pour, pour sa disponibilité permanente, pour sa patience et ses conseils.*

- *Je remercie Mr **M.BOUHELASSA** Professeur à l'Université Constantine 3, d'avoir accepté de présider le jury.*
- *Je remercie Mr **O.KHOLAI** Professeur à l'Université Constantine 1, pour sa participation à l'évaluation du présent travail.*

Enfin, mes remerciements vont également à tous ceux et celles qui de près ou de loin m'ont apporté aide et encouragements, Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude.

Moundjia

Dédicace

Je dédie ce mémoire en particulier

Au prophète Mohamed (ص)

A ma chère mère

A la mémoire de mon cher père que le bon dieu lui accorde

son miséricorde

A mon cher mari et mes enfants

A mes chers frères et sœurs

A toutes ma famille et belle famille

Et enfin à toutes mes amies

Moundjia

Nomenclature

C	Concentration du traceur (mol/m ³)
C ₀	Concentration à l'entrée (mol/m ³)
D	Diffusivité (m ² s)
E(t)	Fonction de distribution du temps d séjour (s ⁻¹)
E(θ)	Fonction normalisée de distribution du temps de séjour, adimensionnelle
F(t)	Fonction cumulée de distribution du temps de séjour, adimensionnelle
H	Hauteur du réservoir/réacteur (m)
L	Longueur du réservoir/réacteur (m)
P	Pression (Pa)
Q	Débit volumique (m ³ /s)
Re	Nombre de Reynolds, adimensionnel
t	Temps (s)
U _{moy}	Vitesse moyenne du fluide à l'entrée du réservoir (m/s)
u	Vitesse selon X (m/s)
v	Vitesse selon Y (m/s)
V	Volume du réacteur (m ³)
x	Coordonné horizontal (m)
y	Coordonné vertical (m)
Symboles grecques	
θ	Temps réduit, adimensionnel
μ	Viscosité dynamique du fluide (Kg/m/s)
ν	Viscosité cinématique (m ² /s)
ρ	masse volumique (kg/m ³)

τ	Temps de passage (s)
ω	Vorticité (m^2/s^2)
ψ	Fonction de courant (m^2/s)

Liste des figures

Figure (I.1)	Modèles d'écoulements non idéaux	4
Figure (I.2)	Détermination de la distribution du temps de séjour	5
Figure (I.3)	DTS typique du volume stagnant (à gauche) et court circuit (à droite)	5
Figure (I.4)	Injection échelon et impulsion pour la détermination de la DTS	6
Figure (I.5)	Réponse à une injection échelon	6
Figure (I.6)	Représentation du réacteur à tube concentrique à émulsion d'air par M.GAVRILESCU et al (1999)	10
Figure (I.7)	Schéma expérimentale utilisé pour la mesure de la DTS par E.SAHLE-DEMESSIE et al (2003)	11
Figure (I.8)	Usine de traitement des eaux de west lafayette par K.JINDAL (2004)	12
Figure (I.9)	Schéma du HDVS (Hydrodynamic vortex separator) étudié par DARRELL A.EGARR et al (2004)	13
Figure (I.10)	Géométrie du réacteur simulé par BYUNG S.CHOI et al (2004)	14
Figure (I.11)	Configuration du micro-canal pour la mesure de la DTS par FRANZ TRACHSEL et al (2005)	15
Figure (I.12)	Géométrie du contacteur d'ozone par JAN HOFMAN et al (2007)	15
Figure (I.13)	Schéma du dispositif expérimental par D.BOSKOVIC et al (2008)	17
Figure (I.14)	Micro-canal en jonction T (Vue 2D) par JOHN T.ADEOSUN et al (2009)	18
Figure (I.15)	Schéma du réacteur utilisé par NAHID GHASEMI et al (2011)	19
Figure (I.16)	Schéma du réacteur cyclone solaire aéro-blindé (a) vue de haut (b) vue de profil utilisé par V.SHILAPURAM et al (2011)	20
Figure (I.17)	Représentation du réacteur électrochimique agité en continu étudié par R.THILAKAVATHI et al (2012)	20
Figure (I.18)	Schéma de la colonne à bulles expérimentale par M.SIMCIK et al (2012)	22
Figure (I.19)	Schéma indiquant l'emplacement de la sonde et le positionnement du point d'échantillonnage dans le dispositif	

	utilisé par SOMAIEH MOHAMMADI et al (2012)	23
Figure (I.20)	Configuration du réacteur et modèle de l'axe symétrique utilisé en COMSOL par M.BABAIE et al (2012)	23
Figure (I.21)	(a)réacteur initial ; (b) réacteur modifié étudié par L.LORENZ et al (2014)	25
Figure (I.22)	Tube du réacteur horizontal étudié par D.A.SIEVERS et al (2015)	26
Figure (I.23)	Schéma explicatif de l'injection échelon par M.K.E BOUCHAREB (2015)	27
Figure (I.24)	Montage expérimental du réacteur utilisé pour obtenir les données de la DTS par M.JAFARIKOJOUR (2016)	28
Figure (II.1)	Forces appliquées sur le volume élémentaire $dx dy dz$	32
Figure (II.2)	Forces tangentielles suivant ox	33
Figure (II.3)	Définition du domaine soumis à un bilan	35
Figure (II.4)	Bilan des flux dans le volume de contrôle	36
Figure (III.1)	(a) Maillage uniforme d'un domaine et (b) zoom sur la partie délimitée	45
Figure (III.2)	Géométrie du problème étudié	50
Figure (IV.1)	Configuration géométrique pour la validation	56
Figure (IV.2)	Schéma du maillage de cavité	57
Figure (IV.3(a))	Evolution des contours de la concentration dans le réacteur $Re=10$ (Présent travail)	57
Figure (IV.3(b))	Evolution des contours de la concentration dans le réacteur $Re=10$ (A.E.Rodrigues, M.Minceva)	58
Figure (IV.4)	Evolution du profil de la fonction de distribution cumulée du temps de séjour $F(\theta)$ pour $Re=10$	58
Figure (IV.5)	Géométrie du problème étudié	59
Figure (IV.6)	(a)Fonction de courant et (b) champs de vitesse	60
Figure (IV.7)	Trajectoires des particules fluides	60
Figure (IV.8)	Superposition du champ de pression sur les trajectoires	61
Figure (IV.9)	(a) Profil de la vitesse U/U_{moy} (b) profil de la vitesse V/U_{moy}	62

Figure (IV.10)(a)	Re=100	63
Figure (IV.10)(b)	Re=50	64
Figure (IV.10)(c)	Re=20	65
Figure (IV.10)(d)	Re=10	65
Figure (IV.10)(e)	Re=5	66
Figure (IV.11)	Fonction de distribution du temps de séjour E(t) pour différentes valeurs du nombre de Reynolds	67
Figure (IV.12)	Fonction cumulée de la distribution du temps de séjour F(t) pour différentes valeurs du nombre de Reynolds	67
Figure (IV.13)	Evolution instantanée de la concentration (injection impulsion) dans la cavité pour un nombre de Reynolds égal à 50	68
Figure (IV.14)	Fonction cumulée de la distribution du temps de séjour F(t) pour différentes valeurs du nombre de Reynolds	69
Figure (IV.15)	Fonction de distribution du temps de séjour E(t) pour différentes valeurs du nombre de Reynolds	69
Figure (IV.16)	Contours de la concentration dans la cavité (a) Re=10 et (b) Re=100	70
Figure (IV.17)	Evolution instantanée de la concentration (injection échelon) dans la cavité pour un nombre de Reynolds égale à 50	71

Liste des tableaux

Tableau (IV.1) Comparaison du débit normalisé pour différents maillages

56

Introduction générale

Les réacteurs chimiques sont les éléments essentiels dans tous les processus chimiques et constituent les équipements principaux dans les différents systèmes industriels. L'étude de l'hydrodynamique de l'écoulement d'un fluide à travers les éléments composant les réacteurs chimiques constitue la première étape du dimensionnement et du design de ces réacteurs. En effet cette étude permet d'accéder à la détermination de la fonction de Distribution des Temps de Séjour (DTS), RTD (Residence Time Distribution) en anglais. Cette notion de fonction de «distribution des temps de séjour» est largement utilisée dans d'autres domaines comme par exemple l'hydraulique, le génie de l'environnement, la météorologie...

Comme son nom l'indique cette fonction mesure le temps de séjour des molécules du fluide entre l'entrée et la sortie du réacteur. La comparaison de cette fonction par rapport à celles des réacteurs idéaux (réacteur piston et réacteur parfaitement agité) permet la prédiction des performances et donc le dimensionnement des réacteurs chimiques. L'intérêt de la DTS réside dans la détection d'hypothétiques zones mortes ou stagnantes, de chemins préférentiels empruntés par le fluide à travers le réacteur.

La détermination de la fonction de distribution des temps de séjour (DTS) se fait soit expérimentalement par le suivi de la concentration d'un traceur à la sortie du réacteur, en réponse à une injection à l'entrée du réacteur de type échelon ou de type Dirac soit numériquement, par la résolution des équations de Navier-stokes couplées à l'équation de transport de la concentration du traceur dans le réacteur. Le mouvement du fluide est régi par des équations différentielles à dérivées partielles (EDP) traduisant la conservation de toute entité physique (masse, quantité de mouvement, matière, énergie...). La discrétisation de ces équations par différentes méthodes numériques et leur résolution permettent de déterminer la structure générale de l'écoulement ainsi que les différents paramètres nécessaires au dimensionnement de tout dispositif industriel. Cette approche constitue le fondement de la **CFD : Computational Fluid Dynamics** que l'on peut traduire par la « mécanique des fluides numérique » et qui est une technique très populaire basée sur les méthodes numériques couplées à des simulations sur ordinateurs pour résoudre des problèmes impliquant les phénomènes de transport dans les écoulements des fluides.

Le but principal de cette étude concerne la caractérisation numérique de l'hydrodynamique de l'écoulement d'un fluide dans un réacteur modélisé par une cavité carrée et la détermination de la concentration d'un traceur injecté à l'entrée du réacteur pour accéder à la DTS.

Afin d'atteindre l'objectif fixé nous avons scindé ce mémoire en quatre chapitres.

- Le premier chapitre est consacré à des généralités sur les réacteurs chimiques. Une revue bibliographique portant sur la détermination de la DTS a été développée.
- Le second chapitre détaille la formulation mathématique du problème.
- Le troisième chapitre expose la méthode numérique utilisée ainsi que les conditions aux limites.
- Le quatrième et dernier chapitre présente les principaux résultats obtenus par des simulations numériques.
- Le mémoire se termine par une conclusion générale résumant les différents résultats obtenus ainsi que des recommandations pour de futurs travaux en relation avec ce travail.

Chapitre I : Généralités et Revue bibliographique

I.1 Généralités

Dans ce chapitre, nous rappelons brièvement le principe des écoulements dans les réacteurs réels. Ces réacteurs n'ont pas un comportement proche à celui des réacteurs idéaux, pour cela l'introduction d'une nouvelle approche s'est avérée nécessaire. Il s'agit de la distribution du temps de séjour appelée DTS (RTD : Residence Time Distribution en anglais), établie par Danckwerts pendant les années 50, et est représentée par la fonction $E(t)$.

I.1.1 Notion de Distribution du Temps de Séjour (DTS)

La DTS cherche à décrire les écoulements dans les réacteurs par des informations plus globales mais indispensables à la description des comportements transitoires des réactifs que le fluide en écoulement transporte. La distribution du temps de séjour est un modèle qui permet de caractériser l'hydrodynamique d'un réacteur chimique et de déterminer quel modèle définit le mieux l'installation étudiée (réacteur continu ou réacteur tubulaire) ainsi que les déviations par rapport aux modèles des réacteurs idéaux. Cette caractéristique est importante pour pouvoir calculer la performance d'une réaction avec une cinétique connue. Deux types de modèle décrivent les réacteurs ouverts et leur hydrodynamique:

- Le modèle du réacteur tubulaire avec un écoulement de type piston, caractérisé par un temps de séjour unique, c'est-à-dire que toutes les molécules du fluide traversent le réacteur avec la même vitesse, sans mélange ni accumulation de matière. Il ne présente pas de dispersion axiale.
- Le modèle du réacteur agité ou continu avec un mélange parfait, homogène, totalement dépourvu de gradient de concentration. En tout point du réacteur, les paramètres sont identiques (concentration, température, pH ...)

Toutefois, le réacteur réel s'écarte plus ou moins des deux écoulements idéaux. Dans un réacteur réel, les molécules séjournent dans le volume réactionnel pendant des temps (t_s) qui dépendent notamment du profil hydrodynamique et de la géométrie du réacteur, il existe donc une distribution des temps de séjour où les temps de contacts vont de zéro à l'infini. Cette dispersion a pour conséquence une influence sur les performances chimiques du réacteur.

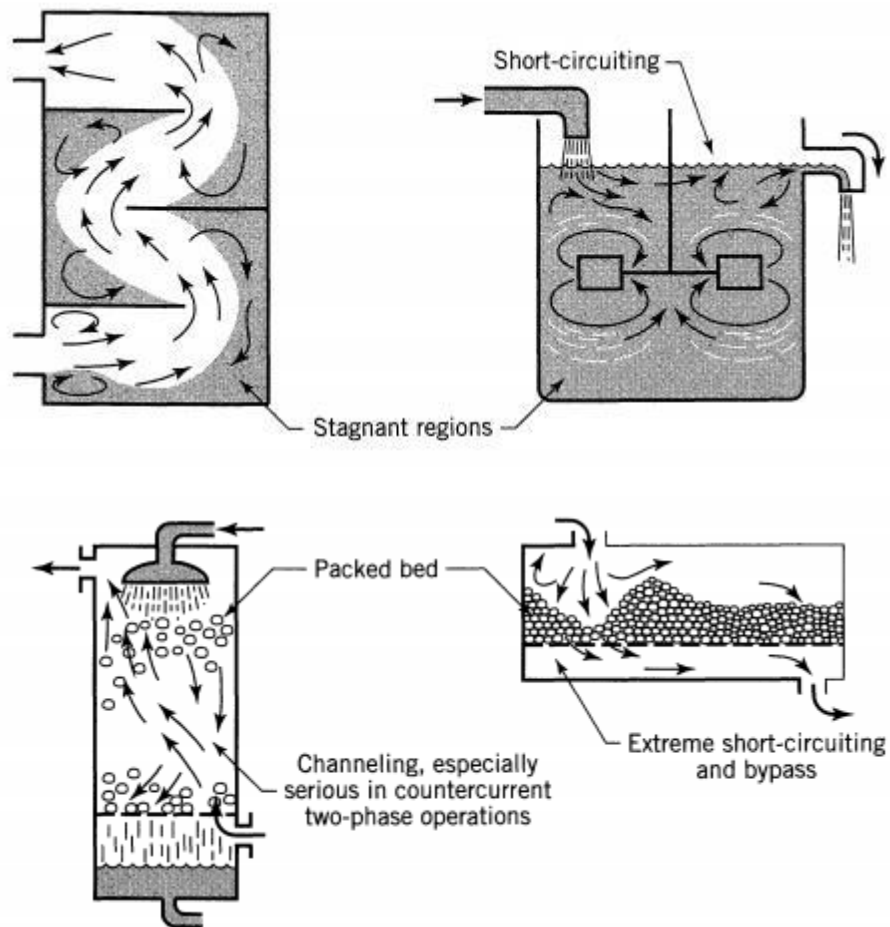


Figure (I.1) : Modèles d'écoulements non idéaux (O. Levenspiel, 1999).

I.1.1.1 Définitions

La fonction de distribution du temps de séjour dénommée $E(t)$ peut être déterminée expérimentalement, (voir **figure I.2**). L'injection d'une concentration connue d'un traceur à l'entrée du réacteur et la mesure de l'évolution de la concentration $C(t)$ de ce traceur à la sortie du réacteur nous permet de définir la relation de cette fonction par :

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt}$$

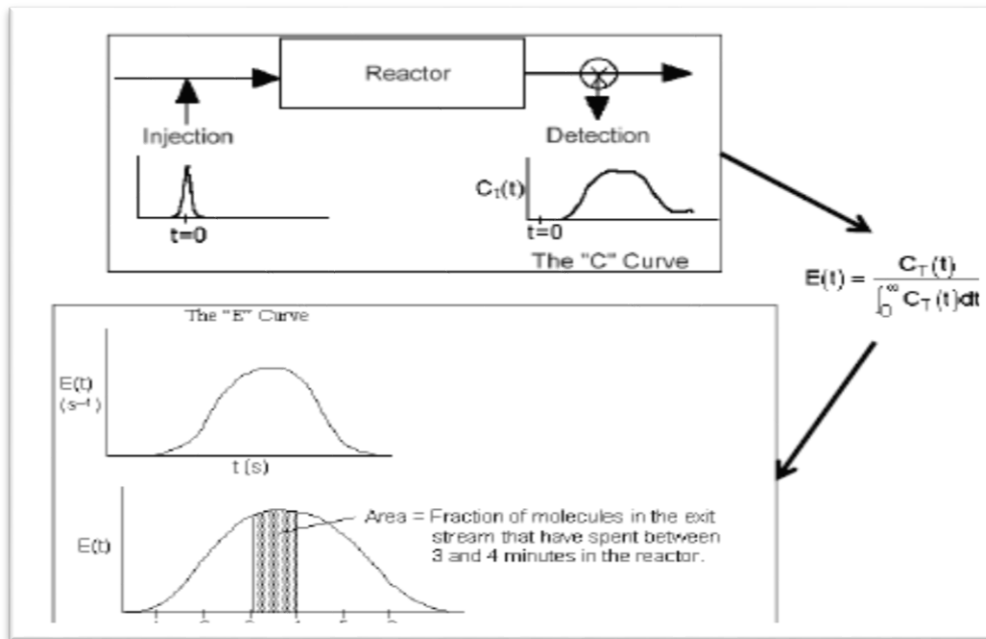


Figure (I.2) : Détermination de la fonction de distribution du temps de séjour.

La fonction de distribution du temps de séjour $E(t)$ représente donc la fraction des molécules en sortie du réacteur ayant séjourné entre deux instants t et $t + dt$. L'un des principes de cette fonction consiste en la détection des non idéalités dans le comportement du réacteur, tels que les volumes morts et les courts-circuits comme le montre la **figure (I.3)**.

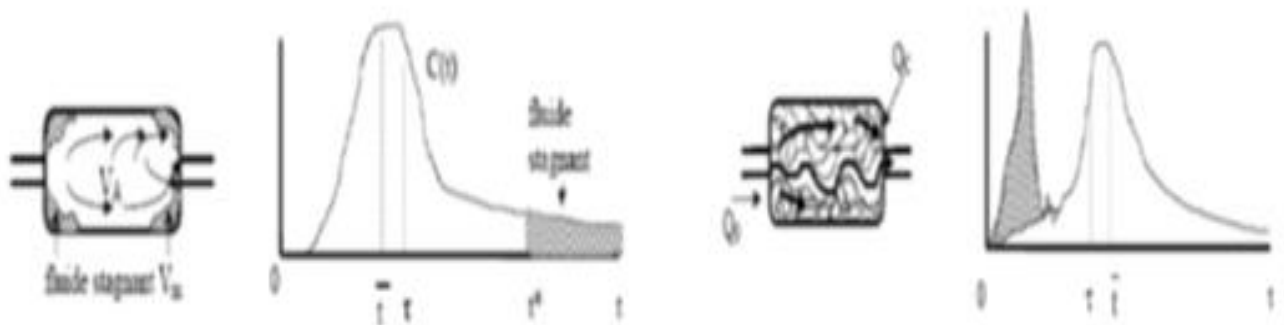


Figure (I.3) : DTS typique de volume stagnant (à gauche) et court-circuit (à droite).

I.1.1.2 Détermination expérimentale du temps de séjour:

Pour mesurer une distribution des temps de séjour, il s'agit de « marquer » les molécules pour pouvoir les détecter dans le courant de sortie pour cela on utilise un traceur qui peut être un corps radioactif, un colorant, ou toute substance de mêmes propriétés hydrodynamiques que le fluide, mais décelable par une propriété physique telle que la conductivité électrique, etc.

On applique à l'aide du traceur un certain « signal » à l'entrée du réacteur, de manière à ne pas perturber le régime d'écoulement, et on examine sa « réponse » à la sortie.

Il existe plusieurs méthodes pour déterminer la DTS dont on donne seulement les deux principales et simples utilisées généralement dans les études expérimentales qui sont (voir **figure I.4**) :

- injection échelon
- injection impulsion (ou Dirac)

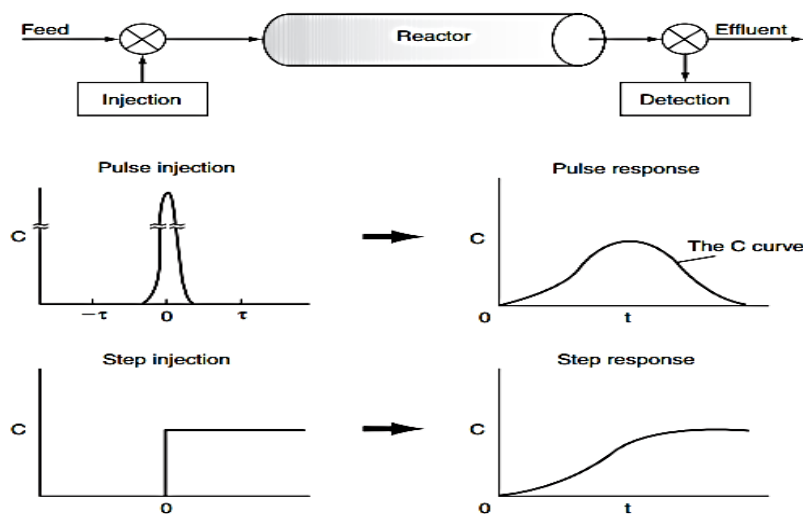


Figure (I.4) : Injection échelon et impulsion pour la détermination de la DTS

A. Injection échelon :

Dans ce type d'injection la concentration en traceur passe brusquement de 0 à C_0 dans l'alimentation à l'instant $t = 0$, la concentration en sortie est notée $C(t)$. Le suivi de cette concentration est présenté sur la **figure (I.5)**.

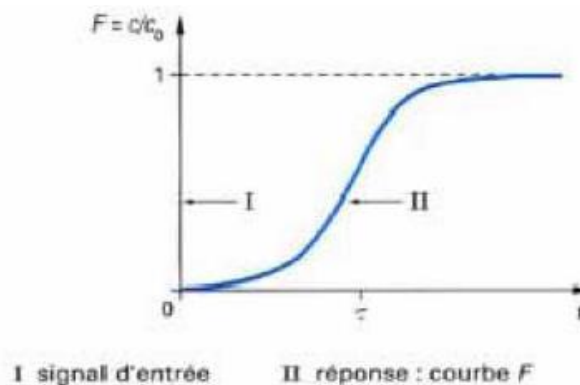


Figure (I.5) : Réponse à une Injection échelon.

$C(t)/C_0$ est appelée fonction $F(t)$. Elle représente la fraction des molécules en sortie ayant séjourné moins longtemps que t , donc :

$$F(t) = \frac{C(t)}{C_0} = \int_0^t E(t)dt$$

Une fois cette courbe obtenue la fonction de distribution du temps de séjour est déterminée par :

$$\frac{dF}{dt} = E(t)$$

B. Injection impulsion ou Dirac :

Si nous considérons un réacteur alimenté en continue par un débit Q (régime permanent). A l'entrée du réacteur, nous injectons instantanément une quantité N du traceur. Si $C(t)$ est la concentration moyenne du traceur dans le flux franchissant la section de sortie du réacteur alors, pendant l'intervalle de temps dt compris entre t et $t + dt$, la masse qui est sortie du réacteur est égale à : $QC(t)dt$. Donc la fraction de traceur ayant séjourné entre t et $t + dt$ dans le réacteur (la fraction de débit ayant séjourné un temps dt dans le réacteur) est :

$$E(t)dt = \frac{C(t)Q dt}{N}$$

Comme :

$$N = Q \int_0^{\infty} C(t)dt$$

Donc la fonction de distribution du temps de séjour est directement donnée par la relation :

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt}$$

I.1.1.3 Paramètres associés à la DTS :

Ces paramètres renseignent de façon plus générale sur le comportement de la concentration du traceur dans le réacteur. On définit des paramètres associés à la distribution tel que:

- **Le temps de séjour moyen** : Le temps de séjour moyen \bar{t} peut être calculé comme étant le moment d'ordre 1 de la fonction de distribution du temps de séjour, il est donné par la relation suivante :

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} tE(t)dt$$

- **La variance** : Elle représente le moment centré d'ordre 2 et donne une information directe sur le type de mélange à l'intérieur du système.

$$\delta^2 = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^2 E(t)dt$$

- **Temps de passage** :

Le temps de passage (ou temps de séjour hydraulique) se définit par le rapport du volume du réacteur et le débit qui le traverse et il est égale à :

$$\tau = \frac{V}{Q}$$

- **Temps Réduit** :

Dans la plus part des cas les résultats obtenus concernant la fonction de distribution du temps de séjour sont donnés en fonction du temps réduit qui n'est autre que le rapport du

temps réel et du temps de passage. Son expression est : $\theta = \frac{t}{\tau} = \frac{t}{V/Q}$

I. 2 Revue Bibliographique

Le phénomène de transfert de la matière ayant lieu dans différents processus est régi par les équations de transport de la quantité de mouvement couplées à une équation de transport de la matière. Différents travaux expérimentaux et numériques que nous allons exposer dans ce qui suit concernent la détermination de la distribution du temps de séjour dans différents types de réacteurs.

M.GAVRILESCU et al (1999) ont effectué l'analyse de la distribution du temps de séjour (DTS) de la phase liquide dans un réacteur à tube concentrique avec émulsion d'air par la technique impulsion du traceur. Le réacteur opère avec un écoulement continu diphasique liquide-gaz, le temps de séjour moyen du liquide et la variance ont été essentiellement utilisés pour le diagnostic de l'écoulement du liquide dans les différentes zones du réacteur : colonne montante, colonne descendante, zone de fond et séparateur de gaz, et ce selon deux modes de fonctionnement : avec et sans recirculation.

La DTS obtenu pour la variante sans recirculation a mis en évidence les aspects suivants :

- Dans la colonne descendante caractérisée par un flux monophasique, l'écart par rapport à l'écoulement piston idéal est significatif avec une grande dispersion axiale et des zones stagnantes.
- Dans la colonne montante avec écoulement diphasique, les déviations par rapport à l'écoulement piston idéal de la phase liquide ont été également mises en évidence.
- Dans la zone du bas et dans le séparateur de gaz, le comportement de l'écoulement s'approche de celui des cuves de mélange.

Donc l'écoulement de la phase liquide dans le réacteur entier s'écarte du modèle d'écoulement piston idéal en raison de la dispersion axiale superposée, les zones stagnantes et les courts circuits.

Pour la deuxième variante de fonctionnement, c.à.d. avec recirculation du fluide, l'écoulement de la phase liquide est plus proche de l'écoulement piston idéal avec dispersion axiale dans l'ensemble du réacteur ainsi que dans ses zones spécifiques. L'écoulement est plus uniforme et l'écart par rapport à l'écoulement piston est moins que dans la première variante, les zones mortes ont diminué et les courts circuits sont devenus négligeables.

Il a été observé également que l'intensité de la dispersion axiale dépend du débit du liquide à l'entrée du réacteur et de la vitesse superficielle du gaz de la colonne montante.

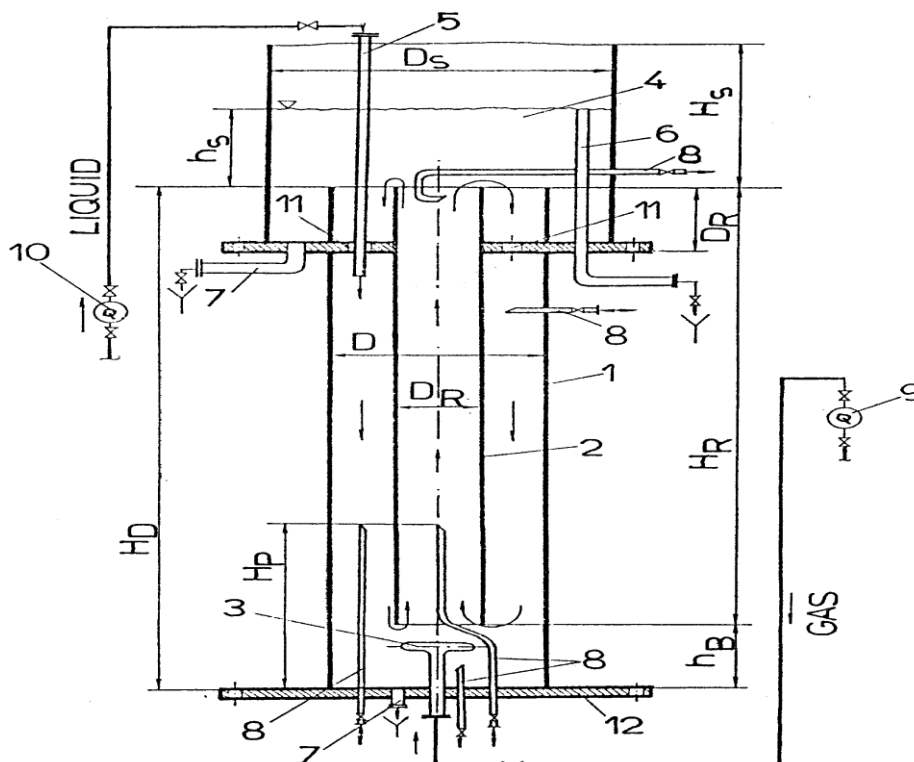


Figure (I.6) : Représentation du réacteur à tube concentrique à émulsion d'air :
 1, reactor body; 2, draft-tube; 3, gas sparger; 4, gas-separator zone; 5, liquid feed pipe;
 6, overflow pipe; 7, liquid drain pipe; 8, ports for tracer injection and sampling;
 9, air rotameter; 10, liquid flowmeter; 11, holes in the upper plate for liquid
 Recirculation in downcomer; 12, bottom plate.

D.R GLYNN et al (2000) ont utilisé la CFD pour analyser l'hydraulique de deux réservoirs de stockage d'eau potable en construction, il s'agit du :

- Réservoir de hartshead Moor service, yorkshire en Angleterre, dont l'objectif est l'évaluation de la performance du réservoir avec et sans chicanes.
- Et le réservoir Inglewood, Taranaki en nouvelle Zélande. Pour ce réservoir l'attention est portée sur la possibilité d'améliorer la performance par le repositionnement de la sortie.

Pour les deux cas la DTS a été mesurée en vue d'observer l'effet du court-circuit sur l'efficacité de chloration de l'eau.

Les prédictions numériques obtenues pour chaque réservoir ont conduit à des révisions des spécifications de conception aux fins de minimiser la présence des zones mortes et des courts circuits.

E.SAHLE-DEMESSIE et al (2003) ont étudié l'influence de la vitesse du flux, les vitesses d'agitation et les dimensions du réacteur (ratios L/D) sur la distribution du temps de séjour dans un photo-réacteur annulaire (gaz-liquide) avec agitateur magnétique. Les mesures de la réponse à une impulsion par un traceur sont utilisées pour la détermination expérimentale des courbes de la DTS ainsi qu'une méthode numérique basée sur une discrétisation du second ordre des conditions aux limites et de la vitesse d'entrée. Les résultats obtenus peuvent servir pour le choix de la configuration adéquate du réacteur.

Ils ont constaté que :

- La mesure de la DTS présente des déviations significatives par rapport aux conditions de l'écoulement piston quand le temps de séjour est plus faible que le temps de passage.
- Un agitateur avec une vitesse de rotation optimale peut améliorer le transfert de masse à la surface réactionnelle, cette vitesse optimale se situe dans l'intervalle de 150 à 250rpm.
- La comparaison qualitative des résultats numériques et expérimentaux montre que la rotation axiale ou mixte de l'agitateur peut améliorer le profil d'écoulement en créant un nombre de Reynolds élevé et en évitant le mélange en retour.

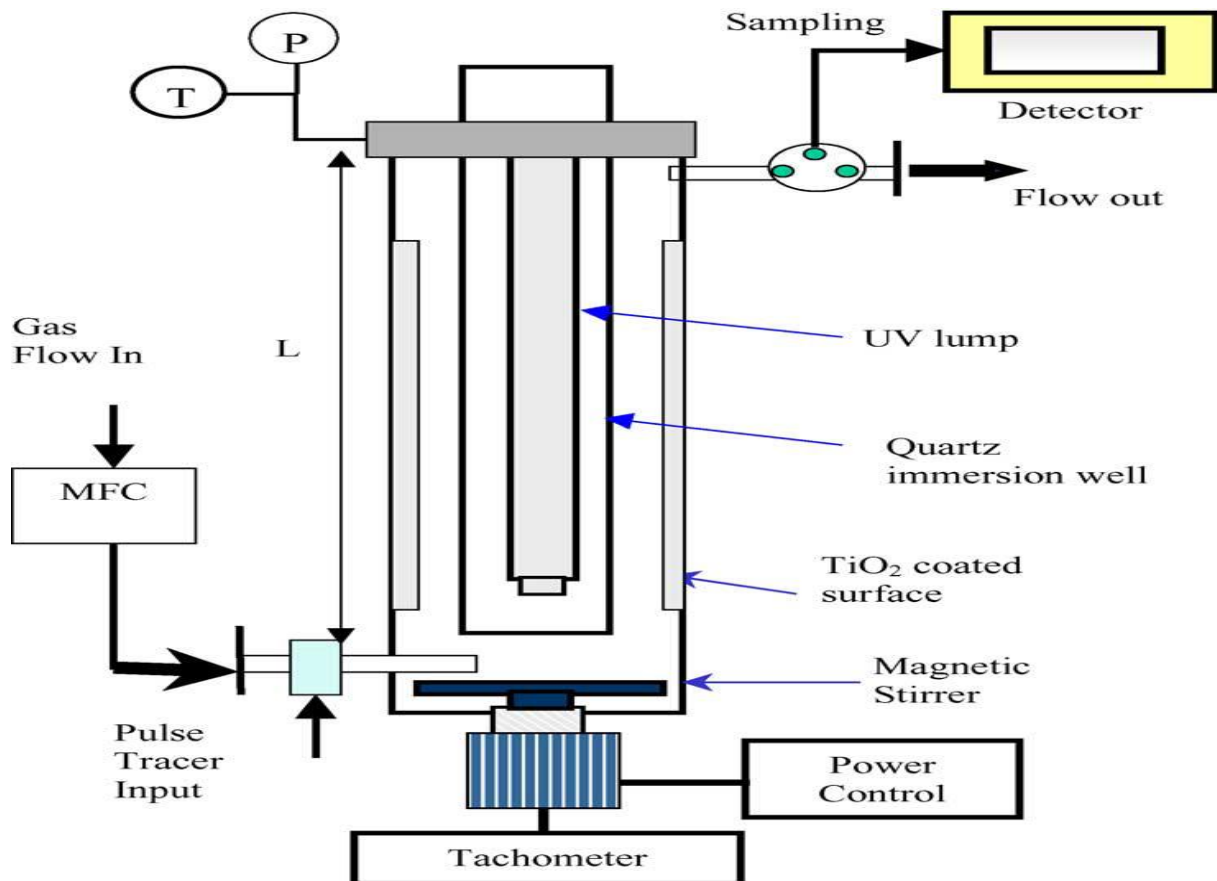


Figure (I.7) : Schéma expérimental utilisé pour la mesure de la DTS.

K.JINDAL (2004) a modélisé la chambre de désinfection au chlore (chloration) à l'usine de traitement des eaux usées de west lafayette aux états unis en mesurant l'efficacité des contacteurs hydrauliques et en étudiant l'influence de la configuration des chicanes, les conditions à l'entrée et à la sortie, la largeur et la longueur des compartiments, et ce par l'utilisation de la CFD. Cette étude a été conduite en deux étapes :

- La première concernant les tests réalisés à l'usine de traitement des eaux pour la détermination du temps de séjour dans la chambre de chloration à l'aide d'un traceur.
- La seconde consiste à la simulation des tests de traceur par le logiciel Fluent et la prédiction de la distribution du temps de séjour.

Il a constaté que les résultats de la DTS prédits par la CFD présentent des variations par rapport aux résultats expérimentaux.



Figure (I.8) : Usine de traitement des eaux de West Lafayette

DARRELL A. EGARR et al (2004) ont modélisé l'hydrodynamique d'un séparateur vortex par la mécanique des fluides numérique (CFD) afin de prédire le temps de résidence du fluide à la sortie du trop plein, les résultats sont comparés à ceux déterminés expérimentalement. Ils ont constaté que l'utilisation de la CFD donne la possibilité de prédire la DTS d'un séparateur vortex ainsi que le temps de séjour moyen.

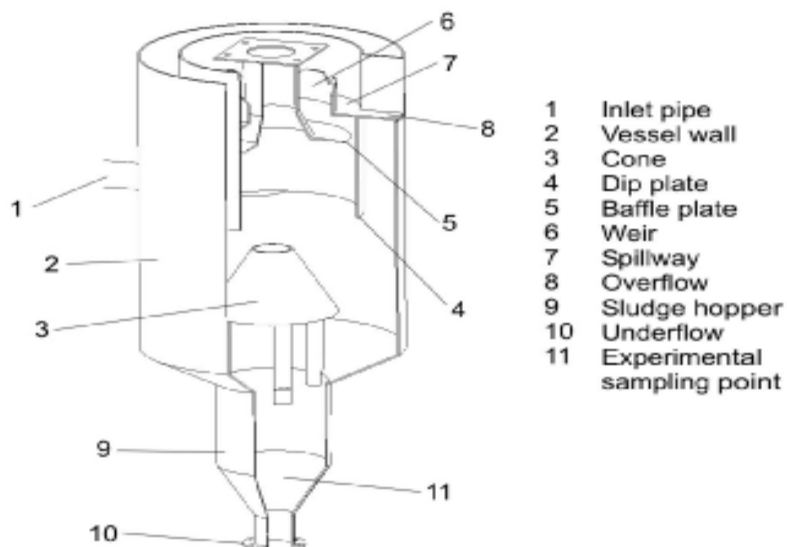


Figure (I.9) : Schéma du HDVS (hydrodynamic vortex separator) étudié.

BYUNG S.CHOI et al (2004) ont mesuré la DTS pour un réacteur avec chicanes (**Voir figure I.10**) et un autre réacteur du laboratoire sans chicanes ayant la même taille, les deux réacteurs sont munis d'une turbine Rushton opérant avec différents débits d'alimentation et différentes vitesses de rotation (rpms). Le comportement idéal est observé par l'obtention de la distribution du temps de séjour (DTS) pour les nombres de Reynolds suivants : 2327 pour le réacteur avec chicanes et 3878 pour le réacteur sans chicanes. Les résultats expérimentaux pour le réacteur avec chicanes sont comparés avec les prédictions de la DTS obtenues par la mécanique des fluides numériques (CFD) en utilisant le modèle de turbulence $k-\varepsilon$.

Ils ont conclu que la moyenne et la variance de la DTS pour un réacteur agité présentent des déviations par rapport aux valeurs idéales pour les faibles vitesses de rotation de l'agitateur. Pour le réacteur sans chicanes le comportement idéal est observé à environ 100 rpm ou à un nombre de Reynolds de l'agitateur supérieur ou égal à 3878, cependant pour un réacteur avec chicanes le comportement idéal est observé à environ 60 rpm ou à un nombre de Reynolds de l'agitateur supérieur ou égal à 2327. Les prédictions de la DTS, ainsi que sa moyenne et sa variance avec la CFD sont en bon accord avec les résultats expérimentaux en régime transitoire turbulent.

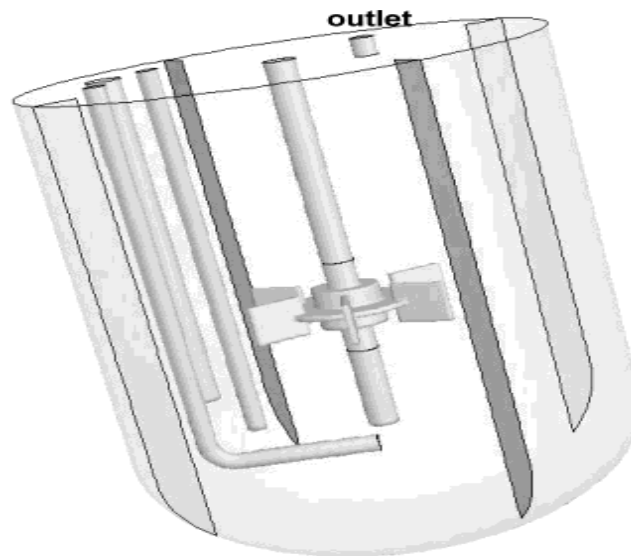


Figure (I.10) : Géométrie du réacteur

FRANZ TRACHSEL et al (2005) ont présenté la méthode expérimentale de la détermination de la DTS dans un réseau de micro-canaux par l'utilisation d'un traceur piézoélectrique actionné dans un écoulement micrométrique gaz-liquide et un écoulement

liquide monophasique. Les résultats sont donnés pour une condition d'écoulement particulière et une série limitée du nombre capillaire.

Ils ont constaté que :

- La variance de la DTS est significativement faible pour l'écoulement gaz-liquide que pour l'écoulement monophasique dans les mêmes conditions. Pour les plus grandes nombres capillaires, une augmentation de l'effet de la dispersion axiale a été remarquée.
- La dispersion axiale augmente avec l'augmentation de la taille des bulles de gaz.
- L'influence de la section du passage a été présentée, précisément pour la section rectangulaire où la forme du ménisque liquide dans les coins du canal est dominée par la tension de surface du liquide.
- La variation des dimensions du canal à des nombre capillaires constants n'a pas d'incidence sur l'épaisseur du film.

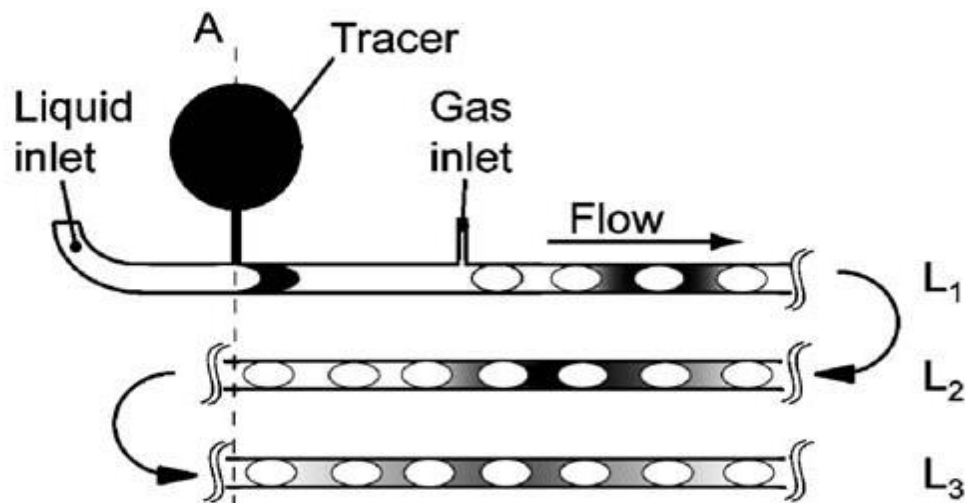


Figure (I.11) : Configuration du micro-canal pour la mesure de la DTS.

JAN HOFMAN et al (2007) a étudié l'effet de la DTS dans les contacteurs d'ozone destinés à la désinfection d'eau potable afin de prédire la performance de la désinfection dans ce système. Pour la validation du modèle, des expériences ont été menées à l'aide d'un traceur injecté dans un contacteur de dimensions 42x3.8x5.6m, le système a été étudié en 2D et 3D avec trois débits d'alimentation, le modèle $k-\varepsilon$ est utilisé et le profil de vitesse est supposé uniforme à l'entrée. Il a conclu que la validation expérimentale par l'étude d'un traceur a montré que le modèle d'écoulement et l'équation d'advection-diffusion donnent une bonne description du processus ayant lieu dans le système.

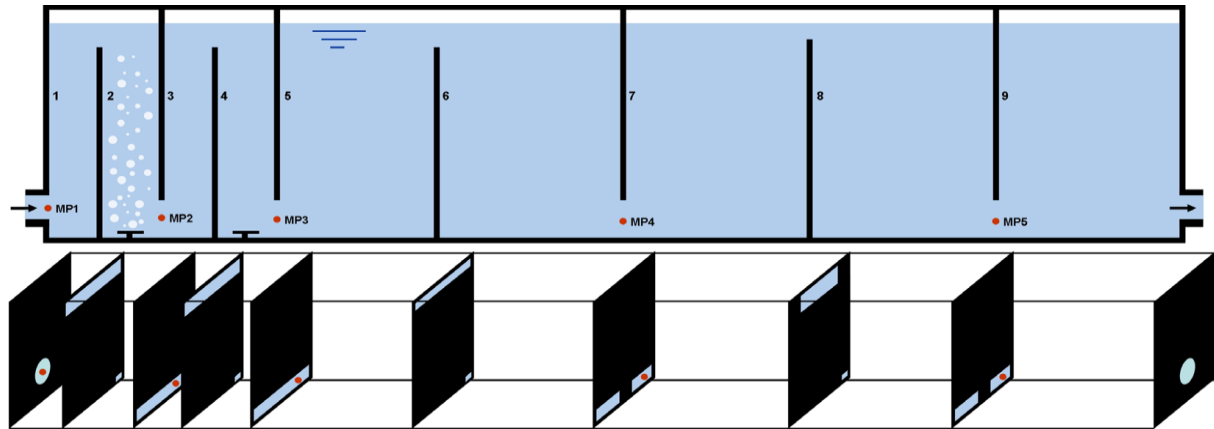


Figure (I.12) : Géométrie du contacteur d'ozone (Les points rouges marquent la zone de prélèvement d'échantillons).

YANN LE MOULLEC (2008) a consacré une partie de son travail à l'étude de l'hydrodynamique dans un réacteur biologique de traitement des eaux fonctionnant en eau claire, le pilote est de forme rectangulaire, alimenté d'eau par une pompe centrifuge et munis de tubes d'acier situés au pied des parois du réacteur assurant l'admission d'air. L'étude des champs de vitesse et de turbulence est menée par une approche de mécanique des fluides numérique, par la suite le comportement hydrodynamique global est modélisé par la théorie des distributions du temps de séjour et validé par l'expérience (technique du traceur). Il a été conclu que cette étude a permis de montrer qu'il était possible de simuler l'hydrodynamique locale du réacteur canal gaz-liquide à courants croisés par la mécanique des fluides numériques. Du point de vue des champs de vitesse et de turbulence, les modèles de turbulence $k-\epsilon$ et RSM donnent des résultats très similaires, le temps de séjour moyen étant estimé avec moins de 1% d'erreur.

D.BOSKOVIC et al (2008) ont étudié la distribution du temps de séjour (DTS) dans trois différents micro-mélangeurs (dispositif micro-fluidique) afin d'examiner la performance du mélange et le comportement de l'écoulement. La méthode expérimentale du suivi de la concentration d'un traceur (colorant) par spectroscopie à la sortie est utilisée. Il a été constaté que les données de la DTS mesurées montrent des écarts par rapport à la DTS réelle, ces déviations sont causées par les capillaires connectés et leur contribution dans la DTS globale du système ce qui a conduit à la prédiction d'un modèle algébrique pour la DTS des micro-mélangeurs.

L'application du modèle de dispersion axiale a montré des résultats raisonnables uniquement pour les grandes vitesses d'écoulement. Pour les faibles vitesses un modèle empirique a été

développé, celui-ci a permis une examination rapide de la performance du mélange ainsi que le comportement de l'écoulement.

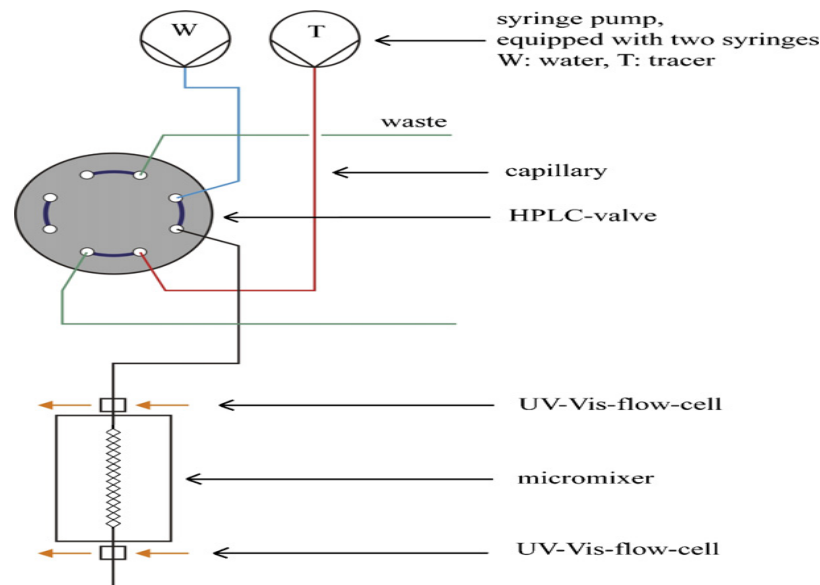


Figure (I.13) : Schéma du dispositif expérimental

J.AUBIN et al (2008) ont étudié l'effet du ratio (profondeur canal/largeur canal) et du coefficient de dispersion axiale sur la DTS dans un micro-canal pour l'écoulement newtonien et non newtonien en utilisant la mécanique des fluides numériques.

Les résultats montrent que pour une section transversale et un débit fixe, un rétrécissement de la courbe de la DTS a été constaté en diminuant le ratio, cet effet est plus prononcé pour les fluides non newtonien, et ceci est dû à l'augmentation rapide du coefficient de dispersion axiale pour des ratios inférieurs à 0.3. Il a été montré également que le coefficient de dispersion axiale dépend linéairement du nombre de Reynolds lorsque le ratio ou la vitesse moyenne du fluide varie. En outre, le nombre de Péclet du fluide est une fonction linéaire du nombre de Reynolds uniquement quand le ratio (et donc le diamètre hydraulique) varie. Globalement, les résultats indiquent qu'afin d'obtenir une DTS étroite et une dispersion axiale réduite, les micro-canaux doivent être conçus avec un faible ratio (≤ 0.3) c'est-à-dire avec des canaux larges et peu profonds.

JOHN T.ADEOSUN et al (2009) ont étudié le comportement du mélange en écoulement laminaire dans un micro-canal avec jonction T d'un mélangeur/réacteur en utilisant les deux approches numérique et expérimentale. Le concept de la distribution du temps de séjour (DTS) est appliqué pour caractériser cet écoulement.

Expérimentalement, la DTS est obtenue par l'injection d'un traceur en impulsion et la mesure de sa concentration à la sortie par spectroscopie à l'aide d'une vis-UV.

Les simulations de la mécanique des fluides numérique se font par le logiciel Fluent avec deux modèles d'écoulement : le modèle de dispersion axiale et le modèle semi empirique. Ils ont conclu que :

- Le modèle semi empirique correspond le mieux aux données expérimentales que le modèle de dispersion.
- Les résultats des simulations et des expériences sont en bonne concordance.



Figure (I.14): Micro-canal en jonction T (Vue 2D)

NAHID GHASEMI et al (2011) ont modélisé l'écoulement à travers un réacteur cyclone à double courant entrant par la CFD (A two impinging streams cyclone reactor - TISCR) en utilisant l'approche d'EULER-LAGRANGE afin de :

- Vérifier l'aptitude du modèle à prédire la DTS de la phase solide en régime stationnaire.
- Déterminer la variance et le temps de séjour moyen.
- Et comparer les résultats prédits par rapport aux données expérimentales.

Ils ont constaté que la CFD peut être utilisée comme un outil de simulation et d'optimisation des processus mis en œuvre dans ce type de réacteurs et en ce qui concerne la prédiction de la DTS, il a été observé que pour les incréments du temps $\Delta t=0.231$ et $\Delta t =0.362s$, une corrélation étroite est trouvée entre les résultats expérimentaux et ceux calculés par la CFD.

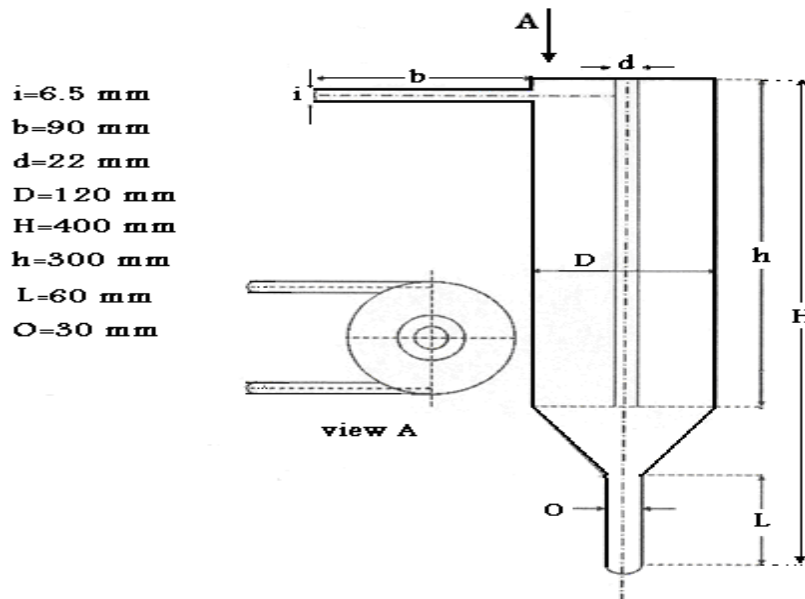


Figure (I.15) : TISCR utilisé par NAHID GHASEMI et al

V.SHILAPURAM et al (2011) ont caractérisé par l'analyse de la DTS, le comportement d'écoulement dans un réacteur cyclone solaire aéro-blindé conçu pour générer de l'hydrogène à partir du craquage solaire thermique du méthane.

Le temps de séjour moyen et la variance obtenus par les simulations de la CFD sur la base de deux différentes méthodes du traceur sont comparés avec le temps de passage dépendant des conditions à l'entrée.

Sur la base des résultats obtenus, ils ont tiré ce qui suit :

- Une différence significative dans le temps de séjour moyen a été observée en augmentant le débit de gaz et la fraction du méthane dans l'alimentation.
- Le modèle de réacteurs en série est plus approprié pour décrire le comportement d'écoulement dans un réacteur solaire aéro-blindé ;
- L'écoulement cyclone ou vortex augmente le temps de séjour moyen à l'intérieur du réacteur solaire.
- Les propriétés thermochimiques des gaz ont un effet sur l'écoulement qui affecte de manière significative le temps de séjour moyen dans le réacteur.
- Les lignes de courant montrent que les variables opératoires ont un effet significatif sur le comportement d'écoulement à l'intérieur du réacteur.

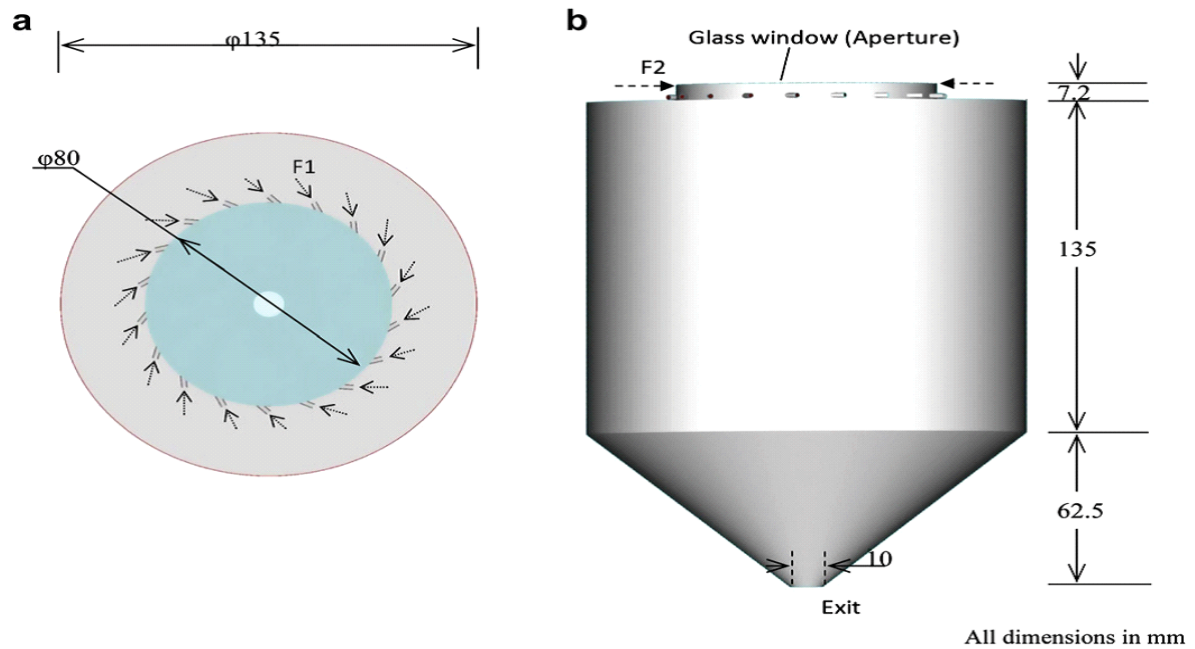


Figure (I.16) : Réacteur cyclone solaire aéro-blindé (a) vue de haut (b) vue de profil

R.THILAKAVATHI et al (2012) ont étudié le comportement de l'écoulement d'un électrolyte dans un réacteur électrochimique agité en continu par les études de la DTS, les expériences ont été effectuées par la technique du traceur et les courbes de distribution de l'âge à la sortie ont été élaborées pour différentes conditions opératoires. Le modèle d'écoulement bidimensionnel est développé pour visualiser l'écoulement de l'électrolyte à l'intérieur du réacteur en utilisant la CFD. L'influence de la vitesse d'écoulement de l'électrolyte et la vitesse d'agitation ont été examinées. Ils ont conclu que les résultats expérimentaux et théoriques sont en bon accord avec les simulations de la CFD et en augmentant le débit de l'électrolyte et la vitesse d'agitation, le temps de séjour moyen dans le réacteur diminue.

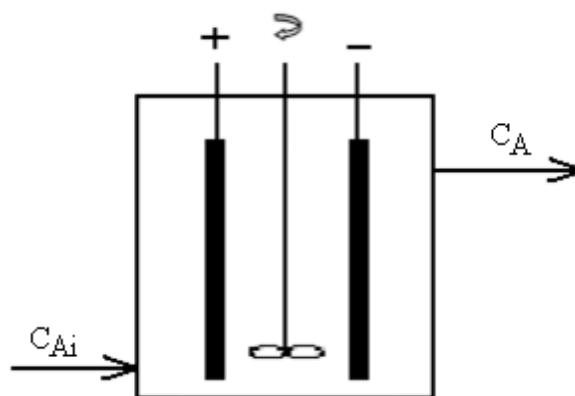


Figure (I.17) : Représentation du réacteur électrochimique agité en continu (CSTER)

K.NITIN G et al (2012) ont étudié la DTS dans un réacteur à écoulement piston (Plug flow). Le modèle donne une prédiction du nombre de réacteurs idéaux agités en continu qui peuvent représenter le réacteur tubulaire en question.

A partir des résultats expérimentaux, il a été conclu que :

- Dix-neuf (19) réacteurs agités en continu de la même taille placés en série ont une performance équivalente à celle d'un réacteur piston non idéal.
- Un écart de 22.86% a été enregistré par rapport à l'expérimental et le temps de séjour moyen.
- Les résultats de la DTS fournissent des informations essentielles concernant l'effet des conditions de fonctionnement.
- Le nombre de réacteurs augmente à mesure que la variance diminue.

M.SIMCIK et al (2012) ont étudié le concept de la DTS dans les systèmes Polyphasiques gaz-liquide (colonne à bulle) à l'aide de deux approches, la première est la DTS standard en utilisant les techniques du traceur et la seconde est la DTS intelligente (DTSI) qui consiste à la détermination de la distribution spatiale en fonction du temps de l'âge du fluide à travers l'appareil étudié. Le champ de l'écoulement est décrit par les équations de continuité et de quantité de mouvement pour chaque phase. Ils ont établi ce qui suit :

- La relation entre DTS et DTSI a été présentée et discutée.
- La DTSI a été formulée dans le cas d'un système poly-phasique et la distribution spatio-temporelle de l'âge du liquide a été calculée pour la colonne à bulles.
- Les calculs de la DTS standard ont été effectués par des expériences et des simulations numériques.
- Les résultats obtenus par les deux approches ont été comparés et discutés.

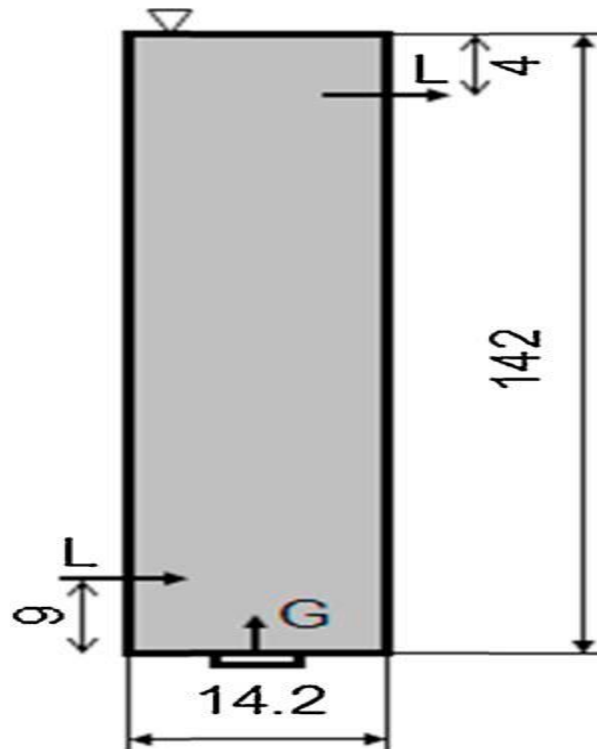


Figure (I.18) : Schéma de la colonne à bulle expérimentale

SOMAIEH MOHAMMADI et al (2012) ont étudié l'influence des conditions de l'hydrodynamique d'un film de faible épaisseur ainsi que les configurations du disque sur la DTS afin de déterminer les paramètres expérimentaux optimaux pour lesquels on s'approche du comportement piston dans le réacteur à disque tournant.

Il a été constaté ce qui suit :

On s'approche de l'écoulement piston par l'augmentation du débit et la vitesse du disque et la diminution de la viscosité.

Les courbes de la DTS concernant l'écoulement d'un film dans un réacteur à disque tournant varient avec une étroite distribution symétrique quand la dispersion radiale est négligeable (conditions de l'écoulement piston idéal) vers une distribution plus asymétrique lorsque des déviations significatives par rapport à l'écoulement piston ont lieu.

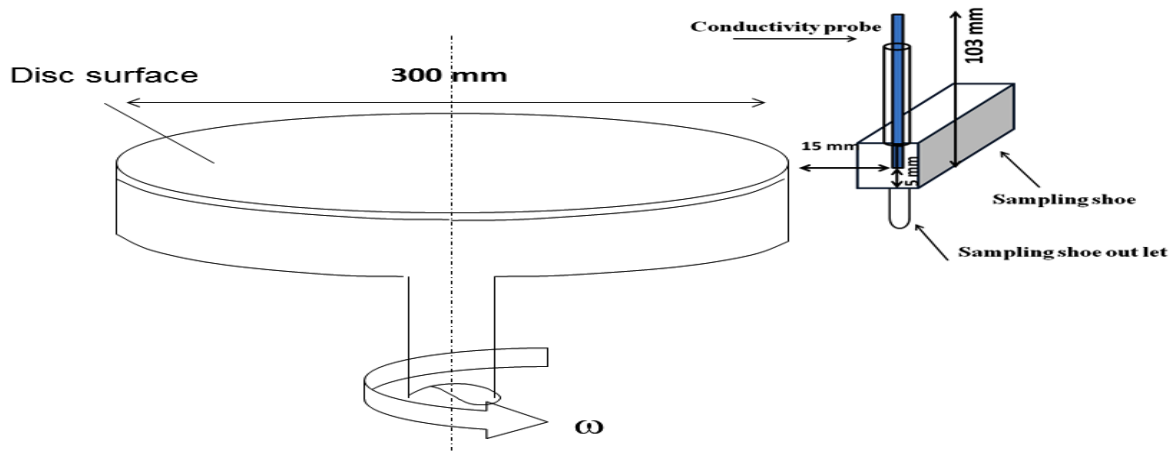


Figure (I.19): Schéma montrant l'emplacement de la sonde et le positionnement du point d'échantillonnage.

M.BABAIE et al (2012) ont modélisé la DTS dans un réacteur de vidange à cloison diélectrique (Dielectric barrier discharge reactor –DBD reactor) par le logiciel COMSOL, le modèle 2D avec axe symétrique est utilisé. Pour cela différentes géométries et différentes vitesses d'entrée ainsi que l'influence de l'ajout de rugosités ont été considérées afin d'observer leurs effets sur la distribution du temps de séjour. Il a été conclu ce qui suit : La distribution du temps de séjour pour un réacteur DBD conventionnel a été modélisé et l'effet de la rugosité a été étudié où il a été observé que l'ajout approprié de rugosités peut augmenter le temps de séjour significativement sans aucune perte considérable de pression.

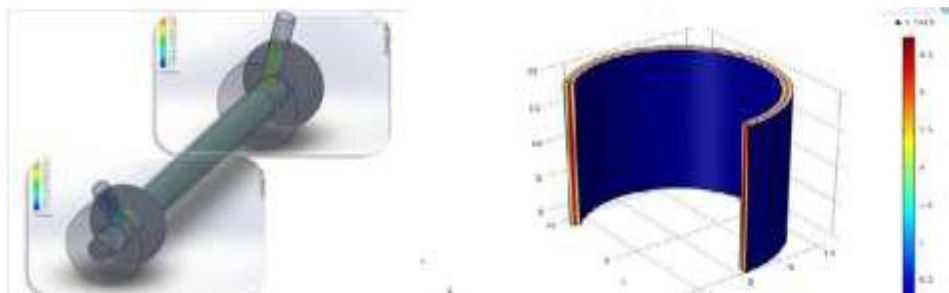


Figure (I.20) : Configuration du réacteur et modèle de l'axe symétrique utilisé en COMSOL

H.A AFFUKM et al (2013) ont utilisé un modèle simplifié de la cinétique en combinaison avec le modèle de réacteurs en série afin de prédire la conversion du craquage catalytique fluidisé dans un riser (colonne montante) en fonction de la variation de la température d'alimentation, le débit d'alimentation ainsi que le diamètre et la hauteur de la colonne. Les

différentes fonctions de la distribution du temps de séjour ainsi que les paramètres du modèle d'écoulement sont utilisés dans la caractérisation du régime de mélange dans le riser et du degré de tout comportement non idéal. Ils ont observé que:

- La conversion augmente avec la taille de la colonne c'est à dire le diamètre et la hauteur.
- La conversion augmente également avec l'augmentation de la température d'alimentation.
- Pour un débit d'alimentation de $10\text{m}^3/\text{s}$ la conversion atteint 95,95% tandis que pour un débit de $40\text{m}^3/\text{s}$ la conversion atteint seulement 89,72%, ce qui indique une relation inverse entre la conversion et le débit d'alimentation.

L.GONZALEZ et al (2014) ont analysé l'influence des paramètres hydrodynamique sur les réactions impliquées dans les processus de traitement des eaux usées pour la dégradation du colorant azoïque dans un réacteur cylindrique à lit fixe au charbon actif.

En utilisant la méthode de distribution du temps de séjour (DTS) pour la caractérisation de l'hydrodynamique, il a été conclu qu'une plus grande dispersion dans le réacteur se produit pour un temps de séjour hydraulique $\text{HRT}_m=1\text{h}$ que pour $\text{HRT}_m=4\text{h}$, une analyse cinétique suggère que cet effet de dispersion peut être associé à une grande vitesse de réaction dépendant de la concentration du colorant azoïque.

Le pourcentage d'élimination du colorant n'est pas compromis par la diminution du HRT_m (90 à 99% lors d'un changement de 1h à 4h).

L.LORENZ et al (2014) ont déterminé par le logiciel COMSOL Multiphysics, la distribution du temps de séjour (DTS) dans un réacteur tubulaire utilisé dans le laboratoire de génie chimique de l'université fédérale de PARANA, Brésil.

D'après les résultats, il a été constaté que :

- La modélisation du réacteur révèle un bon accord avec les résultats expérimentaux en fonction du coefficient de corrélation qui est de l'ordre de 0.97.
- Il a été possible de vérifier le comportement hydrodynamique de l'écoulement : chemins préférés, zones de recirculation et zones stagnantes permettant ainsi la localisation des non idéalités du réacteur.
- Cette étude a montré un temps de passage de 6.10min et un temps de séjour moyen de 3.05min (réacteur initial) et 3.38min (réacteur modifié).

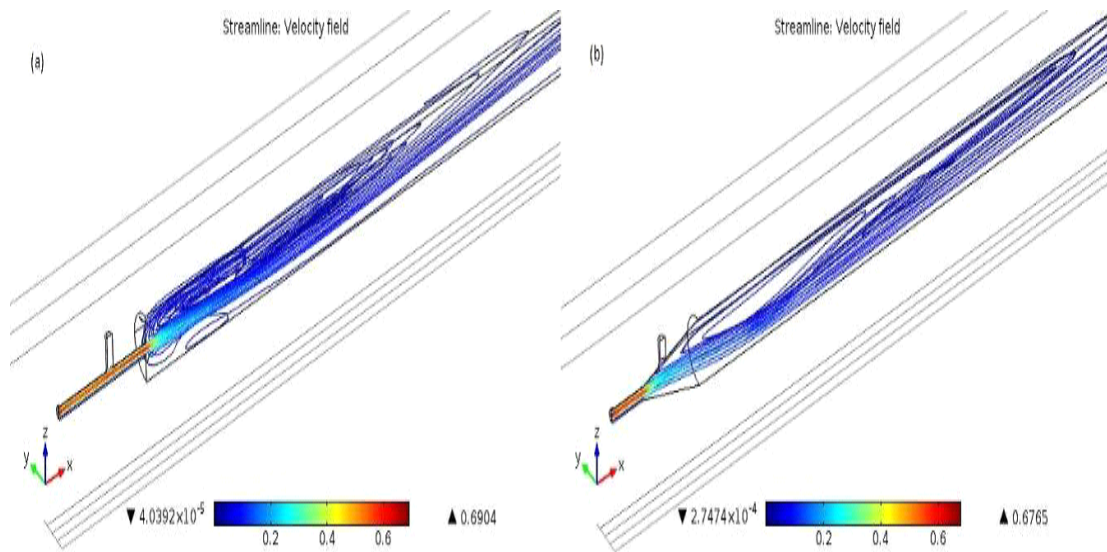


Figure (I.21) : (a) réacteur initial ; (b) Réacteur modifié

I.LIUTA et al (2015) ont étudié la distribution du temps de séjour de la phase liquide dans un bioréacteur à deux compartiments (lit garni/lit garni ou lit garni/sans garnissage) pour le traitement des eaux usées. La DTS est modélisée en utilisant le modèle modifié d'échange de la dispersion axiale avec un courant liquide contournant la région liquide dynamique.

Dans le compartiment sans garnissage, la DTS est modélisée comme dans un réacteur agité en continu avec des zones de mélange idéales ou non idéales.

Ils ont conclu que :

- Le modèle de la DTS proposé donne l'opportunité de quantifier les paramètres suivants : la fraction du liquide dynamique, le nombre des unités de transfert entre les régions du liquide dynamiques et stagnantes, le temps de rétention du liquide stagnant.
- Les courbes de la DTS pour les deux zones sont proches à une fonction d'impulsion Dirac suivies d'une queue prononcée qui indique l'existence d'une région importante de liquide stagnant et un échange de matière lent entre les régions dynamiques et stagnantes, en plus d'une importante dispersion axiale.
- La dispersion par fraction en rapport avec le coefficient de dispersion axiale est plus importante que la dispersion inter-flux liée au coefficient de dispersion transversale.
- Les simulations montrent la tendance correcte des courbes de la DTS lorsque les différents paramètres du modèle sont modifiés

D.A.SIEVERS et al (2015) ont procédé à la mesure en ligne de la DTS du prétraitement thermochimique de la biomasse lignocellulosique par l'injection du chlorure de sodium comme traceur dans la charge entrant dans un réacteur à l'échelle pilote fonctionnant à différentes conditions. La Concentration du traceur a été mesurée dans la décharge en utilisant une instrumentation de la conductivité électrique spécialement fabriquée. Ils ont abouti aux conclusions suivantes :

- Cette méthode de conductivité en ligne est meilleure dans le sens de l'exactitude des mesures et des besoins en ressources comparativement aux analyses hors ligne.
- Les valeurs du temps de séjour moyen expérimentalement mesurées diffèrent significativement de la valeur théorique, ce qui accentue l'importance des mesures expérimentales de la DTS au lieu de compter sur les calculs théoriques
- Cette technique rapide de faible coût permet une étude plus approfondie des facteurs influant la DTS de prétraitement, ainsi qu'une vérification de routine du temps de séjour et elle peut être appliquée à d'autres procédés qui impliquent des boues humides granulaires.

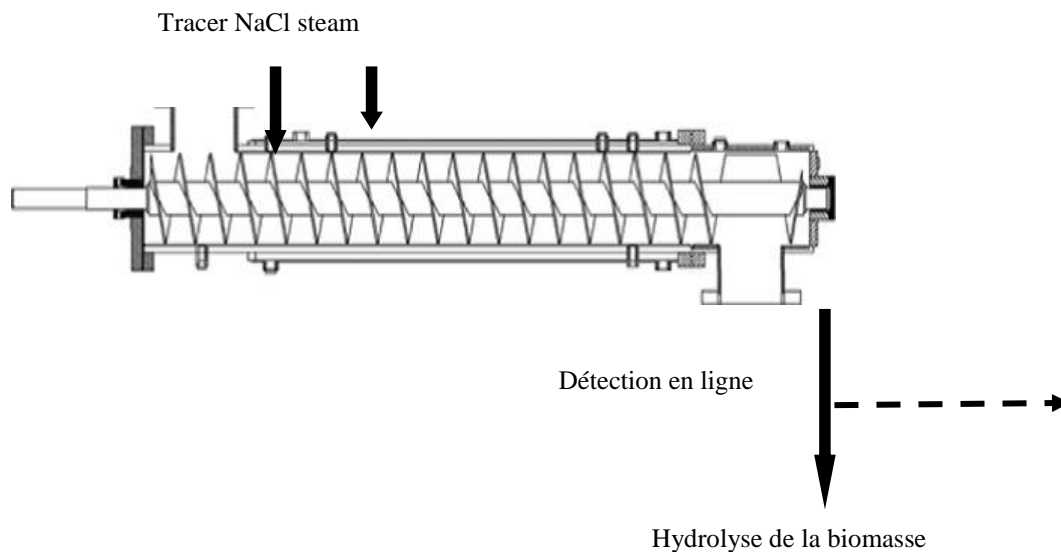


Figure (I.22) : Tube du réacteur horizontal

E.OBONUKUT et al (2016) ont étudié la DTS dans un réacteur tubulaire conçu et construit avec des caractéristiques améliorées afin d'assurer une dispersion axiale minimale. Il a été constaté que :

- Les fonctions de la DTS générées étaient de forme attendue avec de longues queues au-delà de la concentration maximale à la sortie.

- La fonction empirique de distribution du temps de séjour $E(T)$ est toujours une distribution contrairement à la fonction Dirac-Delta $\delta(t-\tau)$ prévue pour le réacteur piston.
- L'écart empirique de la distribution de la fonction $E(t)$ par rapport au pic théorique ou la fonction Delta confirme l'existence de l'effet mesurable du mélange de retour dans le réacteur.
- La dispersion axiale offre un meilleur ajustement aux données expérimentales indépendamment du nombre élevé ou faible de Péclet.

M.K.E BOUCHAREB (2015) a étudié expérimentalement la dégradation photo catalytique du colorant Bleu Basique 41 (BB41) en solution aqueuse synthétique et réelle dans un réacteur solaire CPC. Dans une première étape la distribution du temps de séjour (DTS) a été déterminée pour caractériser le type d'écoulement dans le réacteur.

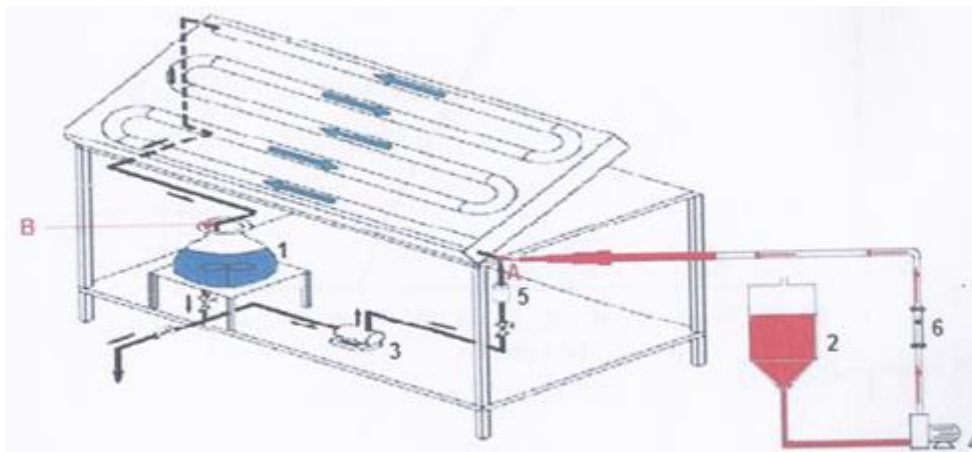


Figure (I.23) : Schéma explicatif de l'injection échelon : **1** réservoir contenant de l'eau ($C_{RB46}=0$ mg/L); **2** réservoir contenant la solution du colorant RB45 ($C_o=20$ mg/L); **3** et **4** pompes centrifuges ; **5** et **6** débitmètres ; **A** point d'injection du colorant, **B** point de prélèvement.

M.JAFARIKOJOUR (2016) ont développé un nouveau modèle pour l'étude du comportement d'écoulement dans un réacteur coaxiale à alimentation liquide-liquide fonctionnant à contre-courant. Ce modèle considère une cascade de réacteurs agités de taille descendante placés en série, des mesures de la DTS ont été effectuées expérimentalement par l'injection d'un traceur et les résultats obtenus sont comparés avec les données du modèle théorique. Ils ont conclu que le modèle présenté améliore les prédictions du comportement hydrodynamique de ce type de réacteur.

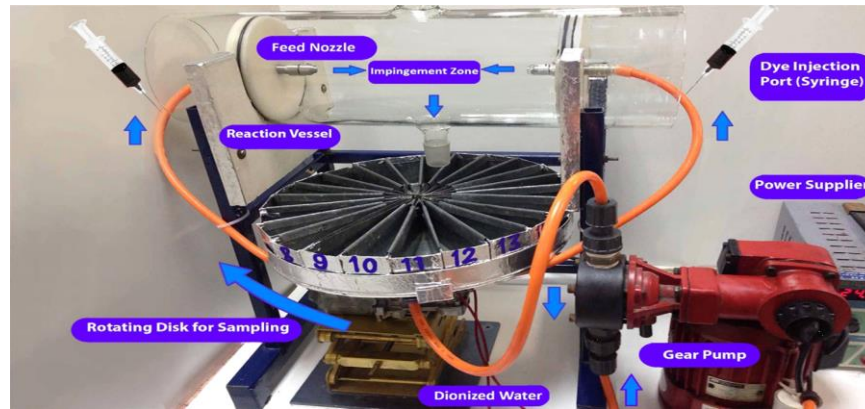


Figure (I.24) : Montage expérimental du réacteur utilisé pour obtenir les données de la DTS.

La qualité et la quantité des articles consacrés à l'étude aussi bien expérimentale que numérique montrent que le sujet est loin d'être maîtrisé et que de nombreuses études sont en cours pour apporter de nouvelles connaissances à la compréhension du phénomène de transport convectif et diffusif des entités physiques dans les écoulements de fluides pour une caractérisation optimale du fonctionnement des réacteurs chimiques.

Ces travaux cités dans cette revue bibliographique montrent l'importance de la détermination de la fonction de distribution du temps de séjour dans le dimensionnement d'un réacteur chimique et justifie le travail entrepris dans cette étude.

Références

H.Scott Fogler (2006), « Elements of chemical reaction engineering ». Pearson education. 4th edition,2006.

O.Levenspiel (1999), « Chemical reaction engineering ». John wiley&sons.3rd edidion.

J.Villermoux (1982), « Génie de la réaction chimique, conception et fonctionnement des réacteurs ».

Z.benaissa, F.Benkhellaf, M.Chaker (2015), « Etude numérique d'un réacteur réel à faible dispersion axiale ». Mémoire de fin d'étude pour l'obtention du diplôme de Master en Génie chimique.

Byung S.Choi, Bin Wan, Susan Philyaw, Kumar Dhansekharan and Terry A.Ring (2004) « Residence time distributions in a stirred tank: Comparaison of CFD predictions with experiment ». Ind.Eng.Chem.Res. Vol 43.No.20,2004

Darrell A.Egarr, Michael G.Faram, Timothy O'Doherty, David A.Phipps and Nicholas syred (2004), « Computational fluid dynamic prediction of the residence time of a vortex

separator applied to disinfection ». 4th international conference on sewer processes and networks, Madeira, 22nd -24th November 2004, PP 49-56.

Kanish Jindal (2004), « Modeling of a west Lafayette chlorine disinfection chamber at west Lafayette treatment plant » ABE 527.

D R.Glynn and A.Shilton (2000), « Reservoir design improvement using CFD ».

Jan Hofman, Dolf Wind, Bas wols, wim uijtewaal, Hans van Dijk, Guus Steeling (2007), « The use of CFD modeling to determine the influence of residence time distribution on the disinfection of drinking water in ozone contactors ». Excerpt from the proceedings of the COMSOL users conference. Grenoble.

Nahid Ghasemi, Morteza Sohrabi and Yasan Soleymani (2011), « Residence time distribution in a two impinging streams cyclone reactor: CFD prediction and experimental validation ». World academy of science, engineering and technology, Vol 55.

Yann Le Moullec (2008), « Comparaison des approches systémique, mécanique des fluides numérique et compartimentale pour la modélisation des réacteurs : Application à un réacteur canal à boue activées ». Thèse de doctorat de l'institut national polytechnique de Lorraine.

M.Simcik, M.C.Ruzicka, A.Mota, J.A.Teixeira (2012), « Smart RTD for multiphase flow systems ». Elsevier. chemical engineering research and design, 90 (2012) 1739-1749.

Somaieh Mohammadi and Kamelia V.K.Boodhoo (2012), « Online conductivity measurement of residence time distribution of thin film flow in the spinning disc reactor ». Chemical Engineering Journal (2012).

M.Babaie, P.Talebizadeh, S.Saha, H.Rahimzadeh, F.Zare and R.J.Brown (2012), « Residence time investigation in a coaxial dielectric barrier discharge reactor ». The 4th international conference on computational methods (ICCM2012), Gold Coast, Australia.

R.Thilakavathi, D.Rajasekhar, N.Balasubramanian, C.Srinivasakannan, Ahmed. Al shoabi (2012), « CFD modeling of continuous stirred tank electrochemical reactor ». International Journal of Electrochemical Science, 7(2012) 1386-1401.

H.A.Affum, I.I.Mumuni, G.K.Appiah, S.Y.Adzaklo, M.A.Addo (2013), « On the conversion of gas oil in fluid catalytic cracking risers: Application of residence time distribution (RTD) concept ». International Journal of scientific & technology research volume 2.

Vidyasagar Shilapuram, D.Jaya Krishna, Nesrin Ozalp (2011), « Residence time distribution and flow field study of aero-shielded solar cyclone reactor for emission-free

generation of hydrogen ». Elsevier. International Journal of hydrogen energy 36(2011) 13488-13500.

L.R.de Souza Jr., L.Lorenz (2014), « Residence time distribution for tubular reactors ». Excerpt from the proceedings of the 2014 COMSOL conference in Curitiba.

John T.Adeosun, Adeniyi Lawal (2009), « Numerical and experimental studies of mixing characteristics in a T-Junction microchannel using residence time distribution ». Elsevier. Chemical Engineering Science 64 (2009) 2422-2432.

D.Boskovic, S.Loebbecke (2008), « Modelling of the residence time distribution in micromixers ». Elsevier. Chemical Engineering Journal 135S(2008) S138-S146.

Franz Trachsel, Ascel Gunther, Saif Khan, Klavs F.Jensen (2005), « Measurement of residence time distribution in microfluidic systems ». Elsevier. Chemical Engineering Science (2005) 5729-5737.

J.Aubin, L.Prat, C.Xuereb, C.Gourdon (2009), « Effect of microchannel aspect ratio on residence time distributions and the axial dispersion coefficient ». Elsevier. Chemical Engineering and processing 48 (2009) 554-559.

M.K.E BOUHAREB (2015), « Application d'un réacteur solaire CPC pour la dégradation photo catalytique du colorant Bleu Basique 41 (BB41) en solution aqueuse synthétique et réelle ». Thèse de Doctorat, Département de Génie Chimique, Université Constantine 3.

Chapitre II : Formulation mathématique

II.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons établir les équations régissant l'écoulement d'un fluide à partir des principes fondamentaux de la physique générale qui énoncent la conservation de toute entité physique dans un domaine bien déterminé. Ces équations sont obtenues en faisant le bilan de chaque entité physique (masse, quantité de mouvement, énergie...) à travers le domaine considéré. Il existe différentes expressions des équations de Navier-Stokes. Nous n'en présenterons que deux d'entre elles. La première est obtenue à partir de la définition de la quantité de mouvement et le calcul des différentes forces appliquées à un fluide en écoulement. La seconde est obtenue en établissant une équation générale de transport d'une entité physique quelconque dans un volume élémentaire. L'équation du transport de la concentration d'un traceur injecté à l'entrée du réacteur nous permettra la détermination de la fonction de distribution du temps de séjour DTS.

II.2. Equations de la conservation de la quantité de mouvement

Le principe de la mécanique générale précise que la somme des forces appliquées à un système correspond à l'accroissement ou la diminution de sa quantité de mouvement. La quantité de mouvement d'un système mécanique de volume \mathcal{S} est le produit de la masse M de ce système par sa vitesse \vec{V}

$$Q^{ment} = M\vec{V} = \rho \mathcal{S}\vec{V}$$

La conservation de la quantité de mouvement par unité de volume s'exprime ainsi :

$$\sum \delta \vec{F} = \delta m \vec{\gamma}$$

Cette équation projetée sur l'axe ox donne : $\sum \delta F_x = \delta m \gamma_x$ avec :

$$\gamma_x = \frac{dv_x}{dt} \quad \delta m = \rho dx dy dz$$

$$v_x = f(x, y, z, t) \Rightarrow dv_x = \frac{\partial v_x}{\partial t} dt + \frac{\partial v_x}{\partial x} dx + \frac{\partial v_x}{\partial y} dy + \frac{\partial v_x}{\partial z} dz$$

Comme :
$$\frac{dv_x}{dt} = \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z}$$

Donc :
$$\delta m \gamma_x = \rho dx dy dz \left\{ \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right\}$$

Maintenant nous recensons toutes les forces élémentaires appliquées au volume élémentaire $dx dy dz$. Les forces de surfaces sont schématisées dans la figure (II.1).

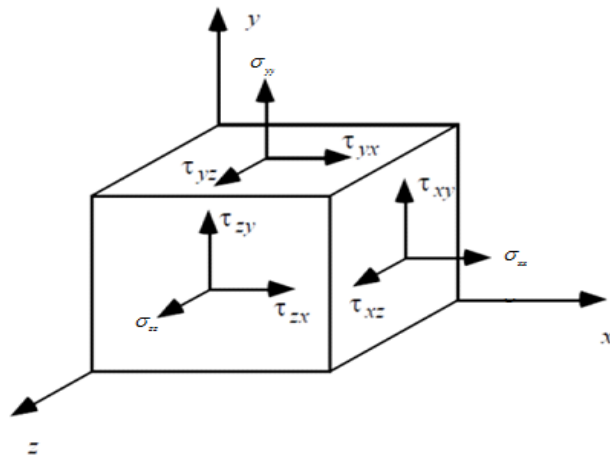


Figure (II.1) : Forces appliquées sur le volume élémentaire $dx dy dz$.

Nous ne considérons que la projection de ces forces suivant l'axe ox :

- Forces extérieures : $\delta F_{ex} = \rho g_x dx dy dz$
- Forces de surface : Elles sont montrées dans la figure (II.2) ci-dessous :
 - Forces normales à la surface : $\sigma_{xx} = p + \tau_{xx}$ perpendiculaire à la surface $dy dz$.
 - Forces de cisaillement : τ_{yx} tangentes à la surface $dx dz$ et τ_{zx} tangente à la surface $dx dy$.

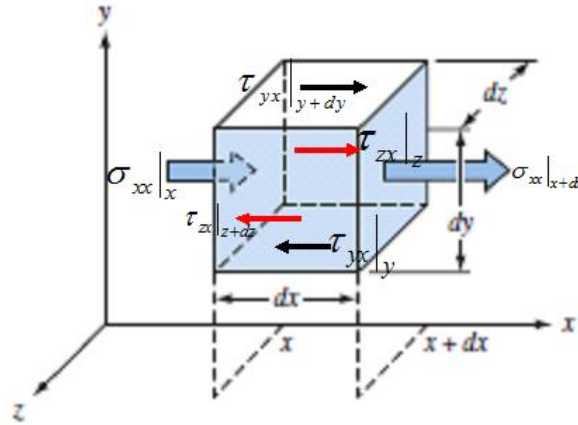


Figure (II.2) : Forces tangentielles suivant ox.

Le développement de Taylor appliqué à une entité physique ϕ quelconque permet d'écrire :

$$\phi_{x+dx} = \phi_x + dx \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

Après avoir effectué tous les calculs nous obtenons le bilan des forces appliquées suivant la direction ox.

$$\sum F_x = \rho g_x dx dy dz - \frac{\partial p}{\partial x} dx dz dy - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx dz dy - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy dz dx - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz dx dy$$

En procédant de la même façon pour les autres directions nous obtenons :

$$\sum F_y = \rho g_y dx dy dz - \frac{\partial p}{\partial y} dx dz dy - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} dx dz dy - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} dy dz dx - \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} dz dx dy$$

$$\sum F_z = \rho g_z dx dy dz - \frac{\partial p}{\partial z} dx dz dy - \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} dx dz dy - \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} dy dz dx - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} dz dx dy$$

Et finalement on obtient les équations traduisant la conservation de la quantité de mouvement de l'écoulement d'un fluide.

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial \rho v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial \rho v_x}{\partial z} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \\ \frac{\partial \rho v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial \rho v_y}{\partial z} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \\ \frac{\partial \rho v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial \rho v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} \end{cases}$$

Les différentes contraintes, pour des fluides newtoniens, sont données par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= -\mu \left[2 \frac{\partial v_x}{\partial x} \right] + \frac{2}{3} \mu (\nabla V) & \tau_{xy} = \tau_{yx} &= -\mu \left[\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right] \\ \tau_{yy} &= -\mu \left[2 \frac{\partial v_y}{\partial y} \right] + \frac{2}{3} \mu (\nabla V) & \tau_{yz} = \tau_{zy} &= -\mu \left[\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right] \\ \tau_{zz} &= -\mu \left[2 \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] + \frac{2}{3} \mu (\nabla V) & \tau_{zx} = \tau_{xz} &= -\mu \left[\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

$$\nabla V = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

II.3. Forme générale d'une équation de transport

II.3.1. Notion de bilan

Toute étude relative à la détermination d'une entité physique quelconque φ repose sur l'établissement de son bilan dans un domaine D pendant une durée de temps dt . Le domaine en question, représenté en figure (II.3), possède un volume élémentaire dV délimité par une surface dS .

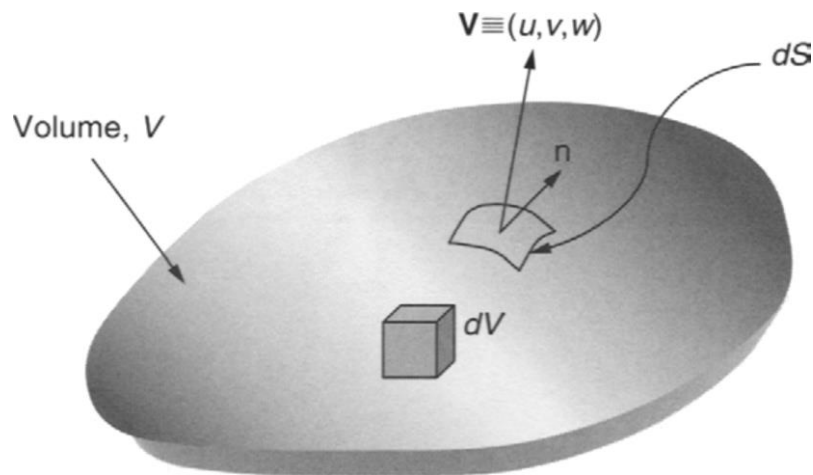


Figure (II.3) : Définition du domaine soumis à un bilan

Le déplacement (transfert, transport) d'une entité physique (masse, quantité de mouvement, énergie, matières, concentration....) peut faire l'objet d'un bilan local à travers le volume élémentaire dV . Ce bilan décrit les variations dans le temps de l'entité physique φ de telle façon que l'entité physique considérée peut rentrer, sortir, se créer (source +) ou disparaître (puits -) dans le volume dV à travers toute sa surface dS .

La notion de bilan peut se traduire par l'énoncé suivant :

L'accumulation (Variation de l'entité phys φ dans le volume dV délimité par la surface dS pendant un laps de temps dt	=	Flux net de φ entrant dans dV par la surface dS .	-	Flux net de φ sortant de dV par la surface dS .	±	La production / ou la destruction de φ dans ce même volume dV
--	---	---	---	---	---	--

Le flux de la grandeur physique considérée peut être un flux convectif lié au mouvement du support matériel (fluide circulant avec une vitesse u) et un flux dispersif (diffusif) lié à la propagation de φ dans le volume V .

II.3.2. Principes de conservation

Les équations de transport (de transfert) résultent toutes d'un principe de conservation de quantités spécifiques (massiques φ ou volumiques $\rho\varphi$). La quantité spécifique $\varphi = \varphi(x, y, z, t)$ est une caractéristique physique du fluide appelée "variable dépendante" où (x, y, z, t) sont les coordonnées spatiales et temporelles appelées "variables indépendantes".

Nous allons établir une équation générale spécifique pour la conservation d'une entité physique φ . Pour cela nous considérons un volume de contrôle dV ($\delta x, \delta y, \delta z$) schématisé par la figure (II.4). Afin d'établir le bilan de cette entité. Le principe de conservation stipule :

L'accumulation de φ dans le volume de contrôle pendant une durée δt est égale au flux net de φ dans ce volume (entrée - sortie) + la création nette (destruction) de φ dans le volume.

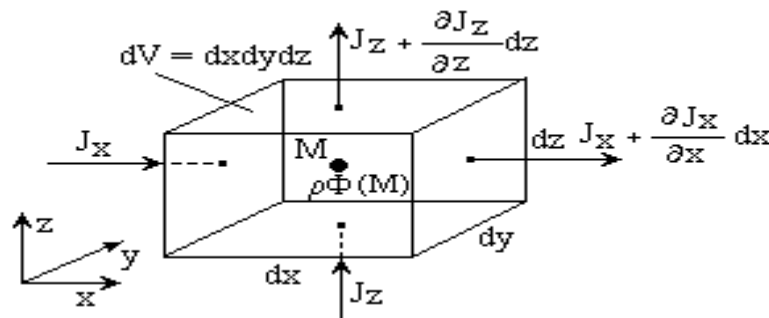


Figure (II.4) : Bilan des flux dans le volume de contrôle.

- Accumulation de φ dans le volume de contrôle $(\rho\varphi dV)_{t+dt} - (\rho\varphi dV)_t$
- Génération nette de φ à l'intérieur du volume de contrôle (terme source) $= S_\varphi dV dt$
 S_φ est la génération de φ par unité de volume
- Flux net de φ dans le volume de contrôle =

$$(J_x - J_{x+dx}) dy dz \delta t + (J_y - J_{y+dy}) dx dz \delta t + (J_z - J_{z+dz}) dx dy \delta t$$

Mais le développement de Taylor permet d'écrire : $J_{x+dx} = J_x + dx \frac{\partial J_x}{\partial x}$

Donc le flux net de φ dans le volume de contrôle sera :

$$-\frac{\partial J_x}{\partial x} dx dy dz \delta t - \frac{\partial J_y}{\partial y} dx dy dz \delta t - \frac{\partial J_z}{\partial z} dx dy dz \delta t$$

Nous savons que le flux de φ peut-être un flux convectif et un flux diffusif et qui s'exprime par les relations suivantes :

$$J_{xconv} = \rho \varphi u_x$$

$$J_{xdiff} = -\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

Le bilan dans le volume de contrôle sera:

$$\frac{(\rho\varphi)_{t+\delta t} - (\rho\varphi)_t}{\delta t} = \frac{(J_x - J_{x+\delta x})}{\delta x} + \frac{(J_y - J_{y+\delta y})}{\delta y} + \frac{(J_z - J_{z+\delta z})}{\delta z} + S_\varphi$$

Ou encore :

$$\frac{\partial(\varphi\rho)}{\partial t} = -\frac{\partial J_x}{\partial x} - \frac{\partial J_y}{\partial y} - \frac{\partial J_z}{\partial z} + S_\varphi$$

En détaillant les flux globaux nous obtenons:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varphi u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \varphi v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \varphi w_z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right] + S_\varphi \dots \dots (I)$$

L'équation générale de transport d'une entité physique quelconque peut être donnée par l'expression en notation vectorielle suivante :

$$\frac{\partial(\varphi\rho)}{\partial t} + \nabla \rho u_x \varphi = \nabla(\Gamma_\varphi \nabla \varphi) + S_\varphi$$

II.4. Equations fondamentales de conservation

II.4.1. Conservation de masse (Equation de continuité)

En remplaçant dans l'équation générale de Conservation (I) : φ par 1, Γ_φ par 0, S_φ Par 0 pour obtenir :

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \frac{\partial\rho v_x}{\partial x} + \frac{\partial\rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial\rho v_z}{\partial z} = 0$$

II.4.2. Conservation de la quantité de mouvement

En remplaçant dans l'équation générale de Conservation (I): φ par u, v, w, Γ_φ par μ et S_φ reste général, nous obtenons les équations de la conservation de la quantité de mouvement sous une autre forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x \cdot v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_x \cdot v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_x \cdot v_z)}{\partial z} &= \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) + S_{x\varphi} \\ \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_y \cdot v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y \cdot v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_y \cdot v_z)}{\partial z} &= \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) + S_{y\varphi} \\ \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_z \cdot v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_z \cdot v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z \cdot v_z)}{\partial z} &= \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + S_{z\varphi} \end{aligned}$$

II.5. Modèle mathématique

Pour établir notre modèle mathématique nous considérons l'équation générale de transport, d'une entité physique quelconque φ , détaillée précédemment et nous supposons que :

- L'écoulement est incompressible et bidimensionnel.
- Les propriétés du fluide sont constantes.
- Le régime est transitoire.
- Régime laminaire
- Conditions isothermes
- Le terme source est nul $S_C = 0$

t : le temps

ρ : La masse volumique

p : La pression

ν : viscosité cinématique du fluide

En tenant compte de toutes les hypothèses considérées, on aboutit au modèle mathématique suivant :

II.5.1. Equation de continuité

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

II.5.2. Equation de quantité de mouvement suivant la direction horizontale (x)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \left[\frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} \right] = -\frac{\partial p}{\rho \partial x} + \nu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right]$$

II.5.3. Equation de quantité de mouvement suivant la direction verticale (y)

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \left[\frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} \right] = -\frac{\partial p}{\rho \partial y} + \nu \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right]$$

II.5.4. Equation de la concentration

La concentration du traceur utilisé pour déterminer la fonction de la distribution du temps de séjour est obtenue à partir de l'équation générale (I), en remplaçant φ par C (concentration), Γ_φ par D (coefficient de diffusion) et S_φ par S_c (terme source). Son expression est :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right] + S_c$$

Cette équation est résolue une fois le champ des vitesses déterminé pour un régime établi.

II.6. Formulation fonction de courant Ψ - Vorticité ω

L'utilisation de la formulation : fonction de courant Ψ et Vorticité ω à pour objet l'élimination du gradient de pression dans l'équation de quantité de mouvement.

II.6.1. Equation de la fonction de courant Ψ

Par définition nous avons :

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

En remplaçant u et v par leur expression dans l'équation de continuité nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} = 0$$

Donc l'équation de continuité est satisfaite.

Par définition la Vorticité est donnée par :

$$\omega = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$$

En remplaçant u et v par leur expression dans cette dernière équation nous obtenons l'équation de fonction de courant.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega$$

II.6.2. Equation de vorticité

En dérivant les équations de quantité de mouvement suivant *ox* et *oy* par rapport à *y* et *x* respectivement.

$$-\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\rho \partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\rho \partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right]$$

Nous obtenons les expressions suivantes :

$$\underbrace{-\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial t}}_{I.1} - \underbrace{\left[u \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right]}_{I.2} - \underbrace{\left[v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right]}_{I.3} = \underbrace{-\frac{\partial^2 p}{\rho \partial y \partial x}}_{I.4} + \underbrace{\nu \left[\frac{\partial^3 u}{\partial y \partial x^2} + \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} \right]}_{I.5} \dots \dots \dots I$$

$$\underbrace{\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t}}_{II.1} + \underbrace{\left[u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right]}_{II.2} + \underbrace{\left[v \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right]}_{II.3} = \underbrace{-\frac{\partial^2 p}{\rho \partial x \partial y}}_{II.4} + \underbrace{\nu \left[\frac{\partial^3 v}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 v}{\partial x \partial y^2} \right]}_{II.5} \dots \dots \dots II$$

Maintenant nous additionnons les termes correspondants des équations I et II

1^{er} terme : terme temporel (*I.1+II.1*):

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial t} + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\underbrace{-\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}}_{\omega} \right) \Rightarrow -\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial t} + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t} = \frac{\partial \omega}{\partial t}$$

2^{ème} terme : terme convectif :

➤ terme convectif (*I.2+II.2*) :

$$\begin{aligned}
-\left[u \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \left[u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right] &= -u \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} - \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} + u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \\
&= \frac{\partial u}{\partial x} \underbrace{\left(-\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{\omega} + u \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\left(-\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{\omega}
\end{aligned}$$

Donc :

$$-\left[u \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \left[u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right] = \frac{\partial u}{\partial x} \omega + u \frac{\partial \omega}{\partial x}$$

➤ terme convectif (I.3+II.3) :

$$\begin{aligned}
-\left[v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right] + \left[v \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right] &= -v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} + v \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \\
-\left[v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right] + \left[v \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right] &= \frac{\partial v}{\partial y} \underbrace{\left(-\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{\omega} + v \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\left(-\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{\omega}
\end{aligned}$$

Donc :

$$-\left[v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right] + \left[v \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right] = \frac{\partial v}{\partial y} \omega + v \frac{\partial \omega}{\partial y}$$

➤ terme convectif complet :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \omega + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \omega + v \frac{\partial \omega}{\partial y} = \omega \underbrace{\left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right]}_0 + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} \Rightarrow u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y}$$

3^{ème} terme : terme de pression (I.4+II.4) :

$$\frac{\partial^2 p}{\rho \partial x \partial y} - \frac{\partial^2 p}{\rho \partial x \partial y} = 0$$

4^{ème} terme : terme diffusif (I.5+II.5) :

$$-\nu \left(\frac{\partial^3 u}{\partial y \partial x^2} + \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} \right) + \nu \left(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 v}{\partial x \partial y^2} \right) = \nu \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{\left(-\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{\omega} + \nu \frac{\partial^2}{\partial y^2} \underbrace{\left(-\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{\omega} = \nu \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right)$$

En regroupant tous les termes nous obtenons l'équation de transport de la vorticité :

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} = \nu \left[\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right]$$

II.7. Equation de pression

La caractérisation de l'hydrodynamique de l'écoulement consiste en la détermination non seulement des champs de vitesses mais aussi celui de la pression. Généralement quand la formulation fonction de courant-vorticité est utilisée pour la résolution d'un écoulement le champ de pression est rarement déterminé. Pour remédier à cela nous allons une approche pour caractériser ce champ de pression à partir de l'équation de la conservation de la quantité de mouvement.

Nous allons adopter la même démarche que celle suivie pour déterminer l'équation de transport de la vorticité ; mais cette fois-ci les équations de la quantité de mouvement suivant ox et oy sont dérivées par rapport à x et y respectivement.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = - \frac{\partial p}{\rho \partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = - \frac{\partial p}{\rho \partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right]$$

Nous obtenons les équations suivantes :

$$\underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}}_{I.1} + \underbrace{\left[u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right]}_{I.2} + \underbrace{\left[v \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right]}_{I.3} = \underbrace{- \frac{\partial^2 p}{\rho \partial x}}_{I.4} + \underbrace{\nu \left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} \right]}_{I.5} \dots \dots \dots I$$

$$\underbrace{\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t}}_{II.1} + \underbrace{\left[u \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right]}_{II.2} + \underbrace{\left[v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right]}_{II.3} = \underbrace{- \frac{\partial^2 p}{\rho \partial y}}_{II.4} + \underbrace{\nu \left[\frac{\partial^3 v}{\partial y \partial x^2} + \frac{\partial^3 v}{\partial y^3} \right]}_{II.5} \dots \dots \dots II$$

Nous additionnons les termes correspondants des équations I et II

1^{er} terme : terme temporel (I.1+II.1) :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial t} + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \right)}_0 = 0$$

2^{ème} terme : terme convectif (I.2+II.2):

$$\left[u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] + \left[v \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right] + \left[u \frac{\partial v}{\partial y \partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right] + \left[v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] = u \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)}_0 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + v \frac{\partial}{\partial y} \underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)}_0 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x}$$

Donc le terme convectif est :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x}$$

3^{ème} terme : terme de pression (I.4+II.4) :

$$-\frac{\partial^2 p}{\rho \partial x^2} - \frac{\partial^2 p}{\rho \partial y^2} = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right)$$

4^{ème} terme : terme diffusif (I.5+II.5) :

$$-\nu \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} \right) + \nu \left(\frac{\partial^3 v}{\partial y \partial x^2} + \frac{\partial^3 v}{\partial y^3} \right) = \nu \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)}_0 + \nu \frac{\partial^2}{\partial y^2} \underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)}_0$$

Donc le terme diffusif est nul.

Finalement nous obtenons l'équation qui nous permet de déterminer le champ de pression donnée par l'expression suivante :

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right) = -\rho \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right]$$

II.8. Modèle mathématique en fonction de ω - ψ

Le modèle mathématique du problème considéré dans cette étude se compose des équations suivantes :

➤ Equation de la vorticité :
$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} = \nu \left[\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right]$$

➤ Equation de la fonction de courant :
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega$$

La résolution de la première équation nous donne les valeurs de la vorticité dans tout le domaine. Les valeurs obtenues injectées dans la seconde équation nous donnent celles de la

fonction de courant. Les vitesses sont calculées explicitement à partir des expressions qui les définissent : $u = \frac{\partial \psi}{\partial y}$ et $v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$

Pour une étude complète on peut alors, une fois le régime établi (pas de variation par rapport au temps) déterminer le champ de pression en résolvant l'équation :

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right) = -\rho \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right]$$

C'est la première étape qui consiste à déterminer le champ hydrodynamique de l'écoulement.

La seconde étape consiste à résoudre l'équation ci-dessous exprimant le transport de la concentration du traceur neutre (terme source nul) pour déterminer la fonction de la distribution du temps de séjour en fonction du type d'injection.

➤ Equation de la concentration : $\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right]$

La résolution de toutes les équations du modèle mathématique nécessite l'incorporation des conditions initiales et aux limites pour chaque variable propres pour chaque configuration géométrique considérée.

Références

Z.benaissa, F.Benkhellaf, M.Chaker (2015), « Etude numérique d'un réacteur réel à faible dispersion axiale ». Mémoire de fin d'étude pour l'obtention du diplôme de Master en Génie chimique.

N.FERROUDJ (2013), « Génération d'entropie de l'écoulement d'un fluide dans une cavité chauffée par le bas ». Mémoire présentée pour l'obtention du diplôme de Magister en génie chimique.

Chapitre III : Formulation Numérique

III.1 Introduction

Dans ce chapitre nous décrivons la méthode numérique utilisée pour résoudre les équations du modèle formulées dans le chapitre II. Plusieurs méthodes de discrétisation des équations différentielles aux dérivées partielles sont utilisées actuellement telles que: la méthode des volumes finis, des différences finies et des éléments finis,etc. Parmi ces méthodes, nous avons choisi celle des différences finies.

III.2 Méthode des différences finies

La méthode consiste à remplacer les opérateurs différentiels par des opérateurs de différence basés sur des intervalles de temps et d'espace finis Δt et Δx , puis à résoudre les équations algébriques obtenues en tenant compte des conditions initiales et aux limites. Ainsi, le domaine de variation continu du problème se trouve transformé en un ensemble finis de points (nœuds) où la solution sera recherchée. Ce domaine discret est alors délimité par des frontières formant par conséquent un réseau de points de calcul, appelé aussi maillage comme le montrent les figures ci-dessous :

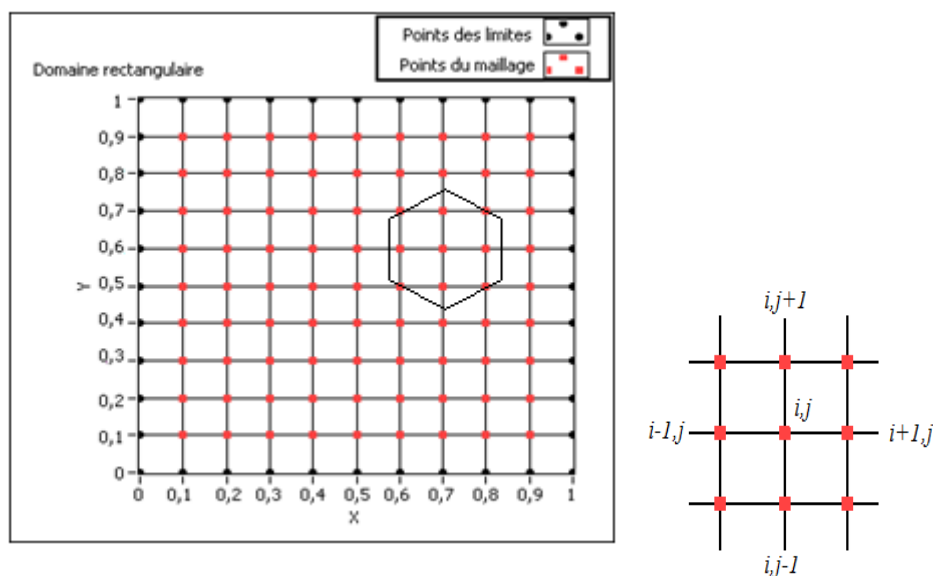


Figure (III.1) : (a) Maillage uniforme d'un domaine et (b) zoom sur la partie délimitée.

III.2.1 Approximation en différences finies

Si une fonction quelconque φ est continue et dérivable, alors l'idée de base est d'appliquer à cette fonction un développement en série de *Taylor* comme suit (*Hoffmann et Chiang, 2000*) :

$$\varphi_{x+dx} = \varphi_x + \Delta x \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_x + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_x + \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} \right|_x + \dots + \frac{\Delta x^n}{n!} \left. \frac{\partial^n \varphi}{\partial x^n} \right|_x + \mathcal{O}(\Delta x^n)$$

$$\varphi_{x-dx} = \varphi_x - \Delta x \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_x + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_x - \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} \right|_x + \dots - \frac{\Delta x^n}{n!} \left. \frac{\partial^n \varphi}{\partial x^n} \right|_x + \mathcal{O}(\Delta x^n)$$

Dans lequel $\mathcal{O}(\Delta x)^n$ représente le reste ou l'erreur de troncature d'ordre n . Les problèmes des écoulements instationnaires étant gouvernés par des équations aux dérivées partielles, on peut appliquer aisément ce développement pour une fonction à deux variables ou plus. Ayant φ comme fonction de l'espace et du temps, on procédera à la discrétisation du plan x, t en un réseau (maillage) orthogonale, formant ainsi une grille de nœuds de calcul. Pour l'approximation des dérivées spatiales premières, et en négligeant l'erreur de troncature, le développement de *Taylor* permet de formuler les possibilités suivantes :

➤ Dérivée première :

- Schéma décentré amont (Précis au premier ordre) :

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_x = \frac{\varphi_{x+dx} - \varphi_x}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

- Schéma décentré aval (Précis au premier ordre) :

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_x = \frac{\varphi_x - \varphi_{x-dx}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

- Schéma centré (Précis au deuxième ordre) :

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_x = \frac{\varphi_{x+dx} - \varphi_{x-dx}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

➤ Dérivée seconde :

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right|_x = \frac{\varphi_{x-dx} - 2\varphi_x + \varphi_{x+dx}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

En ce qui est de la dérivée première par rapport au temps, on adopte en général un schéma décentré en avant.

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right|_{i,j} = \frac{\varphi_{i,j}^{t+\Delta t} - \varphi_{i,j}^t}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

III.2.1.1 Terme convectif

Dans les équations de transport figure le terme convectif $u \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ qui est non linéaire et qui pose des problèmes de convergence quand l'écoulement du fluide présente des zones de recirculation. Pour remédier à cette difficulté le schéma *Upwind* est utilisé pour sa discrétisation. Le principe de ce schéma est le suivant :

$$\begin{aligned} \text{➤ Pour } u_{i,j} \geq 0 & \quad \Rightarrow u \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} = u_{i,j} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\Delta x} \\ \text{➤ Pour } u_{i,j} \leq 0 & \quad \Rightarrow u \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} = u_{i,j} \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\Delta x} \end{aligned}$$

Ce schéma est très stable mais engendre de la dissipation, on peut alors utiliser des ordres supérieurs (second, troisième ordre)

III.2.2. Schémas explicites et implicites

Suivant la façon de discrétisation de l'équation aux dérivées partielles, deux cas se distinguent pour la méthode des différences finies (*Hoffmann et Chiang, 2000*) :

a) Schéma explicite

Si les dérivées spatiales dans l'équation sont exprimées en termes de variables au temps t connu, le schéma est dit alors explicite. C'est-à-dire, les caractéristiques de l'écoulement à un temps donné sont exprimées en fonction des caractéristiques de celui-ci supposées connues à l'instant précédent, de ce fait, ce qui se passe au temps $t + \Delta t$ ne dépend que du passé au temps t . Ce schéma possède un avantage de simplicité de calcul, mais pose des problèmes de stabilité numérique et exige une condition de stabilité, c'est la règle CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*).

Nous citons entre autres schémas, celui de *Lax* (appelé schéma diffusif de *Lax*), le schéma de *Mac Cormack* (1971) et celui de *Gabutti* (*Chaudhry, 2008*), lesquels ont reçu des applications aussi bien en écoulements à surface libre qu'en charge.

b) Schéma implicite

A l'opposé, si les caractéristiques de l'écoulement à un temps donné $t + \Delta t$ sont approchées en fonction de la solution précédente trouvée au temps t , et des valeurs recherchées au temps

même du calcul $t + \Delta t$, la liaison est implicite, et le schéma est dit par conséquent implicite. Ceci impose la résolution simultanée des équations algébriques obtenues à chaque pas de temps. Le schéma en question possède l'avantage d'être inconditionnellement stable et offre une flexibilité dans le choix du temps de calcul, mais pour des systèmes ayant des conditions aux limites complexes, cette méthode devient vite compliquée en plus du volume de calcul induit. Parmi ces schémas, nous citons celui de *Preissmann* (Cunge, 1988), le schéma de *Beam et Warming* (Fennema et Chaudhry, 1989) et le schéma de *Vasiliev* (Chaudhry, 2008). L'ensemble de ces schémas a reçu de larges applications dans le domaine des écoulements à surface libre.

III.3. Discrétisation des équations du problème

Notre modèle mathématique présente deux types d'EDP. Le premier est une équation classique de transport et le second est une équation de Poisson. Leurs expressions générales sont :

➤ Equation de transport : $\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \Gamma_{\varphi} \left[\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right]$ Avec :

<i>Variable</i>	φ	Γ_{φ}
<i>Vorticité</i>	ω	ν
<i>Concentration</i>	C	D

➤ Equation de poisson : $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = S_{\varphi}$ Avec :

<i>Variable</i>	φ	S_{φ}
<i>Fonction de courant</i>	ψ	$-\omega$
<i>Pression</i>	P	$-\rho \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right]$

III.3.1 Discrétisation de l'équation de Transport

Nous avons opté pour un schéma explicite suivant le temps, un schéma *Upwind* du premier ordre pour les termes convectifs et un schéma central pour les termes diffusifs. La discrétisation de l'équation de transport peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -u \frac{\partial \varphi}{\partial x} - v \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \Gamma_{\varphi} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \Gamma_{\varphi} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \text{ Dont la discrétisation est :}$$

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{\Delta t} = & -u_{i,j} \left[\gamma_x \left(\frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right) + (1 - \gamma_x) \left(\frac{\varphi_{i+1,j}^n - \varphi_{i,j}^n}{\Delta x} \right) \right] \\ & - v_{i,j} \left[\gamma_y \left(\frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right) + (1 - \gamma_y) \left(\frac{\varphi_{i,j+1}^n - \varphi_{i,j}^n}{\Delta y} \right) \right] \\ & + \Gamma_{\varphi} \left(\frac{\varphi_{i-1,j}^n - 2\varphi_{i,j}^n + \varphi_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} \right) \\ & + \Gamma_{\varphi} \left(\frac{\varphi_{i,j-1}^n - 2\varphi_{i,j}^n + \varphi_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned}$$

Avec pour le schéma *Upwind* :

$$\begin{aligned} \gamma_x = 0 & \quad \text{si } u_{i,j}, v_{i,j} \leq 0 \\ \gamma_x = 1 & \quad \text{si } u_{i,j}, v_{i,j} \geq 0 \end{aligned}$$

La résolution de cette équation discrétisée est immédiate car les valeurs de $\varphi_{i,j}$ au temps $n+1$ ($t+\Delta t$) sont calculées explicitement en fonction des valeurs connues de $\varphi_{i,j}$ au temps n (t).

III.3.2 Discrétisation de l'équation de Poisson

La discrétisation de l'équation de Poisson peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = S_{\varphi} \text{ Dont la discrétisation est :}$$

$$F_{\varphi} = \frac{\varphi_{i-1,j} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\varphi_{i,j-1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j+1}}{\Delta y^2} - S_{\varphi} = 0$$

La résolution de cette équation discrétisée est effectuée d'une manière itérative par la méthode de Newton-Raphson qui donne les valeurs de $\varphi_{i,j}^{k+1}$ à l'itération $k+1$ en fonction des valeurs connues de $\varphi_{i,j}^k$ à l'itération k par la relation suivante :

$$\phi_{i,j}^{k+1} = \phi_{i,j}^k - \omega \frac{F_\phi}{\partial F_\phi / \partial \phi} \quad \text{Avec} \quad \frac{\partial F_\phi}{\partial \phi} = -2 \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) \text{ où } \omega \text{ est le facteur de relaxation dont}$$

la valeur optimale est comprise entre 0.0 et 2.0.

III.3.3 Discrétisation des composantes de la vitesse

Les vitesses sont calculées explicitement à partir de leurs définitions données par les expressions suivantes :

- Vitesse horizontale U : $U_{i,j} = \frac{\partial \psi}{\partial y} \Rightarrow U_{i,j} = \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}}{2\Delta y}$
- Vitesse verticale V : $V_{i,j} = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \Rightarrow V_{i,j} = -\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{2\Delta x}$

III.4. Présentation du problème

Dans notre cas, nous avons considéré l'écoulement d'un fluide à travers un réservoir/réacteur pilote de laboratoire (2D) avec une longueur L et une hauteur H en régime laminaire et des conditions isothermes. Ce réacteur possède deux entrées, l'une en haut et l'autre en bas (paroi gauche) et une sortie au milieu (paroi droite). La figure ci-dessous schématise la configuration géométrique étudiée.

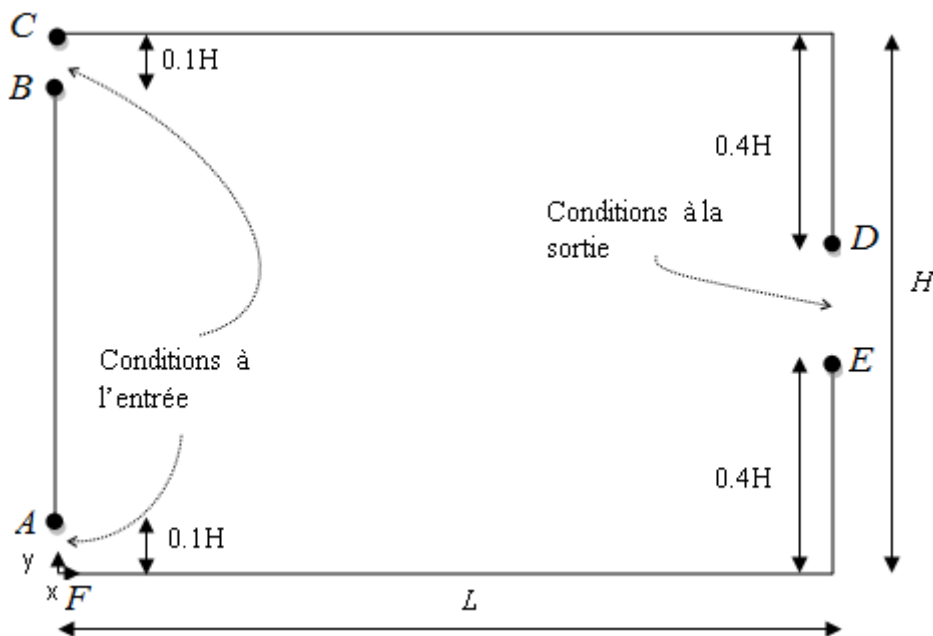


Figure (III.2) : Géométrie du problème étudié.

Les données géométriques, les propriétés du fluide et du traceur sont les suivantes :

- Données géométriques :

Longueur : $0.1m$

Largeur : $0.1m$

Hauteur de l'entrée du bas : $0.01m$; Hauteur de l'entrée du haut : $0.01m$

Hauteur de la sortie : $0.02m$

- Propriétés du fluide :

Fluide : eau

Viscosité cinématique $\nu = 10^{-6} m^2/s$

Traceur : neutre

Coefficient de diffusion $D = 5.10^{-10} m^2/s$

III.5. Conditions initiales et aux limites

Le modèle mathématique ainsi que la configuration géométrique étant définis il nous reste à préciser les conditions initiales et aux limites de chaque variable du problème. Initialement toutes les variables (u , v , ψ , ω et C) sont nulles sauf sur les limites du domaine physique ou elles sont précisées :

1. Vitesses : La vitesse verticale v est nulle dans tout le domaine y compris sur les limites. Alors que la vitesse horizontale u est aussi nulle partout sauf à l'entrée ou nous considérons un profil uniforme donné par : $u(y) = u_{moy}$. La vitesse u_{moy} est déterminée en fonction du nombre de Reynolds de l'écoulement donné par la relation suivante :

$$Re = \frac{u_{moy} L_c}{\nu}$$
 avec L_c une longueur caractéristique égale à $H/10$ pour notre cas (largeur de l'entrée)

2. Fonction de courant : Sur la paroi horizontale inférieure et la partie inférieure de la paroi droite (du point E jusqu'au point F) elle est nulle car il n'y a aucun débit de fluide qui pénètre dans la cavité. A l'entrée (du point F au point A) elle est calculée à partir de la

définition de la vitesse en fonction de la fonction de courant : $u(y) = \frac{\partial \psi}{\partial y}$

Pour un profil uniforme nous obtenons : $\psi(y) = \int_0^{0.1H} u_{moy} dy = u_{moy} y$. La valeur de cette fonction reste constante et égale à $\psi(y)$ pour $y=0.1H$ (débit total pénétrant par l'entrée inférieure) entre les points A et B . Entre les points B et C (seconde entrée) elle est calculée

comme pour la première entrée c'est-à-dire $\psi(y) = \int_{0.09H}^H u_{moy} dy = u_{moy} y_{0.09H}^H$. La fonction de

courant au point C représente le débit total du fluide qui rentre dans la cavité. La valeur de la fonction de courant entre les points C et D reste constante et égale à celle calculée au point C .

3. Vorticité : Cette variable est nulle partout sauf sur les parois et à l'entrée. Sur les parois solides elle est donnée par la relation suivante : $\omega|_p = \frac{2}{\delta^2}(\psi_p - \psi_{p-1})$ ou p désigne le nœud sur la paroi et $p-1$ le nœud qui lui est adjacent.
4. Pression : Si l'équation de la pression est résolue les conditions de celle-ci sont : un gradient de pression nul au niveau des parois ; une valeur nulle à l'entrée. Dans certains cas la pression à l'entrée est déterminée en appliquant l'équation de Bernoulli entre un point situé à l'infini et un autre situé à l'entrée sur le plan horizontal.

$$\frac{p_\infty}{\rho g} + \frac{u_\infty^2}{2g} + Z_\infty = \frac{p_e}{\rho g} + \frac{u_e^2}{2g} + Z_e \Rightarrow (p_e - p_{atm}) = P_e = -\rho \frac{u_e^2}{2}$$

5. Concentration : La concentration à l'entrée est égale à C_0 . Si l'injection échelon est considérée elle reste constante pendant toute la durée de la simulation. Maintenant pour l'injection impulsion elle ne reste constante que pendant un laps de temps, généralement pris égal à 1/100 du temps total de simulation. Sur toutes les parois le gradient de la concentration est nul.
6. Conditions à la sortie : Pour toutes les variables nous considérons un gradient nul à la sortie.

III.6. Algorithme

La formulation fonction de courant ψ -vorticité ω exige un traitement simultané de la résolution des équations de la vorticité et de la fonction de courant ainsi que la détermination des vitesses. Une fois ces vitesses déterminées nous pouvons traiter n'importe quelle équation de transport liée au problème considéré. Dans notre cas il s'agit de la détermination de la concentration d'un traceur neutre dans le but d'étudier la fonction de distribution des temps de séjour dans la configuration géométrique choisie.

Les principales étapes sont données dans l'algorithme suivant :

A. Partie hydrodynamique :

- Début du programme

- Domaine de calcul et données.
- Génération du maillage.
- Conditions initiales et aux limites.
- Calcul de certains coefficients fixes.
- Début de la boucle sur le temps.
 - Résolution de l'équation de la vorticit  (m thode explicite).
 - R solution  ventuelle d'autres  quations (temp rature, concentration).
 - R solution de la fonction de courant (m thode de Newton-Raphson).
 - Calcul des vitesses.
 - Calcul de la vorticit  sur les parois.
 - Test sur r gime  tabli. Si non r p ter les  tapes pr c dentes. Si oui
- R solution de l' quation de pression.
- Impression des r sultats.
- Fin du programme.

B. Partie Concentration :

- D but du programme
- Domaine de calcul et donn es.
- G n ration du maillage.
- Conditions initiales et aux limites.
- Calcul de certains coefficients fixes.
- *Lecture du fichier contenant les valeurs des vitesses donn es par la partie hydrodynamique.*
- D but de la boucle sur le temps.
 - R solution de l' quation de la concentration (m thode explicite).
 - Calcul de la concentration moyenne   la sortie.
 - Calcul de la fonction de la Distribution du temps de s jour pour une injection  chelon ou Dirac de traceur.
 - Test sur r gime  tabli. Si non r p ter les  tapes pr c dentes. Si oui
- Impression des r sultats.
- Fin du programme.

Références

Hoffmann, K.A. et Chiang, S.T., « Computational fluid dynamics ». Volume 1 et 2. Engineering education system, USA, 2000.

Amara Lyes (2013), « Modélisation et simulation numérique des écoulements transitoires en charge par la méthode des volume finies ». Mémoire pour l'obtention du titre de Magister en hydraulique urbaine et ouvrages. Université de Bejaia (2013)

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1.Introduction

Dans les chapitres précédents nous avons établi le modèle mathématique régissant l'écoulement d'un fluide dans la formulation fonction de courant ψ – vorticité ω . Nous avons aussi exposé la méthode numérique de résolution de ce modèle. Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats des différentes simulations numériques relatives à l'écoulement de l'eau dans la géométrie considérée.

Nous rappelons d'abord le modèle mathématique et la géométrie considérée pour la validation de notre programme établi en langage Fortran. Ce problème a été traité par (**A.E. Rodrigues & M. Minceva**)

➤ Modèle mathématique :

○ Partie hydrodynamique :

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega \\ U = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad V = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \end{cases}$$

○ Partie concentration :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right)$$

➤ Géométrie considérée :

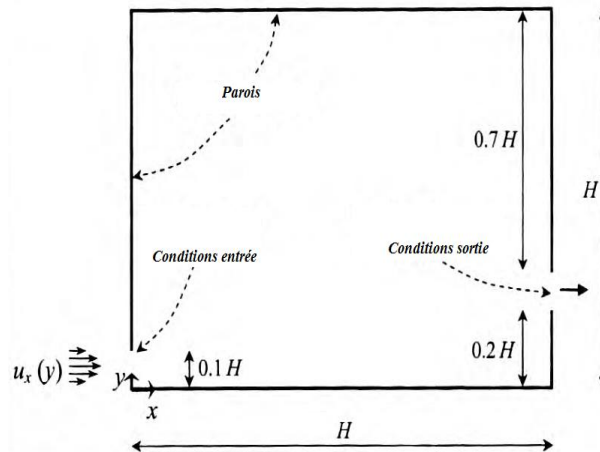


Figure (IV.1) : Configuration géométrique pour la validation.

➤ Données :

La dimension H est prise égale à $0.1m$, le fluide considéré est de l'eau ($\nu = 10^{-6} \text{ m}^2/s$) et la valeur du coefficient de diffusion du traceur est $D = 5.10^{-10} \text{ m}^2/s$.

IV.2. Maillage

La valeur des pas du maillage est un facteur important dont dépend directement la précision des résultats numériques. Nous avons déterminé le débit du fluide (eau $\nu = 10^{-6} \text{ m}^2/s$) à la sortie (qs) normalisé par le débit à l'entrée (qe) pour différents maillages pour un nombre de Reynolds fixé à 10 . Le résultat est donné dans le tableau suivant :

Maillage	Débit normalisé
<i>41x41</i>	<i>0.778844</i>
<i>81x81</i>	<i>0.963605</i>
<i>101x101</i>	<i>0.989615</i>

Tableau (IV.1) : Comparaison du débit normalisé pour différents maillages.

Nous avons donc opté pour un maillage uniforme de $101x101$ nœuds dans les deux directions. Ce maillage est représenté par la figure suivante :

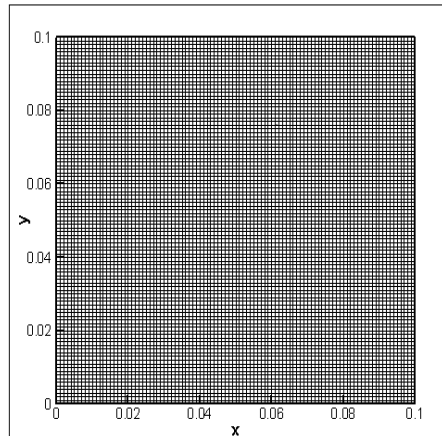


Figure (IV.2) : Schéma du maillage de cavité

IV.3. Validation

Le programme établi en langage Fortran a été validé en comparant les contours de l'évolution de la concentration dans le réacteur obtenue par nos simulations numériques (figure IV.3 (a)) avec ceux mentionnés dans les articles référenciés (figure IV.3 (b)).

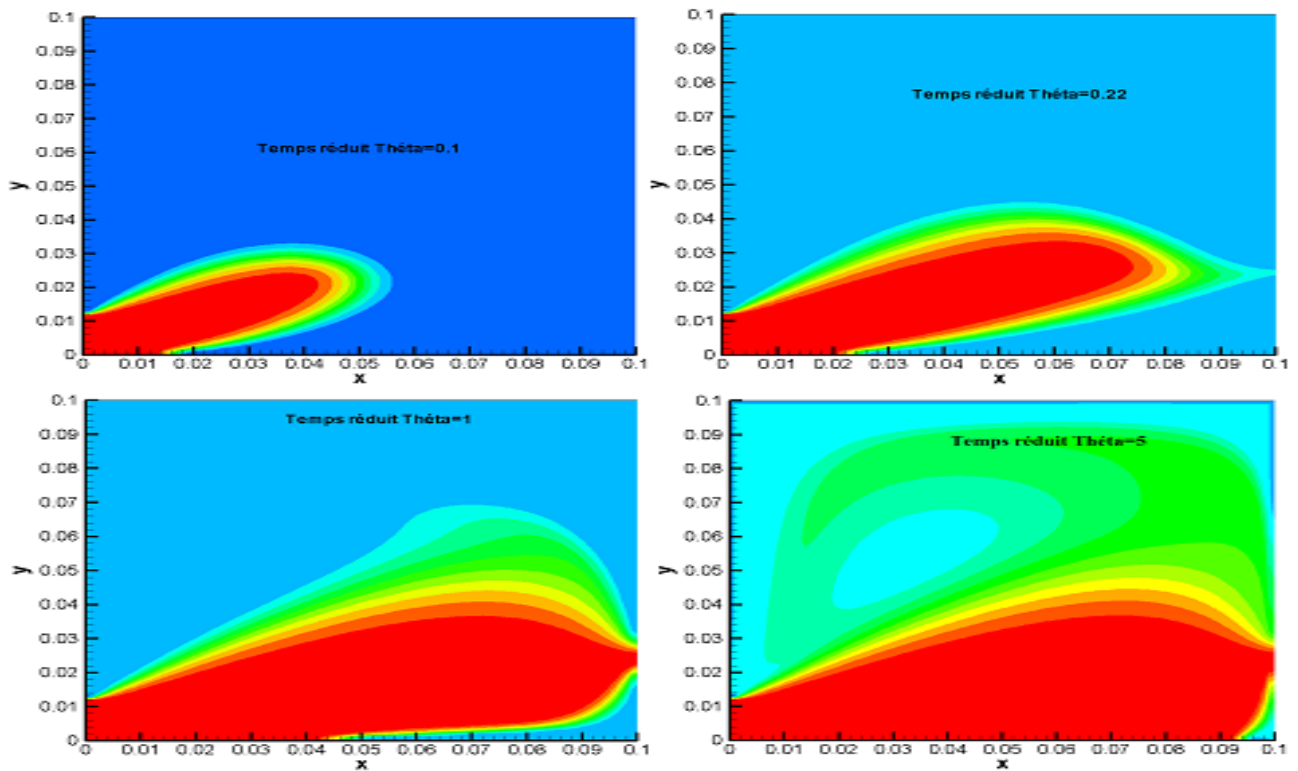


Figure IV.3 (a) : Evolution des contours de la concentration dans le réacteur $Re=10$ (présent travail)

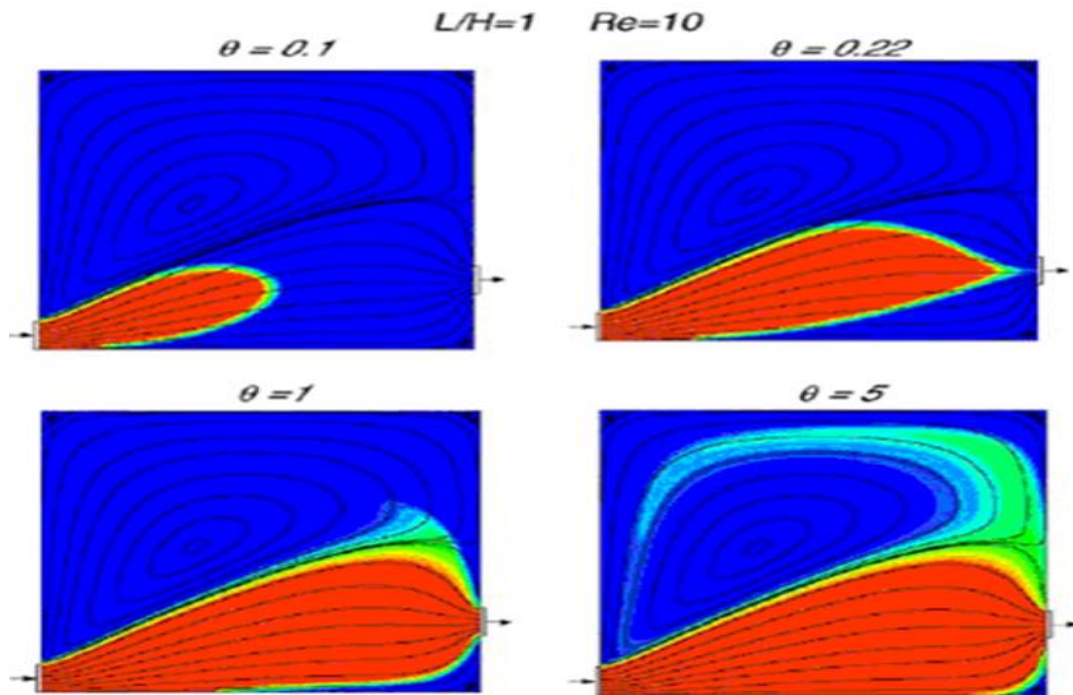


Figure IV.3 (b) : Evolution des contours de la concentration dans le réacteur $Re=10$ (A.E. Rodrigues & M. Minceva)

La figure (IV.4) montre le profil de l'évolution de la fonction de distribution cumulée du temps de séjour $F(\theta)$ pour un nombre de Reynolds égal à 10. Celle-ci commence à atteindre la sortie au bout d'un temps réduit égal à 0.22 comme c'est indiqué dans l'article. (A.E. Rodrigues & M. Minceva).

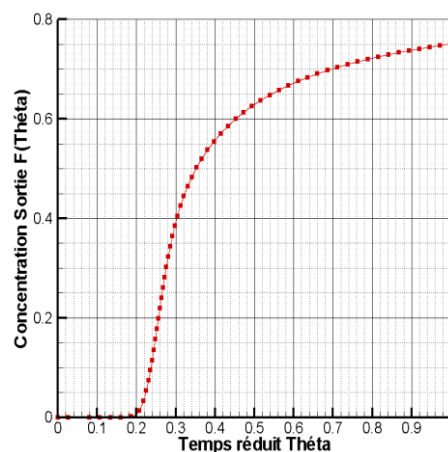


Figure (IV.4) : Evolution du profil de la fonction de distribution cumulée du temps de séjour $F(\theta)$ pour $Re=10$

Ces deux comparaisons confirment la validité du programme établi pour cette étude.

IV.4.Résultats

Dans ce chapitre nous présentons les principales simulations numériques permettant la caractérisation de l'écoulement dans la géométrie choisie et la détermination de la DTS. Cette caractérisation consiste en la détermination, pour un nombre de Reynolds fixé, du champ de vitesses qui servira ultérieurement à la détermination de la fonction de la distribution des temps de séjour. Nous allons d'abord présenter une caractérisation complète de l'écoulement pour un nombre de Reynolds égal à 10. Nous avons jugé utile, pour un meilleur suivi des résultats, de rappeler la géométrie considérée dans cette étude et qui a été invoquée dans le chapitre précédent. Nous avons considéré une cavité carrée ($L=H$), celle-ci est indiquée par la figure suivante :

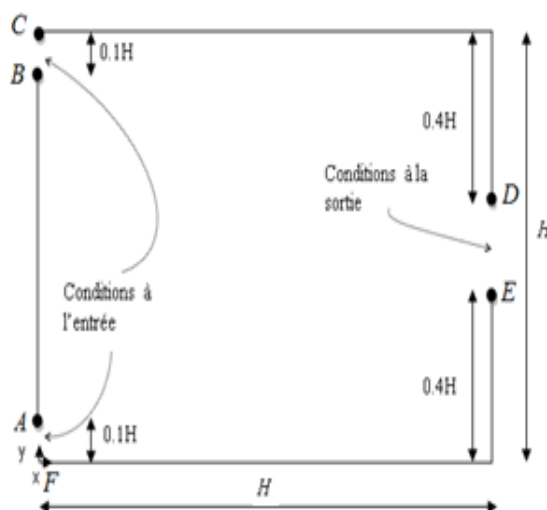


Figure (IV.5) : Géométrie du problème étudié.

IV.4.1. Caractérisation de l'écoulement pour $Re = 10$

Ces résultats sont présentés sous forme de contours de la fonction de courant et de la pression, de champs des vitesses, de trajectoires et de profils de vitesses.

La figure (IV.6) présente le contour de la fonction de courant (a) et le champ des vitesses (b), quant à la figure (IV.7) elle matérialise les trajectoires des particules fluides à travers la cavité. Ces figures montrent clairement le cheminement du fluide à travers la cavité. Une partie du fluide s'écoule d'une manière directe, en suivant le plus court chemin entre les deux entrées et la sortie. Une autre partie du fluide, concrétisée par des zones de recirculation, occupe la partie gauche, le coin supérieur et le coin inférieur situés dans la partie droite de la cavité.

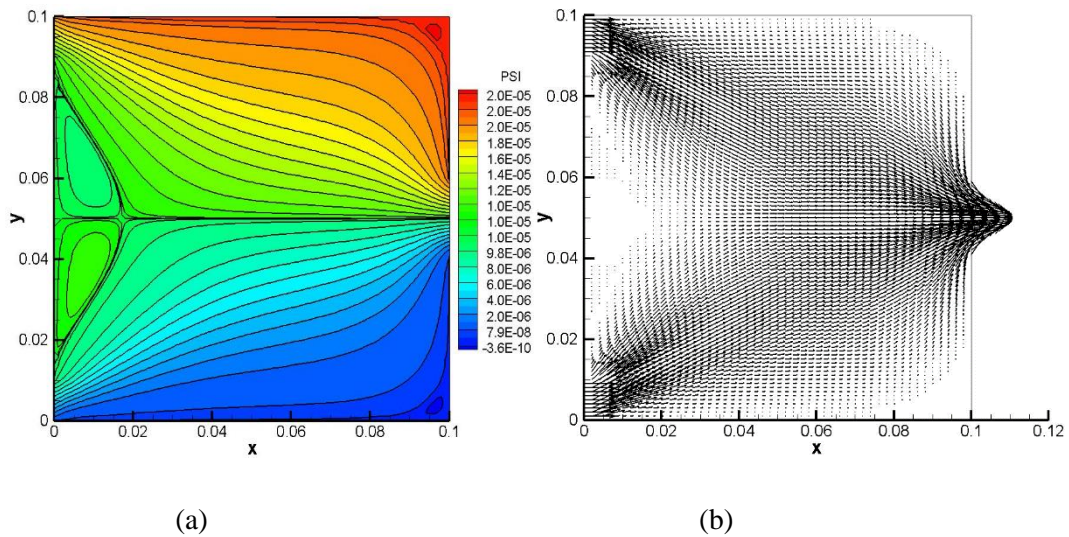


Figure (IV.6) : (a) Fonction de courant et (b) champ de vitesse

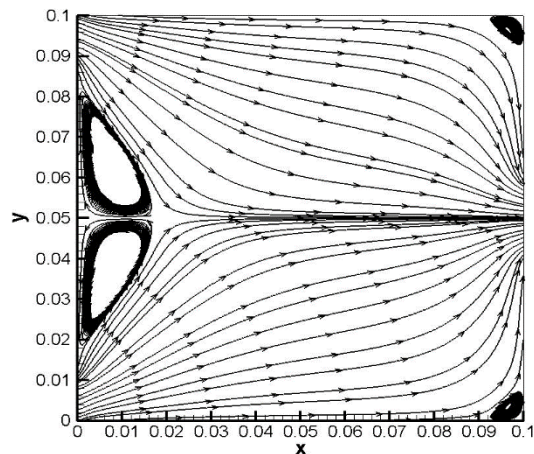


Figure (IV.7) : Trajectoires des particules fluide

Les contours de la pression auxquels nous avons superposé les trajectoires des particules fluides sont affichés dans la figure (IV.8). Au niveau des deux entrées il y a aspiration du fluide à l'intérieur de la cavité (pression négative) et à la sortie nous notons une pression positive importante qui met en évidence une compression du fluide à ce niveau. Au niveau des parois les contours sont perpendiculaires à celle-ci confirmant les conditions aux limites.

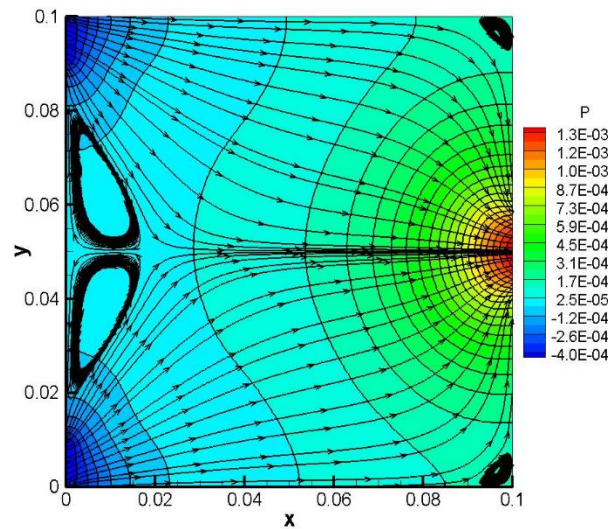


Figure (IV.8) : Superposition du champ de pression sur les trajectoires.

Les profils des composantes de la vitesse u et v normalisés par la vitesse moyenne sont exposés dans la figure (IV.9). La Figure (IV. 9) (a) représente les profils de vitesse u dans différentes stations situées à l'entrée, à $x = H/4, H/2, 3H/4$ et à la sortie. Le fluide pénètre dans la cavité avec un profil uniforme de la vitesse. Entre l'entrée et la sortie nous constatons que le profil de la vitesse u se développe progressivement pour prendre une forme parabolique caractérisant un écoulement laminaire près de la sortie de la cavité. Les zones de recirculation n'apparaissent que pour des nombre de Reynolds supérieurs à 20. Elles sont situées dans la partie haute de la cavité et la partie droite entre les deux entrées. La Figure (IV. 9) (b) représente les profils de vitesse v dans différentes stations situées $y = H/4, H/2, 3H/4$. A $y=0.025 (H/4)$ la vitesse v est positive près de l'entrée de la cavité ($0 < x < 0.02$). Ensuite elle prend des valeurs faiblement positives et s'annule à la paroi. Alors que pour $y=0.075 (3H/4)$ c'est tout à fait le contraire. Au milieu de la cavité $y=0.05 (H/2)$ cette vitesse est nulle. D'une manière générale la vitesse v est nettement inférieure à la vitesse u donc l'écoulement se fait principalement suivant la direction horizontale.

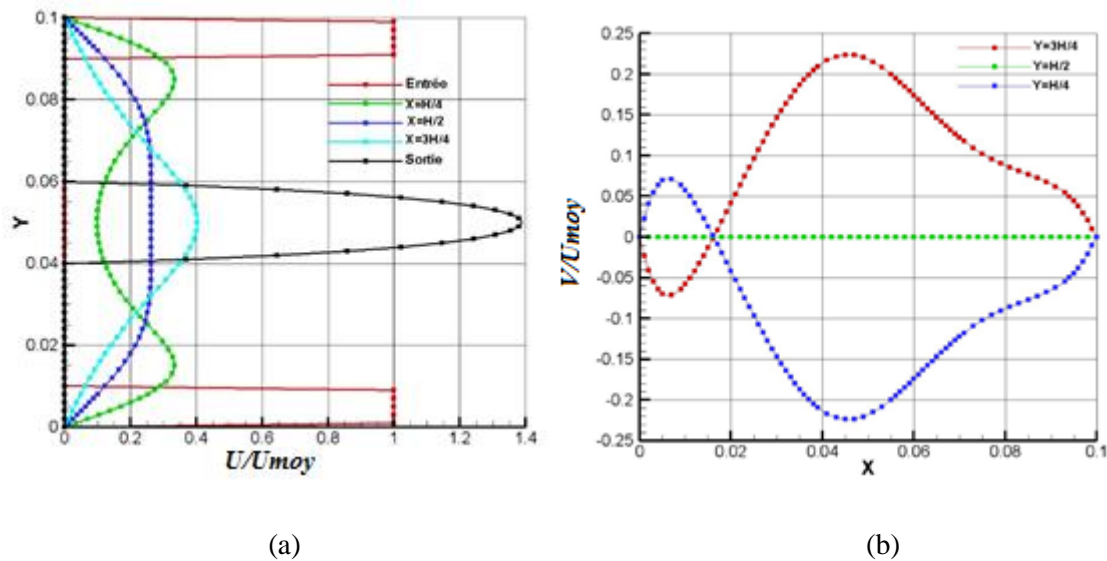


Figure (IV.9) (a) : Profils de la vitesse U/U_{moy} (b) Profils de la vitesse V/U_{moy} .

IV.4.2. Détermination de la fonction de distribution du temps de séjour.

Nous allons déterminer la fonction de distribution du temps de séjour en considérant les deux injections impulsion et échelon aux deux entrées du réacteur.

IV.4.2.1. Injection impulsion

Nous considérons un traceur neutre avec une concentration C_0 égale à 1, injecté pendant une durée de $1/100^{\text{ème}}$ du temps total de simulation. L'équation de transport de la concentration a été résolue pour déterminer la concentration du traceur à l'intérieur du réacteur. La concentration moyenne à la sortie nous permet la détermination de la fonction de distribution du temps de séjour à partir de l'expression suivante :

$$E(t) = \frac{\overline{C_{out}}(t)}{\int_0^{\infty} \overline{C_{out}}(t) dt} \text{ Avec :}$$

- $\overline{C_{out}}(t)$: concentration moyenne à la sortie calculée par la méthode de Simpson.
- $\int_0^{\infty} \overline{C_{out}}(t) dt$: valeur totale de la concentration à la sortie.

Une fois la fonction de distribution des temps de séjour $E(t)$ déterminée la fonction de distribution cumulée du temps de séjour $F(t)$ est obtenue par la relation suivante :

$$F(t) = \int_0^t E(t) dt$$

Nous avons jugé utile de présenter sur une même figure (**Figure IV.10, a, b, c, d et e**) et pour chaque nombre de Reynolds la fonction de distribution du temps de séjour $E(t)$, la fonction cumulée de la distribution du temps de séjour $F(t)$ et les contours de la concentration dans la cavité. L'un des faits important est l'accumulation du traceur dans les coins droits et dans la partie gauche, entre les deux entrées, de la cavité. Ces zones de recirculations du fluide augmentent avec l'augmentation du nombre de Reynolds.

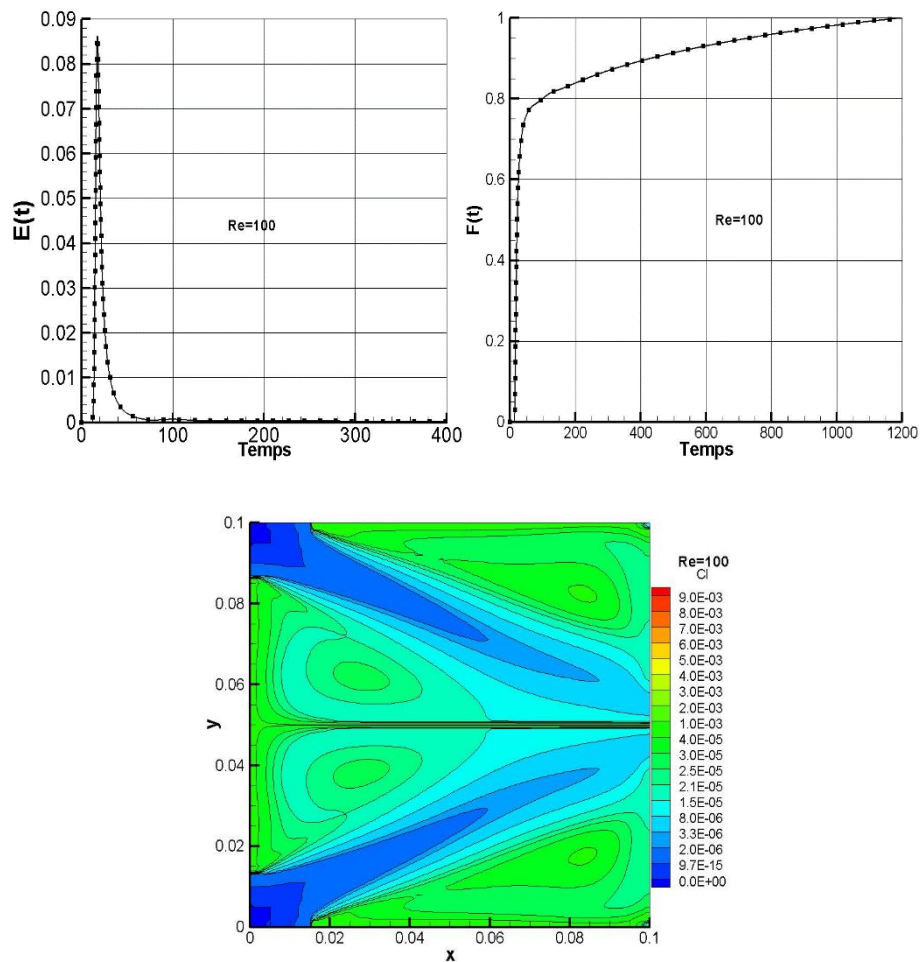


Figure (IV.10) (a) : $Re=100$

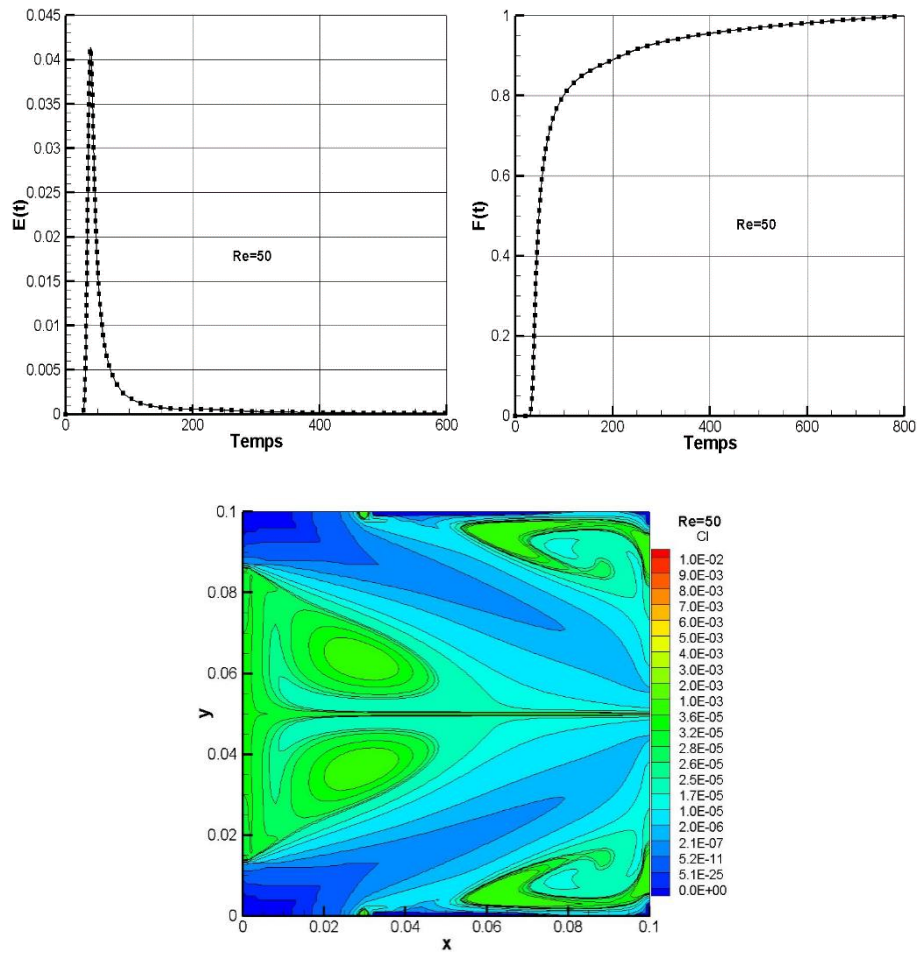
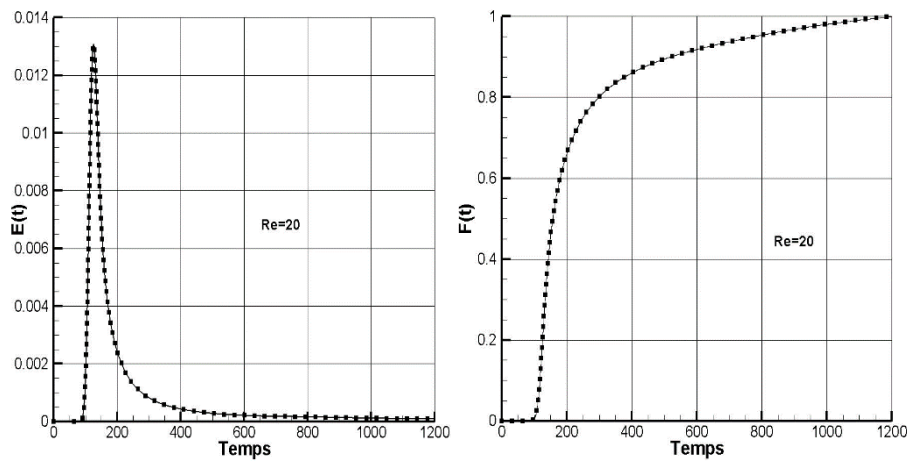


Figure (IV.10) (b) : $Re=50$



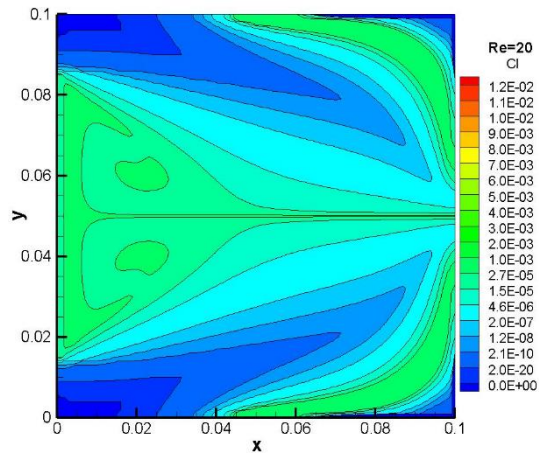


Figure (IV.10) (c) : $Re=20$

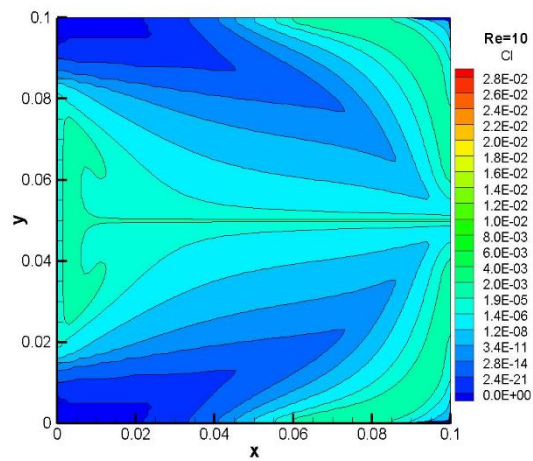
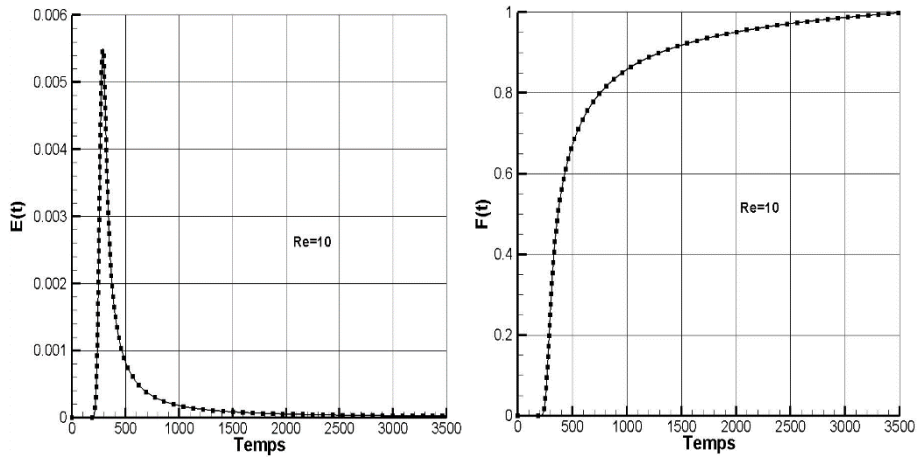
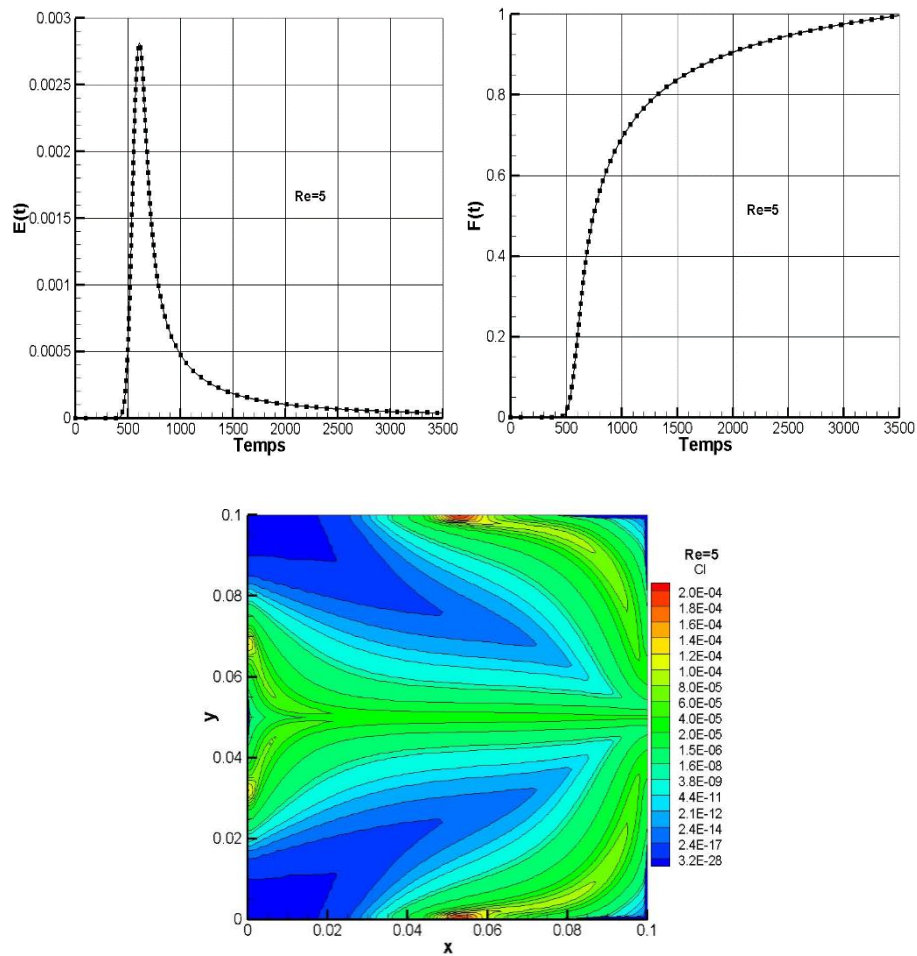


Figure (IV.10) (d) : $Re=10$

Figure (IV.10) (e) : $Re=5$

La figure (IV.11) montre la fonction de distribution du temps de séjour $E(t)$ pour différentes valeurs du nombre de Reynolds. Nous remarquons que la valeur du pic (concentration à la sortie maximale) diminue et l'étalement de la courbe s'accroît lorsque le nombre de Reynolds diminue aussi. Pour des nombres de Reynolds supérieurs à 100 on peut considérer que l'écoulement dans le réacteur est de type « piston ». L'étalement des courbes représentant la fonction de distribution du temps de séjour explique la présence de zones mortes dans la cavité plus ou moins importantes suivant le nombre de Reynolds.

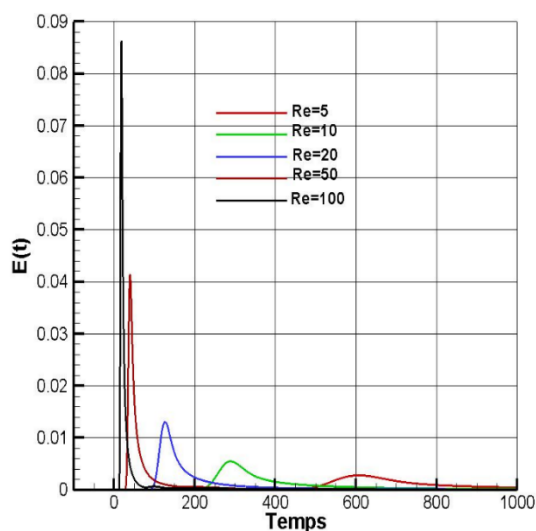


Figure (IV.11) Fonction de distribution du temps de séjour $E(t)$ pour différentes valeurs du nombre de Reynolds

La figure (IV.12) montre la fonction cumulée de distribution du temps de séjour $F(t)$ pour différentes valeurs du nombre de Reynolds. Nous constatons que la concentration à la sortie arrive plus tard lorsque le nombre de Reynolds diminue. Cette diminution traduit une augmentation de la pente des courbes quand le nombre de Reynolds augmente. A partir de la valeur du nombre de Reynolds supérieur à 50 nous obtenons des courbes de la fonction de distribution cumulée du temps de séjour $F(t)$ caractérisant le modèle « piston ».

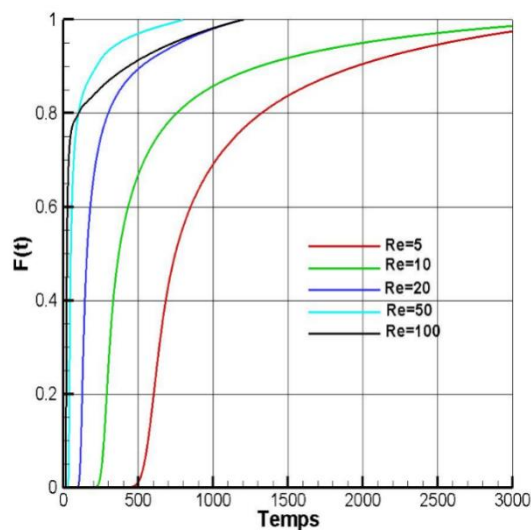


Figure (IV.12) Fonction cumulée de la distribution du temps de séjour $F(t)$ pour différentes valeurs du nombre de Reynolds

La figure (IV.13) montre les « clichés » de l'évolution de la concentration dans le réacteur pour un nombre de Reynolds égale à 50. Celle-ci atteint la sortie aux environs de 30 secondes. Par la suite nous remarquons la propagation de la concentration vers la partie gauche de la cavité (zone morte).

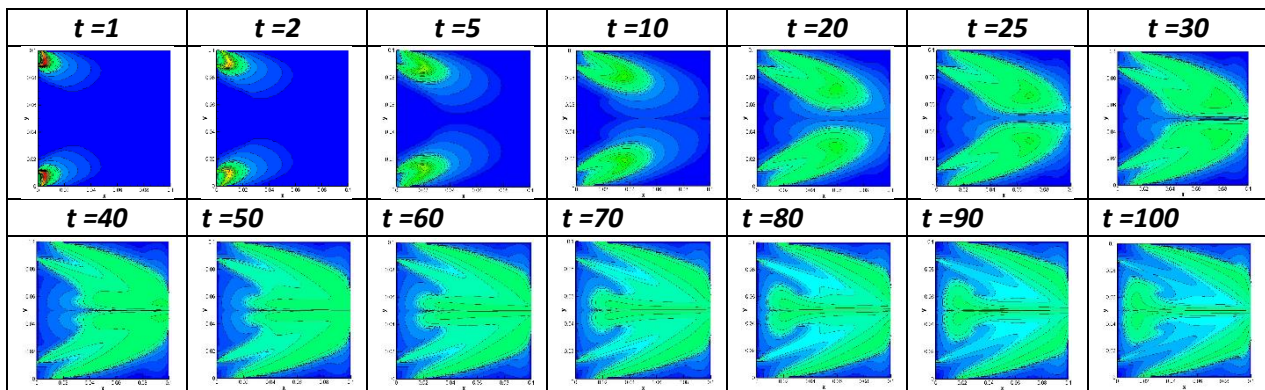


Figure (IV.13) : Evolution instantanée de la concentration (injection impulsion) dans la cavité pour un nombre de Reynolds égale à 50

IV.4.2.2. Injection échelon

Dans ce cas la concentration C_0 est injectée continuellement pendant toute la durée de la simulation. L'équation de transport de la concentration a été résolue pour déterminer la concentration du traceur à l'intérieur du réacteur. La concentration moyenne à la sortie nous permet d'accéder à la fonction cumulée de distribution du temps de séjour par :

$$F(t) = \frac{\overline{C_{out}}(t)}{C_0} \text{ Avec :}$$

- $\overline{C_{out}}(t)$: concentration moyenne à la sortie calculée par la méthode de Simpson.
- C_0 : valeur de la concentration à l'entrée.

La fonction de la distribution du temps de séjour sera déterminée par : $E(t) = \frac{dF(t)}{dt}$

Ces deux caractéristiques sont données par les figures (IV.14) et (IV.15). Nous obtenons les mêmes courbes qu'avec l'injection impulsion.

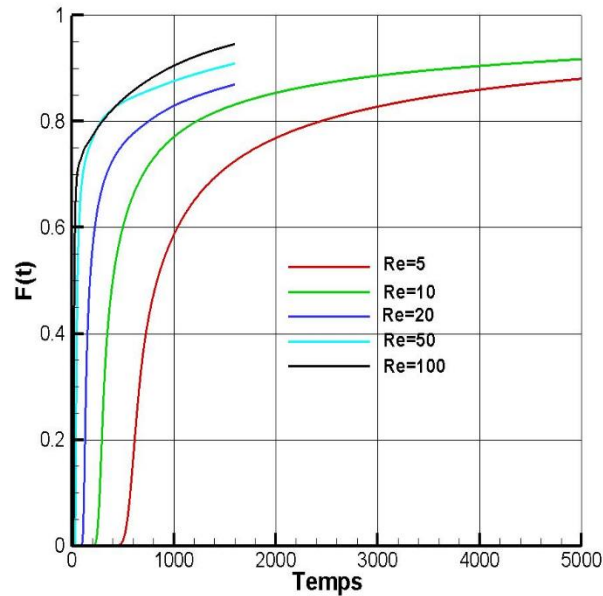


Figure (IV.14) : Fonction cumulée de la distribution du temps de séjour $F(t)$ pour différentes valeurs du nombre de Reynolds

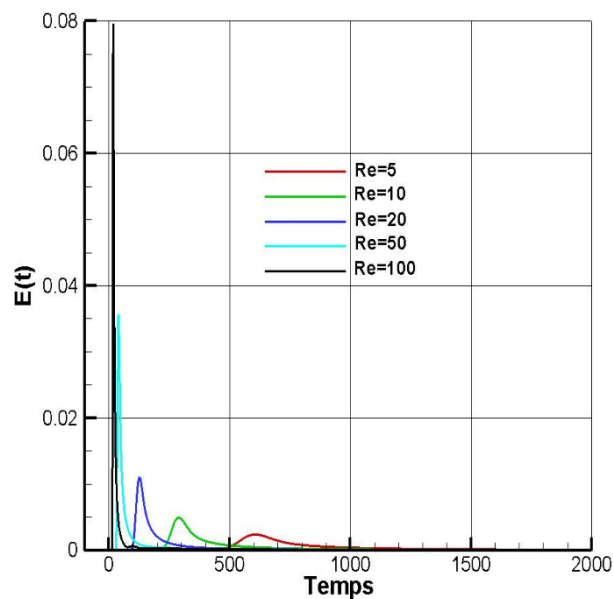
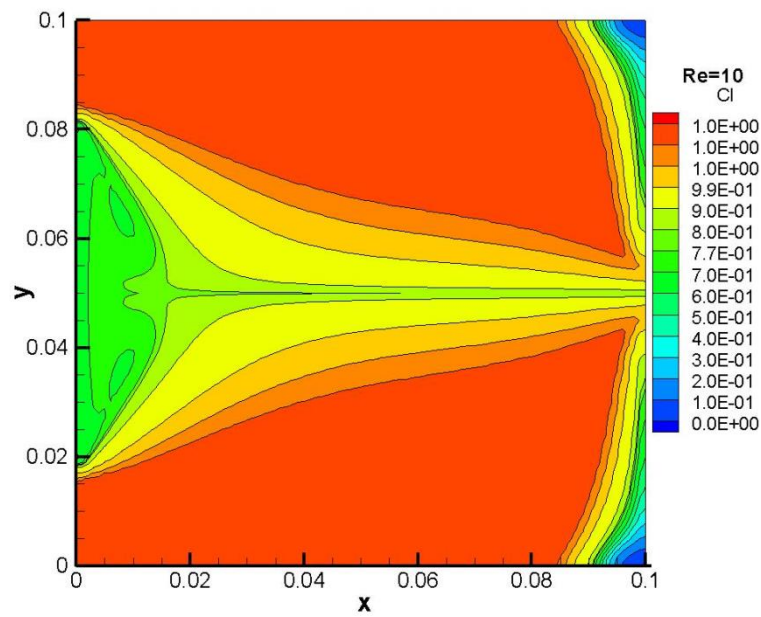
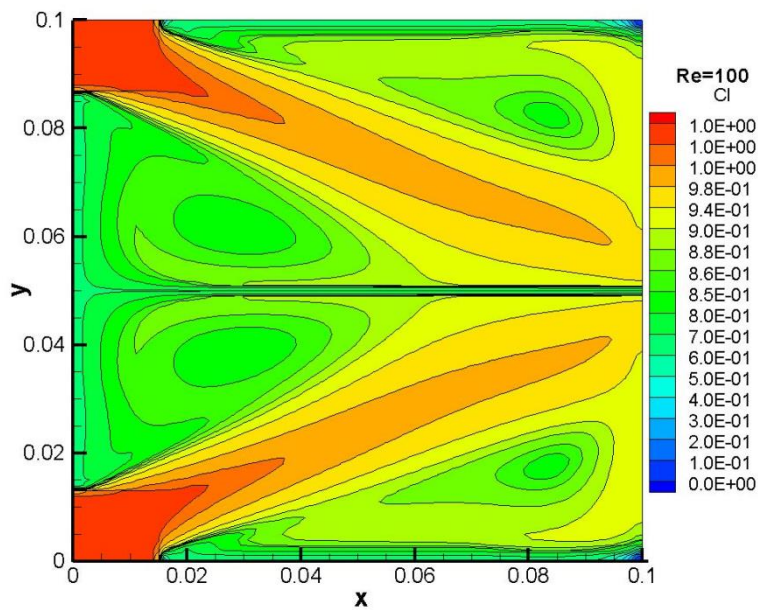


Figure (IV.15) : Fonction de distribution du temps de séjour $E(t)$ pour différentes valeurs du nombre de Reynolds.

La figure (IV.16) montre à titre de comparaison les contours de la concentration dans la cavité pour des nombres de Reynolds égaux à 10 et 100. Nous remarquons que le phénomène de diffusion de la concentration est plus important pour de faibles nombres de Reynolds alors que pour des valeurs plus grandes de ce nombre la convection l'emporte sur la diffusion.



(a)



(b)

Figure (IV.16) : Contours de la concentration dans la cavité. (a) $Re = 10$ et (b) $Re = 100$

La figure (IV.17) montre les « clichés » de l'évolution de la concentration dans le réacteur pour un nombre de Reynolds égale à 50. Celle-ci se propage en suivant les lignes de courant principal de l'écoulement du fluide (plus court chemin entre les deux entrées et la sortie). Dans ce

cas aussi nous remarquons la propagation de la concentration vers la partie gauche de la cavité pour donner naissance à une zone de recirculation du fluide.

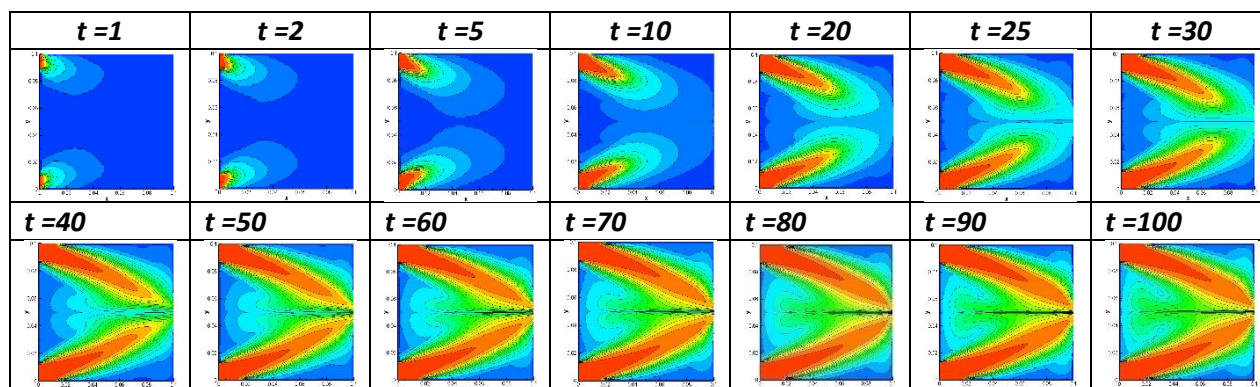


Figure (IV.17) : Evolution instantanée de la concentration (injection échelon) dans la cavité pour un nombre de Reynolds égale à 50

IV.4.3. Conclusion

Nous avons pu déterminer l'hydrodynamique de l'écoulement dans un réacteur de forme géométrique carré. A partir du champ de vitesse nous avons pu accéder à différentes fonctions de distribution du temps de séjour $E(t)$ et aux fonctions cumulées de distribution du temps de séjour $F(t)$. Parmi les nombreuses simulations numériques réalisées dans ce travail nous avons présenté les principaux résultats. Ceux-ci ont été possibles grâce à la **CFD** qui, avec le développement simultané des moyens informatiques et des méthodes numériques, nous permet aujourd'hui de résoudre n'importe quel problème sans avoir recours à l'expérimentation et donc à moindre coût.

Références

Luis M.Madeira, Manuel A.Alves, Alirio E.Rodrigues (2004), « Teaching nonideal reactors with CFD tools » Chemical engineering education, université de Porto. Portugal

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail nous avons établi et résolu numériquement le modèle mathématique régissant le phénomène de transport d'un traceur injecté dans l'écoulement d'un fluide à travers un réacteur chimique matérialisé par une cavité carrée munie de deux entrées situées sur son côté latéral droit et d'une sortie située sur son côté gauche. Elle nous a permis, en outre, d'avoir une connaissance plus précise de la fonction de distribution du temps de séjour DTS dans un réacteur chimique et de sa détermination numérique.

Le phénomène considéré a été modélisé par un système d'équations différentielles à dérivées partielles obtenues à partir de l'établissement de bilans tirés des principes généraux de la physique. La discrétisation de ces équations a été faite par la méthode des différences finies et différents schémas numériques ont été utilisés. Un programme, en langage Fortran, a été établi et validé. De nombreuses simulations ont été réalisées pour déterminer les caractéristiques dynamiques de l'écoulement du fluide ainsi que l'évolution des profils de la concentration du traceur dans l'espace et dans le temps. L'influence du nombre de Reynolds pour les deux types d'injection (Dirac et échelon) a été rapportée.

Les objectifs visés par cette modeste contribution ont été atteints dans leur majorité. Compte tenu des résultats obtenus, on peut déjà souligner l'utilité du modèle numérique élaboré ; et surtout l'utilisation des méthodes numériques dans le domaine de la chimie industrielle. L'avantage principal de ces simulations numériques est la considération de l'influence de n'importe quel paramètre figurant dans les équations du modèle mathématique sans pour autant faire appel à l'expérimentation.

Dans la réalité la plus part des écoulements des fluides sont turbulents c'est pourquoi nous espérons, que ce travail servira comme base pour l'établissement d'un programme pour l'étude du même problème en considérant cette fois-ci un écoulement 2D et pourquoi pas 3D en régime turbulent.