

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE

SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ SALAH BOUBNIDER, CONSTANTINE 03
FACULTÉ DE GÉNIE DES PROCÉDÉS
DÉPARTEMENT DE GÉNIE DE L'ENVIRONNEMENT

N° d'ordre :... ..

Série :... ..

Mémoire

PRESENTÉ POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE MASTER
EN GÉNIE DES PROCÉDÉS
OPTION : GÉNIE DES PROCÉDÉS DE L'ENVIRONNEMENT

MODÉLISATION ET SIMULATION DE L'ADSORPTION
COMPÉTITIVE DE DEUX SOLUTÉS RÉACTIFS EN
MILIEU POREUX HOMOGENÈME DANS LE CAS DE
L'ÉQUILIBRE LOCAL

Présenté par :

Kashi Aimene

Derbal Med AT-Tahir

Dirigé par :

M^{me} KOLLI Mounira

Grade: MCB

Année universitaire

2021-2022

Session : juin

Table des Matières

Table des matières	I
Liste des figures	VI
Liste des tableaux	IX
Liste de sigle et abréviations	X

Introduction générale	1
------------------------------	----------

CHAPITRE I MILIEUX POREUX

I.1	Introduction	3
I.2	Définition.....	3
I.3	Propriétés des milieux poreux	3
I.3.1	Porosité.....	3
I.3.1.1	Porosité d’interstice.....	4
I.3.1.2	Porosité à fissure.....	4
I.3.2	Tortuosité.....	5
I.3.3	Perméabilité.....	5
I.3.3.1	Perméabilité intrinsèque	6
I.3.3.2	Perméabilité effective.....	6
I.3.3.3	Perméabilité relative.....	6
I.3.4	Mouillabilité	6
I.3.5	Volume élémentaire représentatif.....	6
I.3.6	Surface spécifique	7
I.3.7	Saturation de la phase.....	7
I.4	Loi de Darcy.....	8
I.5	Transport dans les milieux poreux	9
I.5.1	Mécanismes du transport en milieu poreux.....	9
I.5.1.1	Transport par advection.....	10

I.5.1.2	Dispersion hydrodynamique.....	10
I.5.1.3	Dispersion cinématique	10
I.5.1.4	Diffusion moléculaire.....	11
CHAPITRE II PROCEDES D'ADSORPTION		
II.1	Introduction	12
II.2	Définition de l'adsorption.....	12
II.3	Types d'adsorption	12
II.3.1	Adsorption physique.....	12
II.3.2	Adsorption chimique	13
II.3.2.1	Persorption.....	13
II.4	Adsorbants.....	14
II.4.1	Définition.....	14
II.4.2	Principaux adsorbants.....	14
II.4.2.1	Charbon actif	14
II.4.2.2	Zéolithes	15
II.4.2.3	Silices	16
II.4.2.4	Alumines activées.....	16
II.4.3	Choix de l'adsorbant	16
II.5	Equipement et appareillage d'adsorption	17
II.5.1	Adsorption statique.....	17
II.5.2	Adsorption dynamique	17
II.6	Facteurs influençant l'équilibre d'adsorption.....	17
II.7	Etat d'équilibre.....	18
II.7.1	Isotherme d'adsorption.....	18
II.7.2	Classification des isothermes d'adsorption	18
II.7.2.1	Isotherme de type I.....	19
II.7.2.2	Isotherme de type II.....	19
II.7.2.3	Isotherme de type III	19
II.7.2.4	Isotherme de type IV	19
II.7.2.5	Isotherme de type V.....	19

II.7.2.6 Isothermes de type VI.....	20
II.8 Modèles d'adsorption	20
II.8.1 Isotherme de Langmuir.....	20
II.8.2 Isotherme de Freundlich.....	21
II.9 Equilibre d'adsorption multiconstituant.....	21
II.9.1 Types d'isothermes en mélange	22
II.9.1.1 Modèle de Langmuir étendu aux mélanges	22
II.9.1.2 Modèle de Freundlich étendu	23
II.10 Cinétiques d'adsorption.....	23
II.11 Courbe de percée	24
CHAPITRE III METHODES NUMERIQUES ET COMSOL	
III.1 Introduction	25
III.2 Méthodes numériques.....	25
III.2.1 Méthode des différences finies (MDF).....	25
III.2.1.1 Définition de la MDF	25
III.2.1.2 Principe général de la MDF.....	25
III.2.1.3 Schémas explicites et implicites	26
a) - Schéma explicite	26
b) - Schéma implicite.....	26
III.2.1.4 Avantages et inconvénients de la MDF.....	27
a) - Avantages	27
b) - Inconvénients	27
III.2.2 Méthode des volumes finis (MVF).....	27
III.2.2.1 Définition de la MVF	27
III.2.2.2 Principe général de la MVF.....	27
III.2.2.3 Avantages et inconvénients de la MVF.....	28
a) - Avantages	28
b) - Inconvénients	28
III.2.3 Méthode des éléments finis (MEF)	28

III.2.3.1	Définition de la MEF.....	28
III.2.3.2	Principe général de la MEF.....	28
III.2.3.3	Démarche de la MEF.....	29
III.2.3.4	Avantages et inconvénients de la MEF	30
	a) - Avantages de la MEF	30
	b) - Inconvénients de la MEF	31
III.3	Comsol.....	31
III.3.1	Introduction	31
III.3.2	Présentation du Comsol.....	31
III.3.3	Prise en main du logiciel	32
III.3.4	Étapes de résolution dans le logiciel Comsol Multiphysics	32
III.3.4.1	Interface utilisateur du Comsol	32
III.3.4.2	Choix du modèle physique	33
III.3.4.3	Interface utilisateur de Comsol.....	34
	a) - Géométrie	35
	b) - Introduction des propriétés des domaines	35
	c) - Maillage du domaine	35
	d) - Résolution du problème	36
	e) - Résultats	36
III.3.5	Mérites et démerite du Comsol.....	36
III.3.5.1	Mérites.....	36
III.3.5.2	Démérites.....	36

CHAPITRE IV MODELISATION ET RESOLUTION

IV.1	Introduction	37
IV.2	Description du problème	37
IV.3	Modélisation de l'adsorption dynamique en milieux poreux	37
IV.3.1	Hypothèses simplificatrices.....	38
IV.3.2	Bilan de matière.....	38
IV.3.3	Modélisation de l'adsorption dynamique monoconstituant en un milieu poreux.....	40

IV.3.4 Modélisation de l'adsorption dynamique multiconstituant dans un milieu poreux : cas d'un mélange binaire	40
IV.3.5 Conditions initiales et aux limites	41
IV.4 Résolution des équations modélisant l'adsorption dynamique.....	42
IV.4.1 Discrétisation du domaine	42
IV.4.2 Discrétisation des équations	42
IV.5 Organigramme de résolution	43

CHAPITRE V RESULTATS ET DISCUSSION

V.1 Introduction	45
V.2 Simulation de l'adsorption mono-constituant	46
V.2.1 Ondes d'adsorption mono-constituant.....	46
V.2.2 Fronts d'adsorption monoconstituant	47
V.2.3 Effet de certains paramètres sur l'étalement, la dispersion, du front de percée	47
V.2.3.1 Effet de la concentration initiale	47
V.2.3.2 Effet du débit.....	48
V.2.3.3 Effet de la longueur de la colonne.....	49
V.2.4 Comparaison entre les résultats simulés par notre programme développé en Fortran et ceux obtenus par le Comsol	49
V.3 Simulation de l'adsorption binaire	52
V.3.1 Ondes d'adsorption d'un mélange équimolaire AMX-IBU	53
V.3.2 Fronts de percée d'un mélange équimolaire AMX-IBU sur la colonne d'adsorption.....	53
V.4 Comparaison entre l'adsorption monoconstituant et l'adsorption binaire.....	54
V.4.1 Comparaison entre les ondes d'adsorption.....	54
V.4.2 Comparaison entre les fronts de percée.....	55

Conclusion générale

57

Référence bibliographique

الملخص

الهدف الأول من هذا العمل هو تطوير نموذجين رياضيين يصفان الامتزاز الديناميكي لمكون صيدلاني واحد ولمكونين من المواد الصيدلانية على سرير ممتز ثابت من الفحم المنشط. تتطلب نمذجة الامتزاز الديناميكي معرفة متعمقة بنقل المواد في الوسائط المسامية. المكونان الصيدلانيان المختاران في هذه الدراسة هما الإيبوبروفين، IBU، والأموكسيسيلين، AMX، كان الهدف الثاني هو حل هذه النماذج رقمياً. تم حل هذه النماذج بطريقتين. الطريقة الأولى هي كتابة البرامج باستخدام لغة برمجة فورتران، وتستند هذه البرامج إلى طريقة الفروق المحدودة والمخطط الضمني. ومع ذلك، فإن الطريقة الثانية تتمثل في استخدام برنامج كومسول الذي يعتمد على طريقة العناصر المحدودة. سمحت لنا دراسة محورية بتفصيل تأثير المعلمات المختلفة على التشتت واستنتاج أن تركيز وطول العمود لهما تأثيرات أكثر وضوحاً من معدل التدفق. تكشف نتائج الامتزاز التنافسي أن جزيئات IBU ممتزة بشكل أفضل من جزيئات AMX وأن وقت ظهور المنتجات المنافسة أقل من وقت ظهور المنتجات النقية.

الكلمات المفتاحية: سرير ثابت، امتزاز تنافسي، وسط مسامي، أموكسيسيلين، إيبوبروفين.

Résumé

Le premier objectif de ce travail a été de développer deux modèles mathématiques décrivant l'adsorption dynamique d'un et deux constituants pharmaceutiques sur un lit fixe d'adsorbant, le charbon actif. La modélisation de l'adsorption dynamique nécessite une connaissance approfondie du transfert de matière en milieu poreux. Les deux constituants pharmaceutiques choisis dans cette étude sont l'ibuprofène, IBU, et l'amoxicilline, AMX. Ainsi, le deuxième objectif a été de résoudre numériquement ces modèles. La résolution de ces modèles a été faite par deux méthodes. La première méthode consiste à écrire des programmes en utilisant le langage de programmation Fortran, ces programmes sont basés sur la méthode des différences finies et le schéma implicite, par contre la deuxième méthode consiste à utiliser le logiciel de Comsol Multiphysics qu'est basé sur la méthode des éléments finis. Une étude paramétrique nous a permis de détailler l'influence des différents paramètres sur la dispersion et de conclure que la concentration et la longueur de la colonne ont des effets plus prononcés que le débit. Les résultats d'adsorption compétitive révèlent que les molécules d'IBU sont mieux adsorbées que les molécules d'AMX et que le temps d'apparition des produits en compétition est plus faible que le temps d'apparition des produits purs.

Mots clés : Lit fixe, adsorption compétitive, milieu poreux, Amoxicilline, Ibuprofène.