

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de L'enseignement Supérieur Et de la Recherche Scientifique

Université Mentouri de Constantine
Faculté des Sciences de l'Ingénieur
Département de Chimie Industrielle

Mémoire de fin d'étude

En vue de l'obtention du diplôme de Master en Génie Chimique

Intitulé

*Effet de l'hétérogénéité chimique dans un milieu
poreux non linéairement interactif favorable*

Réalisé par :

BELBAKI Abdelber

DEMIGHA Zakaria

Dirigé par :

Dr. Djerafi Kaabeche .Kh

Année Universitaire
2012-2013

Introduction

1.1 Les milieux poreux

1.1.1 Définition

1.1.2 Propriétés des milieux poreux

1.1.2.1 Masse volumique sèche

1.1.2.2 Porosité

1.1.2.3 Aire spécifique

1.1.2.4 La perméabilité

1.2 Ecoulement dans les milieux poreux (Loi de Darcy)

1.3 Transport en milieux poreux

1.3.1 Advection (ou convection)

1.3.2 Dispersion hydrodynamique

1.3.2.1 La diffusion moléculaire

1.3.2.2 Dispersion mécanique

1.3.3 Nombre de Péclet

1.4 L'hétérogénéité des milieux poreux

1.4.1 Hétérogénéité physique des milieux poreux

1.4.2 Hétérogénéité chimique des milieux poreux

1.4.3 L'hétérogénéité et effet d'échelle

Conclusion

Introduction

2.1 Définition de l'adsorption

2.2 Types d'adsorption

2.2.1 Physisorption

2.2.2 Chimisorption

2.3 Théorie de l'adsorption

2.3.1 Théorie de la couche monomoléculaire

2.3.2 Théorie de la couche multimoléculaire

2.4 Equation d'adsorption

2.4.1 Isotherme linéaire

2.4.2 Approche de Freundlich

2.4.2.1 Expression du coefficient K_f et n

2.4.2.2 Détermination des valeurs des coefficients K_f et n

2.4.2.3 Signification des valeurs des coefficients K_f et n

2.4.3 Approche de Langmuir

2.5 Adsorption en lit fixe

2.5.1 Evolution des concentrations dans un lit fixe

2.5.2 Courbe de percée

2.5.2.1 Distribution du temps de séjour

2.6 Synthèse bibliographique

Introduction

3.1 Equation du transport

3.1.1 Equation du transport dans un milieu poreux chimiquement hétérogène

3.2 Résolution numérique de l'équation de transport par la méthode des volumes finis

3.2.1 Méthode des volumes finis

3.2.1.1 Volumes finis pour une loi de conservation ou un bilan

3.2.1.2 Les différentes étapes de la méthode des volumes finis mise en œuvre

3.2.2 Discrétisation temporelle

3.2.2.1 Schéma explicite

3.2.2.2 Schéma implicite

3.2.2.3 Schéma de Crank-Nickolson

3.2.3 Les méthodes de résolution

3.2.3.1 Algorithme de thomas

3.2.4 Résolution de l'équation différentielle

3.2.4.1 Discrétisation du domaine

3.2.4.2 Discrétisation de l'équation différentielle

3.2.2 Discrétisation des conditions aux limites

3.3 Algorithme de Thomas

3.4 Calcul des moments statistiques

3.5 Organigramme du programme élaboré

Introduction

4.1 Etude de l'effet de l'hétérogénéité chimique

4.2 Paramètres influençant sur la dispersion des percées

4.2.1 Effet de la longueur

4.2.2 Effet du diamètre des particules

4.2.3 Effet de la concentration initiale C_0

Conclusion

Conclusion générale

Références bibliographiques

Annexe 2

Annexe 3

Sommaire

Sommaire

Liste des tableaux

Liste des figures

Nomenclature

Introduction Générale.....2

Chapitre 1 : Théorie du transport en milieu poreux

Introduction 5

1.1 Les milieux poreux..... 5

1.1.1 Définition..... 5

1.1.2 Propriétés des milieux poreux..... 6

1.1.2.1 Masse volumique sèche 6

1.1.2.2 Porosité..... 7

1.1.2.3 Aire spécifique..... 7

1.1.2.4 La perméabilité 7

1.2 Ecoulement dans les milieux poreux (Loi de Darcy) 8

1.3 Transport en milieux poreux..... 8

1.3.1 Advection (ou convection) 9

1.3.2 Dispersion hydrodynamique 9

1.3.2.1 La diffusion moléculaire 10

1.3.2.2 Dispersion mécanique 11

1.3.3 Nombre de Péclet 12

1.4 L'hétérogénéité des milieux poreux 12

1.4.1 Hétérogénéité physique des milieux poreux 12

1.4.2 Hétérogénéité chimique des milieux poreux..... 12

1.4.3 L'hétérogénéité et effet d'échelle 13

Conclusion 13

Chapitre 2 : Adsorption en lit fixe

Introduction 15

2.1 Définition de l'adsorption 15

2.2	Types d'adsorption	15
2.2.1	Physisorption	16
2.2.2	Chimisorption	16
2.3	Théorie de l'adsorption	16
2.3.1	Théorie de la couche monomoléculaire	17
2.3.2	Théorie de la couche multimoléculaire	17
2.4	Equation d'adsorption.....	17
2.4.1	Isotherme linéaire.....	17
2.4.2	Approche de Freundlich.....	18
2.4.2.1	Expression du coefficient K_f et n	18
2.4.2.2	Détermination des valeurs des coefficients K_f et n	18
2.4.2.3	Signification des valeurs des coefficients K_f et n	19
2.4.3	Approche de Langmuir	20
2.5	Adsorption en lit fixe	20
2.5.1	Evolution des concentrations dans un lit fixe.....	21
2.5.2	Courbe de percée.....	22
2.5.2.1	Distribution du temps de séjour.....	23
2.6	Synthèse bibliographique.....	25
Chapitre 3 : Equation de transport non linéairement interactif		
	Introduction	30
3.1	Equation du transport.....	30
3.1.1	Equation du transport dans un milieu poreux chimiquement hétérogène	32
3.2	Résolution numérique de l'équation de transport par la méthode des volumes finis	33
3.2.1	Méthode des volumes finis	33
3.2.1.1	Volumes finis pour une loi de conservation ou un bilan.....	34
3.2.1.2	Les différentes étapes de la méthode des volumes finis mise en œuvre ..	34
3.2.2	Discrétisation temporelle.....	35
3.2.2.1	Schéma explicite.....	36
3.2.2.2	Schéma implicite	37
3.2.2.3	Schéma de Crank-Nickolson	38
3.2.3	Les méthodes de résolution	40
3.2.3.1	Algorithme de thomas	40

Sommaire

3.2.4	Résolution de l'équation différentielle.....	41
3.2.4.1	Discrétisation du domaine	43
3.2.4.2	Discrétisation de l'équation différentielle	43
3.2.2	Discrétisation des conditions aux limites	46
3.3	Algorithme de Thomas	47
3.4	Calcul des moments statistiques.....	48
3.5	Organigramme du programme élaboré.....	49
Chapitre 4 : Résultats et discussions		
	Introduction	52
4.1	Etude de l'effet de l'hétérogénéité chimique.....	58
4.2	Paramètres influençant sur la dispersion des percées	61
4.2.1	Effet de la longueur	61
4.2.2	Effet du diamètre des particules.....	63
4.2.3	Effet de la concentration initiale C_0	64
	Conclusion	65
	Conclusion générale.....	68
	Références bibliographiques	71
	Annexe 1.....	81
	Annexe 2.....	86
	Annexe 3.....	87

Résumé

Bien que l'effet de l'hétérogénéité physique sur le transport de soluté interactif a été étudié, nous essayerons d'étudier l'effet d'un autre paramètre: l'effet de l'hétérogénéité chimique d'un milieu poreux non linéairement interactif sur la dispersion de la courbe de percée.

L'objectif de notre étude est alors de déterminer l'effet de l'hétérogénéité chimique sur le transport de soluté non linéairement interactif favorable à travers un milieu poreux chimiquement hétérogène. Ce qui nous a conduit à faire un bilan de matière sur un élément de volume contenu dans une colonne à lit fixe, pour avoir un modèle mathématique. La résolution de ce dernier a été faite numériquement. Pour cela on a élaboré un programme de calcul basé sur la méthode des volumes finis afin d'obtenir nos résultats. En utilisant les données des articles issus de la recherche bibliographique approfondie que nous avons effectuée, on a pu comparer nos résultats numériques avec des résultats expérimentaux des travaux antérieurs les plus récents afin de valider notre code de calcul.

D'après les résultats obtenus, on a conclu que le transport d'un soluté non linéairement interactif dans un milieu poreux chimiquement hétérogène diffère de celui dans le cas homogène. Cela est dû donc à l'effet de la variation de l'hétérogénéité d'un milieu à un autre. Lorsque la proportion des grains actifs α qui représente l'hétérogénéité chimique diminue (forte hétérogénéité chimique), l'étalement des courbes de percées devient de plus en plus important. D'autre part, on a trouvé que la longueur de la colonne, la concentration initiale, ainsi que le diamètre des particules ont une influence sur l'hétérogénéité chimique d'un milieu poreux.

On conclue qu'il est important de considérer l'hétérogénéité chimique dans la prévision de l'adsorption en lit fixe.

Mots - clés : transport, milieu poreux, adsorption non linéaire, Freundlich, lit fixe.

الملخص

نظرا الى ان تأثير عدم التجانس الفيزيائي على انتقال المواد المذابة التفاعلية قد تمت دراسته من قبل العديد من الباحثين، نحاول نحن في بحثنا هذا دراسة تأثير عامل اخر الا وهو تأثير عدم التجانس الكيميائي للوسط المسامي على منحنى Percée.

الهدف من دراستنا هذه اذا تحديد تأثير عدم التجانس الكيميائي للوسط المسامي على الانتقال غير الخطي التفاضلي للمواد المذابة. ذلك يتطلب اجراء حوصلة مادية على الحجم القياسي على مستوى عمود ذو سرير ثابت بغية الوصول الى نموذج رياضي يتم من خلاله صياغة البرنامج الرقمي الذي سيستعمل للحصول على النتائج. تعديلنا لهذا البرنامج وفقا للحالة التي نحن بصدد دراستها ، واعتمادا على معطيات تم استنباطها نتيجة بحث دقيق اجريناه ، سمح لنا بمقارنة النتائج التي تحصلنا عليها مع نتائج الابحاث السابقة ، وتوصلنا الى تطابق في النتائج ما يعني ان البرنامج المستعمل ذو فعالية .

من النتائج المتحصل عليها ، نستنتج أن انتقال المادة التفاعلية المذابة في وسط غير خطي تفاضلي وغير متجانس كيميائيا يختلف عنه في الحالة المتجانسة. بالإضافة الى ان اختلاف كيفية عدم التجانس الكيميائي له ايضا تأثير على طريقة انتقال هذه المواد.

من جهة اخرى وجد أن طول العمود، قطر الجسيمات والتركيز الأولي لها تأثير على انحناء منحنيات percées.

ومنه نستنتج أنه من المهم اعتبار عدم التجانس الكيميائية عاملا مهما يجب الاخذ به عند دراسة هذه الاوساط.

الكلمات المفتاحية : انتقال ، وسط مسامي ، امتصاص غير خطي ، Freundlich ، سرير ثابت.