



HAL
open science

Modélisations et simulations numériques d'écoulements d'air dans des milieux micro poreux

Thanh Long Vu

► **To cite this version:**

Thanh Long Vu. Modélisations et simulations numériques d'écoulements d'air dans des milieux micro poreux. Autre. Université Paris-Est, 2011. Français. NNT : 2011PEST1129 . tel-00679375

HAL Id: tel-00679375

<https://theses.hal.science/tel-00679375v1>

Submitted on 15 Mar 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université PARIS-EST
École doctorale : Sciences, Ingénierie et Environnement

THÈSE
pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université PARIS-EST

Spécialité : Mécanique

Thanh Long VU

***Modélisations et simulations numériques d'écoulements
d'air dans des milieux micro poreux***

Thèse dirigée par Guy LAURIAT

Soutenance le 12 décembre 2011

Membres du jury :

G. Bonnet	Professeur	Univ. Paris-Est MLV	Co-directeur de thèse
B. Goyeau	Professeur	Ecole Centrale Paris	Rapporteur
G. Lauriat	Professeur	Univ. Paris-Est MLV	Directeur de thèse
C. Le Niliot	Professeur	Univ. de Provence	Examineur
M. Prat	Dir. Recherche CNRS	IMFT, Toulouse	Rapporteur

Remerciement

Ces trois années de thèse ont été effectuées au laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Échelle de l'Université Paris Est qui m'ont donné plein de sentiments profonds et je vais les garder comme un grand souvenir dans ma vie ...

Tout d'abord, je tiens à remercier chaleureusement Monsieur G. LAURIAT et Monsieur G. BONNET, mes directeurs de thèse pour leurs encadrements, leurs soutiens et leurs courages le longs de trois ans. Ils m'ont donné beaucoup de connaissances scientifiques, de voies de la direction de recherche, de travaux d'autonomie, ... Ses expériences ont toujours été la source de conseils éclairés qui m'ont permis d'avancer dans mes recherches. Ils me sont agréables d'eux exprimer ma gratitude et de pouvoir, si peu que ce soit, les remercier de ses actions en eux présentant de ce mémoire.

Je remercie Monsieur C. PERROT, Maître de Conférence de l'Université, pour avoir assurée l'encadrement de ce travail. Je le remercie par ailleurs pour la confiance qu'il m'a accordée, sa disponibilité ainsi que l'amitié qu'il m'a témoignée tout au long de ce travail.

Je remercie aussi C. LE NILIOT, Monsieur le président du jury qui devrait partir tôt de l'École Politech. de Marseille pour assister à ma soutenance. Je remercie également les Messieurs B. GOYEAU et M. PRAT pour avoir accepté d'être rapporteurs et pour avoir porté une attention rigoureuse et critique à ce mémoire.

Je tiens à remercier l'ensemble des personnes que j'ai pu côtoyer au cours de ces trois années et qui à un moment ou à un autre m'ont apporté leur aide et leur soutien. Mes remerciements vont également aux autres collègues au laboratoire, notamment les collègues vietnamiens qui m'ont bien préparé le pot poursuivait la soutenance.

Enfin, je n'oublie jamais à remercier ma grand famille : mes parents, mes frères, mes soeurs, mes oncles, mes tantes et ma copine qui m'ont toujours mobilisé et stimulé dès que je suis venu en France. Ils m'ont porté plein de puissances pour que je puisse terminer cette thèse.

Résumé

Ce travail de thèse a pour objectif de simuler numériquement des écoulements de gaz dans des matrices poreuses dont les pores sont de taille micrométrique. On étudie l'influence des phénomènes de glissement hydrodynamique qui apparaissent lorsque la dimension caractéristique de micro-conduites est caractérisée par des nombres de Knudsen compris entre $Kn = 0,01$ et $Kn = 0,1$. L'approche suivie est principalement basée sur la résolution numérique des équations de la mécanique des fluides incompressible, suivie d'un post-traitement afin de dégager des propriétés macroscopiques.

Le mémoire de thèse est composé de cinq chapitres suivis d'une conclusion dans laquelle nous présentons quelques perspectives pour une suite de ce travail.

Le chapitre I constitue le travail préliminaire de thèse qui s'est ensuite orienté vers des approches complémentaires. Le principe des méthodes d'homogénéisation périodique est d'abord exposé. Suit une présentation de deux méthodes de résolution dans l'espace de Fourier : l'approche en déformation et l'approche en contrainte. L'extension de ces méthodes à la résolution d'écoulements régis par l'équation de Stokes est ensuite décrite. Des applications aux cas d'écoulements à travers des réseaux de cylindres, avec condition d'adhérence ou avec condition de glissement, sont ensuite discutées.

Deux techniques de modélisation des phénomènes de transport dans des milieux poreux saturés par un fluide monoconstituant sont présentées dans le second chapitre. La première est basée sur la méthode des développements asymptotiques, appelée aussi méthode d'homogénéisation, fondée sur le concept de séparation d'échelles. On explique que le processus consiste en trois étapes : description locale, localisation et description macroscopique. La seconde technique s'appuie sur la méthode de calcul de moyennes à l'échelle d'un VER. Le point de départ de cette méthode est basé sur les équations de la Mécanique des Milieux Continus et sur des théorèmes donnant les expressions des moyennes de tous les opérateurs intervenant dans une équation de transport. Nous montrons qu'elle s'étend sans difficulté aux écoulements de gaz dans des milieux microporeux.

Après une brève présentation du logiciel commercialisé que nous avons utilisé, nous exposons les études de convergence spatiale que nous avons effectuées et nous comparons nos solutions avec des résultats de la littérature dans le chapitre III. Diverses géométries sont considérées (allant de géométries planes à des empilements 3D de cubes ou de sphères) mais ces comparaisons sont limitées à des écoulements isothermes.

L'effet du glissement sur la perméabilité de milieux microporeux est abordé dans le chapitre IV. Le formalisme résultant de l'homogénéisation de structures périodiques est utilisé pour simuler numériquement des écoulements isothermes de gaz dans divers empilements de complexités croissantes. Les perméabilités sont déterminées en calculant les

moyennes spatiales des champs de vitesses, solutions des équations de Stokes. Les valeurs obtenues en imposant des conditions d'adhérence sont comparées à celles obtenues avec des conditions de glissement du premier ordre. On discute de l'augmentation relative de la perméabilité due au glissement selon la géométrie des pores.

Dans le chapitre V, nous présentons des solutions pour des écoulements anisothermes et étudions l'effet du glissement sur la conductivité effective de milieux microporeux 2D et 3D. Dans ce chapitre, nous résolvons les équations de Navier-Stokes et de l'énergie en imposant des conditions de symétries dans une ou deux directions. A partir des solutions locales, sont calculées les moyennes intrinsèques des champs de vitesse et de température. Nous considérons des cas pour lesquels la condition d'équilibre thermique local peut être considérée comme satisfaite et d'autres correspondant à un non-équilibre thermique (NTLE). On détermine les conductivités de dispersion en fonction du nombre du Péclet et on montre l'influence du glissement sur les composantes longitudinales et transverses pour différentes porosités et longueur de glissement. Dans les cas NLTE, le coefficient macroscopique de transfert fluide-solide est aussi calculé.

Mots clés : Milieux poreux, microfluidique, glissement hydrodynamique, homogénéisation, prises de moyennes, perméabilité de glissement, conductivité de dispersion, non-équilibre thermique local.

Abstract

This thesis aims at numerically simulating gas flows in porous matrices with micro-sized pores. We study the influence of hydrodynamic slip phenomena that appear when the characteristic dimension of micro pores is characterized by Knudsen numbers between $Kn = 0,01$ and $Kn = 0,1$. The approach is mainly based on the numerical solution of the equations of incompressible fluid mechanics, followed by a post-processing to identify the macroscopic properties.

The thesis consists of five chapters followed by a conclusion in which we present some perspectives for further studies.

Chapter I is the preliminary work of thesis that turned into complementary approaches. The principle of periodic homogenization methods is first exposed. Then we present two methods in Fourier space : the stress approach and the strain approach. The extension of these methods for solving flows governed by the Stokes equation is then described. Applications to flows through networks of cylinders, subjected to no slip or slip condition, are then discussed.

Two techniques for modeling transport phenomena in porous media saturated by a mono-component fluid are presented in the second chapter. The first is based on the method of asymptotic expansions, also known as homogenization method, based on the concept of separation of scales. It is explained that the process consists of three steps : local description, localization and macroscopic description. The second technique is based on the method of averaging at the level of a representative elementary volume (REV). The starting point of this method is based on the equations of Continuum Mechanics and theorems giving the averaged expressions of all operators involved in a transport equation. We show that it extends easily to gas flows in micro porous media.

After a short presentation of the commercial software used, we present the spatial convergence studies carried out and we compare our solutions with the results of the literature in Chapter III. Various geometries are considered (plane to 3D geometries of cubes or spheres), but these comparisons are limited to isothermal flows.

The effect of slip on the permeability in micro porous media is discussed in Chapter IV. The resulting formalism of the periodic homogenization structures is used for numerical simulation of isothermal gas in various geometries of increasing complexity. The permeabilities are determined by calculating the spatial averages of velocity fields, solutions of the Stokes equations. The values obtained by imposing no slip conditions are compared with first order slip conditions. We discuss the relative increase in permeability due to slip according to the geometry of the pores.

In Chapter V, we present the solutions for anisothermal flows and we study the effect of slip on the effective conductivity in 2D and 3D microporous media. In this chapter, we solve the Navier-Stokes and energy equations by imposing symmetry conditions in one or two directions. The intrinsic mean velocity and temperature fields are calculated from these local solutions. We consider cases where the local thermal equilibrium condition can be considered as satisfied and other corresponding to a non-local thermal equilibrium (NLTE). We determine the dispersion conductivity based on the Peclet number and show the influence of velocity slip on longitudinal and transverse components for various porosities and slip lengths. In NLTE cases, the macroscopic fluid-to-solid heat transfer coefficient is also calculated.

Keywords : Porous media, micro fluidics, hydrodynamic slip, homogenization, volume-averaging, slip permeability, dispersion conductivity, non local thermal equilibrium.

Table des matières

Introduction	3
1 Homogénéisation numérique de structures périodiques par transformée de Fourier	16
1.1 Introduction	16
1.2 Homogénéisation des milieux périodiques	17
1.2.1 Généralités sur l’homogénéisation des milieux périodiques	17
1.2.2 Détermination des propriétés effectives en élasticité linéaire	19
1.2.3 Une méthode de résolution basée sur la transformée de Fourier	21
1.3 Comportement effectif de matériaux poreux en régime statique	28
1.3.1 Méthode de détermination de la perméabilité	28
1.3.2 Mise en oeuvre : écoulement autour de cylindres	34
1.3.3 Prise en compte du glissement	38
1.4 Conclusion	42
2 Présentation des techniques d’homogénéisation	43
2.1 Méthode des développements asymptotiques	43
2.1.1 Méthode d’homogénéisation périodique pour les matériaux structurés	44
2.1.2 Modélisation de l’écoulement d’un fluide en milieu poreux	48
2.2 Méthode de prise de moyennes des équations de conservation sur un VER .	52
2.2.1 Introduction	52
2.2.2 Moyenne des équations de Navier-Stokes	57
2.2.3 Equation de l’énergie	60
2.2.4 Effet du glissement hydrodynamique	67
3 Méthode numérique et validation	69
3.1 Introduction	69
3.2 Méthode numérique	69
3.2.1 Maillage	69
3.2.2 Éléments finis	70
3.2.3 Solveur stationnaire :	70
3.3 Comparaisons avec des cas tests.	72
3.3.1 Convection forcée dans une micro-conduite plane : effets de la vitesse de glissement sur les transferts en régime dynamique et thermique établi.	72
3.3.2 Solution analytique	72
3.3.3 Comparaison entre des solutions analytiques et des résultats numériques	74
3.3.4 Convection forcée dans une conduite à parois conductrices d’épaisseur non nulle.	79

3.4	Écoulements à travers des réseaux bidimensionnels de cylindres	82
3.4.1	Cellule de base	82
3.4.2	Calcul de la perméabilité \mathbf{K}	83
3.4.3	Calcul de la dispersion thermique, \mathbf{K}_{disp}	92
3.5	Écoulements 3D dans des milieux constitués de sphères de même diamètre .	99
3.5.1	Introduction	99
3.5.2	Propriétés géométriques des milieux étudiés.	99
3.5.3	Calcul de la perméabilité en fonction de la porosité ou du rapport \mathbf{R}_s/d	99
3.5.4	Comparaison avec des résultats de la littérature.	101
3.6	Écoulements 3D à travers un réseau de cubes	109
3.6.1	Calcul de la perméabilité \mathbf{K}	109
3.6.2	Calcul de la dispersion thermique \mathbf{K}_{disp}	110
3.7	ANNEXES	112
4	Effet du glissement hydrodynamique sur la perméabilité de milieux micro- poreux	119
4.1	Introduction	119
4.2	Modélisation	119
4.2.1	Problème d'une sphère dans un milieu infini. Comparaisons avec la solution analytique	120
4.3	Écoulement d'un fluide à travers une micro conduite plane	121
4.3.1	Introduction	121
4.3.2	Champs microscopiques de pression et de vitesse	123
4.3.3	Résultats et discussion	123
4.4	Écoulements à travers des réseaux de barres ou de cylindres (2D)	124
4.4.1	Expression de \mathbf{K}	124
4.4.2	Effet du glissement sur la perméabilité d'un réseau de barres	124
4.4.3	Effet du glissement sur la perméabilité de réseaux de cylindres ou de barres.	126
4.5	Écoulements à travers des réseaux de sphères ou de cubes	132
4.5.1	Expression de \mathbf{K}	132
4.5.2	Simulation numérique d'empilements de sphères et effet du glissement. .	133
4.5.3	Écoulement à travers un empilement de cubes	140
5	Effet du glissement dynamique sur la conductivité effective de milieux micro-poreux	142
5.1	Introduction	142
5.2	Modélisation et résolution numérique de la dispersion thermique en milieu micro poreux	142
5.3	Effet du glissement sur la dispersion thermique dans une micro-conduite avec des parois (1D)	145
5.3.1	Introduction	145
5.3.2	Conductivité de dispersion	145
5.3.3	Solution à l'échelle macroscopique	146
5.3.4	Conductivité de tortuosité	146
5.3.5	Coefficient de transfert interstitiel solide-fluide	147
5.4	Effet du glissement sur la dispersion thermique dans le cas de structures micro-poreuses 2D	149
5.4.1	Effet du glissement sur la dispersion thermiques d'un réseau de barres	149

5.4.2	Coefficient de transfert intersticiel solide-fluide	153
5.4.3	Effet du glissement sur la dispersion thermique d'un réseau de cylindres	155
5.5	Effet du glissement sur la dispersion thermique d'un réseau des cubes (3D)	160
5.5.1	Introduction	160
5.5.2	Modèle numérique et champ de la température	160
5.5.3	Résultats et discussion	163
5.5.4	Conductivité de tortuosité	165
5.5.5	Coefficient de transfert intersticiel solide-fluide	165
Conclusion		168

Nomenclature

a	côté d'un carré ou d'un cube [m]
b	facteur de Klinkenberg
B	taille du bloc solide [m]
c	concentration
C_f	coefficient de frottement
C_{pf}, C_{ps}	chaleurs spécifiques du fluide et du solide [$J K^{-1} kg^{-1}$]
Da	nombre de Darcy
D_h	diamètre hydraulique [m]
f	coefficient de la perte de charge
G	gradient macroscopique de pression [$Pa m^{-1}$]
h_{fs}	coefficient de transfert interstitiel fluide-solide [$W m^{-2} K^{-1}$]
H	hauteur de la structure [m]
k_s, k_f	conductivités thermiques du fluide et du solide [$W m^{-1} K^{-1}$]
K_{disp}	dispersion thermique [$W m^{-1} K^{-1}$]
K_{eff}	conductivité thermique effective [$W m^{-1} K^{-1}$]
K_{tor}	tortuosité thermique [$W m^{-1} K^{-1}$]
K_D	perméabilité de Darcy [m^2]
K_G	perméabilité de Klinkenberg [m^2]
Kn	nombre de Knudsen basé sur le diamètre hydraulique D_h , $Kn = \lambda/D_h$
l, L	longueurs caractéristique microscopique et macroscopique [m]
l_c	longueur caractéristique [m]
L	longueur de la structure [m]
L_s	longueur de glissement [m]
LTE	équilibre thermique local
\dot{m}	flux massique [$kg s^{-1}$]
\mathbf{n}	vecteur normal unitaire à dS
$NLTE$	non-équilibre thermique local
Nu	nombre de Nusselt
p	pression microscopique [Pa]
Pe	nombre de Péclet basé sur H
p_m	pression moyenne [Pa]
Pr	nombre de Prandtl de l'air, $Pr = \mu_0/\rho_0 a_0$
q_p	flux chaleur à la paroi [$W m^{-2}$]
r	rayon (cylindre ou sphère) [m]
(r, θ, α)	coordonnées sphériques [m, rad, rad]
R_h	rayon hydraulique [m]
S_{fs}	surface de contact fluide-solide [m^2]
t	temps [s]
t_c	temps caractéristique [s]
T_f, T_s	températures du fluide et du solide [K]

T_m	température moyenne débitante [K]
(u, v, w)	composante du vecteur vitesse [$m s^{-1}$]
u_D	vitesse de Darcy [m]
u_m	vitesse moyenne débitante [$m s^{-1}$]
VER	volume élémentaire représentatif
(x, y, z)	coordonnées cartésiennes [m]
X	variable d'espace [m]

Symboles grecs

α_f, α_s	diffusivités thermiques du fluide et du solide [$m^2 s^{-1}$]
Δ	opérateur laplacien
ε	porosité
ϵ	rapport d'échelle
λ	libre parcours moyen [m]
μ	viscosité dynamique du fluide [$Pa s$]
∇	opérateur gradient
$\nabla \cdot$	opérateur divergence
ν	viscosité cinématique du fluide [$m^2 s^{-1}$]
Ω	volume total [m^3]
Ω_f	volume du fluide [m^3]
Ω_s	volume du solide [m^3]
ρ_f, ρ_s	masses volumiques du fluide et du solide [$kg m^{-3}$]
σ	coefficient d'accommodation

Indices

0	quantité définie à l'instant initial
∞	quantité à l'infini
*	variable adimensionnée
'	fluctuation
<i>cc</i>	cubique centrée
<i>cfc</i>	cubique à face centrée
<i>conv</i>	convection
<i>cs</i>	cubique simple
<i>diff</i>	diffusion
<i>disp</i>	dispersion
<i>eff</i>	effective
<i>f</i>	fluide
<i>hexa</i>	hexagonal
<i>p</i>	paroi
<i>s</i>	solide
<i>tor</i>	tortuosité

Symboles spéciaux

$\langle \cdot \rangle$	moyenne de phase
$\langle \cdot \rangle^f$	moyenne intrinsèque de la phase fluide
$\langle \cdot \rangle^s$	moyenne intrinsèque de la phase solide

Introduction

Objectifs

Ce travail de thèse a pour objectif de simuler numériquement des écoulements de gaz dans des matrices poreuses dont les pores sont de taille micrométrique. On étudie l'influence des phénomènes de glissement hydrodynamique qui apparaissent lorsque la dimension caractéristique de microconduites est de l'ordre de quelques libres parcours moyens des molécules.

L'approche suivie est principalement basée sur la résolution numérique des équations de la mécanique des fluides incompressible, suivie d'un post-traitement afin d'essayer de dégager des propriétés dites 'macroscopiques'. L'intérêt de ces propriétés macroscopiques peut être considéré comme temporaire : il ne s'agit que de résoudre plus facilement des problèmes qu'il est encore difficile de traiter localement (approche dite 'microscopique') parce que les méthodes numériques et les moyens de calcul actuels ne permettent pas de s'affranchir de modèles simplifiés. Cependant, l'approche microscopique requiert une description précise de la géométrie du réseau des pores ce qui n'est pas toujours possible, notamment en Sciences de la Terre. Elle ne présente pas non plus un grand intérêt dans un certain nombre d'applications pratiques.

Puisque ce travail est essentiellement numérique, la pertinence des modèles macroscopiques ne peut être vérifiée qu'en procédant en deux étapes : la première consiste à déterminer des propriétés macroscopiques à partir de solutions locales et en s'appuyant sur des résultats théoriques, relativement bien établis. La seconde consiste à les injecter dans des modèles macroscopiques et de vérifier que les valeurs moyennes des variables décrivant l'écoulement, calculées par l'une ou l'autre des méthodes, ne diffèrent pas sensiblement.

Cette approche n'est pas fondamentalement différente de celle suivie dans la modélisation des écoulements turbulents : les simulations numériques directes de la turbulence (DNS) servent le plus souvent à améliorer les modèles de viscosité et de diffusivité thermique turbulentes qui sont ensuite introduits dans des modèles de turbulence basés sur les moyennes de Reynolds des équations de Navier-Stokes et autres équations de conservation (modèles RANS ou URANS).¹

L'analogie entre les deux approches est directement liée à deux décompositions d'une grandeur locale : la décomposition de Reynolds en un point et la décomposition de Gray. Ces deux décompositions s'écrivent sous la forme $f = f_{moyen} + f_{fluctuant}$. Cependant, la première fait essentiellement intervenir des quantités temporelles alors que la seconde se

1. DNS : Direct Numerical Simulation, RANS : Reynolds Averaged Navier-Stokes, URANS : Unsteady RANS

rapportée à des quantités spatiales. Le point commun étant que la moyenne (temporelle ou spatiale) de la partie fluctuante est supposée nulle.

Généralités sur les écoulements dans les milieux poreux

Porosité

Un milieu poreux consolidé est fondamentalement un solide de forme complexe, ne pouvant pas se diviser sous l'effet d'un écoulement, et renfermant des cavités, appelées 'pores', qui contiennent un fluide constitué d'une seule phase, gaz ou liquide (une espèce ou plusieurs espèces non miscibles), ou de plusieurs phases (liquide + sa phase vapeur, liquide + gaz non miscible ...). A partir des volumes occupés par la matrice solide et par les pores, on peut introduire leur rapport, propriété adimensionnelle appelée "porosité". Cette notion pose immédiatement deux problèmes : le choix du volume utilisé pour définir la porosité et la prise en compte de tous les pores ou de seulement des pores interconnectés. Nous considérerons aussi que la taille des pores est fixe : le volume des pores d'un milieu poreux consolidé, telle qu'une éponge 'naturelle', peut varier lorsque le fluide saturant change d'état. Cet aspect, extrêmement complexe du point de vue de la modélisation mathématique, ne sera pas abordé.

- Concernant le premier problème, la porosité d'une matrice solide peut être définie simplement lorsqu'elle présente une périodicité géométrique, c'est à dire lorsque toute la matrice peut être construite à partir de copies d'une cellule de base pouvant être translatée dans tout l'espace.

Remarque : Le choix de la cellule utilisée pour définir la porosité n'est pas toujours évident. Considérons par exemple un immeuble d'habitation. Si tous les appartements sont identiques et s'ils sont tous répartis de la même façon par rapport aux espaces de service, sa porosité peut être définie à partir d'un seul appartement et d'une partie des espaces qu'il partage avec les appartements voisins. Il s'agit alors d'un immeuble à structure périodique. Si les appartements sont disposés aléatoirement du rez-de-chaussée au dernier étage (ce qui est assez rare mais pourrait se concevoir pour éviter une certaine monotonie), la porosité doit être calculée statistiquement en considérant le volume total du bâtiment.

- Concernant le second problème, on conçoit immédiatement que volume des pores et périodicité ne suffisent pas à caractériser un milieu poreux si on s'intéresse à l'écoulement d'un fluide. Par exemple, les porosités des isolants thermiques que sont la laine de verre et le polystyrène sont voisines (porosité voisine de $\varepsilon = 0,9$) mais l'air ambiant peut circuler dans le premier mais pas dans le second. Comme certains pores peuvent être interconnectés et d'autres non, on peut définir plusieurs porosités. Dans ce travail, nous ne considérons que des matrices poreuses ne délimitant que des pores connectés. Nous ne ferons donc référence qu'à une seule définition de la porosité, appelée aussi porosité effective (ou accessible [Bories et al., 2008 [14]]), $\varepsilon = \mathcal{V}_f / \mathcal{V}_t$ où \mathcal{V}_t est le volume total englobant le volume de fluide circulant dans l'espace des pores \mathcal{V}_f .

Vitesse de filtration

S'il est possible de définir une porosité représentative de l'ensemble d'un milieu poreux, alors il devrait être possible de définir des valeurs moyennes des vitesses en s'appuyant sur des équations du mouvement simplifiées.

Si l'on revient à l'exemple d'un immeuble dans lequel l'air ambiant est mis en circulation sous l'effet d'une ventilation mécanique, sa porosité est la même si toutes les portes sont ouvertes ou si elles sont toutes fermées. Il est donc clair que l'écoulement ne dépend pas uniquement de la porosité.

Il faut donc introduire une autre notion : la perméabilité (unité : m^2). C'est cette grandeur, et non la porosité, qui permet d'introduire le concept de vitesse de filtration lorsque l'écoulement est créé par une différence de pression (associée ou non à une force de volume telle que la poussée d'Archimède). La loi de Darcy, loi postulée de façon totalement empirique puis 'démontrée' moyennant des hypothèses fortes plus d'un siècle après son énoncé, est censée relier la vitesse de filtration proportionnellement à une contrainte mécanique, indépendamment de la nature du fluide et de la porosité. Cet aspect reste largement ouvert.

Modélisation

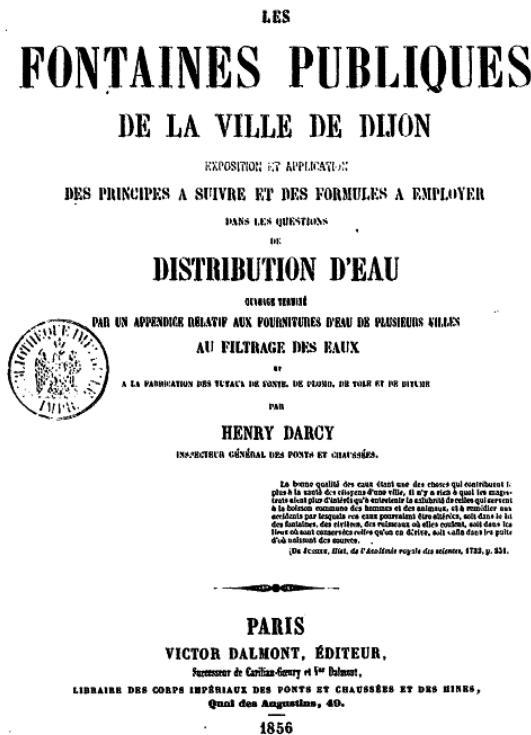


FIGURE 1 – Page de couverture de l'ouvrage de Darcy.

Loi de Darcy

Les écoulements de gaz dans les milieux poreux présentent des propriétés si différentes des écoulements de liquides que l'on peut s'interroger, en dehors de cas particuliers, sur la validité de la loi de Darcy pour les décrire. Cette loi énoncée par Henri Darcy en 1856 [20] à l'issue de nombreuses expériences faites pour déterminer les lois de l'écoulement de l'eau à travers des sables (note *D* de l'ouvrage de H. Darcy sur les "Fontaines de la ville de Dijon" (Fig. 1)). L'appareil qui a servi à l'énoncé de cette loi était une colonne verticale de 2,50 m de hauteur et de diamètre intérieur de 0.35 m (Fig. 2), partiellement remplie

de sable siliceux de la Saône de plusieurs granulométries, versé et tassé dans la colonne préalablement remplie d'eau afin que les pores ne contiennent plus d'air. La porosité était

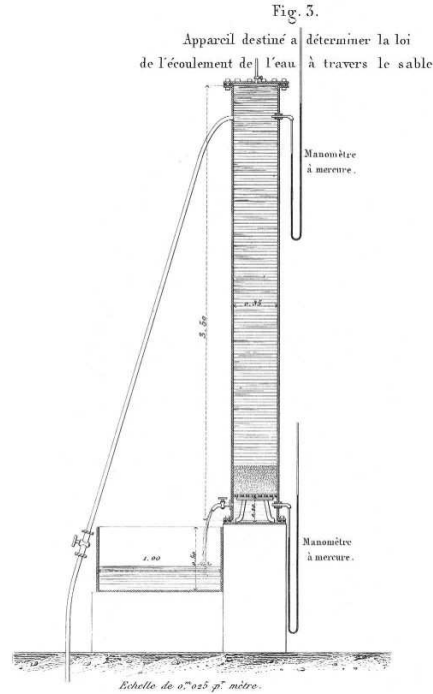


FIGURE 2 – Colonne utilisée pour les expériences interprétées par Darcy.

estimée à $\varepsilon \approx 0,38$. Darcy et ses collaborateurs ont mesuré le débit moyen en fonction de différences de pression appliquée sur des colonnes de sables de différentes hauteurs (de $e = 0,58 \text{ m}$ à $e = 1,71 \text{ m}$, expériences faites à Dijon les 29 et 30 octobre et 2 novembre 1855). Ils en ont déduit l'expression suivante du débit volumique (note D de l'appendice relative au filtrage des eaux, page 594 de l'ouvrage de Darcy) :

$$G_v = k \frac{S}{e} (h + e) \quad \Rightarrow \quad u_D = \frac{k}{e} (h + e) \quad (1)$$

où S est l'aire de la couche de sable, h la hauteur d'eau en dessus de cette couche et k un coefficient dépendant de la morphologie de la couche de sable (unité : m s^{-1}).² Le coefficient k de la relation de Darcy n'est donc pas la perméabilité : il s'agit de la conductivité hydraulique qui a la dimension d'une vitesse. Ce paramètre est très utilisé en hydrogéologie parce que la loi de Darcy est souvent écrite sous la forme $G_v/S = -k \nabla \Phi$ où $\Phi = p/\rho g + z$ est le potentiel hydraulique (z étant la hauteur mesurée positivement vers le haut, k est un tenseur pour un milieu anisotrope). Toutes les expériences ayant été effectuées avec de l'eau, la viscosité du fluide n'apparaît pas dans cette relation. Comme $G_v = u_m S$ avec $u_m = \frac{1}{S} \int_S u dS$, on peut relier la vitesse débitante de l'eau circulant dans la partie de la conduite sous la colonne de sable à k , h et e . Les parois de la colonne étant étanche, cette

2. Cette loi permet de déterminer les lois de décroissance de la hauteur d'eau sur le filtre et du débit en fonction du temps, ce qui semble avoir été l'objectif principal de Darcy :

$$\frac{h + e}{h_0 + e} = e^{-(k(t-t_0)/e)} \quad \text{et} \quad \frac{G_v}{G_{v,0}} = e^{-(k(t-t_0)/e)} \quad (2)$$

où les valeurs h_0 et $G_{v,0}$ correspondent au temps t_0

vitesse est aussi la vitesse moyenne de l'eau qui traverse n'importe quelle section de la couche de sable, appelée vitesse de filtration u_D . Si l'on admet que u_m est donnée par la loi de Poiseuille, on peut alors faire intervenir la viscosité du fluide (ce que n'a pas fait Darcy) et écrire la loi de Darcy sous la forme vectorielle :

$$\mathbf{u}_D = -\frac{\overline{\overline{K}}}{\mu_f} \cdot (\nabla P - \rho_f \mathbf{g}) \quad (3)$$

où \mathbf{u}_D est la vitesse de filtration, $\overline{\overline{K}}$ le tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu, μ_f la viscosité dynamique du fluide de masse volumique ρ_f et p la pression moyenne du fluide. La perméabilité intrinsèque est représentative des forces de frottement entre le fluide et la matrice solide.

Loi quadratique

En se référant aux déductions théoriques de Darcy, faites à partir d'expériences relativement sommaires, il est clair que cette loi souffre d'approximations qui ne lui donne pas un caractère aussi rigoureux que les équations de Navier-Stokes (fruit des travaux théoriques de Newton, d'Euler, de Navier et de Stokes, en particulier). Il en résulte qu'il n'est pas toujours aisé de retrouver expérimentalement la loi linéaire de Darcy pour des écoulements de liquides parce que la mesure de la perméabilité, théoriquement indépendante de la nature du fluide saturant, est très difficile.

La perméabilité peut en outre diminuer quand le débit augmente. Cela a été mis en évidence par des mesures bien antérieures aux expériences de Darcy qui, elles-mêmes (1ère série d'expériences), conduisent à loi [Houpeurt, 1974 [36]] :

$$P_m = 0,30145G_v + 0,002124G_v^2 \quad (4)$$

où P_m est la pression moyenne en mètres d'eau et G_v le débit moyen en litres par minute.

L'interprétation est que les écoulements sont darcéens tant que le nombre de Reynolds basé sur la vitesse de filtration et la dimension caractéristique des pores (en général le diamètre équivalent des pores ou bien \sqrt{K}), $Re = u_D \sqrt{K} / \nu_f$, est inférieur à $Re \approx 1$. Ensuite, la déviation à la loi de Darcy montre que le carré de la vitesse devient proportionnelle au gradient de pression, ce qui n'a rien à voir avec la turbulence, mais indique simplement que la loi de Stokes ne suffit plus à modéliser des écoulements sièges de recirculations à l'intérieur des pores. Nous reviendrons sur cette question dans le deuxième chapitre du mémoire où l'origine du terme quadratique est rigoureusement établie. Forchheimer (1914) [28] a formalisé la loi, appelée de nos jours 'loi de Darcy-Forchheimer', en s'appuyant sur de nombreux résultats expérimentaux publiés au cours du 19^{ème} siècle (dont ceux de Dupuit, 1854 [23]). Cette loi peut s'écrire sous la forme vectorielle suivante :

$$\nabla P = -\frac{\mu_f}{K} \mathbf{u}_D - C_F K^{-1/2} \rho_f |\mathbf{u}_D| \mathbf{u}_D \quad (5)$$

où C_F est un coefficient adimensionnel qui traduit l'influence des termes d'inertie à l'échelle du pore (ou la perte d'énergie cinétique alors que le premier terme, terme darcéen, représente la perte d'énergie due à la viscosité). L'équation 5 qui fait intervenir le produit $K^{-1/2} \rho_f$ a été proposée par Ward (1965) [78] à l'issue d'un grand nombre d'expériences réalisées avec des lits de billes saturés d'eau. Il en déduisit que $C_f = 0,55$ et il supposa

qu'il s'agissait d'une constante universelle. Cette supposition s'avéra rapidement inexacte, en particulier dans le cas de mousses métalliques pour lesquelles $C_f \approx 0,1$. Dans le cas d'un écoulement unidirectionnel à travers des lits de billes de diamètre d_p , Irmay (1958) [37] proposa la forme suivante

$$\frac{dP}{dx} = -\frac{\beta\mu_f(1-\varepsilon)^2u_D}{d_p^2\varepsilon^3} - \frac{\alpha\rho_f(1-\varepsilon)u_D^2}{d_p\varepsilon^3} \quad (6)$$

où α et β sont des coefficients qui doivent être déterminés expérimentalement. Si $\alpha = 1,75$ et $\beta = 150$, l'équation 6 est l'équation d'Ergun (1952) [24]. On en déduit que la perméabilité d'un lit de billes est :

$$K = \frac{d_p^2\varepsilon^3}{\beta(1-\varepsilon)^2} \quad (7)$$

équation de Kozeny-Carman dans laquelle β dépend du type d'empilement de sphères. Nous évaluerons dans le chapitre 3 les valeurs de β pour des empilements de structure cubique, cubique face centrée et hexagonales. Dans le chapitre 4, nous montrerons l'effet du glissement sur ces valeurs de β .

Ces difficultés sont amplifiées dans le cas d'écoulements de gaz parce qu'il n'est souvent pas justifié de négliger le terme quadratique, notamment si la perméabilité est importante, ou parce que le libre parcours moyen des molécules de gaz n'est pas toujours très petit en face des dimensions caractéristiques des pores. Il s'ensuit que la loi de Darcy-Forchheimer a été remise en cause (Houpeurt, 1974 [36]) et que des lois de types $P_A^2 - P_B^2 = am^n$ ou $P_A^2 - P_B^2 = am + bn^n$ ont été suggérées pour représenter la loi d'écoulement des gaz (P_A et P_B étant les pressions en amont et en aval d'une couche poreuse, m le débit massique la traversant, a et b des constantes empiriques). L'exposant n étant de l'ordre de 2, il a été suggéré, par analogie avec des lois approchées adaptées aux écoulements turbulents en conduites, que le régime pouvait être très rapidement turbulent dans le cas des écoulements de gaz. Cet aspect ne sera pas abordé dans ce mémoire parce que nous ne considérerons que des écoulements à faibles nombres de Reynolds.

Exemple 1 : Considérons par exemple un lit de billes de diamètre d_p avec un empilement conduisant à une porosité typique $\varepsilon = 0,4$. La racine carrée de la perméabilité, choisie comme dimension caractéristique des pores est, en se basant sur la relation de Kozeny-Carman (Dullien, 1979 [22]), $\sqrt{K} \approx 3,5 \cdot 10^{-2}d_p$.

- Terme quadratique :

Le paramètre adimensionnel qui caractérise le passage d'une loi linéaire (Darcy) à une loi quadratique (Darcy-Forchheimer) est le nombre de Reynolds basé sur la vitesse de filtration et sur \sqrt{K} comme dimension caractéristique. Supposons un écoulement d'air à température ambiante traversant une couche poreuse de 10 cm d'épaisseur sous une différence de pression $\Delta P = 10^5 Pa$.

On obtient donc en se basant sur la relation de Kozeny-Carman [Dullien, 1979 [22]]

$$\mathbf{v} \approx 800d_p^2 \quad \text{et} \quad Re_K = \frac{\mathbf{v}K^{1/2}}{\nu} \approx 1,9 \cdot 10^6 d_p^3 \quad (8)$$

Le terme quadratique doit être retenu si $Re_K > 1$, soit pour des billes de diamètres supérieur à $d_p \approx 8 \text{ mm}$.

- Glissement :

A l'inverse, considérons un lit de billes de petit diamètre dans lequel les vitesses sont supposées être très faibles parce que la différence de pression ne doit pas être totalement incompatible avec l'hypothèse d'incompressibilité (la loi de Darcy a été établie pour des liquides).

La dimension caractéristique est de l'ordre de $3,5 \mu m$ si $d_p = 0,1 mm$. Si le lit est parcouru par un écoulement d'air à pression atmosphérique, le libre parcours moyen des molécules est proche de $\lambda = 0.06 \mu m$. Dans ces conditions, les phénomènes de glissement aux interfaces fluide-solide deviennent significatifs.

Cette question semble avoir été soulevée pour la première fois par Klinkenberg, 1941 [42] et la solution proposée a été de définir une perméabilité équivalente qui n'est plus une propriété de la matrice poreuse. Cette perméabilité s'écrit :

$$K_G = K \left(1 + \frac{b}{P_m} \right) \quad (9)$$

où P_m est la pression moyenne de l'écoulement (exprimée en atmosphère) et b un paramètre positif (en *atm*) dont la valeur supposée, selon Klinkenberg, doit être inférieure à l'unité : il en résulte que la perméabilité augmente sous l'effet du glissement ce qui, de nos jours, apparaît être évident compte-tenu des nombreux travaux effectués sur les systèmes microfluidiques. La loi de Klinkenberg implique donc que $K_G \leq 2K$, ce qui n'apparaît pas, *a priori*, évident.

Exemple 2 : Mousses métalliques

Contrairement aux lits de billes, les mousses métalliques sont caractérisées par de très grandes porosités (de l'ordre ou supérieures à $\varepsilon = 0,9$) et de très grandes aires spécifiques (jusqu'à plusieurs milliers de m^2 par m^3). Leur légèreté et relativement grande perméabilité les rendent particulièrement bien adaptées pour augmenter les transferts convectifs (thermique ou massique) lorsqu'elles sont insérées dans des équipements thermiques ou dans des réacteurs chimiques. Le lecteur trouvera dans Bonnet et al. (2008) [13] une synthèse de leurs applications. Cet article soulève la pertinence de la loi de Darcy et de la modification de Forchheimer à partir de comparaisons entre mesures effectuées et prédictions théoriques pour des écoulements unidirectionnels d'air ou d'eau distillée. En bref, les résultats montrent que, en dépit de très faibles vitesses de filtration, les variations de masse volumique doivent être prises en compte dans le cas d'écoulements d'air. Pour un gaz parfait, la modification de la loi de Darcy-Forchheimer suggérée par Whitaker (1996) [82] s'écrit simplement :

$$\frac{d(\rho(x)P(x))}{dx} = -2 \left(\frac{\mu_f}{K} u_D(x) - C_F K^{-1/2} \rho_f u_D^2(x) \right) \quad (10)$$

ce qui signifie que le produit $(\rho(x)P(x))$ reste linéaire en régime établi. Par contre, le gradient de pression n'est linéaire que pour un écoulement incompressible (eau) alors qu'il ne l'est pas pour de l'air. Les expériences décrites dans Bonnet et al. (2008) [13] montrent que les effets quadratiques sont importants lorsque le nombre de Reynolds basé sur la dimension caractéristique des pores, D_p , est supérieur à $Re_{D_p} \approx 10$ (pour les mousses métalliques étudiées, D_p est de l'ordre du millimètre : les effets de glissement sont donc négligeables). Ils montrent aussi que la perméabilité est proportionnelle à D_p^2 (en accord avec la relation

de Kozeny-Carman) et que le coefficient du terme quadratique décroît en $1/D_p$ (Fig. 3). Ce que montre aussi la figure 3 est que la perméabilité dépend de la nature du fluide (d'un facteur de l'ordre de 2) alors que le coefficient du terme quadratique en dépend beaucoup moins. En comparant leurs résultats et d'autres publiés dans la littérature (figure 12 de l'article de Bonnet et al. (2008) [13]), la dispersion est de plusieurs ordres de grandeurs! Il y a donc lieu de s'interroger sur la validité de l'équation 3 et de ses extensions, y compris la relation de Klinkenberg (Eq. 9).

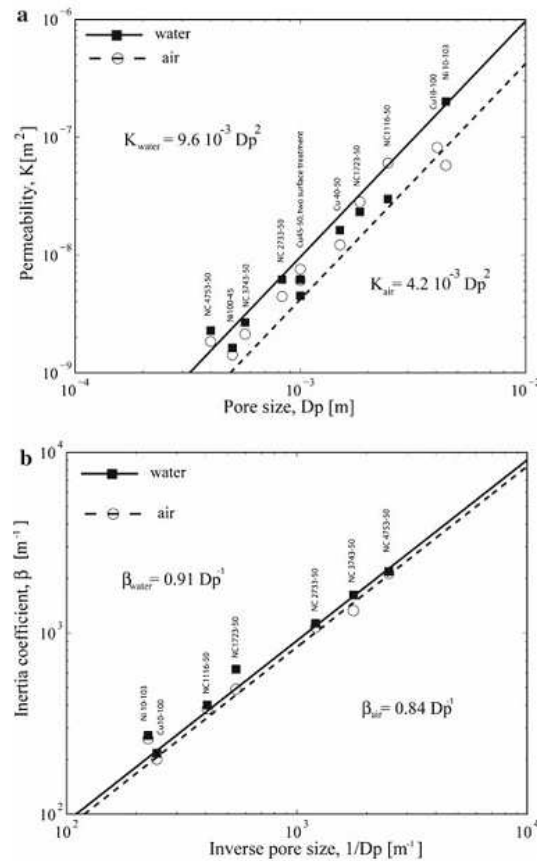


FIGURE 3 – Variations de la perméabilité et du coefficient du terme quadratique en fonction de la dimension caractéristique des pores pour l'air et l'eau distillée (Bonnet et al., 2008 [13]).

Généralités sur les écoulements dans les microconduites

L'étude des écoulements dans les microconduites, et plus généralement dans des microsystèmes naturels ou artificiels de géométries si complexes qu'ils doivent être assimilés à des matrices poreuses afin de simplifier les calculs, nécessite de tenir compte des effets de glissement hydrodynamique et thermique, souvent appelés effets de raréfaction en se basant uniquement sur la valeur du nombre de Knudsen ($Kn = \lambda/D_h$), paramètre fondamental de la théorie cinétique des gaz très dilués (distance intermoléculaire moyenne, δ , très supérieure au diamètre moyen des molécules, d). Cependant, si l'analogie formelle entre écoulements à basse pression et écoulements dans des conduites dont le diamètre est de l'ordre du libre parcours moyen des molécules est souvent avancée, la physique n'est pas tout à fait analogue parce que des effets de glissement doivent aussi être pris en compte dans le cas d'écoulements présentant de forts contrastes de densité (écoulements compressibles). Quoiqu'il en soit, la connaissance des microécoulements gazeux est plus avancée que celle des microécoulements liquides. Pour les gaz, les phénomènes physiques sont beaucoup plus simples à prédire du fait de l'absence, en général, d'effets électrocinétiques (double couche d'Helmoltz (1879), améliorée par Gouy (1910) puis par d'autres physiciens, dont Debye et Huckel (1923)), effets faisant intervenir de nombreux paramètres pour caractériser le fluide, le solide, le potentiel ionique...etc.

Afin que l'approche continue soit applicable pour modéliser un écoulement de gaz, la première condition est que la dimension caractéristique d'une 'particule fluide' soit très grande devant le libre parcours moyen des molécules, $\lambda = 1/(\sqrt{2}\pi d^2 n)$ où $n = \delta^{-3}$ caractérise la concentration moléculaire. Par exemple, dans le cas de l'air dans des conditions standard ($T = 273,15\text{ K}$ et $P = 1.013 \times 10^5\text{ Pa}$), il faut que la dimension caractéristique de la particule fluide soit de l'ordre de $l_p = 100\text{ nm}$. La seconde condition est que l'équilibre thermodynamique soit assuré, c'est à dire que sa température puisse être définie : pour cela, il faut que les temps caractéristiques des phénomènes de transport, en premier lieu la diffusion, soient très grands devant le temps caractéristique des collisions intermoléculaires, de l'ordre de λ/c où c est la vitesse quadratique moyenne des molécules. A ce stade, il importe d'éviter la confusion entre VER et particule fluide. La notion de VER conduit à introduire une échelle supplémentaire de longueur, $L \geq \sqrt{K}$ par exemple en supposant que \sqrt{K} soit la dimension caractéristique des pores.

Le traitement par une approche continue d'un milieu microporeux implique donc :

$$l_p \gg \lambda \quad , \quad \sqrt{K} \gg l_p \quad \text{et donc que} \quad Kn = \frac{\lambda}{\sqrt{K}} \ll O(1) \quad (11)$$

Notons que le dernier critère est contestable parce que \sqrt{K} ne représente pas nécessairement la morphologie d'un milieu poreux (les pores peuvent être très grands et la perméabilité extrêmement petite). Si l'on considère de fines particules compactées (diamètre $d_p = 1\text{ }\mu\text{m}$, par exemple), on obtient $\sqrt{K} \approx 35\text{ nm}$ et donc la mécanique des milieux continus (MMC) ne peut s'appliquer que pour des liquides ou pour des gaz très denses (c'est à dire sous haute pression).

Comme le travail présenté dans ce mémoire se place dans le cadre de la mécanique des milieux continus, on retiendra les critères indicatifs suivants (tableau 1 et Fig. 4) :

- $Kn < 10^{-3}$: le régime est dit **continu** et les phénomènes de transport peuvent être modélisés par les équations de Navier-Stokes et par les équations de conservation de l'énergie et des espèces. De plus, si les échanges radiatifs sont pris en compte dans le cas de mélanges

$Kn \leq 0,003$	$17 \mu m \leq L$	Régime continu : équations de la MMC
$0,003 \leq Kn \leq 0,1$	$0,5 \mu m \leq L \leq 17 \mu m$	Régime de glissement : équations de la MMC avec conditions aux limites modifiées
$0,1 \leq Kn \leq 30$	$0,0017 \mu m \leq L \leq 0,5 \mu m$	Régime de transition : approche moléculaire
$30 \leq Kn$	$L \leq 0,0017 \mu m$	Régime moléculaire libre : théorie cinétique des gaz

TABLE 1 – Classification des régimes de raréfaction pour un écoulement de gaz de type Couette (Colin, 2004 [18]).

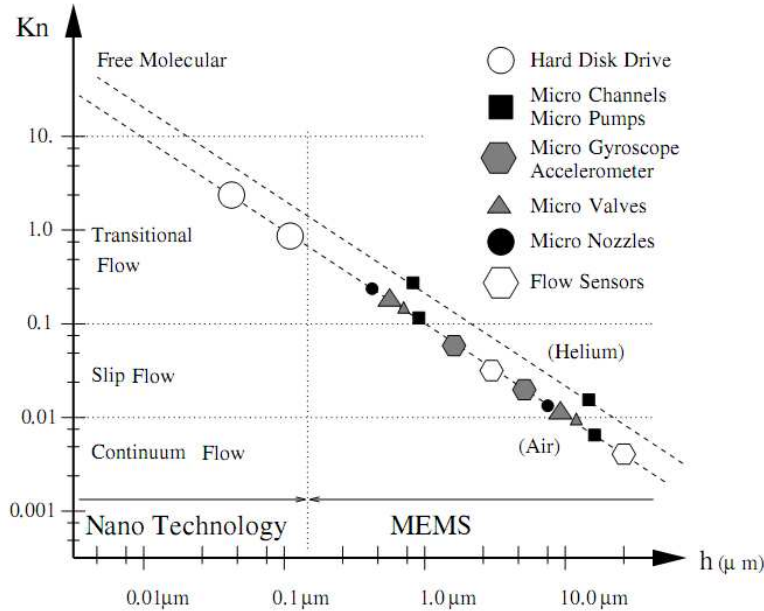


FIGURE 4 – Dimensions caractéristiques de microsystèmes typiques et valeurs du nombre de Knudsen correspondant à la classification des régimes (Karniadakis et al., 2005 [39])

de gaz à pression modérée, les équations gouvernant les échanges par rayonnement entre surfaces et, éventuellement, l'équation de transfert radiatif restent applicables parce que les longueurs d'ondes mises en jeu sont très inférieures aux distances entre surfaces.

- $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$: le régime est dit **glissant**. Les équations de Navier-Stokes et de l'énergie restent applicables mais il est nécessaire de prendre compte des sauts de vitesse et de température aux parois dont les expressions sont données dans la suite. En ce qui concerne les transferts de matière, des conditions aux limites adaptées ne semblent pas avoir été proposées. En ce qui concerne les transferts radiatifs, des progrès considérables ont été réalisés au cours des dernières années [Joulain, 2008 [38], Drevillon et al., 2011 [21]].

- $10^{-1} < Kn < 10$: le régime est dit **de transition**. L'approche continue n'est plus applicable. Cet aspect est en dehors de notre cadre d'étude.

La figure 4, tirée de Karniadakis et al. [2005] [39], indique la valeur du nombre de Knudsen en fonction de la longueur caractéristique de microsystèmes fluidiques courants utilisant

des gaz. On constate que la plupart de ces microsystèmes fonctionnent en régime glissant. On s'intéressera donc à des milieux poreux dont la dimension caractéristique des pores est comprise entre 1 μm et 10 μm .

Les conditions aux limites traduisant un glissement de vitesse ont d'abord été établies par Maxwell [1879]. Si la paroi solide est immobile, elles s'écrivent sous forme adimensionnelle :

$$U_t = \frac{2 - \sigma_t}{\sigma_t} Kn \frac{\partial U_t}{\partial n} + \frac{3}{2\pi} \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{Kn^2 Re}{Ec} \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (12)$$

où n et t désignent les directions normales et tangentielles à une paroi, $\gamma = C_p/C_v$ est le rapport des chaleurs spécifiques, $Re = u_0 L/\nu$ le nombre de Reynolds basé sur la vitesse de référence u_0 et sur la dimension caractéristique L , $Ec = (\gamma - 1)Ma^2(\Delta T/T_0)$ le nombre d'Eckert où $Ma = u_0/a$ est le nombre de Mach et a la vitesse du son, $\theta = (T - T_0)/\Delta T$ est la différence de température réduite.

Le coefficient d'accommodation tangentiel σ_t rend compte des réflexions des molécules sur les parois : il dépend de la nature du gaz et de celle des parois, comme de leur état de surface. Une réflexion purement spéculaire est traduite par $\sigma_t = 0$ et une réflexion purement diffuse par $\sigma_t = 1$. Dans la pratique, les mesures ou les calculs de σ_t par dynamique moléculaire (To et al., 2010 [72]) conduisent à des valeurs le plus souvent comprises entre 0,8 et 1.

Le second terme de l'équation 12 traduit le **pompage thermique**, ce qui signifie qu'un gradient de température tangentiel est susceptible de créer un glissement des molécules le long des parois, l'écoulement s'effectuant des températures les plus hautes vers les plus basses. La physique de ce phénomène est bien expliquée dans les ouvrages de Bird [1994] [11] et de Karniadakis et al. [2005] [39]. Ce terme introduit donc un couplage entre les équations du mouvement et de l'énergie, même si la force de gravité est négligeable. Le traitement numérique de ce couplage n'est pas très simple et des algorithmes adaptés doivent être développés afin d'éviter des oscillations numériques n'ayant aucun sens physique. Enfin, il semble assez clair que le pompage thermique requiert des gradients de températures longitudinaux importants : il faut alors tenir compte des variations de toutes les propriétés thermophysiques avec la température, ce qui accroît la complexité de l'analyse.

Par contre, lorsque le pompage thermique est négligeable, la condition de glissement est similaire à une condition de type Fourier. Il s'ensuit que tous les écoulements établis dans des conduites de géométries simples peuvent être recalculés analytiquement (conduites plane, cylindrique, espace annulaire ...). Nous donnerons un exemple de solution analytique dans le chapitre 3.

Des conditions de glissement du second ordre (c'est à dire faisant intervenir des dérivées normales du second ordre) ont aussi été proposées afin d'élargir le domaine de validité des équations continues pour des nombres de Knudsen correspondant au début du régime de transition. Leur expression, plus ou moins complexe, peut être écrite sous la forme générale :

$$U_t = A_1 Kn \frac{\partial U_t}{\partial n} + A_2 Kn^2 \frac{\partial^2 U_t}{\partial n^2} \quad (13)$$

Comme le second terme de l'équation 13 est en Kn^2 , la question de la validité des équations de la mécanique des milieux continus demeure ouverte lorsque $Kn > 0,1$ parce que ces équations sont généralement considérées comme des approximations du premier ordre en Kn de l'équation de Boltzmann. Le traitement numérique des conditions aux limites

du second ordre est aussi très délicat.

Le glissement se traduit aussi par un saut de température, fonction d'un coefficient d'accommodation thermique, σ_T , compris entre 0 et 1 selon qu'une molécule conserve, après un choc sur une paroi à température T_p , sa température initiale ou qu'elle acquiert celle de la paroi. Ce saut s'écrit sous forme adimensionnelle (Colin et Baldas, 2004) [18] :

$$\theta - \theta_p = \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{Kn}{Pr} \frac{\partial \theta}{\partial n} \quad (14)$$

On note que, pour un gaz, ce phénomène ne peut être important (compte tenu des valeurs de γ et de Pr) que si $\sigma_T \approx 0$ (surface thermiquement spéculaire) ce qui signifie, pour un milieu poreux, que le fluide ne voit pas la matrice poreuse autrement que par son gradient tangentiel de température (Eq. 12). Il s'agit de cas très particuliers que nous n'envisagerons pas dans ce mémoire.

Présentation du mémoire.

Le mémoire de thèse est composé de cinq chapitres suivis d'une conclusion dans laquelle nous présentons quelques perspectives pour une suite de ce travail. Ces cinq chapitres correspondent à l'évolution du travail de thèse.

Le chapitre I constitue donc le travail préliminaire de thèse qui s'est ensuite orienté vers des approches complémentaires. Le principe des méthodes d'homogénéisation périodique est d'abord exposé. Suit une présentation de deux méthodes de résolution dans l'espace de Fourier : l'approche en déformation et l'approche en contrainte, mieux adaptée dans le cas d'inclusions rigides au sein d'un solide hétérogène. L'extension de ces méthodes à la résolution d'écoulements régis par l'équation de Stokes est ensuite décrite : elle consiste à imposer un gradient de pression macroscopique sur un VER puis à déterminer les champs de vitesse locale. Des applications aux cas d'écoulements à travers des réseaux de cylindres, avec condition d'adhérence ou avec condition de glissement, sont ensuite discutées et l'influence du glissement sur la perméabilité est mise en évidence.

Deux techniques de modélisation des phénomènes de transport dans des milieux poreux saturés par un fluide monoconstituant sont présentées dans le second chapitre. La première est basée sur la méthode des développements asymptotiques, appelée aussi méthode d'homogénéisation, basée sur le concept de séparation d'échelles. On explique que le processus consiste en trois étapes : description locale, localisation et description macroscopique. La seconde technique s'appuie sur la méthode de calcul de moyennes à l'échelle d'un VER. Le point de départ de cette méthode est basé sur les équations de la Mécanique des Milieux Continus et sur des théorèmes donnant les expressions des moyennes de tous les opérateurs intervenant dans une équation de transport. Cette approche, introduite dans les années 1970, semble être plus utilisée que la première et a permis d'appréhender des problèmes complexes, tels que des écoulements multiphasiques dans des milieux poreux. Nous montrons qu'elle s'étend sans difficulté aux écoulements de gaz dans des milieux microporeux.

Après une brève présentation du logiciel commercialisé que nous avons utilisé (Comsol), nous exposons les études de convergence spatiale que nous avons effectuées et nous comparons nos solutions avec des résultats de la littérature dans le chapitre III. Diverses géométries sont considérées (allant de géométries planes à des empilements 3D de cubes ou de sphères) mais ces comparaisons sont limitées à des écoulements isothermes. Ce chapitre

contient non seulement un grand nombre de courbes mais aussi des tableaux dans lesquels sont reportées des valeurs numériques que nous considérons être des valeurs de référence.

L'effet du glissement sur la perméabilité de milieux microporeux est abordé dans le chapitre IV. Le formalisme résultant de l'homogénéisation de structures périodiques est utilisé pour simuler numériquement des écoulements isothermes de gaz dans divers empilements de complexité croissante. Les perméabilités sont déterminées en calculant les moyennes spatiales des champs de vitesses, solutions des équations de Stokes, et en supposant le gradient de pression constant. Les valeurs obtenues en imposant des conditions d'adhérence sont comparées à celles obtenues avec des conditions de glissement du premier ordre. On considère des pores de dimensions micrométriques correspondant, pour de l'air à pression atmosphérique, à des nombres de Knudsen compris entre $Kn = 0,01$ et $Kn = 0,1$, domaine de validité des équations de Stokes avec condition de glissement. On discute de l'augmentation relative de la perméabilité due au glissement selon la géométrie des pores.

Dans le chapitre V, nous présentons des solutions pour des écoulements anisothermes et étudions l'effet du glissement sur la conductivité effective de milieux microporeux 2D et 3D. Dans ce chapitre, nous résolvons les équations de Navier-Stokes et de l'énergie stationnaires dans des conduites poreuses en imposant des conditions de symétries dans une ou deux directions. A partir des solutions locales, sont calculées les moyennes intrinsèques des champs de vitesse et de température. Nous considérons des cas pour lesquels la condition 'd'équilibre thermique local' (LTE) peut être considérée comme satisfaite et d'autres correspondant à un non-équilibre thermique (NLTE). On détermine les conductivités de dispersion en fonction du nombre du Péclet et on montre l'influence du glissement sur les composantes longitudinales et transverses pour différentes porosités et longueur de glissement. Dans les cas NLTE, le coefficient macroscopique de transfert fluide-solide est aussi calculé.

Chapitre 1

Homogénéisation numérique de structures périodiques par transformée de Fourier

1.1 Introduction

L'objet de ce travail concerne la détermination de la perméabilité d'un milieu microporeux en s'appuyant sur des techniques de changement d'échelle. Le cadre adopté est celui des méthodes d'homogénéisation des milieux périodiques. Le milieu étudié est défini à l'aide d'une cellule de base que l'on déplace par translation suivant les trois directions de l'espace. Les conditions de périodicité des champs mécaniques permettent alors de réduire l'analyse du problème mécanique à la cellule de base. La résolution proprement dite du problème mécanique sur la cellule de base repose sur les méthodes de résolution dans l'espace de Fourier introduite par l'équipe du LMA de Marseille dans le milieu des années 90 (Moulinec et al. [52], Michel et al. [50]) et améliorée pour traiter le cas des contrastes infinis (Bonnet, 2007 [12]). Le principe consiste à introduire un milieu de référence, les champs fluctuant, de nature périodique, étant alors solution d'un problème de déformation libre. Ces champs sont obtenus sous forme d'une série de Neumann, à l'aide d'un schéma itératif exprimé dans le domaine de Fourier. D'un point de vue numérique, l'utilisation des transformées de Fourier rapide (T.F.R) permet d'accélérer considérablement les calculs. Largement utilisée pour la détermination des propriétés effectives des matériaux composites, ces méthodes n'ont toutefois jamais été utilisées dans le contexte des milieux poreux.

Ce chapitre est structuré de la manière suivante :

- (i) La première partie est de nature bibliographique, les deux premières sections sont dédiées à quelques généralités en ce qui concerne les méthodes de changement d'échelle de milieux périodiques. La troisième section a pour objet de présenter les méthodes de résolution dans le domaine de Fourier pour lesquelles on peut décliner deux approches : l'approche en déformation et l'approche en contrainte. Cette dernière, comme nous le verrons par la suite, est mieux adaptée dans le cas d'inclusions rigides.
- (ii) La seconde partie concerne l'extension de ces méthodes aux problèmes d'écoulements de fluides incompressibles (régis par les équations de Stokes) à travers un squelette solide indéformable. La méthodologie adoptée pour la détermination des composantes du tenseur de perméabilité consiste à imposer un gradient de pression macroscopique, G , sur la cellule de base puis à déterminer le champ de vitesse local. Des applications dans le cas d'un écoulement à travers un réseau de cylindres indéformables ont permis de valider

l'approche. Toutefois, à ce stade, les résultats ont été obtenus en considérant une condition d'adhérence sur la paroi des inclusions. Or, pour des pores de taille micrométrique la prise en compte des effets de glissement sur les interfaces fluide/solide s'avère déterminante dans le calcul de la perméabilité. Nous avons donc tenu compte d'une discontinuité du champ de vitesse sur la surface des inclusions dans la méthode de résolution numérique. La méthodologie adoptée consiste à introduire des propriétés de surface particulières sur la paroi, faisant intervenir la longueur caractéristique liée au saut du champ de vitesse. La méthodologie adoptée est détaillée dans la section 1.3.3.1.

Enfin, on présente des résultats numériques en considérant des condition d'adhérence ou de glissement sur la paroi des inclusions. Ces résultats mettent en évidence l'influence du glissement sur la perméabilité des milieux micro-poreux.

1.2 Homogénéisation des milieux périodiques

Cette première partie, de nature bibliographique, a pour objet de rappeler les méthodes d'homogénéisation des milieux périodiques et les méthodes de résolution dans le domaine de Fourier.

1.2.1 Généralités sur l'homogénéisation des milieux périodiques

1.2.1.1 La cellule de base

Un milieu périodique est défini par une cellule de base que l'on déplace par translation le long de trois vecteurs. La cellule de base n'est pas définie de manière unique. En revanche, les propriétés effectives, même calculées sur des cellules différentes, sont déterminées de façon unique. Il faudra donc veiller à respecter cette indépendance par rapport au choix de la cellule.

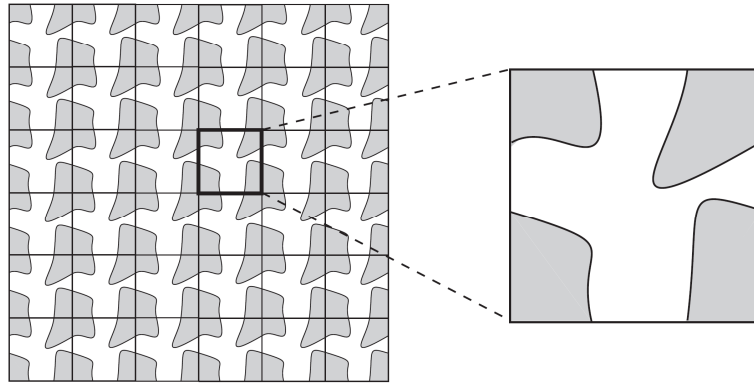


FIGURE 1.1 – Fibres circulaires en réseau carré.

1.2.1.2 Champs de déformations et de contraintes périodiques

Considérons un élément de volume périodique mais de grande taille (donc contenant un grand nombre de cellules de base). On impose un déplacement affine $u = E.x$ au bord de cet élément, l'état de déformation qui en résulte dans le matériau homogénéisé est uniforme et vaut E , l'état de contrainte est également uniforme et vaut Σ . Dans le milieu hétérogène réel, les champs locaux $\varepsilon(x)$ et $\sigma(x)$ sont oscillants et fluctuent autour de leurs valeurs moyennes E et Σ .

Le champ local de déformation $\varepsilon(x)$ peut être décomposé en un champ moyen E qui serait le champ de déformation si le milieu était homogène et une correction fluctuante $\varepsilon^*(x)$ qui tient compte de la présence des hétérogénéités. E donne la déformation du réseau tandis que $\varepsilon^*(x)$ est de moyenne nulle sur la cellule de base, le champ de déplacement associé, noté u^* , est un champ périodique. Les champs de déformation et de déplacement admettent donc la décomposition suivante :

$$u(x) = E \cdot x + u^*(x), \quad \varepsilon(x) = E + \varepsilon^*(x), \quad u^*(x) \text{ périodique} \quad (1.1)$$

Par "périodicité de $u^*(x)$ " on entend que toutes les composantes de u^* prennent des valeurs identiques aux points du bord de la cellule de base qui se correspondent par translation le long des vecteurs du réseau périodique. On notera les relations suivantes, conséquences de la périodicité de $u^*(x)$:

$$\langle \varepsilon(x) \rangle_V = E \quad \text{et} \quad \langle \varepsilon^*(x) \rangle_V = 0 \quad (1.2)$$

par $\langle \cdot \rangle_V$ on définit la moyenne prise sur le volume de la cellule élémentaire, telle que :

$$\langle \cdot \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \cdot \, dV \quad (1.3)$$

La démonstration de (1.2), est triviale. En effet, on a :

$$\langle \varepsilon^*(x) \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} u^*(x) \overset{s}{\otimes} n \, dS \quad (1.4)$$

où $(a \overset{s}{\otimes} b)_{ij} = \frac{1}{2}(a_i b_j + a_j b_i)$. Or cette intégrale de bord s'annule car $u^*(x)$ prend des valeurs identiques aux points opposés. La relation de moyenne généralisée, valide lorsque les cavités ne rencontrent pas le bord de la cellule, s'écrit :

$$\langle \varepsilon(x) \rangle_V = E = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} u(x) \overset{s}{\otimes} n \, dS \quad (1.5)$$

Le champ de contraintes local $\sigma(x)$, en plus d'être périodique, est en équilibre sur l'ensemble du milieu. Il satisfait donc l'équilibre volumique dans V et l'équilibre aux interfaces au bord de V , ce qui traduit l'équilibre d'une cellule avec les cellules voisines. Les équations d'équilibre pour $\sigma(x)$ sont :

$$\text{div} \sigma(x) = 0 \quad \text{dans } V, \quad \sigma(x) \cdot n \text{ antipériodique} \quad (1.6)$$

Le tenseur des contraintes macroscopiques Σ est défini comme la moyenne du champ local :

$$\Sigma = \langle \sigma(x) \rangle_V \quad (1.7)$$

ou encore, en s'appuyant sur le principe des puissances virtuelles :

$$\langle \sigma \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} (\sigma(x) \cdot n) \overset{s}{\otimes} x \, dS \quad (1.8)$$

Lorsque le composite contient des inclusions rigides (où $\sigma(x)$ n'est pas défini), c'est l'expression (1.8) qui doit être substituée à (1.7). Notons également que le champ de contrainte local peut être décomposé en une fluctuation $\sigma^*(x)$ et en un champ de contrainte macroscopique Σ . La condition de périodicité de la fluctuation $\sigma^*(x)$ est équivalente à la condition d'antipériodicité de $\sigma^*(x) \cdot n$.

On peut décliner deux approches en vue de la détermination des propriétés effectives d'un milieu périodique : la première consiste à imposer un champ de déformation macroscopique, E , puis à rechercher l'expression de la contrainte locale. Le comportement macroscopique d'un tel milieu est alors déduit en appliquant la relation de moyenne (1.7). Nous désignerons par "approche en déformation" une telle démarche de détermination des propriétés effectives du milieu périodique. La seconde approche consiste à imposer un champ de contrainte macroscopique, Σ , puis à déterminer le champ de déformation local afin d'obtenir la loi de comportement macroscopique, déduite de la relation de moyenne (1.7). On désignera cette approche par "approche en contrainte".

Il est important de noter que le lemme de Hill s'applique également aux milieux périodiques. Soient $u(x)$ et $\sigma(x)$ des champs de déplacement et de contraintes de la forme (1.1) et (1.6) respectivement, alors :

$$\langle \sigma(x) : \varepsilon(x) \rangle_V = \langle \sigma(x) \rangle_V : \langle \varepsilon(x) \rangle_V = \Sigma : E \quad (1.9)$$

Pour établir (1.9) on note d'abord, à partir de (1.1), que :

$$\langle \sigma(x) : \varepsilon(x) \rangle_V = \langle \sigma(x) : \varepsilon^*(x) \rangle_V + \Sigma : E \quad (1.10)$$

En appliquant le principe des travaux virtuels sur V , on obtient :

$$\langle \sigma(x) : \varepsilon^*(x) \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} \langle \sigma(x) : (u^*(x) \otimes n) \rangle dS \quad (1.11)$$

Dans la dernière relation, u^* prend des valeurs identiques sur les faces opposées de V tandis que $\sigma(x).n$ y prend des valeurs opposées. La dernière intégrale écrite est donc nulle, ce qui permet d'établir l'égalité (1.9).

On se propose de décrire brièvement, dans la section qui suit, l'approche en déformation et l'approche en contrainte dans le cadre de l'élasticité linéaire.

1.2.2 Détermination des propriétés effectives en élasticité linéaire

On se place dans le cadre de l'élasticité linéaire en hypothèse de petites déformations (HPP). Dans les sous-sections (1.2.2.1) et (1.2.2.2) on rappelle les techniques qui aboutissent à la détermination des propriétés effectives des milieux périodiques, respectivement le tenseur d'élasticité homogénéisé \mathbb{L}^{hom} (dans le cas d'une approche en déformation) et le tenseur de souplesse homogénéisé \mathbb{M}^{hom} (dans le cas d'une approche en contrainte).

1.2.2.1 Approche en déformation

Les phases individuelles sont supposées élastiques linéaires de rigidité $\mathbb{L}(x)$. Le champ de déformation local $\varepsilon(x)$ est solution du système d'équations :

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div} \sigma(x) &= 0 \\ \sigma(x) &= \mathbb{L}(x) : (\varepsilon^*(x) + E) \\ \varepsilon(x) &= \frac{1}{2} [\nabla u(x) + \nabla^T u(x)] \end{aligned} \right\} \quad \forall x \in V \quad (1.12)$$

$u^*(x)$ périodique
 $\sigma(x).n$ antipériodique

auxquelles on adjoint les relations de continuité aux interfaces matrice/inclusion :

$$[\sigma(x).n]_{\Gamma} = 0, \quad [u(x)]_{\Gamma} = 0 \quad (1.13)$$

Le champ de contrainte $\sigma(x)$ est ensuite obtenu à partir de la relation de moyenne (1.7) :

$$\Sigma = \langle \mathbb{L}(x) : \varepsilon(x) \rangle_V \quad (1.14)$$

Ecrivons maintenant la règle de localisation dans chacune des phases de la cellule élémentaire :

$$\varepsilon(x) = \mathbb{A}(x) : E \quad (1.15)$$

qui exprime une relation linéaire entre le champ de déformation local $\varepsilon(x)$ et macroscopique E . On définit alors le tenseur d'élasticité homogénéisé en remplaçant (1.15) dans (1.14) :

$$\Sigma = \mathbb{L}^{hom} : E = \langle \mathbb{L}(x) : \mathbb{A}(x) \rangle_V : E \quad (1.16)$$

La déformation macroscopique peut être ensuite décomposée en sollicitations élémentaires, en posant :

$$E = \chi_{ij} e_i \otimes e_j \quad (1.17)$$

dans laquelle la convention de sommation d'Einstein doit être appliquée. χ_{ij} sont les composantes d'un tenseur d'ordre deux "adimensionné", typiquement dans le cas d'une sollicitation correspondant à un cisaillement simple dans le plan Ox_1x_2 . On pose $\chi_{12} = \chi_{21} = 1$ et les autres $\chi_{ij} = 0$.

$$L_{ijkl}^{hom} \chi_{kl} = \langle L_{ijpq}(x) A_{pqkl}(x) \rangle_V \chi_{kl} \quad (1.18)$$

Une expression équivalente de \mathbb{L}^{hom} mais montrant mieux la symétrie de ce tenseur peut être obtenue à l'aide du lemme de Hill (1.9) :

$$L_{ijkl}^{hom} \chi_{ij} \chi_{kl} = \langle A_{ijpq}(x) L_{pqmn}(x) A_{mnkl}(x) \rangle_V \chi_{ij} \chi_{kl} \quad (1.19)$$

La détermination des composantes du tenseur d'élasticité homogénéisé est alors effectuée en considérant successivement les six trajets de chargement élémentaires, $\chi_{11}=1$, $\chi_{12} = 1$, $\chi_{13} = 1 \dots$

1.2.2.2 Approche en contrainte

De manière duale, comme ce qui a été fait dans la section qui précède, on peut décliner une approche conduisant à la détermination des composantes du tenseur de souplesse homogénéisé. Pour cela, on choisit d'imposer une contrainte macroscopique Σ plutôt qu'une déformation macroscopique E . Le problème d'élasticité à résoudre sur la cellule élémentaire se présente sous la forme suivante :

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div} \sigma(x) &= 0 \\ \varepsilon(x) &= \mathbb{M}(x) : (\sigma^*(x) + \Sigma) \\ \varepsilon(x) &= \frac{1}{2} [\nabla u(x) + \nabla^T u(x)] \end{aligned} \right\} \quad \forall x \in V \quad (1.20)$$

$u^*(x)$ périodique
 $\sigma(x) \cdot n$ antipériodique

auquel on adjoint les relations de continuité aux interfaces matrice/inclusion :

$$[\sigma(x) \cdot n]_{\Gamma} = 0, \quad [u(x)]_{\Gamma} = 0 \quad (1.21)$$

$\mathbb{M}(x)$ est le tenseur de souplesse défini par $\mathbb{L}(x) : \mathbb{M}(x) = \mathbb{M}(x) : \mathbb{L}(x) = \mathbb{I}$ (\mathbb{I} tenseur identité symétrique d'ordre quatre). De manière tout à fait similaire à ce qui a été fait dans la section précédente, la déformation macroscopique est déduite de (1.2) :

$$E = \langle \varepsilon(x) \rangle_V = \langle \mathbb{M}(x) : \sigma(x) \rangle_V \quad (1.22)$$

Introduisons alors le tenseur de concentration $\mathbb{B}(x)$ défini par :

$$\sigma(x) = \mathbb{B}(x) : \Sigma \quad (1.23)$$

En écrivant la relation de moyenne (1.2), on obtient alors :

$$\mathbb{M}^{hom} : \Sigma = \langle \mathbb{M}(x) : \mathbb{B}(x) \rangle_V : \Sigma \quad (1.24)$$

dans laquelle on a fait apparaître les tenseurs de souplesse homogénéisé du milieu périodique, \mathbb{M}^{hom} . De manière similaire à ce qui a été fait dans l'approche en déformation, la détermination des composantes de ce tenseur homogénéisé s'effectue en considérant pour Σ des trajets de chargement élémentaires :

$$\Sigma = \kappa_{ij} e_i \otimes e_j \quad (1.25)$$

On écrira ainsi :

$$M_{ijkl}^{hom} \kappa_{kl} = \langle M_{ijpq}(x) B_{pqkl}(x) \rangle_V \kappa_{kl} \quad (1.26)$$

1.2.3 Une méthode de résolution basée sur la transformée de Fourier

La méthode générale permettant de déterminer les propriétés effectives d'un milieu périodique contenant des phases élastiques linéaires a été présenté dans les sections précédentes et déclinée en deux approches : en "déformation" et en "contrainte". La résolution proprement dite du problème d'homogénéisation peut être effectuée en utilisant une méthode par éléments finis et adaptées à la prise en compte de la condition de périodicité des champs mécaniques sur le contour de la cellule. Une méthode numérique utilisant directement les images des microstructures sans recours à un maillage des différentes phases a été proposée par l'équipe du Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique de Marseille dans les années 90 [52], [50] et améliorée pour traiter le cas de contrastes infinis par Bonnet [12]. Cette méthode est fondée sur une technique de résolution dans le domaine de Fourier pour laquelle on peut décliner l'approche en déformation et l'approche en contrainte. On se propose de décrire ces méthodes.

1.2.3.1 Méthode de résolution en déformation

1.2.3.1.1 Le problème d'une déformation libre. Opérateur de Green périodique Γ_0 Le problème d'inhomogénéité considéré ici consiste à rechercher la solution $\varepsilon^*(x)$ vérifiant l'équilibre local au sein de la cellule élémentaire et les conditions de compatibilité :

$$\begin{cases} \operatorname{div} [\mathbb{L}(x) : (\varepsilon^*(x) + E)] = 0 \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot}^T \varepsilon^*(x) = 0 \end{cases} \quad (1.27)$$

avec les conditions de périodicité et les conditions de continuité aux interfaces déjà énoncées précédemment. On transforme classiquement ce problème d'inhomogénéité en un problème d'inclusion en introduisant dans (1.27) un milieu de référence de tenseur d'élasticité \mathbb{L}^0

(uniforme sur la cellule élémentaire). Utilisant alors la décomposition suivante $\mathbb{L}(x) = \mathbb{L}_0 + \delta\mathbb{L}(x)$ (avec $\delta\mathbb{L}(x) = \mathbb{L}(x) - \mathbb{L}^0$) on montre aisément que le problème (1.27) se réécrit sous la forme :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \left[\mathbb{L}_0 : \varepsilon^*(x) + \tau(x) \right] = 0 \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot}^T \varepsilon^*(x) = 0 \end{cases} \quad (1.28)$$

dans laquelle $\tau(x)$ est une contrainte de polarisation définie par :

$$\tau(x) = \delta\mathbb{L}(x) : \varepsilon(x) \quad (1.29)$$

Les champs mécaniques, $u^*(x)$, $\varepsilon^*(x)$, $\sigma(x)$ étant périodiques sur la cellule, ils peuvent être développés en série de Fourier. Par exemple, pour $\varepsilon^*(x)$ on posera :

$$\varepsilon^*(x) = \sum_{\xi=-\infty}^{+\infty} \varepsilon^*(\xi) \exp(-i\xi \cdot x) \quad (1.30)$$

où $\varepsilon^*(\xi)$ désigne la transformée de Fourier de $\varepsilon^*(x)$ sur la cellule :

$$\varepsilon^*(\xi) = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon^*(x) \exp(i\xi \cdot x) dx \quad (1.31)$$

Dans l'espace de Fourier, le système d'équations (1.28) s'écrit donc :

$$\begin{cases} L_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}(\xi) \xi_k = -\tau_{ij}(\xi) \xi_j \\ a_{ijkl}(\xi) \varepsilon^*(\xi) = 0 \end{cases} \quad (1.32)$$

avec :

$$a_{ijkl}(\xi) = \frac{1}{2} \left[\epsilon_{ikp} \epsilon_{jlp} + \epsilon_{jkp} \epsilon_{ilp} \right] \xi_p \xi_q \quad (1.33)$$

où ϵ_{ijk} est le symbole de permutation, non nuls si les indices prennent des valeurs distinctes, il vaut 1 lorsque i, j, k sont cycliques et vaut -1 lorsqu'ils sont acycliques. Le système d'équation algébriques défini par (1.32) comporte neuf équations pour six inconnues que sont les composantes du champ de déformation $\varepsilon_{ij}^*(\xi)$. Toutefois, la seconde relation dans (1.32), qui exprime la condition de compatibilité du champ de déformation, comporte uniquement trois relations indépendantes les unes des autres. La solution du système (1.32) s'écrit :

$$\varepsilon^*(\xi) = -\Gamma^0(\xi) : \tau(\xi) \quad (1.34)$$

où $\Gamma^0(\xi)$ est le tenseur de Green "en déformation" défini par :

$$\Gamma_{ijkl}^0(\xi) = \frac{1}{4\mu_0 |\xi|^2} (\delta_{ik} \xi_j \xi_l + \delta_{il} \xi_j \xi_k + \delta_{jk} \xi_i \xi_l + \delta_{jl} \xi_i \xi_k) - \frac{\lambda_0 + \mu_0}{\mu_0(\lambda_0 + 2\mu_0)} \frac{\xi_i \xi_j \xi_k \xi_l}{|\xi|^4} \quad (1.35)$$

où $|\xi|$ définit la norme du vecteur d'onde ξ . La déformation totale $\varepsilon(x)$ s'obtient à partir de (1.34) en lui superposant la déformation macroscopique, E :

$$\varepsilon(\xi) = E(\xi) - \Gamma^0(\xi) : \tau(\xi) \quad (1.36)$$

Notons que, dans la relation précédente, $E(\xi)$ désigne la transformée de Fourier de la déformation macroscopique. Celle-ci étant uniforme sur la cellule dans l'espace réel, on montre facilement, à partir de (1.31), que $E(\xi)$ est nul pour tout vecteur d'onde différent de zéro et que $E(\xi = 0) = E$.

1.2.3.1.2 Formulation du schéma itératif L'équation (1.36) est l'équation intégrale de Lippmann-Schwinger périodique pour $u(\xi)$. L'expression de la transformée de Fourier de la contrainte de polarisation $\tau(\xi)$ a pour expression :

$$\tau(\xi) = \delta\mathbb{L}(\xi) * \varepsilon(\xi) \quad (1.37)$$

où l'opérateur $*$ définit le produit de convolution dans le domaine de Fourier. L'équation (1.36) s'écrit donc :

$$\varepsilon(\xi) = E(\xi) - \Gamma^0(\xi) : \left[\delta\mathbb{L}(\xi) * \varepsilon(\xi) \right] \quad (1.38)$$

équation que l'on peut encore écrire dans le domaine réel sous la forme :

$$\varepsilon(x) = E - \Gamma^0 * \left[\delta\mathbb{L}(x) : \varepsilon(x) \right] \quad (1.39)$$

On va rechercher la solution de cette dernière équation sous la forme d'un développement en série de Neuman [51] :

$$\varepsilon(x) = \left[\mathbb{I} - \mathbb{H}(x) + \mathbb{H}(x) : \mathbb{H}(x) - \dots \right] : E \quad (1.40)$$

avec : $\mathbb{H}(x) = \Gamma^0 * \delta\mathbb{L}(x)$

que l'on peut obtenir en utilisant le schéma itératif suivant (écrit dans le domaine réel et dans le domaine de Fourier) :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{i+1}(x) &= E - \Gamma^0 * \left[\delta\mathbb{L}(x) : \varepsilon^i(x) \right] \\ \varepsilon^{i+1}(\xi) &= E(\xi) - \Gamma^0(\xi) : \left[\delta\mathbb{L}(\xi) * \varepsilon^i(\xi) \right] \end{aligned} \quad (1.41)$$

L'opérateur de Green possède la propriété suivante :

$$-\Gamma^0 * \left[\mathbb{L}^0 : \varepsilon^i(x) \right] = \varepsilon^i(x) - E \quad (1.42)$$

Ainsi on peut écrire :

$$-\Gamma^0(\xi) : \left[\delta\mathbb{L}(\xi) * \varepsilon^i(\xi) \right] = \varepsilon^i(\xi) - E(\xi) + \Gamma^0(\xi) : \sigma^i(\xi) \quad (1.43)$$

Le schéma itératif se réduit donc à :

$$\varepsilon^{i+1}(\xi) = \varepsilon^i(\xi) - \Gamma^0(\xi) : \sigma^i(\xi) \quad (1.44)$$

Il est clair que cette dernière relation, exprimée dans le domaine de Fourier, est simple du point de vue de son intégration numérique. Néanmoins, il reste le problème de la détermination du champ de contrainte $\sigma^i(\xi)$ à l'étape i , connaissant le champ de déformation $\varepsilon^i(\xi)$. Deux démarches peuvent être adoptées :

- La première consiste tout simplement à calculer le champ de déformation dans le domaine réel $\varepsilon^i(x)$ (par transformée de Fourier inverse), à calculer la contrainte locale $\sigma^i(x) = \mathbb{L}(x) : \varepsilon^i(x)$ puis à recalculer la contrainte dans le domaine de Fourier $\sigma^i(\xi)$. Le schéma itératif se présente alors sous la forme :

Initialisation :	$\begin{cases} \varepsilon^0(x) = E & \forall x \in V \\ \sigma^0(x) = \mathbb{L}(x) : \varepsilon^0(x) & \forall x \in V \end{cases}$
Itération $i + 1$:	$\begin{aligned} \text{a)} & \quad \varepsilon^i(x) \text{ et } \sigma^i(x) \text{ sont connus} \\ \text{b)} & \quad \sigma^i(\xi) = \mathcal{F}(\sigma^i(x)) \\ \text{c)} & \quad \text{Vérifier la convergence} \\ \text{d)} & \quad \varepsilon^{i+1}(\xi) = \varepsilon^i(\xi) - \Gamma_0(\xi) : \sigma^i(\xi) \\ \text{e)} & \quad \varepsilon^{i+1}(x) = \mathcal{F}^{-1}(\varepsilon^{i+1}(\xi)) \\ \text{f)} & \quad \sigma^{i+1}(x) = \mathbb{L}(x) : \varepsilon^{i+1}(x) \quad \forall x \in V \end{aligned}$

Tableau 1 : schéma itératif dans l'approche en déformation

\mathcal{F} et \mathcal{F}^{-1} dénotent respectivement la transformée de Fourier et son inverse.

Sur un plan numérique, l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (T.F.R) permet d'accélérer considérablement les calculs. Le schéma itératif est stoppé lorsque que la solution σ^i à l'étape b est suffisamment proche de la solution exacte. Ceci requiert de se donner un test de convergence ainsi qu'une valeur seuil au dessous de laquelle le schéma itératif est stoppé. Nous reviendrons sur cette question dans la suite.

- La seconde méthode consiste à calculer $\sigma^i(\xi)$ en effectuant le produit de convolution $\mathbb{L}(\xi) * \varepsilon(\xi)$ mais, comme nous allons le voir, ceci n'est possible qu'en considérant des géométries d'inclusion "simple" (ellipsoïdale, carrée... par exemple). A cette fin, nous exprimons la transformée de Fourier du tenseur de rigidité $\mathbb{L}(x)$:

$$\mathbb{L}(\xi) = \int_V \mathbb{L}(x) \exp(i\xi \cdot x) dx = \sum_{\alpha} I_{\alpha}(\xi) \mathbb{L}_{\alpha} \quad (1.46)$$

où \mathbb{L}_{α} et $I_{\alpha}(\xi)$ sont respectivement le tenseur de rigidité et la fonction caractéristique de la géométrie de la phase α . La fonction caractéristique, $I_{\alpha}(\xi)$, étant définie par :

$$I_{\alpha}(\xi) = \frac{1}{V} \int_{V_{\alpha}} \exp(i\xi \cdot x) dx \quad (1.47)$$

avec la propriété suivante :

$$\sum_{\alpha} I_{\alpha}(\xi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \xi \neq 0 \\ 1 & \text{si } \xi = 0 \end{cases} \quad (1.48)$$

Si l'indice $\alpha = M$ désigne celui de la matrice environnante dans laquelle sont noyées les inclusions, on pourra écrire, compte tenu des dernières relations (ainsi que $I_{\alpha} = f_{\alpha}$ où f_{α} définit la fraction volumique de la phase α) :

$$\mathbb{L}(\xi) = \begin{cases} \sum_{\alpha} (\mathbb{L}_{\alpha} - \mathbb{L}_M) I_{\alpha}(\xi) & \text{si } \xi \neq 0 \\ \mathbb{L}_M - f_{\alpha} \sum_{\alpha} (\mathbb{L}_{\alpha} - \mathbb{L}_M) & \text{si } \xi = 0 \end{cases} \quad (1.49)$$

Le produit de convolution de $\mathbb{L}(\xi)$ par $\varepsilon^i(\xi)$ conduit donc à :

$$\sigma^i(\xi) = \mathbb{L}(\xi) * \varepsilon^i(\xi) = \mathbb{L}_M : \varepsilon^i(\xi) + \sum_{\alpha} (\mathbb{L}_{\alpha} - \mathbb{L}_M) \left[I_{\alpha}(\xi) * \varepsilon^i(\xi) \right] \quad (1.50)$$

Dans cette configuration le schéma itératif utilisé se présente d'une manière assez similaire à celui déjà donné plus haut, avec toutefois quelques distinctions :

Initialisation :	$\begin{cases} \varepsilon^0(\xi) = E(\xi) \\ \sigma^0(\xi) = \mathbb{L}_M : E(\xi) + \sum_{\alpha} (\mathbb{L}_{\alpha} - \mathbb{L}_M) \left[I_{\alpha}(\xi) * E(\xi) \right] \end{cases}$
Itération $i + 1$:	
a) $\varepsilon^i(\xi)$ et $\sigma^i(\xi)$ sont connus	
b) Vérifier la convergence	(1.51)
c) $\sigma^i(\xi) = \mathbb{L}_M : \varepsilon^i(\xi) + \sum_{\alpha} (\mathbb{L}_{\alpha} - \mathbb{L}_M) \left[I_{\alpha}(\xi) * \varepsilon^i(\xi) \right]$	
d) $\varepsilon^{i+1}(\xi) = \varepsilon^i(\xi) - \Gamma_0(\xi) : \sigma^i(\xi)$	

Tableau 2 : schéma itératif dans l'approche en déformation

Ici encore, l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (T.F.R) permet d'accélérer considérablement les calculs. La déformation macroscopique, E , est ensuite obtenue à partir de $E = \varepsilon(\xi = 0)$.

Reste enfin à préciser le critère de convergence. Elle est supposée atteinte lorsque le champ de contrainte est en équilibre (i.e. $\text{div}\sigma(x) = 0$). Il est toutefois plus simple de vérifier l'équilibre dans le domaine de Fourier, ce qui paraît d'autant plus évident lorsqu'on utilise le second schéma itératif. Introduisons donc :

$$e^i = \frac{\sqrt{\langle \|\sigma^i(\xi) \cdot \xi\|^2 \rangle_V}}{\|\langle \sigma^i(0) \rangle_V\|} \quad (1.52)$$

qui est une mesure de l'erreur à l'étape i . Le processus itératif est alors stoppé lorsque l'erreur est inférieure à une valeur donnée, $e \leq e_s$. On prendra typiquement $e_s = 10^{-3}$. La vitesse de convergence dépend de plusieurs facteurs tel que le nombre d'onde utilisé ou encore les propriétés élastiques du milieu de référence. Dans le cas d'un matériau biphasé, on choisit généralement pour \mathbb{L}^0 une combinaison des propriétés élastiques de chacune des phases :

$$\mathbb{L}^0 = \beta \mathbb{L}^M + (1 - \beta) \mathbb{L}^I \quad (1.53)$$

avec $0 \leq \beta \leq 1$. En adoptant un critère de convergence portant sur la condition d'équilibre locale la valeur optimale correspond à $\beta = 1/2$, selon Moulinec et al. [53].

Toutefois l'approche en déformation ne permet pas de traiter certains cas particuliers tel que le cas des inclusions rigides correspondant à des propriétés élastiques infinies, $\mathbb{L}^I = +\infty$. Pour traiter ce type de situation, comme on le verra dans la suite, une approche en contrainte, s'avère nécessaire.

1.2.3.2 Méthode de résolution en contrainte

1.2.3.2.1 Le problème d'une déformation libre. Opérateur de Green périodique Δ_0 . La contrainte locale est décomposée en une fluctuation périodique, $\sigma^*(x)$, et

en une contrainte macroscopique, Σ . Formulons le problème d'élasticité, posé sur la cellule élémentaire, pour la contrainte $\sigma^*(x)$:

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma^*(x) = 0 \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot}^T [\mathbb{M}(x) : \sigma^*(x)] = 0 \\ \sigma^*(x) \text{ périodique + conditions de continuité aux interfaces inclusion/matrice} \end{cases} \quad (1.54)$$

Introduisons maintenant le milieu de référence de souplesse \mathbb{M}^0 (uniforme sur la cellule élémentaire). En posant $\mathbb{M}(x) = \mathbb{M}^0 + \delta\mathbb{M}(x)$ (avec $\delta\mathbb{M}(x) = \mathbb{M}(x) - \mathbb{M}^0$), le système (1.54) se réécrit :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma^*(x) = 0 \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot}^T [\mathbb{M}^0 : \sigma^*(x) + \zeta(x)] = 0 \\ \sigma^*(x) \text{ périodique} \end{cases} \quad (1.55)$$

dans laquelle $\zeta(x)$ est une déformation libre définie par :

$$\zeta(x) = \delta\mathbb{M}(x) : \sigma(x) \quad (1.56)$$

Écrivons le système (1.55) dans le domaine de Fourier :

$$\begin{cases} \sigma_{ij}(\xi) \xi_j = 0 \\ a_{ijkl}(\xi) M_{klpq}^0 \sigma_{pq}^*(\xi) = -a_{ijkl} \zeta_{ij}(\xi) \end{cases} \quad (1.57)$$

avec $a_{ijkl}(\xi) = \epsilon_{ikp} \epsilon_{jlp} \xi_p \xi_q$ et ϵ_{ijk} le symbole de permutation. La solution du système (1.57) s'écrit :

$$\sigma^*(\xi) = -\Delta^0(\xi) : \zeta(\xi) \quad (1.58)$$

où $\Delta^0(\xi)$ est le tenseur de Green "en contrainte" défini par :

$$\begin{aligned} \Delta_{ijkl}^0(\xi) = & \frac{2\lambda_0\mu_0}{(\lambda_0 + 2\mu_0)|\xi|^2} (\delta_{ij}\delta_{kl}|\xi|^2 - \delta_{ij}\xi_k\xi_l - \xi_i\xi_j\delta_{kl}) + \mu_0(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\ & - \frac{\mu_0}{|\xi|^2} (\delta_{ik}\xi_j\xi_l + \delta_{il}\xi_j\xi_k + \delta_{jk}\xi_i\xi_l + \delta_{jl}\xi_i\xi_k) + \frac{4\mu_0(\lambda_0 + \mu_0)}{\lambda_0 + 2\mu_0} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l}{|\xi|^4} \end{aligned} \quad (1.59)$$

On notera que les tenseurs de Green en contrainte et en déformation sont liés par les relations :

$$\Delta^0(\xi) = \mathbb{L}^0 - \mathbb{L}^0 : \Gamma^0(\xi) : \mathbb{L}^0, \quad \Gamma^0(\xi) = \mathbb{M}^0 - \mathbb{M}^0 : \Delta^0(\xi) : \mathbb{M}^0 \quad (1.60)$$

La déformation totale $\varepsilon(x)$ s'obtient à partir (1.34) en lui superposant la déformation macroscopique, E :

$$\sigma(\xi) = \Sigma(\xi) - \Delta^0(\xi) : \zeta(\xi) \quad (1.61)$$

avec $\Sigma(\xi) = 0$ si $\xi \neq 0$ et $\Sigma(\xi = 0) = \Sigma$.

1.2.3.2.2 Le schéma itératif On se propose maintenant d'expliciter le schéma itératif dans le cadre de l'approche en contrainte. L'équation (1.61) est une équation intégrale de type Lippmann-Schwinger périodique pour $\sigma(\xi)$. La démarche conduisant au schéma itératif étant la même que dans l'approche en déformation, on sera dans la suite plus bref

quant au détail des calculs. En s'appuyant sur un développement équivalent à (1.40), on montre que la solution du problème peut être déduite du schéma itératif :

$$\sigma^{i+1}(\xi) = \Sigma(\xi) - \Delta^0(\xi) : \left[\delta \mathbb{M}(\xi) * \sigma^i(\xi) \right] \quad (1.62)$$

L'opérateur de Green en contrainte possédant la propriété suivante :

$$-\Delta^0 * \left[\mathbb{M}^0 : \sigma^i(x) \right] = \sigma^i(x) - \Sigma \quad (1.63)$$

le schéma itératif peut se réduire à :

$$\sigma^{i+1}(\xi) = \sigma^i(\xi) - \Delta^0(\xi) : \varepsilon^i(\xi) \quad (1.64)$$

Comme précédemment, on peut décliner deux approches. La première consiste à calculer la loi de comportement dans le domaine réel. Le schéma itératif se présente alors sous la forme :

Initialisation :

$$\begin{cases} \sigma^0(x) = \Sigma & \forall x \in V \\ \varepsilon^0(x) = \mathbb{M}(x) : \sigma^0(x) & \forall x \in V \end{cases}$$

Itération $i + 1$:

- a) $\varepsilon^i(x)$ et $\sigma^i(x)$ sont connus
 - b) $\varepsilon^i(\xi) = \mathcal{F}(\varepsilon^i(x))$
 - c) Vérifier la convergence (1.65)
 - d) $\sigma^{i+1}(\xi) = \sigma^i(\xi) - \Delta_0(\xi) : \varepsilon^i(\xi)$
 - e) $\sigma^{i+1}(x) = \mathcal{F}^{-1}(\sigma^{i+1}(\xi))$
 - f) $\varepsilon^{i+1}(x) = \mathbb{M}(x) : \sigma^{i+1}(x) \quad \forall x \in V$
-

Tableau 3 : schéma itératif de l'approche en contrainte

Avec la seconde méthode, on calcule $\varepsilon^i(\xi)$ en effectuant le produit de convolution $\mathbb{M}(\xi) * \sigma(\xi)$. La transformée de Fourier du tenseur de souplesse $\mathbb{M}(x)$ est définie par :

$$\mathbb{M}(\xi) = \begin{cases} \sum_{\alpha} (\mathbb{M}_{\alpha} - \mathbb{M}_M) I_{\alpha}(\xi) & \text{si } \xi \neq 0 \\ \mathbb{M}_M - f_{\alpha} \sum_{\alpha} (\mathbb{M}_{\alpha} - \mathbb{M}_M) & \text{si } \xi = 0 \end{cases} \quad (1.66)$$

Le schéma itératif utilisé s'écrit alors :

Initialisation :

$$\begin{cases} \sigma^0(\xi) = \Sigma(\xi) \\ \varepsilon^0(\xi) = \mathbb{M}_M : \Sigma(\xi) + \sum_{\alpha} (\mathbb{M}_{\alpha} - \mathbb{M}_M) \left[I_{\alpha}(\xi) * \Sigma(\xi) \right] \end{cases}$$

Itération $i + 1$:

- a) $\varepsilon^i(\xi)$ et $\sigma^i(\xi)$ sont connus
 - b) Vérifier la convergence (1.67)
 - c) $\varepsilon^i(\xi) = \mathbb{M}_M : \sigma^i(\xi) + \sum_{\alpha} (\mathbb{M}_{\alpha} - \mathbb{M}_M) \left[I_{\alpha}(\xi) * \sigma^i(\xi) \right]$
 - d) $\sigma^{i+1}(\xi) = \sigma^i(\xi) - \Delta_0(\xi) : \varepsilon^i(\xi)$
-

Tableau 4 : schéma itératif de l'approche en contrainte

Ici encore, l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (T.F.R) permet d'accélérer considérablement les calculs. La contrainte macroscopique, Σ , est ensuite obtenue à partir de $\Sigma = \sigma(\xi = 0)$.

Reste enfin à préciser le critère de convergence. Ici la contrainte est équilibrée à chaque pas itératif (i.e. $\text{div}\sigma^i(x) = 0$ ou $\sigma^i(\xi).\xi = 0$), la convergence est atteinte lorsque $\varepsilon^i(x)$ vérifie les conditions de compatibilité, c'est à dire lorsque $\text{rot}\text{rot}^T\varepsilon^i(x) = 0$. On définit alors l'erreur, e_i , par :

$$e^i = \frac{\sqrt{\langle \|a_{ijkl}(\xi)\varepsilon_{kl}^i(\xi)\|^2 \rangle_V}}{\|\langle \varepsilon^i(0) \rangle_V\|} \quad (1.68)$$

Le processus itératif est alors stoppé lorsque l'erreur est inférieure à une valeur donnée, $e \leq e_s$. On prendra typiquement $e_s = 10^{-3}$. Dans le cas d'un matériau biphasé, on choisit pour \mathbb{M}^0 une combinaison des propriétés élastiques de chacune des phases :

$$\mathbb{M}^0 = \beta\mathbb{M}^M + (1 - \beta)\mathbb{M}^I \quad (1.69)$$

1.3 Comportement effectif de matériaux poreux en régime statique

L'objet de cette partie est d'étendre le cadre des méthodes d'homogénéisation des milieux périodiques et les méthodes de résolution dans le domaine de Fourier à la détermination des propriétés effectives des milieux poreux. On s'intéresse plus particulièrement à la détermination de la perméabilité.

1.3.1 Méthode de détermination de la perméabilité

1.3.1.1 Le problème d'homogénéisation

Considérons un milieu poreux rigide et périodique avec les pores connectés. Le squelette rigide (que l'on désignera parfois inclusion rigide) occupe le domaine Ω_I de volume V_I , le fluide occupe la partie complémentaire de l'espace, notée Ω_M de volume V_M . On désigne, en suivant les notations introduites précédemment, $\Gamma(x)$ l'aire de la paroi des pores en contact avec le fluide.

Considérons l'écoulement permanent d'un fluide à travers une matrice poreuse. Quand les vitesses sont suffisamment petites, le phénomène est linéaire (les termes non linéaires d'origine inertiels sont donc négligés). L'écoulement est alors régi par les équations de Stokes avec une condition d'adhérence sur la paroi :

$$\mu\Delta v(x) + \text{grad}p(x) = 0, \quad \text{div}v(x) = 0, \quad \forall x \in \Gamma(x) : v(x) = 0 \quad (1.70)$$

Dans l'équation de Stokes, μ désigne la viscosité dynamique du fluide, Δ est l'opérateur Laplacien et p est la pression du fluide. La seconde relation exprime la condition d'incompressibilité de l'écoulement et la dernière exprime la condition d'adhérence.

La contrainte, $\sigma(x)$ est définie en tout point de Ω_M par :

$$\sigma = pI + 2\mu\bar{d} \quad (1.71)$$

où I est l'identité d'ordre deux, d est le taux de déformation. On note \bar{d} sa partie déviatorique et d_m sa partie moyenne. L'incompressibilité du fluide implique ici que $d_m = 0$. La contrainte dans l'inclusion rigide étant indéterminée, nous la prolongeons par continuité

(tel qu'on le ferait pour la déformation dans une cavité en élasticité). L'écoulement du fluide à travers le squelette est provoqué par un gradient de pression macroscopique, noté G . Ainsi la contrainte, dans la cellule élémentaire, s'écrit :

$$\sigma(x) = \sigma^*(x) + \Sigma(x) \quad (1.72)$$

où $\Sigma(x)$ est le tenseur des contraintes macroscopiques, de déviateur nul, et tel que $\Sigma_m(x) = G.x$. Le tenseur $\sigma^*(x)$ est un champ de contrainte périodique sur la cellule. On notera donc que la partie déviatorique du champ de contrainte est périodique $\bar{\sigma}(x) = \bar{\sigma}^*(x)$ tandis que la contrainte moyenne $\sigma_m(x)$ se décompose en une partie périodique, $\sigma_m^*(x)$, et en une dérive linéaire $\Sigma_m = G.x$. Notons que nous faisons ici la distinction entre contrainte moyenne, $\sigma_m(x)$, et pression du fluide $p(x)$. La contrainte moyenne $\sigma_m(x)$ est définie en tout point de la cellule, par conséquent également dans l'inclusion rigide, tandis que $p(x)$ ne possède un sens que dans la phase fluide.

La vitesse $v(x)$ dépend linéairement du gradient de pression G , ce que l'on peut écrire sous la forme de la pseudo-règle de localisation suivante :

$$v(x) = -\frac{1}{\mu}k(x).G \quad (1.73)$$

où $k(x)$ est un tenseur d'ordre deux qui dépend du vecteur position x . Prenons la moyenne volumique des deux membres, on obtient :

$$\langle v(x) \rangle_V = -\frac{1}{\mu}K.G \quad (1.74)$$

où l'on a posé :

$$K = \frac{1}{V} \int_V k(x)dV \quad (1.75)$$

La relation (1.74) est une équation macroscopique. Toutefois il ne s'agit pas encore de la Loi de Darcy : il reste à démontrer que la moyenne de volume du champ de vitesse $\langle v(x) \rangle_V$ est un flux (J.L. Auriault), ce qui n'est pas vrai pour tout champ de vecteur. Partant de l'identité :

$$\operatorname{div} [x \otimes v(x)] = v(x) + x \operatorname{div} v(x) = v(x) \quad (1.76)$$

L'intégration sur le volume de $v(x)$ donne donc :

$$\langle v(x) \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V v(x)dV = \frac{1}{V} \int_{\partial V} (v(x).n)x dS \quad (1.77)$$

ici $v(x)$ est un champ périodique qui prend des valeurs identiques sur les faces opposées de la cellule tandis que n prend des valeurs opposées. S'agissant des valeurs prises par x , cela dépend de la forme de la cellule de base. Dans (1.77) la partie périodique de x conduit à une intégrale nulle, seule la partie antipériodique de x est donc à conserver. Prenons le cas de la cellule carrée de cotés $2b$, x prend les valeurs $\pm be_1 + x_2e_2$ et $x_1e_1 + \pm be_2$ successivement tandis que le vecteur n prendra alors les valeurs $\pm e_1$ et $\pm e_2$. On peut donc noter que la partie antipériodique de x dans ce cas précis est bn . Dans le cas d'une cellule carrée, on a donc pour (1.77) :

$$\langle v \rangle_V = \frac{1}{4b} \int_{\partial V} (v(x).n)n dS \quad (1.78)$$

ainsi on a suivant e_1 et e_2 :

$$\langle v_1(x) \rangle_V = \frac{1}{2b} \int_{x_1=b} v_1(x) dx_2 \quad (1.79)$$

$$\langle v_2(x) \rangle_V = \frac{1}{2b} \int_{x_2=b} v_2(x) dx_1 \quad (1.80)$$

qui montre que $\langle v_i(x) \rangle_V$ est bien un flux dans la direction e_i . La relation (1.74) est donc bien la relation de Darcy. Ce résultat se généralise, bien sûr, à d'autres géométries de cellules.

Le gradient de pression, G , constitue donc le "paramètre de chargement", au vu de la relation de Darcy (1.74), la détermination de la perméabilité requiert celle du champ de vitesse dans la cellule de base.

1.3.1.2 Le schéma itératif

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, il s'agit maintenant de déterminer le champ de vitesse dans la cellule de base fin de déterminer les composantes du tenseur K (perméabilité). La méthode de résolution est celle décrite au chapitre précédent. Réécrivons les relations (1.70) sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma(x) = 0 \\ d = \mathbb{M}_M : \sigma \\ d = \frac{1}{2} (\nabla v + \nabla^T v) \end{cases} \quad (1.81)$$

pour tout $x \in \Omega_M$ et où :

$$\mathbb{M}_M = \frac{1}{2\mu} \mathbb{K} \quad (1.82)$$

avec $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$ où \mathbb{I} est le tenseur d'identité d'ordre 4 symétrique et $J_{ijkl} = \delta_{ij}\delta_{kl}/3$. La seconde relation dans (1.81) exprime à la fois la loi de comportement du fluide visqueux, $\bar{d} = \bar{\sigma}/(2\mu)$, et la condition d'incompressibilité, $\operatorname{div} v(x) = 0$. Dans la phase rigide, comme précédemment mentionné, on prolonge par continuité le champ de contrainte tandis que la vitesse et le taux de déformation y sont nuls. En définitive, on peut écrire sous forme condensée :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma(x) = 0 \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot}^T [\mathbb{M}(x) : \sigma(x)] = 0 \end{cases} \quad (1.83)$$

vraie pour tout $x \in \Omega$ et dans laquelle on a posé :

$$\mathbb{M}(x) = \begin{cases} \mathbb{M}_M & \forall x \in \Omega_M \\ 0 & \forall x \in \Omega_I \end{cases} \quad (1.84)$$

Le champ de contrainte local est décomposé sous la forme $\sigma(x) = \sigma(x)^* + \Sigma(x)$ (où $\Sigma_m = G.x$). Clairement, le problème, tel qu'il est posé, nécessite d'utiliser la méthode "en contrainte" : d'une part, parce que le problème est piloté par la contrainte macroscopique, d'autre part du fait de la présence de l'inclusion rigide.

Toutefois, la particularité est la dépendance du champ de contrainte macroscopique avec le vecteur position, x . On se propose d'examiner en quoi une dépendance linéaire de champ

de contrainte macroscopique modifie le schéma itératif. En introduisant dans (1.83) le milieu de référence, de module \mathbb{M}^0 , le champ périodique vérifie :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma^*(x) + G = 0 \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot}^T [\mathbb{M}^0 : \sigma^*(x) + \zeta(x)] = 0 \end{cases} \quad (1.85)$$

où $\zeta(x) = \delta \mathbb{M}(x) : \sigma(x)$ est un taux de déformation libre. La phase fluide étant incompressible et l'inclusion rigide, on peut remplacer dans l'expression de $\zeta(x)$, la contrainte $\sigma(x)$ par son déviateur $\bar{\sigma}(x)$. La contrainte macroscopique étant de nature hydrostatique on a également $\bar{\sigma}(x) = \bar{\sigma}^*$. Le tenseur des taux de déformations libres $\zeta(x)$ est donc lui même périodique (notons toutefois que cette dernière hypothèse n'est pas vraie de manière générale : il faut que $\Sigma(x)$ soit linéaire par rapport à x et de déviateur nul).

Il est intéressant de noter que dans la première relation (1.85), le vecteur G apparaît comme un champ de force volumique. Dans le domaine de Fourier les équations (1.85), s'écrivent :

$$\begin{cases} i\sigma_{ij}^*(\xi)\xi_j = -G_i(\xi) \\ a_{ijkl}(\xi)\bar{\sigma}_{kl}^*(\xi) = -2\mu_0 a_{ijkl}(\xi)\zeta_{kl}(\xi) \end{cases} \quad (1.86)$$

où $G_i(\xi) = 0$ si $\xi \neq 0$ et $G_i(\xi = 0) = G_i$. La solution de (1.86) s'écrit :

$$\sigma(\xi) = \Sigma(\xi) - \Delta^0(\xi) : \zeta(\xi) \quad (1.87)$$

où Δ^0 est le tenseur de Green "en contrainte" déjà introduit au premier chapitre, pour un milieu de référence incompressible (obtenu en posant $\lambda_0 \rightarrow +\infty$) :

$$\begin{aligned} \Delta_{ijkl}^0(\xi) &= \frac{2\mu_0}{|\xi|^2} (\delta_{ij}\delta_{kl}|\xi|^2 - \delta_{ij}\xi_k\xi_l - \xi_i\xi_j\delta_{kl}) + \mu_0(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\ &\quad - \frac{\mu_0}{|\xi|^2} (\delta_{ik}\xi_j\xi_l + \delta_{il}\xi_j\xi_k + \delta_{jk}\xi_i\xi_l + \delta_{jl}\xi_i\xi_k) + \frac{4\mu_0}{|\xi|^4} \xi_i\xi_j\xi_k\xi_l \end{aligned} \quad (1.88)$$

Démonstration de (1.87) : tout d'abord utilisons la propriété suivante :

$$\epsilon_{ipk}\epsilon_{jqk} = \delta_{ij}(\delta_{pq}\delta_{kl} - \delta_{pl}\delta_{qk}) + \delta_{iq}(\delta_{jk}\delta_{pl} - \delta_{jp}\delta_{kl}) + \delta_{il}(\delta_{jp}\delta_{qk} - \delta_{jk}\delta_{pq}) \quad (1.89)$$

Ce qui permet alors de réécrire $a_{ijkl}(\xi)$ sous la forme :

$$\begin{aligned} a_{ijkl}(\xi) &= \delta_{ij}\delta_{kl}|\xi|^2 - \frac{1}{2} \left[\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} \right] |\xi|^2 \\ &\quad - (\delta_{ij}\xi_k\xi_l + \delta_{kl}\xi_i\xi_j) + \frac{1}{2} \left[\delta_{ik}\xi_j\xi_l + \delta_{il}\xi_j\xi_k + \delta_{jk}\xi_i\xi_l + \delta_{jl}\xi_i\xi_k \right] \end{aligned} \quad (1.90)$$

En combinant les relations (1.86) avec (1.90), on obtient :

$$\begin{aligned} a_{ijkl}(\xi)\bar{\sigma}_{kl}^*(\xi) &= 2(\delta_{ij}\xi^2 - \xi_i\xi_j)\sigma_m^*(\xi) - \sigma_{ij}^*(\xi)\xi^2 - \sigma_{kl}^*(\xi)\xi_k\xi_l\delta_{ij} + \sigma_{ik}^*(\xi)\xi_k\xi_j + \sigma_{jk}^*(\xi)\xi_k\xi_i \\ &= 2(\delta_{ij}\xi^2 - \xi_i\xi_j)\sigma_m^*(\xi) - \sigma_{ij}^*(\xi)\xi^2 + G_k\xi_k\delta_{ij} - G_i\xi_j - G_j\xi_i \end{aligned} \quad (1.91)$$

En notant que $G_i(\xi)\xi_j = 0$ dans la relation précédente, on a donc :

$$2(\delta_{ij}\xi^2 - \xi_i\xi_j)\sigma_m^*(\xi) - \sigma_{ij}^*(\xi)\xi^2 = -2\mu_0 a_{ijkl}(\xi)\zeta_{kl}(\xi) \quad (1.92)$$

En outre, la partie moyenne de $\sigma^*(\xi)$ s'écrit :

$$\sigma_m^*(\xi)\xi^2 = 2\mu_0 \zeta_{kl}(\xi)\xi_k\xi_l \quad (1.93)$$

Reportant cette expression dans (1.92), on obtient :

$$\sigma_{ij}^*(\xi) = \frac{2\mu_0}{|\xi|^2} \left[a_{ijkl}(\xi) - \frac{2}{|\xi|^2} (\delta_{ij}|\xi|^2 - \xi_i\xi_j) a_{iikl}(\xi) \right] \zeta_{kl}(\xi) = -\Delta_{ijkl}^0(\xi) \zeta_{kl}(\xi) \quad (1.94)$$

La contrainte $\sigma_{ij}(\xi)$ est alors obtenue en posant $\sigma(\xi) = \sigma^*(\xi) + \Sigma(\xi)$, où $\sigma^*(\xi)$ est donné par la relation précédente, ce qui conduit alors à (1.87).

Exprimons maintenant le schéma itératif adopté, tout d'abord précisons que l'équation (1.87) est en tout point similaire à (1.61). Le schéma s'écrit donc :

a)	$d^i(\xi)$ et $\sigma^i(\xi)$ sont connus	
b)	Vérifier la convergence	
c)	$d^i(\xi) = \mathbb{M}_M : \sigma^i(\xi) + \sum_{\alpha} (\mathbb{M}_{\alpha} - \mathbb{M}_M) \left[I_{\alpha}(\xi) * \sigma^i(\xi) \right]$	(1.95)
d)	$\sigma^{i+1}(\xi) = \sigma^i(\xi) - \Delta_0(\xi) : d^i(\xi)$	

Tableau 5 : schéma itératif

Dans ce schéma, la fonction caractéristique est supposée connue, ce qui suggère que la forme des inclusions est simple, c'est à dire que I_{α} possède une expression analytique explicite. Dans le cas où la forme des inclusions est quelconque, on pourra utiliser un schéma du même type que celui donné dans le tableau 3. Il reste également à préciser la phase d'initialisation, ceci fait l'objet de la section suivante.

Explicitons maintenant la démarche adoptée pour la détermination du champ de vitesse dans la cellule élémentaire. On rappelle que l'expression du champ de vitesse nous conduira dans un second temps à l'expression des composantes du tenseur de perméabilité en utilisant (1.74). Le champ de vitesse est obtenu par intégration du taux de déformation, $d(x)$, obtenu à l'étape *c* du schéma itératif, la convergence du schéma étant supposée atteinte. On écrira donc dans l'espace de Fourier (en utilisant la condition d'incompressibilité, $v_i(\xi)\xi_i = 0$) :

$$v_i(\xi) = \frac{2i}{|\xi|^2} d_{ij}(\xi) \xi_j \quad (1.96)$$

Notons toutefois qu'à ce stade nous n'avons à aucun moment précisé la condition de vitesse nulle dans l'inclusion. Le taux de déformation est nul dans l'inclusion, toutefois après l'intégration (1.96), le champ de vitesse obtenu est défini à déplacement rigide près. La suppression de ce déplacement rigide est effectué dans l'espace réel.

1.3.1.3 Le problème du choix de $\sigma^0(\xi)$

On peut donc observer que la relation (1.87) est similaire à celle obtenue dans le cas d'un composite élastique soumis à une contrainte moyenne. La résolution du problème est donc effectuée en appliquant les schémas itératifs donnés dans la sous-section (1.2.3.2.2). Toutefois, lorsque l'on applique, conformément aux schémas donnés dans les tableaux 3 et 4, $\sigma^0 = \Sigma$ comme premier terme itératif, $\sigma^0(\xi)$ ne conduit pas à la solution du problème. En effet, le champ de déformation qui résulte du champ de contrainte $\Sigma(\xi)$ est $\varepsilon^0(\xi) = 0$. Par conséquent, on a $\sigma^1(\xi) = \Sigma(\xi)$. Ainsi le schéma converge dès la première itération, la solution obtenue est $\sigma(x) = \Sigma(x)$ mais ne constitue pas la solution du problème étudié. Pour s'en convaincre, il suffit simplement d'observer que cette solution ne vérifie pas l'équilibre interne, on a $\text{div}(\sigma) = G \neq 0$.

Ceci nous conduit donc à reconsidérer non pas le schéma itératif, qui est valide, mais plutôt le choix de la contrainte initiale, $\sigma^0(\xi)$ que l'on injecte dans le schéma itératif. Pour induire une fluctuation sur le champ de contrainte, le terme $-\Delta^0(\xi) : \varepsilon^i(\xi)$ doit être non nul, ce qui nécessite que la partie déviatorique de $\sigma^0(\xi)$ soit non nulle. Afin de déterminer l'expression de $\sigma^0(\xi)$, on se propose d'examiner le cas particulier de plan l'écoulement entre des plaques parallèles. On considère donc une cellule carrée de côté $2b$ contenant une inclusion rigide, rectangulaire, de longueur $2b$, suivant l'axe Ox_1 , et d'épaisseur $2a$, suivant l'axe Ox_2 . L'inclusion rigide étant centrée à l'origine O de la cellule. Notons qu'il ne s'agit pas de l'unique manière de définir la cellule élémentaire. Cette

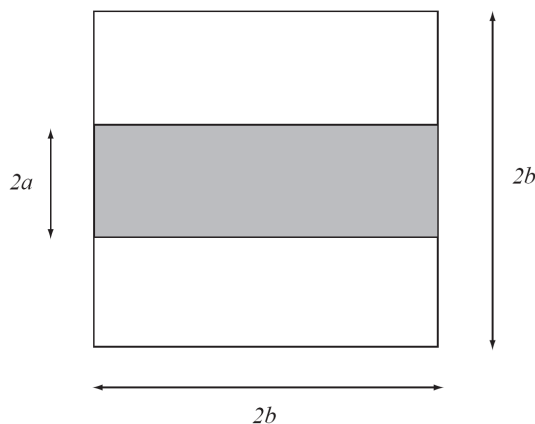


FIGURE 1.2 – Cellule de base d'un écoulement entre plans parallèles.

disposition se justifiera dans la suite. L'écoulement est produit en imposant un gradient de pression suivant l'axe Ox_1 . On pose donc $\Sigma_m(x) = G_1 x_1$. La solution des équations (1.70) est la solution classique de l'écoulement de Poiseuille. Le profil du champ de vitesse est parabolique et s'écrit :

$$\begin{aligned} v_1(x_2) &= -\frac{G_1}{2\mu}(x_2 - a)(x_2 + a - 2b) & a < x_2 < b \\ v_1(x_2) &= 0 & -a < x_2 < a \\ v_1(x_2) &= -\frac{G_1}{2\mu}(x_2 + a)(x_2 - a + 2b) & -b < x_2 < -a \end{aligned} \quad (1.97)$$

Ce champ de vitesse induit donc un cisaillement σ_{12} défini par :

$$\begin{aligned} \sigma_{12}(x_2) &= -G_1(x_2 - b) & a < x_2 < b \\ \sigma_{12}(x_2) &= -G_1(x_2 + b) & -b < x_2 < -a \end{aligned} \quad (1.98)$$

le champ de contrainte étant indéterminé dans le domaine $-a < x_2 < a$. On observe que la partie déviatorique est bien périodique sur la cellule de base et s'équilibre avec la contrainte moyenne $\Sigma_m(x) = G_1 x_1$ dans la phase fluide. On peut prolonger le champ de contrainte dans l'inclusion rigide en posant :

$$\begin{cases} \sigma_{12} = -G_1 \left(1 - \frac{b}{a}\right) x_2 \\ \sigma_{11} = G_1 \left(1 - \frac{b}{a}\right) x_1 \\ \sigma_{22} = G_1 x_1 \end{cases} \quad \text{pour : } a < x_2 < -a \quad (1.99)$$

Nous verrons dans la section suivante, comment on peut s'inspirer de cette solution pour choisir $\sigma^0(\xi)$.

1.3.2 Mise en oeuvre : écoulement autour de cylindres

On se propose ici de déterminer les propriétés d'un écoulement incompressible autour d'un réseau périodiques de cylindres indéformables.

1.3.2.1 Description du problème

On définit la cellule de base, carré de coté $2b$ contenant un cylindre de rayon a (c.f. figure 1.3). On définit la concentration d'inclusion par le rapport $c = \pi a^2 / (4b^2)$ ou encore la porosité $\varepsilon = 1 - c$. la concentration maximale d'inclusion rigide est $c = \pi/4 \simeq 0.785$, lorsque $a = b$, ainsi $0 < c < 0.785$ et $0.215 \leq \varepsilon \leq 1$.

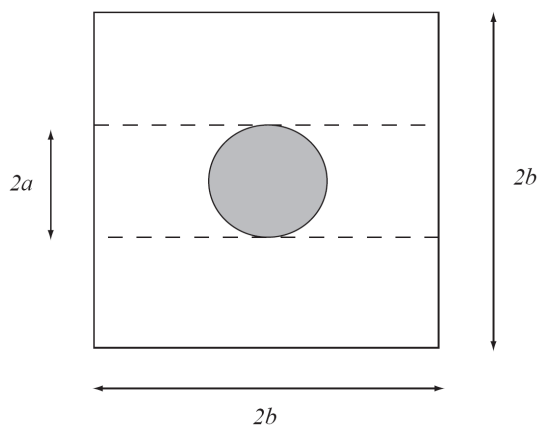


FIGURE 1.3 – Cellule de base d'un écoulement autour de cylindres.

Dans le cas d'une cellule constituée de deux phases, la loi de comportement s'écrit (phase c du tableau 5) :

$$d^i(\xi) = \mathbb{M}_M : \sigma^i(\xi) - \mathbb{M}_M : \left[I_I(\xi) * \sigma^i(\xi) \right] \quad (1.100)$$

où $I_I(\xi)$ est la fonction caractéristique de l'inclusion. Pour une forme cylindrique elle est donnée par [56] :

$$I_I(\xi) = \frac{\pi a}{2|\xi|b^2} J_1(a|\xi|) \quad (1.101)$$

où $J_1(x)$ est la fonction de Bessel de première espèce et d'ordre 1. La valeur choisie pour le premier terme du schéma itératif, c'est à dire la valeur de $\sigma^0(\xi)$, doit être précisée. On considère l'écoulement créé par un gradient de pression dans la direction Ox_1 , on pose donc $G_2 = G_3 = 0$ et on choisit pour le premier terme de l'itération la solution du problème décrit dans la section 1.3.1.3. C'est à dire que l'on considère l'écoulement autour d'un plan d'épaisseur $2a$.

1.3.2.2 Applications

On présente quelques résultats dans le cas d'un écoulement autour d'un cylindre indéformable centré à l'origine. Le rayon du cylindre, a , est choisi tel que $a = b/2$. On rappelle

que b définit la longueur du demi-côté de la cellule de base. La cellule de base, décrite dans la section précédente, est soumise à un gradient de pression, G_1 , c'est à dire dans la direction Ox_1 provoquant ainsi un écoulement du fluide dans la même direction Ox_1 . La composante \bar{v}_1 de la vitesse réduite $\bar{v}(x) = v(x)/(2b)$ est tracée sur les figures 1.4 et 1.5 :

- (i) en fonction de $\bar{x}_2 = x_2/(2b)$ pour $\bar{x}_1 = x_1/(2b) = 0$,
- (ii) en fonction de $\bar{x}_1 = x_1/(2b)$ pour $\bar{x}_2 = x_2/(2b) = 0$.

On observe sur les deux figures que la vitesse est bien nulle dans l'inclusion. On remarque également que la vitesse respecte la condition d'adhérence sur la paroi de l'inclusion, ce qui satisfait les conditions aux limites.

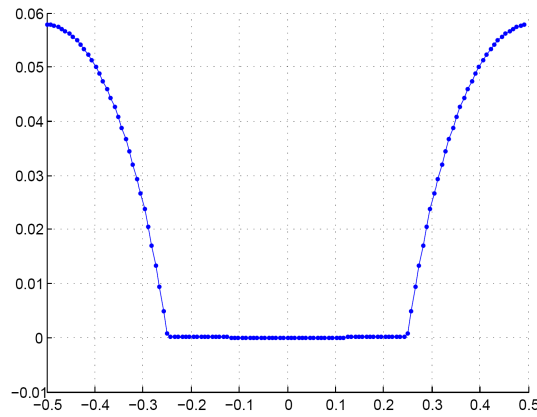


FIGURE 1.4 – Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 0$

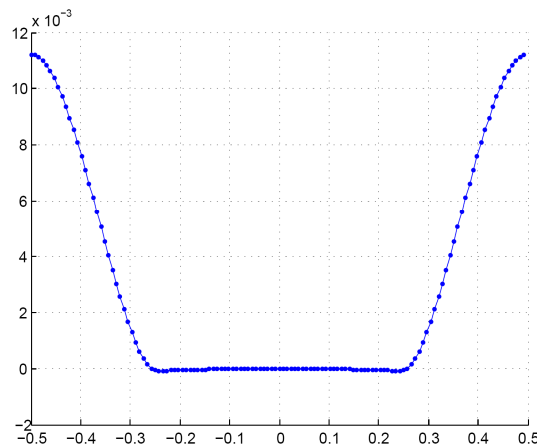


FIGURE 1.5 – Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 0$

Les variations de la composante réduite $v_2/(2b)$ sont tracées sur figures 1.6 et 1.7 :

- (i) en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 1/4$.
- (ii) en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 1/4$.

Les mêmes remarques que précédemment peuvent être faites : les conditions d'adhérence et la condition de vitesse nulle à l'intérieur de l'inclusion sont satisfaites.

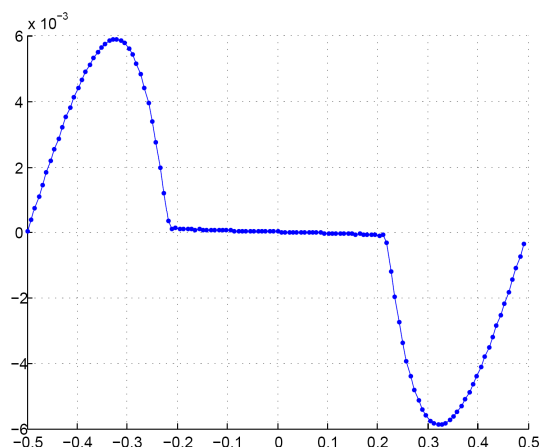


FIGURE 1.6 – Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 1/4$

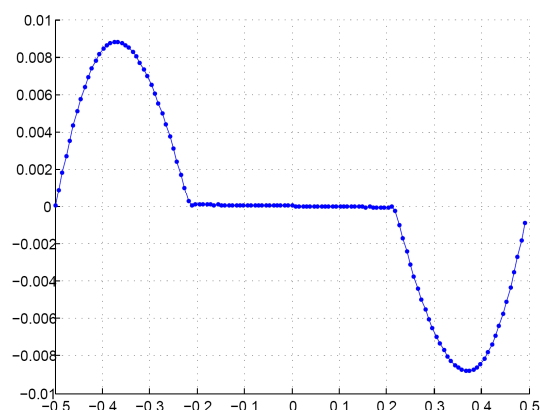


FIGURE 1.7 – Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 1/4$

On se propose maintenant d'examiner la perméabilité d'un milieu poreux constitué de cylindres indéformables. Le problème étant plan, il s'agit donc de déterminer les composantes K_{11} , K_{12} , K_{21} et K_{22} .

K_{11} et K_{12} peuvent être déterminées en imposant un gradient de contrainte dans la direction Ox_1 , c'est à dire en posant $G_2 = 0$, puis en calculant moyenne des composantes v_1 et v_2 du champ de vitesse. K_{11} et K_{12} sont alors déterminées en utilisant la relation (1.74) :

$$K_{11} = -\frac{\mu V_1}{G_1}, \quad K_{12} = -\frac{\mu V_2}{G_1} \quad (1.102)$$

Néanmoins, compte tenu de la symétrie du problème posé la moyenne de v_2 sur la cellule de base, c'est à dire V_2 , est nulle et on a alors $K_{12} = 0$.

K_{21} et K_{22} peuvent être obtenues de manière similaire en imposant un gradient de pression dans la direction Ox_2 , c'est à dire en posant $G_1 = 0$. Toutefois, en invoquant à nouveau des conditions de symétries, on a $K_{21} = 0$ et $K_{22} = K_{11}$. On peut ainsi écrire le

tenseur K sous la forme $K = kI_2$ où I_2 est le tenseur identité d'ordre deux (dans le plan $0x_1x_2$).

Pour résumer, la perméabilité k peut donc être obtenue en imposant un gradient de contrainte dans la direction G_1 et en calculant la moyenne de v_1 , soit V_1 .

La perméabilité réduite $\bar{k} = k/(4b^2)$ (où $4b^2$ définit l'aire de la cellule de base) est tracée sur la figure 1.8 en fonction de la porosité ε définie par :

$$\varepsilon = 1 - \frac{\pi a^2}{4b^2} \quad (1.103)$$

ε prenant des valeurs comprises entre $\varepsilon = 0.215$ pour $a = b$ (la vitesse est nulle en tout point de la cellule, la perméabilité est donc nulle) et $\varepsilon = 1$ correspondant au cas $a = 0$.

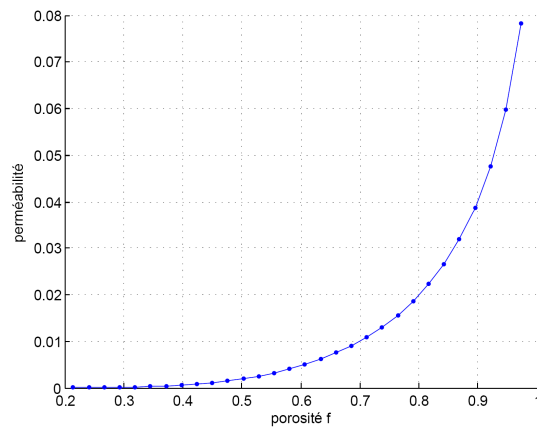


FIGURE 1.8 – Variation de la perméabilité réduite \bar{k} en fonction de la porosité ε .

1.3.3 Prise en compte du glissement

L'objet de cette dernière section est d'introduire une condition de glissement sur l'interface fluide-solide et d'en étudier l'influence sur le calcul de la perméabilité. La première sous-section est dédiée à la présentation de la méthodologie employée pour introduire une discontinuité du champ de vitesse sur la paroi. Dans la seconde sous-section, nous discutons les résultats obtenus dans le cas d'un écoulement autour d'un cylindre.

1.3.3.1 Méthodologie

La condition de glissement sur la paroi de l'inclusion est modélisée par le système :

$$[v.t]_{\Gamma(x)} = \gamma (\text{grad}(v) : (n \otimes t))_{x \in \Gamma(x)}, \quad [v.n]_{\Gamma(x)} = 0 \quad (1.104)$$

où γ est une constante qui a la dimension d'une longueur définissant l'amplitude du glissement sur la paroi de l'inclusion. La méthodologie appliquée est celle décrite par Benveniste et al. [10] dans le cadre de l'élasticité linéaire bidimensionnelle. Elle consiste à considérer une phase intermédiaire pour décrire le comportement des interfaces imparfaites. On se propose ici d'étendre ces résultats au cas d'une interface fluide/solide. En introduisant donc une phase intermédiaire, d'épaisseur e et de viscosité dynamique μ_E , le milieu est régi par les équations :

$$\begin{cases} \text{div} \sigma(x) = 0 \\ d = \mathbb{M}_E : \sigma \\ d = \frac{1}{2} (\nabla v + \nabla^T v) \end{cases} \quad (1.105)$$

avec :

$$\mathbb{M}_E = \frac{1}{2\mu_E} \mathbb{K} \quad (1.106)$$

On pose :

$$\mu_E = \frac{e}{2b} \tilde{\mu}_E \quad (1.107)$$

Si l'on considère que $e/(2b) \ll 1$, on montre alors, voir [10], que l'on introduit une discontinuité du champ de vitesse sur la paroi de l'inclusion du type :

$$[v.t]_{\Gamma(x)} = \frac{2\mu b}{\tilde{\mu}_E} (\text{grad}(v) : (n \otimes t))_{x \in \Gamma(x)}, \quad [v.n]_{\Gamma(x)} = 0 \quad (1.108)$$

On obtient ainsi la relation suivante :

$$\gamma = \frac{2\mu b}{\tilde{\mu}_E} \quad (1.109)$$

On peut donc créer une discontinuité d'amplitude γ en contrôlant le rapport $\mu/\tilde{\mu}_E$. L'adhérence du fluide à la paroi correspond au cas où $\mu_E = +\infty$ et donc $\gamma = 0$.

La prise en compte d'une phase supplémentaire ne modifie pas, sous sa forme générale, le schéma itératif décrit dans le tableau 5. Il reste néanmoins à préciser comment est calculé de taux de déformation $d^i(\xi)$ à l'étape c . La prise en compte de la phase supplémentaire de souplesse \mathbb{M}_E conduit à :

$$d^i(\xi) = \mathbb{M}_M : \sigma^i(\xi) - \mathbb{M}_M : \left[I_I(\xi) * \sigma^i(\xi) \right] + (\mathbb{M}_E - \mathbb{M}_M) : \left[I_E(\xi) * \sigma^i(\xi) \right] \quad (1.110)$$

où $I_E(\xi)$ est la fonction caractéristique de la phase intermédiaire. Dans le cas où l'inclusion est de forme cylindrique, on a :

$$I_E(\xi) = \frac{\pi(a+e)}{2|\xi|b^2} J_1[(a+e)|\xi|] - \frac{\pi a}{2|\xi|b^2} J_1(a|\xi|) \quad (1.111)$$

En considérant le cas limite $e \rightarrow 0$, on a :

$$I_E(\xi) \rightarrow 2\pi a J_0(a\xi)e + o(e^2) = \tilde{I}_E(\xi) \frac{e}{2b} + o(e^2) \quad (1.112)$$

où l'on a posé :

$$\tilde{I}_E(\xi) = 4\pi ab J_0(a\xi) \quad (1.113)$$

$J_0(x)$ est la fonction de Bessel de première espèce et d'ordre 0. Le taux de déformation est alors donné par :

$$d^i(\xi) = \mathbb{M}_M : \sigma^i(\xi) - \mathbb{M}_M : [I_I(\xi) * \sigma^i(\xi)] + \tilde{\mathbb{M}}_E : [\tilde{I}_E(\xi) * \sigma^i(\xi)] \quad (1.114)$$

avec :

$$\tilde{\mathbb{M}}_E = \frac{1}{2\tilde{\mu}_E} \mathbb{K} \quad (1.115)$$

1.3.3.2 Applications

On se propose maintenant d'illustrer la méthode en considérant à nouveau le cas d'un écoulement autour d'un cylindre indéformable de rayon a . La cellule de base est soumise au gradient de pression G_1 provoquant ainsi un écoulement dans la même direction Ox_1 . Les variations de la composante $\bar{v}_1(x)$ de la vitesse réduite $\bar{v}(x)/(2b)$ sont représentées sur les figures 1.9 et 1.10 :

- (i) en fonction de $\bar{x}_2 = x_2/(2b)$ pour $\bar{x}_1 = x_1/(2b) = 0$,
- (ii) en fonction de $\bar{x}_1 = x_1/(2b)$ pour $\bar{x}_2 = x_2/(2b) = 0$.

On observe que la vitesse est bien nulle dans l'inclusion. On note cependant la présence d'une discontinuité du champ de vitesse sur la paroi de l'inclusion cylindrique. Cette discontinuité du champ de vitesse résulte de l'introduction de la phase intermédiaire à l'interface solide/fluide.

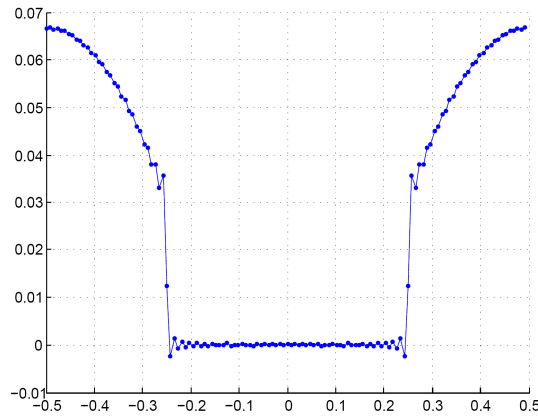


FIGURE 1.9 – Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 0$

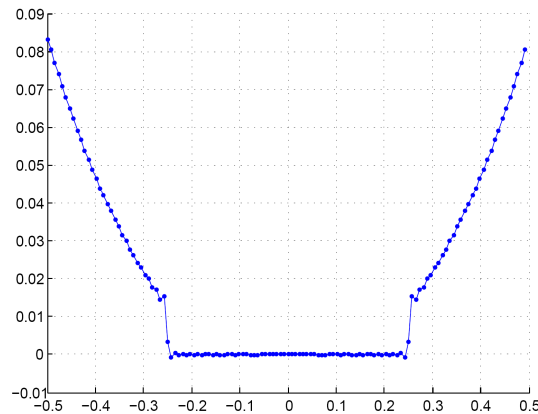


FIGURE 1.10 – Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 0$

La composante $\bar{v}_2(x)$ de la vitesse réduite est tracée sur les figures 1.11 et 1.12 :

(i) en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 1/4$.

(ii) en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 1/4$.

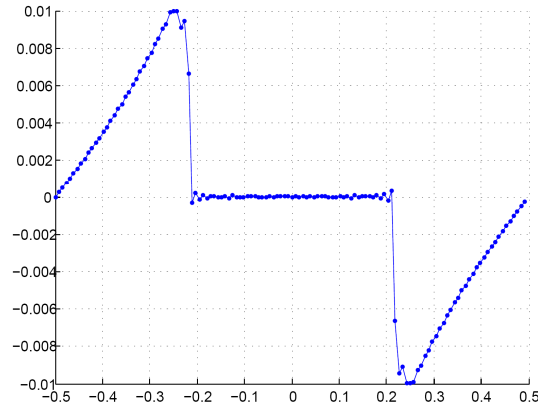


FIGURE 1.11 – Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 1/4$

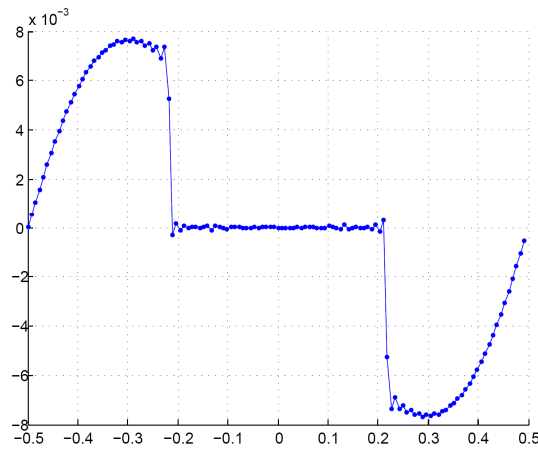


FIGURE 1.12 – Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 1/4$

Examinons enfin la perméabilité. On rappelle que, dans le cas étudié, on a $K = kI_2$ où I_2 est le tenseur identité d'ordre deux dans le plan Ox_1x_2 . La perméabilité réduite $\bar{k} = k/(4b^2)$ est représentée en fonction de la porosité ε sur la Figure 1.13 pour des conditions d'adhérence $\bar{\gamma} = 0$ et pour des conditions de glissement avec $\bar{\gamma} = 0.1$. Les résultats montrent clairement l'influence du glissement sur la perméabilité. Ainsi, K dépend non seulement de la porosité, ε , mais dépend également du rapport $\bar{\gamma}$: lorsque ce dernier augmente la perméabilité augmente.

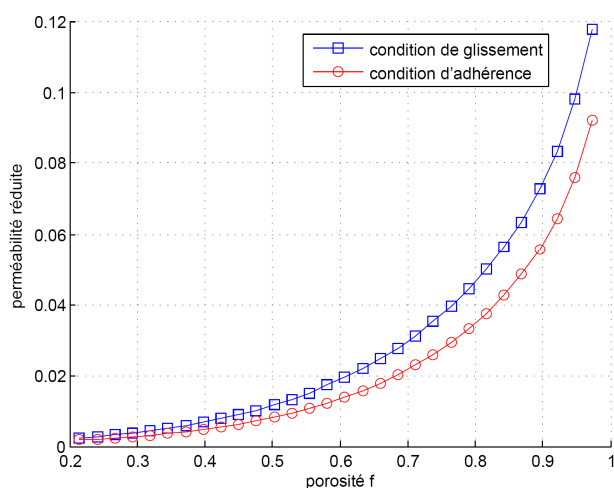


FIGURE 1.13 – Variation de la perméabilité réduite \bar{k} en fonction de la porosité ε . Comparaison entre la condition d'adhérence $\gamma/(2b) = 0$ et la condition de glissement avec $\bar{\gamma} = 0.1$

1.4 Conclusion

Une méthode de résolution numérique pour la détermination de la perméabilité d'un milieu micro-poreux est proposée. Cette méthode s'inspire des techniques d'homogénéisation périodique, largement utilisée pour la détermination des propriétés effectives des matériaux composites. La résolution numérique proprement dite est effectuée dans le domaine de Fourier et repose sur un schéma itératif. Deux niveaux de modélisation ont été proposés en prenant en compte des conditions d'adhérence ou des conditions de glissement sur la paroi des inclusions indéformables. Afin de valider l'approche, des applications au cas d'un écoulement à travers un réseau périodique de cylindres ont été considérées. Les résultats mettent en évidence une dépendance de la perméabilité avec la longueur caractéristique introduite dans la condition de glissement sur la paroi : on montre que le glissement augmente de manière significative la perméabilité d'un milieu poreux.

Chapitre 2

Présentation des techniques d'homogénéisation

Deux techniques de modélisation des phénomènes de transport dans des milieux poreux saturés par un fluide monoconstituant sont présentées dans ce chapitre. La première est basée sur des développements asymptotiques et la seconde est basée sur un principe de décomposition spatiale suivie de calculs de moyennes des opérateurs de différentiation.

2.1 Méthode des développements asymptotiques

La méthode d'homogénéisation par la technique des développements asymptotiques doit être utilisée dans des conditions bien adaptées (Auriault, 2001 [6]). La condition fondamentale, qui est commune à toutes les techniques d'homogénéisation même si elle est seulement implicite pour certaines méthodes, est la séparation des échelles, à savoir la séparation entre l'échelle microscopique (échelle d'hétérogénéité) et l'échelle macroscopique à laquelle le milieu équivalent est recherché. Si les échelles sont séparées, cela signifie que le milieu contient un grand nombre d'hétérogénéités dont la dimension est très petite par rapport à l'échelle macroscopique. Par conséquent, il existe un volume qui est plus petit que le volume macroscopique et qui est, cependant, assez grand pour contenir un nombre suffisant d'hétérogénéités pour représenter le milieu et les phénomènes. Autrement dit, il existe un volume élémentaire représentatif (VER). Ainsi, la séparation des échelles peut être exprimée comme suit :

$$\frac{l}{L} \ll 1 \quad (2.1)$$

où l est la longueur caractéristique microscopique et L est la longueur caractéristique macroscopique. La longueur macroscopique L est soit géométrique, soit liée aux phénomènes à étudier (par exemple une longueur d'onde). Lorsque les échelles sont bien séparées, la technique d'homogénéisation par développement asymptotique peut être utilisée. Cela signifie qu'il est possible de déduire une description macroscopique équivalente à partir de l'échelle microscopique. Lorsque la condition de séparation d'échelles n'est pas satisfaite, la situation est beaucoup plus complexe et les phénomènes physiques ne peuvent généralement pas être décrits sous la forme d'un milieu équivalent macroscopique.

La méthode d'homogénéisation idéale (Strzelecki, 1996 [70] ; Auriault, 2001 [6]) permet de dériver la description équivalente macroscopique à partir de la description à l'échelle microscopique, sans aucune condition supplémentaire. Par conséquent, le processus d'homogénéisation doit permettre de remplacer la description complexe du VER à l'échelle

microscopique par un milieu continu susceptible de restituer la réponse globale du matériau.

Le processus d'homogénéisation peut être divisé en trois étapes :

- la première étape, qui est en fait indépendante de la méthode d'homogénéisation, concerne la "description locale", c'est à dire la description du VER à l'échelle microscopique : la géométrie des différents constituants, leur arrangement (périodique, aléatoire), leurs propriétés physiques (viscosité, ...), les variables physiques (pression, vitesse ...) et les équations de conservation associées aux phénomènes à étudier. Dans le cas d'un milieu périodique, le VER, qui s'étend sur une seule période, peut être parfaitement défini. Dans le cas d'un milieu aléatoire, la définition du VER n'est pas évidente et de plus il est généralement impossible d'obtenir une description parfaite du milieu, même du point de vue statistique.
- la deuxième étape est la "localisation". Cette deuxième étape consiste à déterminer les champs locaux de chaque variable physique lorsque le VER est soumis à une sollicitation macroscopique donnée.
- la dernière étape vise à construire une description équivalente macroscopique. La description macroscopique est exprimée en termes de variables physiques macroscopiques et de propriétés effectives qui sont déduites en effectuant une moyenne des champs locaux.

Le choix de la méthode dépend de l'objectif visé : la méthode d'homogénéisation de structures périodiques ne faisant pas d'hypothèse sur la structure des équations de champ à l'échelle macroscopique est un outil fondamental pour l'obtention de la structure de ces équations. De plus, la méthode est bien adaptée aux structures strictement périodiques. Enfin, les études réalisées en élasticité sur Volume Élémentaire Représentatif avec conditions aux limites de différents types (déplacement imposé, vecteur contrainte imposé ou conditions aux limites périodiques sur la frontière) sur un domaine dans lequel sont introduites des propriétés aléatoires ont montré que l'utilisation de conditions aux limites périodiques permettait une convergence plus rapide de la moyenne déterminée sur différentes réalisations des propriétés des matériaux constitutifs. Dans le domaine d'étude des matériaux aléatoires, on peut noter, en mécanique du solide, les méthodes reposant sur l'obtention de propriétés macroscopiques connaissant les fonctions de corrélation entre propriétés à l'échelle microscopique (Kroner, 1972 [43], 1986 [44]). Les méthodes de calcul de type "autocohérent" peuvent se rattacher à ce type de méthodes pour le cas de matériaux parfaitement désordonnés (Hershey, 1954 [35]; Kroner, 1972 [43]; Eshelby, 1957 [25], 1961 [26]). Sur un plan plus fondamental, la méthode de prise de moyenne (Slattery, 1967 [68]; Whitaker 1969 [79]; Quintard et Whitaker 1987 [62]) est particulièrement utilisée en mécanique des milieux poreux car elle permet de déduire les équations de bilan à l'échelle macroscopique des équations de bilan à l'échelle microscopique. Dans ce qui suit, on présentera tout d'abord la méthode d'homogénéisation périodique, puis la méthode de prise de moyenne.

2.1.1 Méthode d'homogénéisation périodique pour les matériaux structurés

2.1.1.1 Introduction

La méthode d'homogénéisation des structures périodiques, également appelée "méthode d'expansion multiple des échelles", initialement introduite par Sanchez-Palencia (1974) [63], Keller (1977) [41], Bensoussan et al. (1978) [9] et Sanchez-Palencia (1980) [64], a été formulée avec un regard plus physique, en particulier en introduisant une analyse

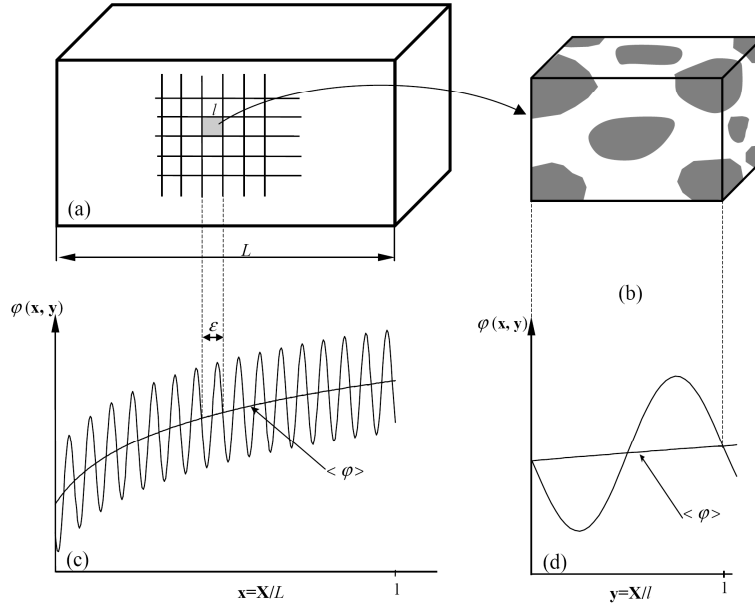


FIGURE 2.1 – Milieu poreux

dimensionnelle des équations par Auriault (1991) [5]. Dans ce mémoire, nous présenterons la méthodologie proposée par Auriault (1991) [5].

2.1.1.2 Séparation d'échelle-VER

La condition de séparation d'échelles qui est commune à toutes les techniques d'homogénéisation, même si elle n'est qu'implicite pour certaines méthodes, est clairement indiquée dans le cas de structures périodiques. Si les échelles sont séparées, il existe un volume élémentaire représentatif. Dans le cas d'un milieu périodique, le VER correspond une seule période. La condition de la séparation d'échelle s'écrit :

$$\epsilon = \frac{l}{L} \ll 1 \quad (2.2)$$

où l et L sont les longueurs caractéristiques microscopique et macroscopique, respectivement. Le rapport d'échelle ϵ est le paramètre d'échelle qui va être à la base des développements asymptotiques utilisés dans la méthode.

2.1.1.3 Variables adimensionnelles

A partir des deux longueurs caractéristiques l et L , on introduit deux variables d'espace adimensionnelles :

$$x = \frac{X}{L} \quad (2.3)$$

$$y = \frac{X}{l} \quad (2.4)$$

où X est la variable d'espace. La variable x est la variable d'espace macroscopique (ou lente) et y est la variable microscopique (ou rapide). En raison de la séparation d'échelles, les champs inconnus (vitesse, pression, ...) sont considérés comme dépendant *a priori* des deux variables d'espace sans dimension. Deux descriptions équivalentes sont alors possibles :

a) La longueur caractéristique L est utilisée comme la longueur de référence.

$$\varphi = \varphi(x, y), \quad \text{avec } y = \epsilon^{-1}x, \quad (2.5)$$

C'est le point de vue macroscopique.

b) La longueur caractéristique l est utilisée comme la longueur de référence.

$$\varphi = \varphi(x, y), \quad \text{avec } x = \epsilon y, \quad (2.6)$$

C'est le point de vue microscopique.

En outre, en invoquant la règle de la différenciation des fonctions de plusieurs variables, l'opérateur gradient par rapport à la variable d'espace physique X s'écrit :

$$\nabla_X = \frac{1}{l} \nabla_y + \frac{1}{L} \nabla_x \quad (2.7)$$

où ∇_y et ∇_x sont les opérateurs gradient par rapport aux variables d'espace adimensionnelles y et x , respectivement. La séparation d'échelle implique que les variations de φ sur une longueur x (Fig 2.1) sont petites et tendent vers zéro dans le cas limite où ϵ tend vers 0. Cette signifie que la quantité φ est stationnaire, c'est à dire que sa moyenne est invariante lors d'une translation locale en $O(l)$. La périodicité implique que φ est y -périodique.

2.1.1.4 Développement asymptotique

La conséquence de la séparation des deux échelles et de la périodicité est que toutes les quantités physiques peuvent être recherchées sous la forme de développements asymptotiques en puissance de ϵ (Bensoussan et al, 1978 [9] ; Sanchez-Palencia, 1980 [64]) :

$$\varphi(x, y) = \varphi^{(0)}(x, y) + \epsilon \varphi^{(1)}(x, y) + \dots \quad (2.8)$$

L'homogénéisation parfaite est obtenue lorsque ϵ tend vers 0. Comme, dans la pratique, ϵ a une valeur petite mais finie, la description équivalente macroscopique, sous forme d'une équation pour $\varphi^{(0)}$, représente une approximation du comportement réel avec une précision en $O(\epsilon)$. La périodicité implique l' y -périodicité des $\varphi^{(i)}$.

2.1.1.5 Adimensionnalisation des variables physiques

La mise en oeuvre d'une adimensionnalisation des variables physiques est bien connue en mécanique des fluides. Elle a été utilisée par Auriault(1991) [5] afin de procurer une base physique aux résultats obtenus par les différents développements asymptotiques. Chaque étape de la méthodologie est maintenant détaillée. Elle est illustrées par la loi de Darcy.

Description à l'échelle microscopique

Cette première étape, qui est indépendante de la méthode d'homogénéisation, porte sur la description à l'échelle microscopique. Cette description comprend la géométrie du milieu, la disposition des différents constituants, leurs propriétés physiques (viscosité, densité ...), les variables physiques (pression, vitesse ...) et leurs équations.

Normalisation

Cette deuxième étape, appelée normalisation, vise à écrire toutes les équations du mouvement sous une forme adimensionnelle qui est obtenue en définissant une échelle

pour chacune des grandeurs physiques. La variable d'espace X et le temps t sont définis comme suit :

$$\varphi^* = \frac{\varphi}{\varphi_c}, \quad X^* = \frac{X}{l_c}, \quad t^* = \frac{t}{t_c} \quad (2.9)$$

Dans cette équation, les grandeurs sans dimension sont indiquées par un astérisque et les quantités caractéristiques sont représentées par l'indice "c". L'écriture de l'adimensionalisation des équations nécessite le choix d'une longueur l_c de référence pour la normalisation des différents opérateurs. Si nous choisissons $l_c = l$, le point de vue microscopique est adopté. Par conséquent, nous avons :

$$\varphi^* = \varphi^*(x, y), \quad \text{avec } x = \epsilon y, \quad (2.10)$$

L'opérateur gradient s'écrit :

$$\nabla = l\nabla_X = \nabla_y + \epsilon\nabla_x \quad (2.11)$$

où ∇_y et ∇_x sont les opérateurs gradients par rapport aux variables adimensionnelles y et x , respectivement. Si nous choisissons $l_c = L$, le point de vue macroscopique est adopté. Par conséquent, nous avons :

$$\varphi^* = \varphi^*(x, y), \quad \text{avec } y = \epsilon^{-1}x, \quad (2.12)$$

L'opérateur gradient s'écrit :

$$\nabla = L\nabla_X = \epsilon^{-1}\nabla_y + \nabla_x \quad (2.13)$$

Adimensionalisation

L'étape suivante est l'évaluation des nombres sans dimension découlant de la description microscopique. Les ordres de grandeur du nombre sans dimension $Q(\varphi_c, l$ ou $L, t_c)$ sont estimés en termes du paramètre ϵ , rapport d'échelles. Par exemple un nombre sans dimension est dit d'ordre 'n' lorsque

$$\epsilon^{n-1} \ll Q(\varphi_c, l \text{ ou } L, t_c) \ll \epsilon^{n+1} \quad (2.14)$$

Lorsque tous les nombres sans dimension ont été déterminés, les équations peuvent alors être écrites sous une forme adimensionnelle. En conséquence, elles seront toutes exprimées comme suit :

$$\sum_i \epsilon^{p_i} A_i = 0 \quad (2.15)$$

Les A_i sont des opérateurs sans dimension. L'influence de la valeur des nombres adimensionnels est représentée par les termes ϵ^{p_i} .

Dérivation de la description macroscopique

Toutes les variables physiques sont maintenant exprimées sous la forme de développements asymptotiques en puissances de ϵ :

$$\varphi(x, y) = \varphi^{(0)}(x, y) + \epsilon\varphi^{(1)}(x, y) + \dots \quad (2.16)$$

où chaque terme $\varphi^{(i)}$ est y -périodique. La méthode consiste maintenant à introduire ces développements asymptotiques dans la description microscopique. Cela conduit à des équations de conservation et à des conditions aux limites aux ordres successifs de ϵ qui, avec la condition de périodicité, permettent de définir des problèmes aux limites sur une cellule

périodique. La détermination de la description macroscopique va s'appuyer sur les solutions de ces problèmes aux limites. Plus précisément, à un ordre donné de ϵ , l'équation du bilan local donnera une équation du type suivant :

$$\nabla_y \cdot \varphi^{*(i+1)} + \nabla_x \cdot \varphi^{*(i)} = 0 \quad (2.17)$$

où $\varphi^{*(i)}$ a déjà été déterminée en résolvant un problème aux limites à l'ordre précédent. L'existence de $\varphi^{*(i+1)}$ exige une condition de compatibilité, qui peut être obtenue par la moyenne de l'équation 2.17 sur le volume de la cellule périodique Ω^* . L'intégration sur la période donne

$$\frac{1}{\Omega^*} \int_{\Omega^*} \nabla_y \cdot \varphi^{*(i+1)} dy + \frac{1}{\Omega^*} \int_{\Omega^*} \nabla_x \cdot \varphi^{*(i)} dy = 0 \quad (2.18)$$

Compte-tenu de la périodicité de $\varphi^{*(i+1)}$ et en utilisant le théorème de la divergence, le premier terme de l'équation ci-dessus devient

$$\frac{1}{\Omega^*} \int_{\Omega^*} \nabla_y \cdot \varphi^{*(i+1)} dy = \frac{1}{\Omega^*} \int_{\delta\Omega^*} \varphi^{*(i+1)} N \cdot dy \quad (2.19)$$

où N est la normale unitaire à la surface $\delta\Omega^*$. L'équation 2.17 réduite à la description macroscopique a la forme suivante :

$$\frac{1}{\Omega^*} \int_{\Omega^*} \nabla_x \cdot \varphi^{*(i)} dy = \nabla_x \cdot \langle \varphi^{*(i)} \rangle = 0 \quad (2.20)$$

Enfin, la description macroscopique dimensionnelle est obtenue en retournant aux quantités dimensionnelles.

2.1.2 Modélisation de l'écoulement d'un fluide en milieu poreux

2.1.2.1 Technique d'homogénéisation

Nous nous proposons ici de déterminer la description macroscopique d'un écoulement isotherme d'un fluide newtonien dans une matrice poreuse. Ce sujet a fait l'objet de nombreux travaux se situant dans le cadre de l'homogénéisation de structures périodiques et, en premier lieu, par Sanchez Palencia (1974) [63].

Nous considérons une matrice poreuse, rigide et périodique (période Ω). Le fluide occupe les pores de volume Ω_f et S_{fs} représente la surface de contact fluide-solide. Pour simplifier, nous supposons la viscosité du fluide homogène dans tout le domaine. A faible vitesse, les équations qui régissent les champs de vitesse \mathbf{u} et de pression p se ramènent à :

- équation de continuité :

$$\nabla_x \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega_f \quad (2.21)$$

- équation de conservation de la quantité de mouvement (équation de Stokes) :

$$\mu \Delta_x \mathbf{u} - \nabla_x p = 0 \quad \text{dans } \Omega_f \quad (2.22)$$

- condition d'adhérence :

$$\mathbf{u}|_{S_{fs}} = 0 \quad \text{sur } S_{fs} \quad (2.23)$$

L'équation 2.22 fait intervenir le nombre adimensionnel Q :

$$Q = \frac{|\nabla_x p|}{|\mu \Delta_x \mathbf{u}|}$$

L'écoulement forcé est créé par un gradient macroscopique de pression :

$$\nabla_x p = 0\left(\frac{p_c}{L}\right)$$

\mathbf{u} varie à l'intérieur des pores dont la dimension caractéristique est notée l :

$$\mu \Delta_X \mathbf{u} = 0\left(\frac{\mu_c v_c}{l^2}\right)$$

Il s'ensuit que :

$$\frac{p_c}{L} = 0\left(\frac{\mu_c v_c}{l^2}\right)$$

Le nombre adimensionnel Q est :

$$Q = 0\left(\frac{p_c}{l} \frac{l^2}{\mu_c v_c}\right) = 0\left(\frac{p_c l}{\mu_c v_c}\right) = 0(\epsilon^{-1})$$

Du point de vue microscopique, les équations sans dimension décrivant l'écoulement d'un fluide incompressible s'écrivent :

-équation de continuité :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = 0 \quad \text{dans } \Omega_f^* \quad (2.24)$$

-équation de quantité de mouvement :

$$\epsilon \mu^* \Delta \mathbf{u}^* - \nabla p^* = 0 \quad \text{dans } \Omega_f^* \quad (2.25)$$

-condition d'adhérence :

$$\mathbf{u}^*|_{S_{fs}^*} = 0 \quad \text{sur } S_{fs}^* \quad (2.26)$$

2.1.2.2 Loi de Darcy

Ayant adopté le point de vue microscopique, les inconnues \mathbf{u}^* et p^* sont recherchées sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^*(x, y) &= \mathbf{u}^{*(0)}(x, y) + \epsilon \mathbf{u}^{*(1)}(x, y) + \epsilon^2 \mathbf{u}^{*(2)}(x, y) + \dots \\ p^*(x, y) &= p^{*(0)}(x, y) + \epsilon p^{*(1)}(x, y) + \epsilon^2 p^{*(2)}(x, y) + \dots \end{aligned} \quad (2.27)$$

$x = \epsilon y$, $u^{*(i)}$ et $p^{*(i)}$ sont Ω^* -périodiques en y . Introduisons ces développements dans le système (2.24-2.26). Notons que l'opérateur **grad** devient **grad** _{y} + ϵ **grad** _{x} .

La résolution du problème aux limites conduit à la description macroscopique à l'ordre le plus faible :

$$\mathbf{grad}_y p^{*(0)} = 0 \quad \text{donne} \quad p^{*(0)} = p^{*(0)}(x) \quad (2.28)$$

Au premier ordre, la pression est constante sur la période. Au second ordre, on obtient le problème aux limites faisant intervenir le premier ordre de la vitesse $\mathbf{u}^{*(0)}$ et le deuxième ordre de la pression $p^{*(1)}$.

$$\mu^* \Delta_y \mathbf{u}^{*(0)} - \mathbf{grad}_y p^{*(1)} - \mathbf{grad}_x p^{*(0)} = 0 \quad (2.29)$$

$$\text{div}_y \mathbf{u}^{*(0)} = 0 \quad (2.30)$$

$$\mathbf{u}^{*(0)}|_{S_{fs}^*} = 0 \quad (2.31)$$

où $\mathbf{u}^{*(0)}$ et $p^{*(1)}$ sont y -périodiques.

Compte tenu de la linéarité du système et du fait que $\mathbf{grad}_x p^{*(0)}$ ne dépend pas de la variable y , $\mathbf{u}^{*(0)}$ et $p^{*(1)}$ sont des fonctions linéaires de $\mathbf{grad}_x p^{*(0)}$ qui peuvent s'écrire :

$$u_i^{*(0)} = -\frac{k_{ij}^*}{\mu^*} \text{grad}_{x_j} p^{*(0)} \quad (2.32)$$

\mathbf{k}^* est un tenseur fonction de y . On considère les équations 2.24 et 2.26. A l'ordre 2 de la vitesse, on obtient :

$$\text{div}_y \mathbf{u}^{*(1)} + \text{div}_x \mathbf{u}^{*(0)} = 0 \quad (2.33)$$

$$\mathbf{u}^{*(1)}|_{S_{fs}^*} = 0 \quad (2.34)$$

Compte tenu du paragraphe 2.1.1.5, le terme de source $\text{div}_x \mathbf{u}^{*(0)}$ doit vérifier la condition de compatibilité et sa moyenne doit être nulle. En écrivant l'intégrale :

$$\langle * \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} * d\Omega \quad (2.35)$$

on obtient

$$\langle \text{div}_x \mathbf{u}^{*(0)} \rangle = \text{div}_x \langle \mathbf{u}^{*(0)} \rangle = -\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \text{div}_y \mathbf{u}^{*(1)} d\Omega = -\frac{1}{\Omega} \int_{\delta\Omega} \mathbf{u}^{*(1)} \mathbf{n} dS = 0 \quad (2.36)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal à S_{fs} . Finalement, on arrive à :

$$\text{div}_x \langle \mathbf{u}^{*(0)} \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{u}^{*(0)} \rangle = -\frac{\mathbf{K}^*}{\mu^*} \mathbf{grad}_x p^{*(0)}, \quad \mathbf{K}^* = \langle \mathbf{k}^* \rangle \quad (2.37)$$

En revenant aux quantités dimensionnelles :

$$\text{div}_X \langle \mathbf{u}^{(0)} \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{u}^{(0)} \rangle = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \mathbf{grad}_X p^{(0)} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \langle \nabla p^{(0)} \rangle, \quad \mathbf{K} = l^2 \mathbf{K}^* \quad (2.38)$$

\mathbf{K} est le tenseur de perméabilité macroscopique et le deuxième terme représente la loi de Darcy.

2.1.2.3 Effet du glissement hydrodynamique

On utilise la technique d'homogénéisation comme dans le cas présenté ci-dessus mais en introduisant la condition de glissement aux interfaces. On obtient :

- équation de continuité :

$$\nabla_X \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega_f \quad (2.39)$$

- équation de conservation de la quantité de mouvement (équation de Stokes) :

$$\mu \Delta_X \mathbf{u} - \nabla_X p = 0 \quad \text{dans } \Omega_f \quad (2.40)$$

- condition de glissement :

$$\mathbf{u}|_{S_{fs}} = -L_s \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{n}} \quad \text{sur } S_{fs} \quad (2.41)$$

La longueur de glissement L_s s'exprime en fonction du coefficient d'accommodation dynamique, σ , par la relation

$$L_s = \left(\frac{2 - \sigma}{\sigma} \right) \lambda \quad 0 \leq \sigma \leq 1 \quad (2.42)$$

où λ est le libre parcours moyen du fluide à la pression p . Le problème aux limites s'écrit sous la forme suivante

$$\mu^* \Delta_y \mathbf{u}^{*(0)} - \mathbf{grad}_y p^{*(1)} - \mathbf{grad}_x p^{*(0)} = 0 \quad \text{dans } \Omega_f^* \quad (2.43)$$

$$\operatorname{div}_y \mathbf{u}^{*(0)} = 0 \quad \text{dans } \Omega_f^* \quad (2.44)$$

$$\mathbf{u}^{*(0)} = L_s [\nabla \mathbf{u}^{*(0)} \cdot \mathbf{n}^* - (\mathbf{n}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^{*(0)} \cdot \mathbf{n}^*) \mathbf{n}^*] \quad \text{sur } S_{fs}^* \quad (2.45)$$

Finalement, on trouve :

$$\langle \mathbf{u}^{*(0)} \rangle = - \frac{\mathbf{K}_G^*}{\mu^*} \mathbf{grad}_x p^{*(0)}, \quad \mathbf{K}_G^* = \langle \mathbf{k}_G^* \rangle \quad (2.46)$$

En revenant aux quantités dimensionnelles :

$$\langle \mathbf{u}^{(0)} \rangle = - \frac{\mathbf{K}_G}{\mu} \mathbf{grad}_X p^{(0)} = - \frac{\mathbf{K}_G}{\mu} \langle \nabla p^{(0)} \rangle, \quad \mathbf{K}_G = l^2 \mathbf{K}_G^* \quad (2.47)$$

\mathbf{K}_G est le tenseur de perméabilité macroscopique de Klinkenberg qui fait intervenir le glissement :

$$\mathbf{K}_G = \mathbf{K}_D \left(1 + \frac{b}{p_m} \right) \quad (2.48)$$

où $\langle \mathbf{u} \rangle$ est la vitesse de filtration et \mathbf{K}_D la perméabilité de Darcy. Le paramètre b dépend de plusieurs facteurs, dont la nature du gaz (Chastanet et al., 2004 [16]) et la taille des pores. p_m est la pression moyenne.

2.2 Méthode de prise de moyennes des équations de conservation sur un VER

2.2.1 Introduction

Introduite dans les années 1970, la méthode consistant à moyenner les équations de conservation écrites à l'échelle de la particule fluide s'est considérablement enrichie au cours des dernières années. Elle s'appuie sur des hypothèses et développements mathématiques (théorèmes) jamais remis en cause depuis cette époque. Nous donnons dans ce chapitre quelques éléments essentiels sur lesquels nous nous sommes appuyés au cours de la préparation de ce mémoire.

Parmi les nombreux développements de cette théorie, visant à substituer une modélisation fondée sur des concepts rigoureux aux approches empiriques (loi de Darcy et ses extensions, concepts de perméabilités relatives, notion de milieux poly-disperses, traitement des discontinuités aux interfaces fluide-milieu poreux ... par exemple), on doit citer des travaux récents se rapportant à la modélisation des écoulements dans des milieux poreux hétérogènes Goyeau et al.(1997) [30], diphasiques (Figus et al. (1999) [27]) et à des écoulements d'un fluide sur la surface d'un milieu poreux (Prat (1989) [61], Goyeau et al.(2003) [31], Valdés-Parada et al. (2007) [74], Valdés-Parada et al. (2009) [73]). Les applications sont multiples : on ne citera que l'évaporation de la vapeur d'eau condensée dans une couche végétale au cours d'une nuit froide ainsi que la récupération d'eau liquide par refroidissement solaire dans les pays les plus exposés au réchauffement climatique (Masmoudi et Prat (1991) [49]).

2.2.1.1 Définitions, règles et théorèmes

Le concept de volume d'étude (ou volume élémentaire) représentatif (VER) introduit par Bear (1972) [8] constitue la base de la théorie de prise de moyenne des équations de transport qui consiste à moyenner les équations locales sur un VER afin de décrire plus simplement (mais en perdant de nombreuses informations) des phénomènes fondamentalement tridimensionnels.

La figure 2.2 représente schématiquement un VER comportant une phase solide et des pores remplis par un fluide monophasique.

Les équations de conservation pour les écoulements des fluides (équations de Navier-Stokes, équation de l'énergie, équations de conservation de chacune des espèces) et l'équation de la chaleur dans la phase solide sont toujours applicables, quelle que soit la complexité géométrique de la matrice solide, qu'elle soit ou non déformable. Passer à une description moyenne, à l'échelle d'un VER, n'a donc aucune autre justification que celle d'économiser des ressources de calcul, analytiques ou numériques. Comme on le verra dans la suite, les équations moyennées comportent plus de termes que les équations locales et plus d'inconnues que d'équations. Il faut donc modéliser ces termes supplémentaires de façon à fermer les systèmes d'équations. Comme en turbulence, le processus dit de "fermeture" s'appuie sur des hypothèses qui conduisent à des modèles plus ou moins exacts que nous discuterons.

Toutes les équations de transport des grandeurs associées à une particule fluide (scalaire, vectorielle ou tensorielle) peuvent être écrites sous la forme générique suivante :

$$\frac{\partial \psi_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_f \psi_f) = \nabla \cdot (\mathbf{J}_{\psi_f}) + S_f \quad (2.49)$$

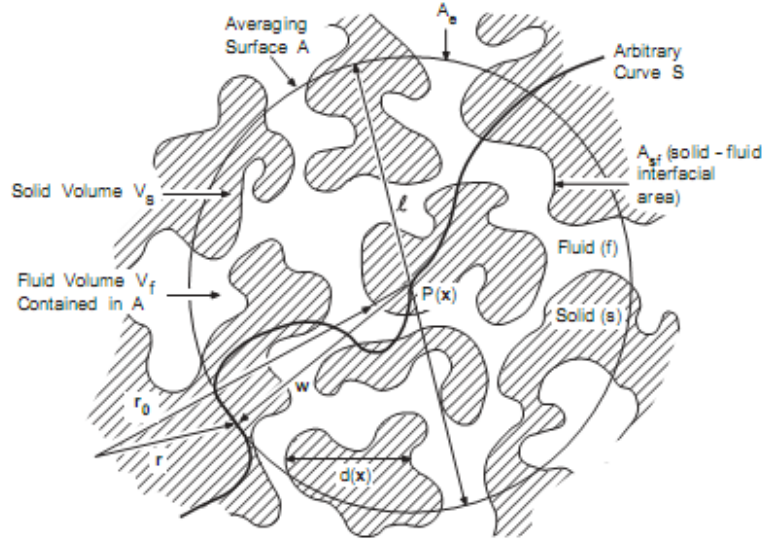


FIGURE 2.2 – Représentation schématique 2D d'un VER (Kaviany, figure 2.14, chapitre 2, page 51 [40])

où \mathbf{J}_{ψ_f} est un flux diffusif (flux de chaleur ou de matière) ou un terme tensoriel (tenseur des contraintes), le terme source S_f peut représenter l'action d'une ou de plusieurs forces (gradient de pression, force de volume, force de Coriolis) ou un terme scalaire de production/dissipation de quantité de chaleur ou de concentration d'une espèce (réaction chimique, rayonnement thermique, travaux des forces de volume ou de surface...).

L'équation de la chaleur définie dans la phase solide s'écrit :

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T_s) + \omega_s \quad (2.50)$$

La question est de moyenner correctement les équations locales (Eq. 2.49 et Eq. 2.50) de façon à obtenir des équations significatives à l'échelle du V.E.R. (équations macroscopiques) en s'appuyant sur des théorèmes concernant les opérateurs temporels et spatiaux (gradient, divergence et laplacien).

2.2.1.1.1 Grandeurs moyennes Soit ψ_f une quantité scalaire, vectorielle ou tensorielle associée à la phase fluide (*phase f*) qui est nulle dans la phase solide (*phase s*).

Moyenne de phase. On définit la moyenne de phase de ψ_f par :

$$\langle \psi_f \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \psi_f d\Omega \quad (2.51)$$

où Ω est le volume élémentaire représentatif constitué du volume Ω_s de la matrice solide et du volume Ω_f de l'espace des pores inclus dans Ω , soit $\Omega = \Omega_s + \Omega_f$. Sa dimension caractéristique (volume/surface) doit être très supérieure à la dimension caractéristique des pores, de l'ordre de grandeur de la racine carrée de la perméabilité. Comme $\psi_f = 0$ dans la *phase s*, on en déduit que

$$\langle \psi_f \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} \psi_f d\Omega_f \quad (2.52)$$

Exemple de moyenne de phase : la vitesse de filtration ou vitesse de Darcy, \vec{V}_D .

Moyenne intrinsèque. La moyenne intrinsèque de phase est définie par :

$$\langle \psi_f \rangle^f = \frac{1}{\Omega_f} \int_{\Omega_f} \psi_f d\Omega_f \quad (2.53)$$

Exemple de moyenne intrinsèque : la vitesse de pore ou vitesse moyenne du fluide dans un pore, \vec{V}_p .

De façon générale, les modèles "macroscopiques" doivent d'abord être établis à partir de moyennes intrinsèques et, éventuellement, ré-écrits en terme de moyenne de phase si une description plus dégradée est acceptable (par exemple, un modèle à une équation d'énergie). Dans le cas d'un écoulement de fluide monophasique, il y a équivalence stricte (via la relation de Dupuit-Forchheimer) entre moyenne intrinsèque et moyenne de phase des équations du mouvement lorsque les propriétés physiques sont supposées être indépendantes de la température du mélange ou de la concentration des constituants.

La relation entre moyenne de phase (2.51) et moyenne intrinsèque de phase (2.53), ou relation de Dupuit-Forchheimer, est immédiate. En introduisant la porosité $\varepsilon = \Omega_f/\Omega$:

$$\langle \psi_f \rangle = \varepsilon \langle \psi_f \rangle^f \quad (2.54)$$

Les relations suivantes dérivent immédiatement des définitions de $\langle \psi_f \rangle$ et de $\langle \psi_f \rangle^f$:

$$\langle \langle \psi_f \rangle \rangle = \langle \langle \psi_f \rangle^f \rangle^f = \langle \psi_f \rangle \quad (2.55)$$

$$\langle \langle \psi_f \rangle^f \rangle^f = \langle \psi_f \rangle^f \quad (2.56)$$

$$\langle \langle \psi_f \rangle^f \rangle = \varepsilon \langle \psi_f \rangle^f \quad (2.57)$$

2.2.1.1.2 Décomposition de Gray Comme la décomposition de Reynolds en un point est à la base des premiers modèles de turbulence (modèles RANS ou URANS), la décomposition de Gray est à la base de la modélisation macroscopique : elle consiste à supposer que toute grandeur locale peut être écrite comme la somme de sa moyenne intrinsèque de phase et d'une fluctuation spatiale (alors que la décomposition de Reynolds en un point est une décomposition temporelle). Soit

$$\psi_f = \langle \psi_f \rangle^f + \psi'_f \quad (2.58)$$

où la moyenne intrinsèque de phase de la fluctuation est nulle :

$$\langle \psi'_f \rangle^f = 0 \quad (2.59)$$

De même :

$$\psi_s = \langle \psi_s \rangle^s + \psi'_s \quad (2.60)$$

où $\langle \psi'_s \rangle^s = 0$.

Moyenne d'un produit

Les équations de conservation font intervenir des produits de grandeurs locales (termes de transport en particulier). Par exemple, la moyenne intrinsèque d'un produit de deux grandeurs attachées à la phase fluide s'écrit en utilisant la décomposition de Gray :

$$\begin{aligned} \langle \psi_f \gamma^f \rangle^f &= \langle (\langle \psi_f \rangle + \psi'_f) (\langle \gamma_f \rangle + \gamma'_f) \rangle = \\ &= \langle \langle \psi_f \rangle^f \langle \gamma_f \rangle^f \rangle^f + \langle \langle \psi_f \rangle^f \gamma'_f \rangle^f + \langle \psi'_f \langle \gamma_f \rangle^f \rangle^f + \langle \psi'_f \gamma'_f \rangle^f \end{aligned} \quad (2.61)$$

En utilisant les relations (2.56) et (2.57)

$$\langle \langle \psi_f \rangle^f \langle \varphi_f \rangle^f \rangle^f = \langle \psi_f \rangle^f \langle \varphi_f \rangle^f \quad (2.62)$$

$$\langle \langle \psi_f \rangle^f \varphi_f' \rangle^f = \langle \psi_f \rangle^f \langle \varphi_f' \rangle^f = 0 \quad (2.63)$$

$$\langle \psi_f' \langle \varphi_f \rangle^f \rangle^f = \langle \psi_f' \rangle^f \langle \varphi_f \rangle^f = 0 \quad (2.64)$$

et donc

$$\langle \psi_f \varphi_f \rangle^f = \langle \psi_f \rangle^f \langle \varphi_f \rangle^f + \langle \psi_f' \varphi_f' \rangle^f \quad (2.65)$$

Le terme $\langle \psi_f' \varphi_f' \rangle^f$ est appelé terme de dispersion : il s'agit en général d'une quantité tensorielle analogue au tenseur de Reynolds. Il doit être modélisé. En utilisant la relation entre moyenne de phase et moyenne intrinsèque, on obtient aussi

$$\begin{aligned} \langle \psi_f \varphi_f \rangle &= \varepsilon \langle \psi_f \rangle^f \langle \varphi_f \rangle^f + \langle \psi_f' \varphi_f' \rangle \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \varphi_f \rangle + \langle \psi_f' \varphi_f' \rangle \end{aligned} \quad (2.66)$$

2.2.1.2 Théorèmes

Les trois théorèmes indispensables pour établir les équations de conservation moyennes (de phase ou intrinsèque) sont les théorèmes de Slattery, de Whitaker et de Gray. Nous les énonçons ici sans démonstration. Leurs conditions de validité sont omises également et peuvent se trouver dans les références [68], [80], [32].

- Théorème de Slattery
 - quantité scalaire (gradient) :

$$\langle \nabla \psi_f \rangle = \nabla \langle \psi_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \psi_f \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.67)$$

où S_{fs} est la surface de contact entre les phases fluide et solide dans le VER et où \mathbf{n}_{fs} est le vecteur unité normal à l'interface dirigé de la phase fluide vers la phase solide.

- quantité vectorielle ou tensorielle (divergence) :

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u}_f \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.68)$$

- Théorème modifié par Gray

$$\langle \nabla \psi_f \rangle = \varepsilon \nabla \langle \psi_f \rangle^f + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \psi_f' \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.69)$$

- Théorème de transport (Whitaker)

$$\left\langle \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_f \rangle - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \psi_f (\mathbf{u}_{fs} \cdot \mathbf{n}_{fs}) dS \quad (2.70)$$

où \mathbf{u}_{fs} est la vitesse à l'interface.

2.2.1.3 Forme générale d'une équation de transport moyennée

La forme générale de la moyenne de phase de l'équation de transport (Eq. 2.49) s'écrit :

$$\left\langle \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right\rangle + \langle \nabla \cdot (\mathbf{u}_f \psi_f) \rangle = \langle \nabla \cdot \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \langle S_f \rangle \quad (2.71)$$

- La moyenne de phase du terme temporel (théorème de Whitaker),

$$\left\langle \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \psi_f \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} \psi_f (\mathbf{u}_{f_s} \cdot \mathbf{n}_{f_s}) dS \quad (2.72)$$

- La moyenne de phase du terme de transport est exprimée à partir du théorème de Slattery et de la décomposition de Gray,

$$\langle \nabla \cdot (\mathbf{u}_f \psi_f) \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_f \psi_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} (\psi_f \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{n}_{f_s} dS \quad (2.73)$$

En remplaçant $\langle \mathbf{u}_f \psi_f \rangle$ par $\frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \varphi_f \rangle + \langle \psi'_f \varphi'_f \rangle$, on obtient

$$\langle \nabla \cdot (\mathbf{u}_f \psi_f) \rangle = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \varphi_f \rangle \right) + \nabla \cdot \langle \psi'_f \varphi'_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} (\psi_f \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{n}_{f_s} dS \quad (2.74)$$

- La moyenne de phase du terme de diffusion est aussi exprimée à partir du théorème de Slattery, soit

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{J}_f \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} \mathbf{J}_{\psi_f} \cdot \mathbf{n}_{f_s} dS \quad (2.75)$$

On obtient en regroupant dans le membre de droite tous les termes faisant intervenir des intégrales de surface :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_f \rangle + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) + \nabla \cdot \langle \psi'_f \mathbf{u}'_f \rangle &= \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \langle S_f \rangle + \\ \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} \mathbf{J}_{\psi_f} \cdot \mathbf{n}_{f_s} dS + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} \psi_f (\mathbf{u}_{f_s} \cdot \mathbf{n}_{f_s}) dS - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} (\psi_f \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{n}_{f_s} dS & \quad (2.76) \end{aligned}$$

Cette équation montre que 4 termes doivent être modélisés :

- le terme de dispersion $\nabla \cdot \langle \psi'_f \mathbf{u}'_f \rangle$
- les 3 termes intégraux du membre de droite.

En fait, le flux diffusif s'exprimant à partir d'une loi constitutive faisant intervenir des opérateurs (au minimum le gradient), un terme supplémentaire apparaît qui doit être aussi modélisé. Il en est de même si le terme de source s'exprime en fonction d'opérateurs.

Simplifications

- Paroi imperméable ($\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_{f_s} = 0$) et rigide ($\mathbf{u}_{f_s} \cdot \mathbf{n}_{f_s} = 0$). L'équation 2.76 se simplifie en :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_f \rangle + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) + \nabla \cdot \langle \psi'_f \mathbf{u}'_f \rangle &= \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \langle S_f \rangle + \\ \frac{1}{\Omega} \int_{S_{f_s}} \mathbf{J}_{\psi_f} \cdot \mathbf{n}_{f_s} dS & \quad (2.77) \end{aligned}$$

Cette simplification montre qu'il n'y a plus que deux termes à modéliser : la dispersion et l'interaction fluide-solide si le terme de source est purement scalaire. S'il fait intervenir un opérateur (gradient de pression par exemple) un terme supplémentaire est à modéliser.

- Écoulement stationnaire. Dans l'équation 2.76 le terme transitoire et le second terme intégral du membre de droite disparaissent. D'où :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) + \nabla \cdot \langle \psi'_f \mathbf{u}'_f \rangle &= \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \langle S_f \rangle + \\ \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \mathbf{J}_{\psi_f} \cdot \mathbf{n}_{fs} dS - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} (\psi_f \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{n}_{fs} dS & \end{aligned} \quad (2.78)$$

Il ne reste donc plus que trois termes à modéliser (+ éventuellement celui lié au terme de source).

- Écoulement stationnaire, paroi imperméable et rigide. Il s'agit du cas le plus souvent considéré en convection thermique sans changement de phase. L'équation 2.76 se simplifie considérablement. On obtient :

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) + \nabla \cdot \langle \psi'_f \mathbf{u}'_f \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \langle S_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \mathbf{J}_{\psi_f} \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.79)$$

- Si, de plus, la porosité est uniforme, l'équation 2.79 devient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot (\langle \psi_f \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle) + \nabla \cdot \langle \psi'_f \mathbf{u}'_f \rangle &= \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \langle S_f \rangle + \\ \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \mathbf{J}_{\psi_f} \cdot \mathbf{n}_{fs} dS & \end{aligned} \quad (2.80)$$

2.2.2 Moyenne des équations de Navier-Stokes

Rappel : Forme microscopique

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (2.81)$$

Equation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_f \otimes \mathbf{u}_f) \right) = -\nabla p_f + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \rho_f \mathbf{F} \quad (2.82)$$

où $\bar{\bar{\tau}}$ est le tenseur de viscosité et \mathbf{F} la force de volume par unité de masse ($m \cdot s^{-2}$). Si cette force est limitée à la force de gravité, on peut écrire : $\mathbf{F} = \mathbf{g} = -\nabla \phi_f$ où ϕ_f est une fonction potentielle.

Hypothèses

- Écoulement incompressible,
- Vitesses interfaciales nulles.

La moyenne de phase de l'équation de continuité se réduit alors à :

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{u}_f \rangle = 0 \quad (2.83)$$

Moyenne de phase de l'équation du mouvement :

– Force de volume (théorème de Gray)

$$\langle \mathbf{g} \rangle = -\langle \nabla \phi_f \rangle = -\varepsilon \nabla \langle \phi_f \rangle^f - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \phi'_f \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.84)$$

Dans un système de coordonnées cartésiennes :

$$\langle \mathbf{g} \rangle = -\varepsilon g \mathbf{e}_z - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \phi'_f \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.85)$$

– Forces de surface (théorèmes de Gray et de Slattery)

• En appliquant le théorème de Gray pour le gradient de pression, on obtient sa moyenne de phase en fonction de sa moyenne intrinsèque de phase et d'un terme de surface :

$$\langle \nabla p_f \rangle = \varepsilon \nabla \langle p_f \rangle^f + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} p'_f \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.86)$$

• En appliquant le théorème de Slattery pour la divergence du tenseur de viscosité, on obtient sa moyenne de phase :

$$\langle \nabla \cdot \bar{\tau} \rangle = \nabla \cdot \langle \bar{\tau} \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \bar{\tau} \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.87)$$

- **Hypothèse** : Fluide newtonien ($\bar{\tau} = \mu_f \nabla \mathbf{u}_f$)

$$\langle \bar{\tau} \rangle = \langle \mu_f \nabla \mathbf{u}_f \rangle = \mu_f \left(\nabla \langle \mathbf{u}_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \mathbf{u}_f \otimes \mathbf{n}_{fs} dS \right) \quad (2.88)$$

Gray et O'Neill (1976) [33] ont montré que le terme intégral était négligeable. On en déduit alors que

$$\nabla \cdot \langle \bar{\tau} \rangle = \mu_f \nabla^2 \langle \mathbf{u}_f \rangle \quad (2.89)$$

et donc

$$\langle \nabla \cdot \bar{\tau} \rangle = \mu_f \nabla^2 \langle \mathbf{u}_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \bar{\tau} \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.90)$$

Finalement, on arrive à la forme macroscopique de l'équation de quantité de mouvement en terme de moyenne de phase (sauf la pression dont la moyenne de phase est non mesurable)

$$\begin{aligned} \rho_f \left[\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{u}_f \rangle + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \mathbf{u}_f \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) + \nabla \cdot \langle \mathbf{u}'_f \otimes \mathbf{u}'_f \rangle \right] = \\ -\varepsilon \nabla \langle p_f \rangle^f + \mu_f \nabla^2 \langle \mathbf{u}_f \rangle - \varepsilon g \mathbf{e}_z + \\ \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} [\bar{\tau} - (p'_f + \rho_f \phi'_f) \bar{\delta}] \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \end{aligned} \quad (2.91)$$

Le terme $\nabla \cdot \langle \mathbf{u}'_f \otimes \mathbf{u}'_f \rangle$ représente la dispersion hydrodynamique (créée par les fluctuations de l'accélération permanente et qui est similaire à l'effet du tenseur des contraintes de Reynolds) : ce terme n'est important que si la vitesse microscopique de l'écoulement et sa valeur moyenne intrinsèque diffèrent significativement ($\mathbf{u}'_f = \mathbf{u}_f - \langle \mathbf{u}_f \rangle^f$), en particulier pour des écoulements présentant des recirculations. Ce terme peut être calculé analytiquement pour des écoulements simples. Le terme intégral issu de la moyenne des forces de surface et de volume représente l'interaction entre ces forces et la matrice solide : la contribution la plus importante est celle des forces visqueuses parce les fluctuations de pression et de gravité sont généralement faibles pour des écoulements incompressibles et dans des conditions de gravité usuelles.

2.2.2.1 Modélisation des termes supplémentaires ou hypothèses de fermeture.

Compte-tenu des hypothèses introduites, la modélisation des termes générés par la technique prise de moyenne est maintenant bien établie (voir Irmay (1958) [37], Whitaker 1986 [81], 1996 [82]). Les modèles empiriques de Darcy, Forchheimer et Brinkman sont donc formellement bien justifiés.

- Force de frottement visqueux surfacique : terme de Darcy

$$\frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} [\bar{\tau} - (p'_f + \rho_f \phi'_f) \bar{\delta}] \cdot \mathbf{n}_{fs} dS = -\frac{\mu_f}{K} \varepsilon \langle \mathbf{u}_f \rangle \quad (2.92)$$

- Dispersion hydrodynamique (Irmay, 1958)

$$\rho_f \nabla \cdot \langle \mathbf{u}'_f \otimes \mathbf{u}'_f \rangle = \rho_f \frac{\varepsilon B}{K} |\langle \mathbf{u}_f \rangle| \langle \mathbf{u}_f \rangle \quad (2.93)$$

où B est une constante caractérisant la structure de la matrice solide (souvent écrite sous la forme $B = FK^{1/2}$ où F est le coefficient de Forchheimer).

L'équation macroscopique de de quantité de mouvement devient donc :

$$\begin{aligned} \rho_f \left[\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{u}_f \rangle + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \mathbf{u}_f \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) \right] &= -\varepsilon \nabla \langle p_f \rangle^f + \mu_f \nabla^2 \langle \mathbf{u}_f \rangle - \varepsilon \rho_f g \mathbf{e}_z + \\ &\rho_f \varepsilon \left[\frac{\nu_f}{K} + \frac{B}{K} |\langle \mathbf{u}_f \rangle| \right] \langle \mathbf{u}_f \rangle \end{aligned} \quad (2.94)$$

En définitive la forme finale de la moyenne de phase de l'équation de conservation de quantité de mouvement s'écrit en introduisant la vitesse de Darcy (ou de filtration) définie par $\mathbf{u}_D = \langle \mathbf{u}_f \rangle$ et la pression intrinsèque p_I :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \mathbf{u}_D}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{u}_D \otimes \mathbf{u}_D \right) &= -\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + \frac{\nu_f}{\varepsilon} \nabla^2 \mathbf{u}_D - g \mathbf{e}_z - \\ &\left[\frac{\nu_f}{K} + \frac{B}{K} |\mathbf{u}_D| \right] \mathbf{u}_D \end{aligned} \quad (2.95)$$

On observe que le terme de Brinkman apparaît naturellement avec $\nu_e = \nu_f / \varepsilon$ comme viscosité effective (expression souvent contestée en supposant $\nu_f / \varepsilon \leq \nu_e \leq \nu_f$).

En termes de vitesse intrinsèque (ou de vitesse de pore), $\mathbf{u}_p = \langle \mathbf{u}_f \rangle^f = \mathbf{u}_D / \varepsilon$, l'équation de quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial \mathbf{u}_p}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u}_p - g \mathbf{e}_z - \left[\frac{\nu_f \varepsilon}{K} + \frac{B \varepsilon^2}{K} |\mathbf{u}_p| \right] \mathbf{u}_p \quad (2.96)$$

Simplifications

On raisonne ici en terme de vitesse de filtration (\mathbf{u}_D).

- Porosité proche de l'unité (mousses métalliques par exemple). L'équation 2.95 se ramène à

$$\frac{\partial \mathbf{u}_D}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_D \otimes \mathbf{u}_D) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u}_D - g \mathbf{e}_z - \left[\frac{\nu_f}{K} + \frac{B}{K} |\mathbf{u}_D| \right] \mathbf{u}_D \quad (2.97)$$

- Porosité proche de l'unité et très grande perméabilité (ce qui n'est pas le cas des mousses métalliques). L'équation 2.95 se ramène à l'équation pour un fluide avec $\mathbf{u} \approx \mathbf{u}_D$:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_D}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_D \otimes \mathbf{u}_D) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u}_D - g \mathbf{e}_z \quad (2.98)$$

où $p_I = p$ est la pression statique.

- Écoulement stationnaire et vitesse de filtration faible

$$-\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u}_D - g \mathbf{e}_z - \left[\frac{\nu_f}{K} + \frac{B}{K} |\mathbf{u}_D| \right] \mathbf{u}_D = 0 \quad (2.99)$$

C'est l'équation de Darcy-Brinkman-Forchheimer.

- Écoulement stationnaire et vitesse de filtration faible et quasiment uniforme

$$-\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + -g \mathbf{e}_z - \left[\frac{\nu_f}{K} + \frac{B}{K} |\mathbf{u}_D| \right] \mathbf{u}_D = 0 \quad (2.100)$$

C'est l'équation de Darcy-Forchheimer.

- Écoulement stationnaire et vitesse de pore faible et quasiment uniforme

$$-\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + -g \mathbf{e}_z - \frac{\nu_f}{K} \mathbf{u}_D = 0 \quad (2.101)$$

On retrouve la loi de Darcy $\mathbf{u}_D = -K/\mu_f (\nabla p + \rho_f g \mathbf{e}_z)$.

2.2.3 Equation de l'énergie

Nous considérons d'abord le modèle général basé sur l'équation de l'énergie pour la phase fluide et sur l'équation de la chaleur pour la matrice solide, c'est à dire que l'on ne suppose pas que les températures moyennes intrinsèques des deux phases sont égales (non-équilibre thermique local ou LTNE). La dérivation des équations moyennées est immédiate

en se basant sur les résultats du paragraphe 2.2.1.3 (moyenne d'une équation de transport).

Phase fluide

On écrit l'équation de l'énergie sous la forme simplifiée :

$$\rho_f C_{pf} \left(\frac{\partial T_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_f T_f) \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_f + \omega_f \quad (2.102)$$

où \mathbf{q}_f est le flux de chaleur donné par la loi de Fourier ($\mathbf{q}_f = -k \nabla T_f$) et ω_f un terme de source représentant la production volumique de chaleur (travaux des forces de surface, réaction chimique, rayonnement volumique ...). Si la porosité est uniforme, la moyenne intrinsèque de phase de cette équation est immédiate :

$$\begin{aligned} \rho_f C_{pf} \left[\frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle T_f \rangle^f \langle \mathbf{u}_f \rangle^f) + \nabla \cdot \langle T_f' \mathbf{u}_f' \rangle^f \right] = \\ -\nabla \cdot \langle \mathbf{q}_f \rangle^f + \langle \omega_f \rangle^f - \frac{1}{\Omega_f} \int_{S_{fs}} \mathbf{q}_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \end{aligned} \quad (2.103)$$

En utilisant le théorème de Slattery, on arrive à l'expression suivante de la moyenne intrinsèque du flux de chaleur

$$\langle \mathbf{q}_f \rangle^f = -k_f \nabla \langle T_f \rangle^f - \frac{k_f}{\Omega_f} \int_{S_{fs}} T_f \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.104)$$

La moyenne intrinsèque de l'équation de l'énergie est donc

$$\begin{aligned} \rho_f C_{pf} \left[\frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle T_f \rangle^f \langle \mathbf{u}_f \rangle^f) \right] = k_f \nabla^2 \langle T_f \rangle^f + \langle \omega_f \rangle^f \\ - \rho_f C_{pf} \nabla \cdot \langle T_f' \mathbf{u}_f' \rangle^f + \frac{k_f}{\Omega_f} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_f \mathbf{n}_{fs} dS \right) + \int_{S_{fs}} \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \right) \end{aligned} \quad (2.105)$$

Les trois derniers termes du membre de droite de l'équation 2.105 doivent être modélisés : le premier représente la dispersion thermique, le second traduit la complexité géométrique de l'interface solide-fluide (ou tortuosité) et le troisième caractérise les flux de chaleur échangés sur l'interface. La modélisation usuelle consiste à introduire les deux premiers de ces trois termes dans le terme de diffusion en introduisant une conductivité effective qui est une quantité tensorielle.

Phase solide

En procédant de la même façon pour la phase solide, on obtient la moyenne intrinsèque de l'équation de la chaleur pour la phase solide. Soit

$$\begin{aligned} \rho_s C_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = k_s \nabla^2 \langle T_s \rangle^s + \langle \omega_s \rangle^s \\ + \frac{k_s}{\Omega_s} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_s \mathbf{n}_{sf} dS \right) + \int_{S_{fs}} \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{sf} dS \right) \end{aligned} \quad (2.106)$$

où $\mathbf{n}_{sf} = -\mathbf{n}_{fs}$ est la normale à l'interface dirigée vers la phase fluide. Les deux derniers termes du membre de droite de l'équation 2.106 sont à modéliser et ont la même signification que ceux de l'équation 2.105.

Les équations 2.105 et 2.106 constituent le fondement du modèle à deux équations d'énergie.

Modélisation

On introduit les quantités tensorielles suivantes pour la phase fluide :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{K}}_{tor,f} &= \frac{k_f}{\Omega_f} \int_{S_{fs}} T_f \cdot \mathbf{n}_{fs} \\ \underline{\underline{K}}_{disp} &= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T_f \rangle^f} \langle T'_f \mathbf{u}'_f \rangle^f \\ \underline{\underline{K}}_{e,f} &= k_f \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}}_{tor,f} + \underline{\underline{K}}_{disp}\end{aligned}\quad (2.107)$$

Le terme d'échange de chaleur fluide-solide est modélisé en définissant un coefficient d'échange fluide-solide à l'intérieur du VER (ou coefficient d'échange entre phases), h_{fs} tel que :

$$h_{fs} a_{fs} (\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f) = \frac{k_f}{\Omega} \int_{S_{fs}} \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.108)$$

où $a_{fs} = S_{fs}/\Omega$ est l'aire spécifique (m^2/m^3) (le produit $h_{fs} a_{fs}$ est aussi appelé coefficient d'échange volumique [58] ($W/m^3 K$)). On en déduit la forme finale suivante de la moyenne intrinsèque de l'équation de l'énergie :

$$\rho_f C_{pf} \left[\frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle T_f \rangle^f \langle \mathbf{u}_f \rangle^f) \right] = \nabla \cdot (\underline{\underline{K}}_{e,f} \nabla \langle T_f \rangle^f) + \langle \omega_f \rangle^f + h_{fs} A_{fs} (\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f) \quad (2.109)$$

En procédant de même pour la phase solide, on arrive à la moyenne intrinsèque de l'équation de la chaleur :

$$\rho_s C_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{\underline{K}}_{e,s} \nabla \langle T_s \rangle^s) + \langle \omega_s \rangle^s + h_{fs} A_{fs} (\langle T_f \rangle^f - \langle T_s \rangle^s) \quad (2.110)$$

où la conductivité effective de la phase solide est la somme de la conductivité du solide et de la conductivité de tortuosité (tensorielle) définie par la somme :

$$\underline{\underline{K}}_{e,s} = k_s \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}}_{tor,s} \quad (2.111)$$

avec

$$\underline{\underline{K}}_{tor,s} = \frac{k_s}{\Omega_s} \int_{S_{fs}} T_s \cdot \mathbf{n}_{sf} dS \quad (2.112)$$

2.2.3.1 Modèle à une seule équation d'énergie : Équilibre thermique local (LTE)

Ce modèle est basé sur l'hypothèse de l'égalité des températures moyennes intrinsèques dans un V.E.R., soit $\langle T_f \rangle^f = \langle T_s \rangle^s$. La validité de cette hypothèse repose fondamentalement sur la valeur du coefficient d'échange entre phases et, par conséquent, sur la vitesse interstitielle du fluide. Elle permet d'écrire la moyenne de phase sous la forme

$$\langle T \rangle = \varepsilon \langle T_f \rangle^f + (1 - \varepsilon) \langle T_s \rangle^s = \langle T_f \rangle^f = \langle T_s \rangle^s \quad (2.113)$$

Les équations moyennées 2.105 et 2.106 sont combinées en les ré-écrivant en moyennes de phase ($\langle \cdot \rangle^f = \varepsilon \langle \cdot \rangle$ et $\langle \cdot \rangle^s = (1 - \varepsilon) \langle \cdot \rangle$). On obtient immédiatement :

$$\rho_f C_{pf} \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon^2} \langle T \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle T' \mathbf{u}'_f \rangle \right) \right] = k_f \frac{1}{\varepsilon} \nabla^2 \langle T \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \langle \omega_f \rangle + \frac{k_f}{\varepsilon \Omega} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_f \mathbf{n}_{fs} dS \right) + \int_{S_{fs}} \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \right) \quad (2.114)$$

$$\rho_s C_s \frac{1}{(1 - \varepsilon)} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = k_s \frac{1}{(1 - \varepsilon)} \nabla^2 \langle T \rangle + \frac{1}{(1 - \varepsilon)} \langle \omega_s \rangle + \frac{k_s}{(1 - \varepsilon) \Omega} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_s \mathbf{n}_{sf} dS \right) + \int_{S_{fs}} \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{sf} dS \right) \quad (2.115)$$

Pour effectuer la combinaison de ces deux équations, il faut que la porosité soit uniforme dans un V.E.R. En multipliant l'équation de l'énergie par ε et l'équation de la chaleur par $(1 - \varepsilon)$ puis en les ajoutant on arrive à l'équation unique :

$$\begin{aligned} (\rho C_p)_e \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \rho_f C_{pf} \nabla \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle) &= k_e \nabla^2 \langle T \rangle + \langle \omega_e \rangle \\ -\rho_f C_{pf} \nabla \cdot (\langle T' \mathbf{u}'_f \rangle) + \frac{k_f}{\Omega} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_f \mathbf{n}_{fs} dS \right) + \int_{S_{fs}} \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \right) &+ \\ \frac{k_s}{\Omega} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_s \mathbf{n}_{sf} dS \right) + \int_{S_{fs}} \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{sf} dS \right) & \end{aligned} \quad (2.116)$$

où $(\rho C_p)_e = \varepsilon \rho_f C_{pf} + (1 - \varepsilon) \rho_s C_s$, $k_e = \varepsilon k_f + (1 - \varepsilon) k_s$ et $\langle \omega_e \rangle = \varepsilon \langle \omega_f \rangle + (1 - \varepsilon) \langle \omega_s \rangle$.

La continuité des températures ($T_f = T_s$ sur S_{fs}) et des flux de chaleur à l'interface ($k_f \nabla T_f = k_s \nabla T_s$) où $\mathbf{n}_{sf} = -\mathbf{n}_{fs}$ permet d'annuler le terme d'échange de chaleur interfaciale et de combiner les termes de tortuosité. Soit :

$$\frac{k_f}{\Omega} \int_{S_{fs}} \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS + \frac{k_s}{\Omega} \int_{S_{fs}} \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{sf} dS = 0 \quad (2.117)$$

$$\frac{k_f}{\Omega} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_f \mathbf{n}_{fs} dS \right) \right) + \frac{k_s}{\Omega} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_s \mathbf{n}_{sf} dS \right) \right) = \frac{(k_s - k_f)}{\Omega} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T \mathbf{n}_{sf} dS \right) \right) \quad (2.118)$$

En définissant une conductivité effective appropriée au modèle à une équation :

$$\underline{\underline{K}}_{eff} = k_e \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}}_{tor} + \underline{\underline{K}}_{disp} \quad (2.119)$$

avec

$$\underline{\underline{K}}_{tor} = \frac{(k_f - k_s)}{\Omega} \int_{S_{fs}} T \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.120)$$

La forme finale du modèle L.T.E. s'écrit :

$$(\rho C_p)_e \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \rho_f C_{pf} \nabla \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle) = \nabla \cdot (\underline{\underline{K}}_{eff} \nabla \langle T \rangle) + \langle \omega_e \rangle \quad (2.121)$$

2.2.3.2 Synthèse

Modèle à deux équations d'énergie (LTNE)

Pour un écoulement incompressible, les variables dépendantes sont la vitesse et la pression statique intersticielle, \mathbf{u}_p et p_I , les moyennes intrinsèques des températures : soient 4 variables dépendantes. En notant $\mathbf{u}_p = \langle \mathbf{u}_f \rangle^f = \mathbf{u}_D / \varepsilon$, $T_f = \langle T_f \rangle^f$ et $T_s = \langle T_s \rangle^s$, les 4 équations de conservation s'écrivent :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_p = 0 \quad (2.122)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u}_p - g \mathbf{e}_z - \left[\frac{\nu_f \varepsilon}{K} + \frac{B \varepsilon^2}{K} |\mathbf{u}_p| \right] \mathbf{u}_p \quad (2.123)$$

$$\rho_f C_{pf} \left[\frac{\partial T_f}{\partial t} + \nabla \cdot (T_f \mathbf{u}_f) \right] = \nabla \cdot (\underline{K}_{e,f} \nabla T_f) + \langle \omega_f \rangle^f + h_{fs} A_{fs} (T_s - T_f) \quad (2.124)$$

$$\rho_s C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{K}_{e,s} \nabla T_s) + \langle \omega_s \rangle^s + h_{fs} A_{fs} (T_f - T_s) \quad (2.125)$$

Paramètres : En plus des propriétés thermophysiques du fluide (ρ_f , μ_f , C_{pf} et k_f) et de la matrice solide (ρ_s , C_s et k_s) et de la porosité ε , les hypothèses de fermeture font intervenir six quantités à modéliser : K , B , $\underline{K}_{tor,f}$, \underline{K}_{disp} , $\underline{K}_{tor,s}$ et h_{fs} .

Ces six quantités peuvent être déterminées, avec plus ou moins de succès, empiriquement ou à partir d'expériences. Par contre, si toutes les équations de conservation sont résolues sous leur forme microscopique, leurs valeurs numériques (en incluant les coefficients tensoriels) peuvent être déterminées exactement (aux erreurs numériques près) en s'appuyant simplement sur la décomposition de Gray. Cette approche est équivalente au calcul de la viscosité ou de la diffusivité turbulente, intervenant dans les modèles RANS, à partir de simulations numériques directes (DNS).

Modèle à une équation d'énergie (LTE)

Pour un écoulement incompressible, les variables dépendantes sont alors la vitesse de Darcy et la pression statique intersticielle, \mathbf{u}_D et p_I et la moyenne de phase de la température : soient 3 variables dépendantes. En notant $\mathbf{u}_D = \langle \mathbf{u}_f \rangle$, $T = \langle T \rangle$, les 3 équations de conservation s'écrivent :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_D = 0 \quad (2.126)$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \mathbf{u}_D}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon^2} \nabla \cdot (\mathbf{u}_D \otimes \mathbf{u}_D) = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p_I + \frac{\nu_f}{\varepsilon} \nabla^2 \mathbf{u}_D - g \mathbf{e}_z - \left[\frac{\nu_f}{K} + \frac{B}{K} |\mathbf{u}_D| \right] \mathbf{u}_D \quad (2.127)$$

$$\rho C_e \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_f C_{pf} \nabla \cdot (T \mathbf{u}_D) = \nabla \cdot (\underline{K}_{eff} \nabla T) + \omega_D \quad (2.128)$$

2.2.3.3 Corrélations

Nous donnons ici quelques expressions classiques permettant de calculer les propriétés macroscopiques de milieux poreux. Le lecteur en trouvera ne nombreuses autres, par exemple dans les ouvrages de Kaviany [40] et de Nield et Bejan [59]. En dehors des expressions établies analytiquement à partir de modèles simples, le degré de précision de ces expressions est très variable, y compris pour des milieux poreux modèles tels que des empilements de billes de même diamètre.

Nous ne considérons ici que le cas de matrices solides dont tous les pores sont interconnectés.

Perméabilité :

La première remarque à faire concernant la perméabilité est qu'il n'y a, en général, aucune relation universelle entre porosité effective (quantité parfaitement définie physiquement) et perméabilité (modèle). Les seules relations qu'il est possible d'obtenir sont de nature empirique et découlent de calculs effectifs de la perméabilité pour des structures géométriques données.

- Empilements de sphères de diamètre d_p : relation d'Ergun (1952) [24]

$$K = \frac{\varepsilon^3 d_p^2}{150(1 - \varepsilon)^2} \quad (m^2) \quad (2.129)$$

- Fissures capillaires (espacement w , épaisseur des lamelles d) :

$$K = \frac{w^3}{12(w + d)} = \frac{w^2}{12} \varepsilon \quad (m^2) \quad (2.130)$$

- Faisceau de N tubes capillaires de rayon r_0 :

$$K = N \frac{\pi r_0^4}{8} = \varepsilon \frac{r_0^2}{8} \quad (m^2) \quad (2.131)$$

Coefficient d'inertie ou de Forchheimer :

- Empilements de sphères de diamètre d_p : relation d'Ergun (1952) [24]

$$F = \frac{1,75(1 - \varepsilon)}{d_p \varepsilon^3} K^{1/2} \quad (2.132)$$

Conductivité stagnante équivalente :

Elle s'écrit en général sous la forme réduite $\frac{k_e}{k_f} = f(\varepsilon, \text{géométrie}, k_s, k_f)$.

- Empilements de sphères de diamètre d_p : relation de Schlunder

$$\frac{k_e}{k_f} = \frac{2}{1 - k_f/k_s} \left[\frac{\ln(k_s/k_f)}{1 - (k_s/k_f)} - 1 \right] \quad (2.133)$$

- Particules sphériques : équations de Maxwell

- Borne inférieure ($\varepsilon \approx 1$ ou sphères dispersées dans un fluide)

$$\frac{k_e}{k_f} = \frac{2\varepsilon + (3 - 2\varepsilon)(k_s/k_f)}{(2 - \varepsilon) + \varepsilon(k_s/k_f)} \quad (2.134)$$

- Borne supérieure (matrice solide continue contenant des pores disconnectés)

$$\frac{k_e}{k_f} = \frac{2 \left(\frac{k_s}{k_f} \right)^2 (1 - \varepsilon) + (1 + 2\varepsilon) \left(\frac{k_s}{k_f} \right)}{(2 + \varepsilon) \left(\frac{k_s}{k_f} \right) + 1 - \varepsilon} \quad (2.135)$$

– Fissures capillaires (espacement w , épaisseur des lamelles d , $\varepsilon = w/(w + d)$) :

- Modèle parallèle (valeur **maximale** de k_e)

$$\frac{k_e}{k_f} = \varepsilon + (1 - \varepsilon) \frac{k_s}{k_f} \quad (2.136)$$

- Modèle série (valeur **minimale** de k_e)

$$\frac{1}{k_e} = \frac{\varepsilon}{k_f} + \frac{(1 - \varepsilon)}{k_s} \quad (2.137)$$

D'autres modèles sont donnés dans l'ouvrage de Kaviany [40] (tableau 3.1, pages 125-126) ou dans Bories et al. (2008) [14].

Conductivité de dispersion :

Elle s'écrit le plus souvent sous une forme scalaire adaptée à des écoulements établis en conduite et elle s'exprime en fonction de la vitesse de filtration (ou du nombre de Reynolds basé sur le diamètre des particules : $Re_d = U_D d_p / \nu_f$).

– Empilements de sphères de diamètre d_p : relation de Yagi and Wakao (1959) [84].

$$k_{disp} = \gamma_d k_f Pr Re_d \quad (2.138)$$

avec $0,09 \leq \gamma_d \leq 0,1$.

– Empilements de sphères de diamètre d_p associé au modèle de Darcy-Brinkman : modèle de type "longueur de mélange" (Cheng et Vortmeyer, 1988 [17]).

$$\frac{k_{disp}}{k_f} = \gamma_d l_m Pr Re_{d,m} \frac{u(y)}{u_m} \quad (2.139)$$

avec $u(y)$ vitesse locale, u_m vitesse débitante et $Re_{d,m} = u_m d_p / \nu_f$. La longueur de mélange a pour expressions $l_m = y / \omega d_p$ aux voisinages des parois et $l_m = 1$ dans la partie centrale de la conduite. ω est une constante empirique de l'ordre de $\omega = 1,5$.

– Autres modèles : voir Alazmi et Vafai (2000) [3], Kuwahara et al. [46], [45], Nakayama et al. ... etc)

Diminution de la conductivité due à la tortuosité :

Lorsque le fluide est immobile, la tortuosité conduit à une conductivité du fluide $k_{t,f}$ inférieure à k_f et le quotient $k_{t,f}/k_f$ est appelé tortuosité. Il en est de même pour la phase solide. La tortuosité n'est pas mesurable mais peut être calculée numériquement. Elle est, en général, incluse dans les expressions de la conductivité effective stagnante mais il faut noter qu'il s'agit d'une quantité tensorielle lorsque les matrices poreuses sont anisotropes.

Coefficient de transfert intersticiel solide-fluide et aire spécifique :

La plupart des expressions du coefficient de transfert intersticiel se rapporte à des empilements de sphères de même diamètre.

– Modèle de Wakao et al. (1979) [84]

$$h_{fs} = \frac{k_f}{d_p} \left[2 + 1, 1Pr^{1/3} Re_d^{0,6} \right] \quad \text{avec} \quad A_{sf} = 6(1 - \varepsilon)/d_p \quad (2.140)$$

– Modèle de Kar et Dybbs (1982)

$$h_{fs} = 0.004 \left(\frac{d_\nu}{d_p} \right)^{0,35} \left(\frac{k_f}{d_p} \right) Pr^{1/3} Re_d^{1,35} \quad \text{pour } Re_d \leq 75, \quad A_{sf} = \frac{20,35(1 - \varepsilon)\varepsilon^2}{d_p} \quad (2.141)$$

où $d_\nu = 4\varepsilon/A_{sf}$ est le diamètre moyen des pores : $d_\nu = 4d_p/[20,35\varepsilon(1 - \varepsilon)]$ soit $d_\nu \approx 0,8d_p$ si $\varepsilon = 0,4$.

– Autres modèles : voir Alazmi et Vafai (2000) [3], Nield et Bejan (1992) [59]... etc

2.2.4 Effet du glissement hydrodynamique

Les phénomènes de glissement intervenant dans les milieux micro-poreux modifient les conditions à l'interface solide-fluide d'un V.E.R. car il faut tenir compte du saut de vitesse. Nous nous limiterons ici au cas de glissement du premier ordre et nous n'envisagerons pas les effets de "pompage" et de glissement thermique.

• **Hypothèses** : Fluide newtonien, écoulement incompressible et stationnaire.

– Equation de continuité : on applique le théorème de Slattery (divergence)

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u}_f \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_f \rangle + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \quad (2.142)$$

Le terme intégral est nul car la vitesse de glissement est tangentielle.

– Equation de quantité de mouvement : on part de la forme générale de la moyenne de phase d'une équation de transport (Eq. 2.76) dans laquelle on supprime les termes correspondant à la partie instationnaire. Soit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_f \rangle + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \langle \psi_f \rangle \langle \mathbf{u}_f \rangle \right) + \nabla \cdot \langle \psi'_f \mathbf{u}'_f \rangle &= \nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\psi_f} \rangle + \langle S_f \rangle + \\ \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \mathbf{J}_{\psi_f} \cdot \mathbf{n}_{fs} dS + \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} \psi_f (\mathbf{u}_{fs} \cdot \mathbf{n}_{fs}) dS - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} (\psi_f \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{n}_{fs} dS & \end{aligned} \quad (2.143)$$

Comme on l'a vu précédemment, l'hypothèse de fluide newtonien (Eq. 2.91) conduit à :

$$\begin{aligned} \rho_f \left[\frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot (\langle \mathbf{u}_f \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_f \rangle) + \nabla \cdot \langle \mathbf{u}'_f \otimes \mathbf{u}'_f \rangle \right] &= -\varepsilon \nabla \langle p_f \rangle^f + \mu_f \nabla^2 \cdot \langle \mathbf{u}_f \rangle - \varepsilon g \mathbf{e}_z + \\ \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} [\bar{\tau} - (p'_f + \rho_f \phi'_f) \bar{\delta}] \cdot \mathbf{n}_{fs} dS - & \\ \frac{1}{\varepsilon \Omega} \int_{S_{fs}} (\mathbf{u}_{fs} \otimes \mathbf{u}_{fs}) \cdot \mathbf{n}_{fs} dS - \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} (\mathbf{u}'_{fs} \otimes \mathbf{u}'_{fs}) \cdot \mathbf{n}_{fs} dS & \end{aligned} \quad (2.144)$$

Si l'on suppose que le glissement hydrodynamique ne modifie pas la modélisation du terme d'inertie (terme de Forchheimer) et des termes liés aux 3 forces de l'équation

microscopique du mouvement, on maintient la modélisation introduite précédemment (Eq. 2.94) et on arrive à :

$$\begin{aligned} \rho_f \left[\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{u}_f \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot (\langle \mathbf{u}_f \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_f \rangle) \right] &= -\varepsilon \nabla \langle p_f \rangle^f + \mu_f \nabla^2 \langle \mathbf{u}_f \rangle - \varepsilon \rho_f g \mathbf{e}_z + \\ &\quad \rho_f \varepsilon \left[\frac{\nu_f}{K} + \frac{B}{K} |\langle \mathbf{u}_f \rangle| \right] \langle \mathbf{u}_f \rangle - \\ \frac{1}{\varepsilon \Omega} \int_{S_{fs}} (\mathbf{u}_{fs} \otimes \mathbf{u}_{fs}) \cdot \mathbf{n}_{fs} dS &- \frac{1}{\Omega} \int_{S_{fs}} (\mathbf{u}'_{fs} \otimes \mathbf{u}'_{fs}) \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \end{aligned} \quad (2.145)$$

La modélisation des deux termes intégraux du membre de droite n'a jamais été faite : elle demande soit la réalisation de nombreuses expériences, soit des développements théoriques. Ce qu'il est facilement possible de faire numériquement est de résoudre les équations microscopiques pour une matrice poreuse donnée puis de les post-traiter : on calcule le champ moyen à partir de la définition de la moyenne de phase puis le champ des fluctuations (décomposition de Gray). On calcule ensuite tous les termes intégraux et on évalue leur importance numérique. A l'issue d'un grand nombre de calculs et de beaucoup de réflexion, on essaye de corréler les deux termes dus au glissement en fonction de paramètres microscopiques et/ou macroscopiques. Cet aspect ne sera pas abordé dans le cadre de ce mémoire de thèse.

- Equation de l'énergie : on part de la forme générale des moyennes intrinsèques de l'équation de l'énergie (Eq. 2.105) et de la chaleur (Eq. 2.106) dans lesquelles on supprime les termes correspondant à la partie instationnaire. Soient :

$$\begin{aligned} \rho_f C_{pf} \nabla \cdot (\langle T_f \rangle^f \langle \mathbf{u}_f \rangle^f) &= k_f \nabla^2 \langle T_f \rangle^f + \langle \omega_f \rangle^f - \rho_f C_{pf} \nabla \cdot \langle T'_f \mathbf{u}'_f \rangle^f \\ &+ \frac{k_f}{\Omega_f} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_f \mathbf{n}_{fs} dS \right) + \int_{S_{fs}} \nabla T_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \right) \\ &+ \frac{k_f}{\Omega_f} \int_{S_{fs}} T_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_{fs} dS \end{aligned} \quad (2.146)$$

Le dernier terme intégral représente la contribution du glissement : il est nul parce que \mathbf{u}_f et \mathbf{n}_{fs} sont perpendiculaires.

$$\begin{aligned} 0 &= k_s \nabla^2 \langle T_s \rangle^s + \langle \omega_s \rangle^s + \frac{k_s}{\Omega_s} \left(\nabla \cdot \left(\int_{S_{fs}} T_s \mathbf{n}_{sf} dS \right) \right) \\ &+ \frac{k_s}{\Omega_s} \left(\int_{S_{fs}} \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{sf} dS \right) \end{aligned} \quad (2.147)$$

La vitesse de glissement n'intervenant pas dans l'équation de la chaleur, le modèle précédent est donc conservé.

Chapitre 3

Méthode numérique et validation

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons d'abord le logiciel utilisé pour résoudre les équations de conservation sous leur forme stationnaire et pour post-traiter numériquement les résultats (calculs de moyennes en particulier). Des comparaisons avec des solutions analytiques ou avec des solutions publiées récemment et des tests de convergence spatiale sont discutés.

Les problèmes considérés sont divers et concernent des écoulements en conduite aussi bien que des écoulements dans des milieux poreux.

- Convection dans une micro-conduite plane et comparaison avec une solution analytique,
- Écoulement à travers un réseau de cylindres,
- Calcul des dispersions hydrodynamique et thermique dans un arrangement de barreaux à section carrée,
- Écoulements dans des empilements de sphères,
- Écoulements dans des réseaux de cubes.

3.2 Méthode numérique

Tous les calculs discutés dans les chapitres qui suivent ont été effectués en utilisant le logiciel Comsol [19], logiciel commercialisé utilisant une méthode de discrétisation spatiale par éléments finis. Bien que nous ne présentons que des résultats stationnaires, nous décrivons succinctement les solveurs stationnaires et instationnaires parce que la taille des systèmes d'équations à résoudre nous a conduit, dans certains cas, à recourir à des méthodes instationnaires afin de réduire la taille des systèmes linéarisés (par découpage itératif) compte-tenu des capacités mémoires des machines disponibles au laboratoire.

3.2.1 Maillage

En géométries 1D, on divise le domaine en segments dont les extrémités sont les sommets du maillage. En géométries 2D, on divise le domaine par des éléments triangulaires

ou quadrilatéraux. Les côtés des triangles ou des quadrilatères sont appelés les bords des mailles et leurs sommets sont les sommets du maillage. De la même façon en 3D, on utilise des éléments tétraédriques, hexaédriques, ou des prismes. Les faces formant les limites du domaine géométrique sont partitionnées en éléments triangulaires ou quadrilatéraux.

3.2.2 Éléments finis

Après avoir construit le maillage, on introduit des approximations des variables dépendantes par des fonctions analytiques. Pour un problème simple ne dépendant que d'une seule variable u , on introduit une fonction qui décrit un nombre fini de paramètres, nommés nombre de degrés de liberté (ddl). Différents types d'éléments sont implémentés dans Comsol : élément courbe, élément de Lagrange, élément d'Argyris, élément d'Hermite, élément bulle, élément discontinu, ... On présente ici l'élément de Lagrange que l'on a utilisé dans toutes nos simulations numériques.

Considérons un nombre positif k , ordre des éléments lagrangiens. La fonction u est alors un polynôme de degré k . Pour décrire cette fonction, on introduit le point de Lagrange dont la coordonnée locale est multipliée par $1/k$: par exemple, pour un maillage triangulaire en 2D avec $k = 2$ cela signifie que l'on a des noeuds aux sommets aux milieux des côtés de toutes les mailles triangulaires. Pour chacun des noeuds p_i , il existe un degré de liberté $U_i = u(p_i)$ et une fonction de forme φ_i tels que :

$$u(\vec{x}) = \sum_i U_i \varphi_i(\vec{x}) \quad (3.1)$$

Un élément lagrangien d'ordre 1 est appelé élément linéaire, un élément d'ordre 2 est appelé élément quadratique. Les éléments de Lagrange sont disponibles avec tous les types de maillage. L'ordre k peut être arbitraire, mais les formules d'intégration numérique limitent généralement son utilité à $k \leq 5$ ($k \leq 4$ pour les mailles tétraédriques).

3.2.3 Solveur stationnaire :

Le solveur stationnaire permet de résoudre des problèmes décrits par des systèmes d'équations aux dérivées partielles linéaires ou non linéaires. La forme générique d'une équation stationnaire est de la forme :

$$\nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f \quad (3.2)$$

Dans un modèle non linéaire, un ou plusieurs des coefficients $c, \alpha, \gamma, \beta, a$ et le second membre f dépendent de la solution u ou de ses dérivées.

Par défaut, COMSOL Multiphysics résout deux problèmes : un linéaire et l'autre non linéaire en se basant sur la formulation faible suivante :

$$\begin{aligned} L(u) + (\nabla r_f)^T \mu &= 0 \\ r(u) &= 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

où la valeur résiduelle, $L(u)$, est la somme de toutes les contributions de la formulation faible du modèle, $r(u)$ est un vecteur colonne qui contient les contraintes et ∇r_f est le

Jacobien. L'objectif du solveur stationnaire est de trouver une solution u qui satisfait l'équation 3.3.

Modèle linéaire :

Après la discrétisation par éléments finis, nous pouvons écrire un modèle linéaire ou linéarisé sous la forme :

$$\begin{aligned} K(U_0)(U - U_0) + N_F(U_0)\Lambda &= L(U_0) \\ N(U_0)(U - U_0) &= M(U_0) \end{aligned} \quad (3.4)$$

où U_0 est le vecteur correspondant au point u_0 de linéarisation, U est la vecteur (correspondant à u), et Λ est le vecteur des multiplicateurs de Lagrange (correspondant à μ). K est la matrice jacobienne (matrice de rigidité), L est l'équation du vecteur résiduel, N est la contrainte de la matrice jacobienne, N_F est la force de contrainte jacobienne et M est un vecteur de contrainte résiduelle.

Si le modèle n'a que des contraintes idéales,

$$N_F = N^T \quad (3.5)$$

Si le modèle est linéaire, K , N_F et N sont indépendants de U_0 et si de plus $U_0 = 0$ nous pouvons écrire

$$\begin{bmatrix} K & N_F \\ N & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ \Lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L(0) \\ M(0) \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Solveur direct :

Les solveurs directs PARDISO, UMFPACK, SPOOLES et TAUCS Cholesky sont préférables pour les modèles 1D et 2D ainsi que pour les modèles 3D avec un nombre de degrés de liberté petit (en gros, entre 100.000 et 1.000.000 selon la mémoire disponible). Le solveur direct résout un système linéaire par élimination de Gauss. Ce processus stable et fiable est bien adapté pour les systèmes mal conditionnés. En 1D et 2D, les solveurs directs sont utilisés par défaut parce qu'ils sont plus rapides que les solveurs itératifs.

Solveur itératif :

Pour les modèles avec de grands degrés de liberté (en gros, plus de 1.000.000 selon la mémoire de l'ordinateur disponible), les solveurs directs ont souvent besoin de trop de mémoire. Dans ce cas, les solveurs itératifs comme GMRES, FGMRES, gradients conjugués, BiCGStab et multigrille sont mieux adaptés. Cependant, les solveurs itératifs sont moins stables que les directs et ne sont pas toujours convergents. Pour améliorer la convergence d'un solveur itératif, il est important de choisir un préconditionneur approprié : décomposition LU incomplète, SSOR, Vanka, ...

Critère de convergence :

Lorsqu'on utilise un solveur itératif, COMSOL Multiphysics [19] estime l'erreur de la solution au cours de la résolution. Quand l'estimation de l'erreur est suffisamment petite, telle que déterminée par le critère de convergence suivant :

$$\rho |M^{-1}(b - Ax)| < tol. |M^{-1}b| \quad (3.7)$$

le logiciel termine les calculs et la/une solution est obtenue. Quand on utilise un solveur direct, Comsol fait un contrôle d'erreur. Si le critère de convergence n'est pas satisfait, le

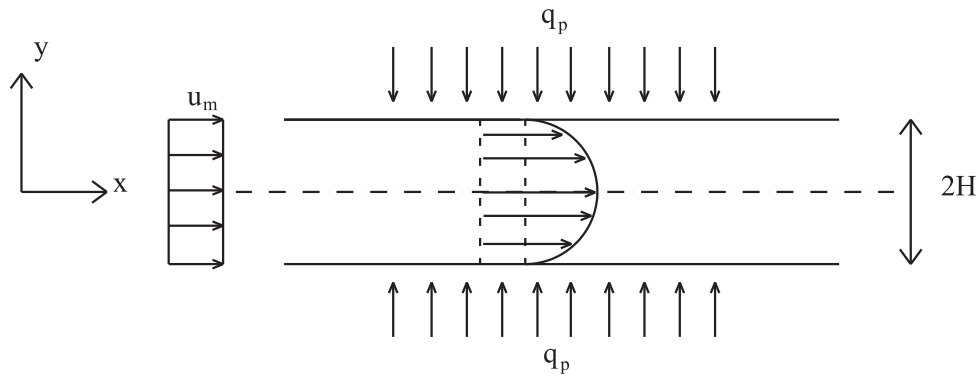


FIGURE 3.1 – Écoulement de Poiseuille plan dans une micro-conduite (système de coordonnées (x, y)).

processus de calcul s'arrête et un message est donné.

La définition de M pour les différents solveurs est :

- Pour UMFPACK, PARDISO et SPOOLES, $M = LU$, où L et U sont les matrices triangulaires inférieure et supérieure calculées par le solveur.
- Quand on utilise les solveurs itératifs GMRES, gradients conjugués et BiCGStab, M est la matrice préconditionnée.
- Pour les autres solveurs itératifs, M est la matrice identité.

3.3 Comparaisons avec des cas tests.

3.3.1 Convection forcée dans une micro-conduite plane : effets de la vitesse de glissement sur les transferts en régime dynamique et thermique établi.

Le logiciel Comsol permet de calculer des écoulements avec des vitesses de glissement du premier ordre. L'utilisateur doit d'abord vérifier que la programmation de la condition de glissement permet effectivement de retrouver une solution analytique. Nous avons choisi le cas d'une conduite plane pour laquelle une solution analytique est facile à dériver en régime établi.

3.3.2 Solution analytique

Lorsqu'un fluide s'écoule dans une micro-conduite, les conditions aux limites des équations du mouvement et de l'énergie doivent être modifiées lorsque le nombre de Knudsen est inférieur à $Kn = 0,1$ ($Kn = \lambda/D_h$ où λ est le libre parcours moyen des molécules, au sens de la théorie cinétique des gaz, et D_h est le diamètre hydraulique de la conduite).

Les conditions aux limites pour la composante tangentielle de la vitesse et pour la température, dans le cas d'un écoulement symétrique de Poiseuille plan en régime établi

(Figure 3.1), peuvent être écrites en $y = H$ sous la forme :

$$u(H) = -L_s \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=H} \quad T(x, H) - T_p(x) = 0 \quad (3.8)$$

Cette expression traduit la discontinuité de vitesse au voisinage des parois et la continuité des températures fluide-solide.

Si le fluide est un gaz parfait, le coefficient L_s s'exprime en fonction de coefficient d'accommodation dynamique, σ sous la forme

$$L_s = \left(\frac{2 - \sigma}{\sigma} \right) \lambda \quad 0 \leq \sigma \leq 1 \quad (3.9)$$

En régime dynamiquement établi, $dp/dx = cste$. En régime thermiquement établi, $\partial T/\partial x = dT_m/dx = cste$ si une densité de flux de chaleur uniforme q_p est appliquée sur les parois.

L'équation du mouvement se réduit à :

$$0 = -\frac{dp}{dx} + \mu \frac{d^2u}{dy^2} \quad (3.10)$$

et l'équation de l'énergie à :

$$\rho C_p u(y) \frac{dT_m}{dx} = k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (3.11)$$

Les conditions aux limites sont données par les équations 3.8 et par les conditions de symétrie sur l'axe de la conduite (soit $du/dy|_0 = 0$ et $dT/dy|_0 = 0$).

A partir des équations 3.10 et 3.11, les équations du mouvement et de l'énergie s'écrivent sous la forme :

$$\frac{d^2u}{dy^2} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{dp}{dx} \right) \quad \text{et} \quad \frac{d^2T}{dy^2} = \frac{q_p}{Hk} \left(\frac{u(y)}{u_m} \right) \quad (3.12)$$

où u_m est la vitesse moyenne (ou vitesse débitante).

Le profil de vitesse axiale a pour expression (voir l'annexe 1) :

$$\frac{u(y)}{u_m} = \frac{6L_s H + 3H^2 - 3y^2}{6L_s H + 2H^2} \quad (3.13)$$

où la vitesse moyenne s'écrit

$$u_m = \frac{1}{2H} \int_{-H}^H u(y) dy = \frac{1}{H} \int_0^H u(y) dy = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{dp}{dx} \right) \left(L_s H + \frac{H^2}{3} \right) \quad (3.14)$$

Le profil de température axiale a pour expression (voir l'annexe 1) :

$$T(x, y) = - \left[\frac{q_p}{4Hk} \frac{1}{6L_s H + 2H^2} \right] y^4 + \left[\frac{q_p}{2Hk} \frac{6L_s H + 3H^2}{6L_s H + 2H^2} \right] y^2 + \left[\frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} \right] x + T_e + \frac{q_p}{h} - \frac{5H^3 q_p + 12L_s H^2 q_p}{4k(6L_s H + 2H^2)} \quad (3.15)$$

Coefficients et propriétés macroscopiques

Les définitions usuelles des coefficients de frottement, C_f , et de perte de charge, f , conduisent aux expressions suivantes :

$$C_f = \frac{\tau_p}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} = \frac{-\frac{dp}{dx}H}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} = \frac{\frac{\mu u_m}{L_s H + H^2/3}H}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} = \frac{2\mu}{\rho u_m(L_s + H/3)} \quad (3.16)$$

$$f = -\frac{dp}{dx} \frac{D_h}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} = \frac{\frac{\mu u_m}{L_s H + H^2/3}4H}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} = \frac{8\mu}{\rho u_m(L_s + H/3)} = 4C_f \quad (3.17)$$

Bien que n'ayant pas de sens physique, le coefficient de dispersion thermique et la tortuosité peuvent être calculés à partir de leurs définitions données dans le chapitre précédent : la fluctuation de vitesse est alors l'écart entre la vitesse locale et la vitesse débitante ($u' = u(y) - u_m$); la fluctuation de température est l'écart entre la température locale et la température moyenne débitante. Comme la solution en régime établi est unidirectionnelle, ces quantités sont des scalaires.

Coefficient de dispersion thermique longitudinal :

$$(K_{disp})_{xx} \cdot \nabla \langle T \rangle = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega} (u - \langle u \rangle^f) (T - \langle T \rangle) d\Omega = A \times B \quad (3.18)$$

avec

$$A = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \nabla \langle T \rangle$$

$$B = \left[\frac{2}{5} (C_1 C_5 + C_2 C_6) H^5 (x_2 - x_1) - \frac{2}{7} C_2 C_5 H^7 (x_2 - x_1) + \frac{2}{3} C_3 C_5 H^3 \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) \right. \\ \left. + \frac{2}{3} (C_5 C_7 - C_1 C_6) H^3 (x_2 - x_1) - 2C_3 C_6 H \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) - 2C_6 C_7 H (x_2 - x_1) \right] \quad (3.19)$$

Les coefficients C_1 à C_7 sont donnés dans l'annexe 1 et les abscisses x_1 et x_2 sont arbitraires en régime établi (la valeur de K_{disp} est indépendante du choix de x_1 et de x_2 pourvu que $\nabla \langle T \rangle$ soit constant quelle que soit la valeur de $(x_2 - x_1)$).

Coefficient de tortuosité : la tortuosité doit être nulle pour une conduite rectiligne (conduites à section rectangulaire, circulaire, espace annulaire...). On vérifie dans l'annexe 1 que la solution analytique conduit bien à $\int_{S_{fs}} T \cdot \mathbf{n} dS = 0$ et donc que

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{tor} = \frac{k_f - k_s}{\Omega} \int_{S_{fs}} T \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.20)$$

Les différentes façons utilisées pour calculer $\nabla \langle T \rangle$ sont décrites dans l'annexe 1.

3.3.3 Comparaison entre des solutions analytiques et des résultats numériques

Les calculs ont été effectués pour les valeurs numériques suivantes :

Données : $H = 0.5 \mu m$, $L = 10 \mu m$, $u_m = 50 m/s$, $T_0 = 300 K$, $q_p = 10^3 W/m^2$
 Coefficient de glissement et libre parcours moyen : $\sigma = 0,9$, $\lambda = 0,0611 \mu m$
 Propriétés du fluide : $\rho_f = 1 kg/m^3$, $\mu = 2 \times 10^{-5} Pa.s$, $C_{pf} = 1006 J/kg K$, $k_f =$

$0,025 \text{ W/m K}$, $\gamma = 3/2$, $Pr = 0,7$

Résultats préliminaires :

En faisant varier le nombre de Knudsen, on obtient les variations de u/u_{moy} et de u_{max}/u_{moy} en fonction de y et de x , comme représentées sur la figure 3.2 qui montre un bon accord entre les résultats numériques et les solutions analytiques.

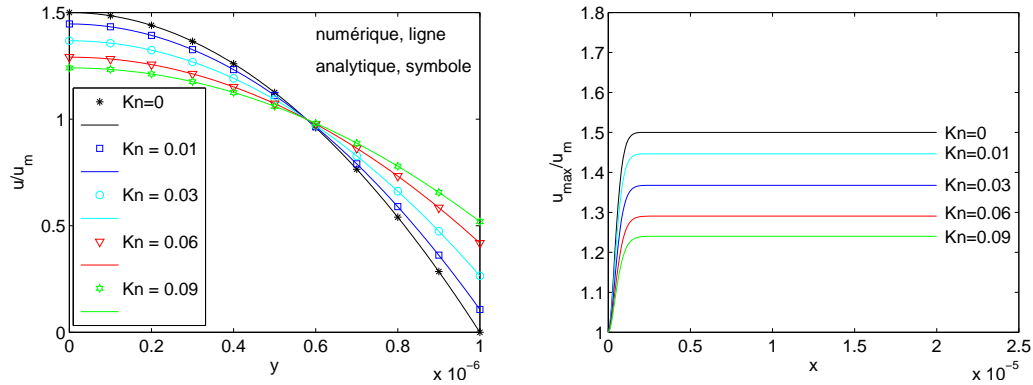


FIGURE 3.2 – Comparaison entre les résultats numériques et les solutions analytiques pour différents nombres de Knudsen, $Re = 2.58 \times 10^{-3}$.

Quand les nombres de Reynolds et de Knudsen augmentent, la figure 3.3 montre que la longueur d'établissement du régime dynamique augmente.

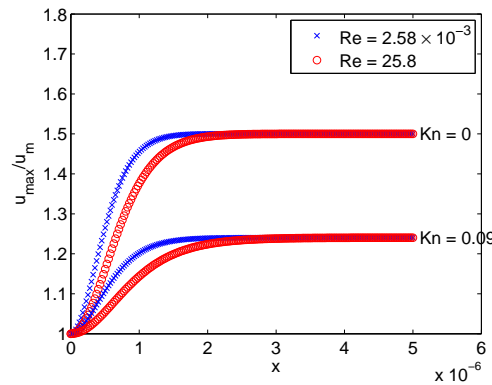


FIGURE 3.3 – Établissement du régime dynamique pour deux valeurs de Kn et de Re.

Application au cas du non-glissement :

$$L_s = 0, \quad x_1 = 8H, \quad x_2 = 10H$$

Résultats analytiques :

On calcule les 4 nombres adimensionnels suivants ($D_h = 4H = 2 \cdot 10^{-6}m$, $u_m = 50m/s$).

– Nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{u_m \cdot D_h}{\nu} = 5$$

– Coefficient de frottement C_f :

$$C_f = \frac{\tau_p}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} = \frac{24}{Re} = 4.8$$

– Coefficient de perte de charge f :

$$f = \frac{\Delta P}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} \frac{D_h}{L} = \frac{96\nu}{u_m D_h} = \frac{96}{Re} = 19.2$$

Le nombre de Nusselt Nu , qui représente le rapport entre le transfert thermique par convection et le transfert par conduction, a pour valeur :

$$Nu = \frac{hD_h}{k} = \frac{140}{17} = 8.235$$

Les calculs analytiques conduisent aux résultats reportés dans le tableau 3.1 :

Re	C_f	f	Nu	A	B	K_{disp}	K_{disp}/k_f
5	4.8	19.2	8.235	-2.5301×10^{10}	-8.5714×10^{-14}	2.1686×10^{-3}	0.0867

TABLE 3.1 – Tableau des solutions analytiques pour l'écoulement de Poiseuille plan dans le cas de non-glissement.

Résultats numériques :

On simule une micro-conduite de diamètre $2H$ et longueur L donnés. Une étude de maillage non-uniforme avec un maillage très resserré à l'entrée et aux voisinages des parois a conduit à un maillage (40×400) représenté sur la figure 3.4.

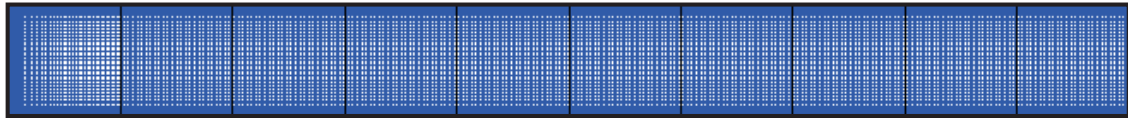


FIGURE 3.4 – Maillage non uniforme 40×400

- Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\begin{aligned} u = u_m, \quad v = 0, \quad T = T_0, \quad \text{en } x = 0, \quad \forall y \\ \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \text{en } x = L, \quad \forall y \\ u = v = 0, \quad q = q_p, \quad \text{en } y = \pm H \quad \forall x \end{aligned}$$

Pour cet écoulement laminaire dans une conduite plane, la longueur d'établissement dynamique est de l'ordre de

$$x_D = C_l D_h Re \approx 0.11 \times 2 \cdot 10^{-6} \times 5 = 1.1 \times 10^{-6} (m) \quad (3.21)$$

La longueur d'établissement du régime thermique, x_T , est de l'ordre de grandeur du produit $x_D Pr$. La figure 3.5 montre que l'écoulement s'établit très rapidement, dynamiquement et thermiquement, dans une micro-conduite. La vitesse maximale $u(x, 0)$ devient rapidement constante et égale à $1,5u_m$ (Fig. 3.6) et la variation de température est linéaire ($\partial T/\partial x = dT_m/dx = cste$).

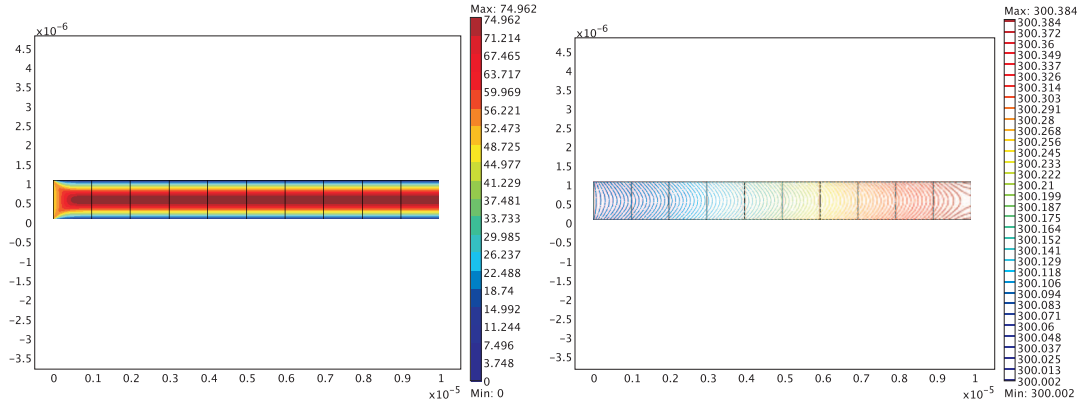


FIGURE 3.5 – Champ de vitesse et de température

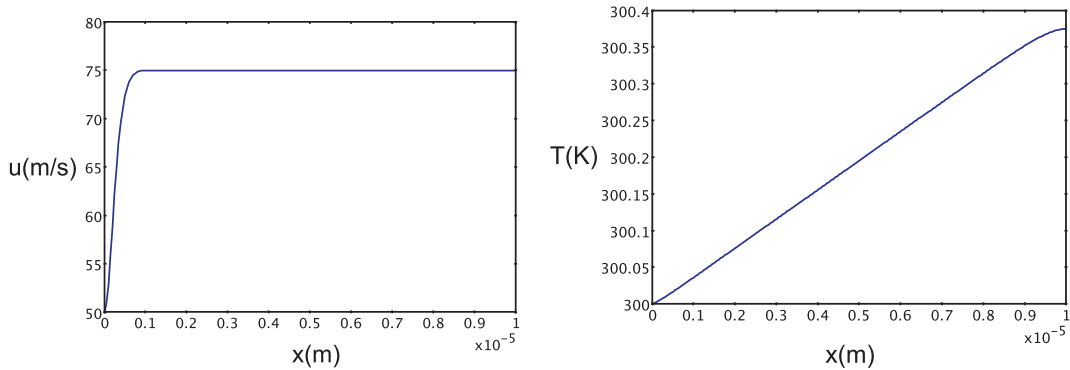


FIGURE 3.6 – Profils longitudinaux de vitesse et de température sur l'axe.

Quand l'écoulement est établi, on n'utilise qu'une cellule au milieu de la conduite pour déterminer la dispersion thermique K_{disp} . Ici, on a situé la cellule entre les abscisses $x_1 = 8H$ et $x_2 = 10H$. Les résultats obtenus selon les quatre façons de calculer $\nabla\langle T \rangle$ (Annexe 1) sont reportés dans le tableau 3.2. On remarque que l'écart entre les 4 valeurs n'est pas significatif.

On trouvera une synthèse des résultats numériques pour le cas de non-glissement dans le tableau 3.3.

Application au cas du glissement :

On procède comme dans le cas de non-glissement en ne changeant que la condition de vitesse aux parois avec le coefficient de glissement L_s donné ci-dessous.

$$L_s = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda = 7.469 \times 10^{-8} m, \quad x_1 = 8H, \quad x_2 = 10H$$

	Analytique	Numérique			
		1ère façon	2è façon	3è façon	4è façon
$\nabla\langle T \rangle$	39761	39791	39791	39788	39788
K_{disp}	2.1686×10^{-3}	2.1654×10^{-3}	2.1654×10^{-3}	2.1655×10^{-3}	2.1655×10^{-3}
K_{disp}/k_f	0.0867	0.0866	0.0866	0.0866	0.0866

TABLE 3.2 – Comparaison entre la solution analytique et les 4 façons de calculer numériquement le gradient macroscopique de température (annexe 1) dans le cas de non-glissement.

Re	C_f	f	Nu	A	B	K_{disp}	K_{disp}/k_f
5	4.7964	19.1855	8.2415	-2.5282×10^{10}	-8.5649×10^{-14}	2.1654×10^{-3}	0.0866

TABLE 3.3 – Résultats numériques pour l'écoulement de Poiseuille plan dans le cas de non-glissement.

Résultats analytiques :

– Nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{u_m \cdot D_h}{\nu} = 5$$

– Coefficient de frottement C_f :

$$C_f = \frac{\tau_p}{\frac{1}{2}\rho u_m^2} = 3.3146$$

– Coefficient de perte de charge f :

$$f = 4C_f = 13.2584$$

– Nombre de Nusselt :

$$Nu = \frac{hD_h}{k} = \frac{140}{17} = 9.206$$

Les résultats analytiques sont reportés dans le tableau 3.4.

Re	C_f	f	Nu	A	B	K_{disp}	K_{disp}/k_f
5	3.3146	13.2584	9.206	-2.5301×10^{10}	-5.5119×10^{-14}	1.3946×10^{-3}	0.0558

TABLE 3.4 – Résultats analytiques de l'écoulement de Poiseuille plan avec glissement ($L_s = 7.469 \times 10^{-8}m$).

Résultats numériques :

Dans ce cas la vitesse maximale n'est égal plus $1.5 u_m$ et la vitesse aux parois est différente de zéro : la figure 3.7 montre que la vitesse maximale (sur l'axe) est égale à $\approx 67m/s$ parce que la vitesse de glissement est de l'ordre de $15 m/s$.

Le tableau 3.5 donne le gradient macroscopique de température $\nabla\langle T \rangle$ selon les 4 façons de le calculer (annexe 1). On obtient la même solution.

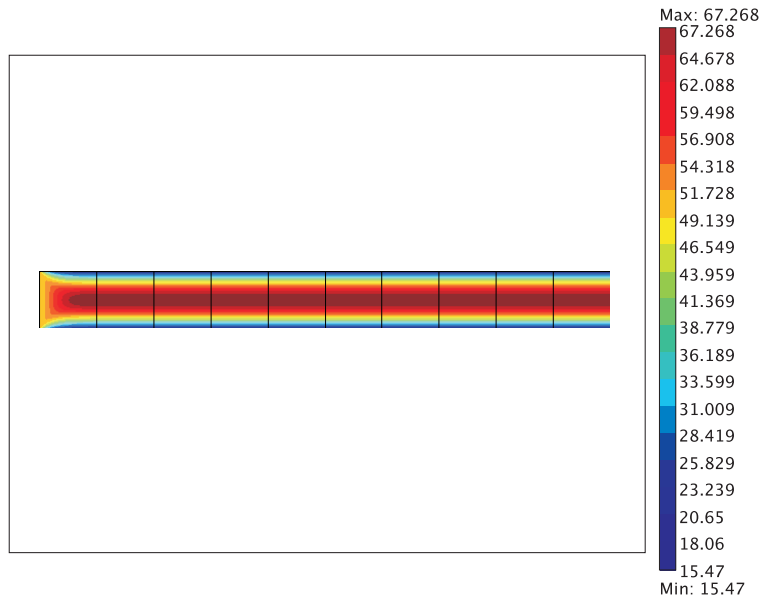


FIGURE 3.7 – Champ de vitesse \mathbf{u} (m/s)

	Analytique	Numérique			
		1ère façon	2è façon	3è façon	4è façon
$\nabla\langle T \rangle$	39761	39761	39760	39759	39759
K_{disp}	1.3946×10^{-3}	1.3946×10^{-3}	1.3946×10^{-3}	1.3946×10^{-3}	1.3946×10^{-3}
K_{disp}/k_f	0.0558	0.0558	0.0558	0.0558	0.0558

TABLE 3.5 – Comparaison entre les 4 façons (annexe 1) de calculer le gradient macroscopique de température pour le cas de glissement.

Le tableau 3.6 donne une synthèse des résultats numériques pour le cas de glissement.

Re	C_f	f	Nu	A	B	K_{disp}	K_{disp}/k_f
5	3.3146	13.2584	9.206	-2.5302×10^{10}	-5.5119×10^{-14}	1.3946×10^{-3}	0.0558

TABLE 3.6 – Résultats numériques pour un écoulement de Poiseuille plan avec glissement.

Le tableau 3.7 synthétise les résultats analytiques et numériques pour des écoulements avec ou sans glissement.

3.3.4 Convection forcée dans une conduite à parois conductrices d'épaisseur non nulle.

Les calculs présentés dans le paragraphe précédent ont été comparés à des solutions analytiques. Le problème réside dans le fait que le modèle utilisé ne représente pas un milieu poreux puisqu'il n'existe pas de matrice solide. Le milieu poreux le plus simple à étudier est constitué de conduites planes comprises entre couches de solide (milieu lamellaire,

	Non-glissement		Glissement	
	Analytique	Numérique	Analytique	Numérique
Re	5	5	5	5
C_f	4.8	4.7964	3.3146	3.3146
f	19.2	19.1855	13.2584	13.2584
Nu	8.235	8.2415	9.206	9.206
K_{disp}/k_f	0.0867	0.0866	0.0558	0.0558

TABLE 3.7 – Résultats analytiques et numériques pour un écoulement de Poiseuille plan.

Fig. 3.8). En dehors de cas très particuliers (se ramenant en fait au problème précédent), il n'existe pas de solutions analytiques parce que la conduction thermique dans la paroi rend le transfert de chaleur bidimensionnel avec des conditions d'échanges non-homogènes. Nous ne considérons pas ici l'effet du glissement qui sera étudié dans le chapitre 5.

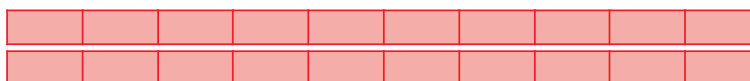


FIGURE 3.8 – Conduite plane à parois conductrices (les traits verticaux délimitent des VER arbitraires).

On a étudié l'influence de l'épaisseur de la paroi conductrice sur la dispersion thermique et sur la condition d'équilibre thermique locale (ETL) puis on a comparé les solutions macroscopique et microscopique. Dans cette partie, on ne tient pas compte du glissement.

La largeur de la conduite est dans tous les cas $d = 1 \mu m$ ($D_h = 2 \mu m$) et le rapport des conductivités thermiques a pour valeur $k_s/k_f = 10$. On a fait varier l'épaisseur des parois de $e = 0,5 \mu m$ à $e = 4,5 \mu m$ (donc $2 \mu m \leq H = d + 2e \leq 10 \mu m$ et $0,1 \leq \varepsilon = d/(d + e) \leq 0,5$). La longueur de la conduite a été fixée à $L = 100\mu m$, soit $100d$. Compte tenu des faibles nombres de Reynolds et de Péclet considérés, les régimes dynamique et thermique s'établissent dès le début de la conduite que l'on a divisée en 10 parties qui correspondent à des VER, sur lesquels des conditions de périodicité pourraient être appliquées, à condition que le régime soit établi.

La figure 3.9 montre que la dispersion thermique longitudinale augmente avec le nombre de Péclet et diminue lorsque l'épaisseur de la paroi augmente. L'augmentation de la dispersion longitudinale avec le nombre de Péclet (Fig. 3.9) peut être corrélée par la relation $K_{disp}/k_f = a Pe^{1.98}$ où a diminue quand H augmente ($a = 0.0027$ pour $H = 2 \mu m$, $a = 0.0009$ pour $H = 6 \mu m$ et $a = 0.0006$ pour $H = 10 \mu m$). Lorsque l'épaisseur de la paroi augmente, le gradient transverse de température diminue et donc $T'_f = T - T_m$ diminue. Les résultats calculés avec Comsol ont été comparés aux résultats obtenus avec Fluent : la figure 3.9 montre un excellent accord.

Dans tous les cas, l'écart entre la température moyenne des parois et la température moyenne du fluide (moyennes intrinsèques) est négligeable comme le montre le tableau 3.8 : on en conclût que la condition d'équilibre thermique local est vérifiée.

On considère maintenant la simulation à l'échelle macroscopique. La figure 3.10 montre

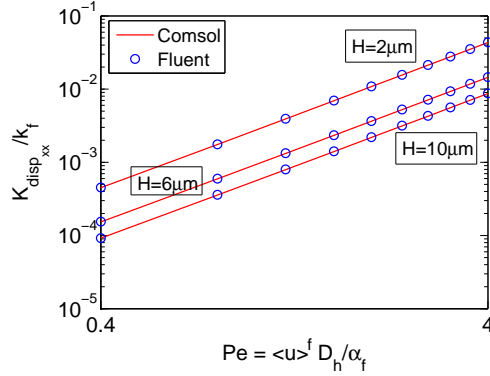


FIGURE 3.9 – Dispersion thermique longitudinale en fonction du nombre de Péclet pour différentes épaisseurs des parois

	$\langle T \rangle$	$\langle T_f \rangle^f$	$\langle T_s \rangle^s$
$H = 10 \mu m$	302.8078	302.8035	302.8083
$H = 6 \mu m$	304.6904	304.6871	304.6911
$H = 2 \mu m$	313.4251	313.4221	313.4282

TABLE 3.8 – Condition d'équilibre thermique local

le modèle équivalent. L'équation macroscopique de l'énergie s'écrit



FIGURE 3.10 – Modèle macroscopique

$$\rho_f C_{pf} \langle \mathbf{u} \rangle \cdot \nabla \langle T \rangle = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla \langle T \rangle) \quad (3.22)$$

La conductivité thermique effective (scalaire en régime dynamique établi et tortuosité nulle) a pour expression $k_{eff} = k_e + k_{disp}$ avec $k_e = \varepsilon k_f + (1 - \varepsilon) k_s$. la vitesse moyenne de phase, $\langle \mathbf{u} \rangle = \varepsilon \langle \mathbf{u} \rangle^f$, a été introduite dans cette équation dont les conditions aux limites sont :

$$\begin{aligned} T_f &= T_s = T_0, & \text{en } x = 0, \quad \forall y \\ \frac{\partial T_f}{\partial y} &= \frac{\partial T_s}{\partial y} = 0, & \text{en } x = L, \quad \forall y \\ q &= q_p, & \text{en } y = 0, H \quad \forall x \end{aligned}$$

La solution de l'équation macroscopique conduit exactement aux mêmes valeurs (à trois décimales près) que les moyennes de phase reportées dans le tableau 3.8. Par exemple, on trouve $\langle T \rangle = 302.808$ pour le cas $H = 10 \mu m$.

Le tableau 3.9 donne les valeurs numériques de la perméabilité pour différentes épaisseurs des parois. La valeur théorique est $K_{theo} = \varepsilon d^2/12$: l'accord entre calcul et théorie est excellent.

	$H = 2\mu m$	$H = 6\mu m$	$H = 10\mu m$
$K_D(m^2)$	4.17×10^{-14}	1.39×10^{-14}	8.33×10^{-15}

TABLE 3.9 – Perméabilité (sans-glisement) dans le cas 1D

La principale limitation de ces calculs réside dans la non-prise en compte des effets de compressibilité. Compte tenu de la dimension micrométrique de la conduite, la différence de pression entrée - sortie peut être considérable lorsque la vitesse débitante est grande. Cela signifie que la différence de masse volumique est aussi très importante si le fluide est un gaz. Bien que cette question ne soit pas abordée dans le cadre de cette thèse, nous tenons à souligner qu'elle devra être nécessairement traitée dans les travaux futurs.

La différence de pression entre l'entrée et la sortie d'une cellule de $10\mu m$ de longueur (calculée sur la base de l'hypothèse d'incompressibilité) est donnée dans le tableau 3.10. On constate qu'elle est considérable si $u_m = 50 m/s$ (soit $Pe = 4$).

$u(m/s)$	5	25	50
$Pe = \frac{\langle u \rangle^f D_h}{\alpha_f}$	0.4	2	4
$\Delta P^f (Pa)$	12.000	60.000	120.000

TABLE 3.10 – Chute de la pression entre l'entrée et la sortie d'une cellule de $10\mu m$ de longueur

3.4 Écoulements à travers des réseaux bidimensionnels de cylindres

On considère un milieu périodique constitué de cylindres indéformables de section circulaire de rayon r ou de section carrée de côté $2a$ (Fig. 3.11).

3.4.1 Cellule de base

a) la première figure correspond à un arrangement en ligne de cylindres de section circulaire de rayon r , chaque côté de la maille a pour valeur $2d = 4r$. La fraction volumique $c = \pi r^2/4d^2$ varie entre $0 < c < \pi/4$

b) la deuxième figure correspond à un arrangement en quinconce de cylindres de section circulaire de rayon r , la dimension de la maille est de $2d \times 2d_1$ avec $2d_1 = 2d\sqrt{3}$. La fraction volumique $c = 2\pi r^2/4(d^2\sqrt{3})$ varie entre $0 < c < \pi/2\sqrt{3}$

c) la troisième figure correspond à un arrangement en ligne de cylindres de section carrée de côté $2a$, chaque côté de la maille a pour valeur $2d$. La fraction volumique varie entre $0 < c < 1$

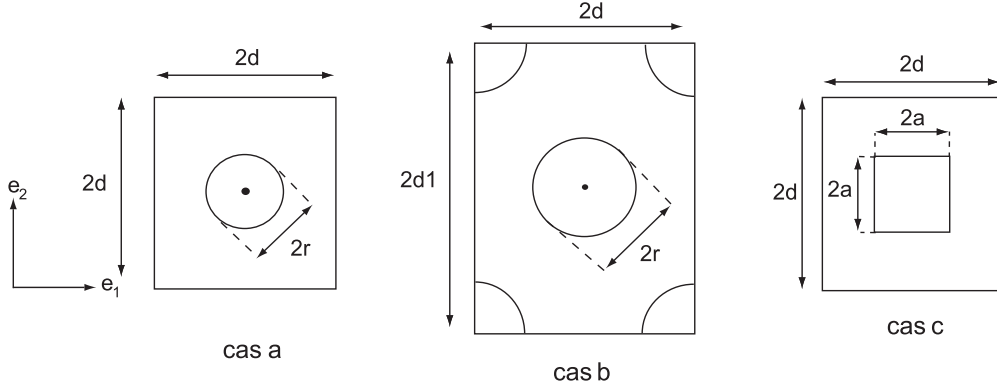


FIGURE 3.11 – Exemples de cellules élémentaires de milieux poreux périodiques.

3.4.2 Calcul de la perméabilité \mathbf{K}

L'écoulement est décrit par la loi de Darcy :

$$\langle \mathbf{u} \rangle = -\frac{\mathbf{K}_D}{\mu} \langle \nabla p^{(0)} \rangle \quad (3.23)$$

En raison de la symétrie des structures, l'écoulement présente une propriété d'isotropie transverse. Ainsi, en coordonnées cartésiennes (e_1, e_2, e_3) , le tenseur de perméabilité \mathbf{K} pour les réseaux périodiques de cylindres peut être écrit sous la forme :

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_{11} & 0 & 0 \\ 0 & K_{22} & 0 \\ 0 & 0 & K_{33} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Les composantes $K_{11} = K_{22}$ décrivent la perméabilité dans le cas du problème plan (e_1, e_2) quand l'écoulement est normal par rapport à l'axe des cylindres : soit $\mathbf{G} = e_1$, soit $\mathbf{G} = e_2$. A cause de la géométrie et du gradient macroscopique de pression, la composante K_{11} (ou K_{22}) est obtenue en simulant uniquement le problème plan 2D, tandis que K_{33} est obtenue par une simulation 3D lorsque l'écoulement est parallèle à l'axe des cylindres $\mathbf{G} = e_3$.

3.4.2.1 Simulation numérique de l'écoulement PERPENDICULAIRES à l'arrangement des cylindres

Le problème aux limites résolu sur un VER périodique en 2D avec $\mathbf{G} = e_1$ donne les composantes de la perméabilité $K_{11} = K_{22}$ et $K_{12} = K_{21} = 0$. La perméabilité normalisée est $K_{11}^* = K_{22}^* = K_{11}/S = K_{22}/S$ avec $S = 4d^2$ pour l'arrangement en ligne et $S = 4\sqrt{3}d^2$ pour l'arrangement en quinconce. Le champ de vitesse locale s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{u}^{(0)} = u^{(0)} \mathbf{e}_1 + v^{(0)} \mathbf{e}_2 = \frac{k_{11}}{\mu} \mathbf{e}_1 + \frac{k_{21}}{\mu} \mathbf{e}_2 \quad (3.25)$$

et

$$K_{11} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{11} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} u^{(0)} dy = \mu \langle u^{(0)} \rangle \quad (3.26)$$

$$K_{21} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{21} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} v^{(0)} dy = \mu \langle v^{(0)} \rangle = 0 \quad (3.27)$$

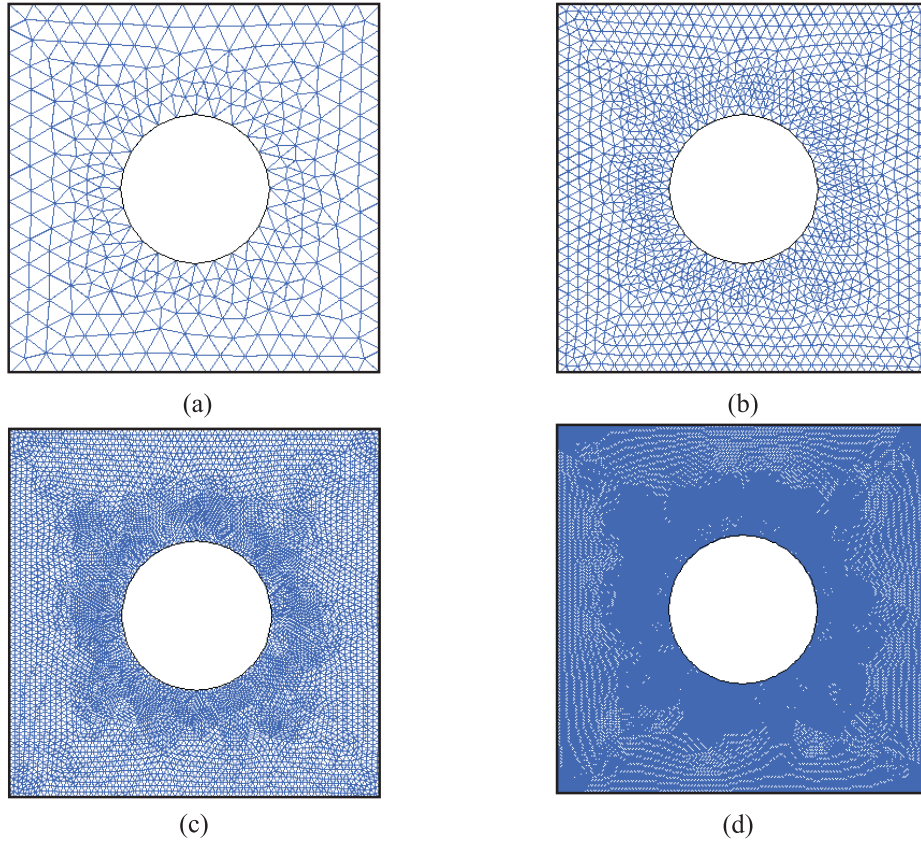


FIGURE 3.12 – Etude du maillage pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l’arrangement en ligne : a) normal, b) fin, c) plus fin, d) très fin.

3.4.2.1.1 Etude de la convergence spatiale Dans cette partie, on estime le temps de calcul et l’espace mémoire utilisé afin de rechercher le maillage optimal. Les simulations numériques sont effectuées sur une station de calcul du laboratoire ayant 164 Go de mémoire . Après avoir considéré les résultats de convergence spatiale reportés dans les tableaux 3.11, 3.12 et 3.13, on a retenu, pour les trois réseaux de cylindres, le maillage appelé ”plus fin”.

Maillage	normal	fin	<i>plus fin</i>	très fin
Nombre d’éléments	638	2 552	<i>10 208</i>	40 832
Nombre de degrés de liberté	6 258	24 000	<i>93 936</i>	371 616
K_{11}/S	3,2938E-2	3,2947E-2	<i>3,2948E-2</i>	3,2948E-2

TABLE 3.11 – Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l’arrangement en ligne (Figure 3.12).

3.4.2.1.2 Champs microscopiques de vitesse et de pression Les figures 3.15, 3.16 et 3.17 montrent les champs microscopiques de vitesse et de pression pour les trois réseaux des cylindres. Les figures 3.15a, 3.16a et 3.17a montrent que le champ microscopique de pression est symétrique par rapport l’axe e_1 ,

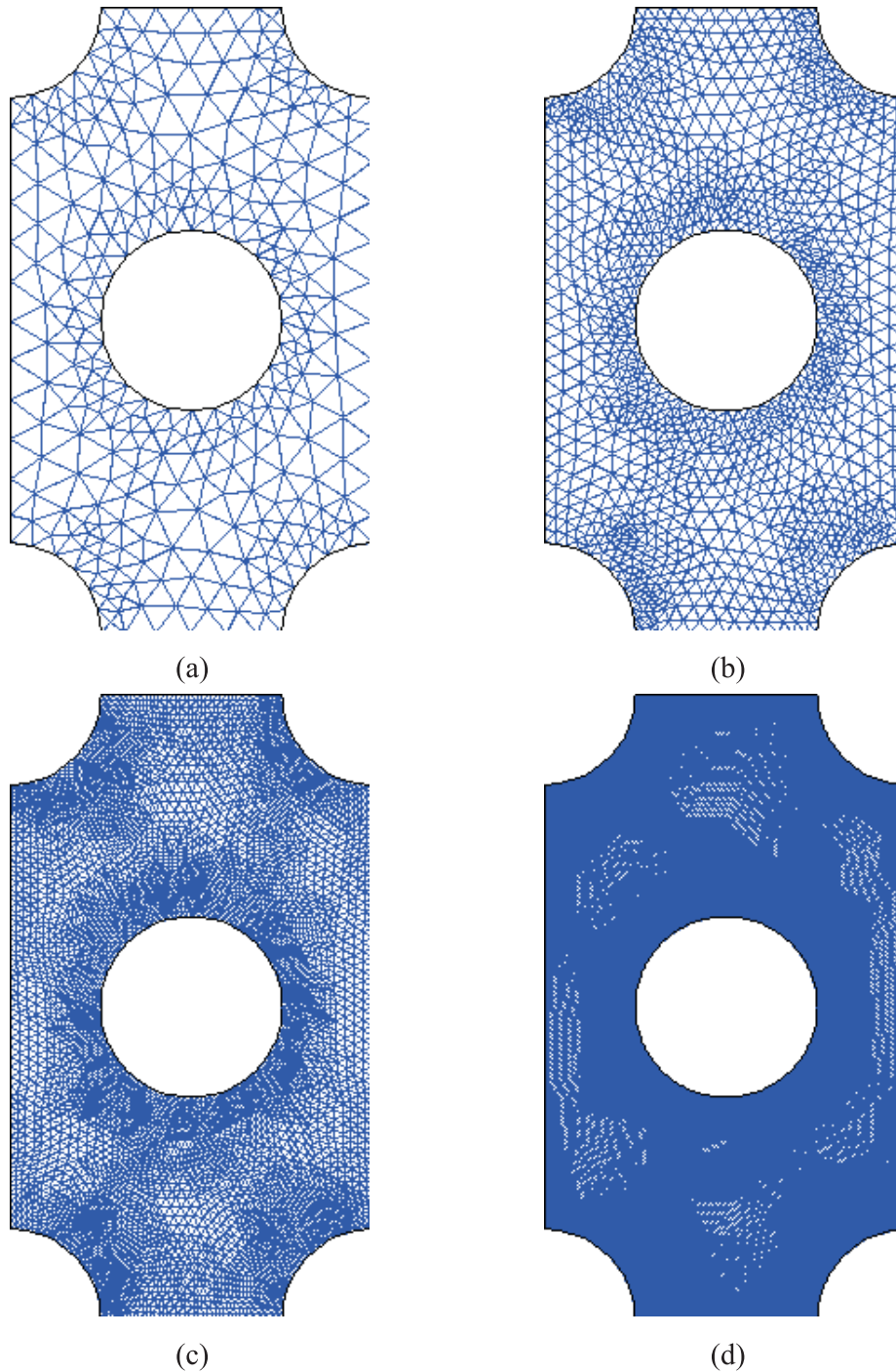


FIGURE 3.13 – Etude du maillage pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en quinconce : a) normal, b) fin, c) plus fin, d) très fin.

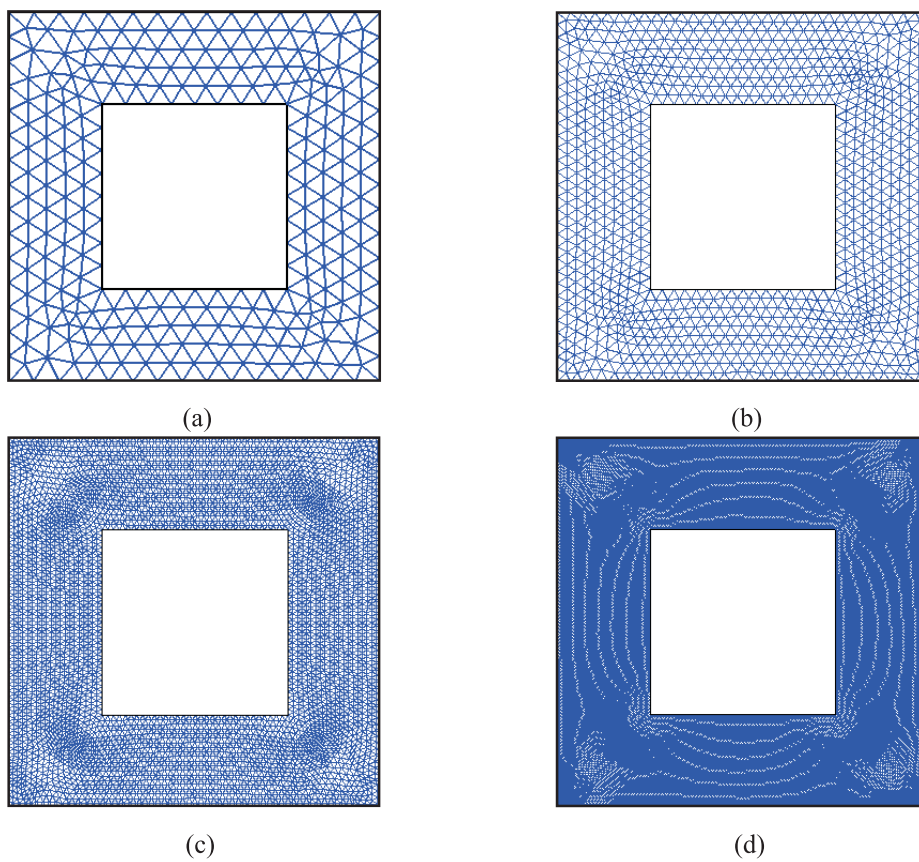


FIGURE 3.14 – Etude du maillage pour un réseau de cylindres de section carrée. Cas de l'arrangement en ligne : a) normal, b) fin, c) plus fin, d) très fin.

Maillage	normal	fin	<i>plus fin</i>	très fin
Nombre d'éléments	568	2 272	<i>9 088</i>	36 352
Nombre de degrés de liberté	5 732	21 680	<i>84 248</i>	332 072
K_{11}/S	8,25E-2	8,25E-2	<i>8,24E-2</i>	8,24E-2

TABLE 3.12 – Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en quinconce (Figure 3.13).

Maillage	normal	fin	<i>plus fin</i>	très fin
Nombre d'éléments	482	1 928	<i>7 712</i>	30 848
Nombre de degrés de liberté	4 926	18 528	<i>71 760</i>	282 336
K_{11}/S	8,6915E-5	8,6821E-2	<i>8,6824E-2</i>	8,6829E-2

TABLE 3.13 – Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres de section carrée. Cas de l'arrangement en ligne (Figure 3.14).

$$p^{(1)}(y_1, y_2) = p^{(1)}(y_1, -y_2) \quad (3.28)$$

et anti-symétrique par rapport l'axe e_2 ,

$$p^{(1)}(y_1, y_2) = -p^{(1)}(-y_1, y_2) \quad (3.29)$$

La composante du champ microscopique de vitesse u est symétrique par rapport aux deux axes e_1 et e_2 (Figure 3.15c, 3.16c et 3.17c),

$$u^{(0)}(y_1, y_2) = u^{(0)}(y_1, -y_2) = u^{(0)}(-y_1, y_2) = u^{(0)}(-y_1, -y_2) \quad (3.30)$$

Par contre, la composante du champ microscopique de vitesse v est anti-symétrique (Figure 3.15d, 3.16d et 3.17d),

$$v^{(0)}(y_1, y_2) = -v^{(0)}(y_1, -y_2) = -v^{(0)}(-y_1, y_2) = v^{(0)}(-y_1, -y_2) \quad (3.31)$$

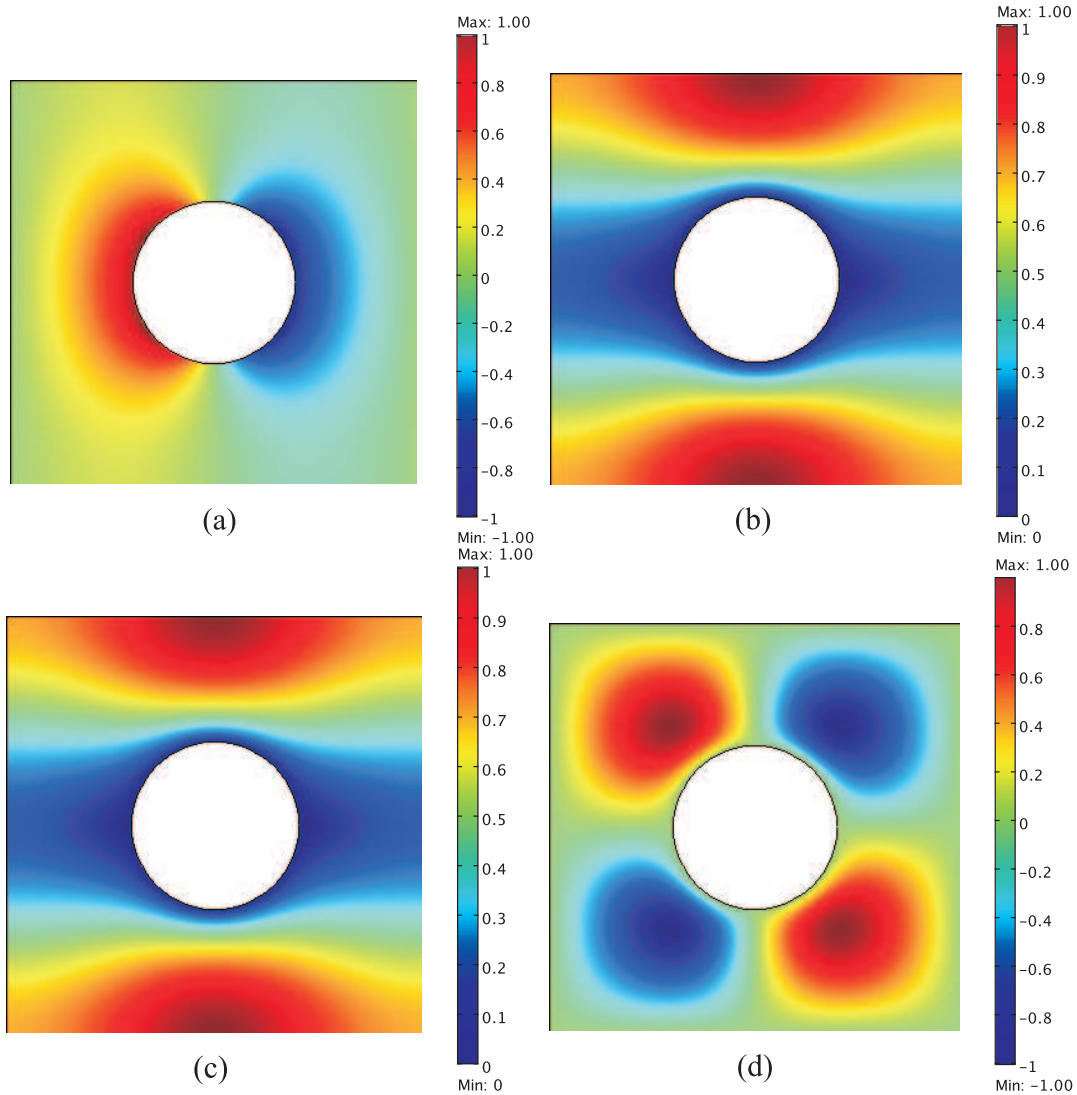


FIGURE 3.15 – Écoulement à travers un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en ligne : a) champs de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champs de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = \mathbf{e}_1$, $r/d = 0.4$, $(p^{(1)})_{max} = 6.086 \times 10^{-7} Pa$, $(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 3.804 \times 10^{-9} (m/s)$, $(u^{(0)})_{max} = 3.804 \times 10^{-9} (m/s)$, $(v^{(0)})_{max} = 6.468 \times 10^{-10} (m/s)$).

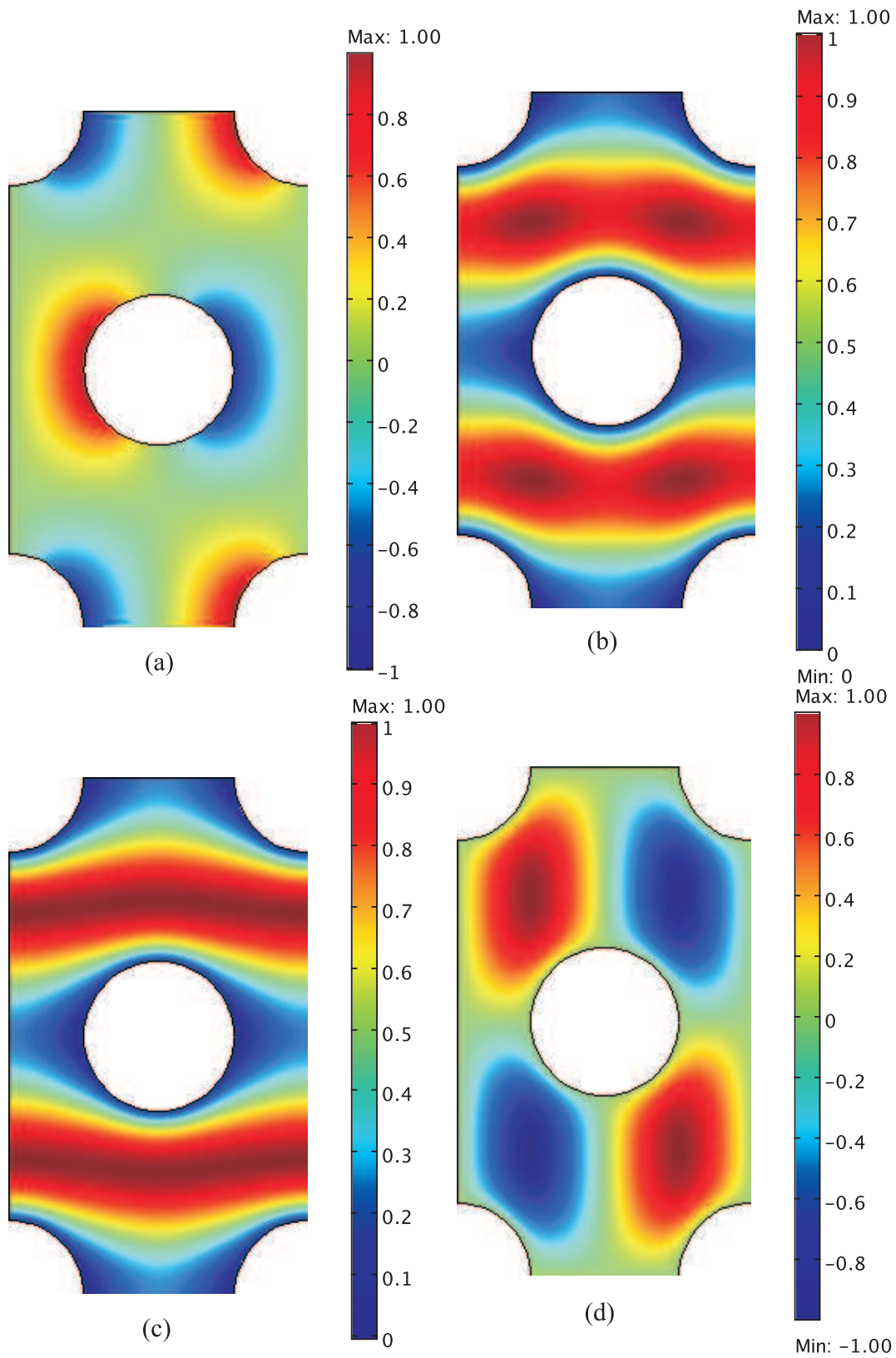


FIGURE 3.16 – Écoulement à travers un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en quinconce : a) champs de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champs de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1$, $r/d = 0.5$, $(p^{(1)})_{max} = 4.10 \times 10^{-7} Pa$, $(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 1.745 \times 10^{-9} (m/s)$, $(u^{(0)})_{max} = 1.59 \times 10^{-9} (m/s)$, $(v^{(0)})_{max} = 7.232 \times 10^{-10} (m/s)$).

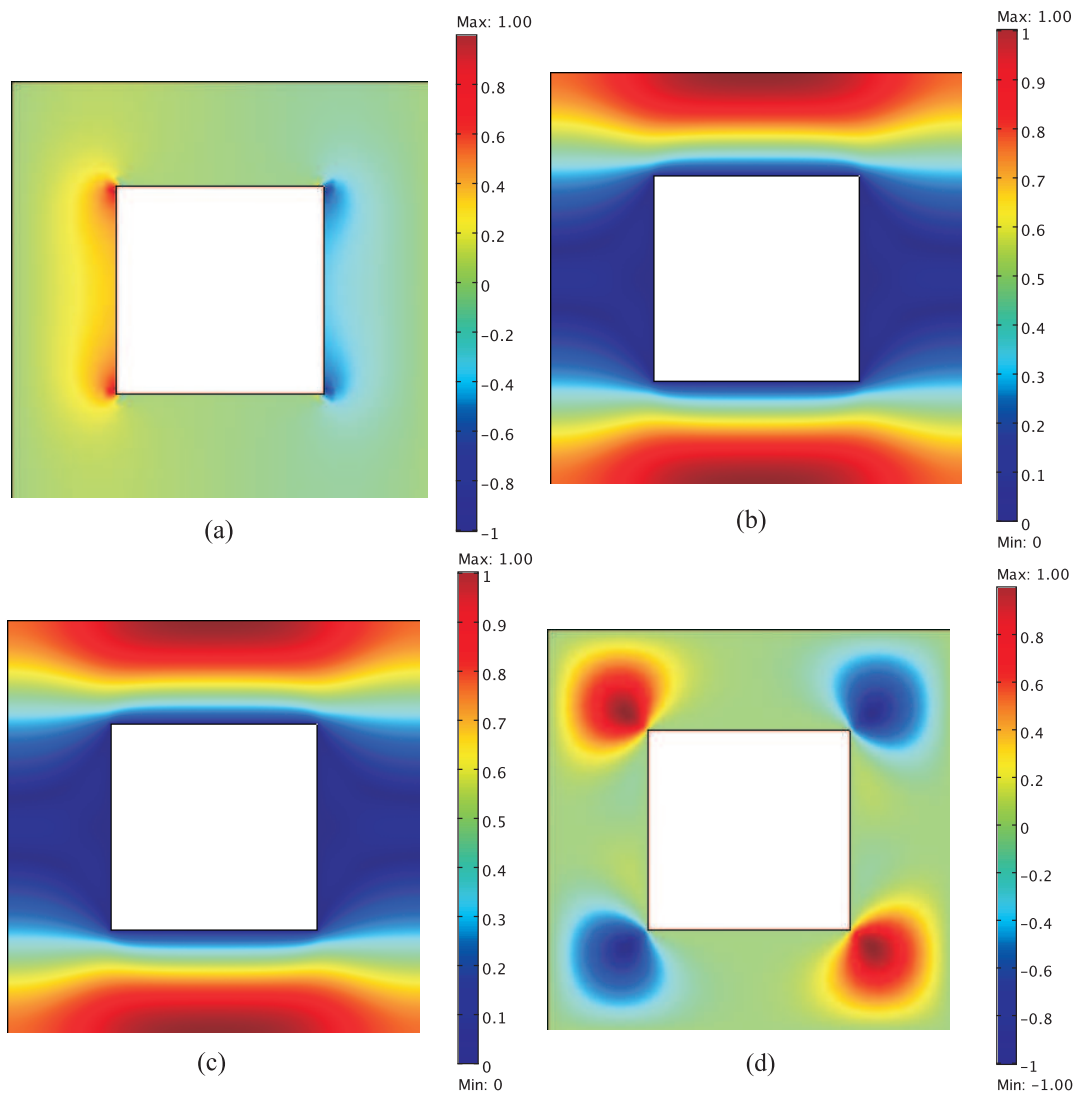


FIGURE 3.17 – Écoulement à travers un réseau de cylindres de section carré. Cas de l'arrangement en ligne : a) champs de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champs de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1$, $r/d = 0.5$, $(p^{(1)})_{max} = 7.936 \times 10^{-7} Pa$, $(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 1.953 \times 10^{-9} (m/s)$, $(u^{(0)})_{max} = 1.953 \times 10^{-9} (m/s)$, $(v^{(0)})_{max} = 2.872 \times 10^{-10} (m/s)$).

3.4.2.1.3 Résultats et comparaisons. Les figures ci-dessous montrent la comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature TFR (2010) [57]), Wang (1996 [75], 2001 [76], 2003 [77]), Sangani et Acrivos (1982a [65]). On en conclût que nos résultats sont en bon d'accord avec ceux de la littérature (Figure 3.18 et 3.19).

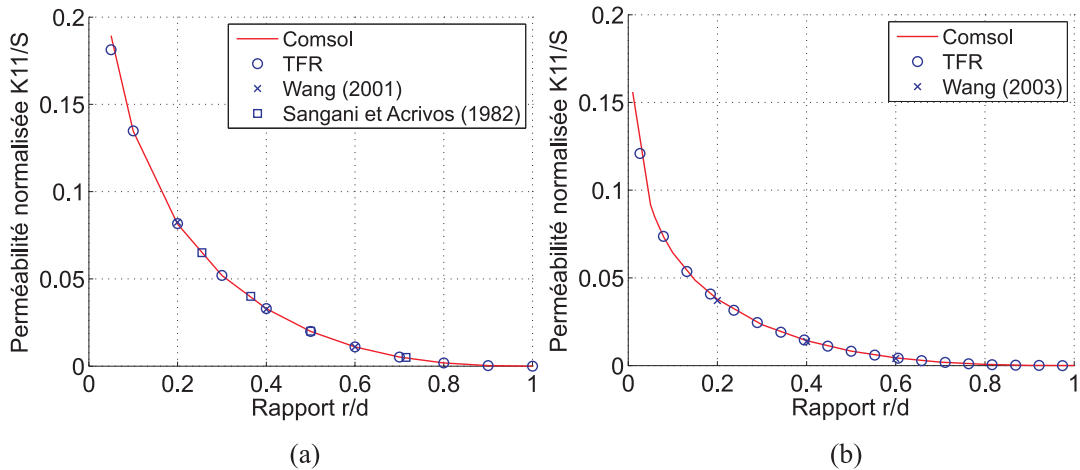


FIGURE 3.18 – Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers un réseau de cylindres. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).

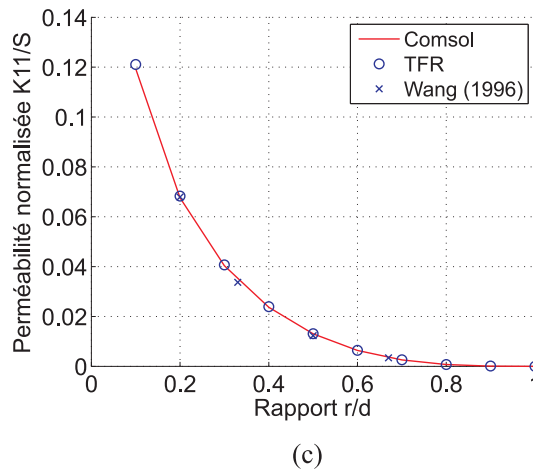


FIGURE 3.19 – Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers un réseau de barres à section carrée. Cas de l'arrangement en ligne (c).

3.4.2.2 Simulation numérique d'écoulements PARALLÈLES à l'axe des cylindres

On considère que l'écoulement est parallèle pour tous les types d'arrangements de cylindres. La perméabilité normalisée est $K_{33}^* = K_{33}/S$ avec $S = 4d^2$ pour l'arrangement en ligne et $S = 4\sqrt{3}d^2$ pour l'arrangement en quinconce. Le problème aux limites résolu sur un VER périodique en 3D avec $\mathbf{G} = e_3$ donne la composante de la perméabilité K_{33} .

Le champ de la vitesse locale s'écrit :

$$\mathbf{u}^{(0)} = w^{(0)} \mathbf{e}_3 = \frac{k_{33}}{\mu} \mathbf{e}_3 \quad (3.32)$$

et

$$K_{33} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{33} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} w^{(0)} dy = \mu \langle w^{(0)} \rangle \quad (3.33)$$

3.4.2.2.1 Champs microscopiques de vitesse Les figures 3.20 et 3.21 montrent quelques exemples du maillage et du champ microscopique de la vitesse $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$. La composante de la vitesse $w^{(0)}$ est symétrique par rapport aux axes e_1 et e_2

$$w^{(0)}(y_1, y_2) = w^{(0)}(y_1, -y_2) = w^{(0)}(-y_1, y_2) = w^{(0)}(-y_1, -y_2) \quad (3.34)$$

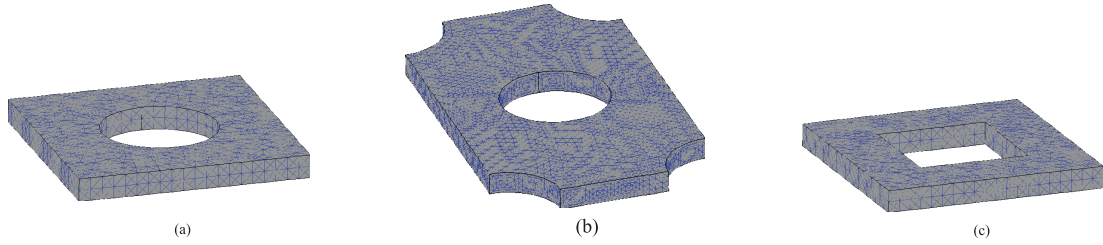


FIGURE 3.20 – Exemples de maillages pour un réseau de cylindre (a,b) et de barre carrée (c) : a) arrangement en ligne, b) arrangement en quinconce, c) arrangement en ligne.

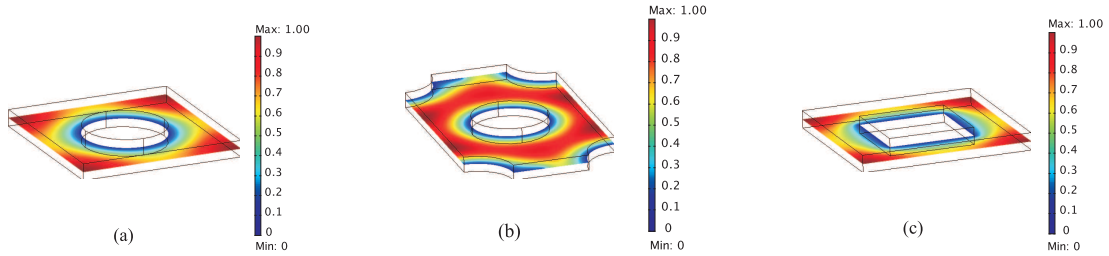


FIGURE 3.21 – Champs microscopique de la vitesse $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$ pour un réseau de cylindre (a,b) et de barre carrée (c) : a) arrangement en ligne ($((\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.146 \times 10^{-9} (m/s)$), b) arrangement en quinconce ($((\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.592 \times 10^{-9} (m/s)$), c) arrangement en ligne ($((\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.985 \times 10^{-9} (m/s)$) ($\mathbf{G} = e_3, r/d = 0.5$).

3.4.2.2.2 Résultats et discussions Les figures ci-dessous permettent de comparer nos résultats avec ceux de littérature : TFR (2010 [57]), Wang (1996 [75]), Sparrow et Loeffler (1959 [69]). On observe que nos résultats sont bon d'accord (Figure 3.22 et 3.23).

3.4.3 Calcul de la dispersion thermique, \mathbf{K}_{disp} .

Données :

Paramètres géométriques (Figure 3.24) : $H = 100 \mu m$, $L = 1000 \mu m$, taille d'un bloc

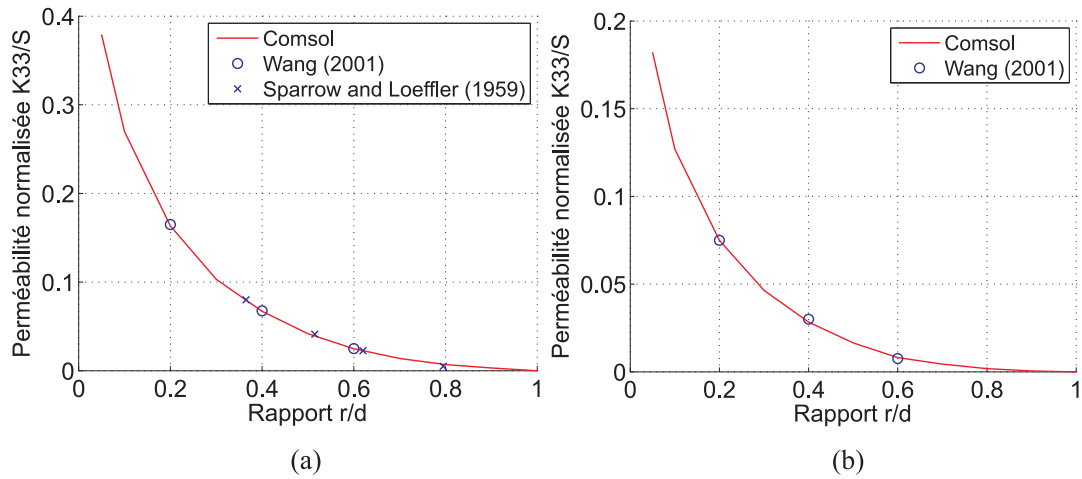


FIGURE 3.22 – Perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de cylindre de section circulaire. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).

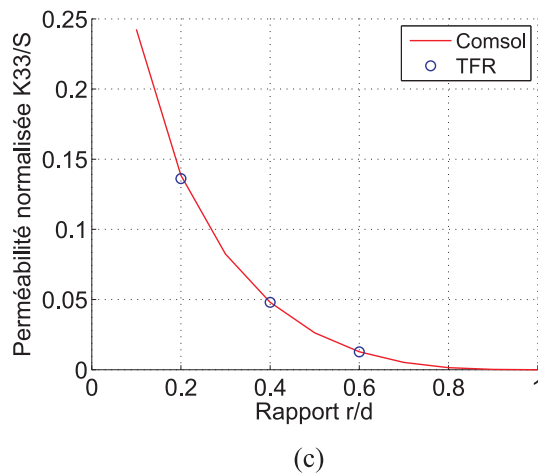


FIGURE 3.23 – Perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de cylindres de section carré. Cas de l'arrangement en ligne (c).

carré : $B = 40 \mu m \times 40 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0.64$.

Propriétés du fluide et du solide : $\rho_f = 1 kg/m^3$, $\mu = 2 \times 10^{-5} Pa.s$, $C_{pf} = 1006 J/kg K$, $k_f = 0,025 W/m K$, $\rho_s = 1000 kg/m^3$, $C_{ps} = 1006 J/kg K$, $k_s = 0,025 W/m K$

Condition d'entrée : $u_0 = 4 m/s$, $T_0 = 300 K$

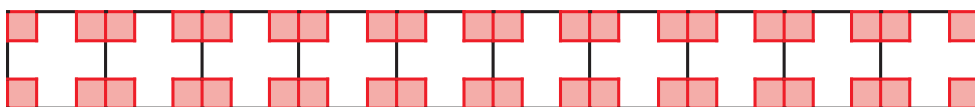


FIGURE 3.24 – Géométrie de la matrice poreuse

3.4.3.1 Equations microscopiques et conditions aux limites.

On considère un écoulement incompressible et permanent dans une matrice poreuse ($H \times L$) de porosité $\varepsilon = 0.64$. Les équations microscopiques pour les phases fluide (f) et solide (s) sont :

$$\rho_f(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.35)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.36)$$

$$\rho_f C_{pf} \nabla \cdot (\mathbf{u} T) = k_f \nabla^2 T \quad \text{dans } \Omega_f \quad (3.37)$$

$$k_s \nabla^2 T = 0 \quad \text{dans } \Omega_s \quad (3.38)$$

La condition d'adhérence et les continuités des températures et des flux à l'interface solide-fluide s'écrivent :

$$\mathbf{u} = 0 \quad \text{sur } S_{fs} \quad (3.39)$$

$$T_f = T_s \quad \text{sur } S_{fs} \quad (3.40)$$

$$k_f \nabla T \cdot \mathbf{n} = k_s \nabla T \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } S_{fs} \quad (3.41)$$

- Conditions aux limites :

$$\begin{aligned} u = u_0, \quad v = 0, \quad T = T_0, \quad \text{en } x = 0, \quad \forall y \\ \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad v = 0, \quad q = 0, \quad \text{en } x = L, \quad \forall y \\ u = v = 0, \quad q = q_p, \quad \text{en } y = 0, H \quad \forall x \end{aligned}$$

3.4.3.2 Equation macroscopique de l'énergie.

L'équation macroscopique est écrite en supposant l'équilibre thermique local ($\langle T \rangle = \langle T_f \rangle^f = \langle T_s \rangle^s$).

$$\rho_f C_{pf} \langle \mathbf{u} \rangle \cdot \nabla \langle T \rangle = \nabla \cdot (\underline{\mathbf{K}}_{eff} \nabla \langle T \rangle) \quad (3.42)$$

où :

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{K}}_{eff} &= K_e \underline{\mathbf{I}} + \underline{\mathbf{K}}_{tor} + \underline{\mathbf{K}}_{disp} \\ \underline{\mathbf{K}}_{tor} &= \frac{k_f - k_s}{\Omega} \int_{S_{fs}} T \cdot \mathbf{n} dS \\ \underline{\mathbf{K}}_{disp} &= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \langle T' \mathbf{u}' \rangle = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega_f} \mathbf{u}' T' d\Omega \end{aligned} \quad (3.43)$$

Pour calculer le gradient macroscopique de température $\nabla \langle T \rangle$ on impose un flux de chaleur au dessus et en dessous de la conduite ($q_p = 10^3 \text{ W/m}^2$). Quand les deux flux sont entrant (Fig. 3.25a), $\nabla \langle T \rangle_x$ est calculé et on obtient la dispersion thermique longitudinale. Quand un flux est entrant et l'autre sortant (Fig. 3.25b), $\nabla \langle T \rangle_z$ est calculé et on obtient la dispersion thermique transverse (K_{disp})_{zz}.

$$(K_{disp})_{xx} = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega_f} u' T' d\Omega = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega_f} (u - \langle u \rangle^f) (T - \langle T \rangle) d\Omega \quad (3.44)$$

$$(K_{disp})_{zz} = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega_f} v' T' d\Omega = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega_f} (v - \langle v \rangle^f) (T - \langle T \rangle) d\Omega \quad (3.45)$$

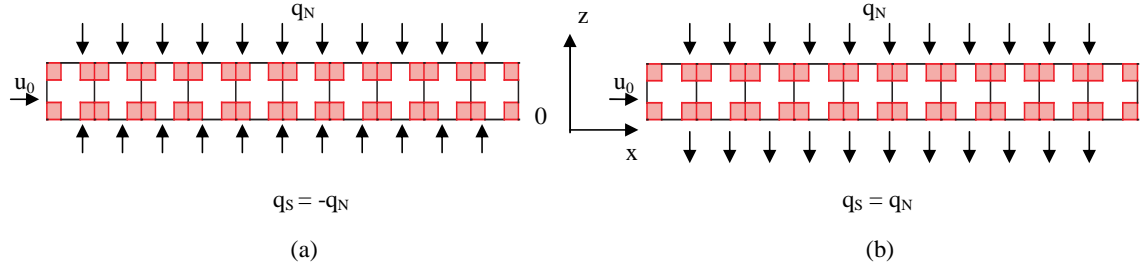


FIGURE 3.25 – Domaine physique simulé (cas 2D) et conditions thermiques appliquées sur les surfaces de symétrie pour calculer les conductivités de dispersion longitudinale (a) et transverse (b).

3.4.3.3 Modèle numérique.

Une étude de maillage uniforme a été effectuée en faisant varier le nombre de mailles pour obtenir le résultat optimal. Chaque côté d'un bloc solide est divisé en 20 mailles et les deux branches de la conduite sont divisées de 30 à 70 mailles, ce qui signifie que la dimension du maillage est comprise entre 70×700 et 110×1100 .

L'étude de maillage conduit à choisir un maillage optimal de 100×1000 (100000 éléments et 1165504 degrés de liberté, tableau 3.14) pour un nombre de Péclet $Pe = 10$. On utilisera ce maillage dans la suite .

	70×700	80×800	90×900	100×1000	110×1100
$(K_{disp})_{xx}/k_f$	1.2344	1.2381	1.2404	1.2420	1.2431
$(K_{disp})_{zz}/k_f$	1.02751×10^{-3}	1.0266×10^{-3}	1.0253×10^{-3}	1.0242×10^{-3}	1.0233×10^{-3}

TABLE 3.14 – Etude de la convergence spatiale afin de choisir un maillage optimal pour calculer les dispersions longitudinale $(K_{disp})_{xx}$ et transverse $(K_{disp})_{zz}$.

Quand l'écoulement est établi (dynamiquement et thermiquement) (Figure 3.26, 3.27 et 3.28), on profite de la périodicité et on n'utilise qu'une cellule au milieu de la conduite (par exemple) pour calculer numériquement les dispersions thermiques longitudinale et transverse K_{disp} (Figure 3.29 et 3.30). Le nombre de Péclet défini par $Pe = \langle u \rangle^f H / \alpha_f$ et le rapport de conductivité k_s/k_f sont les seuls paramètres des calculs.

Nos résultats sont comparés aux résultats de Kuwahara et al., 1999 [45] et de Pedras et al., 2008 [60] dans le tableau 3.15 et sur les figures 3.31.

Pour des nombres de Péclet faibles (inférieurs de 100) la conductivité de dispersion longitudinale varie proportionnellement de Pe^2 tandis que la dispersion transverse varie proportionnellement de $Pe^{1.76}$. Les résultats numériques conduisent à :

Dispersion longitudinale :

$$\frac{(K_{disp})_{xx}}{k_f} = 0.0123 Pe^2 \quad (3.46)$$

Dispersion transverse :

$$\frac{(K_{disp})_{zz}}{k_f} = 2 \times 10^{-5} Pe^{1.76} \quad (3.47)$$

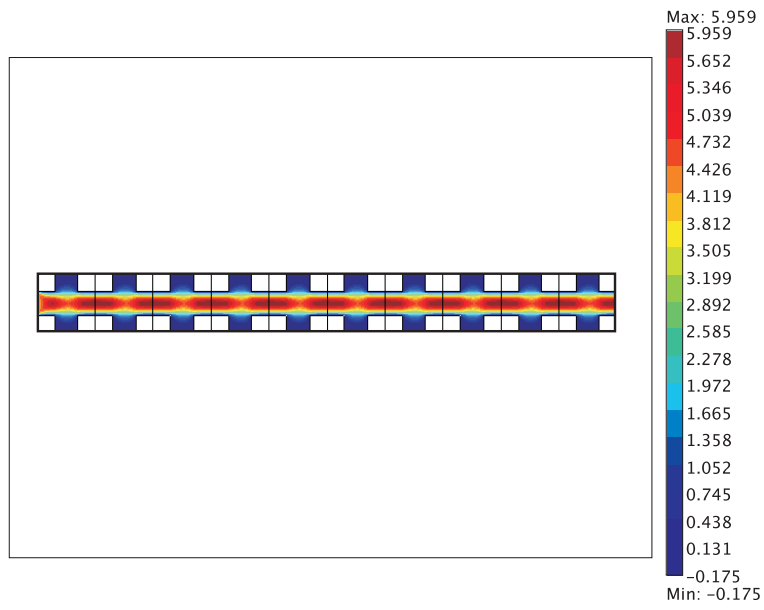


FIGURE 3.26 – Champ de vitesse u en régime dynamique établi.

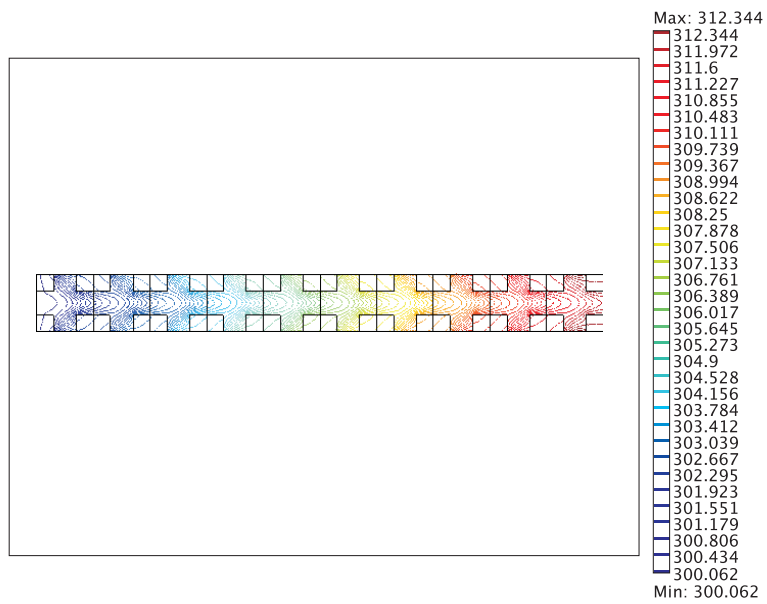


FIGURE 3.27 – Champ de température pour le cas longitudinal en régime thermique établi.

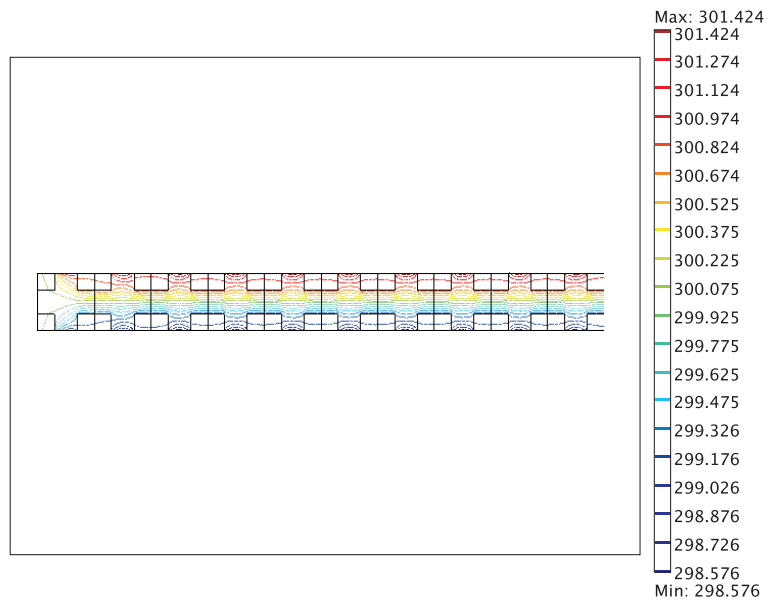


FIGURE 3.28 – Champ de température pour le cas transverse en régime thermique établi.

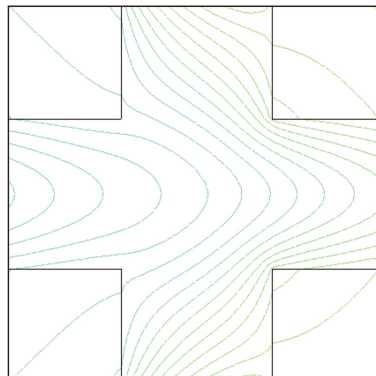


FIGURE 3.29 – Champ de température au sein d’une seule cellule pour le cas longitudinal en régime thermique établi.

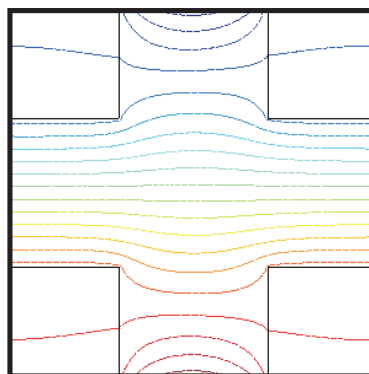


FIGURE 3.30 – Champ de température au sein d’une seule cellule pour le cas transverse en régime thermique établi.

		$Pe = 1$	$Pe = 5$	$Pe = 10$	$Pe = 50$	$Pe = 100$
$\frac{k_s}{k_f} = 10$	$\frac{(K_{disp})_{xx}}{k_f}$	1.2718×10^{-2}	3.0226×10^{-1}	1.2420	3.3543×10^1	1.3283×10^2
	$\frac{(K_{disp})_{zz}}{k_f}$	1.8279×10^{-5}	3.8871×10^{-4}	1.0242×10^{-3}	9.6677×10^{-3}	4.3950×10^{-2}
$\frac{k_s}{k_f} = 2$	$\frac{(K_{disp})_{xx}}{k_f}$	1.6773×10^{-2}	4.0543×10^{-1}	1.6437	4.3429×10^1	1.6873×10^2
	$\frac{(K_{disp})_{zz}}{k_f}$	2.5458×10^{-5}	5.4899×10^{-4}	1.4870×10^{-3}	1.2380×10^{-2}	5.5046×10^{-2}
[[45]]	$\frac{(K_{disp})_{xx}}{k_f}$	2.2×10^{-2}	5.5×10^{-1}	2.2	10.125×10^1	2.025×10^2
	$\frac{(K_{disp})_{zz}}{k_f}$	1.19×10^{-2}	1.838×10^{-1}	5.973×10^{-1}	9.36×10^{-1}	1.872
[[60]]	$\frac{(K_{disp})_{xx}}{k_f}$	3.45×10^{-2}	4.91×10^{-1}	1.5411	2.1934×10^1	6.8836×10^1
	$\frac{(K_{disp})_{zz}}{k_f}$	2×10^{-4}	7×10^{-4}	1.3×10^{-3}	6.1×10^{-3}	1.18×10^{-2}

TABLE 3.15 – Comparaisons de nos résultats avec ceux de Kuwahara et al. [45] et de Pedras et al., 2008 [60] pour deux rapports de conductivité et $1 \leq Pe \leq 100$.

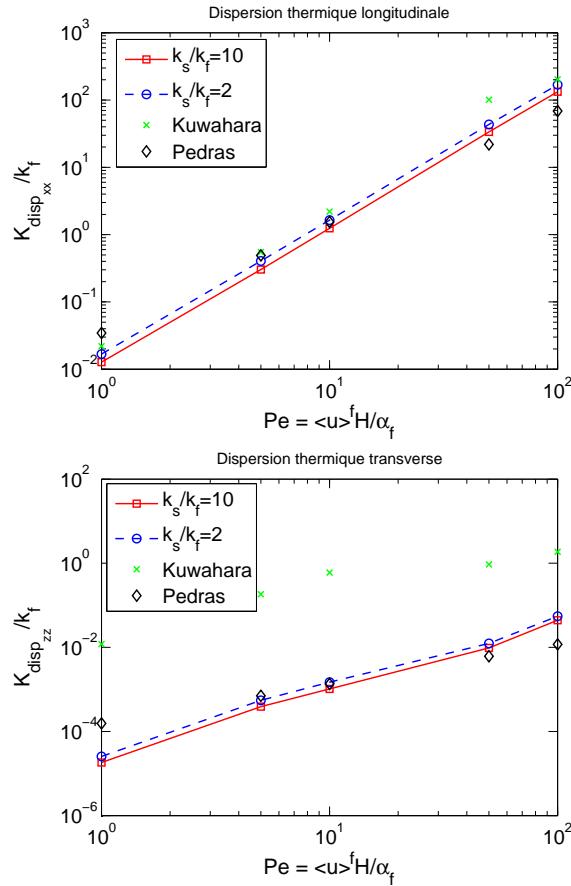


FIGURE 3.31 – Comparaison des dispersions longitudinale et transverse avec celles données par Kuwahara et al., 1999 [45] et Pedras et al., 2008 [60].

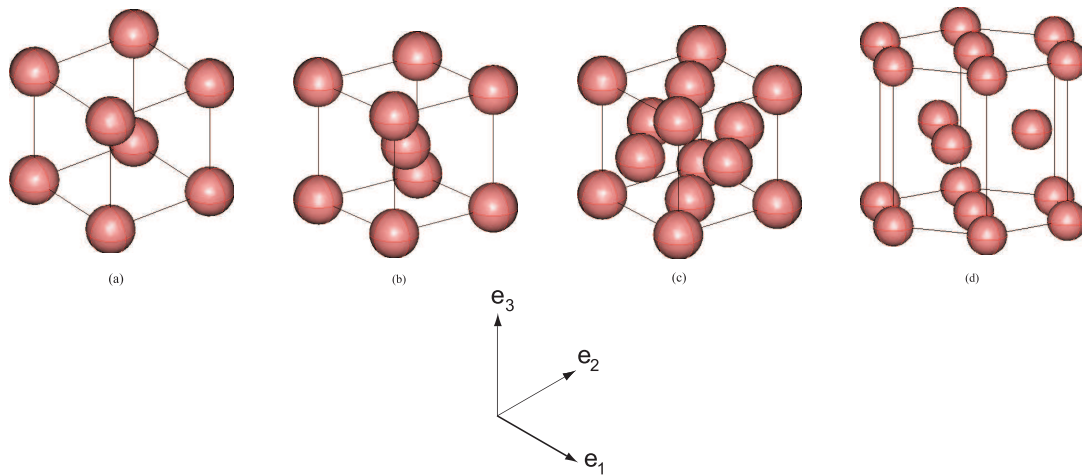


FIGURE 3.32 – Volume élémentaire représentatif (VER) d'empilements de sphères : a) cubique simple (CS), b) cubique centrée (CC), c) cubique à face centrée (CFC), d) hexagonal (HEXA).

3.5 Écoulements 3D dans des milieux constitués de sphères de même diamètre

3.5.1 Introduction

Dans cette partie, nous considérons l'écoulement d'un fluide dans des empilements de sphères. Notre objectif est d'étudier la dépendance de la perméabilité d'un réseau périodique de sphères avec ses caractéristiques géométriques : le rayon des sphères " R_s ", la porosité " ε " liée à l'arrangement de sphères présentant un motif périodique (cubique simple (CS), cubique centrée (CC), cubique à face centrée (CFC) ou hexagonal (HEXA)). A cet effet, nous avons effectué quelques simulations numériques 3D en suivant la méthodologie présentée dans les chapitres précédents afin de déterminer la perméabilité. La valeur de la perméabilité K est donc présentée selon les propriétés géométriques du milieu et comparée avec des résultats disponibles dans la littérature (Chapman et Higdon, 1992 [15]; Lee et Leamy, 2009 [47]; Hasimoto, 1959 [34]; Sangani et Acrivos, 1982a [65]; Zick et Zick et Homsy, 1982 [86] ...).

3.5.2 Propriétés géométriques des milieux étudiés.

La figure 3.32 présente les VER de ces milieux : cubique simple (Figure 3.32a), cubique centré (Figure 3.32b), cubique à face centrée (Figure 3.32c) et hexagonal (Figure 3.32d). Le rayon des sphères est R_s et la dimension cellulaire caractéristique est " d ". La porosité est déterminée à l'aide de ces deux paramètres.

3.5.3 Calcul de la perméabilité en fonction de la porosité ou du rapport R_s/d .

Les résultats numériques obtenus en fonction du rapport de R_s/d sont comparés avec la méthode TFR (Transformation de Fourier Rapide) sur les figures 3.33 et 3.34 : on constate que l'accord est excellent.

Géométrie	CS	CC	CFC	HEXA
fraction volumique, c	$\frac{4\pi R_s^3}{3d^3}$	$\frac{8\pi R_s^3}{3d^3}$	$\frac{16\pi R_s^3}{3d^3}$	$\frac{24\pi R_s^3}{3V_t}$
porosité, ε	$1 - \frac{4\pi R_s^3}{3d^3}$	$1 - \frac{8\pi R_s^3}{3d^3}$	$1 - \frac{16\pi R_s^3}{3d^3}$	$1 - \frac{24\pi R_s^3}{3V_t}$
ε_{min}	$1 - \frac{\pi}{6} \approx 0.48$	$1 - \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.32$	$1 - \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.26$	$1 - \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.26$
R_h (m)	$(\frac{4}{\pi} - \frac{2}{3})R_s$	$(\frac{16}{3\sqrt{3}\pi} - \frac{2}{3})R_s$	$(\frac{2\sqrt{2}}{\pi} - \frac{2}{3})R_s$	$(\frac{2\sqrt{2}}{\pi} - \frac{2}{3})R_s$

TABLE 3.16 – Tableau des paramètres géométriques pour différents arrangements de sphères.

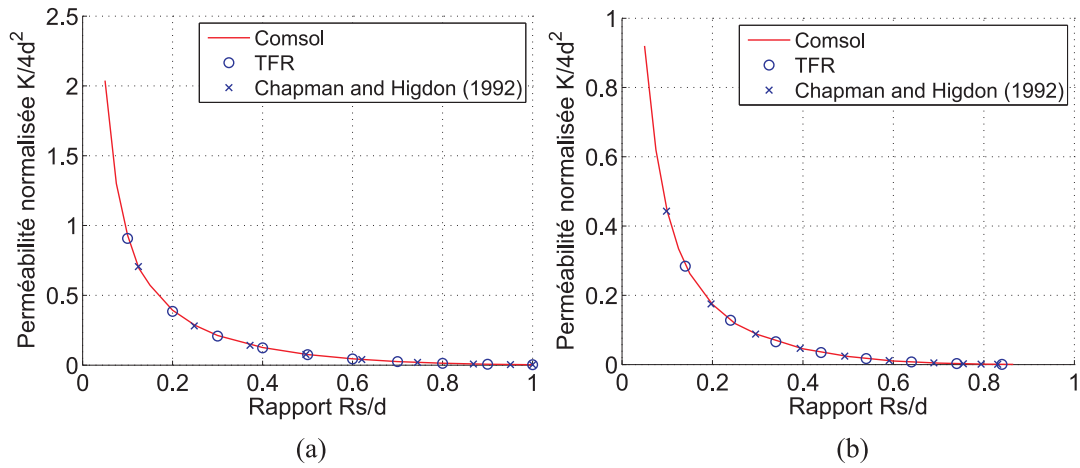


FIGURE 3.33 – Perméabilité normalisée $K/4d^2$ pour des réseaux cubique simple (a) et cubique centré (b).

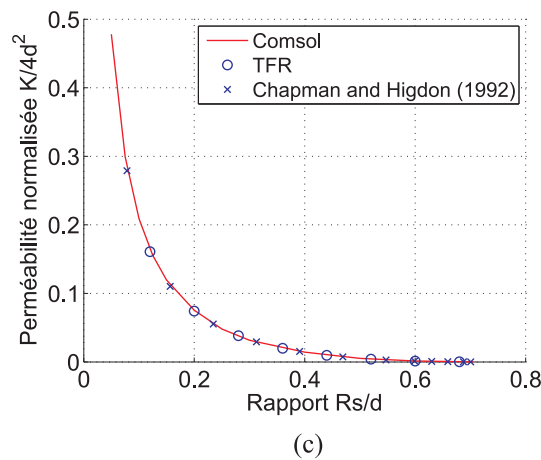


FIGURE 3.34 – Perméabilité normalisée $K/4d^2$ pour un réseau cubique à face centrée (c).

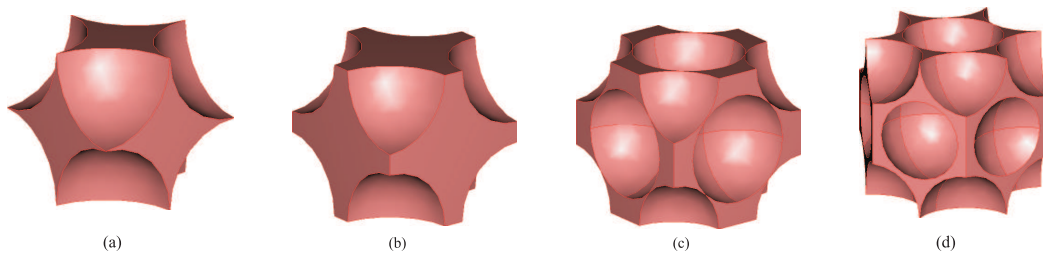


FIGURE 3.35 – Domaine de calcul de réseaux cubiques : a) cubique simple (CS), $\varepsilon = 0.48$; b) cubique centré (CC), $\varepsilon = 0.32$; c) cubique à face centrée (CFC), $\varepsilon = 0.26$; d) hexagonal (HEXA), $\varepsilon = 0.26$.

3.5.4 Comparaison avec des résultats de la littérature.

3.5.4.1 Introduction

Dans la section 3.5.3 ci-dessus on a comparé nos valeurs numériques de la perméabilité avec celles de la littérature en fonction de la porosité ε (ou de R_s/d). Dans cette partie, on considère que, pour les différents arrangements, les sphères sont en contact (empilements) avec les dispositions cubique simple (CS), cubique centré (CC), cubique à face centrée (CFC) et hexagonal (HEXA) (Fig. 3.35).

3.5.4.2 Etude du maillage

Nous avons fait une étude de maillage pour chacune des géométries puis nous avons déterminé le maillage optimal en se basant sur le nombre d'éléments (ou le degré de liberté) et le temps de calcul (Fig. 3.36). Ce maillage a ensuite été utilisé pour tous les autres calculs. Les calculs ont été effectués sur une station de calcul du laboratoire ayant 164 Go de mémoire vive, ce qui limite en pratique le nombre d'éléments à $N_{max} = 5 \cdot 10^5$, environ.

Compte-tenu de la symétrie des empilements de sphères, on ne simule qu'un quart des géométries CS, CC, CFC et un tiers de la géométrie HEXA. A partir des tableaux de convergence spatiale pour des maillages comportant entre $7 \cdot 10^3$ et $24 \cdot 10^4$ éléments tétraédriques, on a trouvé qu'un nombre d'éléments compris entre $4 \cdot 10^4$ et $12 \cdot 10^4$ permettait d'obtenir une bonne convergence pour tous les types d'arrangements considérés (Tableau 3.17, 3.18, 3.19, 3.20 pour CS, CC, CFC et HEXA).

Nombre d'éléments	33 508	47 420	65 593	<i>84 946</i>	107 984	132 563	158 741
Nombre degré liberté	172 492	241 117	331 881	<i>426 522</i>	538 350	658 101	783 384
Temps de calcul (s)	103	104	271	<i>381</i>	375	480	667
K_D (μm^2)	9,92E-3	9,95E-3	1,00E-2	<i>1,01E-2</i>	1,01E-2	1,01E-2	1,01E-2

TABLE 3.17 – Etude de la convergence spatiale pour le réseau cubique simple (CS).

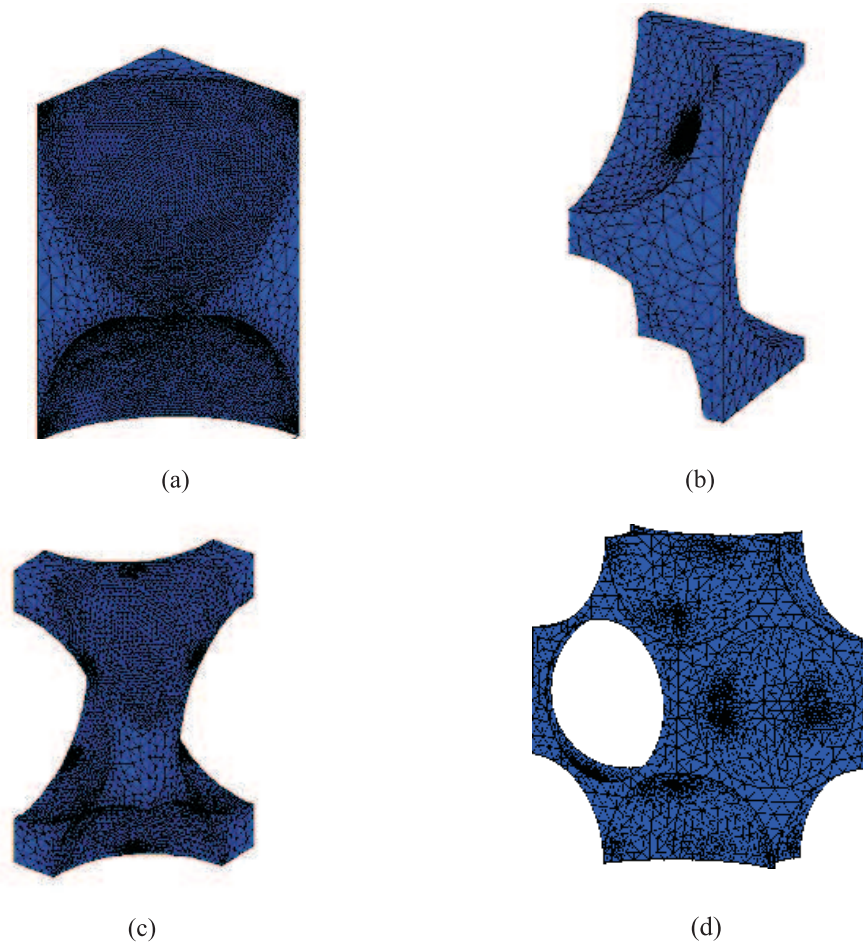


FIGURE 3.36 – Exemple de maillage : a) 1/4 cubique simple (CS) ; b) 1/4 cubique centré (CC) ; c) 1/4 cubique à face centrée (CFC) ; d) 1/3 hexagonal (HEXA).

Nombre d'éléments	7 723	8 253	20 670	<i>47 949</i>	53 455	101 337	138 170
Nombre degré liberté	43 769	48 224	120 085	<i>275 659</i>	29 7310	518 994	703 918
Temps de calcul (s)	13	20	34	<i>94</i>	100	265	310
$K_D (\mu m^2)$	1,97E-3	2,00E-3	2,00E-3	<i>2,01E-3</i>	2,01E-3	2,01E-3	2,01E-3

TABLE 3.18 – Etude de la convergence spatiale pour le réseau cubique centré (CC).

Nombre d'éléments	36 982	57 974	85 522	<i>113 277</i>	149 783	191 958	239 656
Nombre degré liberté	201 830	310 105	451 726	<i>586 246</i>	768 746	979 855	1 216 585
Temps de calcul (s)	51	93	158	<i>424</i>	638	725	913
$K_D (\mu m^2)$	6,92E-4	6,93E-4	6,93E-4	<i>6,94E-4</i>	6,94E-4	6,94E-4	6,94E-4

TABLE 3.19 – Etude de la convergence spatiale pour le réseau cubique à face centrée (CFC).

3.5.4.3 Champ microscopique de vitesse et de pression

Les figures 3.37, 3.38, 3.39 et 3.40 montrent les champs microscopiques de vitesse et de pression pour les réseaux cubique simple, cubique centré, cubique à face centrée et

Nombre d'éléments	7 945	13 874	40 535
Nombre degré liberté	46 144	79 990	223 187
Temps de calcul (s)	5	8	25
K_D (μm^2)	6,48E-4	6,53E-4	6,59E-4

TABLE 3.20 – Etude de la convergence spatiale pour le réseau hexagonal (HEXA).

hexagonal. Les figures 3.37a, 3.38a, 3.39a et 3.40a montrent que le champ microscopique de pression est symétrique par rapport aux plans (e_1, e_3) et (e_2, e_3) ,

$$p^{(1)}(y_1, \cdot, \cdot) = p^{(1)}(-y_1, \cdot, \cdot) \quad (3.48)$$

$$p^{(1)}(\cdot, y_2, \cdot) = p^{(1)}(\cdot, -y_2, \cdot) \quad (3.49)$$

et anti-symétrique par rapport l'axe (e_1, e_2) ,

$$p^{(1)}(\cdot, \cdot, y_3) = -p^{(1)}(\cdot, \cdot, -y_3) \quad (3.50)$$

La composante u du champ microscopique de vitesse est symétrique par rapport à (e_1, e_3) et anti-symétrique par rapport à (e_1, e_2) , (e_2, e_3) (Figure 3.37b, 3.38b, 3.39b et 3.40b),

$$u^{(0)}(\cdot, y_2, \cdot) = u^{(0)}(\cdot, -y_2, \cdot) \quad (3.51)$$

$$u^{(0)}(y_1, \cdot, \cdot) = -u^{(0)}(-y_1, \cdot, \cdot) \quad (3.52)$$

$$u^{(0)}(\cdot, \cdot, y_3) = -u^{(0)}(\cdot, \cdot, -y_3) \quad (3.53)$$

La composante v du champ microscopique de vitesse est symétrique par rapport à (e_2, e_3) et anti-symétrique par rapport à (e_1, e_2) , (e_1, e_3) (Figure 3.37c, 3.38c, 3.39c et 3.40c),

$$v^{(0)}(y_1, \cdot, \cdot) = v^{(0)}(-y_1, \cdot, \cdot) \quad (3.54)$$

$$v^{(0)}(\cdot, y_2, \cdot) = -v^{(0)}(\cdot, -y_2, \cdot) \quad (3.55)$$

$$v^{(0)}(\cdot, \cdot, y_3) = -v^{(0)}(\cdot, \cdot, -y_3) \quad (3.56)$$

Par contre, la composante w du champ microscopique de vitesse est symétrique par rapport à tous les plans (e_1, e_2) , (e_2, e_3) et (e_1, e_3) (Figure 3.37d, 3.38d, 3.39d et 3.40d).

$$w^{(0)}(y_1, \cdot, \cdot) = w^{(0)}(-y_1, \cdot, \cdot) \quad (3.57)$$

$$w^{(0)}(\cdot, y_2, \cdot) = w^{(0)}(\cdot, -y_2, \cdot) \quad (3.58)$$

$$w^{(0)}(\cdot, \cdot, y_3) = w^{(0)}(\cdot, \cdot, -y_3) \quad (3.59)$$

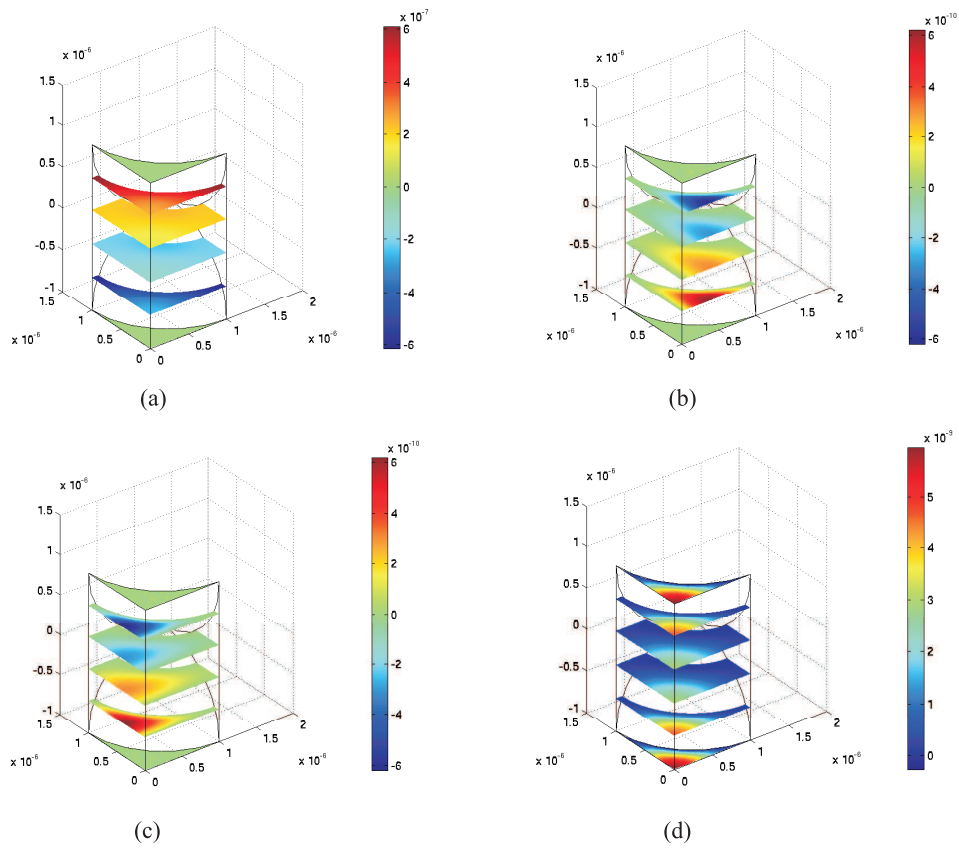


FIGURE 3.37 – Écoulement à travers un réseau cubique simple (CS) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0,48$).

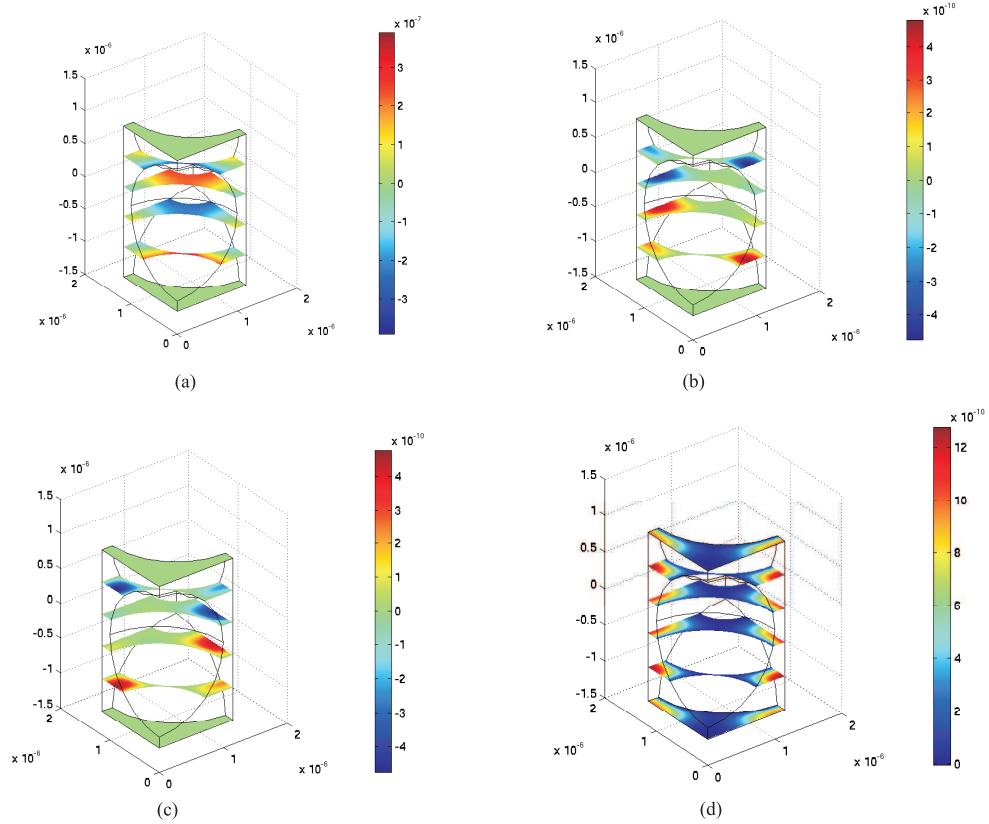


FIGURE 3.38 – Écoulement à travers un réseau cubique centré (CC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0, 32$).

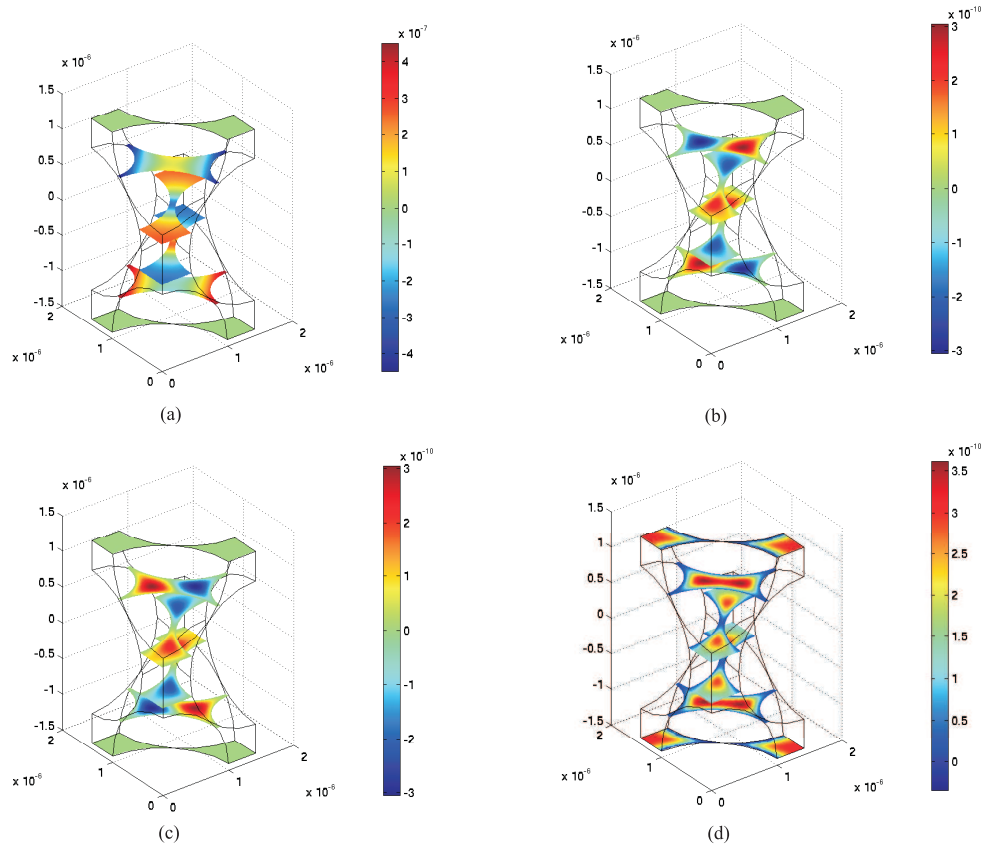


FIGURE 3.39 – Écoulement à travers un réseau cubique à face centrée (CFC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0,26$).

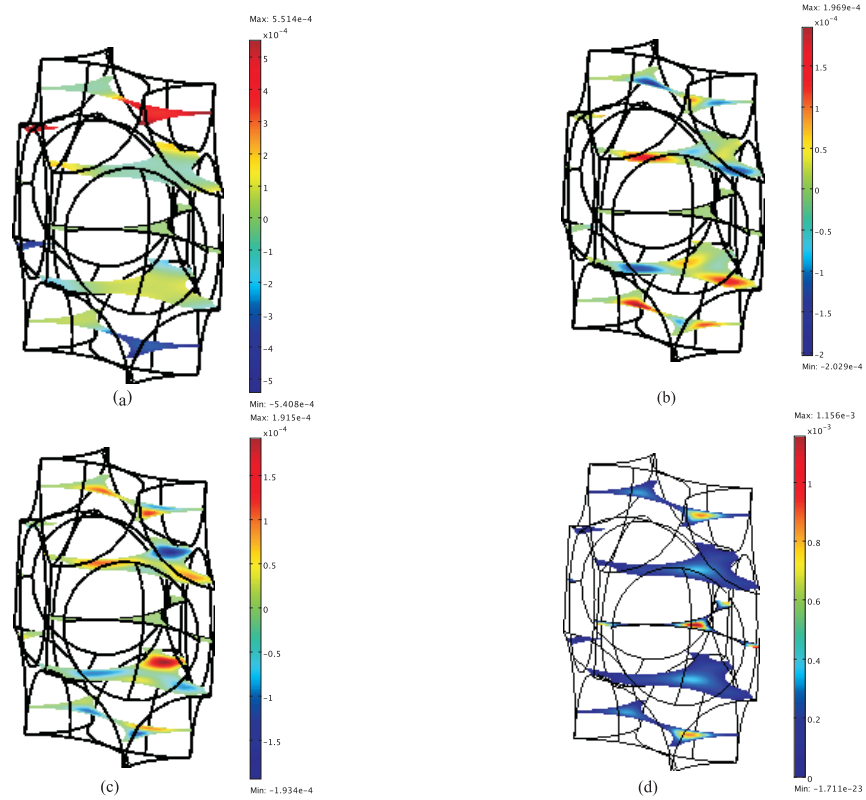


FIGURE 3.40 – Écoulement à travers un réseau hexagonal (HEXA) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = \mathbf{e}_3$, $\varepsilon = 0,26$).

3.5.4.4 Valeurs numériques et comparaisons avec les résultats de littérature

On considère des écoulements d'air ($\mu = 1,72 \times 10^{-5} Pa.s$) à travers des milieux poreux constitués de sphères en contact et de même rayon, R_s . Les arrangements étudiés sont les réseaux CS, CC, CFC et HEXA (Figure 3.35). Les porosités correspondantes sont $\varepsilon_{cs} \approx 0.48$, $\varepsilon_{cc} \approx 0.32$, $\varepsilon_{cfc} \approx 0.26$ et $\varepsilon_{hexa} \approx 0.26$. Les rayons hydrauliques ($2 \times$ volume de la phase fluide/surface mouillée) ont pour valeurs $R_{h,cs} \approx 0.61R_s$, $R_{h,cc} \approx 0.31R_s$, $R_{h,cfc} \approx 0.23R_s$ et $R_{h,hexa} \approx 0.23R_s$ (Tableau 3.16). Les perméabilités de Darcy (Tableau 3.21) ont été calculées en résolvant le problème aux limites défini dans le chapitre 2 et en appliquant un gradient macroscopique de pression unitaire. Une étude de maillage sur des grilles comportant entre 10^4 et 2×10^5 éléments tétraédriques a montré qu'un nombre d'éléments compris entre 4×10^4 et 8×10^4 permettait d'obtenir une bonne convergence pour tous les types d'arrangements considérés.

Si la condition d'adhérence est appliquée, les valeurs des perméabilités reportées dans le tableau 3.21 sont en bon accord avec la relation de Kozeny-Carman, $K_D = 4R_s^2\varepsilon^3/\beta(1-\varepsilon)^2$, moyennant l'adaptation du coefficient de forme β à l'arrangement ($\beta = 163, 141$ et 185 pour les réseaux CS, CC et CFC, soit une valeur moyenne se situant dans l'intervalle couramment admis, $150 \leq \beta \leq 180$).

$R_s(\mu m)$	$K_D(\mu m^2)$		
	CS	CC	CFC
1	$1,01 \times 10^{-2}$	$2,01 \times 10^{-3}$	$6,94 \times 10^{-4}$
2	$4,02 \times 10^{-2}$	$8,03 \times 10^{-3}$	$2,77 \times 10^{-3}$
3	$9,04 \times 10^{-2}$	$1,81 \times 10^{-2}$	$6,24 \times 10^{-3}$
5	$2,51 \times 10^{-1}$	$5,02 \times 10^{-2}$	$1,74 \times 10^{-2}$
10	1,01	$2,01 \times 10^{-1}$	$6,94 \times 10^{-2}$
15	2,26	$4,52 \times 10^{-1}$	$1,56 \times 10^{-1}$
20	4,02	$8,03 \times 10^{-1}$	$2,78 \times 10^{-1}$

TABLE 3.21 – Perméabilité de Darcy K_D pour différents rayons de sphères R_s et pour les réseaux CS, CC et CFC.

Quelques auteurs Chapman et Higdon, 1992 [15], Lee et Leamy, 2009 [47], Gasser et al., 2005 [29], ... ont fait des simulations numériques et des expériences pour ces quatre empilements de sphères. Dans les expériences de Lee et Leamy [47] et Gasser [29], le rayon des sphères est $R_s = 1 mm$ et les sphères sont connectées par de petites soudures de $150 \mu m$ de rayon.

Les valeurs de la perméabilité reportées dans le tableau 3.22 montrent que nos résultats coïncident avec ceux de Chapman et diffèrent peu de ceux de Lee et Leamy, la différence étant certainement due à l'effet des soudures entre sphères.

	CS			CC		
	Lee	Chapman	Comsol	Lee	Chapman	Comsol
ε	0.48	0.48	0.48	0.32	0.32	0.32
$K_o(m^2)$	1.02×10^{-8}	1.01×10^{-8}	1.01×10^{-8}	1.97×10^{-9}	2.01×10^{-9}	2.01×10^{-9}

	CFC			HEXA	
	Lee	Chapman	Comsol	Lee	Comsol
	0.26	0.26	0.26	0.26	0.26
	6.70×10^{-10}	6.95×10^{-10}	6.94×10^{-10}	6.42×10^{-10}	6.59×10^{-10}

TABLE 3.22 – Comparaison entre nos résultats et ceux de Lee, 2009 [47], Chapman, 1992 [15] pour différents empilements de sphères de rayon $R_s = 1 \text{ mm}$.

3.6 Écoulements 3D à travers un réseau de cubes

3.6.1 Calcul de la perméabilité K

La méthode d'homogénéisation a aussi été utilisée pour déterminer la perméabilité d'un réseau de cube dont le volume élémentaire représentatif (cube de côté $H = 10 \mu m$) est représenté sur la figure 3.41a. Deux géométries correspondant à des espacements entre les cubes de $1 \mu m$ (porosité, $\varepsilon = 0,271$) et de $4 \mu m$ (porosité, $\varepsilon = 0,784$) sont considérées.

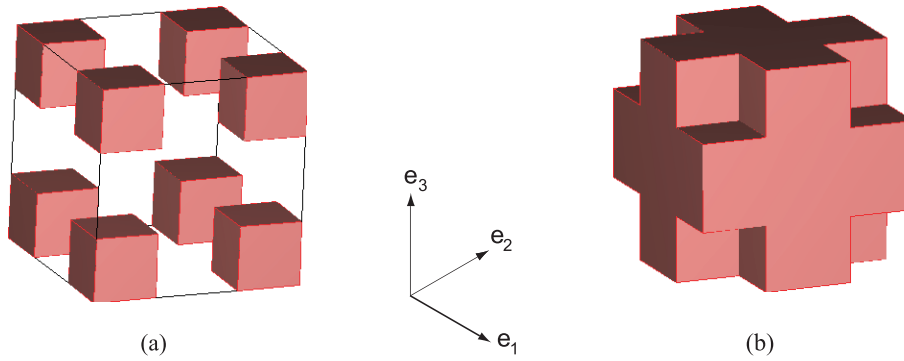


FIGURE 3.41 – a) Volume élémentaire représentatif (VER) périodique (porosité, $\varepsilon = 0,784$); b) Domaine de calcul d'un cube de porosité $\varepsilon = 0,784$.

La figure 3.42 montre que le champ microscopique de vitesse \mathbf{u} est symétrique par rapport à tous les plans (e_1, e_2) , (e_2, e_3) et (e_1, e_3)

$$\mathbf{u}^{(0)}(y_1, \dots) = \mathbf{u}^{(0)}(-y_1, \dots) \quad (3.60)$$

$$\mathbf{u}^{(0)}(\dots, y_2, \dots) = \mathbf{u}^{(0)}(\dots, -y_2, \dots) \quad (3.61)$$

$$\mathbf{u}^{(0)}(\dots, \dots, y_3) = \mathbf{u}^{(0)}(\dots, \dots, -y_3) \quad (3.62)$$

Le tableau 3.23 montre que la perméabilité augmente beaucoup quand la porosité passe de $\varepsilon = 0,271$ à $\varepsilon = 0,784$.

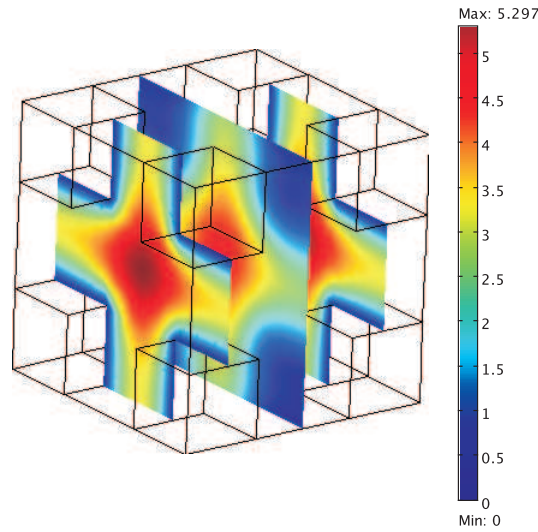


FIGURE 3.42 – Champ de vitesse \mathbf{u} complètement symétrique.

	$\varepsilon = 0,271$	$\varepsilon = 0,784$
$K_D (m^2)$	$1,80 \times 10^{-14}$	$1,51 \times 10^{-12}$

TABLE 3.23 – Perméabilités pour des espacements entre cubes de $1 \mu m$ et de $4 \mu m$.

3.6.2 Calcul de la dispersion thermique K_{disp} .

La méthode de prise de moyenne a maintenant été utilisée pour calculer la dispersion thermique parce que le champ de température ne présente aucune périodicité dans la direction axiale. Nous ne considérons ici qu'une seule géométrie 3D avec un espacement entre cubes de $1 \mu m$ (Figure 3.43). La longueur d'établissement du régime thermique étant faible pour les nombres de Péclet considérés, la dispersion longitudinale a été calculée en considérant un VER situé au milieu du domaine simulé.

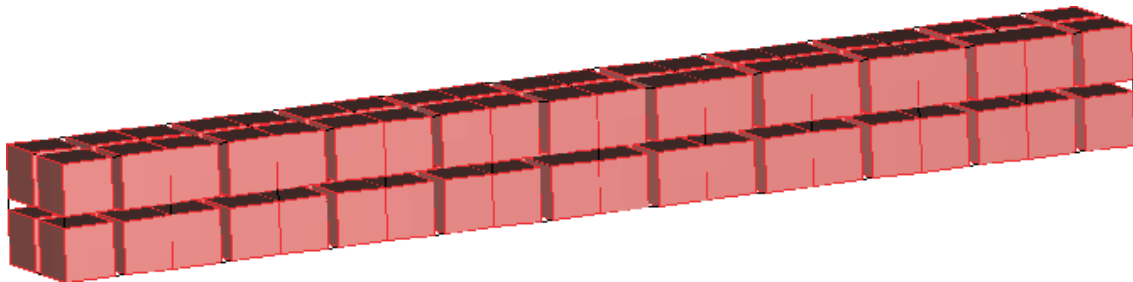


FIGURE 3.43 – Géométrie étudiée : conditions de symétrie dans les direction transverses, espacement entre cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0,271$.

La figure 3.44 représente la variation de la dispersion longitudinale en fonction du nombre de Péclet. On observe qu'elle augmente en puissance de Pe . La corrélation obtenue, $K_{disp_{xx}}/k_f = 8.10^{-4}Pe^{1.7}$, indique que la dispersion longitudinale est plus faible qu'en 2D.

La figure 3.45 représente les variations des composantes transverses de la conductivité de dispersion en fonction du nombre de Péclet. Comme en 2D, ces valeurs sont plus de deux ordres de grandeur plus faibles que la celle de la dispersion longitudinale parce que des conditions de symétrie ont été appliquées transversalement et parce que les fluctuations des composantes de vitesse v' et w' sont beaucoup plus faibles, l'écoulement étant principalement axial. Elles varient aussi en puissance de Pe mais l'exposant est très proche de l'unité (variations quasi-linéaires avec Pe) : $K_{disp_{zz}}/k_f = 3.10^{-6}Pe^{1.004}$ et $K_{disp_{yy}}/k_f = 8.10^{-6}Pe^{0.99}$.

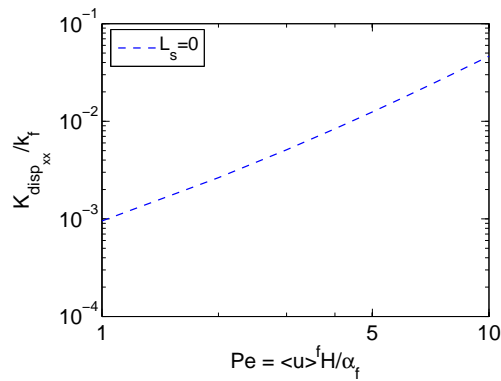


FIGURE 3.44 – Dispersion longitudinale en fonction du nombre de Péclet.

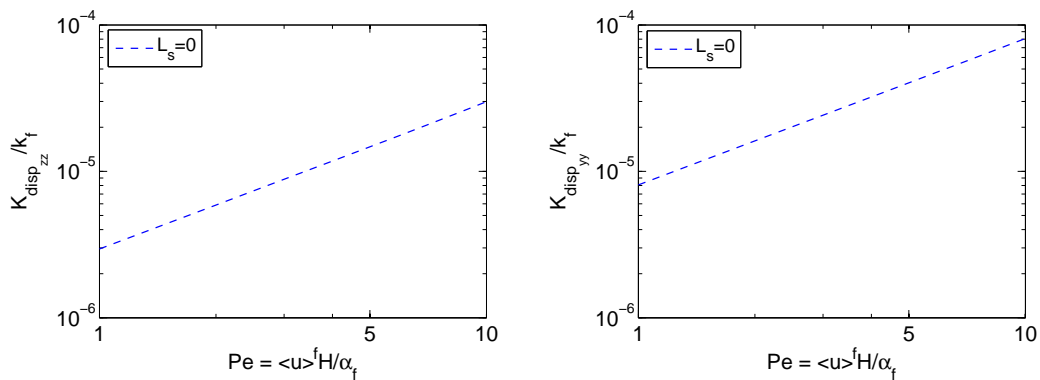


FIGURE 3.45 – Dispersion transverse en fonction du nombre de Péclet.

3.7 ANNEXES

ANNEXE 1 : Démonstration des solutions analytiques.

(a) Profil de vitesse et de température

On rappelle que les équations de conservation se réduisent, en régime dynamiquement et thermiquement établi, à :

$$\frac{d^2u}{dy^2} = \frac{1}{\mu} \cdot \frac{dp}{dx} \quad \text{et} \quad \frac{d^2T}{dy^2} = \frac{q_p}{H \cdot k} \cdot \frac{u(y)}{u_m} \quad (3.1)$$

où u_m est la vitesse moyenne (ou vitesse débitante). Les conditions aux limites (éq. 3.8) sont :

$$u(H) = -L_s \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=H} \quad T(x, H) = T_p(x) = T_e + \frac{q_p}{h} + \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}}x \quad (3.2)$$

Equation du mouvement

On a :

$$\begin{aligned} \frac{d^2u}{dy^2} = \frac{1}{\mu} \cdot \frac{dp}{dx} &\Rightarrow \frac{du}{dy} = \frac{dp}{\mu dx} y + A \Rightarrow u(y) = \frac{dp}{\mu dx} \frac{y^2}{2} + Ay + B \\ \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} &= 0 \Rightarrow A = 0 \\ \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=H} &= \frac{dp}{\mu dx} H \Rightarrow u(H) = -L_s \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=H} = -L_s \frac{dp}{\mu dx} H \\ \text{mais } u(H) &= \frac{dp}{\mu dx} \frac{H^2}{2} + B \Rightarrow B = -\left(L_s + \frac{H}{2}\right) \frac{H dp}{\mu dx} \end{aligned}$$

Donc le profil de vitesse a pour expression :

$$u(y) = \frac{dp}{\mu dx} \left(\frac{y^2}{2} - L_s H - \frac{H^2}{2} \right) \quad (3.3)$$

La vitesse moyenne s'écrit :

$$u_m = \frac{1}{2H} \int_{-H}^H u(y) dy = \frac{1}{H} \int_0^H u(y) dy = \frac{dp}{\mu dx} \left(-L_s H - \frac{H^2}{3} \right) \quad (3.4)$$

On en déduit donc que

$$u(y) = u_m \left(\frac{6L_s H + 3H^2 - 3y^2}{6L_s H + 2H^2} \right) \quad (3.5)$$

Equation de l'énergie

$$\rho c_p u(y) \frac{dT_m}{dx} = k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (3.6)$$

Le bilan thermique sur une longueur élémentaire Δx s'écrit (conduction axiale négligée) :

$$2q_p \Delta x = \dot{m} C_p \Delta T_m = \rho u_m 2H C_p \Delta T_m \quad (3.7)$$

On en déduit que

$$\frac{dT_m}{dx} = \frac{\Delta T_m}{\Delta x} = \frac{q_p}{\rho C_{pf} u_m H} \quad (3.8)$$

En combinant les équations 3.8 et 3.6 , on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{d^2T}{dy^2} &= \frac{q_p}{Hk} \frac{u(y)}{u_m} = \frac{q_p}{Hk} \frac{6L_sH + 3H^2 - 3y^2}{6L_sH + 2H^2} \\
\Rightarrow \frac{dT}{dy} &= \frac{q_p}{Hk} \frac{6L_sH + 3H^2}{6L_sH + 2H^2} y - \frac{3q_p}{Hk} \frac{1}{6L_sH + 2H^2} \frac{y^3}{3} + C \\
\Rightarrow T(x, y) &= \frac{q_p}{Hk} \frac{6L_sH + 3H^2}{6L_sH + 2H^2} \frac{y^2}{2} - \frac{q_p}{Hk} \frac{1}{6L_sH + 2H^2} \frac{y^4}{4} + Cy + D \quad (3.9)
\end{aligned}$$

Conditions aux limites :

$$\left. \frac{dT}{dy} \right|_{y=0} = 0 \Rightarrow C = 0$$

$$T(x, H) = T_p(x) = T_e + \frac{q_p}{h} + \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} x$$

$$\text{et } T(x, H) = \frac{q_p}{Hk} \frac{6L_sH + 3H^2}{6L_sH + 2H^2} \frac{H^2}{2} - \frac{q_p}{Hk} \frac{1}{6L_sH + 2H^2} \frac{H^4}{4} + D$$

$$\Rightarrow D = T_e + \frac{q_p}{h} + \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} x - \frac{5H^3q_p + 12L_sH^2q_p}{4k(6L_sH + 2H^2)}$$

La forme générale du profil de température est donc :

$$T(x, y) = \frac{q_p}{2Hk} \frac{6L_sH + 3H^2}{6L_sH + 2H^2} \cdot y^2 - \frac{q_p}{4Hk} \frac{1}{6L_sH + 2H^2} \cdot y^4 + \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} \cdot x + T_e + \frac{q_p}{h} - \frac{5H^3q_p + 12L_sH^2q_p}{4k(6L_sH + 2H^2)}$$

$$\Rightarrow T(x, y) = C_1y^2 - C_2y^4 + C_3x + C_4 \quad (3.10)$$

où :

$$\begin{aligned}
C_1 &= \frac{q_p}{2Hk} \cdot \frac{6L_sH + 3H^2}{6L_sH + 2H^2} \\
C_2 &= \frac{q_p}{4Hk} \cdot \frac{1}{6L_sH + 2H^2} \\
C_3 &= \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} \\
C_4 &= T_e + \frac{q_p}{h} - \frac{5H^3q_p + 12L_sH^2q_p}{4k(6L_sH + 2H^2)}
\end{aligned}$$

(b) Nombre de Nusselt

On peut maintenant calculer le nombre de Nusselt $Nu = hD_h/k = q_p D_h / (T_{p_m} - T_m)k$ où T_m est la température moyenne débitante qui est définie par :

$$\begin{aligned}
 T_m &= \frac{\int_{-H}^H u(y)T(y)dy}{\int_{-H}^H u(y)dy} = \frac{1}{u_m 2H} \int_{-H}^H u(y)T(y)dy \\
 &= \frac{1}{u_m 2H} \int_{-H}^H \left[\frac{dp}{2\mu dx} \cdot y^2 - \left(L_s H + \frac{H^2}{2} \right) \frac{dp}{\mu dx} \right] [C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4] dy \\
 &= \frac{1}{u_m 2H} \int_{-H}^H (C_5 y^2 - C_8) (C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4) dy \\
 &= \frac{1}{u_m 2H} \int_{-H}^H [(C_1 C_5 + C_2 C_8) y^4 - C_2 C_5 y^6 + C_3 C_5 x y^2 + (C_4 C_5 - C_1 C_8) y^2 - C_3 C_8 x - C_4 C_8] dy \\
 &= \frac{1}{u_m 2H} \left[\frac{2}{5} (C_1 C_5 + C_2 C_8) H^5 - \frac{2}{7} C_2 C_5 H^7 + \frac{2}{3} C_3 C_5 H^3 x + \frac{2}{3} (C_4 C_5 - C_1 C_8) H^3 - 2C_3 C_8 H x - 2C_4 C_8 H \right]
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

avec

$$\begin{aligned}
 C_5 &= \frac{dp}{2\mu dx} \\
 C_8 &= \left(L_s H + \frac{H^2}{2} \right) \frac{dp}{\mu dx}
 \end{aligned}$$

T_{p_m} est la température moyenne à la paroi qui est calculée par $T(x, H) = T_p(x) = C_1 H^2 - C_2 H^4 + C_3 x + C_4$:

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow T_p - T_m &= (C_1 H^2 - C_2 H^4 + C_3 x + C_4) - \frac{1}{u_m 2H} \left[\frac{2}{5} (C_1 C_5 + C_2 C_8) H^5 - \frac{2}{7} C_2 C_5 H^7 + \frac{2}{3} C_3 C_5 H^3 x \right. \\
 &\quad \left. + \frac{2}{3} (C_4 C_5 - C_1 C_8) H^3 - 2C_3 C_8 H x - 2C_4 C_8 H \right]
 \end{aligned}$$

On en déduit donc l'expression analytique suivante du nombre de Nusselt :

$$Nu = \frac{q_p}{T_{p_m} - T_m} \cdot \frac{D_h}{k} \tag{3.12}$$

(c) Gradient macroscopique de température

On calcule le gradient macroscopique de température $\nabla \langle T \rangle$ de 4 façons :

Première façon :

$$\nabla \langle T \rangle = \frac{\Delta \bar{T}_x}{\Delta x} = \frac{\bar{T}(x_2, y) - \bar{T}(x_1, y)}{x_2 - x_1} \tag{3.13}$$

où le profil de température peut être écrit sous la forme :

$$T(x, y) = C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4$$

On en déduit que

$$\begin{aligned}
 \bar{T}(x_2, y) - \bar{T}(x_1, y) &= \frac{1}{2H} \int_{-H}^H [(C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x_2 + C_4) - (C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x_1 + C_4)] dy \\
 &= \frac{1}{H} \int_0^H C_3 (x_2 - x_1) dy = C_3 (x_2 - x_1)
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \nabla \langle T \rangle = \frac{\bar{T}(x_2, y) - \bar{T}(x_1, y)}{x_2 - x_1} = C_3 = \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} \quad (3.14)$$

Deuxième façon :

$$\nabla \langle T \rangle = \frac{\Delta T_{m_x}}{\Delta x} = \frac{T_m(x_2, y) - T_m(x_1, y)}{x_2 - x_1} \quad (3.15)$$

On en déduit que

$$\begin{aligned} T_m(x_2, y) - T_m(x_1, y) &= \frac{1}{u_m 2H} \int_{-H}^H [(C_5 y^2 - C_8)(C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x_2 + C_4) \\ &\quad - (C_5 y^2 - C_8)(C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x_1 + C_4)] dy \\ &= \frac{1}{u_m 2H} \left(\frac{2}{3} C_3 C_5 H^3 - 2C_3 C_8 H \right) (x_2 - x_1) = \frac{1}{u_m} \left(\frac{1}{3} C_5 H^2 - C_8 \right) C_3 (x_2 - x_1) \end{aligned}$$

On a

$$u_m = \frac{1}{2H} \int_{-H}^H u(y) dy = \frac{1}{H} \int_0^H u(y) dy = \frac{1}{H} \int_0^H (C_5 y^2 - C_8) dy = \frac{1}{3} C_5 H^2 - C_8 \quad (3.16)$$

$$\Rightarrow T_m(x_2, y) - T_m(x_1, y) = C_3 (x_2 - x_1) \quad (3.17)$$

et donc

$$\nabla \langle T \rangle = \frac{T_m(x_2, y) - T_m(x_1, y)}{x_2 - x_1} = C_3 = \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} \quad (3.18)$$

Troisième façon :

$$\nabla \langle T \rangle = \frac{\Delta \langle T \rangle_x}{\Delta x} = \frac{\langle T(x, y) \rangle_2 - \langle T(x, y) \rangle_1}{x_3 - x_1} = \frac{\langle T(x, y) \rangle_2 - \langle T(x, y) \rangle_1}{x_4 - x_2} \quad (3.19)$$

Note : $x_3 - x_1 = x_4 - x_2$ et $x_2 - x_1 = x_4 - x_3$

On en déduit que

$$\begin{aligned} \langle T(x, y) \rangle_2 - \langle T(x, y) \rangle_1 &= \frac{1}{\Omega} \left(\int_{x_3}^{x_4} \int_{-H}^H (C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4) dx dy \right. \\ &\quad \left. - \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H (C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4) dx dy \right) \\ &= \frac{1}{2H(x_2 - x_1)} HC_3 ((x_4^2 - x_3^2) - (x_2^2 - x_1^2)) = \frac{C_3(x_4 - x_2 + x_3 - x_1)}{2} \end{aligned} \quad (3.20)$$

et donc

$$\nabla \langle T \rangle = \frac{C_3(x_3 - x_1)}{(x_3 - x_1)} = C_3 = \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} \quad (3.21)$$

Quatrième façon :

$$\nabla \langle T \rangle = \frac{\Delta \langle T \rangle_x}{\Delta x} = \frac{[T(x, y)u(y)]_m]_2 - [T(x, y)u(y)]_m]_1}{x_3 - x_1} = \frac{[T(x, y)u(y)]_m]_2 - [T(x, y)u(y)]_m]_1}{x_4 - x_2} \quad (3.22)$$

Note : $x_3 - x_1 = x_4 - x_2$ et $x_2 - x_1 = x_4 - x_3$

On en déduit que

$$\begin{aligned}
& [T(x, y)u(y)_m]_2 - [T(x, y)u(y)_m]_1 = \left(\frac{\int_{\Omega} u(y)T(x, y)d\Omega}{\int_{\Omega} u(y)d\Omega} \right)_2 - \left(\frac{\int_{\Omega} u(y)T(x, y)d\Omega}{\int_{\Omega} u(y)d\Omega} \right)_1 \\
& = \frac{1}{\langle u \rangle_{\Omega}} \left[\int_{x_3}^{x_4} \int_{-H}^H (C_5 y^2 - C_8)(C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4) dx dy \right. \\
& \quad \left. - \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H (C_5 y^2 - C_8)(C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4) dx dy \right] \\
& = \frac{(\frac{1}{3}C_5 H^2 - C_8)C_3 H [(x_4^2 - x_3^2) - (x_2^2 - x_1^2)]}{\langle u \rangle 2H(x_2 - x_1)} = \frac{u_m C_3 H(x_2 - x_1) 2(x_3 - x_1)}{u_m 2H(x_2 - x_1)} = C_3(x_3 - x_1)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Comme $\langle u \rangle = u_m$ (pour une conduite dont les parois n'ont pas d'épaisseur)

$$\langle u \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u(y) d\Omega = \frac{1}{2H(x_2 - x_1)} \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H (C_5 y^2 - C_8) dx dy = \frac{1}{3} C_5 H^2 - C_8 = u_m \tag{3.24}$$

$$\tag{3.25}$$

alors

$$\nabla \langle T \rangle = \frac{C_3(x_3 - x_1)}{(x_3 - x_1)} = C_3 = \frac{2q_p}{\dot{m}C_{pf}} \tag{3.26}$$

On en conclût que ces 4 méthodes de calcul conduisent à la même expression du gradient macroscopique de température $\nabla \langle T \rangle$

(d) Détermination du coefficient de dispersion thermique longitudinale

$$(K_{disp})_{xx} \cdot \nabla \langle T \rangle = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega} (u - \langle u \rangle^f)(T - \langle T \rangle) d\Omega \tag{3.27}$$

Le champ de température macroscopique est calculé par :

$$\begin{aligned}
\langle T \rangle & = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} T d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H (C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4) dx dy \\
& = \frac{\frac{2}{3}C_1 H^3(x_2 - x_1) - \frac{2}{5}C_2 H^5(x_2 - x_1) + C_3 H(x_2^2 - x_1^2) + 2C_4 H(x_2 - x_1)}{2H(x_2 - x_1)} \\
& = \frac{1}{3}C_1 H^2 - \frac{1}{5}C_2 H^4 + \frac{1}{2}C_3(x_2 + x_1) + C_4
\end{aligned} \tag{3.28}$$

En combinant les deux équations 3.14 et 3.28 avec l'équation 3.14, on obtient la dispersion thermique longitudinale :

$$\begin{aligned}
(K_{disp})_{xx} \cdot \nabla \langle T \rangle &= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{\Omega} (u - \langle u \rangle^f) (T - \langle T \rangle) d\Omega \\
&= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H \left[\frac{dp}{\mu dx} \left(\frac{y^2}{2} - L_s H - \frac{H^2}{2} \right) - \langle u \rangle \right] [C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_4 \\
&\quad - \langle T \rangle] dx dy \\
&= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H \left[\frac{dp}{2\mu dx} y^2 - \left((L_s H + \frac{H^2}{2}) \frac{dp}{\mu dx} + \langle u \rangle \right) \right] [C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x \\
&\quad + C_7] dx dy \\
&= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H (C_5 y^2 - C_6) (C_1 y^2 - C_2 y^4 + C_3 x + C_7) dx dy \\
&= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \int_{x_1}^{x_2} \int_{-H}^H [(C_1 C_5 + C_2 C_6) y^4 - C_2 C_5 y^6 + C_3 C_5 x y^2 + (C_5 C_7 - C_1 C_6) y^2 \\
&\quad - C_3 C_6 x - C_6 C_7] dx dy \\
&= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega} \left[\frac{2}{5} (C_1 C_5 + C_2 C_6) H^5 (x_2 - x_1) - \frac{2}{7} C_2 C_5 H^7 (x_2 - x_1) + \frac{2}{3} C_3 C_5 H^3 \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{2}{3} (C_5 C_7 - C_1 C_6) H^3 (x_2 - x_1) - 2 C_3 C_6 H \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) - 2 C_6 C_7 H (x_2 - x_1) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow (K_{disp})_{xx} &= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega \nabla \langle T \rangle} \left[\frac{2}{5} (C_1 C_5 + C_2 C_6) H^5 (x_2 - x_1) - \frac{2}{7} C_2 C_5 H^7 (x_2 - x_1) + \frac{2}{3} C_3 C_5 H^3 \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{2}{3} (C_5 C_7 - C_1 C_6) H^3 (x_2 - x_1) - 2 C_3 C_6 H \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) - 2 C_6 C_7 H (x_2 - x_1) \right] \\
&= A \times B
\end{aligned}$$

où :

$$\begin{aligned}
A &= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\Omega \nabla \langle T \rangle} \\
B &= \left[\frac{2}{5} (C_1 C_5 + C_2 C_6) H^5 (x_2 - x_1) - \frac{2}{7} C_2 C_5 H^7 (x_2 - x_1) + \frac{2}{3} C_3 C_5 H^3 \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{2}{3} (C_5 C_7 - C_1 C_6) H^3 (x_2 - x_1) - 2 C_3 C_6 H \left(\frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} x_1^2 \right) - 2 C_6 C_7 H (x_2 - x_1) \right] \\
C_5 &= \frac{dp}{2\mu dx} \\
C_6 &= \left(L_s H + \frac{H^2}{2} \right) \frac{dp}{\mu dx} + \langle u \rangle = C_8 + u_m \\
C_7 &= C_4 - \langle T \rangle
\end{aligned}$$

(e) Détermination du coefficient de tortuosité.

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{tor} &= \frac{k_f - k_s}{\nabla \langle T \rangle} \int_{S_{fs}} T \cdot \mathbf{n} dS \\ &= \frac{k_f - k_s}{\nabla \langle T \rangle} \int_{x_1}^{x_2} [(C_1 H^2 - C_2 H^4 + C_3 x + C_4) - (C_1 H^2 - C_2 H^4 + C_3 x + C_4)] dx \\ &= 0\end{aligned}$$

Chapitre 4

Effet du glissement hydrodynamique sur la perméabilité de milieux micro-poreux

4.1 Introduction

Les écoulements dans les milieux micro-poreux font l'objet d'un intérêt grandissant en raison du développement rapide de micro-systèmes fluidiques de géométries complexes (micro-échangeurs thermiques, microréacteurs chimiques...). Dans ce chapitre, le formalisme résultant de l'homogénéisation de structures périodiques est employé pour simuler numériquement des écoulements isothermes de gaz à travers divers empilements de complexité croissante :

- écoulements dans un milieu lamellaire (1D),
- écoulements à travers des réseaux de barres à section rectangulaires ou de cylindres (2D),
- écoulements dans des empilements de cubes ou de sphères (3D).

Les perméabilités sont déterminées en calculant les moyennes spatiales des champs de vitesses, solutions des équations de Stokes, et en supposant constant le gradient de pression macroscopique. Les valeurs obtenues en imposant des conditions d'adhérence sont comparées à celles obtenues avec des conditions de glissement du premier ordre. On considère des pores de dimensions micrométriques correspondant, pour de l'air à pression atmosphérique, à des nombres de Knudsen compris entre $Kn = 0,01$ et $Kn = 0,1$, domaine de validité des équations de Stokes avec condition de glissement (Karniadakis et al., 2005 [39]). On discute de l'augmentation relative de la perméabilité due au glissement selon la géométrie des pores.

4.2 Modélisation

On considère l'écoulement lent, isotherme, incompressible et permanent d'un gaz dans un milieu poreux consolidé. Lorsque la dimension caractéristique l_p des pores est de l'ordre

du libre parcours moyen ($\lambda \approx 61\text{nm}$ pour de l'air dans des conditions standard) l'hypothèse d'adhérence fluide-paroi n'est plus applicable (Navier, 1823 [55]) parce que l'épaisseur de la couche de Knudsen n'est plus négligeable devant l_p . Pour des écoulements de gaz à pression faible ou modérée, Klinkenberg, 1941 [42] a suggéré la modification suivante de la loi de Darcy :

$$\langle \mathbf{u}^{(0)} \rangle = -\frac{\mathbf{K}_G}{\mu} \langle \nabla p^{(0)} \rangle \quad (4.1)$$

$$\mathbf{K}_G = \mathbf{K}_D \left(1 + \frac{b}{p_m}\right) \quad (4.2)$$

où $\langle \mathbf{u} \rangle$ est la vitesse de filtration, \mathbf{K}_D est la perméabilité de Darcy et \mathbf{K}_G est la perméabilité de Klinkenberg. Le paramètre b dépend de plusieurs facteurs, dont la nature du gaz (Chastanet et al., 2004 [16]) et la taille des pores. p_m est la pression moyenne. La perméabilité de Klinkenberg peut être calculée en résolvant, sur des réseaux périodiques, le problème aux limites local donné par l'homogénéisation périodique [67]. Pour une matrice poreuse rigide de période Ω :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{(0)} = 0 \quad \text{dans } \Omega_f \quad (4.3)$$

$$-\nabla p^{(1)} + \mu \nabla^2 \mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{G} \quad \text{dans } \Omega_f \quad (4.4)$$

$$\mathbf{u}^{(0)} = L_s [\nabla \mathbf{u}^{(0)} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}^{(0)} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}] \quad \text{sur } S_{fs} \quad (4.5)$$

où Ω_f représente le volume occupé par la phase fluide et S_{fs} est l'aire de l'interface fluide-solide. $\mathbf{u}^{(0)}$ et $p^{(1)}$ sont Ω -périodiques, \mathbf{n} désigne la normale à la paroi et L_s est la longueur de glissement, ou de Navier, ($L_s = \lambda(2 - \sigma)/\sigma$ où σ est le coefficient d'accommodation qui peut être déterminé par dynamique moléculaire ou expérimentalement). $\mathbf{G} = \langle \nabla p^{(0)} \rangle$ est le gradient macroscopique de pression.

Ce modèle a été introduit dans le code de calcul commercialisé Comsol et validé par comparaison avec des solutions analytiques pour des écoulements glissant de Poiseuille (Wu et al., 2003 [83]) et pour un écoulement de Stokes autour d'une sphère (Barber et Emerson, 2000 [7]).

4.2.1 Problème d'une sphère dans un milieu infini. Comparaisons avec la solution analytique

On considère une micro-sphère de rayon a immergée dans un écoulement de fluide incompressible dont la vitesse loin de la sphère est u_∞ . On utilise le système de coordonnées sphériques pour analyser ce problème avec l'origine au centre de la sphère et une direction de la vitesse u_∞ telle que $\theta = 0$.

4.2.1.1 Données

$a = 1 \mu\text{m}$, $u_\infty = 1,825 \text{ m/s}$, $\rho = 1,23 \text{ kg/m}^3$, $\mu = 1,78 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$, $\sigma = 0,8$, $\lambda = 5 \times 10^{-2} \mu\text{m}$

Selon l'article de Barber et Emerson, 2000 [7], on trouve la solution analytique de la vitesse tangentielle u_θ sous la forme :

$$u_\theta|_{r=a} = Kn \left(\frac{2 - \sigma}{\sigma} \right) \frac{a}{\mu} \tau_{r\theta}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad (4.6)$$

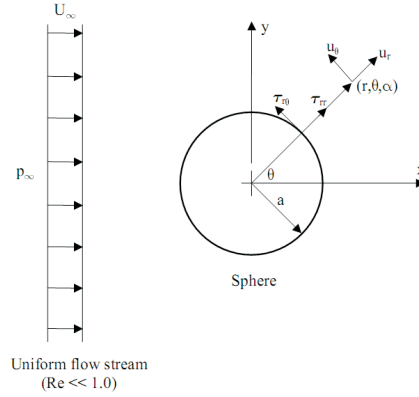


FIGURE 4.1 – Géométrie étudiée.

où $\tau_{r\theta} = \mu\left(\frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{1}{r}u_\theta + \frac{\partial u_\theta}{\partial r}\right)$ est la contrainte tangentielle à la surface de la sphère. Après calculs, on obtient le résultat suivant :

$$u_\theta|_{r=a} = -\frac{3Kn'}{2 + 6Kn'}u_\infty \sin \theta \quad (4.7)$$

avec $Kn' = (2 - \sigma)/\sigma Kn$

4.2.1.2 Application numérique

Solution analytique : En effectuant un changement de coordonnées sphériques à coordonnées cartésiennes défini par

$$\cos \theta = \frac{z}{r} \quad (4.8)$$

Quand $z=0 \Rightarrow \cos \theta = 0 \Rightarrow \sin \theta = 1$

$$Kn' = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{\lambda}{a} = \frac{2 - 0,85 \times 10^{-8}}{0,8} \frac{10^{-6}}{10^{-6}} = 0,075 \quad (4.9)$$

$$\Rightarrow u_\theta|_{r=a} = -\frac{3Kn'}{2 + 6Kn'}u_\infty \sin \theta = 0,167 \text{ m/s} \quad (4.10)$$

Solution numérique : On constate que la vitesse de glissement calculée numériquement à la surface d'une sphère a pour valeur 0.164 m/s (figure 4.2), ce qui valide la solution numérique.

4.3 Écoulement d'un fluide à travers une micro conduite plane

4.3.1 Introduction

Dans le chapitre 3, on a comparé les résultats numériques avec des solutions analytiques pour une micro conduite à paroi d'épaisseur négligeable (problème de Poiseuille plan). On examine l'effet du glissement sur la perméabilité dans le cas d'une micro conduite avec différentes épaisseurs des parois, épaisseur variant de $e = 0,5 \mu\text{m}$ ($H = 2 \mu\text{m}$) à $e = 4,5 \mu\text{m}$ ($H = 10 \mu\text{m}$). La largeur de la conduite est fixée à $1 \mu\text{m}$.

On utilise un maillage non-uniforme et resserré aux interfaces fluide-solide (Fig. 4.3a).

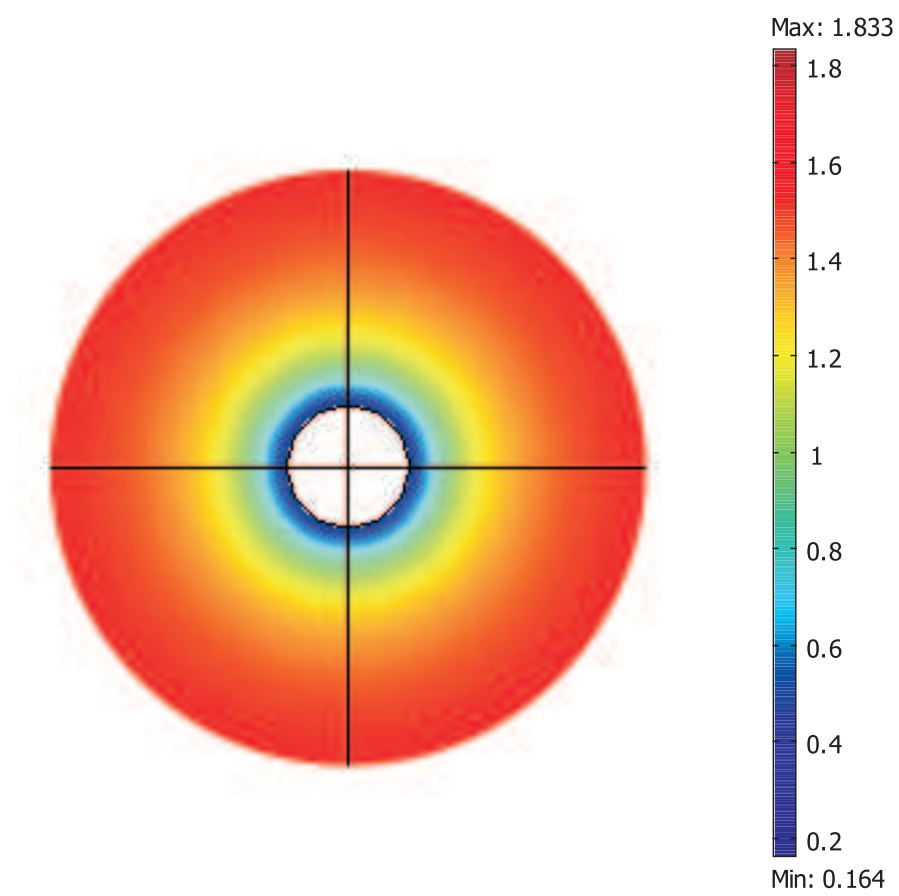


FIGURE 4.2 – Champ microscopique de vitesse.

4.3.2 Champs microscopiques de pression et de vitesse

Les champs microscopiques de pression et de vitesse obtenus sont identiques à ceux du problème de Poiseuille plan sans parois : $\mathbf{u}^{(0)}$, $p^{(1)}$ sont Ω -périodiques (Fig. 4.3). Sous l'effet du glissement, la vitesse n'est pas nulle à l'interface fluide-solide. Sa valeur est maximale sur l'axe de la conduite fluide mais elle est inférieure à $1,5u_m$. Elle est minimale le long des parois.

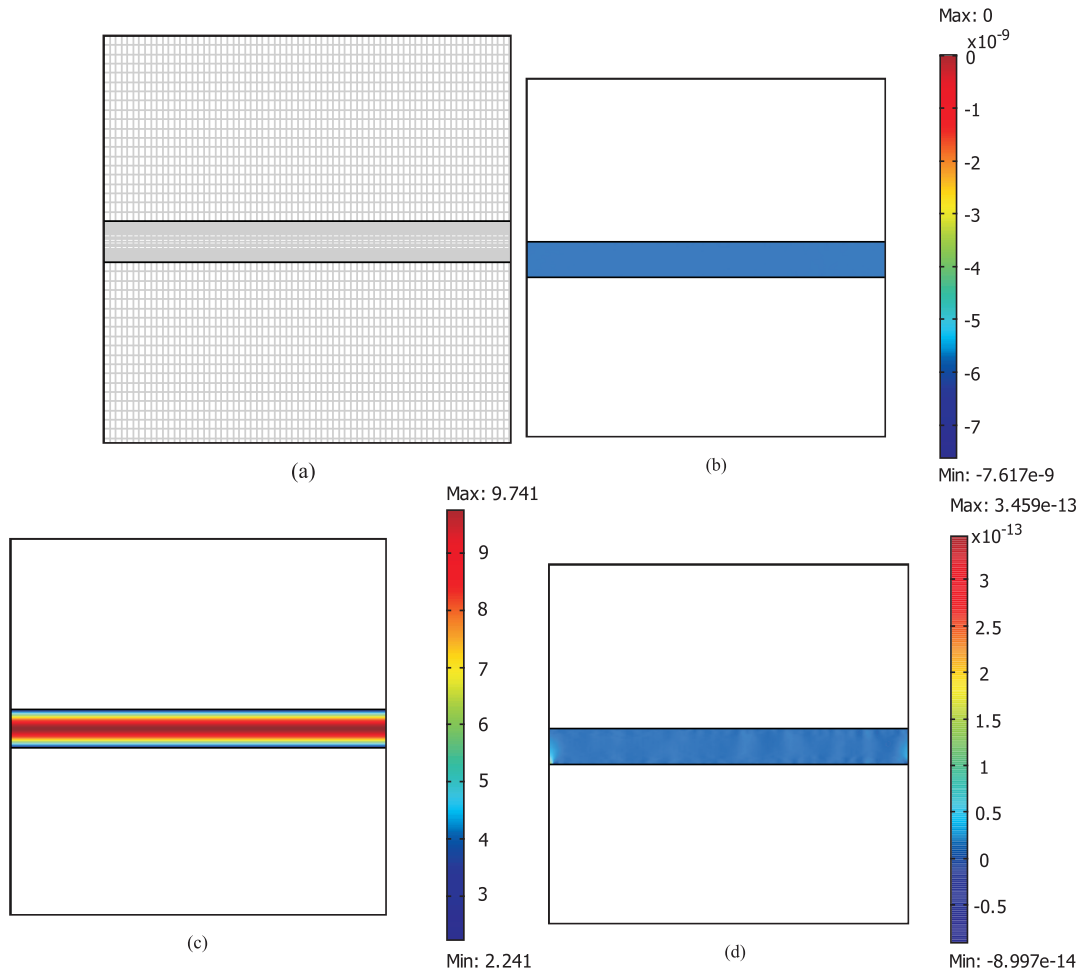


FIGURE 4.3 – Écoulement d'un fluide à travers une micro-conduite avec des parois (1D) : a) exemple de maillage ; b) champ de pression p ; c) composante de la vitesse u ; d) composante de la vitesse v

4.3.3 Résultats et discussion

Le tableau 4.1 donne des valeurs numériques de la perméabilité avec ou sans glissement selon l'épaisseur e des parois. L'augmentation relative de la perméabilité $((K_G - K_D)/K_D)$ pour les 3 géométries est identique ($\approx 45\%$) car la largeur de la conduite est fixée. L'augmentation relative de la perméabilité augmente avec le glissement, caractérisé par le facteur d'accommodation σ (notons que σ est compris entre 0.8 et 1 selon la nature du couple gaz-paroi, Seidl and Steinheil, 1974 [66] ; Lord, 1977 [48]).

	$e = 0.5 \mu m$	$e = 2.5 \mu m$	$e = 4.5 \mu m$
$K_D(m^2)$	4.17×10^{-14}	1.39×10^{-14}	8.33×10^{-15}
$K_G(\sigma = 0.9)(m^2)$	6.04×10^{-14}	2.01×10^{-14}	1.21×10^{-14}
$K_G(\sigma = 0.8)(m^2)$	6.46×10^{-14}	2.15×10^{-14}	1.29×10^{-14}

TABLE 4.1 – Perméabilité sans glissement, K_D , et avec glissement , K_G .

4.4 Écoulements à travers des réseaux de barres ou de cylindres (2D)

4.4.1 Expression de \mathbf{K}

Des micro-structures formées par des barres à section carrée ou par trois types d'arrangement de cylindres sont examinées.

Dans le chapitre 3, on a comparé nos valeurs de la perméabilité avec celles reportées dans la littérature sans condition de glissement. On simule ici le cas de l'air avec un coefficient d'accommodation $\sigma = 0.9$. Sachant que le libre parcours moyen à pression atmosphérique est $\lambda = 6.111 \times 10^{-8}$ (m), la longueur du glissement est $L_s = \lambda(2 - \sigma)/\sigma = 7.468 \times 10^{-8}$ (m). Les composantes du tenseur de perméabilité \mathbf{K} s'écrivent sous la forme :

$$K_{11} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{11} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} u^{(0)} dy = \mu \langle u^{(0)} \rangle \quad (4.11)$$

$$K_{21} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{21} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} v^{(0)} dy = \mu \langle v^{(0)} \rangle = 0 \quad (4.12)$$

4.4.2 Effet du glissement sur la perméabilité d'un réseau de barres

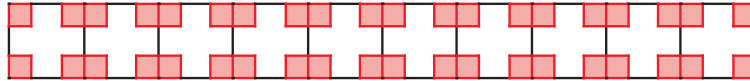


FIGURE 4.4 – Domaine physique.

La géométrie étudiée est représentée sur la figure 4.4. La hauteur simulée est $H = 10 \mu m$ et la longueur $L = 100 \mu m$. Dans tous les cas considérés, le nombre de cellules élémentaires (VER) est de 10, soit une dimension de $10 \mu m \times 10 \mu m$. La taille des côtés des blocs carrés est $a = 3 \mu m$ de sorte que la porosité a pour valeur $\varepsilon = 0.64$. Dans cette partie, on peut appliquer la condition de périodicité, c-à-d que la méthode d'homogénéisation peut être utilisée pour calculer la perméabilité. Comme dans la partie précédente, on prend toujours le maillage optimal de 100×1000 (20 pour le solide, 60 pour le fluide et 1000 sur la longueur de la conduite) pour le modèle complet (Fig. 4.6). Le maillage d'un VER est de 100×100 (modèle périodique, Fig. 4.5). Les deux modèles donnent les mêmes valeurs de la perméabilité sans condition de glissement. Le modèle complet montre que l'écoulement s'établit très rapidement et que le champ de vitesse devient périodique dès le second VER.

On a ensuite fait varier la taille des côtés des blocs carrés (Figure 4.7) de $a = 4, 5 \mu m$ à $a = 3 \mu m$ de sorte que la porosité augmente de $\varepsilon = 0, 19$ à $\varepsilon = 0, 64$. Le nombre de Knudsen,

	Modèle complet	Modèle périodique
$K_D (m^2)$	6.35×10^{-13}	6.35×10^{-13}

TABLE 4.2 – Comparaison des perméabilités entre modèle complet et modèle périodique.

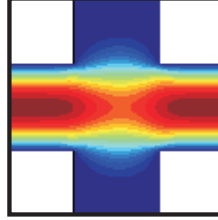


FIGURE 4.5 – Champs de vitesse pour le modèle périodique.

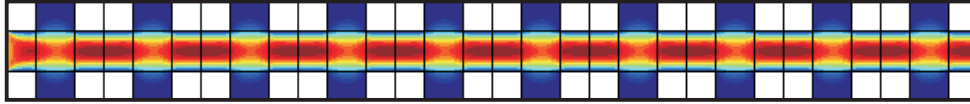


FIGURE 4.6 – Champs de vitesse pour le modèle complet.

$Kn = \lambda/(H - 2a)$, varie alors de $Kn = 0,06$ à $Kn = 0,015$. Dans ce domaine de Kn , des conditions de glissement doivent être appliquées. La perméabilité, sans tenir compte du glissement, est alors comprise entre $K = 8,68 \times 10^{-15} m^2$ et $K = 6,35 \times 10^{-13} m^2$ (Tableau 4.3). On en déduit que la longueur d'établissement du régime dynamique est très courte (de l'ordre de quelques \sqrt{K}). La perméabilité augmente évidemment sous l'effet du glissement : son augmentation est d'autant plus importante que le nombre de Knudsen est grand et que le coefficient d'accommodation est faible.

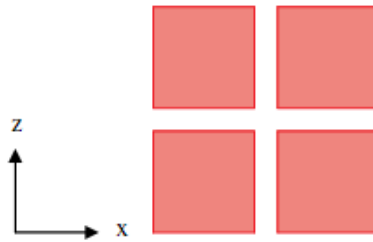


FIGURE 4.7 – Maille élémentaire 2D.

	$\varepsilon = 0,19$	$\varepsilon = 0,36$	$\varepsilon = 0,51$	$\varepsilon = 0,64$
$K_D (m^2)$	$8,68 \times 10^{-15}$	$7,25 \times 10^{-14}$	$2,56 \times 10^{-13}$	$6,35 \times 10^{-13}$
$K_G(\sigma = 0,9) (m^2)$	$1,24 \times 10^{-14}$	$8,74 \times 10^{-14}$	$2,89 \times 10^{-13}$	$6,95 \times 10^{-13}$
$K_G(\sigma = 0,8) (m^2)$	$1,32 \times 10^{-14}$	$9,06 \times 10^{-14}$	$2,97 \times 10^{-13}$	$7,07 \times 10^{-13}$

TABLE 4.3 – Effet du glissement sur la perméabilité pour différentes porosités (ou de Kn) et pour deux valeurs du coefficient d'accommodation.

4.4.3 Effet du glissement sur la perméabilité de réseaux de cylindres ou de barres.

4.4.3.1 Simulation numérique d'écoulements PERPENDICULAIRES à l'axe des arrangements.

4.4.3.1.1 Champ microscopique de vitesse et de pression Les figures 4.8,4.9 et 4.10 montrent les champs microscopiques de vitesse et de pression pour les trois réseaux étudiés : arrangement en ligne de cylindres, arrangement en quinconce de cylindres et arrangement en ligne de barres. Les figures 4.8a, 4.9a et 4.10a montrent que le champ microscopique de pression est toujours symétrique par rapport l'axe e_1 ,

$$p^{(1)}(y_1, y_2) = p^{(1)}(y_1, -y_2) \quad (4.13)$$

et anti-symétrique par rapport l'axe e_2 ,

$$p^{(1)}(y_1, y_2) = -p^{(1)}(-y_1, y_2) \quad (4.14)$$

La composante du champ microscopique de vitesse u est symétrique selon les deux axes e_1 et e_2 (Fig. 4.8c, 4.9c et 4.10c),

$$u^{(0)}(y_1, y_2) = u^{(0)}(y_1, -y_2) = u^{(0)}(-y_1, y_2) = u^{(0)}(-y_1, -y_2) \quad (4.15)$$

Par contre la composante du champ microscopique de vitesse v est anti-symétrique (Fig. 4.8d, 4.9d et 4.10d),

$$v^{(0)}(y_1, y_2) = -v^{(0)}(y_1, -y_2) = -v^{(0)}(-y_1, y_2) = v^{(0)}(-y_1, -y_2) \quad (4.16)$$

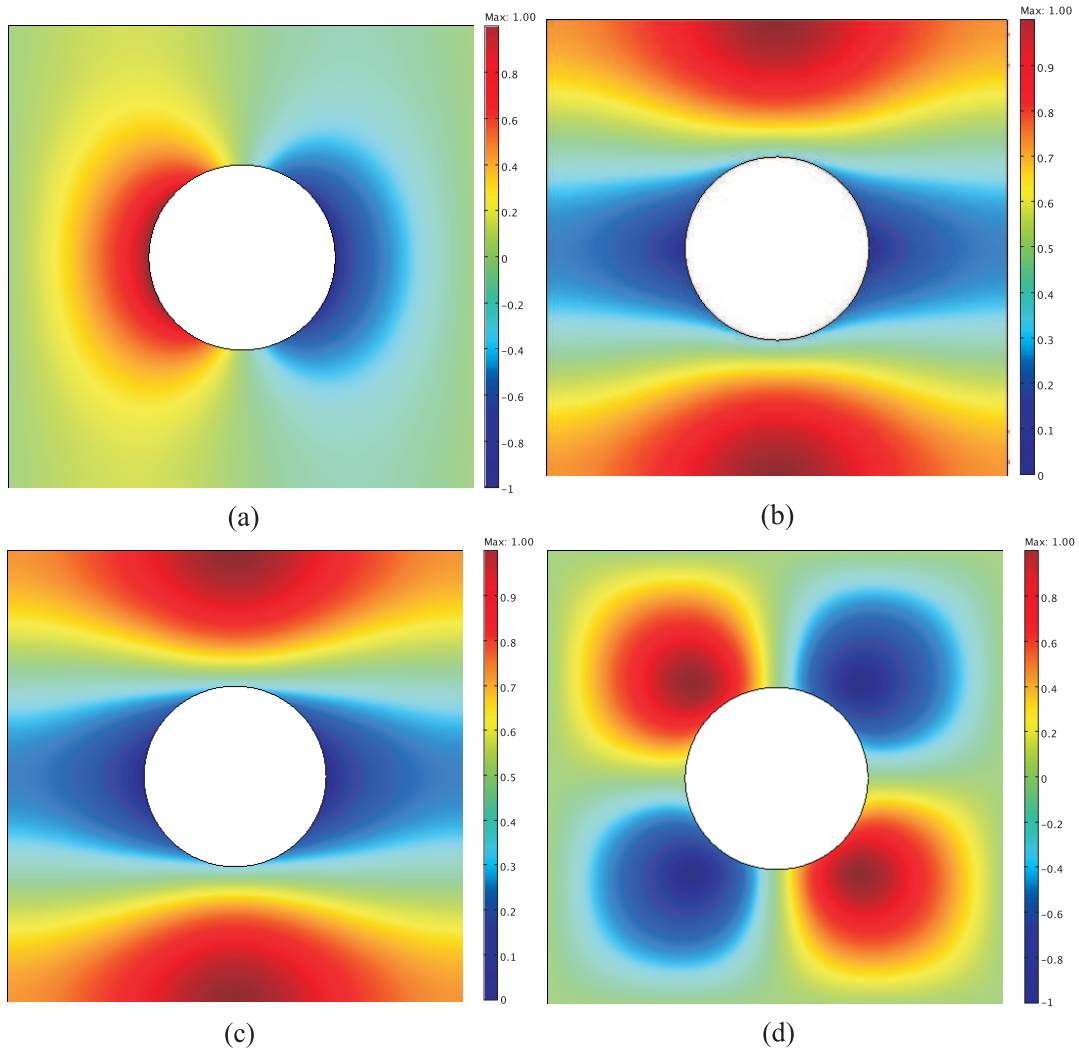


FIGURE 4.8 – Écoulement à travers un réseau de cylindres : cas de l'arrangement en ligne a) champ de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champ de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1$, $r/d = 0.4$, $(p^{(1)})_{max} = 6.161 \times 10^{-7} Pa$, $(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.75 \times 10^{-9} (m/s)$, $(u^{(0)})_{max} = 4.75 \times 10^{-9} (m/s)$, $(v^{(0)})_{max} = 9.121 \times 10^{-10} (m/s)$).

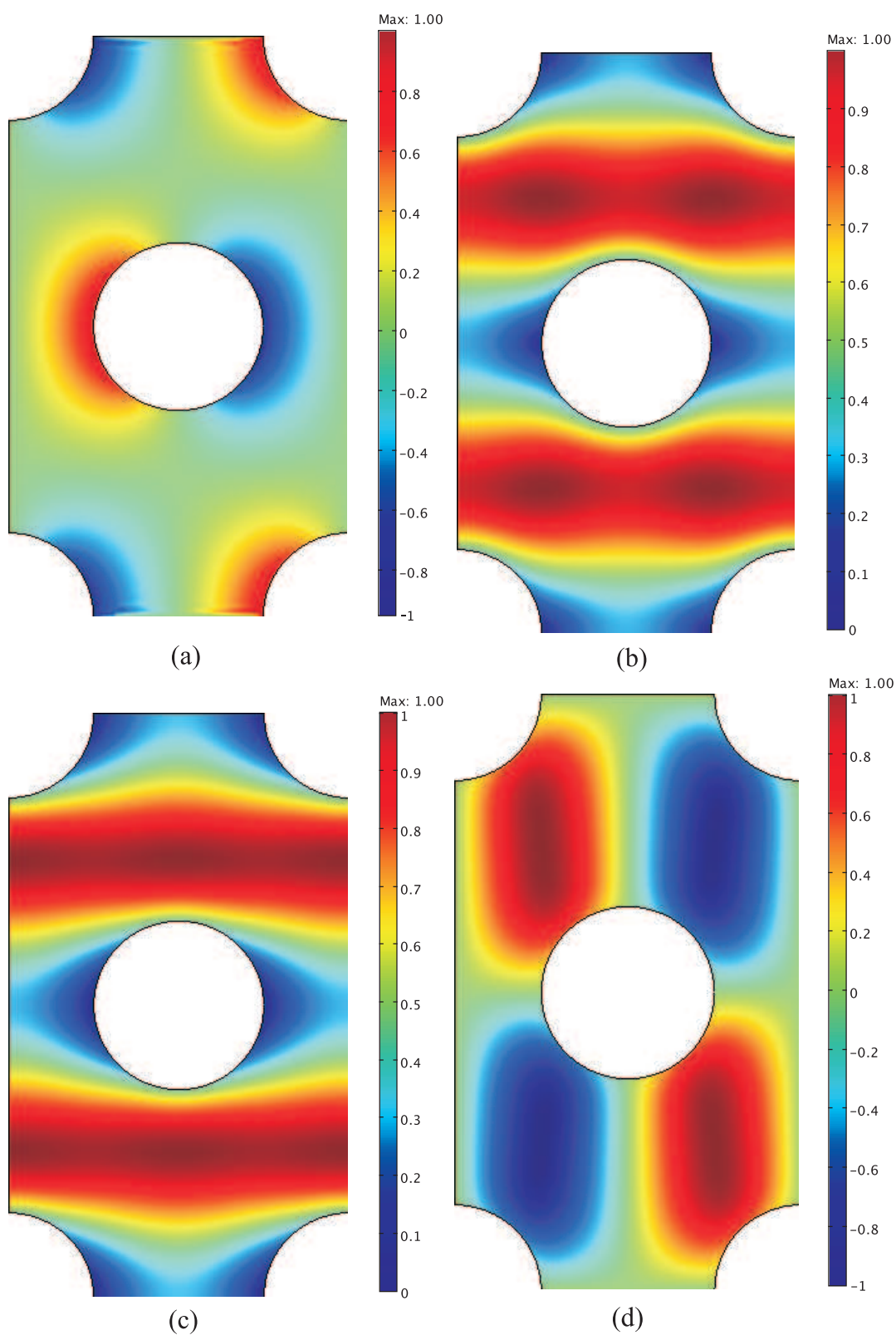


FIGURE 4.9 – Écoulement à travers un réseau de cylindres : cas de l'arrangement en quinconce a) champ de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champ de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1$, $r/d = 0.5$, $(p^{(1)})_{max} = 4.612 \times 10^{-7} Pa$, $(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.349 \times 10^{-9} (m/s)$, $(u^{(0)})_{max} = 2.214 \times 10^{-9} (m/s)$, $(v^{(0)})_{max} = 8.834 \times 10^{-10} (m/s)$).

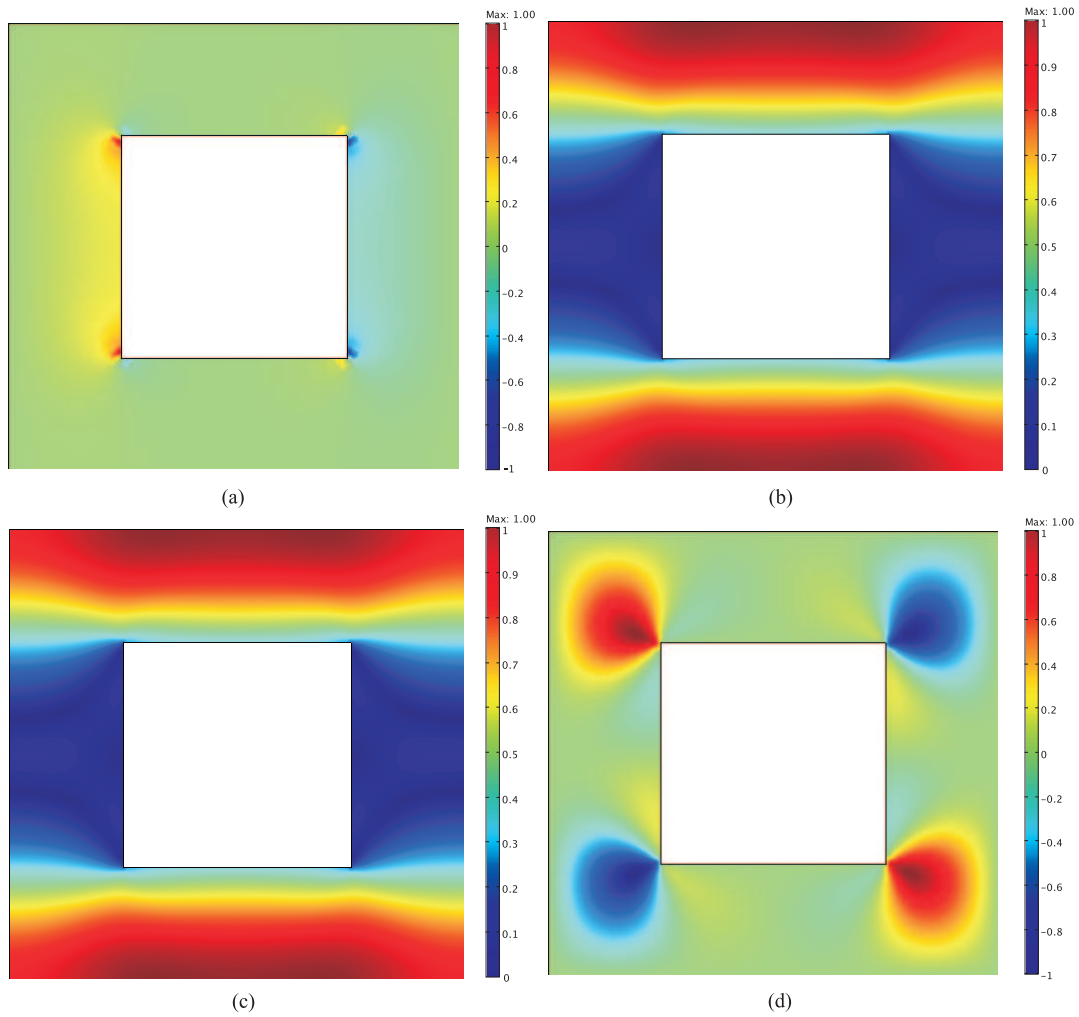


FIGURE 4.10 – Écoulement à travers un réseau de barres à section carrée : cas de l'arrangement en ligne a) champ de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champ de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1$, $r/d = 0.5$, $(p^{(1)})_{max} = 1.504 \times 10^{-6} Pa$, $(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.416 \times 10^{-9} (m/s)$, $(u^{(0)})_{max} = 2.416 \times 10^{-9} (m/s)$, $(v^{(0)})_{max} = 3.473 \times 10^{-10} (m/s)$).

4.4.3.1.2 Résultats et discussions Les figures 4.11 et 4.12 représentent les variations de la perméabilité normalisée K_{11}/S pour les différents réseaux de cylindres en fonction de la fraction volumique c ou du rapport r/d . On observe que le glissement augmente la perméabilité. Quand la fraction volumique c tend vers c_{max} , la perméabilité normalisée $K_{11}/S \rightarrow 0$ et $c \rightarrow 0$, la perméabilité normalisée $K_{11}/S \rightarrow \infty$

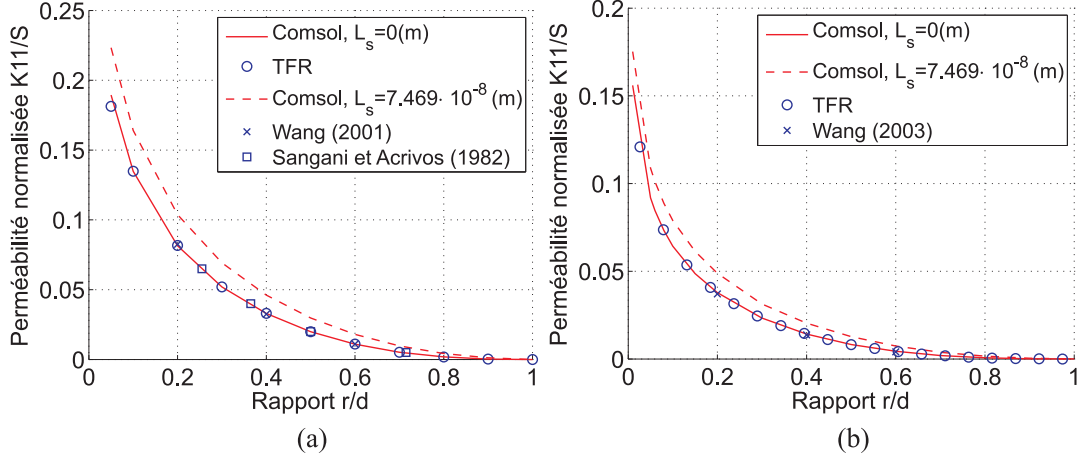


FIGURE 4.11 – Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers des réseaux de cylindres. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).

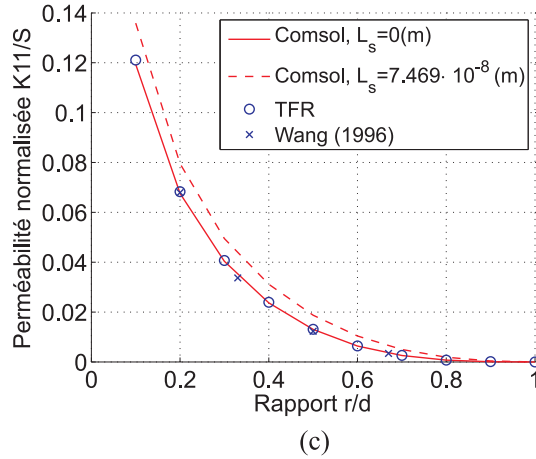


FIGURE 4.12 – Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers un réseau en ligne de barres à section carrée. Cas des arrangements en ligne (c)

4.4.3.2 Simulation numérique d'écoulements PARALLÈLES à l'axe des cylindres

4.4.3.2.1 Champ microscopique de vitesse La figure 4.13 montre le champ de vitesse locale $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$. La composante de la vitesse $w^{(0)}$ est symétrique par rapport aux axes e_1 et e_2 , la vitesse aux interfaces n'étant pas nulle.

$$w^{(0)}(y_1, y_2) = w^{(0)}(y_1, -y_2) = w^{(0)}(-y_1, y_2) = w^{(0)}(-y_1, -y_2) \quad (4.17)$$

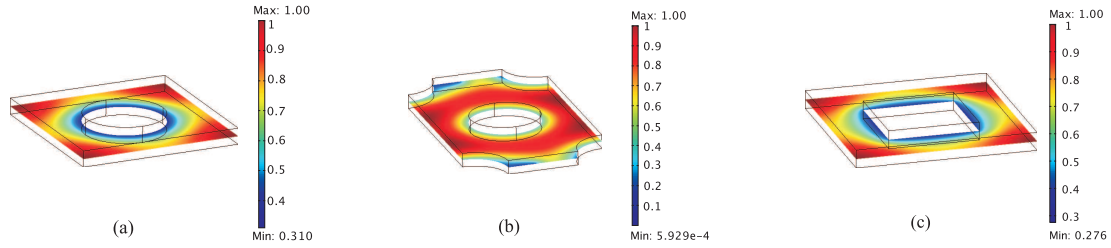


FIGURE 4.13 – Champs de vitesse $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$ pour des réseaux de cylindre (a,b) et de barre carrée (c) : a) arrangement en ligne ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 6.0646 \times 10^{-9} (m/s)$), b) arrangement en quinconce ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.039 \times 10^{-9} (m/s)$), c) arrangement en ligne ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.506 \times 10^{-9} (m/s)$) ($\mathbf{G} = e_3, r/d = 0.5$).

4.4.3.2.2 Résultats et discussions Les figures 4.14 et 4.15 montrent les variations de la perméabilité normalisée K_{33}/S pour les différents réseaux de cylindres en fonction de la fraction volumique c ou du rapport r/d .

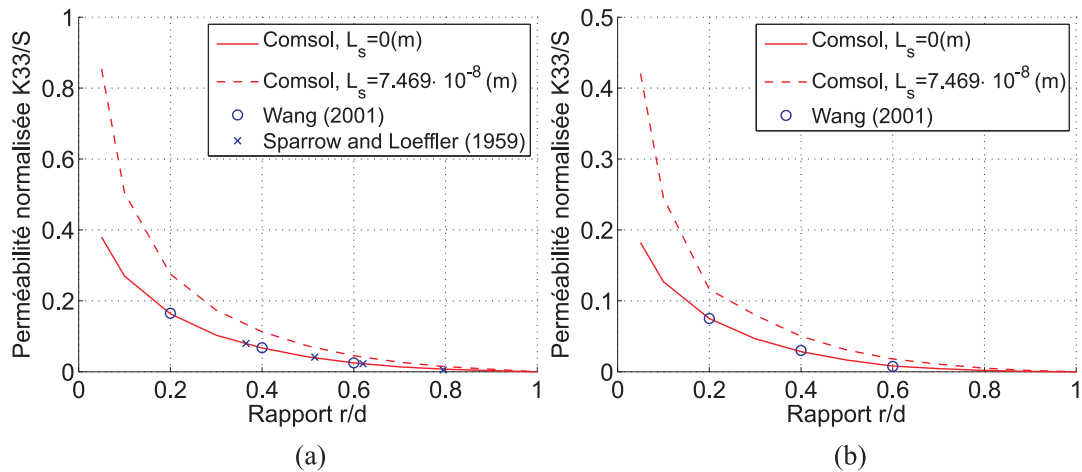
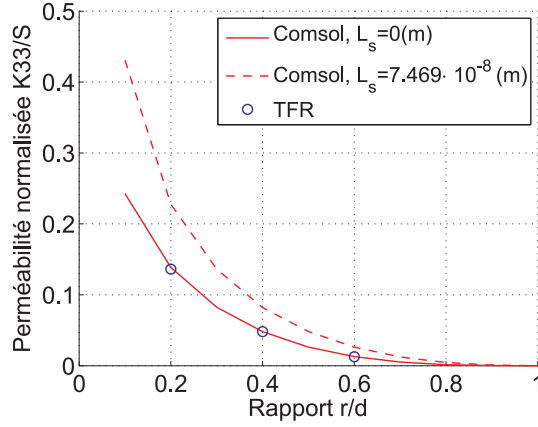


FIGURE 4.14 – Effet du glissement sur la perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de cylindres. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).



(c)

FIGURE 4.15 – Effet du glissement sur la perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de barres à section carrée. Cas des arrangements en ligne (c).

4.5 Écoulements à travers des réseaux de sphères ou de cubes

4.5.1 Expression de \mathbf{K}

Comme dans le cas 2D, l'écoulement est décrit par la loi de Darcy :

$$\langle \mathbf{u}^{(0)} \rangle = -\frac{\mathbf{K}\mathbf{G}}{\mu} \quad (4.18)$$

Pour les géométries considérées, l'écoulement est isotrope et le tenseur de perméabilité \mathbf{K} est donc isotrope pour des arrangements périodiques :

$$\mathbf{K} = K\mathbf{I} \quad (4.19)$$

où \mathbf{I} est le tenseur identité et K la perméabilité qui dépend du rayon de la sphère solide " R_s ", de la porosité " ε " et de l'arrangement des sphères, soit $K = K(R_s, \varepsilon, \text{arrangement})$.

Pour déterminer la perméabilité dans un milieu périodique, la méthode d'homogénéisation décrite dans le chapitre 2 est utilisée. Le problème aux limites pour un volume élémentaire représentatif est résolu par des simulations numériques 3D en appliquant le gradient macroscopique de pression $\mathbf{G} = \langle \nabla p^{(0)} \rangle = \mathbf{e}_3$. Le champ microscopique de la vitesse prend donc la forme :

$$\mathbf{u}^{(0)} = u^{(0)}\mathbf{e}_1 + v^{(0)}\mathbf{e}_2 + w^{(0)}\mathbf{e}_3 = \frac{k_{31}}{\mu}\mathbf{e}_1 + \frac{k_{32}}{\mu}\mathbf{e}_2 + \frac{k_{33}}{\mu}\mathbf{e}_3 \quad (4.20)$$

Les composantes du tenseur de perméabilité s'écrivent :

$$K_{31} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{31} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} u^{(0)} dy = \mu \langle u^{(0)} \rangle = 0 \quad (4.21)$$

$$K_{32} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{32} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} v^{(0)} dy = \mu \langle v^{(0)} \rangle = 0 \quad (4.22)$$

$$K_{33} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} k_{33} dy = \mu \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_f} w^{(0)} dy = \mu \langle w^{(0)} \rangle \quad (4.23)$$

On a trouvé numériquement les mêmes valeurs des composantes diagonales du tenseur de perméabilité $K_{11} = K_{22} = K_{33}$ (ce qui était attendu).

4.5.2 Simulation numérique d'empilements de sphères et effet du glissement.

Les perméabilités de réseaux cubiques de sphères (cubique simple, CS, cubique centré, CC, cubique face centrée, CFC, et hexagonal, HEXA) ont été déterminées en calculant les moyennes spatiales des champs de vitesses, solutions des équations de Stokes, et en supposant constant le gradient de pression macroscopique. Les valeurs obtenues en imposant des conditions d'adhérence sont comparées à celles obtenues avec des conditions de glissement du premier ordre.

On considère des sphères de diamètre compris entre $2\mu m$ et $40\mu m$, ce qui correspond, pour de l'air à pression atmosphérique, à des nombres de Knudsen basés sur le rayon hydraulique des pores compris entre $Kn = 0,01$ et $Kn = 0,1$, domaine de validité des équations de Navier-Stokes avec condition de glissement (Karniadakis et al., 2005 [39]).

Dans cette partie, on utilisera les mêmes maillages que dans le chapitre précédent.

4.5.2.1 Champs microscopiques de vitesse et de pression

Le champ de la vitesse avec condition de glissement est du même type qu'avec des conditions d'adhérence. Les figures 4.17, 4.18, 4.19 et 4.20 montrent les champs microscopiques de vitesse et de pression pour des réseaux cubiques : cubique simple, cubique centrée, cubique à face centrée et hexagonal. Les figures 4.17a, 4.18a, 4.19a et 4.20a montrent que le champ microscopique de pression est symétrique par rapport aux plans (e_1, e_3) et (e_2, e_3) ,

$$p^{(1)}(y_1, \dots) = p^{(1)}(-y_1, \dots) \quad (4.24)$$

$$p^{(1)}(\dots, y_2, \dots) = p^{(1)}(\dots, -y_2, \dots) \quad (4.25)$$

et anti-symétrique par rapport à l'axe (e_1, e_2) ,

$$p^{(1)}(\dots, y_3) = -p^{(1)}(\dots, -y_3) \quad (4.26)$$

La composante du champ microscopique de vitesse u est symétrique par rapport à (e_1, e_3) et anti-symétrique par rapport à (e_1, e_2) , (e_2, e_3) (Fig. 4.17b, 4.18b, 4.19b et 4.20b),

$$u^{(0)}(\dots, y_2, \dots) = u^{(0)}(\dots, -y_2, \dots) \quad (4.27)$$

$$u^{(0)}(y_1, \dots) = -u^{(0)}(-y_1, \dots) \quad (4.28)$$

$$u^{(0)}(\dots, y_3) = -u^{(0)}(\dots, -y_3) \quad (4.29)$$

La composante du champ microscopique de vitesse de glissement v est symétrique par rapport à (e_2, e_3) et anti-symétrique par rapport à (e_1, e_2) , (e_1, e_3) (Figure 4.17c, 4.18c, 4.19c et 4.20c),

$$v^{(0)}(y_1, \dots) = v^{(0)}(-y_1, \dots) \quad (4.30)$$

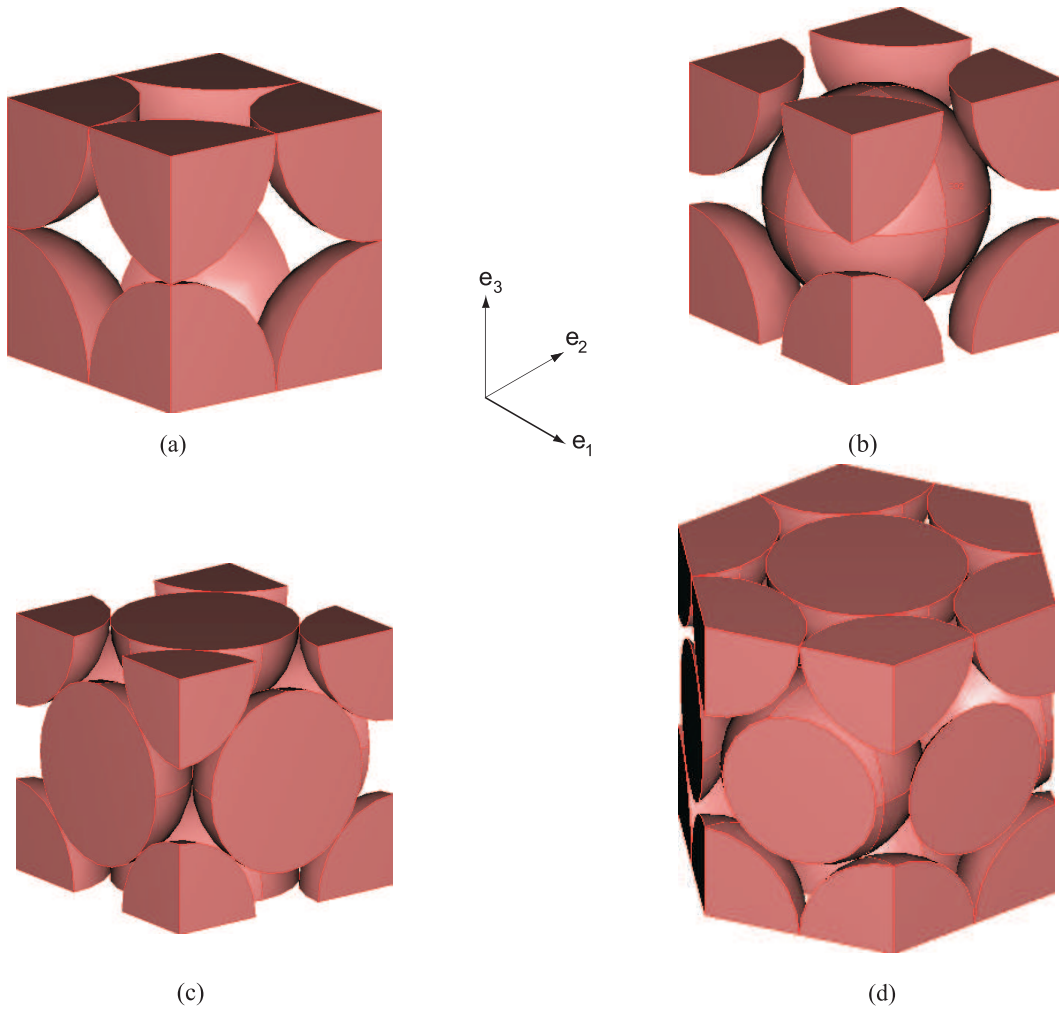


FIGURE 4.16 – Volume élémentaire représentatif (VER) des empilements de sphères : a) cubique simple (CS), $\varepsilon = 0.48$; b) cubique centrée (CC), $\varepsilon = 0.32$; c) cubique à face centrée (CFC), $\varepsilon = 0.26$; d) hexagonal (HEXA), $\varepsilon = 0.26$.

$$v^{(0)}(., y_2, .) = -v^{(0)}(., -y_2, .) \quad (4.31)$$

$$v^{(0)}(., ., y_3) = -v^{(0)}(., ., -y_3) \quad (4.32)$$

Par contre, la composante du champ microscopique de vitesse de glissement w est symétrique par rapport à tous les plans (e_1, e_2) , (e_2, e_3) et (e_1, e_3) (Fig. 4.17d, 4.18d, 4.19d et 4.20d).

$$w^{(0)}(y_1, ., .) = w^{(0)}(-y_1, ., .) \quad (4.33)$$

$$w^{(0)}(., y_2, .) = w^{(0)}(., -y_2, .) \quad (4.34)$$

$$w^{(0)}(., ., y_3) = w^{(0)}(., ., -y_3) \quad (4.35)$$

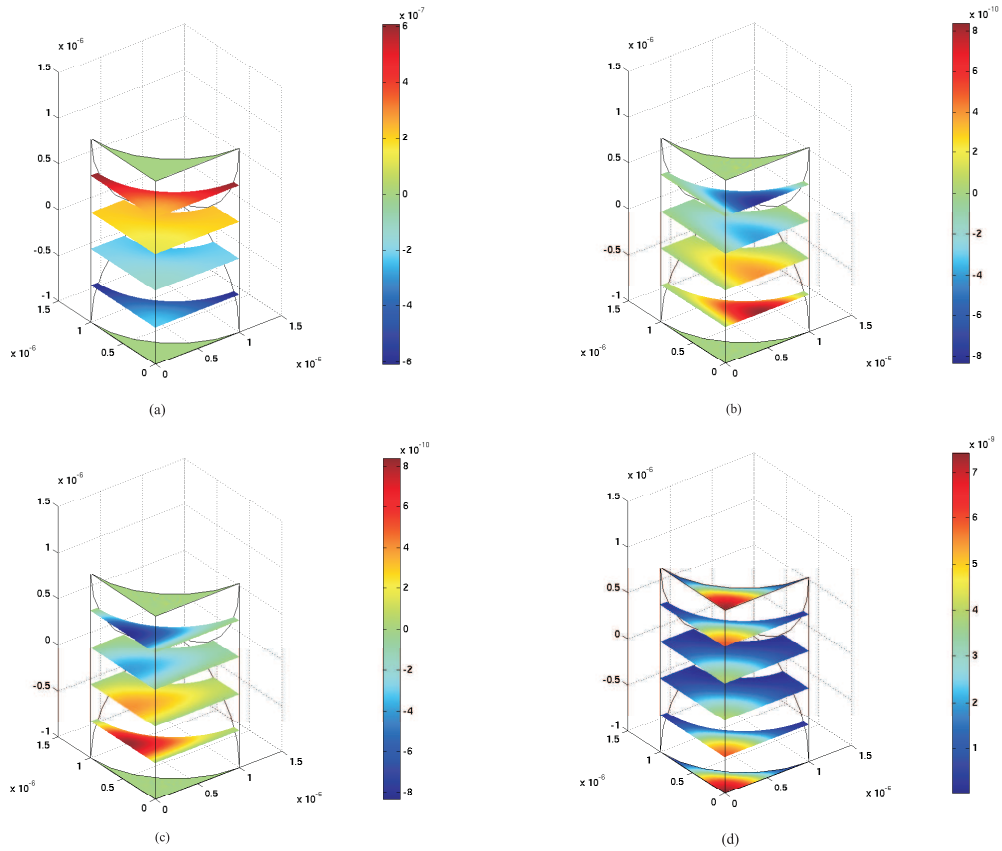


FIGURE 4.17 – Écoulement à travers un réseau cubique simple (CS) : a) champs microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0,48$).

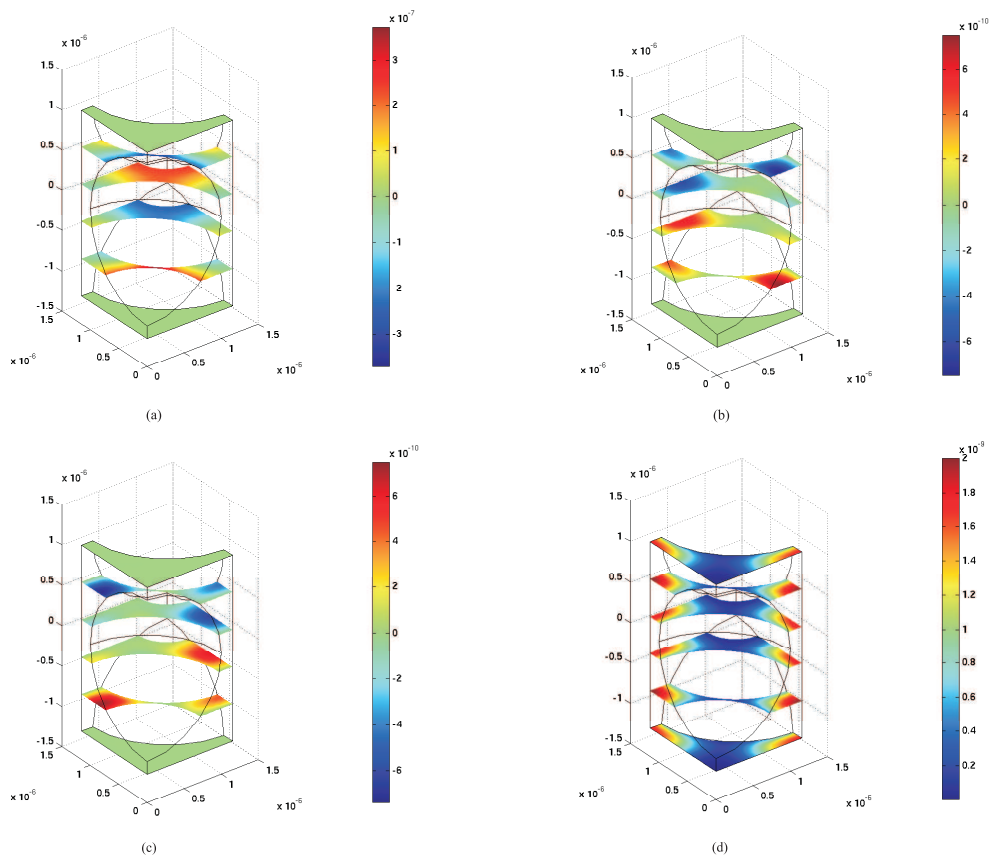


FIGURE 4.18 – Écoulement à travers un réseau cubique centré (CC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0,32$).

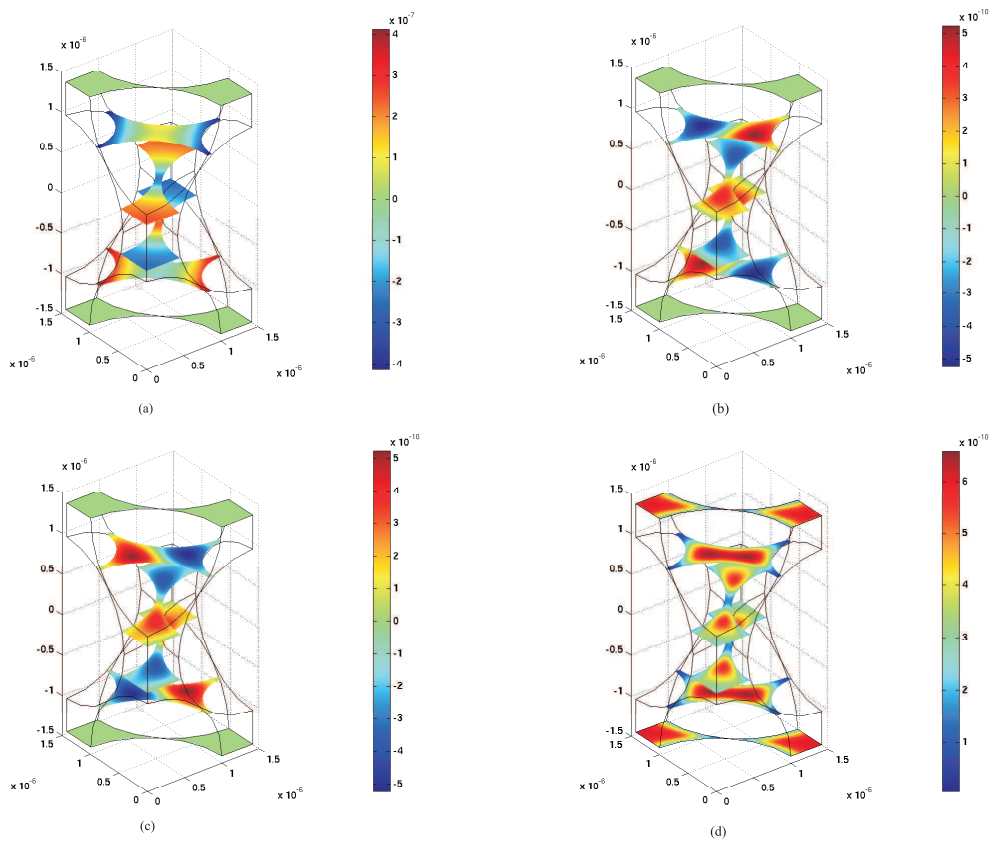


FIGURE 4.19 – Écoulement à travers un réseau cubique à face centrée (CFC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0,26$).

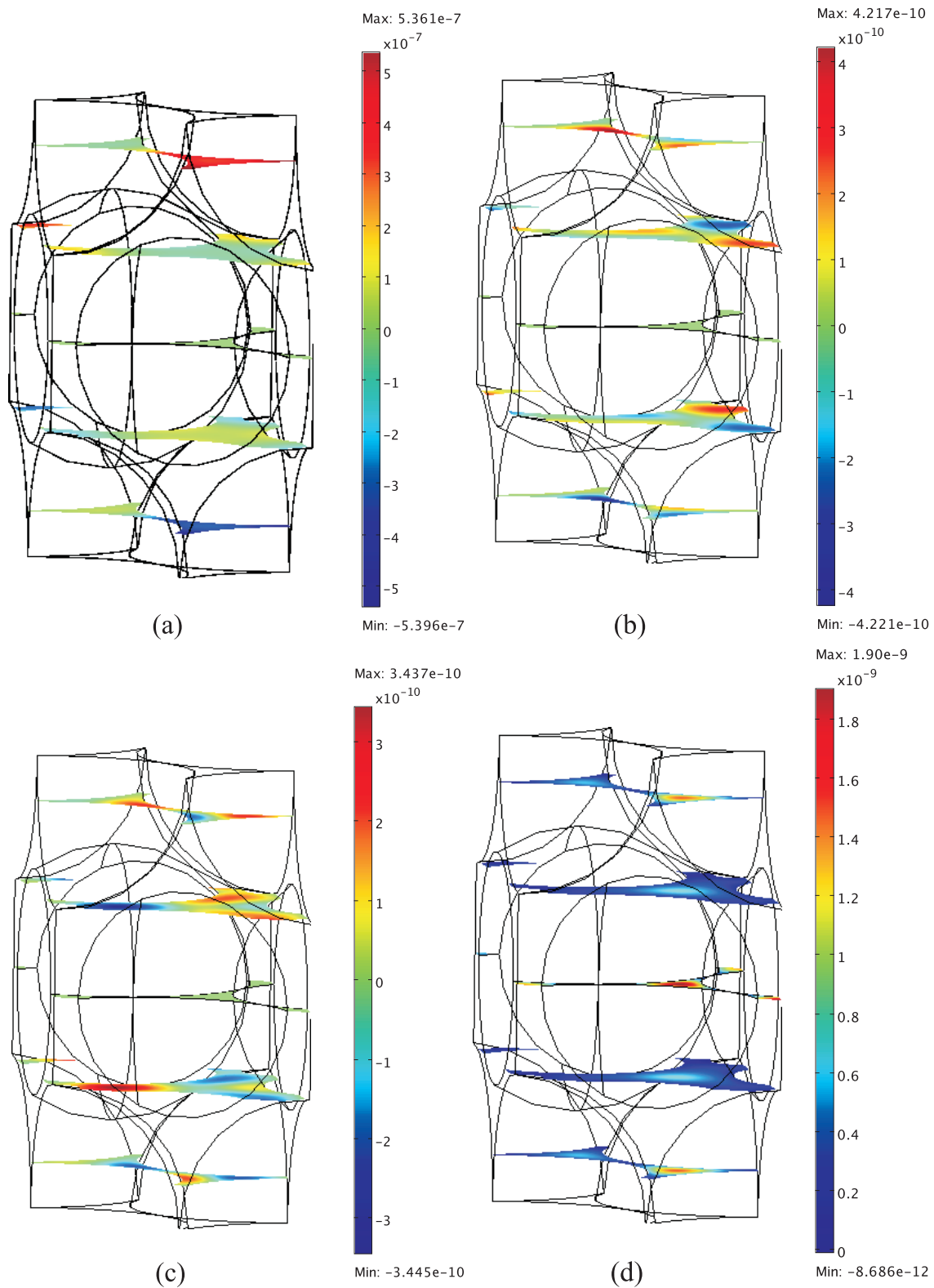


FIGURE 4.20 – Écoulement à travers un réseau cubique hexagonal : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0, 26$).

4.5.2.2 Valeurs numériques

Les valeurs reportées dans le Tableau 4.4 et les courbes de la Figure 4.21 illustrent l'effet du glissement dans le cas d'empilements de sphères. Elles montrent que l'arrangement CFC est le plus sensible au phénomène de glissement. Cependant, les différences entre les variations relatives de perméabilité, selon les arrangements considérés, restent assez faibles puisque la différence maximale observée sur la Figure 4.21 pour $Kn = 0, 1$ est inférieure à 15%.

On peut noter que la variation relative de perméabilité, $(K_G - K_D)/K_D$, est égale au paramètre de glissement $b/p_m = \varepsilon R_h \tau / K_D$ (Chastanet et al., 2004 [16]) où τ est la tortuosité de Stokes ($\tau = \langle u \cdot u \rangle / \langle u \rangle \langle u \rangle$). Ce paramètre peut aussi s'écrire $b/p_m = \varepsilon \tau (Kn / Da)$, où $Da = K_D / R_h^2$ est le nombre de Darcy. Si le libre parcours moyen est supposé constant, hypothèse liée à la condition d'incompressibilité, le terme b/p_m varie avec la taille et l'arrangement des sphères. Pour un diamètre de sphère donné, la topologie du réseau influe en effet sur la porosité, la tortuosité et le rayon hydraulique. La Figure 4.21 indique que b/p_m varie quasiment linéairement avec Kn , quel que soit l'arrangement, et qu'une relation linéaire de type $b/p_m = \alpha Kn$ pourrait assez bien représenter l'ensemble des configurations traitées dans le cadre de ce travail.

$R_s(\mu m)$	$K_D(\mu m^2)$			$K_G(\mu m^2)$		
	CS	CC	CFC	CS	CS	CFC
1	$1,01 \times 10^{-2}$	$2,01 \times 10^{-3}$	$6,94 \times 10^{-4}$	$1,62 \times 10^{-2}$	$4,14 \times 10^{-3}$	$1,76 \times 10^{-3}$
2	$4,02 \times 10^{-2}$	$8,03 \times 10^{-3}$	$2,77 \times 10^{-3}$	$5,33 \times 10^{-2}$	$1,27 \times 10^{-2}$	$5,12 \times 10^{-3}$
3	$9,04 \times 10^{-2}$	$1,81 \times 10^{-2}$	$6,24 \times 10^{-3}$	$1,11 \times 10^{-1}$	$2,52 \times 10^{-2}$	$9,88 \times 10^{-3}$
5	$2,51 \times 10^{-1}$	$5,02 \times 10^{-2}$	$1,74 \times 10^{-2}$	$2,87 \times 10^{-1}$	$6,24 \times 10^{-2}$	$2,36 \times 10^{-2}$
10	1,01	$2,01 \times 10^{-1}$	$6,94 \times 10^{-2}$	1,08	$2,26 \times 10^{-1}$	$8,22 \times 10^{-2}$
15	2,26	$4,52 \times 10^{-1}$	$1,56 \times 10^{-1}$	2,38	$4,89 \times 10^{-1}$	$1,76 \times 10^{-1}$
20	4,02	$8,03 \times 10^{-1}$	$2,78 \times 10^{-1}$	4,18	$8,53 \times 10^{-1}$	$3,04 \times 10^{-1}$

TABLE 4.4 – Perméabilité de Darcy K pour différents rayons de sphères R_s associés aux empilements CS, CC et CFC.

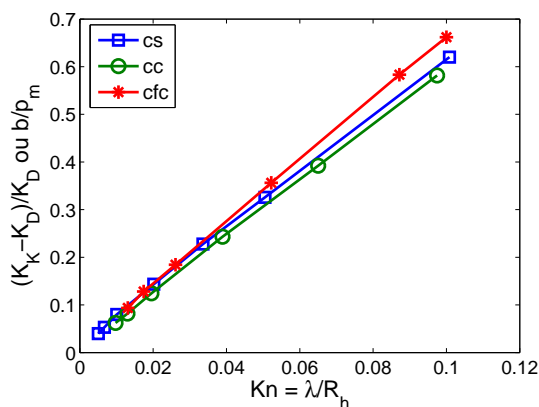


FIGURE 4.21 – Augmentation relative de la perméabilité en fonction du nombre de Knudsen basé sur le rayon hydraulique.

4.5.3 Écoulement à travers un empilement de cubes

Dans le chapitre précédent, on a déterminé la perméabilité d'un empilement de cubes sans condition de glissement. On calcule ici la perméabilité avec condition de glissement sur les surfaces de contact fluide-solide d'un VER. L'étude de maillage est résumée dans le tableau de convergence spatiale ci-dessous (tableau 4.5).

Nombre d'éléments	3 013	14 498	18 255
Nombre de degrés de liberté	74 068	197 201	219 454
$K_G (\mu m^2)$	2,63E-2	2,61E-2	2,61E-2

TABLE 4.5 – Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cubes.

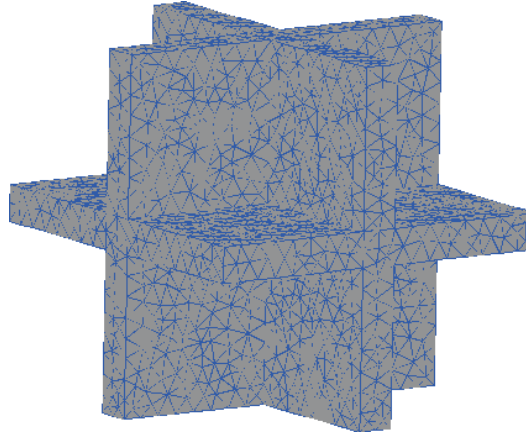


FIGURE 4.22 – Maillage optimal (18 255 éléments tétraédriques, 219 454 nombres degrés libertés), espacement entre cubes de $1 \mu m$, $\varepsilon = 0,271$.

4.5.3.1 Valeurs numériques

On a calculé la perméabilité pour des espacements entre cubes de $1 \mu m$ et de $4 \mu m$. Les valeurs de la perméabilité (Tableau 4.6) pour des configurations 3D qui correspondent à la première et à la dernière colonne du Tableau 4.3 montrent que la perméabilité est approximativement doublée et que l'effet du glissement est plus important qu'en géométries 2D.

	$\varepsilon = 0,271 (Kn = 0,06)$	$\varepsilon = 0,784 (Kn = 0,015)$
$K_D (m^2)$	$1,80 \times 10^{-14}$	$1,51 \times 10^{-12}$
$K_G(\sigma = 0,9) (m^2)$	$2,61 \times 10^{-14}$	$1,68 \times 10^{-12}$
$K_G(\sigma = 0,8) (m^2)$	$2,78 \times 10^{-14}$	$1,72 \times 10^{-12}$

TABLE 4.6 – Effet du glissement sur la perméabilité pour des espacements entre cubes de $1 \mu m$ et de $4 \mu m$.

La figure 4.23 montre que le champ microscopique de vitesse de glissement \mathbf{u} est symétrique par rapport à tous les plans (e_1, e_2) , (e_2, e_3) et (e_1, e_3) .

$$\mathbf{u}^{(0)}(y_1, \cdot, \cdot) = \mathbf{u}^{(0)}(-y_1, \cdot, \cdot) \quad (4.36)$$

$$\mathbf{u}^{(0)}(\cdot, y_2, \cdot) = \mathbf{u}^{(0)}(\cdot, -y_2, \cdot) \quad (4.37)$$

$$\mathbf{u}^{(0)}(\cdot, \cdot, y_3) = \mathbf{u}^{(0)}(\cdot, \cdot, -y_3) \quad (4.38)$$

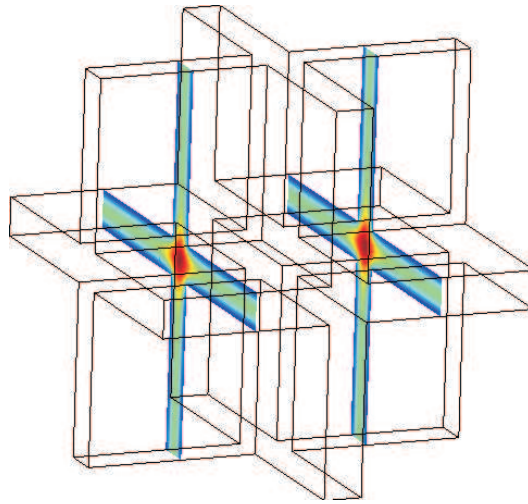


FIGURE 4.23 – Champ de la vitesse \mathbf{u} dans un VER (avec glissement).

Chapitre 5

Effet du glissement dynamique sur la conductivité effective de milieux micro-poreux

5.1 Introduction

En considérant des motifs périodiques et en supposant l'écoulement périodique ou - plus exactement - établi, on peut en déduire de nouvelles valeurs de la perméabilité incluant les effets du glissement (chapitre 4). La forme macroscopique de l'équation de l'énergie (ou seulement de l'équation de l'énergie pour la phase fluide si la modélisation est basée sur un modèle hors équilibre thermique local), montre que la conductivité effective - c'est-à-dire la conductivité stagnante plus la conductivité due à la dispersion ($\langle u'T' \rangle$) - dépend du couplage entre champs de vitesse et champs de température.

Un certain nombre d'articles publiés au cours des vingt dernières années ont porté sur cette question ([4],[46],[45],[54],[71],[60] et [85] par exemple) en considérant une maille élémentaire d'un milieu périodique. Le problème du glissement n'a cependant jamais été considéré. L'objectif de ce chapitre est d'étudier l'effet du glissement dynamique sur la conductivité de dispersion. Nous nous limitons au cas d'une conduite remplie par une structure périodique chauffée à flux constant. Nous ne faisons aucune hypothèse sur le caractère périodique des transferts de chaleur et de quantité de mouvement dans la direction principale de l'écoulement : les transferts sont simulés depuis l'entrée jusqu'à la sortie d'une conduite. Nous nous intéressons plus particulièrement aux valeurs moyennes calculées dans un VER situé dans la zone d'écoulement dynamiquement établi.

5.2 Modélisation et résolution numérique de la dispersion thermique en milieu micro poreux

On considère un écoulement de convection forcée laminaire, incompressible et stationnaire d'air à travers un milieu poreux constitué par un motif régulier de solides disposés en réseau en ligne. Les échanges radiatifs entre les surfaces solides et la production de chaleur par dissipation visqueuse sont négligés. L'air entre dans la conduite avec un débit fixé (vitesse moyenne d'entrée imposée) et on suppose qu'il est possible d'imposer un gradient de température constant (ou un flux de chaleur) parallèlement ou perpendiculairement à la direction principale de l'écoulement (Figure 5.1). Compte-tenu de la distance maximale entre parois (inférieure à $100 \mu m$), les nombres de Reynolds, Re , ou de Péclet,

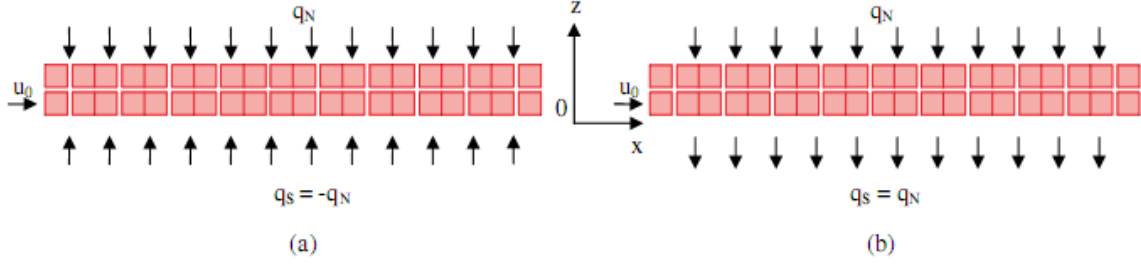


FIGURE 5.1 – Domaine physique simulé (cas 2D) et conditions thermiques appliquées sur les surfaces de symétrie pour calculer les conductivités de dispersion longitudinale (a) et transverse (b).

$Pe = Re \times Pr$, basés sur la vitesse débitante sont faibles ($Pe \leq 10$). Les équations de conservation décrivant l'écoulement et les transferts de chaleur à l'échelle "microscopique" (données dans le paragraphe 3.4.3.1) sont rappelées ci-dessous :

$$\rho_f(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad \text{dans } \Omega_f \quad (5.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega_f \quad (5.2)$$

$$\rho_f C_{pf} \nabla \cdot (\mathbf{u} T) = k_f \nabla^2 T \quad \text{dans } \Omega_f \quad (5.3)$$

$$k_s \nabla^2 T = 0 \quad \text{dans } \Omega_s \quad (5.4)$$

Conditions aux limites :

Aux interfaces fluide-solide, on écrit les conditions d'imperméabilité pour les composantes normales et de glissement pour les composantes tangentielles des vitesses. On admet aussi la continuité des températures et des flux le long des surfaces de contact fluide-solide (S_{fs}). Soit :

$$\mathbf{u} = L_s [\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}] \quad \text{sur } S_{fs} \quad (5.5)$$

$$T_f = T_s \quad \text{sur } S_{fs} \quad (5.6)$$

$$k_f \nabla T \cdot \mathbf{n} = k_s \nabla T \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } S_{fs} \quad (5.7)$$

où L_s est la longueur de glissement qui s'exprime en fonction du coefficient d'accommodation dynamique σ et du libre parcours moyen λ par la relation $L_s = (2 - \sigma)\lambda/\sigma$. Pour de l'air à pression atmosphérique, $\lambda \approx 61 \text{ nm}$ et $0,8 \leq \sigma \leq 0,9$ pour les couples gaz-solide usuels.

En géométries 3D cartésiennes, les conditions aux limites sur le bord du domaine d'intégration sont écrites :

- sections d'entrée ($x = 0$) et de sortie ($x = L$) de la conduite :

$$u = u_0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad T_f = T_s = T_0, \quad \text{en } x = 0, \quad \forall y, z$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial z} = 0, \quad v = 0, \quad w = 0, \quad \frac{\partial T_f}{\partial y} = \frac{\partial T_s}{\partial y} = \frac{\partial T_f}{\partial z} = \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0, \quad \text{en } x = L, \quad \forall y, z$$

- faces latérales du domaine

$u = v = w = 0$, sur les surfaces solides + conditions de périodicité au bord du domaine fluide,

$$q_p = |q_N| = |q_S|, \quad \text{en } y, z = 0, H \quad \forall x$$

En se basant sur une modélisation à une seule équation d'énergie ($\langle T \rangle = \langle T_f \rangle^f = \langle T_s \rangle^s$), la version "macroscopique" la plus simple des équations de conservation s'écrit :

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{u} \rangle = 0 \quad (5.8)$$

$$\langle \mathbf{u} \rangle = \frac{\underline{\underline{\mathbf{K}}}}{\mu} \nabla \langle P \rangle^f \quad (5.9)$$

$$\rho_f C_{pf} \langle \mathbf{u} \rangle \cdot \nabla \langle T \rangle = \nabla \cdot (\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{eff} \nabla \langle T \rangle) \quad (5.10)$$

Le tenseur de conductivité effective se décompose comme suit :

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{eff} = k_e \underline{\underline{\mathbf{I}}} + \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{tor} + \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{disp} \quad (5.11)$$

avec

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{tor} &= \frac{k_f - k_s}{\nabla \langle T \rangle} \int_{S_{fs}} T \cdot \mathbf{n} dS \\ \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{disp} &= -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle} \langle T' \mathbf{u}' \rangle = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle} \int_{\Omega_f} \mathbf{u}' T' d\Omega \end{aligned} \quad (5.12)$$

où Ω est le volume de la maille élémentaire (Figure 5.2).

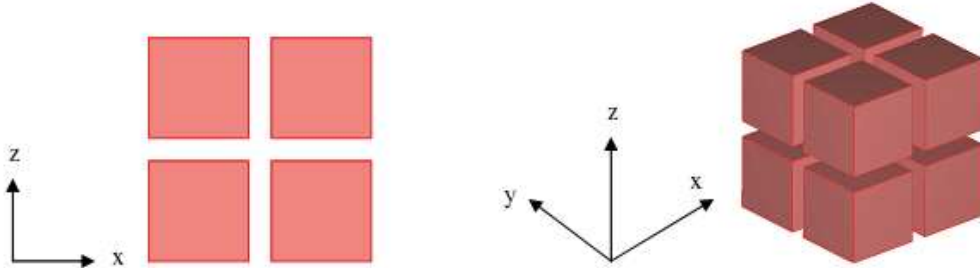


FIGURE 5.2 – Maillages élémentaires 2D et 3D.

Il est à noter que ces équations ne sont valables que pour un écoulement dynamique-ment établi et que le glissement n'intervient pas directement dans l'équation de l'énergie en régime stationnaire. La somme $\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{eff} = k_e \underline{\underline{\mathbf{I}}} + \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{tor}$ est la conductivité stagnante. Les fluctuations T' et u' sont déduites des solutions locales puis moyennées sur un VER (Figure 5.2), soient $T'(x, y, z) = T(x, y, z) - \langle T(x) \rangle$ et $u' = u - \langle u \rangle^f$.

Pour calculer les composantes du gradient macroscopique de température $\langle T \rangle$, le sens du flux imposé en $z = 0$ est modifié (Figure 5.1a pour la dispersion thermique longitudinale, $(K_{disp})_{xx}$, et Figure 5.1b pour la dispersion thermique transverse, $(K_{disp})_{zz}$) (cf. les références [4], [46], [45] et [60]). Les expressions des composantes diagonales ($i = x, y, z$) du tenseur de dispersion thermique sont donc calculées à partir des relations :

$$(\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{disp})_{ii} = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle_i} \int_{\Omega_f} \mathbf{u}'_i T' d\Omega = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle_i} \int_{\Omega_f} (\mathbf{u}_i - \langle \mathbf{u}_i \rangle^f) (T - \langle T \rangle) d\Omega \quad (5.13)$$

5.3 Effet du glissement sur la dispersion thermique dans une micro-conduite avec des parois (1D)

5.3.1 Introduction

Dans le chapitre 3 on a présenté ce modèle en 1D (Figure 5.3) et comparé les résultats numériques obtenus sans condition de glissement avec ceux donnés par un autre code commercialisé (Fluent). Dans cette partie, on étudie les influences de l'épaisseur de la paroi solide et du glissement sur la dispersion thermique et sur la condition d'équilibre thermique local. Tous les calculs ont été effectués avec le rapport de conductivités $k_s/k_f = 10$.

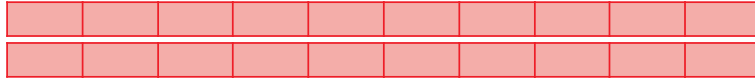


FIGURE 5.3 – Géométrie dans le cas 1D

5.3.2 Conductivité de dispersion

La hauteur simulée est H (variable) et la longueur $L = 100\mu m$, fixée. La largeur de la conduite est fixée à $d = 1\mu m$ dans tous les cas considérés. Le nombre de cellule élémentaire (VER) a été arbitrairement fixé à 10. On a fait varier la taille des côtés des blocs de $e = 0,5\mu m$ à $e = 4,5\mu m$ de sorte que la hauteur simulée augmente de $H = 2\mu m$ ($\varepsilon = 0,5$) à $H = 10\mu m$ ($\varepsilon = 0.1$).

La figure 5.4 montre que la dispersion longitudinale augmente avec le nombre de Péclet et diminue avec le glissement et avec l'épaisseur de la matrice solide. Cependant, les pentes des courbes sont très proches, ce qui conduit à $K_{disp.xx}/k_f \approx aPe^{1,98}$ avec a dépendant de H et de σ ($3 \times 10^{-4} \leq a \leq 6 \times 10^{-4}$). Comme la température est uniforme lorsque $q_N = q_S$, la dispersion transverse est nulle.

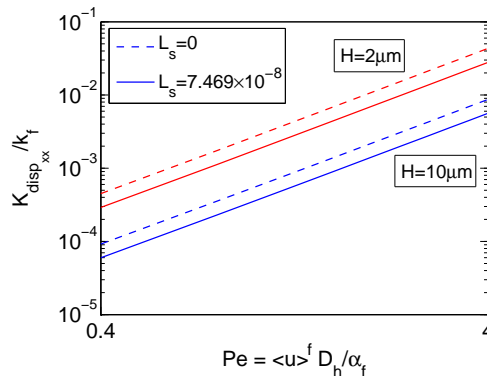


FIGURE 5.4 – Effet de glissement sur la dispersion longitudinale en fonction de l'épaisseur de la paroi solide(L_s est la longueur de glissement, $L_s = (2 - \sigma)\lambda/\sigma$, et $\sigma = 0,9$).

L'effet du glissement sur la condition d'équilibre thermique local pour $2\mu m \leq H \leq 10\mu m$ est reporté dans le tableau 5.1 lorsque la vitesse d'entrée est fixée à $u_0 = 5m/s$. On observe

qu'il est négligeable car $\langle T_f \rangle^f = \langle T_s \rangle^s$, à deux chiffres significatifs près, dans tous les cas considérés.

		$\langle T \rangle$	$\langle T_f \rangle^f$	$\langle T_s \rangle^s$
$H = 10\mu m$	Non-glissement	302.8078	302.8035	302.8083
	Glissement	302.8076	302.8034	302.8080
$H = 6\mu m$	Non-glissement	304.6904	304.6871	304.6911
	Glissement	304.6898	304.6865	304.6904
$H = 2\mu m$	Non-glissement	313.4251	313.4221	313.4282
	Glissement	313.4181	313.4152	313.4210

TABLE 5.1 – Condition d'équilibre thermique local (température en K).

5.3.3 Solution à l'échelle macroscopique

On rappelle l'équation de l'énergie à l'échelle macroscopique :

$$\rho_f C_{pf} \langle \mathbf{u} \rangle \cdot \nabla \langle T \rangle = \nabla \cdot (\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{eff} \nabla \langle T \rangle) \quad (5.14)$$



FIGURE 5.5 – Géométrie du modèle macroscopique

- Conditions aux limites :

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= T_0, & \text{en } x = 0, \quad \forall y \\ \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial y} &= 0, & \text{en } x = L, \quad \forall y \\ q &= q_p, & \text{en } y = 0, H \quad \forall x \end{aligned}$$

Après avoir résolu l'équation macroscopique, on observe que la solution macroscopique est la même que la moyenne de phase de la solution microscopique $\langle T \rangle_{nonglisse} \approx \langle T \rangle_{glisse} \approx 302.8 K$ pour le cas $H = 10\mu m, L = 100\mu m$ (Figure 5.6).

5.3.4 Conductivité de tortuosité

Les composantes diagonales du tenseur de tortuosité thermique ont pour expression :

$$(K_{tor})_{ii} = \frac{k_f - k_s}{\Omega} \int_{S_{fs}} T n_i dS = 0 \quad (5.15)$$

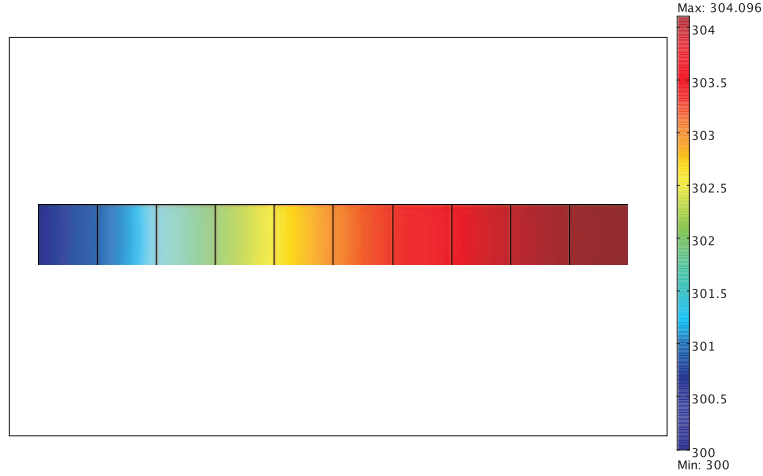


FIGURE 5.6 – Champ de la température du modèle macroscopique.

où $i = x, z$ et $n_i = (n_x, n_z) = (0, 1)$.

Le coefficient de la conductivité de tortuosité longitudinale est nul pour une conduite plane car $\int_{S_{fs}} T n_x dS = 0$. La tortuosité transverse a pour expression :

$$(K_{tor})_{zz} = \frac{k_f - k_s}{\nabla \langle T \rangle_z} \int_{S_{fs}} T n_z dS = \frac{k_f - k_s}{\nabla \langle T \rangle_z} \left[\int_0^L T(x, d/2) dx - \int_0^L T(x, -d/2) dx \right] \quad (5.16)$$

où le terme entre crochets est nul si le champ de température est symétrique. Elle n'est pas définie si la température est uniforme.

5.3.5 Coefficient de transfert interstitiel solide-fluide

Pour les calculs précédents, on a supposé que le modèle était basé sur l'hypothèse d'équilibre thermique local, $\langle T_s \rangle^s = \langle T_f \rangle^f = \langle T \rangle$. Cette hypothèse est mise en défaut si les résistances thermiques des parois sont importantes (grande épaisseur des parois et/ou faible conductivité thermique). Dans ce paragraphe, on considère des parois d'épaisseur $(H - d)/2 = 450 \mu m$, la largeur et la longueur de la conduite étant maintenues à $d = 1 \mu m$ et $L = 1000 \mu m$ (voir la figure 5.7).

Avec le modèle à deux équations d'énergie (NLTE), le coefficient de transfert fluide-solide h_{fs} est défini par :

$$h_{fs} = \frac{q_{fs}}{\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f} \quad (5.17)$$

où q_{fs} est le flux de chaleur aux interfaces fluide-solide, $\langle T_s \rangle^s$ et $\langle T_f \rangle^f$ sont les moyennes intrinsèques des températures des phases solide et fluide.

Comme dans les cas précédents, on définit 10 cellules élémentaires de longueur $L/10 = 100 \mu m$ et de hauteur $H = 901 \mu m$ (Fig.5.7), le rapport de conductivité $k_s/k_f = 10$.

La figure 5.8 montre les variations longitudinales des moyennes intrinsèques des températures des phases solide et fluide. On observe, d'une part, qu'elles sont différentes, ce qui signifie que le milieu n'est pas en équilibre thermodynamique local, et, d'autre part, que la différence $\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f$ n'est pas constante (contrairement au cas d'une conduite à

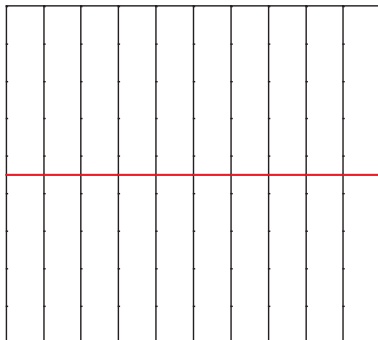


FIGURE 5.7 – Domaine simulé pour la condition de non-équilibre thermique local.

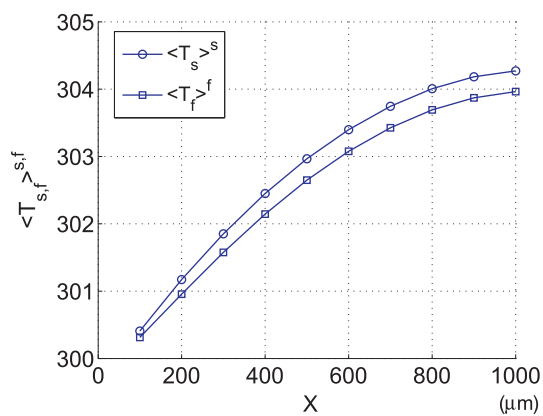


FIGURE 5.8 – Variations axiales des moyennes intrinsèques des températures des phases solide et fluide.

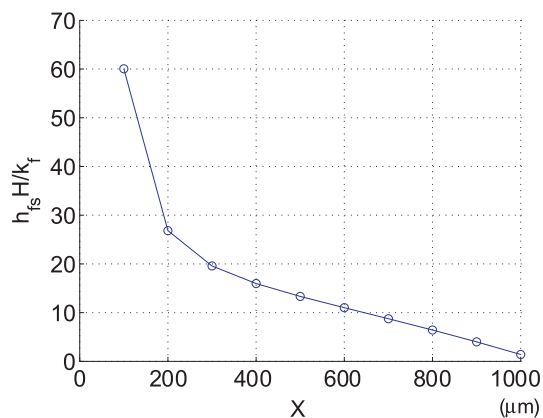


FIGURE 5.9 – Variation axiale du coefficient de transfert interstitiel solide-fluide.

parois minces). Cela signifie que le régime n'est pas thermiquement établi (à cause de la conduction thermique axiale dans les parois). En conséquence, le coefficient de transfert par convection diminue fortement de l'entrée à la sortie de la conduite (Fig.5.9), comme pour le problème de Graetz. Il ne tend pas vers une valeur asymptotique parce que la conduite est trop courte : aucune des corrélations proposées dans la littérature n'est susceptible de traduire ce comportement parce qu'elles ont toutes été établies sous l'hypothèse de périodicité dans la direction de l'écoulement.

5.4 Effet du glissement sur la dispersion thermique dans le cas de structures micro-poreuses 2D

5.4.1 Effet du glissement sur la dispersion thermiques d'un réseau de barres

Les géométries étudiées sont du type de celle représentée sur la figure 5.1. La hauteur simulée est $H = 10\mu m$ et la longueur $L = 100\mu m$. Dans tous les cas considérés, le nombre de cellules élémentaires (VER) est de 10, soit une dimension de $10\mu m \times 10\mu m$. On a fait varier la taille des côtés des blocs carrés (Fig. 5.2) de $a = 4,5\mu m$ à $a = 3\mu m$ de sorte que la porosité augmente de $\varepsilon = 0,19$ et $\varepsilon = 0,64$. Le nombre de Knudsen, $Kn = \lambda/(H - 2a)$, varie alors de $Kn = 0,06$ à $Kn = 0,015$. Dans ce domaine de Kn, des conditions de glissement doivent être appliquées.

5.4.1.1 Modèle numérique et champs de vitesse et de température.

On applique directement l'étude de maillage discutée dans la section 3.4.3.3. Le nombre d'éléments est donc 100×1000 dans cette partie (Fig. 5.10).

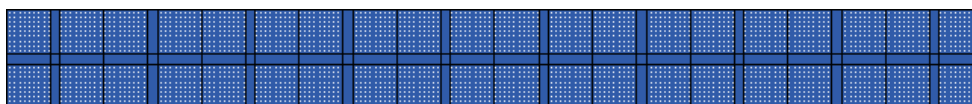


FIGURE 5.10 – Maillage optimal d'une structure micro-poreuse 2D (blocs carrés de côtés $a = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,19$).

La figure 5.11 représente la totalité du champ de vitesse le long de la conduite. La figure 5.12 ne montre que le champ de vitesse en régime établi dans une cellule (une cellule au milieu de la conduite, par exemple). Ce champ est symétrique par rapport aux deux axes e_1, e_2 . Soit :

$$\mathbf{u}^{(0)}(y_1, y_2) = \mathbf{u}^{(0)}(y_1, -y_2) \quad (5.18)$$

$$\mathbf{u}^{(0)}(y_1, y_2) = \mathbf{u}^{(0)}(-y_1, y_2) \quad (5.19)$$

Le champ de température longitudinal (Fig. 5.13) est symétrique suivant l'axe e_1

$$T(y_1, y_2) = T(y_1, -y_2) \quad (5.20)$$

Par contre, le champ transverse (Fig. 5.14) n'est pas symétrique.

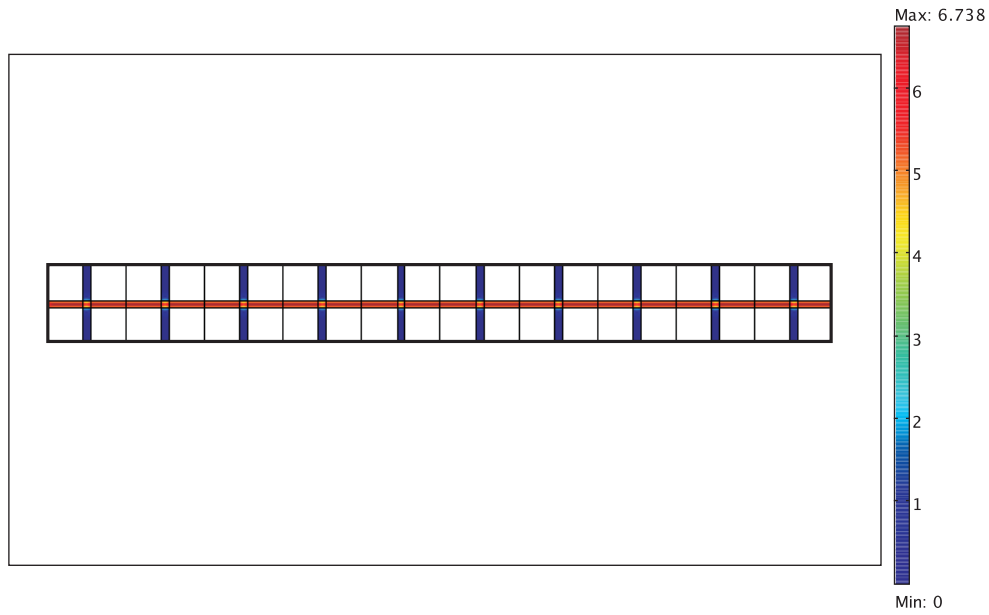


FIGURE 5.11 – Champ de vitesse sur toute la longueur de la conduite pour $Pe = 1$ (blocs carrés de côtés $a = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,19$).

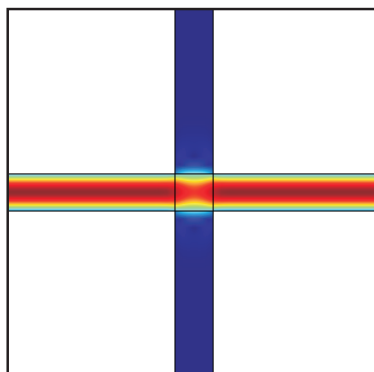


FIGURE 5.12 – Champ de vitesse dans une cellule en régime dynamique établi.

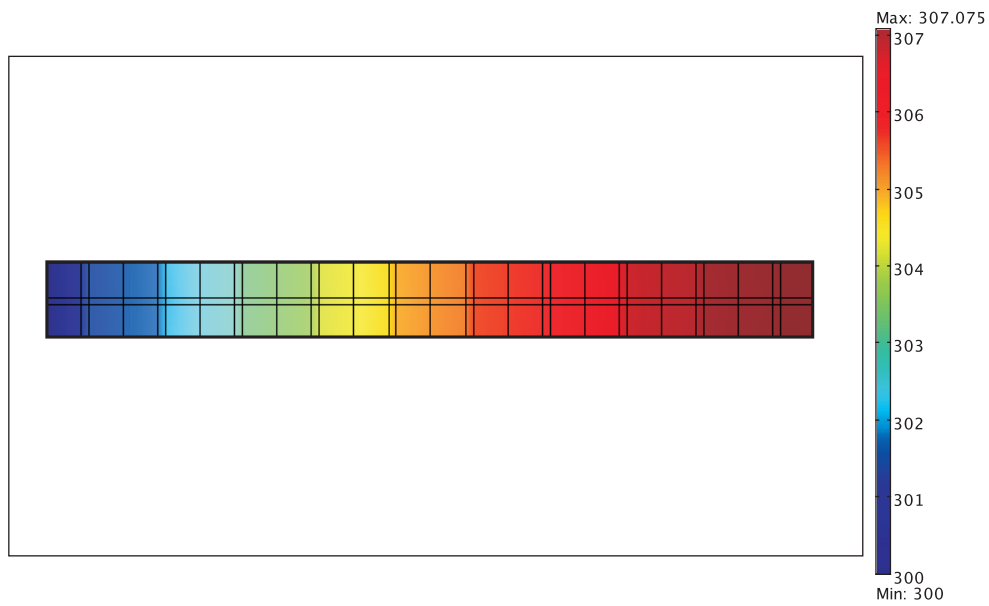


FIGURE 5.13 – Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas **longitudinal** et pour $Pe = 1$ (blocs carrés de côtés $a = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,19$).

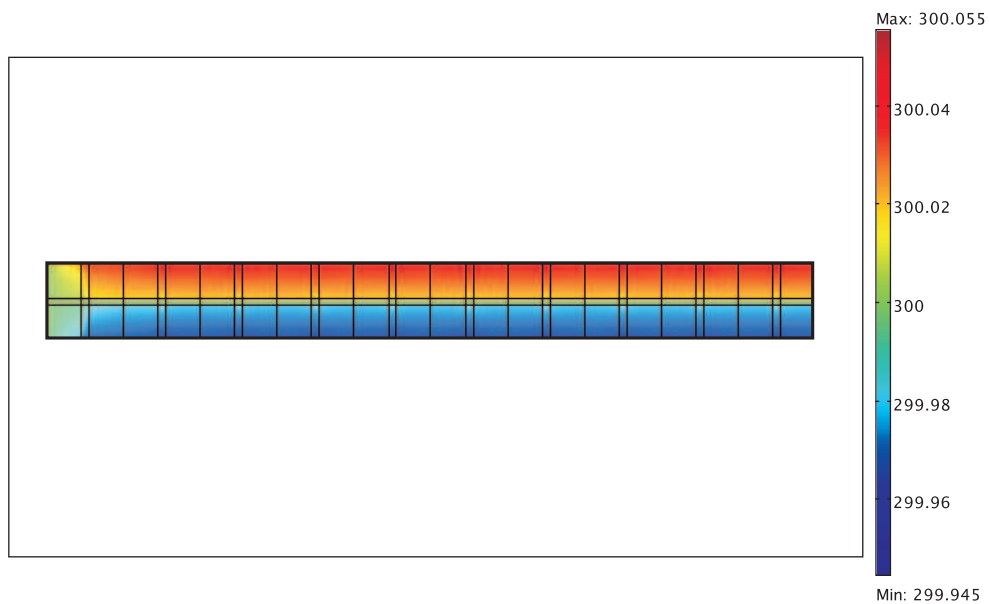


FIGURE 5.14 – Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas **transverse** et pour $Pe = 1$ (blocs carrés de côtés $a = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,19$).

5.4.1.2 Conductivité de dispersion.

Les figures 5.15 et 5.16 représentent les variations des composantes longitudinale et transverse de la conductivité de dispersion en fonction du nombre de Péclet (pour $k_s/k_f = 10$) et en fonction du rapport des conductivités (pour $Pe = 5$) lorsque $\varepsilon = 0, 19$ et $\varepsilon = 0, 64$. Si des valeurs très supérieures de k_s/k_f peuvent être considérées, le nombre de Péclet doit rester inférieur à $Pe \approx 10$ pour que l'hypothèse d'incompressibilité soit admissible. Les calculs ayant montré que la dispersion thermique est peu sensible à la valeur du coefficient d'accommodation, les résultats présentés sur ces deux figures correspondent à $\sigma = 0,9$. On remarque que la dispersion longitudinale est très peu sensible aux effets de glissement (diminution maximale de 5% pour $Kn = 0,06$) alors que la dispersion transverse, dont la valeur est beaucoup plus faible, dépend beaucoup plus du glissement. Dans le domaine de variation des paramètres étudié, l'effet maximal du glissement sur $(K_{disp})_{zz}$ est obtenu pour $Kn = 0,06$ et $k_s/k_f = 10$: $(K_{disp})_{zz} = 4,34 \times 10^{-6} k_f$ sans glissement et $(K_{disp})_{zz} = 2,69 \times 10^{-6} k_f$ en tenant compte du glissement. Les figures 5.15 et 5.16 montrent aussi que la porosité a une influence beaucoup plus importante sur la conductivité de dispersion mais que son influence est peu différente sous l'effet du glissement. Il apparaît en définitive que le glissement n'a pas d'influence importante sur les composantes de la conductivité de dispersion.

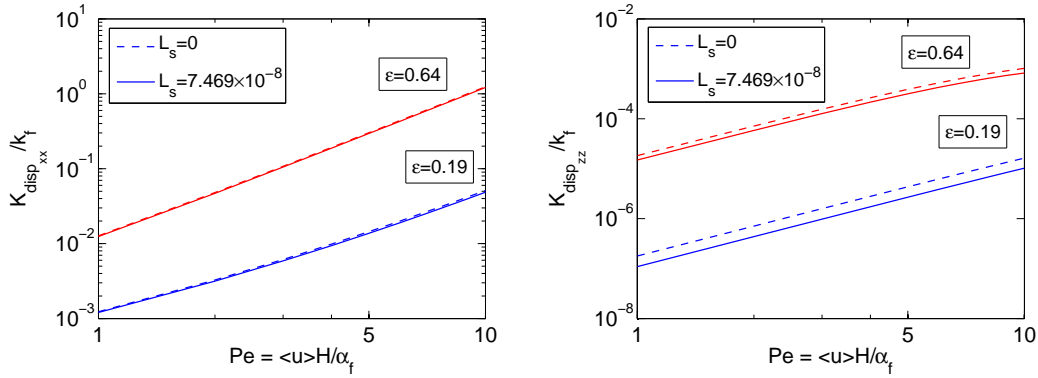


FIGURE 5.15 – Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10$, $\sigma = 0,9$).

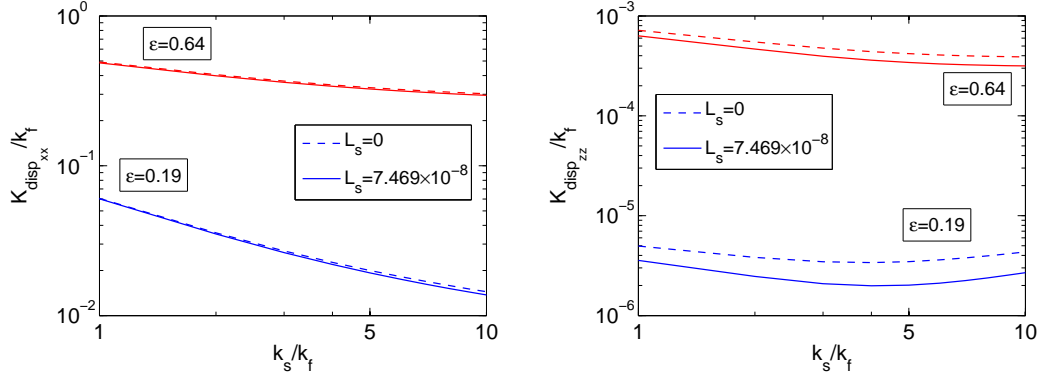


FIGURE 5.16 – Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0, 9$).

5.4.1.3 Conductivité de tortuosité

La figure 5.17 représente la conductivité de tortuosité longitudinale en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f pour deux porosités. La tortuosité transverse $(K_{tor})_{zz}$ est nulle. On remarque que la conductivité de tortuosité dépend significativement de la porosité.

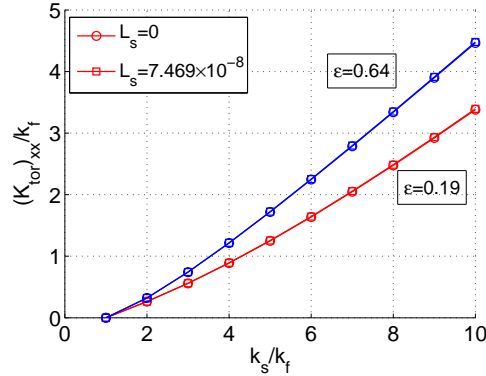


FIGURE 5.17 – Coefficient de la tortuosité longitudinale en fonction du rapport de conductivité, $Pe = 5, \sigma = 0, 9$.

5.4.2 Coefficient de transfert interstitiel solide-fluide

La taille de la géométrie étudiée est $H = 901\mu m, L = 1000\mu m$, les blocs solides ayant une dimension de $450\mu m \times 99\mu m$. L'espace entre des blocs solides est fixé à $1\mu m$ et le nombre de cellule élémentaire est de 10 (figure 5.18), le rapport de conductivité $k_s/k_f = 10$.

Dans ce cas, la température moyenne intrinsèque de la phase fluide, $\langle T_f \rangle^f$, n'est pas très différente de celle de la phase solide, $\langle T_s \rangle^s$, et l'hypothèse d'équilibre thermique local peut être considérée comme valable (figure 5.19).

On peut supposer que la conduction axiale dans la paroi solide (flux de conduction

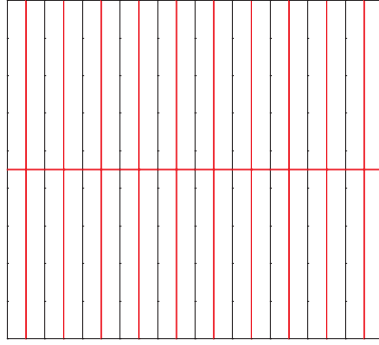


FIGURE 5.18 – Domaine bidimensionnel simulé pour la condition de non équilibre thermique local.

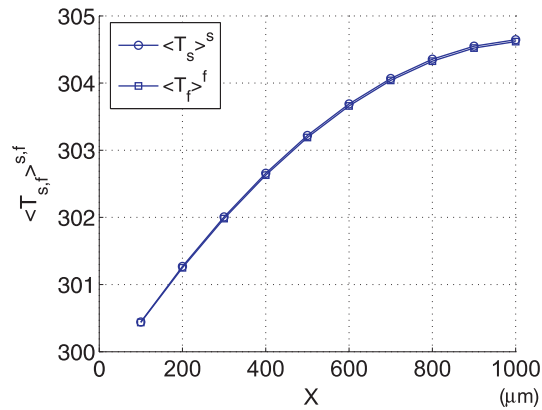


FIGURE 5.19 – Variations longitudinales des moyennes intrinsèques de température des phases solide, s , et fluide, f .

axial uniquement dirigé vers l'entrée de la conduite compte-tenu des conditions aux limites imposées dans la section de sortie) influe considérablement sur les différences de température entre le fluide et la paroi. Afin de vérifier cette hypothèse, des résistances thermiques ont été créées dans la paroi solide en augmentant l'espacement longitudinal entre barres et en diminuant le rapport des conductivités mais en maintenant la largeur de la conduite à $d = 1\mu m$. L'écoulement transverse étant faible, les couches de fluide séparant deux barres diminuent d'autant plus la conduction longitudinale que la conductivité de la paroi est faible. Comme la modélisation est limitée au cas des gaz, nous ne considérons pas des valeurs de la conductivité du solide inférieures à celle du fluide.

La figure 5.20 représente la différence de température moyenne intrinsèque entre les phases solide et fluide, $\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f$, en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f pour différents espacements ($0, 1\mu m \leq e \leq 1\mu m$). Comme prévu, on remarque que la différence entre les moyennes intrinsèques de phase des températures augmente lorsque $k_s/k_f \rightarrow 1$ et lorsque l'espacement diminue. La solution 2D s'approche de la solution 1D d'autant plus vite que k_s/k_f augmente.

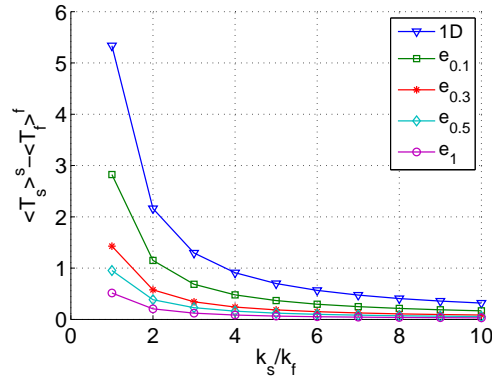


FIGURE 5.20 – Différence entre les températures moyennes intrinsèques des phases solide, s , et fluide, f , en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f pour différents espacements transverses.

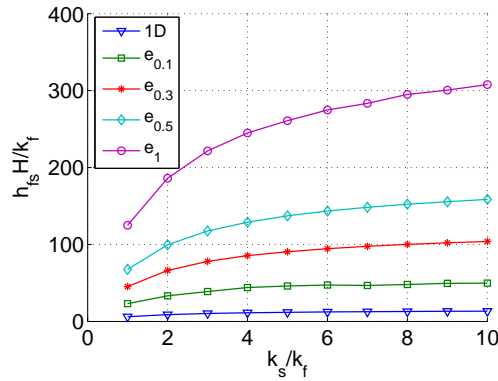


FIGURE 5.21 – Variation axiale du coefficient de transfert interstitiel solide-fluide.

5.4.3 Effet du glissement sur la dispersion thermique d'un réseau de cylindres

5.4.3.1 Modèle numérique et champs locaux

La taille de la conduite est conservée ($H = 10\mu m$, $L = 100\mu m$) mais on remplace les barres à section carrée par des cylindres dont le rayon varie de $r = 3\mu m$ à $r = 4,5\mu m$ de sorte que l'espacement entre les cylindres, $a = H - 2r$, varie de $a = 1\mu m$ à $a = 4\mu m$. La porosité est comprise entre $\varepsilon = 0,364$ à $\varepsilon = 0,717$ et le nombre de Knudsen, $Kn = \lambda/a$, est compris entre $Kn = 0,015$ et $Kn = 0,06$.

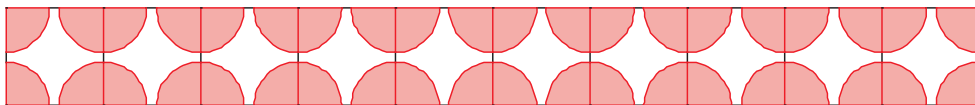


FIGURE 5.22 – Géométrie d'un réseau de cylindres en lignes.

Après une étude de convergence spatiale (tableau 5.2), le maillage optimal retenu

comporte 200 264 d'éléments triangulaires (1 220 519 degrés de liberté) avec une densité de mailles beaucoup plus importante dans le fluide que dans les cylindres, le maillage étant resserré aux interfaces fluide-solide.

Nombre d'éléments	1 960	7 840	31 360	200 264
Nombre degré liberté	13 955	50 819	193 427	1 220 519
$(K_{disp})_{xx}/k_f$	1,5583E-3	1,5589E-3	1,6368E-3	1,7106E-3
$(K_{disp})_{xx}^{glisse}/k_f$	1,4342E-3	1,5749E-3	1,5964E-3	1,5990E-3

TABLE 5.2 – Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres, espacement entre les cylindres de $1\mu m$, rayon de cylindre $r = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,364$; $Pe = 1$.

La figure 5.23 montre le champ de vitesse le long de la conduite qui est symétrique par rapport aux deux axes e_1, e_2 . Soit :

$$\mathbf{u}^{(0)}(y_1, y_2) = \mathbf{u}^{(0)}(y_1, -y_2) \quad (5.21)$$

$$\mathbf{u}^{(0)}(y_1, y_2) = \mathbf{u}^{(0)}(-y_1, y_2) \quad (5.22)$$

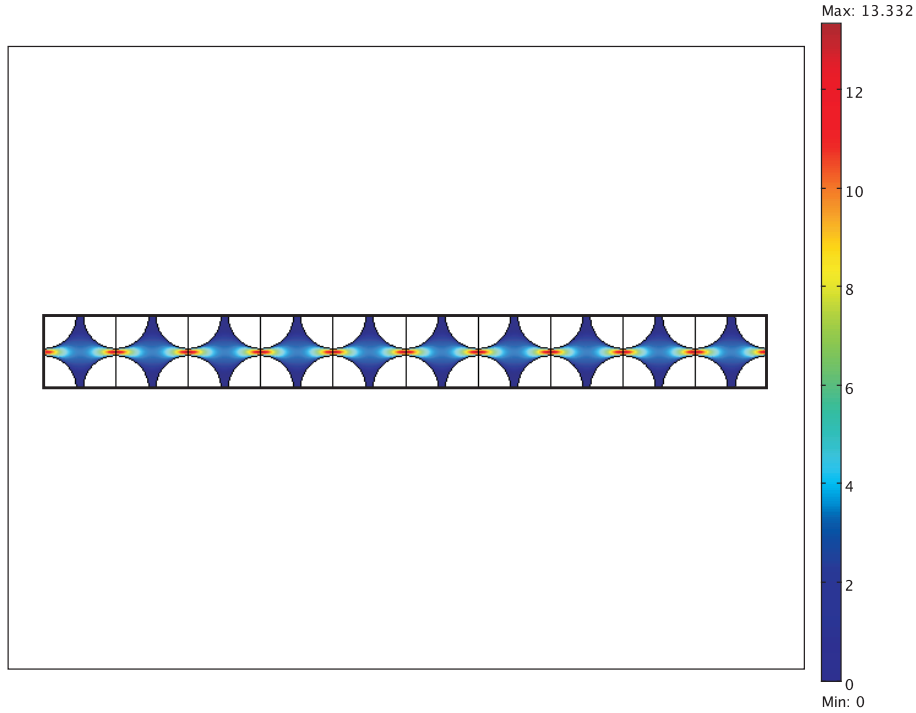


FIGURE 5.23 – Champ de vitesse sans glissement sur toute la longueur du réseau des cylindres pour $Pe = 1$ ($r = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,364$).

Le champ de température longitudinal (Fig. 5.24) est symétrique par rapport à l'axe e_1

$$T(y_1, y_2) = T(y_1, -y_2) \quad (5.23)$$

Par contre, le champ transverse (Fig. 5.25) n'est pas symétrique.

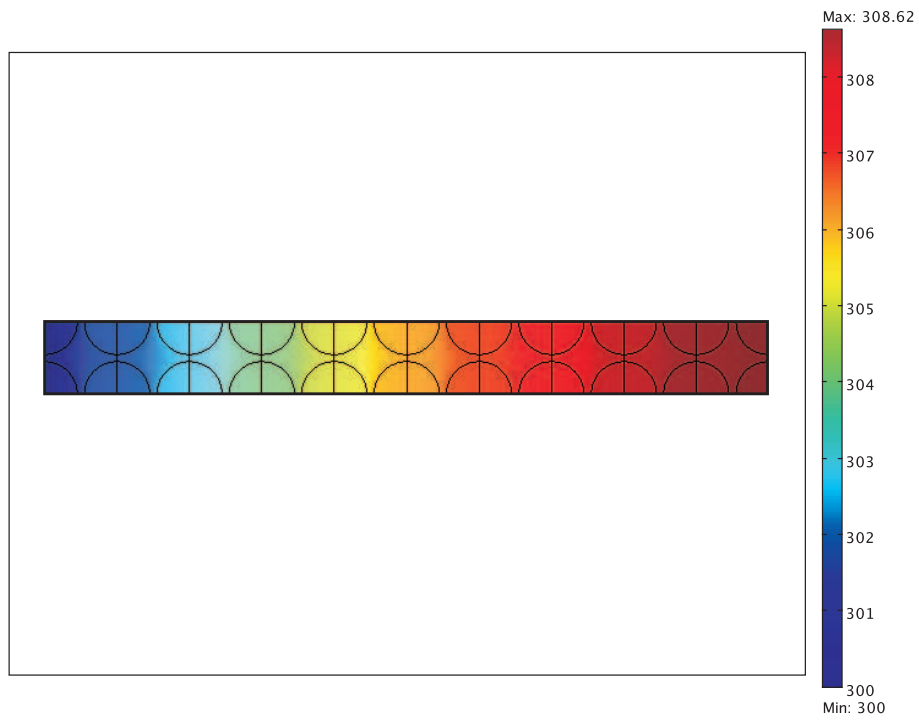


FIGURE 5.24 – Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas **longitudinal** et pour $Pe = 1$ ($r = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,364$).

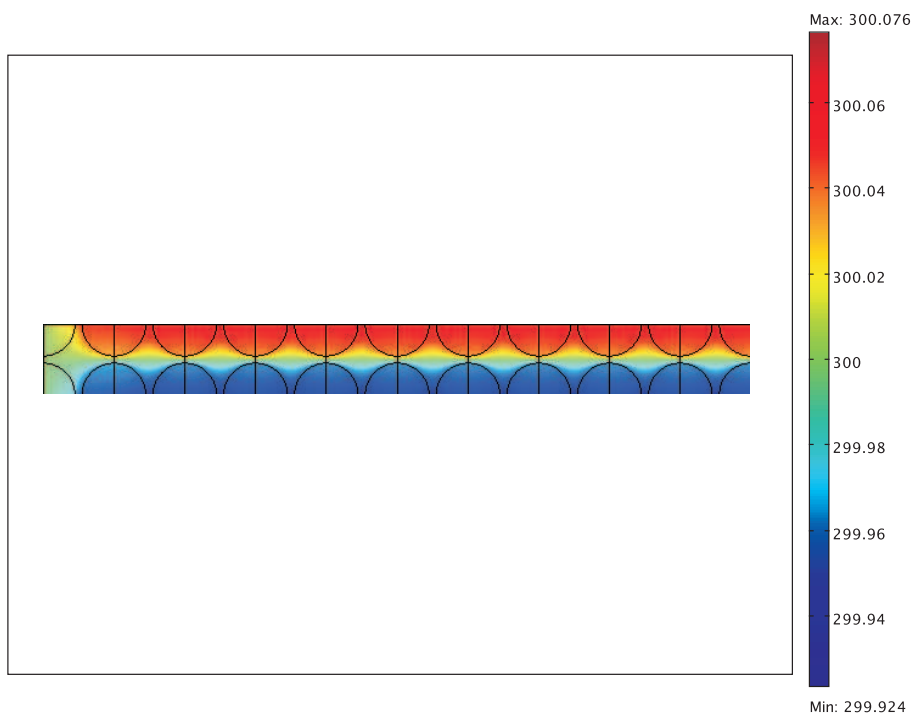


FIGURE 5.25 – Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas **transverse** et pour $Pe = 1$ ($r = 4,5\mu m$, $\varepsilon = 0,364$).

5.4.3.2 Conductivité de dispersion

Les figures 5.26 et 5.27 montrent les composantes longitudinale et transverse de la conductivité de dispersion en fonction du nombre de Péclet (pour $k_s/k_f = 10$) et en fonction du rapport des conductivités (pour $Pe = 5$) pour deux réseaux de cylindres de rayon $r = 3\mu m$ ($\varepsilon = 0,717$) et $r = 4,5\mu m$ ($\varepsilon = 0,364$). On trouve que la valeur de dispersion longitudinale est à peu près la même que celle calculée pour des barres carrées de côté $a = r$. Ce résultat est en accord avec ceux discutés dans Pedras et de Lemos (2008) qui montrent que la dispersion thermique longitudinale dépend peu de la géométrie du solide pourvu que les porosités soient voisines. La valeur de la dispersion transverse est un peu plus grande que pour des barres carrées mais reste de l'ordre de deux ordres de grandeur inférieure à $(K_{disp})_{xx}$. On remarque aussi que l'effet du glissement sur la dispersion longitudinale est plus important que sur la dispersion transverse. La diminution maximale est de 11% pour $r = 4,5\mu m$: $(K_{disp})_{xx} = 2,63 \times 10^{-2}k_f$ sans glissement et $(K_{disp})_{xx} = 2,34 \times 10^{-2}k_f$ en tenant compte du glissement.

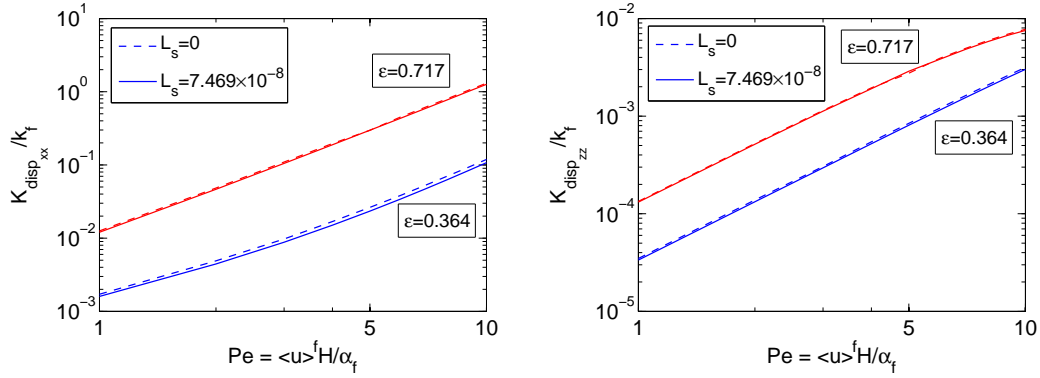


FIGURE 5.26 – Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10, \sigma = 0,9$).

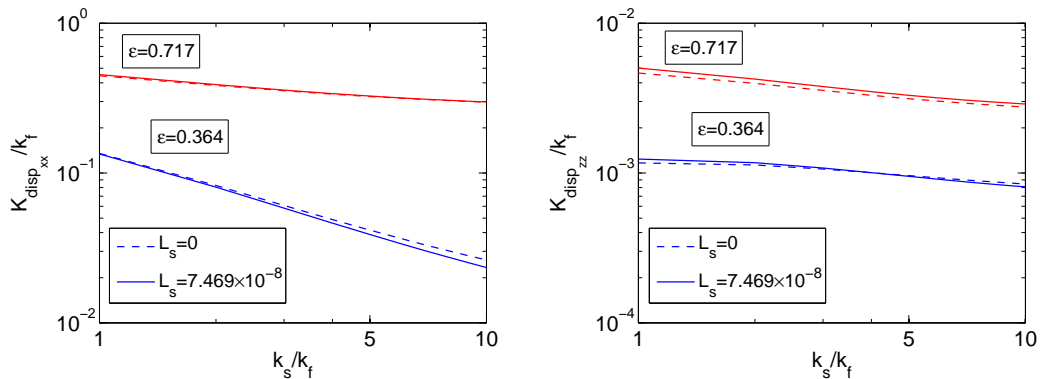


FIGURE 5.27 – Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0,9$).

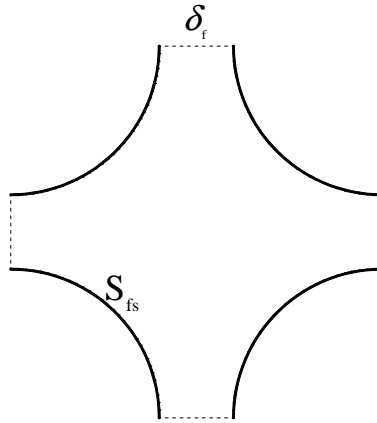


FIGURE 5.28 – Un exemple d’une surface ouverte de cylindre.

5.4.3.3 Conductivité due à la tortuosité

Dans ce cas, on ne peut pas calculer directement le terme $\int_{S_{fs}} TndS$ comme pour un réseau de barres parce que le vecteur normal \mathbf{n} change aux interfaces fluide-solide. Pour le calculer, on doit utiliser la théorème de la divergence pour une surface ouverte :

$$\int_{S_{fs}} TndS = \int_{\Omega_f} \nabla T d\Omega - \int_{\delta_f} Tnd\delta_f \quad (5.24)$$

où δ_f est la surface fluide entre cylindres (figure 5.28). La figure 5.29 montre que le coefficient de la conductivité de tortuosité longitudinale augmente avec la porosité mais que celui de la conductivité transverse varie en sens inverse. On remarque aussi que la tortuosité augmente linéairement avec le rapport de conductivité k_s/k_f .

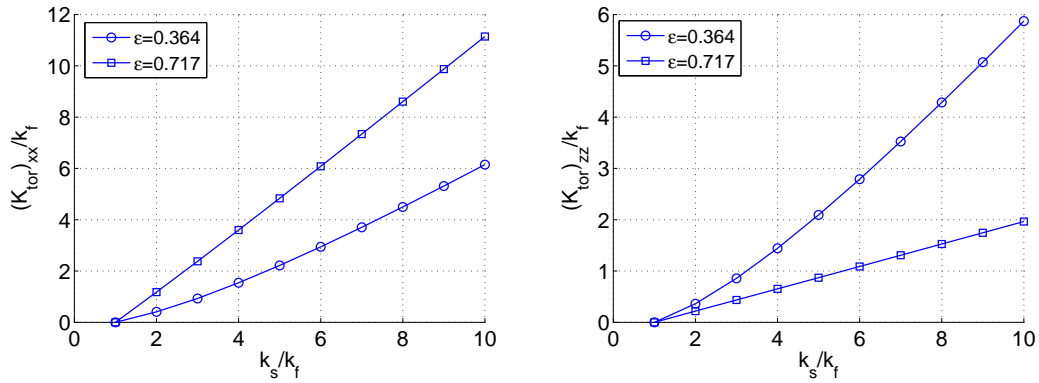


FIGURE 5.29 – Coefficients des tortuosités longitudinale (xx) et transverse (zz) en fonction du rapport de conductivité pour deux porosités.

5.5 Effet du glissement sur la dispersion thermique d'un réseau des cubes (3D)

5.5.1 Introduction

Dans le chapitre 3 on a calculé la dispersion thermique pour un réseau de cubes 3D (espacement entre les cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0,271$). Nous reprenons ce problème en tenant compte du glissement. Le domaine simulé est représenté sur la figure 5.30. L'espacement est augmenté de $e = 1 \mu m$ à $e = 4 \mu m$ ($\varepsilon = 0,784$) en diminuant la taille des cubes ($3 \mu m \leq a \leq 4,5 \mu m$) de sorte que la taille du volume périodique soit maintenue constante ($H^3 = 10 \mu m^3$).

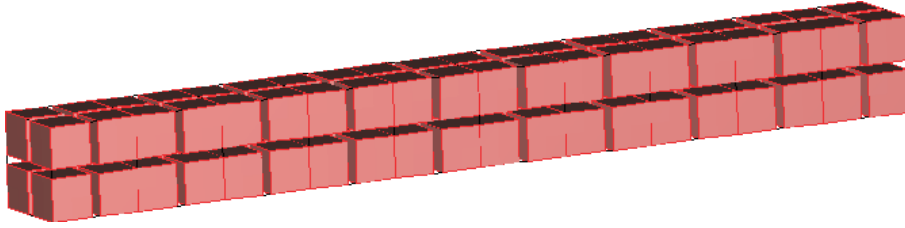


FIGURE 5.30 – Représentation schématique du domaine de calcul (espacement entre blocs cubiques de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0,271$).

5.5.2 Modèle numérique et champ de la température

Une étude de la convergence spatiale a été effectuée. On va appliquer le résultat obtenu pour toutes les autres simulations. Le maillage optimal comporte 351.371 éléments du type tétraédrique, ce qui correspond à 2.661.122 degrés de liberté (tableau 5.3, figure 5.31). En utilisant une station de calcul de 164 Go de mémoire vive, un calcul dure une heure, environ.

Nombre d'éléments	60 273	289 960	<i>351 371</i>
Nombre degré liberté	498 203	1 391 238	<i>2 661 122</i>
$(K_{disp})_{xx}/k_f$	8,9521E-4	9,5331E-4	<i>9,5331E-4</i>
$(K_{disp})_{xx}^{glisse}/k_f$	1,0315E-3	1,0140E-3	<i>1,0140E-3</i>

TABLE 5.3 – Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cubes, espacement entre les cubes de $1 \mu m$, $\varepsilon = 0,271$; $Pe = 1$.

Nombre d'éléments	21 914	<i>159 960</i>	300 042
Nombre degré liberté	208 121	<i>1 552 053</i>	2 829 713
$(K_{disp})_{xx}/k_f$	8,9521E-3	<i>9,5912E-3</i>	9,6508E-3

TABLE 5.4 – Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cubes, espacement entre les cubes de $4 \mu m$, $\varepsilon = 0,784$; $Pe = 1$.

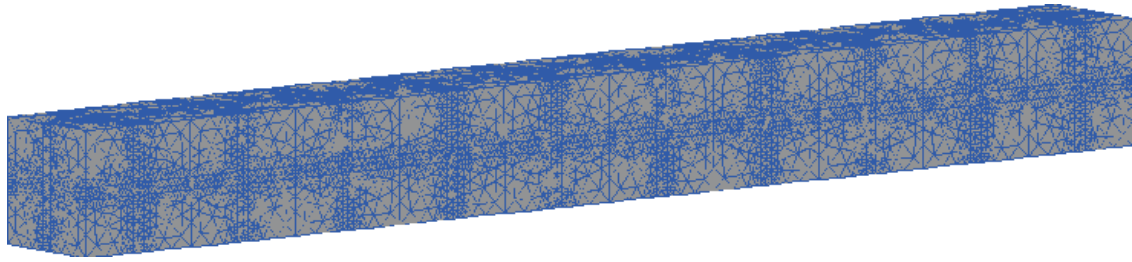


FIGURE 5.31 – Le maillage optimal contient 351 371 éléments tétraédriques lorsque l'espacement entre les cubes est de $1\mu m$, $\varepsilon = 0,271$; $Pe = 1$.

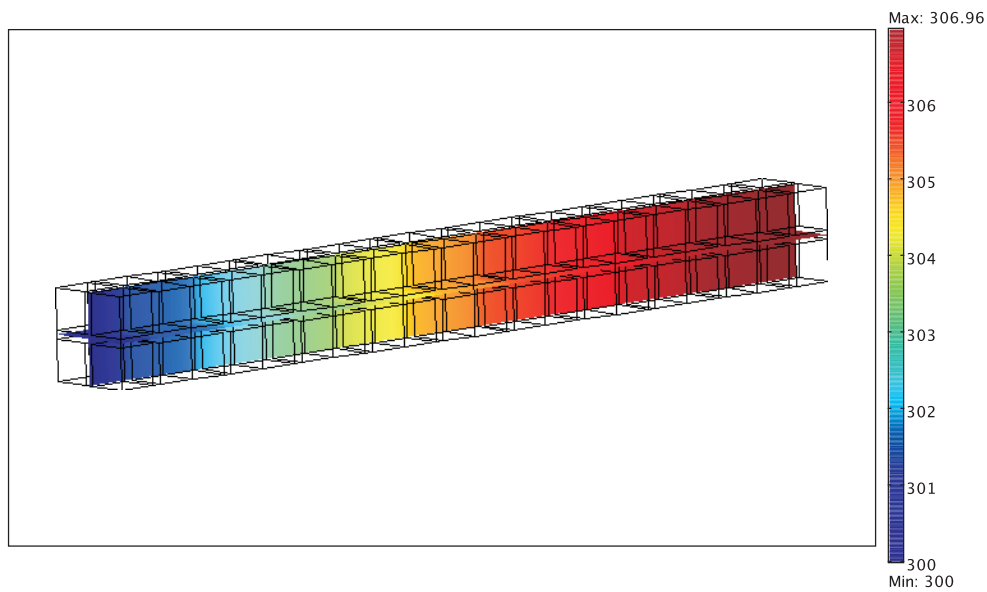


FIGURE 5.32 – Champ de température pour le cas longitudinal (espacement entre cubes de $1\mu m$, porosité $\varepsilon = 0,271$; $Pe = 1$).

La figure 5.32 montre le champ de température longitudinale et les figures 5.33, 5.34 montrent les champs de température transverses.

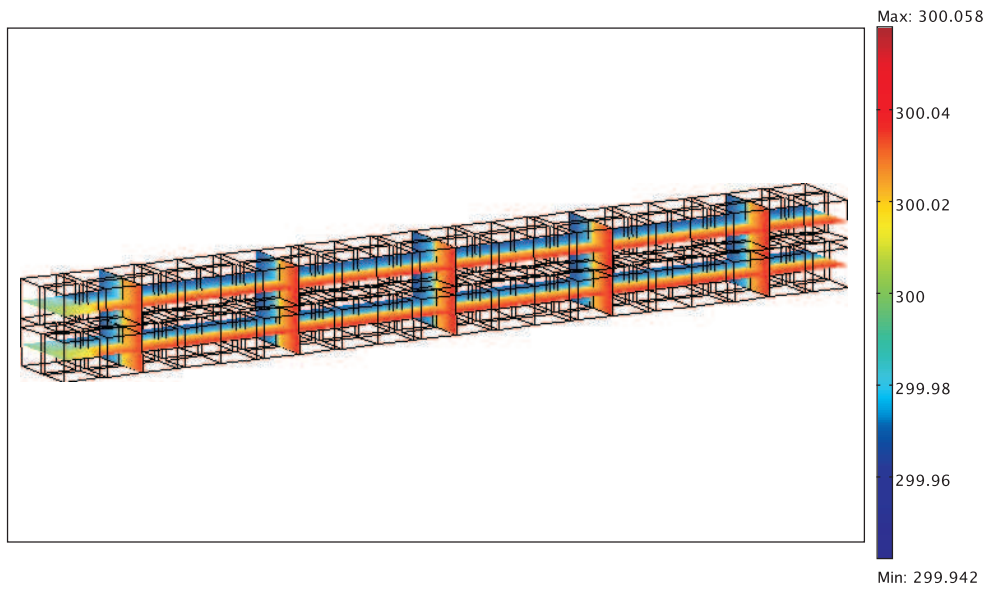


FIGURE 5.33 – Champ de température pour le cas transverse (zz) (espacement entre cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0,271$; $Pe = 1$).

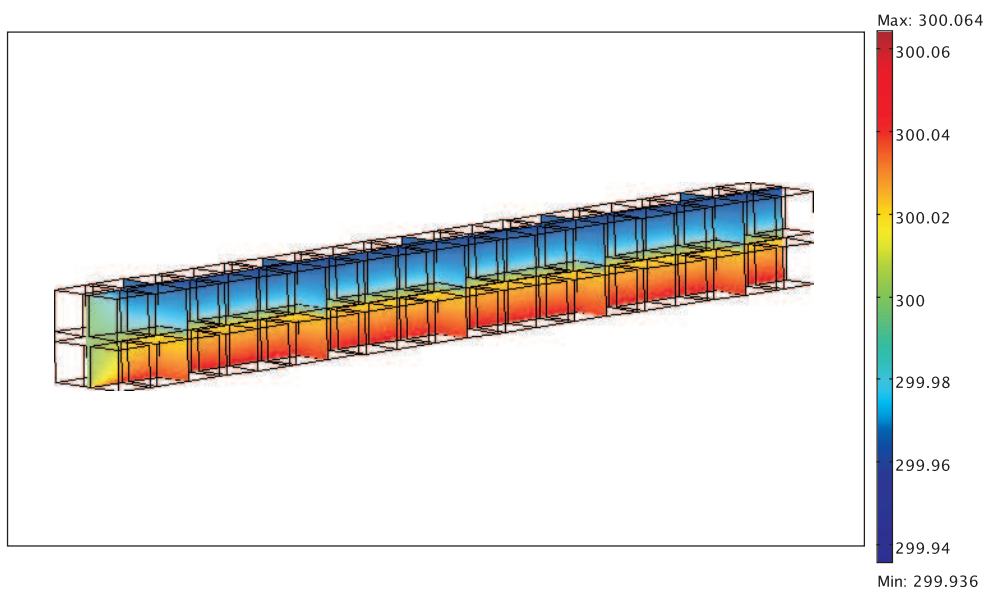


FIGURE 5.34 – Champ de température pour le cas transverse (yy) (espacement entre cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0,271$; $Pe = 1$).

5.5.3 Résultats et discussion

La figure 5.36 représente les variations des composantes transverses de la conductivité de dispersion en fonction du nombre de Péclet pour $k_s/k_f = 10$ et un espacement entre des cubes solides de $1 \mu m$ et $4 \mu m$. L'effet du glissement sur la dispersion longitudinale est similaire à celui observé en géométrie 2D (figure 5.35). Il est plus important sur les composantes transverses $(K_{disp})_{yy}$ et $(K_{disp})_{zz}$ dont les valeurs diffèrent parce que les fluctuations des composantes de vitesse v' et w' sont sensiblement différentes.

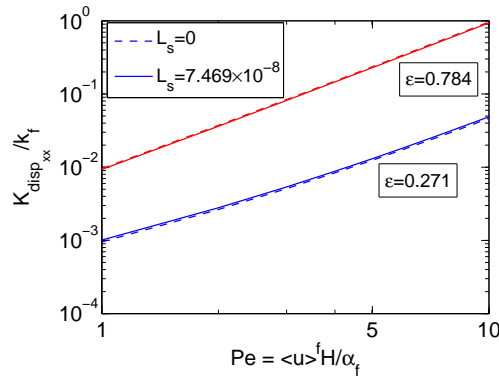


FIGURE 5.35 – Effet du glissement sur la dispersion longitudinale en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10, \sigma = 0, 9$).

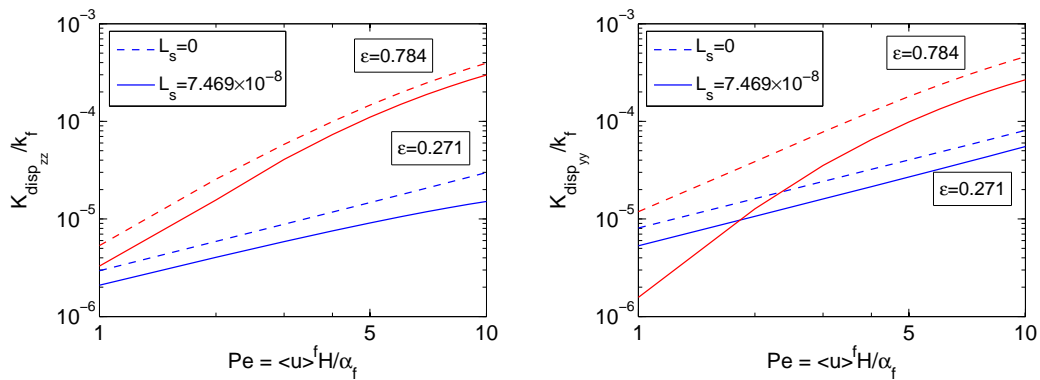


FIGURE 5.36 – Effet du glissement sur les dispersions transverses en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10, \sigma = 0, 9$).

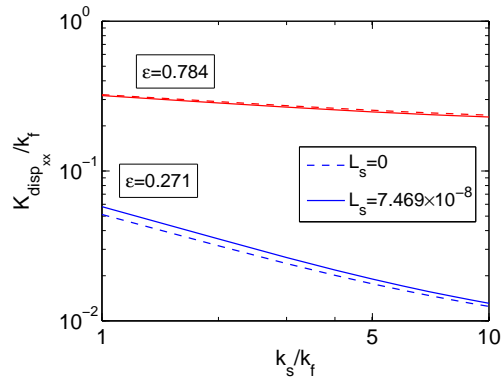


FIGURE 5.37 – Effet du glissement sur la dispersion longitudinale en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0, 9$).

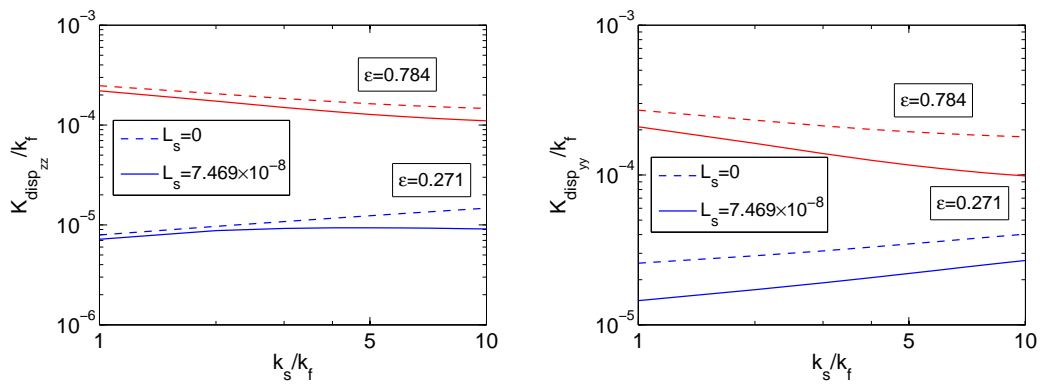


FIGURE 5.38 – Effet du glissement sur les dispersions transverses en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0, 9$).

5.5.4 Conductivité de tortuosité

La tortuosité est déterminée comme dans la section précédente. La figure 5.39 représente la conductivité de tortuosité longitudinale en fonction du rapport k_s/k_f pour les deux porosités $\varepsilon = 0,271$ et $\varepsilon = 0,784$. La figure 5.40 représente les conductivités de tortuosité transverses en zz et yy , ses valeurs numériques sont identiques.

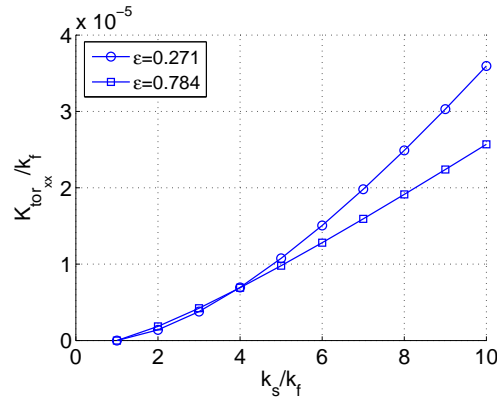


FIGURE 5.39 – Conductivité de tortuosité longitudinale en fonction du rapport k_s/k_f pour les deux porosités $\varepsilon = 0,271$ et $\varepsilon = 0,784$.

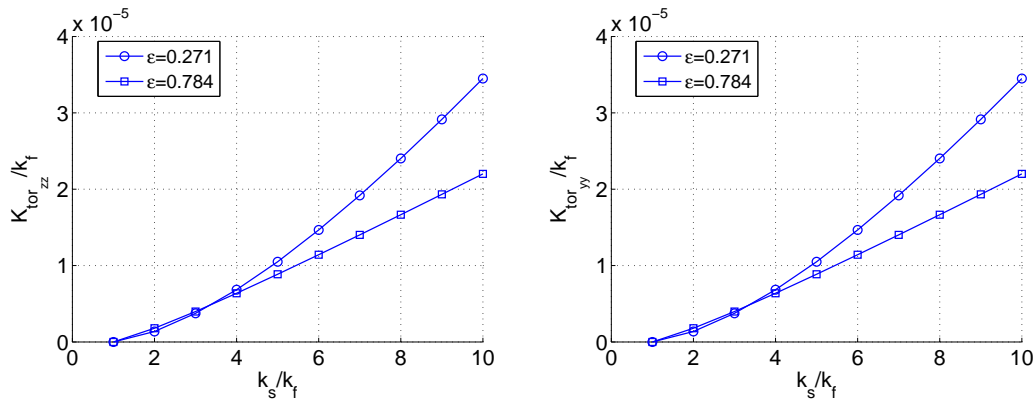


FIGURE 5.40 – Conductivité de tortuosité transverse en fonction du rapport k_s/k_f pour les deux porosités $\varepsilon = 0,271$ et $\varepsilon = 0,784$.

5.5.5 Coefficient de transfert interstitiel solide-fluide

La taille de la géométrie étudiée est de $H = 901\mu m$, $B = 901\mu m$ et $L = 1000\mu m$, les blocs solides ayant une dimension de $450\mu m \times 450\mu m \times 99\mu m$. L'espacement entre des blocs solides est fixé à $1\mu m$ et le nombre de cellule élémentaire est de 10 (figure 5.41), le rapport de conductivité $k_s/k_f = 10$.

Comme le cas 2D, quand l'espacement entre des blocs solides est fixé $1\mu m$ on observe que l'hypothèse d'équilibre thermique local peut être considérée. Pour vérifier la condition non équilibre thermique local on varie l'espacement des blocs solide ($0,3\mu m \leq e \leq 1\mu m$)

suivant les 2 directions y et z mais en maintenant la largeur en direction x ($d = 1\mu m$).

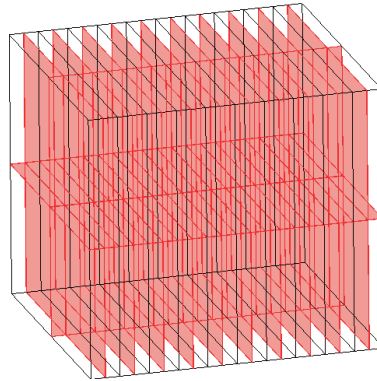


FIGURE 5.41 – Domaine tridimensionnel simulé pour la condition de non équilibre thermique local.

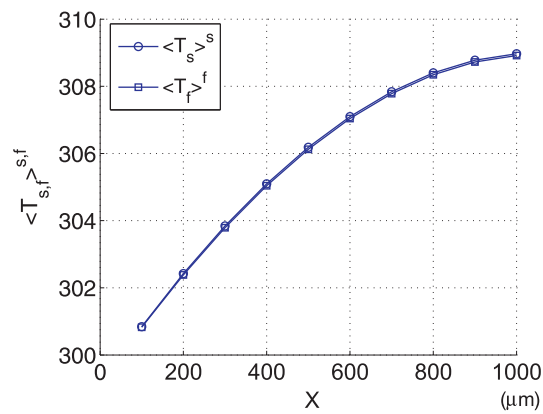


FIGURE 5.42 – Variations longitudinales des moyennes intrinsèques des températures des phases solide, s , et fluide, f .

La figure 5.43 représente la différence de température moyenne intrinsèque entre les phases solide et fluide, $\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f$, en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f pour différents espacements ($0, 3\mu m \leq e \leq 1\mu m$). La figure 5.44 montre la variation axiale du coefficient de transfert interstitiel solide-fluide en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f , on trouve que ces résultats 3D sont approchés de ceux 2D.

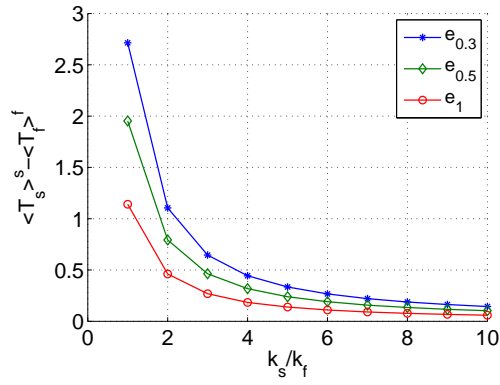


FIGURE 5.43 – Différence entre les températures moyennes intrinsèques des phases solide, s , et fluide, f , en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f pour différents espacements transverses.

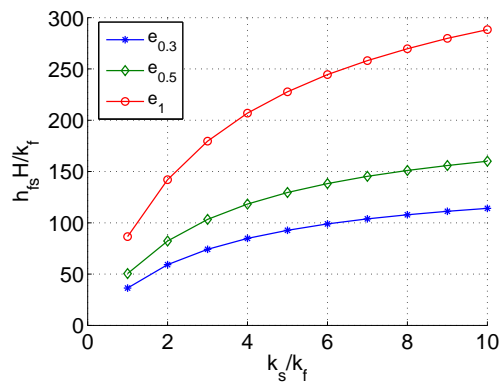


FIGURE 5.44 – Variation axiale du coefficient de transfert interstitiel solide-fluide.

Conclusion

Les écoulements et les transferts convectifs de gaz dans des micro-conduites de diamètre hydraulique D_h tel que le nombre de Knudsen ($Kn = \lambda/D_h =$ libre parcours moyen des molécules /diamètre hydraulique) est compris entre $Kn = 0,01$ et $Kn = 0,1$ (soit D_h de l'ordre de quelques micromètres pour de l'air à pression atmosphérique) ont été modélisés en s'appuyant sur les équations de la mécanique des milieux continus avec des conditions aux limites modifiées afin de représenter les phénomènes de glissement dynamique.

Dans le chapitre 1, nous avons proposé une méthode de résolution numérique pour déterminer la perméabilité d'un milieu micro-poreux. Cette méthode s'inspire des techniques d'homogénéisation périodique, couramment utilisée pour la détermination des propriétés effectives des matériaux composites. La résolution numérique proprement dite est effectuée dans le domaine de Fourier et repose sur un schéma itératif. Deux niveaux de modélisation ont été proposés en prenant en compte des conditions d'adhérence ou des conditions de glissement sur les parois d'inclusions indéformables. Afin de valider l'approche, des applications au cas d'un écoulement à travers un réseau périodique de cylindres ont été considérées. Les résultats mettent en évidence une dépendance de la perméabilité avec la longueur caractéristique introduite dans la condition de glissement sur la paroi parce que le glissement augmente de manière significative la perméabilité d'un milieu poreux. Les résultats numériques, limités à quelques géométries, permettent de quantifier cet effet.

Nous présentons deux techniques d'homogénéisation dans le chapitre 2 : la méthode d'homogénéisation périodique basée sur des développements asymptotiques et la méthode de prise de moyenne des équations de conservation sur un volume d'étude représentatif (VER). Ces méthodes seront mises en oeuvre sur des exemples dans le chapitre 3 en utilisant un logiciel d'éléments finis commercialisé (Comsol) puis dans les chapitres 4, pour la première, et 5 pour la seconde. Les concepts fondamentaux et les conditions d'applications de ces deux méthodes sont rappelées dans le chapitre 2 et on montre comment ces processus d'homogénéisation permettent de remplacer la description complexe des phénomènes de transport à l'échelle microscopique par un milieu continu susceptible de restituer la réponse globale du milieu à l'échelle d'un VER.

Après avoir présenté succinctement le logiciel utilisé au cours de ce travail de thèse, des comparaisons avec des solutions analytiques ou avec des solutions numériques publiées récemment sont discutées dans le chapitre 3.

Les problèmes considérés sont divers et concernent des écoulements en conduite aussi bien que des écoulements dans des milieux poreux modèles dont la structure de la matrice solide est de complexité croissante.

L'exemple le plus simple est celui de la convection forcée dans une micro-conduite plane en tenant compte du glissement hydrodynamique. Lorsque les parois de la conduite ont une épaisseur négligeable et sont uniformément chauffées par des densités de flux constantes,

une solution analytique obtenue en régimes dynamique et thermique établis nous a permis de vérifier que l'implémentation numérique de la condition de glissement était correctement réalisée. Les grandeurs macroscopiques calculées analytiquement et numériquement, en particulier la conductivité thermique de dispersion, sont en très bon accord.

Dans la suite de chapitre, le fluide est supposé adhérer aux parois solides (condition d'adhérence). Nous traitons d'abord le cas d'une conduite à parois épaisses, représentative d'un milieu poreux lamellaire. La conduction thermique dans les parois est alors bidimensionnelle et le problème ne semble pas posséder de solution analytique simple en régime dynamique établi. Pour les faibles épaisseurs et les conductivités thermiques des parois considérées ($1 \leq k_s/k_f \leq 10$), il existe un régime thermique établi (variation linéaire de la température moyenne débitante du fluide). On montre que l'hypothèse d'équilibre thermique local est vérifiée et que les moyennes de phase des solutions microscopiques sont identiques aux solutions macroscopiques obtenues en appliquant la loi de Darcy et en introduisant une conductivité effective appropriée.

Les composantes diagonales du tenseur de perméabilité pour des réseaux bidimensionnels de barres à section circulaire ou carrée sont ensuite calculées en appliquant la méthode d'homogénéisation périodique. Les structures correspondent à des arrangements en ligne ou en quinconce. En raison de leur symétrie, les écoulements les traversant présentent des propriétés d'isotropie transverse. On ne calcule que les composantes diagonales du tenseur de perméabilité en ne considérant que des écoulements perpendiculaires ou parallèles à l'axe des cylindres. On montre que les valeurs obtenues sont en bon accord avec celles reportées dans la littérature.

Le calcul des composantes diagonales du tenseur de dispersion thermique d'un réseau de barres carrées en ligne est ensuite effectué en appliquant la méthode de prise de moyennes : on résout le système complet des équations de conservation à l'échelle microscopique dans le cas d'une conduite plane partiellement remplie par des barres (en tenant compte des conditions de symétrie transverses) et on en déduit des corrélations donnant les composantes longitudinales et transverses du tenseur de dispersion. Les résultats obtenus et les corrélations sont en bon accord avec des résultats reportés dans la littérature.

Ce troisième chapitre est complété par des simulations tridimensionnelles d'écoulements dans des arrangements de sphères ou de cubes et dans des empilements de sphères. Toutes les perméabilités sont calculées en utilisant la méthode d'homogénéisation périodique et on compare nos résultats avec des résultats de la littérature pour des empilements de sphères de type cubique simple, cubique centré, cubique à face centrée et hexagonal. Comme en 2D, la dispersion thermique d'un réseau de cubes a été calculée par la méthode de prise de moyenne.

L'effet du glissement sur la perméabilité de milieux micro-poreux est abordé dans le chapitre 4. Le formalisme résultant de l'homogénéisation de structures périodiques est à nouveau employé pour simuler numériquement des écoulements isothermes de gaz à travers divers empilements de complexité croissante :

- écoulements dans un milieu lamellaire (1D),
- écoulements à travers des réseaux de barres à section rectangulaire ou de cylindres (2D),
- écoulements dans des empilements de cubes ou de sphères (3D).

Les perméabilités sont déterminées en calculant les moyennes spatiales des champs de vitesses, solutions des équations de Stokes, et en supposant constant le gradient de pression macroscopique. Les valeurs obtenues en imposant des conditions d'adhérence sont compa-

rées à celles obtenues avec des conditions de glissement du premier ordre. On considère des pores de dimensions micrométriques correspondant, pour de l'air à pression atmosphérique, à des nombres de Knudsen compris entre $Kn = 0,01$ et $Kn = 0,1$, domaine de validité des équations de Stokes avec condition de glissement. On discute de l'augmentation relative de la perméabilité due au glissement selon la géométrie des pores et en considérant des facteurs d'accommodation réaliste pour de l'air ($0,8 \leq \sigma \leq 1$). De façon générale, la perméabilité augmente sous l'effet du glissement mais son augmentation relative dépend aussi de la géométrie et de la porosité, notamment en géométries 2D et 3D. A partir de l'ensemble des résultats présentés dans ce chapitre, on peut conclure que l'augmentation relative de perméabilité peut atteindre 50%, sans qu'un interval de variations puisse être précisément déterminé compte tenu du nombre de paramètres intervenant dans les calculs.

Le dernier chapitre du mémoire (chapitre 5) traite de l'effet du glissement dynamique sur la conductivité effective de milieux micro-poreux. L'objectif de ce chapitre est de montrer l'effet du glissement dynamique sur la conductivité de dispersion, sur la condition d'équilibre thermique local et sur le coefficient de transfert intersticiel fluide-solide lorsqu'un modèle à deux équations d'énergie doit être employé. Nous nous sommes limités au cas d'une conduite remplie par une structure périodique (composée de carrés, de cylindres ou de cubes) chauffée à flux constant et nous avons imposé le rapport de conductivité thermique à $k_s/k_f = 10$. Dans ce chapitre, nous n'avons fait aucune hypothèse sur le caractère périodique des transferts de quantité de mouvement et de chaleur dans la direction principale de l'écoulement : les transferts sont simulés depuis l'entrée jusqu'à la sortie d'une conduite. Nous nous sommes intéressés plus particulièrement aux valeurs moyennes calculées dans un VER situé dans la zone d'écoulement dynamiquement établi. Les résultats, basés sur la méthode de prise de moyenne, montrent que la dispersion longitudinale augmente avec le nombre de Péclet mais diminue sous l'effet du glissement, ce qui était attendu. Cependant, l'effet du glissement est relativement faible sur les propriétés thermiques macroscopiques étudiées dans ce chapitre, notamment en géométries 2D et 3D. Les variations axiales du coefficient de transfert intersticiel montrent que le régime thermique ne s'établit pas pour les longueurs de conduites considérées, ce qui ne permet pas de comparer nos résultats aux corrélations reportées dans la littérature qui ont été établies en supposant le régime thermique établi ou en introduisant des conditions de périodicité axiale dans les modélisations puis dans les simulations numériques.

Perspectives

Les résultats présentés dans ce mémoire pourraient être complétés dans deux directions dans la perspective d'étudier les phénomènes de transport dans des milieux micro-poreux plus réalistes, tels que des mousses métalliques (Bonnet et al. (2008) [13]), mais aussi dans des conduites de diamètre hydraulique de l'ordre de quelques microns et partiellement remplies par un milieu poreux (Aguilar-Madera et al. (2011) [1], Aguilar-Madera et al. (2011) [2]). Les techniques de prise de moyennes appliquées à des VER contenant une phase fluide entourant ou superposée à une matrice solide ayant considérablement progressé aux cours des dernières années, leur extension à des micro-écoulements avec glissement dynamique et thermique semble être maintenant accessible.

Le glissement thermique n'a pas été pris en compte dans ce travail de thèse. Si l'on admet que les coefficients d'accommodation dynamique et thermiques sont du même ordre de grandeur, ce phénomène, qui ne semble être important que pour des interactions gaz-parois

à caractère nettement spéculaire ou si les gradients normaux de température aux interfaces sont très grands, demanderait à être étudié en détail, notamment lorsque la condition d'équilibre thermique local n'est pas satisfaite. De même, les termes de pompage thermique devraient être pris en compte afin de modéliser des écoulement dans des conduites très courtes reliant des réservoirs contenant des gaz à températures différentes (quelques degrés d'écart suffisent). Si la modélisation de ces phénomènes à l'échelle microscopique semble être bien établie, deux problèmes restent ouverts : à l'échelle microscopique, le traitement numérique du couplage entre les équations du mouvement et de l'énergie par l'intermédiaire des conditions aux limites et, plus fondamentalement, la modélisation à l'échelle macroscopique du pompage thermique qui devrait nécessiter d'introduire des hypothèses de fermeture supplémentaires.

Les effets de compressibilité ont été évoqués dans ce mémoire. Un calcul simple montre que pour créer un écoulement d'air avec une vitesse de filtration de 1 m/s dans un milieu micro-poreux de perméabilité de l'ordre de 10^{-13} m^2 (lit de billes de diamètre $dp \approx 5 \mu\text{m}$ et $\varepsilon = 0.5$) et de $100 \mu\text{m}$ de longueur, il faut une différence de pression de l'ordre de $0,2 \text{ atm}$. Si cet écoulement n'est pas siège d'ondes de choc, il est clair que la masse volumique du gaz varie considérablement entre l'entrée et la sortie de la conduite. Tenir compte des effets de compressibilité à l'échelle macroscopique nécessite de complètement reprendre les méthodes d'homogénéisation présentées dans le chapitre 2 et d'introduire de nouvelles hypothèses de fermeture. Par contre, la modélisation à l'échelle microscopique ne devrait pas poser de problème particulier sur le plan numérique parce que l'hypothèse d'écoulement faiblement compressible est admissible.

Bibliographie

- [1] C.G. Aguilar-Madera, F.J. Valdes-Parada, B. Goyeau, O.T. Alberto, et al. One-domain approach for heat transfer between a porous medium and a fluid. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(9-10) :2089–2099, 2011.
- [2] C.G. Aguilar-Madera, F.J. Valdés-Parada, B. Goyeau, and J.A. Ochoa-Tapia. Convective heat transfer in a channel partially filled with a porous medium. *International Journal of Thermal Sciences*, 50(8) :1355–1368, 2011.
- [3] B. Alazmi and K. Vafai. Analysis of variants within the porous media transport models. *Journal of Heat Transfer*, 122 :303–326, 2000.
- [4] E. Arquis, J.P. Caltagirone, and P. Le Breton. Détermination des propriétés de dispersion d’un milieu périodique à partir de l’analyse locale des transferts thermiques. *Comptes rendus de l’Académie des sciences. Série 2, Mécanique, Physique, Chimie, Sciences de l’univers, Sciences de la Terre*, 313(10) :1087–1092, 1991.
- [5] J.L. Auriault. Heterogeneous medium is an equivalent macroscopic description possible? *International journal of engineering science*, 29(7) :785–795, 1991.
- [6] J.L. Auriault. *Homogénéisation*. Ecole Doctorale Mécanique et Energétique, 2001.
- [7] R.W. Barber and D.R. Emerson. Analytical solution of low reynolds number slip flow past a sphere. *CLRC Daresbury Laboratory Technical Report DL-TR-00-001*, 2000.
- [8] J. Bear and C. Braester. On the flow of two immiscible fluids in fractured porous media. *Proc. First Int. Symp. on Fundamentals of Trans. Phen. in Porous Media*, pages 177–202, 1972.
- [9] A. Bensoussan, J.L. Lions, and G. Papanicolaou. *Asymptotic analysis for periodic structures*, volume 5. North Holland, 1978.
- [10] Y. Benveniste and T. Miloh. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. *Mechanics of materials*, 33(6) :309–323, 2001.
- [11] G.A. Bird. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Clarendon Press, 1994.
- [12] G. Bonnet. Effective properties of elastic periodic composite media with fibers. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(5) :881–899, 2007.
- [13] J.P. Bonnet, F. Topin, and L. Tadrist. Flow laws in metal foams : compressibility and pore size effects. *Transport in Porous Media*, 73(2) :233–254, 2008.
- [14] S. Bories, A. Mojtabi, M. Prat, and M. Quintard. Transferts de chaleur dans les milieux poreux : Conduction, convection, rayonnement. *Techniques de l’ingénieur. Génie énergétique*, (BE8250), 2008.

- [15] A.M. Chapman and J.J.L. Higdon. Oscillatory stokes flow in periodic porous media. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4 :2099, 1992.
- [16] J. Chastanet, P. Royer, and J.L. Auriault. Does klinkenberg’s law survive upscaling? *Transport in porous media*, 56(2) :171–198, 2004.
- [17] P. Cheng and D. Vortmeyer. Transverse thermal dispersion and wall channelling in a packed bed with forced convective flow. *Chemical engineering science*, 43(9) :2523–2532, 1988.
- [18] S. Colin and L. Baldas. Effets de raréfaction dans les micro-écoulements gazeux. *Comptes Rendus Physique*, 5(5) :521–530, 2004.
- [19] Comsol. *Comsol multiphysics, User manual, version 3.5a*. 2008.
- [20] H. Darcy. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. 1856.
- [21] J. Drevillon, K. Joulain, P. Ben-Abdallah, and E. Nefzaoui. Far field coherent thermal emission from a bilayer structure. *Journal of Applied Physics*, 109(3) :034315, 2011.
- [22] F.A.L. Dullien. *Porous media : fluid transport and pore structure*. New York, 1979.
- [23] J. Dupuit, R. Genieys, and J.F.A. de Voisins. *Traité théorique et pratique de la conduite et de la distribution des eaux*, volume 49. Cariliàn-Goeury et V. Dalmont, 1854.
- [24] S. Ergun. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :89–94, 1952.
- [25] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 241(1226) :376, 1957.
- [26] J.D. Eshelby. Elastic inclusions and inhomogeneities. *Progress in solid mechanics*, 2(1) :89–140, 1961.
- [27] C. Figus, Y.L. Bray, S. Bories, and M. Prat. Heat and mass transfer with phase change in aporous structure partially heated : continuum model and pore network simulations. *International journal of heat and mass transfer*, 42(14) :2557–2569, 1999.
- [28] P. Forchheimer. *Hydraulik*. BG Teubner, 1914.
- [29] S. Gasser, F. Paun, and Y. Bréchet. Absorptive properties of rigid porous media : Application to face centered cubic sphere packing. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 117 :2090, 2005.
- [30] B. Goyeau, T. Benihaddadene, D. Gobin, and M. Quintard. Averaged momentum equation for flow through a nonhomogenous porous structure. *Transport in porous media*, 28(1) :19–50, 1997.
- [31] B. Goyeau, D. Lhuillier, D. Gobin, and M.G. Velarde. Momentum transport at a fluid-porous interface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(21) :4071–4081, 2003.
- [32] W.G. Gray. A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engineering Science*, 30(2) :229–233, 1975.

- [33] W.G. Gray and K. O'Neill. On the general equations for flow in porous media and their reduction to darcy's law. *Water Resources Research*, 12(2) :148–154, 1976.
- [34] H. Hasimoto. On the periodic fundamental solutions of the stokes equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 5(02) :317–328, 1959.
- [35] A.V. Hershey. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *J. appl. Mech*, 21(3) :226–240, 1954.
- [36] A. Houpeurt. *Mécanique des fluides dans les milieux poreux : critiques et recherches*. Editions Technip, 1974.
- [37] S. Irmay. On the theoretical derivation of darcy and forchheimer formulas. *Trans. Am. Geophys. Union*, 39(4) :702–707, 1958.
- [38] K. Joulain. Near-field heat transfer : A radiative interpretation of thermal conduction. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 109(2) :294–304, 2008.
- [39] G. Karniadakis, A. Bestok, and N.R. Aluru. *Microflows and nanoflows : fundamentals and simulation*, volume 29. Springer Verlag, 2005.
- [40] M. Kaviany. *Principles of heat transfer in porous media*. Springer Verlag, 1991.
- [41] J.B. Keller. Effective behavior of heterogeneous media. *Statistical mechanics and statistical methods in theory and application*, pages 631–644, 1977.
- [42] L.J. Klinkenberg. The permeability of porous media to liquids and gases. *Drilling and production practice*, 1941.
- [43] E. Kroner. *Statistical continuum mechanics*. Springer-Verlag, 1972.
- [44] E. Kroner. Statistical modelling. *Elsevier Science Publishers, Modelling Small Deformations of Polycrystals*,, pages 229–291, 1986.
- [45] F. Kuwahara and A. Nakayama. Numerical determination of thermal dispersion coefficients using a periodic porous structure. *Journal of heat transfer*, 121(1) :160–163, 1999.
- [46] F. Kuwahara, A. Nakayama, and H. Koyama. A numerical study of thermal dispersion in porous media. *Journal of heat transfer*, 118 :756, 1996.
- [47] C.Y. Lee, M.J. Leamy, and J.H. Nadler. Acoustic absorption calculation in irreducible porous media : A unified computational approach. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 126 :1862, 2009.
- [48] R.G. Lord. Tangential momentum accommodation coefficients of rare gases on polycrystalline metal surfaces. *Rarefied gas dynamics*, pages 531–538, 1977.
- [49] W. Masmoudi and M. Prat. Heat and mass transfer between a porous medium and a parallel external flow. application to drying of capillary porous materials. *International journal of heat and mass transfer*, 34(8) :1975–1989, 1991.
- [50] J.C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 172(1-4) :109–143, 1999.

- [51] G.W. Milton. *The theory of composites*. Cambridge Univ Pr, 2002.
- [52] H. Moulinec and P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série II, Mécanique, physique, chimie, astronomie*, 318(11) :1417–1423, 1994.
- [53] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157(1-2) :69–94, 1998.
- [54] C. Moyne, S. Didierjean, H.P. Amaral Souto, and O.T. Da Silveira. Thermal dispersion in porous media : one-equation model. *International journal of heat and mass transfer*, 43(20) :3853–3867, 2000.
- [55] C. Navier. Mémoire sur les lois du mouvement des fluides. *Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France*, 6 :389–440, 1823.
- [56] S. Nemat-Nasser and M. Hori. *Micromechanics : overall properties of heterogeneous materials*. Elsevier The Netherlands, 1999.
- [57] T.K. Nguyen. *Homogénéisation numérique de structures périodiques par transformée de Fourier : matériaux composites et milieux poreux*. PhD thesis, 2010.
- [58] D.A. Nield. Effects of local thermal nonequilibrium in steady convective processes in a saturated porous medium : Forced convection in a channel. *Journal of Porous Media*, 1 :181–186, 1998.
- [59] D.A. Nield and A. Bejan. *Convection in porous media*. Springer Verlag, 1992.
- [60] M.H.J. Pedras and M.J.S. de Lemos. Thermal dispersion in porous media as a function of the solid-fluid conductivity ratio. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(21-22) :5359–5367, 2008.
- [61] M. Prat. On the boundary conditions at the macroscopic level. *Transport in Porous Media*, 4(3) :259–280, 1989.
- [62] M. Quintard and S. Whitaker. Ecoulement monophasique en milieu poreux : Effet des hétérogénéités locales. *Journal de Mécanique théorique et appliquée*, 6(5) :691–726, 1987.
- [63] E. Sanchez-Palencia. Comportements local et macroscopique d'un type de milieux physiques heterogenes. *International Journal of Engineering Science*, 12(4) :331–351, 1974.
- [64] E. Sanchez-Palencia. Non-homogeneous media and vibration theory. In *Non-homogeneous media and vibration theory*, volume 127, 1980.
- [65] A.S. Sangani and A. Acrivos. Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer. *International journal of Multiphase flow*, 8(3) :193–206, 1982.
- [66] M. Seidl and E. Steinheil. Measurement of momentum accommodation coefficients on surfaces characterized by auger spectroscopy, sims and leed. *Rarefied gas dynamics*, 1974.

- [67] E. Skjetne and J.L. Auriault. Homogenization of wall-slip gas flow through porous media. *Transport in Porous Media*, 36(3) :293–306, 1999.
- [68] J.C. Slattery. Flow of viscoelastic fluids through porous media. *AIChE Journal*, 13(6) :1066–1071, 1967.
- [69] E.M. Sparrow and J.R. Loeffler. Longitudinal laminar flow between cylinders arranged in regular array. *AIChE Journal*, 5(3) :325–330, 1959.
- [70] T. Strzelecki. *Mechanika Osrodkow Niejednorodnych. Teoria Homogenizacji*. Dolnoslaskie Wydawnictwo Edukacyjne, 1996.
- [71] A. Testu, S. Didierjean, D. Maillet, C. Moyne, T. Metzger, and T. Niass. Thermal dispersion for water or air flow through a bed of glass beads. *International journal of heat and mass transfer*, 50(7-8) :1469–1484, 2007.
- [72] Q.D. To, C. Bercegeay, G. Lauriat, C. Léonard, and G. Bonnet. A slip model for micro/nano gas flows induced by body forces. *Microfluidics and Nanofluidics*, 8(3) :417–422, 2010.
- [73] F.J. Valdés-Parada, J. Alvarez-Ramírez, B. Goyeau, and J.A. Ochoa-Tapia. Computation of jump coefficients for momentum transfer between a porous medium and a fluid using a closed generalized transfer equation. *Transport in porous media*, 78(3) :439–457, 2009.
- [74] F.J. Valdés-Parada, B. Goyeau, et al. Jump momentum boundary condition at a fluid-porous dividing surface : derivation of the closure problem. *Chemical engineering science*, 62(15) :4025–4039, 2007.
- [75] C.Y. Wang. Stokes flow through an array of rectangular fibers. *International journal of multiphase flow*, 22(1) :185–194, 1996.
- [76] C.Y. Wang. Stokes flow through a rectangular array of circular cylinders. *Fluid Dynamics Research*, 29(2) :65–80, 2001.
- [77] C.Y. Wang. Stokes slip flow through square and triangular arrays of circular cylinders. *Fluid dynamics research*, 32(5) :233–246, 2003.
- [78] J.C. Ward. *Turbulent flow in porous media*. University of Arkansas, Engineering Experiment Station, 1965.
- [79] S. Whitaker. Advances in theory of fluid motion in porous media. *Industrial & Engineering Chemistry*, 61(12) :14–28, 1969.
- [80] S. Whitaker. The transport equations for multi-phase systems. *Chemical Engineering Science*, 28(1) :139–147, 1973.
- [81] S. Whitaker. Flow in porous media i : A theoretical derivation of darcy’s law. *Transport in porous media*, 1(1) :3–25, 1986.
- [82] S. Whitaker. The forchheimer equation : a theoretical development. *Transport in Porous media*, 25(1) :27–61, 1996.
- [83] W. Wu, S.Y. Lei, J.H. Du, and B.X. Wang. Relationship of threshold diameter and darcean permeability in unconsolidated porous structures. *Chemical Engineering Science*, 58(15) :3565–3570, 2003.

- [84] S. Yagi and N. Wakao. Heat and mass transfer from wall to fluid in packed beds. *AIChE Journal*, 5(1) :79–85, 1959.
- [85] C. Yang and A. Nakayama. A synthesis of tortuosity and dispersion in effective thermal conductivity of porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(15-16) :3222–3230, 2010.
- [86] A.A. Zick and G.M. Homsy. Stokes flow through periodic arrays of spheres. *Journal of fluid mechanics*, 115(-1) :13–26, 1982.

Table des figures

1	Page de couverture de l'ouvrage de Darcy.	5
2	Colonne utilisée pour les expériences interprétées par Darcy.	6
3	Variations de la perméabilité et du coefficient du terme quadratique en fonction de la dimension caractéristique des pores pour l'air et l'eau distillée (Bonnet et al., 2008 [13]).	10
4	Dimensions caractéristiques de microsystèmes typiques et valeurs du nombre de Knudsen correspondant à la classification des régimes (Karniadakis et al., 2005 [39])	12
1.1	Fibres circulaires en réseau carré.	17
1.2	Cellule de base d'un écoulement entre plans parallèles.	33
1.3	Cellule de base d'un écoulement autour de cylindres.	34
1.4	Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 0$	35
1.5	Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 0$	35
1.6	Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 1/4$	36
1.7	Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 1/4$	36
1.8	Variation de la perméabilité réduite \bar{k} en fonction de la porosité ε	37
1.9	Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 0$	40
1.10	Variation de \bar{v}_1 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 0$	40
1.11	Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_2 pour $\bar{x}_1 = 1/4$	41
1.12	Variation de \bar{v}_2 en fonction de \bar{x}_1 pour $\bar{x}_2 = 1/4$	41
1.13	Variation de la perméabilité réduite \bar{k} en fonction de la porosité ε . Comparaison entre la condition d'adhérence $\gamma/(2b) = 0$ et la condition de glissement avec $\bar{\gamma} = 0.1$	42
2.1	Milieu poreux	45
2.2	Représentation schématique 2D d'un VER (Kaviany, figure 2.14, chapitre 2, page 51 [40])	53
3.1	Écoulement de Poiseuille plan dans une micro-conduite (système de coordonnées (x, y)).	72
3.2	Comparaison entre les résultats numériques et les solutions analytiques pour différents nombres de Knudsen, $Re = 2.58 \times 10^{-3}$	75
3.3	Établissement du régime dynamique pour deux valeurs de Kn et de Re.	75
3.4	Maillage non uniforme 40×400	76
3.5	Champ de vitesse et de température	77
3.6	Profils longitudinaux de vitesse et de température sur l'axe.	77
3.7	Champ de vitesse \mathbf{u} (m/s)	79
3.8	Conduite plane à parois conductrices (les traits verticaux délimitent des VER arbitraires).	80

3.9	Dispersion thermique longitudinale en fonction du nombre de Péclet pour différentes épaisseurs des parois	81
3.10	Modèle macroscopique	81
3.11	Exemples de cellules élémentaires de milieux poreux périodiques.	83
3.12	Etude du maillage pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en ligne : a) normal, b) fin, c) plus fin, d) très fin.	84
3.13	Etude du maillage pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en quinconce : a) normal, b) fin, c) plus fin, d) très fin.	85
3.14	Etude du maillage pour un réseau de cylindres de section carrée. Cas de l'arrangement en ligne : a) normal, b) fin, c) plus fin, d) très fin.	86
3.15	Écoulement à travers un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en ligne : a) champs de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champs de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1, r/d = 0.4, (p^{(1)})_{max} = 6.086 \times 10^{-7} Pa, (\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 3.804 \times 10^{-9} (m/s), (u^{(0)})_{max} = 3.804 \times 10^{-9} (m/s), (v^{(0)})_{max} = 6.468 \times 10^{-10} (m/s)$).	88
3.16	Écoulement à travers un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en quinconce : a) champs de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champs de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1, r/d = 0.5, (p^{(1)})_{max} = 4.10 \times 10^{-7} Pa, (\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 1.745 \times 10^{-9} (m/s), (u^{(0)})_{max} = 1.59 \times 10^{-9} (m/s), (v^{(0)})_{max} = 7.232 \times 10^{-10} (m/s)$).	89
3.17	Écoulement à travers un réseau de cylindres de section carré. Cas de l'arrangement en ligne : a) champs de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champs de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1, r/d = 0.5, (p^{(1)})_{max} = 7.936 \times 10^{-7} Pa, (\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 1.953 \times 10^{-9} (m/s), (u^{(0)})_{max} = 1.953 \times 10^{-9} (m/s), (v^{(0)})_{max} = 2.872 \times 10^{-10} (m/s)$).	90
3.18	Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers un réseau de cylindres. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).	91
3.19	Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers un réseau de barres à section carrée. Cas de l'arrangement en ligne (c).	91
3.20	Exemples de maillages pour un réseau de cylindre (a,b) et de barre carrée (c) : a) arrangement en ligne, b) arrangement en quinconce, c) arrangement en ligne.	92
3.21	Champs microscopique de la vitesse $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$ pour un réseau de cylindre (a,b) et de barre carrée (c) : a) arrangement en ligne ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.146 \times 10^{-9} (m/s)$), b) arrangement en quinconce ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.592 \times 10^{-9} (m/s)$), c) arrangement en ligne ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.985 \times 10^{-9} (m/s)$) ($\mathbf{G} = e_3, r/d = 0.5$).	92
3.22	Perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de cylindre de section circulaire. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).	93
3.23	Perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de cylindres de section carré. Cas de l'arrangement en ligne (c).	93
3.24	Géométrie de la matrice poreuse	93
3.25	Domaine physique simulé (cas 2D) et conditions thermiques appliquées sur les surfaces de symétrie pour calculer les conductivités de dispersion longitudinale (a) et transverse (b).	95
3.26	Champ de vitesse \mathbf{u} en régime dynamique établi.	96

3.27	Champ de température pour le cas longitudinal en régime thermique établi.	96
3.28	Champ de température pour le cas transverse en régime thermique établi.	97
3.29	Champ de température au sein d'une seule cellule pour le cas longitudinal en régime thermique établi.	97
3.30	Champ de température au sein d'une seule cellule pour le cas transverse en régime thermique établi.	97
3.31	Comparaison des dispersions longitudinale et transverse avec celles données par Kuwahara et al., 1999 [45] et Pedras et al., 2008 [60].	98
3.32	Volume élémentaire représentatif (VER) d'empilements de sphères : a) cubique simple (CS), b) cubique centrée (CC), c) cubique à face centrée (CFC), d) hexagonal (HEXA).	99
3.33	Perméabilité normalisée $K/4d^2$ pour des réseaux cubique simple (a) et cubique centré (b).	100
3.34	Perméabilité normalisée $K/4d^2$ pour un réseau cubique à face centrée (c).	100
3.35	Domaine de calcul de réseaux cubiques : a) cubique simple (CS), $\varepsilon = 0.48$; b) cubique centré (CC), $\varepsilon = 0.32$; c) cubique à face centrée (CFC), $\varepsilon = 0.26$; d) hexagonal (HEXA), $\varepsilon = 0.26$.	101
3.36	Exemple de maillage : a) 1/4 cubique simple (CS); b) 1/4 cubique centré (CC); c) 1/4 cubique à face centrée (CFC); d) 1/3 hexagonal (HEXA).	102
3.37	Écoulement à travers un réseau cubique simple (CS) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0, 48$).	104
3.38	Écoulement à travers un réseau cubique centré (CC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0, 32$).	105
3.39	Écoulement à travers un réseau cubique à face centrée (CFC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0, 26$).	106
3.40	Écoulement à travers un réseau hexagonal (HEXA) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3$, $\varepsilon = 0, 26$).	107
3.41	a) Volume élémentaire représentatif (VER) périodique (porosité, $\varepsilon = 0, 784$); b) Domaine de calcul d'un cube de porosité $\varepsilon = 0, 784$.	109
3.42	Champ de vitesse \mathbf{u} complètement symétrique.	110
3.43	Géométrie étudiée : conditions de symétrie dans les direction transverses, espacement entre cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0, 271$.	110
3.44	Dispersion longitudinale en fonction du nombre de Péclet.	111
3.45	Dispersion transverse en fonction du nombre de Péclet.	111
4.1	Géométrie étudiée.	121
4.2	Champ microscopique de vitesse.	122
4.3	Écoulement d'un fluide à travers une micro-conduite avec des parois (1D) : a) exemple de maillage; b) champ de pression p ; c) composante de la vitesse u ; d) composante de la vitesse v .	123
4.4	Domaine physique.	124
4.5	Champs de vitesse pour le modèle périodique.	125
4.6	Champs de vitesse pour le modèle complet.	125
4.7	Maille élémentaire 2D.	125

4.8	Écoulement à travers un réseau de cylindres : cas de l'arrangement en ligne a) champ de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champ de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1, r/d = 0.4, (p^{(1)})_{max} = 6.161 \times 10^{-7} Pa, (\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.75 \times 10^{-9} (m/s), (u^{(0)})_{max} = 4.75 \times 10^{-9} (m/s), (v^{(0)})_{max} = 9.121 \times 10^{-10} (m/s)$).	127
4.9	Écoulement à travers un réseau de cylindres : cas de l'arrangement en quinconce a) champ de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champ de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1, r/d = 0.5, (p^{(1)})_{max} = 4.612 \times 10^{-7} Pa, (\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.349 \times 10^{-9} (m/s), (u^{(0)})_{max} = 2.214 \times 10^{-9} (m/s), (v^{(0)})_{max} = 8.834 \times 10^{-10} (m/s)$).	128
4.10	Écoulement à travers un réseau de barres à section carrée : cas de l'arrangement en ligne a) champ de pression microscopique $p^{(1)}/(p^{(1)})_{max}$, b) champ de vitesse microscopique $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$, c) composante de vitesse $u^{(0)}/(u^{(0)})_{max}$, d) composante de vitesse $v^{(0)}/(v^{(0)})_{max}$; ($\mathbf{G} = e_1, r/d = 0.5, (p^{(1)})_{max} = 1.504 \times 10^{-6} Pa, (\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 2.416 \times 10^{-9} (m/s), (u^{(0)})_{max} = 2.416 \times 10^{-9} (m/s), (v^{(0)})_{max} = 3.473 \times 10^{-10} (m/s)$).	129
4.11	Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers des réseaux de cylindres. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).	130
4.12	Perméabilité normalisée K_{11}/S pour un écoulement transverse à travers un réseau en ligne de barres à section carrée. Cas des arrangements en ligne (c)	130
4.13	Champs de vitesse $\mathbf{u}^{(0)}/(\mathbf{u}^{(0)})_{max}$ pour des réseaux de cylindre (a,b) et de barre carrée (c) : a) arrangement en ligne ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 6.0646 \times 10^{-9} (m/s)$), b) arrangement en quinconce ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.039 \times 10^{-9} (m/s)$), c) arrangement en ligne ($(\mathbf{u}^{(0)})_{max} = 4.506 \times 10^{-9} (m/s)$) ($\mathbf{G} = e_3, r/d = 0.5$).	131
4.14	Effet du glissement sur la perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de cylindres. Cas des arrangements en ligne (a) et en quinconce (b).	131
4.15	Effet du glissement sur la perméabilité normalisée K_{33}/S pour un écoulement longitudinal à travers un réseau de barres à section carrée. Cas des arrangements en ligne (c).	132
4.16	Volume élémentaire représentatif (VER) des empilements de sphères : a) cubique simple (CS), $\varepsilon = 0.48$; b) cubique centrée (CC), $\varepsilon = 0.32$; c) cubique à face centrée (CFC), $\varepsilon = 0.26$; d) hexagonal (HEXA), $\varepsilon = 0.26$.	134
4.17	Écoulement à travers un réseau cubique simple (CS) : a) champs microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3, \varepsilon = 0, 48$).	135
4.18	Écoulement à travers un réseau cubique centré (CC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3, \varepsilon = 0, 32$).	136
4.19	Écoulement à travers un réseau cubique à face centrée (CFC) : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3, \varepsilon = 0, 26$).	137
4.20	Écoulement à travers un réseau cubique hexagonal : a) champ microscopique de pression $p^{(1)}$, b) composante de vitesse $u^{(0)}$, c) composante de vitesse $v^{(0)}$, d) composante de vitesse $w^{(0)}$; ($\mathbf{G} = e_3, \varepsilon = 0, 26$).	138
4.21	Augmentation relative de la perméabilité en fonction du nombre de Knudsen basé sur le rayon hydraulique.	139

4.22	Maillage optimal (18 255 éléments tétraédriques, 219 454 nombres degrés de liberté), espacement entre cubes de $1\mu m$, $\varepsilon = 0, 271$	140
4.23	Champ de la vitesse \mathbf{u} dans un VER (avec glissement).	141
5.1	Domaine physique simulé (cas 2D) et conditions thermiques appliquées sur les surfaces de symétrie pour calculer les conductivités de dispersion longitudinale (a) et transverse (b).	143
5.2	Mailles élémentaires 2D et 3D.	144
5.3	Géométrie dans le cas 1D	145
5.4	Effet de glissement sur la dispersion longitudinale en fonction de l'épaisseur de la paroi solide(L_s est la longueur de glissement, $L_s = (2 - \sigma)\lambda/\sigma$, et $\sigma = 0, 9$).	145
5.5	Géométrie du modèle macroscopique	146
5.6	Champ de la température du modèle macroscopique.	147
5.7	Domaine simulé pour la condition de non-équilibre thermique local.	148
5.8	Variations axiales des moyennes intrinsèques des températures des phases solide et fluide.	148
5.9	Variation axiale du coefficient de transfert intersticiel solide-fluide.	148
5.10	Maillage optimal d'une structure micro-poreuse 2D (blocs carrés de côtés $a = 4, 5\mu m$, $\varepsilon = 0, 19$).	149
5.11	Champ de vitesse sur toute la longueur de la conduite pour $Pe = 1$ (blocs carrés de côtés $a = 4, 5\mu m$, $\varepsilon = 0, 19$).	150
5.12	Champ de vitesse dans une cellule en régime dynamique établi.	150
5.13	Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas longitudinal et pour $Pe = 1$ (blocs carrés de côtés $a = 4, 5\mu m$, $\varepsilon = 0, 19$).	151
5.14	Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas transverse et pour $Pe = 1$ (blocs carrés de côtés $a = 4, 5\mu m$, $\varepsilon = 0, 19$).	151
5.15	Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10, \sigma = 0, 9$).	152
5.16	Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0, 9$).	153
5.17	Coefficient de la tortuosité longitudinale en fonction du rapport de conductivité, $Pe = 5, \sigma = 0, 9$	153
5.18	Domaine bidimensionnel simulé pour la condition de non équilibre thermique local.	154
5.19	Variations longitudinales des moyennes intrinsèques de température des phases solide, s , et fluide, f	154
5.20	Différence entre les températures moyennes intrinsèques des phases solide, s , et fluide, f , en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f pour différents espacements transverses.	155
5.21	Variation axiale du coefficient de transfert intersticiel solide-fluide.	155
5.22	Géométrie d'un réseau de cylindres en lignes.	155
5.23	Champ de vitesse sans glissement sur toute la longueur du réseau des cylindres pour $Pe = 1$ ($r = 4, 5\mu m$, $\varepsilon = 0, 364$).	156
5.24	Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas longitudinal et pour $Pe = 1$ ($r = 4, 5\mu m$, $\varepsilon = 0, 364$).	157
5.25	Champ de température sur toute la longueur de la conduite pour le cas transverse et pour $Pe = 1$ ($r = 4, 5\mu m$, $\varepsilon = 0, 364$).	157
5.26	Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10, \sigma = 0, 9$).	158

5.27	Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0, 9$).	158
5.28	Un exemple d'une surface ouverte de cylindre.	159
5.29	Coefficients des tortuosités longitudinale (xx) et transverse (zz) en fonction du rapport de conductivité pour deux porosités.	159
5.30	Représentation schématique du domaine de calcul (espacement entre blocs cubiques de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0, 271$).	160
5.31	Le maillage optimal contient 351 371 éléments tétraédriques lorsque l'espacement entre les cubes est de $1 \mu m$, $\varepsilon = 0, 271$; $Pe = 1$.	161
5.32	Champ de température pour le cas longitudinal (espacement entre cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0, 271$; $Pe = 1$).	161
5.33	Champ de température pour le cas transverse (zz) (espacement entre cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0, 271$; $Pe = 1$).	162
5.34	Champ de température pour le cas transverse (yy) (espacement entre cubes de $1 \mu m$, porosité $\varepsilon = 0, 271$; $Pe = 1$).	162
5.35	Effet du glissement sur la dispersion longitudinale en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10, \sigma = 0, 9$).	163
5.36	Effet du glissement sur les dispersions transverses en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f = 10, \sigma = 0, 9$).	163
5.37	Effet du glissement sur la dispersion longitudinale en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0, 9$).	164
5.38	Effet du glissement sur les dispersions transverses en fonction du rapport de conductivité ($Pe = 5, \sigma = 0, 9$).	164
5.39	Conductivité de tortuosité longitudinale en fonction du rapport k_s/k_f pour les deux porosités $\varepsilon = 0, 271$ et $\varepsilon = 0, 784$.	165
5.40	Conductivité de tortuosité transverse en fonction du rapport k_s/k_f pour les deux porosités $\varepsilon = 0, 271$ et $\varepsilon = 0, 784$.	165
5.41	Domaine tridimensionnel simulé pour la condition de non équilibre thermique local.	166
5.42	Variations longitudinales des moyennes intrinsèques des températures des phases solide, s , et fluide, f .	166
5.43	Différence entre les températures moyennes intrinsèques des phases solide, s , et fluide, f , en fonction du rapport de conductivité k_s/k_f pour différents espacements transverses.	167
5.44	Variation axiale du coefficient de transfert intersticiel solide-fluide.	167

Liste des tableaux

1	Classification des régimes de raréfaction pour un écoulement de gaz de type Couette (Colin, 2004 [18]).	12
3.1	Tableau des solutions analytiques pour l'écoulement de Poiseuille plan dans le cas de non-glissement.	76
3.2	Comparaison entre la solution analytique et les 4 façons de calculer numériquement le gradient macroscopique de température (annexe 1) dans le cas de non-glissement.	78
3.3	Résultats numériques pour l'écoulement de Poiseuille plan dans le cas de non-glissement.	78
3.4	Résultats analytiques de l'écoulement de Poiseuille plan avec glissement ($L_s = 7.469 \times 10^{-8}m$).	78
3.5	Comparaison entre les 4 façons (annexe 1) de calculer le gradient macroscopique de température pour le cas de glissement.	79
3.6	Résultats numériques pour un écoulement de Poiseuille plan avec glissement.	79
3.7	Résultats analytiques et numériques pour un écoulement de Poiseuille plan.	80
3.8	Condition d'équilibre thermique local	81
3.9	Perméabilité (sans-glissement) dans le cas 1D	82
3.10	Chute de la pression entre l'entrée et la sortie d'une cellule de $10\mu m$ de longueur	82
3.11	Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en ligne (Figure 3.12).	84
3.12	Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres de section circulaire. Cas de l'arrangement en quinconce (Figure 3.13).	87
3.13	Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres de section carrée. Cas de l'arrangement en ligne (Figure 3.14).	87
3.14	Etude de la convergence spatiale afin de choisir un maillage optimal pour calculer les dispersions longitudinale ($K_{disp})_{xx}$ et transverse ($K_{disp})_{zz}$	95
3.15	Comparaisons de nos résultats avec ceux de Kuwahara et al. [45] et de Pedras et al., 2008 [60] pour deux rapports de conductivité et $1 \leq Pe \leq 100$.	98
3.16	Tableau des paramètres géométriques pour différents arrangements de sphères.	100
3.17	Etude de la convergence spatiale pour le réseau cubique simple (CS).	101
3.18	Etude de la convergence spatiale pour le réseau cubique centré (CC).	102
3.19	Etude de la convergence spatiale pour le réseau cubique à face centrée (CFC).	102
3.20	Etude de la convergence spatiale pour le réseau hexagonal (HEXA).	103
3.21	Perméabilité de Darcy K_D pour différents rayons de sphères R_s et pour les réseaux CS, CC et CFC.	108
3.22	Comparaison entre nos résultats et ceux de Lee, 2009 [47], Chapman, 1992 [15] pour différents empilements de sphères de rayon $R_s = 1 mm$	109
3.23	Perméabilités pour des espacements entre cubes de $1 \mu m$ et de $4 \mu m$	110

4.1	Perméabilité sans glissement, K_D , et avec glissement, K_G	124
4.2	Comparaison des perméabilités entre modèle complet et modèle périodique.	125
4.3	Effet du glissement sur la perméabilité pour différentes porosités (ou de Kn) et pour deux valeurs du coefficient d'accommodation.	125
4.4	Perméabilité de Darcy K pour différents rayons de sphères R_s associés aux empilements CS, CC et CFC.	139
4.5	Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cubes.	140
4.6	Effet du glissement sur la perméabilité pour des espacements entre cubes de $1 \mu m$ et de $4 \mu m$	140
5.1	Condition d'équilibre thermique local (température en K).	146
5.2	Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cylindres, espacement entre les cylindres de $1 \mu m$, rayon de cylindre $r = 4,5 \mu m$, $\varepsilon = 0,364$; $Pe = 1$	156
5.3	Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cubes, espacement entre les cubes de $1 \mu m$, $\varepsilon = 0,271$; $Pe = 1$	160
5.4	Etude de la convergence spatiale pour un réseau de cubes, espacement entre les cubes de $4 \mu m$, $\varepsilon = 0,784$; $Pe = 1$	160