



HAL
open science

Modélisation avancée des phénomènes de transport dans les milieux poreux granulaires

Aboubacar Djibo Soumana

► **To cite this version:**

Aboubacar Djibo Soumana. Modélisation avancée des phénomènes de transport dans les milieux poreux granulaires. Génie des procédés. Université Claude Bernard - Lyon I, 2023. Français. NNT : 2023LYO10135 . tel-04701049

HAL Id: tel-04701049

<https://theses.hal.science/tel-04701049v1>

Submitted on 18 Sep 2024

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.

**THÈSE de DOCTORAT DE
L'UNIVERSITÉ CLAUDE BERNARD LYON 1**
École Doctorale N°206
Chimie (Chimie, Procédés, Environnement)

Discipline : Génie des Procédés

Soutenue publiquement le 19/07/2023, par :

Aboubacar Djibo Soumana

**Modélisation avancée des
phénomènes de transport dans les
milieux poreux granulaires**

Devant le jury composé de :

PORTHA Jean-François

Maître de Conférences, Université de Lorraine

KOTYCZKA Paul

Maître de Conférences, Université Technique de
Munich

JULCOUR Carine

Directrice de Recherche CNRS, INP Toulouse

JALLUT Christian

Professeur des Universités, Université Claude
Bernard Lyon 1

LEFEVRE Laurent

Professeur des Universités, INP Grenoble

PITault Isabelle

Chargée de Recherche CNRS, Université Claude
Bernard Lyon 1

ZANOTA Marie-Line

Ingénieure de Recherche, CPE Lyon

Rapporteur

Rapporteur

Examinatrice

Président du jury

Examineur

Directrice de thèse

Invitée

Co-encadrante

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier sincèrement ma directrice de thèse Isabelle PITAULT, mon co-directeur de thèse Bernhard MASCHKE et mon encadrante Marie-Line ZANOTA, pour leur disponibilité, leurs conseils, leurs écoutes et les réunions régulières tout au long ma thèse au cours desquelles j'ai énormément appris à leurs côtés. Je leur exprime ma plus grande reconnaissance pour leur bienveillance à mon égard aussi bien du point de vue scientifique que du point de vue humain.

Je remercie Maxime POULLEAU, le stagiaire qui a construit les empilements numériques, que j'ai utilisés au cours de ma thèse, avec le logiciel `liggths`; Haithem LOUATI et Tobias SCHEUERMANN pour avoir programmé la base des programmes (Python) que j'ai utilisé pour faire mes simulations; Jérôme VICENTE qui nous a donné accès au logiciel `iMorph` qu'il a créé avec ses collègues du laboratoire IUSTI de Polytech Marseille. Ils ont tous contribué à l'aboutissement cette thèse.

J'adresse mes remerciements aux Docteurs Jean-François PORTHA et Paul KOTYCZKA, pour avoir accepté d'être rapporteurs et membres du jury de ma thèse. Je remercie le Professeur Christian JALLUT pour avoir accepté de présider le jury de ma thèse ainsi que le Docteur Carine JULCOUR et le Professeur Laurent LEFEVRE pour leur participation en tant que membres du jury.

Je voudrais aussi remercier les Docteurs Boussad HAMROUN et Claudia COGNE pour avoir accepté de participer aux comités de suivi de thèse pour examiner l'avancement de ma thèse à la fin de mes première et deuxième années de thèse.

Je remercie tout le personnel permanent, particulièrement la Directrice du laboratoire, Professeure Stéphanie BRIANÇON pour m'avoir accueilli au sein du LAGEPP, Nadia CHAPEL pour l'accompagnement administratif, Olivier GARRIGUES pour le support informatique, Jean-Pierre VALOUR et Maria José PEREZ RODRIGUEZ pour le support technique. Je remercie également l'équipe DYCOOP pour le temps passé à vos côtés, j'ai beaucoup apprécié ces moments, notamment les rencontres et réunions organisées au cours desquelles j'ai beaucoup appris tant du point de vue scientifique que relationnel. Vous avez tous contribué à la concrétisation de cette thèse.

Je remercie aussi les post-docs, les doctorants et les stagiaires avec lesquels j'ai passé de très bons moments de convivialité. J'ai une pensée spéciale pour mes collègues du bureau, notamment Barbara, Haithem, Jean, Léa et Mohammad.

Enfin, je remercie ma famille (spécialement mes parents, ma femme Mariama et ma tante Moumeye Abdou et toute sa famille dont Abdouramane qui était en collocation avec moi pendant la deuxième année ma thèse) et mes amis (dont Mahamadou, Tidjani, leurs familles et Abdoulawahab) qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de cette thèse. Je leur adresse ma reconnaissance et toute ma gratitude.

Résumé

La modélisation des phénomènes de transport dans les milieux poreux granulaires, notamment les réacteurs à lits fixes catalytiques, a été abordée dans la littérature de deux manières : par une représentation des empilements de particules comme un (ou deux) milieu pseudo-continu auquel on attribue une porosité constante (ou variable) ou par des méthodes de type mécanique des fluides prenant en compte chaque particule dans le lit. Si la première méthode a été validée pour les réacteurs de grand diamètre, elle donne des résultats approximatifs, voire erronés pour les réacteurs de faible diamètre. Quant à la seconde méthode, bien qu'adaptée aux réacteurs de faible diamètre, elle nécessite de grande capacité de calcul.

Cette thèse propose une nouvelle méthode de modélisation des phénomènes de transport dans les lits fixes. Elle est basée sur une représentation des phases, supposées continues, par des graphes et une écriture structurée des bilans par des systèmes hamiltoniens à port. Ainsi, le lit est représenté par trois graphes : un graphe pour la phase solide (empilement des particules solides), un graphe pour la phase fluide (réseau de pores entre les particules) et un graphe pour les échanges entre les deux phases. Les bilans, écrits habituellement sous forme d'équations différentielles du second degré, sont formulés sous forme d'équations différentielles du premier degré. Ces dernières sont structurées sous forme d'un système pseudo-hamiltonien à port.

Pour représenter le lit granulaire par des graphes, la phase solide est discrétisée en considérant chaque particule comme un élément discret. Quant à la phase fluide, elle est définie utilisant les lois de Plateau qui construisent les éléments discrets de cette phase à partir de ceux de la phase solide (4 billes adjacentes forment une cellule fluide, 3 billes adjacentes forment une connexion entre deux cellules fluides). L'interconnexion des éléments discrets de chaque phase forme un graphe. Le troisième graphe est construit à partir de l'interconnexion des éléments discrets de la phase solide avec ceux de la phase fluide. Les matrices d'incidences associées aux graphes sont la base de l'écriture du système pseudo-hamiltonien à port discret. Le système est dit pseudo-hamiltonien à port, car la matrice globale associée est certes antisymétrique, mais le produit des variables de flux et d'effort ne dérive pas d'une fonction thermodynamique. Pour mettre en application notre modèle, plusieurs empilements numériques de billes sphériques, physiquement cohérents, ont été construits avec la méthode des éléments discrets (Discrete Element Method, DEM). Ils ont fait ensuite l'objet d'un traitement d'images pour en extraire les graphes et les propriétés géométriques globales telles que la porosité et la surface spécifique des lits, et les propriétés locales telles que les numéros, les coordonnées, les volumes et les surfaces des nœuds et les surfaces de contact et les distances entre les nœuds voisins. L'étude de l'effet de la résolution des images a montré un impact principalement sur la surface de contact entre les particules solides et la surface spécifique dans le lit qu'il est important de considérer dans les transferts de chaleur.

La méthode de modélisation a été éprouvée sur la simulation de la dynamique de la conduction thermique dans les empilements numériques. Les résultats ont montré que le modèle était capable de mettre en évidence les caractères hétérogène et anisotrope du milieu. L'effet de paramètres physiques, tels que le coefficient d'échange entre les billes et la phase fluide et la diffusivité thermique des phases, a été étudié afin de mettre en évidence la sensibilité du modèle. Enfin, l'ajout de termes sources sur certaines billes a montré qu'il est possible de simuler l'effet de points chauds et permettra de prendre en compte à termes les réactions chimiques.

Enfin, le code développé a permis de simuler un empilement d'environ 10 000 nœuds (solide et fluide).

Mots clés : Modélisation, milieux poreux, système hamiltonien à port, graphes, phénomènes de transport, conduction thermique.

Abstract

The modeling of transport phenomena in granular porous media, especially catalytic fixed bed reactors, has been approached in the literature in two ways : by representing particle packings as one (or two) pseudo-continuous media to which a constant (or variable) porosity is assigned, or by fluid mechanics type methods taking into account each particle in the bed. If the first method has been validated for large diameter reactors, it gives approximate or even erroneous results for small diameter reactors. As for the second method, although adapted to small diameter reactors, it requires a large computational capacity.

This thesis proposes a new method for modeling transport phenomena in fixed beds. It is based on a representation of the phases, supposed to be continuous, by graphs and a structured writing of the balance equations by port Hamiltonian systems. Thus, the bed is represented by three graphs : a graph for the solid phase (packing of solid particles), a graph for the fluid phase (network of pores between particles) and a graph for the exchanges between the two phases. The balance equations, usually written as second order differential equations, are formulated as first order differential equations. The latter are structured in the form of a port pseudo-Hamiltonian system.

To represent the granular bed by graphs, the solid phase is discretized by considering each particle as a discrete element. As for the fluid phase, it is defined using Plateau's laws which build the discrete elements of this phase from those of the solid phase (4 adjacent beads form a fluid cell, 3 adjacent beads form a connection between two fluid cells). The interconnection of the discrete elements of each phase forms a graph. The third graph is built from the interconnection of the discrete elements of the solid phase with those of the fluid phase. The incidence matrices associated with the graphs are the basis for writing the discrete port pseudo-Hamiltonian system. The system is said to be port pseudo-Hamiltonian because the associated global matrix is indeed antisymmetric but the product of the flow and effort variables does not derive from a thermodynamic function. To implement our model, several numerical packings of spherical beads, physically coherent, have been built with the Discrete Element Method (DEM). They were then subjected to image processing to extract graphs and global geometric properties such as porosity and specific surface area of the beds, and local properties such as numbers, coordinates, volumes and surfaces of the nodes and contact surfaces and distances between neighboring nodes. The study of the effect of image resolution showed an impact mainly on the contact area between solid particles and the specific surface area in the bed that is important to consider in heat transfers.

The modeling method was tested on the simulation of heat conduction dynamics in numerical packings. The results showed that the model is able to highlight the heterogeneous and anisotropic character of the medium. The effect of physical parameters, such as the exchange coefficient between the beads and the fluid phase and the thermal diffusivity of the phases, was studied to highlight the sensitivity of the model. Finally, the addition of source terms on some beads has shown that it is possible to simulate the effect of hot spots and will allow taking into account chemical reactions in the future. Finally, the developed code has allowed to simulate a packing of about 10 000 nodes (solid and fluid).

Keywords : Modeling, porous media, port Hamiltonian system, graphs, transport phenomena, thermal conduction.

Table des matières

Remerciements	iii
Résumé	iv
Nomenclature	xvii
I Introduction générale	1
II État de l'art	5
II.1 Introduction	5
II.2 Modèles de représentation des lits fixes	5
II.2.1 Représentation des phases dans les lits granulaires	7
II.2.2 Échelle de représentation des phases dans les lits granulaires	8
II.2.2.1 Échelle de représentation de la phase solide	8
II.2.2.2 Échelle de représentation de la phase fluide	9
II.3 Modèles stationnaires de lit continu ou pseudo-homogènes	10
II.3.1 Modèles de lit continu : approche génie des procédés	10
II.3.2 Modèles de lit continu : approche Mécanique des fluides numériques . .	13
II.4 Modèles stationnaires de lit hétérogènes	14
II.4.1 Modèles de lit hétérogènes : approche génie des procédés	15
II.4.2 Modèles de lit hétérogènes : approche Mécanique des fluides numériques ou CFD	17
II.5 Paramètres physiques des modèles des lits fixes	20
II.5.1 Porosité	20
II.5.2 Nombre moyen de voisins par particule dans le lit	22
II.5.3 Propriétés effectives	23
II.5.3.1 Transfert de chaleur	23
II.5.3.2 Transport de matière	28
II.6 Modèles stationnaires de lit hétérogènes de type Réseaux de pores et/ou de particules	30
II.7 Autres milieux hétérogènes représentés par des réseaux ou graphes	34
II.8 Conclusion	36
	ix

TABLE DES MATIÈRES

III Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port	37
III.1 Introduction	37
III.2 Système Hamiltonien à Port pour les milieux homogènes	37
III.2.1 Systèmes hamiltoniens à port pour les systèmes à paramètres distribués	38
III.2.1.1 Une définition sommaire des systèmes hamiltoniens à port . .	38
III.2.1.2 Formulation hamiltonienne à port de la conduction de chaleur	41
III.2.1.2.1 Formulation entropique	41
III.2.1.2.2 Définition de l'interface du système avec son environ-	
nement	42
III.2.1.3 Formulation pseudo-hamiltonienne de la conduction de chaleur	44
III.2.2 Systèmes hamiltoniens à port définis sur des graphes et équations de	
bilan discrètes.	44
III.2.2.1 Système hamiltonien à port défini sur un graphe	45
III.2.2.2 Conduction de chaleur formulée sur un 3-complexe	48
III.2.2.3 Conduction de chaleur formulée sur un 1-complexe	50
III.3 Système Pseudo-Hamiltonien à Port pour les milieux hétérogènes	50
III.3.1 Discrétisation d'un lit de particules à l'aide de trois graphes	53
III.3.1.1 Graphe de la phase solide	54
III.3.1.2 Graphe de la phase fluide	56
III.3.1.3 Graphe de transport entre les phases solide et fluide	58
III.3.2 Équations de bilan d'énergie pour un milieu hétérogène composé de 2	
phases	59
III.3.3 Bilans d'énergie discrets pour le milieu hétérogène	59
III.3.4 Formulation du système pseudo-hamiltonien à port discret pour les lits	
granulaires	62
III.4 Conclusion	65
IV Graphes de milieux granulaires : outils et méthodes	67
IV.1 Introduction	67
IV.2 Représentation numérique 3D d'un empilement réel	67
IV.3 Construction 3D des empilements numériques par la modélisation DEM (Dis-	
cret Element Method)	69
IV.3.1 Simulation d'empilements numériques avec <i>LIGGGHTS</i> ®	69
IV.3.2 Génération d'images pour la caractérisation des empilements numé-	
riques générés par la méthode DEM	71
IV.3.3 Validation des simulations des empilements numériques	71
IV.3.3.1 Calcul des porosités globale, radiale et axiale	71
IV.3.3.2 Calcul du nombre de voisins pour chaque bille	72
IV.3.3.3 Comparaison empilements numériques et réels	73
IV.3.3.3.1 Validation en utilisant les corrélations de la littérature :	
IV.3.3.3.2 Validation en utilisant l'empilement tomographié . . .	77
IV.4 Analyse d'images et extraction des données géométriques des empilements . . .	78
IV.4.1 Les étapes de traitement des images avec le logiciel <i>iMorph</i>	79

TABLE DES MATIÈRES

IV.4.2	Influence de la résolution des images	81
IV.5	Construction des graphes	84
IV.5.1	Graphes issus du logiciel <i>Imorph</i>	85
IV.5.2	Extraction et construction des vecteurs et matrices d'incidence du système algébro-différentiel	86
IV.6	Propriétés géométriques des éléments discrets du lit	87
IV.6.1	Calcul des distances entre nœuds	88
IV.6.2	Calcul des surfaces d'interface	88
IV.7	Méthodes de résolution du système pseudo hamiltonien à port	90
IV.8	Conclusion	91
V	Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant	93
V.1	Introduction	93
V.2	Paramètres du modèle et caractéristiques des empilements	93
V.2.1	Paramètres du modèle	93
V.2.2	Caractéristiques des empilements numériques étudiés	95
V.2.3	Résumé des paramètres des simulations	96
V.3	Simulation de la conduction thermique dans l'empilement N°5	97
V.3.1	Comportement dynamique général	99
V.3.2	Distributions de températures à différents instants t dans un plan xz ($y = 50$ mm)	100
V.3.3	Distributions de températures à différents temps t dans un plan xy 2D ($z = 52,5$ mm)	102
V.3.4	Profils axial et radial de températures en régime stationnaire	103
V.3.5	Comparaison des comportements dynamiques des nœuds de phases différentes situés à un même rayon ou à une même hauteur	104
V.3.5.1	Comportement dynamique des nœuds situés sur un même rayon	105
V.3.5.2	Comportement dynamique des nœuds situés sur une même section	106
V.3.6	Analyse des profils dynamiques de température pour un nœud solide et ses voisins des deux phases	108
V.4	Effet de la surface de contact entre les billes pour l'empilement N°5	110
V.5	Effet des paramètres physiques	113
V.5.1	Effet du coefficient d'échange de chaleur entre les particules et le fluide .	113
V.5.2	Effet de la diffusivité thermique du fluide	115
V.6	Effet du rapport du diamètre du tube sur le diamètre des particules	117
V.7	Ajout d'une puissance sur quelques billes dans le lit	121
V.8	Conclusion	123
VI	Conclusion générale et perspectives	125
A	Paramètres et résultats des calculs de traitement d'images	141
A.1	Effet de la taille des voxels	141
A.2	Effet du rapport dt/dp	142

TABLE DES MATIÈRES

B Profils radiaux et axiaux de températures en régime stationnaire	145
C Exemple de construction de matrice d'incidence	149

Table des figures

II.1	Profils externes et internes de concentration et de température (qualitatifs) . . .	8
II.2	Deux approches CFD (a) et (b) pour la simulation d'un écoulement dans un lit fixe granulaire (inspiré de [20])	14
II.3	Représentation du traitement local pour supprimer le point de contact entre les particules	18
II.4	Représentation du maillage non structuré de la surface des particules sphériques	19
II.5	Comparaison entre un modèle de prédiction de MUELLER [33] et des données expérimentales de BENENATI et BROSILOW [53] pour la variation radiale de la porosité dans un lit : $\frac{d_t}{d_p} = 20, 3$	21
II.6	Modèle «Multi-sphere Unit Cell» pour des particules sans contact avec la paroi (inspiré de [14])	26
II.7	Illustration de la représentation de la conduction thermique entre les particules (inspiré de [85])	33
II.8	A) Représentation schématique du transport de chaleur sur un volume contrôle (\hat{v}_i) et force motrice de la différence de température entre deux nœuds. B) Représentation schématique du transfert entre deux phases solide et fluide. Images reproduites de [7] (John Wiley and sons Licence Agreement 5637531449266) . . .	35
III.1	Circuit composé de deux inductances et un condensateur en parallèle avec source de tension	39
III.2	Circuit RLC dérivé du circuit III.1 où la source est remplacée par une résistance.	40
III.3	Circuit RC avec noeud d'interaction.	45
III.4	Empilements (a) réel et (b) numérique de particules sphériques	52
III.5	Représentation d'un empilement de sphères en 2D traversé par un fluide du bas vers le haut. Points rouges = nœuds solides. Points verts = nœuds fluides. . . .	54
III.6	Graphe de la phase solide pour l'empilement de sphères en 2D de la figure III.5.	55
III.7	Graphe de la phase fluide pour l'empilement de sphères en 2D de la figure III.5	57
III.8	Graphe de couplage	58
IV.1	Image 2D d'une coupe d'un empilement de billes de verre dans un cylindre de 6 cm de diamètre obtenue par tomographie RX.	68
IV.2	Volumes élémentaires pour la détermination des porosités axiales et radiales . . .	72

TABLE DES FIGURES

IV.3	Comparaison du profil de porosité radiale de l'empilement N°1 et du profil de la porosité radiale obtenue avec la corrélation de Martin (équation IV.5).	75
IV.4	Comparaison du profil de porosité radiale de l'empilement N°2 et du profil de la porosité radiale obtenue avec la corrélation de Martin (équation IV.5).	75
IV.5	Comparaison des corrélations du nombre de coordinations en fonction de la porosité des empilements. Les étoiles bleues correspondent aux empilements N°1 et N°2. Le graphe est issu de [13].	77
IV.6	Comparaison entre la porosité radiale de l'empilement numérique n°3 construit avec <i>LIGGGHTS</i> ® et les porosités radiales obtenues à partir de l'empilement réel	78
IV.7	Surfaces des particules dans une ROI d'empilement numérique construite avec une taille de voxel de (a) 150 μm et (b) de 750 μm	81
IV.8	Représentation graphique en 2D de l'effet de la taille de pixel sur le nombre de voisins.	82
IV.9	Représentation graphique en 2D de l'effet de la taille de pixel sur la surface spécifique.	82
IV.10	Évolution de la porosité globale et de la surface spécifique en fonction de la taille de voxel dans une ROI.	84
IV.11(a)	Reconstruction 3D et (b) graphe de la phase solide d'une région d'intérêt (ROI) cylindrique de 5,72 cm de diamètre et 5,6 cm de hauteur de l'empilement réel de particules sphériques de 5 mm de diamètre.	86
IV.12	Représentation illustrative 2D d'un lit de particules sphériques et les noeuds associés aux éléments discrets	88
V.1	Conditions (a) initiales (b)aux limites	97
V.2	Comportement dynamique général des températures pour trois noeuds de la phase solide et trois noeuds de la phase fluide.	99
V.3	Distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide	100
V.4	Évolution locale de la distribution de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide	101
V.5	Évolution globale de la distribution de la température sur le plan xy à $z = 52,5 \pm 2,5 \text{ mm}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide	102
V.6	Distribution de la température sur le plan xy à $z = 52,5 \pm 2,5 \text{ mm}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide ($t = 1000\text{s}$)	103
V.7	Profils de températures en régime stationnaire ($t=20079\text{s}$) : (a) radial et (b) axial104	
V.8	Positions de noeuds des deux phases (a) trois noeuds à une hauteur constante $z = 27 \pm 2,5 \text{ mm}$ (b) trois noeuds à un rayon constant ($r = 17,5 \pm 2,5 \text{ mm}$) et le noeud solide N°5632 situé à $r = 2 \text{ mm}$ et $z = 64 \text{ mm}$	105
V.9	Évolution temporelle des températures des trois noeuds solides et des trois noeuds fluides se trouvant au même rayon ($r = 17,5 \pm 2,5 \text{ mm}$) à $z = 29,5 \text{ mm}$, $z = 104,5 \text{ mm}$ et $z = 188,0 \text{ mm}$ (a) profils de toute la gamme de temps (b) 1000 premières secondes (c) zone stationnaire	106

TABLE DES FIGURES

V.10	Évolution temporelle des températures des trois nœuds solides et des trois nœuds fluides se trouvant sur une même section $z = 27 \pm 2,5 \text{ mm}$ à $r = 8 \text{ mm}$, $r = 19 \text{ mm}$ et $r = 45 \text{ mm}$: (a) profils de toute la gamme de temps (b) 4219 premières secondes (c) zone stationnaire	107
V.11	Profils temporels de température du nœud N°5632 de la phase solide ($r = 2 \text{ mm}$ et $z = 64 \text{ mm}$ et ses voisins des deux phases	109
V.12	Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour les simulations N°1 ($A = A_{1ij}$) et N°2 ($A = A_{1ij}/4$) à $t = 20080 \text{ s}$ et la simulation N°2 à $t = 70126 \text{ s}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide	111
V.13	Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 ($A = A_{1ij}$) entre 0 et 48176s et N°2 ($A = A_{1ij}/4$) entre 0 et 70126 s	112
V.14	Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 ($A = A_{1ij}$) et N°2 ($A = A_{1ij}/4$) entre 0 et 48176s	112
V.15	Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour les simulations N°1 et N°3 à $t = 20085 \pm 5 \text{ s}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide	114
V.16	Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 ($h^{sf} = 5,2 \text{ W/m}^2$) et N°3 ($h^{sf} = 1,04 \text{ W/m}^2$) jusqu'à l'état stationnaire	114
V.17	Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour les simulations N°1 et N°4 à $t = 20085 \pm 6 \text{ s}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide	116
V.18	Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 (air comme phase fluide) et N°4 (CO_2 comme phase fluide)	116
V.19	Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour la simulations N°1 de l'empilement N°5 ($d_p = 10 \text{ mm}$) et la simulation N°6 de l'empilement N°6 ($d_p = 15 \text{ mm}$)	118
V.20	Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour la simulations N°1 de l'empilement N°5 et la simulation N°6 de l'empilement N°6 à $t = 20080 \text{ s}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide	118
V.21	Profils de températures en régime stationnaire pour les simulations N°1 et N°6 : (a) radial et (b) axial	119
V.22	Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour la simulation N°5 à différents temps : ● pour le solide et ◇ pour le fluide	122
B.1	Profils radiaux de températures suivant r à z constant ($\pm 5 \text{ mm}$) en régime stationnaire ($t = 20086 \text{ s}$) pour la simulation n°1	146
B.2	Profils axiaux de températures suivant z à rayon constant ($\pm 2,5 \text{ mm}$) en régime stationnaire ($t = 20086 \text{ s}$)	147

TABLE DES FIGURES

C.1	Graphe de solde illustratif construit à partir d'un empilement (2D)	149
-----	---	-----

Nomenclature

Lettres romaines

A	Interface entre deux éléments discrets [m^2]	87
a_c	Aire spécifique d'interface solide-fluide par unité de volume du lit [m^{-1}]	11
a_c	Aire spécifique d'interface solide/fluide par m^3 de réacteur [m^{-1}]	15
A_p	Surface d'une particule solide [m^2]	27
Bi_h	Nombre de Biot à la paroi du lit [-]	29
c_∞	Concentration molaire loin de la paroi du solide [$mol.m^{-3}$]	9
c_V	Capacité calorifique à volume constant [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]	59
$c_{p,w}$	Concentration molaire à la surface d'une particule solide [$mol.m^{-3}$]	9
C_{pme}	Capacité calorifique massique à l'entrée [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]	11
C_{pm}	Capacité calorifique massique [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]	11
D_m	Coefficient de diffusion moléculaire [$m^2.s^{-1}$]	29
D'_m	Coefficient de diffusion moléculaire apparent [$m^2.s^{-1}$]	29
d_p	Diamètre d'une particule [m]	29
d_t	Diamètre du lit [m]	11
D_{ax}	Coefficient de dispersion axiale [$m^2.s^{-1}$]	11
$D_{e,p}$	Diffusivité effective dans la particule [$m^2.s^{-1}$]	8
D_{er}	Coefficient de dispersion radiale [$m^2.s^{-1}$]	11
d_{ps}	Diamètre d'une sphère ayant la même surface que la particule sphérique [m]	29

NOMENCLATURE

d_{pv}	Diamètre d'une sphère ayant le même volume que la particule sphérique [m]	29
E	Énergie d'activation [$J.mol^{-1}$]	7
\mathcal{F}	Différence de température entre deux éléments discrets voisins [K]	61
\mathcal{F}^f	Vecteur contenant les différences de températures discrètes \mathcal{F}_j^f	62
\mathcal{F}^{sf}	Vecteur contenant les différences de températures discrètes \mathcal{F}_{ij}^{sf}	62
\mathcal{F}^s	Vecteur contenant les différences de températures discrètes \mathcal{F}_i^s	62
f_k	Facteur de correction non-isotherme [-]	27
F_{1-2}^S, F_{1-2}^L	Facteur de vue du rayonnement des particule 1 par 2 et 2 par 1 [-]	27
f_{ex}	Fraction de résistance externe [-]	7
\bar{h}_{int}	Coefficient de transfert thermique global du lit [$W.m^{-2}.K^{-1}$]	11
H	Hauteur du réacteur [m]	11
h^{sf}	Coefficient d'échange thermique à l'interface bille/fluide [$W.m^{-2}.K^{-1}$]	95
h_B^{sf}	Coefficient d'échange thermique à l'interface bille/fluide aux frontières du lit [$W.m^{-2}.K^{-1}$]	97
h_p	Coefficient d'échange thermique externe [$W.m^{-2}.K^{-1}$]	9
h_{int}^{sf}	Coefficient de Transfert thermique à la paroi du lit [$W.m^{-2}.K^{-1}$]	11
J_j	Production de l'espèce j [$kg.s^{-1}.m^{-3}$]	11
$\dot{j}_{jp,w}$	Flux de matière de l'espèce j dans le grain [$mol.m^{-2}.s^{-1}$]	17
$\dot{j}_{p,d}$	Flux molaire dû à la diffusion à l'intérieur d'une particule solide [$mol.m^{-2}.s^{-1}$]	9
$\dot{j}_{p,w}$	Flux molaire à travers la couche limite autour d'une particule solide [$mol.m^{-2}.s^{-1}$]	9
$\dot{j}_{p,d}$	Densité de flux de matière par diffusion dans la particule [$mol.m^{-3}.s^{-1}$]	8
k_D	Coefficient de transfert de matière externe [$m.s^{-1}$]	7
k_{Dj}	Coefficient de transfert de matière externe [$m.s^{-1}$]	9
k_{Dj}^0	Coefficient de transfert de matière externe en l'absence de convection [$m.s^{-1}$]	15
L	Taille caractéristique d'une particule solide [m]	11
L_{ik}	Chemin entre les centres des éléments discrets i et k [m]	60
L_{jl}	Chemin entre les centres des éléments discrets j et l [m]	60
M_f, M_e	Matrices définies dans l'équation III.2 [-]	39
\bar{N}_c	Nombre de coordination [-]	27
N_i^f	Nombre de voisins de la phase fluide pour i	61

NOMENCLATURE

N_i^s	Nombre de voisins de la phase solide pour i	61
N_j^f	Nombre de voisins de la phase fluide pour j	61
N_j^s	Nombre de voisins de la phase solide pour j	61
Nu	Nombre de Nusselt [-]	96
P_{source}	Vecteur des puissances (terme source) [W]	121
Pe_a	Nombre de Péclet axial basé sur la taille de particule [-]	10
Pe_L	Nombre de Péclet basé sur le coefficient de dispersion longitudinale ($= \frac{uL}{D_{ax}}$) [-] ...	29
Pe_m	Nombre de Péclet dû aux particules inertes ($= \frac{ud_p}{D_m}$) [-]	29
Pr	Nombre de Prandtl [-]	29
$q_{p,cd}$	Flux de chaleur dû à la conduction à l'intérieur d'une particule solide [$W.m^{-2}$]	9
$q_{p,w}$	Flux de chaleur à travers la couche limite autour d'une particule solide [$W.m^{-2}$]	9
$q_{p,d}$	Densité de flux de chaleur par conduction dans la particule [$W.m^{-2}$]	8
R	Constante des gaz parfaits [$J.mol^{-1}.K^{-1}$]	7
r	Rayon d'un empilement numérique [m]	103
R_λ	Résistance thermique du fluide interstitiel dans les micro-pores en régime de Knudsen [$K.W^{-1}$]	27
r_c	Rayon de la zone de contact entre particules [m]	27
R_G	Résistance thermique du fluide dans les macro-pores [$K.W^{-1}$]	27
R_g	Résistance thermique du fluide interstitiel dans les micro-pores [$K.W^{-1}$]	27
R_s	Résistance thermique au niveau des micro-contacts [$K.W^{-1}$]	27
R_{eq}	Résistance au transfert thermique entre deux demi-particules en contact [$K.W^{-1}$] ..	27
$R_{ext,1,2}$	Résistance externe des deux solides [$K.W^{-1}$]	27
$R_{in,1,2}$	Résistance interne des deux solides [$K.W^{-1}$]	27
$R_{L,1,2}$	Résistance thermique au niveau des macro-contacts [$K.W^{-1}$]	27
$R_{mil,1,2}$	Résistance intermédiaire des deux solides [$K.W^{-1}$]	27
R_{rig}	Résistance thermique dû au contact entre particules [$K.W^{-1}$]	27
Re_p	Nombre de Reynolds calculé avec la longueur caractéristique des particules [-]	29
Re_v	Nombre de Reynolds du lit effectif [-]	13
Re_{ps}	Nombre de Reynolds calculé un diamètre hydraulique égale d_{ps} [-]	27
\bar{T}	Température moyenne à la surface d'une particule [K]	27

NOMENCLATURE

t	Temps [s].....	60
T^f	Vecteur contenant les températures discrètes T_j^f	62
T^s	Vecteur contenant les températures discrètes T_i^s	62
T_e	Température à l'entrée [K]	11
T_q	Température moyenne de l'élément q	60
T_w	Température à la paroi [K]	11
T_{bas}	Température limite du bas du cylindre [°C ou K].....	97
T_{haut}	Température limite du haut du cylindre [°C ou K]	97
$T_{initiale}$	Température initiale dans le lit [K].....	97
$T_{lateral}$	Température limite sur le côté latéral du cylindre [°C ou K].....	97
$T_{p,w}$	Température à la surface d'une particule solide [K]	9
$\langle u_v \rangle$	Vitesse en fût vide moyennée sur une section [$m.s^{-1}$].....	11
u	Vitesse moyenne du fluide dans le milieu poreux [$m.s^{-1}$]	29
U^f	Vecteur contenant les énergies internes discrètes U_j^f	62
U_j^f	L'énergie interne de j [J]	61
U^s	Vecteur contenant les énergies internes discrètes U_i^s	62
U_i^s	L'énergie interne de i [J].....	61
u_v	Vitesse en fût vide [$m.s^{-1}$].....	11
v_i	Volume de l'élément discret i de la phase solide	60
v_j	Volume de l'élément discret j de la phase fluide	60
w_j	Fraction massique de l'espèce j [-]	11
$w_{j\infty}$	Fraction massique de l'espèce j dans le fluide loin du solide [-]	11
w_{je}	Fraction massique de l'espèce j à l'entrée [-]	11
z	Abscisse [m].....	11

Lettres grecques

α_e	Écart réduit de température externe [-]	7
------------	---	---

NOMENCLATURE

ΔH	Enthalpie de réaction [$J.mol^{-1}$]	7
δ_w	Paramètre d'activation[-] défini par (II.2)	7
η_{eff}	Viscosité dynamique effective du lit [$Pa.s$]	13
γ_{lim}	Tolérance inférieure à 1 fixée par l'opérateur [-]	7
λ_f	Conductivité thermique du fluide [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	29
λ_s	Conductivité thermique du solide [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	29
λ_s^*	Conductivité thermique effective du solide [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	29
λ_{ax}^{sf}	Conductivité thermique effective axiale du système fluide-solide [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	11
$\lambda_{e,p}$	Conductivité effective dans la particule [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	8
λ_{er}^f	Conductivité thermique effective radiale du fluide [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	11
λ_{er}^{sf0}	Conductivité thermique effective radiale du système fluide-solide avec le fluide au repos [$W.m^{-2}.K^{-1}$]	121
λ_{er}^{sf}	Conductivité thermique effective radiale du système fluide-solide [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	11
λ_{er}^s	Conductivité thermique effective radiale du solide [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	11
μ_e	Viscosité dynamique du fluide à l'entrée du lit [$Pa.s$]	22
ν	Viscosité cinématique du fluide [$m^2.s^{-1}$]	11
ω_0	Déformation des particules solides aux points de contact [m]	27
∂v_i	Surface de l'élément discret i de la phase solide [m^2]	60
∂v_j	Surface de l'élément discret j de la phase fluide [m^2]	60
Φ^f	Vecteur contenant les puissances thermiques discrètes Φ_{jn}^f	62
Φ^{sf}	Vecteur contenant les puissances thermiques discrètes Φ_{ij}^{sf}	62
Φ^s	Vecteur contenant les puissances thermiques discrètes Φ_{im}^s	62
ϕ_p	Flux de chaleur à la surface du grain [$W.m^{-2}$]	17
ρ	Masse volumique [kg/m^3]	10
σ	Constante de Stephan-Boltzmann pour le rayonnement [$W.m^{-2}.K^{-4}$]	27
ε	Porosité [-]	22
ε_b	Porosité au coeur du lit [-]	22
ξ	Emissivité du solide [-]	24
ζ	Facteur de friction [-]	11

NOMENCLATURE

Indices

<i>e</i>	Référent à l'entrée du lit	10
<i>f</i>	Référent à la phase fluide	59
<i>i</i>	Référent à un élément discret de la phase solide	60
<i>j</i>	Référent à un élément discret de la phase fluide	60
<i>k</i>	Référent à un élément discret de la phase solide	60
<i>l</i>	Référent à un élément discret de la phase fluide	60
<i>s</i>	Référent à la phase solide	59

Chapitre I

Introduction générale

Les réacteurs catalytiques sont des procédés très largement utilisés dans de nombreuses industries, notamment dans le secteur de la chimie et de la pétrochimie. Parmi eux, les lits fixes le sont pour de très nombreuses réactions catalytiques en phase gaz, telles que la synthèse de l'ammoniac, la production de l'hydrogène, la conversion du gaz naturel en gaz de synthèse pour les transformer en carburants liquides, etc. Leur efficacité dépend en grande partie des propriétés des écoulements des réactifs dans le lit fixe catalytique, des interactions entre les réactifs et le catalyseur et de la capacité de l'ensemble à transférer la matière et la chaleur.

La modélisation des phénomènes de transport dans les lits fixes catalytiques est une question de grande importance. En effet, la compréhension de ces phénomènes est essentielle pour améliorer la conception et l'optimisation de ces systèmes. Les modèles de transport qui ont été développés dans le passé ont été largement utilisés pour simuler les performances des réacteurs catalytiques. Cependant, dû aux hypothèses et aux simplifications, ces modèles présentent souvent des limites ne permettant pas de représenter de manière précise les phénomènes physiques impliqués dans les réactions catalytiques. Ainsi, plusieurs modèles de représentation du lit fixe sont rencontrés dans la littérature. Cela va des modèles les plus simples qui considèrent le milieu poreux granulaire comme un milieu pseudo-homogène et lui attribuent des propriétés effectives aux modèles les plus complexes [1-3] dont certains prennent en compte la porosité interne des grains qui constituent le milieu granulaire [4]. Toutes ces représentations présentent aussi bien des avantages que des inconvénients en fonction des phénomènes étudiés. Les modèles simples, qui considèrent le lit comme pseudo-homogène, ont été éprouvés sur des procédés industriels pour les réacteurs de grand diamètre (avec plus de 10 particules sur le diamètre du tube) avec des réactions lentes et fonctionnent bien. Pour chaque application, il est possible de trouver des corrélations qui permettent d'obtenir des résultats acceptables pour la détermination des paramètres effectifs, notamment la conductivité effective ou la diffusivité effective de la matière. Mais ils engendrent souvent des imprécisions de résultats dans certains cas particuliers tels que les réacteurs à lit fixe multitubulaire caractérisés par des tubes très fins (avec moins de 10 particules sur le diamètre du tube) pour lesquels la plupart des corrélations disponibles dans la littérature ne sont pas adéquates, ces réacteurs étant surtout utilisés pour des réactions à thermicité élevée (exothermique ou endothermique) c'est-à-dire qui nécessitent une évacuation ou un apport de chaleur très important. C'est le cas par exemple

Introduction générale

des réactions fortement endothermiques de vaporeformage du méthane pour la production de l'hydrogène ou des réactions exothermiques d'hydrogénation pour le raffinage pétrolier ou d'oxydation sélective de propène en acroléine. Quant aux modèles complexes, ce sont le plus souvent des modèles basés sur la mécanique des fluides numérique (CFD, computational fluid dynamics). S'ils ont été éprouvés depuis longtemps pour des écoulements monophasiques, la modélisation des écoulements dans les milieux granulaires constitue un vrai challenge si l'on veut prendre en compte les caractéristiques de l'empilement et en particulier les effets des points de contact entre les particules sur les écoulements. La précision du calcul des champs de vitesses étant directement en lien avec la finesse du maillage aux points de contact, les capacités de calcul nécessaires pour la modélisation d'un empilement de taille réduite peuvent déjà s'avérer importantes. Par exemple, certains modèles CFD interstitiels ont maillé les lits fixes de manière très serrée jusqu'à faire des milliers de mailles à l'intérieur d'une seule particule. Pour palier ces inconvénients, des simplifications, telles que l'épaississement des points de contact par ajout numérique de voxels solides ou la suppression de matière aux points de contact conduisant à des empilements de billes en «lévitation», ont souvent été utilisées. Cependant, elles n'ont pas permis de dépasser la centaine de billes dans les empilements simulés [5]. De ce fait, les modèles de type CFD sont souvent utilisés pour estimer des paramètres effectifs de propriétés d'empilement qui seront ensuite utilisés dans des modèles simples.

Le développement de modèles de réacteurs plus précis que les modèles simples, mais raisonnablement moins gourmands en termes de capacité de calcul que les modèles CFD, serait donc une avancée cruciale pour l'optimisation des réacteurs catalytiques à lit fixe granulaire fin ($d_t/d_p < 10$ où d_t est le diamètre du tube et d_p est le diamètre des particules). Dans leurs travaux sur la modélisation des phénomènes de transport dans les mousses à cellules ouvertes, SCHEUERMANN et al. [6] et LOUATI et al. [7] ont développé une nouvelle méthode de modélisation basée sur la représentation des phases par des graphes et sur l'écriture des équations de bilans sous forme de systèmes hamiltoniens à ports. Cela permet de prendre en compte la structure des phases de façon assez précise et en particulier l'anisotropie des milieux poreux. Par exemple, pour la structure solide de la mousse, ils ont représenté chaque nœud de la mousse par un nœud de graphe et chaque brin de la mousse par une arête de graphe. Puis, ils ont écrit les bilans d'énergie sur chaque nœud et les flux sur chaque arête en considérant que seuls les nœuds contenaient de la matière et que les sections des brins de mousse étaient les surfaces d'échanges entre les nœuds solides. Cette méthode permet de représenter les milieux poreux en prenant en compte leur hétérogénéité à une échelle intermédiaire entre les modèles simples qui le représente comme un continuum et les modèles CFD qui le représente comme un milieu hétérogène de façon trop détaillée.

Cette thèse a donc pour objectif de développer le même type de modèle que celui proposé par SCHEUERMANN et al. [6] et LOUATI et al. [7] mais de l'appliquer à la modélisation des phénomènes de transport dans les milieux poreux granulaires fins ($d_t/d_p < 10$). La méthode de modélisation va consister à représenter le milieu granulaire par trois graphes : un graphe pour la phase solide, un graphe pour la phase fluide et un graphe pour les échanges entre les deux phases. Les équations de bilans des phénomènes de transport seront écrites de façon structurée sous forme de systèmes hamiltoniens à port. Après un état de l'art détaillé sur la modélisation des milieux poreux, nous présenterons l'écriture des systèmes de bilan sous la forme de systèmes pseudo-hamiltonien à port pour des exemples simples, puis pour les milieux

granulaires. Puis, nous présenterons tous les outils numériques que nous avons utilisés ou mis en place pour parvenir à une simulation fiable des phénomènes de transports dans les milieux biphasiques. Enfin, nous présenterons les résultats de simulation pour un lit type et les effets des différentes propriétés des lits.

Un plan de la thèse plus détaillé est donné ci-dessous.

L'état de l'art se présente en cinq points. Le premier expose les différents types modèles de représentation du lit et les critères pour les différencier. Les second, troisième et cinquième points détaillent respectivement les modèles de lit pseudo-homogène, hétérogène et les modèles de type réseaux (ou graphes). Le quatrième point concerne la présentation des corrélations utilisées pour estimer les paramètres effectifs nécessaires pour les modèles pseudo-homogène et hétérogène et montre que, bien souvent, des concepts de représentation des lits fixes granulaires par des réseaux ont été utilisés pour déterminer les paramètres effectifs.

Dans le Chapitre III, les méthodes mathématiques utilisées pour écrire les équations qui régissent les bilans d'énergie sur un lit fixe rempli de fluide stagnant sous forme de système pseudo-hamiltonien à port sont présentées. Il est subdivisé en deux parties : la première consiste à définir, à l'aide d'une revue bibliographique sélective, les systèmes hamiltoniens à port. La seconde partie concerne la formulation des équations différentielles qui gouvernent la conduction thermique dans le lit fixe sous forme d'un système pseudo-hamiltonien à port discret.

Le Chapitre IV est dédié à la présentation des outils et méthodes que nous avons utilisés : pour construire numériquement des empilements par la méthode des éléments discrets (DEM en anglais, pour Discrete Element Method) , pour construire par traitement d'image les graphes représentant le lit discrétisé, extraire les matrices d'incidences et les propriétés géométriques associées à ces graphes et enfin pour résoudre le système pseudo-hamiltonien à port discret. Une étude a été réalisée pour valider nos empilements numériques en comparant ses propriétés à celles d'empilements réels. L'impact de la résolution des images utilisée pour construire ces empilements sera étudié.

Le Chapitre V présentera les différents empilements étudiés et les résultats des simulations. Nous porterons, dans un premier temps, une attention particulière au comportement global de notre modèle puis nous étudierons les effets des différents paramètres physiques et géométriques. Nous montrerons qu'avec ce nouveau type de modélisation, il est possible d'étudier la distribution de la température pour chaque phase dans tout le lit et de simuler l'évolution dynamique de la température en tout point dans le lit. Nous montrerons aussi que cette méthode de modélisation permet de simuler les effets de points chauds dans un réacteur.

Le dernier chapitre conclura ce travail avec les principaux résultats trouvés et présentera les perspectives envisageables.

Chapitre II

État de l'art

II.1 Introduction

Les réacteurs à lit fixe catalytique sont des milieux poreux hétérogènes constitués d'empilements de particules catalytiques solides, poreuses ou non, immobilisées dans un récipient. Les réacteurs sont le plus souvent cylindriques et les lits sont traversés par des fluides, soit seuls (ou miscibles) (monophasique) ou en mélange (multiphasique). Le mouvement de ces fluides est souvent turbulent surtout pour les réacteurs industriels. Les réacteurs à lit fixe catalytique sont utilisés dans de nombreux procédés de fabrication de produits chimiques ou intermédiaires. Les particules solides sont les catalyseurs qui permettent d'accélérer les réactions chimiques entre les réactifs et ainsi améliorer la performance des réacteurs. En général, les particules solides utilisées sont uniformes (sphériques, cylindriques, anneau. . .) et de même gamme de taille. L'espace occupé par le fluide est appelé porosité, c'est l'espace intergranulaire. Les particules pouvant être poreuses, l'espace intragranulaire constitue alors une seconde échelle de porosité du lit.

Dans la littérature, les réacteurs à lit fixe catalytique ont été largement étudiés, que ce soit expérimentalement ou à l'aide de modèles numériques. Différentes méthodes de modélisation ont été utilisées, ayant toutes, des avantages et des inconvénients qui vont être dépendants des dimensions du réacteur et des dimensions des particules de catalyseurs considérées. Ce sont ces méthodes qui nous ont intéressées dans notre travail de thèse et que nous allons détailler dans la suite.

Après une description générale des modèles de représentation des lits fixes, nous détaillerons les modèles de lit continu ou pseudo-homogènes, les modèles de lit hétérogènes, la détermination des paramètres qui sont utilisés dans ces modèles et les modèles de lit hétérogènes représentés par des réseaux.

II.2 Modèles de représentation des lits fixes

La modélisation, de façon générale, consiste à représenter le plus fidèlement possible le fonctionnement d'un système réel afin d'en analyser son comportement ou sa réaction à une perturbation. Cette représentation peut se faire sous forme d'une maquette, c'est le cas lors-

qu'on veut concevoir un nouveau procédé de taille industrielle. La maquette est construite, à une échelle réduite, suivant les règles de similitude, en se servant des nombres adimensionnels. C'est la technique qui était utilisée avant le développement de la technologie numérique. Mais ce type de modélisation présente deux inconvénients majeurs : le coût élevé et le domaine d'application très réduit du modèle construit. L'approche par des modèles réduits est de moins en moins utilisée, elle cède place aux modèles mathématiques. Ces derniers peuvent servir comme outils de conception, mais aussi pour l'exploitation de résultats expérimentaux d'un système existant.

Pour établir un modèle mathématique, on se base sur deux facteurs clés : l'expérience et la compréhension des lois fondamentales qui régissent le système étudié. TRUONG-MEYER [8] classe les modèles mathématiques utilisés en génie des procédés en quatre catégories :

- Les modèles empiriques établis uniquement à partir des données expérimentales ;
- Les modèles de connaissance pure basés uniquement sur la connaissance théorique du système ;
- Les modèles phénoménologiques qui décrivent certains phénomènes globalement en se basant sur les lois fondamentales de la physique, mais d'autres phénomènes sont représentés de façon empirique, soit pour simplifier le modèle, soit par manque de connaissance ;
- Les modèles «hybrides» qui font intervenir explicitement et simultanément des comportements continus et discrets. Ils consistent à utiliser deux modèles différents pour décrire les différents comportements du même système.

Les deux derniers types de modèles constituent une alternative aux deux premiers. En effet, les modèles empiriques présentent l'avantage d'être facilement et rapidement établis et facilitent également la simulation, mais ils ont l'inconvénient d'être onéreux, de nécessiter une quantité importante de données expérimentales et ont un domaine de validité très limité. Quant aux modèles de connaissance, ils permettent de mieux décrire les phénomènes qui se passent dans le système et leurs couplages, en s'appuyant sur les lois fondamentales de la physique. Ils présentent un certain nombre d'avantages :

- besoin de peu d'expériences ;
- meilleure extrapolabilité ;
- meilleure cohérence ;
- large domaine d'application ;
- peu de paramètres à identifier ;
- facile à réutiliser.

Mais leur temps de développement est souvent très long et dépend du niveau de compréhension et de connaissances du système qu'a le modélisateur.

Pour la modélisation des réacteurs à lits fixes, les modèles rencontrés sont le plus souvent empiriques ou phénoménologiques. Il existe principalement trois grandes familles de phénomènes de transport dans les milieux poreux granulaires : le transport de matière, le transport de quantité de mouvement et le transport d'énergie. À cela s'ajoutent les éventuelles réactions

chimiques. Le développement de ces modèles se base principalement sur les profils de vitesse pour la quantité de mouvement, de concentration pour le transport de matière et de température pour le transport de chaleur. La modélisation consiste à écrire un bilan pour chaque famille de phénomène sur le milieu poreux, ce qui engendre des systèmes d'équations différentielles. Pour résoudre ces équations, on se réfère à une représentation du milieu poreux pour faire la discrétisation et appliquer les méthodes numériques de résolution qui conviennent.

II.2.1 Représentation des phases dans les lits granulaires

Pour décrire les phénomènes qui se passent à l'intérieur du réacteur, les modèles de représentation du lit utilisés sont développés en se basant sur les échanges au niveau de la particule solide. C'est ainsi que les deux approches rencontrées dans la littérature sont distinguées :

- Les modèles pseudo-homogènes ou continus qui consistent à considérer le système fluide-solide comme un continuum et à établir les propriétés effectives du milieu en tenant compte de toutes les phases présentes [9-15]. La dénomination dépend des communautés scientifiques : le terme «pseudo-homogène» est utilisé en génie des procédés alors que «continu» est utilisé en mécanique des fluides.
- Les modèles hétérogènes qui décrivent les phénomènes dans chaque phase séparément et utilisent des équations de fermetures aux interfaces [5, 16, 17]. Dans certains cas, la phase solide est traitée en distinguant chaque particule solide dans le milieu granulaire [5, 17], et éventuellement en prenant en compte la porosité des particules solides.

Deux critères, qui permettent d'estimer approximativement la résistance diffusionnelle de matière à travers la couche limite de fluide autour d'un grain (équation II.1) et la résistance externe au transfert de chaleur (équation II.2), sont utilisés pour choisir entre ces deux types de modèles [18].

$$f_{ex} = \frac{c_{\infty} - c_{p,w}}{c_{\infty}} < 0,05 \quad (\text{II.1})$$

et

$$\delta_w = \frac{E}{RT_{\infty}} \frac{\alpha_e f_{ex}}{1 + \alpha_e f_{ex}}, |\delta_w| < \gamma_{lim} \quad (\text{II.2})$$

où $\alpha_e = \frac{k_D c_{\infty} (-\Delta H)}{h_p T_{\infty}}$

f_{ex} est appelée fraction de résistance externe et γ_{lim} est une tolérance inférieure à 1 fixée par l'opérateur. c_{∞} , $c_{p,w}$ sont les concentrations respectivement dans le fluide loin de la surface du grain et à la surface du grain. T_{∞} est la température dans le fluide loin de la surface du grain, R la constante des gaz parfaits et E l'énergie d'activation. k_D est le coefficient de transfert de matière externe, ΔH l'enthalpie de la réaction chimique considérée et h_p est coefficient d'échange thermique à l'interface du grain.

II.2.2 Échelle de représentation des phases dans les lits granulaires

II.2.2.1 Échelle de représentation de la phase solide

La modélisation des phénomènes de transport dans les réacteurs lit fixe peut faire intervenir plusieurs échelles pour la phase solide [18] :

- Échelle de la particule où les transports de chaleur et de matière à l'intérieur du grain (transport interne) se font par diffusion et sont décrits respectivement par les équations II.3 et II.4. Il y a également un échange à la surface du grain à travers la couche limite supposée stagnante (transport externe), exprimé par les équations II.5 et II.6 issues du modèle du film illustré dans la Figure II.1.

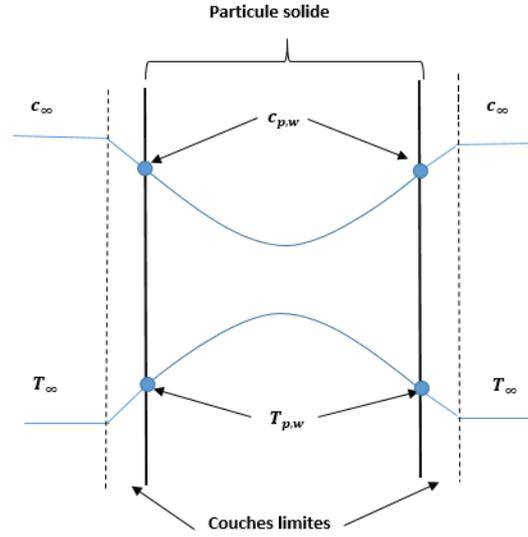


Figure II.1. Profils externes et internes de concentration et de température (qualitatifs)

Dans le grain :

$$\vec{q}_{p,cd} = -\lambda_{e,p} \vec{\nabla}(T) \quad (\text{II.3})$$

où $\vec{q}_{p,cd}$, $\lambda_{e,p}$ sont respectivement la densité de flux de chaleur par conduction et la conductivité effective dans la particule.

$$\vec{j}_{p,d} = -D_{e,p} \vec{\nabla}c \quad (\text{II.4})$$

où $\vec{j}_{p,d}$, $D_{e,p}$ sont respectivement la densité de flux de matière par diffusion et la diffusivité effective dans la particule.

À l'interface :

$$q_{p,w} = h_p(T_{p,w} - T_\infty) \quad (\text{II.5})$$

avec $q_{p,w}$, h_p représentant respectivement le flux de chaleur échangé et le coefficient d'échange à la paroi de la particule et $T_{p,w}$ et T_∞ les températures à sa paroi et dans le fluide externe.

$$j_{p,w} = k_{Dj}(c_{p,w} - c_{\infty}) \quad (\text{II.6})$$

avec $j_{p,w}$, k_{Dj} représentant respectivement le flux de matière et le coefficient de transfert de matière (constituant j) à travers la couche limite autour de la particule et $c_{p,w}$ et c_{∞} les concentrations à sa paroi et dans le fluide externe.

- Échelle du réacteur où il peut y avoir du transport par convection et par diffusion aussi bien pour la matière que pour la chaleur et éventuellement du rayonnement dans le cas où la température est très élevée [19].

II.2.2.2 Échelle de représentation de la phase fluide

La mécanique des fluides numérique (désigné en anglais par Computational Fluid Dynamics, CFD) peut donner une représentation de la phase fluide à plusieurs échelles suivant les méthodes considérées. En effet, la CFD consiste à étudier les variations des variables d'état dans le fluide, ou leurs effets, par la résolution numérique des équations qui le régissent (ce sont en général les équations de Navier-Stokes : conservation de matière et de quantité de mouvement et le bilan d'énergie). Cette résolution se fait en maillant le domaine du fluide, c'est-à-dire en le subdivisant en plusieurs petites cellules. Ces équations de bilans sont numériquement résolues sur chaque maille sous leur forme discrétisée, ainsi, il est possible d'accéder à toutes les informations instantanées (vitesse, pression, concentration, température...) pour chaque maille.

En général, la discrétisation repose sur la méthode des volumes finis ou la méthode des éléments finis. Ces dernières engendrent un nombre de mailles plus ou moins important selon les phénomènes étudiés et donc nécessitent une capacité de calcul considérable. La modélisation d'un écoulement laminaire est en général moins gourmande en capacité de calcul que celle d'un écoulement turbulent et la difficulté de la modélisation CFD se ramène à celle de la turbulence. Ainsi, il existe trois approches pour modéliser la turbulence :

1. La simulation directe numérique (DNS, pour Direct Numerical Simulation) qui consiste à mailler le domaine de telle sorte que les mailles soient plus petites que le plus petit tourbillon attendu. C'est de loin la plus gourmande en ressources et en temps de calcul, mais elle est très précise. Elle permet de résoudre directement les équations de Navier-Stokes sans aucune modélisation de la turbulence. Elle est uniquement utilisée pour la recherche à petite échelle.
2. La simulation des grandes échelles (LES, pour Large Eddy Simulation) qui consiste à faire un maillage plus grossier filtrant seulement les gros tourbillons, les petits étant modélisés avec un modèle physique (moyenne spatiale des équations de Navier-Stokes).
3. La modélisation statistique de la turbulence (RANS pour Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation) qui est un moyennage temporel des équations de Navier-Stokes pour toutes les échelles. Cette approche consiste à résoudre les équations moyennées par rapport au temps. Ainsi, pour chaque position, les variables instantanées sont décomposées en une variable moyennée et une fluctuation. C'est la moins exigeante en ressources et en temps de calcul, mais aussi la moins précise. Son efficacité dépend donc de la finesse

du maillage. Elle est la plus utilisée dans l'industrie, car elle permet un usage en grande échelle. C'est celle qui est la plus souvent utilisée, en faisant un compromis en termes de besoins de représentation physique par rapport aux ressources de calcul disponibles, pour la modélisation et la simulation des milieux granulaires [20].

II.3 Modèles stationnaires de lit continu ou pseudo-homogènes

La plupart des modèles de représentation d'un lit fixe le considèrent comme un milieu pseudo-homogène et lui attribuent une porosité souvent uniforme dans les 3 dimensions de l'espace. Dans quelques modèles, elle a été prise variable sur une des directions (souvent le rayon) [9, 15, 19, 20]. Ces modèles sont appelés «modèles pseudo-homogènes». Ils sont utilisés pour modéliser les réacteurs de grandes dimensions dans lesquels les résistances aux transports de chaleur et de matière à l'échelle des particules sont négligeables [18] (c'est-à-dire les critères II.1 et II.2 sont satisfaits). Cela revient à considérer qu'à l'interface particule/fluide, la température et la concentration de la particule sont les mêmes que celles du fluide. Des propriétés effectives sont associées au lit [9-12, 14, 19, 20] : la conductivité effective, le coefficient global d'échange à la paroi, le coefficient de dispersion axial, la diffusivité effective...

II.3.1 Modèles de lit continu : approche génie des procédés

Dans les modèles pseudo-homogènes, l'écoulement du fluide de type «piston» correspond à un écoulement sans rétro-mélange, ni court-circuit, ni zone morte. Cela permet de considérer une diffusivité axiale nulle et une diffusivité radiale infinie [21]. Mais dans les cas où la diffusivité axiale n'est pas nulle ou celle radiale n'est pas infinie non plus, il faut tenir compte de ces diffusivités à leur juste apport dans les modèles. Ainsi, trois types de modèles pistons pseudo-homogènes sont définis dans la littérature [18]. Il s'agit de deux modèles monodirectionnels (1D) appelés «modèle piston-PH1» et «modèle piston dispersif-PH2» et un modèle bidirectionnel (2D) appelé «modèle piston avec profil radiaux-PH3». Les inéquations II.7 et II.8 servent de critères de sélection entre les modèles pistons monodimensionnels (1D) PH1 et PH2.

$$Max \left| \frac{d_p}{c_{je}} \frac{dc_j}{dz} \right| < Pe_a \quad (II.7)$$

$$Max \left| \frac{d_p}{T_e} \frac{dT}{dz} \right| < \frac{\rho^f u_v C_{pm} d_p}{\lambda_{ax}^{sf}} \quad (II.8)$$

d_p est la taille des particules (le diamètre s'ils sont sphériques), c_j et c_{je} les concentrations de l'espèce j respectivement dans le lit et à l'entrée du lit et z la variable de position axiale. $Pe_a = \frac{u_v d_p}{D_{ax}}$ est le nombre de Péclet axial basé sur la taille de particule avec u_v la vitesse en fût vide. T_e est la température à l'entrée du lit, ρ est la masse volumique de la phase fluide, c_{pm} la capacité calorifique massique à pression constante et λ_{ax}^{sf} est la conductivité thermique axiale effective dans le lit.

— Modèle piston-PH1

C'est le cas idéal où les profils radiaux de concentration, de température et de vitesse

sont supposés plats et où les dispersions axiales de chaleur et de matière sont considérées négligeables. Les bilans s'écrivent alors :

$$\frac{\rho_e^f u_{ve}}{M_j} \frac{dw_j}{dz} = (1 - \varepsilon) J_j \quad (\text{II.9})$$

$$\rho_e^f u_{ve} C_{pm} \frac{dT}{dz} = \frac{4\bar{h}_{int}}{d_t} (T_w - T) + (1 - \varepsilon) \phi \quad (\text{II.10})$$

$$\frac{dP}{dz} = -\zeta \frac{\rho u_v^2}{d_p} \quad (\text{II.11})$$

Conditions en entrée du lit :

$$z = 0 : T = T_e, w_j = w_{je}$$

Avec l'indice e correspond à l'entrée du lit et l'indice supérieure f représente la phase fluide. M_j et w_j représentent respectivement la masse molaire et la fraction massique de l'espèce j. \bar{h}_{int} représente le coefficient de transfert de chaleur global du réacteur ; il est principalement dû à la résistance de transfert au voisinage de la paroi [9]. T_w est la température à la paroi du lit. J_j et ϕ sont les productions, respectivement, de l'espèce j et de chaleur dans le réacteur. ε la porosité du lit, P la pression, ζ est le facteur de friction du fluide dans le lit.

— Modèle piston dispersif-PH2

Pour appliquer convenablement le modèle piston-PH1, il faut que les gradients axiaux de température et de concentration respectent les deux conditions II.7 et II.8. Dans le cas contraire, le modèle PH2, qui permet de tenir compte de la dispersion axiale de matière D_{ax} et de la dispersion thermique axiale λ_{ax} , sera nécessaire [18].

$$\rho_e^f u_{ve} \frac{dw_j}{dz} = (1 - \varepsilon) M_j J_j + \varepsilon \frac{d}{dz} \left(D_{ax} \rho \frac{dw_j}{dz} \right) \quad (\text{II.12})$$

$$\rho_e^f u_{ve} C_{pm} \frac{dT}{dz} = \frac{4\bar{h}_{int}}{d_t} (T_w - T) + (1 - \varepsilon) \phi + \lambda_{ax}^{sf} \frac{d^2 T}{dz^2} \quad (\text{II.13})$$

$$\frac{dP}{dz} = -\zeta \frac{\rho u_v^2}{d_p} \quad (\text{II.14})$$

Conditions aux limites :

$$z = 0 : \rho_e^f u_{ve} (w_{je} - w_j |_{z=0}) = -\varepsilon D_{ax} \left(\rho \frac{dw_j}{dz} \right)_{z=0} \text{ et } \rho_e^f u_{ve} C_{pme} (T_e - T |_{z=0}) = -\lambda_{ax}^{sf} \left(\frac{dT}{dz} \right)_{z=0}$$

$$z = H : \left(\frac{dw_j}{dz} \right)_{z=H} = \left(\frac{dT}{dz} \right)_{z=H} = 0$$

Avec l'indice supérieure f représente la phase solide.

— **Modèle piston avec profils radiaux-PH3**

Pour des réactions à thermicité marquée, les profils radiaux de température et de concentration ne peuvent plus être considérés comme plats. Un modèle bidimensionnel est alors nécessaire. Le modèle piston PH3 permet de tenir compte de ces gradients radiaux dans les bilans, tout en négligeant la dispersion axiale. Ils sont établis en se basant sur deux hypothèses simplificatrices :

- La pression est uniforme sur une section droite.
- Le débit massique spécifique, $\rho_e u_{ve}$, est uniforme sur une section d'entrée et il n'y a pas de convection radiale.

$$\rho_e^f u_{ve} \frac{\partial w_j}{\partial z} = (1 - \varepsilon) J_j + \frac{\varepsilon}{r} \frac{\partial (r D_{er} \rho \frac{\partial w_j}{\partial r})}{\partial r} \quad (\text{II.15})$$

$$\rho_e^f u_{ve} C_{pm} \frac{\partial T}{\partial z} = (1 - \varepsilon) \phi + \frac{1}{r} \frac{\partial (\lambda_{er}^{sf} r \frac{\partial T}{\partial r})}{\partial r} \quad (\text{II.16})$$

$$\frac{dP}{dz} = -\zeta \frac{\rho_e u_{ve} \langle u_v \rangle}{d_p}, \langle u_v \rangle = \frac{8}{d_t^2} \int_0^{\frac{d_t}{2}} u_v(r) r dr \quad (\text{II.17})$$

Conditions aux limites :

- $z = 0$: $T = T_e, w_j = w_{je}, \rho u_v = \rho_e^f u_{ve} \forall r$
- $r = 0$: $\frac{\partial w_j}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \forall z$
- $r = \frac{d_t}{2}$: $\frac{\partial w_j}{\partial r} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{h_{int}^{sf}}{\lambda_{er}^{sf}} (T - T_w)$

$$\text{En sortie du lit } z = H : \langle w_j \rangle = \frac{8}{d_t^2} \int_0^{\frac{d_t}{2}} w_j(r) r dr, \langle C_{pm} T \rangle = \frac{8}{d_t^2} \int_0^{\frac{d_t}{2}} C_{pm}(T) T(r) r dr$$

Avec r est la variable de position radiale dans le lit, D_{er} est le coefficient effectif de dispersion radiale, λ_{er}^{sf} est la conductivité thermique effective radiale et d_t est le diamètre du tube cylindrique. $u_v(r)$ est la vitesse superficielle locale $\langle u_v \rangle$ sa moyenne locale. La valeur de $u_v(r)$ dépend de la variation radiale de la porosité. H est la hauteur du lit.

Dans ces modèles, nous voyons que le lit a été traité dans sa globalité comme une seule phase. Les deux phases sont en quelque sorte entremêlées de manière qu'à chaque point du lit, il y a simultanément du solide et du fluide proportionnellement à la porosité globale. Les bilans que nous avons présentés ici sont stationnaires, mais certains auteurs ont tenu compte de la dynamique [22-25]. Dans ces bilans, nous voyons que le bilan de quantité de mouvement se réduit au calcul de la perte de charge dans le lit dont il revient de déterminer le facteur de friction ζ . Si ζ est estimé avec la corrélation II.18, alors les équations II.11, II.14 et II.17 sont appelées Équation d'Ergun [26]. C'est la plus utilisée dans la littérature.

$$\zeta = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3} \left(a + b \frac{1 - \varepsilon}{Re_p} \right) \quad \text{avec} \quad Re_p = \frac{u_v d_p}{\nu} \quad (\text{II.18})$$

avec $a = 1,75; b = 150$ pour $\frac{Re_p}{1 - \varepsilon} < 500$ [26]

HANDLEY et HEGGS [27] ont proposé d'autres valeurs de coefficients ($a = 1, 24; b = 368$ pour $1000 < \frac{Re_p}{1-\varepsilon} < 5000$). TALLMADGE [28], quant à lui, a proposé la corrélation II.19 pour déterminer ζ :

$$\zeta = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left(4, 2 \left(\frac{1-\varepsilon}{Re_p} \right)^{\frac{1}{6}} + 150 \frac{1-\varepsilon}{Re_p} \right) \quad \text{pour} \quad 0, 1 < \frac{Re_p}{1-\varepsilon} < 10^5 \quad (\text{II.19})$$

Certains auteurs, comme WINTERBERG et al. [25], utilisent l'équation de Darcy-Brinkman-Forchheimer (équation II.20) à la place de l'équation II.17. Cette équation permet de prendre en compte le profil radial de vitesse dans le facteur de friction ζ . Cependant, contrairement aux modèles qui sont généralement utilisés pour déterminer les corrélations définissant les dispersions axiale et radiale, les modèles utilisés par WINTERBERG et al. [25] font intervenir à la fois des termes de dispersions axiale et radiale dans les équations II.15 et II.16.

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -f_1 u_v(r) - f_2 [u_v(r)]^2 + \frac{\eta_{eff}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial u_v}{\partial r} \right) \quad (\text{II.20})$$

Conditions aux limites :

- $r = 0$: $\frac{\partial u_v}{\partial r} = 0$
- $r = R$: $u_v = 0$

avec

$$f_1 = 150 \frac{(1-\varepsilon(r))^2 \eta_f}{[\varepsilon(r)]^3 d_p^2} \quad \text{et} \quad f_2 = 1, 75 \frac{(1-\varepsilon(r)) \rho_f}{[\varepsilon(r)]^3 d_p} \quad (\text{II.21})$$

$$\frac{\eta_{eff}}{\eta_f} = 2 \exp(2.10^{-3} Re_v) \quad (\text{II.22})$$

η_f et η_{eff} sont respectivement la viscosité dynamique du fluide et la viscosité dynamique effective du lit. η_{eff} est calculée à l'aide de l'équation II.22. Re_v est le nombre de Reynolds calculé avec la vitesse superficielle moyenne.

Pour les bilans de matière et d'énergie, c'est la détermination des propriétés effectives qui nécessite une attention particulière. Beaucoup de corrélations sont proposées dans la littérature pour déterminer la porosité du lit [29-33] et d'autres pour estimer ses propriétés effectives [9, 19, 20]. La difficulté de l'utilisation de ces modèles réside dans la capacité de ces corrélations à estimer convenablement la porosité et les propriétés effectives.

II.3.2 Modèles de lit continu : approche Mécanique des fluides numériques

Les modèles de lit continu de type CFD sont presque les mêmes que ceux de type génie des procédés [20]. En effet, l'empilement est considéré comme une phase pseudo-homogène. Il s'agit de simplifier la complexité de la structure du milieu granulaire en la remplaçant par un milieu continu effectif qui tiendrait compte des phases fluide et solide via la porosité [20], comme la figure II.2a. Les bilans de matière et d'énergie sont écrits de façon similaire et souvent ce sont les mêmes corrélations qui sont utilisées pour déterminer les paramètres

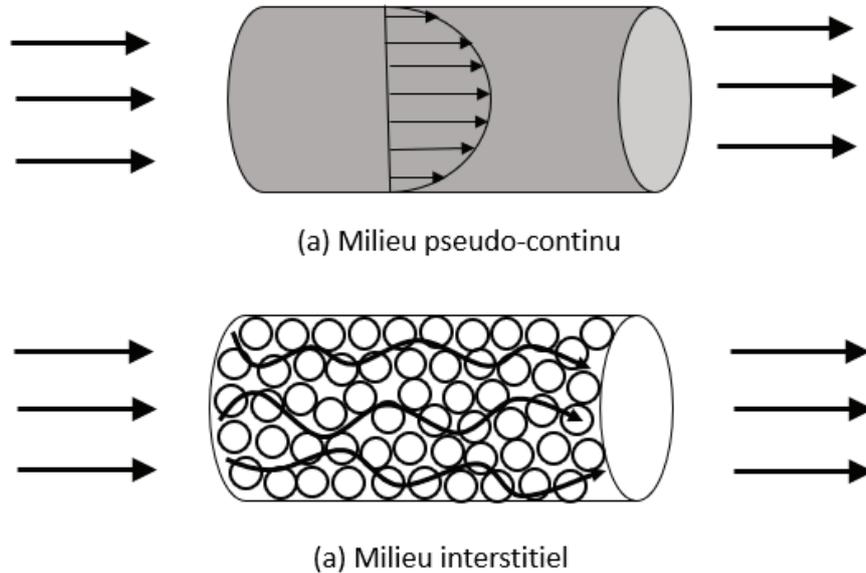


Figure II.2. Deux approches CFD (a) et (b) pour la simulation d'un écoulement dans un lit fixe granulaire (inspiré de [20])

effectifs (conductivités thermiques effectives, coefficient d'échange à la paroi, coefficients de diffusivité...) lors de la résolution de ces équations de bilans. La particularité de la CFD est qu'elle a été conçue initialement pour résoudre les équations régissant l'écoulement du fluide. C'est cette particularité qui est exploitée pour comprendre l'écoulement du fluide dans le lit. Ainsi, le bilan de quantité de mouvement peut être traité de façon détaillée, comme dans le papier [34] où un bilan de quantité de mouvement dynamique a été écrit dans chacune des deux directions (r et z). Outre, les bilans de matière et d'énergie sont écrits de façon dynamique et en 2D. Le milieu poreux est discrétisé, en général, de façon uniforme avec un resserrement du maillage au niveau des parois externes du lit. Mais certains auteurs divisent le milieu poreux en deux zones [35] : une zone proche paroi, qui s'étend de la paroi à un rayon de $0,5d_p$, et une autre au centre du lit. En effet, dans la littérature, il a été prouvé que la porosité est plus grande dans la zone proche paroi que dans le reste du lit [33, 36-38]. Cela est appelé «effet de la paroi». Ainsi, HAMZAH et al. [35] ont maillé les deux zones différemment. Cette discrétisation en 2 zones permet de tenir compte des différentes valeurs de porosité. Pour la discrétisation des équations de bilans, c'est la méthode des volumes finis qui est le plus souvent utilisée.

II.4 Modèles stationnaires de lit hétérogènes

Si au moins un des deux critères II.1 et II.2 n'est pas satisfait, c'est-à-dire que l'on ne peut négliger les résistances diffusionnelles de matière et/ou de chaleur dans la couche limite entourant les particules, il convient de tenir compte des limitations de transport entre phases

fluide et solide que cela engendre. Cependant, dans les modèles décrits ci-dessous aussi, le milieu poreux est traité dans sa globalité.

II.4.1 Modèles de lit hétérogènes : approche génie des procédés

En génie des procédés, la prise en considération des limitations aux échanges au niveau des interfaces solide/fluide dans le lit conduit au développement de trois catégories de modèles hétérogènes. Ces derniers constituent l'adaptation des modèles pseudo-homogènes en prenant en considération la limitation aux transferts externes. Ainsi, il est décrit dans le livre de SCHWEICH [18] trois modèles hétérogènes : «modèle piston avec résistance externe-HT1», «modèle hétérogène avec dispersion axiale-HT2» et «modèles hétérogènes avec dispersion radiale-HT3». Les deux premiers sont des modèles 1D et le troisième un modèle 2D. Dans ces modèles, le bilan de quantité de mouvement est écrit de façon similaire aux modèles pseudo-homogènes. Les bilans de matière et d'énergie sont écrits pour chaque phase (solide et fluide). Pour la phase solide, le bilan consiste à estimer les échanges entre les particules et le fluide à travers la couche limite.

— Modèle piston avec résistance externe-HT1

C'est une amélioration du modèle PH1 en l'adaptant à la limitation du transport externe. Ainsi, les bilans de matière et d'énergie sont écrits comme suit :

$$Fluide \begin{cases} \frac{\rho_e^f u_{ve}}{M_j} \frac{dw_{j\infty}}{dz} = k_{Dj}^0 a_c (c_{jp,w} - c_{j\infty}) \\ \rho_e^f u_{ve} C_{pm} \frac{dT_\infty}{dz} = \frac{4\bar{h}_{int}}{d_i} (T_w - T_\infty) + h a_c (T_{p,w} - T_\infty) \end{cases} \quad (II.23)$$

$$Solide \begin{cases} k_{Dj}^0 (c_{jp,w} - c_{j\infty}) = j_{jp,w} \\ h (T_{p,w} - T_\infty) = \phi_p \end{cases} \quad (II.24)$$

Conditions aux limites :

$$z = 0 : T_\infty = T_e, w_{j\infty} = w_{je}$$

Avec $a_c = \frac{1-\varepsilon}{L}$ est l'aire spécifique d'interface solide/fluide par m^3 de réacteur, L est la longueur caractéristique de la particule de catalyseur et k_{Dj}^0 est le coefficient de transfert de matière externe en l'absence de convection. h est le coefficient d'échange à la surface des particules solides. $j_{jp,w}$ et ϕ_p sont respectivement les flux de matière de l'espèce j et de chaleur à la surface des particules.

Les bilans sur la phase solide (équation II.24) permettent de calculer la concentration $c_{jp,w}$ d'une espèce j et la température $T_{p,w}$ à la surface du grain solide. Ces informations sont nécessaires pour les bilans sur la phase fluide (équation II.23). Cela suppose que les grains sont identiques.

— Modèle Hétérogène avec dispersion axiale-HT2

Ce modèle est une extension du modèle PH2 avec la prise en compte de la dispersion

axiale. Les bilans sont écrits dans les équations II.25 et II.26.

$$Fluide \begin{cases} \rho_e^f u_{ve} \frac{dw_{j\infty}}{dz} = k_{Dj}^0 a_c (c_{jp,w} - c_{j\infty}) + \varepsilon \frac{D_{ax} \rho \frac{dw_{j\infty}}{dz}}{dz} \\ \rho_e^f u_{ve} C_{pm} \frac{dT_\infty}{dz} = \frac{4\bar{h}_{int}}{d_t} (T_w - T_\infty) + \lambda_{ax}^{sf} \frac{dT_\infty}{dz^2} + ha_c (T_{p,w} - T_\infty) \end{cases} \quad (II.25)$$

$$solide \begin{cases} k_{Dj}^0 (c_{jp,w} - c_{j\infty}) = j_{jp,w} \\ h(T_{p,w} - T_\infty) = \phi_p \end{cases} \quad (II.26)$$

$$z = 0 : \rho_e^f u_{ve} (w_{je} - w_{j\infty} |_{z=0}) = -\varepsilon D_{ax} (\rho \frac{dw_{j\infty}}{dz})_{z=0}$$

$$\text{et } \rho_e^f u_{ve} C_{pme} (T_e - T_\infty |_{z=0}) = -\lambda_{ax}^{sf} (\frac{dT_\infty}{dz})_{z=0}$$

$$z = H : (\frac{dw_j}{dz})_{z=H} = (\frac{dT}{dz})_{z=H} = 0$$

— **Modèles hétérogènes avec dispersion radiale-HT3**

Ils sont exprimés de deux manières en fonction des hypothèses considérées :

- Transfert radial assuré par le fluide seul. Ces modèles sont adaptés lorsque l'écart de température entre le fluide et le solide n'est pas trop important et le nombre de Reynolds ($Re_p = \frac{u_v d_p}{\nu}$) est supérieur à 100.

$$Fluide \begin{cases} \frac{\rho_e^f u_{ve}}{M_j} \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial z} = k_{Dj}^0 a_c (c_{jp,w} - c_{j\infty}) + \frac{\varepsilon}{r} \frac{\partial(D_{er} \rho \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial r})}{\partial r} \\ \rho_e^f u_{ve} C_{pm} \frac{\partial T_\infty}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial(\lambda_{er}^f r \frac{\partial T_\infty}{\partial r})}{\partial r} + ha_c (T_{p,w} - T_\infty) \end{cases} \quad (II.27)$$

$$solide \begin{cases} k_{Dj}^0 (c_{jp,w} - c_{j\infty}) = j_{jp,w} \\ h(T_{p,w} - T_\infty) = \phi_p \end{cases} \quad (II.28)$$

$$z = 0 : T_\infty = T_e, w_{j\infty} = w_{je}, \rho u_v = \rho_e^f u_{ve}$$

$$r = 0 : \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial r} = \frac{\partial T_\infty}{\partial r} = 0$$

$$r = \frac{d_t}{2} : \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial r} = 0, \frac{\partial T_\infty}{\partial r} = -\frac{h_{int}^{sf}}{\lambda_{er}^{sf}} (T_\infty - T_w)$$

- Transfert radial de chaleur assuré par les deux phases (fluide externe et solide)

$$Fluide \begin{cases} \frac{\rho_e^f u_{ve}}{M_j} \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial z} = k_{Dj}^0 a_c (c_{jw} - c_{j\infty}) + \frac{\varepsilon}{r} \frac{\partial(D_{er} \rho_t \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial r})}{\partial r} \\ \rho_e^f u_{ve} C_{pm} \frac{\partial T_\infty}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial(\lambda_{er}^f r \frac{\partial T_\infty}{\partial r})}{\partial r} + ha_c (T_{p,w} - T_\infty) \end{cases} \quad (II.29)$$

$$solide \begin{cases} k_{Dj}^0 (c_{jw} - c_{j\infty}) = j_{jp,w} \\ h(T_{p,w} - T_\infty) = \phi_p + \frac{1}{a_c r} \frac{\partial(\lambda_{er}^s r \frac{\partial T_{p,w}}{\partial r})}{\partial r} \end{cases} \quad (II.30)$$

$$z = 0 : T_\infty = T_e, w_{j\infty} = w_{je}, \rho u_v = \rho_e^f u_{ve}$$

$$r = 0 : \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial r} = \frac{\partial T_\infty}{\partial r} = 0$$

$$r = \frac{d_t}{2} : \frac{\partial w_{j\infty}}{\partial r} = 0, \frac{\partial T_\infty}{\partial r} = -\frac{h_{int}^f}{\lambda_{er}^f} (T_\infty - T_w), \frac{\partial T_{p,w}}{\partial r} = -\frac{h_{int}^s}{\lambda_{er}^s} (T_{p,w} - T_w)$$

II.4.2 Modèles de lit hétérogènes : approche Mécanique des fluides numériques ou CFD

Pour la CFD, la modélisation hétérogène consiste à étudier l'écoulement du fluide (à échelle de la particule [4]), et ses effets, à travers les interstices de l'empilement de particules dans le lit (II.2b), mais aussi la conduction thermique dans les particules solides le cas échéant. Ce sont des modèles 3D. Les équations régissant cet écoulement sont bien connues, mais une des difficultés de l'utilisation de cette approche est le maillage. En effet, l'empilement de particules donne lieu à une structure poreuse très complexe dont la modélisation et le maillage sont très compliqués [20, 39]. Très souvent le maillage des géométries complexes est généré par des algorithmes de maillage, ces derniers créent des cellules plus grossières aux centres des pores (et des particules) et des cellules de plus en plus petites aux voisinages des interfaces solide/fluide. Il convient de préciser ici qu'aussi bien les surfaces des particules que celles de la colonne qui les contient sont considérées comme des parois lors du maillage du milieu granulaire. Pour des raisons de convergence numérique, ces cellules doivent respecter un certain nombre de critères de telle sorte qu'elles soient le moins exigües possible. Cependant, la prise en compte de ces critères conduisent les générateurs de maillage à générer un grand nombre de mailles, ce qui va nécessiter des ressources et de temps de calculs très importants. Pour pallier ce problème, plusieurs astuces sont utilisées :

- Sachant que c'est la zone proche-paroi qui génère le plus de cellules, des chercheurs [40] ont proposé des fonctions semi-empiriques appelés «Wall functions» qui permettent de modéliser les variations dans cette zone. Elles sont basées sur l'hypothèse que la vitesse obéit à une loi logarithmique en fonction de la distance à la paroi [20]. Ces fonctions permettent de réduire considérablement le nombre de mailles dans la zone proche paroi ;
- Étudier un nombre limité de particules ou subdiviser la géométrie globale en sous-géométries contenant un nombre représentatif de particules avec des conditions aux limites périodiques ;
- Les cellules les plus exigües étant générées au niveau des points de contacts, certains auteurs [41-43] ont proposé de les supprimer tout simplement en réduisant légèrement le diamètre des particules. Les particules à l'intérieur du lit sont en quelque sorte en «lévitation» comme on peut le voir sur la Figure II.3. MICHIEL NIJEMEISLAND et ANTHONY G. DIXON [41] ont obtenu des résultats acceptables pour le profil de vitesse avec une réduction de 0,5 à 1% du diamètre des particules tandis que CALIS et al. [42] et THIAGALINGAM et al. [43] ont réduit le diamètre des particules de 1%. D'autres ont préféré augmenter le diamètre des particules, ainsi, il y aura une surface de contact au lieu d'un point de contact, c'est le cas dans [44] où la taille des particules a été agrandie

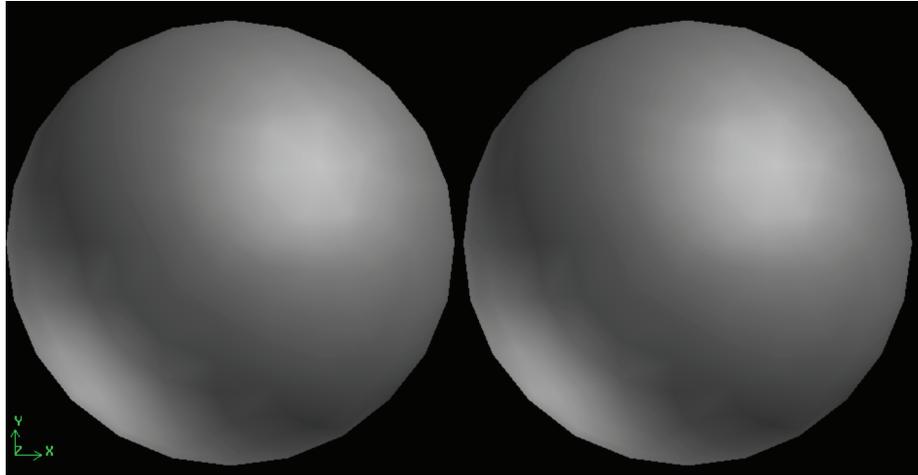


Figure II.3. Représentation du traitement local pour supprimer le point de contact entre les particules

de 1%. DIXON [5] a comparé les deux approches. Ils ont supprimé les points contacts dans un cas et ont utilisé des petits tubes comme ponts entre les particules sphériques en contact dans un autre cas. Ils ont réalisé leur test sur un empilement de 14 billes traversé par de l'éthylène. Deux paramètres globaux (flux thermique et le flux molaire) et deux paramètres locaux (température, fraction massique) ont été mesurés. Ils ont conclu que les deux approches permettaient d'obtenir des résultats acceptables.

Pour effectuer le maillage au voisinage des parois, on doit déterminer la taille minimale des cellules de manière à ce que les résultats des simulations soient indépendants de ces dernières. MAGNICO [45], lors d'une étude de la distribution spatiale de la vitesse normalisée, estime que cette taille de cellule doit être inférieure à $d_p/40$. Dans l'étude de la perte de charge dans un lit fixe en utilisant la méthode de Lattice- Boltzmann, ZEISER [46] a constaté qu'avec une taille de cellule de $d_p/20$ il y a 3% d'erreur et a fait toute son étude avec des tailles de cellules comprises entre $d_p/30$ et $d_p/20$. Dans un autre article, FREUND et al. [47] ont directement utilisé des mailles de taille $d_p/30$. DIXON et al. [20] ont constaté que, dans toutes ces études, la taille des mailles est du même ordre de grandeur que celles utilisées dans l'étude de TOBIS [48] qui montre en comparant des expériences et des simulations que les tailles de cellules doivent être comprises entre $d_p/38$ et $d_p/19$ pour donner des résultats satisfaisants. Dans leur étude, ils ont utilisé une taille moyenne de cellules comprise entre 0,5 et 1 mm pour un diamètre de particules de $d_p = 25,4\text{mm}$. EPPINGER et al. [49] a regroupé dans le tableau II.1 les nombres de mailles que l'on obtiendrait si on supprimait les points de contact et maintenait au moins 0,48% de d_p de distance entre les particules en fonction des rapports d_t/d_p et du nombre de particules sphériques. On remarque que le nombre de mailles est compris entre 7.10^5 et $5,7.10^6$.

En conclusion, même avec l'augmentation des puissances des calculateurs, l'utilisation de cette approche pour dimensionner un réacteur industriel reste très compliquée. Mais elle est plutôt utilisée pour comprendre la dynamique dans les empilements granulaires. En effet,

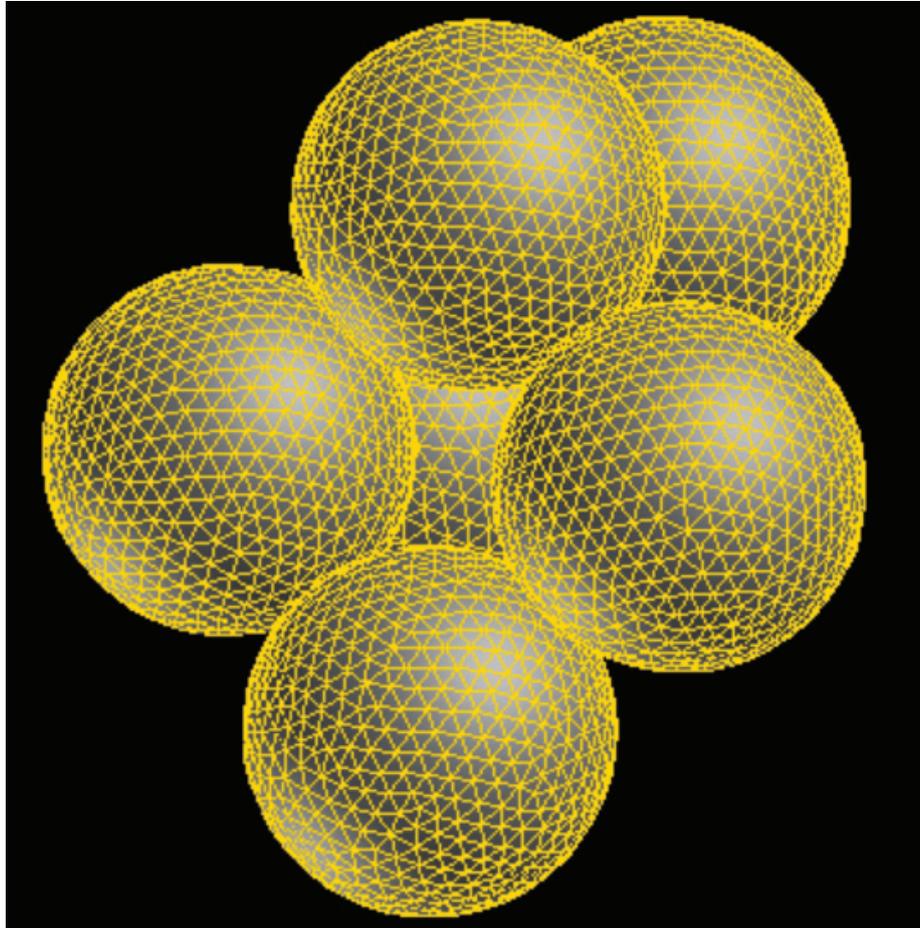


Figure II.4. Représentation du maillage non structuré de la surface des particules sphériques

DIXON et al. [20] ont estimé que la modélisation des phénomènes de transport dans les lits, si elle prend en compte les variations au niveau du point de contact entre particules solides d'une part et entre les particules et la paroi d'autre part, requiert une grande précision et donc nécessite un grand nombre de mailles à la surface de chaque particule, surtout aux points de contact. Dans un lit, plus il y a de particules, plus le nombre de points de contact augmentent et le nombre de mailles augmente aussi très rapidement. Ils ont proposé d'utiliser un nombre de particules limité pour étudier les phénomènes locaux. Par exemple, la figure II.4 correspond au maillage de six particules sphériques en contact les unes aux autres. Elle illustre qu'il y a un nombre important de mailles générées pour une seule particule. Mais tout récemment, DIXON [5, 17] a utilisé un empilement de particules sphériques (avec $d_t/d_p = 5,96$) pour étudier le transport et la réaction chimique : endothermique [17] et exothermique [5]. Dans son modèle (3D), il a utilisé les deux techniques de traitement des points de contact, c'est-à-dire soit en les supprimant, soit en créant des surfaces de contact à la place des points. Il a comparé ses résultats à deux modèles hétérogènes dynamiques de type génie des procédés : 1D avec

Tableau II.1. Résultats de maillage pour plusieurs empilements avec suppression des petits de contact[49]

d_t/d_p	Nombre de sphères	Nombre de mailles
3	80	1.10^6
4	50,100,130,200	$0, 7.10^6, 1, 2.10^6, 1, 5.10^6, 1, 7.10^6$
5	250	$2, 6.10^6$
6	300	$2, 8.10^6$
7	400	3.10^6
8	500	$4, 6.10^6$
10	750	$5, 7.10^6$

dispersion axiale (HT1) et 2D avec dispersions axiale (HT2) et radiale (HT3) aussi bien pour la matière que pour la chaleur. Il a conclu que pour les deux types de réactions, les modèles 1D et 2D n'étaient pas capables de reproduire quantitativement les profils (axiaux pour le modèle 1D et axiaux et radiaux pour le modèle 2D) de températures et de concentrations des espèces chimiques. Pour le modèle 1D, il faudrait augmenter de 10% les paramètres effectifs pour arriver à reproduire les profils. Pour le modèle 2D, l'utilisation d'une porosité radiale variable permet de caler les profils avec ceux du modèle 3D pour la réaction endothermique. Mais pour la réaction exothermique, même la porosité radiale variable ne permet pas de retrouver les profils de température et de concentration des deux modèles (2D et 3D).

Dans les modèles CFD, les équations de bilans correspondent aux équations de conservations de matière (équation de continuité), de quantité de mouvement et d'énergie. Si l'écoulement est laminaire, ces équations sont discrétisées en utilisant la méthode des volumes finis ou les éléments finis puis résolues numériquement. Mais si l'écoulement est turbulent, les équations de conservations sont réécrites conformément à un modèle de turbulence que l'on choisit au préalable.

II.5 Paramètres physiques des modèles des lits fixes

Dans les modèles pseudo-homogènes et hétérogènes de type génie des procédés, mais aussi les modèles CFD avec lit continu, la porosité et les propriétés effectives doivent être déterminées. Nous allons présenter ci-dessous quelques unes des corrélations de la littérature permettant d'estimer ces paramètres.

II.5.1 Porosité

Pour résoudre les équations de bilans des modèles cités précédemment, il est nécessaire d'estimer la porosité du lit. Pour les modèles pseudo-homogènes(1D) et hétérogènes (1D), une porosité moyenne (constante) est utilisé dans tout le lit. Mais pour les modèles 2D, certains auteurs utilisent une porosité variable [50] (souvent suivant la direction radiale). En effet, considérons un empilement de particules solides sphériques de même taille, la structure poreuse formée aura une distribution uniforme tant qu'elle n'est pas en contact avec d'autres

objets solides de taille et/ou de forme différentes. Avec ce genre d'arrangement de particules, la porosité peut être considérée comme constante. Mais dans un lit fixe, cet arrangement est en contact avec la paroi du réacteur (en général de forme cylindrique), la distribution uniforme de la porosité est perturbée. En effet, il n'existe qu'un contact ponctuel entre les sphères et la paroi, ce qui altère la structure de l'empilement et engendre une porosité plus grande à la paroi. L'effet de la présence de la paroi diminue progressivement au fur et à mesure que l'on s'en éloigne, c'est une variation radiale. L'impact de cette variation sur la porosité globale du lit dépend du rapport des diamètres $\frac{d_t}{d_p}$. Plus ce rapport est grand, moins il y a d'effet sur la porosité moyenne [31, 32]. En effet, plusieurs auteurs ont montré par des études expérimentales [51-55] ou numériques (utilisant la méthode des éléments discrets, DEM) [33, 36-38] que l'effet de la paroi est amorti au bout d'une distance relative équivalente à cinq diamètres de particules (illustrée dans la Figure II.5). Donc, cet effet ne pourrait être négligé que si le rapport $\frac{d_t}{d_p}$ est suffisamment grand ($d_t/d_p > 10$) [31]. Une porosité plus grande peut s'observer à l'entrée et à la sortie du réacteur compte tenu du fait que les particules qui s'y trouvent n'ont pas autant de voisines que celles situées au centre du lit. Cet effet est appelé, selon ZOU et YU [56], l'effet d'épaisseur (the thickness effect, en anglais). Ils ont montré que pour un empilement dont $d_t/d_p = 24,3$, la diminution de H/d_p entraîne une augmentation de la porosité totale du lit.

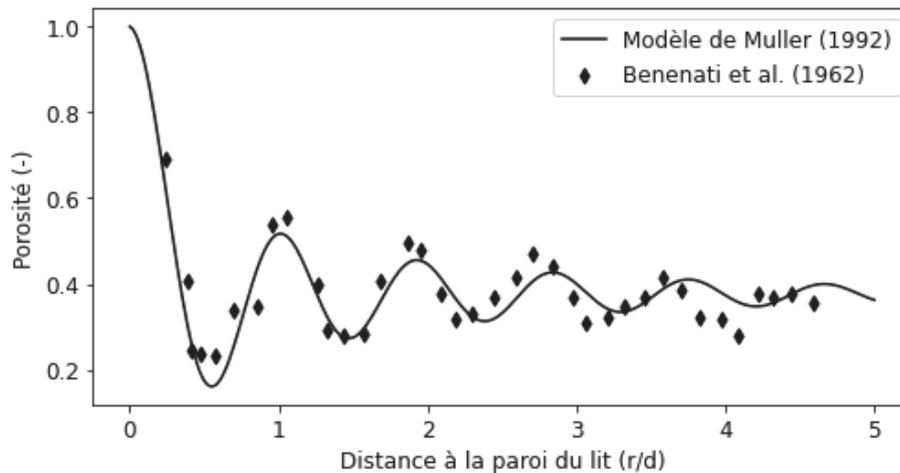


Figure II.5. Comparaison entre un modèle de prédiction de MUELLER [33] et des données expérimentales de BENENATI et BROSILOW [53] pour la variation radiale de la porosité dans un lit : $\frac{d_t}{d_p} = 20,3$

Pour modéliser la distribution de la porosité dans un lit fixe, deux principaux types de modèles, basés sur une approche pseudo-homogène, ont été proposés dans la littérature. Il s'agit des corrélations qui décrivent le comportement de la variation de la porosité comme suit :

- Variation sinusoïdale de la porosité dans le lit. Parmi les différents modèles disponibles dans la littérature, VAN ANTWERPEN et al. [13] en se basant sur les résultats expérimentaux et numériques de DU TOIT [57], estiment que les corrélations proposées par

MARTIN [32] et DE KLERK [31] (équation II.31) permettent de mieux prédire la variation sinusoïdale de la porosité dans la direction radiale. Par intégration, la porosité radiale peut aussi servir à calculer la porosité moyenne du lit (équation II.32).

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} 2,14y^2 - 2,53y + 1, & y \leq 0,637 \\ \varepsilon_b + 0,29 \exp(-0,6y)[\cos(2,3\pi(y - 0,16))] + 0,15 \exp(-0,9y), & y > 0,637 \end{cases} \quad (\text{II.31})$$

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\int_0^{\frac{d_t}{2}} \varepsilon(r)(2\pi r) dr}{\pi(\frac{d_t}{2})^2} \quad (\text{II.32})$$

- Variation exponentielle de la porosité dans le lit. Après analyse des corrélations disponibles, DU TOIT [57] conclut que la corrélation II.33, proposée par HUNT et TIEN [58], représente mieux la variation de la porosité suivant la direction radiale.

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_b [1 + a \exp(-b \frac{r}{d_p})] \quad (\text{II.33})$$

où a est défini de telle sorte que la porosité soit égale à 1 à la paroi du lit et b permet d'approximer la variation de la porosité. La valeur de b vaut 6 pour des particules sphériques et 8 pour les autres formes.

Une bonne détermination de la porosité est importante car cette donnée est aussi utilisée lors de la détermination des propriétés effectives liées au lit pseudo-continu.

II.5.2 Nombre moyen de voisins par particule dans le lit

Le nombre de voisins par particule, appelé aussi nombre de coordination [59], est un paramètre important qui peut aider dans la compréhension de la structure du lit. Il est utilisé dans certaines corrélations permettant de déterminer les propriétés effectives. Selon plusieurs auteurs [19, 59-61], il existe une relation entre la porosité et le nombre moyen de voisins pour chaque particule. Plusieurs auteurs ont proposé des corrélations reliant la porosité au nombre de coordination, dont quelques-unes sont citées dans le papier de VAN ANTWERPEN et al. [19], où les auteurs ont critiqué ces corrélations en mettant en avant le fait qu'elles donnent toutes des valeurs différentes. Ils ont affirmé qu'elles ne sont pas valides dans la zone proche de la paroi. Ils ont estimé que celle proposée par DU TOIT et al. [59] (équation II.34) est meilleure, comparativement aux autres, car elle tient compte de l'effet de la paroi sur la porosité. Dans la suite, nous l'avons appelée «corrélation de du Toit».

$$\overline{N}_c = 25,952\epsilon^3 - 60,364\epsilon^2 + 39,724\epsilon - 2,0233 \quad (\text{II.34})$$

avec $0,2398 < \epsilon < 0,54$ où \overline{N}_c et ϵ sont respectivement le nombre de coordination et la porosité dans le lit.

II.5.3 Propriétés effectives

La détermination des propriétés effectives du système solide-fluide constitue le principal obstacle de l'utilisation des modèles pseudo-homogènes et hétérogènes de type génie des procédés et des modèles CFD avec lit continu. En effet, ce sont des caractéristiques phénoménologiques du système [62], donc l'évaluation est une étape clé pour le dimensionnement ou l'interprétation de résultats expérimentaux [18].

II.5.3.1 Transfert de chaleur

Pour le transfert de chaleur, presque tous les modèles que l'on trouve dans la littérature estiment la conductivité effective en considérant trois contributions additives. Il s'agit de la contribution du solide, du fluide au repos et du fluide en mouvement. La contribution du solide se manifeste par conduction et par rayonnement. Celle du fluide au repos se fait dans certains cas par convection naturelle en plus des deux modes cités précédemment. Enfin, celle du fluide en mouvement est principalement sous forme de convection forcée. Il peut y avoir une synergie entre ces différents modes de transfert de chaleur et, en fonction des conditions opératoires du système, certaines contributions peuvent être prépondérantes. En effet, les modèles trouvés dans la littérature sont basés sur des hypothèses simplificatrices permettant de négliger certains effets, c'est le cas de la convection naturelle qui n'est presque jamais prise en compte et le rayonnement qui est négligé si la température est faible et/ou si les particules sont trop petites [9].

1. **La conductivité effective axiale** λ_{ax}^{sf} requise dans les équations II.13 et II.25 est estimée soit en utilisant :

- Les corrélations proposées dans la littérature. Celles choisies par KULKARNI et DORAISWAMY [9] et SCHWEICH [18] sont décrites en détail dans les papiers [11, 63-68]. Quelques-unes sont reportées dans le Tableau II.2

Tableau II.2. Corrélations pour la conductivité axiale effective

$\frac{\lambda_{ax}^{sf}}{\lambda_f} = \frac{\lambda_{ax}^{sf0}}{\lambda_f} + \delta Pr Re_p$	YAGI et al. [64]
$\frac{1}{Pe_{ha}} = \frac{\lambda_{ax}^{sf0}}{\lambda_f} \frac{1}{Pr Re_p} + \frac{14.5}{d_p(1 + \frac{C}{Pr Re_p})}$	VOTRUBA et al. [66]
$\frac{\lambda_{ax}^{sf}}{\lambda_f} = \frac{\lambda_{ax}^{sf0}}{\lambda_f} + \frac{Pr^2 Re_p^2}{6(1-\varepsilon)Nu}$	VORTMEYER [67]
$\lambda_{ax}^{sf} = \lambda_{ax}^f + \frac{\lambda_{ax}^s}{\left(\frac{1 + \frac{16}{3} \lambda_s \left(\frac{1}{h_{sf} d_p} + \frac{0.1}{\lambda_s} \right)}{(1-\varepsilon) \left(\frac{d_t}{d_p} \right)^2} \right)^2}$	DIXON et CRESSWELL [69]

δ dépend de la conductivité thermique du solide. Par exemple, il est égal à 0,7 pour des particules en acier et à 0,8 si elles sont en verre.

- Des modèles théoriques tels que celui proposé par DIXON et CRESSWELL [69] (Voir dans le tableau II.2).

2. La conductivité effective radiale

Selon SCHWEICH [18], les modèles les plus satisfaisants sont ceux de KUNII et SMITH [10] (équation II.35) et de ZEHNER et SCHLÜNDER [70] (équation II.36). Ces modèles reposent sur des approches semblables. Ils décomposent aussi la conductivité effective en trois contributions comme dans le cas axial. Par contre, VAN ANTWERPEN et al. [13] montrent dans leur travail que ces modèles donnent des résultats moins précis si le rapport entre la conductivité thermique du solide et de celle du fluide λ_s/λ_f est supérieur à 10^3 . Ils expliquent cela par le fait que l'effet de la surface de contact entre les particules du lit est négligé dans ces modèles. THURGOOD et al. [71] ont étudié dans [71] l'applicabilité des corrélations de KUNII et SMITH [10] et de ZEHNER et SCHLÜNDER [70] dans la zone proche paroi. Les résultats ont montré que ces modèles n'estiment pas correctement la valeur de la conductivité thermique effective aux hautes températures. Ils attribuent cela à l'effet de la paroi sur la zone proche paroi, c'est-à-dire que cet effet n'est pas correctement pris en compte. YAGI et KUNII [72] ont d'ailleurs proposé une amélioration du modèle de KUNII et SMITH [10] en considérant une porosité plus grande en proche paroi telle que $\varepsilon_w = 0,7$. BAUER et SCHLÜNDER [12] quant à eux, ont modifié le modèle de ZEHNER et SCHLÜNDER [70] en y intégrant le rayonnement, un paramètre de fraction surfacique pour le transfert à travers la surface de contact entre deux particules et en tenant compte du régime d'écoulement (qui prend en considération l'effet de la rugosité des particules). Le modèle final est communément appelé «modèle de Zehner, Bauer et Schlünder (ZBS)».

Avec $\kappa = \frac{\lambda_s}{\lambda_f}$ et λ_{er}^{sf0} est défini par :

$$\frac{\lambda_{er}^{sf0}}{\lambda_f} = \varepsilon \left(1 + \beta \frac{\lambda_{rf}}{\lambda_f} \right) + \frac{\beta(1-\varepsilon)}{\frac{1}{\varphi} + \frac{\lambda_{rs}}{\lambda_f} + \frac{\gamma}{\kappa}} \quad (\text{II.35})$$

où $0,9 < \beta < 1$ et $\gamma = \frac{2}{3}$ pour des particules sphériques

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_1, \varepsilon < 0,26 \\ \varphi_2, \varepsilon > 0,476 \\ \varphi_2 + (\varphi_1 - \varphi_2) \frac{\varepsilon - 0,26}{0,216}, 0,26 < \varepsilon < 0,476 \end{cases}$$

Avec

$$\varphi_1 = \frac{0,333(1 - \frac{1}{\kappa})^2}{\ln |\kappa - 0,577(\kappa - 1)| - 0,423(1 - \frac{1}{\kappa})} - \frac{\gamma}{\kappa}$$

$$\varphi_2 = \frac{0,072(1 - \frac{1}{\kappa})^2}{\ln |\kappa - 0,925(\kappa - 1)| - 0,075(1 - \frac{1}{\kappa})} - \frac{\gamma}{\kappa}$$

SCHWEICH [18] définit l'apport radiatif à la conductivité effective du solide (λ_{rs}) et du fluide (λ_{rf}) comme : $\lambda_{rs} = 0,227 \cdot 10^{-6} \frac{\xi}{2-\xi} T^3 d_p$ et $\lambda_{rf} = \frac{0,227 \cdot 10^{-6}}{1 + \frac{\varepsilon}{2(1-\varepsilon)} \frac{1-\xi}{\xi}} T^3 d_p$ et définit λ_{er}^{sf0} par :

$$\frac{\lambda_{er}^{sf0}}{\lambda_f} = (1 - \sqrt{1 - \varepsilon}) \left(1 + \varepsilon \frac{\lambda_{rs}}{\lambda_f} \right) + \frac{2\sqrt{1 - \varepsilon}}{M} \Theta \quad (\text{II.36})$$

$$\text{où } M = 1 + \frac{1}{\kappa} \left(\frac{\lambda_{rs}}{\lambda_f} - B \right)$$

$$\Theta = B \frac{\left(1 + \frac{1}{\kappa} \left(\frac{\lambda_{rs}}{\lambda_f} - 1 \right) \right)}{M^2} \ln \left(\frac{\frac{\lambda_{rs}}{\lambda_f} + 1}{\frac{B}{\kappa}} \right) - \frac{B-1}{M} + \frac{B+1}{2B} \left(\frac{\lambda_{rs}}{\lambda_f} - B \right)$$

$$\text{et } B = b \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right)^{\frac{10}{9}}$$

avec b qui dépend de la forme des particules. Ainsi si ce sont des sphères : $b = 1, 25$, des cylindres : $b = 2, 5$ et des cylindres creux : $b = 2, 5 \left(1 + \left(\frac{d_{p,i}}{d_{p,ext}} \right)^2 \right)$

Ces deux modèles ont été établis en considérant un fluide stagnant. Selon KULKARNI et DORAISWAMY [9], il est difficile de développer une corrélation théorique pour la contribution dynamique. Par conséquent, il propose l'utilisation des corrélations empiriques qui sont, en général, fonction du nombre de Reynolds. L'équation II.37 proposée par DE WASCH et FROMENT [73] semble estimer correctement la contribution dynamique dans le lit d'après KULKARNI et DORAISWAMY [9].

$$\frac{\lambda_{er}^{sf^d}}{\lambda_f} = \frac{0,0025}{1 + 46 \left(\frac{d_p}{d_t} \right)^2} Re_p \quad (\text{II.37})$$

VAN ANTWERPEN et al. [14], après avoir étudié les différents modèles de prédiction de la conductivité thermique effective dans [13], ont proposé un nouveau modèle appelé «Multi-sphere Unit Cell Model» (voir équation II.39). Ils suivent une approche plus rigoureuse (mais plus complexe) en tenant compte de la variation radiale de la porosité, du nombre de particules voisines, la rugosité des particules et de l'angle de contact entre les particules adjacentes. Ils ont considéré des particules sphériques. Ils ont développé ce modèle en analysant les différents mécanismes pouvant engendrer une résistance au transfert de chaleur à travers deux demi-sphères entourées de fluide. Donc, par association en série et en parallèle, et en prenant en compte les épaisseurs correspondantes, ils ont déterminé une résistance équivalente R_{eq} (équation II.38), qui est illustrée dans la Figure II.6.

$$R_{eq} = \left((R_{rig})^{-1} + \frac{1}{R_\lambda} + \frac{1}{R_G} \right)^{-1} + \left(\frac{1}{R_{in,1,2}} + \frac{1}{R_{mil,1,2}} + \frac{1}{R_{ext,1,2}} \right)^{-1} \quad (\text{II.38})$$

avec

$$R_{rig} = \begin{cases} R_{L,1,2} + \left(\frac{1}{R_g} + \frac{1}{R_s} \right)^{-1} & \text{si particules rugueuses} \\ \frac{0,64}{\lambda_s r_c} = R_{HERTZ,1,2} & \text{sinon} \end{cases}$$

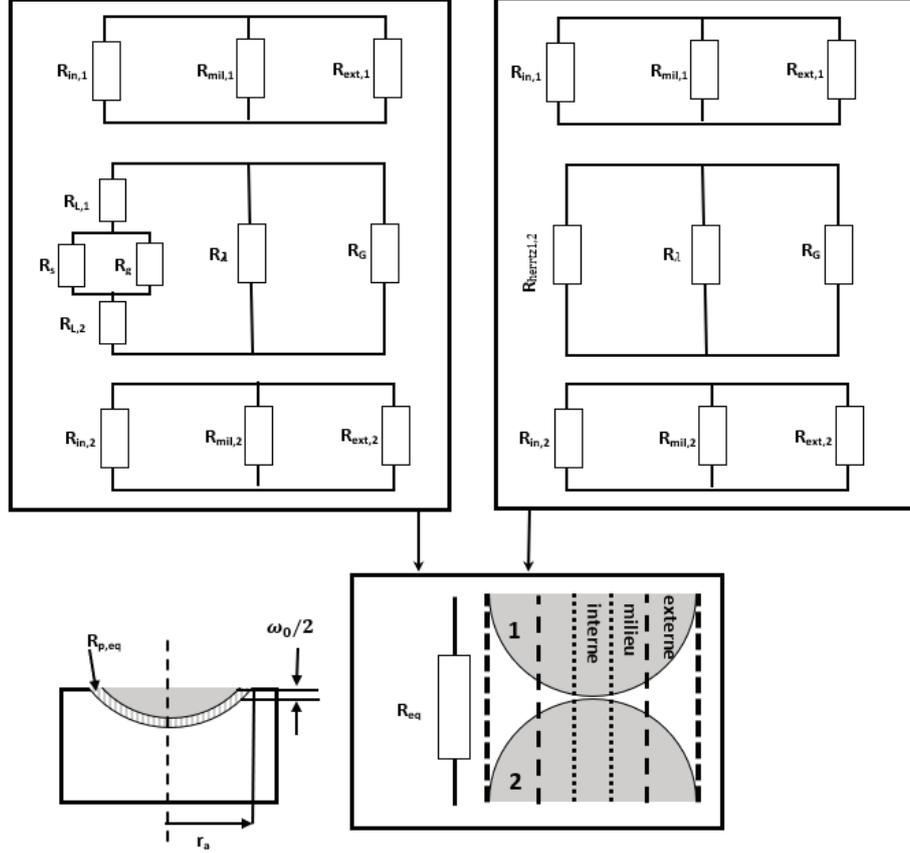


Figure II.6. Modèle «Multi-sphere Unit Cell» pour des particules sans contact avec la paroi (inspiré de [14])

pour calculer $\lambda_{er}^{sf^0}$:

$$\lambda_{er}^{sf^0} = \frac{\bar{N}_c(d_p - \omega_0)}{2d_p^2 R_{eq}} \sin(\bar{\theta}_c) + \frac{2\bar{N}_c d_p \sigma A_p \bar{T}^3}{d_p^2 \left(\frac{2-2\xi}{\xi}\right) + \frac{1}{F_{1-2}^S}} f_k \sin(\bar{\theta}_c) + \frac{5,32 d_p \sigma A_p \bar{T}^3 \bar{n}_L}{d_p^2 \left(\frac{2-2\xi}{\xi}\right) + \frac{1}{F_{1-2}^L}} f_k \quad (\text{II.39})$$

Avec ω_0 la déformation des particules solides aux points de contact, R_{eq} la résistance au transfert de chaleur entre deux demi-particules en contact, \bar{N}_c le nombre de coordination moyen et \bar{n}_L le flux du nombre de coordination pour le rayonnement sans contact, $\bar{\theta}_c$ l'angle moyen de contact entre les particules, \bar{T} la température moyenne à la surface de particule, f_k le facteur de correction non-isotherme, F_{1-2}^S ou F_{1-2}^L facteur de vue du rayonnement avec S pour les particules en contact et L pour les particules qui ne sont pas en contact immédiat.

ε et \bar{N}_c sont déterminés en utilisant respectivement la corrélation de DE KLERK [31]

(équation II.31) et l'équation II.34. $\bar{\theta}_c$ est calculé en utilisant l'équation II.40.

$$\bar{\theta}_c = -6,1248\bar{N}_c^2 + 73,419\bar{N}_c - 186,68 \quad (\text{II.40})$$

3. Coefficient d'échange thermique à la paroi du lit

On distingue deux types de coefficient d'échange à la paroi qui sont \bar{h}_{int} et h_{int}^{sf} . \bar{h}_{int} correspond au coefficient d'échange effectif au voisinage de la paroi pour un modèle monodimensionnel, il est calculé en supposant un profil radial de température plat et en utilisant une température moyenne en chaque position axiale dans le lit, tandis que h_{int}^{sf} est utilisé pour un modèle bidimensionnel et correspond aux échanges à la paroi, il est calculé en utilisant la température du voisinage immédiat de la paroi du lit. Comme pour la conductivité effective, le coefficient d'échange est constitué d'une contribution statique (conduction, convection naturelle et rayonnement) et une contribution dynamique (convection forcée) [9]. Ils peuvent donc être exprimés comme dans l'équation II.41. KULKARNI et DORAISWAMY [9] suggèrent l'utilisation du modèle monodimensionnel seulement quand le nombre de Biot à la paroi du lit Bi_h est inférieur 1.

$$\bar{h}_{int} = \bar{h}_{int}^0 + \bar{h}_{int}^d \text{ et } h_{int}^{sf} = h_{int}^{sf0} + h_{int}^{sf d} \quad (\text{II.41})$$

Les corrélations de SPECCHIA et al. [74] (équation II.42) et HENNECKE et SCHLÜNDER [75] (équation II.43) sont les plus fiables selon [76].

$$h_{int}^{sf} = \frac{\lambda_f}{d_{pv}} \left(2\varepsilon + \frac{1-\varepsilon}{\frac{\gamma_w}{\kappa} + \varphi_w} \right) + \frac{\lambda_f}{d_{ps}} (aRe_{pv}^b) \quad (\text{II.42})$$

où $\varphi_w = 0,0024 \left(\frac{d_t}{d_{pv}} \right)^{1,58}$ et $\gamma_w = \frac{1}{3}$

$a = 0,0835$ et $b = 0,91$ pour $10 < Re_{ps} < 1200$

$a = 1,23$ et $b = 0,53$ pour $1200 < Re_{ps} < 10000$

$$\frac{h_{int}^{sf} d_p}{\lambda_f} = Nu_p + \frac{\pi}{2} \left(\frac{\Lambda_w}{\lambda_f} - 1 \right) \left(1 - \frac{1}{Nu_p} \right) + \frac{\lambda_{rs}}{\lambda_f} \quad (\text{II.43})$$

où $\frac{\Lambda_w}{\lambda_f} = 1 - \sqrt{1 - \varepsilon_w} + \sqrt{1 - \varepsilon_w} \frac{2\Theta'}{1 - \frac{B'}{\kappa}}$

$Nu_p = 1, 3Pr^{-\frac{1}{6}} [0,194Pe_w^2 + 0,34 \cdot 10^{-4} Pe_w^3 Pr^{-\frac{2}{3}}]^{-\frac{1}{4}}$

avec $B' = 1,25 \left(\frac{1-\varepsilon_w}{\varepsilon_w} \right)^{0,75}$, $\varepsilon_w = \frac{1}{2} - \frac{1}{6(Nu_p-1)}$, $Pe_w = \left((RePr)^2 + \frac{51750d_p}{d_t} \right)^{\frac{1}{2}}$

et $Re_w = \frac{\rho u_v d_p}{\mu \varepsilon} \frac{K + \frac{P'+2}{2}}{K+1}$, $K = 1,5 + 0,0006 \left(\frac{d_t}{d_p} - 2 \right)^3$, $P' = 1,14 \left(\frac{d_t}{d_p} - 2 \right)^{\frac{1}{3}}$

Pour le coefficient d'échange effectif au voisinage de la paroi, on peut utiliser la corrélation (équation II.44) proposé par FROMENT [77].

$$\bar{h}_{int} = \frac{1}{\frac{d_t}{8\lambda_{er}^{sf}} + \frac{1}{h_{int}^{sf}}} \quad (\text{II.44})$$

VAN ANTWERPEN et al. [14] proposent aussi une corrélation pour déterminer h_{int}^{sf} . Elle est exprimée par l'équation II.45. Les deux derniers termes de cette équation correspondent à un rayonnement d'une particule vers la paroi. Pour un échange dans l'autre sens, il faudra remplacer $A_p F_{p-w,moy}$ par $A_w F_{w-p,moy}$.

$$h_{int}^{sf} = \frac{\bar{N}_c(d_p - 2\omega_0)}{2d_p^2 R_{eq,w}} + \frac{2d_p \sigma \bar{T}^3}{A_r \left(\frac{1-\xi_p}{\xi_p A_p} + \frac{1}{A_p F_{p-w}^{s,w}} + \frac{1-\xi_w}{\xi_w A_w} \right)} + \frac{4,53 d_p \sigma \bar{T}^3 \bar{n}_L^w}{A_r \left(\frac{1-\xi_p}{\xi_p A_p} + \frac{1}{A_p F_{p-w,moy}^{L,w}} + \frac{1-\xi_w}{\xi_w A_w} \right)} f_k \quad (\text{II.45})$$

$R_{eq,w}$ est la résistance équivalente au transfert de chaleur entre une particule solide et la paroi du lit, A_w est la surface effective qui contribue au transfert entre la paroi et une particule.

$$R_{eq,w} = \left((R_{rig,w})^{-1} + \frac{1}{R_{\lambda,w}} + \frac{1}{R_{G,w}} \right)^{-1} + \left(\frac{1}{R_{in,p,w}} + \frac{1}{R_{mil,p,w}} + \frac{1}{R_{ext,p,w}} \right)^{-1}$$

$$R_{rig,w} = \begin{cases} R_{L,p,w} + \left(\frac{1}{R_g} + \frac{1}{R_s} \right)^{-1} & \text{si particules rugueuses} \\ \frac{0,64}{\lambda_g^* r_c} = R_{HERTZ,p,w} & \text{sinon} \end{cases}$$

II.5.3.2 Transport de matière

Pour le transport de matière, d'après DELGADO [78], le coefficient de dispersion effectif est la combinaison de la diffusion moléculaire et la convection. Le coefficient de dispersion axiale est plus important que le coefficient de dispersion radiale pour les écoulements à nombre de Reynolds élevé ($Re_p > 10$). Mais les deux sont de même ordre de grandeur si $Re_p < 1$.

1. Le coefficient de dispersion axiale

La dispersion axiale effective requise dans les équations II.13 et II.25 est estimée en général en passant par la détermination du nombre de Péclet axial (ou longitudinal). Le Tableau II.3 présente quelques corrélations pour déterminer le nombre de Péclet axial. La première est celle proposée dans [79] où l'auteur a supposé l'existence de deux zones dans le milieu granulaire, une zone dans laquelle le fluide est en mouvement et une autre où le fluide est presque immobile. La deuxième corrélation [80] est aussi établie en considérant deux zones de mobilités différentes ; dans la zone centrale à forte mobilité, les auteurs ont utilisé deux nombres de Péclet internes longitudinal $Pe_{z,1}$ et radial $Pe_{r,1}$ pour pouvoir estimer la dispersion dans les deux directions. Ces auteurs et DELGADO [78] ont fait le même constat, à savoir que la corrélation présentée dans [79] n'est pas sensible aux variations du nombre Schmidt (Sc) pour $Pe_m = \frac{ud_p}{D_m} < 10^3$ avec D_m tandis

que celle de TSOTSAS et SCHLÜNDER [80] est trop sensible aux variations de Sc . Ils ont donc proposé une nouvelle corrélation (la troisième dans le Tableau II.3).

Le nombre de Péclet longitudinal est relié au coefficient de dispersion axiale par l'équation II.46, le coefficient de dispersion axiale D_{ax} peut en être déduit.

$$Pe_L = \frac{ud_p}{D_{ax}} \quad (\text{II.46})$$

Tableau II.3. Corrélation pour la dispersion axiale effective

$\frac{1}{Pe_L} = \frac{\varepsilon Pe_m}{4\alpha_1^2(1-\varepsilon)}(1-p)^2 + \left(\frac{\varepsilon Pe_m}{4\alpha_1^2(1-\varepsilon)}\right)^2 p(1-p)^3 \left(\exp\left[-\frac{4(1-\varepsilon)\alpha_1^2}{p(1-p)\varepsilon Pe_m}\right] - 1\right) + \frac{1}{\tau Pe_m}$ <p>Pour une sphère : $p = 0.17 + 0.33\exp\left(-\frac{24}{Re}\right)$ et $\tau = \sqrt{2}$ Pour un solide cylindrique : $p = 0.17 + 0.29\exp\left(-\frac{24}{Re}\right)$ et $\tau = 1.93$ α_1 est la solution de $J_0(u_v) = 0$</p>	[79]
$\frac{1}{Pe_L} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{1}{Pe_{z,1}} + \frac{1}{Pe'_m}(1 - \xi_c^2)\right) + \frac{1}{32} \left(\frac{D_c}{d_p}\right)^2 (Pe_{r,1}\xi_c^2 f_1(\xi) + Pe'_m f_2(\xi))$ <p>$\frac{1}{Pe_{z,1}} = \frac{1}{Pe'_1} + \frac{1}{1.14(1+10/Pe'_1)}$ $\frac{1}{Pe_{r,1}} = \frac{1}{Pe'_1} + \frac{1}{8}$ $Pe'_1 = \frac{u_1 d_p}{D'_m}$ et $u_1 = \frac{u}{\xi_c^2}$ $Re \leq 0.1 \rightarrow \xi_c = 0.2 + 0.21\exp(2.81y)$ $Re \geq 0.1 \rightarrow \xi_c = 1 - 0.59\exp[-f(y)]$ $y = \log(Re) + 1$ $f(y) = y(1 - 0.274y + 0.086y^2)$ $f_1(\xi_c) = (1 - \xi_c^2)^2$ $f_2(\xi_c) = 4\xi - 3 - 4\ln(\xi) - \xi_c^4$</p>	[80]
$\frac{1}{Pe_L} = \frac{Pe_m}{5}(1-p)^2 + \frac{Pe_m^2}{25}p(1-p)^3 \left(\exp\left(-\frac{5}{p(1-p)Pe_m}\right) - 1\right) + \frac{1}{\tau Pe_m}$ <p>Avec $p = \frac{0.48}{Sc^{0.15}} + \left(\frac{1}{2} - \frac{0.48}{Sc^{0.15}}\right)\exp\left(-\frac{75Sc}{Pe_m}\right)$</p>	[78]

2. Le coefficient de dispersion radiale

Plusieurs auteurs ont proposé des corrélations pour estimer les coefficients de dispersion radiale requis dans les équations II.15 et II.27. DELGADO [78], dans sa revue sur la dispersion radiale, a comparé les corrélations empiriques proposées par GUNN [79] et WEN, FAN et al. [81] avec des données expérimentales. Il a conclu que la corrélation de GUNN [79] ne prend pas en compte l'effet du nombre Schmidt (Sc) et que la corrélation de WEN, FAN et al. [81] est aussi inadéquate. Il a proposé une corrélation basée sur leurs données expérimentales que l'on trouve dans le Tableau II.4.

Le nombre de Péclet radial est défini comme suit : $Pe_r = \frac{ud_p}{D_{er}}$

Pe_m est le nombre de Péclet pour des particules inertes.

Tableau II.4. Corrélation pour la dispersion radiale effective

$\frac{1}{Pe_r} = \frac{1}{Pe_f} + \frac{1}{\tau} \frac{\varepsilon}{Re Sc}$ <p>Pour des sphères : $Pe_f = 40 - 29 \exp(-\frac{7}{Re})$ et $\tau = \sqrt{2}$ Pour des cylindres : $Pe_f = 11 - 4 \exp(-\frac{7}{Re})$ et $\tau = 1.93$ Pour des cylindres creusés : $Pe_f = 9 - 3.3 \exp(-\frac{7}{Re})$ et $\tau = 1.8$</p>	[79]
$\frac{1}{Pe_r} = \frac{17.5}{Re^{0.75}} + 11.4$ pour des Pe_m élevé	[81]
$\frac{1}{Pe_r} = \frac{1}{\tau} \frac{1}{Pe_m} + \frac{1}{12} - \left(\frac{Sc}{1500}\right)^{4.8} (\tau Pe_m)^{3.83 - 1.3 \log_{10}(Sc)}$ (pour $Pe_m \leq 1600$ et $Sc \leq 550$) $Pe_r = (0.058 Sc + 14) - (0.058 Sc + 2) \exp(-\frac{352 Sc^{0.5}}{Pe_m^{0.5}})$ (pour $Pe_m > 1600$ et $Sc \leq 550$) $\frac{1}{Pe_r} = \frac{1}{\tau} \frac{1}{Pe_m} + \frac{1}{12} - 8.1 \times 10^{-3} (\tau Pe_m)^{0.268}$ (pour $Pe_m \leq 1600$ et $Sc > 550$) $Pe_r = 45.9 - 33.9 \exp(-\frac{15 Sc}{Pe_m})$ (pour $Pe_m > 1600$ et $Sc > 550$)	[78]

II.6 Modèles stationnaires de lit hétérogènes de type Réseaux de pores et/ou de particules

Il existe aussi d'autres modèles de représentation des lits fixes tenant compte de leur hétérogénéité, bien que très rare. La phase fluide du lit peut, par exemple, être représentée comme un réseau de pores communicants et la phase solide comme un réseau de particules qui échangent. C'est l'objet de cette section.

Certains auteurs ont représenté la phase fluide du lit comme un réseau de pores [82, 83]. Ce sont des modèles qui sont utilisés pour étudier l'écoulement dans les empilements de particules à l'échelle du pore intergranulaire. Ainsi, LARACHI et al. [82] ont utilisé la méthode de réseau de pores pour étudier la dispersion du fluide dans un empilement aléatoire monodisperse de particules sphériques. Dans un premier temps, l'empilement a été scanné avec un tomographe à rayon X puis, après traitement d'images, les caractéristiques topologiques et géométriques du réseau de pores ont été déterminées. Chaque pore a été représenté par une sphère de volume équivalent et l'écoulement entre deux pores par un tube cylindrique. Ensuite un bilan de quantité de mouvement a été établi entre chaque couple de pores communicants en considérant une pression constante au niveau de chaque pore (équation II.47). Dans ces bilans, des pertes de charges singulières en entrée (rétrécissement : R_{ij}) et en sortie (élargissement : E_{ij}) et une perte de charge linéaire (K_{ij}) le long de chaque tube sont considérées. Un bilan de matière est établi pour chaque pore en utilisant la loi des noeuds de Kirchhoff, c'est-à-dire la somme des débits volumiques ($q_{v,ij}$) qui entrent dans un pore est égale à la somme de ceux qui en sortent (équation II.48).

$$P_j - P_i = K_{ij} l_{ij} + R_{ij} + E_{ij} \quad (\text{II.47})$$

avec P_i et P_j les pressions dans les pores i et j , l_{ij} la distance entre les deux pores voisins. Des relations constitutives sont utilisées pour calculer K_{ij} , R_{ij} et E_{ij} .

$$\sum_j q_{v,ij} = 0 \quad (\text{II.48})$$

Leur modèle permet d'accéder à plusieurs propriétés telles que :

- la contribution de la dissipation quadratique non turbulente et l'accélération/décélération du fluide à travers les canaux
- les contributions à la perte de charge macroscopique des différents mécanismes à l'échelle des pores
- les différentes composantes de la dispersion mécanique des tubes et des pores

RONG et al. [83] se sont servi de la méthode de réseau de pores pour étudier l'écoulement fluide à l'échelle du pore et en ont déduit une corrélation pour déterminer la perméabilité du milieu poreux qui est une propriété macroscopique. Ils ont extrait leur réseau de pores à partir d'un empilement aléatoire monodisperse construit avec la Méthode des Éléments Discrets (MED ou DEM en anglais, Discrete Elements Method). Le réseau de pores a été construit en utilisant la triangulation de Delaunay qui consiste à construire des cellules tétraédriques entre chaque groupe de trois particules voisines, la phase fluide contenue dans chaque cellule constitue un pore et si deux pores ont une surface en commun, ils sont considérés comme connectés. Ensuite, les pores sont maillés (800 à 2000 mailles par pore et 2.10^7 mailles pour tout le système étudié). Les équations de Navier-Stokes ont été résolues avec la méthode de Lattice-Boltzmann, c'est une méthode CFD. Ils se sont servi des résultats de la simulation pour attribuer une pression moyenne P_i à chaque pore, définir un débit $q_{v,ij}$ moyen (voir système II.49) et calculer une conductance hydraulique g_{ij} (équation II.50) entre deux pores voisins (communicants). L'écoulement entre ces deux pores est supposé se passer dans un tube cylindrique dont le rayon r_{rec} est exprimé dans l'équation II.51.

Pour chaque pore i :

$$\begin{cases} \sum_j q_{v,ij} = 0 \\ q_{v,ij} = \sum_k \mathbf{v}_{ijk} \cdot A_{ijk} \mathbf{n}_{ijk} \end{cases} \quad (\text{II.49})$$

où \mathbf{v}_{ijk} , A_{ijk} et \mathbf{n}_{ijk} sont respectivement le vecteur vitesse, la surface et le vecteur normal à l'interface ij dans la maille k .

$$g_{ij} = \frac{q_{v,ij} |\mathbf{l}_{ij}|^2}{(P_j - P_i) \mathbf{l}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}} \quad (\text{II.50})$$

où \mathbf{n}_{ij} est le vecteur de distance du pore i vers le pore j et $|\mathbf{l}_{ij}|$ sa norme.

$$r_{rec} = \frac{r_{ins} + r_{CFD}}{2} \quad (\text{II.51})$$

où r_{ins} est le rayon de la plus petite sphère totalement inscrit dans le pore et r_{CFD} est obtenu en considérant qu'une simulation numérique de l'écoulement dans un pore a la même résistance que l'écoulement laminaire dans un tube de Venturi. Enfin, ils ont conclu que le modèle permet d'estimer efficacement la perméabilité si la porosité est supérieure à 27%.

D'autres auteurs décrivent l'empilement de particules comme un réseau [84, 85]. Ainsi, FEI et al. [84] ont utilisé plusieurs empilements numériques monodisperses et polydisperses en tant que réseaux pour étudier le transfert thermique dans ces empilements construits avec la Méthode des Éléments Discrets. L'objectif de leur travail est de pouvoir estimer la conductivité effective. Ils ont défini deux types de réseaux : un réseau de contact entre particules et un réseau qu'ils ont appelé «thermique» qui tiendrait compte de l'échange thermique entre deux

particules très proches, mais qui ne se touchent pas. Ils ont collecté les informations les plus importantes permettant de décrire les réseaux à l'aide de la théorie des réseaux complexes, qui est une autre appellation de la théorie des graphes (voir [84] pour l'explication de la théorie), pour les introduire dans une procédure de machine learning pour ensuite établir une corrélation entre ces informations et la conductivité effective. Leur modèle a été validé en le comparant à une simulation avec la méthode des éléments finis.

Dans un autre papier, FEI et al. [85] ont représenté l'empilement (structuré ou aléatoire) de particules sphériques par un graphe orienté et pondéré pour y étudier le transfert thermique (conduction). Ils ont représenté les particules par des nœuds et la résistance au transfert thermique local entre les particules par des arêtes orientées (des flèches) selon la prédominance du transfert thermique. La résistance thermique est utilisée comme poids de pondération au niveau de chaque arête. La figure II.7 illustre comment sont définies les résistances thermiques. Elles sont calculées avec le système II.52. Chaque résistance entre deux particules en contact, comme i et j dans la figure II.7, est une association de trois résistances qui sont la résistance au transfert dans chacune des deux particules et la résistance au niveau de la surface de contact entre deux particules. Si la résistance est calculée entre deux particules très proches, mais qui ne se touchent pas, alors la résistance à l'interface est remplacée par une résistance dans un film de fluide entre les deux particules. Leur but était d'étudier l'anisotropie de la conductivité effective pour une application géothermique à l'aide de la théorie des graphes. La conductivité effective λ_e est calculée avec l'équation II.53 pour un échantillon représentatif de l'empilement, dont L est sa longueur dans la direction du transfert thermique. Leur modèle a été validé, sur un empilement structuré (Sc : simple cubic), en le comparant aux modèles théoriques et aux résultats d'une simulation de la conduction thermique avec utilisation de la méthode des éléments finis.

$$\begin{cases} R_{ij}^{eff} = R_i^P + R_{ij}^{interface} + R_j^P & \text{si } i \text{ et } j \text{ sont en contact} \\ R_{jk}^{eff} = R_j^P + R_{jk}^{film} + R_k^P & \text{si } j \text{ et } k \text{ sont en proche contact} \end{cases} \quad (\text{II.52})$$

où R_{nm}^{eff} ($nm \in [ij, jk]$) est la résistance thermique entre les particules n et m . R_n^P , $R_{ij}^{interface}$ et R_{jk}^{film} sont respectivement les résistances dans la particule n ($n \in [i, j, k]$), à l'interface ij et dans le film fluide entre les particules j et k .

$$\lambda_e = \frac{\frac{1}{A} \sum q_{ij}}{(T_{entree} - T_{sortie})/L} \quad (\text{II.53})$$

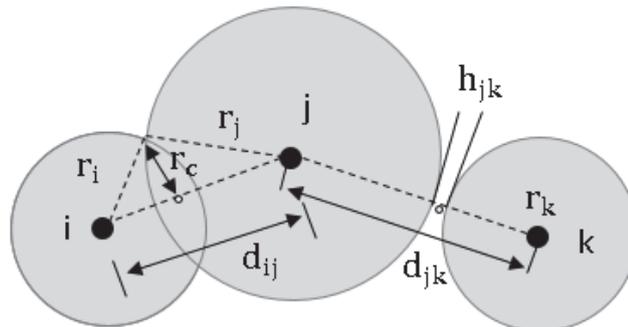
avec :

$$q_{ij} = \frac{1}{R_{ij}^{eff}}(T_i - T_j) = C_{ij}^{eff}(T_i - T_j) \quad (\text{II.54})$$

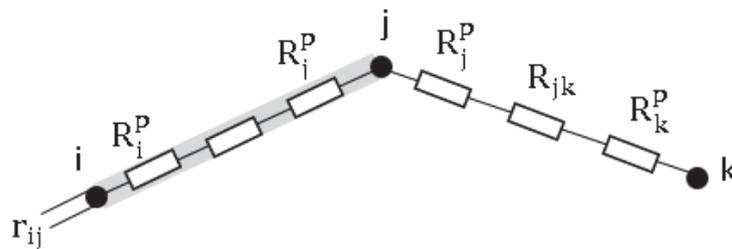
où T_{entree} , T_{sortie} et T_n ($n \in [i, j]$) sont les températures à l'entrée, à la sortie de l'échantillon et de la particule n . q_{ij} est le flux thermique entre deux particules i et j et C_{ij}^{eff} la conductance globale entre ces particules.

L'équation II.54 est écrite sous forme matricielle pour un empilement entier dans le système II.55

(a) Condition de contact



(b) Résistance thermique



(c) Résistance thermique effective

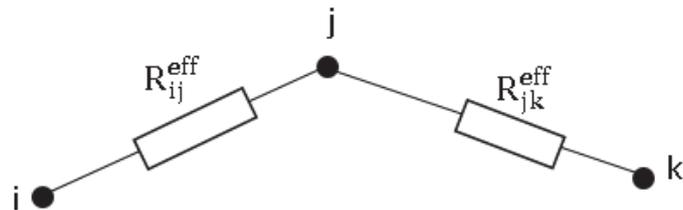


Figure II.7. Illustration de la représentation de la conduction thermique entre les particules (inspiré de [85])

$$\mathbf{Q} = \mathbf{C}\mathbf{T} \quad (\text{II.55})$$

où \mathbf{T} et \mathbf{Q} sont des vecteurs dont les éléments sont respectivement T_i et q_{ij} et \mathbf{C} est une matrice contenant les éléments C_{ij}^{eff} .

II.7 Autres milieux hétérogènes représentés par des réseaux ou graphes

Dans la même logique de représentation du transfert de chaleur dans un milieu poreux par des graphes, SCHEUERMANN et al. [6] et LOUATI et al. [7] ont étudié la conduction thermique dans une mousse métallique à cellules ouvertes. Ces dernières sont fabriquées industriellement de telle sorte que leurs pores, de forme légèrement ovale, soient presque identiques (voir LOUATI et al. [7] pour plus de détail). Ces mousses métalliques peuvent donc être considérées comme le négatif des lits fixes dans le sens où la phase solide de l'un devient la phase fluide de l'autre, à l'exception près que les billes sont sphériques. Les deux auteurs ont pris en compte le transfert thermique dans les deux phases (solide et gaz). C'est au niveau de la représentation du milieu poreux qu'ils ont procédé différemment. En effet, SCHEUERMANN et al. [6] l'ont représenté par un seul graphe dont chaque nœud est associé un volume contenant aussi bien du solide que du fluide, tandis que LOUATI et al. [7] ont représenté la mousse par trois graphes : un graphe pour la phase solide, un graphe pour la phase fluide et un troisième graphe pour le couplage entre les deux phases. Dans les deux cas, la mousse a été tomographiée, puis les images qui en résultent sont traitées à l'aide d'un logiciel dédié (*iMorph*) pour construire les graphes et extraire les propriétés géométriques. Ensuite, les graphes sont reconstruits, en orientant et en pondérant leurs arêtes, numériquement à l'aide d'un programme informatique à partir des données issues du logiciel *iMorph* [86]. L'équation de bilan thermique est réécrite de façon structurée sous forme d'un système hamiltonien à port, méthode que nous détaillerons plus tard. Ainsi, par exemple, après discrétisation, LOUATI et al. [7] écrit les bilans discrétisés de la phase solide (équation II.56) et de la phase fluide (équation II.57). Dans chacune de ces équations, le terme à gauche de l'égalité représente l'accumulation de l'énergie interne dans l'élément discret considéré et les termes de droite représentent les flux de chaleur échangés entre l'élément discret et ses voisins de même phase pour le premier terme et de phase différente pour le second terme.

$$\frac{d}{dt} \int_{\hat{v}_i} u_i^s dv = - \sum \int_{\partial v_{ij}} \phi_{ij}^s ds - \sum \int_{\partial v_{ik}} \phi_{ik}^{sf} ds \quad (\text{II.56})$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\hat{v}_k} u_k^f dv = - \sum \int_{\partial v_{kl}} \phi_{kl}^f ds + \sum \int_{\partial v_{ik}} \phi_{ik}^{sf} ds \quad (\text{II.57})$$

avec

$$\phi_{ij}^s = - \frac{\lambda^s}{L_{ij}} F_{ij}^s; \quad F_{ij}^s = T_j - T_i \quad (\text{II.58})$$

$$\phi_{kl}^f = -\frac{\lambda^f}{L_{kl}} F_{kl}^f; \quad F_{kl}^f = T_l - T_k \quad (\text{II.59})$$

$$\phi_{ik}^{sf} = -A_{ik} h^{sf} F_{ik}^{sf}; \quad F_{ik}^{sf} = T_j - T_i \quad (\text{II.60})$$

où u_i^s et u_k^f sont les énergies internes discrètes respectivement dans un volume de contrôle

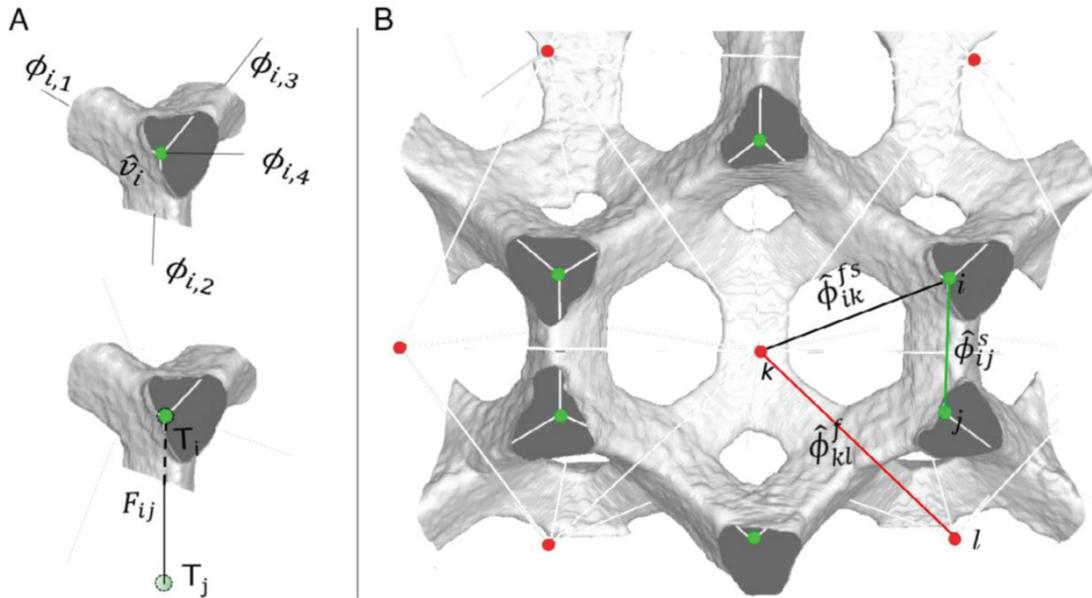


Figure II.8. A) Représentation schématique du transport de chaleur sur un volume contrôle (\hat{v}_i) et force motrice de la différence de température entre deux nœuds. B) Représentation schématique du transfert entre deux phases solide et fluide. Images reproduites de [7] (John Wiley and sons Licence Agreement 5637531449266)

(\hat{v}_i) de solide et dans un volume (\hat{v}_k) d'une cellule fluide. ϕ_{ij}^s et ϕ_{kl}^f sont les flux thermiques respectivement entre deux éléments discrets de la phase solide et entre deux cellules fluides et ϕ_{ik}^{sf} est le flux thermique entre deux éléments discrets de phases différentes. T_i^s et T_k^f sont les températures discrètes aux nœuds i de solide et k de fluide. λ^s et λ^f sont les conductivités thermiques dans chaque phase, h^{sf} coefficient d'échange entre les deux phases et A_{ik} l'interface entre les éléments i et k .

Les variables discrètes et les éléments géométriques auxquels elles sont appliquées sont illustrés dans la figure II.8 où les points rouges correspondent aux nœuds du graphe fluide et les points verts aux nœuds du graphe solide. Le graphe de solide est construit à partir de celui de la phase fluide en utilisant les lois de Plateaux.

II.8 Conclusion

En conclusion de ce chapitre, après avoir analysé en détail les différents modèles existants pour la modélisation des phénomènes de transport dans les lits fixes catalytiques, nous les avons classés en trois catégories : les modèles de type procédés, les modèles de type mécaniques des fluides numériques (CFD, en anglais) et les modèles de type réseaux. Les deux premières sont les plus abondamment utilisées. Les modèles de type procédés représentent le lit comme un (ou deux) milieu pseudo-continu auquel on attribue une porosité constante (ou variable) et des paramètres effectifs tels que la conductivité effective, la diffusivité effective de matière ou le coefficient d'échange thermique à la paroi du lit. La porosité et les paramètres effectifs sont déterminés avec des corrélations. Les modèles de type procédés permettent d'obtenir des résultats satisfaisants pour les réacteurs à grand diamètre, c'est-à-dire ceux dont le diamètre fait au moins 10 fois la taille des particules solides catalytiques. La détermination des paramètres effectifs constituent la principale difficulté de ces modèles. Ils sont moins adaptés aux réacteurs à faible diamètre ($d_t/d_p < 10$) notamment les réacteurs multitubulaires utilisés pour des réactions à thermicité élevée (endothermiques ou exothermiques). Pour les modèles de type CFD, ils représentent le lit soit comme un milieu pseudo-continu et deviennent équivalents aux modèles de type procédés soit ils tiennent compte de chaque particule dans le lit. Dans ce dernier cas, théoriquement, ils peuvent être adaptés aux réacteurs à faible diamètres. Mais ils nécessitent de très grandes capacités de calcul, ils ne peuvent être utilisés que pour des réacteurs avec un nombre limité de particules (une centaine). Quant aux modèles de types réseaux, ils sont souvent utilisés pour établir des corrélations pour déterminer les paramètres effectifs nécessaires dans les modèles de types procédés.

C'est dans ce contexte que nous proposons un nouveau type de modèle pour la modélisation des phénomènes de transport dans les lits fixes catalytiques. Ce modèle repose sur une approche innovante qui s'inspire des travaux de SCHEUERMANN et al. [6] et LOUATI et al. [7] et permet de faire un compromis entre les modèles de type CFD qui sont trop gourmands en termes de capacité de calcul et les modèles classiques de procédés qui simplifient trop la complexité du lit, mais aussi qui nécessitent la détermination de corrélations permettant d'estimer les paramètres effectifs associés au lit. Notre contribution vise ainsi à améliorer la compréhension des phénomènes de transport dans les lits fixes catalytiques, ainsi qu'à permettre une meilleure prédiction des performances de ces systèmes dans diverses applications industrielles. Nous proposons de modéliser les lits fixes en utilisant des graphes couplés. Cette méthode devrait permettre de capturer l'hétérogénéité du milieu tout en gardant des temps de calculs abordables. Cela ouvrira la voie de nouvelles perspectives de recherche et d'innovation. Le détail de ce modèle fait l'objet des parties suivantes.

Chapitre III

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

III.1 Introduction

L'objectif de cette partie est d'expliquer la méthode d'écriture des bilans sous forme de systèmes hamiltoniens à port pour un milieu poreux hétérogène. Cette méthode confère au modèle de la robustesse dans les calculs lors de la résolution des équations différentielles et est parfaitement bien adaptée à la représentation des milieux hétérogènes par des graphes.

La première partie très théorique consiste à présenter une revue bibliographique expliquant ce qu'est un Système Hamiltonien à Port. La démarche d'écriture des bilans sera expliquée et illustrée par l'écriture des lois de Kirchhoff pour des circuits RLC et par l'écriture des bilans d'énergie dans un système homogène non réactif. Les équations de bilans seront tout d'abord écrites sous forme infinie (différentielle partielle), puis sous forme finie (équations de bilan discrètes) où les systèmes hamiltoniens à port sont définis sur des graphes.

La seconde partie est applicative et présente l'écriture du bilan d'énergie dans un empilement de particules sphériques sous la forme d'un système hamiltonien à port défini sur des graphes pour un système hétérogène. Ici, nous nous sommes limités à la modélisation de la conduction de chaleur dans les lits de particules.

Les deux parties sont indépendantes. Le lecteur peut donc passer directement à la seconde partie en cas de difficultés de lecture.

III.2 Système Hamiltonien à Port pour les milieux homogènes

Dans cette section, nous allons rappeler brièvement la définition des systèmes hamiltoniens à port, formalisme que nous utilisons dans cette thèse pour la modélisation structurée des phénomènes de transport dans un lit de billes. Les systèmes hamiltoniens à port ont été développés comme une extension des systèmes hamiltoniens pour représenter des systèmes

physiques ouverts et dissipatifs [87-89]. Le lecteur pourra trouver des présentations synthétiques dans les ouvrages suivants [90, 91] ainsi que des applications en Génie des Procédés [92-97].

Nous allons rappeler ici la définition mathématique des systèmes hamiltoniens à port pour les systèmes d'équations de bilan [98] en prenant comme exemple un circuit RLC puis en traitant le cas particulier du transfert de chaleur par conduction dans les milieux homogènes. Pour le cas général, le lecteur pourra lire la synthèse des publications sur les systèmes hamiltoniens à port de dimension infinie et leurs applications en modélisation, simulation numérique et commande dans [99]. Dans un premier temps, nous allons rappeler la formulation hamiltonienne à port de ces équations de bilan dans un milieu homogène et rappeler la définition de structure de Stokes-Dirac et d'équation hamiltonienne implicite. Dans un deuxième temps, nous allons rappeler la formulation hamiltonienne à port d'équations de bilan discrètes [100] analogue à une méthode de volumes finis, menant à un système de compartiments interagissant à travers un graphe d'interconnexion.

III.2.1 Systèmes hamiltoniens à port pour les systèmes à paramètres distribués

Nous utilisons dans ce mémoire le formalisme des *Systèmes Hamiltoniens à Port* (SHP) pour écrire les modèles des phénomènes de transport dans les milieux hétérogènes. Les Systèmes Hamiltoniens à Port ont été développés afin de représenter les modèles dynamiques des systèmes physiques complexes, souvent définis sur des réseaux. Nous renvoyons le lecteur aux ouvrages [90, 91, 99] pour une définition plus exhaustive de ces systèmes. Dans ce paragraphe, nous présentons ce formalisme sur deux exemples très simples.

III.2.1.1 Une définition sommaire des systèmes hamiltoniens à port

Considérons d'abord le circuit électrique de la figure III.1. L'énergie électromagnétique totale du circuit H_0 est une fonction des variables extensives, charge Q_C du condensateur et flux magnétiques totaux φ_{L_i} des bobines avec $i \in \{1, 2\}$, qui vérifie la relation de Gibbs (équation III.1).

$$dH_0 = v_C dQ_C + i_{L_1} d\varphi_{L_1} + i_{L_2} d\varphi_{L_2} \quad (\text{III.1})$$

Où v_C est la tension aux bornes du condensateur et i_{L_i} sont les courants dans les bobines i . Notons la tension de la source v_s et son courant i_s (en utilisant la convention de signe des éléments actifs) et i_C et v_{L_i} , le courant traversant le condensateur et les tensions aux bornes des bobines, respectivement. En écrivant les lois de Kirchhoff (lois des nœuds et des mailles) et à partir de l'arbre maximal constitué des branches contenant la bobine L_1 et la source de tension, on obtient les relations écrites dans le système III.2 :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=M_f} \begin{pmatrix} i_C \\ v_{L_1} \\ v_{L_2} \\ -i_s \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}_{=M_e} \begin{pmatrix} v_C \\ i_{L_1} \\ i_{L_2} \\ v_s \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{III.2})$$

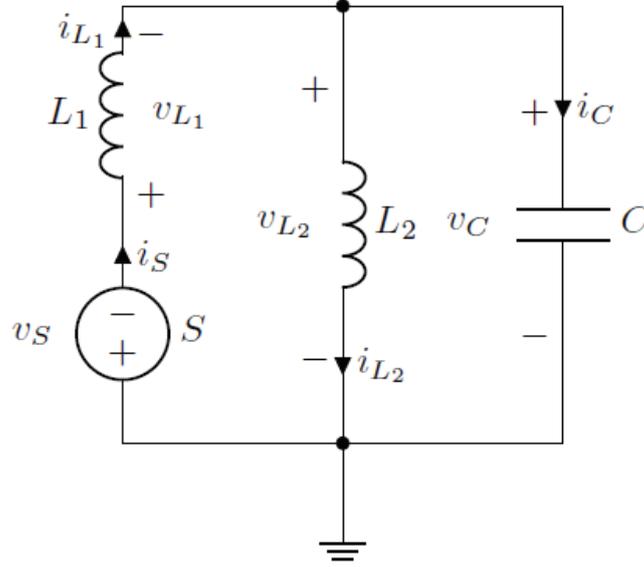


Figure III.1. Circuit composé de deux inductances et un condensateur en parallèle avec source de tension

On notera que, par le théorème de Tellegen, les matrices M_f et M_e vérifient une condition d'antisymétrie $M_f M_e^T + M_e M_f^T = 0$ et que les courants et tensions compatibles avec les lois de Kirchhoff (système III.2) forment un sous-espace vectoriel de $\mathbb{R}^4 \times \mathbb{R}^4$, appelé *structure de Dirac* [101].

Définition III.2.1. [Structure de Dirac : représentation noyau]

Soit un espace vectoriel réel $V \sim \mathbb{R}^n$ et son espace dual V^* que nous identifions également à \mathbb{R}^n , le produit de dualité entre V et V^* s'identifie alors au produit euclidien : $\langle e, f \rangle = e^T f$, $(e, f) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$. On appelle *structure de Dirac* par rapport aux matrices de structures $M_f \in \mathbb{R}^{n \times n}$ et $M_e \in \mathbb{R}^{n \times n}$ vérifiant les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} \text{d'antisymétrie : } & M_f M_e^T + M_e M_f^T = 0 \\ \text{de rang : } & \text{rang} \begin{bmatrix} M_f & M_e \end{bmatrix} = n \end{aligned}$$

le sous-espace vectoriel $\mathcal{D} \subset V \times V^*$

$$\mathcal{D} = \{(f, e) \in V \times V^* | M_f f + M_e e = 0\} \quad (\text{III.3})$$

On note que la relation de Gibbs donne $v_C = \frac{\partial H_0}{\partial Q_C}$ et $i_{L_i} = \frac{\partial H_0}{\partial \varphi_{L_i}}$ et que $v_{L_i} = \frac{d\varphi_{L_i}}{dt}$ et $i_C = \frac{dQ_C}{dt}$. La dynamique du circuit LC commandé par une source de tension S s'écrit alors (système III.4) :

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

$$M_f \left(\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q_C \\ \varphi_{L_1} \\ \varphi_{L_2} \\ -i_s \end{pmatrix} \right) + M_e \left(\begin{pmatrix} \frac{\partial H_0}{\partial Q_C} \\ \frac{\partial H_0}{\partial \varphi_{L_1}} \\ \frac{\partial H_0}{\partial \varphi_{L_2}} \\ v_s \end{pmatrix} \right) = 0 \quad (\text{III.4})$$

Ce système est une généralisation des systèmes hamiltoniens classiques [102] à une formulation implicite et augmentée à des variables de port, ici la tension v_s et le courant i_s de la source, appelée *système hamiltonien à port* [88, 90, 91].

Définition III.2.2. Un système hamiltonien implicite est défini par son espace d'état $\mathbb{R}^n \ni x$, l'espace des variables de port consistant en les vecteurs conjugués d'effort $e_p(t) \in \mathbb{R}^p$ et de flux $f_p(t) \in \mathbb{R}^p$, une structure de Dirac (équation III.3) et la fonction hamiltonienne $H_0(x)$. Sa dynamique est alors définie par l'équation algèbro-différentielle :

$$M_f \left(\begin{pmatrix} \frac{dx}{dt} \\ f_p \end{pmatrix} \right) + M_e \left(\begin{pmatrix} \frac{\partial H_0}{\partial x}(x) \\ e_p \end{pmatrix} \right) = 0 \quad (\text{III.5})$$

Il est remarquable que la structure de Dirac représente les relations d'interconnexion du circuit. Ces relations ne changent pas si l'on remplace la source par une résistance, c'est-à-dire si les variables de port obéissent à une relation dissipative du type de la loi d'Ohm $e_p = R f_p$. Par conséquent, les systèmes dissipatifs possèdent bien la même structure hamiltonienne que les systèmes conservatifs, c'est pourquoi on les appelle aussi ***systèmes hamiltoniens à port dissipatifs***. Souvent, on néglige, par abus de langage, le qualificatif «dissipatif».

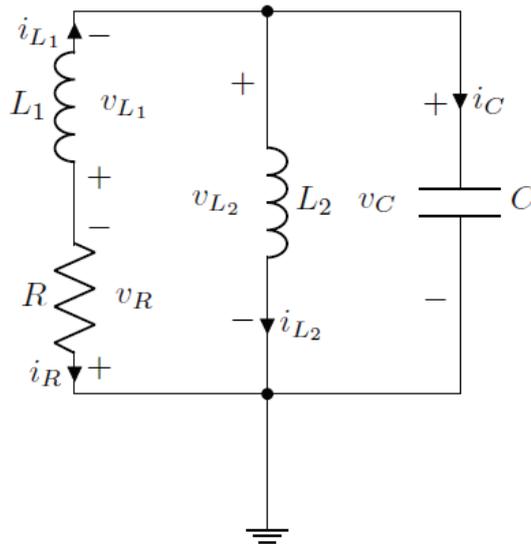


Figure III.2. Circuit RLC dérivé du circuit III.1 où la source est remplacée par une résistance.

Dans le cas du circuit LC de la figure III.1, en identifiant $v_R = v_s$ et $i_R = -i_s$, on obtient le circuit RLC représenté sur la figure III.2. En imposant la relation dissipative $v_R = R i_R$ pour $R > 0$, les équations du système III.5 définissent un système hamiltonien implicite dissipatif qui est bien défini par rapport à la même structure de Dirac.

III.2.1.2 Formulation hamiltonienne à port de la conduction de chaleur

III.2.1.2.1 Formulation entropique

Considérons un milieu homogène, défini sur un domaine spatial de dimension n , borné et connexe $V \subset \mathbb{R}^n$, de bord ∂V et supposons qu'il soit le lieu de transfert de chaleur. Dans ce cas, ses propriétés thermodynamiques peuvent être exprimées par l'équation de Gibbs suivante, dans la formulation entropique :

$$ds = \tau du \quad (\text{III.6})$$

où u est l'énergie interne spécifique, s l'entropie spécifique et τ la température réciproque : $\tau = \frac{1}{T}$ où T est la température.

Son évolution dynamique est alors décrite par l'équation de bilan d'énergie :

$$\partial_t \rho u = -\text{div} \phi \quad (\text{III.7})$$

où ρ est la masse volumique (supposée constante ici) et ϕ est le flux thermique qui s'exprime, en utilisant la loi de Fourier, par la fonction quasi-linéaire :

$$\phi = \lambda(T) F \quad (\text{III.8})$$

où $\lambda(T)$ est la conductivité thermique et F est la force thermodynamique de la conduction thermique :

$$F = -\text{grad} T \quad (\text{III.9})$$

Il est alors habituel de déduire une équation dynamique en la variable température en utilisant par exemple une relation constitutive définissant l'énergie interne en fonction de la température, comme l'équation III.10

$$du = c_v(T) dT \quad (\text{III.10})$$

où $c_v(T)$ est la capacité thermique massique à volume constant, et d'en déduire l'équation d'évolution suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{c_v(T)} \text{div} (\lambda(T) \text{grad} T) \quad (\text{III.11})$$

Dans le cas où la capacité thermique et la conductivité sont constantes, on obtient la célèbre «équation de la chaleur».

Le formalisme hamiltonien à port préfère conserver la forme de bilan d'énergie (équation III.7) et la définition de la force thermodynamique (équation III.9) de manière explicite et, de la même façon, prendre en compte la conjugaison entre variables extensives et intensives exprimées par l'équation de Gibbs (équation III.6). Pour cela, on écrit le système dynamique

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

sous la forme du système algébro-différentiel composé du bilan d'énergie (équation III.7) et la définition de la force thermodynamique (équation III.9) :

$$\begin{pmatrix} \partial_t(\rho u) \\ \bar{F} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\text{div} \\ -\text{grad} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_u S \\ \phi \end{pmatrix} \quad (\text{III.12})$$

où $\delta_u S$ est la dérivée variationnelle (ou fonctionnelle) de l'entropie totale $S(u) = \int_V \rho s(u) dv$ qui est simplement la température réciproque $\delta_u S = \frac{\partial s}{\partial u} = \tau$. Le système dynamique est complété par la relation constitutive de la conduction :

$$\phi = -\frac{\lambda(\tau^{-1})}{\tau^2} \bar{F} \quad (\text{III.13})$$

où la loi de Fourier est exprimée en fonction de la force thermodynamique modifiée :

$$\bar{F} = -\text{grad} \tau \quad (\text{III.14})$$

Bien que le système III.12 et III.13 soit évidemment le modèle de phénomènes irréversibles, il est appelé hamiltonien à port, car il est défini par rapport à l'opérateur différentiel hamiltonien

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & -\text{div} \\ -\text{grad} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.15})$$

Cet opérateur est remarquable par le fait qu'il est canonique (il ne contient pas de paramètres) et que l'on peut lui associer des variables de port de bord de manière intrinsèque de façon à définir une structure de Dirac que nous rappelons maintenant.

III.2.1.2.2 Définition de l'interface du système avec son environnement

Nous rappelons brièvement comment déduire les variables d'interface du système avec son environnement, appelées *variables de port*, de manière systématique et cohérente avec la thermodynamique en utilisant la structure de Dirac canoniquement associée à l'opérateur \mathcal{J} (équation III.15). Cette structure Dirac, appelée structure de Stokes-Dirac, est de dimension infinie, nécessite une définition plus générale que celle présentée ci-dessus dans la définition III.2.1.

Définition III.2.3. Soit deux espaces vectoriels \mathcal{F} et \mathcal{E} muni d'un produit scalaire bilinéaire, non dégénéré, noté $\langle e|f \rangle$ pour tout couple $(f, e) \in \mathcal{F} \times \mathcal{E}$. Une structure de Dirac est un sous-espace vectoriel $\mathcal{D} \subset \mathcal{F} \times \mathcal{E}$ tel que :

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}^{\perp+} \quad (\text{III.16})$$

où l'on note \perp_+ l'orthogonalité par rapport à la forme bilinéaire symétrique sur $\mathcal{F} \times \mathcal{E}$

$$\langle (f_1, e_1), (f_2, e_2) \rangle_+ \doteq \langle e_1|f_2 \rangle + \langle e_2|f_1 \rangle \quad (\text{III.17})$$

On montre dans [103, 104] que l'on peut associer une structure de Stokes-Dirac à l'opérateur différentiel (III.15) où les espaces vectoriel \mathcal{F} et \mathcal{E} sont tous deux des espaces de Hilbert.

Proposition III.2.1. Notons les espaces fonctionnels $H^{\text{div}}(V) = \{e \in L^2(V) \mid \text{div } e \in L^2(V)\}$ et $H^1(V) = \{e \in L^2(V) \mid \text{grad } e \in L^2(V)\}$ où $L^2(V)$ est l'ensemble des fonctions généralisées (distributions) de carré intégrable sur un domaine borné V de \mathbb{R}^n . Puis définissons l'espace des variables de flux :

$$\mathcal{F} = L^2(V) \times (L^2(V))^n \ni \begin{pmatrix} f_q \\ f_p \end{pmatrix} = f \quad (\text{III.18})$$

l'espace des variables d'effort :

$$\mathcal{E} = H^{\text{div}}(V) \times H^1(V) \ni \begin{pmatrix} e_q \\ e_p \end{pmatrix} = e \quad (\text{III.19})$$

et l'espace des variables de port de flux $\mathcal{F}^\partial = H^{-1/2}(\partial V) \ni f^\partial$ et l'espace des variables de port d'effort $\mathcal{E}^\partial = H^{1/2}(\partial V) \ni e^\partial$. Le sous-espace de l'espace fonctionnel :

$$\mathcal{B} = \mathcal{F} \times \mathcal{E} \times \mathcal{F}^\partial \times \mathcal{E}^\partial \quad (\text{III.20})$$

défini comme suit :

$$D_{SD} = \left\{ \begin{pmatrix} f \\ e \\ f^\partial \\ e^\partial \end{pmatrix}^\top \in \mathcal{B} \mid f = \mathcal{J}e \text{ et } \begin{pmatrix} f^\partial \\ e^\partial \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_\perp \\ \gamma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_q \\ e_p \end{pmatrix} \right\} \quad (\text{III.21})$$

où γ_0 est l'opérateur trace de Dirichlet et γ_\perp l'opérateur trace de Neumann [105] est une structure de Dirac, appelée structure de Stokes-Dirac associée à l'opérateur hamiltonien (III.15) par rapport au produit :

$$\int_V e_q f_q dv - \int_{\partial V} f^\partial e^\partial dw \quad (\text{III.22})$$

Remarque III.2.1. Notons que la structure de Stokes-Dirac s'interpète simplement comme le graphe de l'opérateur différentiel (III.15) complété par les variables de port

$$\begin{pmatrix} f^\partial \\ e^\partial \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_\perp \\ \gamma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_q \\ e_p \end{pmatrix} \quad (\text{III.23})$$

Le modèle de conduction de chaleur avec variable de port de bord, peut alors être exprimé comme un système hamiltonien à port dissipatif comme suit :

$$\left(\begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial t} \\ F \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \delta_u S \\ J_Q \end{pmatrix} \quad f^\partial \quad e^\partial \right) \in D_{SD} \quad J_Q = -\frac{\lambda(\tau^{-1})}{\tau^2} \bar{F} \quad (\text{III.24})$$

On voit que, dans ce cas, les variables de port de bord sont $f^\partial = \gamma_\perp J_Q$ le produit du flux de chaleur avec la normale à la frontière du domaine et $e^\partial = \gamma_0 \delta_u S$ la température réciproque évaluée à la frontière du domaine. Ce sont ce que l'on appelle conditions aux limites.

Remarque III.2.2. Notons que les structures de Stokes-Dirac et les systèmes hamiltoniens à port ont d'abord été définis en utilisant le calcul différentiel extérieur [106-108]. Tout d'abord ils ont été définis pour les systèmes de deux lois de conservation, possiblement dissipatives, dans [98] puis ont été étendues à la mécanique des structures [109, 110], la mécanique des fluides [111-113] et aux systèmes de transport de chaleur et de matière [96, 114].

III.2.1.3 Formulation pseudo-hamiltonienne de la conduction de chaleur

La formulation hamiltonienne à port présentée ci-dessus est thermodynamiquement juste, au sens qu'elle est écrite en fonction des variables extensives et intensives définies par la relation de Gibbs (équation III.6). Mais cela conduit à écrire le flux de chaleur comme une fonction non-linéaire (équation III.13) du gradient de la température réciproque (voir par exemple [115]) qui est peu utilisée dans la pratique et complique les calculs. Notons que l'on peut trouver une formulation hamiltonienne avec le même opérateur \mathcal{J} (équation III.15) en utilisant l'équation de Gibbs dans sa forme «énergie interne», $du = T ds$ mais dans ce cas, la fonction hamiltonienne est l'énergie interne du système et on écrit l'équation de bilan d'entropie qui contient le terme non-linéaire de la production irréversible d'entropie (voir les chapitres 3.4 et 4.2 de DUINDAM et al. [90]).

Dans ce paragraphe, nous allons présenter la modélisation utilisée dans cette thèse, conservant l'opérateur hamiltonien \mathcal{J} (équation III.15) mais permettant d'utiliser la définition linéaire du flux de chaleur (équation III.8). Il suffit alors de remarquer que l'équation de bilan d'énergie (équation III.7) et la force thermodynamique de la conduction thermique (équation III.9) peuvent s'écrire de manière matricielle :

$$\begin{pmatrix} \partial_t \rho u \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\text{div} \\ -\text{grad} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ \phi \end{pmatrix} \quad (\text{III.25})$$

par rapport au même opérateur hamiltonien \mathcal{J} (équation III.15). La structure de Dirac associée définit alors les variables de port de bord :

$$\begin{pmatrix} \bar{e}_\partial \\ \bar{f}_\partial \end{pmatrix} = \text{tr} \begin{pmatrix} T \\ \phi \end{pmatrix} \quad (\text{III.26})$$

qui sont la température et le flux de chaleur (normal à la surface) sur le bord du domaine spatial. Les variables énergie interne et température ne sont plus conjuguées au sens de l'équation de Gibbs sous sa forme entropique (équation III.6) mais sont liées par l'équation III.10. On appelle cette formulation pseudo-hamiltonienne, car le produit des paires de variables distribuées $(\partial_t u, T)$, (F, ϕ) et de port $(\text{tr} T, \text{tr} \phi)$ n'a plus la dimension d'un flux d'entropie (ni d'un flux d'énergie, si l'on considère l'équation de Gibbs dans sa forme «énergie»). Cependant, cette formulation partage exactement le même opérateur hamiltonien et la même structure de Dirac associée que la formulation basée sur les variables conjuguées par rapport à l'équation de Gibbs «entropique». On peut donc employer les mêmes méthodes de formulation discrète que nous présentons ci-dessous, quelle que soit la formulation.

III.2.2 Systèmes hamiltoniens à port définis sur des graphes et équations de bilan discrètes.

Dans ce paragraphe, nous allons présenter des systèmes hamiltoniens à port définis sur des graphes correspondant aux modèles utilisés dans la suite de cette thèse, mais dans le cas d'une phase homogène. Puis, nous allons faire le lien avec les modèles discrets de systèmes d'équations de bilan qui correspondent aux équations de diffusion.

III.2.2.1 Système hamiltonien à port défini sur un graphe

Sur l'exemple du circuit de la figure III.1, nous avons illustré la définition des systèmes hamiltoniens à port en donnant les lois de Kirchhoff (équation III.2) qui génèrent une structure de Dirac. Ces lois de Kirchhoff ont en fait été établies en considérant la *matrice des cycles du circuit* [88, 116, 117] associée à l'arbre maximal constitué de la branche portant L_1 et celle portant l'environnement. Dans ce paragraphe, nous allons rappeler comment construire une structure de Dirac à partir de la *matrice d'incidence* du graphe sous-jacent aux lois de Kirchhoff [117, 118], ce qui permettra aussi de considérer une interaction du système par un nœud externe comme dans le cas du circuit de la figure III.3. Notez qu'il s'agit cette fois d'un circuit RC que nous avons dérivé du circuit III.1 en transformant l'inductance L_1 , en la capacité C_1 et l'inductance L_2 en la résistance R_2 afin de rester proche d'un modèle de conduction de chaleur dont on considérerait l'équivalent électrique.

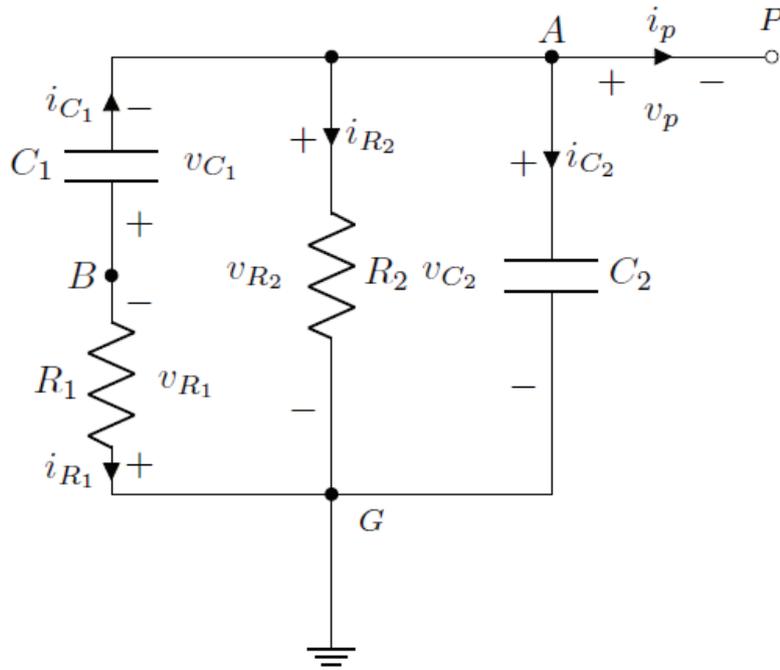


Figure III.3. Circuit RC avec nœud d'interaction.

Dans ce cas, le système dynamique obtenu est en fait du type gradient généralisé, associé au Laplacien du graphe [119], mais il reste vrai qu'il existe une structure de Dirac sous-jacente, associée aux lois de Kirchhoff.

Nous rappelons maintenant la définition des structures de Dirac et des systèmes hamiltoniens à ports dissipatifs associés, définis par rapport à un graphe en suivant la démarche de SCHAFT et MASCHKE [120] mais en adaptant les notations à celle de la thèse.

Considérons tout d'abord la définition d'un *graphe* $\mathcal{G}(\mathcal{N}, \mathcal{A})$ où \mathcal{N} est l'ensemble des nœuds (de cardinal $|\mathcal{N}| = N$), \mathcal{A} est l'ensemble des arêtes orientées (de cardinal $|\mathcal{A}| = M$)

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

chacune associée à un couple de nœuds (m, p) où $m \neq p$ et m est appelé nœud de départ et p nœud d'arrivée (plusieurs arêtes peuvent être associées au même couple de nœuds). Nous supposons dans la suite que ce graphe est connexe, c'est-à-dire que pour tout couple de nœuds il y a au moins un chemin permettant de les relier. En indexant les nœuds et les arêtes, le graphe est uniquement défini par une matrice $N \times M$ dont les coefficients sont à valeurs dans $\{-1, 0, 1\}$, appelée *matrice d'incidence du graphe* et notée \mathcal{D} . Cette matrice est définie de la façon suivante pour $i \in \{1, \dots, N\}$ et $j \in \{1, \dots, M\}$: $\mathcal{D}_{ij} = 1$ si le nœud i est le nœud de départ de l'arête j , $\mathcal{D}_{ij} = -1$ si le nœud i est le nœud d'arrivée de l'arête j , et $\mathcal{D}_{ij} = 0$ sinon.

Définissons ensuite les *variables de 0-flux*, $f_0 \in \Lambda_0$, comme les fonctions à valeurs réelles de l'ensemble des nœuds : $\mathcal{N} \rightarrow \mathbb{R}$ et les *variables de 1-flux*, $f_1 \in \Lambda_1$, comme les fonctions à valeurs réelles de l'ensemble des arêtes : $\mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$. On montre que ces espaces de flux sont isomorphes aux espaces vectoriels $\Lambda_0 \sim \mathbb{R}^N$ et $\Lambda_1 \sim \mathbb{R}^M$ et que l'on peut interpréter comme des valeurs que l'on affecte à chacun des nœuds et des arêtes comme des courants (ou leur combinaison linéaire) dans le cas de circuits électriques. On définit alors les *variables de 0-effort*, $e^0 \in \Lambda^0$, comme les variables duales aux 0-flux, c'est-à-dire l'ensemble des formes linéaires (fonctions linéaires à valeurs réelles) de Λ_0 et de façon analogue les *variables de 1-effort*, $e^1 \in \Lambda^1$, comme les variables duales aux 1-flux. Pour les systèmes physiques, il s'agit des variables conjuguées aux variables de flux, par exemple les potentiels électriques (ou leur combinaison linéaire) pour les circuits électriques. Comme les espaces de flux, les espaces des efforts sont isomorphes aux espaces vectoriels réels suivants $\Lambda^0 \sim \mathbb{R}^N$ et $\Lambda^1 \sim \mathbb{R}^M$.

On définit alors une application linéaire $\mathfrak{D} : \Lambda_1 \rightarrow \Lambda_0$, appelée *opérateur d'incidence*, telle que dans une base canonique des flux, elle est soit définie par la matrice d'incidence du graphe \mathcal{D} . Pour un circuit électrique, cette application donne la somme des courants incidents à chaque nœud du graphe et la loi des nœuds s'écrit alors : $\mathfrak{D} f_1 = 0$. On définit alors l'opérateur adjoint, appelé opérateur de co-incidence $\mathfrak{D}^* : \Lambda^0 \rightarrow \Lambda^1$, défini, dans une base duale des efforts, par la transposée de la matrice d'incidence du graphe \mathcal{D}^\top . Pour un circuit électrique, cet opérateur revient à calculer les différences de potentiel (tensions) à partir des potentiels électriques : $e^1 = -\mathcal{D}^\top e^0$, le signe étant dû à la convention de signe. Il est immédiat que le sous-espace vectoriel associé au graphe $\mathcal{G}(\mathcal{N}, \mathcal{A})$ est une structure de Dirac. Cette structure de Dirac caractérise l'ensemble des courants et tensions compatibles avec les lois de Kirchhoff d'un circuit électrique.

$$D_{\text{Kirchhoff}} = \left\{ (f_1, e^1) \in \Lambda_1 \times \Lambda^1 \sim \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M \mid \exists e^0 \in \Lambda^0, \mathfrak{D} f_1 = 0 \text{ et } e^1 = -\mathcal{D}^\top e^0 \right\} \quad (\text{III.27})$$

Un *graphe ouvert* consiste à définir des nœuds et des arêtes par lesquels le système peut interagir avec son environnement. L'ensemble des nœuds est donc partitionné en un ensemble de nœuds internes \mathcal{N}_I et nœuds frontière ou de bord \mathcal{N}_B : $\mathcal{N} = \mathcal{N}_I \cup \mathcal{N}_B$. Dans la suite de ce mémoire, nous considérerons le cas particulier des graphes ouverts où les nœuds de bord sont de degré d'incidence 1 (ils n'admettent qu'une seule arête incidente). Cette partition induit une décomposition de l'espace des 0-flux, $\Lambda_0 = \Lambda_{0I} \oplus \Lambda_{0B}$, et de son dual, les 0-efforts, $\Lambda^0 = \Lambda^{0I} \oplus \Lambda^{0B}$, et une décomposition de l'opérateur d'incidence (et de la matrice d'incidence) en deux opérateurs, l'un à valeurs dans l'espace des 0-flux associé aux nœuds internes : $\mathfrak{D}_I : \Lambda_1 \rightarrow \Lambda_{0I}$ (on notera sa matrice d'incidence \mathcal{D}_I) et l'autre associé aux nœuds

de bord $\mathcal{D}_B : \Lambda_1 \rightarrow \Lambda_{0B}$ (on notera sa matrice d'incidence \mathcal{D}_B). Les variables de 0-flux, $f_{0B} \in \Lambda_{0B}$, associées aux nœuds externes et les variables conjuguées de 0-effort, $e^{0B} \in \Lambda^{0B}$, sont les *variables de port* du système. Le graphe ouvert et les opérateurs associés définissent alors la structure de Dirac suivante, appelée *structure de Dirac du graphe ouvert, continue en la variable de flux* [120, Def.2.7]

$$D = \left\{ \left(f_1, e^1, f_{0I}, e^{0I}, f_{0B}, e^{0B} \right) \in \Lambda_1 \times \Lambda^1 \times \Lambda_{0I} \times \Lambda^{0I} \times \Lambda_{0B} \times \Lambda^{0B} \mid \right. \\ \left. \mathcal{D}_I f_1 = f_{0I}, \quad \mathcal{D}_B f_1 = f_{0B}, \quad e^1 = -\mathcal{D}_I^T e^{0I} - \mathcal{D}_B^T e^{0B} \right\} \quad (\text{III.28})$$

En utilisant la définition matricielle des opérateurs d'incidence et en identifiant les variables de flux f_1 et d'effort e^1 , de flux f_{0I} et efforts e^{0I} aux variables des relations constitutives des éléments associés aux nœuds internes et aux arêtes du graphe, on obtient alors un système hamiltonien à port dissipatif. Dans le cas des lits de billes traité plus loin, on associe aux nœuds internes les propriétés thermodynamiques du milieu et aux arêtes les propriétés de conduction.

Reprenons l'exemple du circuit électrique de la figure III.3. L'ensemble des nœuds internes est $\mathcal{N}_I = \{G, B, A\}$ et l'ensemble des nœuds de bord est $\mathcal{N}_B = \{P\}$. Notons les arêtes d'après les éléments qui leur sont associés $\mathcal{A} = \{C_1, R_1, R_2, C_2, \text{Port}\}$ où Port désigne l'arête incidente au nœud de bord. Alors les matrices d'incidence interne et de bord sont

$$\mathcal{D}_I = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathcal{D}_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Pour les nœuds internes, les relations constitutives sont $f_{0I} = 0$ pour traduire la loi de Kirchhoff des nœuds, dite «loi des nœuds», et $e^{0I} \in \mathbb{R}^3$ sont libres (et définissent encore une structure de Dirac [120, section 2.6]). Pour les arêtes, on identifie les vecteurs de 1-flux et de 1-effort comme suit :

$$f_1 = \begin{pmatrix} \frac{dQ_1}{dt} \\ i_{R_1} \\ i_{R_2} \\ \frac{dQ_2}{dt} \\ i_p \end{pmatrix} \quad e^1 = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial Q_1} \\ v_{R_1} \\ v_{R_2} \\ \frac{\partial H}{\partial Q_2} \\ v_p \end{pmatrix}$$

Et le système hamiltonien à port s'écrit $M_f \begin{pmatrix} f_1 \\ f_{0I} \\ f_{0B} \end{pmatrix} + M_e \begin{pmatrix} e^1 \\ e^{0I} \\ e^{0B} \end{pmatrix} = 0$ avec

$$\begin{pmatrix} \left[\begin{array}{ccc} \mathcal{D}_I & -I_{3 \times 3} & 0_{3 \times 1} \\ \mathcal{D}_B & 0_{1 \times 3} & -1 \end{array} \right] \\ 0_{5 \times 9} \end{pmatrix} = M_f \\ \begin{pmatrix} 0_{4 \times 9} \\ \left[I_{5 \times 5} \quad \mathcal{D}_I^T \quad \mathcal{D}_B^T \right] \end{pmatrix} = M_e$$

complété par les relations constitutives des nœuds internes : loi de Kirchhoff $f_{0I} = 0$ et $e^{0I} \in \mathbb{R}^3$ qui s'interprète comme des observables, les relations constitutives des capacités données par l'énergie électrique totale $H(Q_1, Q_2)$ et finalement les relations constitutives des résistances $v_{R_k} = R_k i_{R_k}$, $k \in \{1, 2\}$. On trouve aussi que les variables de port sont $i_p = f_{0B}$, le courant de l'arête Port, et la tension $v_p = e^{0B} - e^{0I}(A)$, égale à la différence de potentiel entre le nœud externe P et le nœud interne A .

III.2.2.2 Conduction de chaleur formulée sur un 3-complexe

La généralisation des modèles définis sur des graphes que nous présentons ici, consiste à considérer des systèmes d'équations de bilan, définis sur des 3-complexes, c'est-à-dire sur un réseau défini non seulement sur des nœuds et arêtes, mais sur leur généralisation en dimension 3 : volumes, faces, arêtes et nœuds. Cette approche ne sera pas suivie dans les chapitres suivant du mémoire, mais nous la rappelons pour faire le lien avec la littérature et comme introduction aux modèles que nous avons utilisés.

Pour cela, nous utiliserons l'intégration de formes différentielles et le calcul différentiel extérieur au lieu du calcul vectoriel comme nous l'avons fait par exemple dans le paragraphe III.2.1.3. Le calcul différentiel extérieur est très classiquement présenté dans les ouvrages de physique [107, chap.7] [108, chap.3] [106, chap. IV] et repose sur une théorie de l'intégration qui considère un objet mathématique dual des domaines d'intégration, appelé «forme différentielle extérieure». Les variables sont alors identifiées à des k -chaines ou k -co-chaines et les opérateurs fondamentaux du calcul vectoriel : divergence *div*, gradient *grad* et rotationnel *rot* sont alors définis par les *opérateurs de bord* agissant sur les k -chaines et les *opérateurs de co-bord*, adjoint aux premiers et agissant sur les k -co-chaines. La formulation des systèmes hamiltoniens à port pour les systèmes à paramètres distribués a d'abord été proposée dans ce cadre par SCHAFT et MASCHKE [98] puis développée pour les systèmes distribués [121, 122] et discrets [100, 123-126] avec application à un réseau de réaction-diffusion [127]. Nous présentons maintenant brièvement la formulation hamiltonienne discrète de la conduction de chaleur présentée dans le paragraphe III.2.1.3, en suivant [123, 128] à la différence près d'une identification alternative des variables de flux et d'effort avec les chaines et co-chaines.

Rappelons tout d'abord quelques définitions (pour un exposé complet, voir les références [106, chap. IV] et celles rappelées dans [100, 123]). Une j -cellule est l'image d'un polyèdre convexe $P \subset \mathbb{R}^j$ dans l'espace physique, dans notre cas \mathbb{R}^3 , par une fonction différentiable. Dans la suite, nous considérerons un 3-complexe associé à l'ensemble des j -cellules (avec $j = 0, 1, 2, 3$) généré par une partition ou pavage du domaine spatial de la phase considérée (comme par exemple l'espace occupé par le solide dans un lit fixe). Une j -chaîne est alors une fonction des j -cellules σ_k vers \mathbb{R} que l'on note $c_j = m_1 \sigma_1 + \dots + m_r \sigma_r$ où $m_k \in \mathbb{R}$ est l'image de la cellule σ_k dans \mathbb{R} . Quand toutes les valeurs réelles vérifient $m_k \in \{-1, 0, 1\}$, on dit que la chaîne est un *domaine d'intégration*. L'ensemble des j -chaines forme un espace vectoriel que l'on notera Λ_j . Le 3-complexe est l'ensemble des j -chaines avec $j = 0, 1, 2, 3$, muni des *opérateurs de bord* $\partial_j : \Lambda_j \rightarrow \Lambda_{j-1}$ qui sont l'extension des opérateurs de bord des j -cellules aux j -chaines, déduites de l'image des bords des volumes, faces et arêtes des polyèdres de base. Ces opérateurs de bord vérifient la propriété $\partial_{j-1} \circ \partial_j = 0$. Le dual algébrique de l'ensemble Λ_j des j -chaines est appelé l'ensemble des j -co-chaines et est noté

Λ^j . L'ensemble des j -co-chaines forme le 3-complexe des co-chaines. Il est muni d'opérateurs de co-bord $d^j : \Lambda^{j-1} \rightarrow \Lambda^j$, qui sont les opérateurs adjoints aux opérateurs de bord ∂_j et vérifie $d^j \circ d^{j-1} = 0$. De la définition, il suit que dans deux bases duales des chaines et des co-chaines, les représentations matricielles des opérateurs de bord et de co-bord vérifient

$$d^j = (\partial_j)^\top \quad (\text{III.29})$$

Pour écrire la formulation hamiltonienne à port discrète de la conduction de chaleur associée à sa formulation distribuée (équation III.12) et (équation III.23), nous allons considérer un 3-complexe et les 3-chaines et 3-co-chaines ainsi que les 2-chaines et 2-co-chaines de ce complexe. En effet, le bilan d'énergie s'écrit sur l'intégrale de la densité d'énergie ρu sur un volume, c'est-à-dire une 3-cellule (ou plus généralement une 3-chaine) et est fonction d'un flux total d'énergie, intégrale du flux ϕ sur une surface, soit une 2-cellule (ou plus généralement 2-chaine), au bord de la 3-cellule (en général une 3-chaine). De façon analogue aux graphes ouverts, nous allons considérer des 3-complexes ouverts. Pour cela, nous allons définir une décomposition de l'espace des 2-chaines, $\Lambda_2 = \Lambda_{2I} \oplus \Lambda_{2B}$ et de son dual, de l'espace des 2-co-chaines $\Lambda^2 = \Lambda^{2I} \oplus \Lambda^{2B}$ et une décomposition des opérateurs de bord en deux opérateurs, l'un associé aux cellules internes : $\partial_{3I} : \Lambda_3 \rightarrow \Lambda_{2I}$ et l'autre associé aux cellules de bord $\partial_{3B} : \Lambda_3 \rightarrow \Lambda_{2B}$. On note les deux opérateurs de co-bord adjoints d_I^3 et d_B^3 . On montre alors que le sous-espace vectoriel D_{23} est une structure de Dirac, ce qui est une conséquence triviale de l'équation III.29.

$$D_{23} = \left\{ (f_3, e^3, f_{2I}, e^{2I}, f_{2B}, e^{2B}) \in \Lambda_3 \times \Lambda^3 \times \Lambda_{2I} \times \Lambda^{2I} \times \Lambda_{2B} \times \Lambda^{2B} \mid \begin{aligned} \partial_{3I} f_3 &= f_{2I}, & \partial_{3B} f_3 &= f_{2B}, & e^3 &= -d_I^3 e^{2I} - d_B^3 e^{2B} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.30})$$

La formulation hamiltonienne à port discrète de la conduction de chaleur est alors obtenue en identifiant les variables de la structure de Dirac en utilisant les relations constitutives de la thermodynamique et de la conduction de chaleur. Tout d'abord, nous identifions les 3-co-chaines avec l'énergie totale des 3-domaines c_3 et leur variation : $e^3 = \sum_{k=1}^r \left(\frac{d}{dt} \int_{\sigma_k^3} \rho u dz \right) \sigma_k^3$. La variable conjuguée, la température réciproque discrète, sera alors identifiée à une 3-chaine : $f_3 = \sum_{k=1}^r \tau_k \sigma_{3k}$. Ensuite, nous identifions les 2-co-chaines avec le flux d'énergie total des 2-domaines c_2 : $e^2 = \sum_{k=1}^q \left(\int_{\sigma_k^2} \phi ds \right) \sigma_k^2$. La variable conjuguée, la force motrice de la conduction \bar{F} , sera alors identifiée à une 2-chaine $f_2 = \sum_{k=1}^q \bar{F}_k \sigma_{2k}$. Finalement, il faut compléter le système avec les propriétés thermodynamiques (équation III.6) et la loi de conduction de chaleur (équation III.14).

En comparant à l'expression III.12, l'on voit alors que l'opérateur de co-bord d^3 représente l'opérateur *divergence* et que l'opérateur de bord ∂_3 représente l'opérateur *gradient*. On peut remarquer, de plus, que les variables de port du système discret sont le flux d'énergie au bord e^{2B} et la force motrice au bord f_{3B} .

Remarque III.2.3. Remarquons que ces variables de bord diffèrent des variables de port frontière du système continu (équation III.23) qui sont le flux d'énergie au bord $f^\partial = \gamma_\perp \phi$ et la température réciproque à la frontière $e^\partial = \gamma_0 \delta_u S$ et non la force motrice \bar{F} . Ceci est un

effet de la formulation discrète et peut être comparé à la variable de port qui est une tension et non le potentiel du nœud de bord du circuit traité dans le paragraphe III.2.2.1.

Remarque III.2.4. Il faut noter que cette approche diffère de celle proposée par SESLIJA et al. [127] où les deux opérateurs *gradient* et *divergence* discrets sont exprimés en termes d'opérateurs de co-bord du complexe et de son dual et la structure de Dirac incluant des variables de port est définie en décomposant ces opérateurs [124].

III.2.2.3 Conduction de chaleur formulée sur un 1-complexe

Nous avons vu que pour le modèle de conduction de chaleur, il suffit de considérer les 2- et 3-chaines et co-chaines d'un 3-complexe. Il s'avère alors plus simple de considérer le *complexe dual* du 3-complexe, qui transforme les 2- et 3-chaines et co-chaines d'un 3-complexe en des 1- et 0-chaines et co-chaines du 3-complexe dual [124, 129-131]. En termes physiques, cela revient à représenter les volumes du 3-complexe par des nœuds (intérieurs au volume élémentaire), les faces entre deux volumes élémentaires par une arête reliant les nœuds associés aux volumes.

Donc, nous considérons la structure de Dirac suivante, définie sur le 3-complexe dual

$$D_{10} = \left\{ \left(f_1, e^1, f_{0I}, e^{0I}, f_{0B}, e^{0B} \right) \in \Lambda_1 \times \Lambda^1 \times \Lambda_{0I} \times \Lambda^{0I} \times \Lambda_{0B} \times \Lambda^{0B} \mid \begin{aligned} \partial_{1I} f_1 &= f_{0I}, & \partial_{1B} f_1 &= f_{0B}, & e^1 &= -d_I^1 e^{0I} - d_B^1 e^{0B} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.31})$$

Cette fois, nous identifions les 0-chaines, associées aux nœuds internes, à la variation d'énergie interne : $f_{0I} = \sum_{k=1}^r \left(\frac{d}{dt} u_k \right) \sigma_{0k}$ et les co-chaines conjuguées aux températures réciproques $e^{0I} = \sum_{k=1}^r \tau_k \sigma_k^0$ et nous identifions les 1-chaines, associées aux arêtes, au flux de chaleur $f_1 = \sum_{k=1}^q \phi_k \sigma_{1k}$ et les 1-co-chaines aux forces motrices $e^1 = \sum_{k=1}^q \bar{F}_k \sigma_k^1$.

On note immédiatement que les variables sont identifiées à des objets duaux dans le complexe dual : les énergies internes (et leurs dérivées temporelles) et les flux de chaleur sont identifiés à des chaines et leurs variables duales, températures réciproques et forces motrices sont identifiées à des co-chaines. L'opérateur *divergence* est aussi représenté par l'opérateur de bord ∂_1 et l'opérateur *gradient* est représenté par l'opérateur de co-bord d^1 .

L'opérateur de bord ∂_1 correspond évidemment à la matrice d'incidence du graphe \mathcal{D} associé au 1-complexe composé des 0- et 1-chaines et co-chaines du 3-complexe et ceci permet donc d'identifier la structure de Dirac (équation III.31) avec une structure de Dirac définie sur un graphe ouvert (équation III.28). Dans ce mémoire, nous ne nous préoccupons pas de dualisation de 3-complexes car nous utilisons directement les matrices d'incidence du graphe fourni par le logiciel *iMorph* à partir d'images du milieu considéré.

III.3 Système Pseudo-Hamiltonien à Port pour les milieux hétérogènes

Si les systèmes hamiltoniens à port ont été largement utilisés pour les milieux homogènes ou pseudo-homogènes, ils ont cependant été peu utilisés pour les milieux hétérogènes constitués de plusieurs phases [6, 132]. Parmi les travaux récents sur le sujet, on peut citer les travaux

d'ALTMANN et SCHULZE [132] qui ont consisté à simuler un réacteur chimique homogène en formulant les équations de Navier-Stokes sous forme pseudo-hamiltonienne à port. Leur article montre la difficulté de représenter correctement un système convectif et diffusif par un système hamiltonien à port qui est plus adapté aux systèmes diffusifs. Quant aux travaux de SCHEUERMANN et al. [6, 86], ils ont consisté à modéliser les transferts de chaleur dans des blocs de mousses à l'aide d'un système pseudo-hamiltonien à port en prenant l'énergie interne et la température comme variables conjuguées. Dans ce modèle, la phase solide du bloc de mousse solide a été décrite à l'aide d'un graphe. Quant à la phase fluide, elle a été considérée comme étant le dual de la phase solide et elle a été décrite par le même graphe que la phase solide. En parallèle, LOUATI et al. [7] ont aussi modélisé les transferts de chaleur dans des blocs de mousses à l'aide d'un système pseudo-hamiltonien à port en prenant l'énergie interne et la température comme variables conjuguées (voir la sous-section III.2.1.3), mais ils ont eu une approche différente qui a consisté à considérer des graphes différents pour la phase fluide et la phase solide et ont ajouté un graphe d'interconnexion pour simuler les transferts de chaleur entre les phases. Ils ont formulé leur système d'équation de bilan d'énergie sur un 1-complexe comme dans la sous-section III.2.2.3. Les nœuds physiques de la mousse et les cellules de fluide étant représentées par les nœuds des graphes et arêtes des graphes représentant les fenêtres entre les cellules fluides, les sections des brins de mousse ou les surfaces à l'interface entre les cellules et les brins et les nœuds de la mousse. C'est cette méthode qui a été appliquée ici et que nous avons transposée aux milieux poreux granulaires.

Les milieux poreux granulaires sont des milieux hétérogènes qui sont constitués d'au moins une phase solide et une phase fluide (gaz ou liquide). Comme nous l'avons vu dans l'Introduction (Chapitre I), dans les réacteurs catalytiques, la phase solide est souvent un agrégat ou un empilement plus ou moins compact de particules solides qui peuvent avoir des formes différentes. Mais, même si, in fine, nous avons pour but d'appliquer cette méthode dans des milieux poreux granulaires complexes, pour plus de clarté et de simplicité dans le raisonnement, nous avons choisi de travailler sur des empilements cylindriques de sphères monodisperses que sont souvent les réacteurs à lits fixes catalytiques.

Le remplissage des réacteurs cylindriques se fait sous l'effet de la gravité avec une vitesse plus ou moins grande. Les particules, une fois immobilisées, sont en contact les unes avec les autres de telle sorte que chaque particule ait au moins une voisine. En parallèle, le fluide peut circuler librement entre les particules solides. La phase fluide est donc continue. Lors du remplissage, l'empilement est fait de manière qu'il est impossible de trouver une particule qui soit totalement isolée des autres. Nous pouvons donc aussi considérer une certaine continuité pour la phase solide pour les phénomènes de transport régis par des forces de contact tels que la conduction thermique à travers le lit de particules. Ceci peut être observé sur les figures III.4a et III.4b qui présentent respectivement un empilement réel de billes d'alumine de 5mm dans un cylindre transparent de 20cm de diamètre et un empilement numérique de 10cm de diamètre constitué de particules sphériques de 15mm de diamètre. L'espace entre les particules est supposé être occupé par du fluide. Pour l'empilement numérique, nous voyons clairement que les pores entre les particules sont interconnectés. L'espace intergranulaire est donc continu, d'où la continuité de la matière dans la phase fluide. La résolution de l'image de l'empilement réel ne permet pas de voir à l'intérieur du lit, mais une analyse avec des outils adéquats tels que la tomographie par rayon X permettrait de montrer que la phase

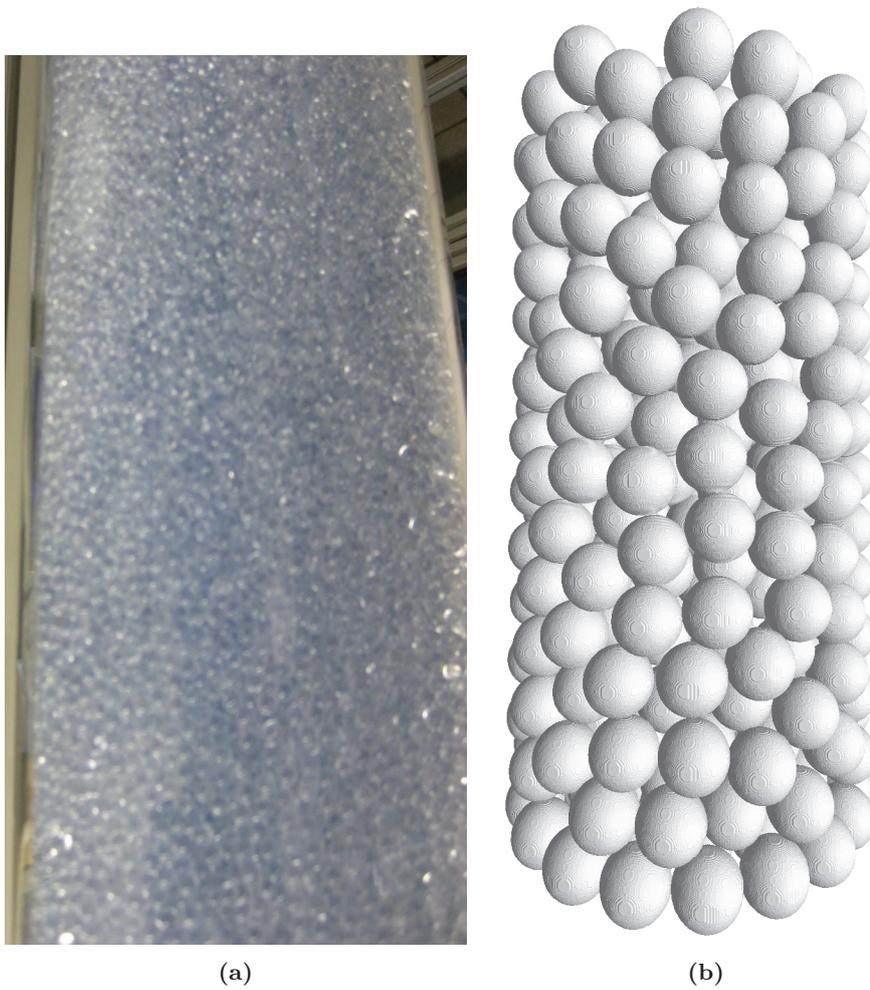


Figure III.4. Empilements (a) réel et (b) numérique de particules sphériques

fluide est continue dans ce lit également. Quant aux particules, elles sont entassées les unes sur les autres. Elles sont donc en contact entre elles. Le fait que les phases fluide et solide sont continues va nous permettre de définir des graphes connexes, c'est-à-dire qu'il doit exister au moins un chemin permettant de relier deux nœuds quelconques dans un même graphe. Les méthodes d'extraction des graphes à partir de ces lits qui vont définir notre système seront expliquées dans le chapitre suivant. Dans cette section, nous allons expliquer comment, à partir des graphes des phases, représenter mathématiquement les bilans dans un lit fixe catalytique sous forme hamiltonienne à port.

III.3.1 Discrétisation d'un lit de particules à l'aide de trois graphes

La discrétisation du lit de particules consiste dans un premier temps à discrétiser les phases solide et fluide séparément comme deux systèmes indépendants. L'ensemble des éléments discrets de chaque phase constitue alors un graphe formé de nœuds et d'arêtes. Puis dans un second temps, un troisième graphe est créé pour assurer les échanges entre les deux phases. Ainsi, le lit fixe de particules discrétisé est représenté par trois graphes : un graphe pour le transfert entre les particules solides, un graphe pour le transport à travers les pores contenant du fluide et un graphe pour les échanges entre les deux phases. Enfin, le lit de particules étant un système ouvert, nous avons dû définir les éléments (nœuds et arêtes) à la frontière du système.

Comme lors de la discrétisation d'un milieu continu homogène, pour chaque étape, différentes options se sont présentées à nous quant au positionnement des nœuds dans le système, à la définition des arêtes (liens entre les nœuds) et à celle des éléments à la frontière du système. Les choix que nous avons faits ont été en général directement dictés par la physique. En effet, les variables physiques extensives utilisées dans les équations de bilans, telles que l'énergie, l'énergie interne, la masse, le nombre de moles ou la quantité de mouvement, sont intégrées sur des volumes et les densités de flux associées sont intégrées sur des surfaces et orientées. De ce fait, nous avons utilisé cette même logique pour définir les nœuds et les arêtes. Les nœuds et arêtes des graphes sont conventionnellement orientés pour pouvoir définir les signes des variables physiques associées. En effet, une variable associée à un nœud est négative si le nœud est considéré comme une source, c'est-à-dire qu'il apporte quelque chose au système, et elle est positive si le nœud reçoit du système. Ici, nous avons considéré que les variables associées aux nœuds sont positives. Quant aux arêtes, ce sont des vecteurs dans le sens où elles ne produisent rien et n'accumulent rien, donc le sens de son orientation dépend de celui des échanges. Ici, nous leur avons donné un sens par défaut : la variable associée à l'arête est positive ou négative selon qu'elle est échangée dans le sens du vecteur représentant l'arête ou dans le sens opposé. De ce fait, nous avons associé les nœuds aux volumes de matière : les particules pour la phase solide et les cellules fluides entre les particules pour la phase fluide comme illustré sur la Figure III.5. Les cercles gris représentent les billes et les points rouges, leurs centres. Les cellules colorisées en jaune, bleu ou marron se trouvant entre les cercles gris représentent les éléments discrets de la phase fluide et les points verts correspondent à leurs barycentres. Quant aux arêtes, nous les avons associées aux surfaces d'échanges aux points de contact entre les particules, les surfaces de contact entre les cellules de fluide et les surfaces de contact entre les cellules fluides et les particules que nous avons appelées *interfaces* pour

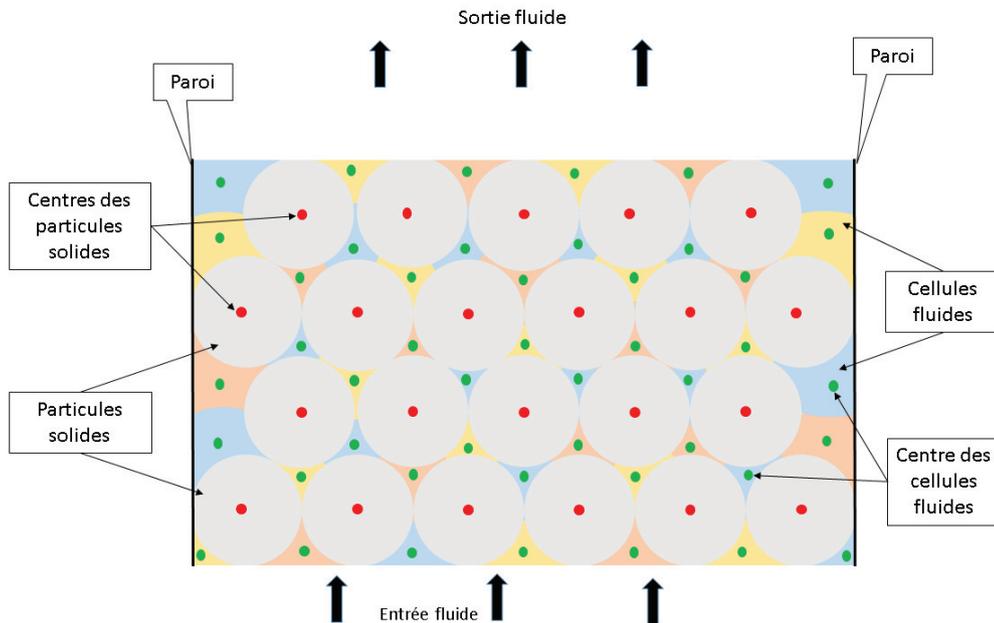


Figure III.5. Représentation d'un empilement de sphères en 2D traversé par un fluide du bas vers le haut. Points rouges = nœuds solides. Points verts = nœuds fluides.

éviter les ambiguïtés avec les surfaces de contact entre cellules d'une même phase (voir les Figures III.6, III.7 et III.8).

Contrairement à la terminologie donnée dans la sous-section III.2.1.2, pour tous les graphes de ce modèle, nous avons distingué quatre types de nœuds : interne, de bord, «Border» et «Ghost», qui n'ont pas la même signification que dans la sous-section III.2.1.2. Cette nouvelle terminologie a été choisie pour distinguer les nœuds en fonction de leur position dans le lit et les différents types d'échanges qu'ils subissent. Les *nœuds internes* de la terminologie de la sous-section III.2.1.2 sont divisés en deux catégories de nœuds : interne et de bord. Les *nœuds de port de bord*, qui sont sur la limite du système, sont aussi divisés en deux catégories de nœuds : «Border» et «Ghost». Pour chaque phase, nous allons détailler la description des graphes et préciser la terminologie de ce modèle pour éviter les ambiguïtés.

III.3.1.1 Graphe de la phase solide

La construction du graphe de solide se fait en attribuant à chaque particule solide un nœud assimilé à son centre de gravité et en créant des arêtes permettant de relier les particules qui sont en contact.

Les particules solides sont des entités volumiques, mais elles sont représentées dans le graphe par des points (nœuds) (Figure III.6) (voir la sous-section III.2.2.3 pour plus de détails). Les nœuds sont classés en trois catégories : les nœuds internes, les nœuds de bord et les nœuds externes.

- Les nœuds internes (disques rouges pleins) représentent les particules se trouvant dans le lit et qui ne sont en contact direct ni avec la paroi du lit, ni avec l'extérieur.
- Les nœuds de bord (cercles rouges) représentent les particules du lit ayant un contact direct avec l'extérieur ou avec la paroi.
- Les nœuds externes (disques rouges hachurés) correspondent aux nœuds «Border». Ce sont des nœuds qui sont associés à des éléments discrets fictifs, dans le même état physique que les billes, situés à la limite du système. Ils sont créés pour pouvoir imposer des conditions de bords au système et assurer les échanges du lit avec son environnement, ces conditions de bords étant aussi appelées conditions limites ou ports suivant les communautés de chercheurs. Les nœuds externes n'ont que les nœuds de bord comme voisins et en général, ils n'ont qu'un seul voisin. Ils sont définis aux points de contact ou surfaces de contact entre les billes et la paroi.

On remarque que, dans l'équation III.31, l'ensemble des nœuds internes et de bord appartiennent à Λ^{0I} et l'ensemble des nœuds externes appartiennent à Λ^{0B} .

Les propriétés géométriques de chaque particule sont conservées ; elles servent soit à pondérer le graphe, soit à calculer des valeurs de variables moyennes se référant aux nœuds. Les propriétés géométriques sont les volumes des particules et les surfaces de contact entre particules. Les volumes sont utilisés lors du calcul des variables volumiques telle que l'énergie interne. Les nœuds externes étant des nœuds fictifs, leur volume est nul.

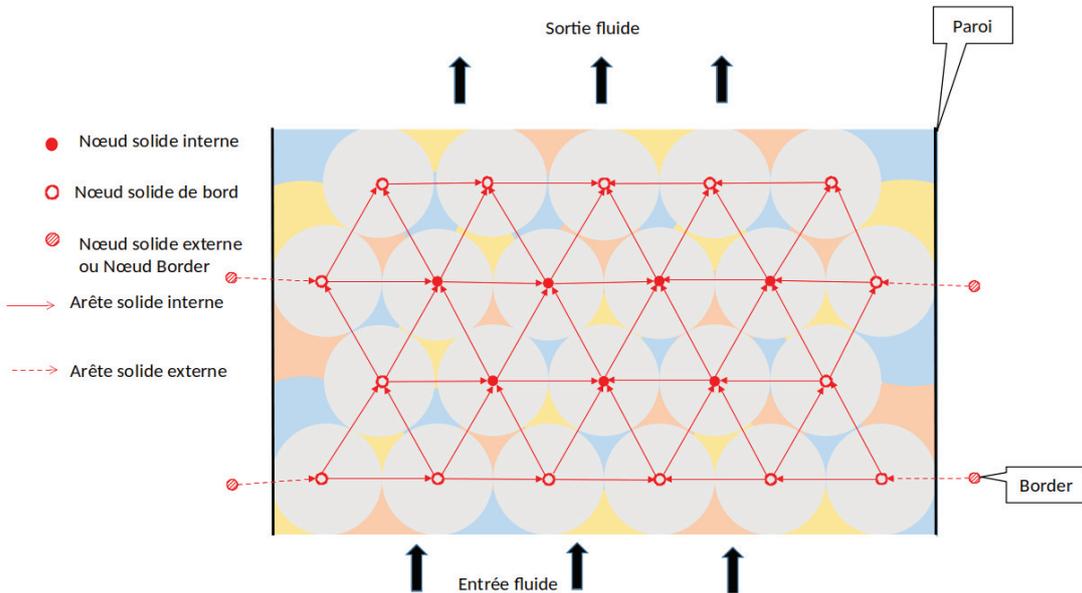


Figure III.6. Graphe de la phase solide pour l'empilement de sphères en 2D de la figure III.5.

Physiquement, les contacts entre deux particules voisines peuvent être soit des surfaces, soit des points (si les particules sont parfaitement sphériques et indéformables). Ils sont représentés dans le graphe par des arêtes (des lignes ou flèches si le graphe est orienté) reliant les

deux nœuds représentant les billes en contact (Figure III.6). Les surfaces de contact servent à calculer les flux entre deux particules solides, elles servent de poids de pondération. Des coordonnées géométriques, attribuées aux nœuds afin de les localiser dans l'espace du système, permettent de calculer les longueurs des arêtes.

Les arêtes sont également définies en deux catégories dont on peut voir une représentation illustratrice dans la figure III.6 :

- Les arêtes internes (traits continus rouges) qui permettent de relier deux nœuds internes ou un nœud interne et un nœud de bord ou deux nœuds de bord.
- Les arêtes externes (traits en pointillés rouges) qui permettent de relier un nœud de bord à un nœud externe ou nœud Border.

Les arêtes des graphes doivent être orientées. Ici, nous avons arbitrairement orienté les arêtes internes du bas de l'empilement vers le haut de l'empilement et de l'extérieur vers l'intérieur de l'empilement. Quant aux arêtes externes, elles ont été orientées pour l'exemple de la paroi vers l'intérieur.

L'interconnexion des nœuds à l'aide des arêtes internes et externes constitue le graphe de la phase solide. La figure III.6 montre le graphe orienté de la phase solide construit à partir de l'empilement 2D discrétisé montré dans la figure III.5.

III.3.1.2 Graphe de la phase fluide

Le graphe de la phase fluide est construit en suivant la même logique que pour la phase solide. C'est-à-dire en attribuant un nœud à chaque élément discret de la phase fluide et en reliant les éléments discrets voisins entre eux par des arêtes. La phase fluide étant continue, elle est discrétisée en cellules. Les hypothèses de discrétisation de la phase fluide et de calcul de la position des nœuds ne seront pas traitées ici, mais dans la partie traitant du traitement d'images (section IV.4).

Comme dans le graphe solide, les cellules fluides sont des entités volumiques. Elles sont représentées dans le graphe par des nœuds (points verts) (Figure III.7). Comme pour la phase solide, les nœuds sont classés en trois catégories : les nœuds internes, les nœuds de bord et les nœuds externes.

- Les nœuds internes (disques verts pleins) représentent les cellules se trouvant au cœur du lit et qui ne sont en contact direct ni avec la paroi du lit, ni avec l'extérieur.
- Les nœuds de bord (cercles verts) représentent les cellules de fluide ayant un contact direct avec l'extérieur ou avec la paroi.
- Les nœuds externes (disques verts hachurés), appelés aussi nœuds «Border», sont des nœuds qui sont liés à des éléments discrets fictifs dans le même état physique à la limite du système. Ils sont créés pour pouvoir imposer des conditions aux limites aux bords du système et assurer les échanges du lit avec son environnement. Les nœuds externes n'ont que les nœuds de bord comme voisins et en général, ils n'ont qu'un seul voisin. Ils sont définis aux interfaces ou surfaces de contact entre les cellules et le fluide externe au niveau des extrémités du lit.

Les propriétés géométriques de chaque cellule servent soit à pondérer le graphe, soit à calculer des valeurs de variables moyennes se référant aux nœuds. Les propriétés géométriques

sont les volumes des cellules et les surfaces de contact entre cellules. Les volumes sont utilisés lors du calcul des variables volumiques telles que l'énergie interne.

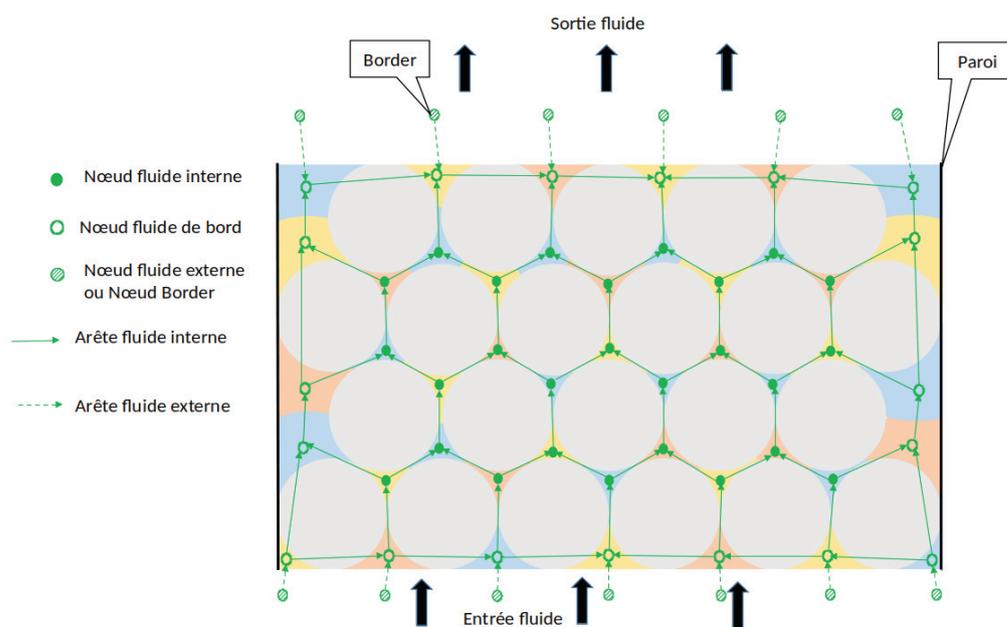


Figure III.7. Graphe de la phase fluide pour l'empilement de sphères en 2D de la figure III.5

Physiquement, les contacts entre deux cellules fluides voisines sont des surfaces. Ils sont représentés dans le graphe par des arêtes (des lignes ou flèches si le graphe est orienté) (Figure III.7). Les surfaces de contact servent à calculer les flux entre deux cellules fluides, elles servent de poids de pondération dans le graphe. Des coordonnées géométriques sont aussi attribuées aux nœuds permettant de les localiser dans l'espace du système, elles permettent de calculer les longueurs des arêtes internes.

Les arêtes sont également définies en deux catégories dont on peut voir une représentation illustratrice dans la figure III.7 :

- Les arêtes internes (traits continus verts) qui permettent de relier deux nœuds internes ou un nœud interne et un nœud de bord ou deux nœuds de bord.
- Les arêtes externes (traits en pointillés verts) qui permettent de relier un nœud de bord à un nœud externe ou nœud Border.

Les arêtes du graphe de fluide sont orientées avec la même logique que le graphe de la phase solide. L'interconnexion des nœuds à l'aide des arêtes internes et externes constitue le graphe de la phase fluide. La figure III.7 montre le graphe orienté de la phase fluide construit à partir de l'empilement 2D discrétisé montré dans la figure III.5.

III.3.1.3 Graphe de transport entre les phases solide et fluide

Le graphe entre les phases solide et fluide ou graphe de couplage sert à représenter les échanges entre les deux phases (solide et fluide). Ce sont des échanges qui se font aux interfaces solide/fluide. Le graphe est construit en reliant les nœuds de la phase fluide aux nœuds de la phase solide, deux à deux, par des arêtes si les deux nœuds ont une interface en commun. Comme pour les graphes des phases solide et fluide, des nœuds sont associés à des éléments

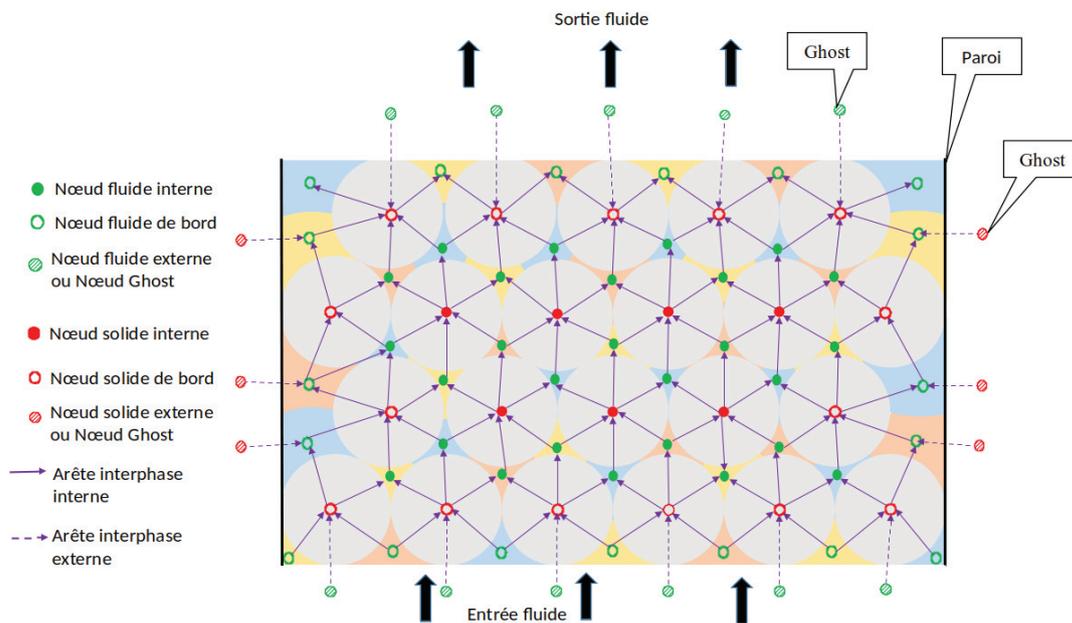


Figure III.8. Graphe de couplage

discrets fictifs aux bords du système. Nous les avons appelés les nœuds «Ghost». Pour les nœuds «Ghost», comme pour les nœuds «Border», nous avons défini deux types de nœuds «Ghost», les nœuds «Ghost» de la phase solide (disques rouges hachurés) et les nœuds «Ghost» de la phase fluide (disques verts hachurés).

Les arêtes sont de deux types :

- Les arêtes internes (traits continus violets) qui relient des nœuds internes ou de bord de la phase fluide avec des nœuds internes ou de bord de la phase solide.
- Les arêtes externes (traits en pointillé violets) qui relient les nœuds «Ghost» aux nœuds de bord dans l'état opposé. Par exemple, le nœud «Ghost» fluide (vert) sera relié à un nœud de bord solide (rouge) et vis-et-versa.

Le graphe de couplage des deux phases, de l'empilement illustratif dessiné dans la figure III.5, est représenté sur la figure III.8. Il est étendu aux nœuds externes de type «Ghost» des deux phases. En fait, le graphe de couplage est construit à partir de l'interconnexion des nœuds internes, de bord et «Ghost» des deux phases. Comme les graphes de phase, c'est un graphe orienté, pondéré et connexe.

III.3.2 Équations de bilan d'énergie pour un milieu hétérogène composé de 2 phases

Considérons un milieu hétérogène constitué de deux phases, une phase solide s et une phase fluide f , définies sur un domaine spatial de dimension n , borné et connexe $V \subset \mathbb{R}^n$, de bord ∂V et supposons qu'il soit le lieu de transfert de chaleur par conduction et d'échange entre les deux phases. L'équation de bilan d'énergie sur chaque phase α ($\alpha \in \{s, f\}$) est donnée par l'équation III.32. Elle constitue l'extension de l'équation III.7 à un système hétérogène.

$$\rho^\alpha \partial_t u^\alpha = -\text{div}(\phi^\alpha) \quad (\text{III.32})$$

où ρ^α est la masse volumique de la phase α , u^α son énergie interne, ϕ^α son flux thermique et $\phi^{\alpha\beta}$ le flux thermique échangé entre les phases α et β ($\alpha \neq \beta \in \{s, f\}$). Le flux thermique ϕ^α s'exprime, en utilisant la loi de Fourier, par la fonction quasi-linéaire :

$$\phi^\alpha = \lambda^\alpha(T) F^\alpha \quad (\text{III.33})$$

où $\lambda^\alpha(T)$ est la conductivité thermique et F^α est la force thermodynamique de la conduction thermique :

$$F^\alpha = -\text{grad } T^\alpha \quad (\text{III.34})$$

En regroupant les équations III.32 et III.34 pour les deux phases s et f dans un même système, on obtient le système :

$$\begin{cases} \rho^s \partial_t u^s = -\text{div}(\phi^s) \\ \rho^f \partial_t u^f = -\text{div}(\phi^f) \\ F^s = -\text{grad } T^s \\ F^f = -\text{grad } T^f \end{cases} \quad (\text{III.35})$$

avec

$$\begin{cases} \phi^s = \lambda^s(T^s) F^s \\ \phi^f = \lambda^f(T^f) F^f \end{cases} \quad (\text{III.36})$$

Les relations constitutives entre l'énergie interne et la température dans chaque phase sont regroupées dans le système III.37 :

$$\begin{cases} du^s = c_v^s dT^s \\ du^f = c_v^f dT^f \end{cases} \quad (\text{III.37})$$

où c_v^α ($\alpha \in \{s, f\}$) est la capacité calorifique de la phase α .

III.3.3 Bilans d'énergie discrets pour le milieu hétérogène

L'écriture du système III.35 sous forme discrète consiste à considérer que les trois graphes, décrits dans la sous-section III.3.1, forment un seul espace discrétisé dans lequel chaque bilan sera appliqué sur un seul graphe. Nous notons s_i un élément discret (nœud) de la phase solide de volume v_i^s et de surface ∂v_i^s et f_j un élément discret (nœud) de la phase fluide de volume

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

v_j^f et de surface ∂v_j^f . Les deux éléments discrets s_i de la phase solide et f_j de la phase fluide sont supposés voisins, c'est-à-dire qu'ils échangent de la chaleur (voir figure III.8). Pour des raisons de simplicité, dans la suite, nous ferons référence à s_i et f_j directement par leurs indices respectifs i et j .

Soient k un élément discret (nœud) de la phase solide voisin à i et l un élément discret (nœud) de la phase fluide voisin à j , le système III.35 peut se réécrire sous forme discrète en intégrant les deux premières équations sur v_i et v_j et les deux suivantes sur L_{ik} (chemin entre les centres des éléments discrets i et k appartenant au graphe solide) et L_{jl} (chemin entre les centres des éléments discrets j et l appartenant au graphe fluide) :

$$\begin{cases} \int_{v_i} \rho_i^s \partial_t u_i^s dv = - \int_{v_i} \text{div}(\phi_i^s) dv \\ \int_{v_j} \rho_j^f \partial_t u_j^f dv = - \int_{v_j} \text{div}(\phi_j^f) dv \\ \int_{L_{ik}} F_{ik}^s dL = - \int_{L_{ik}} \text{grad } T^s dL \\ \int_{L_{jl}} F_{jl}^f dL = - \int_{L_{jl}} \text{grad } T^f dL \end{cases} \quad (\text{III.38})$$

où ρ_i^s est la masse volumique en chaque point de l'élément i , u_i^s est l'énergie interne spécifique dans chaque volume élémentaire dv de i , ϕ_i^s le flux de chaleur échangé entre un volume élémentaire dv de i et ses voisins de la phase solide. ρ_j^f est la masse volumique en chaque point de l'élément j , u_j^f est l'énergie interne spécifique dans chaque volume élémentaire dv de j , ϕ_j^f le flux de chaleur échangé entre un volume élémentaire dv de j et ses voisins de la phase fluide. F_{ik}^s et F_{jl}^f sont les forces motrices respectivement entre les éléments i et k et entre les éléments j et l . T_i^s est la température moyenne de l'élément i et T_j^f est celle de l'élément j .

Les relations constitutives écrites dans les systèmes III.36 et III.37 peuvent aussi être réécrites sous forme discrète dans le système III.39.

$$\begin{cases} \int_{initial}^{final} du_i^s = \int_{initial}^{final} c_{v,i}^s dT_i^s \\ \int_{initial}^{final} du_j^f = \int_{initial}^{final} c_{v,j}^f dT_j^f \\ \phi_{ik}^s = \lambda_{ik}^s F_{ik}^s \\ \phi_{jl}^f = \lambda_{jl}^f F_{jl}^f \end{cases} \quad (\text{III.39})$$

— En supposant une température uniforme dans chaque élément discret, alors le gradient entre deux éléments voisins i et k de la phase solide se traduit par :

$$\int_{L_{ik}} F_{ik}^s dL = - \int_{L_{ik}} \text{grad } T^s dL \Rightarrow F_{ik}^s = - \frac{T_k - T_i}{L_{ik}} \quad (\text{III.40})$$

De même, pour la phase fluide, nous avons :

$$F_{jl}^f = - \frac{T_l - T_j}{L_{jl}} \quad (\text{III.41})$$

— En sachant que d'après le théorème de la divergence (Gauss-Ostrogradsky) :

$$\int_v \operatorname{div} \phi \, dv = \int_{\partial v} \phi \, ds \quad (\text{III.42})$$

— En définissant les variables suivantes :

$$\begin{cases} U_i^s = \int_{v_i} \rho_i^s u_i^s \, dv \\ U_j^f = \int_{v_j} \rho_j^s u_j^s \, dv \\ \Phi_{ik}^s = \int_{\partial v_{ik}} \phi_{ik}^s \, ds = A_{ik} \phi_{ik}^s \\ \Phi_{jl}^f = \int_{\partial v_{jl}} \phi_{jl}^f \, ds = A_{jl} \phi_{jl}^f \\ \Phi_{ij}^{sf} = \int_{\partial v_{ij}} \phi_{ij}^{sf} \, ds = A_{ij} \phi_{ij}^{sf} \\ \mathcal{F}_{ik}^s = F_{ik}^s L_{ik} \\ \mathcal{F}_{jl}^f = F_{jl}^f L_{jl} \\ \mathcal{F}_{ij}^{sf} = F_{ij}^{sf} \end{cases} \quad (\text{III.43})$$

— En nommant :

- o N_i^s le nombre de voisins de la phase solide pour i
- o N_i^f le nombre de voisins de la phase fluide pour i
- o N_j^f le nombre de voisins de la phase fluide pour j
- o N_j^s le nombre de voisins de la phase solide pour j

— En constatant que la surface totale de chaque élément discret est la somme de ses interfaces avec les autres éléments discrets voisins :

$$\begin{aligned} \partial_i &= \sum_k^{N_i^f} \partial_{ik} + \sum_j^{N_i^s} \partial_{ij} \\ \partial_j &= \sum_l^{N_j^s} \partial_{jl} + \sum_i^{N_j^f} \partial_{ij} \end{aligned}$$

Alors le système III.38 devient :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} U_i^s = - \sum_k^{N_i^s} \Phi_{ik}^s - \sum_j^{N_i^f} \Phi_{ij}^{sf} \\ \frac{d}{dt} U_j^f = - \sum_l^{N_j^f} \Phi_{jl}^f + \sum_i^{N_j^s} \Phi_{ij}^{sf} \\ \mathcal{F}_{ik}^s = -(T_k - T_i) \\ \mathcal{F}_{jl}^f = -(T_l - T_j) \\ \mathcal{F}_{ij}^{sf} = -(T_j - T_i) \end{cases} \quad (\text{III.44})$$

En intégrant les deux premières équations du système III.39 d'un état de référence à un état quelconque et sur les volumes de cellules solides et fluides, les relations constitutives se

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

réécrivent comme dans le système III.45 :

$$\begin{cases} \Delta U_i^s = \rho_i^s v_i^s c_{v,i}^s \Delta T_i^s \\ \Delta U_j^f = \rho_j^f v_j^f c_{v,j}^s \Delta T_j^s \\ \Phi_{ik}^s = \frac{A_{ik} \lambda_{ik}^s}{L_{ik}} \mathcal{F}_{ik}^s \\ \Phi_{jl}^f = \frac{A_{jl} \lambda_{jl}^f}{L_{jl}} \mathcal{F}_{jl}^f \\ \Phi_{ij}^{sf} = A_{ij} h_{ij}^{sf} \mathcal{F}_{ij}^{sf} \end{cases} \quad (\text{III.45})$$

Une forme plus simple du modèle peut être obtenue si les propriétés physiques ρ , λ et c_v sont supposées uniformes et constantes dans chaque phase et si les coefficients d'échange h^{sf} sont également supposés identiques et constants pour tous les couples $\{ij\}$. Cela veut dire que chaque phase est supposée isotrope et que les effets de pression et de température sur ses propriétés physiques sont considérés comme négligeables dans les conditions de travail. Alors :

$$\rho_i^s = \rho^s, \rho_j^f = \rho^f, \lambda_{ik}^s = \lambda^s, \lambda_{jl}^f = \lambda^f, c_{v,i}^s = c_v^s, c_{v,j}^f = c_v^f \text{ et } h_{ij}^{sf} = h^{sf}.$$

et le système III.45 devient :

$$\begin{cases} \Delta U_i^s = \rho^s v_i c_v^s \Delta T_i^s \\ \Delta U_j^f = \rho^f v_j c_v^f \Delta T_j^s \\ \Phi_{ik}^s = \frac{A_{ik} \lambda^s}{L_{ik}} \mathcal{F}_{ik}^s \\ \Phi_{jl}^f = \frac{A_{jl} \lambda^f}{L_{jl}} \mathcal{F}_{jl}^f \\ \Phi_{ij}^{sf} = A_{ij} h^{sf} \mathcal{F}_{ij}^{sf} \end{cases} \quad (\text{III.46})$$

Les propriétés géométriques des éléments discrets du lit sont par contre dépendantes de chaque élément et permettent de prendre en compte l'anisotropie du milieu. Il est donc important de les déterminer et de les conserver dans le modèle. Leurs méthodes de détermination font l'objet de la section IV.6. Les propriétés géométriques des éléments discrets du lit sont les volumes v_i et v_j , les longueurs des arêtes L_{ik} , L_{jl} et L_{ij} et les surfaces des interfaces entre éléments voisins A_{ik} , A_{jl} et A_{ij} .

III.3.4 Formulation du système pseudo-hamiltonien à port discret pour les lits granulaires

Le système III.44 est ici réécrit sous forme matricielle pour faire apparaître l'opérateur hamiltonien \mathcal{J} . Pour ceci, nous avons regroupé les variables discrètes dans des vecteurs en suivant les notations suivantes : les énergies internes et les températures discrètes sont regroupées respectivement dans les vecteurs U^α et T^α avec $\alpha \in \{s, f\}$, les puissances thermiques discrètes et les forces motrices respectivement dans les vecteurs Φ^α et $\Phi^{\alpha\beta}$ et \mathcal{F}^α et $\mathcal{F}^{\alpha\beta}$ avec $\alpha \in \{s, f\}$ et $\alpha \neq \beta \in \{s, f\}$. Les températures et les énergies internes sont associées aux nœuds et les forces motrices et les flux thermiques aux arêtes.

Le système III.44 est réécrit sous forme matricielle pour tout le lit fixe avec des conditions aux limites de type Dirichlet, c'est-à-dire les températures aux bords sont fixées. Les arêtes externes de chaque graphe, arêtes liées aux nœuds «Border» et «Ghost», sont appelées ports

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

et les variables associées sont appelés variables de ports. Il en résulte le système pseudo-hamiltonien à port III.47.

$$Y = \mathcal{J}X + \mathcal{J}_B X_B \quad (\text{III.47})$$

avec

$$Y = \left(\frac{d}{dt}U^s \quad \frac{d}{dt}U^f \quad \mathcal{F}^s \quad \mathcal{F}_B^s \quad \mathcal{F}^f \quad \mathcal{F}_B^f \quad \mathcal{F}^{sf} \quad \mathcal{F}_G^s \quad \mathcal{F}_G^f \right)^T \quad (\text{III.48})$$

où $\mathcal{F}_B^s, \mathcal{F}_B^f$ sont des vecteurs contenant les forces motrices discrètes associées aux ports respectivement du graphe de la phase solide et de celui de la phase fluide. $\mathcal{F}_G^s, \mathcal{F}_G^f$ contiennent les forces motrices discrètes associées aux ports du graphe de couplage solide/fluide. Les indices B et G font référence aux ports : arêtes «Border» et «Ghost» (voir section III.3.1).

et avec

$$X = \left(T^s \quad T^f \quad \Phi^s \quad \Phi_B^s \quad \Phi^f \quad \Phi_B^f \quad \Phi^{sf} \quad \Phi_G^s \quad \Phi_G^f \right)^T \quad (\text{III.49})$$

où

$$\begin{cases} \Phi_B^s = \lambda^s \mathcal{A}_B^s \mathcal{L}_B^s \mathcal{F}_B^s \\ \Phi_B^f = \lambda^f \mathcal{A}_B^f \mathcal{L}_B^f \mathcal{F}_B^f \\ \Phi_G^s = h_G^{sf} \mathcal{A}_G^s \mathcal{F}_G^s \\ \Phi_G^f = h_G^{sf} \mathcal{A}_G^f \mathcal{F}_G^f \end{cases}$$

Ici, \mathcal{A}_B^α et \mathcal{L}_B^α sont des matrices diagonales contenant respectivement les surfaces de contact et les inverses des longueurs des arêtes entre les nœuds de bord et les nœuds «Border». \mathcal{A}_G^α est une matrice diagonale contenant les surfaces des interfaces entre les nœuds voisins de phases différentes.

avec

$$X_B = \left(T_B^s \quad T_B^f \quad T_G^s \quad T_G^f \right)^T \quad (\text{III.50})$$

où T_B^α et T_G^α sont des vecteurs contenant les températures discrètes associées respectivement aux nœuds «Border» et aux nœuds «Ghost».

Les matrices \mathcal{J} et \mathcal{J}_B peuvent s'écrire comme suit :

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\mathcal{D}_1 & -\mathcal{D}_{B1} & 0 & 0 & -\mathcal{D}_3 & -\mathcal{D}_{G3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathcal{D}_2 & -\mathcal{D}_{B2} & -\mathcal{D}_4 & 0 & -\mathcal{D}_{G4} \\ \mathcal{D}_1^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{D}_{B1}^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_2^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_{B2}^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{D}_3^T & \mathcal{D}_4^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{D}_{G3}^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_{G4}^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.51})$$

$$\mathcal{J}_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbb{D}_{B1}^T \mathcal{D}_{B1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{D}_{B2}^T \mathcal{D}_{B2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{D}_{G3}^T \mathcal{D}_{G3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbb{D}_{G4}^T \mathcal{D}_{G4} \end{pmatrix} \quad (\text{III.52})$$

La matrice \mathcal{J} est anti-symétrique. Elle représente la structure de l'empilement discrétisé. La matrice \mathcal{J}_B représente les liens du lit avec son environnement. Les éléments de la matrice \mathcal{J} sont plus précisément les matrices d'incidences \mathcal{D} extraites à partir des trois graphes (voir la section IV.5.2). Quant à la matrice \mathcal{J}_B , ses éléments sont équivalents à des matrices signatures avec \mathbb{D} , les matrices d'incidence sans signe.

Sachant que pour chaque graphe, les nœuds internes, de bord, «Border» et «Ghost» sont notés respectivement n_i , n_b , n_B et n_G et les arêtes internes et de bord e_i et e_b . Les éléments non nuls des matrices \mathcal{J} et \mathcal{J}_B sont décrits comme suit :

- \mathcal{D}_1 : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_i et n_b de la phase solide et les arêtes e_i les reliant entre eux.
- \mathcal{D}_{B1} : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_b de la phase solide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds n_B de la même phase.
- \mathbb{D}_{B1} : matrice d'incidence sans signe entre les nœuds n_b de la phase solide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds n_B de la même phase.
- \mathcal{D}_2 : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_i et n_b de la phase fluide et les arêtes e_i les reliant entre eux ;
- \mathcal{D}_{B2} : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_b de la phase fluide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds n_B de la même phase.
- \mathbb{D}_{B2} : matrice d'incidence sans signe entre les nœuds n_b de la phase fluide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds n_B de la même phase.
- \mathcal{D}_3 : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_i et n_b de la phase solide et les arêtes e_i les reliant aux nœuds n_i et n_b de la phase fluide.
- \mathcal{D}_4 : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_i et n_b de la phase fluide et les arêtes e_i les reliant aux nœuds n_i et n_b de la phase solide.
- \mathcal{D}_{G3} : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_b de la phase solide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds «Ghost» n_G d'une autre phase (différente de la phase solide).
- \mathbb{D}_{G3} : matrice d'incidence sans signe entre les nœuds n_b de la phase solide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds «Ghost» n_G d'une autre phase (différente de la phase solide).
- \mathcal{D}_{G4} : matrice d'incidence orientée entre les nœuds n_b de la phase fluide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds «Ghost» n_G d'une autre phase (différente de la phase fluide).

- \mathbb{D}_{G4} : matrice d'incidence sans signe entre les nœuds n_b de la phase fluide et les arêtes e_b les reliant aux nœuds «Ghost» n_G d'une autre phase (différente de la phase fluide)

Avec la matrice \mathcal{J} , nous retrouvons bien l'opérateur hamiltonien. Le système est donc bien une structure de Dirac dans lequel nous retrouvons les variables de flux et d'efforts ainsi que les variables de bord (voir équation III.21).

III.4 Conclusion

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons présenté la théorie des systèmes hamiltoniens à ports en se basant sur la littérature. Des exemples simples tels qu'un circuit LC avec une source de tension S , un circuit RLC et la conduction thermique sur un système homogène non réactif, ont été utilisés pour illustrer la définition des systèmes hamiltoniens et mettre en évidence l'importance d'une structure de Dirac (voir la **définition III.2.1**) dans ces systèmes. Mais, pour expliciter la définition des systèmes hamiltoniens à port, la conduction thermique sur un domaine discrétisé et son équivalent électrique, c'est-à-dire un circuit RC échangeant avec son environnement, ont été utilisés. Ces systèmes ont été représentés par des graphes. Les équations différentielles qui régissent le système physique sont écrites de façon structurée. Les opérateurs, représentés par des matrices comme \mathcal{D}_I et \mathcal{D}_B pour les circuits électriques ou les matrices ∂_{1I} et ∂_{1B} pour le bilan d'énergie, sont antisymétriques. Les variables d'effort et de flux (courant i et les tensions v pour le circuit électrique ou la dérivée temporelle de l'énergie interne, la force thermodynamique, la dérivée variationnelle de l'entropie et le flux thermique pour le bilan d'énergie), complétées par les variables de port permettant d'échanger avec l'environnement du système physique, forment une structure de Stokes-Dirac (voir la **définition III.2.3**) notée \mathcal{D} pour le circuit RLC et \mathcal{D}_{10} pour la conduction thermique. Mais pour la conduction, l'utilisation de la dérivée variationnelle de l'entropie conduit à un système non linéaire. Donc pour linéariser le système, cette variable qui est équivalente à une réciproque de température ($1/T$) a été tout simplement remplacée par la température. Le système est donc relativement dégradé dans le sens où les variables de part et d'autre de l'opérateur antisymétrique appelé aussi opérateur hamiltonien ne sont pas thermodynamiquement conjuguées. Mais pour notre modèle, la propriété des systèmes hamiltoniens à port qui nous intéresse le plus est l'antisymétrie de l'opérateur. Le système linéaire obtenu est alors appelé système pseudo-hamiltonien à port.

La deuxième partie de ce chapitre a été consacrée à l'écriture des équations différentielles qui régissent la conduction thermique dans un lit fixe contenant un fluide stagnant sous forme d'un système pseudo-hamiltonien à port. Le lit fixe a été discrétisé et représenté par trois graphes : un graphe pour la phase solide, un graphe pour la phase fluide et un graphe de couplage solide fluide. Un bilan d'énergie a été établi pour chacune des deux phases séparément en y ajoutant un terme d'échange thermique. Les équations qui en résultent sont des équations différentielles du 1er degré qui sont complétées par des relations constitutives. Les équations de bilan et les relations constitutives définissant les forces thermodynamiques sont écrites dans un système d'équations qui est ensuite réécrit sous forme discrétisée. Les éléments discrets de chaque variable sont regroupés dans des vecteurs et la structure d'interconnexion est représentée par des matrices d'incidences ou leurs transposées. La structure globale du

Modèles de transport dans les milieux particuliers : Système pseudo-hamiltonien à port

Le système sans échange avec l'environnement est antisymétrique, elle constitue l'opérateur hamiltonien du lit. Des matrices qui permettent au lit d'échanger avec son environnement sont également déterminées. Les variables d'effort et de flux de part et d'autre de l'opérateur hamiltonien sont : des dérivées temporelles de l'énergie interne, des forces thermodynamiques, des températures et des flux thermiques. Ce qui nous a permis de confirmer que le système est bien un système pseudo-hamiltonien à port.

Comme nous venons de le voir, la simulation des phénomènes de transport dans un lit de sphères nécessite de discrétiser les phases et d'en tirer les matrices d'incidence. Pour ce faire, nous avons dû utiliser différents outils numériques pour simuler la structure d'un lit de sphères et en extraire les données topologiques et géométriques. C'est ce que nous allons montrer dans la suite de ce manuscrit.

Chapitre IV

Graphes de milieux granulaires : outils et méthodes

IV.1 Introduction

Ce chapitre présente les outils et méthodes qui permettent d'obtenir les trois graphes nécessaires à l'application du modèle numérique que nous avons présenté III.

Pour présenter notre méthodologie de modélisation des phénomènes de transport dans les milieux granulaires, nous avons pris le parti de nous servir d'un cas particulier qui nous servira de support. Notre raisonnement pourra être généralisé ultérieurement. Ainsi, notre modèle a été établi pour des lits fixes dont les particules sont supposées sphériques et monodisperses. Pour ce modèle, nous avons besoin d'extraire trois graphes pour chaque empilement de particules incluant les catégories des nœuds (internes, de bord, Border, Ghost) ainsi que les valeurs des données géométriques (volume, surface, distance).

Pour extraire les graphes, la première étape du processus consiste à obtenir une représentation numérique en 3 dimensions du lit fixe. Pour cela, nous avons utilisé deux méthodes : soit l'empilement réel est scanné par tomographie RX, soit l'empilement numérique est construit par modélisation en utilisant la Méthode des Éléments Discrets (DEM) à l'aide d'un logiciel dédié. L'objectif dans les deux cas est d'obtenir les images d'un empilement numérique 3D de particules pour pouvoir étudier sa topologie et sa géométrie de telle sorte que chaque particule dans le lit puisse être détectée et isolée par analyse d'images. Enfin, la méthode de construction des trois graphes à partir de la détection des particules et la méthode de résolution du système pseudo-hamiltonien à port seront présentées.

IV.2 Représentation numérique 3D d'un empilement réel

L'utilisation d'un tomographe à rayon X¹ permet d'obtenir une représentation numérique en trois dimensions des empilements de particules (voir la figure III.4b). Cette technique non destructive permet de décrire la structure interne d'un objet (3D) par l'analyse multidirec-

1. C'est une technique d'imagerie non destructive, inventée en 1972 par Godfrey N. Hounsfield

tionnelle de l'interaction entre un faisceau de rayons X et la matière qui constitue l'objet. Une série d'images 2D est obtenue. Ces images en niveau de gris présentent des nuances proportionnelles à l'atténuation du rayonnement traversant la matière. La résolution des images dépend du niveau de précision de l'appareil utilisé (elle est proportionnelle à la taille des capteurs LCD et inversement à la taille de l'objet observé). Un exemple d'image 2D est donné dans la figure IV.1. Celle-ci montre une des images obtenue par tomographie RX d'un empilement cylindrique de 6 cm de diamètre (tube en verre) composé de billes de verre sphérique de 5 mm de diamètre. L'acquisition de l'image a été réalisée sur le tomographe Phoenix X-ray (GE, Wunstorf, Germany) localisé dans le laboratoire MATHEIS de l'INSA de Lyon et a une résolution de 80 μm .

Ces images sont utilisées pour reconstruire le lit numériquement en se servant d'un logiciel de traitement d'images, en l'occurrence *iMorph*². Ces images 2D ayant une "épaisseur" physique, on parle donc ici de voxels, objets tridimensionnels cubiques, et non plus de pixels qui sont des objets 2D. La taille du voxel est directement caractéristique de la résolution de l'image en 3 dimensions. Par exemple, pour la figure IV.1 qui a une résolution de 80 μm , les voxels auront une taille de 80 μm x 80 μm x 80 μm . Dans la suite de ce travail, nous appellerons "taille de voxel" la taille d'un de ses côtés. Le nombre d'images et la taille des images sera donc directement en lien avec les dimensions de la zone tomographiée et de la résolution attendue de l'image. Le traitement des images sera abordé dans la suite plus en détail dans la section IV.4.

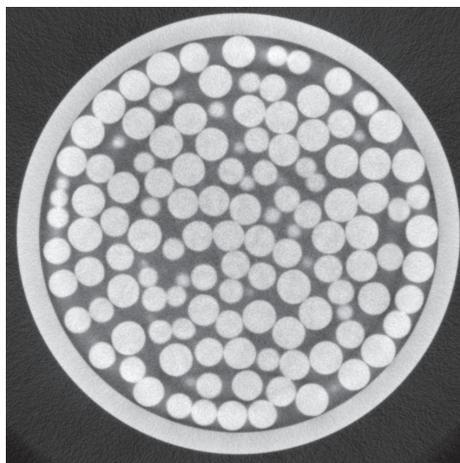


Figure IV.1. Image 2D d'une coupe d'un empilement de billes de verre dans un cylindre de 6 cm de diamètre obtenue par tomographie RX.

2. Le logiciel *iMorph* est développé par Jérôme Vicente, enseignant-chercheur en traitement d'image de l'IUSTI. Le lien de son site est : <https://technopole-marseille.com/imorph-la-3d-haute-resolution-pour-caracteriser-les-materiaux/>

IV.3 Construction 3D des empilements numériques par la modélisation DEM (Discret Element Method)

Pour nous permettre de varier plus facilement les caractéristiques des empilements (hauteur et diamètre de tube, diamètres des billes et polydispersité de la granulométrie, ...), nous avons utilisé la modélisation numérique pour générer des empilements numériques. Cette méthode est couramment utilisée dans la littérature [133, 134]. Nous avons choisi d'utiliser le code *LIGGGHTS*®³. *LIGGGHTS*® est un logiciel Open Source de simulation dynamique des déplacements de particules par la méthode des éléments discrets (DEM). C'est l'amélioration du simulateur classique de dynamique moléculaire LAMMPS⁴. *LIGGGHTS*® simule la chute des particules solides dans un récipient (cylindrique dans notre cas) en calculant les trajectoires (translations et rotations) de chaque particule et de ses éventuelles collisions avec les autres particules et la paroi. Pour ceci, il utilise les propriétés mécaniques des matériaux telles que le module de Young ou encore le coefficient de Poisson et permet d'obtenir des empilements simulés dont les caractéristiques et propriétés sont proches de celles des empilements réels. Pour s'assurer que nos empilements simulés soient les plus représentatifs possible, nous les avons comparés à des empilements réels, soit en les comparant avec ceux que nous avons tomographiés, soit en comparant leurs caractéristiques avec celles calculées à l'aide de corrélations de la littérature. Pour cela, nous avons choisi de comparer les profils de porosité ainsi que la distribution en nombre des points de contact.

Ce travail a été réalisé par Maxime Poulleau, étudiant de l'Université Claude Bernard de Lyon que j'ai co-encadré, dans le cadre de son stage de Master 2 entre le 1er février et 31 juillet 2021.

IV.3.1 Simulation d'empilements numériques avec *LIGGGHTS*®

La simulation se base sur la combinaison du principe fondamental de la dynamique appliquée aux particules (deuxième loi de Newton) et des équations régissant les collisions entre les particules et entre les particules et la paroi. Ces équations prennent en compte les angles de contacts, les rotations des particules et les forces de frottements qu'elles subissent. La zone d'introduction des particules a son importance, car elle détermine, entre autre, la vitesse de chute des particules. Par exemple, pour une particule i de masse m_i , la trajectoire de sa chute est déterminée à partir de la deuxième loi Newton :

$$m_i \vec{a}_i = \vec{F}_{total,i} \quad (\text{IV.1})$$

où \vec{a}_i est son accélération et $\vec{F}_{total,i}$ est la somme des forces exercées sur cette particule, qui sont les forces de contact avec les autres particules, les forces de contact avec le fluide environnant (air, dans notre cas), les forces de distance telle que la force gravitationnelle et les forces d'interactions moléculaires le cas échéant.

3. Le lien du site web est : <https://www.cfdem.com/liggghts-open-source-discrete-element-method-particle-simulation-code>

4. Pour plus d'information, voir le site <https://docs.lammps.org/Manual.html>

Pour calculer les forces de contact, plusieurs modèles sont possibles [135]. Dans notre cas, comme nous simulons la chute de billes de verre et d'alumine, nous avons supposé que les collisions entre particules sont non-élastiques. Donc, ces forces se ramènent à la somme des forces de contact normales $F_{contact,n,ij}$ et tangentielles $F_{contact,t,ij}$, où i et j sont les numéros des particules.

$$\vec{F}_{contact,i} = \sum_j (F_{contact,n,ij} \vec{n}_{ij} + F_{contact,t,ij} \vec{t}_{ij}) \quad (IV.2)$$

où, selon Cundall et Strack [136], \vec{n}_{ij} est le vecteur unitaire normal au plan de contact avec la particule j et pointant de j à i . \vec{t}_{ij} est le vecteur unitaire appartenant au plan de contact ij et pointant dans la direction opposée au déplacement relatif des deux particules. Les forces de contact s'écrivent comme suit :

$$\begin{cases} F_{contact,n,ij} = k_n \delta_{n,ij} + C_n \dot{\delta}_{n,ij} \\ F_{contact,t,ij} = k_t \delta_{t,ij} + C_t \dot{\delta}_{t,ij} \end{cases} \quad (IV.3)$$

Le premier et le second termes des deux équations correspondent respectivement aux forces répulsives et dissipatives. $\delta_{n,ij}$ et $\delta_{t,ij}$ sont les composantes normale et tangentielle du chevauchement entre les particules en contact i et j , k_n et k_t les coefficients de rigidité normale et tangentielle, C_n et C_t les coefficients d'amortissement normal et tangentiel et $\dot{\delta}_{n,ij}$ et $\dot{\delta}_{t,ij}$ sont la vitesse relative normale et la vitesse tangentielle en contact. Ces quatre coefficients dépendent de la composante normale du chevauchement entre deux particules voisines et du rayon moyen des particules [136]. Les coefficients normaux dépendent du module Young moyen et ceux tangentiels varient avec le coefficient de Poisson moyen. De plus, les coefficients d'amortissement sont fonction de la masse moyenne des particules et du coefficient de restitution. Le module Young est le module qui caractérise l'élasticité ou la rigidité d'un matériau. C'est la contrainte mécanique nécessaire pour engendrer un allongement du matériau jusqu'au doublement de sa longueur initiale. Mais dans les faits, la plupart des matériaux se déformeraient de façon permanente ou se casseraient avant que cette contrainte ne soit atteinte. Le coefficient de Poisson est une constante élastique qui varie entre -1 et 0,5. Il est positif pour la plupart des matériaux naturels. Il décrit l'expansion ou la contraction d'un matériau dans des directions perpendiculaires à la direction de la force appliquée. Le coefficient de restitution est un coefficient qui sert à mesurer l'élasticité ou le rebondissement d'une collision. C'est le quotient entre la vitesse relative après collision et la vitesse relative avant collision des deux corps. Lorsque les corps sont unis après la collision, ce quotient est nul. Il vaut 1 dans le cas où la collision est parfaitement élastique.

En plus des paramètres relatifs aux propriétés physico-chimiques des matériaux, des paramètres géométriques des particules et les conditions de remplissage jouent un rôle sur l'empilement obtenu. En effet, la forme et la taille des particules par rapport aux dimensions du tube vont avoir un effet sur la porosité moyenne et les profils de porosité. Ici, nous avons choisi de restreindre le champ des simulations aux particules sphériques et donc, seul le diamètre des particules sera modifié. Le débit de remplissage, la forme et la position de la zone de "largage" modifiant aussi la vitesse initiale de la particule et donc l'ensemble de sa trajectoire, nous avons mené une étude afin de déterminer les paramètres correspondant au mieux au

type de lit que nous souhaitons étudier. L'effet de la vitesse de remplissage sera présentée dans la section IV.3.3.3. Quant à la forme et la position de la zone de "largage", nous avons choisi des formes hexagonales centrées sur le centre du tube, juste au-dessus de l'ouverture du tube. Pour les tubes de 6 cm et 10 cm de diamètre, les diamètres des hexagones seront respectivement de 4 cm et de 8 cm de diamètre.

Pour chaque pas de temps prédéfini à l'avance, le programme de simulation crée un fichier *vtk* dans lequel, pour chaque particule référencée par un numéro d'identification, sont donnés les coordonnées du centre des particules, leur type et leur rayon. Pour tester notre modèle de conduction, nous ne nous sommes intéressés qu'aux fichiers pour lesquels nous étions sûrs que les billes étaient parfaitement immobiles pour pouvoir déterminer les caractéristiques des empilements stabilisés.

IV.3.2 Génération d'images pour la caractérisation des empilements numériques générés par la méthode DEM

À partir des coordonnées des centres des billes ainsi que leur rayon, nous avons construit une matrice binaire 3D sous *Matlab* représentant l'empilement de sphères. Les éléments de cette matrice sont donc des voxels. Les voxels appartenant à chaque bille, c'est-à-dire ceux qui sont situés à une distance de son centre inférieure à son rayon, prendront la valeur 1. Les voxels qui n'appartiennent à aucune bille auront la valeur 0. Les informations contenues dans cette matrice sont ensuite utilisées pour calculer les profils de porosité des empilements. Cette matrice binaire permet ensuite d'obtenir un ensemble d'images 2D binaires représentant des coupes de l'empilement suivant la hauteur. Ces images peuvent ensuite être analysées de la même façon que les images obtenues par tomographie, les méthodes employées seront décrites dans la section IV.4. Suivant la résolution souhaitée et les dimensions de l'empilement, cette matrice sera plus ou moins grande. Un compromis devra donc être fait entre la résolution de l'image et le temps de traitement des images ultérieur.

IV.3.3 Validation des simulations des empilements numériques

Pour valider les conditions de simulation des empilements obtenus avec LIGGGHT, nous avons comparé les caractéristiques des empilements numériques avec celles des empilements issus de la littérature. Les caractéristiques d'empilement que nous avons regardées sont : les porosités globale, radiale et axiale et le nombre de coordinations (ou nombre de voisins par billes). La méthode de calcul de ces paramètres pour les empilements numériques est décrite ci-dessous.

IV.3.3.1 Calcul des porosités globale, radiale et axiale

La porosité d'un milieu poreux est définie comme le rapport entre le volume de vide ou de fluide et le volume total du milieu poreux (voir équation IV.4). Dans les empilements numériques, le volume de chacune des phases revient à compter le nombre de voxels de chacune des phases (voxel = 1 pour le solide, voxel = 0 pour le fluide) et à multiplier ce nombre par le volume d'un voxel. Comme la valeur des voxels de la phase solide est égal à 1, il est plus

simple de calculer la fraction de solide et d'en déduire la porosité à l'aide de l'équation IV.4. Pour déterminer la porosité globale, il suffit de faire le calcul sur l'ensemble de l'empilement numérique.

$$\epsilon = \frac{\text{Volume de vide (ou de fluide)}}{\text{Volume total du milieu}} = 1 - \frac{\text{Volume de solide}}{\text{Volume total du milieu}} \quad (\text{IV.4})$$

Pour caractériser plus finement les empilements, nous avons aussi calculé les profils de porosités axiale et radiale. Pour la porosité axiale, elle a été calculée sur différentes tranches horizontales d'épaisseur dz comme le petit disque dessiné à droite dans la figure IV.2. Pour le calcul du profil de porosité radiale, nous avons considéré des cylindres creux concentriques d'épaisseur dr et de différents rayons comme illustré dans la figure IV.2. Dans chacun d'eux, le rapport de la somme des voxels de valeur 1 sur le nombre de voxels total permet de connaître la fraction locale de solide et donc la porosité locale du lit à un rayon donné.

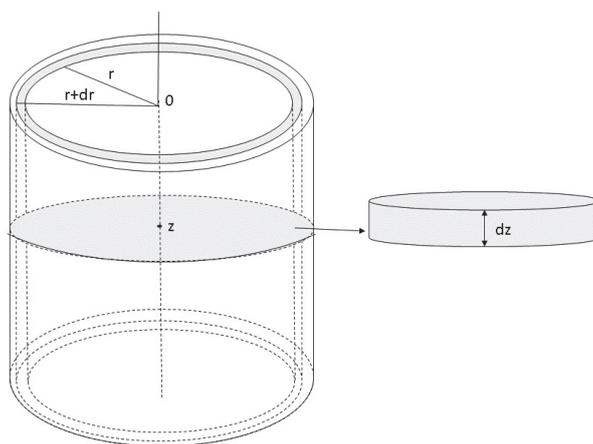


Figure IV.2. Volumes élémentaires pour la détermination des porosités axiales et radiales

IV.3.3.2 Calcul du nombre de voisins pour chaque bille

Les *voisins* d'une bille sont définis comme étant les billes ayant un contact physique avec elle ou étant suffisamment proches pour induire des phénomènes de transfert de chaleur entre elles. Donc, pour déterminer le nombre de voisins moyen par bille, appelé aussi *nombre de coordinations*, nous avons considéré 2 cas :

- les billes réellement en contact : si la distance entre les centres des deux billes est inférieure ou égale à la somme des rayons des billes,
- les billes *proches voisins* : sont les billes dont la distance entre les centres est inférieure à 1,025 fois la somme des rayons des billes. Cela correspond, si nous considérons une bille de 5 mm et une taille de voxel de 100 μm , à 1,25 voxels de plus que le diamètre de la bille (correspondant à 50 voxels).

Cette information pourrait être utilisée lorsque l'on étudie les échanges de chaleur entre particules. Cela permettrait de prendre en compte un échange particulier entre chaque voisine d'une particule selon que les deux particules soient en contact ou seulement proches.

IV.3.3.3 Comparaison empilements numériques et réels

Pour caler les paramètres de simulation DEM, nous avons simulé trois empilements de billes : deux empilements de billes d'alumine dans le tube de 10 cm de diamètre avec deux débits de remplissage pour les comparer avec des corrélations de la littérature et un empilement de billes de verre dans le tube de 6 cm de diamètre ayant pour but de le comparer avec l'empilement que nous avons tomographié (voir tableau IV.1). Le rapport diamètre du tube sur le diamètre des particules a été choisi égal à 20 pour limiter les effets de bord. Les deux méthodes ne sont pas idéales, car dans la comparaison avec les corrélations, un biais peut être apporté par les corrélations elles-mêmes qui ont été obtenues sur la base d'expériences dont il est difficile parfois d'obtenir les détails ou sur la base d'empilements théoriques qui sont loin d'être aléatoires. Quant à la tomographie, les rayons X induisent une variation de niveau de gris sur les bords des billes, ce qui engendre des difficultés à les déterminer avec exactitude. Par conséquent, les porosités estimées vont dépendre du seuil choisi lors du traitement des images. Cependant, ces deux méthodes combinées vont nous permettre de valider des valeurs de paramètres satisfaisants pour générer différents empilements qui serviront de base pour les simulations avec la méthode des systèmes pseudo-hamiltoniens à port.

Tableau IV.1. Caractéristiques des empilements numériques simulés avec *LIGGGHTS*®. d_p : diamètre des particules ; d_t : diamètre du tube ; H : hauteur du tube.

Empilement	Matériau	d_p (mm)	d_t (cm)	H (cm)	Débit (kg.s ⁻¹)
N°1	Alumine	5	10	29,52	1
N°2	Alumine	5	10	29,26	0,1
N°3	Verre	5	6	29,68	0,1

Les propriétés des matériaux (verre et alumine) que nous avons utilisées dans les simulations sont regroupées dans le tableau IV.2. Les propriétés des γ -aluminés publiées dans la littérature étant très variables d'une publication à l'autre, car dépendantes de la méthode de synthèse, nous avons préféré prendre les propriétés moyennes d' α -alumine [137].

Tableau IV.2. Paramètres physiques de l'alumine et du verre utilisés pour les simulations issus respectivement de [137] et de [138]

Matériau	alumine	verre
Module de Young (Y)	390 GPa	46,2 GPa
Coefficient de Poisson (ν)	0,346	0,245
Coefficient de restitution (e)	0,9375	0,935
Coefficient de friction	0,5	0,16
Masse volumique (ρ)	3900 kg.m ⁻³	2500 kg.m ⁻³

IV.3.3.3.1 Validation en utilisant les corrélations de la littérature :

La première étape a été de comparer les caractéristiques obtenues avec celles de la littérature et les profils radiaux de porosité de la simulation N°1 avec ceux obtenus avec la corrélation de Martin IV.5, corrélation empirique couramment utilisée pour représenter les lits fixes [19, 59, 139].

$$\epsilon(\bar{r}) = \begin{cases} \epsilon_{min} + (1 - \epsilon_{min})\bar{r}^2 & \text{si } -1 \leq \bar{r} \leq 0 \\ \epsilon_{\infty} + (\epsilon_{min} - \epsilon_{\infty})e^{-0,25\bar{r}} \cos\frac{\pi}{\bar{T}}\bar{r} & \text{si } \bar{r} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{IV.5})$$

où

$$\epsilon_{min} = 0,23 \quad , \quad \epsilon_{\infty} = 0,39 \quad , \quad \bar{r} = 2\frac{y}{d_p} - 1 \quad , \quad y = \frac{d_p}{2} \quad , \quad \bar{T} = \begin{cases} 0,816 & \text{si } d_t/d_p = \infty \\ 0,876 & \text{si } d_t/d_p = 20,3 \end{cases}$$

Les caractéristiques obtenues ont été regroupées dans le tableau IV.3 et la figure IV.3 montre les différents profils de porosité radiale obtenue soit par la corrélation (Martin), soit par la simulation DEM. Pour la simulation N°1, nous avons fixé arbitrairement le débit de remplissage à 1 kg.s⁻¹. En effet, le débit de remplissage n'est pas un paramètre de réglage direct dans le logiciel *LIGGGHTS*® mais il va dépendre d'une combinaison de la taille des particules, de la taille de la zone de "largage", de la densité de particule et du temps que l'on se fixe pour finir le remplissage. Selon De Klerk [139], la porosité moyenne dans un empilement réel aléatoire peut être affectée par la méthode de remplissage du tube. Elle peut varier de 0,362 à 0,44. La première valeur est obtenue en remplissant le tube et en le secouant pour que les billes s'entassent correctement et la seconde est obtenue lorsque l'on remplit le tube par défluidisation progressive ou par sédimentation. Peu d'études relient directement le débit de remplissage aux propriétés de l'empilement. Nous avons fait des remplissages à différentes vitesses. Nous ne détaillerons pas l'ensemble des résultats mais nous allons seulement montrer les différences observées avec 2 débits. Cela nous permettra de conclure sur le choix du débit permettant d'obtenir des empilements proches de ceux couramment rencontrés dans les lits fixes. Pour la simulation N°1, la porosité globale obtenue est de 0,392, ce qui est bien intermédiaire entre ces deux extrêmes, mais cette information n'est pas suffisante pour juger de la pertinence de nos simulations DEM. Par contre, sur la figure IV.3, on observe que, pour la première oscillation à gauche du graphique (côté paroi), qui est caractéristique de la taille de particule, la simulation DEM et la corrélation de Martin correspondent bien. Mais il y a un déphasage des oscillations qui apparaissent en allant vers le centre du lit. La fréquence d'oscillation est liée au diamètre des billes. En effet, les billes de bords ont tendance à se positionner au contact de la paroi, puis par couches successives. La porosité est donc quasiment égale à 1 proche de la paroi pour ensuite atteindre un minimum à environ un rayon de bille de la paroi. Il est possible de constater ensuite que l'amplitude diminue vers le centre de l'empilement, car en son centre les billes sont de moins en moins ordonnées et la porosité radiale se rapproche de la porosité moyenne.

En baissant le débit à 0,1 kg.s⁻¹ (simulation N°2), nous avons observé que la porosité globale est légèrement plus basse (0,387 au lieu de 0,392). Par contre, les profils de porosité

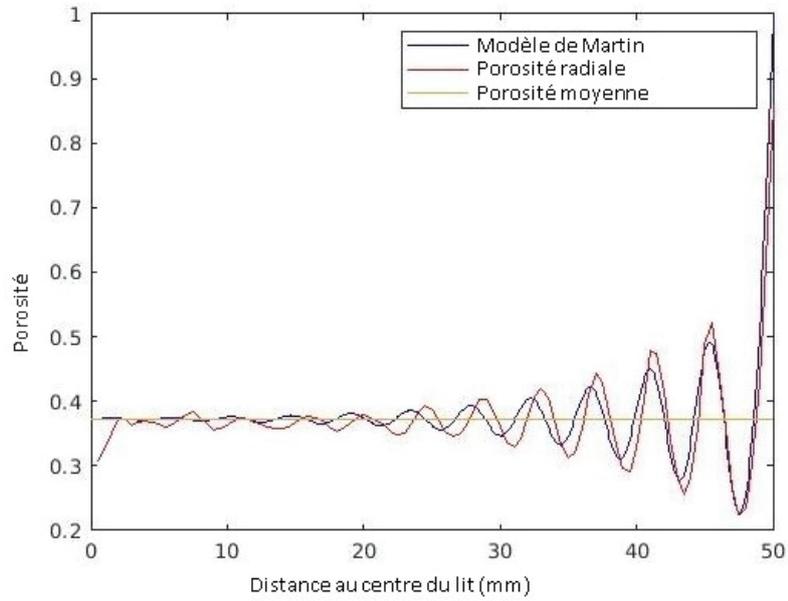


Figure IV.3. Comparaison du profil de porosité radiale de l'empilement N°1 et du profil de la porosité radiale obtenue avec la corrélation de Martin (équation IV.5).

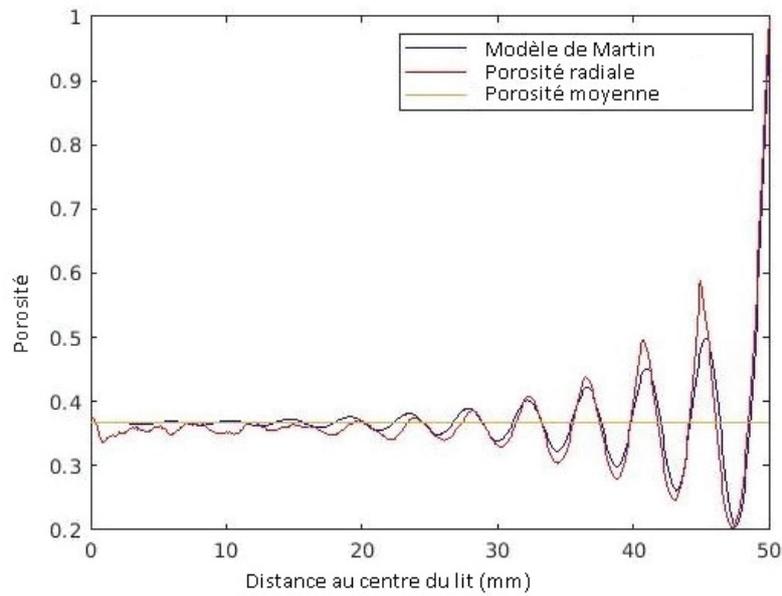


Figure IV.4. Comparaison du profil de porosité radiale de l'empilement N°2 et du profil de la porosité radiale obtenue avec la corrélation de Martin (équation IV.5).

radiale obtenus, avec ce débit, par simulation DEM et la corrélation de Martin sont complètement en phase (figure IV.4). Pour les deux simulations N°1 et N°2, nous constatons cependant des amplitudes légèrement supérieures à celles obtenues avec la loi de Martin en proche paroi et des amortissements moins rapides vers le centre des empilements. Cela peut être dû à l'ajustement des paramètres tels que le paramètre \bar{T} de la corrélation de Martin qui est relatif au rapport des diamètres du tube et de la bille, mais qui n'est pas très précis. Les mêmes tendances ont été observées par van Antwerpen et al. [13] qui remarquaient que, pour leur empilement, la corrélation de De Klerk [139] permettait de mieux prendre en compte les amplitudes que la corrélation de Martin. En conclusion, les corrélations et simulations montrent que le plus faible débit de remplissage permet d'obtenir un empilement plus compact et plus proche des empilements rencontrés dans les lits fixes expérimentaux.

Tableau IV.3. Caractéristiques des deux empilements numériques simulés avec *LIGGGHTS*®. ϵ est la porosité

Empilement	Matériau	d_p (mm)	d_t (cm)	H (cm)	Débit (kg.s ⁻¹)	ϵ	Nombre de points de contact	Nombre de proche voisins moyen
N°1	Alumine	5	10	29,52	1	0,392	5,136	6,713
N°2	Alumine	5	10	29,26	0,1	0,387	5,298	6,907

Concernant le nombre de coordinations, le fait que l'empilement N°2 soit légèrement plus compact se traduit aussi par un nombre moyen de voisins et de proches voisins par particule légèrement plus grand que ceux de l'empilement N°1. Par contre, nous pouvons remarquer que, pour un empilement donné, le nombre de proches voisins est très supérieur au nombre de voisins (voir tableau IV.3). Cela implique qu'une erreur de 2% sur la taille des billes ou un écart entre deux billes de l'ordre de 1 voxel peut induire une augmentation de 30% du nombre de voisins.

Nous avons comparé ces valeurs à celles obtenues avec les corrélations données en figure IV.5 [13]. Nos points sont les étoiles bleues. Nous voyons que nos valeurs sont très inférieures à celles données par les corrélations de la littérature. Les corrélations données par VAN ANTWERPEN et al. [13] sont relatives à des empilements obtenus de façon très différente : soit elles concernent des empilements théoriques ne prenant pas en compte les effets de bord, soit, comme pour la corrélation de SMITH et al. [140], elles ont été obtenues par expérimentation. La corrélation de DU TOIT et al. [59] est particulière, car, contrairement aux autres corrélations, il a analysé un empilement annulaire et a regardé les nombres de coordinations localement en fonction des porosités locales (les faibles porosités correspondant aux porosités à un rayon de billes de la paroi). Comme dans nos calculs, le cylindre entier est considéré et les nombres de coordinations pour les billes de bord sont plus faibles que celles de centre, mécaniquement, les nombres de coordinations que nous avons calculés sont plus faibles que ceux des corrélations. Par contre, les nombres de coordinations pour les proches voisins semblent plus en adéquation avec les corrélations. Ceci montre, dans tous les cas, que le nombre de voisins ou de voisins

proches ne peut pas être utilisé pour statuer de la vraisemblance physique d'un empilement.

En conclusion, nous pouvons dire que les empilements obtenus par DEM, présentent des caractéristiques proches des empilements décrits dans la littérature et que la vitesse de remplissage aura un effet sur la compacité de l'empilement. Pour se rapprocher des caractéristiques des empilements de lits fixes reportés dans la littérature, les empilements numériques utilisés par la suite seront tous simulés avec des débits de remplissage de $0,1 \text{ kg.s}^{-1}$

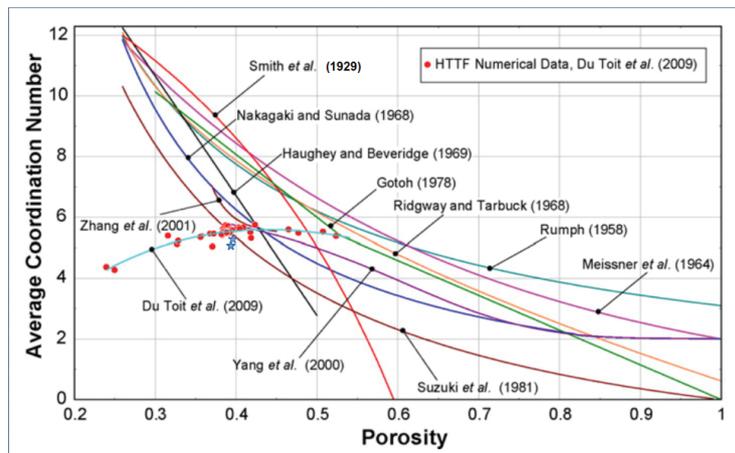


Figure IV.5. Comparaison des corrélations du nombre de coordinations en fonction de la porosité des empilements. Les étoiles bleues correspondent aux empilements N°1 et N°2. Le graphe est issu de [13].

IV.3.3.3.2 Validation en utilisant l'empilement tomographié

Dans une seconde étape, nous avons comparé un empilement de billes de verre simulé avec un empilement identique tomographié. Pour ce dernier, le tube de verre contenant les billes avait un diamètre interne de 6 cm et une hauteur d'une trentaine de centimètres. Pour garder une bonne précision lors de la tomographie, il a été tomographié en deux parties : une partie haute et une partie base de 21,6 cm de hauteur, sans avoir modifié l'empilement. L'empilement était constitué de billes de verre monodisperses de diamètre 5 mm.

Les caractéristiques de l'empilement numérique N°3 sont données en tableau IV.4. Dans chaque partie, les profils radiaux de porosité ont été tracés puis comparés à celui de l'empilement numérique (figure IV.6). Dans cette figure, nous voyons que la porosité radiale varie avec la même fréquence et des amplitudes pratiquement semblables pour les deux types d'empilements. Nous pouvons remarquer que la courbe de porosité de l'empilement numérique est globalement au-dessus de celles de l'empilement réel, cela signifie que la porosité globale est supérieure à celle de l'empilement réel. Cette différence peut être due à la différence de résolution des empilements (80 μm pour l'empilement réel et 100 μm pour l'empilement numérique) ou au seuillage lors du traitement des images tomographiques. En effet, la résolution peut affecter la détection des zones de contacts, sous-estimer le volume de vide dans l'empilement

réel et par conséquent sous-estimer sa porosité. L'effet de la résolution des images sera discuté plus amplement dans la suite.

Tableau IV.4. Caractéristiques de l'empilement de billes de verre numérique simulé avec *LIGGGHTS*®

Empi- lement	Matériau	d_p (mm)	d_t (cm)	H (cm)	Débit (kg.s ⁻¹)	ϵ	Nombre de points de contact	Nombre de proche voisins moyen
N°3	verre	5	6	29,68	0,1	0,395	5,202	6,579

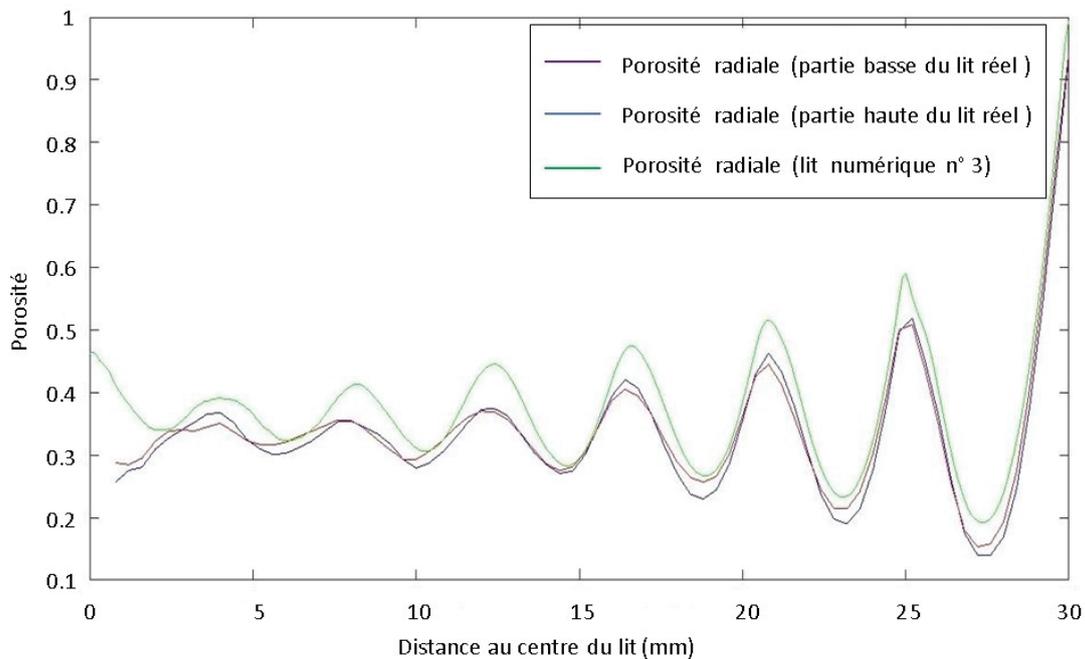


Figure IV.6. Comparaison entre la porosité radiale de l'empilement numérique n°3 construit avec *LIGGGHTS*® et les porosités radiales obtenues à partir de l'empilement réel

IV.4 Analyse d'images et extraction des données géométriques des empilements

Après avoir obtenu des représentations numériques de différents empilements, par simulation DEM ou par tomographie, une étape importante est l'extraction des informations géométriques nécessaires à la simulation, par exemple les volumes de cellule fluide, les surfaces

d'échange, ou encore les connectivités des phases. Nous présenterons dans ce paragraphe les étapes importantes de l'analyse d'image ainsi qu'une étude de l'effet de la résolution des images sur les propriétés mesurées. En effet, nous pourrions être tentés d'utiliser la meilleure résolution possible (la plus petite) mais cela se ferait au détriment du temps de calcul. Une diminution de la taille du voxel par 2 entraîne une augmentation par 8 du volume 3D à traiter. Il sera donc nécessaire de définir à l'avance la résolution des images sur laquelle l'analyse d'image sera effectuée en fonction de notre zone d'intérêt, notée ROI (Region of Interest, en anglais), des capacités de calcul, et la précision physiquement acceptable.

IV.4.1 Les étapes de traitement des images avec le logiciel *iMorph*

Pour exploiter pleinement nos images 3D, nous avons choisi de travailler avec le logiciel de traitement d'images *iMorph*. La première étape est l'import des images, le choix de la ROI et de la résolution de travail. Nous y reviendrons par la suite. Il est ensuite nécessaire de choisir le seuil qui permet d'identifier les différentes phases. Le seuillage permet de transformer les images en nuances de gris en images binaires, c'est-à-dire noir ou blanc. Pour les images issues des simulations d'empilement par la DEM, cette étape ne pose pas de problème, car les images sont déjà binarisées. Pour les images issues du tomographe, cette étape peut être délicate suivant le type de matériaux et donc le contraste obtenu sur les images. Nous avons choisi de travailler avec un lit de billes de verre et l'air comme fluide, ce qui permet d'obtenir un contraste correct (voir figure IV.1).

Le logiciel *iMorph* comprend différents modules de calcul et de visualisation. Nous donnons ici quelques indications sur les méthodes d'analyse d'image employées dans les modules que nous avons utilisés, mais pour plus de détails, il est nécessaire de se reporter à la documentation du logiciel.

- Le module «Surface Meshing» sert à déterminer les interfaces solide/fluide sous forme d'un maillage avec une précision subvoxelique. Ici les surfaces de contact entre voxels blancs et voxels noirs sont identifiées et maillées par un maillage triangulaire permettant la visualisation des surfaces. Ce maillage permet aussi le calcul des surfaces des interfaces. La précision de ce calcul dépendra de celle du maillage, qui elle dépend de la taille des voxels.
- Le module «Distance map» permet de tracer la carte des distances en trois dimensions, sorte de carte topologique. Le résultat est une matrice de la taille de l'image. Les éléments de cette matrice sont les valeurs des distances des voxels d'une phase à l'autre phase. C'est l'outil d'estimation des distances dans les images. Ce calcul se fait séparément dans chacune des phases. Il permet d'obtenir une distribution des distances dans la ROI
- Le module «Granulometry» permet de calculer la carte d'ouverture dans chacune des phases. Il s'agit d'estimer le diamètre maximal des boules totalement incluses dans la phase. Pour cela, pour chaque voxel de la phase, la boule maximale contenue dans la phase est calculée. Lors de cette construction, les plus grosses peuvent empiéter sur des boules plus petites de leur voisinage. Un critère de taux maximal de chevauchement est utilisé pour choisir quand il faut garder ou supprimer la plus petite. Il est fixé à

35%, cela veut dire que toute boule dont le volume est commun à plus de 35% avec une boule plus grosse sera supprimée. Il est possible de trouver le détail de l'algorithme de construction des boules maximales dans l'article de Delerue et al. [141]. À la suite de ce calcul, il est possible de tracer la distribution de taille des boules maximales dans la phase considérée et ainsi avoir une première idée de la taille des objets présents dans l'empilement (pour la phase solide), ou de la taille des cellules fluides.

- Le module «Cells segmentation (watershed)» sert à délimiter les cellules d'une même phase. Alors que, pour la phase solide, il est assez facile de délimiter le contour des objets, surtout dans notre cas avec des billes, cela est plus complexe dans la phase fluide. Pour cela, l'algorithme de "partage des eaux" est utilisé. Il existe plusieurs versions de cet algorithme, mais celui utilisé dans *iMorph* se base sur l'implémentation de Fernand Meyer [142]. Le principe de cet algorithme consiste à "inonder" progressivement chaque cellule de la phase à partir d'une source appelée marqueur. Les marqueurs utilisés dans notre cas sont les centres des billes maximales identifiées lors du calcul de granulométrie. Les zones autour de ces marqueurs "s'inondent" progressivement, et lorsque deux zones inondées à partir de marqueurs différents se rencontrent, une surface de contact est créée. Cette étape d'analyse permet d'obtenir pour chaque zone détectée la position de son centre d'inertie et son volume ainsi que la surface des zones de contact, leur position et l'information sur les zones qu'elle sépare.
- Le module «Network» consiste à déterminer la table de connectivité et le graphe associé à partir des données issues des étapes de l'analyse précédente, qui ont permis de détecter toutes les cellules d'une même phase et les zones de contact. Un nœud est attribué à chacune des cellules et une arête est créée entre deux cellules qui ont en commun une surface de contact. La liste des nœuds ainsi que la liste de leurs voisins sont ensuite reportées dans la table de connectivité. En plus de cette table de connectivité, les distances entre les nœuds en contact et entre les nœuds et les surfaces de contact sont calculées.
- Le module «Plateau Network», quant à lui, permet l'extraction d'une autre table de connectivité. Ce module se base sur les lois de Plateau établies dans les mousses fluides [143] et qui identifient les brins et les nœuds d'une mousse fluide à partir des bulles de celle-ci. Appliqué à des images de lit de billes, ce module de calcul nous a permis, à partir de la détection des billes solides, de construire une table de connectivité des éléments du fluide. En effet, à partir de l'identification des cellules solides (les billes), on utilise la règle suivante :
 - * 4 billes en contact créent un nœud fluide dans l'interstice qu'elles forment.
 - * 3 billes en contact créent une arête reliant 2 nœuds dans la restriction qu'elles forment.

Le graphe ainsi obtenu est formé par les nœuds fluides (centres des cellules fluides) reliés par des arêtes (brins se situant dans les zones de restriction entre les billes). Il contient en plus l'information des nœuds solides (cellules solides ou billes) qui entourent les arêtes et les nœuds de la phase fluide. Ces informations sont primordiales lors de la construction du graphe d'interconnectivité entre le fluide et le solide.

IV.4.2 Influence de la résolution des images

La résolution des images peut avoir un impact sur les paramètres de l'empilement. En effet, comme le montre les figures IV.7a et IV.7b représentant le même empilement, mais reconstruit avec deux tailles de voxel différentes (respectivement 150 μm et 750 μm), les surfaces des particules de la figure IV.7a sont beaucoup plus lisses que celles dans la figure IV.7b et les paramètres, tels que les volumes des cellules et des billes, les surfaces de contact et les surfaces d'échange, etc., et la topologie même des graphes pourraient être impactées. Il est donc important de regarder l'influence de la résolution des images sur les données structurantes de nos modèles.

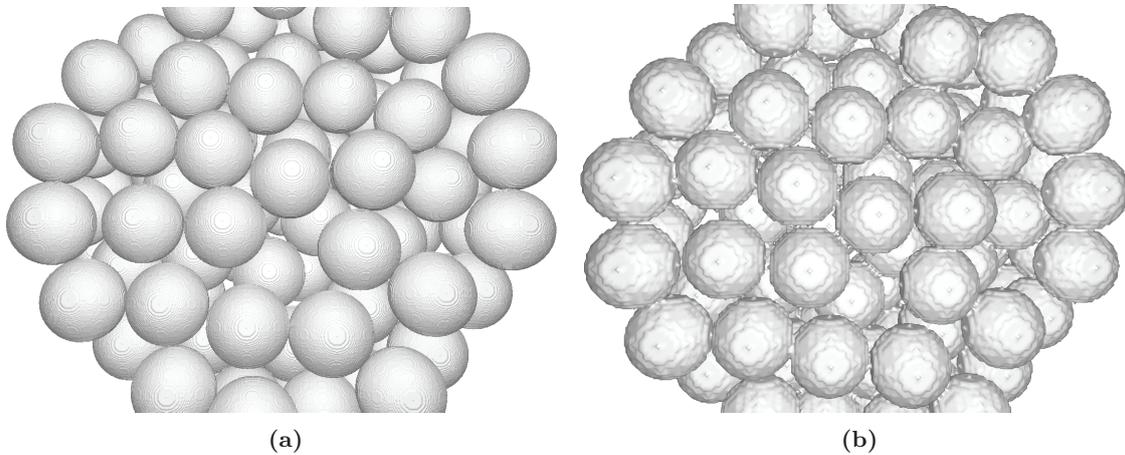


Figure IV.7. Surfaces des particules dans une ROI d'empilement numérique construite avec une taille de voxel de (a) 150 μm et (b) de 750 μm

Expliquons tout d'abord par des exemples sur une image 2D, l'impact que va pouvoir avoir la taille des pixels sur les différents paramètres. Sur les figures IV.8 et IV.9, la surface physique des billes est symbolisée par les traits bleus (ici, périmètre des disques). Lors de la pixelisation, les pixels à l'intérieur de ces traits sont mis égal à 1 (noir) et ceux à l'extérieur égal à 0 (blanc). Pour chaque pixel traversé par la ligne bleue, c'est la couleur dont la proportion de surface du pixel est majoritaire qui est choisie. La figure IV.8 représente deux demi-cercles et deux façons de les pixeliser. On peut voir que les pixels blancs et noirs vont se répartir le long de la ligne bleue de façon relativement équitablement et donc que l'impact de la taille du pixel sur la surface du disque et, par miroir, l'impact sur la porosité vont être faibles. Concernant les points de contact, avec des pixels de petite taille, les deux cercles ne présentent pas de zone de contact, alors que si la taille du pixel est triplée, par exemple, les cercles seront en contact, ce qui augmente le nombre de voisins détectés. Nous avons représenté en rouge les trois pixels qui seront alors identifiés comme pixel appartenant à la surface de contact. En plus de l'effet sur le nombre de voisins, la taille de pixel va avoir de l'importance sur la distance de contact détectée. Concernant les périmètres des disques, sur la figure IV.9, le disque en trait bleu symbolise la forme réelle des billes et les traits vert et rouge les périmètres détectés. Dans le premier cas, petite taille de pixel, le cercle est représenté par les petits carrés grisés.

Pour calculer la distance, les centres de chaque côté d'un pixel se trouvant à l'interface sont reliés, donnant la courbe rouge. Pour une résolution plus faible, les pixels appartenant au cercle seront les gros carrés entourés en noirs, donnant comme périmètre la courbe verte. La somme des segments donne le périmètre du cercle. Le trajet vert étant plus court que le trajet rouge, cela induit une diminution de la distance calculée avec l'augmentation de la taille des pixels. Ce phénomène s'ajoute au fait qu'avec une résolution plus grossière, les distances de contact entre disques augmentent. Cela entraîne donc une diminution de la distance de l'interface entre les disques et l'extérieur lorsque la taille des pixels augmente. Pour transposer ces propriétés de 2D en 3D, il suffit de remplacer dans le raisonnement les surfaces en volumes et les distances en surface.

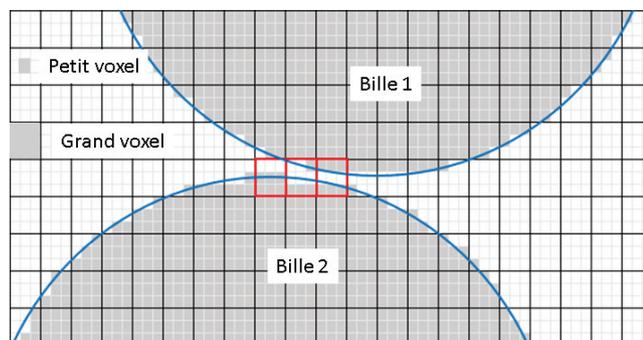


Figure IV.8. Représentation graphique en 2D de l'effet de la taille de pixel sur le nombre de voisins.

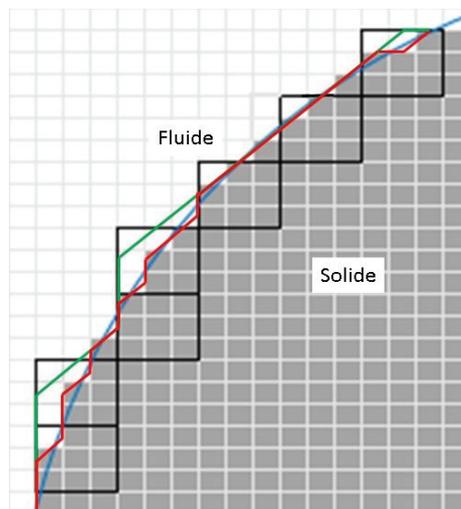


Figure IV.9. Représentation graphique en 2D de l'effet de la taille de pixel sur la surface spécifique.

Pour quantifier l'effet de la résolution initiale des images sur la structure d'un empilement reconstruit avec *iMorph* et évaluer son potentiel impact sur nos modélisations, nous avons

travaillé sur un empilement numérique de 502 billes sphériques de diamètre 15 mm. L'empilement est reconstruit avec cinq tailles de voxel différentes à savoir 150, 250, 300, 500 et 750 μm . Les caractéristiques de la phase fluide ont été calculés à l'aide du module Plateau Network. Les résultats sont regroupés dans le tableau IV.5. Nous constatons que pour les

Tableau IV.5. Effets de la taille de voxel sur les caractéristiques de l'empilement.

Phases	Solide					Fluide				
Taille de voxel (μm)	750	500	300	250	150	750	500	300	250	150
Nombre de billes ou cellules dans la zone d'intérêt	502	502	502	502	502	1505	1470	1441	1466	1450
Nombre moyen de voisins	6,67	6,32	5,97	5,84	5,60	9,13	9,08	9,31	9,26	-
Nombre moyen de billes autour d'une cellule fluide	-					4,29	4,32	4,33	4,32	4,33
Volume moyen d'une bille ou cellule (mm^3)	1757,3	1767,3	1762,0	1766,6	1766,0	470,4	466,8	482,5	467,3	469,9
Erreur relative (%) pour le volume de la bille	0,56	0,01	0,29	0,03	0,06	-				
Surface de contact moyenne (mm^2)	7,77	5,65	3,31	2,98	1,85	25,40	24,60	24,40	23,80	23,40
Rapport de la surface de contact moyenne sur la surface réelle de la bille (%)	1,10	0,80	0,47	0,42	0,26	-				

cinq tailles de voxel, toutes les billes sont correctement détectées et qu'en moyenne 1466 ± 25 cellules fluides sont créées selon les lois de Plateau. Concernant la phase solide, les valeurs des volumes de billes semblent peu être affectées par la résolution dans la gamme choisie : le volume moyen obtenu est de $1765,47 \pm 2,4 \text{ mm}^3$, ce qui est proche du volume théorique d'une bille qui est de $1767,14 \text{ mm}^3$. Pour la phase fluide, le volume moyen des cellules fluides calculé est $472,40 \pm 7 \text{ mm}^3$, et lui aussi semble peu influencé par la résolution. Comme les volumes sont peu impactés par la résolution, la porosité globale aussi varie peu ($43,91 \pm 0,4 \%$) comme le montre aussi la figure IV.10. Par contre, la surface spécifique de la phase solide, représentée aussi sur la figure IV.10, diminue de 7 % quand la taille de voxel augmente.

Concernant le nombre de voisins, pour la phase fluide, la valeur est relativement stable ($9,13 \pm 0,1$) pour les tailles de voxel étudiées. Le nombre moyen de billes autour d'une cellule fluide est aussi quasiment constant, environ 4,32. Par contre, pour la phase solide, le nombre moyen de billes en contact avec une autre bille augmente en fonction la taille de voxel (de 5,84 à 6,66) alors que la porosité varie peu. En plus de l'effet sur le nombre de voisins (billes), la taille de pixel a de l'importance sur la surface de contact moyenne détectée. Elle passe de $1,85 \text{ mm}^2$ à $7,77 \text{ mm}^2$ pour des tailles de voxel allant de 150 μm à 750 μm , soit une augmentation de 320 %. La surface de contact moyenne détectée pour les cellules fluides est, elle, moins impactée ($24,32 \pm 0,7 \text{ mm}^2$), car elle n'augmente que de 8,5 %.

En conclusion, lorsque la taille de voxel augmente la surface spécifique diminue et la

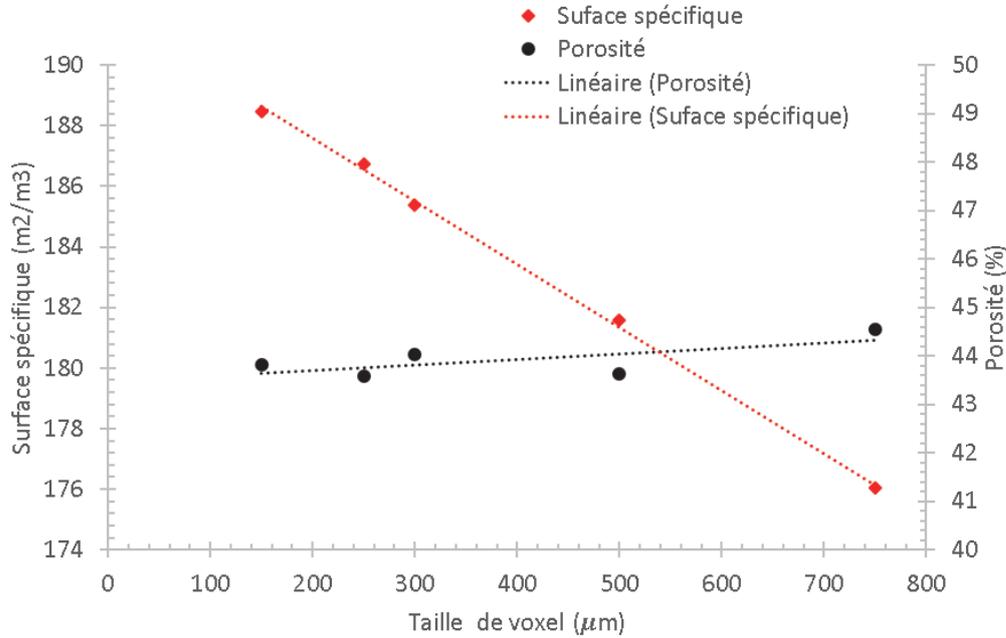


Figure IV.10. Évolution de la porosité globale et de la surface spécifique en fonction de la taille de voxel dans une ROI.

surface de contact entre les billes augmente. Les surfaces de contact entre les billes et les cellules fluides diminuent également avec la taille de voxel, mais dans un ordre de grandeur proche de celui de la surface spécifique, dans la mesure où la surface de points de contact ne représente qu'entre 0,3 et 1,1 % de la surface des billes. Nous retenons, donc, que la taille des voxels va principalement impacter la topologie du graphe solide, son nombre d'arêtes, la surface des points de contact entre billes et la section des arêtes.

IV.5 Construction des graphes

Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre III, notre méthode de simulation consiste à représenter les phases présentes dans les lits fixes sous forme de graphes orientés et pondérés par les propriétés géométriques des empilements et les propriétés physico-chimiques des matériaux. Un graphe orienté est caractérisé par sa matrice d'incidence \mathcal{D} , qui est une matrice de dimensions $N \times M$, avec N le nombre de nœuds et M le nombre d'arêtes du graphe. Les éléments \mathcal{D}_{ij} de la matrice valent 1 si la j^{eme} arête est orientée vers le i^{eme} nœud, ils valent -1 si la j^{eme} arête part du i^{eme} nœud et ils sont nuls s'il n'y a pas d'incidence entre la j^{eme} arête et le i^{eme} nœud. Nous venons de présenter les étapes pour l'obtention d'une représentation numérique du lit ainsi que l'acquisition des propriétés géométriques des éléments de volume et de surface présents dans le lit. Nous avons pu voir aussi comment sont identifiés les objets et la détection des contacts, ce qui permet d'obtenir les tables de connectivités des phases. Nous

allons voir comment sont reliées les informations extraites du logiciel *Imorph* (fichiers .csv) et le système algébro-différentiel qui simule les transferts de chaleur dans les empilements granulaires. Nous verrons aussi les adaptations additionnelles qui ont été mises en place entre les fichiers issus du logiciel *Imorph* et l'obtention des vecteurs des températures, des termes d'accumulation de l'énergie interne, des flux et des forces motrices (équations III.48, III.49 et III.50) et les matrices d'incidences \mathcal{D} utilisées dans notre modèle.

IV.5.1 Graphes issus du logiciel *Imorph*

Les fichiers issus des modules de calcul «Network» et «Plateau Network» donnent directement les informations sur les nœuds solide et fluide internes et de bord, ainsi que les informations sur les arêtes les reliant. Avec l'option «Extended», il est possible d'obtenir les informations sur les nœuds «Border» et les nœuds «Ghost», mais seulement pour ceux qui sont en lien avec les surfaces planes de la zone d'intérêt (ROI). Pour les nœuds «Border» et les nœuds «Ghost» en lien avec les surfaces cylindriques de la ROI, ils sont créés dans le code de simulation du modèle (écrit en *Python*) en amont de la création des vecteurs des températures, des termes d'accumulation de l'énergie interne, des flux et des forces motrices. Cela a nécessité de créer des nœuds additionnels pour chaque nœud de bord en surface du ROI et de définir des arêtes les reliant.

Pour la phase solide, comme le logiciel *Imorph* classe correctement les nœuds en nœuds de bord dès que leur centre est à un rayon de bille de la limite du ROI, leur identification a été simple. Pour chaque nœud de bord se trouvant sur la partie externe du ROI cylindrique, il a été créé un nœud «Border» en lui fixant le même z que celui du nœud de bord et en déterminant ses coordonnées x et y par projection, perpendiculairement à l'axe vertical du ROI, sur la surface cylindrique du ROI. Pour chaque couple de nœuds, il est associé une arête les reliant. Ces arêtes vont porter les transferts entre les billes solides et la paroi solide du réacteur et feront partie du graphe de solide.

Pour la phase fluide, la distinction entre nœud de bord et nœud interne n'est pas faite pour les cellules fluides au centre et cellules fluides touchant la frontière du ROI. Nous avons donc détecté les cellules de bord grâce à leurs coordonnées. Pour chaque nœud fluide positionné à moins d'un rayon de bille, il est tout d'abord reclassé dans la liste des nœuds de bord. Puis, un nœud «Ghost» correspondant est créé avec la même méthode que celle employée précédemment pour la phase solide. De la même manière, une arête le reliant au nœud fluide est créée. Ces nœuds et les arêtes associées feront partie du graphe d'interconnectivité.

Le module de calcul «Plateau Network» de *Imorph* permet aussi d'identifier les nœuds solides qui entourent les nœuds fluides. À partir de cette information, il est possible de créer toutes les arêtes du graphe d'interconnectivité. Elles relient chaque cellule fluide avec les billes l'entourant et donc chaque bille avec les cellules fluides alentour. Pour compléter ce graphe, il est nécessaire d'ajouter les nœuds «Ghost» créés précédemment.

En plus de la localisation et des propriétés des nœuds, les fichiers contiennent des tables de connectivité listant pour chaque nœud ses voisins. Ces tables permettent de créer des singletons (couples de nœuds) qui définissent les arêtes e_i et e_b .

La figure IV.11b montre un exemple de graphe solide extrait de la région d'intérêt cylindrique montrée en figure IV.11a issu du logiciel *Imorph*. Sur cette dernière, nous pouvons

visualiser la représentation numérique d'une zone d'intérêt (ROI) de l'empilement réel cylindrique de 5,72 cm de diamètre et 5,6 cm de hauteur (sphères de 5 mm) qui a été reconstruite à l'aide du logiciel *iMorph* à partir des images tomographiques de résolution 80 μm . Sur la figure IV.11b, les points rouges représentent les nœuds internes et les nœuds de bord, qui ont été positionnés au centre géométrique des billes, les points verts représentent ici les nœuds «Ghost» uniquement présents sur les surfaces planes du ROI, qui auront les propriétés de la phase fluide aux bords. Les nœuds «Border», qui sont les nœuds additionnels sur la surface cylindrique, ne sont pas représentés sur cette figure. Les traits noirs sont les arêtes du graphe qui relient les nœuds internes et de bord ainsi que les nœuds de bords avec les nœuds «Ghost».

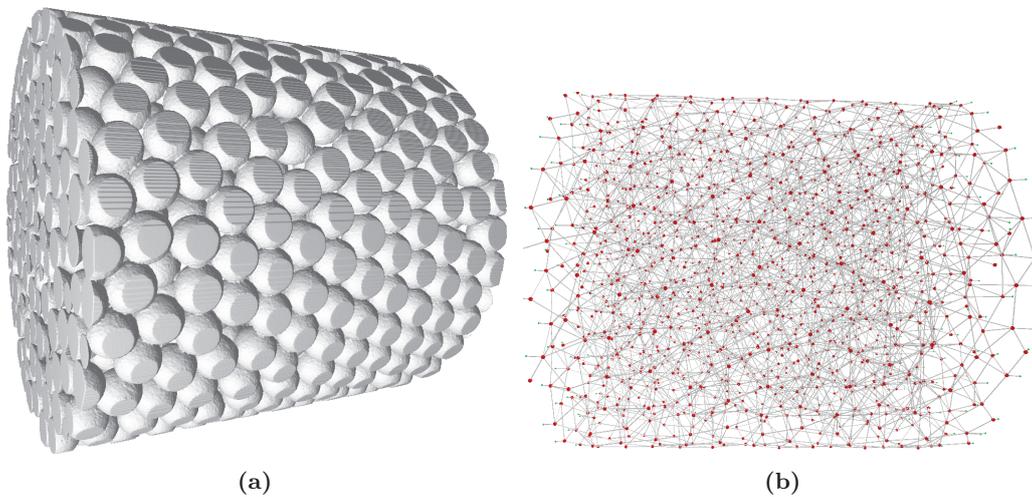


Figure IV.11. (a) Reconstruction 3D et (b) graphe de la phase solide d'une région d'intérêt (ROI) cylindrique de 5,72 cm de diamètre et 5,6 cm de hauteur de l'empilement réel de particules sphériques de 5 mm de diamètre.

IV.5.2 Extraction et construction des vecteurs et matrices d'incidence du système algébro-différentiel

Les trois graphes ont été orientés suivant la méthode décrite par TONTI [144] et reprise pour les mousses par Scheuermann et al. [86]. Les nœuds et les arêtes sont renommés pour prendre en compte l'orientation des graphes, le logiciel *Imorph* ayant sa propre logique de numérotation des nœuds et des arêtes qui n'était pas adéquate avec la méthode de Tonti. Les singletons définissant les arêtes orientées sont aussi créés. Cette partie du code *Python* a été développée par Tobias Scheuermann (2017-2023) durant sa thèse à l'Université Technologique de Munich et est disponible sur la plateforme GitHub⁵. Les trois graphes ainsi obtenus sont ensuite complétés par les informations de volume de billes ou de cellule qui seront associées aux nœuds ainsi que par les informations de surface de contact qui elles seront affectées aux arêtes. Comme pour les nœuds internes et de bord et les arêtes, les surfaces et les distances

5. <https://github.com/pyCellFoam>

entre les billes et les cellules et leurs volumes sont catégorisés à partir de données issues d'*iMorph*. Les nœuds «Border» et «Ghost», nœuds externes étant artificiellement créés pour assurer les échanges avec l'extérieur, n'ont pas de volume. Les trois graphes, solide, fluide et d'interconnexion, sont donc des graphes orientés, pondérés et connexes.

Les vecteurs des températures et des termes d'accumulation de l'énergie interne sont créés en listant les nœuds de la phase solide et de la phase fluide, en commençant par les nœuds internes, puis les nœuds de bord pour les vecteurs T^s , T^f , $\frac{d}{dt}U^s$ et $\frac{d}{dt}U^f$ et en listant les nœuds «Border» et les nœuds «Ghost» pour les vecteurs T_B^s , T_B^f , T_G^s et T_G^f . Les vecteurs des flux Φ et des forces motrices \mathcal{F} sont créés en listant les arêtes catégorisées en interne e_i ou de bord e_b pour les phases solide s et fluide f et les interactions entre les phases sf .

Les matrices d'incidence des trois graphes \mathcal{D} et \mathcal{D}_B composant les matrices \mathcal{J} et \mathcal{J}_B (équations III.51 et III.52) sont elles-mêmes créés à partir des tables de connectivité. Pour chaque graphe, six sous-matrices d'incidence sont construites en fonction des catégories des nœuds et des arêtes. Elles représentent les connections entre : les nœuds internes avec les arêtes internes, les nœuds internes avec les arêtes externes, les nœuds de bord avec les arêtes internes, les nœuds de bord avec les arêtes externes, les nœuds externes avec les arêtes internes et les nœuds externes avec les arêtes externes. Les nœuds internes et de bord ayant les mêmes propriétés, les sous-matrices sont ensuite concaténées. Les matrices d'incidence sont des matrices de grandes tailles, mais elles ont la propriété d'être creuses. Un exemple de construction de matrice d'incidence est donné en Annexe C.

IV.6 Propriétés géométriques des éléments discrets du lit

Les propriétés géométriques des éléments discrets des deux phases sont regroupées dans des matrices carrées diagonales. Ce sont leurs volumes, les longueurs des arêtes entre nœuds voisins, les surfaces de contact entre éléments de même phase et les interfaces entre éléments de phases différentes. Ces matrices servent à associer les nœuds des graphes à leurs propriétés géométriques. En fait, elles sont utilisées dans les systèmes d'équations de bilans sous forme de produit matriciel avec les matrices d'incidence associées aux graphes, les dimensions doivent donc correspondre. Pour les graphes d'une phase (solide ou fluide), les dimensions de ces matrices sont donc égales soit au carré du nombre de nœuds de la phase, soit au carré du nombre d'arêtes de cette phase selon les propriétés qu'elles contiennent. Si ces matrices sont relatives au graphe de couplage, leurs dimensions sont égales au carré de la somme des nombres d'arêtes des deux phases puisqu'il n'y a pas d'échange entre les deux phases aux interfaces.

Pour illustrer graphiquement ces propriétés géométriques, nous représentons le lit et les éléments discrets qui en découlent en 2D comme dans la figure IV.12 où les s_i $\{i = 1, 2, 3...\}$ et f_j $\{j = 1, 2, 3...\}$ sont les nœuds associés aux éléments discrets respectivement de la phase solide et de la phase fluide.

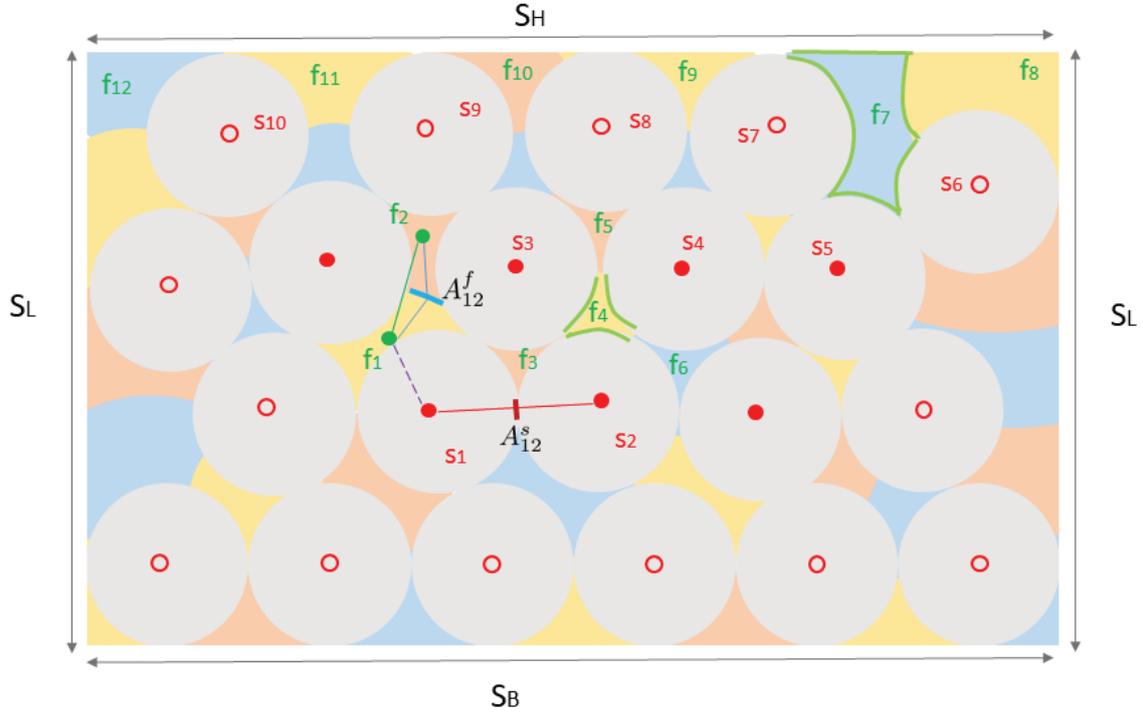


Figure IV.12. Représentation illustrative 2D d'un lit de particules sphériques et les noeuds associés aux éléments discrets

IV.6.1 Calcul des distances entre noeuds

En pratique, les volumes des éléments discrets et les longueurs des arêtes sont directement obtenus du logiciel *iMorph*. Le calcul de la longueur d'une arête e nécessite une attention particulière, elle est estimée selon le chemin que suivrait le transport régi par des forces de contact entre deux éléments discrets voisins. Ce chemin passe forcément par la surface de contact entre les deux éléments. Ainsi le chemin Γ_{12} de transfert entre deux noeuds 1 et 2 est : $\Gamma_{12} = d_{1c_{12}} + d_{2c_{12}}$ avec c_{12} le centre de l'interface A_{12} entre les noeuds 1 et 2 et d la distance (ligne droite) entre deux points. Ce chemin n'est pas toujours égal à la distance entre les noeuds 1 et 2. En effet, si on regarde dans la figure IV.12, on constate que pour les noeuds f_1 et f_2 de la phase fluide le chemin $d_{f_1c_{12}^f} + d_{c_{12}^f f_2} > d_{f_1 f_2}$. Pour les particules, comme elles sont sphériques alors $d_{s_1 c_{12}^s} + d_{c_{12}^s s_2} \simeq d_{s_1 s_2}$.

IV.6.2 Calcul des surfaces d'interface

Quant à la surface de contact A entre deux éléments voisins, il en existe trois catégories :

1. entre deux éléments discrets de la phase solide ;
2. entre deux cellules de la phase fluide ;
3. entre un élément de la phase solide et un élément de la phase fluide.

Les deux premières sont obtenues à partir du logiciel *iMorph*. Pour estimer la surface de contact entre deux éléments discrets de phases différentes, le calcul a dû être développé dans le code *Python*. Servons-nous de la figure IV.12 comme support pour en expliquer la méthode. Sachant que nous pouvons obtenir à partir du logiciel *iMorph* l'équivalent 3D de la surface totale de la cellule f_4 de la phase fluide et les surfaces de contact avec ses cellules fluides voisines f_3 , f_5 et f_6 , la méthode de calcul consiste à soustraire les surfaces de contact fluide/fluide de la surface de f_4 et de soustraire le tout par le nombre de voisins de la phase solide, ici 3, car seuls s_2 , s_3 et s_4 sont en contact avec f_4 . La formule est donnée dans l'équation IV.6.

$$A_{f_4}^{sf} = \frac{\partial v_4^f - (A_{43}^f + A_{45}^f + A_{46}^f)}{N_{f_4}^s} \quad (\text{IV.6})$$

avec ∂v_4^f est la surface totale de f_4 . A_{43}^f , A_{45}^f et A_{46}^f sont les surfaces des interfaces entre f_4 et respectivement f_3 , f_5 et f_6 . $N_{f_4}^s = 3$ est le nombre de voisins de la phase solide pour f_4 .

L'équation générale de la surface d'interface sf pour chaque cellule fluide j avec une bille voisine s est :

$$A_{f_j}^{sf} = \frac{\partial v_j^f - \sum_l^{N_{f_j}^f} A_{jl}^f}{N_{f_j}^s} \quad (\text{IV.7})$$

avec l les numéros de cellules voisines fluides de j , $N_{f_j}^f$ leur nombre et $N_{f_j}^s$ le nombre de billes voisines à j .

Cette méthode suppose qu'au moins un élément discret de la phase fluide partage une interface avec ses voisins de la phase solide. Elle peut acceptablement être utilisée au centre du lit, mais en proche frontière du lit, l'application de cette méthode engendre d'importantes erreurs. En effet, si on regarde la cellule f_7 par exemple, on constate deux problèmes : premièrement, il y a une surface de contact de f_7 avec l'extérieur qui n'est pas comptabilisée dans la soustraction, deuxièmement, l'interface f_7/s_7 est très grande par rapport aux autres interfaces solide/fluide f_7/s_5 et f_7/s_6 . Pour calculer la surface de contact de f_7 avec l'interface extérieure, la solution a été de prendre la surface totale S_H de l'interface extérieure en haut du ROI, de lui retrancher la somme des surfaces de contact avec les particules solides puis de diviser le tout par le nombre de cellules fluides en contact avec l'interface extérieure. Cependant, les surfaces de ces cellules fluides peuvent être très différentes. Donc, nous avons utilisé le facteur de pondération ω_7^f défini par l'équation IV.9 pour atténuer les erreurs de calcul, même si cela n'est pas idéal. La formule générale du calcul de la surface d'interface d'une cellule fluide j avec la surface du ROI $A_{f_j}^{fEx}$ est donnée en IV.8. Pour les différences de grandeur des surfaces d'interface fluide/solide (deuxième problème), nous avons supposé que c'est un cas singulier et nous l'avons négligé.

$$A_{f_j}^{fEx} = \omega_j^f \frac{S_H - \sum_i^{N_s^{ExH}} A_{iEx}^s}{N_f^{ExH}} \quad i \in G_H^s \quad (\text{IV.8})$$

avec G_H^s l'ensemble des éléments discrets de la phase solide en contact avec l'interface extérieure du ROI et N_s^{ExH} leur nombre, A_{iEx}^s la surface de l'interface entre la cellule solide

s et le ROI, N_f^{ExH} le nombre de cellules de la phase fluide j en contact avec le ROI et ω_j^f le facteur de pondération pour la cellule f_j .

$$\omega_j^f = \frac{v_j^f}{\sum_{g \in G_H^f} v_g^f} \quad g \in G_H^f \quad (\text{IV.9})$$

avec G_H^f un ensemble contenant les cellules discrètes de la phase fluide en contact avec le ROI et N_f^{ExH} leur nombre. Dans le cas particulier de la figure IV.12 $G_H^f = \{f_7, f_8, f_9, f_{10}, f_{11}, f_{12}\}$ et $G_H^s = \{s_7, s_8, s_9, s_{10}\}$

IV.7 Méthodes de résolution du système pseudo hamiltonien à port

La résolution du système pseudo hamiltonien à port (équation III.47) se fait en utilisant la fonction prédéfinie `solve_ivp` du sous-module `integrate` du module `Python scipy`. La fonction `Python solve_ivp` est un solveur de problème de type équation différentielle ordinaire (équation IV.10) ou système d'équations différentielles ordinaires. Cela requiert la définition d'un état initial, les bornes d'intégration, de la méthode d'intégration et d'autres paramètres optionnels. Il existe six méthodes de résolution prédéfinies dans cette fonction dont trois sont des méthodes Runge-Kutta explicites (RK45, RK23 et DOP853), deux méthodes implicites (Radau et DBF) et la méthode LSODA qui peut automatiquement détecter la rigidité du problème étudié. Dans la documentation `Python`, il est conseillé d'utiliser les méthodes implicites pour les problèmes rigides. Après test, nous avons retenu la méthode *BDF* (*Bakward Differentiation Formula*) qui est une méthode implicite d'ordre variable (1 à 5). C'est elle qui permet d'obtenir une meilleure convergence avec un temps de calcul plus court.

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t) y(t_0) = y_0 \quad (\text{IV.10})$$

Le système port-hamiltonien III.47 étant un système d'équations différentielles avec des matrices creuses, c'est-à-dire contenant très peu de valeurs non nulles, nous avons utilisé les propriétés de ces matrices pour optimiser les vitesses des simulations. Les matrices diagonales contenant les propriétés géométriques sont aussi creuses. Nous avons utilisé les sous-modules de matrices creuses `csc_matrix`, `coo_matrix`, `csr_matrix` et `dia_matrix` et le sous-module d'intégration `integrate` de `scipy` pour la gestion de la mémoire de stockage des matrices creuses. Les sous-modules (`zeros`, `ones`, `linspace`, `array`, `append`, `concatenate`, `diag`, `count_nonzero`, `linalg`, `average`, `std`, `load`, `savez_compressed`...etc.) de `numpy` sont utilisés pour la construction, l'initialisation et les opérations sur les matrices creuses et non creuses. Ces modules permettent de gérer de façon optimisée ces matrices.

IV.8 Conclusion

Dans ce chapitre, il a été question de présenter les outils et les méthodes que nous avons utilisées pour la construction des trois graphes et l'extraction des matrices d'incidence et les propriétés associées à ces graphes. Ainsi, des lits fixes de particules sphériques monodisperses ont servi de support de raisonnement pour cet exercice. Pour obtenir ces graphes, il était nécessaire d'effectuer une analyse d'images des lits étudiés. Cette analyse a été réalisée en utilisant le logiciel de traitement d'images *iMorph* qui nécessite en amont une pile d'images 2D de chaque empilement. Les images sont obtenues soit par tomographie d'un lit réel, soit par simulation, par la Méthode des Éléments Discrets (DEM), d'un empilement numérique puis traité par *Matlab*. Pour nous permettre de varier plus facilement les caractéristiques des lits, nous avons retenu les empilements numériques. Ces derniers ont été construits avec le logiciel «open source» de génération d'empilement numérique *LIGGGHTS*®. Les propriétés de ces empilements ont été comparées à celles d'empilement réel issu de la littérature à l'aide de corrélations de profils de porosité et du nombre de coordination (ou nombre moyen de voisins pour chaque particule) ou à celles d'un empilement réel tomographié. En effet, les profils de porosité radiaux de deux empilements (N°1 et N°2) dont le rapport d_t/d_p est égal à 20 et qui ont été générés avec deux débits de remplissage (1 kg/s et 0,1 kg/s) ont été comparés à ceux obtenus avec la corrélation de Martin (IV.5). Il en résulte que l'empilement avec le faible débit est parfaitement en phase avec la corrélation de Martin. Mais pour les deux empilements, les amplitudes sont légèrement supérieures à celles de Martin en proche paroi et des amortissements moins rapides vers le centre des empilements ont été constatés. Cela peut être attribué à l'ajustement du paramètre \bar{T} de la corrélation de Martin qui est moins précis. Cela a été corroboré par VAN ANTWERPEN et al. [13]. Pour le nombre de coordination, nous avons trouvé une multitude de corrélations qui sont différentes les unes des autres, nous en avons déduit que ce nombre, bien qu'intéressant pour comprendre la structure d'un empilement, ne peut être utilisé pour statuer de la vraisemblance physique d'un empilement. Ensuite, les profils radiaux de porosité de l'empilement numérique N°3 ($d_p = 5mm$ et $d_t = 60mm$) a été comparés avec ceux d'un empilement réel tomographié avec le même rapport d_t/d_p . Nous avons constaté que les courbes sont en phase, mais la porosité de l'empilement numérique est globalement un peu au-dessus de celle de l'empilement réel. Cela pourrait être dû à la résolution du tomographe ou le seuillage lors du traitement des images. Nous en avons conclu que nos empilements générés par DEM ont des caractéristiques proches de celles des empilements décrits dans la littérature.

L'influence de la résolution des images a également été étudiée pour un empilement numérique ($d_p = 15mm$, $d_t = 100mm$) avec une taille de voxel qui varie de $150\mu m$ à $750\mu m$. Nous avons constaté que toutes les 502 billes sont détectées, le nombre de cellules fluides créées avec les lois de Plateau a varié très peu (1466 ± 25). Les volumes des billes sont presque constants ($1765,47 \pm 2,40$) et ceux des cellules fluides ($472,40 \pm 7mm^3$) et la porosité ($43,91 \pm 0,4\%$) sont très peu influencés par la variation de la taille de voxel. Par contre, la surface spécifique du lit diminue avec la taille de voxel (environ 7% pour une variation de $150\mu m$ à $750\mu m$). La surface de contact moyenne entre les cellules fluides augmente avec la taille de voxel (8,5%). La taille de voxel a surtout un effet sur la surface de contact moyenne entre les billes, en effet, elle passe de $1,85mm^2$ à $7,77mm^2$ dans l'intervalle de taille de voxel utilisé soit 320%. Pour

la surface de contact moyenne entre les deux phases, elle diminue dans un ordre de grandeur proche de celui de la surface spécifique, dans la mesure où la surface de points de contact (ou surfaces de contact) ne représente qu'entre 0,3 et 1,1 % de la surface des billes.

Les trois graphes sont construits à partir des données issues d'*iMorph*. Mais la version d'*iMorph* utilisé ne permet de construire les nœuds externes qui se trouvent sur une frontière non plane (ex. surface de cylindre). Un code sous *Python* a donc été programmé permettant de prendre charge ce problème. Il permet de créer les nœuds et les arêtes manquants. Nous avons également extrait les matrices d'incidence internes et externes pour chaque graphe. Un graphe d'un empilement 2D a servi d'exemple pour illustrer l'extraction des matrices d'incidence. Les propriétés géométriques liées aux nœuds des deux phases sont également fournies par *iMorph*. Une méthode a été développée pour calculer celles qui sont liées aux nœuds externes créés avec le code *Python*.

Enfin, les méthodes d'intégrations du système pseudo-hamiltonien à port ont été présentées dont l'utilisation de modules *Python* permettant de gérer les matrices creuses de façon à optimiser l'usage de la mémoire de la machine et l'utilisation de la méthode implicite d'intégration d'équation différentielle *BDF* (*Bakward Differentiation Formula*) ont été retenues.

Dans la suite, nous allons voir les résultats des simulations réalisées sur un cas type. Cela va permettre de présenter toutes les données qu'il est possible d'obtenir avec ce code. Ensuite, nous présenterons les effets des propriétés géométriques et physiques des systèmes.

Chapitre V

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

V.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la mise en application du modèle en simulant la conduction thermique dans un lit cylindrique de particules sphériques dont les pores entre ces particules sont occupés par un fluide stagnant. L'objectif est de montrer que le modèle est sensible à toute modification, que ce soient des paramètres géométriques ou physiques ou encore des conditions aux limites, et que les résultats sont physiquement cohérents. Trois empilements avec des tailles de billes différentes ont été utilisés. L'accent a été particulièrement mis sur celui avec la taille médiane pour étudier les effets des différents paramètres qui peuvent influencer les profils de température. Ces empilements diffèrent sur la taille des particules et donc sur le rapport du diamètre du lit sur celui des particules.

Dans ce chapitre, après la présentation des différents paramètres du modèle et des caractéristiques des empilements, nous présenterons les effets des différentes caractéristiques des lits et de leurs propriétés géométriques sur les profils de température et le comportement dynamique de ces systèmes, en montrant que le modèle développé ici permet de prendre en compte l'anisotropie des systèmes.

V.2 Paramètres du modèle et caractéristiques des empilements

V.2.1 Paramètres du modèle

Pour un empilement, il existe deux types de paramètres qui peuvent influencer sur le résultat de la simulation : (i) les paramètres qui vont être fixés dans la génération des empilements par la méthode DEM et le traitement d'images et (ii) les paramètres qui peuvent être modifiés dans le code Python. Les premiers étant des propriétés géométriques, mécaniques ou physico-chimiques des matériaux et fluides, ils vont impacter les propriétés topologiques et géométriques des graphes. Ce sont :

- le diamètre du cylindre,

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

- le diamètre des particules,
- le nombre de particules solides (ce paramètre pouvant être modifié avant la génération d'images),
- la vitesse de remplissage,
- les propriétés mécaniques des solides (voir tableau IV.2),
- la taille des voxels et les paramètres de traitement d'images (voir tableau A.1).

Les valeurs de ces paramètres vont influencer sur le calcul de :

- le volume des particules solides,
- la hauteur du cylindre,
- le nombre de nœuds solides,
- le nombre de cellules fluides et donc de nœuds fluides,
- les volumes des cellules fluides,
- le nombre moyen de nœuds solides voisins de chaque nœud solide,
- le nombre moyen de nœuds fluides voisins de chaque nœud fluide,
- le nombre moyen de nœuds solides voisins de chaque nœud fluide,
- les surfaces de contact entre les cellules fluides,
- les surfaces de contact entre les particules solides,
- la porosité globale
- la surface spécifique de l'empilement

Comme nous l'avons vu dans la section IV.4.2, la résolution des images (taille des voxels) ayant servi à la reconstruction de l'empilement numérique dans *iMorph* a un effet important sur les surfaces de contact entre les particules solides. Nous nous sommes donc laissés comme liberté de pouvoir les modifier dans le code Python pour voir l'impact sur la dynamique de la conduction thermique. Quant aux surfaces de l'interface de contact entre les particules solides et les cellules fluides, elles ne sont pas calculées dans *iMorph*, mais dans le code Python en faisant le bilan des surfaces sur chaque nœud et en répartissant les proportions de surfaces entre les voisins. Comme elles sont liées aux flux d'échange entre les phases, elles forment un couple avec le coefficient d'échange à l'interface solide/fluide. Ces deux paramètres ont donc pu être variés indépendamment.

Pour les propriétés physiques, nous avons choisi d'utiliser celles de matériaux et de gaz réels. Par contre, pour voir l'effet des propriétés physiques des matériaux et des gaz, nous avons veillé à les choisir de sorte que les propriétés puissent faire varier au moins une des variables suivantes :

- la diffusivité thermique de la phase solide : $\frac{\lambda^s}{\rho^s c_p^s}$
- la diffusivité thermique de la phase fluide : $\frac{\lambda^f}{\rho^f c_p^f}$
- le coefficient d'échange à l'interface solide/fluide : h^{sf}

En plus, des propriétés géométriques, des propriétés mécaniques et physico-chimiques des phases et des propriétés d'échanges entre les phases, les conditions aux limites et initiales appliquées à l'empilement sont des variables importantes des modèles. Pour les simulations, les conditions aux limites qui ont été appliquées sont : la variation temporelle des températures ou les flux sur le côté latéral, sur le bas ou sur le haut de l'empilement. Dans ce manuscrit, nous ne présenterons que des simulations où les températures $T_{lateral}$, T_{bas} et T_{haut} ont été variées. De plus, un terme source peut également être ajouté à chaque nœud solide ou fluide. Nous montrerons ici l'effet du maintien à une température constante de quelques nœuds solides internes choisis.

V.2.2 Caractéristiques des empilements numériques étudiés

Pour mettre en application notre modèle, trois empilements de caractéristiques différentes ont été étudiés. Les caractéristiques des empilements sont regroupées dans le tableau V.1. Ce sont des empilements de particules sphériques de différents diamètres ($d_p = 5 \text{ mm}$, $d_p = 10 \text{ mm}$ et $d_p = 15 \text{ mm}$). Les trois empilements cylindriques ont été générés par la méthode DEM. Le diamètre du cylindre a été fixé dans *LIGGGHTS*® à $d_t = 10 \text{ cm}$ et un nombre suffisant de particules ont été injectées pour obtenir une hauteur d'une trentaine de centimètres. Puis, pour le traitement d'images, la hauteur des empilements a été réduite en ne considérant que les particules localisées au-dessous de 21,3 cm.

Tableau V.1. Effet du rapport d_t/d_p sur les caractéristiques des empilements

N° d'empilement	N°4		N°5		N°6	
d_t (mm)	100		100		100	
H (mm)	213,75		213		212,25	
d_p (mm)	5		10		15	
Taille de voxel (μm)	250		500		750	
Phases	Solide	Fluide	Solide	Fluide	Solide	Fluide
Nombre de billes ou cellules dans la zone d'intérêt	15988	59546	1899	6445	539	1619
Nombre moyen de voisins	7,77	8,67	7,24	8,93	6,66	9,15
Nombre moyen de billes autour d'une cellule fluide		4,32		4,3		4,3
Volume moyen d'une bille ou cellule (mm^3)	65,01	11,26	520,47	106,54	1757,27	455,74
Surface de contact moyenne (mm^2)	0,88	2,18	3,62	9,56	7,85	24,79
Surface réelle d'une bille (mm^2)	78,53	-	314,16	-	706,86	-

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

La taille des voxels, utilisée lors du traitement des images dans *iMorph*, est choisie de manière que l'on ait 20 voxels par diamètre de bille pour chaque lit. Ainsi, la taille de voxel aura le même impact dans tous les empilements sur les volumes et les surfaces des billes et cellules. L'effet de la taille de voxel a été étudié dans la section IV.4.2 et l'essentiel des résultats est résumé dans le tableau IV.5.

Nous observons que le nombre de billes ainsi que le nombre de cellules fluides dans les lits diminuent très rapidement avec l'augmentation de la taille des billes (tableau V.1). Dans une bien moindre mesure, le nombre moyen de voisins solides pour chaque bille diminue, tandis que le nombre moyen de voisins fluides pour chaque cellule fluide augmente avec l'augmentation de la taille des billes. Mais le nombre moyen de voisins fluides pour chaque bille est presque constant pour les trois tailles de billes, ceci étant dû à l'utilisation de la loi de Plateau lors du traitement d'images. Pour les empilements avec les billes de 5 mm et 10 mm, qui présentent un rapport d_t/d_p supérieur ou égal à 10, le volume moyen des cellules fluides est respectivement de 20,5% et 20,3% de celui de la bille et pour l'empilement avec les billes de 15 mm ($d_t/d_p = 6,67$), le volume moyen des cellules fluides est égal à 26,0% de celui de la bille. Cet empilement entre donc dans la catégorie des empilements pour lesquels les corrélations proposées dans l'état de l'art ne sont utilisables. Par contre, il faut remarquer que, dans les trois cas, la surface de contact moyenne entre les billes est d'environ 1,13% de la surface totale de la bille.

V.2.3 Résumé des paramètres des simulations

Pour chaque simulation commentée par la suite, les caractéristiques des phases des empilements utilisés et les conditions aux limites sont regroupées dans le tableau V.2. Pour chaque phase, les propriétés physiques réelles de l'air, du CO_2 et de l'alumine ont été utilisées. Le coefficient d'échange h^{sf} entre les particules et le fluide a été estimé en considérant que le nombre de Nusselt pour un fluide immobile autour d'une bille sphérique est égal à 2 ($Nu = 2$). L'équation V.1 permet ainsi de calculer h^{sf} .

$$Nu = \frac{h^{sf} d_p}{\lambda^f} \implies h^{sf} = \frac{Nu \lambda^f}{d_p} \quad (V.1)$$

Sauf pour la simulation N°2, toutes les propriétés géométriques sont obtenues à partir d'*iMorph*. Par rapport à la simulation N°1 de référence,

- dans la simulation N°2, les surfaces de contact et d'interface ont été modifiées. La surface de contact solide/solide a été divisée par 4. Le calcul des modifications sera expliqué par la suite.
- dans la simulation N°3, le coefficient d'échange à l'interface solide/fluide h^{sf} a été divisé par 4.
- dans la simulation N°4, la nature du fluide a été modifiée, modifiant le coefficient d'échange à l'interface solide/fluide h^{sf} et la diffusivité thermique des fluides.
- dans la simulation N°5, des conditions limites ont été modifiées en ajoutant des points chauds.

— dans la simulation N°6, le diamètre de particules et tous les paramètres qui en découlent ont été modifiés.

Pour toutes les simulations, des conditions aux limites de type Dirichlet sont appliquées.

V.3 Simulation de la conduction thermique dans l'empilement N°5

Dans cette section, nous allons présenter les résultats de la simulation N°1 de référence de la conduction thermique dans l'empilement N°5 ($d_p = 10 \text{ mm}$) dont les caractéristiques sont regroupées dans le tableau V.1. La nature des matériaux qui constituent les deux phases et leurs caractéristiques sont données dans le tableau V.2 (simulation N°1). Nous avons supposé que la paroi latérale du lit est de même nature que la phase solide et que les deux extrémités sont en contact avec un fluide de même nature que le fluide stagnant à l'intérieur du lit, c'est-à-dire de l'air. Les propriétés de la phase fluide (gaz) sont normalement variables avec la température, mais pour simplifier les calculs, nous les avons considérées comme constantes. Ainsi, toutes les valeurs de ces propriétés explicitées dans le tableau V.2 sont prises aux conditions ambiantes de température et de pression ($T = 298 \text{ K}$ et $P = 1,013 \text{ bar}$). Initialement, tout le lit est supposé à 293 K comme illustré dans la figure V.1a et les conditions aux limites sont de type Dirichlet. Elles sont définies dans la figure V.1b telles que le haut et le bas du cylindre sont maintenus à une température constante ($T_{bas} = T_{haut} = 293 \text{ K}$) et le côté latéral du cylindre est chauffé à température constante ($T_{lateral} = 393 \text{ K}$). Le système pseudo-hamiltonien à port a été résolu entre t_0 et le temps t_f pour lequel le système a été considéré en régime stationnaire, c'est-à-dire, lorsque pour un nœud donné, la moyenne sur 10 itérations du ΔT entre deux itérations est inférieure ou égale à $0,005 \text{ K}$.

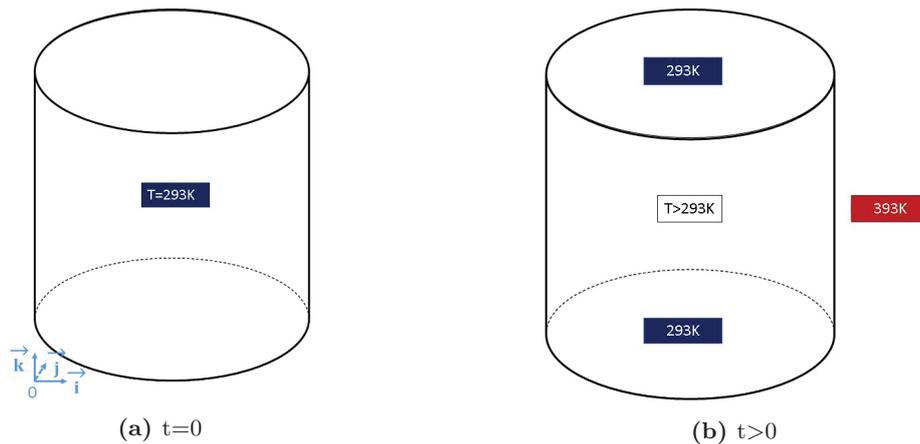


Figure V.1. Conditions (a) initiales (b)aux limites

L'analyse des résultats s'est focalisée sur la distribution de la température dans le lit, l'évolution de cette distribution dans le temps, les profils de température à un instant donné en fonction du rayon ou de la hauteur du lit et la dynamique de la température en chaque

Tableau V.2. Paramètres des simulations

N° simulation	1	2	3	4	5	6					
N° rempliment	5	5	5	5	5	6					
Phases	Alumine Air	Alumine Air	Alumine Air	Alumine CO_2	Alumine Air	Alumine Air					
d_p (mm)	10	10	10	10	10	15					
Propriétés géométriques											
Surface de contact moyen s/s ou f/f (mm^2)	3,62	9,56	0,905	9,56	3,62	9,56					
	3,62	9,56	3,62	9,56	3,62	9,56					
	7,85	24,79									
Interface moyenne (mm^2)	25,05	26,39	25,05	25,05	25,05	68,83					
Conductivité ($W/(m.K)$)	λ	1000	25,98	1000	25,98	1000	16,64	1000	25,98	1000	25,98
	λ_B	1000	25,98	1000	25,98	1000	16,64	1000	25,98	1000	25,98
Propriétés physiques	$h^{s/f}$	5,2	5,2	5,2	1,04	1,04	3,33	3,33	5,2	5,2	3,46
	Coef. échange ($W/(m^2.K)$)	5,2	5,2	5,2	1,04	1,04	3,33	3,33	5,2	5,2	3,46
	$h_B^{s/f}$	5,2	5,2	5,2	1,04	1,04	3,33	3,33	5,2	5,2	3,46
	c_v ($J/(kg.K)$)	795,5	743,16	795,5	743,16	795,5	657,49	795,5	743,16	795,5	743,16
	ρ (kg/m^3)	1500	1,245	1500	1,245	1500	1,807	1500	1,245	1500	1,245
Conditions aux limites	$T_{initiale}$ (K)	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15
	T_{haut} (K)	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15
	T_{bas} (K)	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15	293,15
	$T_{latéral}$ (K)	393,15	393,15	393,15	393,15	393,15	393,15	393,15	393,15	393,15	393,15
Terme source							21 points chauds				

nœud (solide ou fluide) du lit. Dans les figures qui vont suivre, chaque nœud de la phase solide est représenté par un petit disque et chaque nœud de la phase fluide par un petit losange. La variation de la température dans le lit est représentée par une échelle de couleur. Nous rappelons également que les coordonnées des nœuds sont définies par rapport à un repère cartésien (comme dans *iMorph*) dont l'origine est située au pied du lit comme indiqué dans la sous-figure V.1a.

V.3.1 Comportement dynamique général

Pour chaque figure qui va suivre, comme pour la figure V.2, nous ne représenterons les températures que pour un petit nombre de nœuds choisis. Le nombre de nœuds solides et fluides étant respectivement 1899 et 6445 pour cet empilement, une représentation globale n'aurait pas d'intérêt.

La figure V.2 montre le comportement dynamique de la température de quelques nœuds choisis à des rayons différents. Cependant, leurs dynamiques sont représentatives de celle de l'ensemble des nœuds, à savoir, une augmentation des températures avec ou sans retard à partir de t_0 et l'atteinte à l'état stationnaire à partir de 20000 s pour tous les nœuds.

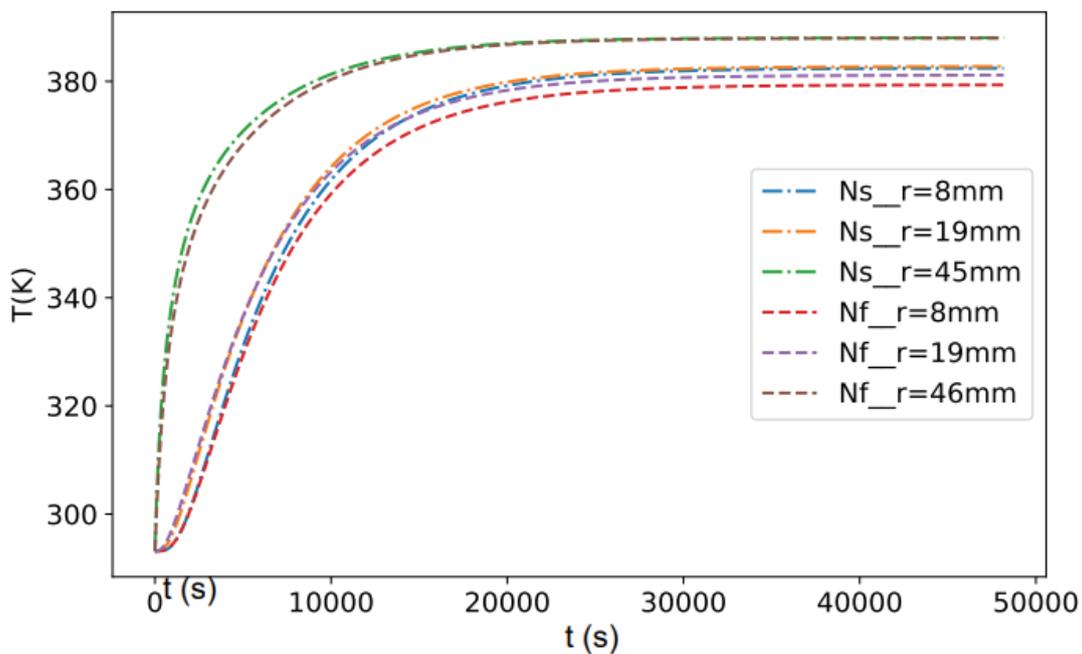


Figure V.2. Comportement dynamique général des températures pour trois nœuds de la phase solide et trois nœuds de la phase fluide.

V.3.2 Distributions de températures à différents instants t dans un plan xz ($y = 50 \text{ mm}$)

La figure V.3 présente la distribution de la température dans le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$, c'est-à-dire que tous les nœuds des deux phases ayant pour coordonnées ($0 \leq x \leq 100 \text{ mm}$, $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$, $0 \leq z \leq 213 \text{ mm}$) sont représentés dans ce plan, pour quatre instants. La variation de la température dans le plan est représentée par une variation de couleur du violet au rouge : le violet correspond à la température la plus faible ($T = 293,15 \text{ K}$) et le rouge à la température la plus élevée ($T = 393,15 \text{ K}$). Les sous-figures V.3c, V.3a, V.3b et V.3d montrent la distribution de la température respectivement à $t = 1000 \text{ s}$, $t = 5000 \text{ s}$, $t = 10000 \text{ s}$ et à $t = 20000 \text{ s}$. Nous observons que, pour tous les nœuds entre ces quatre instants, la

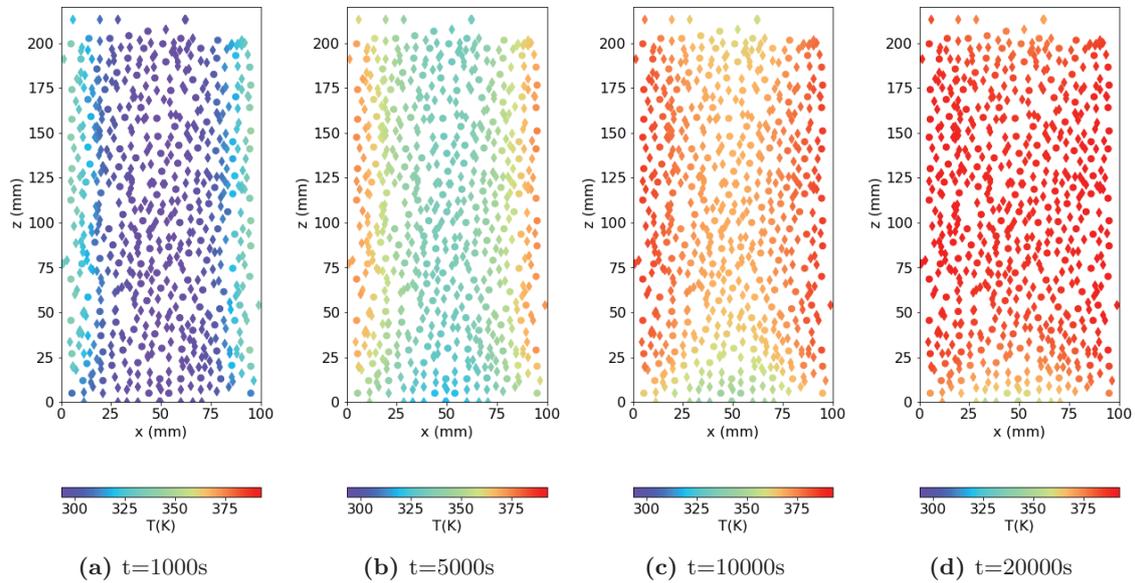


Figure V.3. Distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide

température augmente globalement dans tout le lit jusqu'à atteindre l'état stationnaire global vers 20000 s (soit environ $5,55h$). En régime stationnaire, la température des nœuds dans le lit est comprise entre $353,9 \text{ K}$ et $392,8 \text{ K}$ et est globalement plus proche de celle de la paroi latérale chaude que de celle des extrémités froides du lit. Cela s'explique par le fait que la somme des surfaces d'échange des deux extrémités du lit cylindrique est $2,13$ fois plus petite que la surface d'échange latérale du lit. Nous observons aussi que, logiquement, la température des nœuds situés près de la paroi ($x = 0 \text{ mm}$ ou $x = 100 \text{ mm}$) est relativement plus grande que celle des nœuds situés loin de la paroi pour tous les temps. Ce gradient radial de températures dépend du temps, mais aussi de la hauteur z . Pour voir cela plus précisément, regardons la figure V.4 où nous avons représenté la distribution de la température dans le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour les quatre instants cités ci-dessus, tout en choisissant une échelle spécifique pour chaque instant de manière que la couleur violette corresponde à la température

la plus faible et le rouge pour la température la plus élevée. Ainsi, nous voyons qu'à $t = 1000\text{ s}$ (sous-figure V.4a), la température est comprise entre $293,6\text{ K}$ et $344,2\text{ K}$. Dans une large bande d'environ 40 mm au centre du lit, tous les nœuds ont des températures inférieures à 300 K , cela veut dire que la température n'a presque pas varié alors que dans la zone proche paroi, on observe une augmentation progressive de la température de la paroi vers le centre. À $t = 5000\text{ s}$ (sous-figure V.4b) et à $t = 10000\text{ s}$ (sous-figure V.4c), la température est comprise respectivement entre 319 K et $375,7\text{ K}$ et entre $340,7\text{ K}$ et $386,6\text{ K}$ avec une diminution progressive de la paroi vers le centre pour une hauteur donnée. On observe surtout que les températures des nœuds proches de l'extrémité basse du lit sont relativement plus faibles que celles des nœuds proches de l'extrémité supérieure. Cela veut dire que, bien que l'on ait appliqué les mêmes conditions aux limites aux deux extrémités, elles ne sont pas identiques. Il n'y a pas de symétrie suivant le plan horizontal passant $z = H/2$. Cela s'explique par le fait que les particules dans le lit sont plus ordonnées en bas de l'empilement qu'en haut. En effet, il y a plus de particules dans les premières couches situées en bas du lit par rapport aux dernières couches situées en haut de l'empilement et donc inversement la porosité est plus grande dans les dernières couches que dans les premières. Ceci ne peut pas être observé par un modèle hétérogène de type Génie des Procédés dans la mesure où on suppose des symétries et des porosités uniformes. Après la discrétisation des deux phases avec *iMorph*,

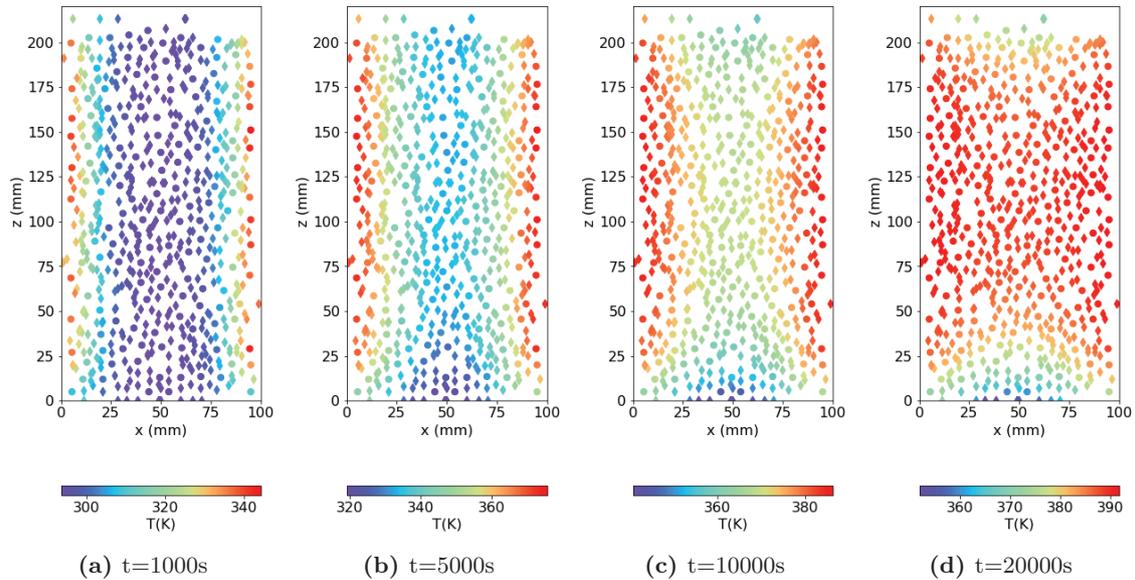


Figure V.4. Évolution locale de la distribution de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5\text{ mm}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide

nous avons pu constater que les cellules fluides sont plus grosses et moins nombreuses et ont des surfaces de contact entre elles plus grandes dans l'extrémité supérieure que celles situées près de l'extrémité inférieure. La résistance au transfert thermique étant inversement proportionnelle aux surfaces de contact, plus ces dernières sont grandes, plus elles facilitent la conduction entre les cellules. En fait, il n'y a pratiquement que des cellules fluides dans

l'extrémité supérieure, alors qu'il y a les éléments discrets des deux phases dans l'extrémité inférieure. Cela veut dire qu'il y a plus de résistance au transfert thermique en bas du lit, compte tenu des faibles surfaces de contact et du nombre éléments plus élevé, qu'en haut. De plus, les capacités volumiques ρc_V étant plus élevées pour les billes que pour le fluide, dynamiquement, ce phénomène est accentué. À partir de $t = 20000$ s, en régime stationnaire, on observe qu'à mi-hauteur du lit, l'écart de température entre les nœuds situés au niveau de la paroi et ceux situés au centre s'est considérablement réduit. Cependant, la différence de distribution de la température entre les deux extrémités du lit est toujours observable, ce qui confirme qu'elle est due à la structure du lit.

V.3.3 Distributions de températures à différents temps t dans un plan xy 2D ($z = 52,5$ mm)

La figure V.5 montre la distribution de la température des nœuds dans le plan xy à $z = 52,5 \pm 2,5$ mm pour quatre temps. Dans ce plan, nous observons aussi que globalement

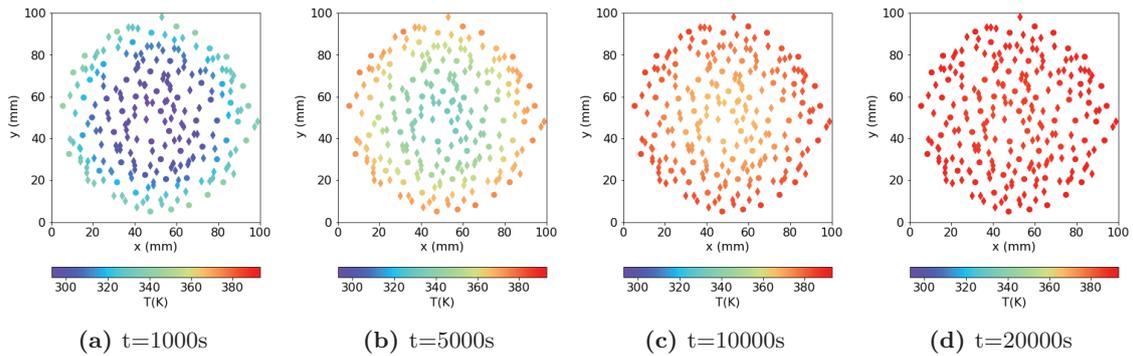


Figure V.5. Évolution globale de la distribution de la température sur le plan xy à $z = 52,5 \pm 2,5$ mm : ● pour le solide et ◇ pour le fluide

la température des nœuds augmente en fonction du temps et que les gradients de température radiaux semblent visuellement similaires dans toutes les directions radiales du plan. Cependant, si on regarde la figure V.6 où des cercles concentriques sont superposés au plan xy à $z = 52,5 \pm 2,5$ mm, nous remarquerons que ces gradients ne sont pas parfaitement identiques. En effet, les quatre carrés placés sur la figure montrent des zones de disparités des températures radiales. Ainsi, des nœuds de même phase et situés sur le même rayon peuvent avoir des températures différentes de plusieurs degrés (couleur différente) comme le montre les températures obtenues à 1000 s pour trois nœuds fluides sur le rayon $r = 40,4$ mm et deux nœuds solides sur le rayon $r = 36,05$ mm (Tableau V.3). Cet écart est important compte tenu de la plage de température de cette section $[293,7 K - 343,5 K]$ qui implique un gradient maximum de $50 K$ entre les billes et cellules en proche paroi et celles au centre du lit. Cela peut s'expliquer par le fait que l'énergie qui parvient à deux nœuds sur un même rayon et dans un même plan horizontal ne parcourt pas la même distance et n'est pas soumise à la même résistance. En effet, l'énergie transférée par chaque nœud dépend de plusieurs paramètres tels que le nombre de voisins, la température des voisins, les surfaces d'échange avec les voisins,

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

Tableau V.3. Températures et positions de deux nœuds solides et trois nœuds fluides situés sur deux cercles concentriques dans le plan xy à $z = 52,5 \pm 2,5 \text{ mm}$

Type de nœud	N° indice	Position (mm)			Rayon (mm)	Température (K)
		i	j	k		
Solide	5561	15,0	41,5	52,0	36,02	315,8
	5551	31,5	19,0	51,5	36,10	318,9
Fluide	240	63,0	88,0	50,5	40,16	326,9
	1167	86,5	67,5	50,5	40,48	328,5
	239	12,5	65,5	50,5	40,58	330,5

les volumes des voisins et les longueurs des chemins de transmission de la chaleur de la paroi jusqu'au nœud. Cela signifie que l'effet de la structure du lit est observable sur la distribution radiale de la température.

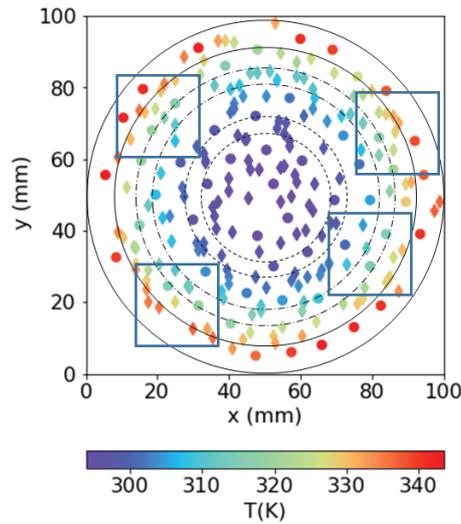


Figure V.6. Distribution de la température sur le plan xy à $z = 52,5 \pm 2,5 \text{ mm}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide ($t = 1000s$)

V.3.4 Profils axial et radial de températures en régime stationnaire

La figure V.7 montre les profils radiaux (sous-figure V.7a) et axiaux (sous-figure V.7b) de la température dans le lit en régime stationnaire ($t = 20079s$). Les profils radiaux ont été tracés avec les valeurs de températures de tous les nœuds situés dans le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ et à une hauteur de $z = 100 \pm 5 \text{ mm}$ et les profils axiaux avec celles des nœuds se trouvant sur le même plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ et à une distance $x = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$, c'est-à-dire au centre du

lit. Le profil radial des deux phases a une forme parabolique avec une température minimum obtenue au centre du lit ($x = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$). La différence de température entre les nœuds du centre et ceux situés en contact avec la paroi est faible (des écarts maximaux de $1,8 \text{ K}$ pour la phase solide et $2,7 \text{ K}$ pour la phase fluide ont été obtenus). La température varie très peu radialement pour les deux phases pour cette hauteur z dans le lit, car les nœuds sont relativement loin des extrémités. Les profils radiaux sont similaires sur toute la hauteur du lit avec les écarts de température entre les nœuds du centre du lit et ceux près de la paroi qui augmentent progressivement quand on approche des extrémités du lit. Cela est illustré dans les figures B.1 en annexe. Quant aux profils axiaux, on voit qu'ils ont également une forme parabolique, pour les deux phases, avec un décalage du maximum vers la moitié supérieure du lit (autour de $z = 130 \text{ mm}$, le centre du lit étant à $z = 106,5 \text{ mm}$). Lorsqu'on s'éloigne du centre du lit, les courbes paraboliques ont tendance à s'aplatir montrant des températures dans une gamme plus restreinte sur une large distance suivant z , sauf aux extrémités du lit qui présentent des températures plus faibles (voir les figures B.2 en annexe).

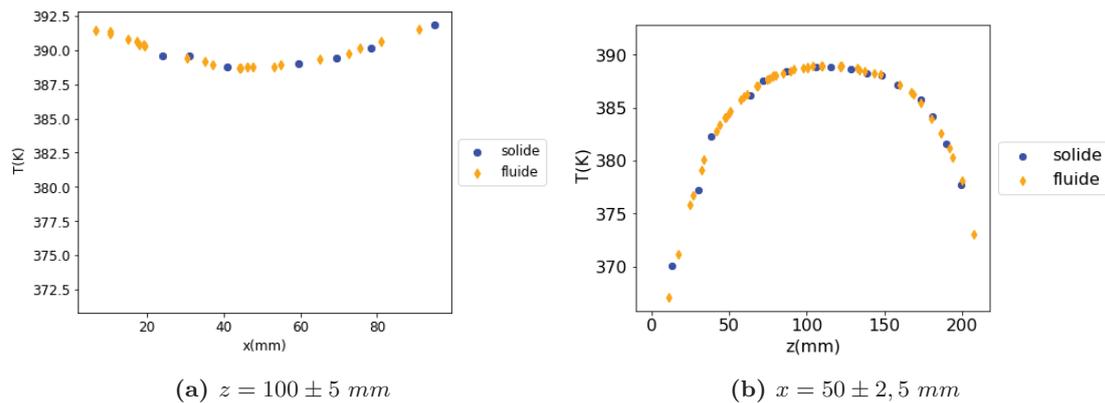


Figure V.7. Profils de températures en régime stationnaire ($t=20079\text{s}$) : (a) radial et (b) axial

V.3.5 Comparaison des comportements dynamiques des nœuds de phases différents situés à un même rayon ou à une même hauteur

Dans cette section, nous allons comparer le comportement dynamique de quelques nœuds situés à des positions spécifiques dans le lit. Les positions de ces nœuds sont indiquées dans la figure V.8. Nous avons déjà vu dans la section V.3.1 le profil général des courbes, nous allons entrer plus dans le détail ici. La sous-figure V.8a montre les positions relatives de trois nœuds situés à une hauteur donnée ($z = 27 \pm 2,5 \text{ mm}$) et à trois rayons différents ($r = 8 \pm 2,5 \text{ mm}$, $r = 19 \pm 2,5 \text{ mm}$ et $r = 45 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour chaque phase. La sous-figure V.8b indique celles de trois nœuds situés à un rayon fixe ($r = 17,5 \pm 2,5 \text{ mm}$) et trois hauteurs différentes ($z = 29,5 \pm 2,5 \text{ mm}$, $z = 104,5 \pm 2,5 \text{ mm}$ et $z = 188,0 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour chaque phase et celle du nœud N°5632 de la phase solide situé à $r = 2 \text{ mm}$ et $z = 64 \text{ mm}$ que nous traiterons dans la section V.3.6.

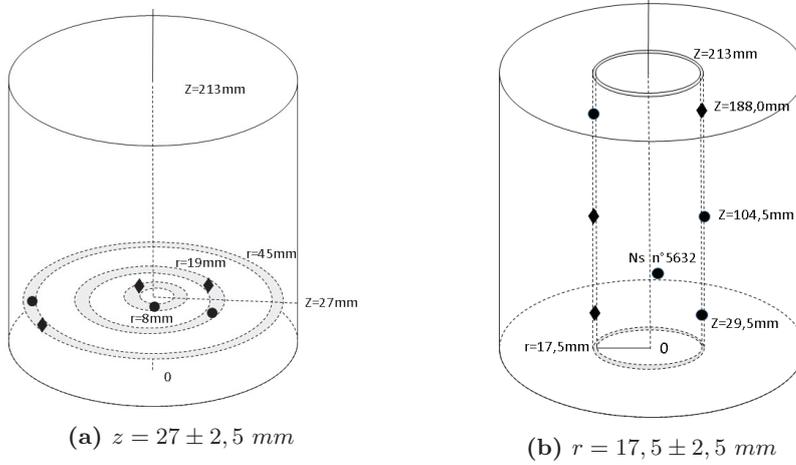


Figure V.8. Positions de nœuds des deux phases (a) trois nœuds à une hauteur constante $z = 27 \pm 2,5 \text{ mm}$ (b) trois nœuds à un rayon constant ($r = 17,5 \pm 2,5 \text{ mm}$) et le nœud solide N°5632 situé à $r = 2 \text{ mm}$ et $z = 64 \text{ mm}$

V.3.5.1 Comportement dynamique des nœuds situés sur un même rayon

La figure V.9 montre le comportement dynamique de la température pour les nœuds des deux phases situés dans le rayon $r = 17,5 \pm 2,5 \text{ mm}$ à différentes hauteurs. Ns et Nf indiquent respectivement «nœud de la phase solide» et «nœud de la phase fluide». Les profils des trois nœuds de chaque phase sont tracés dans la sous-figure V.9a. Deux zooms sont faits : (i) sur 1000 premières secondes (sous-figure V.9b) et (ii) à l'état stationnaire (sous-figure V.9c). Nous observons que les courbes des six nœuds ont globalement la même allure : elles présentent toutes un retard au chauffage entre 0 s et 300 s et l'atteinte à l'état stationnaire après 20000 s .

Le niveau de température à l'état stationnaire n'est pas le même pour tous les nœuds. En effet, comme nous l'avons vu dans la section V.3.4, les profils axiaux de températures présentent un maximum dans les sections au centre du lit, dont la section $z = 104,5 \text{ mm}$ fait partie, et des températures plus basses aux extrémités du lit, dont les sections $z = 29,5 \text{ mm}$ et $z = 188,0 \text{ mm}$ font partie. Pour plus de détails, voir les sous-figures B.2b et B.2c en annexe qui représentent les profils axiaux de températures à l'état stationnaire en $x = 30 \pm 2,5 \text{ mm}$ et $x = 70 \pm 2,5 \text{ mm}$, axes proches du rayon $r = 17,5 \pm 2,5 \text{ mm}$. À l'état stationnaire, les différences d'écart de températures entre les nœuds solides et les nœuds fluides pour une même hauteur et un même rayon ne sont pas significatives, car nous n'avons choisi que deux nœuds par rayon et un nœud par phase qui ne sont pas obligatoirement représentatifs de l'ensemble des nœuds sur un même rayon. En effet, pour conclure sur ce point, il aurait fallu regarder les profils de températures de tous les nœuds solides et fluides sur le même rayon à l'état stationnaire. Concernant le comportement dynamique des différents nœuds, nous constatons dans la sous-figure V.9b que les dynamiques des nœuds proches des extrémités haute et basse du lit ($z = 29,5 \text{ mm}$ et $z = 188,0 \text{ mm}$) sont plus lentes que celles des nœuds au centre du lit. De plus, les dynamiques des nœuds solide et fluide en $z = 29,5 \text{ mm}$ sont remarquables. Si les températures du nœud solide (bleu) sont très légèrement supérieures à

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

celles du nœud fluide (rouge) lors des 1000 premières secondes, c'est l'inverse qui est observé à l'état stationnaire, montrant qu'il y a eu croisement entre la courbe du nœud fluide avec celle du nœud solide. Un même croisement de courbe est aussi observable entre les nœuds solide ou fluide en $z = 29,5 \text{ mm}$ et ceux en $z = 188,0 \text{ mm}$ montrant une dynamique plus rapide pour les nœuds en $z = 188,0 \text{ mm}$. Or, il faut remarquer que les proportions de solide et de fluide ne sont pas les mêmes aux deux extrémités, avec une prédominance du fluide à l'extrémité haute du lit, contrairement à celle en bas du lit. Nous donnerons une explication à ce phénomène dans la suite.

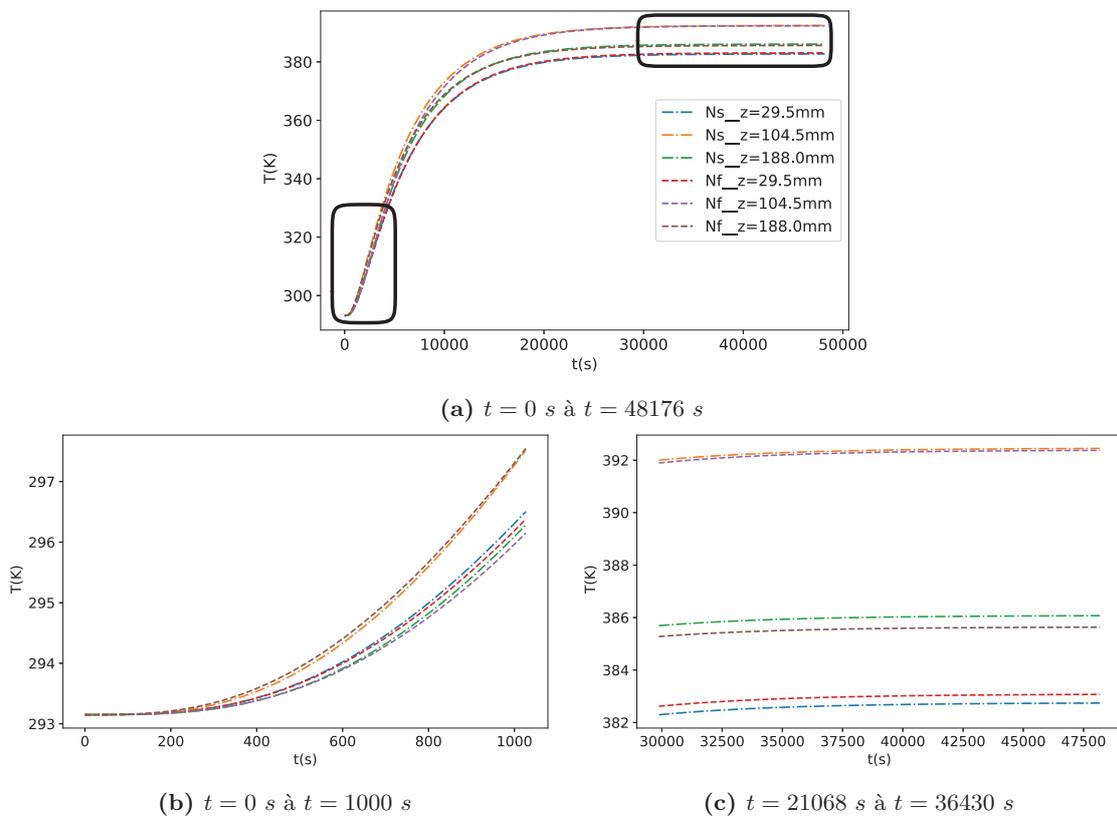


Figure V.9. Évolution temporelle des températures des trois nœuds solides et des trois nœuds fluides se trouvant au même rayon ($r = 17,5 \pm 2,5 \text{ mm}$) à $z = 29,5 \text{ mm}$, $z = 104,5 \text{ mm}$ et $z = 188,0 \text{ mm}$ (a) profils de toute la gamme de temps (b) 1000 premières secondes (c) zone stationnaire

V.3.5.2 Comportement dynamique des nœuds situés sur une même section

L'évolution temporelle de la température des nœuds des deux phases, situés à $z = 27 \pm 2,5 \text{ mm}$ est donnée dans la figure V.10. Les profils des trois nœuds de chaque phase sont tracés dans la sous-figure V.10a. Deux zooms sont faits : (i) sur 4200 premières secondes (sous-figure V.10b) et (ii) à l'état stationnaire (sous-figure V.10c). Nous pouvons observer

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

que les dynamiques sont différentes pour les nœuds sur des rayons différents, mais que l'état stationnaire est atteint autour de 20000 s.

En régime stationnaire, les tendances décrites dans les sections V.3.2 et V.3.3 se retrouvent, à savoir des températures plus hautes à proximité des parois ($r = 45 \text{ mm}$) qu'au centre ($r = 8 \text{ mm}$) pour les deux phases et des différences de températures pouvant être de quelques degrés pour deux nœuds sur un même rayon. Ici, pour les deux nœuds sur le rayon $r = 8 \text{ mm}$, leur différence de température est de $3,1 \text{ K}$. Or, il faut rappeler que le diamètre des particules est de 10 mm et donc que ces deux nœuds sont dans un rayon inférieur à un diamètre de bille, donc probablement voisins.

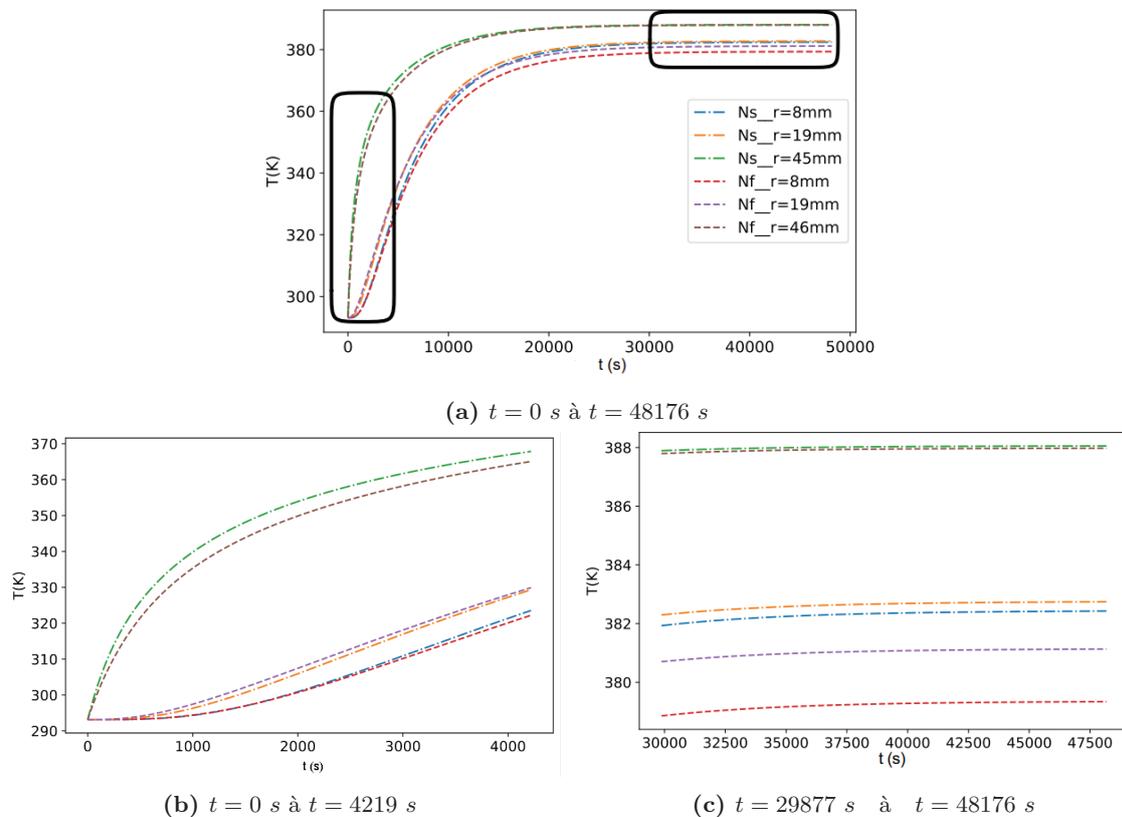


Figure V.10. Évolution temporelle des températures des trois nœuds solides et des trois nœuds fluides se trouvant sur une même section $z = 27 \pm 2,5 \text{ mm}$ à $r = 8 \text{ mm}$, $r = 19 \text{ mm}$ et $r = 45 \text{ mm}$: (a) profils de toute la gamme de temps (b) 4219 premières secondes (c) zone stationnaire

Concernant la dynamique, les nœuds solides et fluides ont des comportements dynamiques pratiquement semblables s'ils sont positionnés sur un même rayon et à une même hauteur. En effet, sur la sous-figure V.10b, nous pouvons observer trois dynamiques différentes pour les nœuds solides et fluides positionnés sur les rayons $r = 8 \text{ mm}$, $r = 19 \text{ mm}$ et $r = 45 \text{ mm}$: les températures associées aux nœuds solides et fluides sur le rayon $r = 45 \text{ mm}$ augmentent très rapidement et instantanément, alors que celles associées aux nœuds solides et fluides sur

les rayons $r = 19 \text{ mm}$ et $r = 8 \text{ mm}$ présentent un retard, le retard étant plus long pour les nœuds sur le rayon $r = 8 \text{ mm}$ que ceux sur le rayon $r = 19 \text{ mm}$, dû à la longueur des chemins. Il serait par contre hasardeux de s'avancer sur la différence de dynamique des nœuds fluide et solide positionnés dans une même zone dans la mesure où elle résulte de différents facteurs qui sont, entre autres, l'accumulation de la chaleur dans le nœud (la quantité nette de chaleur reçue), la résistance au transfert au niveau des surfaces de contact entre le nœud et ses voisins, le nombre de voisins avec lesquels il échange et les propriétés thermiques du matériau qui constitue le nœud. En effet, en comparant les diffusivités thermiques respectives de l'air et de l'alumine, qui sont $20,1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ et $0,84 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, nous pourrions nous attendre à ce que la dynamique soit plus rapide sur les nœuds fluides que sur ceux solides. Cependant, il ne faut pas négliger que ce sont deux milieux interconnectés avec des phénomènes de transfert. Néanmoins, cet écart entre les diffusivités de l'air et de l'alumine pourrait être une explication à la différence de dynamique observée entre le haut et le bas du lit, la proportion de fluide étant très importante en haut du lit (section V.3.5.1).

Dans la suite, nous allons regarder les effets de ces paramètres pouvant influencer les dynamiques.

V.3.6 Analyse des profils dynamiques de température pour un nœud solide et ses voisins des deux phases

Nous avons vu précédemment que les températures des cellules et des billes pouvaient être assez différentes, bien qu'étant localisées sur le même rayon, voire étant proches. De ce fait, nous avons voulu voir quels pouvaient être les gradients de températures entre des nœuds voisins de la même phase ou de phases différentes. Nous avons donc tracé les profils dynamiques de la température pour le nœud N°5632, situé à un rayon de 2 mm et à une hauteur de 64 mm (voir figure V.8b), et ses voisins des deux phases. Le nœud N°5632 a 6 voisins dans la phase solide et 16 dans la phase fluide. Les positions des nœuds voisins sont telles que tous les nœuds des deux phases sont sur des rayons plus grands que celui du nœud N°5632. En termes de hauteur, pour la phase solide, les billes ayant un diamètre de 10 mm , les nœuds solides complètement au-dessus ou au-dessous doivent être positionnés sur des hauteurs $z = 74 \text{ mm}$ ou $z = 54 \text{ mm}$. Nous remarquons que ce n'est le cas que pour un seul nœud solide voisin qui est au-dessous à $z = 54 \text{ mm}$. Les nœuds solides sont globalement dans la zone au-dessous du nœud N°5632, un seul voisin est dans la zone au-dessus et un seul voisin est à la même hauteur que le nœud N°5632, de l'autre côté de l'axe vertical du lit. Qu'il n'y ait pas de répartition uniforme des nœuds solides voisins autour d'une bille est logique dans la mesure où l'empilement n'est pas parfaitement ordonné. Qu'il y en ait très peu au-dessus, peu provenir du fait que ne sont considérées voisines que les nœuds qui ont une surface de contact en commun. Il suffit d'un voxel entre les billes pour qu'elles ne soient pas considérées voisines. Ceci rend souvent les graphes difficiles à interpréter et à valider. Pour la phase fluide, sept nœuds fluides sont au-dessous et sept autres nœuds fluides sont au-dessus du nœud principal. Deux nœuds fluides sont au même niveau que le nœud N°5632.

Les profils temporels des températures du nœud N°5632 et de ses voisins de la phase solide sont tracés dans la sous-figure V.11a et ceux du nœud principal avec ses voisins de la phase fluide sont tracés dans la sous-figure V.11b. Nous observons que dans chacune deux sous-

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

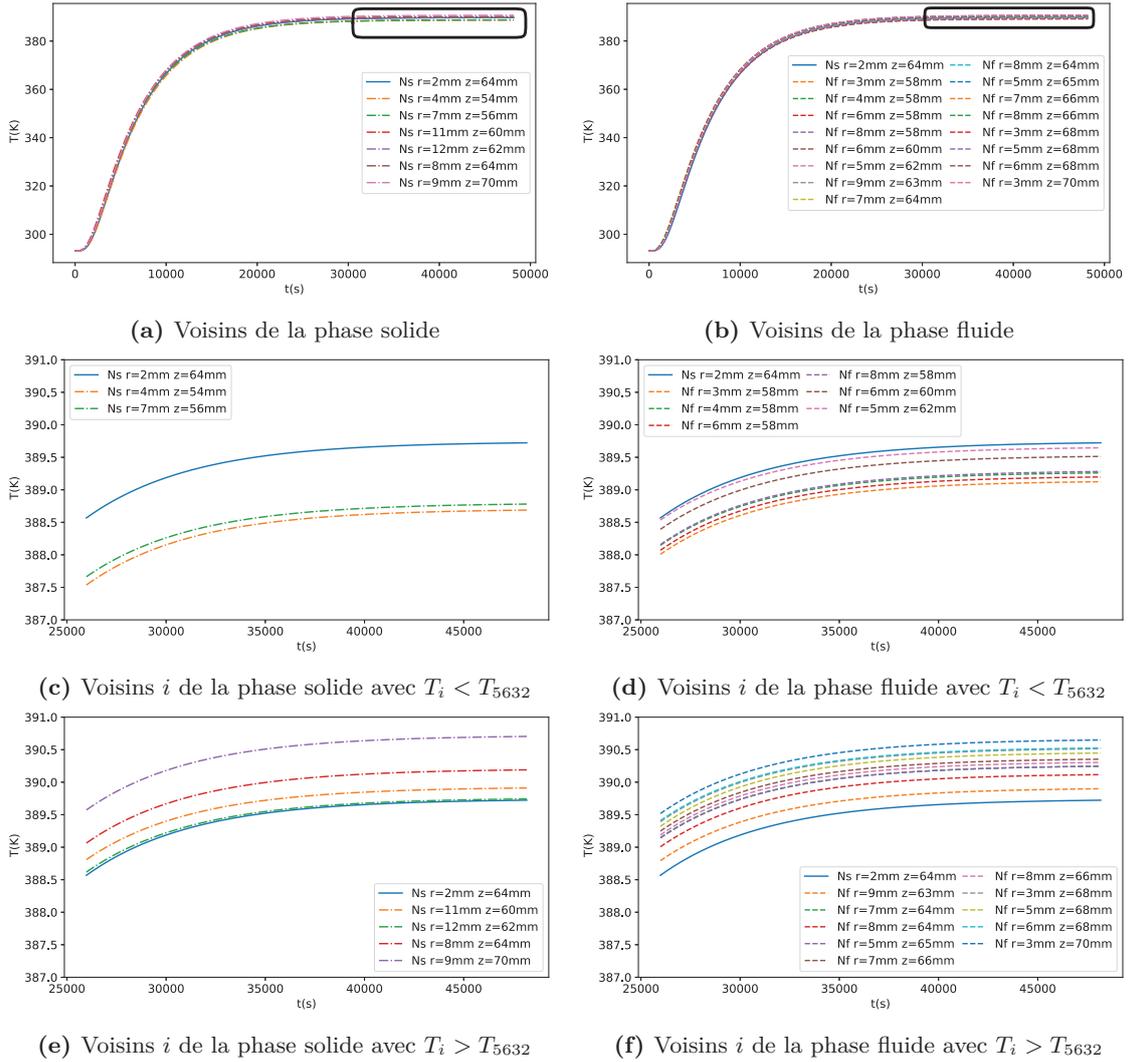


Figure V.11. Profils temporels de température du nœud N°5632 de la phase solide ($r = 2 \text{ mm}$ et $z = 64 \text{ mm}$) et ses voisins des deux phases

figures les profils ont la même allure quel que soit le nœud fluide ou solide. Les valeurs des températures du nœud N°5632 et de ses voisins sont relativement proches en tout instant, les profils constituant un faisceau de courbes autour du nœud N°5632. En effet, les sous-figures V.11c et V.11e, et V.11d et V.11f, montrent les profils dans la zone quasi-stationnaire associés respectivement aux voisins de la phase solide et aux voisins de la phase fluide, la courbe bleue en trait continu étant celui du nœud N°5632.

Nous avons montré sur la figure V.7 qu'en régime stationnaire, la température varie relativement moins radialement dans le lit qu'axialement, sauf aux extrémités du lit. On retrouve les mêmes tendances au niveau du nœud N°5632. En effet, nous voyons que les températures des nœuds à un chaque instant peuvent pratiquement se classer en fonction des hauteurs z des nœuds et ceci pour les deux phases : plus l'écart de hauteur entre le nœud N°5632 et un nœud voisin est grand, plus l'écart de température entre les deux nœuds est grand. Dans la direction radiale, l'écart de température entre le nœud N°5632 et un nœud voisin est plus difficile à interpréter directement, car les différences de rayon ne donnent pas les distances. Pour la phase solide, les distances entre nœuds étant obligatoirement de 10 mm , nous pouvons regarder les exemples des deux nœuds situés à $z = 54\text{ mm}$ et à $z = 64\text{ mm}$ ou proche : la température de la courbe orange ($r = 4\text{ mm}$ et $z = 54\text{ mm}$) est 1 K plus faible que la température du nœud N°5632 alors que les températures de la courbe rouge ($r = 8\text{ mm}$ et $z = 64\text{ mm}$) et de la courbe verte ($r = 12\text{ mm}$ et $z = 62\text{ mm}$) présentent des gradients entre $0,02\text{ K}$ et $0,5\text{ K}$ avec du nœud N°5632 (voir les sous-figures V.11c et V.11e).

L'analyse du comportement d'un nœud et de ses voisins montre que ce type de modèle est intéressant, car il permet de donner des informations locales et ne préjuge pas de symétries dans les empilements. Il reste relativement précis localement, car le nombre de voisins total (22 pour le nœud N°5632) correspond au nombre de mailles de discrétisation de la surface d'une bille.

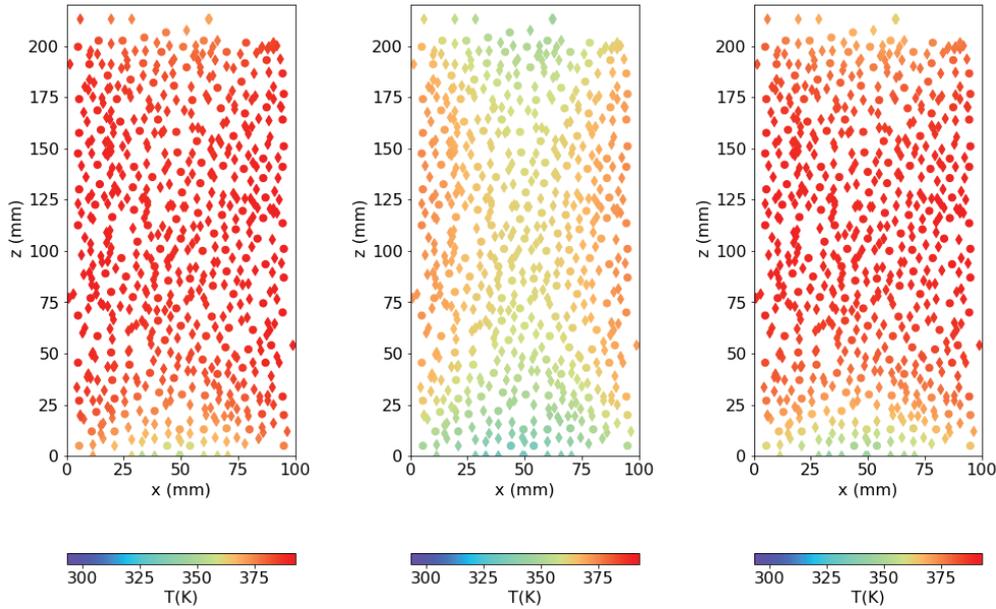
V.4 Effet de la surface de contact entre les billes pour l'empilement N°5

Dans la section IV.4.2, il a été montré que la résolution des images utilisées pour construire l'empilement numérique a un effet sur la surface de contact entre les particules. Or, il est pratiquement admis dans les modèles de type Génie des Procédés que ces surfaces de contact solide/solide ont peu d'impact sur les résultats, mais il faut rappeler que ces modèles sont des modèles quasi-stationnaires et non dynamiques et que nous ne prenons pas en compte la convection ici. Dans cette section, nous allons donc regarder l'effet de la surface de contact entre les particules sur la conduction thermique globale dans le lit.

Pour l'empilement N°5, la surface de contact solide/solide moyenne est de $A1_{moyen} = 3,62\text{ mm}^2$ obtenue pour une résolution d'image de $500\mu\text{m}$. Pour voir l'effet de cette propriété géométrique, la surface de contact solide/solide a été divisée par 4 pour chaque paire de particules solides ij dans la simulation N°2 ($A2_{ij} = \frac{A1_{ij}}{4}$). Les $3/4$ des surfaces solide/solide pour chaque paire de particules solides $A1_{ij}$ sont ensuite ajoutées aux surfaces de contact solide/fluide associées aux particules concernées. La méthode que nous avons utilisée pour répartir ces proportions de surface sur l'interface solide/fluide est la même que celle utilisée

dans la section IV.6.2 pour le calcul des surfaces d'interfaces.

Les figures dans cette section comparent les résultats de la simulation N°2 avec ceux de la simulation N°1 (tableau V.2).



(a) simulation N°1 : $t = 20080$ s (b) simulation N°2 : $t = 20080$ s (c) simulation N°2 : $t = 70126$ s

Figure V.12. Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5$ mm pour les simulations N°1 ($A = A1_{ij}$) et N°2 ($A = A1_{ij}/4$) à $t = 20080$ s et la simulation N°2 à $t = 70126$ s : ● pour le solide et ◇ pour le fluide

La figure V.12 montre la distribution de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5$ mm pour les deux simulations et à $t = 20080$ s et à $t = 70126$ s pour la simulation N°2. Les niveaux de températures des nœuds de deux phases montrent que si pour la simulation N°1, l'état stationnaire peut être considéré comme atteint pour la simulation N°1 en environ 20000 s, ce n'est pas le cas pour la simulation N°2. Nous avons en effet constaté que le régime stationnaire commence à environ 20000s pour la simulation N°1 tandis que pour la simulation N°2, les courbes commencent à peine à se stabiliser autour de 48000s. Cela peut aussi être observé sur les profils de températures de deux nœuds, un solide et un fluide, choisis arbitrairement et situés à $z = 28 \pm 2,5$ mm (figures V.13 et V.14).

La figure V.13 montre la dynamique des deux nœuds sur toute la gamme de temps jusqu'à l'état stationnaire et la figure V.14 montre la dynamique des deux nœuds sur une gamme plus restreinte de temps jusqu'à 48176 s. Pour chacune des deux simulations, les profils des températures des deux nœuds sont similaires. Par contre, ils ne sont pas similaires d'une simulation à l'autre. Pour la simulation N°2, le retard à la montée en température est plus long et l'état stationnaire est atteint sur des températures plus faibles pour les deux nœuds. Pour la simulation N°1, les températures des deux nœuds sont relativement distinctes, surtout dans la zone du régime stationnaire, tandis que pour la simulation N°2, les températures des

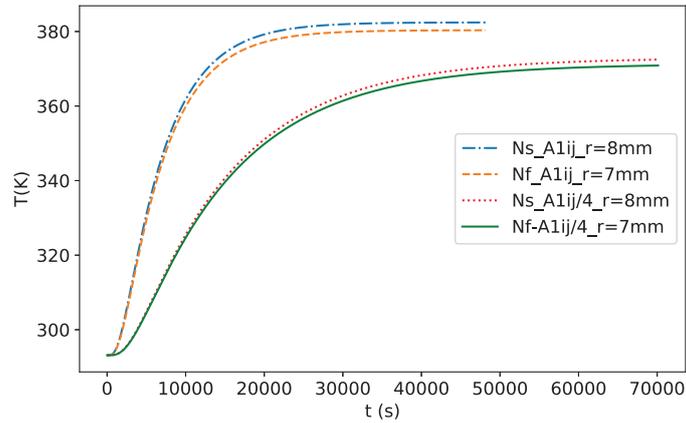


Figure V.13. Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 ($A = A_{1ij}$) entre 0 et 48176 s et N°2 ($A = A_{1ij}/4$) entre 0 et 70126 s

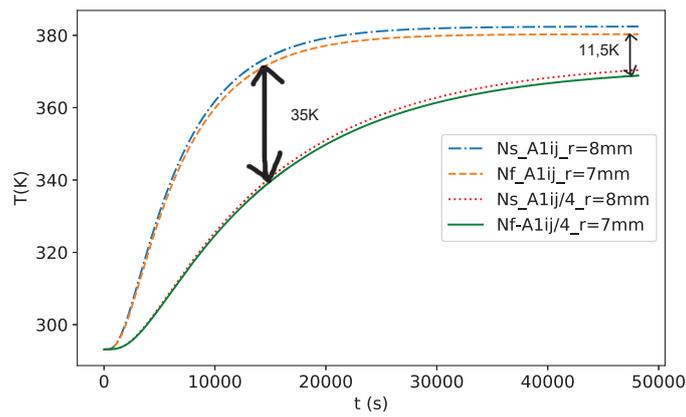


Figure V.14. Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 ($A = A_{1ij}$) et N°2 ($A = A_{1ij}/4$) entre 0 et 48176 s

deux nœuds sont plus proches, pratiquement superposés. Il est observable qu'à chaque instant les températures pour la simulation N°1 sont supérieures de celles de la simulation N°2, l'écart de température entre les simulations augmente progressivement jusqu'à atteindre $35K$ autour de $t = 12000 s$ puis diminue avec le temps pour atteindre $11,5 K$ à $t = 48176 s$. Après atteinte à l'état stationnaire, dans tout le lit, les températures des nœuds des deux phases sont comprises entre $353,9 K$ et $392,8 K$ pour la simulation N°1 et $342,5 K$ et $391,0 K$ pour la simulation N°2, avec un écart de $9,5 K$ entre les températures de la simulation N°1 et la simulation N°2, montrant un effet des surfaces de contact solide/solide à la fois sur la dynamique du système, mais aussi sur l'état stationnaire et que cet effet est plus marqué lors de la montée en température. Concernant les profils radiaux et axiaux observés, ils ont des allures identiques à ceux représentés dans la figure V.7, c'est-à-dire un profil radial parabolique pour tout z avec une faible différence entre les températures minimum et maximum, à l'exception des zones proches des extrémités du lit et un profil axial parabolique pour tout rayon du lit.

En conclusion, nous retenons que la diminution de la surface de contact solide/solide a deux effets principaux :

- elle augmente la durée du régime transitoire ;
- elle change la température de stabilisation des nœuds ;

et que ces effets sont observables à la fois sur la phase solide et la phase fluide.

V.5 Effet des paramètres physiques

V.5.1 Effet du coefficient d'échange de chaleur entre les particules et le fluide

Le coefficient d'échange de chaleur étant un paramètre que nous avons estimé à l'aide d'une corrélation, il est légitime de se demander si cette estimation est correcte. Dans cette section, ce coefficient a été varié, arbitrairement, pour voir son effet sur la dynamique et la distribution de la température dans le lit. Ainsi, la simulation N°3 a été effectuée en divisant par 5 les coefficients d'échange de chaleur solide/fluide h^{sf} et h_B^{sf} , entre les billes et la phase fluide dans le cœur du lit, mais aussi au niveau des conditions aux limites. Les résultats de cette simulation sont comparés à ceux de la simulation N°1. L'essentiel des effets constatés est reporté dans les figures V.15 et V.16. La figure V.15 montre la distribution de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 mm$ et à $t = 20085 \pm 5s$. La figure V.16 montre les courbes de la dynamique d'un nœud de la phase solide et un autre de la phase fluide situés à $z = 28 \pm 2,5 mm$ et $r = 7 \pm 2,5 mm$ pour les simulations N°1 et N°3. Comme pour la simulation N°2, la dynamique des températures sur la simulation N°3 est plus lente que celle de la simulation N°1, mais elle est plus rapide que la simulation N°2.

Pour chaque nœud, les températures de la simulation N°1 sont supérieures à celles de la simulation N°3. Sachant que la simulation N°1 se stabilise autour de $20000 s$, l'on peut constater que les courbes associées à la simulation N°3 continuent de croître même après les $30000 s$. Ce qui signifie que le régime stationnaire n'est atteint qu'après les $30000 s$, donc la diminution de h^{sf} ralentit la dynamique de chauffage du lit. À $t = 48176 s$, la température du nœud solide est pratiquement identique dans les deux simulations ; l'écart de température

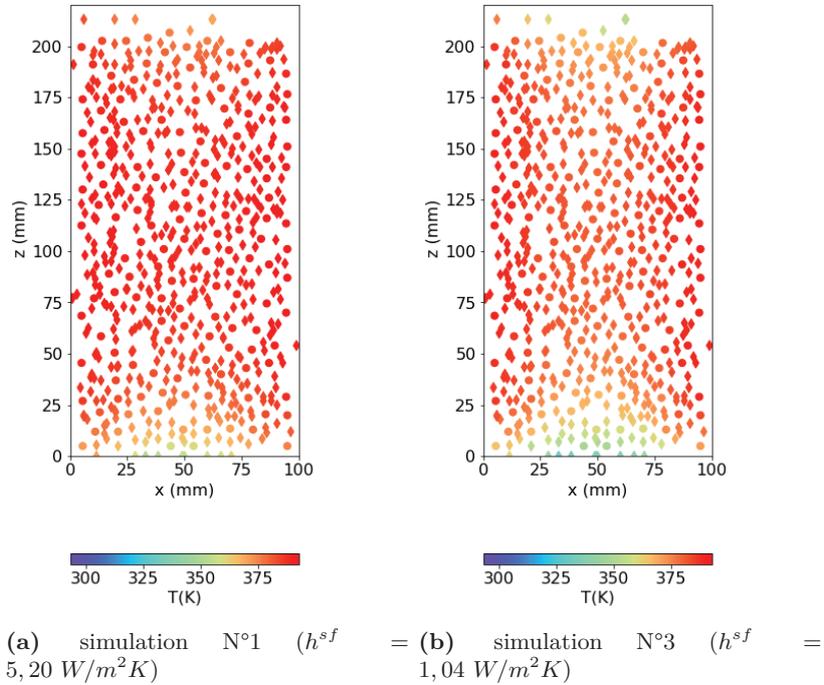


Figure V.15. Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour les simulations N°1 et N°3 à $t = 20085 \pm 5 \text{ s}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide

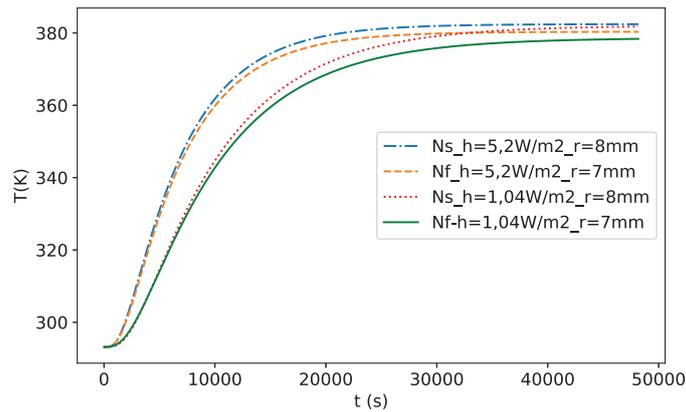


Figure V.16. Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 ($h^{sf} = 5,2 \text{ W/m}^2$) et N°3 ($h^{sf} = 1,04 \text{ W/m}^2$) jusqu'à l'état stationnaire

est de $\Delta T_S = 0,58K$. Pour le nœud fluide, l'écart de température entre les deux simulations reste relativement grande ($\Delta T_F = 1,89K$ soit plus de trois fois ΔT_S). On peut aussi observer que l'écart de température entre le nœud solide et le nœud fluide dans la simulation N°1 à $t = 48176s$ est plus petit que l'écart de température de ces mêmes nœuds dans la simulation N°3. En effet, cet écart vaut $2,09K$ pour la simulation N°1 et $3,41K$ pour la simulation N°3. Cela est logique dans la mesure où le coefficient d'échange est directement lié au flux de transfert de chaleur entre les phases et où, si ce coefficient a une valeur infinie, on peut considérer que le milieu est homogène.

En conclusion, nous pouvons retenir que la diminution du coefficient d'échange de chaleur à l'interface entre les billes et la phase fluide augmente le temps d'atteinte au régime transitoire. Elle augmente aussi localement l'écart de température entre les nœuds solides et fluides, situés dans un même rayon et à la même hauteur à $\pm 2,5\text{ mm}$. Cependant, il faut remarquer que le comportement dynamique du système est plus sensible à la réduction par 4 du flux du chaleur solide/solide qu'à une réduction par 5 du flux de chaleur solide/fluide (Attention, les conclusions ne devraient pas être les mêmes avec la convection).

V.5.2 Effet de la diffusivité thermique du fluide

Pour étudier l'effet des propriétés physiques des matériaux (phases solide et fluide), nous avons opté pour le changement de la nature d'une des phases de notre modèle puisque nous ne voulions utiliser que des propriétés physico-chimiques réelles des matériaux. Le fait de changer la nature d'une phase revient à changer la diffusivité thermique de cette phase, mais aussi le rapport de diffusivité des deux phases. Ainsi, l'air représentant la phase fluide a été remplacé par du dioxyde de carbone (CO_2). Ce dernier a été choisi car la différence entre sa diffusivité thermique ($10,8 \cdot 10^{-6} m^2/s$) et celle de l'air ($20,1 \cdot 10^{-6} m^2/s$) est relativement grande. Le changement de nature de phase affecte aussi le coefficient d'échange à la paroi, car ce dernier dépend de la conductivité du fluide (voir équation V.1).

La simulation N°4 simule donc la conduction de la chaleur dans l'empilement N°5 avec CO_2 comme phase fluide stagnante. Les résultats de cette simulation sont comparés à ceux de la simulation N°1. La figure V.17 montre la distribution de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5\text{ mm}$ à $t = 20085 \pm 6\text{ s}$ pour les simulations N°1 et N°4. Les plages de températures obtenues sont pour les nœuds solides respectivement de $[359,5\text{ K} ; 391,8\text{ K}]$ et $[363,6\text{ K} ; 391,7\text{ K}]$ pour la simulation N°1 et N°4 et pour les nœuds fluides respectivement de $[351,8\text{ K} ; 391,7\text{ K}]$ et $[356,6\text{ K} ; 391,5\text{ K}]$ pour la simulation N°1 et N°4. Ceci montre que, pour cet instant t et pour un nœud donné dans le lit, la température obtenue avec la simulation N°1 est légèrement plus faible que celle issue de la simulation N°4.

Quant à la dynamique, la sous-figure V.18a illustre les profils temporels de la température associés à un nœud de la phase solide et un nœud de la phase fluide situés à $z = 28 \pm 2,5\text{ mm}$ et à $r = 7 \pm 2,5\text{ mm}$. On constate que le changement de nature de la phase fluide induit peu de changement sur le comportement dynamique global. À l'état stationnaire, pour les deux phases, les températures de la simulation N°1 sont légèrement inférieures de celles de la simulation N°4. En effet, à $t = 48165 \pm 11\text{ s}$, l'écart de température entre les deux simulations sur le nœud solide est de $\Delta T_S = T_{S_4} - T_{S_1} = 2,35\text{ K}$ et sur le nœud fluide de $\Delta T_F = 2,59\text{ K}$. On constate aussi que l'écart de température entre les deux nœuds de

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

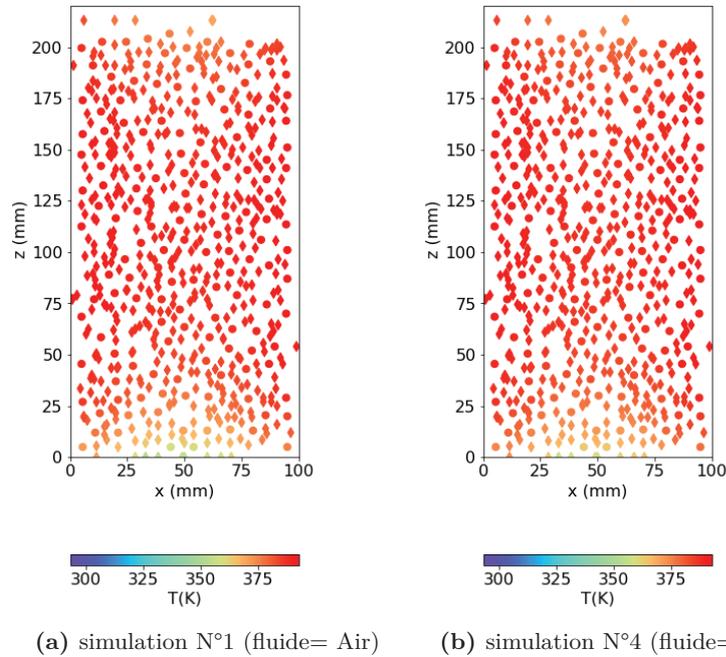


Figure V.17. Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour les simulations N°1 et N°4 à $t = 20085 \pm 6 \text{ s}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide

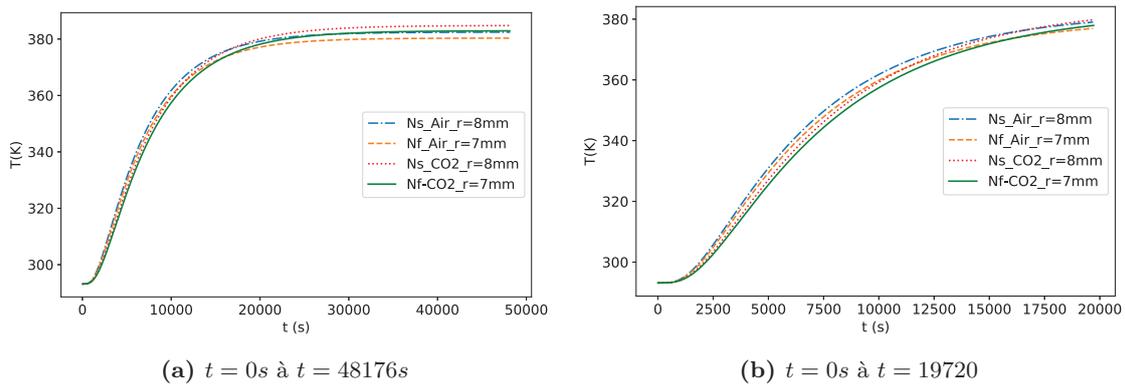


Figure V.18. Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour les simulations N°1 (air comme phase fluide) et N°4 (CO_2 comme phase fluide)

phases différentes est légèrement plus grand pour la simulation N°1 ($\Delta T_{SF} = 2,1 K$) que pour la simulation N°4 ($\Delta T_{SF} = 1,85 K$). En régime transitoire, comme illustré dans la sous-figure V.18b, par contre, les températures de deux nœuds des phases solide et fluide de la simulation N°1 sont supérieures de celles de la simulation N°4. C'est autour de 17000 s que les courbes se croisent pour les deux phases. Cela s'explique par la combinaison des effets de deux paramètres physiques. En effet, le fait que la conductivité de l'air soit supérieure à celle du CO_2 rend la conduction plus rapide dans la phase fluide pendant la simulation N°1 par rapport à la simulation N°4. Mais aussi, le fait que le coefficient d'échange entre les billes et l'air soit relativement plus grand que celui entre les billes et le CO_2 favorise le transfert thermique entre les deux phases et contribue à accélérer la conduction thermique dans le lit. Par conséquent, pour la simulation N°4, la combinaison de ces deux effets allonge le régime transitoire, mais augmente légèrement la température à l'état stationnaire pour chaque nœud. Le régime stationnaire commence autour de 22000 s pour la simulation N°4 au lieu de 20000 s pour la simulation N°1.

V.6 Effet du rapport du diamètre du tube sur le diamètre des particules

Dans cette section, nous nous sommes intéressés à l'effet du rapport du diamètre du lit sur le diamètre des particules. Pour cela, nous avons effectué une simulation de la conduction thermique dans l'empilement N°6 qui a les mêmes dimensions que l'empilement N°5, mais dont la taille des particules est de 15 mm. Le rapport diamètre du tube sur le diamètre des particules de l'empilement N°6 est de $d_t/d_p = 6,67$, contre $d_t/d_p = 10$ pour l'empilement N°5. Les mêmes propriétés physiques sont utilisées pour les deux phases, sauf les coefficients d'échange de chaleur solide/fluide h^{sf} et aux parois h_B^{sf} qui, selon l'équation V.1, dépendent de la taille des particules. Les mêmes conditions aux limites sont appliquées pour les deux simulations.

Il était prévu de comparer l'empilement N°4, qui a des particules de 5 mm et un rapport diamètre du tube sur le diamètre des particules de $d_t/d_p = 20$, avec les empilements N°5 et N°6, mais l'empilement N°4 génère un nombre de nœuds et d'arêtes 9 et 8,9 fois plus grands que ceux de l'empilement N°5, respectivement. Ces nombres de nœuds et d'arêtes ont induit des dimensions de matrices d'incidences associées aux trois graphes représentant le lit discrétisé telles que les capacités de calcul et/ou les algorithmes utilisés n'ont pas été adaptés et non pas permis d'obtenir un résultat. Sachant que le produit du nombre de nœuds par celui des arêtes donne les dimensions d'une matrice d'incidence, les dimensions d'une matrice d'incidence issue de l'empilement N°4 sont pratiquement 80 fois plus grande que celles d'une matrice issue de l'empilement N°5.

Les résultats de la simulation N°6 ont été comparés à ceux de la simulation N°1. La figure V.19 montre les profils temporels de la température pour un nœud de la phase solide et un nœud de la phase fluide situés à $z = 28 \pm 2,5 mm$ et $r = 17 \pm 2,5 mm$ pour la simulation N°1 et en deux nœuds de phase différente se situant à des positions équivalentes dans l'empilement N°6 pour la simulation N°6.

Pour la zone transitoire ($t = 0s$ à $t \simeq 30000 s$), nous constatons que les températures des

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

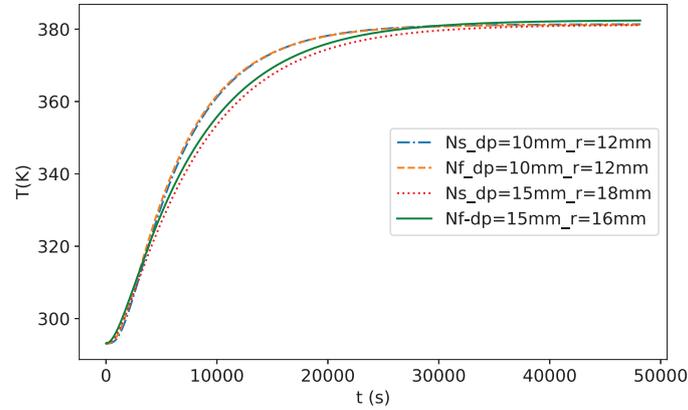


Figure V.19. Profils de températures de deux nœuds, un en phase solide et un en phase fluide, ($z = 28 \pm 2,5 \text{ mm}$) pour la simulations N°1 de l'empilement N°5 ($d_p = 10 \text{ mm}$) et la simulation N°6 de l'empilement N°6 ($d_p = 15 \text{ mm}$)

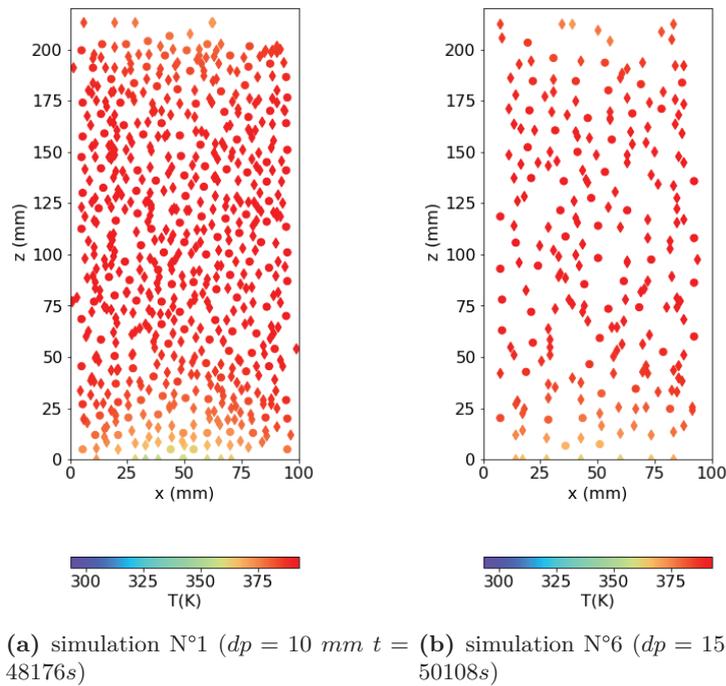


Figure V.20. Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour la simulations N°1 de l'empilement N°5 et la simulation N°6 de l'empilement N°6 à $t = 20080 \text{ s}$: ● pour le solide et ◇ pour le fluide

nœuds des deux phases pour la simulation N°1 sont supérieures de celles de la simulation N°6. Pour la zone stationnaire (à partir de $t = 30000s$), les courbes des températures des nœuds des deux phases de la simulation N°1 et la courbe des températures du nœud de la phase fluide de la simulation N°6 sont presque superposées, l'écart de température entre les deux nœuds de l'empilement N°1 à $t = 48176 s$ est $\delta T_{SF} = 0,036K$ et celui entre les nœuds de la phase fluide des deux simulations est $\delta T_{FF} = 0,032K$. La courbe des températures du nœud de la phase solide de la simulation N°6 est légèrement en dessous des autres courbes, soit un écart de température de $\delta T_{SF} = 1,19K$ par rapport à la courbe de température du nœud de la phase fluide de la simulation N°6.

Nous pouvons aussi voir sur la figure V.20 qui montre le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 mm$ pour les deux simulations à l'état stationnaire que la distribution de la température dans l'empilement N°6 est similaire à celle qui a été observée pour l'empilement N°5. L'effet de bord observé pour la simulation N°1 est également observable pour la simulation N°6. Cela implique que, pour cet empilement aussi, la structure de l'empilement affecte différemment la conduction de chaleur au niveau de ces deux extrémités. Autour de $t = 50000 s$ pour les deux empilements, pour les nœuds solides, la gamme de température est de $[362,2 K ; 392,8 K]$ pour la simulation N°1 et de $[367,6 K ; 392,7 K]$ pour la simulation N°6; pour les nœuds fluides, la gamme de température est de $[353,8 K ; 392,8 K]$ pour la simulation N°1 et de $[362,8 K ; 392,6 K]$ pour la simulation N°6. Ceci montre qu'en moyenne, les températures de la simulation N°6 avec les billes de $15 mm$ auraient des températures supérieures à celles de la simulation N°1 avec des billes de $10 mm$.

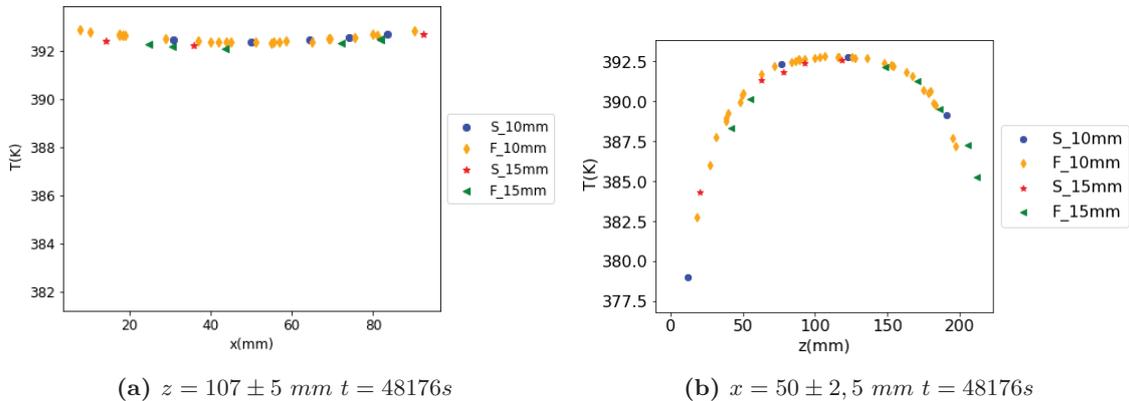


Figure V.21. Profils de températures en régime stationnaire pour les simulations N°1 et N°6 : (a) radial et (b) axial

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

Diamètre de particules	λ_{er}^{sf0}	Air	
		$\xi = 1$	$\xi = 0,01$
10 mm	Schlünder	0,2273	0,1752
	Kunii	0,2180	0,1737
15 mm	Schlünder	0,2517	0,1753
	Kunii	0,2399	0,1742

Tableau V.4. Conductivités thermiques effectives radiales du système fluide-solide avec le fluide au repos pour deux tailles de particules, deux émissivités du solide ($\xi = 1$ et $\xi = 0,01$) et deux nature du gaz (Air, CO_2) calculées par les corrélations de KUNII et SMITH [10] et ZEHNER et SCHLÜNDER [70]

Diamètre de particules	λ_{er}^{sf0}	Air		CO_2	
		$\xi = 1$	$\xi = 0,01$	$\xi = 1$	$\xi = 0,01$
10 mm	Schlünder [70]	0,2273	0,1752	0,1889	0,1337
	Kunii [10]	0,2180	0,1737	0,1785	0,1320
15 mm	Schlünder [70]	0,2517	0,1753	0,2148	0,1338
	Kunii [10]	0,2399	0,1742	0,2016	0,1324

Or, si on regarde les profils axiaux et radiaux de températures pour les simulations N°6 et N°1 (figure V.21), on constate que les profils sont identiques avec des températures très légèrement plus faibles pour les billes de 15 mm et que pour les billes de 10 mm (voir les sous-figures V.21a et V.21b qui montrent respectivement les profils radiaux de la température à $z = 107 \pm 5$ mm et les profils axiaux de la température à $r = 10 \pm 2,5$ mm ($x = 50 \pm 2,5$ mm) à l'état stationnaire autour de $t = 50080$ s pour les deux simulations). Ceci est contradictoire avec les observations de la figure V.20. Nous en avons donc conclu que, avec notre modèle, les températures n'étaient globalement pas différentes d'un empilement à l'autre et les profils de températures ne dépendaient pas de la taille de particules à cette échelle sans convection.

Il est connu dans la littérature que la conduction dans les empilements de billes est proportionnelle à la taille des billes ([18]). Pour vérifier cette allégation, nous avons calculé les conductivités thermiques effectives radiales d'un lit fixe λ_{er}^{sf0} (incluant les contributions des phases solide et fluide avec un fluide stagnant) pour les empilements N°5 et N°6 en utilisant les corrélations de KUNII et SMITH [10] et ZEHNER et SCHLÜNDER [70] (voir Tableau V.4). Nous remarquons qu'effectivement les conductivités thermiques augmentent avec la taille des particules pour les deux corrélations, mais seulement quand l'émissivité n'est pas nulle. Quand l'émissivité est très faible ou que le rayonnement n'a pas été pris en compte dans le modèle, les conductivités thermiques ne varient pas avec la taille de particules. C'est ce dernier comportement que nous observons. Dans la mesure où le rayonnement n'a pas été pris en compte dans notre modèle, cela montre qu'en régime stationnaire avec un fluide stagnant, notre modèle a

un comportement cohérent.

En régime transitoire, les profils de températures des simulations N°1 et N°6 montrent que les températures des nœuds choisis dans les deux phases (solide et fluide) suivent la même dynamique pour une même simulation. Par contre, les profils de températures diffèrent entre les deux simulations pour les nœuds d'une même phase (figure V.19). Aux temps courts ($0 < t < 1000$ s), les températures de nœuds présentent un retard plus court pour les billes de 15 mm que celles de 10 mm, mais une dynamique plus lente pour les billes de 15 mm que celles de 10 mm. Cela s'explique par la différence de volume des billes. Cette dernière induit des accumulations plus importantes pour les billes de 15 mm, d'où une dynamique plus lente. De plus, comme le modèle ne prend pas en compte les gradients de température à l'intérieur des nœuds, la vitesse de déplacement de la chaleur, induite par le changement des conditions limites, va être d'autant plus grande que les distances parcourues entre deux résistances sont grandes ; ce que nous observons avec les billes de 15 mm.

V.7 Ajout d'une puissance sur quelques billes dans le lit

Pour simuler les effets que pourraient avoir une réaction chimique hétérogène exothermique (uniquement localisée sur le solide) ou un chauffage inductif ne chauffant que quelques billes, nous avons ajouté un terme source au système d'équations III.47 (équation V.2), terme source P_{source} qui se caractérise par un vecteur dont la dimension est la somme du nombre de tous les nœuds des deux phases et des arêtes des trois graphes. Les éléments du vecteur sont nuls sauf pour quelques nœuds solides et éventuellement quelques nœuds fluides sur lesquels le terme de puissance est ajouté.

$$Y = \mathcal{J}X + \mathcal{J}_B X_B + P_{source} \quad (V.2)$$

avec

$$P_{source} = \left(P_{source}^s \quad P_{source}^f \quad 0^{n_{total \text{ arêtes}}} \right)^T \quad (V.3)$$

et

$$Y = \left(\frac{d}{dt}U^s \quad \frac{d}{dt}U^f \quad \mathcal{F}^s \quad \mathcal{F}_B^s \quad \mathcal{F}^f \quad \mathcal{F}_B^f \quad \mathcal{F}^{sf} \quad \mathcal{F}_G^s \quad \mathcal{F}_G^f \right)^T \quad (V.4)$$

Dans la simulation N°5, qui a été réalisée sur l'empilement N°5, les températures aux extrémités basse, haute et latérale sont maintenues égales aux températures initiales, soit à 293 K, pendant toute la simulation. Sinon, les mêmes paramètres que ceux de la simulation N°1 ont été utilisés. Une puissance source non nulle a été appliquée sur 21 nœuds de la phase solide, repartis sur toute la hauteur du lit à $r = 0 \pm 2,5$ mm pendant toute la simulation. La même puissance a été appliquée sur toutes les 21 billes. Pour la définir, nous avons calculé grossièrement l'énergie qu'a reçu le système pendant la simulation N°1 : soit l'énergie nécessaire pour augmenter la température de toutes les billes de 100 K et l'avons répartie sur les 21 billes sur 10000 s. Le système défini ainsi étant très raide, nous avons pondéré la puissance par le pas de temps de l'intégration pour avoir de faibles puissances quand les pas de temps petits. Cela revient à considérer un système avec des puissances variables dans le temps. Dans

Simulation de la conduction dans un lit fixe avec fluide stagnant

la suite, nous appellerons «points chauds», les 21 billes pour lesquelles le terme source est non nul.

Tableau V.5. Gamme de température des nœuds solides et fluides sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour les quatre temps de la figure V.22

Temps (s)	Température nœuds solides		Température nœuds fluides	
	T_{min}^s	T_{max}^s	T_{min}^f	T_{max}^f
200	293,1	393,3	293,1	333,9
800	293,2	510,2	293,2	379,4
1600	293,5	555,5	293,4	393,5
2360	294,5	572,7	295,2	415,8

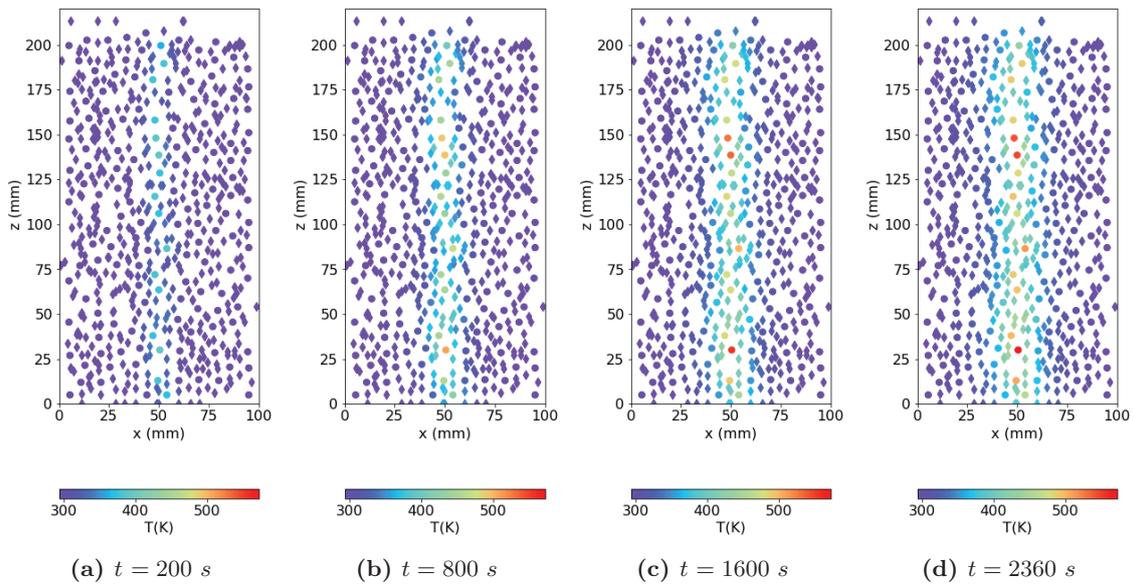


Figure V.22. Comparaison de la distribution globale de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour la simulation N°5 à différents temps : ● pour le solide et ◇ pour le fluide

La figure V.22 montre la comparaison de la distribution de la température sur le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ en quatre instants : $t = 200 \text{ s}$, $t = 800 \text{ s}$, $t = 1600 \text{ s}$ et $t = 2360 \text{ s}$. On observe que les températures augmentent progressivement dans la zone centrale proche de $r = 0 \text{ mm}$, c'est-à-dire dans la zone où se trouvent les points chauds, mais que de larges zones proches des extrémités restent froides. A $t = 2360 \text{ s}$, l'énergie apportée aux billes centrales n'a pas eu le temps de diffuser. Le tableau V.5 donne les plages de températures de tous les nœuds solides, y compris ceux qui ont un terme source, et des nœuds fluides. Les températures des points chauds à $t = 2360 \text{ s}$ sont comprises $431,3 \text{ K}$ et $572,7 \text{ K}$ alors que tous les points chauds reçoivent la même énergie. Cela signifie que leurs voisins jouent un rôle primordial dans leur

comportement. Cependant, leur comportement n'est pas prévisible en regardant simplement leurs voisins directs. En effet, pour les points chauds situés en $z = 138 \text{ mm}$ et $z = 148 \text{ mm}$, leur température est haute (autour de 550 K) par rapport aux autres points chauds. Mais, si le point N°6108 à $z = 138 \text{ mm}$ présente moins de voisins solides ou fluides qu'en moyenne pour les autres points chauds (4 voisins solides et 17 voisins fluides alors que la gamme pour les points chauds est de $[4 - 10]$ voisins solides et de $[13 - 21]$), son proche voisin N°6047, qui est aussi un point chaud à $z = 128 \text{ mm}$ et à 482 K , a 5 voisins solides et 16 voisins fluides. De même, le point chaud N°5414 à $z = 30 \text{ mm}$ et à 572 K a 6 voisins solides et 17 voisins fluides. Ces trois points chauds ont aussi la particularité d'être situés à un rayon $r = 3 \text{ mm}$. Donc, il sera difficile de dissocier le comportement de chaque nœud du comportement du système global dans la mesure où chaque nœud et arête est un élément constitutif des graphes.

V.8 Conclusion

Dans ce chapitre, le modèle basé sur le système pseudo-hamiltonien à port discret (Section III.3.4) a été mis en application pour simuler la conduction thermique dans les empilements numériques de particules sphériques générés et traités dans le Chapitre IV. L'empilement de particules de 10 mm a été pris comme empilement de référence, les capacités de calculs n'ayant pas été suffisantes pour simuler la conduction dans l'empilement avec les billes de 5 mm . Nous avons regardé les effets des paramètres géométriques et physiques, tels que les surfaces de contact solide-solide, le coefficient de transfert de chaleur fluide-solide, la diffusivité du fluide et l'effet du rapport du diamètre de tube sur le diamètre de particules. Des termes sources ont été ajoutés dans les équations différentielles d'ordre 1 pour simuler une réaction chimique hétérogène exothermique ou un chauffage inductif localisé.

Pour toutes les simulations, les propriétés physico-chimiques réelles des matériaux (phases) ont été utilisées sauf pour le coefficient d'échange de chaleur entre les billes et la phase fluide qui a été déterminé à partir d'une corrélation (équation V.1). Pour tous les empilements et toutes les simulations, nous avons retrouvé un comportement classique d'un système dynamique basé sur des graphes, avec des retards pour les nœuds loin des sources chaudes (paroi latérale). Il a également été observé une différence de comportement entre les deux extrémités qui a été attribué à une différence de structure de l'empilement à ces deux extrémités. De plus, les profils axiaux et radiaux se sont avérés avoir aussi des formes paraboliques, avec de très faibles écarts entre la température minimale et la température maximale pour les profils radiaux. Pour les profils axiaux proches des parois, il a été observé des plateaux avec les températures maximales dans la partie au centre de l'empilement où la distribution des billes est plus aléatoire qu'aux extrémités.

Quant aux effets des paramètres géométriques, nous en retenons que la diminution des surfaces de contact entre les billes allonge le régime transitoire, réduit le niveau des températures en régime stationnaire et diminue l'écart de température entre deux nœuds situés au même rayon et la même hauteur. Pour les paramètres physiques, ce sont l'effet du coefficient d'échange entre les billes et la phase fluide et l'effet de la diffusivité thermique qui ont été étudiés. La diminution du coefficient d'échange entre les billes et la phase fluide allonge le régime transitoire et augmente l'écart de température en deux nœuds de phases différentes

situés au même rayon et la même hauteur. La diminution de la diffusivité thermique engendre un faible allongement du régime transitoire. En régime stationnaire, une faible hausse des températures pour les nœuds des deux phases a été observé et une légère diminution de l'écart de températures entre deux nœuds de phases différentes situés au même rayon et la même hauteur.

L'effet du rapport du diamètre du lit sur la taille des particules d_t/d_p a été analysé sur deux tailles de particules seulement. Nous avons observé que plus les billes sont grosses, plus le retard au faible temps est plus court et plus la dynamique est lente. Par contre, à l'état stationnaire, il n'y a aucun effet du rapport d_t/d_p sur les températures de nœuds situés dans la même zone. Cela a été a priori surprenant, mais s'explique par la non prise en compte du rayonnement dans notre modèle.

Quant à l'ajout de termes sources dans les bilans d'énergie de nœuds solides, cela nous a permis de mettre en évidence l'anisotropie des empilements et l'importance de prendre en compte leur réelle structure.

Enfin, l'analyse de tous ces résultats montre à suffisance qu'ils sont physiquement cohérents et que le modèle est sensible à ses paramètres. En effet, la modification de chaque paramètre a eu un impact sur les résultats des simulations vers un changement physique attendu. Nous retenons donc notre modèle permet de simuler qualitativement la conduction thermique dans un empilement de particules sphériques dont le rapport du diamètre du lit sur le diamètre des particules est inférieure ou égale à 10 ($d_t/d_p \leq 10$).

Nous regrettons juste le fait que nous n'ayons pas pu simuler la conduction de la chaleur avec un rapport d_t/d_p plus grand ($d_p = 5mm$). De plus, il serait intéressant de comparer quantitativement ses résultats aux modèles de la littérature, puisque la plupart d'entre eux sont établis pour des empilements avec un rapport $d_t/d_p > 10$.

Chapitre VI

Conclusion générale et perspectives

L'objectif principal de cette thèse était de proposer une nouvelle méthode de modélisation des phénomènes de transport dans les milieux poreux granulaires (ex. lits fixes) qui serait un compromis entre les modèles de type procédés qui représentent les lits fixes comme des milieux pseudo-homogènes auxquels on associe une porosité (constante ou variable) et les modèles de types CFD qui représentent les lits fixes tels qu'ils sont, avec toute leur hétérogénéité, mais qui présentent des limites en terme taille de lit dû à la taille du maillage. L'état de l'art a permis de montrer que les modèles de types procédés s'appliquent très bien si le lit suffisamment grand ($d_t/d_p > 10$) et que l'on peut toujours trouver des corrélations qui permettent d'estimer correctement les paramètres effectifs associés au lit pseudo-continu. Mais dès que l'on a des lits de faible diamètre ($d_t/d_p < 10$), ces modèles sont moins efficaces, les corrélations qui conviennent deviennent rares. Pour les modèles de type CFD, il y a deux catégories : la première est similaire aux modèles de types procédés, mais le problème est abordé d'un point de vue mécanique des fluides. La deuxième catégorie est plus complexe, elle essaie prendre en considération tous (ou presque) les phénomènes qui se passent dans le lit de façon très détaillée. Sa mise en pratique nécessite de faire un maillage très complexe, d'où sa difficulté. En effet, les algorithmes utilisés pour construire les maillages ne sont pas adaptés aux géométries pointues comme les points de contact entre les particules par exemple. Malgré les palliatifs proposés dans la littérature, ces modèles ne peuvent être utilisés que pour des lits contenant une centaine de particules. Un troisième type de modèle est rencontré dans la littérature : il représente le lit comme un réseau de pores et/ou de particules et est utilisé pour déterminer les paramètres effectifs associés aux lits pseudo-continus.

Le modèle que nous avons proposé dans ce travail de recherche est basé sur deux notions clés : les systèmes hamiltoniens à port et la représentation par graphes. Les équations différentielles du second degré qui modélisent les bilans régissant les phénomènes de transport ont été transformées en équations différentielles du premier degré de façon structurée de manière à faire apparaître des gradients et des divergences. Elles sont ensuite regroupées sous forme d'un système pseudo-hamiltonien à port. Le système est dit pseudo-hamiltonien à port, car dans l'application de notre modèle à la conduction thermique, l'opérateur est certes antisymétrique, mais les variables utilisées ne sont pas thermodynamiquement conjuguées. L'avantage de ce type de système est que l'on peut directement utiliser les matrices d'incidences issues

Conclusion générale et perspectives

des graphes qui représentent le lit discrétisé et que cette formulation est très robuste lors de la résolution des équations différentielles.

L'empilement est discrétisé de façon structurée puis représenté par trois graphes : un graphe pour la phase solide, un graphe pour la phase fluide et un troisième graphe pour l'interconnexion entre les deux phases. Pour obtenir la discrétisation structurée du lit, la méthode utilisée est le traitement et analyse d'images en utilisant un logiciel dédié, en l'occurrence *iMorph*. Ce logiciel permet de détecter toutes les particules dans le lit et attribuer des nœuds avec des coordonnées dans le lit et des propriétés géométriques (volumes, surfaces de contact,...). Il permet également de discrétiser la phase fluide à l'aide des lois de Plateau et de générer des cellules discrètes auxquelles on associe également des nœuds et des propriétés géométriques. L'interconnexion de l'ensemble des nœuds associés aux particules constitue le graphe de solide, l'interconnexion des cellules discrètes de la phase fluide donne le graphe de fluide et l'interconnexion des nœuds de la phase solide avec ceux de la phase fluide donne le troisième graphe. Les images nécessaires pour le traitement *iMorph* peuvent être obtenues soit à partir d'un empilement réel tomographié, soit à partir d'un empilement numérique. Dans ce travail, ce sont les empilements numériques qui ont été le plus utilisés. Ils sont construits en utilisant la méthode éléments discrets (DEM, en anglais pour Discrete elements Method) à l'aide du logiciel *LIGGGHTS*®. Ils ont ensuite été traités afin d'obtenir les images 2D compatibles avec le logiciel *iMorph*. Pour vérifier la qualité de la détection des particules et des cellules fluides et la qualité des données liées aux propriétés géométriques, l'effet de la résolution des images a été étudié et a montré que la taille des voxels affecte particulièrement les surfaces de contact entre les particules solides et la surface spécifique dans le lit. Donc, pour tous les empilements générés, nous avons choisi de maintenir constant et égal à 20 le nombre de voxels par diamètre de particules.

La méthodologie de la modélisation se résume donc comme suit :

1. Construire un empilement réel tomographié ou un empilement numérique par DEM puis traité les données de manière à construire une pile d'images 2D ;
2. Traiter et analyser les images à l'aide d'un logiciel dédié pour reconstruire numériquement l'empilement et extraire les éléments discrets des deux phases, leurs propriétés géométriques et les informations de la structure du lit notamment les connexions entre les éléments nécessaires à la construction des graphes ;
3. Définir le système pseudo-hamiltonien à port sur la base des matrices d'incidences des graphes ;
4. Définir les propriétés physiques des matériaux (phases solide et fluide) et les conditions aux limites ;
5. Simuler un ou plusieurs phénomènes de transport dans un empilement de particules fixes.

Le modèle a été mis en application en simulant la conduction thermique sur deux empilements de particules sphériques avec des rapports d'aspect (d_t/d_p) de 6,67 et de 10. Six simulations ont été réalisées dont cinq avec l'empilement avec $d_t/d_p = 10$. Les particules ont été considérées en alumine et la phase fluide est soit de l'air, soit du dioxyde de carbone. L'objectif était de montrer que le modèle était sensible à toute modification de paramètres,

que ce soient les propriétés physiques, les propriétés géométriques ou les conditions au limites, et que les résultats soient physiquement cohérents à l'état stationnaire et en dynamique.

Ainsi, concernant le comportement général de tous les empilements, nous avons constaté que le modèle était capable de prendre en compte : (i) les hétérogénéités aux extrémités des empilements qui sont dues au remplissage des billes dans des cylindres à fond plat. (ii) les différences de températures entre les nœuds solides et les nœuds fluides voisins. (iii) les retards à la montée en température aux temps courts pour les nœuds éloignés des points chauds. (iv) l'anisotropie des empilements. Nous avons observé qu'à l'état stationnaire, les températures se stabilisent à des valeurs proches de celle à la paroi du lit, s'expliquant par le fait que la surface d'échange à la paroi du lit est 2 fois plus grande que la somme des surfaces des deux extrémités. Les profils axiaux et radiaux en régime stationnaire ont tous des formes paraboliques avec un faible écart entre les températures minimale et maximale pour les profils radiaux. Pour les profils axiaux, la température est constante et maximale dans les zones non impactées par les extrémités et est décroissante aux extrémités, due aux conditions limites.

Les paramètres qui ont été modifiés dans les différentes simulations sont : la surface de contact entre les billes, le coefficient d'échange de chaleur entre les billes et la phase fluide, la diffusivité thermique du fluide (en remplaçant l'air par du CO_2) et le rapport d'aspect d_t/d_p . Les résultats ont montré que le modèle était sensible à ces paramètres et qu'ils étaient physiquement cohérents. Les comportements observés sont tels que :

- Diminuer la surface de contact solide/solide favorise les échanges solide/fluide et ralentit la dynamique ;
- Diminuer le coefficient d'échange entre les billes et la phase fluide augmente l'écart de température en régime stationnaire entre deux nœuds de phases différentes situés à des positions équivalentes dans le lit et allonge la durée du régime stationnaire ;
- Diminuer la diffusivité thermique du fluide allonge aussi la durée du régime transitoire et augmente globalement les températures d'équilibre dans le lit en régime stationnaire, mais dans une moindre mesure.
- Réduire le rapport d'aspect retarde l'atteinte au régime stationnaire, mais une fois en régime stationnaire, deux nœuds situés à des positions équivalentes dans les lits ont les mêmes températures, ce comportement étant dû au fait que le rayonnement n'ait pas été considéré dans ce modèle.

L'ajout de termes sources dans le système pseudo-hamiltonien à port pour une vingtaine de nœuds solides (points chauds) a mis en lumière des différences de comportement important entre les points chauds alors que ni le nombre de voisins fluides ou solides, ni la hauteur dans le lit ne pouvaient justifier ces différences de températures observées au bout de 2000 s. Ceci a permis de montrer la sensibilité du modèle à l'anisotropie de l'empilement.

De nombreuses évolutions du modèle et des codes de calculs restent en perspectives. Concernant le modèle pseudo-hamiltonien à port proprement dit, nous n'avons traité ici que les bilans d'énergie et pris en compte uniquement la conduction. De nombreuses évolutions sont possibles : (i) modéliser la convection dans la phase fluide en traitant les bilans de quantité de mouvement et les bilans matières, (ii) modéliser les réactions catalytiques en prenant en compte les cinétique chimique dans les termes sources. Nous avons essayé de traiter ce

Conclusion générale et perspectives

premier point lors de ma thèse, mais la convection n'est pas simple à prendre en compte dans la mesure où la formulation de type hamiltonienne à port est très adaptée aux phénomènes diffusifs et pas à phénomènes convectifs.

D'un point de vue numérique, il serait intéressant d'optimiser le programme en utilisant des algorithmes plus adaptés aux grands systèmes pour que l'on puisse simuler les systèmes avec un plus grand nombre de nœuds, tels que l'empilement de billes de 5 mm. Ce modèle pourrait alors être comparé avec plus de confiance à un système hétérogène de type procédés de dimensions similaires en utilisant les corrélations de la littérature, même si cela va supposer des symétries qui, de toute façon, sont absentes des empilements que nous avons traités.

Concernant le traitement d'images, nous avons été confrontés à des difficultés dans l'utilisation du logiciel *iMorph*. *iMorph* est parfaitement adapté aux mousses à cellules ouvertes (car il a été développé pour cette application) mais il induit souvent des erreurs lors de la construction des graphes, même si l'empilement de billes peut être considéré comme le négatif des mousses. Les difficultés rencontrées nous conduisent à recommander que ce logiciel soit amélioré pour qu'il prenne en charge convenablement le traitement d'images issues d'empilements cylindriques de particules, surtout au niveau des frontières avec la paroi externe du lit et dans les surfaces d'interfaces. Nous pourrions nous demander ici s'il n'aurait pas été plus facile de développer nos propres codes qui prendraient en charge toute forme d'empilements (cylindriques, cubiques, coniques,...).

Enfin, valider notre modèle avec des expériences mettant en œuvre des réactions catalytiques dans des réacteurs fins ou du chauffage par induction serait l'idéal.

Bibliographie

- [1] GF FROMENT. « Analysis and design of fixed bed catalytic reactors ». In : ACS Publications, 1972.
- [2] VJ INGLEZAKIS, MM FYRILLAS et MA STYLIANOU. « Two-phase homogeneous diffusion model for the fixed bed sorption of heavy metals on natural zeolites ». In : *Microporous and Mesoporous Materials* 266 (2018), p. 164-176.
- [3] David SCHLERETH et Olaf HINRICHSSEN. « A fixed-bed reactor modeling study on the methanation of CO₂ ». In : *Chemical Engineering Research and Design* 92.4 (2014), p. 702-712.
- [4] Anthony G DIXON, M Ertan TASKIN, Michiel NIJEMEISLAND et E Hugh STITT. « CFD method to couple three-dimensional transport and reaction inside catalyst particles to the fixed bed flow field ». In : *Industrial & Engineering Chemistry Research* 49.19 (2010), p. 9012-9025.
- [5] Anthony G DIXON. « Local transport and reaction rates in a fixed bed reactor tube : Exothermic partial oxidation of ethylene ». In : *Chemical Engineering Science* 231 (2021), p. 116305.
- [6] Tobias M SCHEUERMANN, Paul KOTYCZKA, Marie-Line ZANOTA, Isabelle PITAULT, Haithem LOUATI et Bernhard MASCHKE. « Numerical approximation of heat transfer on heterogenous media ». In : *PAMM* 19.1 (2019), e201900372.
- [7] Haithem LOUATI, Tobias SCHEUERMANN, Bernhard MASCHKE, Marie-Line ZANOTA, Jérôme VICENTE, Paul KOTYCZKA et Isabelle PITAULT. « Network-Based Modeling of Transport Phenomena in Solid and Fluid Phases of Open-Cell Foams : Construction of Graphs ». In : *Advanced Engineering Materials* 22.5 (2020), p. 1901468.
- [8] Xuân-Mi TRUONG-MEYER. « Modélisation en génie des procédés ». In : *Techniques de l'ingénieur* (J1021 V1 10 juin 2009), p. 21. (Visité le 03/02/2020).
- [9] BD KULKARNI et LK DORAISWAMY. « Estimation of effective transport properties in packed bed reactors ». In : *Catalysis Reviews Science and Engineering* 22.3 (1980), p. 431-483.
- [10] Daizo KUNII et J. M. SMITH. « Heat transfer characteristics of porous rocks ». In : *AIChE Journal* 6.1 (mars 1960), p. 71-78. ISSN : 0001-1541, 1547-5905. DOI : [10.1002/aic.690060115](https://doi.org/10.1002/aic.690060115). URL : <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690060115> (visité le 25/11/2019).

BIBLIOGRAPHIE

- [11] Daizo KUNII et J. M. SMITH. « Heat transfer characteristics of porous rocks : II. Thermal conductivities of unconsolidated particles with flowing fluids ». In : *AIChE Journal* 7.1 (1^{er} mars 1961), p. 29-34. ISSN : 0001-1541. DOI : [10.1002/aic.690070109](https://doi.org/10.1002/aic.690070109). URL : <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690070109>.
- [12] R. BAUER et E. U. SCHLÜNDER. « Part I : Effective radial thermal conductivity of packings in gas flow. Part II : Thermal conductivity of the packing fraction without gas flow. » In : *International Chemical Engineering* 18 (1978), p. 89-204.
- [13] W. VAN ANTWERPEN, C. G. DU TOIT et P. G. ROUSSEAU. « A review of correlations to model the packing structure and effective thermal conductivity in packed beds of mono-sized spherical particles ». In : *Nuclear Engineering and Design* 240.7 (1^{er} juill. 2010), p. 1803-1818. ISSN : 0029-5493. DOI : [10.1016/j.nucengdes.2010.03.009](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2010.03.009). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002954931000155X> (visité le 25/11/2019).
- [14] W. VAN ANTWERPEN, P. G. ROUSSEAU et C. G. DU TOIT. « Multi-sphere Unit Cell model to calculate the effective thermal conductivity in packed pebble beds of mono-sized spheres ». In : *Nuclear Engineering and Design* 247 (1^{er} juin 2012), p. 183-201. ISSN : 0029-5493. DOI : [10.1016/j.nucengdes.2012.03.012](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2012.03.012). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029549312001446> (visité le 25/11/2019).
- [15] Philipp J DONAUBAUER, Leonhard SCHMALHORST et Olaf HINRICHSSEN. « 2D flow fields in fixed-bed reactor design : a robust methodology for continuum models ». In : *Chemical Engineering Science* 208 (2019), p. 115137.
- [16] Yi-Ning WANG, Yuan-Yuan XU, Yong-Wang LI, Yu-Long ZHAO et Bi-Jiang ZHANG. « Heterogeneous modeling for fixed-bed Fischer–Tropsch synthesis : Reactor model and its applications ». In : *Chemical Engineering Science* 58.3-6 (2003), p. 867-875.
- [17] Anthony G DIXON. « Local transport and reaction rates in a fixed bed reactor tube : Endothermic steam methane reforming ». In : *Chemical Engineering Science* 168 (2017), p. 156-177.
- [18] Daniel SCHWEICH. *Génie de la réaction chimique*. Editions Technique & Documentation, 2001.
- [19] Werner VAN ANTWERPEN, CG DU TOIT et Pieter G ROUSSEAU. « A review of correlations to model the packing structure and effective thermal conductivity in packed beds of mono-sized spherical particles ». In : *Nuclear Engineering and design* 240.7 (2010), p. 1803-1818.
- [20] Anthony G DIXON, Michiel NIJEMEISLAND et E Hugh STITT. « Packed tubular reactor modeling and catalyst design using computational fluid dynamics ». In : *Advances in Chemical Engineering* 31 (2006), p. 307-389.
- [21] Pierre TRAMBOUZE et Jean-Paul EUZEN. *Réacteurs chimiques (Les)*. Editions TECHNIP, 2002.

- [22] Luiz Mario de Matos JORGE, Regina Maria Matos JORGE et Reinaldo GIUDICI. « Experimental and numerical investigation of dynamic heat transfer parameters in packed bed ». In : *Heat and mass transfer* 46.11 (2010), p. 1355-1365.
- [23] Türküler ÖZGÜMÜŞ, Moghtada MOBEDI, Ünver ÖZKOL et Akira NAKAYAMA. « Thermal dispersion in porous media—a review on the experimental studies for packed beds ». In : *Applied Mechanics Reviews* 65.3 (2013).
- [24] Jian PENG, Bin YU, Shaowei YAN et Le XIE. « CFD Modeling and Simulation of the Axial Dispersion Characteristics of a Fixed-Bed Reactor ». In : *ACS omega* 7.30 (2022), p. 26455-26464.
- [25] M WINTERBERG, E TSOTSAS, A KRISCHKE et D VORTMEYER. « A simple and coherent set of coefficients for modelling of heat and mass transport with and without chemical reaction in tubes filled with spheres ». In : *Chemical Engineering Science* 55.5 (2000), p. 967-979.
- [26] Sabri ERGUN. « Mass-transfer rate in packed columns-its analogy to pressure loss ». In : *Chemical Engineering Progress* 48.5 (1952), p. 227-236.
- [27] D. HANDLEY et P. J. HEGGS. « Momentum and heat transfer mechanism in regular shaped packing ». In : *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 46 (1968), T251-T264.
- [28] J. A. TALLMADGE. « Packed bed pressure drop—an extension to higher Reynolds numbers ». In : *AIChE Journal* 16.6 (1970), p. 1092-1093.
- [29] D VORTMEYER et J SCHUSTER. « Evaluation of steady flow profiles in rectangular and circular packed beds by a variational method ». In : *Chemical Engineering Science* 38.10 (1983), p. 1691-1699.
- [30] JR SODRÉ et JAR PARISE. « Fluid flow pressure drop through an annular bed of spheres with wall effects ». In : *Experimental thermal and fluid science* 17.3 (1998), p. 265-275.
- [31] Arno DE KLERK. « Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio ». In : *AIChE Journal* 49.8 (1^{er} août 2003), p. 2022-2029. ISSN : 1547-5905. DOI : [10.1002/aic.690490812](https://doi.org/10.1002/aic.690490812). URL : <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aic.690490812> (visité le 25/11/2019).
- [32] Holger MARTIN. « Low pecllet number particle-to-fluid heat and mass transfer in packed beds ». In : *Chemical Engineering Science* 33.7 (1978), p. 913-919. ISSN : 00092509. DOI : [10.1016/0009-2509\(78\)85181-1](https://doi.org/10.1016/0009-2509(78)85181-1). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0009250978851811> (visité le 25/11/2019).
- [33] Gary E. MUELLER. « Radial void fraction distributions in randomly packed fixed beds of uniformly sized spheres in cylindrical containers ». In : *Powder Technology* 72.3 (nov. 1992), p. 269-275. ISSN : 00325910. DOI : [10.1016/0032-5910\(92\)80045-X](https://doi.org/10.1016/0032-5910(92)80045-X). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/003259109280045X> (visité le 19/12/2019).

BIBLIOGRAPHIE

- [34] Hugo A JAKOBSEN, Håvard LINDBORG et Vemund HANDELAND. « A numerical study of the interactions between viscous flow, transport and kinetics in fixed bed reactors ». In : *Computers & chemical engineering* 26.3 (2002), p. 333-357.
- [35] Anthony Basuni HAMZAH, Shinichi OOKAWARA, Shiro YOSHIKAWA et Hideyuki MATSUMOTO. « CFD modelling of mass and heat dispersion in sphere fixed bed with porosity-dependent segmented-continuum approaches ». In : *Chemical Engineering Research and Design* 141 (2019), p. 93-114.
- [36] Gary E. MUELLER. « Numerical simulation of packed beds with monosized spheres in cylindrical containers ». In : *Powder Technology* 92.2 (juill. 1997), p. 179-183. ISSN : 00325910. DOI : [10.1016/S0032-5910\(97\)03207-5](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(97)03207-5). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0032591097032075> (visité le 20/01/2020).
- [37] J. THEUERKAUF, P. WITT et D. SCHWESIG. « Analysis of particle porosity distribution in fixed beds using the discrete element method ». In : *Powder Technology* 165.2 (juill. 2006), p. 92-99. ISSN : 00325910. DOI : [10.1016/j.powtec.2006.03.022](https://doi.org/10.1016/j.powtec.2006.03.022). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0032591006001069> (visité le 20/01/2020).
- [38] Xingtuan YANG, Nan GUI, Jiyuan TU et Shengyao JIANG. « 3D DEM simulation and analysis of void fraction distribution in a pebble bed high temperature reactor ». In : *Nuclear Engineering and Design* 270 (2014), p. 404-411.
- [39] Vivek V RANADE. *Computational flow modeling for chemical reactor engineering*. T. 5. Academic press, 2002.
- [40] Brian Edward LAUNDER et Dudley Brian SPALDING. « The numerical computation of turbulent flows ». In : *Numerical prediction of flow, heat transfer, turbulence and combustion*. Elsevier, 1974, p. 96-116.
- [41] MICHEL NIJEMEISLAND et ANTHONY G. DIXON. « Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas–solid fixed bed ». In : *Chemical Engineering Journal* 82.1 (15 mars 2001), p. 231-246. ISSN : 1385-8947. DOI : [10.1016/S1385-8947\(00\)00360-0](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(00)00360-0). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894700003600> (visité le 25/11/2019).
- [42] HPA CALIS, JPBC NIJENHUIS, BC PAIKERT, FM DAUTZENBERG et CM VAN DEN BLEEK. « CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing ». In : *Chemical Engineering Science* 56.4 (2001), p. 1713-1720.
- [43] I THIAGALINGAM, M DALLET, I BENNACEUR, S CADALEN et Pierre SAGAUT. « Exact non local expression for the wall heat transfer coefficient in tubular catalytic reactors ». In : *International journal of heat and fluid flow* 54 (2015), p. 97-106.
- [44] Alfredo GUARDO, Miguel COUSSIRAT, M Angels LARRAYOZ, Francesc RECASENS et Eduard EGUSQUIZA. « CFD flow and heat transfer in nonregular packings for fixed bed equipment design ». In : *Industrial & Engineering Chemistry Research* 43.22 (2004), p. 7049-7056.

- [45] P MAGNICO. « Hydrodynamic and transport properties of packed beds in small tube-to-sphere diameter ratio : pore scale simulation using an Eulerian and a Lagrangian approach ». In : *Chemical engineering science* 58.22 (2003), p. 5005-5024.
- [46] Thomas ZEISER. « Analysis of the flow field and pressure drop in fixed-bed reactors with the help of lattice Boltzmann simulations ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 360.1792 (2002), p. 507-520.
- [47] Hannsjörg FREUND, Thomas ZEISER, Florian HUBER, Elias KLEMM, Gunther BRENNER, Franz DURST et Gerhard EMIG. « Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation ». In : *Chemical engineering science* 58.3-6 (2003), p. 903-910.
- [48] Jan TOBIŚ. « Influence of bed geometry on its frictional resistance under turbulent flow conditions ». In : *Chemical Engineering Science* 55.22 (2000), p. 5359-5366.
- [49] T EPPINGER, K SEIDLER et M KRAUME. « DEM-CFD simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios ». In : *Chemical Engineering Journal* 166.1 (2011), p. 324-331.
- [50] Mario CASCETTA, Giorgio CAU, Pierpaolo PUDDU et Fabio SERRA. « A comparison between CFD simulation and experimental investigation of a packed-bed thermal energy storage system ». In : *Applied Thermal Engineering* 98 (2016), p. 1263-1272.
- [51] L. H. S. ROBLEE, R. M. BAIRD et J. W. TIERNEY. « Radial porosity variations in packed beds ». In : *AIChE Journal* 4.4 (déc. 1958), p. 460-464. ISSN : 0001-1541, 1547-5905. DOI : [10.1002/aic.690040415](https://doi.org/10.1002/aic.690040415). URL : <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690040415> (visité le 20/01/2020).
- [52] J. S. GOODLING, R. I. VACHON, W. S. STELPFLUG, S. J. YING et M. S. KHADER. « Radial porosity distribution in cylindrical beds packed with spheres ». In : *Powder Technology* 35.1 (mai 1983), p. 23-29. ISSN : 00325910. DOI : [10.1016/0032-5910\(83\)85022-0](https://doi.org/10.1016/0032-5910(83)85022-0). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0032591083850220> (visité le 20/01/2020).
- [53] R. F. BENENATI et C. B. BROSILOW. « Void fraction distribution in beds of spheres ». In : *AIChE Journal* 8.3 (1^{er} juin 1962), p. 359-361. ISSN : 1547-5905. DOI : [10.1002/aic.690080319](https://doi.org/10.1002/aic.690080319). URL : <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aic.690080319> (visité le 25/11/2019).
- [54] K. RIDGWAY et K. J. TARBUCK. « Voidage fluctuations in randomly-packed beds of spheres adjacent to a containing wall ». In : *Chemical Engineering Science* 23.9 (sept. 1968), p. 1147-1155. ISSN : 00092509. DOI : [10.1016/0009-2509\(68\)87099-X](https://doi.org/10.1016/0009-2509(68)87099-X). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/000925096887099X> (visité le 15/01/2020).
- [55] A. J. SEDERMAN, P. ALEXANDER et L. F. GLADDEN. « Structure of packed beds probed by Magnetic Resonance Imaging ». In : *Powder Technology* 117.3 (juin 2001), p. 255-269. ISSN : 00325910. DOI : [10.1016/S0032-5910\(00\)00374-0](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(00)00374-0). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0032591000003740> (visité le 20/01/2020).

BIBLIOGRAPHIE

- [56] R. P. ZOU et A. B. YU. « The packing of spheres in a cylindrical container : the thickness effect ». In : *Chemical Engineering Science* 50.9 (mai 1995), p. 1504-1507. ISSN : 00092509. DOI : [10.1016/0009-2509\(94\)00483-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(94)00483-8). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0009250994004838> (visité le 20/01/2020).
- [57] C. G. DU TOIT. « Radial variation in porosity in annular packed beds ». In : *Nuclear Engineering and Design* 238.11 (1^{er} nov. 2008), p. 3073-3079. ISSN : 0029-5493. DOI : [10.1016/j.nucengdes.2007.12.018](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2007.12.018). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029549308001350> (visité le 25/11/2019).
- [58] M. L. HUNT et C. L. TIEN. « Non-Darcian flow, heat and mass transfer in catalytic packed-bed reactors ». In : *Chemical Engineering Science* 45.1 (1990), p. 55-63.
- [59] Charl DU TOIT, W. ANTWERPEN et P. ROUSSEAU. « Analysis of the porous structure of an annular pebble bed reactor ». In : *International Congress on Advances in Nuclear Power Plants 2009, ICAPP 2009* 1 (jan. 2009), p. 248-257.
- [60] Jao VAN DE LAGEMAAT, Kurt D BENKSTEIN et Arthur J FRANK. « Relation between particle coordination number and porosity in nanoparticle films : implications to dye-sensitized solar cells ». In : *The Journal of Physical Chemistry B* 105.50 (2001), p. 12433-12436.
- [61] JA DODDS. « The porosity and contact points in multicomponent random sphere packings calculated by a simple statistical geometric model ». In : *Journal of colloid and interface science* 77.2 (1980), p. 317-327.
- [62] H. T. AICHLMAYR et F. A. KULACKI. « The Effective Thermal Conductivity of Saturated Porous Media ». In : *Advances in Heat Transfer*. T. 39. Elsevier, 2006, p. 377-460. ISBN : 978-0-12-020039-9. DOI : [10.1016/S0065-2717\(06\)39004-1](https://doi.org/10.1016/S0065-2717(06)39004-1). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0065271706390041> (visité le 20/01/2020).
- [63] W. B. ARGO et J. M. SMITH. « Heat transfer in packed beds-prediction of radial rates in gas-solid beds ». In : *Chemical Engineering Progress* 49.8 (1953), p. 443-451.
- [64] Sakae YAGI, Daizo KUNII et Noriaki WAKAO. « Studies on axial effective thermal conductivities in packed beds ». In : *AIChE Journal* 6.4 (1961), p. 543-546.
- [65] Kenneth B. BISCHOFF. « Axial thermal conductivities in packed beds ». In : *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 40.4 (1962), p. 161-163.
- [66] Jaroslav VOTRUBA, Vladimír HLAVÁČEK et Miloš MAREK. « Packed bed axial thermal conductivity ». In : *Chemical Engineering Science* 27.10 (1972), p. 1845-1851.
- [67] D. VORTMEYER. « Axial heat dispersion in packed beds ». In : *Chemical Engineering Science* 30.8 (1975), p. 999-1001.
- [68] C. L. DE LIGNY. « Coupling between diffusion and convection in radial dispersion of matter by fluid flow through packed beds ». In : *Chemical Engineering Science* 25.7 (1970), p. 1177-1181.
- [69] Anthony G. DIXON et David L. CRESSWELL. « Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds ». In : *AIChE Journal* 25.4 (1979), p. 663-676.

- [70] P. ZEHNER et E. U. SCHLÜNDER. « Wärmeleitfähigkeit von Schüttungen bei mäßigen Temperaturen ». In : *Chemie Ingenieur Technik* 42.14 (1970), p. 933-941.
- [71] C. P. THURGOOD, J. C. AMPHLETT, R. F. MANN et B. A. PEPPLEY. « Radiative heat transfer in packed-beds : the near-wall region ». In : *Proceedings : AIChE Spring National Meeting*. 2004, p. 257-269.
- [72] S. YAGI et D. KUNII. « International developments in heat transfer ». In : *International Heat Transfer Conference*. 1961, p. 760-769.
- [73] A. P. DE WASCH et G. F. FROMENT. « Heat transfer in packed beds ». In : *Chemical Engineering Science* 27.3 (1972), p. 567-576.
- [74] V. SPECCHIA, G. BALDI et S. SICARDI. « Heat Transfer in Packed Bed Reactors with One Phase Flow ». In : *Chemical Engineering Communications* 4.1 (1^{er} jan. 1980), p. 361-380. ISSN : 0098-6445. DOI : [10.1080/00986448008935916](https://doi.org/10.1080/00986448008935916). URL : <https://doi.org/10.1080/00986448008935916>.
- [75] Friedrich-Wilhelm HENNECKE et Ernst Ulrich SCHLÜNDER. « Wärmeübergang in beheizten oder gekühlten Rohren mit Schüttungen aus Kugeln, Zylindern und Raschig-Ringen ». In : *Chemie Ingenieur Technik* 45.5 (1973), p. 277-284.
- [76] M. G. FREIWALD et W. R. PATERSON. « Accuracy of model predictions and reliability of experimental data for heat transfer in packed beds ». In : *Chemical engineering science* 47.7 (1992), p. 1545-1560.
- [77] G. F. FROMENT. « Fixed bed catalytic reactors—current design status ». In : *Industrial & Engineering Chemistry* 59.2 (1967), p. 18-27.
- [78] JMPQ DELGADO. « A critical review of dispersion in packed beds ». In : *Heat and mass transfer* 42.4 (2006), p. 279-310.
- [79] DJ GUNN. « Dispersion in packed beds ». In : *Trans. Inst. Chem. Engers.* 47 (1969), T-341.
- [80] E TSOTSAS et EU SCHLÜNDER. « On axial dispersion in packed beds with fluid flow : über die axiale dispersion in durchströmten festbetten ». In : *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification* 24.1 (1988), p. 15-31.
- [81] Chin-Yung WEN, Liang-tseng FAN et al. *Models for flow systems and chemical reactors*. M. Dekker, 1975.
- [82] Faical LARACHI, Rachid HANNAOUI, Pierre HORGUE, Frédéric AUGIER, Yacine HAROUN, Souhail YOUSSEF, Elisabeth ROSENBERG, Marc PRAT et Michel QUINTARD. « X-ray micro-tomography and pore network modeling of single-phase fixed-bed reactors ». In : *Chemical Engineering Journal* 240 (2014), p. 290-306.
- [83] LW RONG, KJ DONG et AB YU. « Lattice-Boltzmann computation of hydraulic pore-to-pore conductance in packed beds of uniform spheres ». In : *Chemical Engineering Science* 224 (2020), p. 115798.
- [84] Wenbin FEI, Guillermo A NARSILIO, Joost H van der LINDEN et Mahdi M DISFANI. « Network analysis of heat transfer in sphere packings ». In : *Powder Technology* 362 (2020), p. 790-804.

BIBLIOGRAPHIE

- [85] Wenbin FEI, Qirui MA, Kenichi SOGA et Guillermo A NARSILIO. « A graph-theory based directed network feature for thermal anisotropy ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 194 (2022), p. 122987.
- [86] Tobias M. SCHEUERMANN, Paul KOTYCZKA, Christian MARTENS, Haithem LOUATI, Bernhard MASCHKE, Marie-Line ZANOTA et Isabelle PITAULT. « An Object-Oriented Library for Heat Transfer Modelling and Simulation in Open Cell Foams. » In : *IFAC-PapersOnLine* 53.2 (2020). 21st IFAC World Congress, p. 7575-7580. ISSN : 2405-8963. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2020.12.1354>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2405896320317602>.
- [87] B.M. MASCHKE et A.J. VAN DER SCHAFT. « Port-controlled Hamiltonian Systems : Modelling Origins and System-theoretic Properties ». In : *Nonlinear Control Systems Design 1992*. Sous la dir. de M. FLIESS. IFAC Symposia Series. Oxford : Pergamon, 1993, p. 359-365. ISBN : 978-0-08-041901-5. DOI : <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-041901-5.50064-6>.
- [88] A.J. van der SCHAFT et B.M. MASCHKE. « The Hamiltonian Formulation of Energy Conserving Physical Systems with External Ports ». In : *Archiv für Elektronik und Übertragungstechnik* 49.5/6 (1995), p. 362-371.
- [89] A. van der SCHAFT, B. MASCHKE et R.É ORTEGA. « Network modelling of physical systems : a geometric approach ». In : *Advances in the control of nonlinear systems*. Sous la dir. d'A. BAÑOS et F. J. LAMNABHI-LAGARRIGUE F.and Montoya. London : Springer London, 2001, p. 253-276. ISBN : 978-1-84628-570-7.
- [90] V. DUINDAM, A. MACCHELLI, S. STRAMIGIOLI et H. eds. BRUYNINCKX. *Modeling and Control of Complex Physical Systems - The Port-Hamiltonian Approach*. ISBN 978-3-642-03195-3. Springer, sept. 2009.
- [91] A. van der SCHAFT et D. JELTSEMA. « Port-Hamiltonian Systems Theory : An Introductory Overview ». In : *Foundations and Trends in Systems and Control* 1.2-3 (2014), p. 173-378. ISSN : 2325-6818. DOI : [10.1561/2600000002](https://doi.org/10.1561/2600000002). URL : <http://dx.doi.org/10.1561/2600000002>.
- [92] H. HOANG, F. COUENNE, C. JALLUT et Y. Le GORREC. « The port Hamiltonian approach to modeling and control of Continuous Stirred Tank Reactors ». In : *Journal of Process Control* 21.10 (2011). <ce :title>Special Issue :Selected Papers From Two Joint IFAC Conferences : 9th International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems and the 11th International Symposium on Computer Applications in Biotechnology, Leuven, Belgium, July 5-9, 2010.</ce :title>, p. 1449-1458. ISSN : 0959-1524. DOI : [10.1016/j.jprocont.2011.06.014](https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2011.06.014). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959152411001247>.
- [93] H. HOANG, F. COUENNE, C. JALLUT et Y. Le GORREC. « Lyapunov-based control of non isothermal continuous stirred tank reactors using irreversible thermodynamics ». In : *Journal of Process Control* 0 (2012). ISSN : 0959-1524. DOI : [10.1016/j.jprocont.2011.12.007](https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2011.12.007). URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959152411002447>.

- [94] D.T. TEFERA, S. DUBLJEVIC et V. PRASAD. « A Port Hamiltonian approach to dynamical chemical process systems network modeling and analysis ». In : *Chemical Engineering Science* 261 (2022), p. 117907. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2022.117907>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250922004912>.
- [95] A. BAAIU, F. COUENNE, D. EBERARD, C. JALLUT, Y. LE GORREC, L. LEFÈVRE et M. TAYAKOUT-FAYOLLE. « Port-based modelling of mass transfer phenomena ». In : *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems* 15.3 (2009), p. 233-254.
- [96] A. BAAIU, F. COUENNE, L. LEFÈVRE, Y. LE GORREC et M. TAYAKOUT-FAYOLLE. « Structure-preserving infinite dimensional model reduction : Application to adsorption processes ». In : *Journal of Process Control* 19 (2009), p. 394-404.
- [97] C. JALLUT, F. COUENNE et B. MASCHKE. « Representation and Modelling of Processes ». In : *Green Process Engineering : From Concepts to Industrial Applications* (2015), p. 49-71.
- [98] A.J. van der SCHAFT et B.M. MASCHKE. « Hamiltonian formulation of distributed parameter systems with boundary energy flow ». In : *J. of Geometry and Physics* 42 (2002), p. 166-174.
- [99] F. RASHAD R.and Califano, A. van der SCHAFT et S. STRAMIGIOLI. « Twenty years of distributed port-Hamiltonian systems : a literature review ». In : *IMA Journal of Mathematical Control and Information* (juill. 2020). dnaa018. ISSN : 1471-6887. DOI : [10.1093/imamci/dnaa018](https://doi.org/10.1093/imamci/dnaa018). eprint : <https://academic.oup.com/imamci/advance-article-pdf/doi/10.1093/imamci/dnaa018/33537885/dnaa018.pdf>. URL : <https://doi.org/10.1093/imamci/dnaa018>.
- [100] P. KOTYCZKA et B. MASCHKE. « Discrete Port-Hamiltonian formulation and numerical approximation for systems of two conservation laws ». In : *at - Automatisierungstechnik* 65.5 (2017), p. 308-322. DOI : [10.1515/auto-2016-0098](https://doi.org/10.1515/auto-2016-0098).
- [101] T.J. COURANT et A. WEINSTEIN. « Beyond Poisson structures ». In : *Séminaire Sud-Rhodanien de Géométrie*. T. 8. Travaux en cours 27. Paris : Hermann, 1988.
- [102] V.I. ARNOLD. *Méthodes Mathématiques de la Mécanique Classique*. Moscou : Editions Mir, 1976.
- [103] J. KURULA, M. KURULA et H. ZWART. *The duality between the gradient and divergence operators on bounded Lipschitz domains*. Memorandum 1994. Department of Applied Mathematics, University of Twente, oct. 2012.
- [104] M. KURULA et H. ZWART. « Linear wave systems on n-D spatial domains ». In : *International Journal of Control* 88.5 (2015), p. 1063-1077. DOI : [10.1080/00207179.2014.993337](https://doi.org/10.1080/00207179.2014.993337). eprint : <https://doi.org/10.1080/00207179.2014.993337>.
- [105] Vivette GIRAULT et Pierre-Arnaud RAVIART. *Finite element methods for Navier-Stokes equations : theory and algorithms*. T. 5. Springer Science & Business Media, 2012.
- [106] Y. CHOQUET-BRUHAT et C. DE WITT-MORETTE. *Analysis Manifolds and Physics*. Revised. North-Holland Publ. Co., 1982.

BIBLIOGRAPHIE

- [107] V.I. ARNOLD. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. II. ISBN 0-387-96890-3. Springer, 1989.
- [108] T. FRANKEL. *The Geometry of Physics*. 2nd. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 2004.
- [109] A. MACCHELLI, C. MELCHIORRI et S. STRAMIGIOLI. « Port-based modelling and simulation of mechanical systems with rigid and flexible links ». In : *IEEE Trans. on Robotics* 25.5 (2009), p. 1016-1029.
- [110] A. MACCHELLI et C. MELCHIORRI. « Modeling and Control of the Timoshenko Beam. The Distributed Port Hamiltonian Approach ». In : *SIAM Journal On Control and Optimization* 43.2 (2004), p. 743-767.
- [111] H. HAMROUN, L. LEFÈVRE et E. MENDES. « Port-Based modelling for open channel irrigation systems ». In : *Transactions on Fluid Mechanics* 1.12 (2006), p. 995-1009.
- [112] M. POLNER et J.J.W. van der VEGT. « A Hamiltonian vorticity–dilatation formulation of the compressible Euler equations ». In : *Nonlinear Analysis : Theory, Methods & Applications* 109 (2014), p. 113-135. ISSN : 0362-546X. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.na.2014.07.005>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0362546X14002235>.
- [113] Luis A. MORA, Yann LE GORREC, Denis MATIGNON, Hector RAMIREZ et Juan I. YUZ. « On port-Hamiltonian formulations of 3-dimensional compressible Newtonian fluids ». In : *Physics of Fluids* 33.11 (2021), p. 117117. DOI : [10.1063/5.0067784](https://doi.org/10.1063/5.0067784). eprint : <https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/5.0067784>. URL : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/5.0067784>.
- [114] A. BAAIU, F. COUENNE, D. EBERARD, C. JALLUT, Y. LEGORREC, L. LEFÈVRE et B. MASCHKE. « Port-based modelling of mass transport phenomena ». In : *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems* 15.3 (2009), 233-254. ISSN : 1387-3954. DOI : [10.1080/13873950902808578](https://doi.org/10.1080/13873950902808578).
- [115] I. PRIGOGINE. *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes*. John Wiley et Sons, 1962.
- [116] B.M. MASCHKE, A.J. van der SCHAFT et P.C. BREEDVELD. « An intrinsic Hamiltonian formulation of the dynamics of LC-circuits ». In : *IEEE Trans. Circuit and Systems I :Fundamental Theory and Applications* 42.2 (fév. 1995), p. 73-82.
- [117] H. GERNANDT, F.E. HALLER, T. REIS et A.J. van der SCHAFT. « Port-Hamiltonian formulation of nonlinear electrical circuits ». In : *Journal of Geometry and Physics* 159 (2021), p. 103959. ISSN : 0393-0440. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.geomphys.2020.103959>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0393044020302321>.
- [118] W. RESPONDEK et S. RICARDO. « Equivariants of Mechanical Control Systems ». In : *SIAM Journal on Control and Optimization* 51.4 (2013), p. 3027-3055. DOI : [10.1137/11086104X](https://doi.org/10.1137/11086104X).

- [119] Arjan VAN DER SCHAFT. « Modeling of physical network systems ». In : *Systems & Control Letters* 101 (2017). Jan C. Willems Memorial Issue, Volume 2, p. 21-27. ISSN : 0167-6911. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.sysconle.2015.08.013>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167691115001814>.
- [120] A. van der SCHAFT et B. MASCHKE. « Port-Hamiltonian Systems on Graphs ». In : *SIAM Journal on Control and Optimization* 51.2 (2013), p. 906-937. DOI : [10.1137/110840091](https://doi.org/10.1137/110840091).
- [121] G. NISHIDA, B. MASCHKE et R. IKEURA. « Boundary Integrability of Multiple Stokes–Dirac Structures ». In : *SIAM Journal on Control and Optimization* 53.2 (2015), p. 800-815.
- [122] Gou NISHIDA, Kenji FUJIMOTO et Daiji ICHISHIMA. « Scalable Reduction of Elastic Continuum for Boundary Energy Control ». In : *SIAM Journal on Control and Optimization* 53.4 (2015), p. 2424-2448. DOI : [10.1137/11084529X](https://doi.org/10.1137/11084529X).
- [123] A.J. van der SCHAFT et B. MASCHKE. « Model Based Control : bridging rigorous theory and advanced technology ». In : eds. P.M.J. Van den Hof, C. Scherer and P.S.C. Heuberger. Dordrecht : Springer, 2009. Chap. Conservation laws and lumped system dynamics, p. 31-48.
- [124] Marko SESLIJA, Jacquélien MA SCHERPEN et Arjan VAN DER SCHAFT. « Explicit simplicial discretization of distributed-parameter port-Hamiltonian systems ». In : *Automatica* 50.2 (2014), p. 369-377.
- [125] Marko SESLIJA, Arjan van der SCHAFT et Jacquélien SCHERPEN. « Discrete exterior geometry approach to structure-preserving discretization of distributed-parameter port-Hamiltonian systems ». In : *Journal of Geometry and Physics* 62.6 (2012), p. 1509-1531.
- [126] P. KOTYCZKA, B. MASCHKE et L. LEFÈVRE. « Weak Form of Stokes-Dirac Structures and Geometric Discretization of Port-Hamiltonian Systems ». In : *ArXiv e-prints* (juin 2017). arXiv : [1706.06156](https://arxiv.org/abs/1706.06156) [[math.DS](https://arxiv.org/abs/1706.06156)].
- [127] Marko SESLIJA, Arjan VAN DER SCHAFT et Jacquélien MA SCHERPEN. « Hamiltonian perspective on compartmental reaction–diffusion networks ». In : *Automatica* 50.3 (2014), p. 737-746.
- [128] AJ VAN DER SCHAFT et BM MASCHKE. « Conservation laws and open systems on higher-dimensional networks ». In : *2008 47th IEEE Conference on Decision and Control*. IEEE. 2008, p. 799-804.
- [129] A. BOSSAVIT. *Computational Electromagnetism*. Academic Press, 1998.
- [130] Anil N HIRANI. « Discrete exterior calculus ». Thèse de doct. California Institute of Technology, 2003.
- [131] Douglas N ARNOLD, Richard S FALK et Ragnar WINTHER. « Finite element exterior calculus, homological techniques, and applications ». In : *Acta numerica* 15.1 (2006), p. 1-155.

BIBLIOGRAPHIE

- [132] R. ALTMANN et P. SCHULZE. « A port-Hamiltonian formulation of the Navier-Stokes equations for reactive flows ». In : *Systems and Control Letters* 100 (2017), p. 51-55. ISSN : 0167-6911. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.sysconle.2016.12.005>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167691116301980>.
- [133] Hua BAI, Jörg THEUERKAUF, Paul A GILLIS et Paul M WITT. « A coupled DEM and CFD simulation of flow field and pressure drop in fixed bed reactor with randomly packed catalyst particles ». In : *Industrial & Engineering Chemistry Research* 48.8 (2009), p. 4060-4074.
- [134] Ferdaous DORAI. « Étude numérique des chargements et de l'hydrodynamique dans des réacteurs pilotes à lits fixes ». Thèse de doct. 2015.
- [135] F BERTRAND, L-A LECLAIRE et G LEVECQUE. « DEM-based models for the mixing of granular materials ». In : *Chemical Engineering Science* 60.8-9 (2005), p. 2517-2531.
- [136] Peter A CUNDALL et Otto DL STRACK. « A discrete numerical model for granular assemblies ». In : *geotechnique* 29.1 (1979), p. 47-65.
- [137] B GOKUL et Dhiraj V PATIL. « DEM Simulation of Finite Size Particle Impact on a Loose Granular Bed ». In : *Fluid Mechanics and Fluid Power : Proceedings of FMFP 2019*. Springer. 2021, p. 613-619.
- [138] Hongxiang TANG, Rui SONG, Yan DONG et Xiaoyu SONG. « Measurement of Restitution and Friction Coefficients for Granular Particles and Discrete Element Simulation for the Tests of Glass Beads ». In : *Materials* 12.19 (sept. 2019), p. 3170. DOI : [10.3390/ma12193170](https://doi.org/10.3390/ma12193170).
- [139] Arno DE KLERK. « Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio ». In : *AIChE journal* 49.8 (2003), p. 2022-2029.
- [140] WO SMITH, Paul D FOOTE et PF BUSANG. « Packing of homogeneous spheres ». In : *Physical Review* 34.9 (1929), p. 1271.
- [141] JF DELERUE, Edith PERRIER, ZY YU et B VELDE. « New algorithms in 3D image analysis and their application to the measurement of a spatialized pore size distribution in soils ». In : *Physics and Chemistry of the Earth, Part A : Solid Earth and Geodesy* 24.7 (1999), p. 639-644.
- [142] Fernand MEYER. « Un algorithme optimal de ligne de partage des eaux ». In : *Actes du 2* (1991), p. 847-859.
- [143] Joseph Antoine Ferdinand PLATEAU. *Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires*. T. 2. Gauthier-Villars, 1873.
- [144] Enzo TONTI. « A Direct Discrete Formulation of Field Laws : The Cell Method ». In : *Computer Modeling in Engineering & Sciences* 2.2 (2001), p. 237-258. ISSN : 1526-1506. DOI : [10.3970/cmcs.2001.002.237](https://doi.org/10.3970/cmcs.2001.002.237). URL : <http://www.techscience.com/CMES/v2n2/24731>.

Annexe A

Paramètres et résultats des calculs de traitement d'images

A.1 Effet de la taille des voxels

Pour évaluer l'effet de la taille des voxels sur les résultats des calculs de traitement d'images issus du logiciel iMorph, un empilement de diamètre 10cm et de hauteur 20cm a été utilisé. Il est constitué de 502 particules sphériques de 15mm de diamètre. Les calculs ont été effectués pour cinq tailles de voxels : $150\mu\text{m}$, $250\mu\text{m}$, $300\mu\text{m}$, $500\mu\text{m}$ et $750\mu\text{m}$. Les images des empilements ont été gérées par un code écrit sous Matlab avec la fonction *strel* qui utilise la position des centres des billes, issues des calculs réalisés sous Liggths. Les mêmes paramètres iMorph ont été utilisés pour chaque taille de voxel, à l'exception de la «clean distance» qui a été adaptée à chaque taille de voxel (tableau A.1). La «clean distance» est un paramètre qui

Tableau A.1. Paramètres de traitement d'images entrés dans iMorph pour l'étude de la résolution des images

Taille de voxel		$750\mu\text{m}$	$500\mu\text{m}$	$300\mu\text{m}$	$250\mu\text{m}$	$150\mu\text{m}$
Distance Map	Methods	Exact distance from voxels faces and Edges				
Granulometry	Granulometry grid	0,5				
	Maximal ball histogram	<input checked="" type="checkbox"/>				
	Maximal overlapping rate	35				
	Minimal maximal ball radius	0,6				
Surface meshing	<input checked="" type="checkbox"/>					
Watershed balls	Minimal radius	3				
	Maximal overlapping rate for a maximal ball	35				
	use Balls at Faces	<input checked="" type="checkbox"/>				
Network	Segmentation images	Water _ balls.bin				
	Center to center graph	<input checked="" type="checkbox"/>				
	Extend graph to borders	<input checked="" type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/> <input checked="" type="checkbox"/>				
	Plateau graph	<input checked="" type="checkbox"/>				
	Clean distance	4	6	10	12	20
	Cells extraction from plateau nodes	<input checked="" type="checkbox"/>				
	Compute throats	<input checked="" type="checkbox"/>				
	Node throats	<input checked="" type="checkbox"/>				

Paramètres et résultats des calculs de traitement d'images

permet de réguler à la hausse ou à la baisse le nombre ou la taille des cellules fluides. C'est la distance minimale entre deux cellules fluides. Ici, nous avons choisi qu'elle soit environ égale à 1/5 du diamètre d'une bille en voxel. Les résultats pour chaque phase sont synthétisés un tableau (tableau A.2 pour la phase solide et tableau A.3 pour la phase fluide).

Tableau A.2. Données issues des calculs de traitement d'images (iMorph) pour la phase solide

Taille de voxel	750 μm	500 μm	300 μm	250 μm	150 μm
Nombre total de nœuds solides	537	537	537	537	537
Nombre de nœuds solides internes (inner)	266	266	266	266	266
Nombre de nœuds solides de bord (border)	236	236	236	236	236
Nombre de nœuds solides aux bords (Border ou Ghost)	35	35	35	35	35
Nombre de billes voisines	6,67	6,32	5,97	5,84	5,60
Volume moyen des billes en nombre de voxel	4165	14138	65259	113062	523270
Surface moyenne de contact entre billes en nombre de voxel	13,8	22,6	36,8	47,7	82,2

Tableau A.3. Données issues des calculs de traitement d'images (iMorph) pour la phase fluide (Plateau de la phase fluide).

Taille de voxel	750 μm	500 μm	300 μm	250 μm	150 μm
Nombre total de nœuds fluides	1601	1575	1545	1567	1450
Nombre de nœuds fluides internes	1422	1387	1357	1380	1371
Nombre de nœuds fluides de bord (inner)	83	83	84	86	79
Nombre de nœuds fluides aux bords (border)	96	105	104	101	-
Nombre de cellules fluides voisines (Border ou Ghost)	9,13	9,08	9,31	9,26	
Nombre de billes voisines par cellule fluide	4,29	4,32	4,33	4,32	4,33
Volume moyen des cellules fluides en nombre de voxel	1115	3735	17871	29911	139239
Surface moyenne de contact entre cellules fluides en nombre de voxel	25,4	24,6	24,4	23,8	23,4

A.2 Effet du rapport dt/dp

Les paramètres utilisés dans *iMorph* lors de construction des empilements n° 4, n°5 et n°6 sont regroupés dans le tableau A.4. Ce sont exactement les mêmes paramètres qui ont été utilisés y compris la «clean distance». Ce dernier paramètre n'a pas été modifié mais la taille de voxel change d'un empilement à l'autre, car pour les trois empilements le nombre voxel par diamètre de particules est le même, soit 20. Les résultats tels que sortis d'imorph sont regroupés dans les tableaux A.5 et A.6 respectivement pour la phase solide et la phase fluide.

Paramètres et résultats des calculs de traitement d'images

Tableau A.4. Paramètres de traitement d'images entrés dans iMorph pour l'étude de l'effet de d_t/d_p

Empilements n°		4	5	6
Taille de voxel (μm)		750	500	300
Distance Map	Methods	Exact distance from voxels faces and Edges		
Granulometry	Granulometry grid	0,5		
	Maximal ball histogram	☑		
	Maximal overlapping rate	35		
	Minimal maximal ball radius	0,6		
Surface meshing		☑		
Watershed balls	Minimal radius	3		
	Maximal overlapping rate for a maximal ball	35		
	use Balls at Faces	☑		
Network	Segmentation images	Water _ balls.bin		
	Center to center graph	☑		
	Extend graph to borders	☑☑☑		
	Plateau graph	☑		
	Clean distance	4	4	4
	Cells extraction from plateau nodes	☑		
	Compute throats	☑		
	Node throats	☑		

Tableau A.5. Données issues des calculs de traitement d'images (iMorph) pour les phases solides des trois empilements

Empilements n°	4	5	6
Taille de voxel (μm)	250	500	750
Nombre total de nœuds solides	15988	1974	576
Nombre de nœuds solides internes (inner)	12991	1285	286
Nombre de nœuds solides de bord (border)	2678	614	253
Nombre de nœuds solides aux bords (Border ou Ghost)	319	75	37
Nombre de billes voisines	7,77	7,24	6,66
Volume moyen des billes en nombre de voxel	4081,3	4163,8	3897,7
Surface moyenne de contact entre billes en nombre de voxel	14,2	14,5	14

Paramètres et résultats des calculs de traitement d'images

Tableau A.6. Données issues des calculs de traitement d'images (iMorph) pour les phases fluides des trois empilements

Empilements n°	4	5	6
Taille de voxel (μm)	250	500	750
Nombre total de nœuds fluides	59546	6702	1713
Nombre de nœuds fluides internes (inner)	57795	6236	1539
Nombre de nœuds fluides de bord (border)	795	209	80
Nombre de nœuds fluides aux bords (Border ou Ghost)	956	257	94
Nombre de cellules fluides voisines	8,67	8,93	9,15
Volume moyen des cellules fluides en nombre de voxel	720,5	852,3	3616
Surface moyenne de contact entre cellules fluides en nombre de voxel	34,9	38,24	44,1

Annexe B

Profils radiaux et axiaux de températures en régime stationnaire

La figure B.1 montre les profils radiaux dans le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ en quatre hauteurs ($z = 25 \pm 2,5 \text{ mm}$, $z = 75 \pm 2,5 \text{ mm}$, $z = 138 \pm 2,5 \text{ mm}$ et $z = 188 \pm 2,5 \text{ mm}$) dans lit. Les quatre profils sont tracés en régime stationnaire à $t = 20086s$, pour la simulation n°1, à distance égales deux à deux par rapport aux extrémités, c'est-à-dire que les courbes tracées dans les sous-figures B.1a et B.1d sont situées à 25 mm des extrémités de part et d'autre du lit de même les courbes tracées dans les sous-figures B.1b et B.1c sont à 75 mm des deux extrémités.

Nous voyons dans ces quatre sous-figures que les profils ont une forme parabolique mais que l'écart entre les températures minimale et maximale pour chaque cas dépend de la hauteur dans le lit. Cet écart se réduit lorsqu'on éloigne des extrémités suivant la hauteur, mais cela est plus accentué dans la moitié inférieur du lit relativement à l'autre moitié. Nous observons aussi que pour une position donnée suivant x , l'écart maximale de température est plus grande au niveau des extrémités.

Les courbes de quatre profils axiaux sont tracées dans la figure B.2. Ces profils sont tracés dans le plan xz à $y = 50 \pm 2,5 \text{ mm}$ pour quatre valeurs de x ($x = 10 \pm 2,5 \text{ mm}$, $x = 30 \pm 2,5 \text{ mm}$, $x = 70 \pm 2,5 \text{ mm}$ et $x = 90 \pm 2,5 \text{ mm}$) en régime stationnaire ($t = 20086s$) pour la simulation n°1. Nous voyons que ces profils axiaux ont une forme en créneau, c'est-à-dire que l'on a une faible variation de la température sur une large bande suivant z au milieu du lit et une variation relativement plus forte au niveau des extrémités. Mais la largeur du plateau des courbes diminue lorsqu'on éloigne de la paroi et elles tendent vers une forme parabolique.

Profils radiaux et axiaux de températures en régime stationnaire

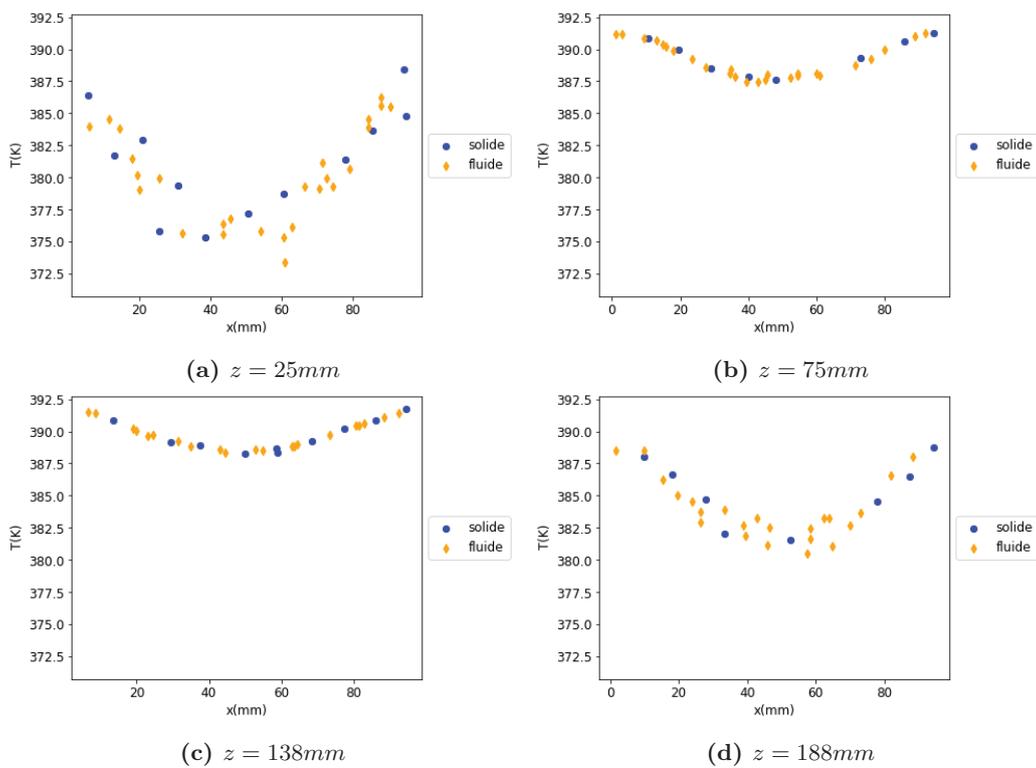


Figure B.1. Profils radiaux de températures suivant r à z constant ($\pm 5mm$) en régime stationnaire ($t = 20086s$) pour la simulation n°1

Profils radiaux et axiaux de températures en régime stationnaire

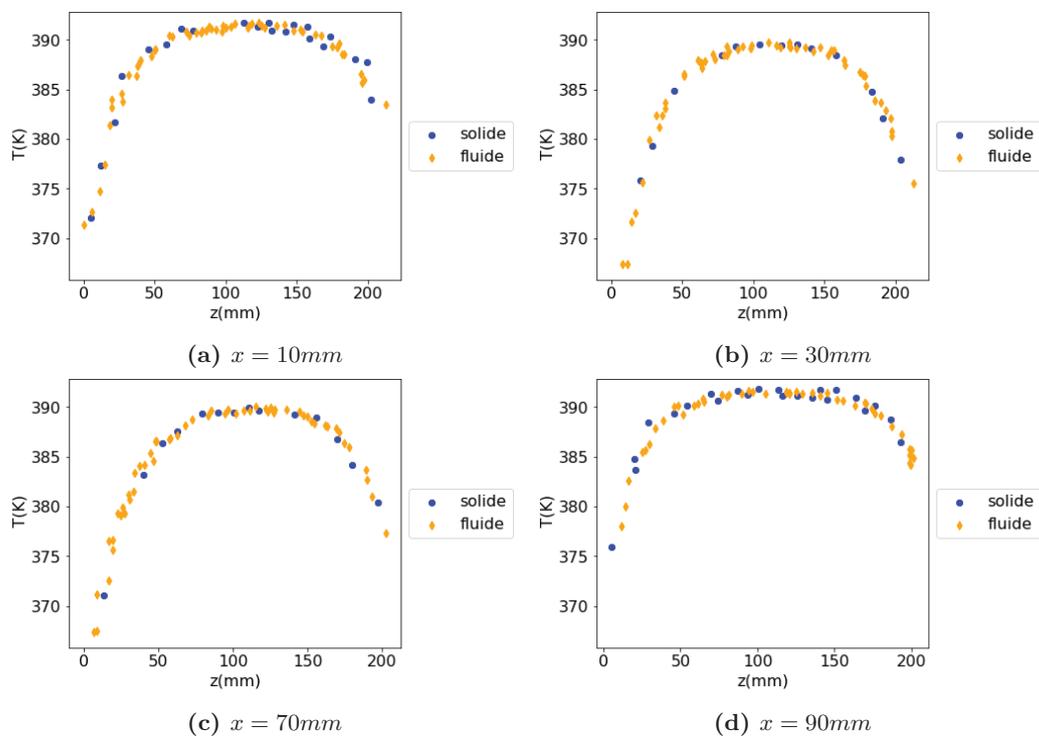


Figure B.2. Profils axiaux de températures suivant z à rayon constant ($\pm 2.5\text{mm}$) en régime stationnaire ($t = 20086\text{s}$)

Annexe C

Exemple de construction de matrice d'incidence

Les graphes réels construits à partir de la discrétisation du lit étant très complexes, pour expliquer l'extraction des matrices d'un graphe, nous nous sommes servis d'un exemple comme illustré dans la figure C.1 où le graphe de la phase solide d'un petit empilement 2D de particules

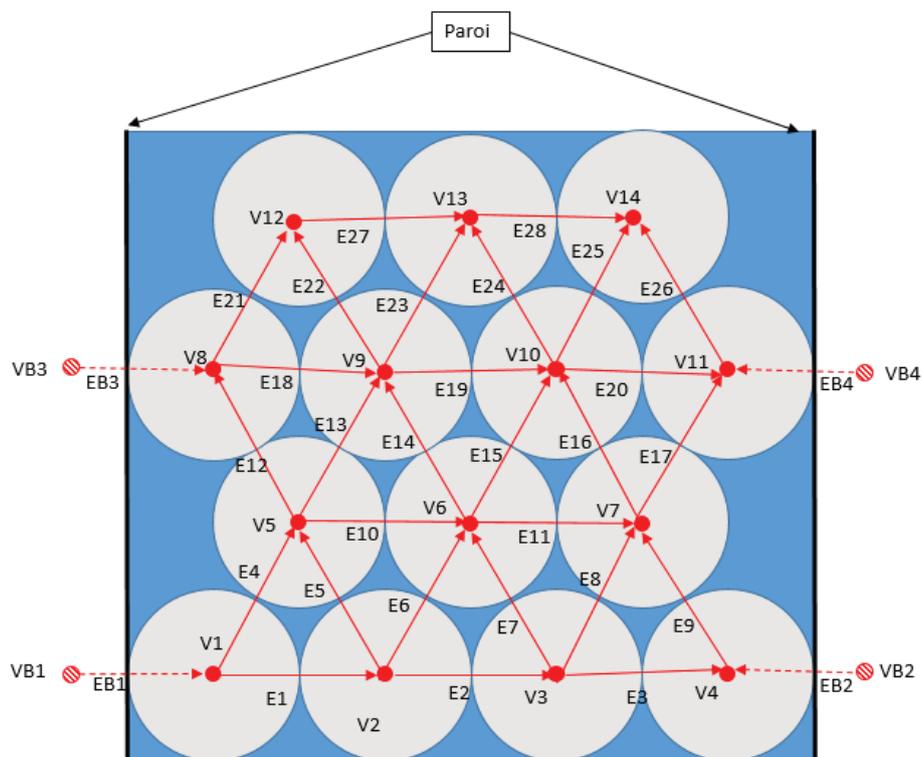


Figure C.1. Graphe de solide illustratif construit à partir d'un empilement (2D)

Exemple de construction de matrice d'incidence

sphériques a été construit. Les petits cercles rouges numérotés de $V1$ à $V14$ correspondent aux nœuds internes et de bords et ceux hachurés numérotés de $VB1$ à $VB4$ correspondent aux nœuds externes. Les petites flèches reliant les nœuds $V1, V2...V14$ sont les arêtes internes du graphe tandis que celles en pointillé sont les arêtes externes. Les arêtes sont orientées arbitrairement de gauche à droite et du bas vers le haut.

Les matrices d'incidence internes sont les sous-matrices D_i . Elles sont construites pour chaque graphe à partir des nœuds internes et de bords reliés entre eux par les arêtes internes et externes. Autrement, D_i est une matrice associée à un sous-graphe $G_i = (V_i, E_i)$ d'un graphe principal $G = (V, E)$, défini à partir d'un ensemble $V_i \subset V$ de points constitué par les nœuds internes et de bords du graphe principal reliés entre eux par un ensemble $E_i \subset E$ de liens contenant les arêtes internes et externes du graphe principal. Les matrices d'incidence internes sont utilisées pour calculer les valeurs des variables volumiques telles que les énergies internes discrètes à l'intérieur du lit, tandis qu'on se sert de leurs transposées pour déterminer les variables linéiques telles que les forces motrices discrètes. La matrice \mathcal{D}_i correspond à \mathcal{D}_1 dans la matrice \mathcal{J} (équation III.51).

Pour l'exemple illustratif C.1, on peut facilement construire la matrice interne avec ses nœuds internes et de bords et les arêtes internes et externes orientées dont \mathcal{D}_i^T est sa transposée.

Dans le programme *Python*, nous avons défini deux matrices d'incidence de ports, les sous-matrices \mathcal{D}_B et \mathcal{D}_G . Elles permettent de vérifier les liens entre les arêtes externes et respectivement les nœuds de bords et les nœuds «Border» ou les nœuds «Ghost». Mais, bien qu'il n'y ait pas de lien entre les arêtes externes et les nœuds internes, la construction de \mathcal{D}_B et \mathcal{D}_G se fait avec l'ensemble des nœuds ayant un volume pour qu'elle ait le même nombre de lignes que la matrice \mathcal{D}_i .

Pour l'exemple illustratif C.1, on définit la matrice \mathcal{D}_B^T transposée de \mathcal{D}_B . \mathcal{D}_B correspond à la sous-matrice \mathcal{D}_{B1} dans la matrice \mathcal{J} (équation III.51). La matrice $\mathbb{D}_B^T \mathcal{D}_B$ correspond elle à la sous-matrice $\mathbb{D}_{B1}^T \mathcal{D}_{B1}$ dans la matrice \mathcal{J}_B (équation III.52).

On utilise les transposées de \mathcal{D}_1 et de \mathcal{D}_{B1} pour calculer les valeurs des variables qui assurent les échanges du lit avec son environnement. Ces variables peuvent être surfaciées ou linéiques.

Exemple de construction de matrice d'incidence

$$\mathcal{D}_i^T = \begin{bmatrix}
 & V1 & V2 & V3 & V4 & V5 & V6 & V7 & V8 & V9 & V10 & V11 & V12 & V13 & V14 \\
 E1 & -1 & 1 & & & & & & & & & & & & \\
 E2 & & -1 & 1 & & & & & & & & & & & \\
 E3 & & & -1 & 1 & & & & & & & & & & \\
 E4 & -1 & & & & 1 & & & & & & & & & \\
 E5 & & -1 & & & 1 & & & & & & & & & \\
 E6 & & -1 & & & & 1 & & & & & & & & \\
 E7 & & & -1 & & & 1 & & & & & & & & \\
 E8 & & & -1 & & & & 1 & & & & & & & \\
 E9 & & & & -1 & & & 1 & & & & & & & \\
 E10 & & & & & -1 & 1 & & & & & & & & \\
 E11 & & & & & & -1 & 1 & & & & & & & \\
 E12 & & & & & & -1 & & 1 & & & & & & \\
 E13 & & & & & & -1 & & & 1 & & & & & \\
 E14 & & & & & & & -1 & & 1 & & & & & \\
 E15 & & & & & & & -1 & & & 1 & & & & \\
 E16 & & & & & & & & -1 & & & 1 & & & \\
 E17 & & & & & & & & -1 & & & & 1 & & \\
 E18 & & & & & & & & & -1 & 1 & & & & \\
 E19 & & & & & & & & & & -1 & 1 & & & \\
 E20 & & & & & & & & & & & -1 & 1 & & \\
 E21 & & & & & & & & & -1 & & & & 1 & \\
 E22 & & & & & & & & & & -1 & & & 1 & \\
 E23 & & & & & & & & & & -1 & & & & 1 \\
 E24 & & & & & & & & & & & -1 & & & 1 \\
 E25 & & & & & & & & & & & & -1 & & 1 \\
 E26 & & & & & & & & & & & & & -1 & 1 \\
 E27 & & & & & & & & & & & & & -1 & 1 \\
 E28 & & & & & & & & & & & & & & -1 & 1
 \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{D}_B^T = \begin{bmatrix}
 & V1 & V2 & V3 & V4 & V5 & V6 & V7 & V8 & V9 & V10 & V11 & V12 & V13 & V14 \\
 EB1 & -1 & & & & & & & & & & & & & \\
 EB2 & & & & -1 & & & & & & & & & & \\
 EB3 & & & & & & & & -1 & & & & & & \\
 EB4 & & & & & & & & & & & & -1 & &
 \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{D}_B^T \mathcal{D}_B = \begin{bmatrix}
 & VB1 & VB2 & VB3 & VB4 \\
 EB1 & 1 & & & \\
 EB2 & & 1 & & \\
 EB3 & & & 1 & \\
 EB4 & & & & 1
 \end{bmatrix} \tag{C.1}$$