

EFFET D'UNE REACTION CHIMIQUE SUR LES TRANSFERTS DE CHALEUR ET DE MASSE DANS UNE CONDUITE POREUSE.

A. BOUSRI^{1*}, K. BOUHAEF, H. BEJI²
Ph. HERVE³

¹Laboratoire des Transports Polyphasiques et Milieux Poreux
Faculté de Génie Mécanique et de Génie des Procédés/USTHB

²Laboratoire des Technologies Innovantes.

Université de Picardie Jules Verne, Amiens

³Laboratoire d'Energie, Economie d'Energie
Université de Paris 10 Nanterre, Ville d'Avray France
hassen.beji@u-picardie*

RESUME

Pendant les trois dernières décennies, beaucoup d'effort a été consacré à l'étude de la convection libre ou forcée dans les milieux poreux, siège d'un écoulement de fluide avec ou sans source de chaleur interne. L'intérêt porté à ce problème a été suscité par l'importance qu'il présente dans diverses applications telles que le traitement des déchets nucléaires et le traitement des fumées dû à l'industrie, aux réservoirs géothermiques, au refroidissement des composants électroniques, etc. Nous intéressons dans ce travail à l'étude des transferts thermiques et massiques simultanés dans les écoulements de certains fluides dans les milieux réactifs, en absence d'équilibre thermique local entre la phase fluide et la phase solide, en vue de leur éventuelle épuration de certaines substances soit par filtration, soit destructions des substances indésirables. Ce système est discrétisé et résolu numériquement, grâce à la méthode des volumes finis. Nous analysons l'influence des paramètres dynamiques et thermo-physiques sur les distributions des températures, concentrations moyennes et les transferts de chaleur et de masse, en présence d'une réaction chimique traduite par l'expression d'Arrhenius.

NOMENCLATURE

A	Facteur pre-exponentiel	s ⁻¹	r	Rayon du cylindre	m
B _{int}	Nombre de Biot interstitiel		Re	Nombre de Reynolds	
C	Concentration	kg/m ³	R _F	Rapport de forme	
C _p	Chaleur spécifique	kJ/kg.K	R _v	Rapport des viscosités	
D	Diffusivité massique	m ² /s	t	Temps	s
Da	Nombre de Darcy		u	Vitesse longitudinale,	m/s
D _{1,2,3}	Nombres adimensionnels		V	Module de vitesse	m/s
E	Energie d'activation	kJ/kmol	v	Vitesse transversale	m/s
(FK) _m	Nombre de Frank– Kamenetskii modifié		z	Coordonnée axiale m	
H	Hauteur du cylindre	m	r	Coordonnée radiale	m
K	Perméabilité	m ²	ΔH	Enthalpie	kJ/kg
k	Conductivité thermique	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	Symboles grecs		
Le	Nombre de Lewis		ε	Porosité	
P	Pression	N/m ²	μ	Viscosité dynamique,	kg/m.s
Pr	Nombre de Prandtl		ρ	Masse volumique	kg/m ⁻³
θ	Température adimensionnelle				

σ Rapport des capacités calorifiques

Indices

f Fluide

s Solide

1. INTRODUCTION

Nous apportons, par le présent travail, une contribution à l'étude de ce problème en traitant plus particulièrement des transferts de chaleur et de matière par convection forcée dans un milieu poreux réactifs contenu dans un conduit cylindrique avec application éventuelle aux catalyseurs. Il s'agit d'étudier des effets d'un certain nombre de paramètres thermo-physiques tels que la perméabilité du milieu poreux, le nombre de Reynolds caractérisant l'écoulement fluide et le nombre de Frank-Kamenetskii relatif à la production énergétique due aux réactions chimiques.

Ce problème a été abordé par quelques auteurs dont F. Contain et al [1] qui a étudié numériquement la filtration dans la combustion pour le cas d'une conduite à parois chauffées et saturées. L'auteur a choisi un profil de température trapézoïdal à l'intérieur du réacteur pour une vitesse de filtration variant de 15 à 45 cm/s. Malico [2] pour sa part a étudié l'importance du rayonnement et des propriétés radiatives pour un prototype poreux de brûleur développé et testé à LSTM- Erlangen. Les résultats obtenus sont comparés en termes de différences dans des profils de température, flux radiatif. Le cas où le rayonnement est négligé a été également étudié et les résultats sont comparés aux valeurs expérimentales. Lazarovici et al. [3] ont étudié l'effet de la convection sur la génération de la chaleur par une réaction exothermique dans un réacteur carré lié par des parois à des températures constantes. Les équations du fluide en écoulement et du transfert thermique sont résolues numériquement pour une gamme des valeurs des nombres de Rayleigh (Ra) et de Frank-Kamenetskii (FK). À partir de ces solutions, des frontières entre les solutions liées et l'emballlement thermique sont déterminées, avec la gamme de FK pour les solutions liées augmentant au fur et à mesure que le Ra est augmenté. La couche poreuse horizontale est refroidie de la frontière supérieure avec deux états de frontière. Y. Demirel [4], son étude présente les équations modelant des systèmes non-isothermes de la réaction-diffusion (RD) avec des flux couplés de chaleur et de masse en excluant de l'accouplement les réactions chimiques en utilisant l'approche thermodynamique de non-équilibre linéaire. Pour un granule de catalyseur de galette, il montre le comportement dynamique des profils de composition et de température obtenus à partir des solutions numériques des équations partielles non linéaires par des solutions mathématique pour deux systèmes de réaction industriels de synthèse de chlorure de vinyle et de dissociation du N_2O . L'étude présente considère une conduite cylindrique poreuse; la réaction chimique se produit dès l'entrée de la conduite.

2. EQUATIONS

Les équations régissant le problème dans un fluide visqueux, incompressible sont déduites des principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces chimiques. Elles sont considérées sous leur forme instationnaire et le modèle d'écoulement adopté dans le milieu poreux est celui de Darcy-Brinkman-Forchheimer.

Les hypothèses simplificatrices adoptées sont les suivantes : régime d'écoulement laminaire bidimensionnel, fluide incompressible et dissipation de l'énergie par frottement négligée, propriétés physiques constantes, fluide Newtonien, écoulement axisymétrique et non équilibre thermique et chimique local entre la phase solide et fluide.

1.1 Continuité

$$\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rv)}{\partial r} = 0 \quad (1)$$

1.2 Quantité de mouvement

$$\varepsilon \frac{\partial u}{\partial t} + \left[u \frac{\partial u}{\partial z} + v \frac{\partial u}{\partial r} \right] = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{2R_F R_v \varepsilon^2}{Re} \cdot \left[\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] - \frac{2R_F \varepsilon^2}{Da^2 Re} \cdot u - D_0 |V| u \quad (2)$$

$$\varepsilon \frac{\partial v}{\partial t} + \left[v \frac{\partial v}{\partial z} + v \frac{\partial v}{\partial r} \right] = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{2R_F R_v \varepsilon^2}{Re} \cdot \left[\frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{v}{r^2} \right] - \frac{2R_F \varepsilon^2}{Da^2 Re} \cdot v - D_0 |V| v \quad (3)$$

1.3 Energie [5]

$$\varepsilon \frac{\partial \theta_f}{\partial t} = - \left(u \frac{\partial \theta_f}{\partial z} + v \frac{\partial \theta_f}{\partial r} \right) + \varepsilon \frac{2R_F}{Re Pr} \left(\frac{\partial^2 \theta_f}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta_f}{\partial r} \right) \right) + D_1 \cdot (\theta_s - \theta_f) \quad (4)$$

$$\sigma(1-\varepsilon) \frac{\partial \theta_s}{\partial t} = -(1-\varepsilon) R_c \frac{2R_F}{Re Pr} \left(\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta_s}{\partial r} \right) \right) + D_1 (\theta_s - \theta_f) + (FK)_m \cdot C_s \exp(\theta_s) \quad (5)$$

1.5 Concentration

$$\varepsilon \frac{\partial C_f}{\partial t} = - \left(u \frac{\partial C_f}{\partial z} + v \frac{\partial C_f}{\partial r} \right) + \varepsilon \frac{2R_F}{Re Sc} \left(\frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_f}{\partial r} \right) \right) + D_2 \cdot (C_s - C_f) \quad (6)$$

$$0 = D_2 (C_s - C_f) - D_3 C_s \exp(\theta_s) \quad (7)$$

Avec :

$$D_2 = \frac{6(1-\varepsilon) \beta_m Re}{2 \varepsilon R_F u_0 Re_p} ; \quad (8)$$

$$D_3 = \varepsilon \frac{DA}{u_0} \exp \left(-\frac{E}{R_g T_0} \right) \quad (9)$$

$$(FK)_m = \frac{\varepsilon A (\Delta H) C_0 E H}{(\rho C_p)_f u_0 R_g T_0^2} \exp \left(\frac{-E}{R_g T_0} \right) \quad (10)$$

1.6 Conditions initiales et aux limites:

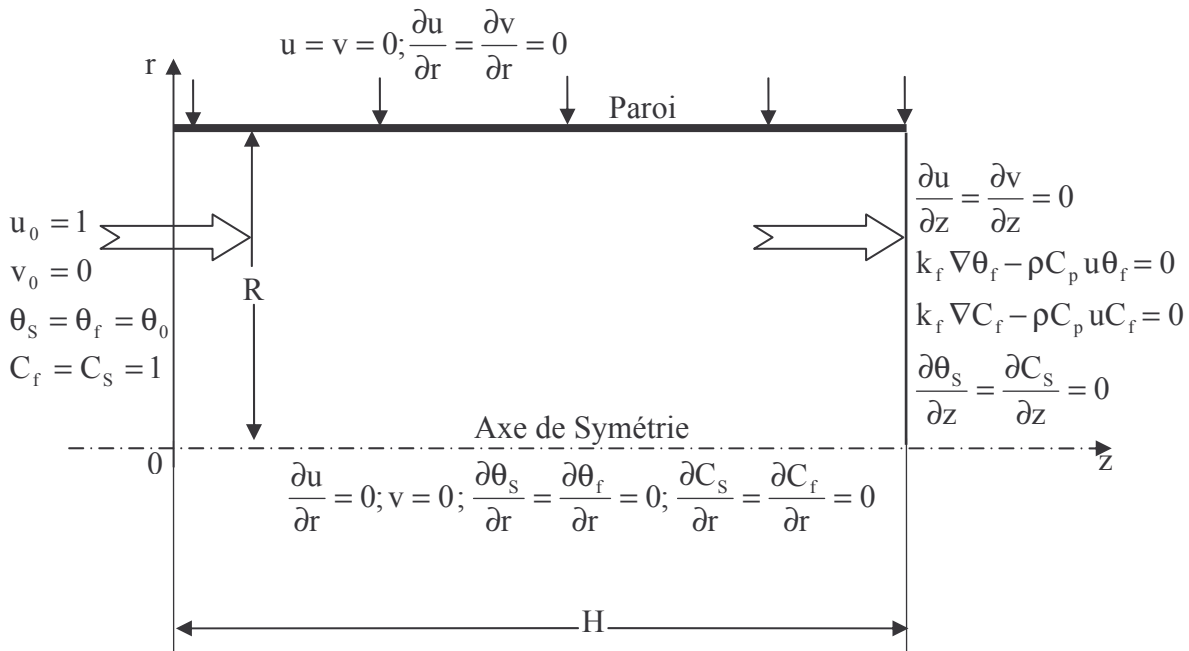
à $t = 0$:

$$u(z, r, 0) = v(z, r, 0) = 0 \quad (11)$$

$$\theta_s(z, r, 0) = \theta_f(z, r, 0) = 0 \quad (12)$$

$$C_f(z, r, 0) = C_s(z, r, 0) = 1 \quad (13)$$

à $t > 0$:



2. RESOLUTION NUMERIQUE

La résolution des équations qui régissent notre problème se fait par la méthode des volumes finis et on a utilisé un maillage non uniforme de (160X80). Le schéma de discrétisation employé polynomiale et le couplage vitesse pression est calculé selon l'algorithme SIMPLER développé par (Patankar et Spalding [1972]). La résolution des équations discrétisées est basée sur la méthode ADI à chaque pas de temps. On considère que la convergence est atteinte lorsque l'erreur relative est inférieure à 10^{-6} tel que :

4. RESULTATS ET DISCUSSIONS

Dans le but de valider notre code de calcul, nous avons confronté nos résultats numériques obtenus dans un cas limite à ceux obtenus analytiquement dans les travaux de thèse. Ameziani [6] concernant l'analyse de la convection forcée en milieux poreux dans une conduite cylindrique.

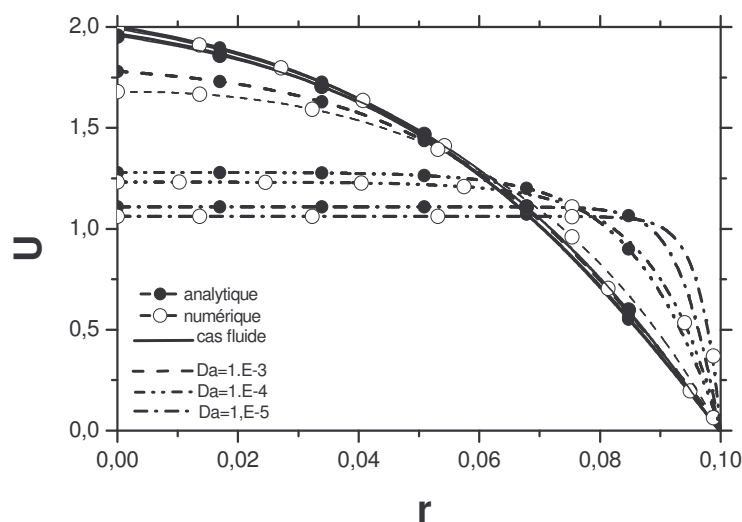


Figure1 : Comparaison des profils de vitesse à la sortie du cylindre entre la solution analytique et numérique pour $Re = 100$.

La figure 1 est une validation du champ dynamique dans la conduite en fonction de la coordonnée transversale pour différentes valeurs du nombre de Darcy et pour $Re = 100$. On remarque une bonne concordance entre les deux résultats et que l'écart maximum ne dépasse pas les 0.5%, pour des valeurs proches du cas fluide. On remarque aussi que lorsque le nombre de Darcy diminue, la vitesse au centre diminue et le profil change de forme, en allant d'un profil parabolique pour des nombres de Darcy élevés vers un profil plat, pour des Darcy faibles (cas d'un milieu poreux très peu perméable).

Par suite, on représentera les résultats concernant les distributions de la température et la concentration pour un ordre de réaction égal à un et cela afin de considérer le couplage entre le transfert thermique et massique. Dans ces résultats, on a étudié l'effet de certains paramètres physiques tels que le nombre de Reynolds et le nombre de Frank-Kamenetskii modifier sur la température et la concentration moyennes pour la phase solide et la phase fluide.

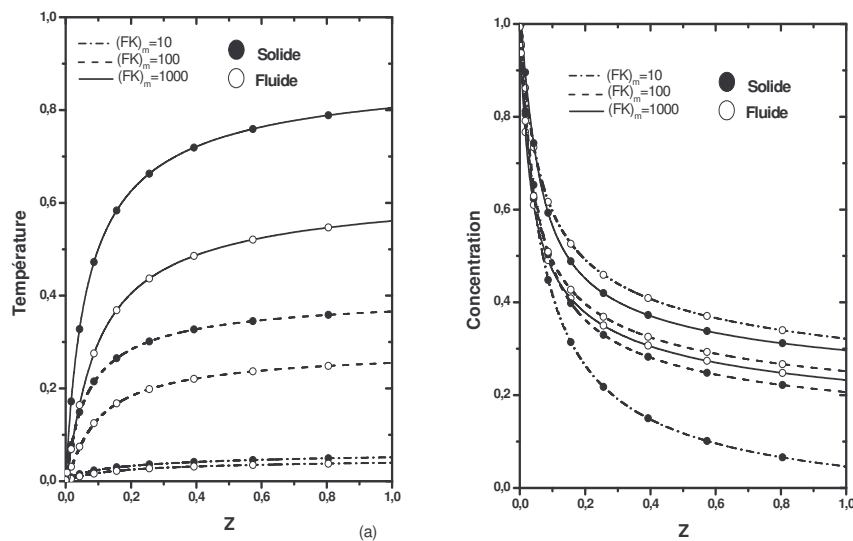


Figure 2 : Effet du nombre de Frank-Kamenetskii sur la température.

L'influence de la réaction chimique, exprimée par le nombre de Frank-Kamenetskii $(FK)_m$ modifié, sur le profil des températures et concentrations moyennes le long de la conduite pour les phases fluide et solide, est représentée sur la figure (2). On remarque que la température augmente rapidement dès l'entrée de la conduite puis se stabilise au fur et à mesure que l'écoulement avance pour atteindre une valeur constante. Pour des valeurs importantes du nombre de Frank-Kamenetskii, la température moyenne est très importante pour la phase fluide et la phase solide. Ce comportement est dû au taux de la réaction chimique (terme d'Arrhenius) qui est représenté par le nombre de Frank-Kamenetskii dans l'équation d'énergie et à la résistance interne entre la phase solide et fluide, empêchant l'évacuation de la chaleur générée par le solide. Sur la figure 2.b, on a représenté la concentration moyenne, on note que cette dernière diminue rapidement à l'entrée puis se stabilise vers l'avant. Quand le nombre de Frank-Kamenetskii augmente, la concentration de la phase solide augmente aussi. De même, ce comportement est dû à la présence de la réaction chimique représentée par le terme d'Arrhenius (Eq.7). Par contre, la concentration de la phase fluide diminue en augmentant le nombre $(FK)_m$, puisque à grande valeur de ce dernier la majorité des réactifs se transforme en produits, par conséquent, la concentration des réactifs diminue.

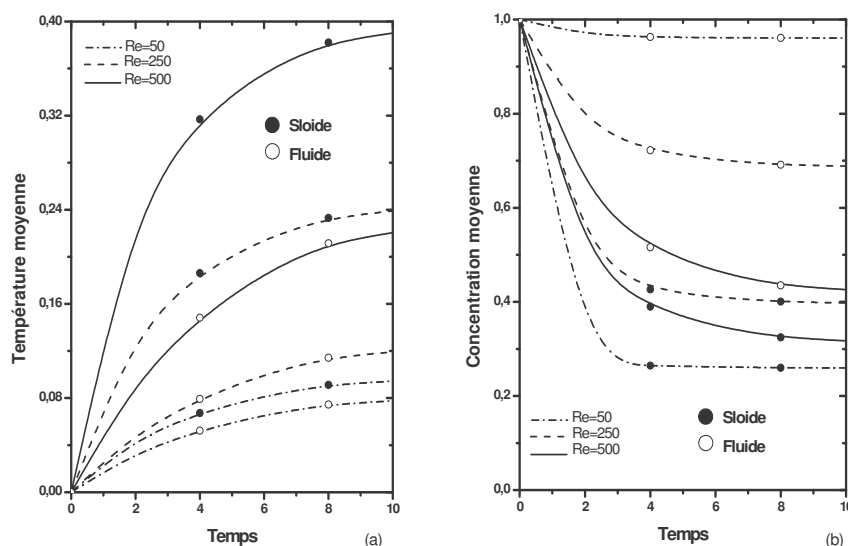


Figure 3 : Température moyenne en fonction du temps.

Sur la figure 3, on a représenté l'évolution de la température et concentrations temporelle. On constate que la température varie d'une manière croissante (parabolique) en fonction du temps, de plus, quand le nombre de Reynolds augmente l'écart entre les températures des phases fluide et solide augmente. Cet écart est attribué à un transfert diffusif élevé à travers le solide et d'un faible échange thermique interne, bloquant ainsi l'évacuation de la chaleur générée. Cela explique l'écart important de température entre les deux phases solide liquide.

5. CONCLUSION

Les échanges thermiques et massiques simultanés et couplés, ayant lieu dans les milieux poreux en présence d'une réaction chimique dans une conduite cylindrique, sont analysés. Nous avons pris la condition de paroi avec un flux et pour considérer le couplage entre le transfert thermique et le transfert massique, on a considéré un ordre de réaction égal à un. D'après les résultats obtenus, on remarque que : L'effet de la matrice poreuse est largement influencé par le nombre de Reynolds qui lorsqu'il augmente, a tendance à aplatir les profils des vitesses et augmente la longueur d'établissement. L'influence du nombre de Franck-Kamenetskii modifie sur la température et concentration, du fait que, qu'en augmentant ce nombre la concentration diminue et la température du solide augmente. Ainsi, ce travail pourrait être vu comme étant une contribution pour la maîtrise des problèmes de la modélisation numérique des transferts de chaleur et de matière dans les milieux poreux réactifs où se produisent des changements de phase et des transferts sous l'effet d'un écoulement forcé.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. F. Contain et al, 2003, A reciprocal flow filtration combustor with embedded heat exchangers: numerical study. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, V., n°: 46, pp. 949-961.
2. I. Malico and F.pereira, October 2001, Numerical study on the influence of radiative properties in porous media combustion. *Journal of Heat Transfer*, V., n°: 123, pp. 951-957.
3. A. Lazarovici et al., 2005, "Steady states, oscillations and heat explosion in a combustion problem with convection». *European Journal of Mechanics B/ Fluids*. Vol 24, pp. 189-203.
4. Y. Demirel, 2006, " Non-isothermal reaction-diffusion systems with thermodynamically coupled heat and mass transfer", *Chemical Engineering Science*, Vol.61, Issue 10, pp.3379-3385.
5. D. A. Nield and A. Bejan, 2006, *Convection in Porous Media*, Springer Verlag, (3rd edition).
6. D.E. Ameziari, 2001, Modélisation du transfert de chaleur dans les silos, *Thèse*.