

Etude numérique de l'effet de la vitesse de glissement sur la perméabilité et sur la conductivité de dispersion de milieux micro-poreux

T.L. VU, G. LAURIAT, G. BONNET

MSME, CNRS UMR 8208, Université Paris-Est, Marne la Vallée, 5 Bd Descartes, Champs-sur-Marne, 77452
Marne-la Vallée cedex 2

Résumé :

Des écoulements forcés dans des milieux poreux dont la taille du volume d'étude représentatif est de l'ordre de quelques micromètres sont étudiés numériquement. Les champs de vitesse et de température d'écoulements d'air sont calculés à l'échelle locale en géométries 2D et 3D. On en déduit les propriétés macroscopiques à partir de moyennes spatiales. On montre que le glissement de vitesse influe fortement sur la perméabilité mais que son effet sur la conductivité thermique de dispersion est beaucoup plus faible.

Abstract :

A numerical study on forced convection in micro porous media is conducted. 2D as well as 3D flows and temperature fields are solved at the microscopic scale, and spatially averaged in order to determine permeabilities and thermal dispersion conductivities for various shapes of a representative elementary volume. It is shown that the gas slippage effect has a significant influence on permeability while it has a weak effect on thermal dispersion

Mots clefs : convection forcée en milieux micro-poreux, perméabilité, conductivité de dispersion, glissement

1 Introduction

Les écoulements et les transferts convectifs de gaz dans des micro-conduites de diamètre hydraulique D_h tel que le nombre de Knudsen ($Kn = \text{libre parcours moyen}/\text{diamètre hydraulique}$) est compris entre $Kn = 0,01$ et $Kn = 0,1$ (soit D_h de l'ordre de quelques micromètres pour de l'air à pression atmosphérique) sont modélisables en s'appuyant sur les équations de la mécanique des milieux continus à condition de modifier les conditions aux limites afin de représenter les phénomènes de glissement, dynamique et /ou thermique. Introduits d'abord pour les écoulements de gaz raréfiés, par Maxwell en particulier, ces phénomènes font intervenir de nouveaux coefficients qui peuvent être déterminés expérimentalement ou théoriquement par différentes approches, telle que la dynamique moléculaire.

Connaissant ces coefficients, toutes les modélisations des écoulements en conduite peuvent être reconsidérées. Un nombre considérable de travaux expérimentaux ou numériques portant sur la mécanique des fluides ou sur la convection thermique dans des micro-conduites a ainsi été publié au cours des dernières années, le cas des liquides étant beaucoup plus complexe.

S'agissant de milieux micro poreux (c'est-à-dire de milieux dont la taille caractéristique des pores est de l'ordre du micron), les modélisations « macroscopiques » usuelles (homogénéisation, prises de moyennes...) doivent être modifiées. En ce qui concerne la partie dynamique, la façon la plus simple de procéder est de recalculer une perméabilité tenant compte du glissement dynamique afin de continuer à utiliser la loi de Darcy [1]. En considérant des motifs périodiques et en supposant l'écoulement périodique ou - plus exactement - établi, on peut en déduire de nouvelles valeurs de la perméabilité incluant les effets du glissement. La forme « macroscopique » de l'équation de l'énergie (ou de l'équation de l'énergie pour la phase fluide si la modélisation est basée sur un modèle hors équilibre thermique local), montre que la conductivité effective – c'est-à-dire la conductivité stagnante plus la conductivité due à la dispersion ($\langle \mathbf{u}'T' \rangle$) – dépend du couplage entre champs de vitesse et champs de température. Un certain nombre

d'articles publiés au cours des vingt dernières années ont porté sur cette question ([2-8] par exemple) en considérant une maille élémentaire d'un milieu périodique. Le problème du glissement n'a cependant jamais été considéré.

L'objectif de cette communication est de montrer l'effet du glissement dynamique sur la perméabilité et sur la conductivité de dispersion. Nous nous limitons au cas d'une conduite remplie par une structure périodique chauffée à flux constant. Nous ne faisons aucune hypothèse sur le caractère périodique des transferts de chaleur et de quantité de mouvement dans la direction principale de l'écoulement : les transferts sont simulés depuis l'entrée jusqu'à la sortie d'une conduite. Dans cette communication, nous nous intéressons plus particulièrement aux valeurs moyennes calculées dans un VER situé dans la zone d'écoulement dynamiquement et thermiquement établi.

2 Modélisation et résolution numérique

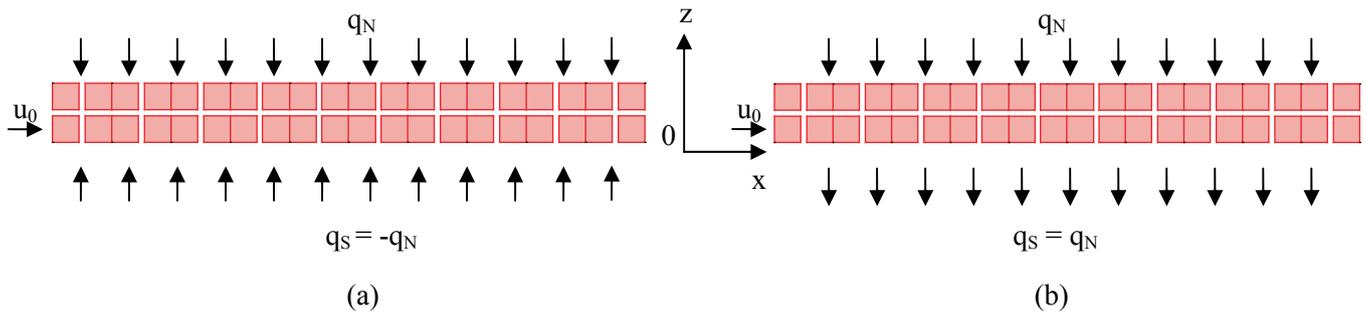


FIG. 1 - Domaine physique simulé (cas 2D) et conditions thermiques appliquées sur les surfaces de symétrie pour calculer les conductivités de dispersion longitudinale (a) et transverse (b).

On considère un écoulement de convection forcée laminaire, incompressible et stationnaire d'air à travers un milieu poreux constitué par un motif régulier de cubes disposés en réseau en ligne. Les échanges radiatifs entre surfaces solides et la production de chaleur par dissipation visqueuse sont négligés. L'air entre dans la conduite avec un débit fixé (vitesse moyenne d'entrée imposée) et on suppose qu'il est possible d'imposer un gradient de température constant (ou un flux de chaleur) parallèlement ou perpendiculairement à la direction principale de l'écoulement (Fig. 1). Compte-tenu de la distance entre parois (inférieure à 100 μm), les nombres de Reynolds, Re , ou de Péclet, $Pe = Re \times Pr$, basés sur la vitesse débitante sont faibles ($Pe \leq 10$). Les équations décrivant l'écoulement et les transferts de chaleur s'écrivent à l'échelle «microscopique» :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\rho_f (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}$$

$$\rho_f C_{pf} \nabla \cdot (\mathbf{u} T_f) = k_f \nabla^2 T_f \quad \text{dans } V_f$$

$$k_s \nabla^2 T_s = 0 \quad \text{dans } V_s$$

Aux interfaces fluide-solide, on écrit les conditions d'imperméabilité et de glissement pour les composantes normales et tangentielles des vitesses. On admet aussi la continuité des températures et des flux le long des surfaces de contact fluide-solide (S_{fs}). Soit :

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

$$T_f = T_s \quad \text{sur } S_{fs}$$

$$k_f \nabla T_f \cdot \mathbf{n} = k_s \nabla T_s \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } S_{fs}$$

où L_s est la longueur de glissement qui s'exprime en fonction du coefficient d'accommodation dynamique α_g et du libre parcours moyen λ par la relation $L_s = (2 - \alpha_g)\lambda/\alpha_g$. Pour de l'air à pression atmosphérique, $\lambda \approx 60$ nm et $0,8 \leq \alpha_g \leq 0,9$ pour les couples gaz-solide usuels. Les conditions aux limites sur le bord du domaine d'intégration sont écrites :

$$u = u_0, \quad v=0, \quad w=0, \quad T_f = T_s = T_0, \quad \text{en } x=0, \quad \forall y,z$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial z} = 0, \quad v=0, \quad w=0, \quad \frac{\partial T_f}{\partial y} = \frac{\partial T_s}{\partial y} = \frac{\partial T_f}{\partial z} = \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0, \quad \text{en } x=L, \quad \forall y,z$$

$u = v = w = 0$ sur les surfaces solides + conditions de périodicité au bord du domaine fluide,

$$q=q_N=q_p, \quad \text{en } y,z=0,H \quad \forall x$$

En se basant sur une modélisation à une seule équation d'énergie ($\langle T \rangle = \langle T_f \rangle^f = \langle T_s \rangle^s$), la version « macroscopique » la plus simple des équations de conservation s'écrit :

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{u} \rangle = 0$$

$$\langle \mathbf{u} \rangle = \frac{K}{\mu} \nabla \langle P \rangle^f$$

$$\rho_f C_{pf} \langle \mathbf{u} \rangle \cdot \nabla \langle T \rangle = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla \langle T \rangle)$$

Le tenseur de conductivité effective se décompose comme suit :

$$\underline{\underline{K}}_{eff} = k_e \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}}_{tor} + \underline{\underline{K}}_{disp}$$

avec

$$k_e = \varepsilon k_f + (1 - \varepsilon) k_s, \quad \underline{\underline{K}}_{tor} = \frac{k_f - k_s}{\nabla \langle T \rangle} \int_{S_s} T \mathbf{n} dS, \quad \underline{\underline{K}}_{disp} = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle} \langle T' \mathbf{u}' \rangle = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle} \int_{V_f} T' \mathbf{u}' dV$$

où V est le volume de la maille élémentaire (Fig.2).

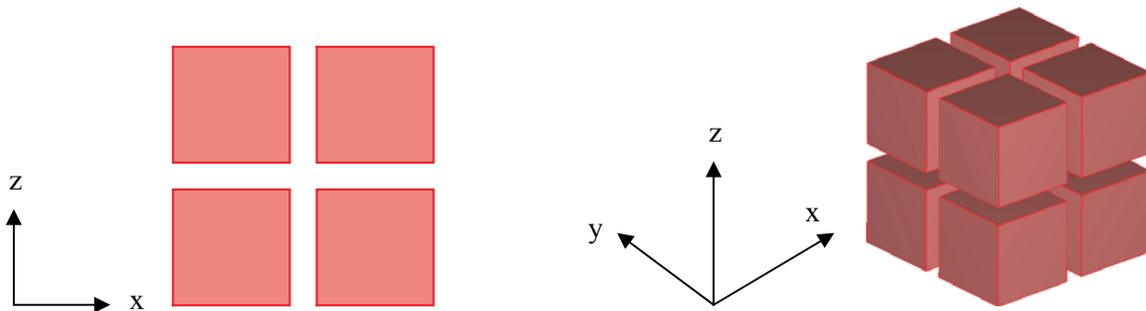


FIG. 2 - Mailles élémentaires 2D et 3D.

Il est à noter que ces équations ne sont valables que pour un écoulement établi et que le glissement n'intervient pas dans l'équation de l'énergie en régime stationnaire. La somme $k_e \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}}_{tor}$ est la conductivité stagnante et les fluctuations T' et \mathbf{u}' sont déduites des solutions locales et moyennées sur un VER (Fig.2), soient $T'(x,y,z) = T(x,y,z) - \langle T(x) \rangle$ et $\mathbf{u}' = \mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle^f$. Pour calculer les composantes du gradient macroscopique de température $\nabla \langle T \rangle$, le sens du flux imposé en $z = 0$ est modifié (Fig. 1a pour la dispersion thermique longitudinale, $(K_{disp})_{xx}$, et Fig. 1b pour la dispersion thermique transverse, $(K_{disp})_{zz}$) [2, 3, 4 et 7]. Les expressions des composantes diagonales ($i=x,y,z$) du tenseur de dispersion thermique sont donc calculées à partir des relations :

$$(K_{disp})_{ii} = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle_i} \int_{V_f} T' u_i' dV = -\frac{\rho_f C_{pf}}{\nabla \langle T \rangle_i} \int_{V_f} (T - \langle T \rangle) (u_i - \langle u_i \rangle^f) dV$$

Les équations de conservation à l'échelle microscopique ont été résolues par la méthode des éléments finis implémentée dans le code commercialisé Comsol [9] en utilisant un maillage rectangulaire non-uniforme en géométries 2D comportant typiquement 5×10^4 éléments et avec un maillage tétraédrique comportant 6×10^4 éléments en géométries 3D.

Des comparaisons avec les solutions de Kuwahara et al. [4] et de Pedras et de Lemos [7], qui se rapportent à des géométries et à des paramètres très proches de ceux considérés dans cette étude, ont aussi été effectuées pour des nombres de Péclet dans l'intervalle $1 \leq Pe \leq 100$ et pour $k_s/k_f = 2$ et 10 . Il en résulte que les valeurs de la dispersion longitudinale sont en très bon accord avec [4, 7] qui donnent une dépendance de $(K_{disp})_{xx}$ en Pe^2 mais que celles de la dispersion transverse ne sont en accord qu'avec celles de Pedras et de Lemos [7].

3. Résultats

3.1 Etude de l'effet du glissement sur la perméabilité et la dispersion thermique en géométries 2D

Les géométries étudiées sont du type de celle représentée sur la figure 1. La hauteur simulée est $H = 10 \mu m$ et la longueur $L \approx 100 \mu m$. Dans tous les cas considérés, le nombre de cellules élémentaires (VER) est de 10, soit une dimension de $10 \mu m \times 10 \mu m$. On a fait varier la taille des côtés des blocs carrés (Fig. 2) de $a = 4,5 \mu m$ à $a = 3 \mu m$ de sorte que la porosité augmente de $\varepsilon = 0,19$ et $\varepsilon = 0,64$. Le nombre de Knudsen, $Kn = \lambda / (H - 2a)$, varie alors de $Kn = 0,06$ à $Kn = 0,015$. Dans ce domaine de Kn , des conditions de glissement doivent être appliquées.

La perméabilité sans tenir compte du glissement étant alors comprise entre $K = 8,68 \cdot 10^{-15} m^2$ et $K = 6,35 \cdot 10^{-13} m^2$ (Tableau 1). On en déduit que la longueur d'établissement du régime dynamique est très courte (de l'ordre de quelques \sqrt{K}). La perméabilité augmente évidemment sous l'effet du glissement : son augmentation est d'autant plus importante que le nombre de Knudsen est grand et que le coefficient d'accommodation est faible.

	$\varepsilon=0,19$ (Kn=0,06)	$\varepsilon=0,36$ (Kn=0,03)	$\varepsilon=0,51$ (Kn=0,02)	$\varepsilon=0,64$ (Kn=0,015)
K (m ²)	$8,68 \times 10^{-15}$	$7,25 \times 10^{-14}$	$2,56 \times 10^{-13}$	$6,35 \times 10^{-13}$
$K_g(\alpha_g=0,9)$ (m ²)	$1,24 \times 10^{-14}$	$8,74 \times 10^{-14}$	$2,89 \times 10^{-13}$	$6,95 \times 10^{-13}$
$K_g(\alpha_g=0,8)$ (m ²)	$1,32 \times 10^{-14}$	$9,06 \times 10^{-14}$	$2,97 \times 10^{-13}$	$7,07 \times 10^{-13}$

Tableau 1 : Effet du glissement sur la perméabilité pour différentes porosités (ou de Kn) et pour deux valeurs du coefficient d'accommodation.

En régime thermique établi, la moyenne intrinsèque de la température du fluide et la moyenne de phase de la température varient linéairement (soit $d\langle T(x) \rangle / dx = Cste$ et $d\langle T(x) \rangle / dx = Cste$) et on a vérifié que la dispersion thermique est indépendante de la température d'entrée et de la valeur de la densité de flux appliquée sur les surfaces de périodicité.

Les figures 3 et 4 représentent les variations des composantes longitudinale et transverse de la conductivité de dispersion en fonction du nombre de Péclet (pour $k_s/k_f = 10$) et en fonction du rapport des conductivités (pour $Pe = 5$) lorsque $\varepsilon = 0,19$ et $\varepsilon = 0,64$. Si des valeurs très supérieures de k_s/k_f peuvent être considérées, le nombre de Péclet doit rester inférieur à $Pe \approx 10$ pour que l'hypothèse d'incompressibilité soit admissible. Les calculs ayant montré que la dispersion thermique est peu sensible à la valeur du coefficient d'accommodation, les résultats présentés sur ces deux figures correspondent à $\alpha_g = 0,9$.

On remarque que la dispersion longitudinale est très peu sensible aux effets de glissement (diminution maximale de 5% pour $Kn = 0,06$) alors que la dispersion transverse, dont la valeur est beaucoup plus faible, dépend beaucoup plus du glissement. Dans le domaine de variation des paramètres étudié, l'effet maximal du glissement sur $(K_{disp})_{zz}$ est obtenu pour $Kn = 0,06$ et $k_s/k_f = 10$: $(K_{disp})_{zz} = 4,34 \cdot 10^{-6} k_f$ sans glissement et $(K_{disp})_{zz} = 2,69 \cdot 10^{-6} k_f$ en tenant compte du glissement. Les figures 3 et 4 montrent aussi que la porosité a une influence beaucoup plus importante sur la conductivité de dispersion mais que son influence est peu modifiée

sous l'effet du glissement.

Il apparaît en définitive que le glissement n'a pas d'influence importante sur les composantes de la conductivité de dispersion.

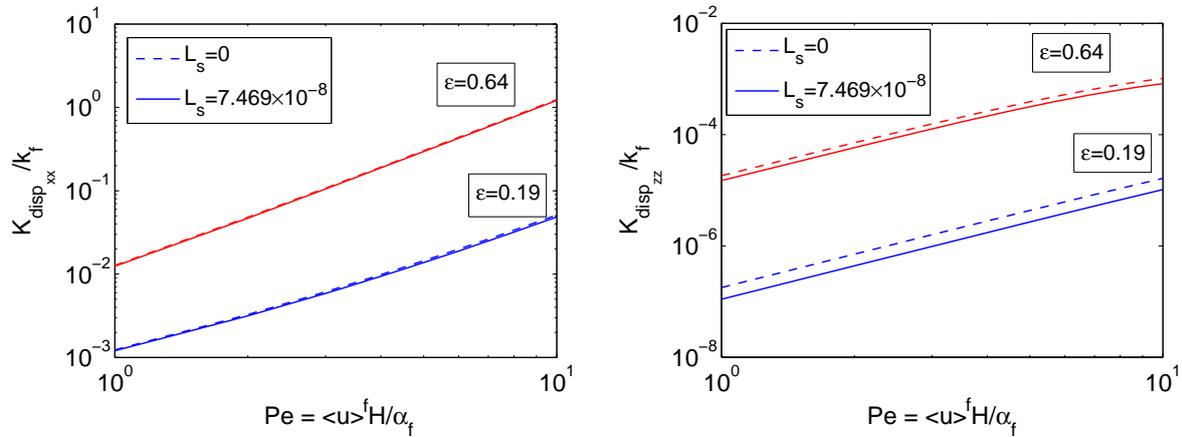


FIG.3 - Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du nombre de Péclet ($k_s/k_f=10$, $\alpha_g=0,9$).

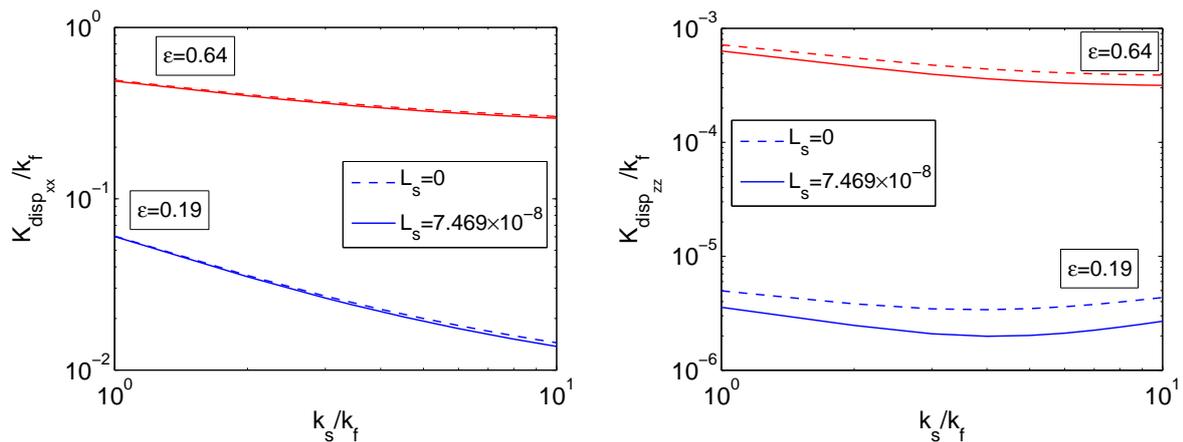


FIG.4 –Effet du glissement sur les dispersions longitudinale et transverse en fonction du rapport de conductivité ($Pe=5$, $\alpha_g=0,9$).

3.2 Etude de l'effet du glissement sur la perméabilité et la dispersion thermique en géométries 3D.

	$\epsilon=0,271$ (Kn=0,06)	$\epsilon=0,784$ (Kn=0,015)
K (m ²)	$1,80 \times 10^{-14}$	$1,51 \times 10^{-12}$
K _g ($\alpha_g=0,9$) (m ²)	$2,61 \times 10^{-14}$	$1,68 \times 10^{-12}$
K _g ($\alpha_g=0,8$) (m ²)	$2,78 \times 10^{-14}$	$1,72 \times 10^{-12}$

Tableau 2 : Effet du glissement sur la perméabilité en géométrie 3D pour des espacements entre blocs carrés de 1 μm et de 4 μm .

Les valeurs de la perméabilité (Tableau 2) pour des configurations 3D qui correspondent à la première et à la dernière colonne du tableau 1 montrent que la perméabilité est approximativement doublée et que l'effet du

glissement est plus important qu'en géométries 2D.

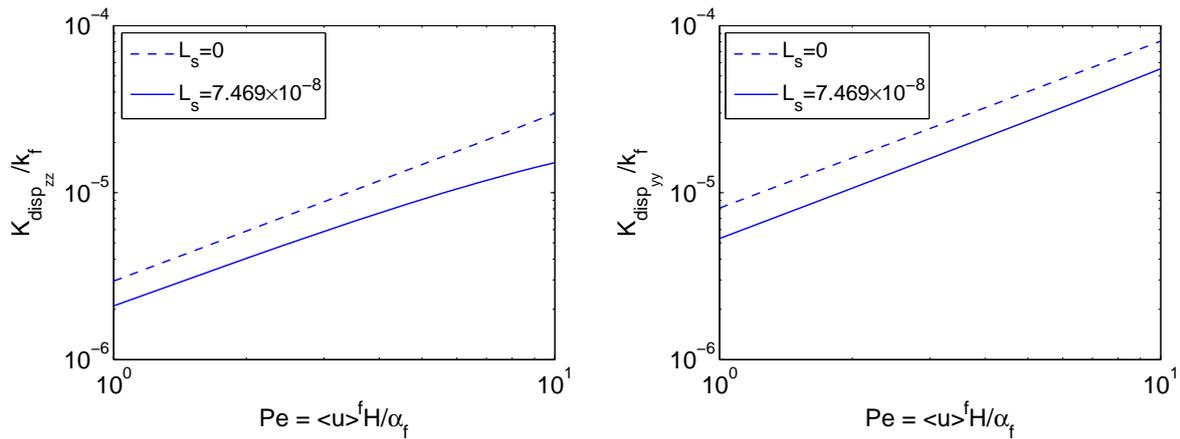


FIG.5 - Effet du glissement sur les dispersions transverses en fonction du nombre de Péclet ($\varepsilon = 0,271$, $k_s/k_f = 10$, $\alpha_g = 0,9$).

La figure 5 représente les variations des composantes transverses de la conductivité de dispersion en fonction du nombre de Péclet pour $k_s/k_f = 10$ et un espacement entre blocs solides de $1 \mu\text{m}$ ($\varepsilon = 0,271$). L'effet du glissement sur la dispersion longitudinale est similaire à celui observé en géométrie 2D. Il est aussi plus important sur les composantes transverses dont les valeurs diffèrent parce que les fluctuations des composantes de vitesse v' et w' sont sensiblement différentes.

4 Conclusion

A partir de simulations numériques à l'échelle locale d'écoulements d'air dans des milieux micro-poreux, on a déterminé la perméabilité et les composantes diagonales du tenseur de conductivité de dispersion en effectuant des moyennes spatiales dans un volume d'étude représentatif. Les résultats, obtenus pour des nombres de Péclet $1 \leq Pe \leq 10$ et des rapports de conductivités thermiques $1 \leq k_s/k_f \leq 10$, montrent que l'effet du glissement augmente lorsque la porosité diminue (ou lorsque le nombre de Knudsen augmente). La perméabilité est beaucoup plus sensible aux effets de glissement que la composante longitudinale de la conductivité de dispersion, les composantes transverses étant plus modifiées par le glissement mais beaucoup plus faibles que la conductivité du fluide, du moins pour les configurations géométriques.

Références

- [1] Vu T. L., Perrot C., Lauriat G., Bonnet G., Etude numérique de l'effet de glissement sur la perméabilité de milieux poreux formés par des réseaux périodiques de micro sphères, journées JEMP, 2010.
- [2] Arquis E., Caltagirone J.P., Le Breton P., Détermination des propriétés de dispersion d'un milieu périodique à partir de l'analyse locale des transferts thermiques, CRAS, t 313, Série II, 1087-1092, 1991
- [3] Kuwahara F., Nakayama, A., Koyama, H., A numerical study of thermal dispersion in porous media, ASME J. Heat Transfer, 118,756-761, 1996
- [4] Kuwahara F., Nakayama, A., Numerical determination of thermal dispersion coefficients using a periodic porous structure, ASME J. Heat Transfer, 121, 160-163, 1999
- [5] Moyne C., Didierjean S., Amaral Souto H.P., da Silveira O.T., Thermal dispersion in porous media: one-equation model, Int. J. Heat Mass Transfer, 43, 3853-3867, 2000
- [6] Testu A., Didierjean S., Maillot D., Moyne C., Metzger T., Niass T., Thermal dispersion for water or air flow through a bed of glass beads, Int. J. Heat Mass Transfer, 50, 1469-1484, 2007
- [7] Pedras M., de Lemos M., Thermal dispersion in porous media as a function of the solid-fluid conductivity ratio, Int. J. Heat Mass Transfer, 51, 5359-5367, 2008
- [8] Yang C., Nakayama, A., A synthesis of tortuosity and dispersion in effective thermal conductivity of porous media, Int. J. Heat Mass Transfer, 53, 3222-3230, 2010
- [9] Comsol multiphysics, User manual, version 3.5a, 2008