

N° d'ordre : 3646

THESE

présentée à

L'UNIVERSITE BORDEAUX 1

ECOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE
L'INGENIEUR

par

Samuel LETELLIER

pour obtenir le grade de

DOCTEUR

Spécialité : Mécanique

**DISPERSION A DEUX ET TROIS PHASES
DANS LE CADRE DE L'INGENIERIE
TISSULAIRE DU CARTILAGE**

Thèse dirigée par AHMADI-SENICHAULT Azita et LASSEUX Didier

Soutenue le 24 octobre 2008

Devant la commission d'examen formée de :

M.	VIGNOLES Gérard	Professeur, Laboratoire LCTS, Université Bordeaux 1, Bordeaux	Président
M.	BUES Michel	Professeur, Laboratoire LAEGO - Ecole de Géologie, Vandoeuvre-lès-Nancy	Rapporteur
M.	HULIN Jean-Pierre	Directeur de Recherche CNRS, Laboratoire FAST, Orsay	Rapporteur
Mme.	AHMADI Azita	Professeur, Laboratoire TREFLE, ENSAM, Bordeaux	Examinateur
M.	GOLFIER Fabrice	Maître de Conférence, Laboratoire LAEGO - Ecole de Géologie, Vandoeuvre-lès-Nancy	Examinateur
M.	LASSEUX Didier	Chargé de Recherche, Laboratoire TREFLE, ENSAM, Bordeaux	Examinateur

-2008-

Ce travail de thèse a été effectué au sein du laboratoire Interétablissement TREFLE situé dans les locaux de l'ENSAM Bordeaux. Il a été financé par le ministère de la Recherche et de l'Education.

Je tiens à remercier vivement Monsieur le Professeur Gérard Vignoles de m'avoir fait l'honneur de présider mon jury de thèse.

J'adresse mes profonds remerciements à Messieurs les Professeurs Michel Bues et Jean-Pierre Hulin pour avoir accepté de juger mon travail et pour le temps qu'ils y ont consacré.

Je tiens à remercier Monsieur Fabrice Golfier d'avoir participé à mon jury de thèse.

J'adresse toute ma reconnaissance à Azita Ahmadi-Sénichault et Didier Las-seux pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire et pour avoir dirigé ma thèse. Je les remercie de l'intérêt qu'ils ont pu porter à ce travail.

Pendant ces trois ans, bon nombre de collègues ont participé au bon déroulement (et dans la bonne humeur) de ce travail. En premier lieu, je veux remercier Bérengère Léger, ma plus fidèle collocatrice de bureau, de m'avoir supporter pendant les deux ans et quelques de notre collocation. Ce fût un réel plaisir de partager mon bureau (et quelques soirées) avec toi.

Je tiens aussi à remercier tous mes compagnons de thèse et de soirées Zoubir Acem, Matthieu Bamford, Jean-Luc Dauvergne, Jérôme Lopez, Vincent Morisson, Vincent Schick, Christophe Vallet. Tous les moments passés ensemble resteront à jamais graver dans ma mémoire tellement ils furent bon.

J'adresse aussi un grand merci aux Mexicains (Vladimir Canseco, David Luna, Sadoth Sandoval) pour le temps qu'ils ont passé avec moi à parler de nos pays respectifs. Un grand merci aussi à leur femme pour les délicieuses spécialités qu'elles ont pu préparer à diverses occasions.

Je souhaite apporter un remerciement tout particulier à Monsieur Yannick Anguy, dit "Mister A", pour les différents moments passés à discuter autour d'un café sur divers sujets (roller, pression capillaire, ski...).

Un grand merci à Sylviane Boya, Muriel Boré, Jean-Laurent Gardarein, Pascal Jolly, Frédéric Lapègue sans qui ces trois ans auraient certainement été plus tristes. Merci Sylviane pour les produits frais. Merci Fred pour toutes les réponses aux questions (parfois idiotes) que je t'ai posées pour des problèmes d'info.

Je tiens à dire un grand merci à toutes les personnes que j'ai pu cotoyer mais que je n'ai pas cité ci-dessus.

Enfin, je ne peux terminer ces remerciements sans parler de ma famille sans qui je ne serais pas là à l'heure actuelle. Je ne peux pas trouver les mots pour vous remercier tous (ici et dans l'au-delà) à la hauteur de la confiance et du soutien que vous m'avez apporté.

Table des matières

1	Introduction générale	3
1.1	Contexte	3
1.2	Le cartilage et les traitements chirurgicaux de ses lésions	4
1.3	Niveaux de description et changement d'échelle	9
1.4	Objectifs de ce travail	12
2	Modèle de transport réactif à trois phases	15
2.1	Modèle microscopique	16
2.2	Modèle macroscopique à une équation et fermeture	20
2.2.1	Forme adimensionnée	24
2.2.2	Reformulation de la fermeture et de la dispersion effective	27
2.3	Discrétisation et résolution	30
2.3.1	Partie diffusive	31
2.3.2	Partie convective	33
2.3.3	Traitement des interfaces	35
2.3.4	Résolution	39
3	Validation	41
3.1	Diffusion pure	41
3.1.1	Validation dans un cas de diffusion pure dans un système 2D à deux régions	41
3.1.2	Etude de cas 3D	43
3.2	Diffusion - réaction	48
3.2.1	Validation sur un cas 2D	48
3.2.2	Résultats obtenus pour des cas 3D	50
3.3	Dispersion passive	52
3.3.1	Cas analytique : Théorie de Taylor-Aris	52

3.3.2	Comparaison avec des résultats numériques	54
3.3.3	Dispersion passive en 3D	60
4	Dispersion passive : cas solide/fluide	63
4.1	Evolution du tenseur de dispersion avec le nombre de Péclet et la porosité (croissance homothétique).	66
4.1.1	Comportement en fonction de Pe	66
4.1.2	Comportement en fonction de la porosité	68
4.2	Discussion sur la dispersion effective	75
4.2.1	Partie diffusive	76
4.2.2	Partie hydrodynamique	81
4.3	Dépendance du tenseur de dispersion effective avec l'évolution par direction de la structure solide	90
5	Cas de la dispersion réactive en milieu triphasique	95
5.1	Influence du nombre de Péclet Pe et du nombre cinétique Ki	100
5.1.1	Composante longitudinale	100
5.1.2	Composante transversale	104
5.2	Influence des fractions volumiques sur \mathbf{D}_{Aeff}	107
5.3	Influence du couplage Pe et α_γ	110
5.3.1	D_{Aeff}^{xx}	110
5.3.2	D_{Aeff}^{yy}	114
5.4	Influence de la morphologie et de la distribution des phases solide (α) et cellulaire (γ)	114
5.4.1	Influence de la forme de l'inclusion	117
5.4.2	Influence de l'arrangement	122
5.5	Quelques résultats en 3D	125
5.5.1	Diffusion - Réaction	125
5.5.2	Résolution du problème complet en 3D	127
6	Conclusions et perspectives	129

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Contexte

Ce travail est à resituer dans le cadre du traitement de lésions cartilagineuses. Par an, il est estimé que plus d'un million de patients requièrent le traitement de cartilage endommagé aux Etats Unis [Langer and Vacanti, 1993, Obradovic et al., 2000, Yu et al., 2004] et plusieurs millions à travers le monde [Cancedda et al., 2003]. Le cartilage articulaire chez l'adulte n'a qu'une faible capacité d'auto-réparation après un traumatisme important. De ce fait, un cartilage articulaire endommagé ou lésé mène à une déficience progressive et une diminution de la qualité de vie [Risbud and Sittinger, 2002]. Ces lésions du cartilage sont le plus souvent induites par de l'ostéoarthrite, maladie squelettique la plus répandue. Les personnes les plus touchées par ce genre de dégénérescence du cartilage sont les personnes âgées de 65 ans et plus. Cependant, une forme plus commune de cette maladie est l'arthrite rhumatoïdale qui touche environ 1% de la population et plus particulièrement les patients âgés de 30 à 50 ans [Risbud and Sittinger, 2002]. Une technique particulièrement intéressante, car pouvant théoriquement fournir tous les types de cartilage nécessaires, est l'ingénierie tissulaire, le cadre plus restreint de notre étude. Cependant, et bien que cette technique soit largement utilisée pour le traitement des brûlures de la peau, son utilisation est en pleine expansion [Hardouin et al., 2000] pour des applications à d'autres organes ou tissus tels que les valves cardiaques, le foie ou, dans notre cas, le cartilage.

1.2 Le cartilage et les traitements chirurgicaux de ses lésions

D'un point de vue fonctionnelle, le cartilage joue deux rôles primordiaux au sein de l'organisme. Tout d'abord, au niveau des articulations, le cartilage contribue à diminuer les forces de friction lors du déplacement de segments osseux, ce qui lui impose d'avoir une consistance dure. Son second rôle est de transmettre, répartir et amortir les contraintes subies par l'articulation. Ceci n'est possible que grâce à sa non-minéralisation qui lui confère une certaine flexibilité. Le cartilage est principalement composé de trois éléments : des cellules (ou chondrocytes), des fibres (collagène et élastique) et une substance de maintien (glycosaminoglycanes principalement). Ces deux derniers constituants forment la Matrice Extra-Cellulaire (ou MEC). La proportion de chaque élément donne des propriétés particulières à ce tissu. Trois types de cartilage sont alors identifiables. Le cartilage hyalin (Fig. 1.1 a), qui se retrouve au niveau du cartilage de conjugaison et articulaire par exemple, présente une MEC à l'aspect amorphe et homogène ainsi qu'une densité cellulaire relativement faible. Le cartilage élastique (Fig. 1.1 b) se distingue par la présence de nombreuses fibres élastiques et une densité importante en cellules, ce qui lui vaut d'être situé là où une flexibilité est requise (comme le nez, le pavillon de l'oreille ou les trompes d'Eustache). Le dernier type de cartilage que l'on peut rencontrer dans un organisme humain est le cartilage fibreux (Fig. 1.1 c) qui se caractérise par des faisceaux épais de fibres de collagène. Ce dernier type de cartilage ne se retrouve qu'au niveau du système ostéo-articulaire, et forme, entre autres, les disques intervertébraux et les ménisques du genou.

Le faible pouvoir de régénération du cartilage peut être expliqué par deux raisons. Tout d'abord, les chondrocytes sont issus de la spécialisation de cellules souches dites mésenchymateuses. Au cours de cette différenciation, les cellules passent par divers stades qui leurs confèrent des capacités plus ou moins réduites à la multiplication et à la régénération. Au stade de chondrocyte dans un cartilage articulaire mature, Rothwell and Bentley [1973] ont rapporté une faible capacité à la division de ce type de cellule. Ces mêmes auteurs, et en se basant sur les travaux de Mankin [1964], précisent que la probabilité d'observer des cellules en mitose (c'est-à-dire en cours de multiplication) sur une lame mince de cartilage articulaire est proche de zéro. A cause de ce faible pouvoir de mul-

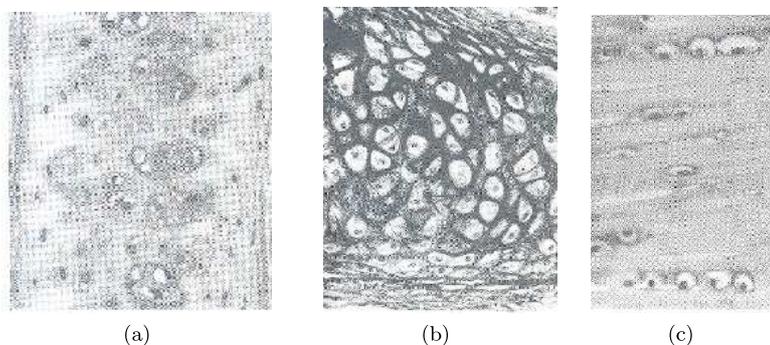


FIG. 1.1: Les différents types de cartilage que l'on peut rencontrer dans un organisme humain. **a)** Cartilage hyalin **b)** Cartilage élastique **c)** Cartilage fibreux (ou fibrocartilage). Extrait de Leeson et al. [1985].

tiplication des chondrocytes, le cartilage articulaire n'a qu'une faible capacité à se régénérer en cas de lésion importante, seul le métabolisme des chondrocytes s'intensifie sans toutefois parvenir à reformer une surface totalement normale. Une autre raison induisant un faible pouvoir de multiplication est que ce tissu est dépourvu de vascularisation [Galois et al., 2005], impliquant un apport en nutriment uniquement par diffusion à travers la matrice à partir des capillaires du périchondre¹.

Dans le but de traiter les lésions cartilagineuses, des efforts en chirurgie thérapeutique ont été faits. Plus exactement, des techniques médicales pour aider le tissu à recouvrer sa pleine fonctionnalité ont été développées, telles que la microfracturation, la mosaïcoplastie, la transplantation de chondrocytes autologues ou l'ingénierie tissulaire. La technique de la *microfracturation* (proposée par Steadman en 1988 [Versier and Bures, 2002]) consiste en la stimulation de la formation de fibrocartilage induite par la perforation de la zone lésée [Cancedda et al., 2003]. L'objectif est de faire migrer les cellules mésenchymateuses dans la lésion en vue de la formation d'un fibrocartilage de bonne tenue voire vers un tissu proche du cartilage hyalin [Bahuaud et al., 2002]. L'inconvénient majeur de cette dernière technique réside dans le type de cartilage produit (fibrocartilage au lieu d'un cartilage hyalin). Dans le cas où seul le cartilage hyalin est souhaité, deux techniques peuvent être pratiquées : la *mosaïcoplastie* et la *transplantation de chondrocytes autologues*, la première étant plus invasive que la seconde. Le

¹Le périchondre est un tissu conjonctif dense et régulier, bien vascularisé, entourant la surface des substances cartilagineuses, exceptées les surfaces articulaires.

principe de la *mosaïcoplastie* (décrite par Matusue en 1993) est de combler la perte de substance à l'aide de greffons cylindriques pris aux dépens de zones articulaires non portantes [Versier and Bures, 2002] (voir Fig. 1.2).

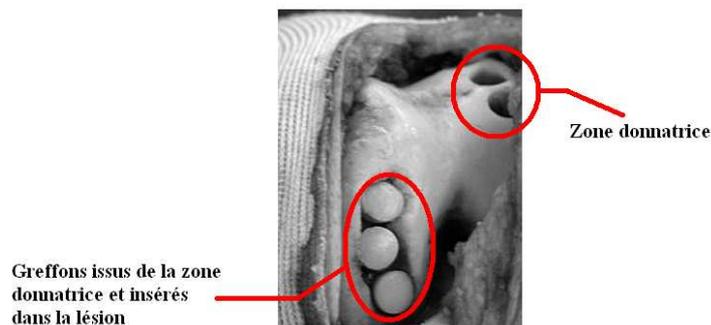


FIG. 1.2: Traitement par mosaïcoplastie d'une volumineuse lésion du condyle médial du genou chez un patient de 44 ans. Extrait de Galois et al. [2005].

La *transplantation de chondrocytes autologues* (mise au point par l'équipe de Peterson et Brittberg en 1987 [Versier and Bures, 2002]), quant à elle, se divise en plusieurs étapes : biopsie et isolement de cellules saines, culture unicouche et ré-injection sous un patch de périoste autologue. Les cellules saines cultivées sont injectées sous un fin patch de périoste (suture et hermétiquement étanchéifié) prélevé dans une partie saine de l'os. Un inconvénient de cette technique est la possibilité de fuite des cellules injectées sous le patch en cas de mauvaise suture ou de mauvaise étanchéité induisant une propagation des chondrocytes aux alentours de la lésion.

Enfin, une technique utilisée depuis longtemps pour le traitement des brûlures (fin des années 1970 et dans les années 1980 [Langer, 2000]) mais récemment utilisée pour d'autres tissus et organes est l'*ingénierie tissulaire* [Hardouin et al., 2000]. Le principe de cette technique est de prélever (par biopsie, comme la greffe de chondrocytes autologues) des cellules saines en grand nombre et de les ensemercer sur un support (fibreuse ou spongieux, de nature protéique, saccharidique ou synthétique). Enfin, l'ensemble (support + cellules) est immergé dans un bioréacteur contenant un milieu de culture composé, entre autres, de substances nutritives. La Fig. 1.3 explicite le schéma de principe de cette technique biomédicale.

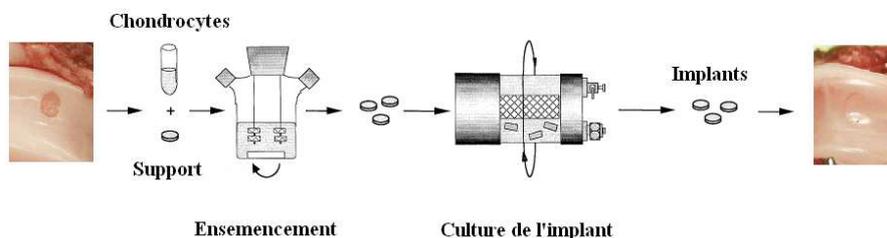


FIG. 1.3: Schéma de principe de l'ingénierie tissulaire. Extrait de [Obradovic et al., 2001].

Les cellules utilisées sont principalement des chondrocytes sains issus du patient lui-même. Cependant, d'autres cellules peuvent être envisagées, telles que des cellules issues du péri-chondre ou des cellules souches mésenchymateuses [Galois et al., 2005, Nestic et al., 2006]. L'inconvénient présenté par l'utilisation des cellules issues du péri-chondre est une décroissance cellulaire continue au fil du temps [Galois et al., 2005]. Les cellules souches mésenchymateuses sont des cellules progénitrices qui s'auto-renouvellent et qui ont le potentiel de se différencier en tissu d'origine mésenchymateuse (ténocyte, ostéocyte, chondrocyte...) [Rahaman and Mao, 2005]. Elles présentent aussi l'avantage de pouvoir être extraites de différents tissus (ou organes) adultes facilement accessibles telles que la moëlle osseuse, le tissu adipeux, la pulpe des dents... [Rahaman and Mao, 2005]. En ce qui concerne le support de culture, il doit répondre à un cahier des charges assez contraignant. Ainsi, il doit : i) être hautement poreux afin de faciliter la prolifération des cellules, ii) être constitué de matériau(x) parfaitement biocompatible(s) et biodégradable(s) et iii) avoir des propriétés mécaniques suffisantes pour supporter la différenciation cellulaire et la production de matrice [Nestic et al., 2006]. Il doit également autoriser les phénomènes d'adhésion et de bio-interaction (interaction néotissu-tissu natif) [Galois et al., 2005]. Dans ce travail, nous considérons un support fibreux (diamètre des fibres de l'ordre de la dizaine de micromètres [Mahmoudifar and Doran, 2005]) d'acide polyglycolique (PGA) tel que présenté sur la Fig. 1.4. En constituant le support avec ce type de matériau, on obtient une porosité de l'ordre de 95% [Lasseux et al., 2004, Croll et al., 2005]. Ce matériau est utilisé depuis très longtemps en chirurgie, puisqu'employé pour la confection des fils de suture.

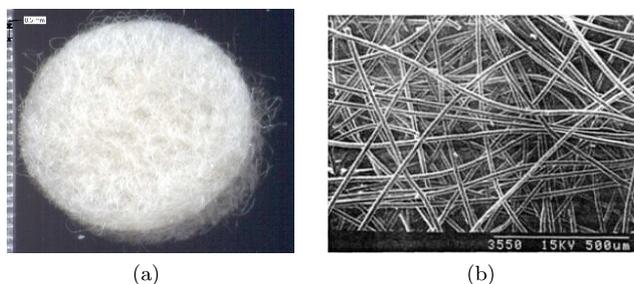


FIG. 1.4: Photographie du type de matelas fibreux considéré dans ce travail. **a)** Matelas entier, **b)** Vue en microscopie électronique (diamètre des fibres de l'ordre de $10 \mu m$).

Le dernier élément utilisé par cette technique biomédicale est le bioréacteur. Un réacteur, au sens Génie des Procédés, correspond à une cuve contenant un milieu réactionnel. Dans notre étude, le milieu réactionnel est un milieu de culture constitué principalement d'eau, de nutriments et de facteurs de croissance (si nécessaire) dans lequel est immergé l'implant. Deux types de bioréacteur sont envisageables : les réacteurs statiques (e.g., boîte de Pétri) et les réacteurs agités (e.g., cuve parfaitement agitée, cuve à paroi tournante...). Vunjak-Novakovic et al. [1996] ont démontré l'importance du mélange dans la forme et la composition de l'implant de cartilage conçu. Ils conclurent que non seulement la forme et la taille de l'implant était fortement influencé par le mélange (Fig. 1.5) mais aussi que la composition en glycosaminoglycanes et en collagène du néo-cartilage était améliorée. C'est pourquoi dans l'étude présentée ici, nous considérons un réacteur agité.

Bien que l'hydrodynamique autour et à l'intérieur du support semble être d'une grande importance [Elias et al., 1995, Heath and Magari, 1996, Martin et al., 2000, Obradovic et al., 2000, Temenoff and Mikos, 2000], il a été montré que le transfert de matière fortement couplé à l'hydrodynamique joue aussi un rôle clé dans le développement cellulaire. En effet, Freed et al. [1994] indiquent que, lors de cultures statiques, la vitesse de croissance des chondrocytes est diminuée soit par l'épaisseur, soit par la densité cellulaire de l'implant. Afin de confirmer cette réflexion, ces auteurs ont effectué une comparaison avec une culture pratiquée en réacteur parfaitement agité. Ces expériences ont démontré que dans des

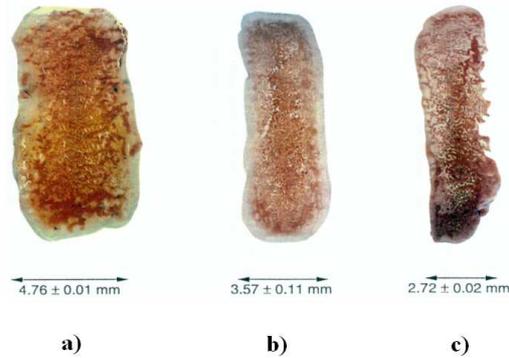


FIG. 1.5: Influence du mélange sur la forme et la taille d'implants de 8 semaines. **a)** Mélange turbulent, **b)** Boîte de Pétri mélangée orbitalement, **c)** Boîte de Pétri statique. Extrait de Vunjak-Novakovic et al. [1996].

conditions dynamiques, un implant de 1 cm de diamètre et de 0.3 cm d'épaisseur pouvait être maintenu pendant 7 semaines alors qu'en conditions statiques, la croissance cellulaire cesse au bout de 3-4 semaines. De plus, une différence était aussi observable quant à la densité cellulaire de l'implant obtenu.

Du fait que le transfert de matière joue un rôle non négligeable d'une part sur la croissance cellulaire et d'autre part sur la qualité de l'implant, il est intéressant de bien comprendre les phénomènes favorisant ce transfert. A l'échelle du pore, échelle à laquelle se déroulent les phénomènes, il est difficile (voire impossible) de mesurer les champs de concentration, de vitesse... Seules les quantités macroscopiques (concentrations macroscopiques, propriétés macroscopiques de l'implant...) sont mesurables. On a donc besoin de modéliser à l'échelle microscopique et faire le lien entre la physique à cette échelle et les propriétés macroscopiques observables à travers un changement d'échelle. C'est dans cette optique que Lasseux et al. [2004] ont développé un modèle macroscopique en utilisant la méthode de la prise de moyenne volumique. Cette technique de changement d'échelle fait appel à différents niveaux de description des phénomènes qui font l'objet de la section suivante.

1.3 Niveaux de description et changement d'échelle

D'un point de vue modélisation, on distingue souvent trois échelles de description Quintard and Whitaker [1987] : l'échelle *microscopique* (ou échelle du

pore), l'échelle *locale* (ou premier niveau de description macroscopique associé à l'échelle du laboratoire) et les grandes échelles (Fig. 1.6). Dans ce travail, nous considérons deux échelles : l'échelle *microscopique* (ou encore appelée échelle du *pore*) et l'échelle *locale* (que l'on qualifera de *macroscopique* dans ce document).

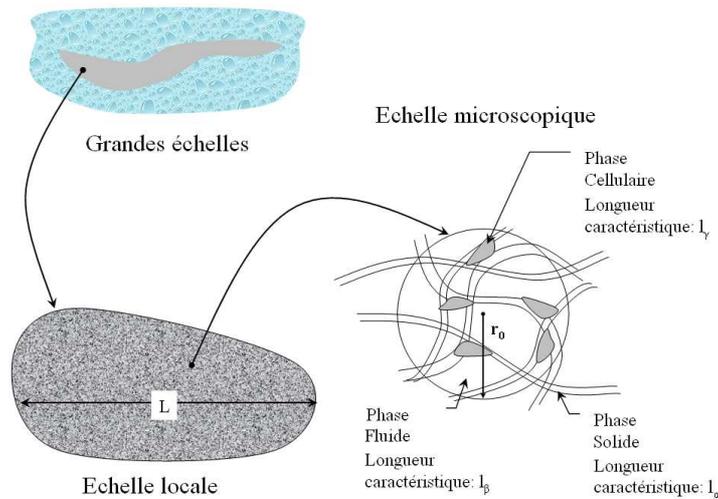


FIG. 1.6: Illustration schématique des trois niveaux de description génériques.

A l'échelle *microscopique*, le milieu est discret, c'est-à-dire hétérogène (dans notre cas, composé des phases cellulaire, fluide et solide), chaque phase occupant de manière exclusive une partie de l'espace. A cette échelle, les processus sont décrits de façon précise par les équations de la mécanique des milieux continus. Cependant, une description à cette échelle ne peut être utilisée dans la pratique car trop détaillée et complexe, l'expérimentateur ne pouvant mesurer de données à cette échelle. Les longueurs caractéristiques admises à cette échelle sont les longueurs de chaque phase identifiable (l_α pour la phase solide, l_β pour la phase fluide et l_γ pour la phase cellulaire).

L'échelle *locale* est associée à un premier niveau de description macroscopique compatible avec notre capacité à mesurer (et observer) les phénomènes. Cette échelle correspond à l'échelle de l'échantillon du laboratoire. A cette échelle, le système réel est remplacé par un milieu modèle "fictif" où chaque phase est modélisée comme un *continuum* remplissant le système dans son entier

[Bear et al., 1993]. Avec l'introduction de ce niveau de description, la connaissance détaillée des interfaces microscopiques n'est plus nécessaires. Néanmoins, les effets de la configuration de ces interfaces sont toujours présents dans les expressions des coefficients de transport macroscopiques (comme dans le tenseur de dispersion par exemple). A cette échelle, les phénomènes physiques sont décrits en termes de valeurs moyennes, mesurables et associées à un *Volume Élémentaire Représentatif V* (VER) [Bear et al., 1993].

Enfin, aux *grandes échelles*, le milieu est hétérogène et inclut plusieurs éléments qui localement peuvent être considérés comme homogènes. La description des phénomènes intègrent les effets des hétérogénéités existant aux échelles inférieures.

Une notion introduite ci-dessus et qui mérite quelques explications est la notion de VER. Un VER est un volume qui, quelque soit l'endroit où il se situe dans le milieu poreux, contient toujours une phase solide persistante (ou matrice solide) et un espace "vide" (occupé par d'autres phases que la phase solide). Afin que le Volume Élémentaire puisse être qualifié de Représentatif, la taille r_0 doit être [Bear et al., 1993] :

1. beaucoup plus grande que les longueurs caractéristiques des différentes phases composant le milieu poreux (soit $l_\alpha, l_\beta, l_\gamma$ dans notre cas) ;
2. mais beaucoup plus petite que la longueur caractéristique du système étudié L .

Ceci se traduit, en utilisant la notation indiquée sur la Fig. , par :

$$l_\alpha, l_\beta, l_\gamma \ll r_0 \ll L \tag{1.1}$$

La compréhension des processus mis en jeu à l'échelle du pore, l'identification des paramètres structuraux microscopiques pertinents et l'intégration de cette information dans les modèles macroscopiques définis aux échelles supérieures permettent une meilleure modélisation à l'échelle locale et aux grandes échelles, échelles d'intérêt pour le praticien. Afin d'obtenir un modèle macroscopique en partant d'une description microscopique du système, un changement d'échelle doit donc être effectué. Pour cela, deux grandes familles existent : les méthodes probabilistes et les méthodes déterministes. Dans ce travail, nous ne considérons que le changement d'échelle effectué à l'aide de la prise de moyenne volumique [Marle, 1967, Slattery, 1967, Whitaker, 1999] qui est une méthode déterministe. Son principe est de moyenniser les équations à l'échelle inférieure sur un volume

de prise de moyenne (ou Volume Élémentaire Représentatif), ce qui permet de déterminer les équations et de calculer les coefficients à l'échelle supérieure.

1.4 Objectifs de ce travail

Dans la littérature, des modèles physiques décrivant le processus de croissance biologique ont déjà été proposés, dans le cadre de biofilms [Ochoa et al., 1986, Ochoa, 1988, Wood and Whitaker, 1998, 1999, 2000, Wood et al., 2001, 2002b], ou dans le cadre de l'ingénierie tissulaire du cartilage [Galban and Locke, 1999a,b, Lasseux et al., 2004]. Tous ces modèles, à l'exception de celui de [Wood et al., 2002] et de [Lasseux et al., 2004], ne considèrent que deux phases : une phase fluide et une phase cellulaire. L'échelle de description étant celle de la cellule, seules les cellules et le fluide intercellulaire ne sont observables (Fig. 1.7).

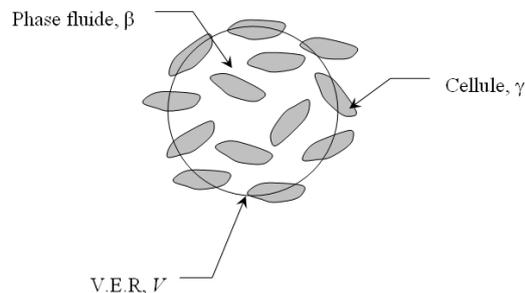


FIG. 1.7: Composition du V.E.R dans la plupart des modèles cités, hormis pour [Wood et al., 2002] et [Lasseux et al., 2004].

De plus, ces modèles ne prennent pas en compte la convection. Dans Wood et al. [2002] et Lasseux et al. [2004], la phase solide et la convection intervenant dans la phase fluide sont toutes deux considérées. Malgré les similitudes qui peuvent exister entre les modèles de ces deux références, quelques différences subsistent au niveau du terme réactif, de l'interface cellule/fluide ainsi que dans le problème de fermeture. Wood et al. [2002] pour développer leur modèle ont, tout d'abord, considéré une cinétique de réaction pour les nutriments de type Michaelis-Menten avec interaction du produit du métabolisme. Ensuite,

une condition d'équilibre a été préservé à l'interface cellule/fluide, cette dernière menant alors à une expression du type $c_{A\gamma} = K_{Aeq}c_{A\beta}$. Enfin, Wood et al. [2002] n'ont pas présenté le problème de fermeture nécessaire à la détermination du tenseur de dispersion effective. Cependant, la référence aux travaux de Whitaker [1986] laisse sous-entendre que dans le problème de fermeture associé à leur modèle, le terme réactif est négligé (comme l'ont fait Ochoa et al. [1986], Ochoa [1988] ou Wood and Whitaker [1998] par exemple), menant ainsi à la résolution du problème classique de diffusion/convection. Bien que l'utilisation d'une cinétique du premier ordre semble simpliste d'un point de vue biologique, Lasseux et al. [2004] ont gardé une certaine généralité dans leur modèle en imposant une condition de non-équilibre au niveau de l'interface cellule/fluide. De plus, le problème de fermeture qui en résulte conserve le terme réactif, ce qui mène à la détermination d'un tenseur de dispersion effective en prenant en compte tous les phénomènes (et toutes les phases) présentes à l'échelle microscopique.

L'étude présentée ici se base sur le modèle développé par Lasseux et al. [2004] et se divise en quatre chapitres :

Dans le **chapitre 2**, les équations microscopiques sont rappelées, ainsi que le modèle macroscopique et les problèmes de fermeture associés. Dans un même temps, les définitions et contraintes principales imposées par et lors du changement d'échelle sont exposées. Nous montrons également comment ce modèle a été adimensionné et que le tenseur de dispersion effective (fonction explicite de variables de fermeture) peut être exprimé sous une forme plus attrayante pour sa discrétisation numérique. Le problème de fermeture dans sa forme continue ne peut être numérisé, c'est pourquoi nous exposons la discrétisation de ce problème à l'aide de la méthode de Volumes Finis, ainsi que la méthodologie suivie pour le traitement des conditions aux limites.

Le **chapitre 3** est, quant à lui, dédié à la validation de l'outil numérique réalisé pour la résolution des problèmes de fermeture et la détermination des propriétés macroscopiques. Cette validation est effectuée pour des configurations que l'on peut qualifier de "sous-classes" du problème plus général présenté ici. Plus particulièrement, des problèmes de diffusion pure, de diffusion-réaction et de diffusion-convection sont étudiés, nos résultats étant confrontés à des données disponibles dans la littérature. On peut d'ores et déjà indiquer ici que nous exposons, dans ce chapitre, des résultats pour des configurations 2D et 3D.

Dans le **chapitre 4**, il est question de la dispersion passive (n'impliquant pas réaction) dans un milieu poreux inerte. Plus précisément, une première discussion est faite en ce qui concerne une expansion homothétique de la phase solide.

Ainsi, nous montrons qu'à l'aide de l'ensemble de simulations présentées dans ce cas, il est possible de déterminer des paramètres liés au milieu poreux tels que la tortuosité ou les dispersivités (longitudinale et transversale). Dans un second temps, la phase solide est étendue de deux manières différentes afin d'analyser le comportement de la dispersion effective vis-à-vis de la microstructure du milieu poreux.

Enfin, le **chapitre 5** est consacré à l'analyse de l'effet des différents paramètres apparaissant dans le modèle macroscopique sur la dispersion effective. De plus, la morphologie de l'ensemble (cellules + solide) et sa distribution sont étudiées afin de savoir quelle configuration permet de maximiser la dispersion macroscopique, gage de meilleur qualité de l'implant de cartilage obtenu [Freed et al., 1994].

Le dernier chapitre de ce document est dédié aux conclusions et aux perspectives liées à ce travail.

Chapitre 2

Modèle de transport réactif à trois phases

Afin de prédire l'évolution de la concentration en nutriment au cours du temps, sans réaliser d'expérience, les phénomènes physiques sont modélisés. Cette modélisation est d'autant plus fine que l'échelle à laquelle sont décrits les phénomènes est petite. Cependant, il nous est impossible de mesurer l'évolution de la concentration en nutriment dans une cellule ou dans la matrice extra-cellulaire, seule la concentration dans le fluide de culture est facilement connue. Afin de développer un modèle prédisant l'évolution de la concentration d'un nutriment au cours du temps à une échelle mesurable, les équations données à la micro-échelle doivent être *macroscopisées*. En effectuant ce changement d'échelle (réalisé ici à l'aide de la prise de moyenne volumique), l'évolution de la concentration peut alors être vue comme la signature des phénomènes intervenant à une échelle plus petite. De ce fait, procéder à un changement d'échelle permet de rendre compte des interactions entre les paramètres microscopiques (diffusion microscopique, microgéométrie,...) et les coefficients macroscopiques.

Après avoir rappelé le modèle microscopique à l'échelle du pore décrit par Lasseux et al. [2004], le modèle macroscopique et le problème de fermeture résultant de l'application de la méthode de la prise de moyenne volumique ainsi que les contraintes et définitions principales impliquées sont présentés. Afin de rendre l'emploi de l'outil numérique réalisé dans ce travail aussi général que possible (en vue d'utilisations possibles dans d'autres domaines que l'ingénierie tissulaire), le modèle macroscopique et le problème de fermeture sont adimensionnés. Dans

un même temps, le problème de fermeture et le tenseur de dispersion sont reformulés faisant ainsi disparaître les termes intégrô-différentiels des équations. Les problèmes de fermeture étant continus, une discrétisation est alors nécessaire. La méthode des Volumes Finis (méthode bien adaptée aux équations de conservation) est alors appliquée. Enfin, nous montrons la méthodologie suivie afin de déterminer les approximations des différentes dérivées partielles résultantes de la discrétisation des termes de diffusion aux différentes interfaces.

2.1 Modèle microscopique

L'échelle de départ utilisée par Lasseux et al. [2004] est l'échelle du pore (ou de la fibre du matelas fibreux support de culture), échelle à laquelle trois phases sont identifiables (Fig. 2.1) : une phase fluide, notée β , une phase solide (supposée ici inerte), notée α , et une phase "cellulaire" (constituée de choncocytes et de Matrice Extra-Cellulaire, MEC), notée γ .

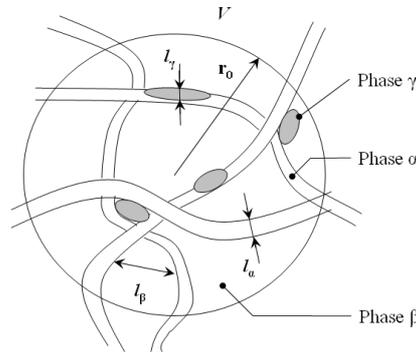


FIG. 2.1: Schématisation du volume de prise de moyenne constitué de trois phases : la phase cellulaire γ , la phase fluide β et la phase solide α . Sont aussi représentées les longueurs caractéristiques de chaque phase (l_γ , l_β , l_α pour les phases cellulaire, fluide et solide respectivement). r_0 et V correspondent, respectivement, au rayon et au volume de prise de moyenne.

La phase α est considérée ici comme une phase rigide et imperméable, tandis que la phase β est, quant à elle, considérée comme un liquide Newtonien incompressible. Ce dernier contient les nutriments (notés A dans ce document)

et les produits du métabolisme cellulaire qui sont transportés à l'aide de deux phénomènes : un transport diffusif (rencontré dans la phase fluide et la phase cellulaire) et un transport convectif (uniquement dans la phase fluide). Enfin, les nutriments introduits dans la phase fluide β sont métabolisés dans la phase cellulaire en considérant un cinétique de réaction du premier ordre. Les bilans de masse prenant en compte ces phénomènes pour les nutriments dans les phases cellulaire et fluide s'écrivent respectivement :

$$\frac{\partial c_{A\gamma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma}) - k_A c_{A\gamma} \text{ dans } V_\gamma \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{A\beta} \nabla c_{A\beta}) - \nabla \cdot (c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta) \text{ dans } V_\beta \quad (2.2)$$

où $\frac{\partial c_{A\eta}}{\partial t}$ représente l'accumulation (ou variation temporelle) de la concentration en nutriment dans la phase η , $\nabla \cdot (D_{A\beta} \nabla c_{A\beta})$ et $\nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma})$ la diffusion de A dans la phase fluide et dans la phase cellulaire respectivement, $k_A c_{A\gamma}$ le terme de réaction du premier ordre qui a lieu dans la phase cellulaire et $\nabla \cdot (c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta)$ le transport convectif se produisant dans la phase fluide du fait que l'on considère ici un réacteur dynamique. La phase cellulaire γ est traitée comme un *continuum*, c'est-à-dire comme une phase continue. Bien que l'on tienne pas compte de l'individualité des cellules, la phase "cellulaire" n'est pas continue et forme des amas ou des couches sur la phase solide. Les coefficients de ce *continuum* peuvent être considérées comme issus d'un changement d'échelle antérieur ayant pour point de départ l'échelle des cellules, échelle à laquelle la phase γ peut être vue comme un système multiphasique. C'est pourquoi un tenseur (et non un scalaire) de diffusion ($\mathbf{D}_{A\gamma}$) est introduit. Pour plus de détail sur ce premier changement d'échelle, nous invitons le lecteur à prendre connaissance des travaux, entre autres, de Wood and Whitaker [1998] et Wood et al. [2002b]. L'attention du lecteur est attirée sur le fait que l'hypothèse d'une réaction du premier ordre dans la phase cellulaire ($r_A = k_A c_{A\gamma}$) peut être considérée comme un cas particulier de la cinétique de Michaelis-Menten (Eq. (2.3)), cinétique couramment employée en microbiologie. Pour cette cinétique, ce terme réactif s'écrit :

$$r_A = \frac{k_{max} c_{A\gamma}}{K_{MM} + c_{A\gamma}} \quad (2.3)$$

où k_{max} est la constante de vitesse maximale de réaction (obtenue à l'état saturé en substrat) [$mol.m^{-3}.s^{-1}$] et K_{MM} est la constante de demi-saturation (ou concentration en substrat pour laquelle la vitesse initiale de la réaction est égale

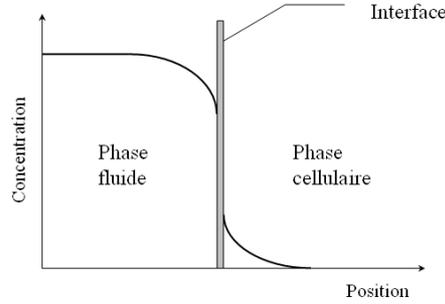


FIG. 2.2: Evolution de la concentration au niveau de l'interface cellule/fluide sous l'hypothèse de non-équilibre massique. Extrait et adapté de ?.

à la moitié de la vitesse initiale maximale) [$mol.m^{-3}$]. Si on fait l'hypothèse que $c_{A\gamma} \ll K_{MM}$, alors on obtient une cinétique du premier ordre où $k_A = \frac{k_{max}}{K_{MM}}$ devient une constante de réaction apparente (de dimension s^{-1}).

Afin de compléter cette description microscopique, les phénomènes ayant lieu aux différentes interfaces doivent être identifiés et formulés, fournissant ainsi les conditions aux limites nécessaires à l'écriture d'un problème fermé.

La phase solide étant considérée, ici, comme inerte et imperméable, les conditions aux limites se traduisent par un flux de matière nul aux interfaces cellule/solide et fluide/solide et sont alors données par :

$$-\mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma} = 0 \text{ sur } A_{\alpha\gamma} \quad (2.4)$$

$$-\mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot D_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = 0 \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (2.5)$$

où $\mathbf{n}_{\eta\pi} = -\mathbf{n}_{\pi\eta}$ représente le vecteur normal unitaire sortant de la phase η vers la phase π [-]. Cette convention est conservée dans l'ensemble de ce travail.

En ce qui concerne les conditions aux limites pour l'interface cellule/fluide, la conservation de la matière à travers cette interface impose la continuité des flux diffusifs, ce qui se traduit par l'égalité donnée par l'Eq. (2.6).

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot D_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = -\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma} \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (2.6)$$

Ensuite deux possibilités se présentent au niveau de cette interface : l'équilibre ou le non-équilibre massique. Contrairement à Wood et al. [2002] et dans

le but de garder une certaine généralité dans le modèle, Lasseux et al. [2004] ont imposé une condition de non-équilibre (comme indiqué par Ochoa [1988] et schématisé sur la Fig. 2.2) qui se traduit par :

$$-\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma} = \alpha_A (c_{A\gamma} - K_{Aeq} c_{A\beta}) \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (2.7)$$

où α_A est le coefficient de transfert de matière interfacial [$m.s^{-1}$] et K_{Aeq} le coefficient de partition entre la phase γ et la phase β [-]. Dans cette dernière relation, il a été supposé que le flux dépend linéairement de la force motrice $c_{A\gamma} - K_{Aeq} c_{A\beta}$. Cependant, une certaine généralité a été conservée en laissant α_A prendre n'importe quelle valeur. Ce faisant, le transfert au niveau de cette interface peut être considéré comme limité soit par le transfert de masse dans le volume, soit par le transfert de masse à travers l'interface elle-même (ou tout comportement se situant entre ces deux extrêmes). On peut remarquer que si α_A est infiniment grand, cette condition à la frontière se réduit à

$$c_{A\gamma} = K_{Aeq} c_{A\beta} \text{ sur } A_{\beta\gamma}$$

correspondant ainsi à la relation à l'équilibre massique (cf. travaux de Wood et al. [2002]).

Afin de compléter le problème aux limites, des conditions doivent être écrites concernant les entrées et sorties du volume de prise de moyenne représenté sur la Fig. 2.1. On peut alors imposer des concentrations d'entrée et de sortie aux interfaces désignées par $A_{\gamma e}$ et $A_{\beta e}$, telles que :

$$c_{A\gamma} = c_{A\gamma}^e \text{ sur } A_{\gamma e} \text{ et } c_{A\beta} = c_{A\beta}^e \text{ sur } A_{\beta e} \quad (2.8)$$

Enfin, on impose aussi des conditions initiales telles que :

$$c_{A\gamma} = c_{A\gamma}^0 \text{ et } c_{A\beta} = c_{A\beta}^0 \text{ à } t = 0 \quad (2.9)$$

Pour compléter ce modèle microscopique, un système d'équations similaire est obtenu pour les produits du métabolisme cellulaire, au signe près concernant le terme de réaction.

Dans la modèle présenté ci-dessus, on note, dans l'Eq. (2.2), la présence d'un terme de vitesse dans la phase fluide : \mathbf{v}_β . Ce terme correspond à la vitesse locale donnée par un problème aux limites additionnel pour la conservation totale de masse et de quantité de mouvement dont les équations peuvent être découplées des équations de conservation de la masse de l'espèce A en supposant que la

viscosité et la masse volumique dans cette phase restent constantes. Ainsi, ce problème peut être décrit par le modèle classique de Navier-Stokes.

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0 \text{ dans } V_\beta \quad (2.10)$$

$$\rho_\beta \frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} + \rho_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta = -\nabla p_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta \text{ dans } V_\beta \quad (2.11)$$

$$\text{B.C.1}' : -\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\beta = 0 \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (2.12)$$

$$\text{B.C.2}' : -\mathbf{n}_{\beta\alpha} \cdot \mathbf{v}_\beta = 0 \text{ sur } A_{\beta\alpha} \quad (2.13)$$

Plus précisément, dans ce travail, le modèle de Stokes a été considéré, modèle menant à la loi de Darcy (Eq. (2.14)) après lui avoir appliqué un changement d'échelle [Whitaker, 1986].

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle = -\frac{\mathbf{K}}{\mu_\beta} \cdot [\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \rho_\beta \mathbf{g}] \quad (2.14)$$

où $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle$ est la moyenne superficielle de la vitesse du fluide β [$m.s^{-1}$] (cette moyenne est définie un peu plus loin dans ce document), μ_β la viscosité dynamique de la phase β [$Pa.s$], ρ_β sa masse volumique [$kg.m^{-3}$], $\langle p_\beta \rangle^\beta$ la pression moyenne interstitielle dans la phase β [Pa], \mathbf{g} le vecteur gravité [$m.s^{-2}$] et \mathbf{K} le tenseur de perméabilité associé à la loi de Darcy [m^2]. Pour plus de détails, nous invitons le lecteur à se reporter aux travaux de Whitaker [1986].

Dans le présent travail, les champs de vitesse pour chaque configuration envisagée ont été déterminés à l'aide d'un programme réalisé au laboratoire. Cet outil de calcul est basé sur une méthode des Volumes Finis et de compressibilité artificielle.

2.2 Modèle macroscopique à une équation et fermeture

Afin de *macroscopiser* le problème ci-dessus, ma procédure générale de la prise de moyenne volumique (décrite par Whitaker [1999]) a été mise en oeuvre. Cette méthode de changement d'échelle, dans son principe global, consiste à moyennner (dans notre cas, spatialement), sur un volume V (tel que celui repré-

senté sur la Fig. 2.1), les équations de conservation à l'échelle microscopique (Eqs. (2.1) et (2.2)). Deux moyennes sont alors introduites : la moyenne superficielle ($\langle \psi_\eta \rangle$) et la moyenne intrinsèque ($\langle \psi_\eta \rangle^\eta$), respectivement définies par :

$$\langle \psi_\eta \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_\eta} \psi_\eta dV \quad \text{et} \quad \langle \psi_\eta \rangle^\eta = \frac{1}{V_\eta} \int_{V_\eta} \psi_\eta dV \quad (2.15)$$

Ces deux moyennes sont liées l'une à l'autre par la relation :

$$\langle \psi_\eta \rangle = \varepsilon_\eta \langle \psi_\eta \rangle^\eta$$

où $\varepsilon_\eta = \frac{V_\eta}{V}$ est la fraction volumique de la phase η [-] et ψ_η une quantité physique associée à la phase η .

L'utilisation du volume V pour moyenner les quantités microscopiques impose une bonne séparation des échelles, qui se traduit par un rayon (r_0) pour V qui doit être d'un part beaucoup plus grand que la longueur caractéristique des phases (l_α , l_β et l_γ) qui le composent et d'autre part beaucoup plus petit que la longueur caractéristique du système macroscopique (L), soit :

$$l_\eta \ll r_0 \ll L \quad \eta = \alpha, \beta, \gamma \quad (2.16)$$

Cependant, dans le cas de milieux poreux périodiques (ou ordonnés, tels que la structure représentée sur la Fig. 2.3), on pourra prendre pour V un V.E.R. dont la taille est en fait du même ordre de grandeur que celles des phases le constituant [Quintard and Whitaker, 1994a,b], ce qui permet de ré-écrire la contrainte d'échelle (Eq. (2.16)) selon :

$$l_\eta \simeq r_0 \ll L \quad \eta = \alpha, \beta, \gamma$$

Le but du changement d'échelle effectué par Lasseux et al. [2004] étant de développer un modèle à une équation décrivant l'évolution de la concentration en nutriment dans un ensemble triphasique, le principe de l'*équilibre de massique local* est supposé à l'échelle macroscopique de sorte que la dispersion puisse être caractérisée par une concentration unique [Ochoa et al., 1986, Wood et al., 2002], notée $\{c_A\}$ dans ce travail.

Dans le cas où le système atteint l'*équilibre thermodynamique local*, $\{c_A\}$ est relié à $\langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ et $\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma$ par :

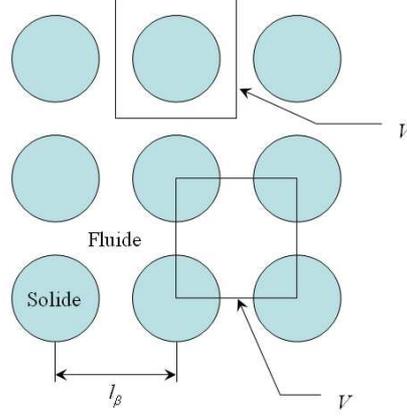


FIG. 2.3: Schématisation d'un milieu périodique diphasique.

$$\{c_A\} = \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \frac{1}{K_{Aeq}} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \quad (2.17)$$

Même si la condition d'équilibre thermodynamique n'existe pas, l'utilisation d'une concentration unique reste une approximation raisonnable [Wood et al., 2002, Lasseux et al., 2004]. Pour de tels cas, on dit que l'hypothèse d'équilibre massique local est valide et nous permet alors de définir la concentration unique comme [Ochoa et al., 1986, Wood et al., 2002, Lasseux et al., 2004] :

$$\{c_A\} = \frac{1}{K_{Aeq}} \frac{\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_\gamma + \varepsilon_\beta} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \frac{\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\gamma + \varepsilon_\beta} \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \quad (2.18)$$

L'utilisation de cette définition et moyennant des contraintes restrictives (pour plus de détails, voir Lasseux et al. [2004]), nous mène au modèle macroscopique dit "à une équation" suivant :

$$(\varepsilon_\beta + K_{Aeq}\varepsilon_\gamma) \frac{\partial \{c_A\}}{\partial t} = \mathbf{D}_{Aeff} : \nabla \nabla \{c_A\} - \varepsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \{c_A\} - k_{Aeff} \{c_A\} \quad (2.19)$$

où k_{Aeff} est la constante effective (ou macroscopique) de réaction pour la consommation des nutriments [s^{-1}] exprimée par :

$$k_{Aeff} = \varepsilon_\gamma K_{Aeq} k_A \quad (2.20)$$

tandis que \mathbf{D}_{Aeff} correspond au tenseur de dispersion effective pour les nutriments [$m^2.s^{-1}$] donné par :

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \left[\begin{array}{l} K_{Aeq} \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \left(\varepsilon_\gamma \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \mathbf{b}_\gamma dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\gamma}} \mathbf{n}_{\gamma\alpha} \mathbf{b}_\gamma dA \right) \\ + D_{A\beta} \left(\varepsilon_\beta \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \mathbf{b}_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\alpha} \mathbf{b}_\beta dA \right) \\ - \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \end{array} \right] \quad (2.21)$$

où $\tilde{\mathbf{v}}_\beta = \mathbf{v}_\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ correspond à la déviation spatiale locale de la vitesse dans la phase β . On peut d'ores et déjà observer ici que la constante de réaction effective (k_{Aeff}) peut être évaluée directement alors que le tenseur de dispersion effective (\mathbf{D}_{Aeff}) fait appel à des variables (\mathbf{b}_γ et \mathbf{b}_β) dites de "fermeture" reliant les déviations locales de la concentration à la concentration moyenne $\{c_A\}$ à travers :

$$\tilde{c}_{A\gamma} = K_{Aeq} \mathbf{b}_\gamma \cdot \nabla \{c_A\} \text{ et } \tilde{c}_{A\beta} = \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla \{c_A\}$$

Un problème dit également "de fermeture" se doit donc d'être développé. Pour résumer (pour plus de détails se reporter à l'article de Lasseux et al. [2004]), moyennant un contrainte sur l'échelle de temps donnée par :

$$\frac{D_{A\beta} t'}{l_\beta^2}, \frac{D_{A\gamma} t'}{l_\gamma^2} \gg 1 \quad (2.22)$$

où t' est le temps caractéristique de transport à l'échelle microscopique [s], le problème de fermeture est rendu quasi-statique et s'écrit :

$$\mathbf{D}_{A\gamma} : \nabla \nabla \mathbf{b}_\gamma - \varepsilon_\gamma^{-1} \left(\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\gamma + \mathbf{I}) dA \right) - k_A \mathbf{b}_\gamma = 0 \text{ dans } V_\gamma \quad (2.23)$$

$$\text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\gamma = -\mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \text{ sur } A_{\alpha\gamma} \quad (2.24)$$

$$D_{A\beta} \nabla^2 \mathbf{b}_\beta - \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta - \varepsilon_\beta^{-1} D_{A\beta} \left(\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\beta + \mathbf{I}) dA \right) = \tilde{\mathbf{v}}_\beta \text{ dans } V_\beta \quad (2.25)$$

$$\text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\alpha\beta} \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (2.26)$$

$$\text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot D_{A\beta}(\nabla \mathbf{b}_\beta + \mathbf{I}) = K_{Aeq} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\gamma + \mathbf{I}) \text{ sur } A_{\gamma\beta} \quad (2.27)$$

$$\text{B.C.4 : } -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\gamma + \mathbf{I}) = \alpha_A (\mathbf{b}_\gamma - \mathbf{b}_\beta) \text{ sur } A_{\gamma\beta} \quad (2.28)$$

$$\text{B.C.5 : } \mathbf{b}_\eta(r + l_i) = \mathbf{b}_\eta(r) \quad i = 1, 2, 3; \eta = \gamma, \beta \quad (2.29)$$

$$\int_{V_\eta} \mathbf{b}_\eta dV = 0 \quad \eta = \gamma, \beta \quad (2.30)$$

Enfin, les variables de fermeture sont considérées comme périodiques (de période l_i ; $i = 1, 2, 3$ dans les trois directions de l'espace). On voit donc clairement que la solution de ce problème, moyennant l'Eq. (2.21), permet d'estimer \mathbf{D}_{Aeff} . La détermination de \mathbf{D}_{Aeff} peut être faite, compte tenu de ce changement d'échelle, à partir de la donnée géométrique microscopique de la cellule unitaire. Dans ce travail, cette solution est recherchée par voie numérique.

Avant de présenter la mise sous forme adimensionnelle du problème de fermeture et du modèle macroscopique, une remarque peut être faite quant à la structure du tenseur de dispersion effective \mathbf{D}_{Aeff} . Ce paramètre macroscopique est la somme de plusieurs contributions. Tout d'abord, les termes $\varepsilon_\gamma K_{Aeq} \mathbf{D}_{A\gamma}$ et $\varepsilon_\beta D_{A\beta} \mathbf{I}$ marquent l'influence de la diffusion microscopique dans la phase cellulaire et dans la phase fluide respectivement. Les termes intégraux représentent la contribution des flux interfaciaux (ou effets induits par la tortuosité du milieu). Enfin, $\langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle$ exprime l'influence de l'hydrodynamique locale sur la dispersion macroscopique. Ces deux dernières contributions contiennent aussi, par le biais de \mathbf{b}_γ et \mathbf{b}_β , l'influence de la microgéométrie sur \mathbf{D}_{Aeff} .

2.2.1 Forme adimensionnée

La mise sous forme adimensionnelle d'un modèle permet d'une part de réduire le nombre de paramètres physiques en introduisant des groupements adimensionnels caractéristiques du phénomène étudié et d'autre part de rendre le problème universel. Ces groupements adimensionnels permettent ainsi la com-

paraison des résultats obtenus dans des domaines différents mais faisant intervenir le(s) même(s) valeur(s) de ces nombres. De plus, et du fait de l'absence de dimension, le problème des échelles n'intervient plus, seule la géométrie du système étudié importe.

Le choix des grandeurs de références permettant de rendre les variables sans dimension a été guidé par la physique du problème. Ainsi, la concentration est adimensionnée par une concentration de référence arbitraire c_{ref} , les termes de vitesse par la norme de la vitesse interstitielle ($\|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta\|$), les paramètres de diffusion (\mathbf{D}_{Aeff} , $\mathbf{D}_{A\gamma}$ et $D_{A\beta}$) par le coefficient de diffusion des nutriments dans la phase β ($D_{A\beta}$) et les longueurs, surfaces et volumes par la longueur, la surface et le volume de la cellule de calcul supposée cubique ici (l , l^2 et l^3). Le choix de la longueur de la cellule de calcul comme longueur de référence s'est imposée du fait que seule cette longueur reste constante au cours du temps. Le coefficient de diffusion dans la phase fluide est utilisé pour la mise sous forme adimensionnelle du fait de son caractère scalaire, ce qui n'est pas le cas de $\mathbf{D}_{A\gamma}$. L'introduction de ces quantités dans les équations fait apparaître naturellement les nombres sans dimensions suivants :

- Le nombre de Péclet $Pe = \frac{\|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta\| l}{D_{A\beta}}$ qui compare les effets convectifs aux effets diffusifs dans la phase fluide,
- Le rapport des diffusions dans la phase cellulaire et fluide : $\mathbf{D}_A = \frac{\mathbf{D}_{A\gamma}}{D_{A\beta}}$,
- Le nombre cinétique $Ki = \frac{k_A l^2}{D_{A\beta}}$ qui représente le rapport entre la vitesse de réaction au sein de la phase cellulaire et la vitesse de transport par diffusion des nutriments dans la phase fluide. Ce nombre compare, dans sa forme actuelle, des effets qui n'ont pas lieu dans la même phase. Cependant, ce nombre peut être relié au critère de Thiele $\phi^2 = k_A l^2 \mathbf{D}_{A\gamma}^{-1}$, rapport de la vitesse de réaction au transport par diffusion, par la relation : $\phi^2 = Ki D_A^{-1}$.
- Un nombre équivalent à l'inverse du nombre de Sherwood $\alpha_\gamma = \frac{\mathbf{D}_{A\gamma}}{\alpha_A l}$ qui rapporte l'influence du transport par diffusion au sein de la phase cellulaire au transport à travers l'interface.

Jusqu'à maintenant, il n'a pas été question de l'adimensionnement du temps (dimension unique de t et de k_A). L'introduction des paramètres de référence nous mène, outre les nombres adimensionnels sus-cités, à un temps caractéristique représenté par $\frac{l^2}{D_{A\beta}}$ traduisant le temps de diffusion du nutriment dans la phase fluide sur l'échelle d'espace l de la cellule unitaire.

Toutes ces variables nous permettent de ré-écrire le modèle macroscopique

sous la forme adimensionnée suivante :

$$(\varepsilon_\beta + \varepsilon_\gamma K_{Aeq}) \frac{\partial \{c_A^*\}}{\partial t^*} = \mathbf{D}_{Aeff}^* : \nabla^* \nabla^* \{c_A^*\} - \varepsilon_\beta Pe \langle \mathbf{v}_\beta^* \rangle^\beta \cdot \nabla^* \{c_A^*\} - k_{Aeff}^* \{c_A^*\} \quad (2.31)$$

où la constante de réaction effective k_{Aeff}^* est évaluée grâce à :

$$k_{Aeff}^* = \varepsilon_\gamma K_{Aeq} Ki \quad (2.32)$$

et le tenseur de dispersion effective déterminé par :

$$\mathbf{D}_{Aeff}^* = \left[\begin{array}{c} \varepsilon_\gamma \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \left(\frac{1}{V^*} \int_{A_{\alpha\gamma}^*} \mathbf{n}_{\gamma\alpha} \mathbf{b}_\gamma^* dA^* + \frac{1}{V^*} \int_{A_{\beta\gamma}^*} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \mathbf{b}_\gamma^* dA^* \right) \\ + \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \left(\frac{1}{V^*} \int_{A_{\alpha\beta}^*} \mathbf{n}_{\beta\alpha} \mathbf{b}_\gamma^* dA^* + \frac{1}{V^*} \int_{A_{\beta\gamma}^*} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \mathbf{b}_\beta^* dA^* \right) \\ - Pe \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta^* \mathbf{b}_\beta^* \rangle \end{array} \right] \quad (2.33)$$

Les variables de fermeture \mathbf{b}_β^* et \mathbf{b}_γ^* , quant à elles, sont obtenues en résolvant le problème de fermeture adimensionné suivant :

$$\mathbf{D}_A : \nabla^* \nabla^* \mathbf{b}_\gamma^* - \varepsilon_\gamma^{-1} \left(\frac{1}{V^*} \int_{A_{\beta\gamma}^*} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \mathbf{D}_A \cdot (\nabla^* \mathbf{b}_\gamma^* + \mathbf{I}) dA^* \right) - Ki \mathbf{b}_\gamma^* = 0 \text{ dans } V_\gamma^* \quad (2.34)$$

$$\text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla^* \mathbf{b}_\gamma^* = -\mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \text{ sur } A_{\alpha\gamma}^* \quad (2.35)$$

$$\nabla^{*2} \mathbf{b}_\beta^* - Pe \mathbf{v}_\beta^* \cdot \nabla^* \mathbf{b}_\beta^* - \varepsilon_\beta^{-1} \left(\frac{1}{V^*} \int_{A_{\beta\gamma}^*} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla^* \mathbf{b}_\beta^* + \mathbf{I}) dA^* \right) = Pe \tilde{\mathbf{v}}_\beta^* \text{ dans } V_\beta^* \quad (2.36)$$

$$\text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla^* \mathbf{b}_\beta^* = -\mathbf{n}_{\alpha\beta} \text{ sur } A_{\alpha\beta}^* \quad (2.37)$$

$$\text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla^* \mathbf{b}_\beta^* + \mathbf{I}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot (\nabla^* \mathbf{b}_\gamma^* + \mathbf{I}) \text{ sur } A_{\gamma\beta}^* \quad (2.38)$$

$$\text{B.C.4 : } -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \boldsymbol{\alpha}_\gamma \cdot (\nabla^* \mathbf{b}_\gamma^* + \mathbf{I}) = (\mathbf{b}_\gamma^* - \mathbf{b}_\beta^*) \text{ sur } A_{\gamma\beta}^* \quad (2.39)$$

$$\text{B.C.5 : } \mathbf{b}_\eta^*(r + l_i) = \mathbf{b}_\eta^*(r) \quad i = 1, 2, 3; \eta = \gamma, \beta \quad (2.40)$$

$$\int_{V_\eta^*} \mathbf{b}_\eta^* dV^* = 0 \quad \eta = \gamma, \beta \quad (2.41)$$

Dans la suite de ce travail, pour des raisons de lisibilité, **nous ne ferons plus apparaître les astérisques**. Afin d'éviter toute confusion, les termes \mathbf{v}_β^* et $\{c_A^*\}$ sont notés dans la suite de ce travail \mathbf{V}_β et $\{C_A\}$. On gardera en mémoire que, sauf indication contraire, toutes les quantités sont sans dimension dans le reste de ce document.

2.2.2 Reformulation de la fermeture et de la dispersion effective

Reformulation du problème de fermeture. Le problème de fermeture précédent est composé d'équations intégro-différentielles. De part la présence de ces termes intégraux dans les Eqs. (2.34) et (2.36), la résolution du problème de fermeture n'est pas aisée. Afin de pallier à cette difficulté, une forme plus attractive de ces deux équations doit être déterminée.

Soit $\hat{\mathbf{u}}_\beta$ et $\hat{\mathbf{u}}_\gamma$ les deux vecteurs définis par :

$$\hat{\mathbf{u}}_\beta = \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\beta + \mathbf{I}) dA \quad (2.42)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_\gamma = \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \mathbf{D}_A \cdot (\nabla \mathbf{b}_\gamma + \mathbf{I}) dA \quad (2.43)$$

D'après la condition aux limites (2.38) et la définition de $\boldsymbol{\kappa}$, ces deux vecteurs sont reliés par :

$$\hat{\mathbf{u}}_\beta = -K_{Aeq} \hat{\mathbf{u}}_\gamma \quad (2.44)$$

En introduisant ces définitions dans les Eqs. (2.34) et (2.36), on obtient deux nouvelles équations pour \mathbf{b}_γ et \mathbf{b}_β :

$$\mathbf{D}_A : \nabla \nabla \mathbf{b}_\gamma - K i \mathbf{b}_\gamma = -\varepsilon_\gamma^{-1} K_{Aeq}^{-1} \hat{\mathbf{u}}_\beta \quad (2.45)$$

et

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta - Pe \mathbf{V}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = Pe \tilde{\mathbf{V}}_\beta + \varepsilon_\beta^{-1} \hat{\mathbf{u}}_\beta \quad (2.46)$$

Les variables de fermeture sont ensuite décomposées selon :

$$\mathbf{b}_\eta = \mathbf{d}_\eta + B_\eta \hat{\mathbf{u}}_\beta \quad \eta = \beta, \gamma \quad (2.47)$$

afin d'éliminer le vecteur $\hat{\mathbf{u}}_\beta$ des Eqs. (2.45) et (2.46). En utilisant une telle décomposition, deux problèmes indépendants de $\hat{\mathbf{u}}_\beta$ sont obtenus et résolus sur une cellule unitaire arbitraire et périodique.

Problème 1 :

$$\mathbf{D}_A : \nabla \nabla \mathbf{d}_\gamma - Ki \mathbf{d}_\gamma = 0 \text{ dans } V_\gamma \quad (2.48)$$

$$\text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla \mathbf{d}_\gamma = -\mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \text{ sur } A_{\alpha\gamma} \quad (2.49)$$

$$\nabla^2 \mathbf{d}_\beta - Pe \mathbf{V}_\beta \cdot \nabla \mathbf{d}_\beta = Pe \tilde{\mathbf{V}}_\beta \text{ dans } V_\beta \quad (2.50)$$

$$\text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla \mathbf{d}_\beta = -\mathbf{n}_{\alpha\beta} \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (2.51)$$

$$\text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{d}_\beta + \mathbf{I}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot (\nabla \mathbf{d}_\gamma + \mathbf{I}) \text{ sur } A_{\gamma\beta} \quad (2.52)$$

$$\text{B.C.4 : } -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \boldsymbol{\alpha}_\gamma \cdot (\nabla \mathbf{d}_\gamma + \mathbf{I}) = \mathbf{d}_\gamma - \mathbf{d}_\beta \text{ sur } A_{\gamma\beta} \quad (2.53)$$

$$\text{B.C.5 : } \mathbf{d}_\eta(r + l_i) = \mathbf{d}_\eta(r) \quad i = 1, 2, 3; \eta = \gamma, \beta \quad (2.54)$$

$$\langle \mathbf{d}_\beta \rangle^\beta + \langle \mathbf{d}_\gamma \rangle^\gamma = 0 \quad (2.55)$$

Problème 2 :

$$\mathbf{D}_A : \nabla \nabla B_\gamma - Ki B_\gamma = -\varepsilon_\gamma^{-1} K_{Aeq}^{-1} \text{ dans } V_\gamma \quad (2.56)$$

$$\text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla B_\gamma = 0 \text{ sur } A_{\alpha\gamma} \quad (2.57)$$

$$\nabla^2 B_\beta - Pe \mathbf{V}_\beta \cdot \nabla B_\beta = \varepsilon_\beta^{-1} \text{ dans } V_\beta \quad (2.58)$$

$$\text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla B_\beta = 0 \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (2.59)$$

$$\text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \nabla B_\beta = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla B_\gamma \text{ sur } A_{\gamma\beta} \quad (2.60)$$

$$\text{B.C.4 : } -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \boldsymbol{\alpha}_\gamma \cdot \nabla B_\gamma = B_\gamma - B_\beta \text{ sur } A_{\gamma\beta} \quad (2.61)$$

$$\text{B.C.5 : } B_\eta(r + l_i) = B_\eta(r) \quad i = 1, 2, 3; \eta = \gamma, \beta \quad (2.62)$$

$$\langle B_\beta \rangle^\beta + \langle B_\gamma \rangle^\gamma = 0 \quad (2.63)$$

On voit clairement que lorsque les problèmes 1 et 2 sont résolus, c'est-à-dire lorsque \mathbf{d}_β , \mathbf{d}_γ , B_β et B_γ sont déterminés, alors \mathbf{b}_β et \mathbf{b}_γ peuvent à leur tour être obtenus grâce à l'Eq. (2.47). En effet, en prenant la moyenne de l'Eq. (2.47) et en vertu de l'Eq. (2.41), il vient :

$$\hat{\mathbf{u}}_\beta = -\frac{\langle \mathbf{d}_\eta \rangle^\eta}{\langle B_\eta \rangle^\eta}, \quad \eta = \beta, \gamma \quad (2.64)$$

et donc :

$$\mathbf{b}_\eta = \mathbf{d}_\eta - B_\eta \frac{\langle \mathbf{d}_\beta \rangle^\beta}{\langle B_\beta \rangle^\beta} \quad \eta = \beta, \gamma \quad (2.65)$$

compte tenu que $\hat{\mathbf{u}}_\beta$ est une constante vis-à-vis de cette moyenne.

Reformulation du tenseur de dispersion effective. Une fois les variables \mathbf{b}_β et \mathbf{b}_γ déterminées, \mathbf{D}_{Aeff} peut être calculé (cf. Eq.(2.33)). Pour simplifier ce calcul, compte tenu de la méthode numérique retenue, il est intéressant de reformuler les termes intégraux dans \mathbf{D}_{Aeff} . Pour ce faire, on utilise le théorème de la prise de moyenne, reliant la moyenne d'un gradient au gradient de la moyenne, ce qui donne :

$$\langle \nabla \mathbf{b}_\eta \rangle = \nabla \langle \mathbf{b}_\eta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\eta}} \mathbf{n}_{\eta\alpha} \mathbf{b}_\eta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\pi\eta}} \mathbf{n}_{\eta\pi} \mathbf{b}_\eta dA \quad (2.66)$$

$$\eta = \beta, \gamma; \quad \pi = \beta, \gamma; \quad \eta \neq \pi$$

Or, d'après l'Eq. (2.41), la moyenne de la variable de fermeture est nulle, ce qui nous permet de ré-écrire l'Eq. (2.66) sous la forme :

$$\langle \nabla \mathbf{b}_\eta \rangle = \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\eta}} \mathbf{n}_{\eta\alpha} \mathbf{b}_\eta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\pi\eta}} \mathbf{n}_{\eta\pi} \mathbf{b}_\eta dA \quad (2.67)$$

$$\eta = \beta, \gamma; \quad \pi = \beta, \gamma; \quad \eta \neq \pi$$

Le tenseur de dispersion effective peut donc être reformulé selon :

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \varepsilon_\gamma \boldsymbol{\kappa} + \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (2.68)$$

Compte tenu de ces expressions du tenseur de dispersion effective macroscopique et des problèmes de fermeture associés, nous présentons maintenant la discrétisation de ces derniers permettant leur résolution numérique.

2.3 Discrétisation et résolution

Plusieurs techniques sont disponibles en vue de passer d'un problème exact (continu) à un problème approché (discret) comme par exemple les différences finies, les éléments finis et les volumes finis. Dans ce travail, les équations sont discrétisées selon la méthode des Volumes Finis. Cette technique fournissant des approximations discrètes conservatives, elle est bien adaptée au genre de problème que nous étudions ici, i.e. des équations de conservation. Un maillage tridimensionnel Cartésien est utilisé pour discrétiser la géométrie du système. La valeur approchée d'une variable φ au point (x_i, y_j, z_k) est notée $\varphi(i, j, k)$. La méthode utilisée pour la résolution du problème de Stokes implique, afin d'éviter des problèmes d'oscillation lors des calculs numériques, que les inconnues soient décalées : les vecteurs vitesses $(\mathbf{V}_\beta(u, v, w))$ sont estimés aux interfaces de la maille tandis que les variables de fermeture $(\mathbf{b}_\eta, \mathbf{d}_\eta, B_\eta)$ sont connues au centre de la maille. La Figure 2.4 schématise la position des différentes variables.

Dans la suite de cette section, nous ne présentons que les développements pour les interfaces $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ et $(i - \frac{1}{2}, j, k)$ pour les variables \mathbf{d}_η , le cheminement étant similaire pour les autres interfaces et pour la variable B_η . En ce qui

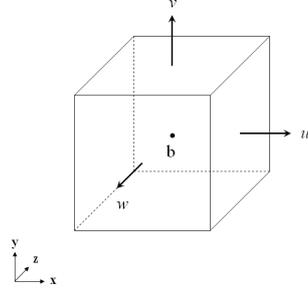


FIG. 2.4: Positionnement des variables au niveau de la maille. u , v , w correspondent aux composantes selon les axes Ox , Oy et Oz du vecteur vitesse \mathbf{V}_β .

concerne la variable \mathbf{b}_η , nous ne résolvons pas le problème de fermeture, nous utilisons uniquement les conditions aux limites exprimées pour déterminer des approximations nécessaires au calcul des gradients dans l'expression de \mathbf{D}_{Aeff} . Un cheminement similaire à celui de \mathbf{d}_η a été suivi, fournissant des approximations similaires.

2.3.1 Partie diffusive

Dans cette partie, nous nous intéressons plus particulièrement à la discrétisation des termes diffusifs, représentés par $\mathbf{D}_A \cdot \nabla \nabla \mathbf{d}_\gamma$ et $\nabla^2 \mathbf{d}_\beta$. La méthode des volumes finis est une formulation intégrale des équations sur des volumes de contrôles (ou volumes élémentaires) au centre desquels la variable de fermeture est placée. De plus, l'utilisation de la formule d'Ostrogradski introduit des vecteurs normaux \mathbf{n} qui sont placés aux interfaces. L'utilisation de cette méthode mène aux formulations discrètes suivantes :

$$D_{Ai,j,k}^{xx} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{\Delta X} \left(\frac{\partial d_\gamma^x}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{\partial d_\gamma^x}{\partial X} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) \\ + \frac{1}{\Delta Y} \left(\frac{\partial d_\gamma^x}{\partial Y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k} - \frac{\partial d_\gamma^x}{\partial Y} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) \\ + \frac{1}{\Delta Z} \left(\frac{\partial d_\gamma^x}{\partial Z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{\partial d_\gamma^x}{\partial Z} \Big|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) \end{array} \right] \text{ dans } V_\gamma \quad (2.69)$$

$$\left[\begin{array}{l} \frac{1}{\Delta X} \left(\frac{\partial d_\beta^x}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} - \frac{\partial d_\beta^x}{\partial X} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) \\ + \frac{1}{\Delta Y} \left(\frac{\partial d_\beta^x}{\partial Y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k} - \frac{\partial d_\beta^x}{\partial Y} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) \\ + \frac{1}{\Delta Z} \left(\frac{\partial d_\beta^x}{\partial Z} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{\partial d_\beta^x}{\partial Z} \Big|_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) \end{array} \right] \text{ dans } V_\beta \quad (2.70)$$

où ΔX , ΔY et ΔZ correspondent aux pas d'espace sans dimension selon les axes Ox , Oy ou Oz . On rappelle que, dans ce travail, le tenseur de diffusion adimensionné à l'échelle microscopique (\mathbf{D}_A) est considéré comme sphérique ($D_A^{xx} = D_A^{yy} = D_A^{zz}$) et constant par maille ($D_{A,i+\frac{1}{2}-\delta,j,k}^{xx} = D_{A,i-\frac{1}{2}+\delta,j,k}^{xx} = D_{A,i,j,k}^{xx}$) et pour la phase ; ce qui implique des propriétés identiques pour les deux tenseurs α_γ et κ . Cependant, nous avons voulu garder une certaine généralité de l'outil de calcul en y intégrant la possibilité d'utiliser des tenseurs de diffusion qui ne sont pas sphériques mais qui sont tout de même diagonaux.

L'application d'un développement de Taylor sur les variables de fermeture aux points (i, j, k) et $(i+1, j, k)$ nous mène au schéma classique d'ordre 2 suivant de la dérivée partielle en $(i + \frac{1}{2}, j, k)$:

$$\frac{\partial d_\eta^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2},j,k)} = \frac{1}{\Delta X} (d_{\eta,i+1,j,k}^x - d_{\eta,i,j,k}^x) \quad (2.71)$$

En suivant le même cheminement, la relation en $(i - 1/2, j, k)$ s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial d_\eta^x}{\partial X} \Big|_{(i-\frac{1}{2},j,k)} = \frac{1}{\Delta X} (d_{\eta,i,j,k}^x - d_{\eta,i-1,j,k}^x) \quad (2.72)$$

Ces expressions ne sont valables que si les deux mailles consécutives sont dans la même phase. Du fait de la particularité engendrée par la discontinuité des variables et de leur gradient (Eqs. (2.52) et (2.53) par exemple), un développement plus complexe doit être considéré lorsque deux mailles consécutives sont séparées par une interface α/β , α/γ et γ/β . Ce développement est présenté ultérieurement (paragraphe) .

Le cas de la diffusion étant traité, nous allons nous intéresser à la discrétisation des termes convectifs.

2.3.2 Partie convective

La résolution des problèmes de fermeture nécessite l'approximation du terme de convection dans les Eqs. (2.50) et (2.58). Lorsque la convection est importante, les différents schémas numériques existants introduisent soit de la diffusion numérique, soit des oscillations. La diffusion numérique modifie la forme de la solution tandis que les oscillations génèrent des solutions non physiques. Dans son travail de thèse, Béchaud [1998] a fait une étude de différents schémas numériques afin de déterminer celui présentant le meilleur compromis entre précision, robustesse et coût de calcul (stockage, temps de calcul). Les schémas étudiés, au nombre de quatre, étaient les suivants :

1. un schéma du second ordre implicite ;
2. deux schémas du premier ordre implicites avec un terme d'anti-diffusion (Schéma décentré amont et Schéma de Murman) ;
3. un schéma explicite avec limiteur de flux dit de haute résolution.

De cette étude, il en ressort que le schéma présentant le meilleur compromis entre stabilité, précision et temps de calcul est le schéma décentré amont anti-diffusé. Par conséquent, nous utiliserons, dans cette étude, ce même schéma.

Pour contrer la diffusion numérique introduite par un schéma décentré du premier ordre, un terme de correction local est ajouté dans l'équation initiale, ce qui rend le schéma d'ordre 2 pour ce terme. Dans le cas d'un schéma amont décentré anti-diffusé, le terme de convection peut être discrétisé de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta X} \int_{i-\frac{1}{2},j,k}^{i+\frac{1}{2},j,k} V_{\beta}^x \frac{\partial d_{\beta}^x}{\partial X} dx = \frac{1}{\Delta X} & \begin{cases} V_{\beta,i+\frac{1}{2},j,k} \begin{cases} d_{\beta,i,j,k}^x & \text{si 1} \\ d_{\beta,i+1,j,k}^x & \text{si 2} \end{cases} \\ -V_{\beta,i-\frac{1}{2},j,k}^x \begin{cases} d_{\beta,i-1,j,k}^x & \text{si 3} \\ d_{\beta,i,j,k}^x & \text{si 4} \end{cases} \end{cases} & \text{dans } V_{\beta}^* \\ + \frac{\lambda}{(\Delta X)^2} & \begin{bmatrix} |V_{\beta,i+\frac{1}{2},j,k}^x| \left(d_{\beta,i+1,j,k}^x - d_{\beta,i,j,k}^x \right) \\ -|V_{\beta,i-\frac{1}{2},j,k}^x| \left(d_{\beta,i,j,k}^x - d_{\beta,i-1,j,k}^x \right) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.73)$$

où les différentes situations (1 à 4) sont liées au signe de la vitesse représenté sur la Fig. 2.5 et $|V_{\beta,i\pm\frac{1}{2},j,k}^x|$ désigne la valeur absolue de $V_{\beta,i\pm\frac{1}{2},j,k}^x$.

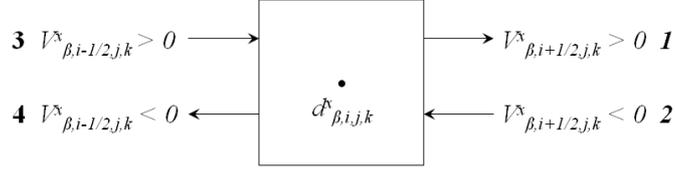


FIG. 2.5: Signe de la vitesse et différentes possibilités d'écoulement aux interfaces de la maille.

Le second terme du membre de droite de l'Eq. (2.73) correspond à la discrétisation du terme d'anti-diffusion dans lequel λ est un coefficient correctif évalué de trois manières différentes [Béchaud, 1998] :

$$\lambda = \min \left(\frac{0.9}{Pe}, \frac{\Delta X}{2}, \frac{\Delta Y}{2}, \frac{\Delta Z}{2} \right) \quad (2.74)$$

pour une correction identique pour toutes les mailles et pour toutes les directions,

$$\lambda_x = \min \left(\frac{0.9}{Pe \langle \mathbf{V}_\beta \rangle^{\beta,x}}, \frac{\Delta X}{2} \right) \quad (2.75)$$

pour une correction calculée par direction et identique pour toutes les mailles,

$$\lambda_x(i, j, k) = \min \left(\frac{0.9}{Pe \max(|V_{\beta,i-\frac{1}{2},j,k}^x|, |V_{\beta,i+\frac{1}{2},j,k}^x|)}, \frac{\Delta X}{2} \right) \quad (2.76)$$

pour une correction déterminée pour chaque maille et pour chaque direction. Dans le présent travail, nous avons adopté une correction calculée par direction et identique pour toutes les mailles (Eq. (2.75)).

Il est important de noter que lorsque ce coefficient de correction prend la valeur $\frac{\Delta X}{2}$ (ou plus généralement, le pas d'espace divisé par deux), alors la diffusion numérique est totalement supprimée à l'ordre 2 du schéma. Dans le cas contraire, la diffusion numérique n'est que partiellement annulée car $\lambda = \frac{0.9}{Pe \langle \mathbf{V}_\beta \rangle^{\beta,x}}$. Le facteur 0.9 utilisé dans le calcul de la correction est choisi pour assurer une meilleure stabilité [Béchaud, 1998].

2.3.3 Traitement des interfaces

Une difficulté majeure dans ces problèmes de fermeture est le traitement des interfaces entre deux phases distinctes. En effet, les différentes conditions aux limites montrent des discontinuités tant au niveau des variables de fermeture (Eqs. (2.39), (2.53) et (2.61)) qu'au niveau de leur gradient (Eqs. (2.38), (2.52) et (2.60)). La Figure 2.6 schématise ces discontinuités.

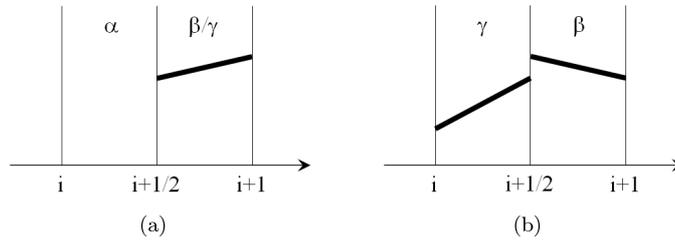


FIG. 2.6: Comportement des variables de fermeture et de leur gradient aux interfaces. **a)** α/β ou α/γ et **b)** β/γ .

Les conditions aux limites exprimées en \mathbf{b}_η et \mathbf{d}_η sont identiques, seules celles exprimées en B ne font pas intervenir la matrice identité (\mathbf{I}). Par conséquent, nous montrerons ici les développements pour les conditions du problème de fermeture n°1 (variables de fermeture \mathbf{d}_η).

Interface fluide/solide et cellule/solide. Les conditions au niveau de ces interfaces sont exprimées par :

$$\begin{cases} \text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla \mathbf{d}_\gamma = -\mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A & \text{sur } A_{\alpha\gamma} \\ \text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla \mathbf{d}_\beta = -\mathbf{n}_{\alpha\beta} & \text{sur } A_{\alpha\beta} \end{cases} \quad (2.77)$$

La discrétisation de (2.77) dans les cas où une interface α/η ($\eta = \beta$ ou γ) est présente en $i + 1/2$ ou $i - 1/2$ conduit aux relations suivantes :

$$\left. \frac{\partial d_\eta^x}{\partial X} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} = -1 \quad ; \quad \left. \frac{\partial d_\eta^x}{\partial X} \right|_{i-\frac{1}{2},j,k} = -1 \quad \text{sur } A_{\alpha\eta} \quad (2.78)$$

$$\left. \frac{\partial d_\eta^y}{\partial X} \right|_{i+\frac{1}{2},j,k} = 0 \quad ; \quad \left. \frac{\partial d_\eta^y}{\partial X} \right|_{i-\frac{1}{2},j,k} = 0 \quad \text{sur } A_{\alpha\eta} \quad (2.79)$$

$$\frac{\partial d_\eta^z}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial d_\eta^z}{\partial X} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k} = 0 \quad \text{sur } A_{\alpha\eta} \quad (2.80)$$

avec $\eta = \beta$ ou γ .

Ainsi, quelle que soit la phase dans laquelle se situe le point (i, j, k) (fluide ou cellule), l'approximation de (2.77) au niveau de l'interface avec la phase solide est toujours la même.

Interface Fluide/Cellule. Sur cette interface, les conditions aux limites pour la fermeture résultent de la continuité des flux diffusifs et de la condition de non-équilibre (Eqs. (2.81)) initialement écrite pour le problème physique microscopique.

$$\begin{cases} \text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{d}_\beta + \mathbf{I}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot (\nabla \mathbf{d}_\gamma + \mathbf{I}) & \text{sur } A_{\beta\gamma} \\ \text{B.C.4 : } -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \boldsymbol{\alpha}_\gamma \cdot (\nabla \mathbf{d}_\gamma + \mathbf{I}) = \mathbf{d}_\gamma - \mathbf{d}_\beta & \text{sur } A_{\beta\gamma} \end{cases} \quad (2.81)$$

En considérant une maille (i, j, k) dans la phase γ et l'interface γ/β en $(i + 1/2, j, k)$ [Fig. 2.7], ces relations se ré-écrivent sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial d_\beta^x}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j,k} + 1 = \kappa^{xx} \left(\frac{\partial d_\gamma^x}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j,k} + 1 \right) \\ -\alpha_\gamma^{xx} \left(\frac{\partial d_\gamma^x}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j,k} + 1 \right) = d_{\gamma,i+\frac{1}{2}-\delta,j,k}^x - d_{\beta,i+\frac{1}{2}+\delta,j,k}^x \end{cases} \quad (2.82)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial d_\beta^y}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j,k} = \kappa^{xx} \frac{\partial d_\gamma^y}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j,k} \\ -\alpha_\gamma^{xx} \frac{\partial d_\gamma^y}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j,k} = d_{\gamma,i+\frac{1}{2}-\delta,j,k}^y - d_{\beta,i+\frac{1}{2}+\delta,j,k}^y \end{cases} \quad (2.83)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial d_\beta^z}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j,k} = \kappa^{xx} \frac{\partial d_\gamma^z}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j,k} \\ -\alpha_\gamma^{xx} \frac{\partial d_\gamma^z}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j,k} = d_{\gamma,i+\frac{1}{2}-\delta,j,k}^z - d_{\beta,i+\frac{1}{2}+\delta,j,k}^z \end{cases} \quad (2.84)$$

Dans ces dernières expressions, δ est un paramètre infinitésimal indiquant de quel côté de l'interface se situe le point (Fig. 2.7).

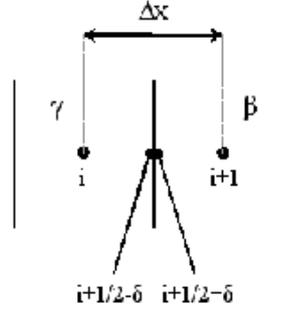


FIG. 2.7: Exemple de configuration avec une interface γ/β en $(i + 1/2, j, k)$, la maille (i, j, k) étant dans γ .

Le fait d'imposer une condition de non-équilibre à l'interface $A_{\beta\gamma}$ complique un peu l'approximation des dérivées partielles des variables de fermeture \mathbf{d}_γ et \mathbf{d}_β . Nous allons illustrer la méthodologie utilisée dans le cas indiqué sur la Fig. 2.7. Tout d'abord, un développement de Taylor est appliqué sur les variables de fermeture $d_{\gamma,i,j,k}^x$ et $d_{\beta,i+1,j,k}^x$, ce qui donne :

$$d_{\gamma,i,j,k}^x = d_{\gamma,i+\frac{1}{2}-\delta,j,k}^x - \frac{\Delta X}{2} \frac{\partial d_\gamma^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}-\delta,j,k)} + O((\Delta X)^2) \quad (2.85)$$

$$d_{\beta,i+1,j,k}^x = d_{\beta,i+\frac{1}{2}+\delta,j,k}^x + \frac{\Delta X}{2} \frac{\partial d_\beta^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}+\delta,j,k)} + O((\Delta X)^2) \quad (2.86)$$

où ΔX correspond au pas d'espace adimensionné selon l'axe Ox . Grâce à ce développement, l'approximation décentrée des dérivées partielles obtenue est du premier ordre. En soustrayant (2.86) de (2.85), le second membre de l'Eq. (2.82b) se ré-écrit :

$$d_{\gamma, i+\frac{1}{2}-\delta, j, k}^x - d_{\beta, i+\frac{1}{2}+\delta, j, k}^x = \left[\begin{array}{c} d_{\gamma, i, j, k}^x - d_{\beta, i+1, j, k}^x \\ + \frac{\Delta X}{2} \left[\frac{\partial d_{\gamma}^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}-\delta, j, k)} + \frac{\partial d_{\beta}^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}+\delta, j, k)} \right] \end{array} \right] + O((\Delta X)^2) \quad (2.87)$$

Dans le raisonnement montré ici, on souhaite déterminer une approximation de la dérivée première en x de d_{γ}^x à l'interface $(i+1/2, j, k)$. Or dans l'Eq. (2.87), la dérivée partielle dans la phase fluide $(\frac{\partial d_{\beta}^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}+\delta, j, k)})$ apparait. Afin d'éliminer ce terme, la relation (2.82 a) nous mène à l'expression suivante :

$$\frac{\partial d_{\beta}^x}{\partial X} \Big|_{i+\frac{1}{2}+\delta, j, k} = \kappa^{xx} \left(\frac{\partial d_{\gamma}^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}-\delta, j, k)} + 1 \right) - 1 \quad (2.88)$$

En introduisant cette relation dans (2.87) , puis (2.87) dans (2.82 b), $\frac{\partial d_{\gamma}^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}-\delta, j, k)}$ peut être approximé par :

$$\frac{\partial d_{\gamma}^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}-\delta, j, k)} = \frac{2}{\Delta X} \frac{d_{\beta, i+1, j, k}^x - d_{\gamma, i, j, k}^x}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}} + \frac{1 - \kappa^{xx} - \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}} \quad (2.89)$$

En employant un raisonnement similaire, les approximations des autres interfaces possibles (β/γ) et (γ/β) s'écrivent alors :

- la maille (i, j, k) est dans la phase cellulaire γ , la maille $(i-1, j, k)$ dans la phase fluide β :

$$\frac{\partial d_{\gamma}^x}{\partial X} \Big|_{(i-\frac{1}{2}+\delta, j, k)} = \frac{2}{\Delta X} \frac{d_{\gamma, i, j, k}^x - d_{\beta, i-1, j, k}^x}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}} + \frac{1 - \kappa^{xx} - \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}} \quad (2.90)$$

- la maille (i, j, k) est dans la phase fluide β , la maille $(i+1, j, k)$ dans la phase cellulaire γ :

$$\frac{\partial d_{\beta}^x}{\partial X} \Big|_{(i+\frac{1}{2}-\delta, j, k)} = \frac{2}{\Delta X} \frac{d_{\gamma, i+1, j, k}^x - d_{\beta, i, j, k}^x}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}} + \frac{-1 + \kappa^{xx} - \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_{\gamma}^{xx}}{\Delta X}} \quad (2.91)$$

- la maille (i, j, k) est dans la phase fluide β , la maille $(i-1, j, k)$ dans la phase cellulaire γ :

$$\left. \frac{\partial d_\beta^x}{\partial X} \right|_{(i-\frac{1}{2}+\delta, j, k)} = \frac{2}{\Delta X} \frac{d_{\beta, i, j, k}^x - d_{\gamma, i-1, j, k}^x}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_\gamma^{xx}}{\Delta X}} + \frac{-1 + \kappa^{xx} - \frac{2\alpha_\gamma^{xx}}{\Delta X}}{1 + \kappa^{xx} + \frac{2\alpha_\gamma^{xx}}{\Delta X}} \quad (2.92)$$

En ce qui concerne les interfaces $(i, j \pm \frac{1}{2}, k)$ et $(i, j, k \pm \frac{1}{2})$, les approximations du type de l'Eq. (2.93) sont obtenues.

$$\left. \frac{\partial d_\gamma^x}{\partial Y} \right|_{(i, j+\frac{1}{2}-\delta, j, k)} = \frac{2}{\Delta Y} \frac{d_{\beta, i, j+1, k}^x - d_{\gamma, i, j, k}^x}{1 + \kappa^{yy} + \frac{2\alpha_\gamma^{yy}}{\Delta Y}} \quad (2.93)$$

Ces différentes approximations sont introduites dans la partie diffusive Eqs. (2.69) et (2.70) quand cela est nécessaire. De plus, comme indiqué un peu plus haut, pour le calcul des gradients de \mathbf{b}_η aux différentes interfaces, des approximations similaires à celles ci-dessus ont été déterminées. **Enfin, l'ordre d'approximation de ces estimations ne peut pas être indiqué du fait de la division par $\alpha_\gamma + \frac{\Delta X}{2}(1 + \kappa)$. En effet, selon le terme prédominant (α_γ ou $(1 + \kappa)$), l'ordre varie entre 1 et 2.**

2.3.4 Résolution

La discrétisation des problèmes de fermeture aboutit à un système d'équations linéaires à résoudre de la forme $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$, \mathbf{A} étant une matrice relativement creuse. Deux types de méthodes peuvent être envisagées pour résoudre ce type de système linéaire : les méthodes directes (dites "exactes") et les méthodes itératives (dites "approchées"). Ces dernières sont préférées aux méthodes directes car elles posent moins de problème de stockage [Lascaux and Théodor, 1987].

Dans notre étude, une seule méthode itérative a été utilisée, à savoir le Gradient Bi-Conjugué Stabilisé (Bi-CGSTAB) dans sa version donnée par Van der Vorst [1992]. Le choix de cette méthode a été motivé par la possibilité de résoudre des systèmes à matrice non symétrique, ce qui est le cas ici. De plus, afin d'améliorer la convergence, un préconditionnement par la diagonale a été introduit dans cette méthode.

En ce qui concerne les champs de vitesse \mathbf{V}_β , nous les déterminons pour chaque configuration étudiée à l'aide d'un code numérique réalisé au laboratoire résolvant le problème de Stokes et un algorithme de compressibilité artificielle. Ce programme fonctionne aussi bien pour des configurations 2D que 3D, tout comme le code réalisé dans ce travail.

Chapitre 3

Validation

L'outil numérique mis en place nous permet de résoudre les deux problèmes de fermeture (et donc de déterminer \mathbf{D}_{Aeff}) pour des configurations 3D. Avant d'exploiter pleinement cet outil numérique, nous allons nous attarder sur sa validation sur des cas simples. Pour cela, nous étudions des cas de diffusion pure, de diffusion/réaction et de dispersion passive qui ont fait l'objet de travaux antérieurs. Les résultats obtenus pour chaque cas sont confrontés à des données disponibles dans la littérature. Bien que les validations soient principalement effectuées en 2D, chaque configuration sera utilisée pour éprouver l'outil numérique en 3D et, le cas échéant, les résultats seront confrontés à ceux disponibles dans la littérature.

3.1 Diffusion pure

3.1.1 Validation dans un cas de diffusion pure dans un système 2D à deux régions

Dans le but de valider l'outil de calcul pour le cas simple de la diffusion pure, nous nous appuyons sur un travail rapporté par Quintard and Whitaker [1987]. Dans cette référence, un modèle macroscopique de l'écoulement monophasique dans un milieu poreux hétérogène composé de deux régions a été développé en employant la méthode de la prise de moyenne volumique, aboutissant à une expression du tenseur de perméabilité effective. Il s'agit d'un problème de diffusion (sur la pression) dans un milieu à coefficient de diffusion (perméabilité) hétérogène. L'équivalence entre ces deux problèmes peut être faite en fixant les

paramètres adimensionnels de notre modèle à $Ki = 0$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = \mathbf{0}$, $Pe = 0$ et $K_{Aeq} = 1$ dans le problème initial (Eqs. (2.23) à (2.29)). Les termes intégraux peuvent alors être facilement annulés, conduisant à $\mathbf{b}_\eta = \mathbf{d}_\eta$. De plus, afin de résoudre le problème de fermeture sur un système de même nature que celui traité par Quintard and Whitaker [1987], on considère que la cellule unitaire est constituée uniquement d'une phase fluide (β) et d'une phase "cellulaire" (γ) comme représentée sur la Fig. 3.1. Avec toutes ces considérations, l'expression du tenseur de diffusion effective est équivalente à celle du tenseur de perméabilité effective développé dans la référence mentionnée plus haut [Quintard and Whitaker, 1987].

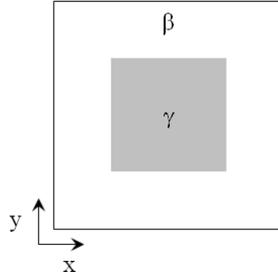


FIG. 3.1: Cellule unitaire utilisée pour la validation de l'outil de calcul sur le problème de diffusion pure entre deux régions.

En considérant dans notre problème les paramètres adimensionnels mentionnés plus haut ainsi que les deux phases γ et β , le modèle macroscopique se ré-écrit sous la forme :

$$\frac{\partial \{C_A\}}{\partial t} = \mathbf{D}_{Aeff} : \nabla \nabla \{C_A\} \quad (3.1)$$

où \mathbf{D}_{Aeff} s'exprime par :

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \varepsilon_\gamma \mathbf{D}_A + \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \mathbf{D}_A \cdot \left(\frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \mathbf{b}_\gamma dA \right) + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\beta}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \mathbf{b}_\beta dA \quad (3.2)$$

Du fait que $K_{Aeq} = 1$ et compte tenu de l'expression de $\boldsymbol{\kappa}$, il vient : $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{D}_A$. L'unique problème de fermeture associé à \mathbf{D}_{Aeff} se reformule alors de la façon suivante :

$$\mathbf{D}_A : \nabla \nabla \mathbf{b}_\gamma = 0 \text{ dans } V_\gamma \quad (3.3)$$

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0 \text{ dans } V_\beta \quad (3.4)$$

$$\text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\beta + \mathbf{I}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \cdot (\nabla \mathbf{b}_\gamma + \mathbf{I}) \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (3.5)$$

$$\text{B.C.4 : } \mathbf{b}_\gamma = \mathbf{b}_\beta \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (3.6)$$

$$\text{B.C.5 : } \mathbf{b}_\eta(r + l_i) = \mathbf{b}_\eta(r) \quad i = 1, 2, 3; \quad \eta = \beta, \gamma \quad (3.7)$$

$$\langle \mathbf{b}_\eta \rangle^\eta = 0 \quad ; \quad \langle \mathbf{b}_\eta \rangle = 0 \quad \eta = \beta, \gamma \quad (3.8)$$

Nous résolvons donc le même problème de fermeture que pour la perméabilité hétérogène et calculons un tenseur de dispersion qui présente une expression similaire au tenseur de perméabilité à grande échelle pour un système à deux régions (1 et 2), ce dernier s'écrivant, dans sa forme adimensionnée (où \mathbf{K}_1 est le rapport des perméabilités entre les régions 1 et 2) :

$$\mathbf{K} = \varepsilon_1 \mathbf{K}_1 + \varepsilon_2 \mathbf{I} + (\mathbf{K}_1 - \mathbf{I}) \cdot \left(\frac{1}{V} \int_{A_{12}} \mathbf{n}_{12} \cdot \mathbf{b}_1 dA \right) \quad (3.9)$$

L'équivalence entre les expressions (3.2) et (3.9) est assurée par la continuité de \mathbf{b}_η à l'interface entre les deux phases (Eq. 3.6). Dans la configuration de la Fig. 3.1, \mathbf{D}_{Aeff} (ou \mathbf{K}) est sphérique compte tenu des symétries de la cellule unitaire si \mathbf{D}_A l'est, on note alors $\mathbf{D}_{Aeff} = D_{Aeff} \mathbf{I}$ et $\mathbf{D}_A = D_A \mathbf{I}$. Sur la Fig. 3.2, nous avons représenté le comportement de D_{Aeff} en fonction de D_A obtenu pour la cellule de calcul représentée par la Fig. 3.1 et pour différentes valeurs de la fraction volumique de la phase β . Les calculs ont été effectués sur une grille de 100×100 mailles. Cette figure atteste de l'excellent accord entre nos résultats et ceux fournis dans la référence citée, confirmé par un écart entre les deux résultats sur D_{Aeff} inférieure à 0.5% sur toute la gamme de D_A étudiée ($1 - 10^3$).

Ces résultats permettent de valider l'outil numérique en 2D dans le cas particulier de la diffusion pure.

3.1.2 Etude de cas 3D

Nous présentons maintenant des séries de résultats du calcul de \mathbf{D}_{Aeff} en diffusion pure pour un milieu 3D. La première concerne la diffusion pure d'un traceur inerte dans un milieu poreux (inclusion solide dans une phase fluide) tandis que la seconde traite de la diffusion pure entre deux régions (configuration semblable au cas traité par Quintard and Whitaker [1987]). Les différentes

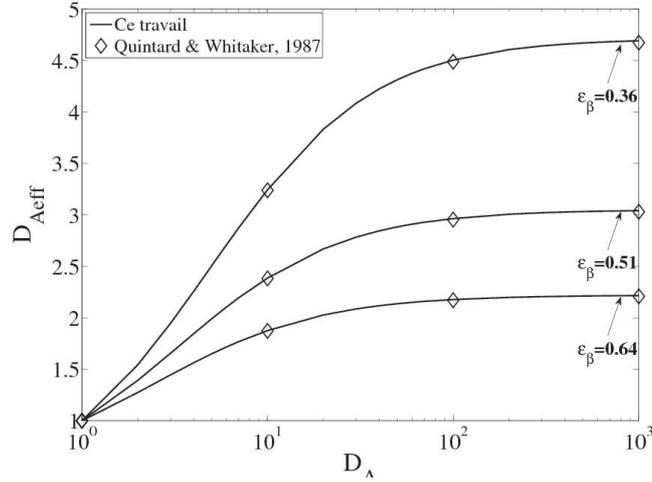


FIG. 3.2: Diffusion effective en fonction du rapport des coefficients de diffusion dans les deux régions pour différentes valeurs de ε_β . $Ki = 0$, $Pe = 0$, $\alpha_\gamma = \mathbf{0}$, $K_{Aeq} = 1$. Nombre de mailles : 100×100 .

études sont réalisées sur un maillage $40 \times 40 \times 40$. Dans chaque cas, l'inclusion est de forme cubique et constitue un réseau cubique.

Diffusion pure d'un traceur inerte. La configuration géométrique employée pour ces calculs est représentée sur la Fig. 3.3.

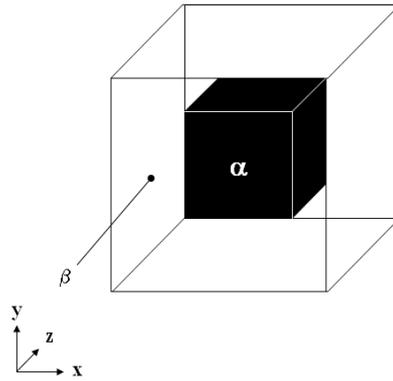


FIG. 3.3: Cellule unitaire employée dans le cas de la diffusion pure d'un traceur inerte.

La diffusion ayant lieu uniquement dans la phase fluide, nous sommes amenés à écrire le problème macroscopique de la manière suivante :

$$\varepsilon_\beta \frac{\partial \{C_A\}}{\partial t} = \mathbf{D}_{Aeff} : \nabla \nabla \{C_A\} \quad (3.10)$$

où le tenseur de diffusion effective est donné par :

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (3.11)$$

Le problème de fermeture associé est alors donné par :

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0 \text{ dans } V_\beta \quad (3.12)$$

$$\text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\alpha\beta} \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (3.13)$$

Là encore, compte tenu des symétries, \mathbf{D}_{Aeff} est nécessairement sphérique et donc $\mathbf{D}_{Aeff} = D_{Aeff} \mathbf{I}$. Comme indiqué sur la Fig. 3.4, D_{Aeff} a un comportement en fonction de la porosité (ε_β) en bon accord avec ceux extraits des travaux de . Sur cette même figure, nous avons reporté des données issues des travaux de Maxwell (1881), Weissberg [1963] et Ryan [1984] fournis graphiquement par Quintard [1993]. Une précision peut être apportée quant au système étudié par la référence. Dans son étude, a considéré un milieu poreux constitué de sphères solides imperméables, et ce pour différents arrangements. Sur la Fig. 3.4, nous avons reporté uniquement les résultats correspondant à un arrangement cubique simple des sphères (SC). Les données de Ryan [1984] sont, quant à elles, fournies pour un milieu 2D constitué d'inclusions solides carrées [Quintard, 1993].

La sphéricité est numériquement bien retrouvée puisque les termes extra-diagonaux sont au plus de l'ordre de 10^{-18} , soit proche du zéro machine. Ce cas peut donc être considéré comme étant validé.

Diffusion d'un traceur inerte dans un milieu à deux régions. Dans un second temps, le cas de la diffusion d'un traceur dans **deux régions** ayant des coefficients de diffusion différents est traité. La cellule unitaire employée lors de cette série de "tests" est composée d'une région γ cubique incluse dans une région

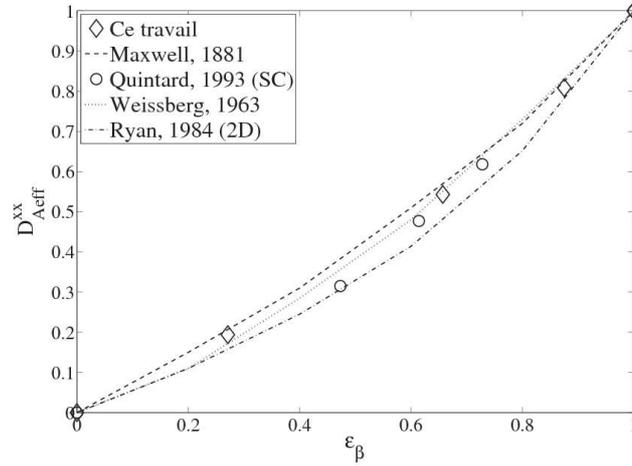


FIG. 3.4: Comportement de D_{Aeff}^{xx} en fonction de la porosité pour le problème de diffusion d'un traceur inerte dans un milieu poreux imperméable. Nous avons reporté ici les résultats de données pour un arrangement cubique simple de sphères (SC). Maillage : $40 \times 40 \times 40$.

β telle que représentée sur la Fig. 3.5. Le modèle macroscopique et le problème de fermeture sont donnés par les Eqs. (3.1) à (3.8) du cas de validation en 2D.

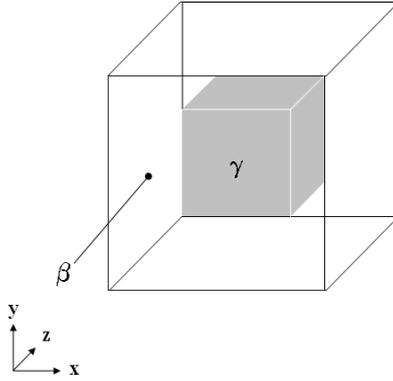


FIG. 3.5: Configuration 3D employée dans le cadre de la diffusion entre deux régions ayant des coefficients de diffusion différents.

Pour cette série de calculs, le seul paramètre variant est la diffusion micro-

scopique adimensionnée, les autres paramètres étant fixés comme en 2D à :

$$Pe = 0, \quad Ki = 0, \quad \alpha_\gamma = \mathbf{0}, \quad K_{Aeq} = 1$$

Les résultats numériques sont reportés sur la Fig. 3.6, sur laquelle nous montrons aussi les résultats obtenus dans le cas 2D.

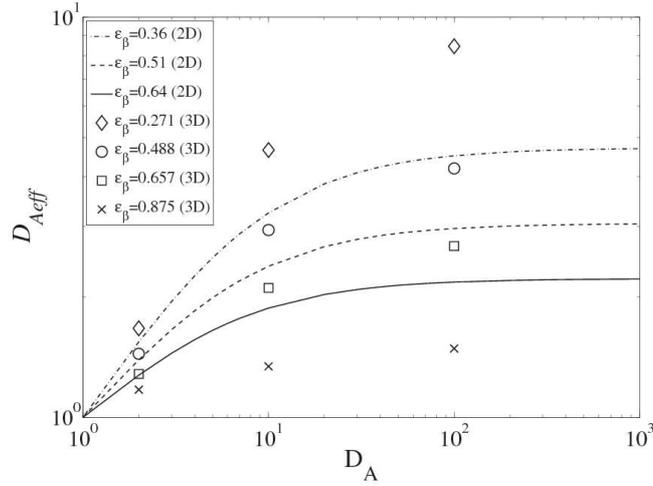


FIG. 3.6: Diffusion effective en fonction du rapport des coefficients de diffusion dans les deux régions pour différentes valeurs de ε_β . $Ki = 0$, $Pe = 0$, $\alpha_\gamma = \mathbf{0}$, $K_{Aeq} = 1$. Maillage : 100×100 (2D) et $40 \times 40 \times 40$ (3D).

Résoudre un problème 2D ou 3D ne semble pas avoir d'influence sur l'allure générale suivie par D_{Aeff} . En effet, quelque soit la configuration, D_{Aeff} tend vers une valeur limite aux grandes valeurs de D_A . Cependant, pour des valeurs de ε_β proches (e.g. $\varepsilon_\beta = 0.64$ en 2D et $\varepsilon_\beta = 0.657$ en 3D), on remarque que cette limite est plus haute dans le cas 3D. La variation de la diffusion microscopique est un peu plus influente en 3D qu'en 2D. Cette dépendance semble d'autant plus marquée que ε_β est petit. Enfin, on vérifie bien que le tenseur de diffusion effective, compte tenu de toutes les symétries, est bien sphérique.

3.2 Diffusion - réaction

3.2.1 Validation sur un cas 2D

Ochoa et al. [1986] et Ochoa [1988] ont traité le problème de diffusion/réaction dans un système fluide/amas de cellules. Dans ces travaux, en débutant par une description microscopique des phénomènes et en utilisant la méthode de la prise de moyenne volumique, un modèle à une équation en milieu diphasique a été obtenu. En plus de l'ajout d'un terme de réaction dans les équations de conservation, les auteurs ont imposé une condition de non-équilibre à l'interface cellule/fluide.

A titre de comparaison avec ces travaux, nous avons résolu le problème de fermeture sans convection, c'est-à-dire $Pe = 0$. Dans leurs travaux, Ochoa et al. [1986] et Ochoa [1988] ont négligé le terme de réaction, ce qui nous impose de fixer $Ki = 0$. Dans le chapitre traitant du problème complet (chapitre 5), nous discuterons de la contrainte imposée par Ochoa et al. [1986] et Ochoa [1988] conduisant à négliger le terme de réaction dans le problème de fermeture. En fixant ces valeurs de paramètres, notre tenseur de dispersion effective se ré-écrit alors :

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \varepsilon_\gamma \boldsymbol{\kappa} + \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (3.14)$$

Le problème de fermeture à résoudre revenant à :

$$\mathbf{D}_A : \nabla \nabla \mathbf{b}_\gamma = 0 \text{ dans } V_\gamma \quad (3.15)$$

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0 \text{ dans } V_\beta \quad (3.16)$$

$$B.C.3 : \quad \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\beta + \mathbf{I}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\gamma + \mathbf{I}) \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (3.17)$$

$$B.C.4 : \quad -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \boldsymbol{\alpha}_\gamma \cdot (\nabla \mathbf{b}_\gamma + \mathbf{I}) = \mathbf{b}_\gamma - \mathbf{b}_\beta \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (3.18)$$

$$B.C.5 : \quad \mathbf{b}_\eta(r + l_i) = \mathbf{b}_\eta(r) \quad i = 1, 2, 3; \quad \eta = \beta, \gamma \quad (3.19)$$

$$\langle \mathbf{b}_\eta \rangle^\eta = 0 \quad ; \quad \langle \mathbf{b}_\eta \rangle = 0 \quad \eta = \beta, \gamma \quad (3.20)$$

Le problème de fermeture ci-dessus est résolu sur la cellule unitaire présentée sur la Fig. 3.7 et pour trois valeurs de la fraction volumique en fluide ($\varepsilon_\beta = 0.64, 0.51$ et 0.36).

On peut remarquer que le problème de fermeture est similaire à celui du

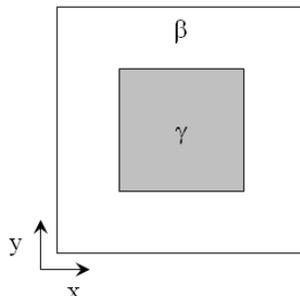


FIG. 3.7: Cellule unitaire employée lors de la validation sur le problème de diffusion - réaction 2D.

problème de diffusion pure entre deux régions (paragraphe 3.1.1). La différence majeure réside dans la condition aux limites (3.18) dans laquelle la variable de fermeture n'est plus considérée comme continue ($\mathbf{b}_\gamma \neq \mathbf{b}_\beta$). Ochoa et al. [1986] et Ochoa [1988] ont discrétisé le problème à l'aide de deux méthodes : la méthode des Différences Finies (FDM) et la méthode des Eléments de Frontière (BEM). En ce qui concerne cette dernière méthode de discrétisation, Ochoa [1988] a étudié seulement deux valeurs de fraction volumique fluide, à savoir $\varepsilon_\beta = 0.64$ et 0.36 . Tous les calculs ont été effectués en introduisant les paramètres suivants :

$$K_{Aeq} = 0.5 \quad ; \quad \mathbf{D}_A = 2\mathbf{I} \quad ; \quad \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{I} \quad ; \quad \boldsymbol{\alpha}_\gamma = 10\mathbf{I} \quad (3.21)$$

Les résultats donnés par Ochoa [1988] en utilisant la méthode FDM ont été obtenus pour un maillage 20×20 . Cependant, pour des raisons de symétrie, ses résolutions ont été effectuées sur un quart de cellule unitaire, ce qui correspond, dans notre cas, à un maillage de 40×40 . Sur la Fig. 3.8, nous avons reporté la composante xx du tenseur \mathbf{D}_{Aeff} en fonction du nombre total de mailles.

La Figure 3.8 montre que les termes du tenseur de dispersion sont sous-estimés quand le maillage est grossier. Cependant, nos résultats approchent ceux d'Ochoa avec une méthode BEM quand le maillage est raffiné (jusqu'à 200×200) bien que de faibles différences apparaissent à cause de la méthode de discrétisation employée (Volumes finis pour nous, BEM et FDM dans la référence citée).

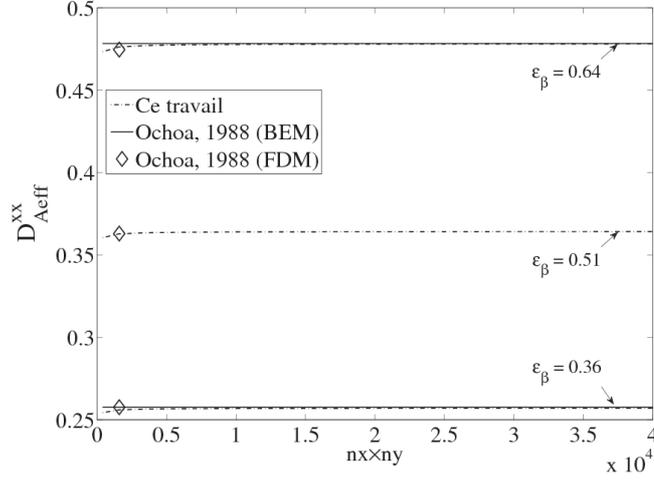


FIG. 3.8: D_{Aeff}^{xx} en fonction du nombre total de mailles pour différentes valeurs de ε_β . Comparaison avec les résultats fournis par avec $Ki = 0$, $\alpha_\gamma = 10\mathbf{I}$, $\mathbf{D}_A = 2\mathbf{I}$, $\kappa = \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 0.5$, $Pe = 0$.

La méthode BEM étant généralement considérée comme la méthode de discrétisation la plus performante, les résultats issus de cette méthode sont utilisés comme référence. Pour un maillage de 200×200 , l'erreur entre la BEM (avec 200 éléments) et nos résultats est inférieure à 1%. Notre outil numérique peut donc être considéré comme validé pour le cas de diffusion - réaction dans un système diphasique 2D.

Comme dans le cas de validation précédent, la sphéricité de \mathbf{D}_{Aeff} est bien vérifiée, l'introduction de la résistance au transfert de matière à l'interface β/γ (ou non-équilibre) n'altère en rien cette propriété.

3.2.2 Résultats obtenus pour des cas 3D

En conservant les valeurs des paramètres du paragraphe 3.2.1, une structure 3D a été étudiée. Il s'agit d'inclusions de forme cubique de la phase γ (cellule) dans une matrice de fluide avec une structure cubique simple (Fig. 3.9).

Les résultats obtenus (Fig. 3.10) montrent un comportement similaire à celui observé en 2D, à savoir D_{Aeff} croît avec la fraction volumique en fluide (ε_β). Là

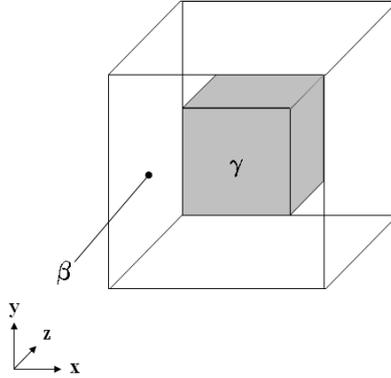


FIG. 3.9: Configuration de la cellule unitaire employée pour la résolution des problèmes de diffusion - réaction 3D.

encore, compte tenu de la symétrie du problème et de la géométrie, le tenseur de diffusion effective obtenu est sphérique : $\mathbf{D}_{Aeff} = D_{Aeff}\mathbf{I}$. En effet, les valeurs maximales des termes extra-diagonaux sont de l'ordre de 10^{-14} .

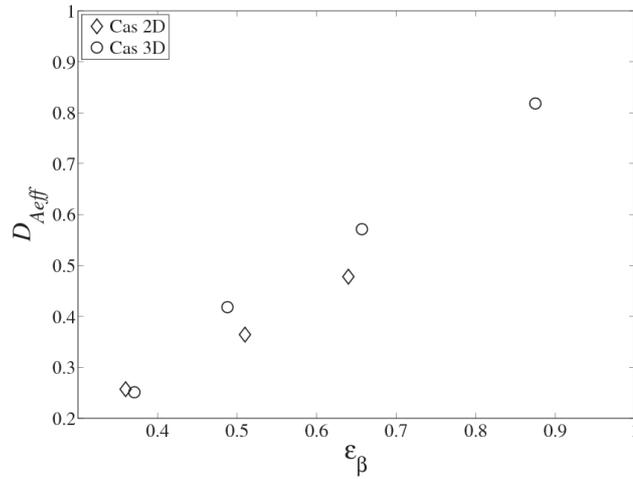


FIG. 3.10: Comparaison des D_{Aeff} obtenus dans le cas de la diffusion - réaction en 2D et en 3D. Maillages : 200×200 (2D) et $40 \times 40 \times 40$ (3D). $Pe = 0$, $Ki = 0$, $\alpha_\gamma = 10\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 0.5$, $\mathbf{D}_A = 2\mathbf{I}$, $\kappa = \mathbf{I}$.

3.3 Dispersion passive

Afin de compléter la validation, nous présentons maintenant des tests de dispersion passive dans un système diphasique (solide/fluide). Le modèle macroscopique et le tenseur de dispersion effective sont alors donnés par :

$$\varepsilon_\beta \frac{\partial \{C_A\}}{\partial t} = \mathbf{D}_{Aeff} : \nabla \nabla \{C_A\} - \varepsilon_\beta Pe \langle \mathbf{V}_\beta \rangle \cdot \nabla \{C_A\} \quad (3.22)$$

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (3.23)$$

3.3.1 Cas analytique : Théorie de Taylor-Aris

Il y a un peu plus d'un demi siècle, et comme indiqué par Fried and Combarous [1971], Taylor [1953] a décrit la dispersion dans un milieu poreux en faisant l'analogie avec un faisceau de tubes capillaires de section circulaire dans un écoulement macroscopique. Sous un certain nombre d'hypothèses [Fried and Combarous, 1971], il a dérivé une expression (Eq. (3.24)) reliant le coefficient de diffusion moléculaire au coefficient de dispersion effective.

$$D_{eff} = \frac{a_T^2 U_{T0}^2}{192 D_{TA}} \quad (3.24)$$

où D_{eff} est le coefficient de dispersion effective ($m^2.s^{-1}$), a_T le rayon du capillaire (m), U_{T0} la vitesse maximale sur l'axe du capillaire ($m.s^{-1}$), D_{TA} le coefficient de diffusion moléculaire ($m^2.s^{-1}$). , quelques années plus tard, étendit les travaux de Taylor aux capillaires droits ayant un profil quelconque et en prenant en compte la diffusion axiale. En utilisant la méthode des moments, Aris a développé une expression du coefficient de dispersion effective dont la forme générale est donnée par :

$$D_{eff} = D_{TA} + \frac{a_A^2 U_{Am}^2}{S D_{TA}} \quad (3.25)$$

où a_A une dimension caractéristique de la section droite du capillaire (m), U_{Am} la vitesse moyenne de l'écoulement ($m.s^{-1}$) et S un nombre adimensionnel dépendant de la section droite du capillaire ($S = 48$ pour une section circulaire [Fried and Combarous, 1971]).

Dans ce travail, nous nous intéressons uniquement au cas de l'écoulement de Poiseuille en deux dimensions entre des plaques planes. Ce cas de figure, étudié par Wooding [1960], et reporté par Zhu and Fox [2002] et Dorfman and Brenner

[2001], conduit à une expression pour le coefficient de dispersion de Taylor-Aris pour cette configuration de la forme :

$$D_{eff} = D_{TA} + \frac{a_A^2 U_{Am}^2}{210 D_{TA}} \quad (3.26)$$

En utilisant notre notation adimensionnelle, l'Eq. (3.26) devient :

$$D_{eff} = 1 + \frac{\varepsilon_\beta^2 Pe^2}{210} \quad (3.27)$$

où ε_β est la fraction volumique en fluide (ou dans ce cas, la porosité) et Pe le nombre de Péclet définis respectivement par :

$$\varepsilon_\beta = \frac{a}{l} \quad ; \quad Pe = \frac{\|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta\| l}{D_\beta} \quad (3.28)$$

où $\|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta\|$ représente la norme de la vitesse moyenne interstitielle ($m.s^{-1}$), D_β le coefficient de diffusion dans la phase fluide ($m^2.s^{-1}$), l la longueur de la cellule de calcul (m), a la largeur de la phase fluide dans la cellule de calcul (m). Ces différents paramètres sont montrés sur la Fig. 3.11. La forme adimensionnée donnée par l'Eq. (3.27) est semblable à celle donnée par Dullien [1979].

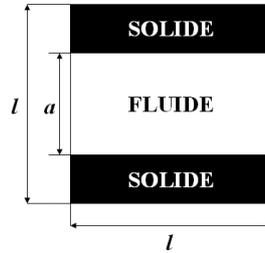


FIG. 3.11: Configuration de la cellule de calcul correspondant à un couple de plaques planes parallèles.

Afin de comparer les résultats obtenus à l'aide de notre outil numérique à ceux fournis par la théorie de Taylor-Aris, le tenseur de dispersion est déterminé pour différentes valeurs du nombre de Péclet (10^{-2} , 1 et 10^2) et pour différentes porosités (0.2, 0.4, 0.6 et 0.8). La configuration de notre cellule unitaire est rappelée sur la Fig. 3.11. Tous nos résultats présentent une excellente adéquation

avec la solution analytique, comme indiqué sur la Fig. 3.12. Pour les trois valeurs de Péclet étudiées ici, l'erreur relative, définie comme $\frac{D_{analytique}^{xx} - D_{numérique}^{xx}}{D_{analytique}^{xx}} \times 100$, reste faible voire très faible (inférieure à 0.5%), ce qui nous confirme le bon accord entre les solutions analytique et numérique.

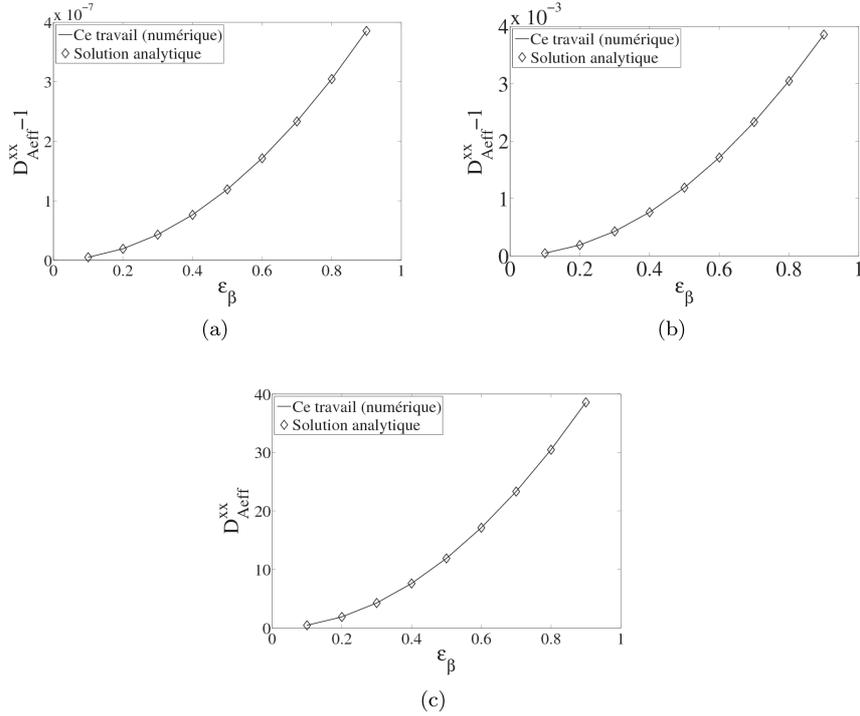


FIG. 3.12: Comparaison entre la solution analytique et nos résultats numériques dans le cadre d'un écoulement entre deux plaques planes. Sur les Figs. a) et b), nous avons tracé l'évolution de $D_{Aeff}^{xx} - 1$ en fonction de la porosité ε_β .

3.3.2 Comparaison avec des résultats numériques

Le problème classique de la dispersion passive dans un milieu poreux homogène d'un traceur inerte a été traité par Quintard and Whitaker [1994c] dans un travail plus général sur la contamination des aquifères par une Phase Liquide Non-Aqueuse (NAPL). Partant d'une description microscopique d'un système

triphase (impliquant le NAPL, une phase liquide aqueuse et une phase solide, voir Fig. 3.13a) avec de la convection, de la diffusion et un échange possible entre la phase aqueuse et le NAPL, Quintard and Whitaker [1994c] ont utilisé la méthode de prise de moyenne volumique pour exprimer le tenseur de dispersion effective (présenté ici sous forme adimensionnée) :

$$\mathbf{D}_{eff} = \left(\varepsilon_\beta \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \mathbf{b}_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\alpha}} \mathbf{n}_{\beta\alpha} \mathbf{b}_\beta dA \right) - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (3.29)$$

Dans le cas où la phase piégée γ est absente (Fig. 3.13b), le tenseur de dispersion et le problème de fermeture deviennent :

$$\mathbf{D}_{eff} = \left(\varepsilon_\beta \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\alpha}} \mathbf{n}_{\beta\alpha} \mathbf{b}_\beta dA \right) - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (3.30)$$

Problème 1 :

$$Pe \mathbf{V}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta + Pe \tilde{\mathbf{V}}_\beta = \nabla^2 \mathbf{b}_\beta \text{ dans } V_\beta \quad (3.31)$$

$$B.C.2: \quad \mathbf{n}_{\beta\alpha} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\alpha} \text{ sur } A_{\beta\alpha} \quad (3.32)$$

$$\mathbf{b}_\beta(r + l_i) = \mathbf{b}_\beta(r) \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.33)$$

Cette dernière formulation correspond exactement à la forme monophasique de l'Eq. (2.21). Il s'agit finalement de la dispersion passive classique en milieu poreux homogène dont la mise à l'échelle a été bien détaillée par Whitaker [1999] (chapitre 3) et conduisant exactement à la forme (3.30) pour le tenseur de dispersion et au problème de fermeture (3.31) à (3.33).

Chella et al. [1998] ont obtenu, dans le cadre de l'écoulement multiphasique et multicomposant dans un milieu poreux, une expression du tenseur de dispersion effective et des problèmes de fermeture similaires à ceux présentés par Quintard and Whitaker [1994c]. Dans ce cas encore, l'expression du coefficient de dispersion effective et les problèmes de fermeture associés sont identiques à ceux de notre développement pour une même configuration.

Dans l'étude présentée ici, la forme du tenseur de dispersion effective donnée par Whitaker [1999] est facilement obtenue. Le problème de fermeture, quant à lui, nécessite de reprendre la forme initiale fournie par Lasseux et al. [2004] (Eqs. (2.23) à (2.30) pour rappel) dans laquelle les termes relatifs à la phase cellulaire

γ sont éliminés, menant à la résolution d'un problème de fermeture identique à celui en \mathbf{d}_η . Nous illustrons donc la validation sur ce type de problème en commençant par le type de cellule unitaire de la Fig. 3.13, le gradient de pression étant appliqué selon \mathbf{e}_x .

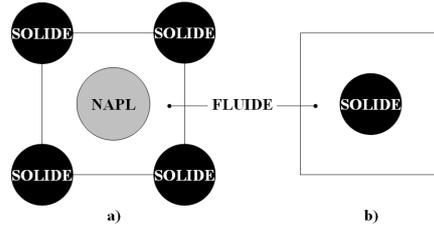


FIG. 3.13: Configurations utilisées par : **a)** dans le cadre de leur étude et **b)** dans le cas de la dispersion passive classique.

Comme montré sur la Fig. 3.14, la composante longitudinale du tenseur de dispersion effective suit la tendance classique en fonction du nombre de Péclet reportée par Eidsath [1981], Edwards et al. [1991, 1993] et Chella et al. [1998]. De plus, pour une fraction volumique en fluide identique ($\varepsilon_\beta = 0.3725$), les résultats de la Fig. 3.14 sont en excellent accord avec les résultats fournis par .

Sur la Fig. 3.15, nos résultats pour D_{Aeff}^{yy} confrontés à ceux fournis par Quintard and Whitaker [1994c] montrent aussi un excellent accord avec un écart relatif par rapport à la référence inférieure à 1%. On peut ajouter que D_{Aeff}^{yy} est beaucoup moins influencé par Pe que D_{Aeff}^{xx} . Pour la configuration utilisée ici, $D_{Aeff}^{xx} = O(10^3)$ à $Pe = 10^3$ tandis que $D_{Aeff}^{yy} = O(10^{-1} - 1)$ pour la même valeur de Pe . Tant que $Pe \leq 10$, D_{Aeff}^{yy} est quasiment constante, au-delà, D_{Aeff}^{yy} réagit faiblement avec Pe . Ce type de comportement du coefficient de dispersion transversal, aussi démontré par Quintard et al. [1997] dans le cadre de la dispersion de chaleur en milieu diphasique, peut être imputé au fait que l'on travaille avec un écoulement principalement unidirectionnel (dans le sens longitudinal).

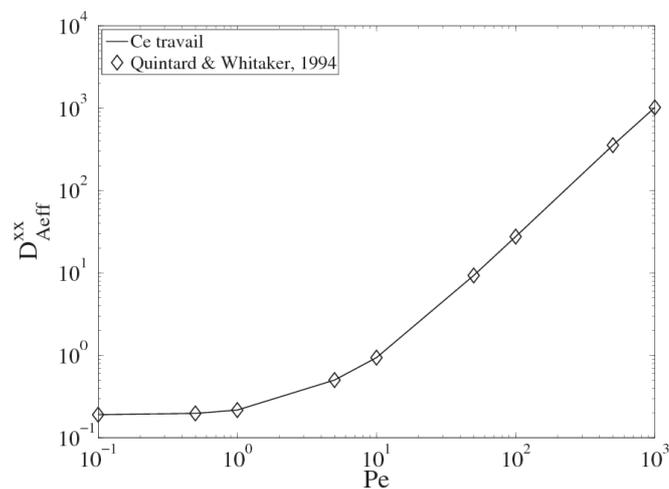


FIG. 3.14: Coefficient longitudinal de la dispersion effective en fonction de Pe : Comparaison entre les résultats de Quintard and Whitaker [1994c] et ce travail. Cas de la cellule unitaire de la Fig. 3.13b. Nombre de mailles : 100×100 , $\varepsilon_\beta = 0.3725$.

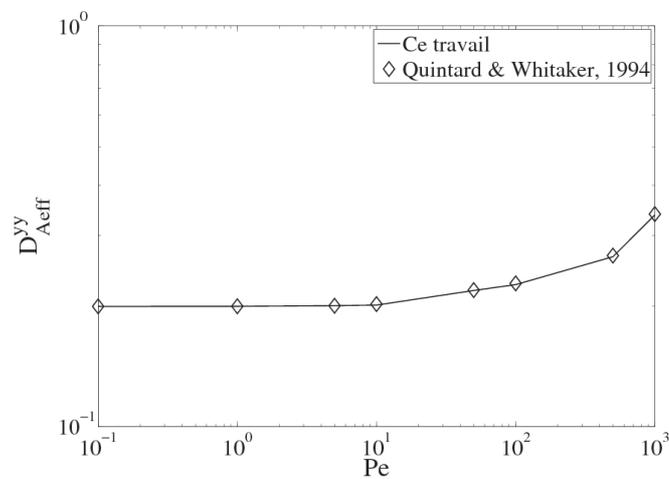


FIG. 3.15: Coefficient transversal de la dispersion effective (D_{Aeff}^{yy}) en fonction de Pe : Comparaison avec les résultats de Quintard and Whitaker [1994c]. Cas de la cellule unitaire de la Fig. 3.13b. Maillage : 100×100 , $\varepsilon_\beta = 0.3725$.

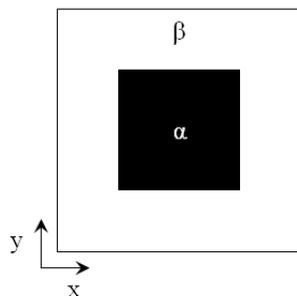


FIG. 3.16: Cellule unitaire utilisée dans le cadre de la dispersion passive en comparaison avec Eidsath [1981] et Noble et al. [1998].

Pour un autre type de cellule unitaire tel que celui représenté sur la Fig. 3.16, liste des valeurs de $\varepsilon_\beta^{-1} D_{Aeff}^{xx}$ fournies par Eidsath [1981] et Noble et al. [1998] que nous avons reporté sur la Fig. 3.17 avec nos résultats numériques.

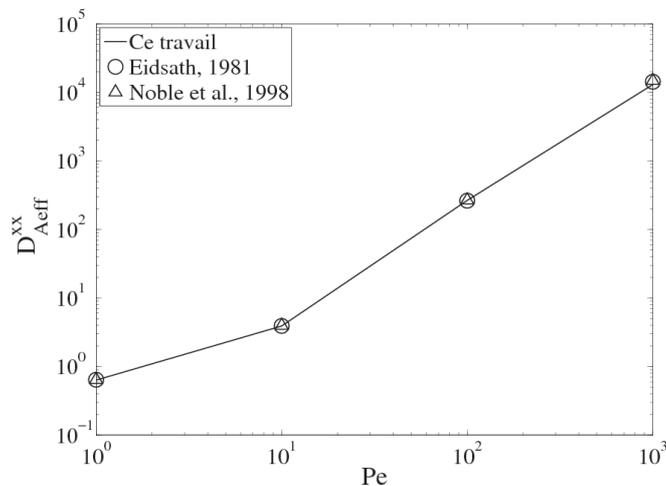


FIG. 3.17: Comparaison entre nos résultats numériques et ceux fournis par Eidsath [1981] et Noble et al. [1998], répertoriés par Whitaker [1999]. $\varepsilon_\beta = 0.36$. Maillage : 100×100 .

Malgré des techniques de discrétisations différentes (méthode des éléments finis pour Eidsath [1981], méthode de Boltzmann sur réseau (*lattice Boltzmann method*) pour Noble et al. [1998], méthode des volumes finis dans ce document), nos résultats sont en bonne adéquation avec ceux de la littérature. En effet, l'erreur relative estimée entre nos résultats et ceux de la littérature est de l'ordre de 1%.

Dans la référence citée ci-dessus [Whitaker, 1999], la composante yy de \mathbf{D}_{Aeff} n'est pas évoquée. Sur la Fig. 3.18, nous avons représenté le comportement de D_{Aeff}^{yy} en fonction de Pe pour les deux types de cellule unitaire des Figs. 3.13b et 3.16.

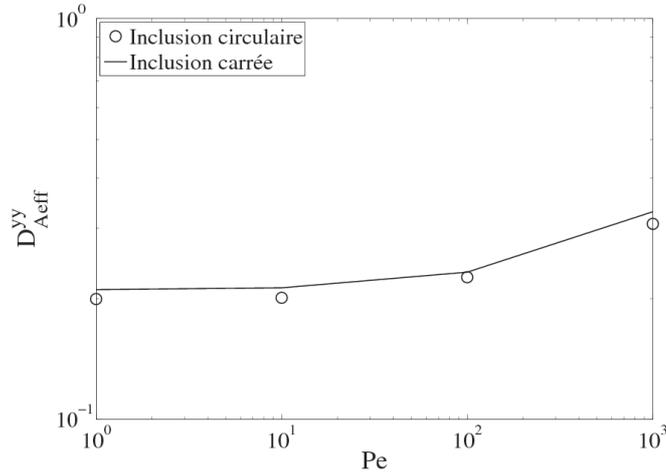


FIG. 3.18: D_{Aeff}^{yy} en fonction de Pe pour deux cellules unitaires : une composée d'une inclusion solide de profil carré ($\varepsilon_\beta = 0.36$) et une constituée d'une phase solide de profil circulaire ($\varepsilon_\beta = 0.3725$). Maillage : 100×100 .

La Fig. 3.18 met bien en évidence que la composante D_{Aeff}^{yy} présente un comportement similaire quelque soit la forme de l'inclusion solide. On notera encore le contraste d'ordre de grandeur entre D_{Aeff}^{xx} (Fig. 3.17) et D_{Aeff}^{yy} sur cette figure.

3.3.3 Dispersion passive en 3D

Les résultats dans la littérature sont donnés la plupart du temps pour des cellules unitaires bidimensionnelles. L'outil numérique présenté ici étant réalisé pour calculer le tenseur de dispersion effective de milieux tridimensionnels, nous présentons quelques résultats obtenus lors de la dispersion passive dans un milieu 3D modèle représenté par la Fig. 3.19. Le gradient de pression est toujours appliqué selon \mathbf{e}_x .

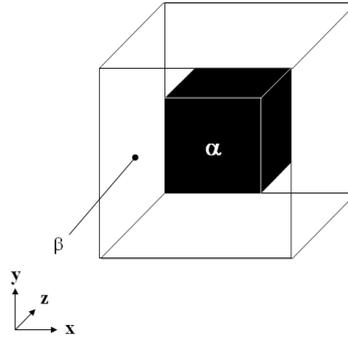


FIG. 3.19: Milieu 3D utilisé pour le calcul de \mathbf{D}_{Aeff} en dispersion passive. Maillage de $40 \times 40 \times 40$.

L'analyse des composantes diagonales de \mathbf{D}_{Aeff} en fonction de Pe (Fig. ***) appelle plusieurs remarques. Tout d'abord, le comportement exhibé par la dispersion longitudinale (D_{Aeff}^{xx}) en fonction de Pe est similaire à celui observé en 2D. Tant que $Pe \leq 1$, D_{Aeff}^{xx} est quasiment constant (a). Quand $Pe \geq 10$, le comportement de D_{Aeff}^{xx} est régi par les effets hydrodynamiques ($Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle$). Ce comportement peut alors être décrit par une loi de puissance en Pe . L'ensemble des deux descriptions mènent alors à une corrélation de la forme :

$$D_{Aeff}^{xx} = a + bPe^n \quad (3.34)$$

où a correspond aux effets diffusifs purs et bPe^n aux effets purement hydrodynamiques. Sur l'intervalle $[Pe = 10; Pe = 10^3]$, b et n sont estimés comme étant égaux à $b = 9.1 \cdot 10^{-3}$ et $n = 1.86$. En utilisant les résultats obtenus pour $Pe < 1$, $a = 0.38$. Une précision doit être apportée ici en ce qui concerne la détermination des coefficients ci-dessus, et en particulier b et n . Avant d'appliquer

une régression linéaire sur les résultats obtenus quand $Pe \geq 10$, la valeur de a est soustraite afin de ne garder que les effets purement hydrodynamiques, effets d'intérêt pour la détermination de b et n .

En ce qui concerne D_{Aeff}^{yy} et D_{Aeff}^{zz} (Fig. 3.20b), ces deux composantes sont égales sur toute la gamme de Pe étudiée et restent très inférieurs, à fort Pe , à D_{Aeff}^{xx} . D'après les résultats obtenus ici, il semble aussi possible d'exprimer ces deux composantes à l'aide d'une fonctionnelle de la forme $b'Pe^m$. Ainsi, en procédant de la même manière que pour D_{Aeff}^{xx} , les valeurs de b' et m sont estimées à $b' = 8 \cdot 10^{-4}$ et $m = 0.63$. Ces valeurs sont à prendre avec précaution en raison du faible nombre de points (2) utilisés pour cette détermination. Cependant, ces valeurs semblent être beaucoup plus petites que pour D_{Aeff}^{xx} .

Notre outil numérique étant validé pour différentes configurations (Diffusion pure, Diffusion-Réaction et Dispersion passive), et avant de réaliser une étude paramétrique du problème complet, une analyse plus approfondie des résultats obtenus dans le cadre de la dispersion passive est tout d'abord être présentée. Cette première étude pourra être vue, dans le cadre du travail présenté ici, comme une première approche au design des fibres constituant le support de culture.

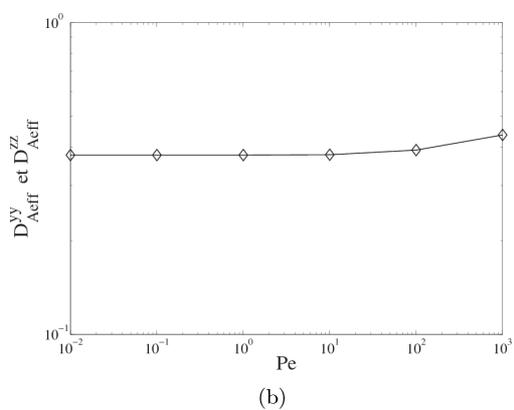
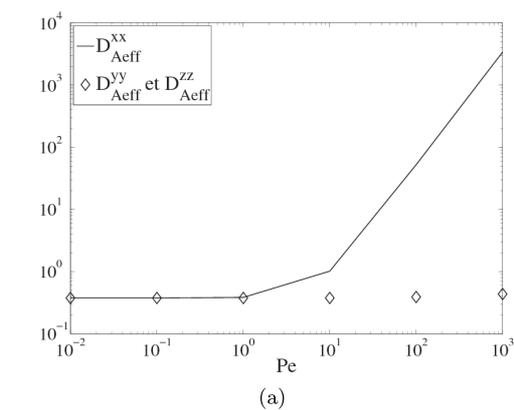


FIG. 3.20: D_{Aeff}^{xx} , D_{Aeff}^{yy} et D_{Aeff}^{zz} en fonction du nombre de Péclet pour une configuration 3D. $\varepsilon_\beta = 0.488$. **a)** représentation des trois composantes en fonction de Pe , **b)** D_{Aeff}^{yy} et D_{Aeff}^{zz} en fonction de Pe . Maillage : $40 \times 40 \times 40$.

Chapitre 4

Dispersion passive : cas solide/fluide

La dispersion passive d'espèces en milieu poreux est un sujet très largement documenté. Les processus de dispersion ont attiré l'attention de différentes branches de la science et de l'ingénierie. En Génie Chimique, on étudie, par exemple, la dispersion pour des applications telles que la chromatographie [Baumeister et al., 1995] ou les réacteurs chimiques [Balakotaiah and Chang, 1995]. Les ingénieurs pétroliers, quant à eux, étudient les processus de déplacement de produits miscibles dans le cadre de la récupération d'huiles [Blackwell, 1962]. Par le biais du cadre général de ce travail, les sciences médicales sont aussi intéressées par les processus de transports associés aux organismes vivants (tissus, organes...) comme par exemple les hématies dans un écoulement sanguin [Bishop et al., 2002] ou le transfert de matière lors de la croissance *in vitro* de tissus [Obradovic et al., 2000]. Enfin, un domaine très intéressé par ces phénomènes de dispersion (active ou passive) est l'hydrologie et plus particulièrement le champ de recherche lié à la contamination d'aquifère [De Josselin de Jong and van Duijn, 1986, Quintard and Whitaker, 1994c], par exemple.

Le phénomène de dispersion en milieux poreux a été étudié au moins depuis les travaux de Slichter [1905] à propos du mouvement d'eau souterraine. Une explication théorique simple de ce phénomène a été apportée dans un premier temps par Taylor [1953] puis par Aris [1956] qui ont exprimé la dispersion effective en fonction de Pe^2 . Suite à ces travaux, Hoagland and Prud'homme [1985] ont étudié la dispersion d'un soluté dans un milieu poreux caractérisé par un

ensemble de tubes capillaires de section droite circulaire ayant une variation sinusoïdale dans le sens de l'écoulement. Le problème de ces théories est qu'elles ne prennent pas en compte les interconnexions transversales qui peuvent apparaître, notamment dans les milieux réels non-consolidés. Pour y remédier, des modèles alternatifs ont été dérivés, impliquant des éléments probabilistes tels que les modèles stochastiques de Aris and Amundson [1957], Saffman [1959, 1960] et Koch and Brady [1985], des modèles de capillaires de diamètre aléatoire [Simon and Kelsey, 1971a,b] ou des modèles de prise de moyenne tels que ceux de Bear [1969] et Carbonell and Whitaker [1983]. La prise en compte de la possibilité d'interconnexions entre les pores permet ainsi d'étendre les études de dispersion à des milieux modèles multidimensionnels (2D voire 3D). Ainsi les propriétés de transport sont rigoureusement exprimées en terme de vitesse moyenne du fluide et de propriétés physico-chimiques liées à la géométrie de la micro-échelle [Edwards et al., 1991].

Dans les chapitres précédents, nous avons vu comment, à partir d'une description microscopique du système, Lasseux et al. [2004] ont obtenu un modèle macroscopique. De plus, nous avons validé l'outil de calcul à l'aide de cas tests. Plus particulièrement, nous avons testé le problème de la dispersion passive dans deux cas 2D : écoulement entre deux plaques planes (Théorie de Taylor-Aris) et écoulement dans un treillis de cylindre de section circulaire [Quintard and Whitaker, 1994c, Chella et al., 1998]. L'outil numérique permet, entre autre, de déterminer les propriétés de transport (tenseur de dispersion effective) d'un milieu poreux évolutif dans le cas de la dispersion passive. Nous nous proposons donc de réaliser une étude un peu plus approfondie de ce problème. Elle consiste en l'analyse du comportement du tenseur de dispersion en fonction de la porosité ainsi qu'en fonction de la manière dont l'inclusion solide peut évoluer dans le cas d'une structure 2D simple. Cette étude s'intègre bien dans le cadre général de ce document car ce type de configuration est rencontré à l'instant initial de la culture tissulaire. En d'autres termes, l'analyse qui suit peut-être vue comme un premier élément d'aide au design de formes d'objet microscopiques optimales pour initier la culture. De plus, l'évolution d'une phase solide consistant un milieu poreux est rencontrée dans d'autres domaines comme par exemple l'étude de l'évolution de systèmes carbonatés (précipitation/dissolution).

Le modèle macroscopique et le tenseur de dispersion effective associés à la dispersion passive sont donnés par les Eqs. (3.22) et (3.23), tandis que le problème de fermeture revient à celui utilisé lors de la validation sur ce problème (Eqs. (3.31) à (3.33)). Un changement dans l'écriture du modèle doit intervenir

à ce stade. En effet, l'utilisation de la notation $\{C_A\}$ n'a plus lieu d'être, une seule concentration étant alors considérée ici, donnant $\{C_A\} = \langle C_{A\beta} \rangle^\beta$, ce qui nous mène à la reformulation suivante :

$$\frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = \mathbf{D}'_{Aeff} : \nabla \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta - Pe \langle \mathbf{V}_\beta \rangle^\beta \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta, \quad (4.1)$$

laquelle a été divisée par ε_β afin de ne plus faire apparaître de façon explicite ce paramètre. Le tenseur de dispersion effective \mathbf{D}'_{Aeff} est alors donné par :

$$\mathbf{D}'_{Aeff} = \mathbf{I} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta \quad (4.2)$$

Ces dernières formulations (Eqs. (4.1) et (4.2)) correspondent à la forme habituellement indiquée dans la littérature [Carbonell and Whitaker, 1983, Amaral Souto and Moyne, 1997, Whitaker, 1999, Neculae et al., 2002, Aggelopoulos and Tsakiroglou, 2007].

Comme énoncé un peu plus haut dans ce chapitre, il est question de l'influence de l'évolution de l'inclusion solide (α). Pour cela, nous avons augmenté, de manière artificielle, la fraction volumique en phase solide. Nous parlerons d'expansion (ou croissance) *longitudinale* quand la phase solide est plus longue que large (Fig. 4.1 a), et d'expansion *transversale* quand la phase solide est plus large que longue (Fig. 4.1 b). La croissance *homothétique* en x et y est également abordée. Elle coïncide en fait avec une analyse de la dispersion en fonction de la porosité pour le type de cellule unitaire considéré.

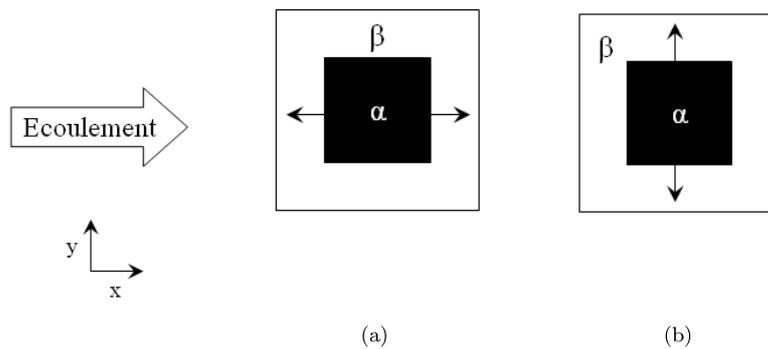


FIG. 4.1: Deux types d'expansion utilisées dans ce travail : **a)** expansion longitudinale, **b)** accroissement transversal de la phase solide.

Dans cet esprit, une expansion *homothétique* (identique selon chaque direction de l'espace) est donc tout d'abord étudiée et discutée avant d'analyser la dépendance de \mathbf{D}_{Aeff} aux croissances longitudinales et transversales.

4.1 Evolution du tenseur de dispersion avec le nombre de Péclet et la porosité (croissance homothétique).

Le comportement de \mathbf{D}'_{Aeff} pour de grandes plages de variation de Pe (entre 10^{-2} et 10^3) et de porosité (de 0.19 à 0.99) est, tout d'abord, étudié sur une inclusion de forme carrée, telle qu'indiquée sur la Fig. 4.1. Pour tous les résultats présentés ici, le tenseur de dispersion est diagonal, nous menant à discuter uniquement de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et $D'_{Aeff}{}^{yy}$.

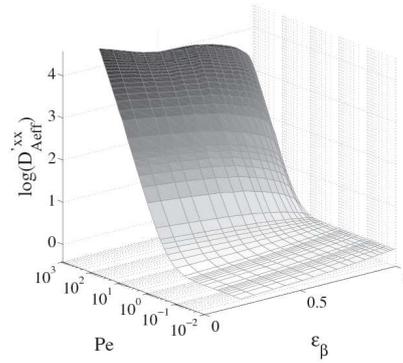
La dépendance de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et $D'_{Aeff}{}^{yy}$ vis-à-vis de Pe et ε_β sont résumées sur la Fig. 4.2 où les composantes principales du tenseur de dispersion sont tracées simultanément en fonction de la porosité et du nombre de Péclet.

4.1.1 Comportement en fonction de Pe

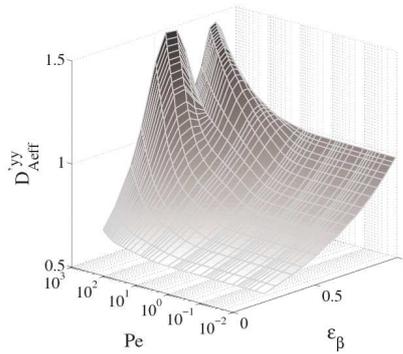
Dans un premier temps, l'analyse de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ représenté uniquement en fonction de Pe (Fig. 4.3 a) montre que le comportement décrit par Eidsath [1981], Edwards et al. [1991], Quintard and Whitaker [1994c] et Sahraoui and Kaviany [1993] est bien reproduit ici. Tant que Pe est suffisamment petit (< 1 environ), $D'_{Aeff}{}^{xx}$ est très peu affecté par les effets hydrodynamiques et de ce fait reste quasiment constant. A ce stade, $D'_{Aeff}{}^{xx}$ est proportionnel à la diffusion moléculaire à la tortuosité près (noté a ici). Au-delà, les effets hydrodynamiques deviennent prédominants et imposent leur comportement ((quasi-) linéaire en $\log(Pe)$). $D'_{Aeff}{}^{xx}$ peut alors être décrit par une relation en loi de puissance ne Pe (noté bPe^n). Ainsi, et comme indiqué par Quintard and Whitaker [1994c], il est possible de corrélérer le comportement complet de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ par une relation du type (Eq. (4.3)) :

$$D'_{Aeff}{}^{xx} = a + bPe^n \quad (4.3)$$

4.1 Evolution du tenseur de dispersion avec le nombre de Péclet et la porosité (croissance homothétique).



(a)



(b)

FIG. 4.2: Coefficient de dispersion pour la structure 2D de la Fig. 4.1 en fonction de Pe et ε_β . **a)** coefficient longitudinal et **b)** coefficient transversal du tenseur de dispersion effective. Maillage : 100×100 .

Ceci est consistant avec la théorie de Taylor-Aris (présentée dans le chapitre précédent) où le comportement du coefficient de dispersion entre deux plaques planes est décrit par une loi en Pe^2 (Eq. (3.27)) qui peut être considéré comme un cas limite. La détermination des coefficients de l'Eq. (4.3) sera explicitée un peu plus loin dans ce travail.

Concernant le comportement de D_{Aeff}^{yy} en fonction de Pe (Fig. 4.3 b), cette

composante reste faible comparée à $D'_{Aeff}{}^{xx}$ quand les effets convectifs deviennent prépondérants ($Pe \geq 1$). Cette allure est similaire à celle rapportée par Amaral Souto and Moyne [1997] pour $\varepsilon_\beta = 0.64$ et pour un arrangement carré de cylindres carrés (cas considéré ici). Plus précisément, tant que $Pe \leq 10$, $D'_{Aeff}{}^{yy}$ est (quasi-)constant. Au-delà de cette valeur, deux régimes apparaissent (l'un pour $10 \leq Pe \leq 10^2 - 2 \cdot 10^2$ et l'autre pour $Pe > 2 \cdot 10^2$). De ce fait, et comme indiqué par Quintard and Whitaker [1994c] et Amaral Souto and Moyne [1997], ce comportement empêche toute approximation $D'_{Aeff}{}^{yy}$ par une expression du type Eq. (4.3). Le champ de vitesse étant faible dans le sens transversal à l'écoulement, le transfert dispersif, dans cette direction, est alors principalement piloté par la diffusion moléculaire. A titre d'exemple, pour $Pe = 10^3$ et $\varepsilon_\beta = 0.64$, la contribution de la diffusion microscopique est de 1 (en adimensionné, constante quelque soit Pe), alors que la somme des flux interfaciaux et des effets purement hydrodynamiques ($\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta,yy} + Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta,yy}$) est de l'ordre de 0.44. Bien que $Pe \gg 1$, cette dernière contribution n'est donc pas prédominante mais pas négligeable non plus, car elle représente environ 30% de la dispersion transversale.

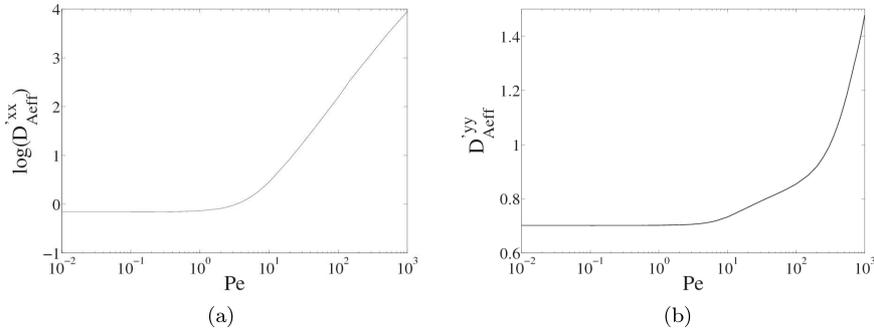


FIG. 4.3: Dépendance de **a)** $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et **b)** $D'_{Aeff}{}^{yy}$ vis-à-vis de Pe pour une fraction volumique en fluide de $\varepsilon_\beta = 0.64$.

4.1.2 Comportement en fonction de la porosité

En reprenant les résultats de la Fig. (4.2), le comportement des termes diagonaux du tenseur de dispersion effective, pour une valeur de Pe fixée, est analysé

ici en fonction de la porosité. Les composantes principales du tenseur de dispersion effective en fonction de la porosité mettent en évidence des comportements très différents, en particulier aux forts nombres de Péclet.

Tout d'abord, $D'_{Aeff}{}^{xx}$ en fonction de ε_β (Fig. 4.4) est caractérisé par un comportement strictement croissant pour de faibles valeurs de Pe (≤ 1). Quand la fraction volumique fluide (ε_β) tend vers 1, la dispersion effective longitudinale ($D'_{Aeff}{}^{xx}$) tend aussi vers l'unité. Afin de comprendre ce comportement, on décompose $D'_{Aeff}{}^{xx}$ (Tableau 4.1). Le terme de diffusion microscopique (\mathbf{I}) est constant quelque soit la porosité. A ces valeurs de Pe , le terme $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta$ reste négligeable (quand $Pe = 1$, ce dernier terme est de l'ordre de $1/10^{2me}$ des flux interfaciaux). Donc, cette augmentation de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ est liée au seul terme $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta$. Ce terme, qui est négatif à ces valeurs de Pe , croît avec ε_β .

ε_β	$D'_{Aeff}{}^{xx}$	\mathbf{I}^{xx}	$\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta xx}$	$Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta xx}$
0.64	0.7316	1	-0.2952	$-2.68 \cdot 10^{-2}$
0.75	0.7905	1	-0.2287	$-1.92 \cdot 10^{-2}$
0.84	0.8523	1	-0.1606	$-1.29 \cdot 10^{-2}$

TAB. 4.1: Valeurs des différents termes dans l'expression de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ pour trois valeurs de ε_β et $Pe = 1$. Maillage : 100×100 .

Pour des valeurs de Pe au-delà de 1, $D'_{Aeff}{}^{xx}$ passe d'une allure croissante à une allure décroissante avec ε_β . L'analyse des différentes contributions a montré, qu'à ces valeurs de Pe , c'est le terme $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta xx}$, qui est prédominant et impose le comportement global de $D'_{Aeff}{}^{xx}$.

En ce qui concerne la composante transversale ($D'_{Aeff}{}^{yy}$, Fig. 4.5), on peut réitérer la même explication pour les cas où $Pe \leq 1$, à savoir que $D'_{Aeff}{}^{yy}$ est croissant avec ε_β . Cette tendance peut même être étendue jusqu'à $Pe = 10$. Ensuite, pour des valeurs du nombre de Péclet plus grandes ($10 < Pe \leq 10^2$), l'allure est d'abord convexe jusqu'à $\varepsilon_\beta = 0.84$ puis au-delà, $D'_{Aeff}{}^{yy}$ présente une courbure concave. Enfin, pour des valeurs de Pe proches de 10^3 , une deuxième concavité apparaît avec un col vers $\varepsilon_\beta = 0.75$.

4.1 Evolution du tenseur de dispersion avec le nombre de Péclet et la porosité (croissance homothétique).

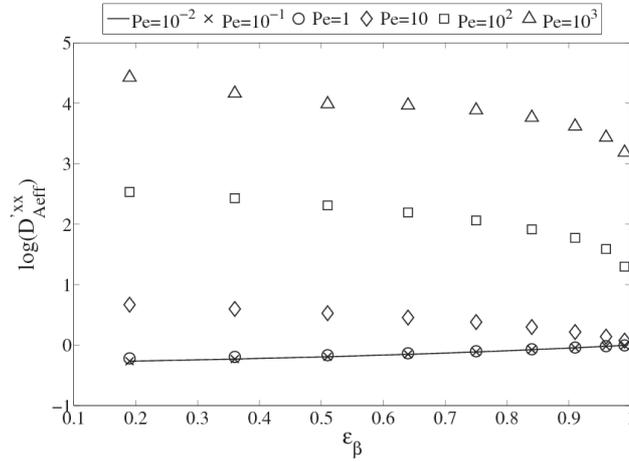


FIG. 4.4: Dépendance de $D_{Aeff}^{'xx}$ en fonction de la porosité pour différentes valeurs de Pe . Maillage : 100×100 .

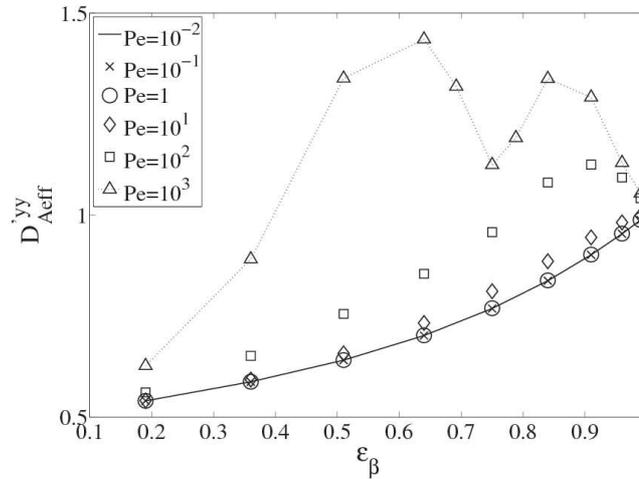


FIG. 4.5: Dépendance de $D_{Aeff}^{'yy}$ en fonction de la porosité pour différentes valeurs de Pe . Maillage : 100×100 .

Aux fortes valeurs de Pe , $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$ étant la contribution majeure, et dans l'optique d'expliquer le comportement observé, nous avons tracé, sur les Figs. 4.7 et 4.8, les évolutions des champs $(\tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta)^{\beta yy}$. Sur ces mêmes figures, l'évolution

de la variable de fermeture le long de l'interface "nord" β/α pour trois valeurs de porosité (0.64, 0.75 et 0.84) a été représentée. On peut rappeler dès maintenant que

$$\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy} = \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\alpha}} n_\beta^y b_\beta^y = \frac{2}{V_\beta} \int_{x=x_{min,\alpha\beta}}^{x=x_{max,\alpha\beta}} b^y|_{y=y_0} \quad (4.4)$$

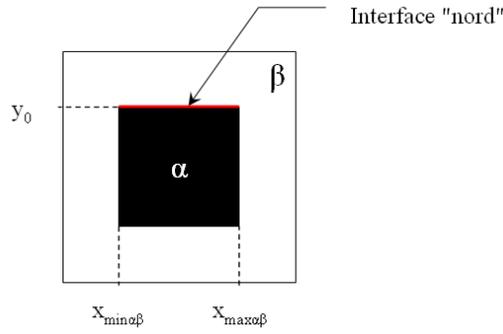


FIG. 4.6: Schéma localisant les différentes interfaces et coordonnées considérées dans l'Eq. (4.4).

où $x_{min,\alpha\beta}$, $x_{max,\alpha\beta}$ et y_0 sont indiqués sur la Fig. 4.6. Il est intéressant de montrer ces champs car c'est l'intégrale de ces champs qui renseigne sur le comportement de $D'_{Aeff}{}^{yy}$. Pour compléter cette compréhension, nous précisons la valeur de la contribution purement hydrodynamique $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$. Dans ce travail, les champs de \mathbf{V}_β (et donc de $\tilde{\mathbf{V}}_\beta$) sont considérés comme constants pour une porosité donnée. Seul le champ de \mathbf{b}_β est alors responsable du changement de comportement observé entre $Pe = 1$ et $Pe = 10^3$.

4.1 Evolution du tenseur de dispersion avec le nombre de Péclet et la porosité (croissance homothétique).

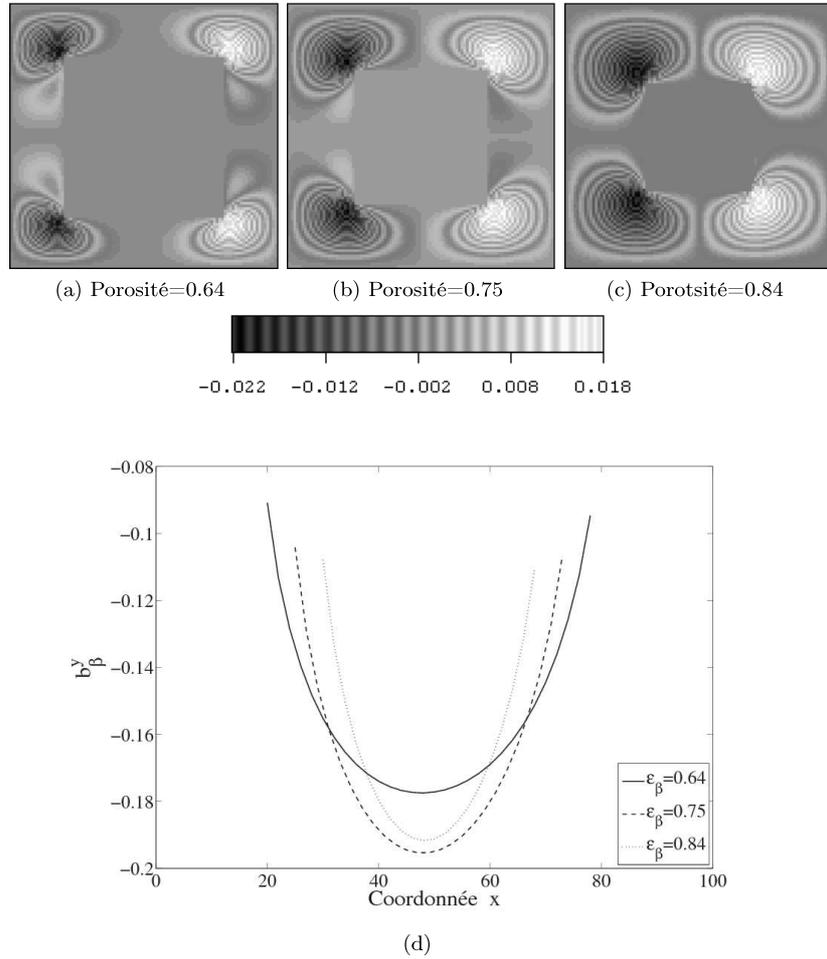


FIG. 4.7: Evolutions : **a - c**) du champ de la partie purement hydrodynamique $(\tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta)^{\beta yy}$ et **d**) de la variable de fermeture b_β^y le long de l'interface "nord" pour trois porosités (0.64, 0.75 et 0.84). **a**) $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy} = -1.4395 \cdot 10^{-4}$; **b**) $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy} = -2.548 \cdot 10^{-4}$; **c**) $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy} = -3.6762 \cdot 10^{-4}$. $Pe = 1$.

4.1 Evolution du tenseur de dispersion avec le nombre de Péclet et la porosité (croissance homothétique).

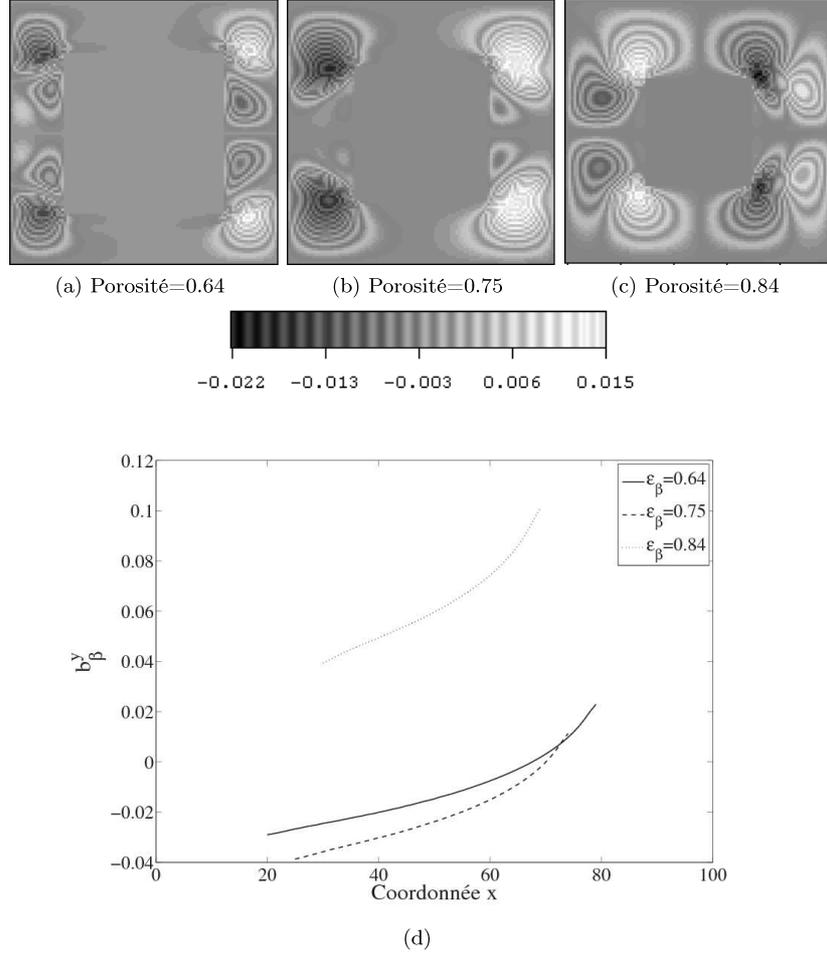


FIG. 4.8: Evolutions : **a - c**) du champ de la partie purement hydrodynamique $(\tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta)^{\beta yy}$ et **d**) de la variable de fermeture b_β^y le long de l'interface "nord" pour trois porosités (0.64, 0.75 et 0.84). **a**) $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy} = -4.745 \cdot 10^{-1}$; **b**) $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy} = -1.669 \cdot 10^{-1}$; **c**) $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy} = -2.8872 \cdot 10^{-1}$. $Pe = 10^3$.

A partir des Figs. 4.7 a) à c), l'évolution de $(\tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta)^{\beta yy}$ semble progressive avec une porosité croissante (à petit Pe). Ceci est confirmé si on tient compte de l'évolution de la contribution purement hydrodynamique $(Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy})$

qui a un comportement monotone. Dans le cas où $Pe = 10^3$, l'aspect progressif que l'on pouvait constater pour $Pe = 1$ n'est plus aussi évident. En effet, quand la fraction volumique fluide est de 0.75, le champ de $(\tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta)^{\beta yy}$ est moins complexe, ce qui a pour conséquence d'augmenter $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$. Ce terme étant soustrait dans l'Eq. (4.2), sa contribution est alors la plus faible, menant à une valeur de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ plus petite.

En ce qui concerne l'évolution de b_β^y le long de l'interface "nord" (Figs. 4.7 d et 4.8 d), on peut noter que, aux forts Pe , le cas $\varepsilon_\beta = 0.75$ est toujours inférieur aux deux autres, ce qui se répercute sur les contributions liées à cette variable (Tableau 4.2).

ε_β	$D'_{Aeff}{}^{yy}$	\mathbf{I}^{yy}	$\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$	$-Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$
0.64	0.70	1	-0.3	$-1.44 \cdot 10^{-4}$
0.75	0.77	1	-0.23	$-2.55 \cdot 10^{-4}$
0.84	0.84	1	-0.16	$-3.68 \cdot 10^{-4}$

(a) $Pe = 1$

ε_β	$D'_{Aeff}{}^{yy}$	\mathbf{I}^{yy}	$\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$	$-Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$
0.64	1.44	1	$-3.96 \cdot 10^{-2}$	0.48
0.75	1.13	1	$-4.23 \cdot 10^{-2}$	0.17
0.84	1.34	1	$4.87 \cdot 10^{-2}$	0.29

(b) $Pe = 10^{-3}$

TAB. 4.2: Valeur de chaque terme contribuant à $D'_{Aeff}{}^{yy}$. **a)** $Pe = 1$, **b)** $Pe = 10^3$.

Les valeurs de chaque contribution mettent bien en évidence le caractère monotone aux faibles Pe (Tableau 4.2 a). A ces valeurs de Pe , la prédominance de $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$ est bien marquée, sa valeur étant environ mille fois supérieure à celle de $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$. Son évolution en fonction de ε_β croissante est à l'origine du comportement croissant de $D'_{Aeff}{}^{yy}$. Au contraire, aux fortes valeurs de Pe , c'est le terme purement hydrodynamique ($Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$) qui impose son allure non-monotone avec ε_β . De plus, on peut noter que la variation de $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$ montre aussi un minimum pour $\varepsilon_\beta = 0.75$, mais de façon moins marquée.

4.2 Discussion sur la dispersion effective

Dans ce chapitre, aucune réaction n'est prise en considération, le transfert de matière n'est donc piloté que par la diffusion et la convection. Le tenseur de dispersion effective, donné par l'Eq. (4.2), peut donc être partitionné de manière à faire apparaître la somme de deux contributions principales : un tenseur de diffusion pure, noté \mathbf{D}_{Diff} , et un tenseur de dispersion purement hydrodynamique, notée \mathbf{D}_{Hydro} .

$$\mathbf{D}'_{Aeff} = \mathbf{D}_{Diff} + \mathbf{D}_{Hydro} \quad (4.5)$$

En couplant cette relation avec la définition (4.2), ces deux contributions sont liées à la variable de fermeture par :

$$\mathbf{D}_{Diff} = \mathbf{I} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Diff}^\beta \quad (4.6)$$

$$\mathbf{D}_{Hydro} = \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Hydro}^\beta - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta \quad (4.7)$$

où, pour rappel, dans ce cas d'étude, $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\alpha}} \mathbf{n}_{\beta\alpha} \mathbf{b}_\beta dA$ d'après l'Eq. (2.67).

Dans les Eqs. (4.6) et (4.7), la contribution liée à la tortuosité ($\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta$) a été scindée en deux parties afin de bien séparer les effets diffusifs, d'une part, des effets purement hydrodynamiques d'autre part. En effet, le problème de fermeture implique, dans son écriture générale, en même temps des effets diffusifs ($\nabla^2 \mathbf{b}_\beta$) et hydrodynamiques ($Pe \mathbf{V}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta$ et $Pe \tilde{\mathbf{V}}_\beta$). Ainsi, la contribution purement diffusive peut facilement être obtenue en résolvant le problème avec $Pe = 0$. Les effets purement hydrodynamiques sont, quant à eux, obtenus en résolvant le problème de fermeture incluant les termes de dispersion et en soustrayant le résultat obtenu dans le cas de la diffusion pure. La détermination de chaque contribution est illustrée à l'aide de calculs effectués sur la cellule unitaire de la Fig. 4.9.

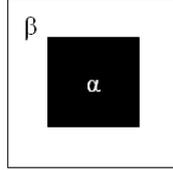


FIG. 4.9: Cellule unitaire utilisée pour la détermination des contributions intervenant dans le problème de diffusion/convection.

4.2.1 Partie diffusive

Afin de déterminer l'évolution de \mathbf{D}_{Diff} en fonction de la porosité, le cas de la diffusion pure d'un traceur inerte a tout d'abord été étudié. Dans ce cas, le tenseur de diffusion effective prend la forme :

$$\mathbf{D}_{Diff} = \mathbf{D}_{Aeff} = \mathbf{I} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Diff}^\beta \quad (4.8)$$

tandis que le problème de fermeture associé s'écrit :

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0 \text{ dans } V_\beta \quad (4.9)$$

$$\text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\alpha} \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (4.10)$$

$$\langle \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta = 0 \quad ; \quad \langle \mathbf{b}_\beta \rangle = 0 \quad (4.11)$$

$$\mathbf{b}_\beta(r + l_i) = \mathbf{b}_\beta(r) \quad (4.12)$$

La dépendance des termes diagonaux du tenseur de diffusion effective (qui sont bien égaux comme attendu, d'où $\mathbf{D}_{Diff} = D_{Diff} \mathbf{I}$) en fonction de la porosité ε_β sont présentées sur la Fig. 4.10. Sur cette figure, sont également reportés les résultats de Carbonell and Whitaker [1983] sur une géométrie analogue à la notre (treillis carré de cylindres de section carrée).

Sur la Fig. 4.10, l'allure classique de $\mathbf{D}_{Diff} = f(\varepsilon_\beta)$ donnée par les résultats de Carbonell and Whitaker [1983], mais aussi rapporté par Bear [1969] et

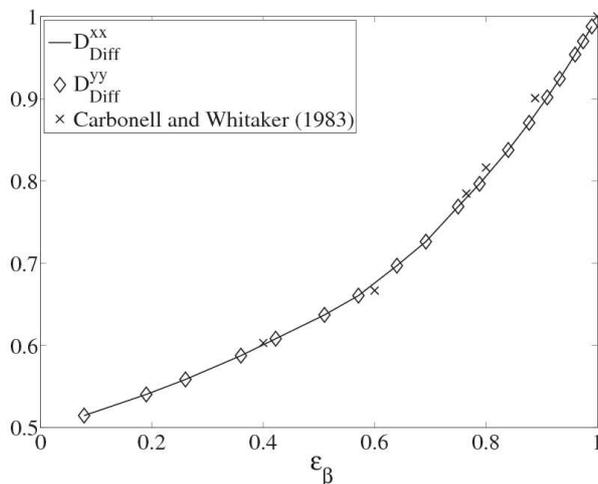


FIG. 4.10: Comportement de \mathbf{D}_{Diff} en fonction de la porosité ε_β . Des données extraites de l'étude de Carbonell and Whitaker [1983] sont aussi représentées (croix). Maillage : 100×100 . Les différences observables entre nos résultats et ceux fournis par la référence sont imputables à la méthode (graphique) d'extraction des données.

Quintard [1993], est bien retrouvée.

Comme indiqué dans le chapitre précédent, D_{Diff} tend vers l'unité quand la porosité est proche de 1. Si la fraction volumique en solide (ε_α) diminue, le terme $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Diff}^\beta$ tend vers zéro, la diffusion microscopique (\mathbf{I}) devenant alors la seule contribution dans l'Eq. (4.8). Le fait que D_{Diff} soit inférieur à 1 implique que $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Diff}^\beta$ soit négatif. L'explication physique [Carman, 1937] réside dans le fait que les particules diffusantes doivent contourner l'inclusion. De cette réflexion a émergé l'expression d'un terme dit de "tortuosité".

Selon l'abondante littérature traitant de la diffusion pure ou de la dispersion en milieu poreux, une tortuosité (τ) peut être estimée à partir de la diffusion effective. Greenkorn [1983] définit la tortuosité comme étant "une mesure macroscopique de la sinuosité de l'écoulement et de la variation de la taille du pore le long du chemin de l'écoulement". Cependant, bien que cette notion ait été introduite il y a un peu plus de cinquante ans par Carman [1937, 1956], des confusions subsistent à propos de sa définition mathématique [Epstein, 1989]. En effet, la quantification de la tortuosité, dans sa définition, fait référence à deux longueurs : la longueur effective du chemin moyen (L_e) et la longueur du

milieu traversé par une particule (L). Bear [1972] (p.117) précise que la longueur moyenne L_e peut avoir deux significations, selon la manière dont on la considère. Si la longueur moyenne des lignes de courant est calculée à partir d'un ensemble de particules sans limite de temps de séjour de ces particules, la tortuosité ainsi évaluée est une *tortuosité géométrique*. En revanche, si cette moyenne est réalisée à partir des distances effectivement parcourues par les particules **sur un temps donné**, on parle plutôt de *tortuosité cinématique*. Dans ce cas, la distribution de vitesse, dépendante du profil des canaux élémentaires et de la condition de glissement ou de non-glissement à l'interface solide/fluide, affectera la ligne de courant moyenne résultante.

Ainsi, plusieurs expressions ont été proposées. Par exemple, Carman [1956] statua que τ peut être défini comme le rapport de la longueur effectivement parcourue (L_e) par la particule fluide sur l'épaisseur (L) du milieu poreux (Eq.(4.13)).

$$\tau = \frac{L_e}{L} \quad (4.13)$$

Cette définition, largement reprise (par exemple, Epstein, 1989, Adler, 1992, Boudreau, 1996, Dias et al., 2006), induit que la tortuosité doit être supérieure ou égale à l'unité. En effet, la longueur réellement parcourue par le fluide est, au plus court, l'épaisseur du milieu. Cette réflexion est confirmée par les propos de Greenkorn [1983] qui stipule dans son ouvrage que "*la tortuosité a été introduite afin de prendre en compte le fait que les pores d'un milieu réel ne sont pas droits*". Diedericks and Du Plessis [1995] ajoute que "*le terme de tortuosité se réfère de façon sémantique à la mesure de la sinuosité de la structure du pore et doit donc être égal ou supérieure à l'unité*". Cependant, et malgré la logique de cette définition, d'autres auteurs (dont Bear [1972]) ont défini la tortuosité comme le rapport de la longueur apparente du milieu (L) sur la longueur effectivement parcourue (L_e) par les particules fluides, soit l'inverse de l'Eq. (4.13). D'autres encore [Aris, 1975, Shackelford, 1991, Wahyudi et al., 2002] ont considéré la tortuosité comme le carré de ce terme. **Dans ce travail, nous considérons la tortuosité telle qu'exprimée par la relation (4.13)**. Quelque soit la relation utilisée, il est unanimement accepté [Boudreau, 1996, Maerki et al., 2004, Shen and Chen, 2007] que le coefficient de diffusion effectif adimensionné est relié au rapport des longueurs de la manière suivante :

$$D_{Diff} = \left(\frac{L}{L_e} \right)^2 \quad (4.14)$$

ce qui revient dans notre cas à écrire $D_{Diff} = \frac{1}{\tau^2}$. Cette relation purement scalaire n'est évidemment valable que dans le cas d'un milieu isotrope.

Si on se réfère à la littérature traitant de la prise de moyenne volumique, on trouve essentiellement deux expressions. Dans les références traitant de la dispersion passive, Carbonell and Whitaker [1983], Amaral Souto and Moyne [1997], Didierjean et al. [1997] et Neculae et al. [2002] entre autres, expriment un tenseur de tortuosité par :

$$\mathbf{T} = \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\alpha}} \mathbf{n}_{\beta\alpha} \mathbf{b}_\beta dA \quad (4.15)$$

Cette dernière relation revient à écrire : $\mathbf{T} = \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta$. Le tenseur de tortuosité ainsi défini est bien dépendant de la configuration géométrique de la phase solide à travers l'intégrale sur l'interface solide/fluide. Cependant, sa relation avec la tortuosité n'a pas été indiquée [Diedericks and Du Plessis, 1995]. De plus, cette définition ne prend pas en compte l'intégralité de la diffusion effective (il manque la matrice identité \mathbf{I}). Comme $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta$ est négatif, ce type de définition implique une tortuosité négative, ce qui est physiquement incohérent.

Dans un article traitant de la dispersion passive non linéaire multicomposant, Quintard et al. [2006] précise que dans le cas de la diffusion pure, le tenseur de tortuosité \mathbf{T} peut être représenté par la relation (4.16).

$$\mathbf{T} = \frac{\mathbf{I}}{\tau^2} = \mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\alpha}} \mathbf{n}_{\beta\alpha} \mathbf{b}_\beta dA \quad (4.16)$$

Cette dernière relation, qui suppose que le milieu soit isotrope, revient à l'expression de la tortuosité employée ici.

A l'aide des résultats obtenus plus haut (Fig. 4.10) et de la relation (4.16), l'évolution de τ^2 en fonction de la porosité ε_β a été déterminée et est reportée sur la Fig. 4.11. Sur cette même figure, sont reportés les résultats fournis par des relations extraites de la littérature et indiquées dans le Tableau 4.3. Pour tracer l'évolution de τ^2 en fonction de ε_β avec la relation de Iversen and Jorgensen [1993], nous avons repris la valeur de B indiquée par Shen and Chen [2007], valeur obtenue à l'aide d'un ajustement par des moindres carrés.

A partir de la Fig. 4.11, les recommandations fournies par Boudreau [1996], à savoir

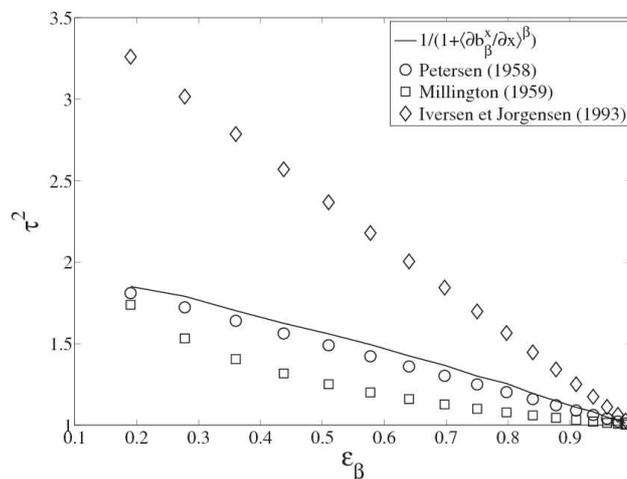


FIG. 4.11: Evolution de la tortuosité en fonction de la porosité. Comparaison de nos résultats avec des modèles disponibles dans la littérature. τ^2 est déterminé à partir des résultats de \mathbf{D}_{diff} obtenus pour un maillage de 100×100 .

$$\tau^2 \geq 1 \quad ; \quad \lim_{\epsilon_\beta \rightarrow 1} \tau = 1, \quad (4.17)$$

sont bien satisfaites. De plus, les valeurs de τ^2 estimées avec nos résultats numériques sont quasi-linéaires en fonction de ϵ_β , avec une tendance très proche de celle décrite par la relation fournie par Petersen [1958]. Afin de déterminer une relation entre la tortuosité et la porosité, pour le cas d'un milieu constitué de cylindres de section carré, nous avons appliqué une regression linéaire qui donne :

$$\tau^2 = -1.0616\epsilon_\beta + 2.0813 \quad (4.18)$$

avec un coefficient de détermination (R^2) de 0.9964. La forme de l'approximation fournie par Petersen [1958] peut être vue comme un cas particulier de l'expression plus générale d'Iversen and Jorgensen [1993] avec $B = 2$. Ainsi, en retenant une corrélation du type de celle de Petersen [1958], l'erreur relative maximale avec nos résultats est de l'ordre de 5 – 6%.

Relations	Systèmes Physiques et/ou Références
$\tau^2 = 2 - \varepsilon_\beta$	Solides poreux extrudés ou granulaire. [Petersen, 1958]
$\tau^2 = \varepsilon_\beta^{-1/3}$	Empliments homogènes, isotropiques et partiellement saturés de billes de verre monodispersés. [van Brakel and Heertjes, 1974]
$\tau^2 = \varepsilon_\beta + B(1 - \varepsilon_\beta)$	Sédiments sableux et vases [Iversen and Jorgensen, 1993]

TAB. 4.3: Relations porosité/tortuosité théoriques et empiriques, leurs auteurs et systèmes physiques. Extraites de Shen and Chen [2007].

4.2.2 Partie hydrodynamique

Comme indiqué plus haut dans ce chapitre, la détermination du tenseur des effets purement hydrodynamiques \mathbf{D}_{Hydro} est obtenue en soustrayant au tenseur de dispersion effective \mathbf{D}_{Aeff} le tenseur de diffusion effective \mathbf{D}_{Diff} . Ainsi, le tenseur des effets purement hydrodynamiques \mathbf{D}_{Hydro} s'exprime à l'aide de l'Eq. (4.7).

Les composantes diagonales du tenseur de dispersion hydrodynamique sont représentées sur la Fig. 4.12 pour différents Pe en fonction de la porosité.

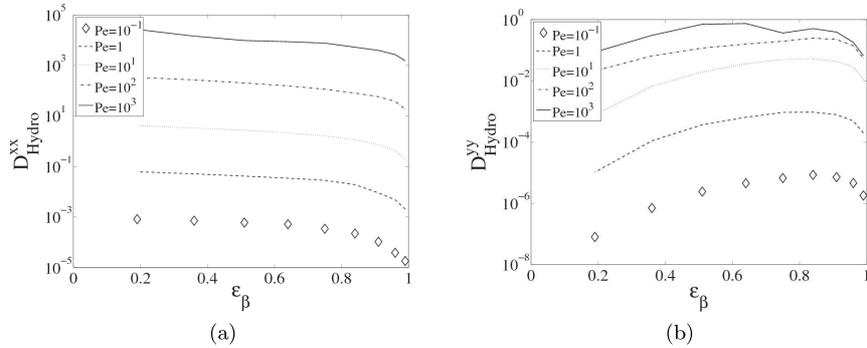


FIG. 4.12: Composantes diagonales de \mathbf{D}_{Hydro} en fonction de la porosité et pour cinq valeurs du nombre de Péclet (10^{-1} , 10^0 , 10^1 , 10^2 , 10^3). a) D_{Hydro}^{xx} , b) D_{Hydro}^{yy} . Maillage : 100×100 .

D'après la Fig. 4.12 a), D_{Hydro}^{xx} présente toujours la même variation, à savoir une dépendance strictement décroissante avec ε_β avec une pente plus prononcée

à forte porosité (supérieure à 0.9). Cependant, quand $Pe = 10^3$, une cassure dans la pente apparaît pour ε_β compris entre 0.5 et 0.7. De plus, multiplier Pe par 10 induit une multiplication de D_{Hydro}^{xx} par environ 10^2 , ce qui indique la possibilité d'exprimer ce terme à l'aide d'une loi de puissance en Pe avec un exposant proche de 2. Cette approximation sera discutée un peu plus loin.

La dispersion hydrodynamique transversale D_{Hydro}^{yy} , comme montrée sur la Fig. 4.12 b), ne suit pas un comportement monotone avec ε_β . Tant que $Pe < 10^2$, D_{Hydro}^{yy} présente un profil concave, avec un extremum pour $\varepsilon_\beta \simeq 0.9$. Au-delà, comme D_{Hydro}^{xx} , la courbure de la concavité s'accroît. Pour des valeurs de Pe supérieures à 10^2 , une seconde concavité centrée sur $\varepsilon_\beta \simeq 0.55$ apparaît graduellement. Afin d'expliquer ce comportement, l'évolution de chaque contribution composant D_{Hydro}^{yy} a été tracée séparément (Figs. 4.13).

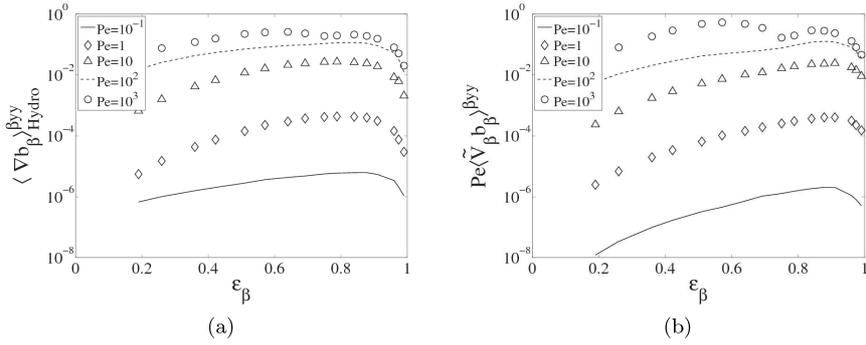


FIG. 4.13: Comportement de chaque terme composant la dispersion hydrodynamique transverse. **a)** $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$, **b)** $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{\beta yy}$. Maillage : 100×100 .

Les Figs. 4.13 a) et b) montrent que les deux contributions suivent, de façon plus ou moins prononcée, une évolution similaire. De plus, tant que les effets diffusifs sont supérieurs aux effets convectifs ($Pe < 1$), le terme $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Hydro}^{\beta yy}$ domine et impose son comportement. Au-delà de cette valeur, les deux contributions sont du même ordre de grandeur et font apparaître à mesure que Pe augmente la deuxième concavité observable dans le comportement de D_{Hydro}^{yy} .

Nous présentons maintenant ces mêmes résultats mais cette fois-ci en fonction du nombre de Péclet (Pe) (Fig. 4.14).

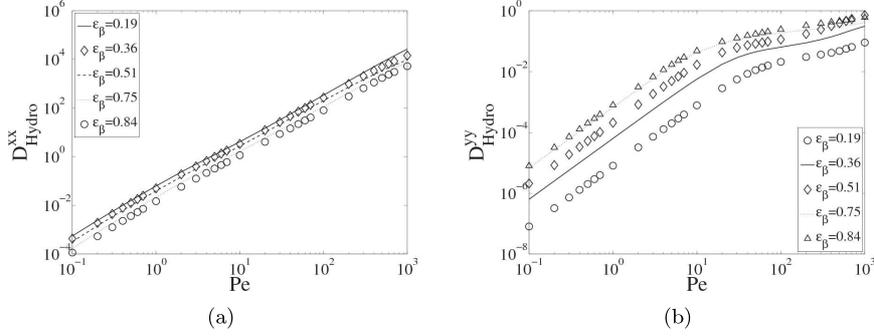


FIG. 4.14: Comportement de **a)** D_{Hydro}^{xx} et de **b)** D_{Hydro}^{yy} en fonction du nombre de Péclet pour cinq porosités (0.19, 0.36, 0.51, 0.75 et 0.84). Maillage : 100×100 .

Comme attendu à partir de la représentation sur la Fig. 4.3 a), quand $Pe \geq 10$ environ, D_{Aeff}^{xx} dépend (quasi-) linéairement de $\log(Pe)$. Au regard de la Fig. 4.14 a), il devient évident d'écrire que ce comportement est induit par la prédominance de D_{Hydro}^{xx} qui, par ailleurs, suit ce comportement sur toute la plage de Pe étudiée ici. Comme expliqué précédemment, il est possible d'approximer D_{Hydro}^{xx} par :

$$D_{Hydro}^{xx} = bPe^n \quad (4.19)$$

Cette expression a été utilisée entre autres par Quintard and Whitaker [1994c], Amaral Souto and Moyne [1997] ou encore Whitaker [1999] qui fournissent des valeurs de ces paramètres.

Plus intéressant, la tendance suivie par la composante transversale du tenseur des effets hydrodynamiques est assez différente de celui de D_{Hydro}^{xx} (Fig. 4.14 b). Tant que $Pe \leq 10$ environ, un comportement (quasi-) linéaire en $\log(Pe)$ similaire à la composante longitudinale est observable. Au-delà de cette valeur, un nouveau régime apparaît avec une dépendance moins prononcée à Pe . En effet, entre $Pe = 10^{-1}$ et 10, D_{Hydro}^{yy} est multiplié par environ 10^4 tandis qu'entre $Pe = 10$ et $Pe = 10^3$, D_{Hydro}^{yy} n'est multiplié que par un facteur de l'ordre de 10^2 . Compte tenu de ce comportement, il n'est pas possible de corrélérer ce paramètre par une loi de puissance telle que l'Eq. (4.19) sur l'ensemble de la gamme de Pe présentée ici. Par contre, sur la plage de variation $Pe = [10^{-1}; 10]$, cette approximation est possible. Amaral Souto and Moyne [1997] et Quintard and

Whitaker [1994c] indiquent que la forme de D_{Aeff}^{yy} en fonction de ε_β ne permet pas une corrélation simple en loi de puissance, sous entendu sur l'ensemble de la gamme de Pe étudiée.

Comme nous venons de le voir, il est possible de déterminer les coefficients de la corrélation dans l'Eq. (4.19). Les dispersivités (longitudinale, d_L , et transversales, d_T) peuvent aussi être estimées à partir de ces résultats. Ces deux points font l'objet des paragraphes suivants.

Détermination des coefficients de la corrélation en loi de puissance.

Dans ce paragraphe, nous estimons b et n dans l'Eq. (4.19) pour les composantes longitudinale et transversale du tenseur de dispersion. Les résultats obtenus pour quelques valeurs de porosités sont listés dans le Tableau 4.4. Pour toutes ces corrélations, le coefficient de détermination R^2 reste supérieur à $R^2 = 0.9993$.

Porosité	D_{Hydro}^{xx}		D_{Hydro}^{yy}	
	b	n	b	n
0.19	0.0554	1.8985	$8 \cdot 10^{-6}$	1.9988
0.36	0.0451	1.8738	$6 \cdot 10^{-5}$	1.996
0.51	0.0355	1.8606	$2 \cdot 10^{-4}$	1.9917
0.64	0.0269	1.8747	$4 \cdot 10^{-4}$	1.9859
0.75	0.0196	1.8886	$6 \cdot 10^{-4}$	1.9808
0.84	0.0134	1.8971	$8 \cdot 10^{-4}$	1.9782
0.91	$8.4 \cdot 10^{-3}$	1.9247	$7 \cdot 10^{-4}$	1.9777
0.96	$4.6 \cdot 10^{-3}$	1.9568	$4 \cdot 10^{-4}$	1.9784
0.99	$2 \cdot 10^{-3}$	1.9818	$2 \cdot 10^{-4}$	1.9797

TAB. 4.4: Valeurs des coefficients de la corrélation (4.19).

Bien que dans plusieurs travaux (Quintard and Whitaker, 1994c, Amaral Souto and Moyne, 1997, Whitaker, 1999, entre autres) ces coefficients aient été déterminés, seules les valeurs (ou l'intervalle de variation) de n étaient le plus souvent indiquées et discutées. En revanche les valeurs de b ont rarement été rapportées.

Tout d'abord, en ce qui concerne la composante longitudinale D_{Hydro}^{xx} , Quintard and Whitaker [1994c] fournissent des valeurs pour les deux paramètres dans le cas d'arrangements 2D carrés centrés de cylindres parallèles à section droite circulaire. Plus précisément, ils indiquent que pour ε_β variant de 0.255 à 0.38,

n varie de 1.55 à 1.74 dans le cas de la dispersion active, c'est à dire avec un échange entre deux phases non miscibles (cas de la cellule unitaire de la Fig. 3.13). Dans son ouvrage sur la prise de moyenne volumique, Whitaker [1999] généralise la valeur prise par n en fonction de l'arrangement formant le milieu poreux. Il indique ainsi que :

- Pour un ensemble de tubes capillaires, $n = 2$ (Théorie de Taylor-Aris) ;
- Pour un arrangement carré de cylindres de section droite circulaire, $n = 1.7$;
- Pour des lits compactés, $n = 1.2$.

Les valeurs de n que nous avons obtenues sont de l'ordre de 1.9, valeurs assez éloignées de la valeur 1.7 annoncée par Whitaker [1999]. Notons toutefois la différence de géométrie des inclusions solides (cylindres à section droite carrée dans notre cas, à section droite circulaire dans cette référence) qui expliquent probablement cet écart. Les résultats fournis par Quintard and Whitaker [1994c] pour le problème de la dispersion active (avec un échange entre deux phases non-miscibles) et ceux de Whitaker [1999] étant donnés pour une géométrie différente à la nôtre (section circulaire), ils ne doivent donc pas supporter une étroite comparaison. De ce fait, ces résultats ne sont présentés qu'à titre indicatif. Amaral Souto and Moyne [1997], dans un article traitant de la dispersion passive dans un milieu constitué d'un arrangement carré de cylindres de section droite carrée, fournissent des valeurs de n proches des nôtres (de l'ordre de 1.9), confirmant ainsi l'influence de la forme des inclusions sur n . Sur la Fig. 4.15, nous avons reporté les variations de b et n obtenues pour D_{Hydro}^{xx} sur la gamme de porosité $\varepsilon_\beta \simeq 0.2 - 0.9$ en fonction de ε_β et pour D_{Hydro}^{xx} .

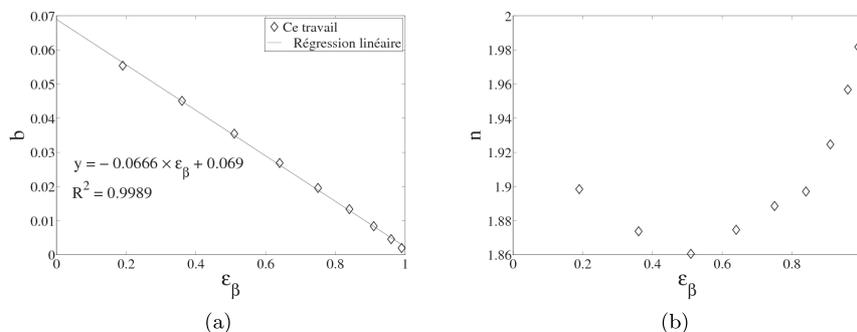


FIG. 4.15: Les coefficients de la fonction de corrélation en fonction de la porosité pour D_{Hydro}^{xx} .

Il apparaît clairement que b dépend linéairement de ε_β et est strictement décroissant (Fig. 4.15 a). En utilisant une régression linéaire, le facteur b peut être corrélé à la porosité grâce à :

$$b = -0.067 \times \varepsilon_\beta + 0.069$$

Cette relation a été obtenue avec un facteur de détermination de $R^2 = 0.9989$. Pour n (Fig. 4.15 b), la dépendance à ε_β est plus complexe. Tant que $\varepsilon_\beta \leq 0.5$, n décroît. Au-delà de cette valeur de ε_β , n est croissant. Ces résultats semblent consistants avec ceux d'Amaral Souto and Moyne [1997], et ce malgré la différence entre notre valeur et la leur pour $\varepsilon_\beta = 0.84$ (1.8971 contre 1.99).

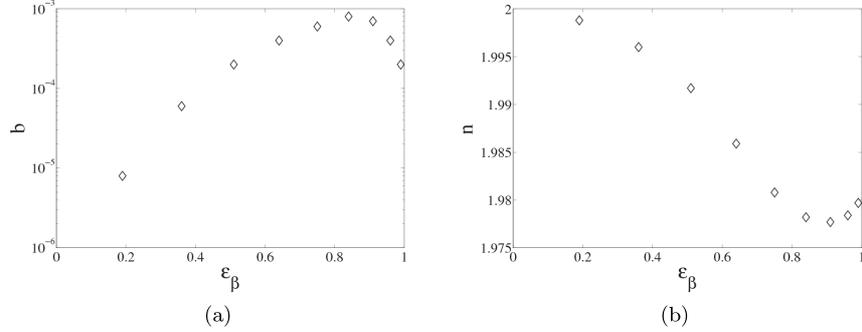


FIG. 4.16: Comportement des coefficients de la fonction de corrélation en fonction de la fraction volumique en fluide ε_β pour la composante transversale du tenseur de dispersion hydrodynamique D_{Hydro}^{yy} .

En répétant la démarche pour la dispersion hydrodynamique transversale (D_{Hydro}^{yy}), n et b suivent des allures totalement différentes de celles présentées pour la dispersion longitudinale (Fig. 4.16). Le facteur b montre une concavité avec ε_β dont l'extremum se situe vers $\varepsilon_\beta = 0.84$. L'exposant n , quant à lui, montre un comportement plus complexe et présente deux extrema, un qui correspond à la valeur asymptotique de 2 à petit ε_β , l'autre à un minimum vers $\varepsilon_\beta = 0.91$. Le point d'inflexion entre ces deux valeurs extrêmes se situe vers $\varepsilon_\beta = 0.64$. Pour les petites valeurs de ε_β (< 0.2), n semble tendre vers 2. Ce comportement n'apparaît pas aussi clairement pour D_{Hydro}^{xx} . Quand $\varepsilon_\beta \geq 0.91$, n croît avec ε_β .

Détermination des dispersivités. Une autre manière d'écrire le tenseur de dispersion effective est celle proposée par Bear [1972], qui met en jeu des dispersivités longitudinale (d_L) et transversale (d_T) dans sa forme générale avec dimension (Eq. (4.20)).

$$\mathbf{D}_\beta^* = \left(\varepsilon_\beta D'_{Diff} + d'_T \left\| \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle \right\| \right) \mathbf{I} + \left(d'_L - d'_T \right) \frac{\langle \mathbf{v}'_\beta \rangle \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle}{\left\| \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle \right\|^2} \quad (4.20)$$

Il faut d'abord insister que cette forme repose sur l'hypothèse d'un milieu isotrope ($\mathbf{D}'_{Diff} = D'_{Diff} \mathbf{I}$). Afin d'obtenir \mathbf{D}_{Aeff} tel que celui considéré ici, l'Eq.

(4.20) est tout d'abord adimensionnée à l'aide des paramètres caractéristiques mentionnés dans le paragraphe ?? |le coefficient de diffusion D_{Diff} est adimensionné à l'aide de $D_{A\beta}$, $\langle \mathbf{v}'_{\beta} \rangle$ par $\|\langle \mathbf{v}'_{\beta} \rangle\|$ et d'_L et d'_T par l puis divisée par ε_{β} , ce qui donne :

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \frac{\mathbf{D}_{\beta}^*}{D_{\beta}\varepsilon_{\beta}} = [D_{Diff} + Ped_T]\mathbf{I} + (d_L - d_T) Pe \langle \mathbf{V}_{\beta} \rangle^{\beta} \langle \mathbf{V}_{\beta} \rangle^{\beta} \quad (4.21)$$

Dans cette dernière expression, le tenseur de diffusion $D_{Diff}\mathbf{I} = \mathbf{D}_{Diff}$ est celui de l'Eq. (4.8) tandis que le tenseur de dispersion hydrodynamique (\mathbf{D}_{Hydro}) est donné par :

$$\mathbf{D}_{Hydro} = Ped_T\mathbf{I} + (d_L - d_T) Pe \langle \mathbf{V}_{\beta} \rangle^{\beta} \langle \mathbf{V}_{\beta} \rangle^{\beta} \quad (4.22)$$

En considérant uniquement les composantes longitudinales et transversales, les dispersivités peuvent être déterminées et s'expriment de la façon suivante :

$$d_L = \frac{1}{Pe} \left[\frac{1 - \langle V_y \rangle^{\beta 2}}{\langle V_x \rangle^{\beta 2} - \langle V_y \rangle^{\beta 2}} D_{Hydro}^{xx} + \frac{\langle V_x \rangle^{\beta 2} - 1}{\langle V_x \rangle^{\beta 2} - \langle V_y \rangle^{\beta 2}} D_{Hydro}^{yy} \right] \quad (4.23)$$

$$d_T = \frac{1}{Pe} \left[\frac{-\langle V_y \rangle^{\beta 2}}{\langle V_x \rangle^{\beta 2} - \langle V_y \rangle^{\beta 2}} D_{Hydro}^{xx} + \frac{\langle V_x \rangle^{\beta 2}}{\langle V_x \rangle^{\beta 2} - \langle V_y \rangle^{\beta 2}} D_{Hydro}^{yy} \right] \quad (4.24)$$

où $\langle V_x \rangle^{\beta}$ et $\langle V_y \rangle^{\beta}$ correspondent respectivement aux vitesses moyennes interstitielles longitudinale et transversale.

Ces deux relations montrent que d_L et d_T dépendent des vitesses moyennes et du nombre de Péclet. Il est donc peu vraisemblable que pour une structure donnée, ces deux quantités soient des constantes. Cette dépendance avec la vitesse a été démontrée par Guin et al. [1972].

Dans notre cas, $\langle V_x \rangle^{\beta} = 1$ et $\langle V_y \rangle^{\beta} = 0$, ce qui nous mène aux deux relations plus simples :

$$d_L = \frac{1}{Pe} D_{Hydro}^{xx} = bPe^{(n-1)} \quad (4.25)$$

$$d_T = \frac{1}{Pe} D_{Hydro}^{yy} \quad (4.26)$$

Ces relations sont similaires à celles développées par Fetter [1993] et reprises par Olsson and Grathwohl [2007]. En utilisant ces deux relations, les évolutions des dispersivités en fonction de la porosité pour notre cellule de calcul (arrangement carré de cylindres de section carrée) sont donc celles reportées sur la Fig. 4.17.

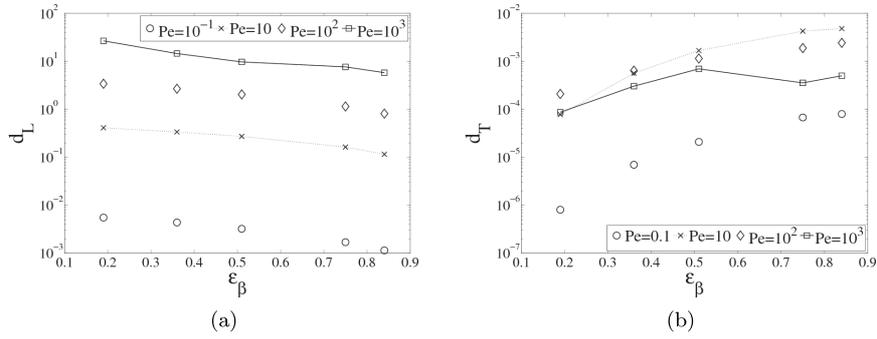


FIG. 4.17: Dispersivités **a)** longitudinale et **b)** transversale en fonction de la porosité. Maillage : 100×100 .

Cette figure met clairement en évidence que les dispersivités ne sont pas des constantes en fonction de ε_β et encore moins en fonction de Pe . Dans la littérature, la dispersivité est souvent considérée comme un *paramètre géométrique* [Bear, 1972] qui mesure la tendance d'un milieu poreux à disperser un traceur dynamiquement neutre [Guin et al., 1972]. Or, les résultats de la Fig. 4.17 indiquent une forte dépendance avec Pe , et donc par extension avec la vitesse. La dispersivité transversale (d_T) montre une particularité en fonction de Pe . A partir d'une certaine valeur de ce paramètre (environ 10), d_T décroît avec Pe . Afin d'étayer cette observation, nous avons tracé, sur la Fig. 4.18, le comportement de d_L et d_T en fonction de Pe .

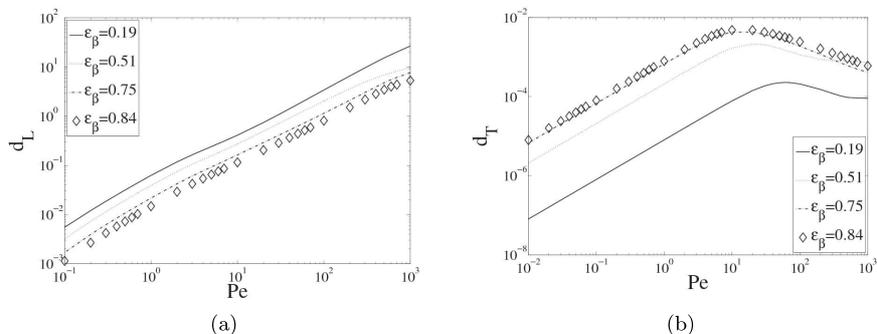


FIG. 4.18: La dispersivité **a)** longitudinale et **b)** transversale en fonction de Pe pour quatre porosités (0.19, 0.51, 0.75 et 0.84). Maillage : 100×100 .

La dépendance de d_L et de d_T avec la vitesse, au regard de la Fig. 4.18 est très forte. Multiplier Pe par 10^3 induit une multiplication de d_L par un facteur de l'ordre de 10^3 (entre 3×10^3 et 5×10^3) pour les valeurs présentées ici. Pour ce qui est de la dispersivité transversale (d_T), son comportement montre bien deux régimes séparés par un extremum qui se situe dans une plage de Pe comprise entre 10 et 50 environ. Tant que Pe n'atteint pas cette plage de valeur (partie croissante de la courbe), d_T est multiplié par un facteur compris entre 60 et 300 pour Pe variant de 10^{-1} à 10 environ. Ensuite, l'augmentation des effets convectifs contribue à diminuer la dispersivité transversale. Quand Pe varie de 10 à 10^3 environ, d_T est multiplié par un facteur de l'ordre de 10^{-1} .

4.3 Dépendance du tenseur de dispersion effective avec l'évolution par direction de la structure solide

Dans cette partie, nous étudions l'influence de deux types d'évolution de l'inclusion solide sur le tenseur de dispersion macroscopique. Plus précisément, nous avons choisi d'analyser l'impact des deux types de croissances de l'inclusion solide présentés sur la Fig. 4.1, à savoir une *longitudinale* et une *transversale*. On rappelle que l'expansion longitudinale correspond à une évolution de la phase solide (α) selon la direction de l'écoulement (selon x) tandis que la croissance

transversale a lieu dans la direction perpendiculaire à l'écoulement. Sur toutes les figures présentées par la suite, les valeurs indiquées en légende correspondent à la longueur de l'interface constante. Ces valeurs sont normalisées par rapport à la longueur totale de la cellule de calcul.

Les résultats obtenus pour $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et $D'_{Aeff}{}^{yy}$ en partant d'une configuration symétrique de la cellule de calcul sont reportés sur les Figs. 4.19 et 4.20.

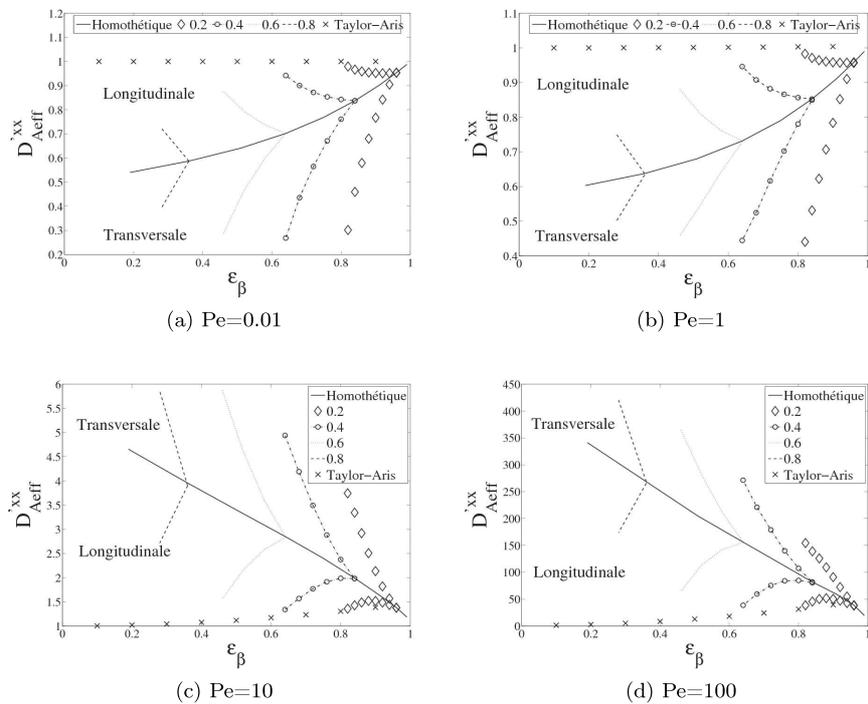


FIG. 4.19: Comportement de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ selon le type d'expansion de la phase solide. Maillage : 100×100 .

Le rôle joué par la microstructure est bien mise en évidence sur les Figs. 4.19 et 4.20. Ainsi, dans l'optique d'augmenter et d'améliorer la dispersion longitudinale ($D'_{Aeff}{}^{xx}$), un support de culture présentant un élancement dans la direction de l'écoulement sera alors préféré aux faibles et moyens Pe tandis que qu'un élancement dans la direction perpendiculaire devra être favorisé aux fortes

valeurs de Pe . Enfin, comme attendu, quand l'extension horizontale de l'inclusion solide (α) tend à égarder la longueur de la cellule de calcul, les résultats s'acheminent vers ceux prédits par la théorie de Taylor-Aris, la configuration revenant alors à celle de la dispersion entre plaques planes.

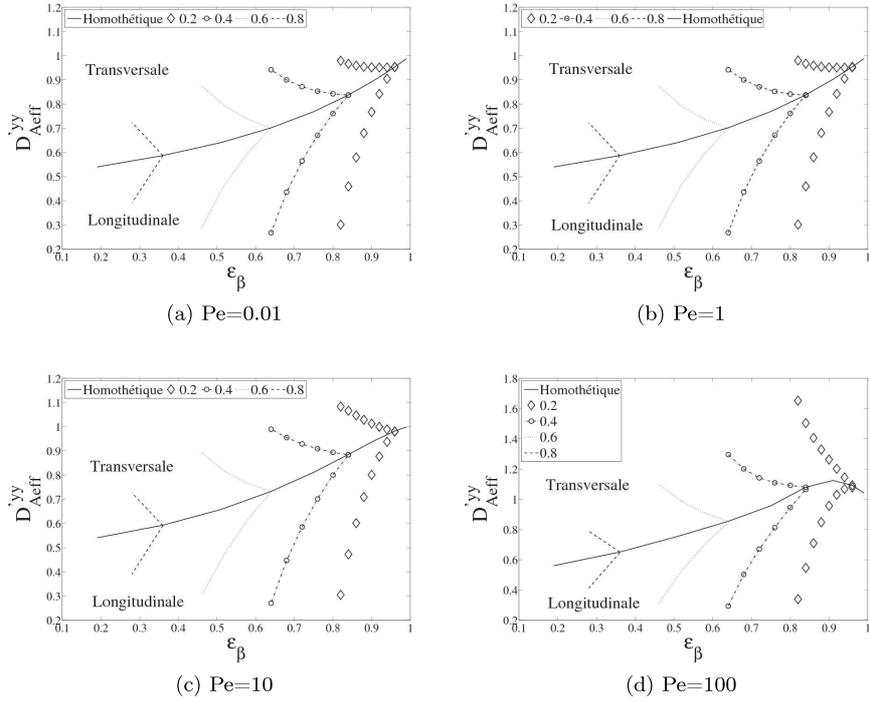


FIG. 4.20: Comportements de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ en fonction de ε_β pour les trois types d'expansion considérés ici. Maillage : 100×100 .

Pour des Pe faibles, l'expansion transversale améliore $D'_{Aeff}{}^{yy}$ (Fig. 4.20) alors que $D'_{Aeff}{}^{xx}$ est, pour les mêmes valeurs de Pe , augmenté par une expansion longitudinale. Aux fortes valeurs de Pe , l'extension de la phase solide selon l'axe orthogonal à l'écoulement améliore les deux coefficients de dispersion effective. Pour être plus précis en ce qui concerne l'effet du type d'expansion sur $D'_{Aeff}{}^{yy}$, nous avons calculé les rapports entre les valeurs de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ obtenues à même porosité par croissance transversale d'une part et longitudinale d'autre part. Ainsi,

quand la phase solide s'étend perpendiculairement à l'écoulement, la dispersion est améliorée jusqu'à 4 fois avec une moyenne d'environ 3.5.

Pour terminer, il est intéressant de comparer à $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et $D'_{Aeff}{}^{yy}$ obtenus avec une inclusion carrée la moyenne des $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et $D'_{Aeff}{}^{yy}$ obtenus, à même valeur de ε_β , sur une fibre élançée longitudinalement d'une part et dans la direction perpendiculaire à l'écoulement d'autre part. Sur la Fig. 4.21, nous avons reporté cette moyenne de la dispersion longitudinale (symboles) ainsi que $D'_{Aeff}{}^{xx}$ obtenu avec l'inclusion carrée (cas homothétique) en fonction de ε_β . En régime diffusif ($Pe < 1$), la valeur de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ pour l'inclusion carrée représente toujours une borne supérieure à la moyenne des dispersions obtenues avec des inclusions ayant des rapports d'aspect différents de 1. Par contre, lorsque Pe augmente (par exemple, $Pe = 10^2$), cette valeur moyenne s'organise bien autour de la valeur obtenue sur la cellule à inclusion carrée, l'erreur restant inférieure à 30% (pour $\varepsilon_\beta = 0.96$).

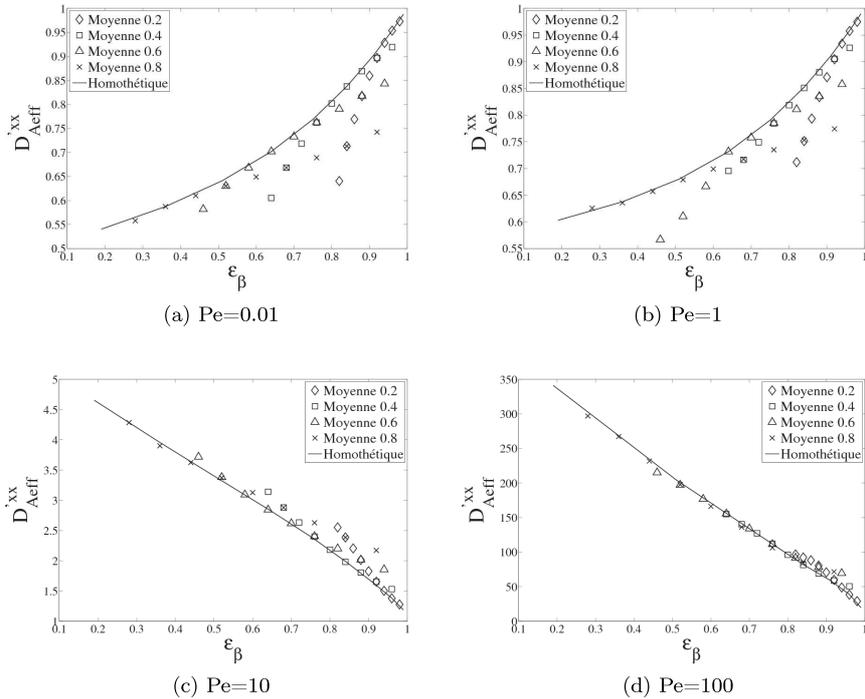


FIG. 4.21: Comparaison entre l'évolution de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ pour le cas homothétique avec les moyennes des expansions étudiées ici.

De manière analogue, nous avons représenté sur la Fig. 4.22, les moyennes de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ pour les deux types d'expansion ainsi que les valeurs de l'inclusion carrée (cas homothétique). Pour toutes les valeurs de Pe examinées ici, $D'_{Aeff}{}^{yy}$ pour l'inclusion carrée représente systématiquement une borne supérieure à la moyenne des valeurs obtenues à même ε_β pour les inclusions à expansions longitudinale et transversale. Comme indiqué pour $D'_{Aeff}{}^{xx}$, quand le rapport d'aspect est proche de 1, la moyenne de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ pour un ε_β donné est proche de la valeur du cas symétrique. Cependant, les écarts calculés atteignent, pour une valeur strictement identique de ε_β , les 15% avec une moyenne (sur les valeurs calculées) de 12%.

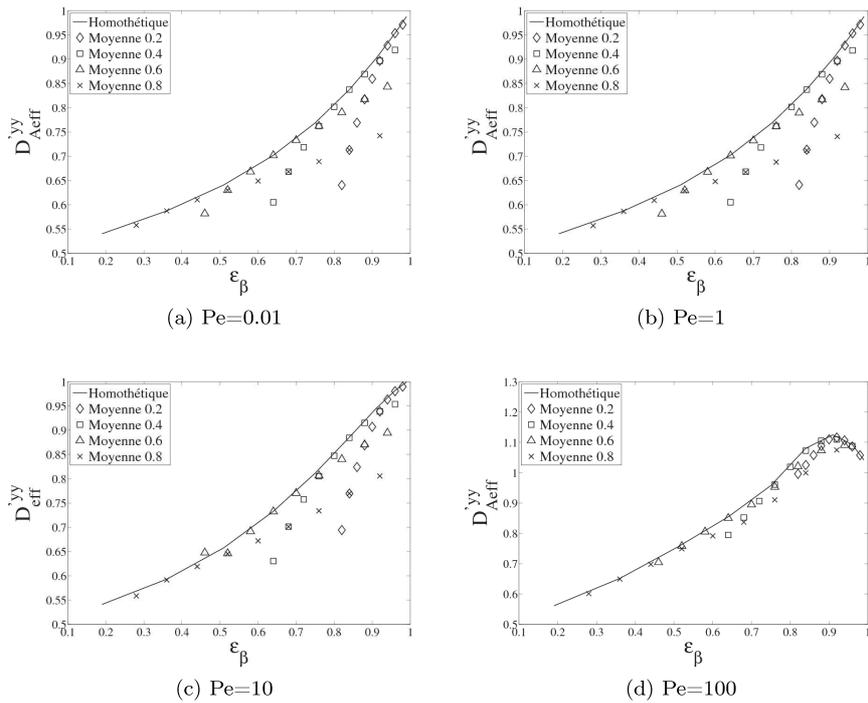


FIG. 4.22: Comparaison entre les moyennes des comportements de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ et celui de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ issu de la croissance homothétique de la phase solide.

Chapitre 5

Cas de la dispersion réactive en milieu triphasique

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, la prise en compte des phénomènes intervenant dans le transport des espèces dépend de l'échelle de description. Les modèles proposés jusqu'à présent (la plupart d'entre eux résultant de changements d'échelle par prise de moyenne volumique) [Ochoa et al., 1986, Ochoa, 1988, Galban and Locke, 1997, Wood and Whitaker, 1998, Galban and Locke, 1999a,b, Wood and Whitaker, 1999, 2000, Wood et al., 2001, Chung et al., 2006] ne considèrent pas toujours la convection. De ce point de vue, ces modèles peuvent être considérés comme incomplets. L'intérêt du modèle présenté ici est la prédiction des coefficients de dispersion macroscopique en faisant intervenir tous les phénomènes qui peuvent avoir lieu dans le processus de croissance *in vitro*.

Lors du chapitre précédent, nous avons démontré une influence de la microstructure sur la dispersion effective calculée. Nous allons donc maintenant nous attacher à réaliser une étude paramétrique de l'influence des différentes grandeurs associées au milieu et au processus sur la dispersion macroscopique, l'objectif étant rappelés-le, d'étudier la possibilité d'optimiser les transferts pour améliorer la qualité du tissu cultivé. Pour cela, on résout alors le cas complet des problèmes de fermeture. Pour rappel, le modèle complet et les paramètres effectifs qui lui sont associés s'écrivent :

$$(\varepsilon_\beta + K_{Aeq}\varepsilon_\gamma) \frac{\partial \{C_A\}}{\partial t} = \mathbf{D}_{Aeff} : \nabla \nabla \{C_A\} - \varepsilon_\beta Pe \langle \mathbf{V}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \{C_A\} - k_{Aeff} \{C_A\} \quad (5.1)$$

où k_{Aeff} et \mathbf{D}_{Aeff} sont déterminés en utilisant :

$$k_{Aeff} = \varepsilon_\gamma K_{Aeq} Ki \quad (5.2)$$

$$\mathbf{D}_{Aeff} = \varepsilon_\gamma \boldsymbol{\kappa} + \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle + \boldsymbol{\kappa} \cdot \langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (5.3)$$

Dans le cas complet, les variables de fermeture \mathbf{b}_η sont déterminées à partir des deux problèmes suivants :

Problème 1 :

$$\mathbf{D}_A : \nabla \nabla \mathbf{d}_\gamma - Ki \mathbf{d}_\gamma = 0 \text{ dans } V_\gamma \quad (5.4)$$

$$\text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla \mathbf{d}_\gamma = -\mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \text{ sur } A_{\alpha\gamma} \quad (5.5)$$

$$\nabla^2 \mathbf{d}_\beta - Pe \mathbf{V}_\beta \cdot \nabla \mathbf{d}_\beta = Pe \tilde{\mathbf{V}}_\beta \text{ dans } V_\beta \quad (5.6)$$

$$\text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla \mathbf{d}_\beta = -\mathbf{n}_{\alpha\beta} \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (5.7)$$

$$\text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\nabla \mathbf{d}_\beta + \mathbf{I}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot (\nabla \mathbf{d}_\gamma + \mathbf{I}) \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (5.8)$$

$$\text{B.C.4 : } -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \boldsymbol{\alpha}_\gamma \cdot (\nabla \mathbf{d}_\gamma + \mathbf{I}) = \mathbf{d}_\gamma - \mathbf{d}_\beta \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (5.9)$$

$$\langle \mathbf{d}_\beta \rangle^\beta + \langle \mathbf{d}_\gamma \rangle^\gamma = 0 \quad (5.10)$$

Problème 2 :

$$\mathbf{D}_A : \nabla \nabla B_\gamma - Ki B_\gamma = -\varepsilon_\gamma^{-1} K_{Aeq}^{-1} \text{ dans } V_\gamma \quad (5.11)$$

$$\text{B.C.1 : } \mathbf{n}_{\alpha\gamma} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla B_\gamma = 0 \text{ sur } A_{\alpha\gamma} \quad (5.12)$$

$$\nabla^2 B_\beta - P\epsilon \mathbf{V}_\beta \cdot \nabla B_\beta = \epsilon_\beta^{-1} \text{ dans } V_\beta \quad (5.13)$$

$$\text{B.C.2 : } \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot \nabla B_\beta = 0 \text{ sur } A_{\alpha\beta} \quad (5.14)$$

$$\text{B.C.3 : } \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \nabla B_\beta = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla B_\gamma \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (5.15)$$

$$\text{B.C.4 : } -\mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \boldsymbol{\alpha}_\gamma \cdot \nabla B_\gamma = B_\gamma - B_\beta \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (5.16)$$

$$\langle B_\beta \rangle^\beta + \langle B_\gamma \rangle^\gamma = 0 \quad (5.17)$$

Les variables \mathbf{d}_η et B_η sont périodiques et sont reliées à \mathbf{b}_η par :

$$\mathbf{b}_\eta = \mathbf{d}_\eta - B_\eta \frac{\langle \mathbf{d}_\beta \rangle^\beta}{\langle B_\beta \rangle^\beta} \quad (5.18)$$

Nous rappelons aussi que $\langle \nabla \mathbf{b}_\eta \rangle$ peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\langle \nabla \mathbf{b}_\eta \rangle = \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\eta}} \mathbf{n}_{\eta\alpha} \mathbf{b}_\eta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\pi\eta}} \mathbf{n}_{\eta\pi} \mathbf{b}_\eta dA$$

$$\eta = \beta, \gamma; \quad \pi = \beta, \gamma; \quad \eta \neq \pi$$

Dans un premier temps, nous étudions l'influence des paramètres physiques sur la dispersion effective dans le cas d'une cellule unitaire simplifiée constituée de deux cylindres concentriques de section carrée telle que schématisée sur la Fig. 5.1. Lors de ces calculs, un maillage 100×100 a été employé. Ce maillage concilie à la fois une bonne description de la géométrie, ainsi qu'un temps de calcul raisonnable.

Ce travail étant volontairement placé dans le cadre de processus biologiques, nous avons choisi des plages de variation de paramètres physiques dont les valeurs sont typiques de ces processus. En s'appuyant sur des données disponibles dans la littérature, nous avons retenu les intervalles de variations rappelés dans le Tableau 5.1 [Galban and Locke, 1997, 1999a,b, Pathi et al., 2005, Chung et al., 2006].

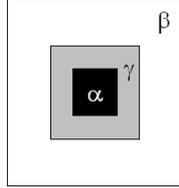


FIG. 5.1: Cellule unitaire utilisée lors de la détermination des coefficients de la dispersion effective à l'aide du modèle complet. α : phase solide; β : phase fluide; γ : phase cellulaire

Paramètre	Valeur
$D_{A\beta}$	$10^{-9} m^2.s^{-1}$
$\mathbf{D}_{A\gamma}$	$10^{-10} \mathbf{I} m^2.s^{-1}$
k_A	$[10^{-2}; 10] s^{-1}$
K_{Aeq}	10^{-1}
ε_β	$[0; 0.95]$
ε_α	$5 \cdot 10^{-2}$
α_A	$[10^{-5}; 10^{-3}] m.s^{-1}$

TAB. 5.1: Valeurs des paramètres extraites de la littérature.

Aucune indication précise ayant été trouvée quant aux valeurs typiques du nombre de Péclet, nous avons choisi un intervalle suffisamment étendu pour représenter tous les régimes, soit Pe compris entre 10^{-2} et 10^3 , intervalle couramment utilisé dans les travaux traitant de la dispersion [Edwards et al., 1991, Quintard and Whitaker, 1994c, Amaral Souto and Moyne, 1997, Ahmadi et al., 2001].

En introduisant les valeurs mentionnées dans le Tableau 5.1 dans les expressions des différents nombres adimensionnels employés dans ce travail, les intervalles de variation de ces paramètres sont ceux résumés dans le Tableau 5.2.

Pe	ε_γ	Ki	α_γ
$[10^{-2}; 10^3]$	$[0; 0.9]$	$[10^{-1}; 10^2]$	$[10^{-3}; 10^{-1}] \mathbf{I}$

TAB. 5.2: Plages de variation des paramètres adimensionnels employés pour la résolution des problèmes de fermeture.

les paramètres “constants” prenant alors les valeurs rassemblées dans le tableau 5.3.

\mathbf{D}_A	ε_α	K_{Aeq}	$\boldsymbol{\kappa}$
$10^{-1}\mathbf{I}$	$5 \cdot 10^{-2}$	10^{-1}	$10^{-2}\mathbf{I}$

TAB. 5.3: Valeurs des paramètres constants employés pour la résolution de la fermeture du modèle macroscopique.

Afin de déterminer les nombres adimensionnels listés dans les Tableaux 5.2 et 5.3, la longueur de la cellule de calcul a été considérée comme étant égale à $100 \mu m$, soit environ dix fois le diamètre d’une fibre de support (qui est de l’ordre de $10 \mu m$ [Mahmoudifar and Doran, 2005]) et environ 10 fois la taille d’une cellule érythroïdétique “moyenne” (reportée à environ $10 \mu m$ par Croll et al. [2005]). Comme les scaffolds vierges ont une porosité de l’ordre de 95% [Lasseux et al., 2004, Croll et al., 2005], nous avons bloqué la valeur de ε_α à 5%. Cependant, dans une étude spécifique sur l’influence des fractions volumiques en cellule et en solide, nous faisons varier la fraction volumique solide (ε_α) sur un intervalle compris entre 10^{-2} et 0.81.

Dans l’ensemble des résultats présentés ici, les effets de chaque paramètre ayant une plage de variation sont étudiés. Lorsqu’un paramètre donné ne fait pas partie de l’étude, il est alors pris au centre de son intervalle de variation. Par exemple, quand Ki et Pe sont variables, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma$ est alors égal à $5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$. De plus, les calculs ont été réalisés pour trois fractions volumiques cellulaires (ε_γ) différentes, à savoir $5 \cdot 10^{-2}$, 0.45 et 0.85, permettant ainsi de bien distinguer l’importance de la phase cellulaire. De cette manière, on rend compte partiellement de la dépendance de \mathbf{D}_{Aeff} vis-à-vis de l’évolution du milieu à trois stades (précoce, intermédiaire et terminal) du processus de croissance. En effet, la croissance n’est pas simulée ici, étant découplée du transfert de matière d’un point de vue cinétique.

Enfin, chaque paramètre a été étudié en simultané avec le nombre de Péclet. En effet, compte tenu que ce paramètre peut induire des changements de comportement de \mathbf{D}_{Aeff} (cf. chapitre précédent), il a paru nécessaire de le faire varier dans chaque étude.

5.1 Influence du nombre de Péclet Pe et du nombre cinétique Ki

Tout d'abord, l'influence simultanée du nombre de Péclet et du nombre cinétique est examinée. Le nombre de Péclet (Pe) quantifie les effets convectifs par rapport aux effets diffusifs, tandis que le nombre cinétique (Ki) exprime le rapport entre la vitesse de réaction dans la phase cellulaire et la vitesse de diffusion dans la phase fluide. Ce dernier correspond au critère de Thiele à un facteur \mathbf{D}_A^{-1} près. Nous nous intéressons ici plus particulièrement au comportement des composantes longitudinale et transversale du tenseur de dispersion. Afin de réaliser cette étude, les paramètres physiques sont fixés à :

Pe	Ki	ε_α	α_γ	K_{Aeq}	κ	\mathbf{D}_A
$[10^{-2}; 10^3]$	$[10^{-1}; 10^2]$	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	10^{-1}	$10^{-2}\mathbf{I}$	$10^{-1}\mathbf{I}$

TAB. 5.4: Valeurs des différents paramètres physiques. Comme précisé un peu plus haut, les calculs sont effectués pour $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$; 0.45 et 0.85.

5.1.1 Composante longitudinale

Sur les Figs. 5.2, nous avons reporté la dépendance de D_{Aeff}^{xx} vis-à-vis de Pe et Ki pour trois fractions volumiques en cellule ($\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$; 0.45 et 0.85). A partir de ces figures, deux remarques s'imposent. Premièrement, la dépendance de D_{Aeff}^{xx} avec Pe suit la tendance classique déjà observée à la section ?? pour le cas de la dispersion passive (voir Fig. ??). Pour $Pe \leq 1$, le régime est essentiellement diffusif, où se superposent les effets de diffusion moléculaire et de tortuosité. Ensuite, quand les effets hydrodynamiques deviennent prépondérants, D_{Aeff}^{xx} dépend (quasi-)linéairement de $\log(Pe)$.

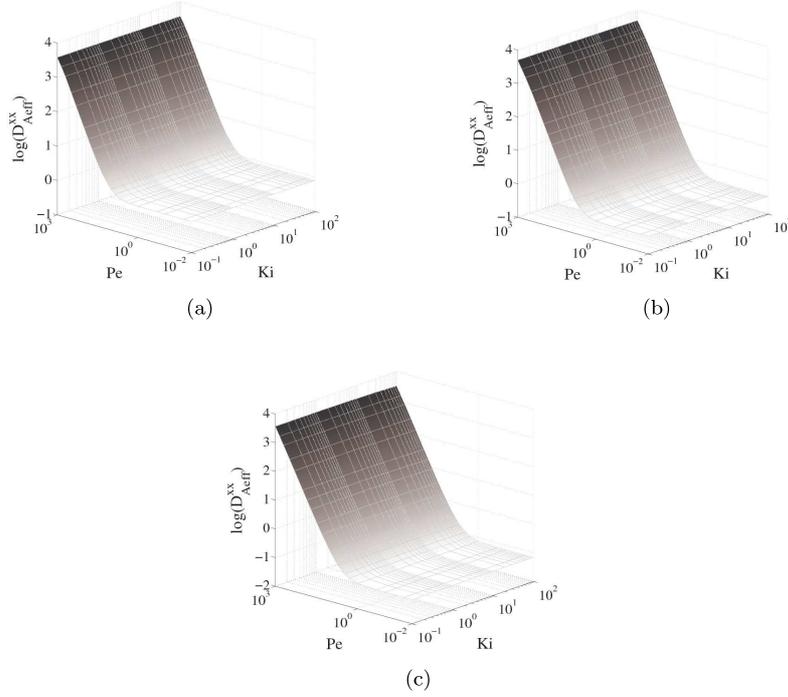


FIG. 5.2: Influence de Pe et Ki sur D_{Aeff}^{xx} . **a)** $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$; **b)** $\varepsilon_\gamma = 0.45$; **c)** $\varepsilon_\gamma = 0.85$. $\mathbf{D}_A = 10^{-1}\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2}\mathbf{I}$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$.

La transition entre le “régime diffusif” et le “régime convectif” commence à une valeur de Pe légèrement plus faible quand la fraction volumique en cellule augmente. Pour $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$, la transition est sensible pour $Pe = 4 - 5$, alors que pour $\varepsilon_\gamma = 0.45$ et 0.85 , cette transition se situe plutôt vers $Pe = 3$ et $Pe = 2$ respectivement. Enfin, ε_γ joue aussi un rôle sur la plage de variation de D_{Aeff}^{xx} . Pour la valeur la plus faible de la fraction volumique en cellule, $\log(D_{Aeff}^{xx})$ varie grossièrement entre 0 et 3.5. Pour la fraction volumique intermédiaire, cette plage passe à environ $[-0.5; 3.7]$, enfin pour $\varepsilon_\gamma = 0.85$, $\log(D_{Aeff}^{xx})$ varie dans l’intervalle $[-1; 3.5]$ environ. La diminution du coefficient de dispersion effective (pour des Pe faibles) lorsque la fraction volumique de la phase fluide diminue est cohérente avec les observations sur l’influence de la porosité sur D_{Aeff} en dispersion passive.

Intéressons nous maintenant à la dépendance vis à vis du nombre cinétique.

Au regard des Figs. 5.2, on constate que Ki ne semble pas avoir d'influence significative sur D_{Aeff}^{xx} . Pour être plus précis, nous avons représenté, sur la Fig. 5.3, D_{Aeff}^{xx} en fonction de Ki pour deux valeurs du couple (Pe, ε_γ) , soit $(Pe = 1, \varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2})$ et $(Pe = 2 \cdot 10^2, \varepsilon_\gamma = 0.45)$.

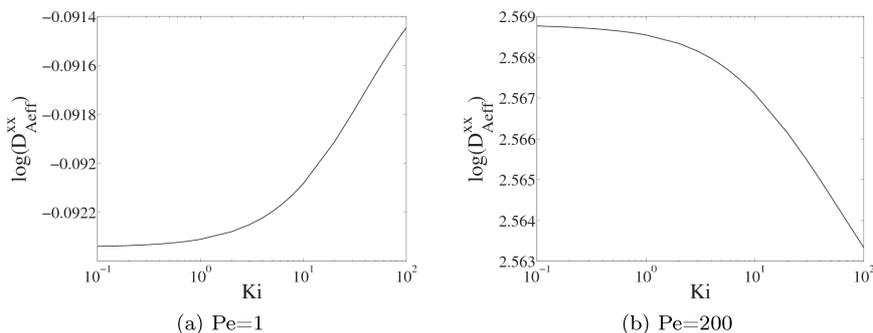


FIG. 5.3: D_{Aeff}^{xx} en fonction de Ki . a) $Pe = 1, \varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$; b) $Pe = 2 \cdot 10^2, \varepsilon_\gamma = 0.45$.

Les résultats des Figs. 5.3 montrent que pour des valeurs faibles et moyennes de Pe , D_{Aeff}^{xx} est très légèrement croissant avec Ki alors que pour des valeurs plus importantes de Pe ($2 \cdot 10^2$ ici), on note un comportement décroissant. Cependant, et cela pour chaque cas, ces évolutions restent extrêmement faibles, voire insignifiantes. En multipliant Ki par 10^3 , D_{Aeff}^{xx} varie de moins de 1% pour ces deux valeurs de Pe quand $\varepsilon_\beta = 5 \cdot 10^{-2}$ et au maximum d'environ 2% pour le couple $(\varepsilon_\beta = 0.45; Pe = 2 \cdot 10^2)$. En conclusion, on notera que Ki n'a que très peu d'effet sur D_{Aeff}^{xx} .

Ce résultat est intéressant car il permet de revenir sur un point des travaux d'Ochoa [Ochoa et al., 1986, Ochoa, 1988] concernant la diffusion et la réaction dans un milieu cellulaire. Lors du développement du problème de fermeture pour le cas de diffusion/réaction, ces auteurs ont imposé une contrainte concernant le terme de réaction, à savoir :

$$Ki \left(\frac{l_\gamma}{l} \right)^2 \ll D_A \quad (5.19)$$

En d'autres termes, le problème de fermeture tel qu'indiqué par Ochoa (qui ne diffère du notre qu'au terme en Ki près) n'est valable que si le nombre cinétique

Ki est très petit devant le coefficient de diffusion adimensionné dans la phase cellulaire D_A , le facteur de forme $\frac{l_\gamma}{l}$ étant au maximum égal à 1 (la phase cellulaire envahit toute la cellule de calcul). Avec les paramètres introduits ici, on peut affirmer que cette contrainte est finalement très restrictive. En effet, quelque soit la configuration, il semble que ce terme puisse être écarté jusqu'à $Ki \cong 10 D_A$. C'est ce qu'indiquent les résultats des Figs. 5.3 qui montrent que D_{Aeff}^{xx} reste quasi-constant jusqu'à environ $Ki = 1$, soit $10 D_A$.

Afin d'illustrer un peu plus l'influence de Ki , nous nous avons reporté sur les Figs. 5.4 les champs de b^x (seule composante de \mathbf{b} intervenant dans D_{Aeff}^{xx}) obtenus pour $\varepsilon_\gamma = 0.45$ et pour deux valeurs de Pe (1 et $2 \cdot 10^2$). Selon les Eqs. (5.4) et (5.11) des problèmes de fermeture, seuls \mathbf{d}_γ et B_γ (soit \mathbf{b}_γ) sont modifiés par Ki , modification qui se répercute sur $\langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle$. C'est pourquoi nous avons représenté sur la Fig. 5.4 les champs de b^x (soit b_β^x et b_γ^x) pour deux valeurs de Pe (1 et $2 \cdot 10^{-2}$) et pour $\varepsilon_\beta = 0.45$.

Au regard des Eqs. (5.4) et (5.11), on s'attend à ce que d_γ^x ainsi que B_γ tendent vers 0 quand $Ki \gg D_A$. Les Figures 5.4 montrent bien cette tendance. Comme sous-entendu ci-dessus, les champs de b_β^x ne sont pas (ou très peu) influencés par Ki pour une même valeur de Pe . Une étude sur la variation de b_β^x a montré une influence négligeable de Ki , d'où $\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{xx}$ constant jusqu'à la quatrième décimale. Cette très légère influence s'explique par les conditions aux limites à l'interface $A_{\beta\gamma}$ qui relie b_β à b_γ . Il n'en reste pas moins que les changements dans les contributions liées à la tortuosité sont directement liés à $\kappa^{xx} \langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle^{xx}$ (Tableau 5.5).

$Pe =$	10^{-2}			$2 \cdot 10^2$			
	Ki	$\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{xx}$	$\langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle^{xx}$	Somme	$\langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{xx}$	$\langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle^{xx}$	Somme
10^{-1}		-0.1858	$-5.0 \cdot 10^{-1}$	-0.1808	2.55	355	-1.005
10^2		-0.1858	$-6.6 \cdot 10^{-1}$	-0.1791	2.52	350	-0.9863
Variation (%)		$5.38 \cdot 10^{-3}$	33.63	0.93	1.22	1.41	1.86

TAB. 5.5: Contributions liées à la tortuosité composant D_{Aeff}^{xx} pour $\varepsilon_\gamma = 0.45$. Maillage : 100×100 . Note : Somme = $\kappa^{xx} \langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle^{xx} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle^{xx}$

Dans le cas où $Pe = 2 \cdot 10^2$, la dépendance de $\langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle^{xx}$ vis-à-vis de Ki est fortement atténuée. Pour les autres valeurs de porosité étudiées ici ($\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$

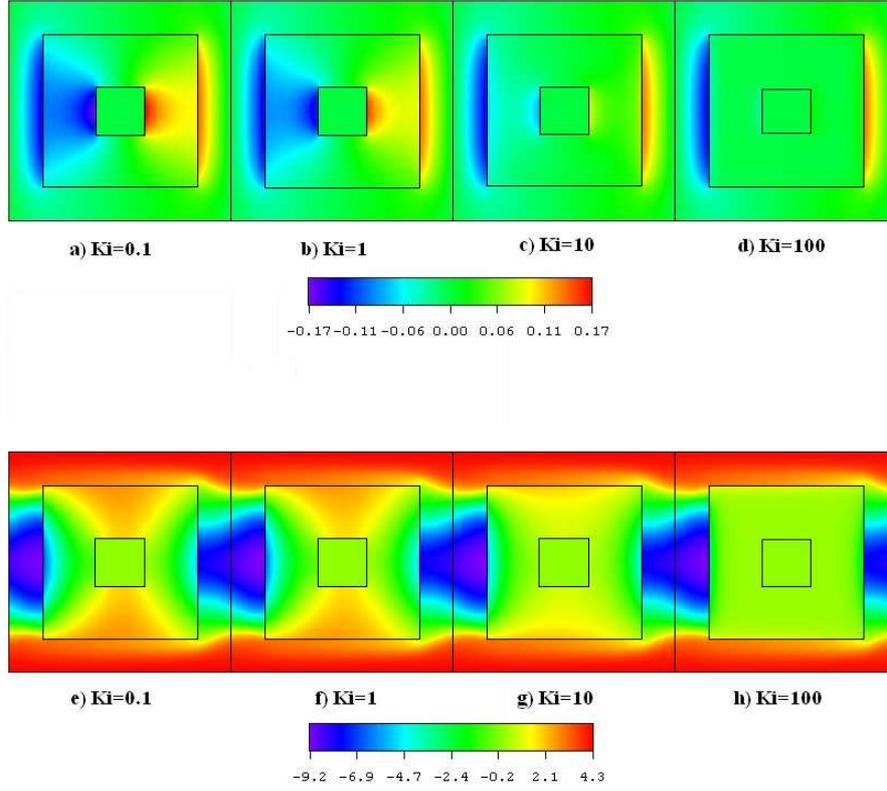


FIG. 5.4: Champs de b_η^x , $\eta = \beta$; γ pour quatre valeurs de Ki (10^{-1} , 1, 10 et 10^2) et pour $\varepsilon_\gamma = 0.45$. a) à d) $Pe = 10^{-2}$; e) à h) $Pe = 2 \cdot 10^2$.

et 0.85), des comportements similaires ont été observés, à savoir que le champ de \mathbf{b}_γ tend vers zéro quand Ki augmente.

5.1.2 Composante transversale

Nous nous intéressons maintenant au comportement de D_{Aeff}^{yy} vis-à-vis de Pe et Ki pour les mêmes intervalles de variation de ces paramètres que précédemment. Les Figs. 5.5 montrent des comportements de D_{Aeff}^{yy} en fonction de Pe similaires à celles présentées sur les Fig. 5.2 pour D_{Aeff}^{xx} . Notons cependant que D_{Aeff}^{yy} reste très inférieur à D_{Aeff}^{xx} , et ce d'autant plus que ε_γ est élevé. Quand $\varepsilon_\gamma = 0.45$ et 0.85, les comportements de D_{Aeff}^{yy} présentent deux pentes pour des $Pe \geq 10$, confirmant l'impossibilité de corréler globalement la dépendance de D_{Aeff}^{yy} avec Pe par une loi puissance en dehors du régime diffusif.

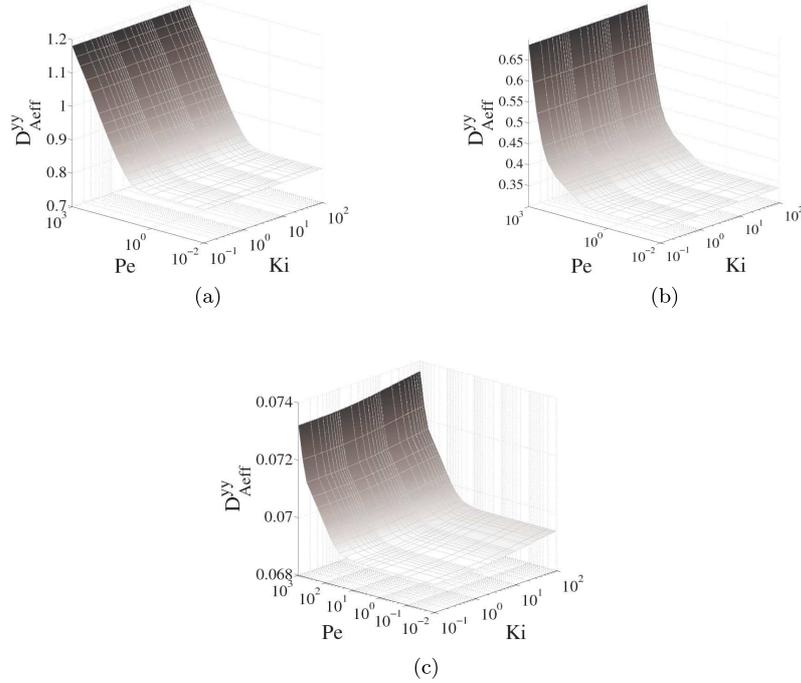


FIG. 5.5: Comportement de D_{Aeff}^{yy} en fonction de Pe et de Ki . **a)** $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$; **b)** $\varepsilon_\gamma = 0.45$; **c)** $\varepsilon_\gamma = 0.85$. $\mathbf{D}_A = 10^{-1}\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2}\mathbf{I}$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$.

Pour la valeur la plus forte de ε_γ (0.85), la dispersion effective transversale qui croît avec Ki montre une dépendance “plus marquée” avec le nombre cinétique. Comparé aux autres valeurs de fractions volumiques cellulaires présentées ici, cette influence semble plus marquée du fait d’une plage de variation de $D_{Aeff}^{yy}(\varepsilon_\gamma = 0.85)$ beaucoup plus restreinte. Alors que pour $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$ et 0.45 D_{Aeff}^{yy} varie respectivement d’environ 0.8 à 1.2 et de 0.35 à 0.7, ce paramètre effectif ne croît que d’environ $6 \cdot 10^{-3}$ pour $\varepsilon_\gamma = 0.85$. Dans ce dernier cas, la dispersion transversale est négligeable face à la dispersion longitudinale.

Bien que D_{Aeff}^{yy} soit très faible, nous avons représenté sur les Figs. 5.6 les champs de la composante selon y de \mathbf{b} (b_η^y) pour les mêmes configurations que celles indiquées sur les Figs. 5.4.

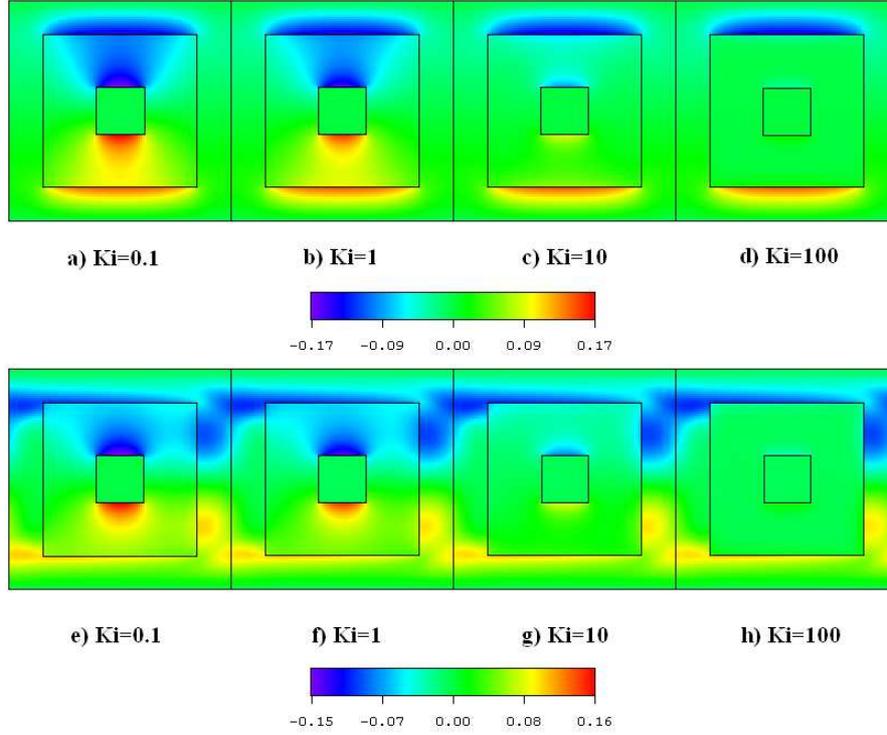


FIG. 5.6: Champs de b_γ^y , $\eta = \beta$, γ pour quatre valeurs de Ki (10^{-1} , 1, 10 et 10^2) et pour $\varepsilon_\gamma = 0.45$. a) à d) $Pe = 10^{-2}$; e) à h) $Pe = 10^3$.

Ces Figs. 5.6 appellent la même remarque que celle pour D_{Aeff}^{xx} , à savoir que plus Ki est élevé (ou plus la réaction est prépondérante), plus le champ de \mathbf{b}_γ tend vers zéro. Ce comportement peut être expliqué physiquement par le fait que lorsque Ki augmente (c'est-à-dire, lorsque la réaction est très rapide), la fluctuation de concentration dans la phase γ diminue également car les nutriments apportés sont quasi-instantanément consommés. Pour de faibles nombres de Péclet, le champ semble identique à celui obtenu pour D_{Aeff}^{xx} mais avec une rotation de 90° dans le sens horaire. Ce constat peut être simplement expliqué par le fait que les effets hydrodynamiques sont insensibles, laissant la diffusion comme principal vecteur de transfert pour les nutriments. Pour de plus fortes valeurs de Pe , cette analogie disparaît.

5.2 Influence des fractions volumiques sur \mathbf{D}_{Aeff}

Dans cette section, l'influence des fractions volumiques en solide (α) et en cellule (γ) sur la dispersion macroscopique longitudinale est étudiée. Pour une valeur de fraction volumique en fluide (ε_β) donnée, on étudie la dispersion en variant ε_α et ε_γ . Ainsi, comme indiqué dans le préambule de cette section, la fraction volumique solide a été considérée comme une variable dans le but d'analyser l'influence de la composition (ou plus exactement des proportions) de l'inclusion sur le comportement de D_{Aeff}^{xx} . Différentes valeurs de Pe ont été considérées, seuls les résultats pour $Pe = 10^{-2}$ et $Pe = 10$ sont présentés sur les Figs. 5.7, des comportements similaires ayant été obtenus pour d'autres valeurs de Pe . Afin d'assurer une bonne précision sur la localisation des interfaces en fonction des valeurs de ε_γ et ε_α , un maillage 200×200 a été retenu. Avec ce maillage, les deux configurations $\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\gamma = 0.64$ et $\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\gamma = 0.65$, par exemple, peuvent être discriminées. L'ensemble des paramètres introduits pour ces calculs sont répertoriés dans le Tableau 5.6.

Pe	Ki	α_γ	K_{Aeq}	κ	\mathbf{D}_A
$10^{-2}; 10^3$	50	$5 \cdot 10^{-2} \mathbf{I}$	10^{-1}	$10^{-2} \mathbf{I}$	$10^{-1} \mathbf{I}$

TAB. 5.6: Valeurs des paramètres des problèmes de fermeture introduites lors de l'étude de l'influence simultanée de ε_γ et ε_α .

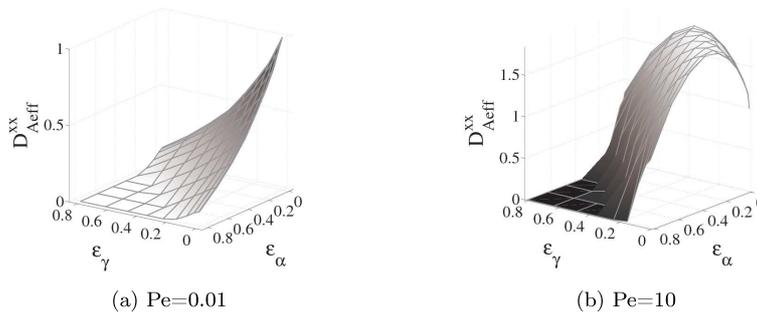


FIG. 5.7: D_{Aeff}^{xx} en fonction des fractions volumiques solide (ε_α) et cellulaire (ε_γ). **a)** $Pe = 10^{-2}$, **b)** $Pe = 10$. $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\kappa = 10^{-2} \mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\alpha_\gamma = 5 \cdot 10^{-2} \mathbf{I}$. Maillage : 200×200 .

Pour $Pe = 10^{-2}$ (Fig. 5.7 a), la dispersion longitudinale décroît, comme attendu, avec une diminution de la fraction volumique en fluide ($\varepsilon_\beta = 1 - (\varepsilon_\gamma + \varepsilon_\alpha)$). Cependant, quand $Pe = 10$, on peut clairement observer un extremum pour ε_β proche de 0.5. Pour être plus complet, cet extremum se situe toujours sur l'isovaleur $\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\gamma = 0.5$. Ce comportement est du à la contribution du terme purement hydrodynamique ($Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle$) dans l'expression du tenseur macroscopique de dispersion. Sur la Fig. 5.8, la composante longitudinale de ce terme est représentée en fonction de ε_α (ε_γ étant considéré égal à 0) pour les deux valeurs de Pe considérées ici. Bien que ce terme exhibe toujours une dépendance concave avec ε_α avec un extremum à $\varepsilon_\beta \simeq 0.5$, sa contribution reste faible comparée aux effets de la diffusion moléculaire ($\varepsilon_\gamma \boldsymbol{\kappa} + \varepsilon_\beta \mathbf{I}$) et aux effets de $\boldsymbol{\kappa} \cdot \langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle + \langle \nabla \mathbf{b}_\gamma \rangle$ quand la diffusion domine (c'est-à-dire, jusqu'à $Pe \simeq 1$). Pour des valeurs plus importantes de Pe (10 en l'occurrence), la convection est dominante, conduisant à une contribution majeure de la partie purement hydrodynamique dans la dispersion macroscopique et expliquant le comportement reporté sur la Fig. 5.7 b).

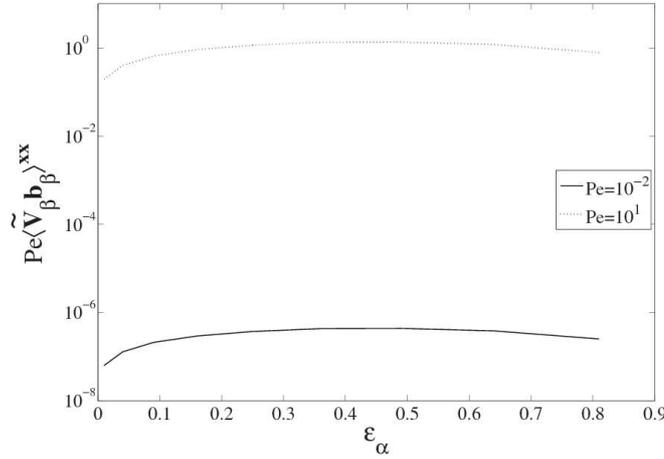


FIG. 5.8: Composante longitudinale du terme purement hydrodynamique $Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^{xx}$ en fonction de la fraction volumique solide (ε_α). $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2} \mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2} \mathbf{I}$, Maillage : 200×200 .

Le comportement concave se retrouve également sur la dépendance de la dispersion effective longitudinale en fonction du nombre de Péclet (Pe) et de la fraction volumique cellulaire (ε_γ) [voir Fig. 5.9]. En effet, cette figure montre que :

1. quand Pe est petit (jusqu'à 10 environ), D_{Aeff}^{xx} est strictement décroissant avec ε_γ ;
2. une variation concave de D_{Aeff}^{xx} en fonction de ε_γ apparaît au-delà de cette valeur de Pe .

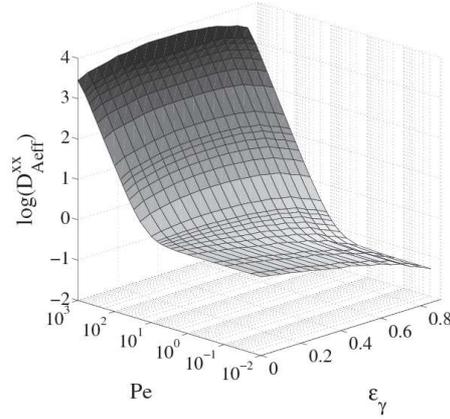


FIG. 5.9: Evolution de la dispersion longitudinale en fonction de Pe et de ε_γ . $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$, $Ki = 50$, $\alpha_\gamma = 5 \cdot 10^{-2} \mathbf{I}$, $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\kappa = 10^{-2} \mathbf{I}$.

Les résultats de la Fig. 5.7 montrent par ailleurs que la composition de l'inclusion (solide+phase cellulaire) ne semble pas avoir d'influence sur la valeur maximale observée pour la dispersion. En effet, quand $Pe = 10$, la valeur maximale notée pour les différentes fractions volumiques est proche de 1.80. Lorsque la convection domine, la présence ou non de la phase solide joue un rôle mineur à $\varepsilon_\beta = \text{constante}$, ce qui est intuitivement correct puisque :

- il n'y a pas de convection dans la phase cellulaire (γ),
- et la diffusion à un rôle mineur à ces valeurs de Pe .

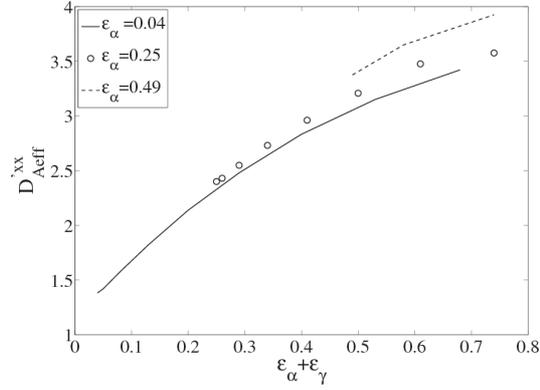


FIG. 5.10: Comportement de D_{Aeff}^{xx} en fonction à la fois de ε_γ et de ε_α . $Ki = 50$, $\alpha_\gamma = 5 \cdot 10^{-2} \mathbf{I}$, $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\kappa = 10^{-2} \mathbf{I}$, $Pe = 10$.

Enfin, D_{Aeff}^{xx} , tel que représenté sur les Figs. 5.7, correspond au produit $D_{Aeff}^{xx} = (\varepsilon_\beta + K_{Aeq} \varepsilon_\gamma) D_{Aeff}^{\prime xx}$, en reprenant la notation utilisée dans le chapitre précédent. En traçant $D_{Aeff}^{\prime xx}$ en fonction à la fois de ε_α et ε_γ (Fig. 5.10), l'allure suivie par $D_{Aeff}^{\prime xx}$ est similaire à celle observée dans le cadre de la dispersion passive (chapitre précédent et $Pe = 10$), à savoir une évolution strictement décroissante avec une augmentation de la fraction volumique en fluide (soit $\varepsilon_\beta = 1 - (\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\gamma)$).

5.3 Influence du couplage Pe et α_γ

5.3.1 D_{Aeff}^{xx}

Lors de cette série de calculs, nous étudions l'influence du couple (Pe, α_γ) sur la dispersion effective. Le paramètre α_γ , d'un point de vue physique, définit l'importance de la vitesse de transfert à travers l'interface cellule/fluide face à la vitesse de transfert par diffusion dans la phase cellulaire. Les valeurs des différents paramètres introduits sont listées dans le Tableau 5.7.

Sur les Figs. 5.11, nous reportons les résultats obtenus pour les trois séries de calcul correspondant aux trois valeurs de ε_γ .

Pe	α_γ	Ki	K_{Aeq}	κ	\mathbf{D}_A
$[10^{-2}; 10^3]$	$[10^{-3}; 10^{-1}]$	$5 \cdot 10^1$	10^{-1}	$10^{-2} \mathbf{I}$	$10^{-1} \mathbf{I}$

TAB. 5.7: Paramètres introduits pour la résolution de la fermeture lors de l'examen du rôle de Pe et α_γ sur \mathbf{D}_{Aeff} . $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}; 0.45; 0.85$.

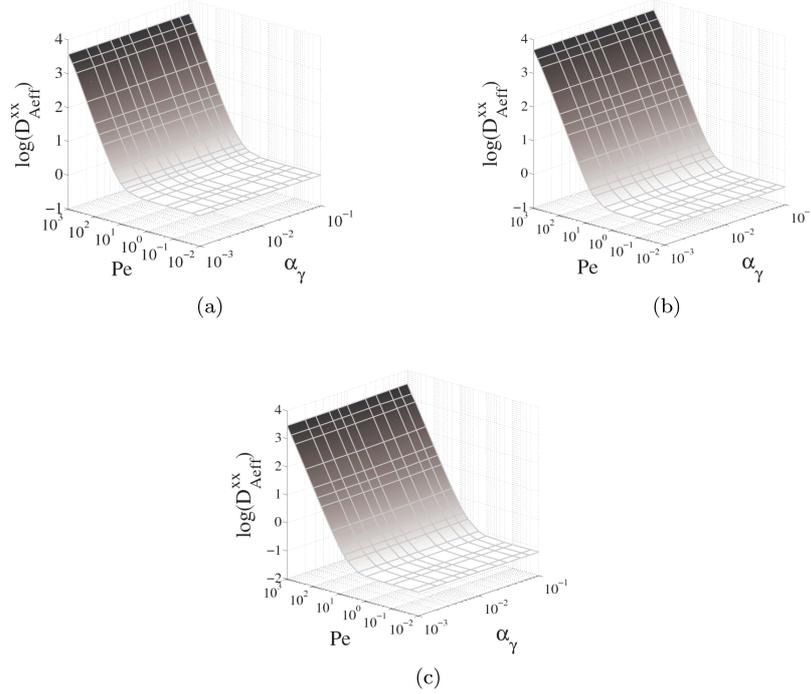


FIG. 5.11: D_{Aeff}^{xx} en fonction de Pe et α_γ pour trois valeurs de ε_γ . **a)** $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$, **b)** $\varepsilon_\gamma = 0.45$, **c)** $\varepsilon_\gamma = 0.85$. $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\kappa = 10^{-2} \mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$. Maillage : 100×100 .

Les Figs. 5.11 montrent que α_γ n'a qu'une faible influence sur la dispersion longitudinale, du moins sur les intervalle de variation et les valeurs de paramètres utilisés ici . Cette faible influence est précisée sur la Fig. 5.12 pour deux valeurs particulières de Pe : $Pe = 10^{-1}$ et $Pe = 10^2$.

Dans le premier cas (Fig. 5.12 a), D_{Aeff}^{xx} décroît avec α_γ , tandis que l'inverse

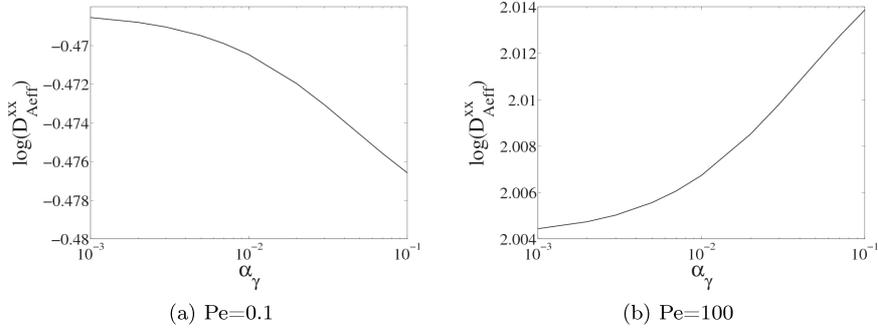


FIG. 5.12: Dispersion effective longitudinale en fonction de α_γ pour deux valeurs particulières de Pe et une fraction volumique en cellule $\varepsilon_\gamma = 0.45$. a) $Pe = 10^{-1}$ et b) $Pe = 10^2$.

est observé quand Pe est grand (Fig. 5.12 b). Bien qu'à ces échelles l'évolution soit bien visible, la variation de D_{Aeff}^{xx} reste très faible en comparaison de l'intervalle de variation de α_γ . En multipliant ce paramètre par 10^2 , la dispersion effective longitudinale ne varie que de 1.6% environ pour $Pe = 10^{-1}$ et de 0.5% environ pour $Pe = 10^2$.

Cependant, comparé à Pe , l'intervalle de variation de α_γ est beaucoup plus petit et les valeurs beaucoup plus faibles. C'est pourquoi des calculs complémentaires (non nécessairement physiques) ont été entrepris sur une gamme plus étendue, à savoir $\alpha_\gamma = [10^{-3}; 10^2] \mathbf{I}$. En employant un intervalle de variation de α_γ plus étendu, l'influence de ce paramètre sera plus marquée. Compte tenu que seule la tendance générale nous intéresse, un maillage grossier de 40×40 a été employé. Les calculs ont été réalisés pour six valeurs de α_γ (10^{-3} ; 10^{-2} ; 10^{-1} ; 1; 10; 10^2) et quatre valeurs de Pe (10^{-2} ; 1; 10; 10^2). Les résultats sont rassemblés sur les Figs. 5.13.

Ces résultats montrent que D_{Aeff}^{xx} tend vers une valeur limite (inférieure à Pe faible et supérieure à Pe élevé) aux grandes valeurs de α_γ (> 1), soit pour une valeur du coefficient de transfert de matière interfacial (α_A) inférieure à $10^{-5} m.s^{-1}$ avec $\mathbf{D}_{A\gamma} = 10^{-1} \mathbf{I}$ et $l = 10^{-4} m$. Pour les valeurs de $\alpha_\gamma \leq 10^{-3}$, D_{Aeff}^{xx} amorce une courbure indiquant une valeur limite supérieure (respectivement inférieure) quand $Pe \leq 1$ (respectivement $Pe > 1$). Quand α_γ augmente, la résistance au transfert à l'interface β/γ s'accroît jusqu'à l'obtention d'une

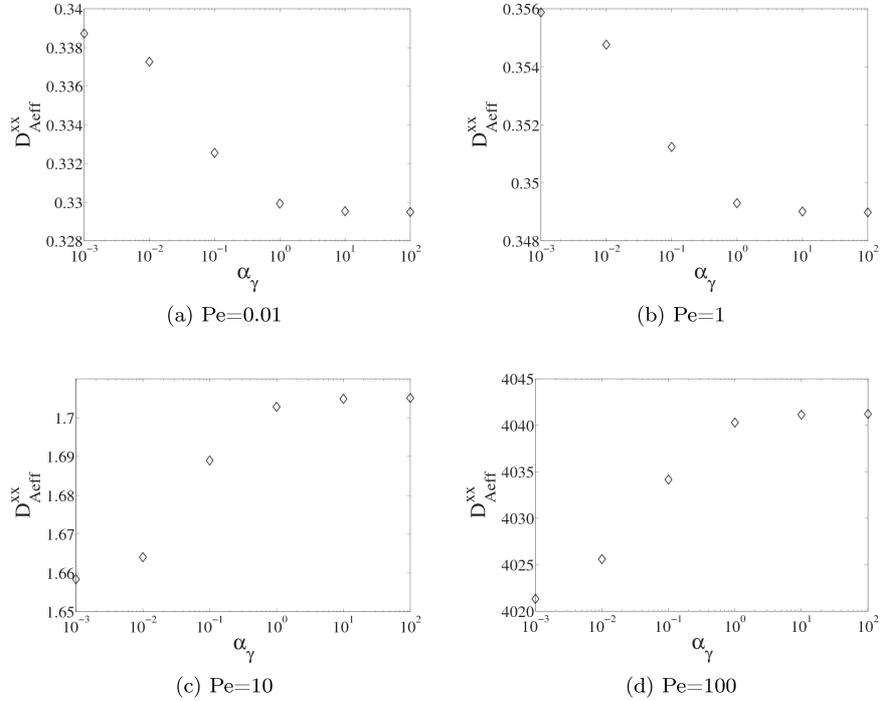


FIG. 5.13: Dispersion effective longitudinale D_{Aeff}^{xx} en fonction de α_γ pour une grande plage de variation de ce paramètre. **a)** $Pe = 10^{-2}$; **b)** $Pe = 1$; **c)** $Pe = 10$; **d)** $Pe = 10^2$. Maillage : 40×40 .

interface quasi-imperméable aux très fortes valeurs de α_γ . Dans cette limite, D_{Aeff}^{xx} est équivalent à la dispersion effective dans un milieu poreux inerte. En effet, des calculs réalisés pour les mêmes conditions hydrodynamiques (Pe identique) dans une cellule de calcul uniquement constituée de fluide et de solide montre que les résultats obtenus pour $\alpha_\gamma = 10^2$ sont proches de ceux fournis pour le cas solide/fluide (au maximum 1% d'écart). En contre partie, quand α_γ est très faible, l'interface est très peu résistante, menant, dans un cas extrême, à la condition d'équilibre. Cette dernière correspondrait à une limite supérieure en conditions diffusives ($Pe \leq 1$) et à une limite inférieure dans le cas où les effets convectifs dominant ($Pe > 1$).

En définitive, le résultat le plus marquant est que sur un intervalle de variation de α_γ énorme (quatre ordres de grandeur), la variation maximale de D_{Aeff}^{xx} observée n'est que de 5% au maximum, quelque soit Pe . On peut en conclure

que α_γ , pour les valeurs étudiées ici, n'a que peu d'influence sur D_{Aeff}^{xx} .

5.3.2 D_{Aeff}^{yy}

Après avoir analysé l'influence de α_γ sur D_{Aeff}^{xx} , nous montrons, sur les Figs. 5.14, le comportement de D_{Aeff}^{yy} en fonction à la fois de Pe et α_γ . Tout d'abord, D_{Aeff}^{yy} présente une allure similaire à D_{Aeff}^{xx} en fonction uniquement de Pe . Ensuite, on note que, comme pour D_{Aeff}^{xx} , l'influence de α_γ sur D_{Aeff}^{yy} est négligeable. En multipliant α_γ par 10^2 , la variation de D_{Aeff}^{yy} est au maximum de 2,2% (pour $\varepsilon_\gamma = 0.85$). Pour $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$ et 0.45, D_{Aeff}^{yy} varie respectivement de moins de 0.5% et d'environ 1%. La même remarque que lors de l'étude de Ki est applicable ici concernant la fraction volumique en cellule $\varepsilon_\gamma = 0.85$, à savoir que $D_{Aeff}^{yy}(\varepsilon_\gamma = 0.85)$ présente une concavité non observable pour les autres valeurs de ε_γ . L'explication réside simplement dans l'intervalle de variation de D_{Aeff}^{yy} beaucoup plus faible à cette valeur de ε_γ (environ $5 \cdot 10^{-3}$ contre environ 0.35 pour $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$ et 0.45).

Le tracé de D_{Aeff}^{yy} en fonction uniquement de α_γ montre un comportement toujours décroissant quelque soit Pe , ce que l'on voit bien sur la Fig. 5.14 c) dans le cas $\varepsilon_\gamma = 0.85$. Pour ce coefficient de dispersion, une condition d'équilibre à l'interface cellule/fluide (α_γ très petit) est alors une limite haute quelque soit Pe , tandis qu'une condition de flux nul à cette même interface (= interface imperméable, α_γ très grand) correspond à la limite inférieure.

5.4 Influence de la morphologie et de la distribution des phases solide (α) et cellulaire (γ)

L'analyse paramétrique réalisée précédemment a été effectuée à l'aide d'une cellule unitaire simpliste. Si on se réfère aux travaux de Hutmacher [2000], les fibres composant le support de culture présentent le plus souvent une section droite circulaire (Fig. 5.15).

Pour simplifier, on peut supposer que la forme la plus canonique que puisse prendre la phase cellulaire est soit un anneau qui tapisse les fibres solides, soit des amas circulaires attachés aux fibres. Dans cette partie, nous nous intéressons

5.4 Influence de la morphologie et de la distribution des phases solide (α) et cellulaire (γ)

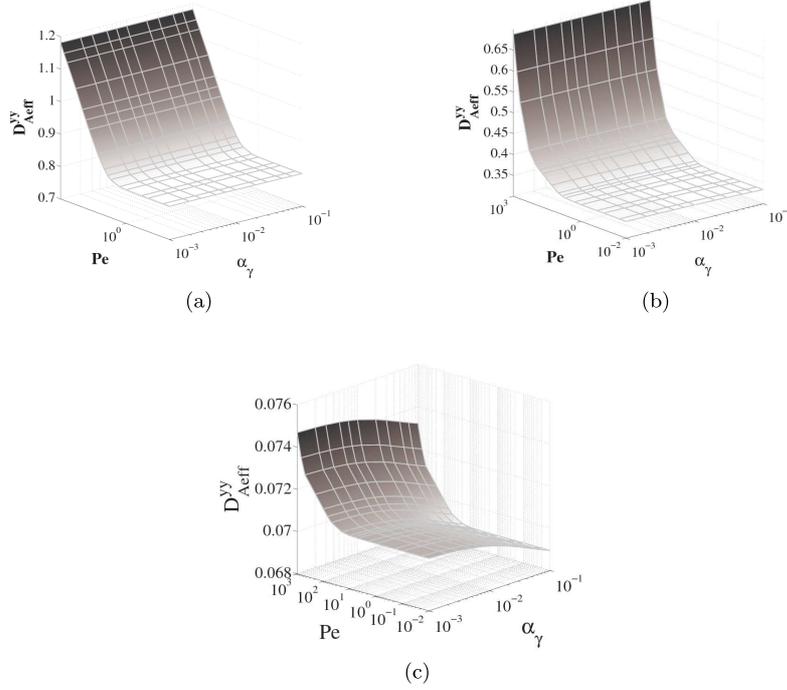


FIG. 5.14: D_{Aeff}^{yy} en fonction à la fois de Pe et de α_γ pour trois valeurs de ε_γ . **a)** $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$, **b)** $\varepsilon_\gamma = 0.45$, **c)** $\varepsilon_\gamma = 0.85$. $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2} \mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$. Maillage : 100×100 .

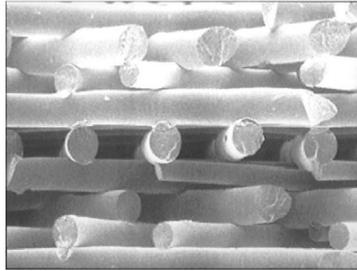


FIG. 5.15: Vue en microscopie électronique de supports. Ici, on peut voir un support structuré. Extrait des travaux de Hutmacher [2000].

non seulement à la morphologie des phases γ et α mais aussi à leur distribution dans la cellule unitaire. Trois morphologies ont été considérées, ainsi que deux types d'arrangement. Tout d'abord, en plus du cas du cylindre de section droite

carrée (Fig. 5.16 a), nous avons considéré les cas d'une fibre solide à section droite circulaire, la phase γ étant disposée en anneau sur la fibre (Fig. 5.16 b) ou en amas (Fig. 5.16 c). Les Figs. 5.17 a et b) schématisent les deux types d'arrangements utilisés dans ce qui suit, à savoir un réseau carré (a) et un réseau carré centré (b). L'influence de l'arrangement n'a été étudié que pour les sections carrée et circulaire.

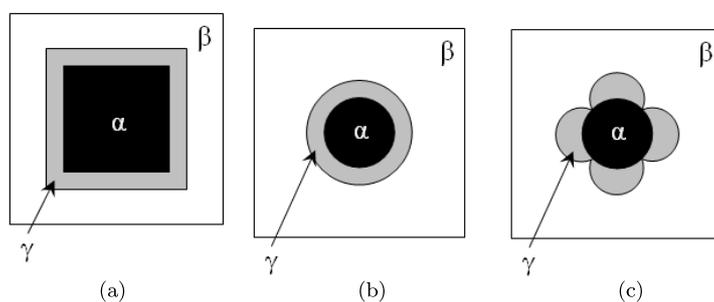


FIG. 5.16: Types de morphologies étudiées dans ce travail. Dans chaque cas, un maillage régulier de 100×100 a été employé. **a)** section carrée, **b)** section circulaire et **c)** section en amas.

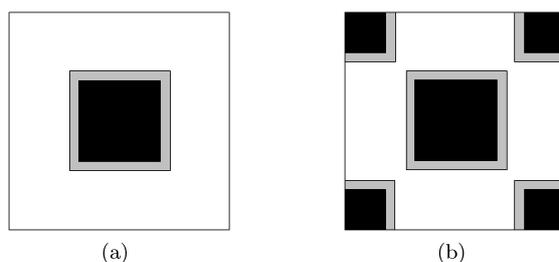


FIG. 5.17: Types d'arrangements 2D étudiés dans cette partie du travail. **a)** Réseau carré. **b)** Réseau carré centré

Pour chaque cas, l'étude a été conduite jusqu'à une valeur de ε_β correspondant à la limite de percolation du système. La fraction volumique de la phase solide (ε_α) est fixée à $5 \cdot 10^{-2}$ et un maillage de 100×100 a été employé. Enfin, les

paramètres introduits dans le problème de fermeture sont listés dans le Tableau 5.8.

\mathbf{D}_A	K_{Aeq}	Ki	Pe	α_γ	κ	ε_α
$10^{-1}\mathbf{I}$	10^{-1}	50	$[10^{-2}; 10^3]$	$5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$	$10^{-2}\mathbf{I}$	$5 \cdot 10^{-2}$

TAB. 5.8: Valeurs des différents paramètres utilisés dans le cadre de l'étude de l'influence de la morphologie et de la distribution des phases α et γ sur le tenseur de dispersion effective en 2D.

Tous les paramètres ayant un intervalle de variation, hormis Pe , sont donc pris au centre de leur intervalle de variation. Dans les deux sections qui suivent, nous discutons des comportements de D_{Aeff}^{xx} et de D_{Aeff}^{yy} en fonction du nombre de Péclet.

5.4.1 Influence de la forme de l'inclusion

Dans un premier temps, nous nous attachons plus particulièrement à la dépendance de \mathbf{D}_{Aeff} avec la morphologie des phases solides α et cellulaires γ au travers de la distribution carrée (Fig. 5.17 a).

Composante longitudinale. Pour les trois morphologies, nous avons conservé autant que possible, une fraction volumique en cellule constante ou la plus proche possible. Compte tenu du maillage structuré utilisé ici, des valeurs exactes ne sont pas toujours accessibles. Ainsi, pour le réseau carré, deux valeurs de ε_γ ont été considérées, à savoir $\simeq 5 \cdot 10^{-2}$ et $\simeq 0.55$ (voir Figs. 5.18).

Les résultats en fonction de Pe obtenus pour la composante longitudinale sont représentés sur les Figs. 5.18.

On peut conclure de la Fig. 5.18 a) que pour une faible fraction volumique en cellule, le profil de l'inclusion n'a que très peu d'effet sur l'allure de D_{Aeff}^{xx} sur tout l'intervalle de Pe étudié. La dispersion est légèrement plus grande à Pe élevé ($Pe > 10$) pour la fibre de section carrée comparativement aux deux autres morphologies. Le rapport des résultats obtenus avec une section carrée et les autres profils indique que $D_{Aeff}^{xx}(\text{carré})$ est jusqu'à 1.5 fois plus grand ($Pe = 10^3$). Cette tendance est confirmée et accentuée quand ε_γ croît

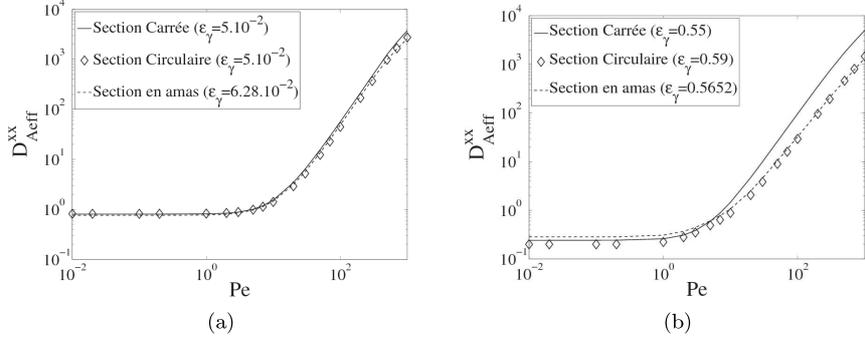


FIG. 5.18: D_{Aeff}^{xx} en fonction de Pe pour les trois sections de la Fig. 5.16. Cas du réseau carré. **a)** $\varepsilon_\gamma \simeq 5 \cdot 10^{-2}$, **b)** $\varepsilon_\gamma \simeq 0.55$. $\mathbf{D}_A = 10^{-1}\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2}\mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$. Maillage : 100×100 .

(Fig. 5.18 b). Le coefficient de dispersion calculé à partir d’une morphologie carrée est jusqu’à 4 fois plus grand que ceux obtenus sur des morphologies circulaire et en amas. Ce comportement vis-à-vis de la morphologie suggère qu’il y a un effet important des coins (dans le cas de la morphologie carrée) dans le champs hydrodynamique, seul caractère géométrique différent. En “régime diffusif” ($Pe \leq 1$), la morphologie en amas induit une dispersion plus élevée, tandis que dans le cas d’une morphologie circulaire, D_{Aeff}^{xx} est le plus faible (écart entre les deux d’environ $8.5 \cdot 10^{-2}$). De plus, les sections circulaires et en amas, pour $\varepsilon_\gamma \simeq 0.55$ et à fort Pe , sont tels que les valeurs de D_{Aeff}^{xx} sont quasi-égaux. Cette tendance peut être imputée aux champs de vitesse qui, pour ces deux types de morphologie et pour cette valeur de ε_γ , sont similaires (Fig. 5.19). Plus ε_γ augmente dans ce dernier cas, plus la forme de l’amas cellulaire se rapproche d’un anneau du fait que la croissance est réalisée en augmentant le rayon de chaque cylindre cellulaire (le centre restant toujours sur l’interface solide/cellule). En supposant une telle croissance, le rayon de courbure augmente permettant alors dans un cas extrême d’obtenir une morphologie proche de la morphologie circulaire.

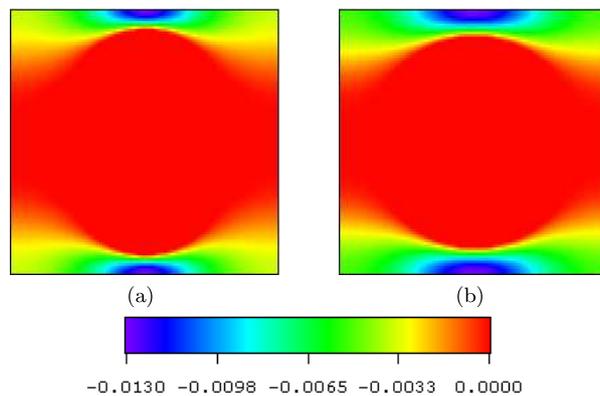


FIG. 5.19: Champ de vitesse V_β^x . **a)** Profil en amas $\varepsilon_\gamma = 0.59$ et **b)** Profil circulaire $\varepsilon_\gamma = 0.5652$. Maillage : 100×100 .

Des champs de vitesses semblables, associés à des champs de b_β^x similaires eux aussi (Fig. 5.20), induisent des champs de $(\tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta)^{xx}$ qui conservent les ressemblances (Fig. 5.21), d'où la quasi-égalité du coefficient de dispersion effectif longitudinal.

Composante transversale. Sur la Fig. 5.22, nous avons reporté les évolutions de D_{Aeff}^{yy} en fonction du nombre de Péclet et pour les deux configurations présentées précédemment, à savoir ($\varepsilon_\gamma \simeq 0.5$ et 0.55).

5.4 Influence de la morphologie et de la distribution des phases solide (α) et cellulaire (γ)

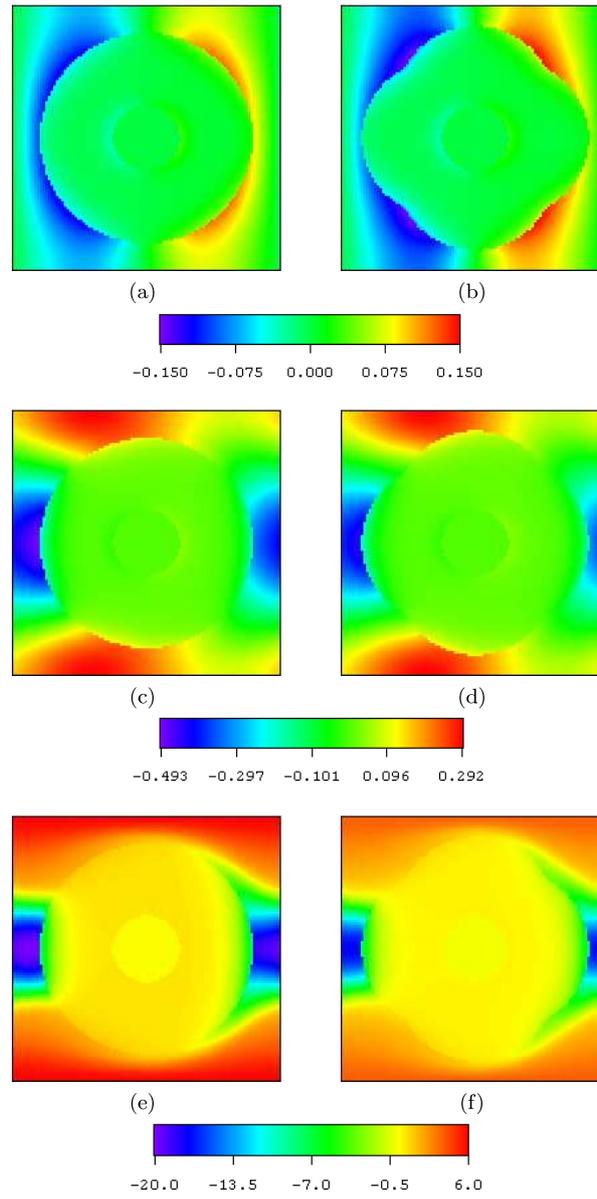


FIG. 5.20: Champ de b^x pour trois valeurs de Pe et $\varepsilon_\gamma = 0.55-0.5652$. **a) - b)** $Pe = 10^{-1}$; **c) - d)** $Pe = 10$; **e) - f)** $Pe = 10^3$. Maillage : 100×100 .

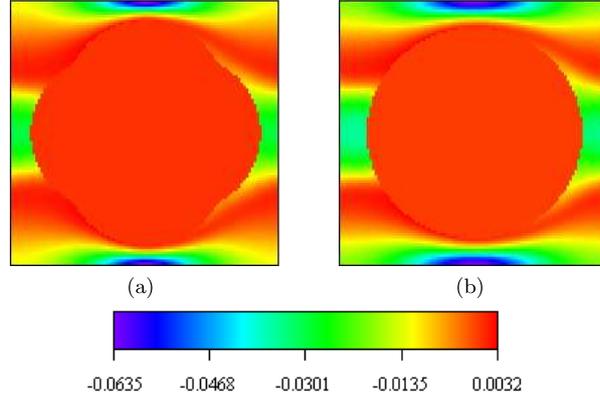


FIG. 5.21: Champs de $(\tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta)^{xx}$ obtenus pour (a) un profil en amas et (b) un profil circulaire avec $\varepsilon_\gamma = 0.5652 - 0.55$ respectivement.

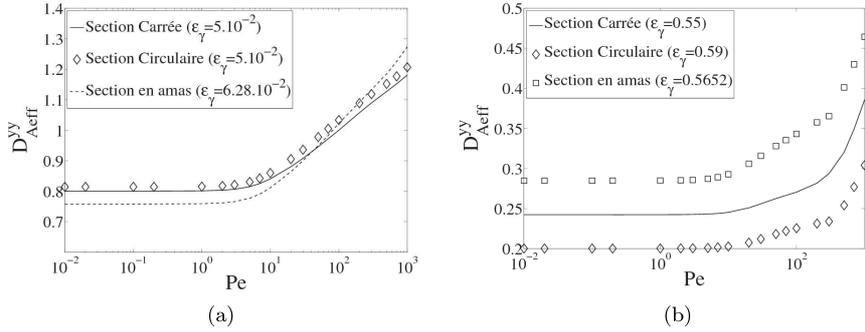


FIG. 5.22: D_{Aeff}^{yy} en fonction de Pe pour les trois morphologies étudiées pour une distribution carrée. **a)** $\varepsilon_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}$, **b)** $\varepsilon_\gamma = 0.55$. $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2} \mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2} \mathbf{I}$. Maillage : 100×100 .

Quand ε_γ est faible ($\varepsilon_\gamma \simeq 5 \cdot 10^{-2}$, Fig. 5.22 a), D_{Aeff}^{yy} présente une évolution similaire à celle de D_{Aeff}^{xx} mais avec une variation beaucoup plus faible. Multiplier Pe par 10^5 induit une multiplication de D_{Aeff}^{xx} par environ $4.7 \cdot 10^3$, alors que dans le même temps D_{Aeff}^{yy} n'est multiplié que par environ 1.5. De plus, les variations de D_{Aeff}^{yy} avec Pe obtenues avec des inclusions circulaire et carrée ont des allures (quasiment) parallèles; D_{Aeff}^{yy} , pour l'inclusion circulaire,

étant toujours légèrement supérieur à D_{Aeff}^{yy} (carré). Le rapport entre ces deux coefficients varie entre 0.967 et 0.983. Bien que l'allure générale de la configuration en amas soit semblable aux deux autres configurations, dès que $Pe > 10$, D_{Aeff}^{yy} (amas) évolue linéairement en $\log(Pe)$ avec une pente plus forte. Ainsi, au-delà de $Pe = 2 \cdot 10^2$, ce type de morphologie conduit à une amélioration de la dispersion transversale. Pour des régimes hydrodynamiques à plus faibles Pe , c'est la morphologie circulaire qui mène aux D_{Aeff}^{yy} les plus élevés.

Dans une configuration où la phase cellulaire représente environ 50% de la cellule de calcul (Fig. 5.22 b), les D_{Aeff}^{yy} déterminés à l'aide des trois types de profils étudiés montrent des comportements similaires mais bien distincts. Par cela, il faut comprendre que les D_{Aeff}^{yy} suivent le même genre de courbe mais ne sont pas confondus. Dans ce cas de figure, un profil en amas permet toujours d'obtenir la dispersion la plus élevée, le coefficient de dispersion transversal déterminé sur une section circulaire étant toujours le plus petit.

Comme remarqué lors de l'étude en dispersion passive (chapitre précédent), quand $Pe > 10$, D_{Aeff}^{yy} montre deux pentes : une entre 10 et 10^2 , l'autre au-delà de cette valeur ($Pe > 3 \cdot 10^2$). Ce changement de régime est d'autant plus marqué que ε_γ est grand.

5.4.2 Influence de l'arrangement

Après avoir discuté du rôle de la morphologie des phases sur les composantes longitudinale et transversale du tenseur de dispersion effective, nous analysons maintenant l'influence de la distribution des "cylindres" (cellule+solide) sur la dispersion macroscopique.

Sur la composante longitudinale du tenseur de dispersion effective.

D'un point de vue général, pour la composante longitudinale du tenseur de dispersion, un arrangement plus complexe (distribution carrée centrée) induit une dispersion moins performante, et ce quelle que soit la morphologie de l'inclusion (Figs. 5.23). En effet, sur les Figs. 5.23 a - c), on observe deux comportements très différents entre le réseau carré et le réseau carré centré avec une morphologie d'inclusion carrée lorsque Pe augmente. Cette différence est d'autant plus marquée que la fraction volumique en cellule est grande. Sans phase cellulaire, D_{Aeff}^{xx} (carré, $\varepsilon_\gamma = 0$) est environ 16 fois plus grand que celui obtenu avec un arrangement carré. Ce facteur multiplicatif passe à plus de 100 quand $\varepsilon_\gamma = 0.4$.

5.4 Influence de la morphologie et de la distribution des phases solide (α) et cellulaire (γ)

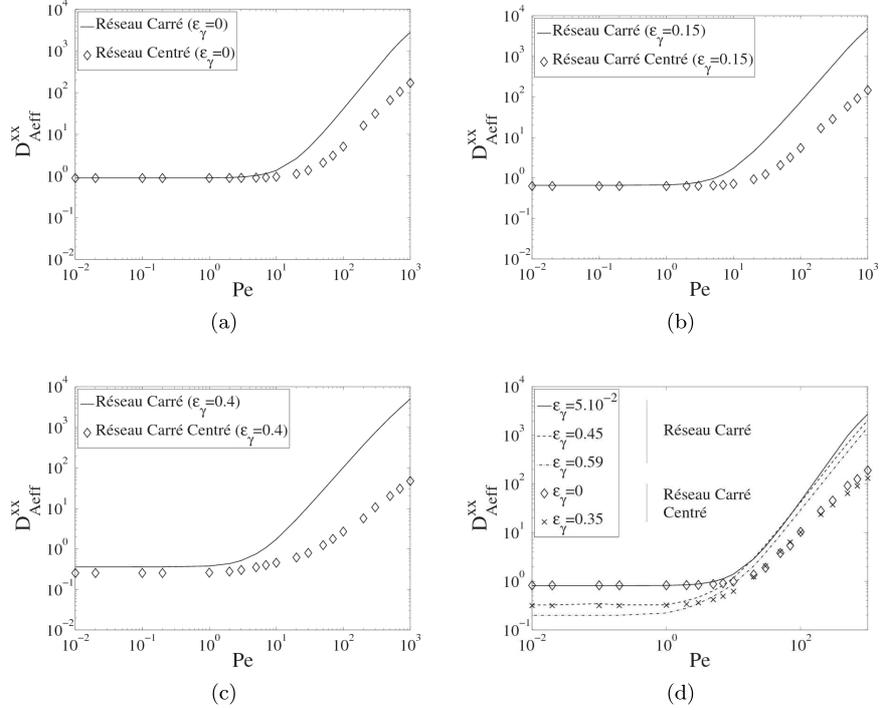


FIG. 5.23: D_{Aeff}^{xx} en fonction de Pe pour les deux types de réseaux étudiés. a) Section Carrée, $\varepsilon_\gamma = 0$, b) Section Carrée, $\varepsilon_\gamma = 0.15$, c) Section Carrée, $\varepsilon_\gamma = 0.40$ et d) Section Circulaire. $\mathbf{D}_A = 10^{-1}\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\kappa = 10^{-2}\mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\alpha_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$. Maillage : 100×100 .

Quand la morphologie de l'inclusion est circulaire, le même type de comportement que dans la cas de l'inclusion carrée est observé, c'est-à-dire qu'un arrangement carré centré induit des dispersions moins performantes qu'un réseau carré.

Sur la composante transversale du tenseur de dispersion effective.

La composante transversale de la dispersion effective, quant à elle, obéit à un comportement inverse de celui de D_{Aeff}^{xx} . En effet, d'après les Figs. 5.24, plus l'arrangement s'oppose à l'écoulement, plus la dispersion transversale est améliorée. De plus, cette amélioration est d'autant plus importante que la fraction volumique en cellules est grande.

5.4 Influence de la morphologie et de la distribution des phases solide (α) et cellulaire (γ)

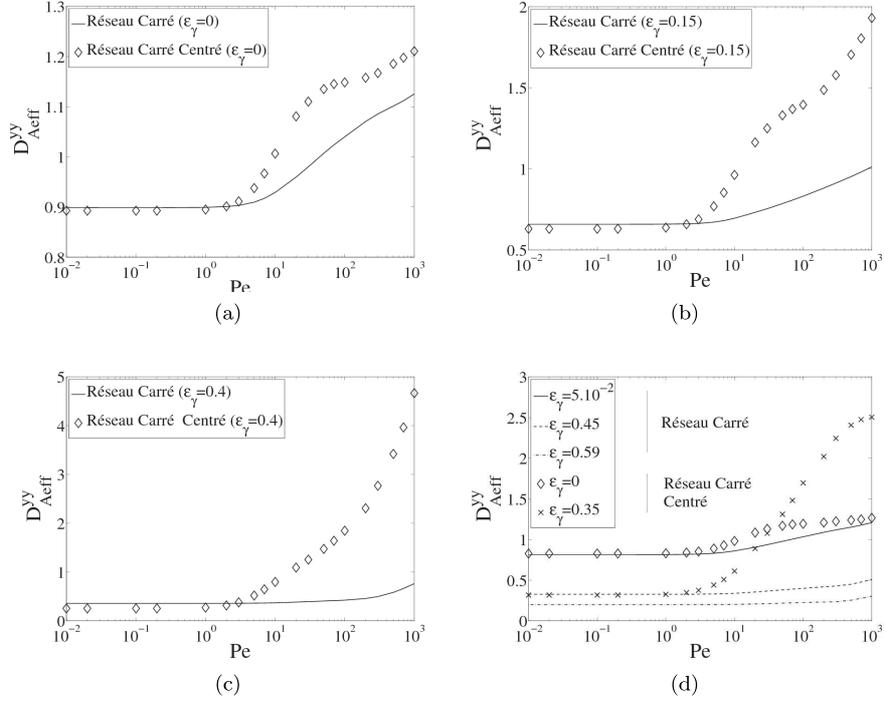


FIG. 5.24: D_{Aeff}^{yy} en fonction de Pe pour les deux types d'arrangement étudiés. **a)** Section Carrée, $\varepsilon_\gamma = 0$, **b)** Section Carrée, $\varepsilon_\gamma = 0.15$, **c)** Section Carrée, $\varepsilon_\gamma = 0.40$ et **d)** Section Circulaire. $\mathbf{D}_A = 10^{-1}\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2}\mathbf{I}$, $Ki = 50$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$. Maillage : 100×100 .

Dans le cas de la morphologie carrée, la dépendance de D_{Aeff}^{yy} avec Pe est modifiée lorsque ε_γ croît. Pour de faibles fractions volumiques en cellule et un réseau carré centré, la dispersion transversale présente deux points d'inflexion qui tendent à disparaître au-fur-et-à-mesure que ε_γ augmente. Une évolution plus classique est alors retrouvée aux fortes fractions volumiques en cellule.

D_{Aeff}^{yy} , pour un profil circulaire, de forts Pe et un réseau carré centré, tend vers une valeur limite, alors que dans le cas d'un réseau carré, D_{Aeff}^{yy} ne semble pas présenter une évolution de ce type (ou tout du moins pour l'intervalle de Pe étudié ici).

Comme indiqué ci-dessus, la dispersion est considérablement améliorée par le réseau carré centré ainsi que par l'augmentation de la fraction volumique en

cellule. En effet, dans le cas où aucune phase cellulaire n'est présente, le fait de passer d'un réseau carré à un réseau carré centré améliore la dispersion d'environ 8%. Cette augmentation est d'autant plus importante que ε_γ est grand. Ainsi, quand la phase cellulaire représente 15% du volume de la cellule unitaire, la dispersion est multipliée par quasiment 2 entre le réseau carré et le réseau carré centré. L'amélioration est encore plus impressionnante quand $\varepsilon_\gamma = 0.4$. A ce stade, la dispersion est multipliée par 5 – 6. Pour la section circulaire les mêmes conclusions s'imposent. Pour $\varepsilon_\gamma \simeq 0.4$, un facteur multiplicatif du même ordre de grandeur que celui de la section carré est observé. Cette dépendance avec la distribution de l'inclusion est à l'inverse de celle présentée par D_{Aeff}^{xx} .

5.5 Quelques résultats en 3D

Le modèle étant général et s'appliquant à des structures 3D, quelques calculs de coefficients de transfert effectifs pour le problème de diffusion avec réaction et le problème complet ont été entrepris. Les valeurs des paramètres utilisés sont indiquées dans le Tableau 5.9.

\mathbf{D}_A	K_{Aeq}	Ki	Pe	α_γ	κ
$10^{-1}\mathbf{I}$	10^{-1}	50	$[10^{-2}, 10^3]$	$5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$	$10^{-2}\mathbf{I}$

TAB. 5.9: Valeurs des différents paramètres utilisés dans le cadre de la résolution en 3D.

Ces quelques résultats sont issus de calculs réalisés avec un maillage de $40 \times 40 \times 40$.

5.5.1 Diffusion - Réaction

Dans le chapitre consacré à la validation, le problème traité par Ochoa et al. [1986] a été considéré pour calculer des coefficients de diffusion effective. Cependant, ce problème ne prend pas en compte le terme réactif qui apparaît dans notre problème de fermeture. C'est pourquoi, nous présentons quelques résultats en 3D du problème de diffusion - réaction. Les résultats obtenus pour quatre valeurs de ε_β (à savoir, 0.271, 0.488, 0.657 et 0.875) sont comparés sur la Fig.

5.25 au cas où $Ki = 0$ qui correspond au problème de fermeture proposé par Ochoa et al. [1986] où n'apparaît pas la contribution du terme réactif.

ε_β	D_{Aeff}
0.271	0.2019
0.488	0.3832
0.657	0.5486
0.875	0.8114

TAB. 5.10: Résultats obtenus dans le cas 3D. Problème complet diffusion - réaction. $Ki = 50$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $\mathbf{D}_A = 10^{-1} \mathbf{I}$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2} \mathbf{I}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2} \mathbf{I}$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$. Maillage : $40 \times 40 \times 40$.

Comme attendu, la prise en compte du terme réactif dans la fermeture n'altère pas le caractère sphérique de la diffusion effective. De plus, et ce avec les paramètres introduits ici, la prise en compte de la réaction dans le problème de fermeture contribue à diminuer la diffusion effective. Cette tendance est d'autant plus marquée que la fraction volumique en phase β (ε_β) est faible comme atteste la Fig. 5.25.

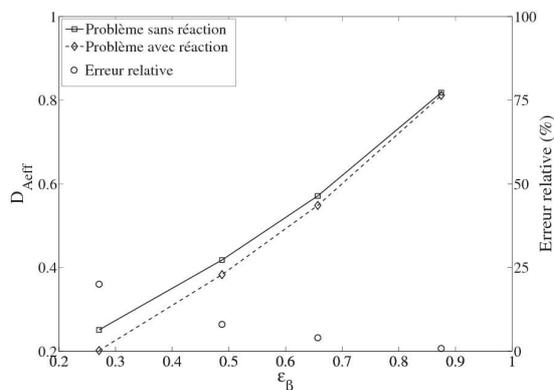


FIG. 5.25: Diffusion effective obtenue avec et sans le terme réactif dans la fermeture pour une structure 3D. Maillage $40 \times 40 \times 40$.

5.5.2 Résolution du problème complet en 3D

Pour cette série de calcul, la somme des fractions volumiques en cellule et en solide est égale à 0.52, ε_α étant égale à environ $5 \cdot 10^{-2}$. La cellule unitaire de calcul est ici composée d'inclusions ($\alpha + \gamma$) cubiques disposées sur une réseau cubique. Les résultats sont rassemblés sur les Fig. 5.26 et 5.27 où les composantes principales du tenseur de dispersion effective sont représentées en fonction du nombre de Péclet.

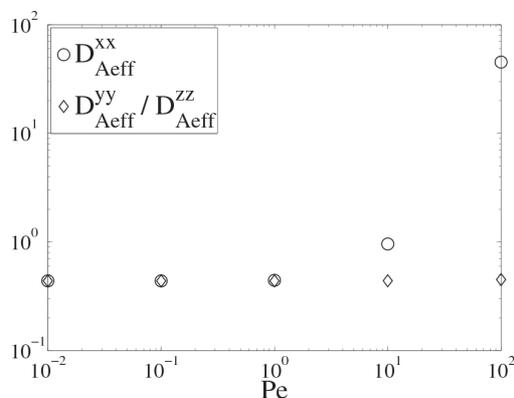


FIG. 5.26: Evolution de D_{Aeff}^{xx} , D_{Aeff}^{yy} et D_{Aeff}^{zz} en fonction du nombre de Péclet. $\mathbf{D}_A = 10^{-1}\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $Ki = 50$, $Pe = [10^{-2}; 10^2]$, $\alpha_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$, $\kappa = 10^{-2}\mathbf{I}$, $\varepsilon_\beta = 0.488$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$. Maillage : $40 \times 40 \times 40$.

Le caractère tridimensionnel du milieu ne change rien au comportement de \mathbf{D}_{Aeff} . Par cela nous sous-entendons que, dans des conditions où les effets purement hydrodynamiques prédominent, D_{Aeff}^{xx} est toujours largement plus grand que D_{Aeff}^{yy} et D_{Aeff}^{zz} qui, de surcroît, restent quasiment constants (augmentation d'environ 3% pour un facteur multiplicatif de Pe de 10^4) sur toute la gamme de Pe étudiée ici.

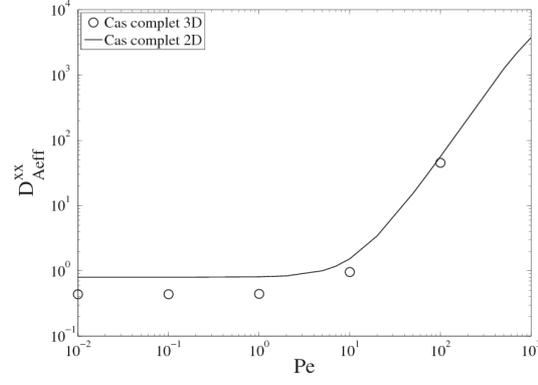


FIG. 5.27: D_{Aeff}^{xx} en fonction de Pe obtenus pour une configuration 2D (ligne) et une configuration 3D (cercle). $\mathbf{D}_A = 10^{-1}\mathbf{I}$, $K_{Aeq} = 10^{-1}$, $Ki = 50$, $Pe = [10^{-2}; 10^2]$, $\boldsymbol{\alpha}_\gamma = 5 \cdot 10^{-2}\mathbf{I}$, $\boldsymbol{\kappa} = 10^{-2}\mathbf{I}$, $\varepsilon_\beta = 0.488$, $\varepsilon_\alpha = 5 \cdot 10^{-2}$. Maillage 3D : $40 \times 40 \times 40$, Maillage 2D : 100×100 .

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

A travers le monde, plusieurs millions de personnes requièrent le traitement de cartilage endommagé. Pour réparer ces lésions, plusieurs techniques médicales ou biomédicales ont été mises au point, dont l'ingénierie tissulaire. Cette dernière consiste en l'ensemencement d'un support (fibreux ou spongieux) par des cellules de cartilage (ou chondrocytes). Cet ensemble (support + cellules) est ensuite placé dans un bioréacteur agité alimenté en continu par un fluide contenant les nutriments et les produits du métabolisme. Afin d'améliorer la qualité de l'implant, des études expérimentales ont tout d'abord démontré que les conditions hydrodynamiques étaient de grande importance. Freed et al. [1994] ont posé la question des transferts de matière. En effet, ces auteurs ont indiqué que, lors de cultures statiques, la vitesse de croissance des chondrocytes était ralentie soit par l'épaisseur, soit par la densité cellulaire de l'implant. Ainsi, avec une confirmation par des essais en réacteur parfaitement agité, l'importance du transfert de matière a été démontré. Bien que de nombreux modèles aient été développés, très peu prennent en compte la convection. Seuls deux modèles intègrent ce phénomène, ceux de Wood et al. [2002] et de Lasseux et al. [2004]. Ce travail est basé sur le modèle de Lasseux et al. [2004] qui, bien que le terme réactif soit du premier ordre, a l'avantage de ne pas considérer l'équilibre à l'interface cellule/fluide, contrairement à ce qui est proposé dans Wood et al. [2002].

Le second chapitre de ce travail a été dédié à la discrétisation et à la méthodologie employée pour l'élaboration d'un outil numérique. Tout d'abord, nous avons présenté le passage d'un modèle dit "à l'échelle microscopique" (échelle de description correspondant à l'échelle du pore) à un modèle dit "macroscopique"

à l'aide de la prise de moyenne volumique. Ensuite, la mise sous forme adimensionnelle ainsi qu'une reformulation du modèle et des problèmes de fermeture ont été exposées, aboutissant à une forme plus simple à discrétiser. Enfin, nous avons montré la méthodologie suivie pour la discrétisation à l'aide de la méthode des volumes finis.

Dans un troisième chapitre, nous avons validé l'outil numérique. Pour cela, des problèmes particuliers, tels que les problèmes de diffusion pure, de diffusion - réaction et de dispersion passive ont été étudiés. Pour l'ensemble des cas tests, les calculs 2D ont montré un bon voire un excellent accord avec les résultats disponibles dans la littérature. Les résultats 3D confirment le bon déroulement des calculs dans toutes les directions de l'espace.

Dans le chapitre 4, une étude plus approfondie de la dispersion passive 2D a été réalisée sur un treillis de cylindres de section carrée. Plus précisément, nous avons analysé l'influence de l'expansion de la phase solide sur le tenseur de dispersion effective. Dans un premier temps, nous avons étudié le comportement des dispersions longitudinale $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et transversale $D'_{Aeff}{}^{yy}$ quand l'inclusion solide garde un rapport d'aspect unité. A partir des résultats, nous avons montré que suivant la valeur de Pe , différents comportements sont rencontrés. Pour des valeurs faibles à moyennes de Pe , les deux coefficients de dispersion ($D'_{Aeff}{}^{xx}$ et $D'_{Aeff}{}^{yy}$) présentent des comportements strictement croissants. Pour les grandes valeurs de Pe , $D'_{Aeff}{}^{xx}$ présente un comportement strictement décroissant tandis que $D'_{Aeff}{}^{yy}$ suit une allure avec un seul puis deux concavités (avec un col vers $\varepsilon_\beta \simeq 0.75$).

Au vu de la structure du problème (diffusion - convection), le tenseur de dispersion effective ($\mathbf{D}'_{Aeff} = \frac{\mathbf{D}_{Aeff}}{\varepsilon_\beta}$) a été scindé en deux parties : une partie purement diffusive (\mathbf{D}_{Diff}) et une purement hydrodynamique (\mathbf{D}_{Hydro}). Nous avons déterminé, grâce aux résultats fournis par les calculs en diffusion pure (et donc de \mathbf{D}_{Diff}), une tortuosité que nous avons relié à la porosité par une relation linéaire. Le comportement de \mathbf{D}_{Hydro} a ensuite été analysé. Tout d'abord, nous avons mis en évidence que les comportements exhibés aux fortes valeurs de Pe en fonction de ε_β sont induites par les effets purement hydrodynamiques. D_{Hydro}^{xx} , tracé en fonction de Pe , a montré une dépendance (quasi-) linéaire avec $\log(Pe)$. Les coefficients dans une fonction de corrélation en loi de puissance ont alors été déterminés. En ce qui concerne D_{Hydro}^{yy} , cette approximation ne s'est avérée possible que jusqu'à $Pe \simeq 10$, la "linéarité" n'étant plus assurée au-delà. Nous avons ainsi montré que le coefficient n variait de façon convexe entre 1.86 et 1.98 pour D_{Hydro}^{xx} ; alors que pour D_{Hydro}^{yy} , n variait entre 1.978 et 2. Ces résultats

ne sont valables que dans le cas d'un arrangement carré de cylindres de section carrée. Dans le cas longitudinal, b a un comportement strictement décroissant avec ε_β , tandis que pour la composante transversale, b suit une allure concave.

Dans la littérature [Bear, 1972], le tenseur de dispersion effective est aussi formulé à l'aide de dispersivités. Ainsi, après identification, les expressions des dispersivités longitudinale (d_L) et transversale (d_T) montrant une dépendance avec la vitesse ont été déterminées. Dans notre cas d'étude, le champ de vitesse étant dirigé selon l'axe Ox , les comportements de d_L et d_T obtenus sont similaires à ceux de D_{Hydro}^{xx} et D_{Hydro}^{yy} à un facteur Pe^{-1} près. De ce fait, les dispersivités ne peuvent être considérées comme des constantes. En effet, quand Pe est multiplié par 10^4 , d_L et d_T sont multipliés par un facteur oscillant entre 10^3 et 10^4 pour une fraction volumique fluide constante.

Enfin, et pour clore ce quatrième chapitre, nous avons analysé la dépendance de \mathbf{D}'_{Aeff} avec la structure micro-géométrique, i.e. la morphologie, de la phase solide (rapport d'aspect différent de 1 dans le sens ou perpendiculairement à l'écoulement). Nous avons montré que dans ce cas, la microstructure avait une influence sur la dispersion effective. Pour une même valeur de ε_γ , trois valeurs de $D'_{Aeff}{}^{xx}$ et de $D'_{Aeff}{}^{yy}$ sont déterminées, une valeur pour chaque configuration de la phase solide. La dispersion longitudinale présente aussi une dépendance avec le nombre de Péclet. Si les conditions hydrodynamiques sont favorables aux effets diffusifs ($Pe \leq 1$), une fibre solide avec un élancement dans le sens de l'écoulement sera préférée dans l'optique d'accroître la dispersion. En revanche, dans des conditions favorables aux effets convectifs ($Pe > 1$), cette même fibre devra être placée perpendiculairement à l'écoulement. Bien évidemment, à grand rapport d'élancement, le comportement en dispersion de Taylor-Aris est asymptotiquement atteint. Dans le même but d'améliorer la dispersion transversale, une inclusion solide plus large que longue sera alors préférée quelque soit les conditions hydrodynamiques.

Enfin, dans le dernier chapitre de ce document, nous avons réalisé une analyse de sensibilité de \mathbf{D}_{Aeff} aux différents paramètres présents dans les problèmes de fermeture. Plus particulièrement, la sensibilité vis-à-vis de Ki , Pe , des fractions volumiques et de la morphologie et de la distribution de l'inclusion a été étudiée. De cette étude, il en ressort que Ki et α_γ n'ont qu'une influence très limitée sur la dispersion dans les conditions des calculs réalisés ici. Quand Ki est multiplié par 10^3 , D_{Aeff}^{xx} ne varie que d'environ 1 – 2% selon les conditions hydrodynamiques et avec les paramètres utilisés ici. De même, quand α_γ varie sur quatre ordres de grandeur, la variation maximale n'est que de 5% environ.

En ce qui concerne D_{Aeff}^{yy} , des variations du même ordre de grandeur ont été obtenues. Pour ce qui est de l'influence des fractions volumiques, nous avons démontré que, quand $Pe = 10$, D_{Aeff}^{xx} suit une allure concave. Cependant, en représentant $\frac{D_{Aeff}^{xx}}{\varepsilon_\beta + K_{Aeq}\varepsilon_\gamma}$, la tendance obtenue dans le cas de la dispersion passive est retrouvée, à savoir une allure décroissante quand $\varepsilon_\gamma + \varepsilon_\alpha$ diminue. Enfin, le rôle joué d'une part par la morphologie (trois types : carré, circulaire et en amas ont été testés) et d'autre part par la distribution de l'inclusion (solide + cellule) (réseaux carré et carré centré) a été analysé. Nous avons montré que dans le cas d'un arrangement carré, D_{Aeff}^{xx} était supérieur dans le cas d'un profil carré tandis que l'influence sur D_{Aeff}^{yy} est plus mitigée. Si ε_γ est faible, c'est un profil circulaire qui induira une dispersion transversale la plus importante sur quasiment toute la gamme de Pe étudiée ici. Par contre, pour des valeurs moyennes, un profil en amas serait préférable, ce dernier fournissant toujours une valeur de D_{Aeff}^{yy} la plus élevée. Enfin, en ce qui concerne la distribution de l'inclusion, nous avons démontré que quelque soit le profil (circulaire ou carré), une distribution sur un réseau carré permettrait d'améliorer D_{Aeff}^{xx} tandis que la dispersion transversale sera optimale pour un arrangement en réseau carré centré.

Perspectives

Afin de décrire le processus de croissance cellulaire *in vitro* de la manière la plus complète possible, l'outil développé lors de ce travail peut s'intégrer dans un algorithme (Fig. 6.1) permettant la simulation complète de la croissance du néo-cartilage en tenant compte des effets microscopiques (échelle du pore). Dans un premier temps, une structure microscopique solide complexe et représentant un VER de la structure réelle doit être définie. Pour cela, deux possibilités s'offrent à nous : soit on génère numériquement une structure 3D périodique et aléatoire, soit on extrait une image binarisée d'un matelas fibreux réel (tomographie, microscopie électronique et analyse d'image). Une fois la structure solide obtenue, un ensemencement aléatoire et contraint doit être envisagé afin de se replacer dans un contexte plus "réaliste" de la culture *in vitro*. La contrainte est alors que la phase cellulaire doit obligatoirement adhérer à la fibre solide. Cette étape est représentée par "Microstructure de départ" sur la Fig. 6.1.

Ensuite, sur la base de la configuration de la microstructure, les champs de

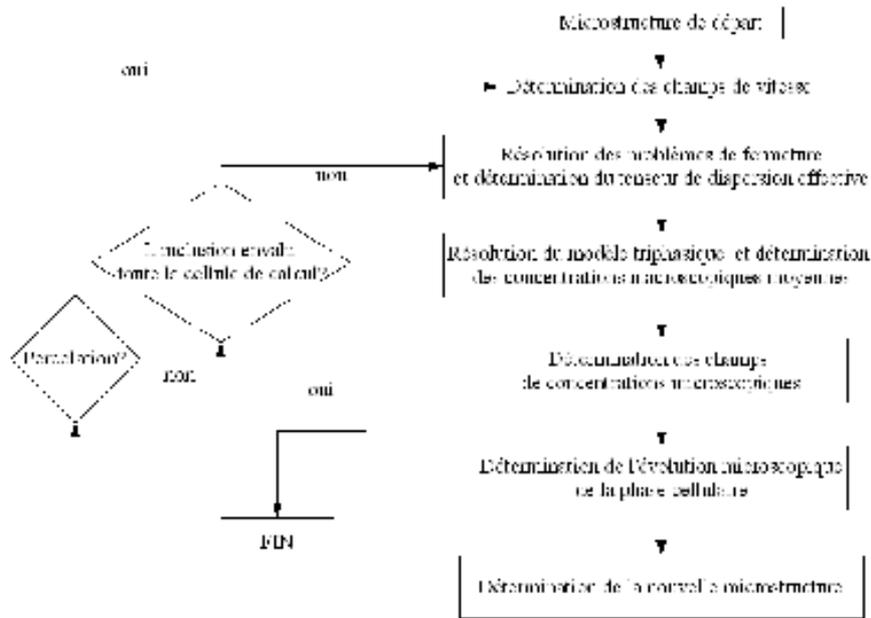


FIG. 6.1: Algorithme d'un ensemble de programmes décrivant tout le processus de croissance cellulaire.

vitesse peuvent être déterminés. Dans le travail présenté ici, nous nous sommes basés sur les équations de Stokes. Compte tenu que la détermination des champs de vitesse est découplée de la résolution des problèmes de fermeture et de la détermination du tenseur de dispersion effective (\mathbf{D}_{Aeff}), le modèle de Navier-Stokes (qui fait intervenir des effets inertiels), peut aussi être envisagé. Dès lors, l'outil numérique exposé dans ce document peut être employé afin de résoudre les problèmes de fermeture (nous fournissant les champs de \mathbf{b}_β et de \mathbf{b}_γ) et de calculer les coefficients de dispersion effective. On peut aussi envisager d'améliorer le modèle et les problèmes de fermeture en employant non plus une cinétique d'ordre 1 mais une cinétique de type Michaelis-Menten, la réaction impliquée étant une réaction enzymatique. L'influence des produits du métabolisme n'étant pas pris en compte dans le présent travail, différentes interactions (nutriment/produit du métabolisme) peuvent être testées (comme le phénomène d'inhibition) et confrontées à des données expérimentales. Une autre amélioration est la prise en compte de la consommation de la fibre solide par les cellules,

ce qui implique une condition aux limites “réactive” avec la phase solide. Les cellules ne migrant pas dans la fibre, une condition de réaction de surface peut alors être envisagée à l’interface cellule/solide.

Selon la Fig. 6.1, nous arrivons maintenant à la résolution du modèle triphasique et à la détermination des concentrations macroscopiques moyennes. Ce modèle doit être résolu sur la structure macroscopique de l’implant. De ce fait, des conditions aux limites (correspondant à chaque face du support) doivent être imposées. Deux types de conditions sont envisageables : soit on impose une condition de flux (condition de Neumann), soit on impose une concentration “de surface” (condition de Dirichlet).

Dans le but de faire évoluer la microstructure de la cellule de calcul (ou VER), les champs de concentrations microscopiques doivent être déterminés. A ce stade, seules les concentrations macroscopiques sont connues. Lors de la procédure de prise de moyenne, plusieurs relations ont été utilisées, ou imposées, pour relier les concentrations microscopiques ($C_{A\gamma}$ et $C_{A\beta}$) à la concentration macroscopique moyenne ($\{C_A\}$). En suivant un démarche inverse, nous avons abouti aux relations suivantes :

$$C_{A\gamma} = K_{Aeq} (\{C_A\} + \mathbf{b}_\gamma \cdot \nabla \{C_A\}) \text{ et } C_{A\beta} = \{C_A\} + \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla \{C_A\}$$

qui relie directement les concentrations aux deux échelles considérées ici.

Si on reprend le schéma 6.1, nous devons maintenant faire évoluer la phase cellulaire (la phase solide étant, on le rappelle, considérée comme inerte). Galban and Locke [1999a] ont effectué une étude sur différentes cinétiques de croissance qu’ils ont comparé avec des données expérimentales. Plus exactement, ils ont effectué un changement d’échelle sur trois cinétiques de croissance (Contois modifié, Moser et une réaction hétérogène d’ordre n) et comparé les résultats obtenus avec des données expérimentales de Freed et al. [1994]. Ils ont montré qu’une cinétique de Contois modifiée (par l’ajout d’un terme de décès cellulaire, Eq. (6.1) dans son écriture microscopique) représentait bien l’évolution de la densité cellulaire macroscopique au cours du temps.

$$\frac{d\rho_\gamma}{dt} = \left[\frac{k_g C_{A\gamma}}{K_C \rho + C_{A\gamma}} - k_d \right] \rho_\gamma \quad (6.1)$$

où k_g est la constante de croissance [s^{-1}], k_d la constante de décès [s^{-1}], K_C la constante de saturation de Contois modifié, ρ la masse volumique totale en

cellule, ρ_γ la masse volumique en cellule de la phase γ . La résolution d'une telle équation permet d'obtenir la masse de la phase cellulaire qui a été produite durant l'intervalle de temps dt en chaque point du système microscopique. Cependant, aucune indication n'est disponible quant à la direction de cette croissance. En première approche, on peut imaginer une évolution uniforme bien que cette expansion ne soit pas physique. Ensuite, une condition aux limites faisant intervenir explicitement l'évolution de l'interface cellule-fluide doit être intégrée (ou imposée) dans le modèle microscopique. Wood and Whitaker [1999, 2000], par exemple, ont imposé des conditions aux limites à l'interface cellule/fluide de la forme :

$$\begin{cases} c_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} = c_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} \\ c_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} = k (c_\gamma - K_{Aeq} c_\beta) \end{cases} \quad \text{sur } A_{\beta\gamma}$$

où l'évolution de l'interface intervient par le biais du terme $\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma}$.

La microgéométrie étant modifiée, on vérifie que l'écoulement est encore possible ("Percolation?"). Deux situations peuvent alors intervenir :

- soit il y a encore percolation. Dans ce cas, on détermine les nouveaux champs de vitesse associés à la nouvelle microstructure et on reprend les calculs
- soit la phase cellulaire obstrue l'écoulement. Dans ce cas, on vérifie s'il existe encore de la phase fluide ($\varepsilon_\beta \neq 0$?). Tant que $\varepsilon_\beta \neq 0$, on continue les calculs.

Des comparaisons avec des expériences arrêtées à différents temps de culture pourront être envisagées. Ainsi, des informations sur la vitesse de croissance, la morphologie.. pourront être recueillies, permettant d'affiner la modélisation. Dans ce cas encore, des images pourront être réalisées et analysées.

Enfin, d'un point de vue mécanique, on peut s'intéresser aux phénomènes d'adhésion/détachement cellulaires. Le premier intervient principalement au moment de l'ensemencement, tandis que le second peut se produire à tout instant aux endroits soumis à de fortes contraintes induite par l'écoulement par exemple.

Bibliographie

- P.M. Adler. *Porous media : Geometry and Transports*. Butterworth-Heinemann, Boston, 1992.
- C.A. Aggelopoulos and C.D. Tsakiroglou. The longitudinal dispersion coefficient of soils as related to the variability of local permeability. *Water Air Soil Pollution*, 185(1-4) :223–237, 2007.
- A. Ahmadi, A. Aigueperse, and M. Quintard. Calculation of the effective properties describing active dispersion in porous media : From simple to complex unit cells. *Advances in Water Resources*, 24(3-4) :423–438, 2001.
- H.P. Amaral Souto and C. Moyne. Dispersion in two-dimensional periodic porous media. Part II. Dispersion tensor. *Physics of Fluids*, 9(8) :2253–2263, 1997.
- R. Aris. On the dispersion of a solute flowing through a tube. *Proceedings of Royal Society Serie A*, 235 :69–77, 1956. cité par Fried et Combarous, 1971.
- R. Aris. *Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts*. Clarendon Press, Oxford, 1975. cité par Shen et Chen, 2007.
- R. Aris and N.R. Amundson. Some remarks on longitudinal mixing and diffusion in packed beds. *A.I.Ch.E Journal*, 3 :280–282, 1957. cité par Edwards et al., 1991.
- J. Bahuaud, E. Taton, F. Tovagliari, M. Allizeard, N. Kerdiles, F. Albisson, and R. Bouvet. Stratégie thérapeutique concernant les lésions du cartilage associées aux ruptures du ligament croisé antérieur : à propos de 30 observations. *e-mémoires de l'Académie Nationale de Chirurgie*, 1(4) :15–25, 2002.

- V. Balakotaiah and H.C. Chang. Dispersion of chemical solutes in chromatographs and reactors. *Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 351 (1695) :39–75, 1995. cité par Olsson et Grathwohl, 2007.
- E. Baumeister, U. Klose, K. Albert, E. Bayer, and G. Guiochon. Determination of the apparent transverse and axial dispersion coefficients in a chromatographic column by pulsed field gradient nuclear magnetic resonance. *Journal of Chromatography*, 694(2) :321–331, 1995. cité par Olsson et Grathwohl, 2007.
- J. Bear. *Hydrodynamic Dispersion*. Academic Press, New York, 1969.
- J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover Editions, New York, USA, 1972.
- J. Bear, C.F. Tsang, and G. de Marsily. *Flow and Contaminant Transport in Fractured Rock*. Academic Press, New York, 1993.
- J.J. Bishop, A.S. Popel, M. Intaglietta, and P.C. Johnson. Effects of erythrocyte aggregation and venous network geometry on red blood cell axial migration. *American Journal of Physiology. Heart and Circulatory Physiology*, 283(5) : H1985–H1996, 2002. cité par Olsson et Grathwohl, 2007.
- R.J. Blackwell. Laboratory studies of microscopic dispersion phenomena. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 2 :1–8, 1962. cité par Olsson et Grathwohl, 2007.
- B.P. Boudreau. Tortuosity variation in a low density binary particulate bed. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 60(16) :3139–3142, 1996.
- C. Béchaud. *Modélisation Numérique de l'Adsorption et de la Dispersion d'un Gaz Binaire en Milieux Poreux*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, France, 1998.
- R. Cancedda, B. Dozin, P. Giannoni, and R. Quarto. Tissue engineering and cell therapy of cartilage and bone. *Matrix Biology*, 22 :81–91, 2003.
- R.G. Carbonell and S. Whitaker. Dispersion in pulsed systems - II : Theoretical developments for passive dispersion in porous media. *Chemical Engineering Science*, 38(11) :1795–1802, 1983.
- P.C. Carman. Fluid flow through granular beds. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 15 : 150–158, 1937. cité par Diedericks et Du Plessis, 1995.

- P.C. Carman. *Flow of Gases Through Porous Media*. Butterworth, London, 1956. cité par Diedericks et Du Plessis, 1995.
- R. Chella, D. Lasseux, and M. Quintrad. Multiphase, multicomponent fluid flow in homogeneous and heterogeneous porous media. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 53(3) :335-346, 1998.
- C.A. Chung, C.W. Yang, and C.W. Chen. Analysis of cell growth and diffusion in a scaffold for cartilage tissue engineering. *Biotechnology and Bioengineering*, 94(6) :1138-1146, 2006.
- T.I. Croll, S. Gentz, K. Mueller, M. Davidson, A.J. O'Connor, G.W. Stevens, and J.J. Cooper-White. Modelling oxygen diffusion and cell growth in a porous, vascularising scaffold for soft tissue engineering applications. *Chemical Engineering Science*, 60(17) :4924-4934, 2005.
- G. De Josselin de Jong and H. van Duijn. Transverse dispersion from an originally sharp fresh-salt interface caused by shear flow. *Journal of Hydrology*, 84(1-2) : 55-79, 1986. cité par Olsson et Grathwohl, 2007.
- R. Dias, J.A. Teixeira, M. Mota, and A. Yelshin. Tortuosity variation in a low density binary particulate bed. *Separation and Purification Technology*, 51 (2) :180-184, 2006.
- S. Didierjean, H.P. Amaral Souto, R. Delannay, and C. Moyne. Dispersion in periodic porous media. Experience versus theory for two-dimensionnal systems. *Chemical Engineering Science*, 52(12) :1861-1874, 1997.
- G.P.J. Diedericks and J.P. Du Plessis. On tortuosity and arosity tensors for porous media. *Transport in Porous Media*, 20(3) :265-279, 1995.
- K.D. Dorfman and H. Brenner. Comment on : Taylor dispersion of a solute in a microfluidic channel. *Journal of Applied Physics*, 90(12) :6553-6554, 2001.
- F.A.L. Dullien. *Porous Media, Fluid Transport and Pore Structure*. Academic Press, New York, 1979.
- D.A. Edwards, M. Shapiro, H. Brenner, and M. Shapira. Dispersion of inert solutes in spatially periodic, two-dimensional model porous media. *Transport in Porous Media*, 6 :337-358, 1991.
- D.A. Edwards, M. Shapiro, and Brenner. Dispersion and reaction in two-dimensional model porous media. *Physics of Fluids A*, 5 :837-848, 1993.

- A.B. Eidsath. *Flow and Dispersion in Spatially Periodic Porous Media : A Finite Element Study*. PhD thesis, Department of Chemical Engineering, University of California, Davis, California, USA, 1981. cited by Whitaker, 1999.
- C.B. Elias, R.B. Desai, M.S. Patole, J.B. Joshi, and R.A. Mashelkar. Turbulent shear stress - Effects on mammalian cell culture and measurement using laser doppler anemometer. *Chemical Engineering Science*, 50(15) :2431–2440, 1995.
- N. Epstein. On tortuosity and the tortuosity factor in flow and diffusion through porous media. *Chemical Engineering Science*, 44(3) :777–779, 1989. cité par Chhabra et al., 2001.
- C.W. Fetter. *Contaminant Hydrogeology*. MacMillan Publishing Company, New York, USA, 1993. cité par Olsson et Grathwohl, 2007.
- L. Freed, G. Vunjak-Novakovic, J.C. Marquis, J. Emmanuel, and R. Langer. Kinetics of chondrocyte growth in cell-polymer implants. *Biotechnology and Bioengineering*, 43(7) :605–614, 1994.
- J.J. Fried and M.A. Combarrous. Dispersion in porous media. *Advances in Hydroscience*, 7 :168–282, 1971.
- C.J. Galban and B.R. Locke. Analysis of cell growth in a polymer scaffold using a moving boundary approach. *Biotechnology and Bioengineering*, 56(4) :422–432, 1997.
- C.J. Galban and B.R. Locke. Analysis of cell growth kinetics and substrate diffusion in a polymer scaffold. *Biotechnology and Bioengineering*, 65(2) : 121–132, 1999a.
- C.J. Galban and B.R. Locke. Effects of spatial variation of cells and nutrient and product concentrations coupled with product inhibition on cell growth in a polymer scaffold. *Biotechnology and Bioengineering*, 64(6) :633–643, 1999b.
- L. Galois, A.-M. Freyria, D. Herbage, and D. Mainard. Ingénierie tissulaire du cartilage : Etat des lieux et perspectives. *Pathologie Biologie*, 53 :590–598, 2005.
- R.A. Greenkorn. *Flow Phenomena in Porous Media*. Marcel Dekker, New York, USA, 1983.

- J.A. Guin, D.P. Kessler, and R.A. Grennkorn. The dispersion tensor in anisotropic porous media. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 11(4) :477–482, 1972.
- P. Hardouin, K. Anselme, B. Flautre, F. Bianchi, G. Bascoulergue, and B. Bouxin. Ingénierie tissulaire et maladies du squelette. *Rev. Rhum.*, 67 : 498–504, 2000.
- C.A. Heath and S.R. Magari. Mini-review : Mechanical factors affecting cartilage regeneration in vitro. *Biotechnology and Bioengineering*, 50 :430–437, 1996.
- D.A. Hoagland and R.K. Prud’homme. Taylor-Aris dispersion arising from flow in sinusoidal tube. *A.I.Ch.E Journal*, 31(2) :236–244, 1985.
- D.W. Hutmacher. Scaffolds in tissue engineering bone and cartilage. *Biomaterials*, 21(24) :2529–2543, 2000.
- N. Iversen and B.B. Jorgensen. Diffusion coefficients of sulfate and methane in marine sediments : Influence of porosity. *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 57(3) :571–578, 1993.
- D.L. Koch and J.F. Brady. Dispersion in fixed beds. *Journal of Fluid Mechanics*, 154 :399–427, 1985. cité par Edwards et al., 1991.
- R. Langer. Tissue engineering. *Molecular Therapy*, 1(1) :12–15, 2000.
- R. Langer and J.P. Vacanti. Tissue engineering. *Science*, 260 :920–926, 1993.
- P. Lascaux and R. Théodor. *Analyse numérique matricielle appliquée à l’art de l’ingénieur*, volume 2. MASSON, Paris, 1987.
- D. Lasseux, A. Ahmadi, X. Cleis, and J. Garnier. A macroscopic model for species transport during in vitro tissue growth obtained by the volume averaging method. *Chemical Engineering Science*, 59(10) :1949–1964, 2004.
- C.R. Leeson, T.S. Leeson, and A.A. Paparo. *Textbook of Histology, Fifth Edition*. W.B. Saunders Company, 1985.
- M. Maerki, B. Wehrli, C. Dinkel, and B. Muller. The influence of tortuosity on molecular diffusion in freshwater sediments of high porosity. *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 68(7) :1519–1528, 2004.

- N. Mahmoudifar and P.M. Doran. Tissue engineering of human cartilage and osteochondral composites using recirculation bioreactors. *Biomaterials*, 26 : 7012–7024, 2005.
- H.J. Mankin. Mitosis in articular cartilage of immature rabbits. *Clinical Orthopaedics and Related Research*, 34 :170, 1964.
- C.M. Marle. Ecoulements monophasiques en milieu poreux. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 22 :1471–1509, 1967.
- I. Martin, B. Obradovic, S. Treppo, A.J. Grodzinsky, R. Langer, L.E. Freed, and G. Vunjak-Novakovic. Modulation of the mechanical properties of tissue engineered cartilage. *Biorheology*, 37(1) :141–147, 2000.
- A. Neculae, B. Goyeau, M. Quintard, and D. Gobin. Passive dispersion in dendritic structures. *Materials Science and Engineering A*, 323(1-2) :367–376, 2002.
- D. Nesic, R. Whiteside, M. Brittberg, D. Wendt, I. Martin, and P. Mainil-Varlet. Cartilage tissue engineering for degenerative joint disease. *Advanced in Drug Delivery Reviews*, 58 :300–322, 2006.
- D.R. Noble, J.G. Geogiadis, and R.O. BUCKIUS. Effect of disorder on dispersion in steady inertial flows in large randomly packed beds. 1998. cited by Whitaker, 1999.
- B. Obradovic, J.H. Meldon, L.E. Freed, and G. Vunjak-Novakovic. Glycosaminoglycan deposition in engineered cartilage : Experiments and mathematical model. *A.I.Ch.E. Journal*, 46(9) :1860–1871, 2000.
- B. Obradovic, I. Martin, R.F. Padera, S. Treppo, L.E. Freed, and G. Vunjak-Novakovic. Integration of engineered cartilage. *Journal of Orthopaedic Research*, 19(6) :1089–1097, 2001.
- J.A. Ochoa. *Diffusion and Reaction in Heterogeneous Media*. PhD thesis, Department of Chemical Engineering, University of California, California, USA, 1988.
- J.A. Ochoa, P. Stroeve, and S. Whitaker. Diffusion and reaction in cellular media. *Chemical Engineering Science*, 41(12) :2999–3013, 1986.

- A. Olsson and P. Grathwohl. Transverse dispersion of non-reactive tracers in porous media : A new nonlinear relationship to predict dispersion coefficients. *Journal of Contaminant Hydrology*, 92(3-4) :149–161, 2007.
- P. Pathi, T. Ma, and B.R. Locke. Role of nutrient supply on cell growth in bioreactor design for tissue engineering of hematopoietic cells. *Biotechnology and Bioengineering*, 89(7) :743–758, 2005.
- E.E. Petersen. Diffusion in a pore of varying cross section. *A.I.Ch.E Journal*, 4(3) :343–345, 1958. cité par Shen et Chen, 2007.
- M. Quintard. Diffusion in isotropic and anisotropic porous systems : Three dimensionnal calculations. *Transport in Porous Media*, 11(2) :187–199, 1993.
- M. Quintard and S. Whitaker. Ecoulement monophasique en milieu poreux : Effet des hétérogénéités locales. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, 6(5) :691–726, 1987.
- M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media I : The cellular average and the use of weighting functions. *Transport in Porous Media*, 14(2) :163–177, 1994a.
- M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media II : Generalized volume averaging. *Transport in Porous Media*, 14(2) :178–206, 1994b.
- M. Quintard and S. Whitaker. Convection, dispersion and interfacial transport of contaminants : Homogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 17(4) :221–239, 1994c.
- M. Quintard, M. Kaviani, and S. Whitaker. Two-medium treatment of heat transfer in porous media : Numerical results for effective properties. *Advances in Water Resources*, 20(2-3) :77–94, 1997.
- M. Quintard, L. Bletzacker, D. Chenu, and S. Whitaker. Nonlinear, multicomponent, mass transport in porous media. *Chemical Engineering Science*, 61(8) :2643–2669, 2006.
- M.N. Rahaman and J.J. Mao. Stem cell-based composite tissue constructs for regenerative medicine. *Biotechnology and Bioengineering*, 91(3) :261–284, 2005.

- M.V. Risbud and M. Sittinger. Tissue engineering : Advances in in vitro cartilage generation. *Trends in Biotechnology*, 20(8) :351–356, 2002.
- A.G. Rothwell and G. Bentley. Chondrocyte multiplication in osteoarthritic articular cartilage. *Journal of Bone and Joint Surgery*, 55 B(3) :588–594, 1973.
- D. Ryan. *The Theoretical Determination of Effective Diffusivities for Reactive, Spatially Periodic Porous Media*. PhD thesis, Department of Chemical Engineering, University of California, Davis, California, USA, 1984.
- P.G. Saffman. A theory on the dispersion in a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 6(3) :321–349, 1959. cité par Edwards et al., 1991.
- P.G. Saffman. Dispersion due to molecular diffusion and macroscopic mixing in flow through a network of capillaries. *Journal of Fluid Mechanics*, 7(2) : 194–208, 1960. cité par Edwards et al., 1991.
- M. Sahraoui and M. Kaviany. Slip and no-slip temperature boundary conditions at the interface of porous plain media : Convection. *International Journal of Heat and Mass transfer*, 37(6) :1029–1044, 1993. cité par Quintard et Whitaker, 1994.
- C.D. Shackelford. Laboratory diffusion testing for waste disposal - A review. *Journal of Contaminant Hydrology*, 7(3) :177–217, 1991. cité par Shen et Chen, 2007.
- L. Shen and Z. Chen. Critical review of the impact of tortuosity on diffusion. *Chemical Engineering Science*, 62(14) :3748–3755, 2007.
- R. Simon and F.J. Kelsey. The use of capillary tube networks in reservoir performance studies : I. Equal-viscosity miscible displacements. *Society of Petroleum Engineering Journal*, 11, 1971a. cité par Edwards et al., 1991.
- R. Simon and F.J. Kelsey. The use of capillary tube networks in reservoir performance studies : II. Effects of heterogeneity and mobility on miscible displacement efficiency. *Society of Petroleum Engineering Journal*, 12, 1971b. cité par Edwards et al., 1991.
- J.C. Slattery. Flow of viscoelastic fluids through granulated material. *Fuel in Science and Practice*, 13 :1066–1071, 1967.

- D.W. Slichter. Field measurements of the rate of movement of underground water. *U.S. Geological Survey Water Supply Paper*, 140, 1905.
- G.I. Taylor. Dispersion of soluble matter in solvent flowing through a tube. *Proceedings of Royal Society Serie A*, 225 :473–477, 1953. cité par Fried et Combarous, 1971.
- J.S. Temenoff and A.G. Mikos. Review : Tissue engineering for regeneration of articular cartilage. *Biomaterials*, 21 :431–440, 2000.
- J. van Brakel and P.M. Heertjes. Analysis of diffusion in macroporous media in terms of a porosity, a tortuosity and a constrictivity factor. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 17(9) :1093–1103, 1974. cité par Shen et Chen, 2007.
- H. Van der Vorst. BCGSTAB : a fast and smoothly converging variant of BCG for the solution of non-symmetric linear systems. *SIAM. J. Sci. Stat. Comput.*, 18 :631–644, 1992.
- G. Versier and C. Bures. Traitement chirurgical des lésions du cartilage en 2002 : Qui ? Quand ? Comment ? *Rhumatologie*, 54(2) :36–42, 2002.
- G. Vunjak-Novakovic, L.E. Freed, R.J. Biron, and R. Langer. Effects of mixing on the composition and morphology of tissue-engineered cartilage. *A.I.Ch.E Journal*, 42(3) :7012–7024, 1996.
- I. Wahyudi, A. Montillet, and A.O.A. Khalifa. Darcy and post-Darcy flows within different sands. *Journal of Hydraulic Research*, 40(4) :519–525, 2002. cité par Ham et al., 2007.
- H.L. Weissberg. Effective diffusion coefficients in porous media. *Journal of Applied Physics*, 34 :2636–2639, 1963.
- S. Whitaker. Flow in porous media I : a theoretical derivation of the Darcy's law. *Transport in Porous Media*, 1(1) :3–25, 1986.
- S. Whitaker. *The method of Volume Averaging*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1999.
- B.D. Wood and S. Whitaker. Diffusion and reaction in biofilms. *Chemical Engineering Science*, 53(3) :397–425, 1998.

- B.D. Wood and S. Whitaker. Cellular growth in biofilms. *Biotechnology and Bioengineering*, 64(6) :656–670, 1999.
- B.D. Wood and S. Whitaker. Multi-species diffusion and reaction in biofilms and cellular media. *Chemical Engineering Science*, 55 :3397–3418, 2000.
- B.D. Wood, M. Quintard, and S. Whitaker. Methods for predicting diffusion coefficients in biofilms and cellular media systems. *Methods in Enzymology*, 337 :319–338, 2001.
- B.D. Wood, M. Quintard, F. Golfier, and S. Whitaker. Biofilms in porous media : Development of macroscopic transport equations via volume averaging with closure. *Computational Methods in Water Resources*, 2 :1195–1202, 2002.
- B.D. Wood, M. Quintard, and S. Whitaker. Calculation of effective diffusivities for biofilms and tissues. *Biotechnology and Bioengineering*, 77(5) :495–516, 2002b.
- R.A. Wooding. Instability of a viscous liquid of variable density in a vertical Hele-Shaw cell. *Journal of Fluid Mechanics*, 7(4) :501–515, 1960.
- X. Yu, E.A. Botchwey, E.M. Levine, S.R. Pollack, and C.T. Laurencin. Bioreactor-based bone tissue engineering : The influence of dynamic flow on osteoblast phenotypic expression and matrix mineralization. *Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America*, 101(31) : 11203–11208, 2004.
- Y. Zhu and P.J. Fox. Simulation of pore-scale dispersion in periodic porous media using smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 182(2) :622–645, 2002.

Nomenclature

a	Partie diffusive de la fonction de corrélation $D_{Aeff}^{xx} = a + bPe^n$.
a_A	Dimension caractéristique de la section droite du capillaire dans les travaux d'Aris [1956], m .
a_T	Rayon du capillaire dans les travaux de Taylor [1953], m .
$A_{\eta\pi}$	Aire interfaciale entre les phases η et π , m^2 .
$A_{\eta\pi}^*$	Aire interfaciale adimensionnée entre les phases η et π .
\mathbf{A}	Matrice de résolution des problèmes de fermeture, $\mathbf{A}\cdot\mathbf{x} = \mathbf{b}$.
b	Coefficient multiplicateur de la fonction de corrélation $D_{Aeff}^{xx} = a + bPe^n$.
\mathbf{b}_η	Variable de fermeture dans la phase η .
\mathbf{b}	Vecteur solution de la résolution des problèmes de fermeture, $\mathbf{A}\cdot\mathbf{x} = \mathbf{b}$.
B_η	Scalaire adimensionné résultant de la décomposition de \mathbf{b}_η dans ce travail, $\mathbf{b}_\eta = \mathbf{d}_\eta + B_\eta \frac{\langle \mathbf{d}_\beta \rangle^\beta}{\langle B_\beta \rangle^\beta}$.
c_{ref}	Concentration de référence arbitraire, $mol.m^{-3}$.
$C_{X\eta}$	Concentration adimensionnée de l'espèce X dans la phase η , $C_{X\eta} = \frac{c_{X\eta}}{c_{ref}}$.
$c_{X\eta}$	Concentration de l'espèce X dans la phase η , $mol.m^{-3}$.
$c_{X\eta}^e$	Concentration de l'espèce X dans la phase η aux entrées et sorties du volume de prise de moyenne, $mol.m^{-3}$.
$c_{X\eta}^0$	Concentration de l'espèce X dans la phase η à $t = 0$, $mol.m^{-3}$.
$\{c_X\}$	Concentration macroscopique moyenne pondérée à l'équilibre de l'espèce X, $mol.m^{-3}$.

$\{C_X\}$	Concentration macroscopique moyenne pondérée à l'équilibre sans dimension de l'espèce X, $\{C_X\} = \frac{\langle c_X \rangle}{c_{ref}}$.
$\hat{c}_{X\eta}$	Déviations spatiales macroscopiques de l'espèce X dans la phase η , $\hat{c}_{X\eta} = \langle c_{X\eta} \rangle^\eta + M \{c_X\}$, $mol.m^{-3}$.
$\tilde{c}_{X\eta}$	Déviations spatiales microscopiques de l'espèce X dans la phase η , $\tilde{c}_{X\eta} = c_{X\eta} - \langle c_{X\eta} \rangle^\eta$, $mol.m^{-3}$.
d'_L, d'_T	Dispersivités longitudinale et transversale respectivement, m .
d_L, d_T	Dispersivités longitudinale et transversale adimensionnées respectivement.
\mathbf{d}_η	Vecteur adimensionné de la décomposition de \mathbf{b}_η dans la phase η , $\mathbf{b}_\eta = \mathbf{d}_\eta + B_\eta \frac{\langle \mathbf{d}_\beta \rangle^\beta}{\langle B_\beta \rangle^\beta}$.
$\mathbf{D}_{X\eta}$	Tenseur de diffusion microscopique de l'espèce X dans la phase η , $m^2.s^{-1}$.
$D_{X\eta}$	Coefficient de diffusion microscopique de l'espèce X dans la phase η , $m^2.s^{-1}$.
\mathbf{D}_X	Tenseur de diffusion microscopique adimensionnée de l'espèce X, $\mathbf{D}_X = \frac{\mathbf{D}_{X\kappa}}{D_{X\kappa}}$.
\mathbf{D}_β^*	Tenseur de dispersion dans la phase β à l'échelle de Darcy, $m^2.s^{-1}$.
D	Diffusivité moléculaire de l'espèce diffusante dans la phase β , $m^2.s^{-1}$.
\mathbf{D}_{Aeff}	Tenseur de dispersion effective macroscopique de l'espèce A.
\mathbf{D}_{Aeff}^*	Tenseur de dispersion effective macroscopique adimensionné de l'espèce A, $\mathbf{D}_{Aeff}^* = \frac{\mathbf{D}_{Aeff}}{D_\beta}$.
\mathbf{D}'_{Aeff}	Tenseur de dispersion effective adimensionnée utilisée lors de l'étude sur la dispersion passive, $\mathbf{D}'_{Aeff} = \frac{\mathbf{D}_{Aeff}}{\varepsilon_\beta}$.
\mathbf{D}_{Diff}	Tenseur de diffusion effective (ou macroscopique) adimensionné issu de la décomposition de \mathbf{D}_{Aeff} , $\mathbf{D}_{Diff} = \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Diff}$.
D_{eff}	Coefficient de dispersion effective de la théorie de Taylor et Taylor-Aris, $m^2.s^{-1}$.
D_{eff}	Coefficient de dispersion effective adimensionné de la théorie de Taylor et Taylor-Aris, $m^2.s^{-1}$.
\mathbf{D}_{Hydro}	Tenseur de dispersion hydrodynamique issu de la décomposition de \mathbf{D}_{Aeff} , $\mathbf{D}_{Hydro} = \langle \nabla \mathbf{b}_\beta \rangle_{Hydro} - Pe \langle \tilde{\mathbf{V}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle$.
D_{TA}	Coefficient de diffusion moléculaire utilisé par Taylor et Aris, $m^2.s^{-1}$.

g	Vecteur gravité, $m.s^{-2}$.
I	Tenseur identité.
k_X	Constante de vitesse de réaction du premier ordre de l'espèce X, s^{-1} .
k_{Aeff}	Constante de vitesse effective macroscopique de l'espèce A, $k_{Aeff} = \varepsilon_\gamma K_{Aeq} k_A$.
k_{Aeff}^*	Constante de vitesse effective macroscopique adimensionnée de l'espèce A, $k_{Aeff} = \varepsilon_\gamma K_{Aeq} Ki$.
k_{max}	Constante de vitesse maximale de réaction issue de l'équation de Michaelis-Menten, $mol.m^3.s^{-1}$.
K_{Xeq}	Coefficient de partage entre les phases γ et β à l'équilibre pour l'espèce X.
Ki	Nombre cinétique, rapport des effets réactifs dans la phase cellulaire sur les effets diffusifs dans la phase fluide, $Ki = \frac{k_A l^2}{D_{A\beta}}$.
K	Tenseur de perméabilité à l'échelle macroscopique, $m^2.s^{-1}$.
K$_\eta$	Tenseur de perméabilité dans la région η , $m^2.s^{-1}$.
K_{MM}	Constante de demi-saturation de Michaelis-Menten, $mol.m^{-3}$.
l	Longueur caractéristique de la cellule unitaire (ou cellule de calcul), m .
l_η	Echelle de longueur caractéristique associée à la phase η , m .
L	Echelle de longueur caractéristique macroscopique, m .
n	Exposant de la fonction de corrélation $D_{Aeff}^{xx} = a + bPe^n$.
n$_{\eta\pi}$	Vecteur normal unitaire dirigé de la phase η vers la phase π , $\mathbf{n}_{\eta\pi} = -\mathbf{n}_{\pi\eta}$.
p_β	Pression dans la phase β , Pa .
Pe	Nombre de Péclet associé à la cellule unitaire de calcul, $Pe = \frac{\ (\mathbf{v}_\beta)^\beta\ l}{D_{A\beta}}$.
r_A	Cinétique de réaction, $mol.m^{-3}.s^{-1}$.
r_0	Rayon du volume de prise de moyenne, m .
S	Nombre adimensionnel dépendant de la section droite du capillaire dans la théorie de Taylor-Aris.
t	Temps, s .
t^*	Temps adimensionné, $t^* = \frac{t D_{A\beta}}{l^2}$.
t'	Temps caractéristique de transport à l'échelle microscopique, s .

\mathbf{T}	Tenseur de tortuosité.
$\hat{\mathbf{u}}_\eta$	Variable sans dimension utilisée pour simplifier les problèmes de fermeture, $\hat{\mathbf{u}}_\eta = \frac{1}{V} \int_{A_{\eta\kappa}^*} \mathbf{n}_{\eta\kappa} \cdot (\nabla \mathbf{b}_\eta + \mathbf{I}) dA^*$.
U_{Am}	Vitesse moyenne de l'écoulement dans la théorie de Taylor-Aris, $m.s^{-1}$.
U_{T0}	Vitesse maximale sur l'axe du capillaire dans l'équation proposée par Taylor [1953], $m.s^{-1}$.
\mathbf{v}_β	Champs de vitesse microscopique dans la phase β , $m.s^{-1}$.
$\tilde{\mathbf{v}}_\beta$	Déviations spatiales microscopiques des champs de vitesse dans la phase β , $m.s^{-1}$.
\mathbf{v}_β^*	Champs de vitesse microscopique adimensionnée
V	Volume moyen, m^3 .
V^*	Volume moyen adimensionné, $V^* = \frac{V}{l^3}$.
V_η	Volume de la phase η , m^3 .
V_η^*	Volume adimensionné de la phase η , $V_\eta^* = \frac{V_\eta}{l^3}$.
\mathbf{V}_β	Champs de vitesse microscopique adimensionnés dans la phase β , $\mathbf{V}_\beta = \frac{\mathbf{v}_\beta}{\ (\mathbf{v}_\beta)^\beta\ }$.
$\tilde{\mathbf{V}}_\beta$	Déviations spatiales microscopiques adimensionnées des champs de vitesse dans la phase β , $\tilde{\mathbf{V}}_\beta = \frac{\tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\ (\mathbf{v}_\beta)^\beta\ }$.
\mathbf{x}	Vecteur de résolution des problèmes de fermeture, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Lettres grecques

α	Phase solide.
α_X	Coefficient de transfert de matière interfacial de l'espèce X, $m.s^{-1}$.
α_γ	Inverse du nombre de Sherwood, rapport adimensionné des effets de diffusion dans la phase cellulaire rapporté aux effets du transfert de matière interfacial, $\alpha_\gamma = \frac{D_{A\gamma}}{\alpha_A L}$. Ce ratio peut être vu comme l'inverse du nombre de Sherwood.
β	Phase fluide.
γ	Phase cellulaire.
δ	Paramètre infinitésimal introduit lors du traitement des interfaces pour indiquer dans quelle phase le point considéré à l'interface se situe.

- $\Delta X, \Delta Y, \Delta Z$ Pas d'espace adimensionné selon les axes Ox, Oy, Oz respectivement.
- κ Rapport adimensionné des effets de diffusion, $\kappa = K_{Aeq} \mathbf{D}_A$.
- ε_η Fraction volumique de la phase ou de la région η , $\varepsilon_\eta = \frac{V_\eta}{V}$.
- ψ_η Quantité arbitraire associée à la phase η .
- $\lambda, \lambda_x, \lambda_x(i, j, k)$ Corrections apportées par l'antidiffusion lors de la discrétisation des termes convectifs. Correction identique pour toutes les mailles et pour toutes les directions, Correction par direction identique pour toutes les mailles et Correction par maille et par direction respectivement.
- ρ_β Masse volumique de la phase β , $kg.m^{-3}$.
- μ_β Viscosité dynamique de la phase β , $Pa.s$.
- ϕ^2 Critère de Thiele, $\phi^2 = \frac{k_A l^2}{D_A}$.
- σ Phase cellulaire dans les travaux d'?? et ?.
- τ Coefficient de tortuosité.

Opérateurs mathématiques

- ∇ Opérateur gradient.
- ∇^* Opérateur gradient adimensionné, $\nabla^* = l\nabla$.
- $\|\mathbf{X}\|$ Norme de \mathbf{X} .
- ∂ Opérateur de dérivation partielle.
- $\langle X \rangle$ Moyenne superficielle de la quantité X , $\langle X \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_\kappa} X dV$.
- $\langle X \rangle^\eta$ Moyenne intrinsèque de la quantité X dans la phase η , $\langle X \rangle^\eta = \frac{1}{V_\eta} \int_{V_\kappa} X dV$.

Résumé

Ce travail s'inscrit dans le contexte général de l'ingénierie tissulaire du cartilage (culture *in vitro*) bien que la physique employée puisse s'appliquer à d'autres domaines. Après un rappel du modèle macroscopique de dispersion réactive obtenu en employant la prise de moyenne volumique, les problèmes de fermeture sont résolus numériquement afin de déterminer la macro-dispersion. Les solutions numériques sont tout d'abord validées dans des cas sans advection et/ou sans réaction. L'étude de la dispersion passive (sans réaction) sur des micro-géométries simples illustre la dépendance des coefficients de dispersion macroscopiques vis-à-vis de la géométrie (porosité, croissance unidirectionnelle ou homothétique). Enfin, la simulation du cas complet (incluant la réaction) nous a permis de montrer l'influence de plusieurs paramètres: nombre cinétique, nombre de Sherwood, structure géométrique microscopique.

Mots clés: *Ingénierie tissulaire, cartilage, dispersion, réaction, triphasique, prise de moyenne volumique*

Two- and three-phase dispersion in the framework of the cartilage tissue engineering

Abstract

This work deals with the framework of cartilage tissue engineering (*in vitro* culture) despite physics can be applied to other research fields. After reminding the macroscopic model of reactive dispersion developed using the volume averaging method, we solve numerically closure problems in order to determine the macro-dispersion. Numerical solutions are first validated comparing them to literature data without advection and/or reaction. Before analyzing the complete problem of three-phase reactive dispersion, we study the influence of the micro-geometry (porosity, one-direction or homothetic growth) on macroscopic dispersion coefficients. To close this study, three-phase reactive dispersion allows us to discuss the influence of several parameters like kinetic number, Sherwood number or the microscopic structure.

Keywords: *Tissue engineering, cartilage, dispersion, reaction, three-phase, volume averaging*