

15/95  
الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التربية الوطنية

MINISTERE DE L'EDUCATION NATIONALE

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT

*Génie Chimique*

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات  
BIBLIOTHEQUE — المكتبة  
Ecole Nationale Polytechnique

## PROJET DE FIN D'ETUDES

### SUJET

*Simulation du phénomène de  
Transfert de matière lors de l'extraction  
solide-liquide  
Application aux concrètes végétales.*

Proposé par :

M<sup>me</sup> R. DERRICHE

Etudié par :

SAYAH Houssem Eddine  
ALLOUACHE Ali

Dirigé par :

M<sup>me</sup> R. DERRICHE

PROMOTION

*Juin 1995*

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التربية الوطنية

MINISTERE DE L'EDUCATION NATIONALE

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT *Génie Chimique*

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات  
BIBLIOTHEQUE — المكتبة  
Ecole Nationale Polytechnique

**PROJET DE FIN D'ETUDES**

**SUJET**

*Simulation du phénomène de  
Transfert de matière lors de l'extraction  
solide-liquide  
Application aux concrètes végétales.*

Proposé par :

**M<sup>me</sup> R. DERRICHE**

Etudié par :

**SAYAH Houssein Eddine  
ALLOUACHE Ali**

Dirigé par :

**M<sup>me</sup> R. DERRICHE**

PROMOTION

**Juin 1995**

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

>> رب — أوزعني أن أشكر نعمتك التي أنعمت  
علي و علي والدي وأن أعمل صالحا ترضاه  
<< وأدخلني برحمتك في عبادك الصالحين

## *Dédicaces*

*A ma mère*

*A mon père*

*A la mémoire de mon grand père Ali*

*A mes frères : Rabah , Abdelrachid , Farid , Yacine,*

*Sofiane , Farouk*

*A mes soeurs : Fatima , Dalila , Zohra*

*A mon oncle Achour*

*A Razika , Fadila , Fetouma*

*et à toute ma famille*

*A mon binôme Houssemeddine*

*A Karim , Mohamed , Merzak*

*et à tous ceux qui me sont chers*

*Je dédie ce modeste travail*

*Ali*

## *Dédicaces*

*A ma mère ,*

*A la mémoire de mon père Nouredine*

*A la mémoire de mon grand père Abdelhamid*

*A mon frère Walid*

*A mes soeurs Hassiba , Amina , Amel , Ratiba et  
Hakima*

*A ma grand mère , et mes oncles*

*A ma tante Soumia et ses adorables enfants*

*A la mémoire de mon ami Mohamed Seghir*

*A mes amis Abderrahmane , Chakib , Saïd et surtout  
Toufik.*

*A mon binôme Ali*

*A toi Houda.*

*Housseem*



Qu'il nous soit permis de remercier des personnes qui , sans leur aide notre travail aurait été moins riche .

Tout d'abord , nous remercions

M<sup>me</sup> R. DERRICHE , chargé de cours à l'ENP pour son sérieux , son encouragement , son suivi , et surtout pour sa sincérité et son esprit scientifique et son soutien tout au long de notre travail.

M<sup>r</sup> E.H. BENYOUCEF , chef de département de génie chimique nous sommes bien honoré que vous acceptez la présidence du jury de soutenance de ce travail.

M<sup>r</sup> BOUGHOUFALA , maître assistant en analyse numérique au (D.P.S.F) , nous fait l'honneur de participer au jury de soutenance , qu'il soit assuré de l'expression de notre profonde considération.

M<sup>elle</sup> CHEMINI chargé de cours à l'I.A.P , vous acceptez de juger et commenter ce travail qu'il nous soit permit de vous remercier vivement.

M<sup>r</sup> M. EL-HATTAB , qui nous fait profiter de ces résultats expérimentaux pour la simulation et qui a accepté notre invitation .

Nous remercions aussi nos collègues M. ZEKRINI , S. TOUMI , A. SEGHIR , K. TOUFOUTI, A. ZEGNOUN pour leurs précieux apports en matière informatique à notre travail , aussi que nos amis T. SENOUN , C. SELADJI et aussi H. BAGHLI pour son intuition .

Monsieur M. ALEM a consacré son PC pour notre travail , on le remercie pour sa compréhension et pour sa générosité.

M<sup>r</sup> M. OUADJAOUT , Docteur en sciences mathématiques du (D.P.S.F) , qu'il trouve ici l'expression de notre vive reconnaissance.

Sans oublier Dahmane , Ahmed et Fatah de la Sté (M.I.E) de Vieux Kouba.

Enfin, toi abdesselem Benazou , tu sais pourquoi !.

ملخص :

من أجل تمثيل ظاهرة انتشار المادة أثناء عملية الاستخراج من الصلب عن طريق المائع ، إلتجنا إلى التمثيل الرياضي لهذه الظاهرة عن طريق وضع عدة فرضيات للحصول على معادلة ذات مشتقات جزئية ، حل هذه المعادلة بطريقة الفروق المنتهية يوفر لنا معلومات عن توزيع التركيز في كل من الصلب والمائع بدلالة الزمن وهذا من أجل تعيين الخصائص المثلى للتجربة .

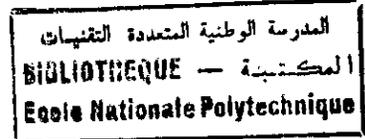
### Résumé :

Afin de simuler le phénomène de diffusion lors de l'extraction solide-liquide , nous avons modélisé ce phénomène à travers de nombreuses hypothèses , pour obtenir une E.D.P. qui sera résolu par la méthode des différences finies pour trouver les profils de concentration dans les deux phases et optimiser les paramètres de l'opération.

### Abstract :

In order to simulate the diffusion phenomenon in solid-liquid extraction we have represent this phenomenon into many assumptions , for getting P.D.E , which is going to be resolved by differences finits method , in order to find a profile of concentration in the two phases and optimise the parameters of the opération.

# Sommaire



Chapitre I : Généralités sur l'extraction solide-liquide

Chapitre II: Equations régissant le transfert de matière

II-1 Définition des concentrations , vitesses et flux massiques

II-2 Equations de continuité pour un mélange binaire

II-3 Modélisation du transfert de matière dans le cas de l'extraction des concrètes végétales

Chapitre III: Résolution numérique des équations de transfert de matière

III-1 La méthode des différences finies

III-2 Méthode explicite

III-3 Discrétisation et résolution dans le cas d'un coefficient de diffusion constant

III-4 Algorithme de résolution

III-5 Organigramme

III-6 Le réajustement

Chapitre IV: Résolution des équations de transfert dans le cas où le coefficient de diffusion est variable

IV-1 Introduction

IV-2 Discrétisation et calcul des concentrations

IV-3 Evolution de la concentration de la phase liquide

IV-3 Evolution de la concentration à la périphérie à partir de la condition d'équilibre.

Chapitre V: Applications , résultats et commentaires

V-1 Application au cas de l'extraction des pyrethrine

V-2 Application au cas de l'extraction des concrètes des bois de cèdre de l'Atlas

V-3 Commentaires

Conclusion

Nomenclature

Bibliographie

Annexes ; figures et programmes.

# INTRODUCTION

# Introduction

L'extraction solide-liquide est une opération classique du génie chimique.

La simulation de cette opération est dans de nombreux cas le meilleur moyen de maîtriser les paramètres de l'opération et d'optimiser ainsi le rendement et la vitesse d'extraction afin d'éviter des expériences souvent coûteuses.

Ce travail se situe dans le contexte exposé, et vise donc à l'analyse du processus d'extraction. Nous avons choisi comme sujet d'étude un procédé "batch" d'extraction, appliqué aux concrètes végétales.

Pour atteindre notre but nous avons modélisé le phénomène de transfert de matière par deux modèles. Le premier concernera la résolution de la deuxième loi de Fick avec  $D$  constant et le deuxième supposera que  $D$  varie de manière exponentielle avec la concentration. La résolution est faite à l'aide de méthodes numériques utilisant la méthode des différences finies. Le résultat de cette simulation permettra d'atteindre les profils de concentration du soluté dans les deux phases solide et liquide en fonction du temps.

Le chapitre I est consacré à la justification du choix du modèle de transfert, à travers un bilan bibliographique. Nous présentons ensuite au chapitre II les équations de transfert reliant les paramètres du modèle et obtenons après plusieurs hypothèses simplificatrices l'équation aux dérivées partielles qui décrit le phénomène, appelée seconde loi de Fick.

La méthode de résolution des équations de transfert est exposée au chapitre III, le chapitre VI est consacré à l'élaboration de l'algorithme de résolution dans le cas du premier modèle avec comme hypothèse la constance du coefficient de diffusion. Et afin de réduire l'erreur un algorithme de réajustement est élaboré en parallèle.

La résolution des équations de transfert dans le cas du deuxième modèle avec comme hypothèse la variation du coefficient de diffusion avec la concentration est faite au chapitre V

Enfin le chapitre VI est consacré à l'application du programme au cas de l'extraction des pyréthrinés et au cas de l'extraction des concrètes de bois de cèdre de l'Atlas, et à la discussion des résultats.

# **CHAPITRE I**

## **Généralités sur l'extraction solide-liquide**

L'extraction solide-liquide est une opération classique du génie chimique qui a pour but d'extraire, de séparer ou de dissoudre, par immersion dans un liquide ou par arrosage par un liquide, un ou plusieurs solutés à un solide.[1]

C'est une opération très ancienne, utilisée pour retirer des plantes et de certains organes animaux des produits alimentaires, pharmaceutiques, colorants ou odoriférants, en vue de production de breuvages, drogues, teintures ou parfums.[2]

Dans les industries agro-alimentaires, pharmaceutiques et de la parfumerie, de nombreux exemples d'extraction de produits naturels peuvent être cités à titre indicatif :

-Les extraits de café et de thé (fabrication des préparations solubles) sont produits par traitement à l'eau bouillante: la caféine est extraite à l'eau du café et du thé; le café décaféiné est obtenu par élimination de la caféine du grain du café vert par traitement aux solvants chlorés.

-Le sucre est extrait à l'eau chaude des racines de betteraves.

-Les huiles alimentaires sont retirées des graines oléagineuses par pression puis extraction à l'hexane.

-Un grand nombre de produits à activité pharmacodynamique, contenus dans les plantes médicinales, sont extraits par l'eau, les alcools, les hydrocarbures ou les solvants chlorés.

-Les parfums naturels sont isolés des plantes (fleurs, racines, tiges...) par les alcools ou les corps gras et donnent des teintures, infusions ou pommades.

-Les tanins naturels sont obtenus par traitement à l'eau de l'écorce de certains arbres.

Il y a plusieurs méthodes d'extraction solide-liquide:

-La percolation : elle consiste à laisser couler un solvant sur un lit de solides afin de dissoudre les composants solubles qui y sont contenus. La préparation de café relève de cette opération.

-La décoction : c'est l'opération dans laquelle le solide est mis à bouillir dans un liquide afin d'extraire les parties solubles. Le traitement de malt en brasserie utilise cette méthode.

-L'infusion : c'est la mise en suspension d'un solide dans un liquide chaud ou l'arrosage du solide par ce liquide afin de dissoudre les constituants utiles, suivie du refroidissement du mélange. La préparation du thé est l'exemple type de cette opération.

-La macération : c'est la mise en contact plus ou moins prolongé à froid d'un solide dans un solvant en vue d'extraire les parties solubles.

-La digestion : c'est une macération à chaud. Cette opération et la macération sont utilisées particulièrement en pharmacie et en parfumerie.

-L'éluion : elle consiste à enlever un soluté fixé à la surface d'un solide par simple contact avec un solvant. Elle est fréquemment employée dans les méthodes d'analyse (chromatographie)[2].

L'extraction solide-liquide est une opération de transfert ou d'échange de matière entre une phase solide, la matière à extraire, et une phase liquide, le solvant d'extraction, les constituants recherchés pouvant être soit le soluté, soit le résidu.

Elle fait partie des opérations dans lesquelles un produit, dans un solide, un liquide ou un gaz, passe à l'état dissout dans un liquide.

L'opération d'extraction se déroule en trois étapes théoriques:

- Le passage du soluté dans le solvant (dissolution et transfert)
- Le lavage du solide par du solvant frais ou pauvre en soluté
- La séparation mécanique du solide.

Ces trois processus sont réalisés soit dans des appareils distincts, soit dans un appareil unique. Dans le cadre de cette étude nous nous intéresserons à la première étape où le transfert du soluté dans le liquide est l'extraction solide-liquide proprement dite. Ce transfert exige un certain temps pour être complet et il est essentiel de déterminer la vitesse globale du phénomène, c'est à dire la vitesse du transfert ou vitesse d'extraction, pour définir un appareil d'extraction. Le choix de la méthode d'extraction est déterminé par la proportion de matière soluble présente, sa distribution au sein du solide, la nature du solide ainsi que sa taille[2]. Au contact du solvant, l'enrichissement de la solution en soluté dans le cas d'extraction des concrètes végétales, peut être considéré comme la succession de trois étapes principales :

-Dissolution du soluté au sein des particules (due à la destruction des poches sécrétrices au cours du prétraitement de la matière végétale.

-Diffusion du solvant à travers la structure microscopique du solide.

-Transfert de l'huile de l'intérieur du solide, vers l'extérieur, lui même comprenant deux étapes:

-transfert de l'huile de l'intérieur vers la surface externe du solide.

-transfert de la solution concentrée adhérente au solide vers la masse du solvant[3].

Si la dissolution est rapide vu l'affinité des solutés envers le solvant, les autres phases de transfert restent assez lentes et par conséquent c'est d'elles que dépendra la vitesse finale du procédé[3].

Si le soluté est localisé en surface du solide, généralement poreux, sa mise en solution est rapide et la vitesse de transfert est très dépendante de la vitesse de diffusion (diffusion surfacique) et peut être accrue par l'agitation du milieu[2].

Si le soluté est localisé dans les cellules végétales à parois très perméables, c'est le cas typique de l'extraction des graines oléagineuses, le cheminement du soluté à travers ces parois peut être très lent. Le processus est régi par un phénomène de diffusion à travers une membrane ou dialyse. Dans ces conditions, c'est cette diffusion interne qui gouverne la vitesse de transfert et l'agitation n'a que peu d'influence sur la vitesse de transfert.

C'est pour ces raisons que beaucoup d'auteurs ont retenu le transfert de l'huile comme étant l'étape la plus lente du processus[2].

# **CHAPITRE II**

## **Equations régissant le transfert de matière**

Comme nous venons de le voir, le transfert d'un soluté se trouvant dans un solide vers une phase liquide est régi par phénomène de diffusion. Nous allons donc écrire dans un premier temps les équations générales de continuité, ensuite nous traiterons des cas particuliers.

## II-1-Définitions des concentrations, vitesses et flux massiques: [4]

On va résumer ces définitions dans des tableaux, qui donneront en même temps la nomenclature et les unités.

**Tableau 1: Notation des concentrations dans un système binaire**

$\rho = X_A + X_B =$ masse volumique de la solution (g/cm <sup>3</sup> ) $X_A = C_A \cdot M_A =$ concentration massique de A (g de A/cm <sup>3</sup> de solution) $\omega_A = \frac{X_A}{\rho} =$ fraction massique de A $M_A =$ masse molaire de A
$C = C_A + C_B =$ densité molaire de la solution (mole/cm <sup>3</sup> ) $C_A = \frac{X_A}{M_A} =$ concentration molaire de A (moles de A/cm <sup>3</sup> de solution) $x_A = \frac{C_A}{C} =$ fraction molaire de A

**Tableau 2 : Notation des vitesses dans un système binaire**

$v_A =$ vitesse de l'espèce a relative à des coordonnées stationnaires $v_A - v =$ vitesse de diffusion de l'espèce A relative à v $v_A - v^* =$ vitesse de diffusion de l'espèce A relative à v*
$v =$ vitesse massique moyenne = $\left(\frac{1}{\rho}\right)(X_A v_A + X_B v_B) = \omega_A v_A + \omega_B v_B$ $v^* =$ vitesse molaire moyenne = $\left(\frac{1}{C}\right)(C_A v_A + C_B v_B) = x_A v_A + x_B v_B$

**Tableau 3 : Flux massiques et molaires dans un système binaire:**

grandeur	par rapport à des axes fixes	par rapport à v	par rapport à v*
vitesse de l'espèce A (cm/s)	$v_A$	$v_A - v$	$v_A - v^*$
flux massique de A (g/cm <sup>2</sup> s)	$F_A = X_A v_A$	$j_A = X_A (v_A - v)$	$j_A^* = X_A (v_A - v^*)$
flux molaire de A (g moles/cm <sup>2</sup> s)	$N_A = C_A v_A$	$J_A = C_A (v_A - v)$	$J_A^* = C_A (v_A - v^*)$

$$F_A + F_B = X_A v_A + X_B v_B$$

à partir de l'expression de v dans le tableau 2 , on obtient :

$$F_A + F_B = \rho \cdot v \quad (II.1)$$

**Tableau 4 : Formes équivalentes de la première loi de FICK pour la diffusion binaire**

flux	gradient	forme de la première loi de FICK
$F_A$	$\nabla \omega_A$	$F_A - \omega_A (F_A + F_B) = -\rho D_{AB} \nabla \omega_A$ (a)
$F_B$	$\nabla X_A$	$N_A - x_A (N_A + N_B) = -C D_{AB} \nabla X_A$ (b)
$j_A$	$\nabla \omega_A$	$j_A = -\rho D_{AB} \nabla \omega_A$ (c)
$J_A^*$	$\nabla X_A$	$J_A^* = -C D_{AB} \nabla X_A$ (d)

## II.2 Equations de continuité pour un mélange binaire :

On applique la loi de conservation de masse d'une espèce A à un volume élémentaire  $\Delta x \Delta y \Delta z$  fixé dans l'espace , à travers lequel un mélange binaire de A et B s'écoule et un réaction chimique  $r_a$  (g/cm<sup>3</sup> sec) est susceptible de se réaliser. Les différentes contributions au bilan de matière sont :

Le taux de variation de masse de A dans le volume élémentaire

$$\frac{\partial X_A}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z$$

Entrée de A à l'abscisse x

$$F_{Ax} \Big|_x \Delta y \Delta z$$

Sortie de A à travers la face

$$F_{Ax} \Big|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z$$

se trouvant à l'abscisse  $x+\Delta x$   
 taux de production de A  
 par réaction chimique

$$r_A \Delta x \Delta y \Delta z$$

En répétant l'opération sur l'axe des y et l'axe des z et en divisant par  $\Delta x \Delta y \Delta z$ , on obtient, après avoir fait tendre le volume élémentaire à zéro.

$$\frac{\partial X_A}{\partial t} + \left( \frac{\partial F_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial F_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial F_{Az}}{\partial z} \right) = r_A \quad (\text{II.2})$$

C'est l'équation de continuité du composé A dans un mélange binaire. Elle nous décrit la variation de la concentration massique de A en fonction du temps dans un point de l'espace ; cette variation étant due au déplacement de A et à la réaction chimique qui produit l'espèce A.

$F_{Ax}$ ,  $F_{Ay}$  et  $F_{Az}$  sont les composantes rectangulaires du vecteur flux massique  $F_A = X_A v_A$ .

La notation vectorielle de l'équation (II.2) s'écrit :

$$\frac{\partial X_A}{\partial t} + (\nabla \cdot F_A) = r_A \quad (\text{II.3})$$

de même pour espèce B :

$$\frac{\partial X_B}{\partial t} + (\nabla \cdot F_B) = r_B \quad (\text{II.4})$$

La somme de ces deux équations donne :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho v) = 0 \quad (\text{II.5})$$

(  $\rho = X_A + X_B$  masse volumique de la solution )

C'est l'équation de continuité pour le mélange. Dans cette équation, on a utilisé le fait que  $F_A + F_B = \rho v$  et que  $r_A + r_B = 0$  d'après la loi de conservation de masse.

L'équation (II.5) devient :

$$(\nabla \cdot v) = 0 \quad (\text{II.6})$$

pour une masse volumique constante.

En terme de flux molaire et par analogie avec l'équation , on a :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + (\nabla \cdot N_A) = R_A \quad (II.7)$$

avec  $R_A$  le taux de production molaire de A par unité de volume de même pour B :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} + (\nabla \cdot N_B) = R_B \quad (II.8)$$

En additionnant ces deux équations , on a :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\nabla \cdot C \cdot v^*) = R_A + R_B \quad (II.9)$$

avec  $N_A + N_B = C v^*$  et C la densité molaire de la solution .

L'équation devient :

$$(\nabla \cdot v^*) = \frac{1}{C} (R_A + R_B) \quad (II.10)$$

pour une densité molaire C constante.

Les équations (II.3) et (II.7) ne sont pas utilisables directement pour obtenir les profils de concentration.

Pour obtenir les équations générales décrivant la diffusion dans un mélange binaire, on remplace les flux  $F_A$  et  $N_A$  par des expressions appropriées exprimant le gradient de concentration. Quand on substitue l'équation (a) du tableau 4 dans l'équation (II.3) et l'équation (b) dans l'équation (II.7), on obtient les équations de diffusion binaire :

$$\frac{\partial X_A}{\partial t} + (\nabla \cdot X_A v) = \nabla D_{AB} \nabla X_A + r_A \quad (II.11)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + (\nabla \cdot C_A v^*) = \nabla \cdot C D_{AB} \nabla X_A + R_A \quad (II.12)$$

Chacune de ces équations peut décrire le profil de concentration dans un système diffusant à deux constituants.

A l'exception de l'absence de diffusion de température, de pression ou forcée, les équations (II.11) et (II.12) sont valables pour des systèmes à densité variable (molaire ou massique) et à coefficient de diffusion  $D_{AB}$  variable.

Suivant le système diffusionnel on peut, à travers l'analyse du système et des hypothèses, simplifier ces équations.

### **II.3 Modélisation du transfert de matière dans le cas de l'extraction des concrètes végétales:**

Les travaux d'Angelidis [5,6] ont montré que la diffusion de l'huile à l'intérieur des pores pouvait, suivant la dimension des pores être :

-Convective ( pour les pores assez larges, de l'ordre du micromètre et plus).

-libre (lorsque la dimension des capillaires n'empêche pas la diffusion moléculaire dans les pores )

-et empêchée ( si la dimension de la molécule diffusante et du capillaire se rapprochent). Cette étape est généralement lente.

Les observations microscopiques effectuées par El HATTAB [3] dans le cas du bois de cèdre de l'Atlas montre l'existence de canaux dont les dimensions n'empêchent pas la diffusion, nous supposons alors que la diffusion dans le cas de l'extraction du bois de cèdre de l'Atlas est libre.

D'autre part tous les modèles utilisés pour interpréter le transfert de masse entre phases, admettent que l'équilibre thermodynamique est atteint à l'interface [1,3,7]; Celui-ci en effet s'établit quasi instantanément en l'absence de réaction chimique et si des substances tensioactives absorbées à l'interface ne viennent pas apporter une résistance supplémentaire[7].

Etant donné le caractère diffusionnel de l'extraction solide-liquide [3,5,6], nous avons choisis de développer un modèle diffusionnel avec équilibre à l'interface pour représenter le phénomène de transfert lors d'un contact batch.

*par paquet.*

#### **II.3.1 Extraction dans un réacteur agité :**

Dans le cas de l'extraction solide-liquide des concrètes végétales on peut faire les simplifications suivantes : [1,3]

-Température de l'opération maintenue constante

-Pas de réaction chimique ( $r_a = 0$ )

-Masse volumique ( $\rho$ ) constante

-Epaisseur du solide uniforme.

L'équation (II.11) :

$$\frac{\partial X_A}{\partial t} + X_A(\nabla v) + (v \nabla X_A) = (\nabla D_{AB} \cdot \nabla X_A)$$

devient , avec  $\nabla v = 0$  dans le cas où  $\rho = \text{constante}$  (équation (II.6)) et  $v = 0$  pour un transfert avec diffusion libre ( sans convection ) :

$$\frac{\partial X_A}{\partial t} = (\nabla(D_{AB} \cdot \nabla X_A)) \quad (\text{II.13})$$

qui est appelée seconde loi de FICK (avec coefficient de diffusion variable ).

### Hypothèses et équations :

Considérons le cas où on a des particules sphériques (ou qui sont assez petites pour être considérées comme des sphères). (Voir Annexe B pour d'autres formes géométriques).

1. Les particules solides de rayon constant R.

2. Etant donné que les propriétés moyennes des concrètes varient peu, la concrète sera considéré comme un soluté unique ayant des propriétés diffusionnelles moyennes [8] c'est à dire qu'on va considérer que le soluté bien qu'il soit composé d'un mélange très varié de constituants a la même propriété pour tous le mélange (le même D)

3. La concentration en soluté dans la phase solide  $X(r)$ , ne dépend que de la position radiale, ceci découle de la symétrie sphérique du problème et nous supposons que la répartition initiale est homogène alors  $X(r,0)=X(0)=\text{constante}$ .

4. Le solvant est une phase parfaitement mélangée de concentration Y. Ceci traduit le fait que la résistance au transfert dans la phase liquide est négligeable.

5. Le transport du soluté dans les particules est un phénomène purement diffusionnel.

6. A l'interface, on suppose l'équilibre  $Y(t)=mX(R,t)$ .

**Les conditions aux limites sont :**

Si l'on désigne par X la concentration dans la phase solide et Y la concentration de la phase liquide

-au centre d'une particule , la concentration est maximale de par la symétrie du problème

soit 
$$\left( \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \quad \forall t \quad (\text{II.14})$$

-à la périphérie, équilibre des concentrations

$$X(R, t) = 1/m Y(t) \quad (\text{II.15})$$

-à l'interface , égalité des flux de soluté

Le flux entrant dans le liquide peut s'écrire :

$$F = V_l \frac{d Y(t)}{dt} \quad (\text{II.16})$$

(où  $V_l$  est le volume de solvant libre).

Le flux sortant du solide est donné par la première loi de FICK:

$$F = -D_{AB} a \left( \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} \right)_{r=R}^* \quad (\text{II.17})$$

L'aire de contact dans le cas des particules sphériques est calculé par :

$$a = N_p 4\pi R^2$$

où  $N_p$  est le nombre de particules que l'on peut estimer par :

$$N_p = V_{\text{humide}} / (4/3)\pi R^3$$

avec  $V_{\text{humide}}$  représentant le volume des particules imbibées.

Or, si  $V_t$  est le volume total de solvant contacté , et  $V_s$  le volume de solide sec , on a :

$$V_{\text{humide}} = V_s + V_t - V_1$$

$V_1$  : volume libre de solvant

ce qui mène à :

$$a = 3 (V_t - V_1 + V_s) / R \quad (\text{II.18})$$

$V_s$  est déterminé à partir de la masse du solide sec ( $m_s$ ), et la masse volumique du solide sec  $\rho_d$ .

$$V_s = m_s / \rho_d$$

On détermine  $\rho_d$  par une méthode simple qui consiste à prendre un volume bien déterminé  $V_1$  des particules solides  $V$  de masse  $M$  à mesurer le volume  $V_2$  de solvant nécessaire pour remplir la capacité qui contient  $M$ , ce qui nous donne la masse volumique du solide par  $\rho_d = M / (V_1 - V_2)$ .

L'égalité des flux (équations (II.16, II.17) s'écrit :

$$\frac{dY}{dt} = -D \frac{3}{R} \frac{V_t + V_s - V_1}{V_1} \left( \frac{\partial X(r, t)}{\partial r} \right)_{r=R} \quad (\text{II.19})$$

Les conditions initiales sont :

-Pour la phase continue :

$$Y(0) = Y_0 = 0 \quad (\text{cas où le solvant est pur})$$

-Pour les particules solides :

$$X(r, 0) = X_0 \quad \forall r \neq R$$

et

$$X(R, 0) = \frac{1}{m} Y_0$$

Pour un transfert unidirectionnel selon le rayon de la sphère, l'équation (II.13) devient en coordonnées sphériques :

$$\frac{\partial X_A}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 D_{AB} \frac{\partial X_A}{\partial r} \right) \quad (\text{II.20})$$

Les équations (II.19) et (II.20) seront résolues au chapitre IV par des méthodes numériques dont nous exposerons le principe au chapitre III.

# **CHAPITRE III**

## **Résolution numérique des équations de transfert de matière**

## Introduction :

Notre modèle est décrit par une équation aux dérivées partielles de type parabolique qui peut être résolue par différentes méthodes numériques, à savoir la méthode des éléments finis ou la méthode des différences finies.

Lors de cette étude nous avons opté pour la méthode des différences finies.

### III.1 La méthode des différences finies [9]

Nous avons choisi d'utiliser la méthode des différences finies, pour sa simplicité et sa souplesse lors de la programmation numérique. De plus elle est caractérisée par une rapidité d'exécution ce qui est très important si on veut réajuster certaines paramètres accessibles difficilement par d'autres méthodes.

Le principe de résolution consiste à exprimer les dérivées successives d'une fonction  $f(x,t)$  à l'aide des développements en série de Taylor (voir annexe A)[9].

Il existe essentiellement trois types de méthodes de base pour résoudre de telles équations : méthode explicite, méthode implicite et de type Crank-Nicholson. Nous exposerons la méthode explicite que nous avons utilisé et qui convient bien aux conditions initiales aux limites de notre problème.

### III.2 Méthode explicite [9]

Cette méthode consiste à transformer les équations aux dérivées partielles en équations algébriques à partir de la discrétisation des fonctions continues et de leurs dérivées.

Il s'agit en fait de diviser le domaine de variation de  $X$  (variable d'espace) en différences finies  $\Delta X$  ou  $h$ , et de même pour le domaine de variation de  $t$  (variable temporelle), en différences finies  $\Delta t$ , et d'exprimer la fonction  $f(X,t)$  ou ses dérivées en fonction de  $h$  et  $\Delta t$ .

Soit à résoudre l'équation parabolique de forme générale suivante :

$$\frac{\partial f(X,t)}{\partial t} = A(X) \cdot \frac{\partial^2 f(X,t)}{\partial X^2} + B(X) \cdot \frac{\partial f(X,t)}{\partial X} + C(X) \cdot f(X,t) + D(X) \quad (\text{III.1})$$

avec les conditions aux limites et initiales:

$$\begin{cases} f(X = a, t) = f_a(t) \\ f(X = b, t) = f_b(t) \\ f(X, t = 0) = f_0(t) \end{cases} \quad (\text{III.2})$$

Supposons connue  $f(X, t)$  en tout point  $X$  ( $a < X < b$ ) à l'instant  $t$ .

On peut alors calculer  $\partial f(X, t) / \partial X$  et  $\partial^2 f(X, t) / \partial X^2$  et on peut écrire

$$\begin{cases} \frac{\partial f(X, t)}{\partial t} = g(X, t) \\ f(X, t = 0) = f_0(X) \end{cases} \quad (\text{III.3})$$

où  $g(X, t)$  est connue .

De façon plus précise , si l'indice  $i$  repère la variable  $X$  et l'indice  $j$  repère la variable  $t$  l'équation (III.1) discrétisée peut s'écrire , en utilisant les différences centrées sur  $X$  et les différences à droite sur  $t$  : (voir annexe A)

$$\frac{1}{\Delta t} (f_{i,j+1} - f_{i,j}) = \frac{A_i}{\Delta X^2} (f_{i-1,j} - 2f_{i,j} + f_{i+1,j}) + \frac{B_i}{2\Delta X} (f_{i+1,j} - f_{i-1,j}) + C_i f_{i,j} + D_i$$

Ce qui donne :

$$f_{i,j+1} = \left[ \frac{A_i \Delta t}{\Delta X^2} - \frac{B_i \Delta t}{2\Delta X} \right] f_{i-1,j} + \left[ 1 - \frac{2A_i \Delta t}{\Delta X^2} + C_i \Delta t \right] f_{i,j} + \left[ \frac{A_i \Delta t}{\Delta X^2} + \frac{B_i \Delta t}{2\Delta X} \right] f_{i+1,j} + D_i \Delta t \quad (\text{III.4})$$

On obtient  $f_i$  à l'instant  $j+1$  comme combinaison de  $f_{i-1}$ ,  $f_i$  et  $f_{i+1}$  à l'instant  $j$ .

La cellule de base est représentée dans la figure III.1 .

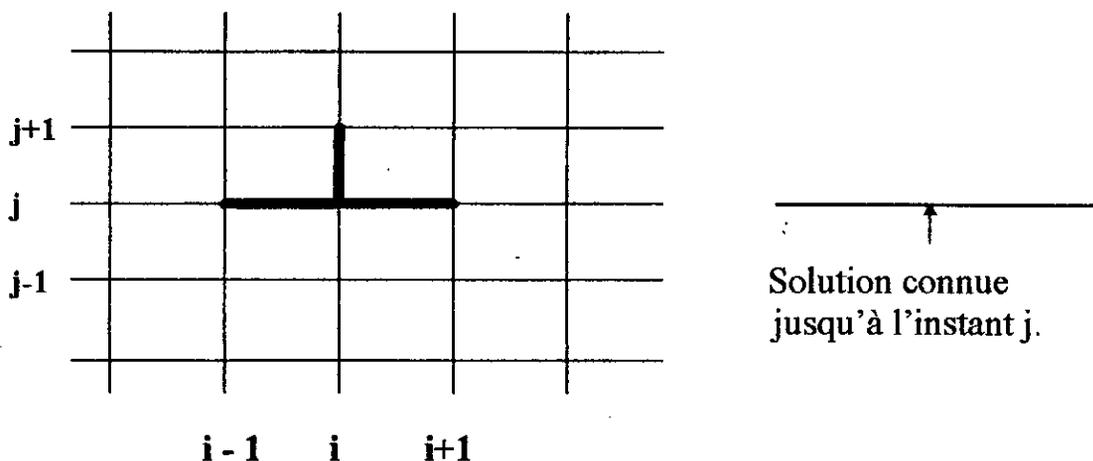


figure III.1 Cellules représentant les variations de  $f_{ij}$

La résolution de l'équation (III.4) fait progresser cette cellule vers  $t_{j+1}, t_{j+2}, \dots$  etc.

L'inconvénient principal de la méthode explicite est qu'elle nécessite de choisir  $\Delta t$  suffisamment petit sinon la solution de l'équation (III.4) devient instable.

En fait il faut que le coefficient de  $f_{i,j}$  soit positif c'est à dire: [9,10,11]

$$\left( \frac{2A_i}{\Delta X^2} - C_i \right) \Delta t \leq 1 \quad (\text{III.5})$$

Cette condition nous impose un choix non arbitraire du pas de discrétisation sur le temps et l'espace de telle manière à ce que la solution devienne stable. (voir chapitre IV.3).

### III.3 Discrétisation et résolution dans le cas d'un coefficient de diffusion constant: [1]

Nous avons à résoudre l'équation aux dérivées partielles, décrivant le transport d'un soluté dans une particule, elle est décrite par la 2<sup>ème</sup> loi de FICK, en coordonnées sphériques, elle s'écrit:

$$\frac{\partial X(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \cdot D \cdot \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} \right] \quad (\text{III.6})$$

on désigne par :

$t$  : la variable temporelle

$r$  : la variable spatiale

avec les conditions aux limites et initiales déjà citées dans le chapitre II.3, et pour résoudre cette équation, nous allons l'écrire avec des variables adimensionnelles.

#### III.3.1 Normalisation : [1]

On définit les grandeurs adimensionnelles suivantes :

$$\tilde{X} = \frac{X}{X_0}, \quad \tilde{Y} = \frac{Y}{X_0}, \quad \eta = \frac{r}{R}$$

et le nombre de FOURIER relatif au temps de contact final  $\tau$ , et le temps réduit  $\tilde{t}$ .

$$F_0 = \frac{D \cdot \tau}{R^2} \quad ; \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau}$$



$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{X}_i}{\partial \eta} = \frac{\tilde{X}_{i+1} - \tilde{X}_{i-1}}{2\Delta\eta} & \text{(III.8. a)} \\ \frac{\partial^2 \tilde{X}_i}{\partial \eta^2} = \frac{\tilde{X}_{i+1} - 2\tilde{X}_i + \tilde{X}_{i-1}}{\Delta\eta^2} & \text{(III.8. b)} \end{cases}$$

Ces approximations sont utilisées uniquement pour  $i \in [2, n-1]$ .

-Pour  $i=1$ , (centre de la particule), nous avons utilisé des différences à droite qui s'écrivent :

$$\begin{cases} \left( \frac{\partial \tilde{X}_1}{\partial \eta} \right)_{\eta=0} = 0 & \text{"la concentration est maximale} \\ & \text{au centre de la particule"} \\ \left( \frac{\partial^2 \tilde{X}_1}{\partial \eta^2} \right)_{\eta=0} = \frac{2}{3} \cdot \frac{\tilde{X}_3 - \tilde{X}_2}{\Delta\eta^2} & \text{(III.9)} \end{cases}$$

-pour  $i=n$ , à la périphérie et à partir de l'hypothèse n° 7 du chapitre (II.3), qui suppose l'existence d'un équilibre à l'interface, et qui néglige toute résistance au transfert à l'interface, on a :

$$\tilde{X}(R, \tilde{t}) = \frac{1}{m} \tilde{Y}(\tilde{t}) \quad \text{(III.10)}$$

et la dérivée première utilise les différences à gauche : ( voir annexe A )

$$\frac{\partial \tilde{X}_n}{\partial \eta} = \frac{\tilde{X}_n - \tilde{X}_{n-1}}{\Delta\eta} \quad \text{(III.11)}$$

Nous avons un système de  $(n+1)$  équations à résoudre

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{X}_i}{\partial \tilde{t}} = F_0 \left[ \frac{\partial^2 \tilde{X}_i}{\partial \eta^2} + \frac{2}{\eta} \frac{\partial \tilde{X}_i}{\partial \eta} \right]; & i \in [1, n] \\ \frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{t}} = -3F_0 \left( \frac{V_t + V_s}{V_l} - 1 \right) \left( \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} \right)_{\eta=1} & \text{(III.12)} \end{cases}$$

Notons que :

-  $Y_j$ ,  $X_{i,j}$  représentant les concentrations à l'instant  $\tilde{t}$  dans les 2 phases liquide, solide resp.

-  $Y_{j+1}$ ,  $X_{i,j+1}$  représentant les concentrations à l'instant  $\tilde{t} + \Delta\tilde{t}$

et

$$\frac{\partial \tilde{X}_i}{\partial \tilde{t}} = \frac{\tilde{X}_{i,j+1} - \tilde{X}_{i,j}}{\Delta\tilde{t}} \quad (\text{III.13})$$

$$\frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{t}} = \frac{\tilde{Y}_{j+1} - \tilde{Y}_j}{\Delta\tilde{t}} \quad (\text{III.14})$$

En utilisant les différences finies développées aux équations (IV.2a, 3a,3.b,6) qui sont valables pour  $i [2, n-1]$ , on obtient :

$$\frac{\tilde{X}_{i,j+1} - \tilde{X}_{i,j}}{\Delta\tilde{t}} = F_0 \left[ \frac{\tilde{X}_{i+1,j} - 2\tilde{X}_{i,j} + \tilde{X}_{i-1,j}}{\Delta\eta^2} + \frac{2}{\eta_i} \frac{\tilde{X}_{i+1,j} - \tilde{X}_{i-1,j}}{2\Delta\eta} \right]$$

Après factorisation on trouve :

$$\tilde{X}_{i,j+1} = A(1)\tilde{X}_{i,j} + A(2)\tilde{X}_{i+1,j} + A(3)\tilde{X}_{i-1,j} \quad (\text{III.15})$$

où

$$A(1) = 1 - 2F_0\Delta\tilde{t}(n-1)^2$$

$$A(2) = F_0\Delta\tilde{t}(n-1)^2 \cdot I / (n-1)$$

$$A(3) = F_0\Delta\tilde{t}(n-1)^2 \cdot (I-2) / (I-1)$$

Sachant que :

$$\Delta\eta = \frac{1}{n-1}$$

et

$$\eta_i = \frac{i-1}{n-1}$$

-Maintenant, envisageant le cas où  $i=1$  c'est à dire au centre de la particule sphérique, en utilisant les équations (III.7 a, III.9, III.13) on obtient :

$$\frac{\tilde{X}_{1,j+1} - \tilde{X}_{1,j}}{\Delta\tilde{t}} = F_0 \cdot \frac{2}{3} \frac{\tilde{X}_{3,j} - \tilde{X}_{2,j}}{\Delta\eta^2}$$

⇒

$$\tilde{X}_{1,j+1} = \tilde{X}_{1,j} + A(4)(\tilde{X}_{3,j} - \tilde{X}_{2,j}) \quad (\text{III.16})$$

avec :

$$A(4) = \frac{2}{3} \Delta \tilde{t} \cdot F_0 \cdot (n-1)^2$$

L'équation (IV.9) décrit l'évolution de la concentration du centre de la particule en fonction du temps.

-Le 3<sup>ème</sup> cas à traiter est quand  $i = n$ , donc  $\eta = 1$  c'est à dire à la périphérie, et à partir de l'équation (IV.5) on obtient :

$$\tilde{X}_{n,j} = \frac{1}{m} \tilde{Y}_j \quad (\text{III.17})$$

Pour le calcul de la concentration  $\tilde{Y}_{j+1}$  dans la phase liquide à l'instant  $(j+1)$ , on utilise l'équation (III.7.b, III.11, III.14) on obtient :

$$\frac{\tilde{Y}_{j+1} - \tilde{Y}_j}{\Delta \tilde{t}} = -3F_0 \left( \frac{V_t + V_s}{V_l} - 1 \right) \left( \frac{\tilde{X}_{n,j} - \tilde{X}_{n-1,j}}{\Delta \eta} \right)$$

d'où

$$\tilde{Y}_{j+1} = \tilde{Y}_j + A(5) (\tilde{X}_{n,j} - \tilde{X}_{n-1,j}) \quad (\text{III.18})$$

avec

$$A(5) = -3 \cdot F_0 \cdot \Delta \tilde{t} (n-1) \left( \frac{V_t + V_s}{V_l} - 1 \right)$$

La figure (III.2) nous montre la progression du calcul des concentrations à l'aide des équations (III.15, III.16, III.17, III.18). [11]

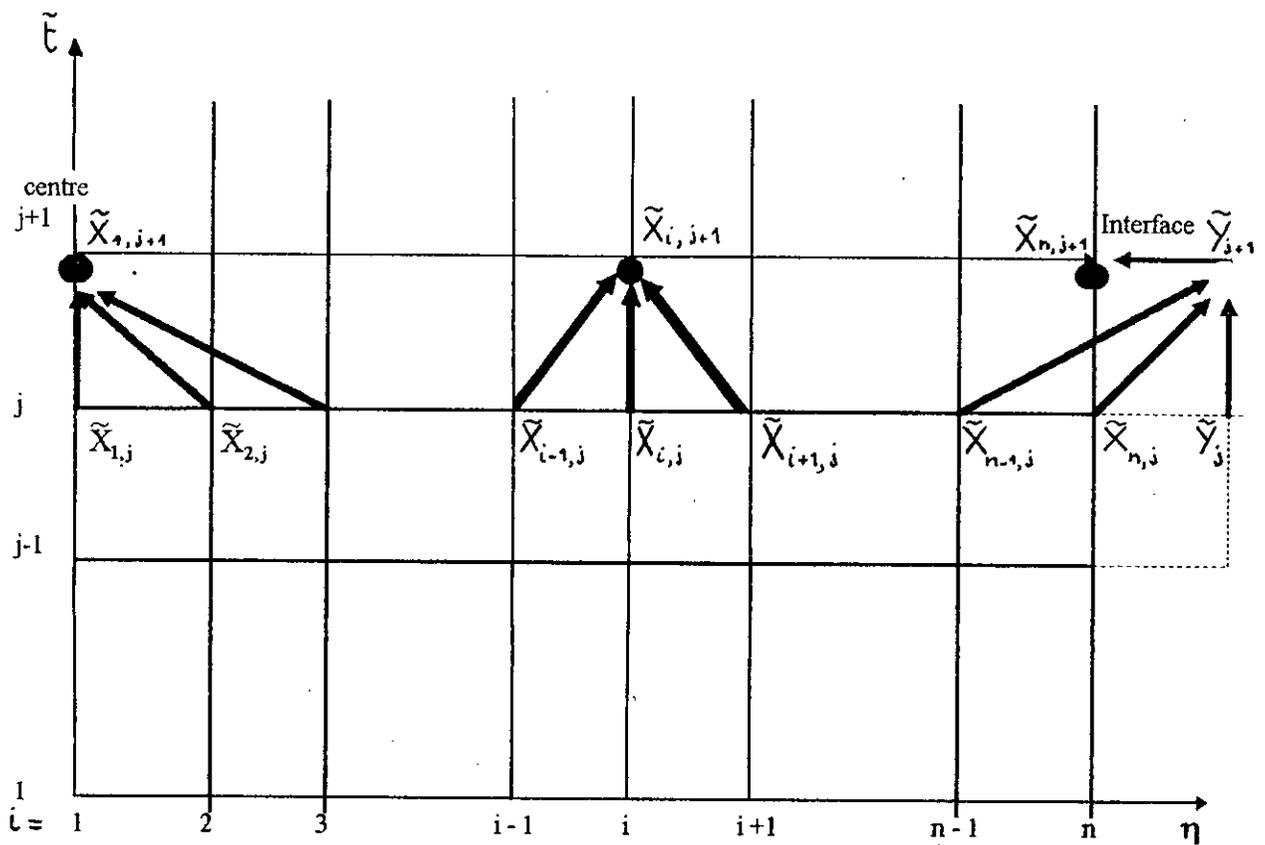


Fig III.2 : Maillage représentatif de la méthode des différences finies ( méthode explicite )

Pour simplifier les calculs et afin de mieux structurer notre programme , on pose :

$$A(6) = E_0 \Delta \tilde{t} (n - 1)$$

$$A(7) = A(6)(n - 1)$$

Les coefficients des équations (III.15 , III.16 , III.17 , III.18) peuvent être exprimés en fonction de A(6) et A(7), on obtient:

$$A(1) = 1 - 2A(7)$$

$$A(2) = A(7) \cdot \frac{I}{I-1}$$

$$A(3) = A(7) \cdot \frac{(I-2)}{(I-1)}$$

$$A(4) = \frac{2}{3} \cdot A(7)$$

$$A(5) = -3A(6) \cdot \left( \frac{V_t + V_s}{V_i} - 1 \right)$$

### III.3.3 Stabilité : [9,10,11]

Une méthode numérique converge si, en supposant les erreurs d'arrondi négligeables, la solution numérique tend vers la solution exacte quand le pas  $\Delta t$  tend vers zéro. En pratique, on ne peut pas éliminer les erreurs d'arrondi du calculateur.

La stabilité est une notion très importante liée à la fois à la méthode et à l'équation aux dérivées partielles. L'instabilité se manifeste par une amplification des erreurs d'arrondi et de troncature. Elle est due au fait qu'on remplace l'équation aux dérivées partielles par une équation aux différences finies, où  $f_i$  dépend de plusieurs  $f_{i-k}$  en général.

La méthode explicite nécessite de choisir  $\Delta t$  suffisamment petit sinon la solution de l'équation devient instable.

En comparant l'équation (III.15) avec (III.4) la condition de stabilité (III.5) devient:

$$A(1) \geq 0$$

Soit

$$1 - 2F_0 \cdot \Delta \tilde{t} (n-1)^2 \geq 0$$

Si on divise le temps final  $\tau$  en  $(NJ-1)$  pas, on aura

$$\tau = \Delta t \cdot (NJ - 1)$$

et puisque  $\Delta \tilde{t} = \frac{\Delta t}{\tau}$

d'où :

$$\Delta \tilde{t} = 1 / (NJ - 1)$$

et on pose  $n = NI$

la condition devient

$$NJ \geq 2 F_0(NI - 1)^2 + 1$$

On doit à chaque fois vérifier cette condition , en donnant une valeur à (NI) et en calculant la valeur entière de (NJ), telle que l'équation (III.5) soit largement respectée donc loin de la limite de stabilité.

### III.4 Algorithme de résolution

Etape 1 : Lire les paramètres du problème

Etape 2 : Initialiser  $\tilde{X}$ ,  $\tilde{Y}$ ,  $j=1$ ,  $i=2$

Etape 3 : Calcul de  $\tilde{X}_{1,j+1}$

$$\tilde{X}_{1,j+1} = \tilde{X}_{1,j} + A(4)(\tilde{X}_{3,j} - \tilde{X}_{2,j})$$

Etape 4 : Calcul de  $\tilde{X}_{i,j+1}$

$$\tilde{X}_{i,j+1} = A(1)\tilde{X}_{i,j} + A(2)\tilde{X}_{i+1,j} + A(3)\tilde{X}_{i-1,j}$$

Etape 5 : Si  $i < NI-1$  mettre  $i=i+1$  retour à l'étape 4  
sinon étape 6

Etape 6 : Calcul de  $\tilde{Y}_{j+1}$

$$\tilde{Y}_{j+1} = \tilde{Y}_j + A(5)(\tilde{X}_{NI,j} - \tilde{X}_{NI-1,j})$$

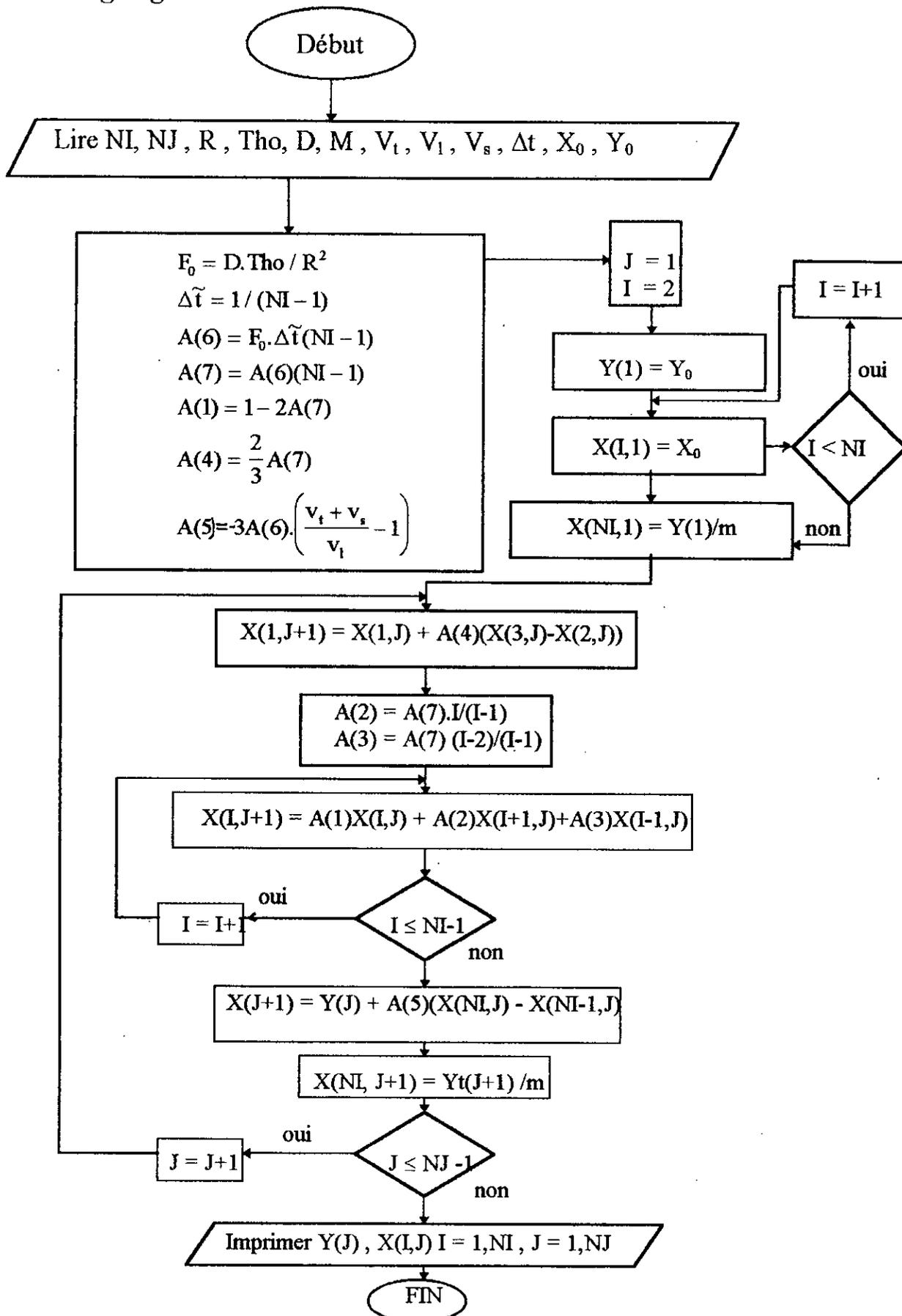
Etape 7 : Calcul de  $\tilde{X}_{NI,j+1}$

$$\tilde{X}_{NI,j+1} = \frac{1}{m} \tilde{Y}_{j+1}$$

Etape 8 : Si  $j \leq NJ-1$  mettre  $j = j+1$  retour à l'étape 3  
sinon étape 9

Etape 9 : Imprimer  $\tilde{Y}_j$ ,  $\tilde{X}_{i,j}$  ( $j=1, NJ, I=1, NI$ )

### III.5 Organigramme



### III.6 Le réajustement

#### III.6.1 Introduction :

Afin de surmonter les difficultés rencontrées dans la détermination des paramètres du modèle  $D$  et  $m$  correspondants aux expériences à simuler, on a commencé par l'analyse des facteurs qui conduisent à l'écart entre les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques fournies par notre modèle ( $\gamma_e$  et  $\gamma_t$ ).

Ces écarts seraient dues essentiellement à deux causes principales :

- Causes liées à l'expérience elle-même : donc à l'erreur expérimentale.
- Causes liées à la résolution numérique : celles-ci sont divisés en deux :
  - Les écarts dues à la méthode numérique utilisée et au calculateur ( erreur de troncature et d'arrondi), mais qui sont minimales lorsqu'on prend les précautions nécessaires de convergence et de stabilité.
  - Les écarts dues à l'estimation des paramètres du système.

Cette dernière est à notre avis la plus importante vue que ces paramètres interviennent directement dans l'algorithme de résolution.

Deux solutions sont envisageables :

- Soit on fait un réajustement de nos paramètres afin que le modèle numérique soit représentatif de l'expérience dans le cas où les hypothèses sont correctes.
- Soit qu'il faut critiquer les hypothèses liées à ces paramètres, à savoir la linéarité de l'équilibre (c'est à dire  $m = \text{constante}$ ) et la constance du coefficient de diffusion  $D$ . Cette solution sera traitée dans le chapitre IV.

Rappelons que les écarts entre la fonction réelle  $Y$  et son modèle  $Y^*$  peuvent être mesurées par la norme [12] :

$$Z = \|Y - Y^*\|_p$$

Les normes les plus courantes sont :

$L_1$  : la norme de Laplace :

$$\|Y - Y^*\|_1 = \sum_{i=1}^n |Y_i - Y_i^*|$$

$L_2$  : la norme euclidienne :

$$\|Y - Y^*\|_2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - Y_i^*)^2$$

$L_3$  : la norme du minimax de Laplace-Tchebychev :

$$\|Y - Y^*\|_\infty = \max_{i=1,n} |Y_i - Y_i^*|$$

Dans notre cas on optera pour la plus simple ( dans un premier temps) la norme  $L_1$ .

### III.6.2 Le réajustement :

On entend par réajustement des résultats du programme , la recherche des paramètres  $D$  et  $m$  qui diminuent l'écart entre les valeurs théoriques et expérimentales.

La méthode préconisée par BOUMAH RAT et GOURDIN [12], pour l'approximation de données numériques par des fonctions analytiques est la méthode des moindres carrés. Cette méthode simple pour les modèles linéaires ou linéarisables peut être appliquée pour les modèles non linéaires et non linéarisables analytiquement. C'est la méthode de GAUSS-NEWTON , qui nécessite la connaissance de la fonction analytique et donc de ses dérivées premières en fonction des paramètres à déterminer. (Autre suggestion : Voir Annexe C).

N'ayant pas la forme analytique de cette fonction et pour palier à cet inconvénient et sachant qu'on a une solution unique c'est à dire une seule valeur de  $D$  et de  $m$  qui traduit notre expérience , nous proposons la méthode suivante :

En premier lieu, il faut savoir qu'on a une infinité de points dans le plan contenant  $D$  et  $m$  (voir figure III.3) , et qu'un seul point  $(D^*, m^*)$  vérifie notre expérience.

La solution qui vient directement à l'esprit est de faire balayer toutes les valeurs de  $D$  et  $m$  et de calculer pour chaque point les concentrations puis les comparer avec les concentrations expérimentales jusqu'à ce qu'on obtienne  $D^*$  et  $m^*$ .

Cette solution bien qu'elle parait évidente est impossible car elle nécessite un temps énorme de calcul .

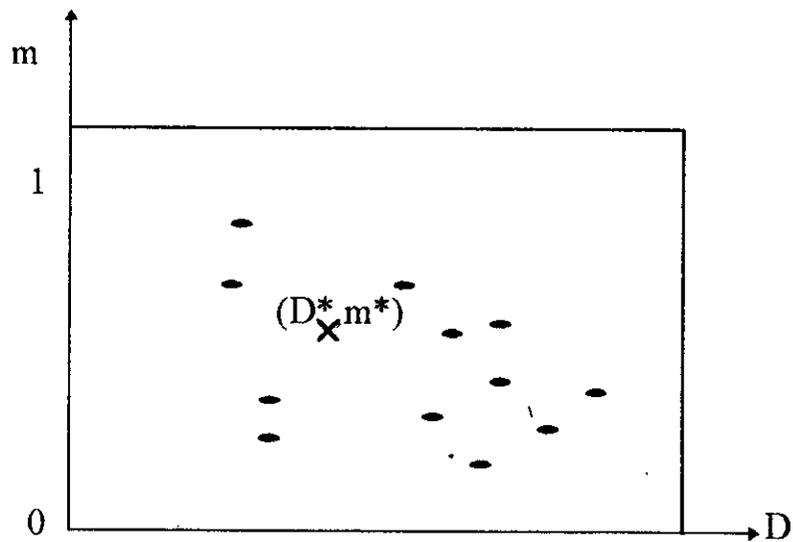


fig.III.3

Cependant , on a pensé qu'il suffisait de déterminer un intervalle de  $D$ , donc une valeur moyenne , vue que la précision est limitée.

On a divisé l'intervalle de  $m$  en petits intervalles et ainsi on a pu balayer tout l'intervalle pas à pas .

Pour le  $D$  , on a procédé comme suit :

On divise l'intervalle en deux , et on calcule pour chacune des valeurs  $D_{\max}$ ,  $D_{\min}$  et  $D_{\text{moy}}$  l'erreur relative qui représente la somme des écarts relatifs entre les valeurs expérimentales et théoriques divisée par le nombre de valeurs expérimentales.

En comparant les erreurs on élimine l'intervalle du côté de la plus grande erreur, on obtient alors un nouvel intervalle pour lequel on refait l'opération , et ainsi de suite jusqu'à ce que l'intervalle de  $D$  soit assez petit , là on arrête et on fait varier le  $m$ , voir (figure III. 4) et ainsi de suite.

Ainsi on peut balayer, pour une valeur de  $m$  donnée , tout l'intervalle de  $D$ .

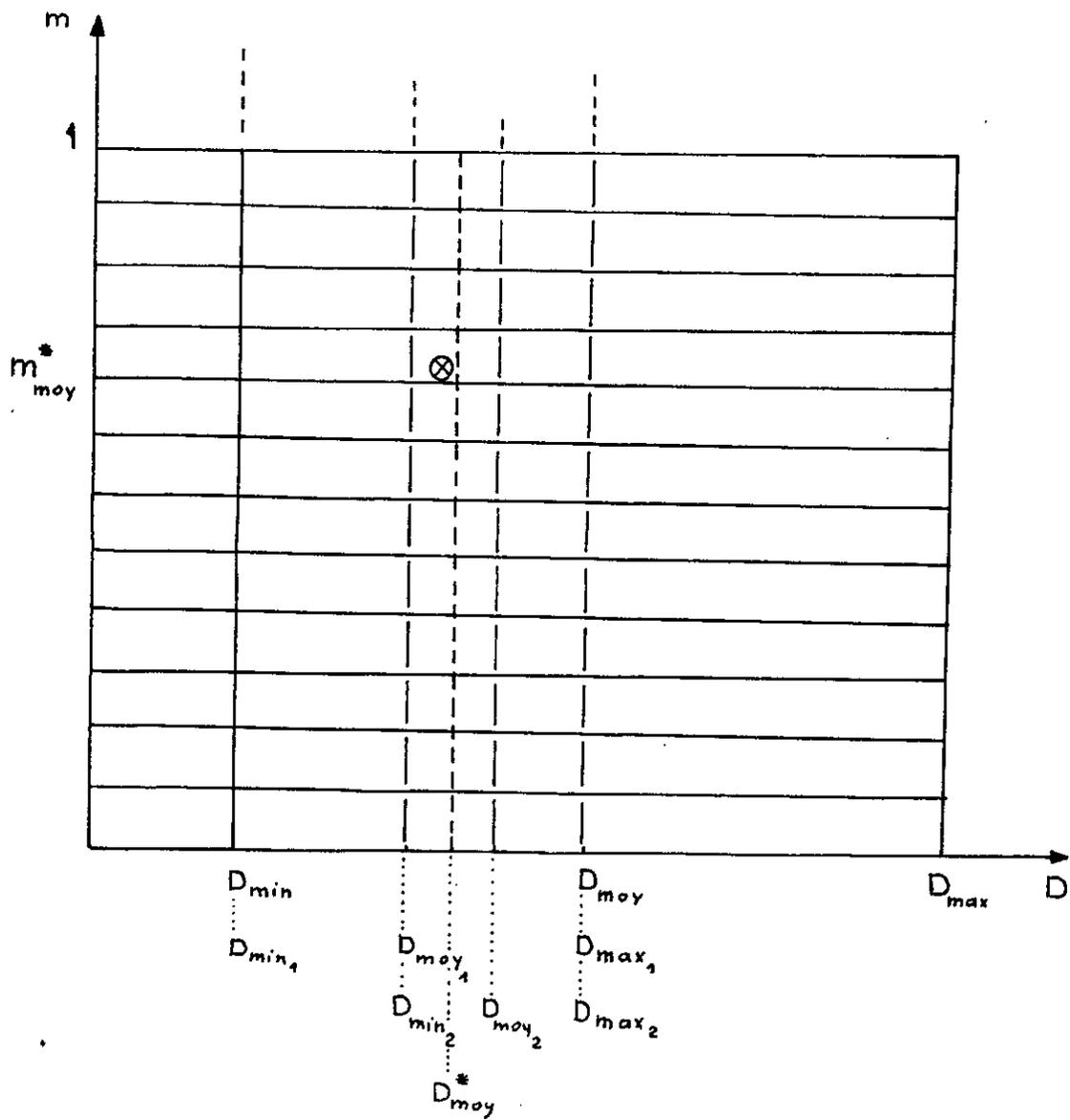


fig. III.4

Schéma illustratif du Réajustement.

### III.6.3 Algorithme de réajustement :

Posons

YE(J) : la valeur expérimentale de la concentration dans la phase liquide à l'instant j.

YT(J) : la valeur théorique

$D_{\max}$  et  $D_{\min}$  les valeurs extrêmes que peut prendre la valeur de D

$M_{\min}$  la valeur minimale que peut prendre la valeur de m.

Epsilon, l'erreur d'approximation à ne pas dépasser.

Etape 1 : Lire  $D_{\max}$ ,  $D_{\min}$ ,  $M_{\min}$ , les valeurs expérimentales YE et leurs nombre NL, K1 et N=1.

Etape 2 : Tester si  $(D_{\max} - D_{\min}) / D_{\max} \leq 0.05$  mettre  $K=K+1$  sinon étape 3.

Etape 3 : Varier M d'un pas :  $M = M_{\min} + K * 0.0001$

Etape 4 : Calculer  $D_{\text{moy}}$  (diviser l'intervalle de D en 2)  
 $D_{\text{moy}} = (D_{\max} + D_{\min}) / 2$

Etape 5 :  $D(1) = D_{\max}$ ,  $D(2) = D_{\text{moy}}$ ,  $D(3) = D_{\min}$

Etape 6 : Mettre  $D = D(N)$  et calculer les profils de concentration à l'aide du programme précédent.

Etape 7 : Identification des valeurs théoriques correspondants aux mêmes temps que les valeurs expérimentales, et calcul de l'erreur moyenne expérimentale par :

$$E(N) = \sum_{i=1}^{NL} |YE_i - YT_i| / YE_i \cdot NL$$

Etape 8 : Si  $N < 3$  mettre  $N = N+1$  retour à l'étape 6, sinon étape 9

Etape 9 : Calcul de l'erreur :  $ER = \text{Min}(E(1), E(2), E(3))$

Si  $ER = E(1)$  mettre  $D = D(1)$ , étape 10

Si  $ER = E(2)$  mettre  $D = D(2)$ , étape 10

Si  $ER = E(3)$  mettre  $D = D(3)$

Etape 10 : Si  $ER < \text{Epsilon}$  aller à l'étape 12, sinon étape 11

Etape 11 : Si  $E(1) > E(3)$  mettre  $D_{\max} = D(2)$ ,  $D_{\min} = D(3)$   
sinon  $D_{\max} = D(1)$ ,  $D_{\min} = D(2)$   
Aller à l'étape 2

Etape 12 : Pour la valeur de D calculer les concentrations à l'aide du programme précédent

Etape 13 : Imprimer M,D,X(L,J), Y(J), I=1,NI J=1,NJ

Etape 14 : STOP

# **CHAPITRE IV**

---

**Résolution des équations  
de transfert dans le cas où  
le coefficient de diffusion  
est variable**

## IV.1 Introduction

Dans le cas où le modèle avec un coefficient de diffusion constant ne représente pas bien l'expérience, on a proposé de critiquer l'hypothèse du premier modèle à savoir la constance du coefficient de diffusion et de la remplacer par l'hypothèse que  $D$  est variable.

La variation de coefficient de diffusion  $D$  rend l'équation aux dérivées partielles non linéaire.

Afin de conserver la caractéristique parabolique des équations de transfert, on a supposé une variation exponentielle de  $D$  en fonction de la concentration la formule proposée par [14] est :

$$D = D_0 \exp k \cdot \frac{c}{c_0}$$

L'hypothèse du modèle est donc (en plus des hypothèses du 1<sup>er</sup> modèle):  
Le coefficient de diffusion  $D$  est variable en fonction de la concentration.

Dans ce cas la 2<sup>ème</sup> loi de FICK s'écrit

$$\frac{\partial X(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \cdot D \cdot \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} \right] \quad (\text{IV.1})$$

Supposons une variation exponentielle du coefficient de diffusion avec la concentration de la forme

$$D = D_0 \cdot \exp \left( k \cdot \frac{X}{X_0} \right) = f(X) \quad (\text{IV.2})$$

où :

$D_0$  : coefficient de diffusion initial

$k$  : constante tel que à l'instant initial on a  $D = D_0 e^k$

En combinant entre (IV.1) et (IV.2), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial X(r,t)}{\partial t} &= \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \cdot f(X) \cdot \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} \right] \\ &= \frac{1}{r^2} \left[ 2r \cdot f(X) \cdot \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} + r^2 \left[ \frac{\partial f(X)}{\partial r} \cdot \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} + f(X) \cdot \frac{\partial^2 X(r,t)}{\partial r^2} \right] \right] \end{aligned}$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{2}{r} \cdot f(X) \cdot \frac{\partial X}{\partial r} + \frac{\partial f(X)}{\partial r} \cdot \frac{\partial X}{\partial r} + f(X) \frac{\partial^2 X}{\partial r^2}$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \left( \frac{2}{r} f(X) + \frac{\partial f(X)}{\partial r} \right) \frac{\partial X}{\partial r} + f(X) \frac{\partial^2 X}{\partial r^2}$$
(IV.3)

mais :

$$f(X) = D_0 \cdot \exp\left(k \cdot \frac{X}{X_0}\right)$$
(IV.4)

d'où

$$\frac{\partial f(x)}{\partial r} = \frac{k}{X_0} \cdot D_0 \exp\left(k \cdot \frac{X}{X_0}\right)$$
(IV.5)

En introduisant les équations (IV.5) et (IV.2) dans (IV.3), on obtient :

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \left[ \frac{2}{r} \cdot D_0 \cdot \exp\left(k \cdot \frac{X}{X_0}\right) + \frac{k D_0}{X_0} \exp\left(k \cdot \frac{X}{X_0}\right) \right] \frac{\partial X}{\partial r} + D_0 \exp\left(k \cdot \frac{X}{X_0}\right) \frac{\partial^2 X}{\partial r^2}$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = D_0 \exp\left(k \cdot \frac{X}{X_0}\right) \left[ \left( \frac{2}{r} + \frac{k}{X_0} \right) \frac{\partial X}{\partial r} + \frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \right]$$
(IV.6)

passons maintenant à la normalisation :

$$\tilde{X} = \frac{X}{X_0}, \quad \tilde{Y} = \frac{Y}{X_0}, \quad \eta = \frac{r}{R}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau}$$

L'équation (IV.6) devient :

$$\frac{X_0 \partial \tilde{X}}{\tau \partial \tilde{t}} = D_0 \cdot \exp(k \cdot \tilde{X}) \left[ \left( \frac{2}{R \cdot \eta} + \frac{k}{X_0} \right) \frac{X_0 \partial \tilde{X}}{R \partial \eta} + \frac{X_0 \partial^2 \tilde{X}}{R^2 \partial \eta^2} \right]$$

$$\frac{\partial \tilde{X}}{\partial \tilde{t}} = \frac{\tau \cdot D_0}{R^2} \exp(k \tilde{X}) \left[ \left( \frac{2}{\eta} + \frac{k \cdot R}{X_0} \right) \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 \tilde{X}}{\partial \eta^2} \right]$$
(IV.7)

D'autre part, nous avons l'équation qui décrit la concentration du soluté dans la phase liquide « solvant »

$$\frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{t}} = -\frac{3\tau}{R^2} \cdot D \left( \frac{V_t + V_s - V_l}{V_l} \right) \left( \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} \right)_{\eta=1}$$
(IV.8)

En introduisant la valeur de  $D=f(x)$  dans l'équation (IV.8) devient :

$$\frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{t}} = -\frac{3\tau}{R} \cdot D_0 \exp(k\tilde{X}) \left( \frac{V_t + V_s - V_l}{V_l} \right) \left( \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} \right)_{\eta=1} \quad (\text{IV.9})$$

Maintenant nous avons à résoudre un système de  $n$  équations aux dérivées partielles , et une équation différentielle composé par (IV.7 et IV.9).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \tilde{t}} &= \frac{\tau \cdot D_0}{R^2} \exp(k\tilde{X}) \left[ \left( \frac{2}{\eta} + \frac{k \cdot R}{X_0} \right) \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 \tilde{X}}{\partial \eta^2} \right] \\ \frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{t}} &= -\frac{3\tau}{R} \cdot D_0 \exp(k\tilde{X}) \left( \frac{V_t + V_s - V_l}{V_l} \right) \left( \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} \right)_{\eta=1} \end{aligned}$$

#### IV.2 : Discrétisation et calcul des concentrations:

Par combinaison des équations suivantes:

$$\frac{\partial \tilde{X}_i}{\partial \eta} = \frac{\tilde{X}_{i+1j} - \tilde{X}_{i-1j}}{2} (n-1) \quad (\text{IV.10})$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{X}_i}{\partial \eta^2} = (\tilde{X}_{i+1j} - 2\tilde{X}_{ij} + \tilde{X}_{i-1j}) (n-1)^2 \quad (\text{IV.11})$$

Les dérivées au centre et à la périphérie (voir annexe A)

$$\frac{\partial \tilde{X}_1}{\partial \eta} = 0$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{X}_1}{\partial \eta^2} = \frac{2}{3} (\tilde{X}_{3j} - X_{2j}) (n-1)^2 \quad (\text{IV.12})$$

$$\frac{\partial \tilde{X}_n}{\partial \eta} = (\tilde{X}_{nj} - \tilde{X}_{n-1j}) (n-1) \quad (\text{IV.13})$$

et

$$\frac{\partial \tilde{X}}{\partial \tilde{t}} = (\tilde{X}_{nj} - \tilde{X}_{n-1j}) / \Delta \tilde{t} \quad (\text{IV.14})$$

$$\frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{t}} = \frac{\tilde{Y}_{j+1} - \tilde{Y}_j}{\Delta\tilde{t}} \quad (\text{IV.15})$$

Les conditions aux limites et initiales sont :

$$\tilde{Y}(0) = \frac{Y_0}{X_0}$$

$$\tilde{X}(\eta, 0) = 1$$

$$\tilde{X}(1, \tilde{t}) = \frac{\tilde{Y}(\tilde{t})}{m}$$

$$\left( \frac{\partial X(\eta, \tilde{t})}{\partial \eta} \right)_{\eta=0} = 0 \quad \text{et } \eta_i = \frac{i-1}{n-1}$$

#### IV.2.1 Evolution de la concentration au centre de la particule :

En utilisant les équations (IV.7, IV.12, IV.16), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{X}_{1,j+1} - \tilde{X}_{1j}}{\Delta\tilde{t}} &= \frac{\tau D_0}{R^2} \exp(k\tilde{X}_{1j}) \left[ \frac{2}{3} (\tilde{X}_{3j} - \tilde{X}_{2j}) (n-1)^2 \right] \\ \Rightarrow \tilde{X}_{1,j+1} &= \tilde{X}_{1j} + \frac{2}{3} \frac{\tau \Delta\tilde{t} \cdot D_0}{R^2} (n-1)^2 \cdot \exp(k\tilde{X}_{1j}) \cdot (\tilde{X}_{3j} - \tilde{X}_{2j}) \\ \tilde{X}_{1,j+1} &= \tilde{X}_{1j} + \frac{2}{3} \cdot B(1) \cdot B(2) \cdot \exp(k\tilde{X}_{1j}) (\tilde{X}_{3j} - \tilde{X}_{2j}) \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned} B(1) &= \frac{\Delta\tilde{t} \cdot \tau \cdot D_0}{R^2} \\ B(2) &= (n-1)^2 \end{aligned}$$

#### IV.2.1 Evolution de la concentration entre le centre et l'interface:

En utilisant les équations (IV.7, IV.10, IV.11, IV.16), on obtient :

$$\tilde{X}_{ij+1} = \tilde{X}_{ij} + B(1) \cdot \exp(k \cdot \tilde{X}_{ij}) \left[ B(6) \cdot \tilde{X}_{i+\lambda, j} + B(7) \cdot \tilde{X}_{i-1, j} - 2B(2) \cdot \tilde{X}_{ij} \right] \quad (\text{IV.17})$$

avec :

$$B(3) = (n-1)^2 \cdot \frac{i}{(i-1)}$$

$$B(4) = (n-1)^2 \frac{(i-2)}{(i-1)}$$

$$B(5) = \frac{k \cdot R \cdot (n-1)}{2X_0}$$

$$B(6) = B(3) + B(5)$$

$$B(7) = B(4) - B(5)$$

### IV.3 Evolution de la concentration dans la phase liquide:

En utilisant les équations (V.9, V.13, V.15), on obtient :

$$\frac{\tilde{Y}_{j+1} - \tilde{Y}_j}{\Delta \tilde{t}} = \frac{-3 \cdot \tau \cdot D_0}{R} \left( \frac{V_t + V_s + V_l}{V_l} \right) \exp(k \cdot \tilde{X}_{Nj}) (\tilde{X}_{Nj} - \tilde{X}_{N-1j}) (n-1)$$

⇒

$$\tilde{Y}_{j+1} = \tilde{Y}_j - \frac{3 \cdot \Delta \tilde{t} \cdot \tau D_0}{R} (n-1) \left( \frac{V_t + V_s}{V_l} - 1 \right) \exp(k \tilde{X}_{Nj}) (\tilde{X}_{Nj} - \tilde{X}_{N-1j})$$

⇒

$$\tilde{Y}_{j+1} = \tilde{Y}_j + B(8) \exp(k \tilde{X}_{Nj}) (\tilde{X}_{Nj} - \tilde{X}_{N-1j}) \quad (\text{IV.18})$$

avec :

$$B(8) = -3 \cdot R \cdot (n-1) \cdot \left( \frac{V_t + V_s}{V_l} - 1 \right) \cdot B(1)$$

### IV.4 Evolution de la concentration à la périphérie, à partir de la condition d'équilibre à l'interface :

D'après l'hypothèse 6 ( chapitre II ) :

$$\tilde{X}_{Nj+1} = \frac{1}{m} \cdot \tilde{Y}_{j+1} \quad (\text{IV.19})$$



# **CHAPITRE V**

---

**Applications**  
**Résultats**  
**Commentaires**

La résolution des équations de transfert avec D constant présentée au paragraphe III.4 permet de fournir à l'identificateur les valeurs théoriques des concentrations dans la phase liquide qui seront comparées aux valeurs expérimentales.

Le réajustement présenté au paragraphe III.6 permet d'estimer les valeurs de D et M qui donnent la plus faible erreur possible.

Quant à l'utilisation du programme présenté au chapitre IV permettrait de mieux représenter le processus avec une meilleure précision.

Aussi les paramètres à fournir à ces programmes sont :

-NI : La valeur de la discrétisation de la variable spatiale , elle influe sur la précision de la représentation physique , et sur la rapidité de résolution numérique nous avons choisi de prendre une valeur de NI = 20.

-NJ:

La valeur du pas de discrétisation de la variable temporelle qui est liée à NI par la condition de stabilité [III.5].

$$NJ \geq 2F_0(NI - 1)^2 + 1$$

Nous avons choisi  $N_j = 100$  qui est loin de la limite de stabilité lors de la vérification à l'aide de stabilité des expériences de [1].

- $V_1, V_s, V_t$  : volumes mesurés expérimentalement.

- $X_0, Y_0$

La concentration initiale du solvant est bien sûr connue :Elle est nulle en début d'essai , et au cours du temps , elle est déterminée par les éventuels prélèvements ; par contre la teneur initiale en soluté dans le solide est un paramètre primordial mal maîtrisé :

Pour cela nous avons donné plusieurs hypothèses sur la concentration initiale  $X_0$  qui n'a pas une grande influence sur les résultats de la modélisation des concentrations dans la phase liquide (figure V.1).

On doit fournir à notre programme les paramètres suivants :

- $D_{\max}, D_{\min}$  :

L'intervalle de D : Il faut noter que le choix de cet intervalle influe peu sur le temps de résolution numérique vue la méthode utilisée pour balayer cet

intervalle , cependant il peut influencer sur la condition de stabilité ; le programme signalera tout de suite cet influence et permettra à l'utilisateur de choisir des valeurs permettant la stabilité de la solution.

- $m_{\min}$  :

La valeur minimale du coefficient d'équilibre

-R: Le rayon de la particule

- : Le temps final de l'expérience

-Epsilon : l'erreur tolérée par l'écart entre les valeurs expérimentales et théoriques

.En sortie le programme fournit :

- Les paramètres D et m

-La concentration en soluté dans le solide et dans le solvant au cours de temps.

-Dans notre cas où le modèle avec D constant représente mal le phénomène physique observé , on peut utiliser l'autre modèle , c'est à dire celui qui suppose la variation du coefficient du diffusion en fonction de la concentration , et pour gagner du temps on pourra utiliser les valeurs de D et m issues du premier programme comme paramètres d'entrée de notre programme avec D variable.

### **V-1 Application au cas de l'extraction des PYRETHRINES [1] :**

On a supposé au départ un coefficient de diffusion constant , et on a injecté (afin de valider notre programme ) les valeurs théoriques de D et m trouvées dans [1] pour plusieurs valeurs de  $X_0$  et on a comparé avec les valeurs théoriques et expérimentales à 20°C données par la référence [1].

On a obtenu le graphe de la figure V-1

En comparant les valeurs théoriques fournies par notre programme et celles de la référence [1] ( voir figure V.2) ,on voit bien une concordance entre les deux courbes théoriques et qu'elles convergent vers la même valeur finale , toutefois un écart existe , il est dû à la différence des méthodes utilisées pour les résolutions des équations de transfert .

Mais la comparaison avec les valeurs expérimentales , montre une convergence entre 7 et 20% , le réajustement permet de diminuer cet écart et de fournir les paramètres D et m du modèle qui traduisent mieux l'expérience.

Après un réajustement , on obtient la figure V.3 et les paramètres D et m identifiées sont données dans le tableau V.1 pour différentes erreurs imposées. Les valeurs obtenues par [1] sont données dans le tableau V-2.

Voici les valeurs des paramètres injectées dans le programme qui ont été évalués par [1].

R = 0.1 cm  
 Tho = 3600 s  
 $V_1 = 450$  ml  
 $V_1 = 388$  ml  
 $V_8 = 18$  ml  
 $X_0 = 4000, 6500, 1000$  [mg/l]  
 $Y_0 = 0.0$  [mg/l]

On a obtenu les profils de concentration dans le solide pour différentes valeurs de  $X_0$  , V.4 , V.5 , V.6. Les profils de concentration trouvées par [1] sont données dans la figure V.7.

**Tableau V.1 Valeurs des paramètres de D et m du système fournies par le programme de réajustement dans le cas du modèle à D constant lors de l'extraction des pyrethrines :**

X0(mg/l)	D( $10^{-7}$ cm <sup>2</sup> /s)	m ( $10^{-2}$ )	Erreur relative (%)
10000	1.5	0.8	11.7
	1.4	1.0	6.7
6500	2.0	1.4	11.7
	2.1	1.4	9.8
4000	3.4	2.3	12.2
	3.3	2.9	4.7

**Tableau V.2 Valeurs des paramètres trouvées par HAUNOLT lors de l'extraction des pyréthrines[1] :**

	D( $10^{-7}$ cm <sup>2</sup> /s)	m ( $10^{-2}$ )
10000	0.7	1.2
6500	1.3	1.9
4000	3.3	3.3

## V-2 Application au cas de l'extraction des concrètes de bois de cèdre[3]:

L'extraction des concrètes de bois de cèdre à l'hexane, étudiée par EL-HATTAB [3], a donnée les resultats sous forme de  $Y_E(t)/Y$  pour cela on fait la normalisation en supposant qu'à l'équilibre la concentration finale dans la phase liquide Y est telle que

$$X_0 = Y_0 / m$$

D'où

$$Y_E(t)/X_0 = (Y_E(t)/Y_0) \cdot m$$

A partir de ces valeurs normalisées on fait un réajustement avec les valeurs suivantes:

$m_{min} = 0.20$

$D_{min} = 1.E-8 \text{ cm}^2/\text{s}$

$D_{max} = 4.E-8 \text{ cm}^2/\text{s}$

$R = 0.03 \text{ cm}$

$THO = 14400 \text{ s}$

$V_t = 600 \text{ ml}$

$V_l = 460 \text{ ml}$

$V_s = 300 \text{ ml}$

$X_0 = 35000 \text{ mg/l}$

$Y_0 = 0.0 \text{ mg/l}$

On obtient alors les résultats portés sur la figure V.9.

La valeur de  $X_0$  influe peu puisqu'on a travaillé avec des valeurs normalisées.

Les valeurs de  $D$  et  $m$  fournies par le programme sont portées dans le tableau V-3.

Pour le deuxième modèle (coefficient de diffusion variable) on a obtenue les résultats présentées dans la figure V-10.

La valeur de  $k$  étant diminuée de 100 avec un pas de (-1) jusqu'à ce que l'erreur devienne acceptable .Nous avons trouvé pour  $k = (-4)$  une erreur de 7%.

**Tableau V.3 : Valeurs des paramètres D et m fournies par le programme de réajustement dans le cas du modèle à D constant lors de l'extraction des concrètes du bois du cèdre**

	D( $10^{-7}$ cm <sup>2</sup> /s)	m	Erreur relative
1er modèle avec réajustement	<b>0.15</b>	<b>0.31</b>	<b>4.71</b>

### V.3 Commentaires :

Après examen des figures ; on constate que les résultats obtenus sont similaires à ceux donnés par HAUNOLD [1] . Nous pouvons appliquer notre programme au cas de l'extraction des concrètes de bois de cèdre. Dans ce cas là le programme donne  $D = 1.5 \cdot 10^{-8}$  cm<sup>2</sup>/s et  $m = 0.31$  ces valeurs correspondent en effet aux valeurs trouvées par la méthode analytique [15 ] qui sont de  $1.4 \cdot 10^{-8}$  cm<sup>2</sup>/s pour D et 0.3 pour m.

Toutefois les courbes théoriques obtenues et représentées dans la figure V.9 montrent une bonne concordance jusqu'à un temps de 2 heures , au delà une erreur apparait.

Aussi avons-nous appliqué le deuxième modèle à savoir avec D variable , dans ce cas les profils de concentration sont donnés par la figure V.10 qui montre que l'écart entre points expérimentalement et courbe théorique sont faibles durant toute l'expérience.



# **CONCLUSION**

---



Notre étude axée sur la simulation du phénomène de transfert de matière lors de l'extraction des concrètes végétales ; permet de suivre l'évolution de la concentration en soluté dans les deux phases solide et liquide.

Nous sommes parvenus à la mise en oeuvre d'un outil mathématique constitué par deux modèles avec comme différence l'hypothèse de constance ou non du coefficient de diffusion de D.

Le modèle établi dans le cas d'une diffusion avec un coefficient constant semble bien représenter l'extraction d'un constituant ( cas de l'extraction des pyrethrines) ce qui nous a permis de valider notre programme.

Afin d'appliquer ce programme à d'autres résultats expérimentaux , il nous est apparu nécessaire de créer un programme de réajustement permettant la détermination des paramètres de l'expérience même si les données expérimentales sur ces derniers (D,m) ne sont pas fiables .Cependant , il faut noter qu'il est nécessaire de vérifier la stabilité de l'Algorithme par rapport aux paramètres d'entrée du programme .

Le second modèle ( avec D variable ) représente mieux le processus d'extraction dans le cas des concrètes végétales qui sont en fait un mélange de constituants.

Nous pensons enfin qu'un effort doit être consacré à l'amélioration des données expérimentales ainsi qu'à une évaluation des performances du modèle.

## NOMENCLATURE

a : aire de contact	$L^2$
A(I) : constantes de l'algorithme de résolution du 1er modèle	-
B(I) : constantes de l'algorithme de résolution du 2ème modèle	-
C : concentration	$ML^{-3}$
D : Coefficient de diffusion	$L^2T^{-1}$
Epsilon : précision imposé	
E : Erreur relative	
$F_0$ : nombre de FOURIER	adimensionnel
f : fonction derivable sur R	
i : indice de la variable spatiale	adimensionnel
j : indice de la variable temporelle	adimensionnel
k : constante	adimensionnel
M : coefficient de partage	adimensionnel
NI : nombre de pas de discrétisation en espace	adimensionnel
NJ : nombre de pas de discrétisation en temps	adimensionnel
NL : nombre de valeurs expérimentales	adimensionnel
$N_p$ : nombre de particules	adimensionnel
r : position radiale dans une particule	L
R : rayon des particules	L
t : variable temporelle	T
$\tilde{t}$ : temps réduit	adimensionnel
$V_l$ : volume de solvant libre	$L^3$
$V_s$ : volume de solide sec	$L^3$
$V_t$ : volume total de solvant contacté	$L^3$
X : concentration locale d'une particule	$ML^{-3}$
$\tilde{X}$ : concentration réduite	adimensionnel
Y : concentration dans le solvant	$ML^{-3}$

$\tilde{Y}$  : concentration réduite

adimensionnel

Lettres grecques :

$\Delta r$  : intervalle de discrétisation radiale

L

$\eta$  : coordonnée radiale réduite

adimensionnel

$\Delta \eta$  : intervalle de discrétisation radiale réduite

adimensionnel

$\rho$  : masse volumique

$ML^{-3}$

$\tau$  : temps final de contact

T

Exposant

\* optimal

Indices

0 initial

moy moyen

max maximale

Min minimale

## **Bibliographie**

- [1] C. HAUNOLD , *These de doctorat* , I.N.P Toulouse , (1991).
- [2] P. FREMAUX , J. LEYBROS. , *Extraction solide-liquide*, Techniques de l'ingénieur J2780,(9-1990).
- [3] M. EL-HATTAB , These de magister , E.N.P , Département de génie chimique , ALGER (1993).
- [4] R. B. BIRD , W. E. STEWART,E. N. LIGHTFOST , *Transport phenomena* , ed Wiley International , New York , (1960).
- [5] O. M. ANGELIDIS, *Revue des oleagineux*, 8,9, Août , Sept (1968).
- [6] O. M. ANGELIDIS, *Revue des oleagineux*, 11,Nov (1968).
- [7] D. DEFIVES , *Transfert de matière* , « *efficacité des opérations du génie chimique* » ,Ed TECHNIP, PARIS ,(1976).
- [8] E.H. BENYOUCEF, Thèse de Magister, ENP, département de génie chimique , ALGER,(1990).
- [9] J. P. NOUGIER , «*Méthodes de calcul numérique* » ,Ed MASSON , PARIS (1991).
- [10] J.H. FERZIGER , « *Numerical Methods for engineering application* » , Ed JOHN WHILEY & SONS , New York , (1981).
- [11] B. CARNAHAN, H.a. LUTHER, J.O. WILKES, « *Applied numerical methods* » , JOHN WHILEY & SONS , New York , (1969).

[12] A. GOURDIN, M. BOUMAH RAT , « *Méthodes numériques appliquées* », Ed OPU 2<sup>nd</sup> ed , ALGER(1991).

[13] J. CRANK , « *The mathematics of diffusion* », Ed CLARENDON PRESS, OXFORD, (1975).

[14] J. H. KRASUK , J. L. LOMBARDI , C. D. OSTROVSKY , « *Diffusion extraction of oil containing materials* » I & EC Process design and developpement , Vol 6 , n° 2 , avril (1967).

[15] R. BELABES , R DERRICHE , M. EL-HATTAB,  
Communication au 1er séminaire du génie des procédés ,Alger fevrier (1994).

## ANNEXES ET FIGURES

## FIGURES DU CHAPITRE V

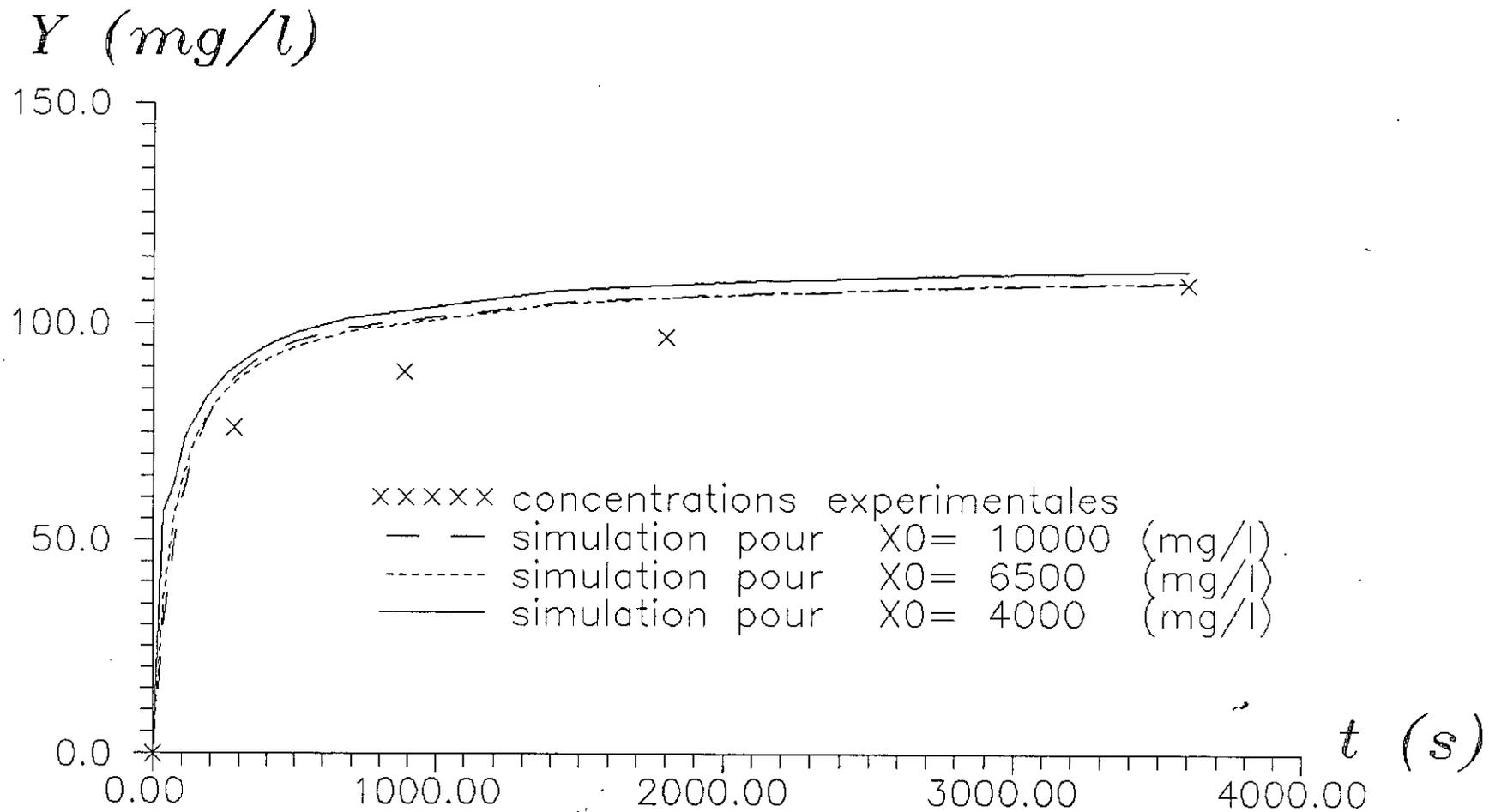
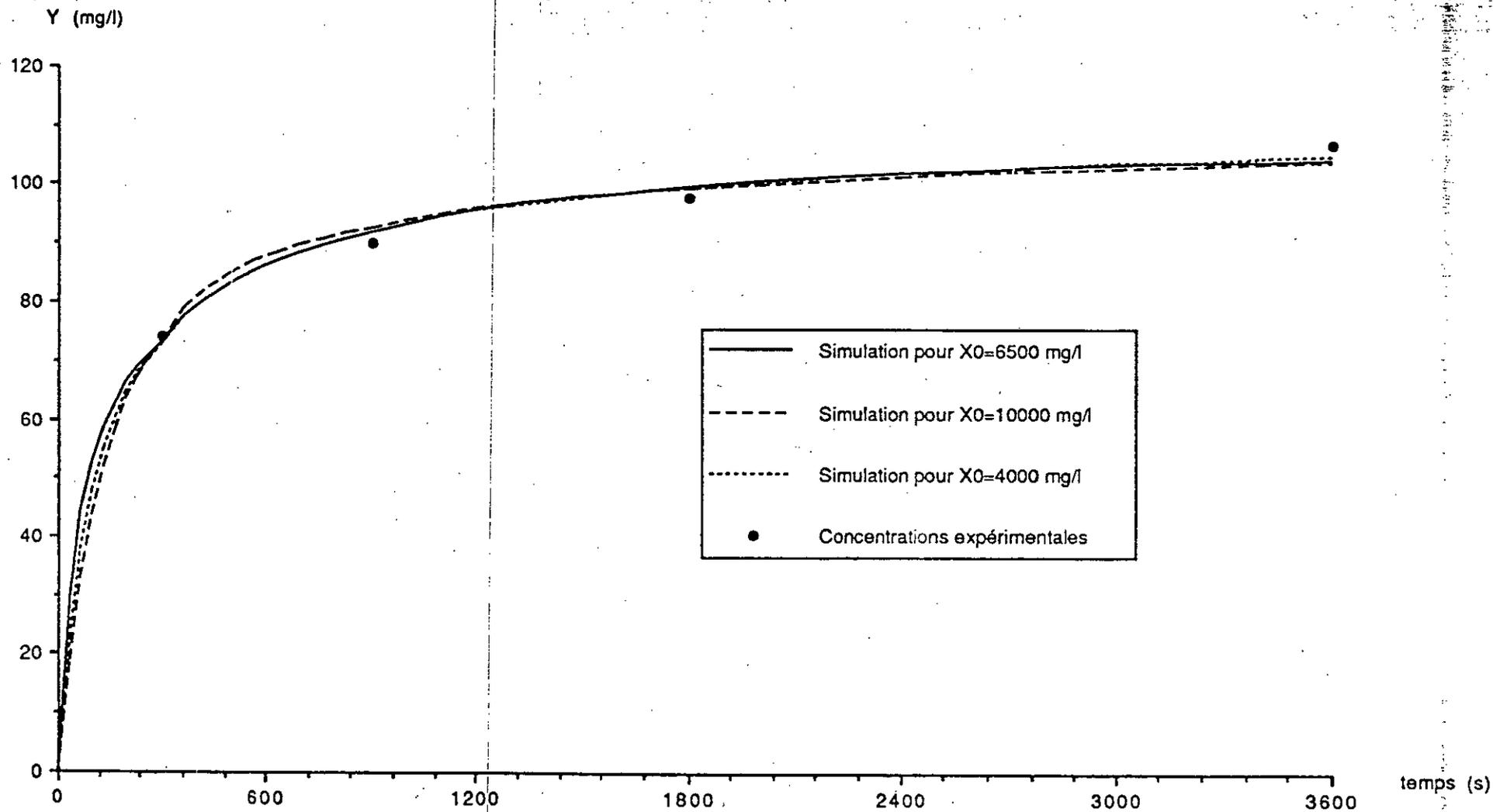


Figure V-1: Profils experimentaux et simules de concentration dans le solvant pour plusieurs hypotheses sur la valeur de  $X_0$  (modele 1) dans le cas de l'extraction des pyrethrines



**Figure V.2 : Profils expérimental et simulés de concentration dans le solvant pour une température de 20°C et plusieurs hypothèses sur la valeur de  $X_0$**

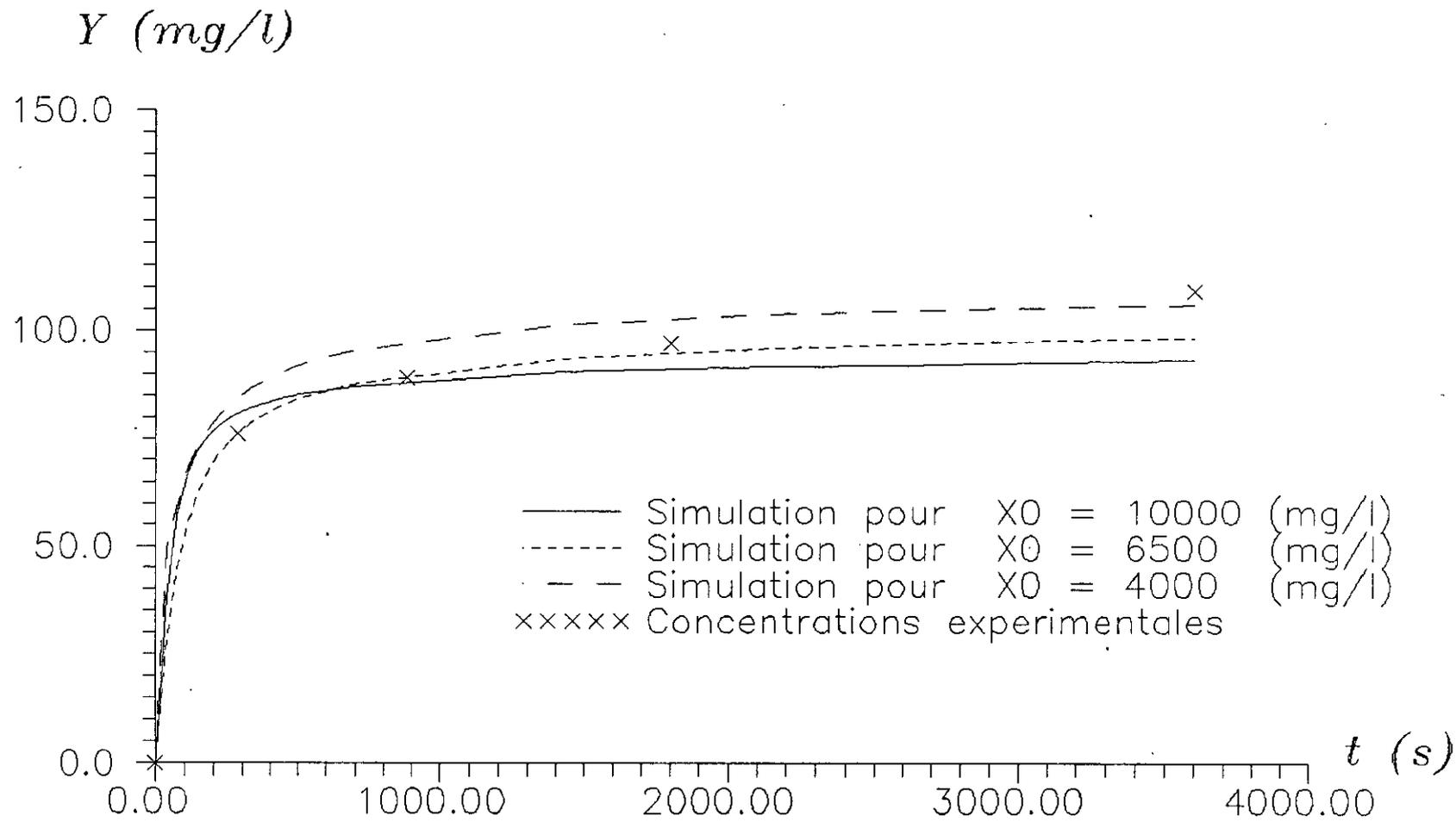


Figure V.-3: Profils experimentaux et simules de concentration dans le solvant pour plusieurs hypotheses sur  $X_0$  (modele 1) apres reajustement dans le cas de l'extraction des pyrethrines

$X / X_0$

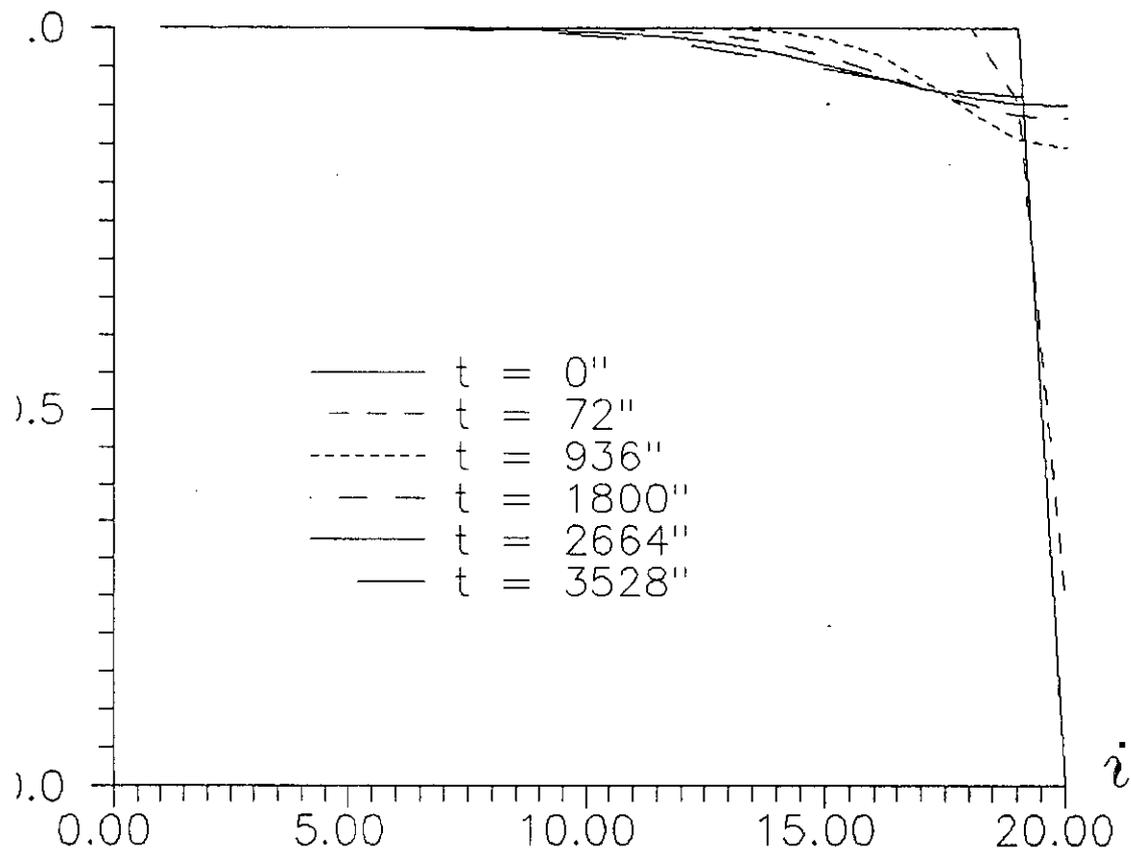


Figure V-4: Profils de concentration dans le solide a differents instants pour  $X_0 = 10000$  (mg/l) dans le cas de l'extraction des pyrethrines

$X / X_0$

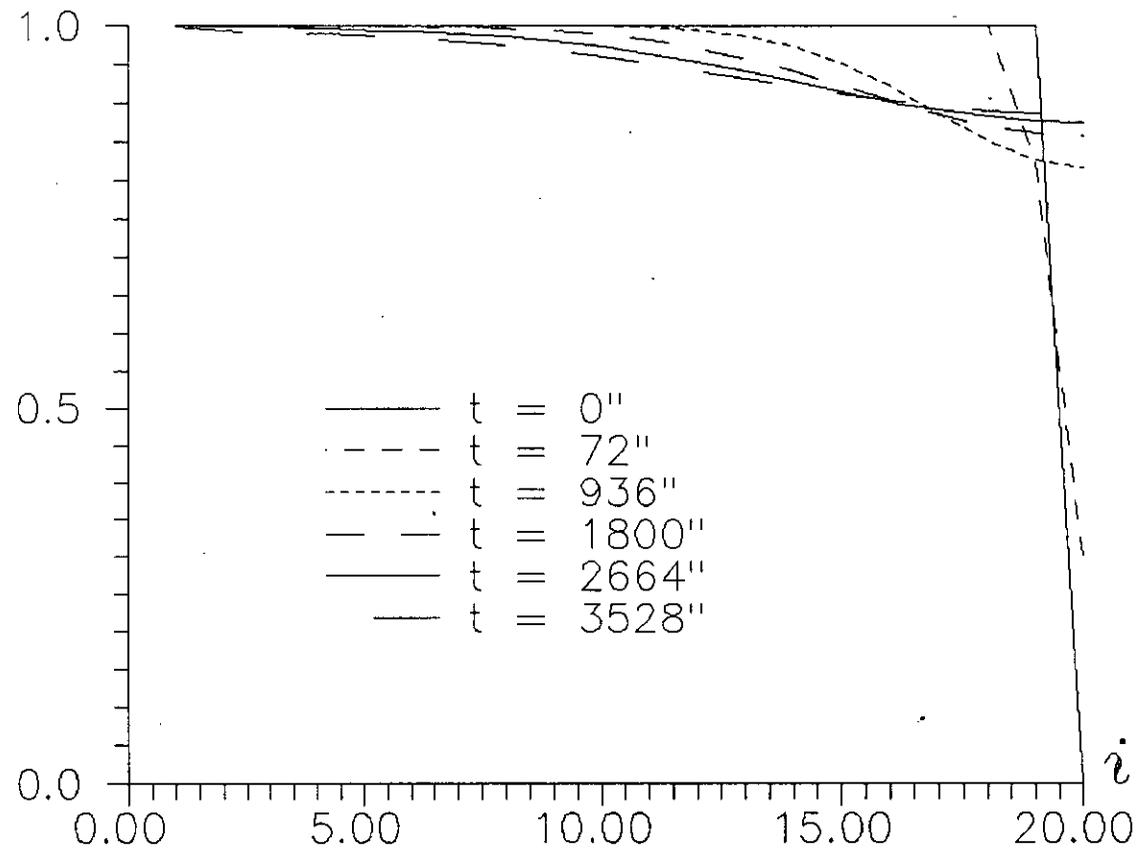


Figure V.-5: Profils de concentration dans le solide a differents instants pour  $X_0 = 6500$  (mg/l) dans le cas de l'extraction des pyrethrines

$X / X_0$

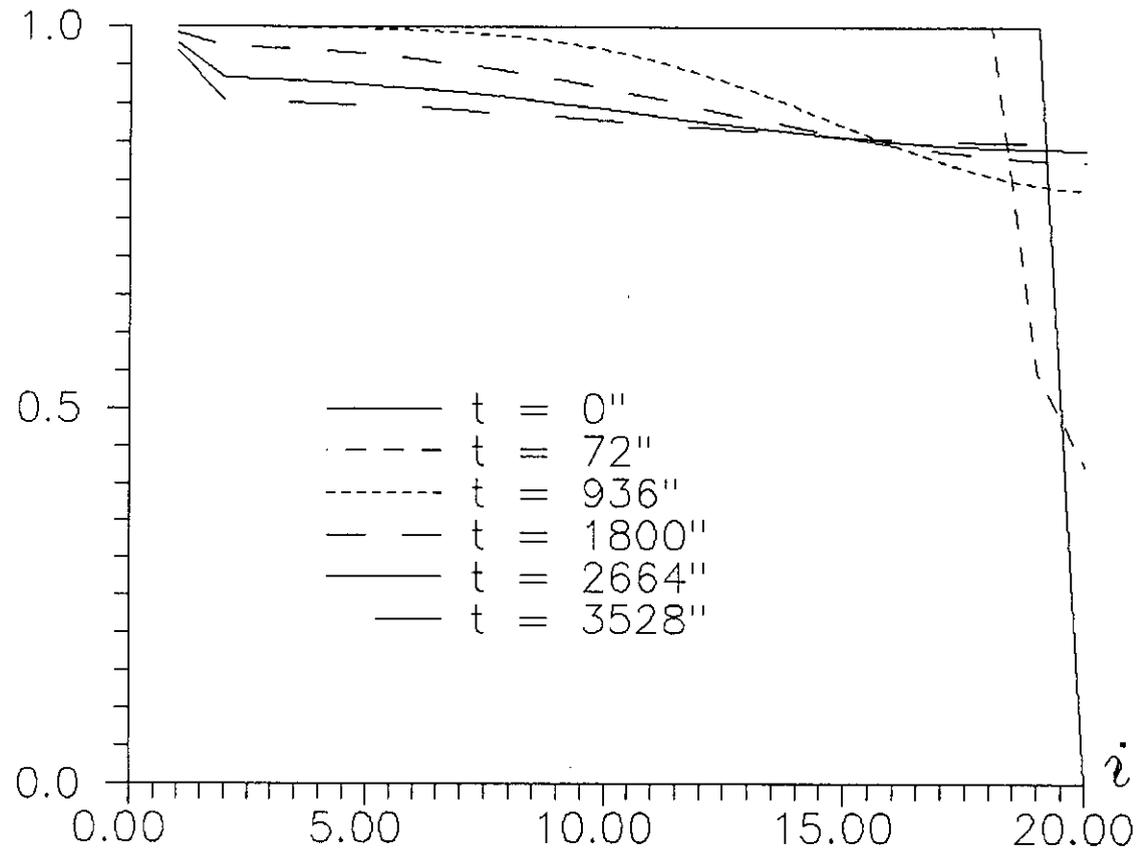
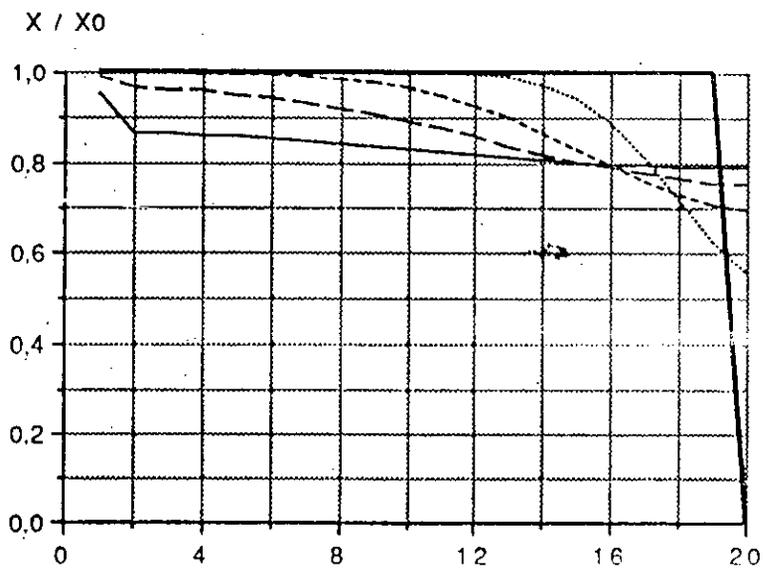
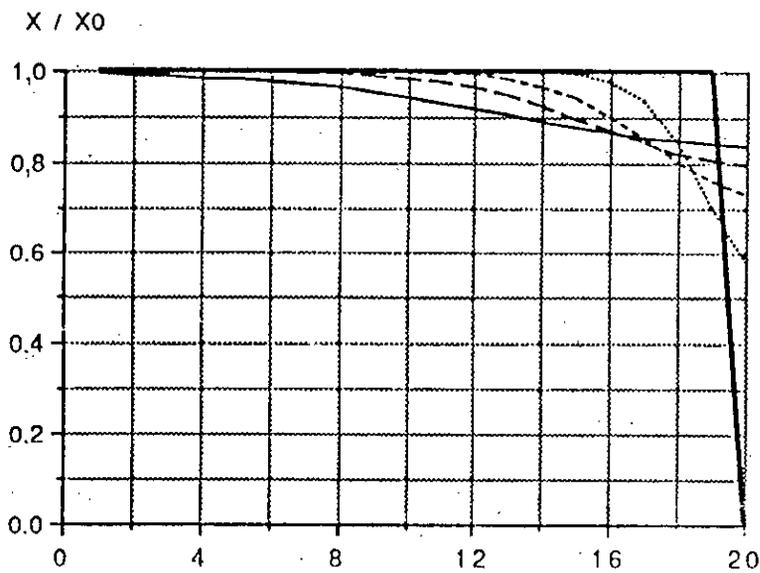
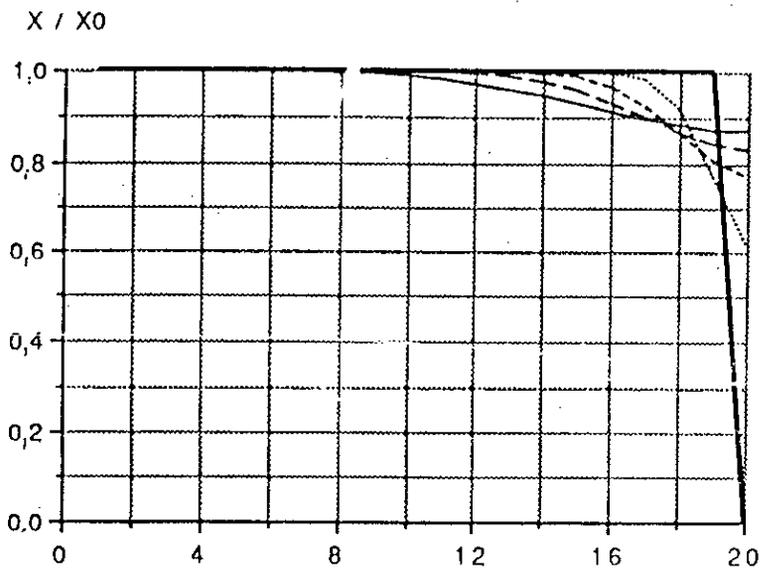


Figure V-6: Profils de concentration dans le solide a differents instants pour  $X_0 = 4000$  (mg/l) dans le cas de l'extraction des pyrethrinés



**Figure V-7 ; Simulation des profils de concentrations relatives dans le solide ( $X_i(t)/X_0$ ) pour l'expérience à  $20^\circ\text{C}$  et plusieurs valeurs de  $X_0$**

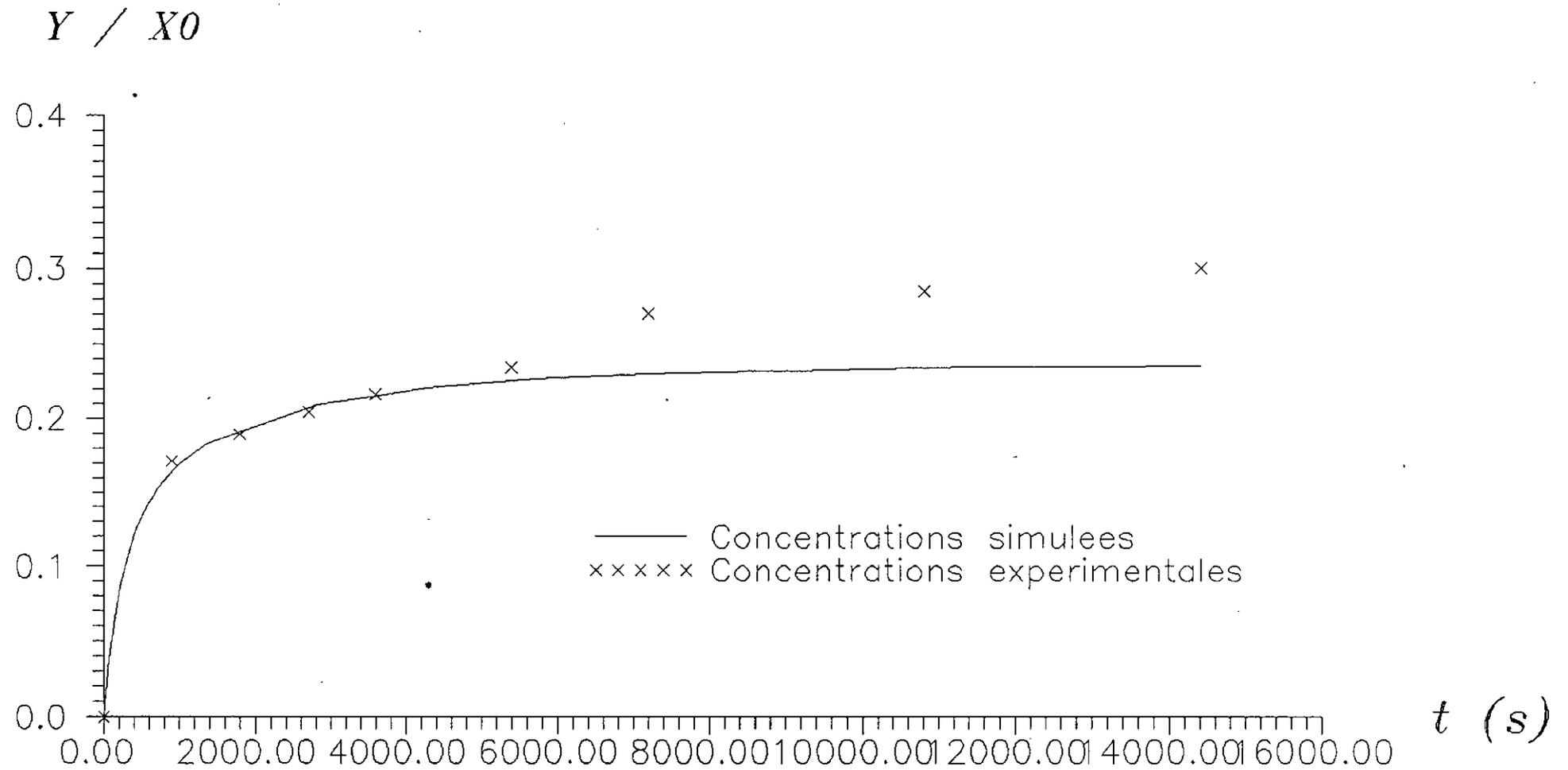


Figure V-9: Profils expérimentaux et simulés de concentration dans le solvant (modèle 1) après réajustement dans le cas de l'extraction des concretes de bois de cedre de l'Atlas

$Y / X_0$

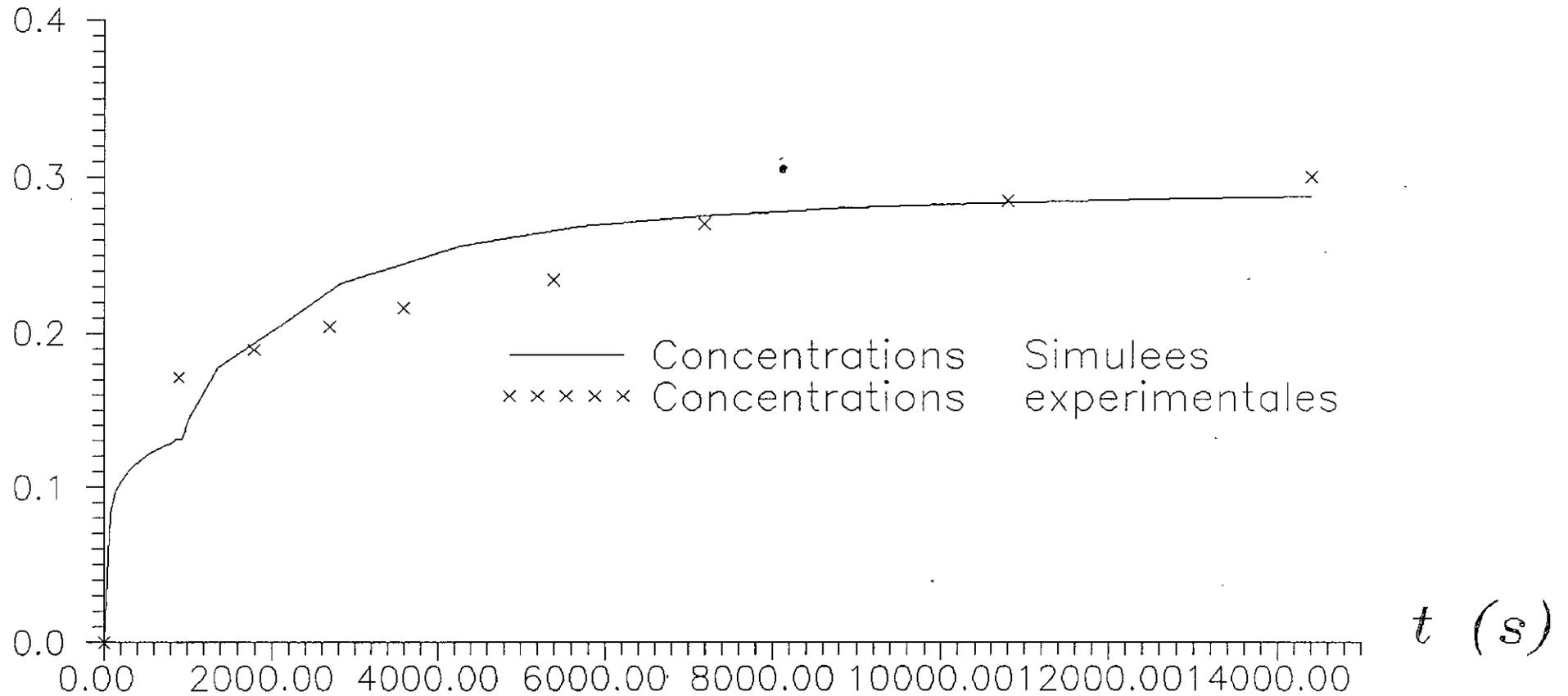


Figure V-10: Profils experimentaux et simulés de concentration dans le solvant (modèle 2) dans le cas de l'extraction des concretes de bois de cedre de l'Atlas

## Annexe A

### Rappel sur les différences finies et le développement des fonctions en série de Taylor

#### I. Utilisation des différences finies à droite (progressives). [4] Dérivées successives de $f(x)$ en $x_j$ à l'ordre 1 en $h$ .

##### I.1 Calcul de $f'_1$ :

On développe  $f(x+h)$  en série de Taylor à l'ordre 1 :

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots$$
$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} f''(x) + \dots = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$$

En posant :

$$\begin{cases} f(x) = f_i \\ f(x+h) = f_{i+1} \end{cases}, \quad \begin{cases} f(x-h) = f_{i-1} \\ f(x+2h) = f_{i+2} \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} f'_i = \frac{\partial f}{\partial x} \\ f''_i = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \end{cases}$$

On obtient :

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + O(h) \quad (1)$$

où :  $O(h)$  est un reste non nul .

##### I.2 Calcul de $f''_1$ (seconde dérivée). [9]

On développe  $f(x+h)$  et  $f(x+2h)$

$$\begin{cases} f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) + \dots \\ f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + \frac{8h^2}{6} f''(x) + \dots \end{cases}$$

En multipliant ces deux équations respectivement par  $(-2)$  et  $(1)$ , et on fait la somme, on trouve :

$$f''(x) = \frac{f(x) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{h^2} - hf''(x)$$

On obtient la 2<sup>ème</sup> dérivée :

$$f_i'' = \frac{f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2}}{h^2} + O(h) \quad (2)$$

### I.3 Utilisation des différences à gauche (régressives). [9]

On opère comme précédemment, mais à partir du développement de  $f(x-h)$  au lieu de  $f(x+h)$ .

On obtient :

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + O(h)$$

Cette équation est utilisée pour le développement à l'interface, elle devient :

$$f_N' = \frac{f_N - f_{N-1}}{h} + O(h) \quad (3)$$

### II.1 Utilisation des différences centrées :

Pour calculer  $f_i'$ , on utilise les points situés de part et d'autre de  $X_i$ , pour cela on considère les deux développements :

$$f(X+h) = f(X) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(X) + \frac{h^3}{3!} f'''(X) + \dots$$

$$f(X-h) = f(X) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(X) - \frac{h^3}{3!} f'''(X) + \dots$$

puis on calcule :

$$f(X+h) - f(X-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{3} f'''(X) + \dots$$

d'où :

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(x) + \dots$$

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2)$$

pour le calcul de  $f_i''$ , on fait  $f(x+h) + f(x-h)$

d'où :

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f''''(x) + O(h^4)$$

on tire :

$$f_i'' = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2} \quad (4)$$

## II.2 Développement à l'extrémité coté centre :

pour cela  $i = 1$  , et en posant :

$$f(X) = f_1$$

$$f(X+h) = f_2$$

$$f(X+2h) = f_3$$

on tire :

$$f_2 = f_1 + hf_1' + f_1'' h^2 / 2$$

$$f_3 = f_1 + 2hf_1' + 2f_1'' h^2$$

dans notre cas on a l'hypothèse

$$f_1' = 0$$

d'où

$$f_1'' = \frac{2}{3} \cdot \frac{(f_3 - f_2)}{h^2} \quad (5)$$

## Annexe B

On peut écrire une seule équation pour le sphère et le plan en introduisant un

$$\text{paramètre de forme } v = \begin{cases} 1 \text{ plan} \\ 2 \text{ cylindre} \\ 3 \text{ sphère} \end{cases}$$

les équations seraient :

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \tau} = F_0 \left[ \frac{\partial^2 \tilde{X}}{\partial n^2} + \frac{v-1}{\eta} \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} \right] \\ \frac{dY}{dt} = -v F_0 \left( \frac{V_t + V_s}{V_l} - 1 \right) \left( \frac{\partial \tilde{X}}{\partial \eta} \right)_{\eta=1} \end{cases}$$

car on a montré que pour une sphère

$$a = \frac{3(V_s + V_t - V_l)}{R}$$

pour un plan, on aura :

une particule  $V_p = A_p \times 2l$

aire d'une particule :  $2A_p$ , on néglige la surface latérale

$$a = N_p \times 2A_p$$

$$N_p = \frac{\text{Volume humide}}{2l A_p}$$

$$a = \frac{\text{Volume humide}}{l} = \frac{V_s + V_t - V_l}{l}$$

$$a = \frac{v}{R} (V_s + V_t - V_l)$$

pareil pour un cylindre de longueur  $L$  :  $A_p = 2\pi R \cdot L$

$$\left. \begin{aligned} a &= N_p \cdot A_p \\ N_p &= \frac{V_{\text{humide}}}{\pi R^2 L} \end{aligned} \right\} \Rightarrow a = \frac{2V_{\text{humide}}}{R}$$

## Annexe C Suggestions

I: En fait la méthode la plus rigoureuse serait la méthode des moindres carrés dont nous donnons les principes de départ pour un éventuel développement dans le futur.

Dans cette méthode les paramètres à ajuster doivent varier selon la technique proposée [GOURDIN,BOUMAH RAT].

$$D = D + R_1$$

$$m = m + R_2$$

$R_1, R_2$  sont les résidus

La détermination de  $R_1$  et  $R_2$  s'obtient par la résolution d'un système d'équations à 2 inconnues .

$$Y - f(t, D, m) - \nabla f \cdot R = e$$

$y$ : valeur expérimentale

$f(t, D, m)$  = valeur du modèle

$$\nabla f = \begin{cases} \left. \frac{\partial f(t_j, D)}{\partial D} \right|_{t_j} \\ \left. \frac{\partial f(t_j, m)}{\partial m} \right|_{t_j} \end{cases}$$

Le problème qui se pose à nous est la connaissance de l'expression  $f$  d'où la difficulté à déterminer  $\frac{\partial f}{\partial D}$  et  $\frac{\partial f}{\partial m}$  ; nous proposons alors le calcul par approximation à savoir qu'on posera  $\frac{\partial f}{\partial D} = \frac{\Delta f}{\Delta D}$  et  $\frac{\partial f}{\partial m} = \frac{\Delta f}{\Delta m}$  pour chaque  $t$  donné

On procédera donc par itération :

$D(k) = D(k-1) + R_1(k)$  jusqu'à ce que l'écart entre deux erreurs successives soit inférieur à epsilon que l'on aura défini au départ.

```

C=====
C*****PROJET DE FIN D'ETUDES*****
C=====
C
C=====
C***** RESOLUTION D'UNE EQUATION AUX DERIVEES PARTIELLES***
C***** DE TYPE PRABOLIQUE DECRIVANT LE PHENOMENE DE*****
C***** DIFFUSION*****
C=====
C
C
C=====
C L'EQUATION EN COORDONNEES SPHERIQUE EST:
C      ++++++
C      * dx(r,t)/dt=r**2*d(r**2*D*dX(r,t)/dr)/dr *
C      ++++++
C=====
      Implicit double precision (A-H,O-Z)
      REAL*8 X(40,100),YE(20),YT(100),A(10),T(100),TE(100)
      CHARACTER*12 FDAT
      CHARACTER*12 FOUT
      CHARACTER*12 FRES
      CHARACTER*12 FTER
      WRITE(*,*) 'Donner le nom du fichier de donnees : '
      READ(*,444) FDAT
      WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie : '
      READ(*,444) FOUT
      WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie pour YT(J) : '
      READ(*,444) FRES
      WRITE(*,*) 'DONNER LE NOM DE FICHIER DE SORTIE POUR YE(J):'
      read(*,444) FTER
444 FORMAT(12A)
      OPEN(5,FILE=FDAT,STATUS='OLD')
      OPEN(6,FILE=FOUT,STATUS='NEW')
      OPEN(7,FILE=FRES,STATUS='NEW')
      OPEN(8,FILE=FTER,STATUS='NEW')
      read(5,*) ni
      WRITE(6,*) 'Valeur de NI =',ni
      read(5,*) nj
      WRITE(6,*) 'Valeur de NJ = ',nj
      read(5,*) epsilon
      WRITE(6,*) 'Valeur de EPSILON = ',epsilon
      read(5,*) R
      WRITE(6,*) 'Le rayon de la particule R =',R
      read(5,*) THO
      WRITE(6,*) 'Le temps final THO = ',THO
      read(5,*) D
      WRITE(6,*) 'L"estimation de D :',D
      read(5,*) ALF
      WRITE(6,*) ' Votre estimation du coefficient d"equilibre:',ALF
      read(5,*) Vt
      WRITE(6,*) 'Le volume total de solvant contact Vt =',Vt
      read(5,*) V1
      WRITE(6,*) 'Le volume de solvant libre V1 =',V1
      read(5,*) Vs
      WRITE(6,*) 'Le volume de solide sec Vs =',Vs
      read(5,*) X0
      WRITE(6,*) 'La concentration initiale dans la particule X0 [mg/l]=
1',X0
      read(5,*) Y0
      WRITE(6,*) 'La concentration initiale dans le solvant Y0 =',Y0
      read(5,*) DeltaT
      WRITE(6,*) 'Le pas sur le temps Delta(T) en sec = ',DeltaT

```

c+++++

```

c+++++
  read(5,*) (YE(j),j=1,5)
  DO 15 J=1,5
  TE(J) =float(j-1)*deltat
  WRITE(6,*) 'VALEURS EXPERIMENTALES NORMALISEES (YE/XO) : '
  write(8,801) TE(J),YE(j)
  100 format(3x,E15.7,3x,E15.7,/)
  15 CONTINUE
c*****
c  CALCUL DES CONSTANTES DU SYSTEME
c*****
  K=0
  DT = 1/FLOAT(NJ-1)
  DT = deltaT/THO
  40 F0 = D*THO/R**2
  A(9) = DT*float(NI-1)
  A(7) = F0 * A(9)*float(NI-1)
  A(1) = 1 - 2*A(7)
  A(4) = 2 * A(7) /3
  A(5) = 1 + A(9)*F0*(NI+1)
  A(6) = (-2)*F0*A(9)*float(NI)
  A(10) = 3 * F0 * (1 - (Vt+Vs)/Vl)*A(9)
  write(6,153) 'F0 = ',F0,'A9 = ',A(9),'A(6) = ',A(6),'A(7) = '
1,A(7),'A(1) = ',A(1),'A(4) = ',A(4),'A(5) = ',A(5)
1,'A(10) = ',A(10),'ALFA = ',ALF,'DT = ',DT
153 FORMAT(10(5x,A17,E14.8,/)
  Yt(1) = 0.0
  Do 18 I= 1,NI-1
  X(I,1) = 1.0
  18 continue
c
c
c
  X(NI,1) = Yt(1)/ALF
  WRITE(6,167) (I,X(I,1),I=1,NI)
  167 FORMAT(3X,'i=',i2,3x,'X(I,1)=' ,F7.5,/)
c
c=====
c  BOUCLE PRINCIPALE DE CALCUL
c=====
c
  DO 30 J= 1,NJ-1
  X(1,J+1) = X(1,J) + A(4) * (X(3,J) -X(2,J))
c
c
  Do 20 I = 2,NI-2
  A(2) = A(7)*float(I)/float(I-1)
  A(3) = A(7)*float(I-2)/float(I-1)
  X(I,J+1) = A(1) *X(I,J) + A(2)*X(I+1,J) + A(3)*X(I-1,J)
20 CONTINUE
  X(NI-1,J+1)=A(1)*X(NI-1,J)+A(2)*Yt(J)/ALF+A(3)*X(NI-2,J)
c
  YT(J+1) = YT(J)+A(10) * (X(NI,J)-X(NI-1,J))
  X(NI,J+1) =YT(J+1)/ALF
30 CONTINUE
c=====
c  BOUCLE D'ECRITURE
c=====
50 DO 16 J=2,NJ,24
  DO 16 I=1,NI
  WRITE(6,601) I,J,X(I,J)
16 CONTINUE
  DO 17 J=1,Nj
  T(j) =float(j-1)*tho/(nj-1)
  Yt(j) =x0*yt(j)

```

```
WRITE(7,801) T(J),YT(J)
IF(J.Ge.15) GOTO 75
17 CONTINUE
75 DO 23 J=20,NJ,20
T(j)=float(j-1)*tho/(nj-1)
YT(j)=x0*YT(j)
WRITE(7,801)T(J),YT(J)
23 CONTINUE
WRITE(6,701) ALF
WRITE(6,901) D
601 FORMAT (1X,'X(',i4,';',i4,')=',E15.8)
701 FORMAT (5X,'ALFA =',E16.9)
901 FORMAT (4X,'La valeur de D :',E16.9)
801 FORMAT (4X,E15.7,4X,E15.7,/)

```

C  
CC

```
STOP
END
```

# Programme de reajustement

```
Dimension X(20,200),YT(200),T(200),P(3),YE(10),TE(10),E(3),A(10)
CHARACTER*12 FDAT
CHARACTER*12 FOUT
CHARACTER*12 FRES
CHARACTER*12 FEXP
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de donnees : '
READ(*,444) FDAT
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie : '
READ(*,444) FOUT
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie pour YT(J) : '
READ(*,444) FRES
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de donnees pour YE(J) : '
READ(*,444) FEXP
444 FORMAT(12A)
OPEN(5,FILE=FDAT,STATUS='old')
OPEN(6,FILE=FOUT,STATUS='NEW')
OPEN(7,FILE=FRES,STATUS='NEW')
OPEN(8,FILE=FEXP,STATUS='OLD')
READ(5,*) NI,NJ,EPSILON,R,THO,Vt,Vl,Vs,X0,Y0,DeltaT
WRITE(*,*) 'NL = '
READ(*,*) NL
Write(*,*) 'Dmin = '
READ(*,*) Dmin1
14 write(*,*) 'Dmax = '
READ(*,*) Dmax1
AD=1-2*(Dmax*THO*(NI-1)**2)/((NJ-1)*R**2)
IF(AD) 29,29,13
29 WRITE(*,*) 'Dmax ne vrifie pas la condition de stabilit!
*il faut diminuer sa valeur'
goto 14

=====
c LECTURE DES VALEURS EXPERIMENTALES
=====
13 DO 15 J=1,NL
READ(8,*) TE(J),YE(J)
c YE(J)=YE(J)/X0
WRITE(*,*) 'TE(J)= ',TE(J),' YE(J) = ',YE(J)
c YE(J)=YE(J)/X0
15 CONTINUE

-----
c ESSAI POUR VARIER ALFA
c
c
M=0
MI=0
c alf=0.012
alfmin=0.2
DO 10 K=1,100
MP=MI+1
write(*,*) 'ALF n ===',MI
ALF =ALFmin+FLOAT(K)*0.01
Dmax=Dmax1
Dmin=Dmin1
* 34 Dmoy=(Dmax+Dmin)/2
c write(*,*) 'Dmoy=',Dmoy
P(1)=Dmax
P(2)=Dmoy
P(3)=Dmin
c write(*,*) 'D(1)=',P(1),'D(2)=',P(2),'D(3)=',P(3)
DO 25 N=1,3
D=P(N)
call ali(ni,nj,R,THO,D,Vt,Vl,Vs,X0,Y0,Alf,x,Yt)
H=0.0
```

```

DO 52 L=1,NL
DO 51 J=1,NJ
T(J) = float(J-1)*THO/(NJ-1)
S = ABS(TE(L)-T(J))
IF(S.GT.19) GOTO 51
WRITE(*,*) 'TE(L)=' ,TE(L), ' T(J)=' ,T(J), ' ye=' ,ye(1), ' yt=' ,yt(j)
if(ye(1)) 1,52,1
1 H= H+ABS(Yt(J)-Ye(L))/YE(L)
GOTO 52
51 CONTINUE
52 CONTINUE
E(N)= H/float(NL)
M = M+1
WRITE(*,*) 'm=' ,M
25 CONTINUE
WRITE(*,*) 'E(1) = ' ,E(1), ' E(2) = ' ,E(2), ' E(3) = ' , E(3)
ERR =MIN(E(1),E(2),E(3))
WRITE(*,*) 'ERREUR = ' ,ERR
IF(ERR.LE.EPSILON) GOTO 74
IF(E(1).GT.E(3)) GOTO 45
Dmax=P(1)
Dmin=P(2)
GOTO 78
45 Dmax=P(2)
Dmin=P(3)
78 DE=(Dmax-Dmin)/Dmax
IF(DE.LE.0.02) GOTO 10
GOTO 34
10 CONTINUE
74 DO 54 N=1,3
EROR=ERR-E(N)
IF(EROR) 54,9,9
54 CONTINUE
9 D=P(N)
call ali(ni,nj,R,THO,D,Vt,Vl,Vs,X0,Y0,Alf,x,Yt)
=====
c BOUCLE D'ECRITURE
=====
50 DO 16 J=2,NJ,24
DO 16 I=1,NI
WRITE(6,601) I,J,X(I,J)
16 CONTINUE
DO 17 J=1,Nj
T(j) =float(j-1)*tho/(nj-1)
c Yt(j) =x0*yt(j)
WRITE(7,801) T(J),YT(J)
IF(J.Ge.15) GOTO 75
17 CONTINUE
75 DO 23 J=20,NJ,20
T(j)=float(j-1)*tho/(nj-1)
c YT(j)=x0*YT(j)
WRITE(7,801)T(J),YT(J)
23 CONTINUE
WRITE(*,701) ALF
WRITE(*,901) D
601 FORMAT (1X,'X(' ,i4,' ;' ,i4,' )=' ,E15.8)
701 FORMAT (5X,'ALFA =' ,E16.9)
901 FORMAT (4X,'La valeur de D :' ,E16.9)
801 FORMAT (4X,E15.7,4X,E15.7,/)
cc
c
c
c
c
STOP
END

```

```

SUBROUTINE ali(ni,nj,R,THO,D,Vt,Vl,Vs,X0,Y0,Alf,x,Yt)
DIMENSION YT(200),A(10),X(20,200)
C*****

```

```

:   CALCUL DES CONSTANTES DU SYSTEME
C*****
:   DT = 1/FLOAT(NJ)
:   DT = deltaT/THO
40  F0 = D*THO/R**2
:   A(9) = DT*float(NI-1)
:   A(7) = F0 * A(9)*float(NI-1)
:   A(1) = 1 - 2*A(7)
:   A(4) = 2 * A(7) /3
:   A(5) = 1 + A(9)*F0*(NI+1)
:   A(6) = (-2)*F0*A(9)*float(NI)
:   A(10) = 3 * F0 * (1 - (Vt+Vs)/Vl)*A(9)
:   write(6,153) 'F0 = ',F0,'A9 = ',A(9),'A(6) = ',A(6),'A(7) = '
1, A(7),'A(1) = ',A(1),'A(4) = ',A(4),'A(5) = ',A(5)
1, 'A(10) = ',A(10),'ALFA = ',ALF,'DT = ',DT
153 FORMAT(10(5x,A17,E14.8,))
:   Yt(1) = Y0/X0
:   Do 18 I= 1,NI-1
:   X(I,1) = 1.0
18  continue
:
:

```

```

:   X(NI,1) = Yt(1)/alf
C   WRITE(6,167) (I,X(I,1),I=1,NI)
:   167 FORMAT(3X,'i=',i2,3x,'X(I,1)=' ,F7.5,/)
C=====
C   BOUCLE PRINCIPALE DE CALCUL
C=====
C
DO 30 J= 1,NJ-1
X(1,J+1) = X(1,J) + A(4) * (X(3,J) -X(2,J))
Do 20 I = 2,NI-2
A(2) = A(7)*float(I)/float(I-1)
A(3) = A(7)*float(I-2)/float(I-1)
X(I,J+1) = A(1) *X(I,J) + A(2)*X(I+1,J) + A(3)*X(I-1,J)
20 CONTINUE
X(NI-1,J+1)=A(1)*X(NI-1,J)+A(2)*Yt(J)/ALF+A(3)*X(NI-2,J)
YT(J+1) = YT(J)+A(10) * (X(NI,J)-X(NI-1,J))
X(NI,J+1) =YT(J+1)/ALF
30  continue
Return
END

```

```

Dimension X(20,200),YT(200),T(200),P(3),YE(10),TE(10),E(3),A(10)
CHARACTER*12 FDAT
CHARACTER*12 FOUT
CHARACTER*12 FRES
CHARACTER*12 FEXP
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de donnees : '
READ(*,444) FDAT
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie : '
READ(*,444) FOUT
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie pour YT(J) : '
READ(*,444) FRES
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de donnees pour YE(J) : '
READ(*,444) FEXP
444 FORMAT(12A)
OPEN(5,FILE=FDAT,STATUS='old')

```

```

C+++++
C      PROGRAMME DE RESOLUTION AVEC D VARIABLE
C+++++
dimension X(20,200),YT(200),T(200),YE(10),TE(10),B(10)
CHARACTER*12 FDAT
CHARACTER*12 FOUT
CHARACTER*12 FRES
CHARACTER*12 FEXP
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de donnees : '
READ(*,444) FDAT
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie : '
READ(*,444) FOUT
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de sortie pour YT(J) : '
READ(*,444) FRES
WRITE(*,*) 'Donner le nom de fichier de donnees pour YE(J) : '
READ(*,444) FEXP
444 FORMAT(12A)
OPEN(5,FILE=FDAT,STATUS='old')
OPEN(6,FILE=FOUT,STATUS='NEW')
OPEN(7,FILE=FRES,STATUS='NEW')
OPEN(8,FILE=FEXP,STATUS='OLD')
READ(5,*) NI,NJ,EPSILON,R,THO,D,ALF,Vt,Vl,Vs,X0,Y0,DeltaT
WRITE(*,*) 'NL = '
READ(*,*) NL
c   write(*,*) 'ni = ',ni
c   WRITE(*,*) 'DeltaT = ',DELTAT
c   print*,'je lis'
C=====
c   LECTURE DES VALEURS EXPERIMENTALES
C=====
DO 15 J=1,NL
READ(8,*) TE(J),YE(J)
c   YE(J)=YE(J)/X0
WRITE(*,*) 'TE(J)= ',TE(J),' YE(J) = ',YE(J)
c   YE(J)=YE(J)/X0
15 CONTINUE
C=====
K =20
74 DO=D/EXP(float(K))
AD=1-2*(D*THO*(NI-1)**2)/((NJ-1)*R**2)
IF(AD) 29,29,13
29 WRITE(*,*) ' la condition de stabilit n''est pas verifie!
*il faut modifier la valeur de NJ dans le fichier de donnees .'
goto 14
13 call HOUSSEM(ni,nj,R,THO,DO,ALF,K,Vt,Vl,Vs,X0,Y0,x,Yt)
=====
c   print*,'sortie'
C=====
H=0.0
DO 52 L=1,NL
DO 51 J=1,NJ
T(J) = float(J-1)*THO/(NJ-1)
S = ABS(TE(L)-T(J))
IF(S.GT.19) GOTO 51
WRITE(*,*) 'TE(L)=',TE(L),' T(J)=',T(J),' ye=',ye(1),' yt=',yt(j)
if(ye(1)) 1,52,1
1 H= H+ABS(Yt(J)-Ye(L))/YE(L)
GOTO 52
51 CONTINUE
52 CONTINUE
H= H/float(NL)
WRITE(*,*) 'ERREUR = ',H
IF(H.LE.EPSILON) GOTO 50
K = K-1
WRITE(*,*) ' K = ', K
GOTO 74

```

```

=====
c      BOUCLE D'ECRITURE                                     ?
=====
50 DO 16 J=2,NJ,24
DO 16 I=1,NI
WRITE(6,601) X(I,J)
16 CONTINUE
DO 17 J=1,Nj
T(j) =float(j-1)*tho/(nj-1)
Yt(j) =x0*yt(j)
*WRITE(7,801)T(J),YT(J)
IF(J.Ge.15) GOTO 75
17 CONTINUE
75 DO 23 J=20,NJ,20
T(j)=float(j-1)*tho/(nj-1)
YT(j)=x0*YT(j)
WRITE(7,801)T(J),YT(J)
23 CONTINUE
print*, 'imprimer'
WRITE(6,701) ALF
WRITE(6,901) D
601 FORMAT (1X,E15.8)
701 FORMAT (5X,'ALFA =',E16.9)
901 FORMAT (4X,'La valeur de D :',E16.9)
801 FORMAT (4X,E15.7,4X,E15.7,/)
cc
c
c
c
c
14 STOP
END

```

SUBROUTINE HOUSSEM(NI,NJ,R,THO,DO,ALF,K,Vt,Vl,Vs,X0,Y0,x,yt)
dimension yt(200),x(20,200),B(10)

```

C+++++
c*****
c      CALCUL DES CONSTANTES DU SYSTEME
c*****
c      print*, 'je calcule'
DT=1/float(Nj)
B(1) =THO*DT*DO/(R*R)
B(2) =FLOAT(NI-1)*FLOAT(NI-1)
B(5) =FLOAT(K)*R*(NI-1)/(2*X0)
B(8) =-3*B(1)*R*(NI-1)*((Vt+Vs)/Vl-1)
c      print*, 'constantes calcules'
c#####INITIALISATION*****
c
Yt(1) = Y0/X0
Do 18 I= 1,NI-1
X(I,1) = 1.0
18 continue
c
c
X(NI,1) = Yt(1)/ALF
WRITE(6,167) (I,X(I,1),I=1,NI)
167 FORMAT(3X,'i=',i2,3X,'X(I,1)=' ,F7.5,/)
=====
c      BOUCLE PRINCIPALE DE CALCUL                                     ?
=====
c      print*, 'je suis dans la boucle'
DO 30 J= 1,NJ-1

```

```

X(1,J+1) = X(1,J)+2/3*B(1)*B(2)*EXP(float(K)*X(1,J))*
1(X(3,J)-X(2,J))
c   print*,'j=',j
   Do 20 I = 2,NI-1
   B(3) =B(2)*FLOAT(I)/FLOAT(I-1)
   B(4) =B(2)*FLOAT(I-2)/FLOAT(I-1)
   B(6)=B(3)+B(5)
   B(7)=B(4)-B(5)
c   print*,'i=',i
   X(I,J+1) =X(I,J)+B(1)*EXP(float(K)*X(I,J))*(-2*B(2)*X(I,J)+
1B(6)*X(I+1,j)+B(7)*X(I-1,J))
c
20  CONTINUE
c
   YT(J+1) = YT(J)+B(8)*EXP(float(K)*X(NI,J))*(X(NI,J)-X(NI-1,J))

   X(NI,J+1) =YT(J+1)/ALF
30  CONTINUE
c   print*,'subroutine execute'
c=====
c
c
c
RETURN

END

```