



HAL
open science

Transfert de masse non-stationnaire depuis des particules sous écoulement

Clément Bielinski, Badr Kaoui

► **To cite this version:**

Clément Bielinski, Badr Kaoui. Transfert de masse non-stationnaire depuis des particules sous écoulement. Comptes Rendus. Mécanique, 2023, 351 (S3), 10.5802/crmeca.204 . hal-04270605

HAL Id: hal-04270605

<https://hal.science/hal-04270605>

Submitted on 4 Nov 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License



INSTITUT DE FRANCE
Académie des sciences

Comptes Rendus

Mécanique

Clément Bielinski et Badr Kaoui


Transfert de masse non-stationnaire depuis des particules sous écoulement

Published online: 2 August 2023

<https://doi.org/10.5802/crmeca.204>

Part of Special Issue: The French “Année de la Mécanique”: some views on recent advances in solid and fluid mechanics

Guest editors: Francisco Chinesta (PIMM, UMR CNRS 8006, Arts et Métiers Institute of Technology, Paris, France) and Aziz Hamdouni (LaSIE, UMR CNRS 7356, La Rochelle Université, France)

 This article is licensed under the
CREATIVE COMMONS ATTRIBUTION 4.0 INTERNATIONAL LICENSE.
<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



*Les Comptes Rendus. Mécanique sont membres du
Centre Mersenne pour l'édition scientifique ouverte*

www.centre-mersenne.org

e-ISSN : 1873-7234



L'année de la mécanique : quelques points de vue sur des avancées récentes en mécanique des solides et des fluides / *The French "Année de la Mécanique": some views on recent advances in solid and fluid mechanics*

Transfert de masse non-stationnaire depuis des particules sous écoulement

Unsteady mass transfer from particles under flow

Clément Bielinski^a et Badr Kaoui^{*, a}

^a Laboratoire Biomécanique et Bioingénierie, Université de Technologie de Compiègne et CNRS, 60200 Compiègne, France

Courriels : bielinski@ladhyx.polytechnique.fr, badr.kaoui@utc.fr

Résumé. Le transfert de masse à partir de particules présente de nombreuses applications biomédicales. En conditions opérationnelles, les particules sont soumises à des écoulements de fluides de différentes natures, dont l'effet sur le transport du soluté est aujourd'hui encore mal connu. Dans cet article nous considérons le transfert de masse à partir de capsules sphériques et de fibres noyau-coque soumises à différentes conditions d'écoulement. Les effets combinés de l'écoulement et de la perméabilité de la coque des particules sur l'efficacité du transfert sont analysés et quantifiés par des corrélations pour le nombre de Sherwood (le coefficient de transfert de masse adimensionnel). La perméabilité des particules influence fortement l'efficacité du transfert, mais elle est difficilement mesurable. Une nouvelle méthode de caractérisation de la perméabilité de la coque des capsules est proposée et validée sur des données expérimentales. Tous les résultats obtenus peuvent être appliqués au transfert de chaleur vers ou depuis des particules soumises à des écoulements.

Abstract. Mass transfer from particles is encountered in many biomedical applications. In operating conditions, particles are subjected to flows whose effect on solute transport is still not well understood. In this article we consider mass transfer from core-shell capsules and fibers subjected to various flow conditions. The combined effects of the flow and the shell permeability on the mass transfer efficiency are analyzed and quantified by correlations for the Sherwood number (the dimensionless mass transfer coefficient). The permeability is found to significantly affect the mass transfer efficiency, but it is a hardly measurable quantity. A new characterization method is proposed and validated using experimental data. All the obtained results can be applied to heat transfer from or to particles subjected to flow.

Mots-clés. transfert de masse, écoulement, convection forcée, capsules, fibres, membranes, perméabilité.

Keywords. mass transfer, heat transfer, flow, forced convection, capsules, fibers, Membranes, permeability.

Published online: 2 August 2023

* Auteur correspondant.

1. Introduction

Le transfert de masse à partir de particules présente de nombreuses applications biomédicales telles que le relargage contrôlé de médicaments, la culture cellulaire, ou encore la conception d'organes bioartificiels. Plusieurs mécanismes de transfert de masse peuvent être utilisés en fonction des applications considérées : la dissolution, l'érosion, ou encore la diffusion [1]. Dans cet article, nous nous intéressons plus particulièrement au relargage contrôlé d'un soluté par diffusion à partir de capsules sphériques et de fibres noyau-coque, qui sont des particules largement utilisées en génie chimique et en génie biomédical. L'agent actif est initialement encapsulé dans le noyau de la particule, puis il est libéré dans le fluide environnant par diffusion à travers la coque semi-perméable. Le relargage du soluté est principalement contrôlé par la perméabilité de la coque de la particule, qui est généralement constituée de polymères tels que le poly(lactic-co-glycolic acid) (PLGA), le polyéthylène glycol (PEG), ou encore l'alginate.

Plusieurs modèles analytiques et empiriques donnant le pourcentage de masse relarguée au cours du temps $R(t)$ à partir de particules sphériques, cylindriques ou encore planes ont été proposés dans la littérature et sont répertoriés dans les références [1, 2]. Tous ces modèles considèrent que le fluide extérieur est au repos. Cependant, en conditions opérationnelles, les particules sont soumises à des écoulements de fluides de différentes natures, dont l'effet sur le transport du soluté est aujourd'hui encore mal connu. Il est pourtant crucial de bien comprendre l'impact de ces écoulements afin d'optimiser le design des particules et d'augmenter leurs performances.

Les études sur le transfert de masse en présence d'un écoulement, qu'elles soient numériques ou expérimentales, s'intéressent plutôt au nombre de Sherwood Sh (i.e. le coefficient de transfert de masse adimensionnel). Plusieurs d'entre elles sont résumées dans la référence [3], où de nombreuses corrélations du nombre de Sherwood sont données pour différents types de particules et conditions d'écoulement. Cependant, toutes ces études considèrent des conditions aux limites constantes et uniformes sur la surface des particules, généralement des conditions aux limites de type Dirichlet ou Neumann. Or, ces conditions aux limites ne sont pas adaptées au cas du relargage d'un soluté au cours duquel la concentration à la surface et à l'intérieur de la particule varie dans le temps. De plus, aucune étude ne traite des particules composites formées d'un noyau et d'une coque.

Dans cet article, nous étudions les effets combinés de l'écoulement extérieur, des propriétés physico-chimiques de la particule et des conditions aux limites considérées à sa surface sur l'efficacité du transfert de masse. Nous considérons des conditions aux limites de continuité du flux et de la concentration à la surface des particules, ce qui modélise correctement le relargage du soluté en l'absence de résistance au transfert de masse. Bien que l'article traite principalement du transfert de masse, les méthodes utilisées, les résultats obtenus et les discussions peuvent par analogie s'appliquer au cas du transfert thermique depuis des particules sous écoulement. Pour cela, il suffit de remplacer la concentration c par la température T , le nombre de Schmidt Sc par le nombre de Prandtl Pr , et le nombre de Sherwood Sh par le nombre de Nusselt Nu dans les équations et les corrélations proposées.

Cet article est organisé comme suit. Dans la première partie, nous considérons le relargage d'un soluté par une capsule sphérique immergée dans un fluide au repos de manière à caractériser le rôle de la perméabilité de la coque, indépendamment de l'effet d'un écoulement extérieur. La contribution d'un écoulement est analysée dans la deuxième partie, en deux dimensions, dans le cas du transfert de masse à partir d'une fibre noyau-coque soumise à un écoulement de Poiseuille. La troisième partie est consacrée à l'étude du transfert de masse en trois dimensions à partir d'une capsule sphérique placée dans un écoulement de cisaillement.

2. Transfert de masse à partir d'une capsule noyau-coque sphérique en l'absence d'écoulement

L'utilisation de capsules à des fins biomédicales s'est généralisée ces dernières décennies, ce qui a conduit à un grand nombre de publications et de brevets. Les capsules sont composées d'un noyau liquide dans lequel le principe actif est encapsulé, et d'une coque épaisse ou une membrane protégeant le noyau (voir figure 1). Le principal avantage des capsules est leur capacité à relarguer le soluté encapsulé de manière contrôlée. De plus, leur coque leur permet de résister aux contraintes mécaniques et protège le matériel encapsulé de l'oxydation par le milieu environnant. Il existe également des capsules ayant des structures plus complexes, constituées de plusieurs couches, et qui sont adaptées à des besoins spécifiques [4–6].

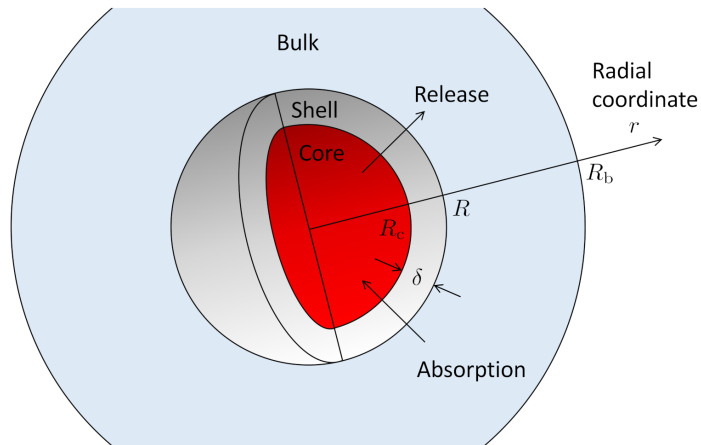


FIGURE 1. Schéma représentant une capsule noyau-coque immergée dans un fluide, avec R_c le rayon du noyau, R le rayon extérieur de la capsule et R_b le rayon du milieu environnant. La coque est homogène et a une épaisseur uniforme δ . Figure reproduite de [7].

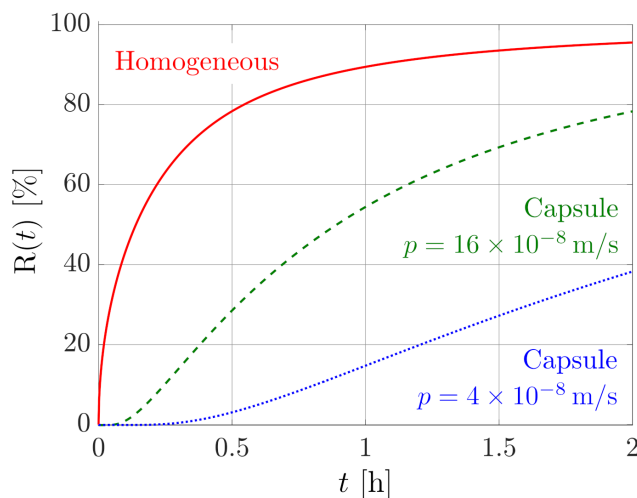


FIGURE 2. Courbes de relargage d'un soluté calculées pour une sphère homogène et deux capsules de perméabilités $p = 16 \times 10^{-8}$ m/s et $p = 4 \times 10^{-8}$ m/s.

La principale propriété d'une capsule est sa perméabilité au soluté. Elle est contrôlée par plusieurs facteurs dont la tortuosité et la porosité de la membrane. D'un point de vue macroscopique, la perméabilité est caractérisée par $p = D_m/\delta$, où D_m est le coefficient de diffusion du soluté dans la membrane (ou la coque) et δ son épaisseur. Le relargage (ou l'absorption) du soluté dépend fortement de la perméabilité des capsules, comme illustré sur la figure 2. Les capsules, grâce à leurs coques, permettent de retarder et de ralentir le relargage du soluté (courbes verte et bleue), ce qui n'est pas possible avec des particules homogènes dépourvues de coque (courbe rouge). Elles sont donc particulièrement intéressantes pour des applications de relargage contrôlé et ciblé.

L'optimisation du design des capsules afin d'obtenir la cinétique désirée est un véritable défi technologique. En effet, la perméabilité est une grandeur difficilement mesurable car elle dépend de la structure interne des capsules, qui est inaccessible en raison de leur topologie fermée. De plus, elle peut varier d'une population de capsules à une autre si les conditions de fabrication ne sont pas strictement identiques.

L'approche classiquement utilisée dans la littérature pour estimer la perméabilité de capsules consiste à ajuster les courbes de relargage ou d'absorption avec des solutions analytiques de la deuxième loi de Fick

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c), \quad (1)$$

où c est la concentration du soluté et D le coefficient de diffusion. Cette approche a été employée dans de nombreuses études dont Réfs. [8–15]. L'équation la plus utilisée dans la littérature dans le cas du relargage d'un soluté est

$$\frac{C_t}{C_{eq}} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6\alpha(1+\alpha)}{9+9\alpha+q_n^2\alpha^2} \exp\left(-\frac{Dq_n^2}{R^2}t\right), \quad (2)$$

où C_t est la concentration du soluté dans le fluide environnant au temps t , et C_{eq} la concentration attendue à l'équilibre lorsque $t \rightarrow \infty$ [16]. R est le rayon de la particule, D le coefficient de diffusion du soluté dans la particule et $\alpha = V_b/V$ est le rapport du volume du milieu environnant et de la particule en supposant le coefficient de partition égal à un. Les q_n sont les racines strictement positives de

$$\tan q_n = \frac{3q_n}{3+\alpha q_n^2}. \quad (3)$$

Dans le cas de l'absorption, l'équation utilisée est plutôt

$$\frac{C_t}{C_0} = \frac{\alpha}{1+\alpha} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6(1+\alpha)}{9+9\alpha+q_n^2\alpha^2} \exp\left(-\frac{Dq_n^2}{R^2}t\right) \right], \quad (4)$$

où C_0 est la concentration initiale du soluté dans le fluide environnant [16]. Les équations (2) et (4) supposent que la concentration dans le fluide environnant est uniforme en espace, ce qui peut s'obtenir en pratique en agitant la solution avec un agitateur magnétique par exemple. Cependant, ces équations sont dérivées analytiquement pour des sphères homogènes et donc dépourvues de membrane ou de coque. Elles ne font intervenir qu'un seul coefficient de diffusion D et ne permettent alors d'obtenir qu'une diffusivité effective pour l'ensemble de la capsule (noyau et membrane réunis). La perméabilité de la membrane reste donc inconnue, alors que c'est pourtant elle qui influence le plus la cinétique du relargage.

Nous proposons une nouvelle méthode de caractérisation de la perméabilité de capsules, qui elle, permet bien d'évaluer correctement le coefficient de diffusion du soluté dans la membrane. La méthode consiste à ajuster la courbe expérimentale de relargage ou d'absorption avec des solutions numériques de la deuxième loi de Fick en coordonnées sphériques (5) calculées par la

méthode des différences finies en supposant que le problème ne dépend que de la coordonnée radiale r

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D \frac{\partial c}{\partial r} \right) = \frac{2D}{r} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial D}{\partial r} \frac{\partial c}{\partial r} + D \frac{\partial^2 c}{\partial r^2}. \quad (5)$$

Le coefficient de diffusion D est variable en espace. Il prend différentes valeurs dans le noyau, la membrane et le fluide environnant :

$$D(r) = \begin{cases} D_c, & 0 \leq r \leq R_c \\ D_m, & R_c < r \leq R \\ D_b, & R < r \leq R_b \end{cases} \quad (6)$$

Les diffusivités dans le noyau (D_c) et dans la membrane (D_m) sont utilisées en tant que variables d'ajustement. Pour plus de détails techniques sur la méthode proposée, le lecteur est invité à lire [17].

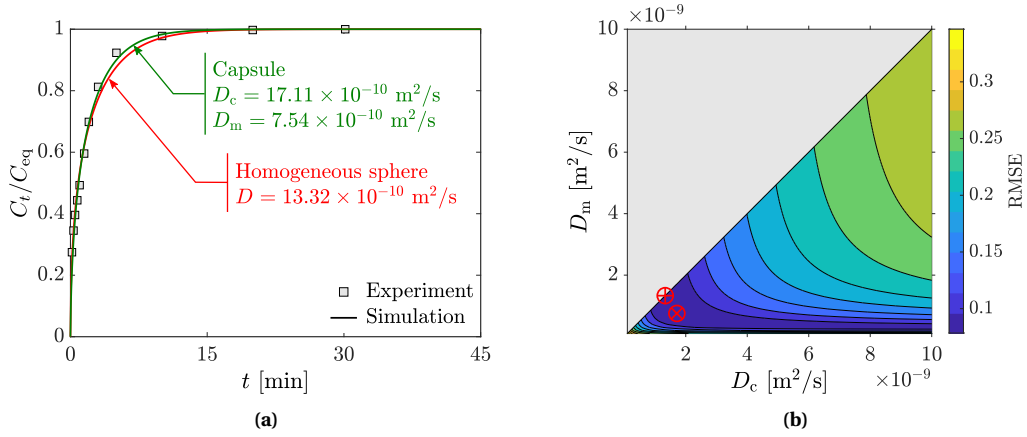


FIGURE 3. Exemple d'application de la méthode proposée dans le cas du relargage de glucose par une capsule d'alginate. (a) Courbes de relargage expérimentales extraites de [14] (carrés) et numériques calculées par la méthode des différences finies (traits continus). (b) Erreur RMSE entre les points expérimentaux et les courbes calculées numériquement en faisant varier D_m et D_c . Le minimum global de l'erreur (\otimes) donne les coefficients de diffusion $D_c = 17,11 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ et $D_m = 7,54 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Le minimum local le long de la droite $D_m = D_c$ (\oplus) donne une diffusivité effective $D = 13,32 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Figure reproduite de [7].

La figure 3 présente un exemple d'application de la méthode proposée sur des courbes de relargage (panneau a) de glucose par une capsule d'alginate. Le panneau b donne l'erreur RMSE entre les données expérimentales et les courbes de relargage calculées par la méthode des différences finies en faisant varier les coefficients de diffusion D_c et D_m sur un large intervalle. L'erreur RMSE est calculée seulement pour $D_m < D_c$ car le coefficient de diffusion de la membrane (gel) est nécessairement inférieur à celui du noyau (liquide) de la capsule. Le minimum global de l'erreur (\otimes) est atteint pour $D_c = 17,11 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ et $D_m = 7,54 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ et conduit à un excellent ajustement des points expérimentaux. La perméabilité de la capsule considérée est ainsi estimée à $p = 1,1 \times 10^{-5} \text{ m/s}$. Le minimum local sur la droite $D_m = D_c$ (\oplus) correspond à un coefficient de diffusion effectif pour l'ensemble de la capsule, qui est estimé à $D = 13,32 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Cette valeur est très proche de celle mesurée expérimentalement par les auteurs de l'étude [14],

qui est $D_{\text{exp}} = 14 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Ce coefficient de diffusion effectif calculé dans les travaux antérieurs correspond à un milieu homogène alors que la capsule est un milieu hétérogène constitué d'un noyau et d'une membrane ayant des coefficients de diffusion différents. La méthode proposée ici, elle, permet bien de dissocier les coefficients de diffusion dans le noyau et dans la membrane de la capsule.

3. Transfert de masse à partir d'une fibre noyau-coque soumise à un écoulement de Poiseuille

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'effet d'un écoulement sur le transfert de masse à partir d'une fibre noyau-coque. De nombreuses études ont montré que la présence d'un écoulement augmentait l'efficacité du transfert de masse (ou de chaleur) [3, 18–21]. Elles proposent des corrélations donnant le nombre de Sherwood Sh (le coefficient de transfert de masse adimensionné) en fonction, entre autres, du nombre de Reynolds $Re = \frac{U_{\text{max}} d}{\nu}$ et du nombre de Schmidt $Sc = \frac{\nu}{D_f}$

$$Sh = f(Re, Sc, \dots).$$

U_{max} et ν sont respectivement la vitesse et la viscosité cinématique du fluide, d est le diamètre de la fibre et D_f est le coefficient de diffusion du soluté dans le fluide.

Pendant, ces études classiques considèrent des conditions aux limites constantes et uniformes qui ne sont pas adaptées au cas du relargage d'un soluté au cours duquel la concentration sur la surface et au sein de la particule évolue dans le temps. De plus, elles considèrent des particules homogènes, dépourvues de coque. Le transfert de masse à partir d'une fibre noyau-coque a été étudié dans [22] à de faibles nombres de Reynolds. L'objectif de cette partie est d'étendre cette étude sur une large plage de nombres de Reynolds. En particulier nous analysons les effets combinés de l'écoulement et de la coque de la fibre sur le transfert de masse, et les quantifions par une nouvelle corrélation incluant pour la première fois la contribution de la perméabilité.

Le problème est schématisé sur la figure 4. La fibre est placée dans un canal plan à l'entrée duquel un écoulement uniforme est imposé. Elle a un rayon extérieur R et est constituée d'un noyau (Ω_c) encapsulant un soluté et d'une coque semi-perméable (Ω_s) d'épaisseur δ . Les coefficients de diffusion du soluté sont D_c dans le noyau, D_s dans la coque et D_f dans le fluide environnant (Ω_f).

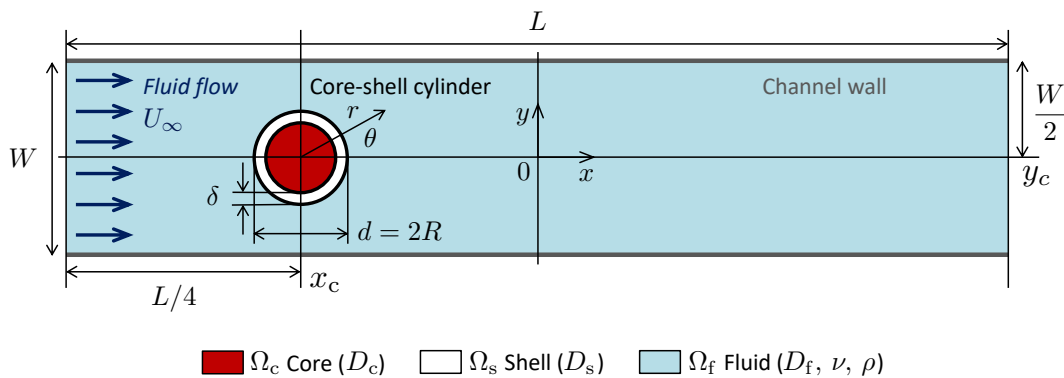


FIGURE 4. Schéma représentant le problème considéré. La fibre est constituée d'un noyau Ω_c et d'une coque Ω_s . Elle est immergée dans un canal plan à l'entrée duquel un écoulement uniforme est imposé. Figure reproduite de [23].

L'écoulement et la concentration du soluté sont tous deux calculés par la méthode de Boltzmann sur réseau en deux dimensions. Les détails techniques sur la méthode numérique utilisée

sont donnés dans [24]. Le problème est contrôlé par trois paramètres adimensionnels clés : le nombre de Reynolds Re , le nombre de Schmidt Sc et la perméabilité de la fibre $P = \frac{D_s}{D_f} \frac{d}{\delta}$.

Trois régimes d'écoulement ont été mis en évidence en fonction du nombre de Reynolds :

- $0 < Re < 21$: Écoulement stationnaire, laminaire et non décollé
- $21 \leq Re < 128$: Écoulement stationnaire, laminaire, décollé avec recirculations
- $Re \geq 128$: Écoulement instationnaire avec formation d'une allée de von Kármán

Ces différents régimes d'écoulement influencent significativement la distribution spatiale du soluté, comme le montre la figure 5 représentant le champ de concentration et les lignes de courant pour $Re = 1, 80$ et 180 . Les trois figures ont été obtenues au même temps adimensionnel $T = \frac{D_f t}{d^2} = 0,03$, et pour un nombre de Schmidt $Sc = 5$ et une perméabilité $P = 3,70$.

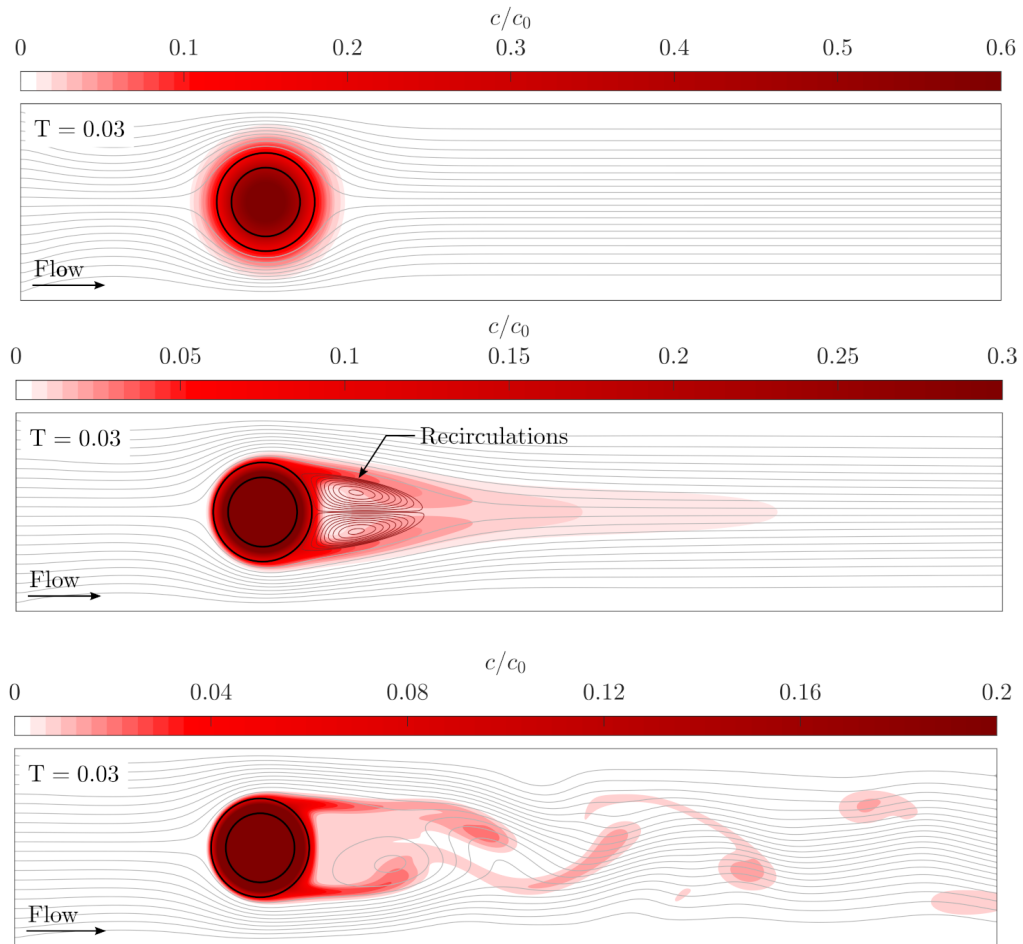


FIGURE 5. Champs de concentration et lignes de courant calculées à $T = 0,03$ pour un nombre de Reynolds $Re = 1$ (haut), $Re = 80$ (milieu) et $Re = 180$ (bas). Le nombre de Schmidt est $Sc = 5$ et la perméabilité de la coque est $P = 3,70$.

Dans le cas $Re = 1$, l'intensité de l'écoulement est relativement faible. Les lignes de courant sont parallèles entre elles loin de l'obstacle. Le transfert de masse est dominé par la diffusion. Le soluté se diffuse radialement et reste dans le voisinage de la particule. Pour $Re = 80$, l'écoulement

se détache de la particule et deux zones de recirculation se sont formées en aval. Le transfert de masse est maintenant dominé par l'advection. Le soluté est transporté vers la sortie du canal. Pour $Re = 180$, l'écoulement devient instationnaire. Le transfert de masse reste dominé par l'advection. Les zones de recirculation se détachent de manière périodique et forment une allée tourbillonnaire de von Kármán qui advecte le soluté jusqu'à la sortie du canal.

Une corrélation donnant le nombre de Sherwood en fonction du nombre de Reynolds, du nombre de Schmidt, et de la perméabilité de la coque a pu être extraite des simulations numériques (voir figure 6) :

$$Sh = 1,99P^{-0,40}Re^{0,43}Sc^{0,40} \quad (7)$$

Cette corrélation permet de quantifier le transfert de masse (ou de chaleur) entre un cylindre muni d'une coque et un fluide en écoulement. Elle est valide pour $10 \leq Re \leq 180$, $1 \leq Sc \leq 25$, $0,1 \leq \frac{D_s}{D_f} \leq 1$ et pour un blocage $B = d/W = 0,5$. Sur toutes les simulations réalisées dans cette étude, la corrélation déterminée donne une erreur moyenne de 4 %, ce qui est très satisfaisant. Plus de détails sur l'obtention de cette corrélation sont disponibles dans [23].

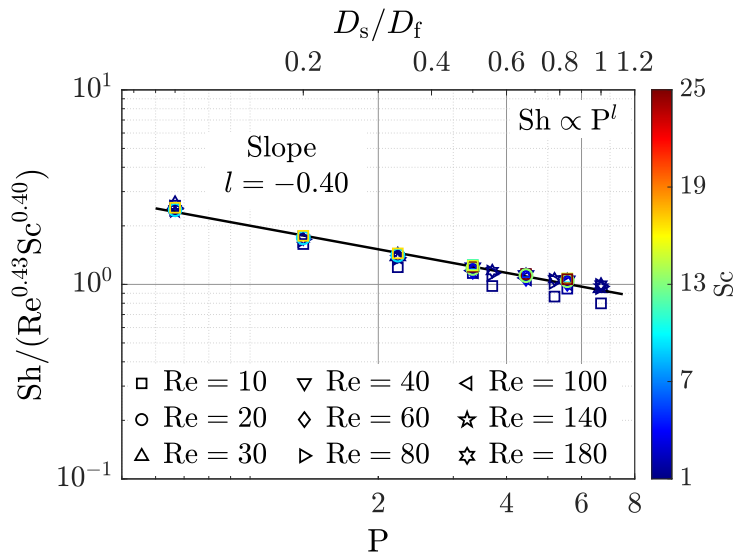


FIGURE 6. Nombre de Sherwood calculé sur une large plage de Re , Sc et P . Tous les points sont alignés le long d'une même droite de pente $-0,40$ et d'ordonnée à l'origine $1,99$. Figure reproduite de [23].

4. Transfert de masse à partir d'une capsule rigide en écoulement de cisaillement

Le problème considéré dans cette partie est le relargage d'un soluté par une capsule rigide soumise à un écoulement de cisaillement simple. Ce type de problème a tout d'abord été étudié par Acrivos *et al.* [25–27] dans la limite de petits nombres de Reynolds ($Re \rightarrow 0$) et pour des nombres de Péclet très faibles ($Pe \rightarrow 0$) ou très grands ($Pe \rightarrow \infty$). Ils ont dérivé des corrélations asymptotiques pour le nombre de Sherwood (ou le nombre de Nusselt dans le cas du transfert thermique). Plus tard, Batchelor [28] a obtenu des corrélations similaires en utilisant une autre approche mathématique. Polyanin et Dil'man [29] ont utilisé des procédures d'ajustement avancées pour interpoler les corrélations d'Acrivos entre $Pe \rightarrow 0$ et $Pe \rightarrow \infty$. Subramanian et Koch [30] ont étendu les travaux d'Acrivos et de Batchelor au cas de nombres de Reynolds finis et ont analysé les effets inertiels sur le transfert massique et thermique. Longest et Kleinstreuer [31] ont étudié l'effet du confinement sur l'efficacité du transfert et ont proposé d'autres corrélations prenant en compte

la contribution du blocage. Plus récemment, Wang et Brasseur [32] ont proposé des corrélations sur un large intervalle de nombres de Péclet, qui sont consistantes avec celles obtenues théoriquement par Batchelor et Acrivos.

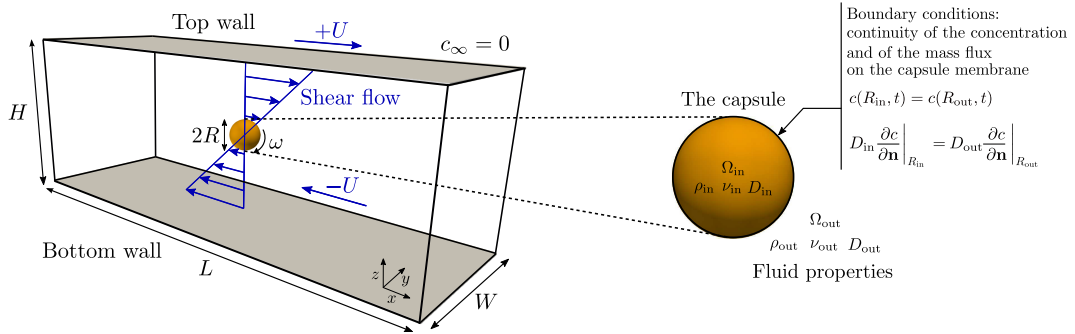


FIGURE 7. Représentation schématique du problème considéré. Figure reproduite de [17].

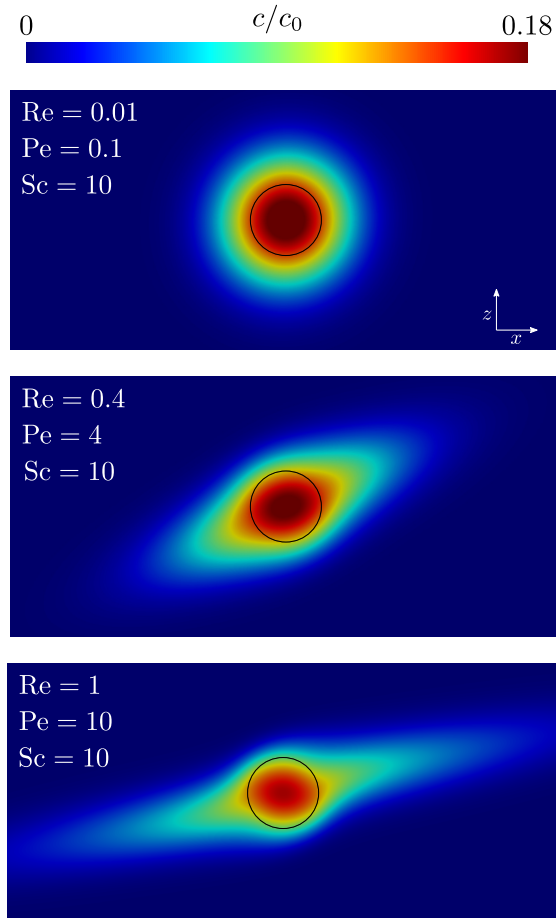


FIGURE 8. Champs de concentration calculés en trois dimensions à $Re = 0,01, 0,4$ et 1 à un nombre de Schmidt $Sc = 10$. Figure reproduite de [17].

Cependant, toutes ces études considèrent des conditions aux limites constantes et uniformes sur la surface des particules, ce qui ne permet pas de modéliser le relargage d'un soluté. Ici, nous considérons le transfert de masse à partir d'une capsule sphérique rigide placée dans un écoulement de cisaillement simple, avec des conditions aux limites de continuité adaptées au cas du relargage et de l'absorption d'un soluté. La membrane est supposée très fine et a donc une très grande perméabilité au soluté, comme considéré également dans [33] pour des globules rouges.

Le problème est schématisé sur la figure 7. La capsule est placée au centre d'un canal dans lequel est imposé un écoulement de cisaillement simple entraînant la rotation de la capsule. La concentration du soluté est initialement uniforme et égale à c_0 dans la capsule, et elle est nulle dans le fluide environnant.

Les champs de vitesse et de concentration sont tous deux calculés par la méthode de Boltzmann sur réseau en trois dimensions, et les interactions entre le fluide et la capsule sont prises en compte par la méthode des frontières immergées. Les détails sur la méthode numérique sont disponibles dans [17].

L'impact de l'écoulement sur la distribution spatiale du soluté est représenté sur la figure 8, montrant le champ de concentration à un nombre de Reynolds $Re = 0,01, 0,4$ et 1 . Le nombre de Schmidt est $Sc = 10$. Pour $Re = 0,01$, le transport du soluté s'opère principalement par diffusion. Les isocontours de la concentration sont concentriques et centrés sur la capsule. Pour des nombres de Reynolds plus élevés, l'advection devient importante et le soluté est transporté efficacement par l'écoulement. Les isocontours de la concentration sont étirés dans la direction de l'écoulement.

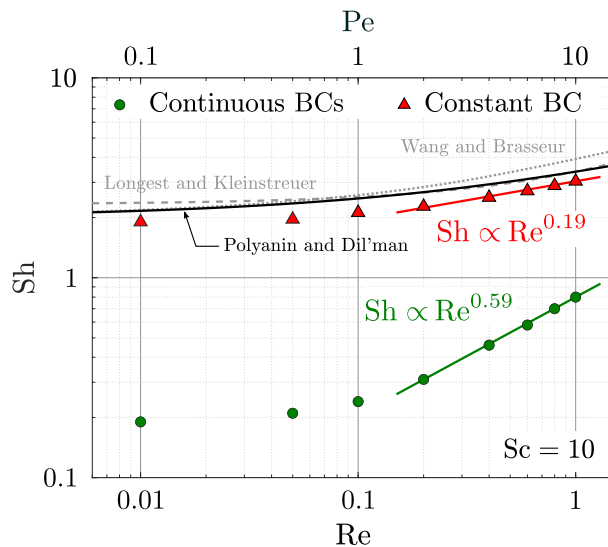


FIGURE 9. Nombre de Sherwood Sh en fonction de Re et Pe pour des conditions aux limites de continuité (cercles) et de Dirichlet (triangles). Les corrélations de Polyanin et Dil'man [29], Longest et Kleinstreuer [31] et Wang et Brasseur [32] sont aussi représentées à titre de comparaison. Le nombre de Schmidt est $Sc = 10$. Figure reproduite de [17].

Le nombre de Sherwood Sh est représenté sur la figure 9 en fonction de Re et Pe en considérant des conditions aux limites continues (cercles) et des conditions aux limites de Dirichlet (triangles) sur la surface de la capsule. Le nombre de Schmidt est $Sc = 10$. L'écoulement améliore l'efficacité du transfert de masse, ce qui se traduit par une augmentation du nombre de Sherwood avec le

nombre de Reynolds. L'augmentation est d'autant plus importante dans le régime dominé par l'advection, pour $Pe > 1$. Le nombre de Sherwood dépend aussi fortement du type de conditions aux limites sur la surface de la capsule. Il est beaucoup plus faible dans le cas de conditions aux limites de continuité. La figure suggère $Sh \propto Re^{0,59}$ pour les conditions aux limites continues et $Sh \propto Re^{0,19}$ pour celles de Dirichlet dans le régime dominé par l'advection ($Pe > 1$). À titre de comparaison, les corrélations de Wang et Brasseur [32], Polyanin et Dil'man [29], et Longest et Kleinstreuer [31] sont aussi représentées. Les nombres de Sherwood calculés dans le cas de conditions aux limites constantes sont en bon accord avec les corrélations de la littérature.

5. Conclusion

Nous avons étudié numériquement le transfert de masse à partir de capsules et de fibres noyau-coque sous différentes conditions d'écoulement rencontrées dans de nombreuses applications biomédicales. Jusqu'à présent, la plupart des travaux portant sur le transfert de masse à partir de particules en présence d'un écoulement considèrent des conditions aux limites constantes et uniformes pour des raisons de simplification. Cependant, ces conditions aux limites ne permettent pas de modéliser le relargage et l'absorption d'un soluté au cours desquels la concentration à la surface des particules évolue dans le temps.

Dans cet article, nous complétons les études existantes en considérant des conditions aux limites non constantes et non uniformes, qui modélisent correctement le relargage et l'absorption d'un soluté. Nous avons analysé la contribution de la perméabilité de la coque des particules sur le transfert de masse, d'abord en l'absence d'écoulement. Puis nous avons montré l'effet d'un écoulement extérieur sur l'efficacité du relargage du soluté à partir d'une fibre et d'une capsule sphérique. Ces résultats peuvent être appliqués à l'étude du transfert thermique vers et depuis des particules sous écoulement, comme par exemple, le refroidissement de particules initialement chaudes par un écoulement de fluide froid. L'écoulement améliore l'efficacité du transfert, ce qui a été quantifié par des corrélations pour le nombre de Sherwood.

Les résultats reportés permettent une meilleure compréhension fondamentale du transfert de masse et de chaleur à partir de particules soumises à des écoulements.

Conflits d'intérêt

Les auteurs n'ont aucun conflit d'intérêt à déclarer.

Remerciements

Les auteurs remercient le laboratoire Biomécanique et Bioingénierie (BMBI) et le Ministère de l'Enseignement Supérieur de la Recherche et de l'Innovation (MESRI) pour le financement, ainsi que Nam Le, Lumi Xia et Guillaume Helbecque pour leurs contributions à certaines parties de ce travail.

Références

- [1] J. Siepmann, F. Siepmann, « Mathematical modeling of drug delivery », *Int. J. Pharm.* **364** (2008), n° 2, p. 328-343.
- [2] D. Y. Arifin, L. Y. Lee, C.-H. Wang, « Mathematical modeling and simulation of drug release from microspheres : Implications to drug delivery systems », *Adv. Drug Deliv. Rev.* **58** (2006), n° 12-13, p. 1274-1325.
- [3] R. Clift, J. R. Grace, M. E. Weber, *Bubbles, Drops, and Particles*, Academic Press Inc., 1978.
- [4] X. Qiu, S. Leporatti, E. Donath, H. Moehwald, « Studies on the drug release properties of polysaccharide multilayers encapsulated ibuprofen microparticles », *Langmuir* **17** (2001), p. 5375-5380.

- [5] B. C. Zarket, S. R. Raghavan, « Onion-like multilayered polymer capsules synthesized by a bioinspired inside-out technique », *Nat. Commun.* **8** (2017), n° 1, article no. 193.
- [6] B. Kaoui, M. Lauricella, G. Pontrelli, « Mechanistic modelling of drug release from multi-layer capsules », *Comput. Biol. Med.* **93** (2018), p. 149-157.
- [7] C. Bielinski, B. Kaoui, « Numerical method to characterise capsule membrane permeability for controlled drug delivery », *Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng.* **38** (2022), article no. e3551.
- [8] R. Dembczynski, T. Jankowski, « Characterization of small molecules diffusion in hydrogel-membrane liquid-core capsules », *Biochem. Eng. J.* **6** (2000), p. 41-44.
- [9] S. Yao, Y. Guan, D. Lin, « Mass transfer behavior of solutes in NaCS-PDMAAC capsules », *Ind. Eng. Chem. Res.* **45** (2006), n° 5, p. 1811-1816.
- [10] R. Ameloot, F. Vermoordele, W. Vanhove, M. B. J. Roeffaers, B. F. Sels, D. E. De Vos, « Interfacial synthesis of hollow metal-organic framework capsules demonstrating selective permeability », *Nature Chemistry* **3** (2011), p. 382-387.
- [11] S. Henning, S. Leick, M. Kott, H. Rehage, D. Suter, « Sealing liquid-filled pectinate capsules with a shellac coating », *J. Microencapsul.* **2** (2012), p. 147-155.
- [12] S. Leick, A. Kemper, H. Rehage, « Alginate/poly-L-lysine capsules : mechanical properties and drug release characteristics », *Soft Matter* **7** (2011), p. 6684-6694.
- [13] A. Shahravan, T. Matsoukas, « Encapsulation and controlled release from core-shell nanoparticles fabricated by plasma polymerization », *J. Nanopart. Res.* **14** (2012), article no. 668.
- [14] L. Rolland, E. Santanach-Carreras, T. Delmas, J. Bibette, N. Bremond, « Physicochemical properties of aqueous core hydrogel capsules », *Soft Matter* **10** (2014), p. 9668-9674.
- [15] G. Ben Messaoud, L. Sánchez-González, L. Probst, C. Jeandel, E. Arab-Tehrany, S. Desobry, « Physico-chemical properties of alginate/shellac aqueous-core capsules : Influence of membrane architecture on riboflavin release », *Carbohydr. Polym.* **144** (2016), p. 428-437.
- [16] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, 1962.
- [17] C. Bielinski, L. Xia, G. Helbecque, B. Kaoui, « Mass transfer from a sheared spherical rigid capsule », *Phys. Fluids* **34** (2022), article no. 031902.
- [18] R. Hilpert, « Wärmeabgabe von geheizten Drähten und Rohren im Luftstrom », *Forschung auf dem Gebiet des Ingenieurwesens* **4** (1933), p. 215-224.
- [19] S. W. Churchill, M. Bernstein, « A correlating equation for forced convection from gases and liquids to a circular cylinder in crossflow », *J. Heat Transfer* **99** (1977), p. 300-306.
- [20] S. Whitaker, « Forced convection heat transfer correlations for flow in pipes, past flat plates, single cylinders, single spheres, and for flow in packed beds and tube bundles », *AIChE J.* **18** (1972), n° 2, p. 361-371.
- [21] E. E. Michaelides, *Particles, bubbles and drops, their motion, heat and mass transfer*, World Scientific, 2006.
- [22] B. Kaoui, « Flow and mass transfer around a core-shell reservoir », *Phys. Rev. E* **95** (2017), article no. 063310.
- [23] C. Bielinski, N. Le, B. Kaoui, « Unsteady mass transfer from a core-shell cylinder in crossflow », *Phys. Rev. Fluids* **6** (2021), article no. 023501.
- [24] C. Bielinski, « Impact de l'écoulement sur le transfert de masse à partir de particules : Applications biomédicales », Thèse, Université de technologie de Compiègne, 2022.
- [25] N. A. Frankel, A. Acrivos, « Heat and mass transfer from small spheres and cylinders freely suspended in shear flow », *Phys. Fluids* **11** (1968), n° 9, p. 1913-1918.
- [26] A. Acrivos, « Heat transfer at high Péclet number from a small sphere freely rotating in a simple shear field », *J. Fluid Mech.* **46** (1971), p. 233-240.
- [27] G. G. Poe, A. Acrivos, « Closed streamline flows past small rotating particles : Heat transfer at high Péclet numbers », *Int. J. Multiphase Flow* **2** (1976), p. 365-377.
- [28] G. K. Batchelor, « Mass transfer from a particle suspended in fluid with a steady linear ambient velocity distribution », *J. Fluid Mech.* **95** (1979), p. 369-400.
- [29] A. D. Polyani, V. V. Dil'man, « New methods of the mass and heat transfer theory- II. The methods of asymptotic interpolation and extrapolation », *Heat Mass. Transf.* **28** (1985), n° 1, p. 45-58.
- [30] G. Subramanian, D. Koch, « Inertial effects on the transfer of heat or mass transfer from neutrally buoyant spheres in a steady linear velocity field », *Phys. Fluids* **18** (2006), article no. 073302.
- [31] P. W. Longest, C. Kleinstreuer, « Interacting effects of uniform flow, plane shear, and near-wall proximity on the heat and mass transfer of respiratory aerosols », *Int. J. Heat Mass Transfer* **47** (2004), p. 4745-4759.
- [32] Y. Wang, J. G. Brasseur, « Enhancement of mass transfer from particles by local shear-rate and correlations with application to drug dissolution », *AIChE J.* **65** (2019), n° 8, article no. 16617.
- [33] B. Kaoui, « Computer simulations of drug release from a liposome into the bloodstream », *Eur. Phys. J. E* **41** (2018), n° 2, article no. 20.