



Open Archive TOULOUSE Archive Ouverte (OATAO)

OATAO is an open access repository that collects the work of Toulouse researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in : <http://oatao.univ-toulouse.fr/>
Eprints ID : 10580

To cite this version : Khouzam, Ali and Mojtabi, Abdelkader and Charrier-Mojtabi, Marie-Catherine and Yacine, Loujaine Nouveau procédé de séparation des espèces d'un fluide binaire par convection mixte. (2013) In: 21e Congrès Français de Mécanique (CFM), 26 August 2013 - 30 August 2013 (Bordeaux, France).

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository administrator: staff-oatao@listes-diff.inp-toulouse.fr

Nouveau procédé de séparation des espèces d'un fluide binaire par convection mixte

A. KHOUZAM^{a, b}, A. MOJTABI^{a, b}, M.C. CHARRIER-MOJTABI^c, L. YACINE^{a, b}

^a Université de Toulouse ; INPT, UPS; IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse); 1, Allée du Professeur Allée Camille Soula, F-31400 Toulouse, France

^b CNRS; IMFT; F-31400 Toulouse, France

^c Laboratoire PHASE, EA 3028, UFR PCA, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062, Toulouse cedex, France

Résumé :

Lorsqu'on soumet une solution initialement homogène, constituée d'au moins deux espèces chimiques, à un gradient thermique, celui-ci induit un transfert des constituants au sein du mélange : ce phénomène est appelé thermodiffusion ou effet Soret. Le couplage entre la convection et la thermodiffusion, appelé diffusion thermogravitationnelle conduit, sous certaines conditions, à une séparation des espèces plus importante qu'en thermodiffusion. Dans les colonnes thermogravitationnelles verticales le gradient thermique imposé induit non seulement la thermodiffusion mais également le mouvement convectif. Nous proposons dans ce travail une nouvelle technique permettant d'améliorer le procédé de séparation en découplant le gradient thermique de la vitesse convective. On considère pour cela, une cavité rectangulaire, horizontale, remplie d'un fluide binaire et soumise à un flux de chaleur vertical. La paroi supérieure est animée d'une vitesse uniforme, ce qui permet de disposer de deux paramètres de contrôle indépendants. Les résultats analytiques et numériques obtenus sont en parfait accord

Abstract :

A thermal gradient applied to a binary mixture, initially homogeneous, induces a mass transfer of the components inside the mixture: this phenomenon is called thermodiffusion or Soret effect. The combination of two phenomena, convection and thermodiffusion is called thermogravitational diffusion. The coupling between these two phenomena leads, in some circumstances, to large species separation. In a vertical cavity heated from the side (thermogravitational column) the temperature gradient induces not only the thermodiffusion phenomena but also the convective flow. We propose in this work a new technique to improve the separation process by decoupling the thermal gradient of the convective velocity. We consider, a horizontal rectangular cavity filled with binary fluid and subjected to a vertical heat flux. The upper wall is driven at a uniform velocity, resulting in two independent control parameters. The analytical and numerical results obtained are in good agreement.

Mots clefs: thermodiffusion, convection, séparation, fluide binaire, effet Soret.

1 Introduction

Le couplage de la thermodiffusion, appelé effet Soret, et de la convection naturelle est appelée diffusion thermogravitationnelle. Ce couplage conduit à une séparation des constituants du mélange beaucoup plus importante que celle induite par la thermodiffusion seule. En 1938, Clusius et Dickel [1] ont considéré une colonne thermogravitationnelle (TGC), constituée de deux cylindres coaxiaux, verticaux de grande extension chauffés différemment. Ils ont observé une séparation importante des constituants du mélange gazeux remplissant la colonne verticale et ont suggéré l'utilisation de cette technique pour la séparation des isotopes. En 1939, Furry, Jones et Onsager (FJO) [2] ont établi les équations de bilan pour décrire le processus de diffusion thermogravitationnelle pour un mélange binaire de gaz confiné dans une cavité rectangulaire verticale, de grand rapport d'aspect, différemment chauffée. Dans ce travail, les auteurs ont émis une hypothèse simplificatrice intéressante consistant à ne pas prendre en compte le rôle de la concentration sur

la masse volumique dans le terme de force de volume appelée depuis «l'effet oublié». En 1968, Horne et Bearman [3] ont étendu la théorie FJO aux cas des solutions binaires dans une colonne thermogravitationnelle cylindrique.

Ecenarro et al. [4], et Horne and Bearman [3] ont repris la théorie de FJO sans faire l'hypothèse de l'effet oublié. En milieu poreux, en se basant sur la théorie de Furry, Jones et Onsager [2], Lorenz et Emery [5] ont obtenu la solution analytique du problème en milieu poreux.

Marcoux et Charrier-Mojtabi [6] ont réalisé des simulations numériques et comparé les résultats obtenus avec des résultats analytiques en diffusion thermogravitationnelle dans une cellule rectangulaire verticale, en milieu poreux. En 2003, Platten et al. [7] ont démontré que l'on pouvait augmenter la séparation moléculaire pour un fluide binaire confiné dans une colonne thermogravitationnelle en inclinant la colonne, chauffée par le haut, d'un certain angle par rapport à la verticale. El Hajjar et al. [8] ont étudié la convection thermosolutale avec effet Soret, dans une couche poreuse horizontale chauffée par le bas, saturée par un fluide binaire et soumise à des vibrations verticales de haute fréquences et de faibles amplitudes. Les auteurs ont montré que les vibrations induisent une séparation des espèces pour une plus large gamme des valeurs des facteurs de séparation. Dans le présent travail, on propose d'étudier la séparation des espèces d'un fluide binaire remplissant une cavité rectangulaire de hauteur H , et d'une longueur L (figure 1). Les axes de coordonnées x et z sont respectivement orientés suivant les directions horizontale et verticale. La cavité, remplie d'un fluide newtonien incompressible, est placée dans le champ de pesanteur. Les parois horizontales de la cavité sont imperméables et soumises à un flux de chaleur uniforme. Les autres parois sont imperméables et adiabatiques. La présence simultanée de la gravité et du flux de chaleur donnent naissance à des mouvements convectifs de plus la plaque supérieure de la cavité est animée d'une vitesse constante.

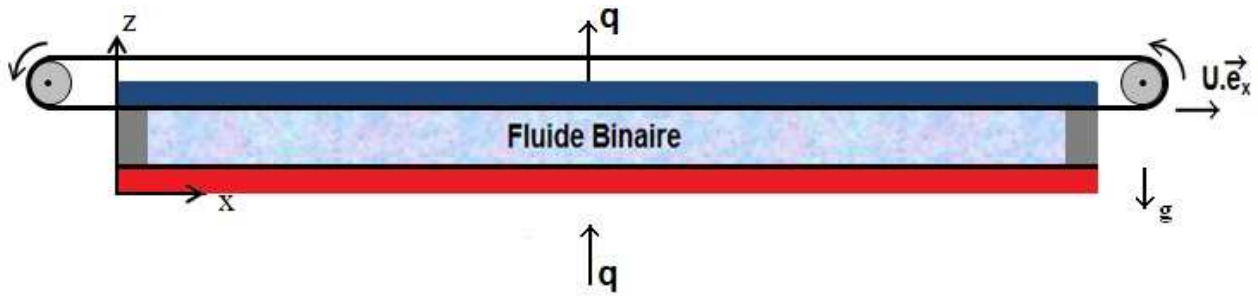


FIG.1- Configuration géométrique.

2 Formulation mathématique

Pour la modélisation mathématique, nous considérons que la longueur de l'enceinte est suffisamment grande par rapport aux autres dimensions pour que la présence des parois verticales ne modifie pas la structure de l'écoulement sur la plus grande partie de la cellule. On suppose que les équations du problème sont écrites dans le cadre l'approximation de Boussinesq. Cette approximation suppose que les grandeurs thermophysiques du mélange binaire sont constantes à l'exception de la masse volumique du mélange dans le terme de force volumique générateur de la convection où la masse volumique est donnée par :

$$\rho_0 = \rho[1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_C(C - C_0)] \quad (1)$$

Où : $\beta_T = -\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_C$, $\beta_C = -\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial C}\right)_T$ sont respectivement les coefficients d'expansion thermique et massique du fluide binaire, T la température et C la fraction massique du constituant le plus lourd, (ρ_0, T_0, C_0 les valeurs de ces grandeurs à l'état de référence).

Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces s'écrivent sous forme adimensionnelle :

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} = -\nabla P + Ra Pr [T - \psi C] \vec{e}_z + Pr \nabla^2 \vec{V} \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T = \nabla^2 T \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla C = \frac{1}{Le} (\nabla^2 C + \nabla^2 T) \quad (5)$$

3 Conditions aux limites adimensionnelles

Les conditions aux limites dynamiques, thermiques et massiques sont données par :

$$\begin{aligned} \vec{V}(x, z = 1) &= Pe \quad \forall x \in [0, A] \\ \vec{V}(x, z = 0) &= \vec{V}(x = (0, A), z) = 0 \quad \forall x \in [0, A] \end{aligned} \quad (6)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = -1, \quad \text{pour } z = 0 \text{ et } z = 1 \quad \forall x \in [0, A] \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x, z)}{\partial z} &= 1 \quad \text{pour } z = 0 \text{ et } z = 1 \\ \frac{\partial C(x, z)}{\partial x} &= \frac{\partial T(x, z)}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = 0 \text{ et } x = A, \quad \forall z \in [0, 1] \end{aligned} \quad (8)$$

Où les variables adimensionnelles sont données par:

$$(x, y, z) = \frac{(x^*, y^*, z^*)}{H}, t = \frac{t^*}{t_{ref}}, (u, v, w) = \frac{(u^*, v^*, w^*)}{V_{ref}}, P = \frac{P^*}{P_{ref}}, T = \frac{T^* - T_{ref}^*}{\Delta T^*}, C = \frac{C^* - C_{ref}^*}{\Delta C^*}$$

Avec :

$$\Delta T^* = T_2^* - T_1^*, \quad \Delta C^* = \Delta T^* C_0^* (1 - C_0^*) \frac{D_T}{D}$$

$$\text{Où : } V_{ref} = \frac{a}{H}, t_{ref} = \frac{H^2}{a}, P_{ref} = \rho_0 \frac{a^2}{H^2}, q_{ref} = q, C_{ref} = C_0$$

Le problème considéré dépend de six paramètres adimensionnels qui sont le nombre de Rayleigh thermique, $Ra = (g\beta_T H^3 \Delta T)/\nu a$, le nombre de Lewis, $Le = a/D$, le nombre de Prandtl, $Pr = \nu/a$, le nombre de Péclet, $Pe = Pr Re$ ou le nombre de Reynolds, $Re = UL/\nu$ où a et ν désignent respectivement la diffusivité thermique et cinématique du fluide binaire, le facteur de séparation $\psi = -\frac{\beta_C D_T}{\beta_T D} C_0 (1 - C_0)$ et le rapport d'aspect $A = L/H$.

4 Solution analytique

Pour une cavité présente de grand rapport d'aspect $A \gg 1$, les lignes de courant, au centre de la cavité, sont quasi parallèles à l'axe des x . Ceci permet de négliger la composante de la vitesse perpendiculaire aux parois horizontales (approximations de l'écoulement parallèle utilisée par El Hajjar et al. [9]), de telle sorte que :

$$\vec{V}(x, z) = u(z) \vec{e}_x, \quad \forall x \in]0, A[\quad (9)$$

Les profils de la température et de la concentration s'écrivent alors sous la forme d'une somme d'un terme définissant une variation longitudinale linéaire et d'un autre terme donnant la distribution transversale :

$$T(x, z) = C_T x + f(z), \quad C(x, z) = C_S x + g(z) \quad (10)$$

En substituant ces profils dans le système (2-5) et en éliminant la pression de l'équation (3) nous obtenons le système d'équations aux dérivées partielles suivant :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^3 u(z)}{\partial z^3} - Ra \frac{\partial}{\partial x} (T - \psi C) &= 0 \\ \nabla^2 T &= C_T u(z) \\ C_S Le u(z) - \left(\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) &= 0\end{aligned}\quad (11)$$

D'autres conditions sont nécessaires pour résoudre ce système d'équations, les conditions aux limites sur les parois verticales n'étant pas prises en compte, car nous nous intéressons à l'écoulement loin des parois. On traduit pour cela que le débit massique est nul à travers toute section droite verticale de la cavité et que la fraction massique d'un des constituants, ici le plus lourd, sur la totalité de la cellule soit conservée :

$$\int_0^1 u dz = 0 \quad \forall x^* \in [0, A],$$

$$\int_0^1 \int_0^A C dz dx = 0$$

En appliquant les conditions aux limites (6-8), et les conditions mentionnées ci-dessus, on détermine alors les profils de vitesse, de température et de concentration :

$$v = \Psi_0 z(2z - 1)(z - 1) + (3z^2 - 2z)Pe \quad (12)$$

$$\begin{aligned}T &= C_T x + \frac{1}{10} \Psi_0 C_T z^5 - \frac{1}{4} \Psi_0 C_T z^4 + \frac{1}{6} \Psi_0 C_T z^3 - z + \frac{1}{12} C_T Pe [3z^4 - 4z^3] \\ C &= f(\Psi_0, Pe, C_T, C_S, Le, z, x)\end{aligned}\quad (13)$$

L'expression du champ de concentration est trop longue pour être explicitée ici. Ψ_0 représente l'intensité de la contribution du champ de vitesse induit par la convection naturelle seulement est, donné par :

$$\Psi_0 = \frac{1}{12} Ra (C_T - \psi C_S) \quad (14)$$

Pour la détermination du gradient de concentration C_S , nous utilisons le fait qu'à l'état stationnaire le débit d'un des constituants à travers toute section verticale est nulle: $\int_0^1 (Le v C - C_S + C_T) dz = 0$. Après intégration, nous obtenons une équation du troisième degré en C_S dont les coefficients sont des fonctions des nombres adimensionnels du problème (Ra, Pe, Le, ψ, A). La résolution de cette équation, conduit à l'expression de C_S :

$$C_S = \frac{105840(-5Pe - Le\Psi_0 + 5LePe + \Psi_0)}{(\Psi_0^2 - 9\Psi_0Pe + 24Pe^2 + 2520)(24Le^2Pe^2 - 9\Psi_0Le^2Pe + \Psi_0^2Le^2 + 2520)} \quad (15)$$

On utilise la même procédure pour trouver l'expression du gradient de température C_T . Le flux thermique à travers toute section verticale de la cellule est nul :

$$\int_0^1 (vT - C_T) dz = 0 \quad (16)$$

L'expression donnant le gradient de température est donnée par:

$$C_T = \frac{42(\Psi_0 - 5Pe)}{\Psi_0^2 - 9\Psi_0Pe + 24Pe^2 + 2520} \quad (17)$$

En combinant les équations (15, 16, 18), et après arrangement, nous obtenons une équation de cinquième degrés permettant de calculer Ψ_0 : $\Psi_0 = f(Pe, Ra, Le)$.

5 Résultats et discussion

Des simulations numériques ont été effectuées pour corroborer les résultats analytiques obtenus. À cette fin, nous avons utilisé le logiciel Comsol Multiphysics avec un maillage rectangulaire, parfaitement adapté à la

géométrie d'étude. La résolution spatiale est de 120×20 pour $A = 10$. Sur la figure 2 on présente l'évolution de la séparation en fonction du nombre de Péclet (Pe) avec $Le = 230$, $\psi=0.1$, pour une cavité chauffée par le bas ($Ra > 0$) (Fig 2-a) pour différentes valeurs de nombre de Rayleigh ($Ra = 300, Ra = 60$ et $Ra = 2$), et pour une cavité chauffée par le haut ($Ra < 0$) (Fig 2-b) avec ($Ra = -300, Ra = -60$ et $Ra = -2$). La solution obtenue analytiquement est représentée en trait continu ou discontinu. Cette solution analytique est en bon accord avec la solution numérique représentée par des symboles (points). On peut voir que la séparation présente un maximum correspondant au couplage optimal entre la thermodiffusion et la vitesse appliquée sur la paroi supérieure. Pour une cavité chauffée par le bas ($Ra > 0$), et pour des faibles valeurs de Rayleigh ($Ra = 2$) la séparation est nulle à $Pe = 0$ (le nombre de Rayleigh est inférieur à la valeur critique caractérisant le déclenchement de la convection). En appliquant une vitesse sur la paroi supérieure ($Pe > 0$) la séparation augmente avec l'augmentation du nombre de Péclet jusqu'à une valeur optimale Pe_{opt} au-delà de laquelle la séparation diminue. Ceci peut s'expliquer par le fait que, lorsque le nombre de Péclet est trop faible (*i.e.* la vitesse de la paroi supérieure est faible), ou lorsque le nombre de Péclet est trop élevé, le temps de diffusion thermique n'est plus en bonne adéquation avec le temps convectif ce qui entraîne une moins bonne séparation des espèces entre les deux extrémités de la cellule. Pour des valeurs plus grandes du nombre de Rayleigh ($Ra = 60, Ra = 300$), la convection se déclenche, et on remarque que la séparation est possible même pour $Pe = 0$.

Dans le cas où la cavité est chauffée par le haut ($Ra < 0$), le fluide le plus chaud migre vers le haut de la cavité et le plus froid migre vers le bas. On est dans une situation toujours stable, par conséquent, la séparation n'est possible que pour $Pe \neq 0$ (la paroi supérieure en mouvement induit un phénomène convectif). Sur les figures 3 et 4, on présente le champ de fractions massique pour différentes valeurs du nombre de Péclet et pour $Ra = 2, 300$ (FIG.3) et $Ra = -2, -300$ (FIG.4), avec $Le = 230$, $Pr = 10, \psi = 0.1$ et $A = 10$. Les lignes représentent les isoconcentrations tandis que les couleurs représentent l'intensité de la fraction massique du constituant le plus lourd. On observe que la déformation des isoconcentrations augmente quand la vitesse de la paroi supérieure augmente. De plus, la déformation des isoconcentrations est plus importante pour $Ra = \mp 300$ que pour $Ra = \mp 2$, puisque à $Ra = 300$ la vitesse convective est plus importante que pour $Ra = 2$.

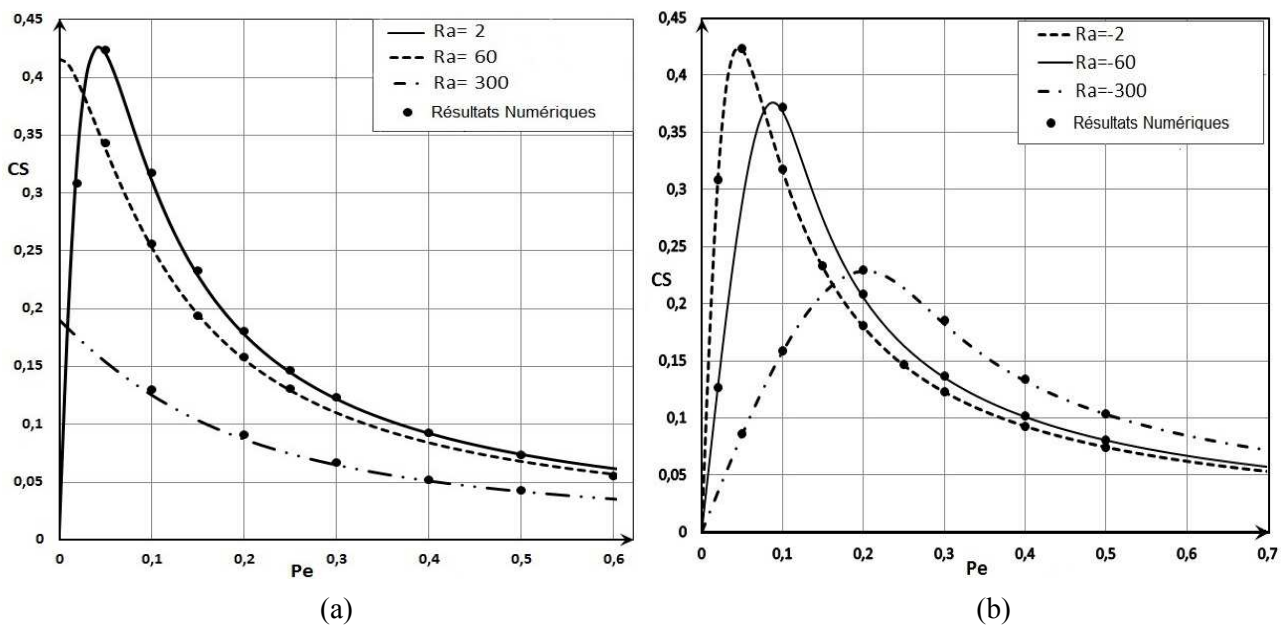
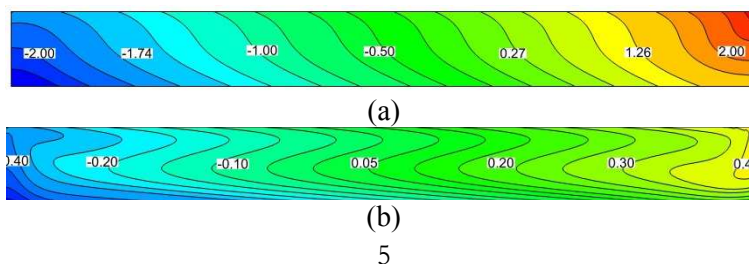


FIG.2- Variation de la fraction massique Cs en fonction du nombre de Péclet Pe , pour $Le = 230, \psi = 0.1$, et pour différents nombres de Rayleigh (a) chauffage par le bas (b) chauffage par le haut.



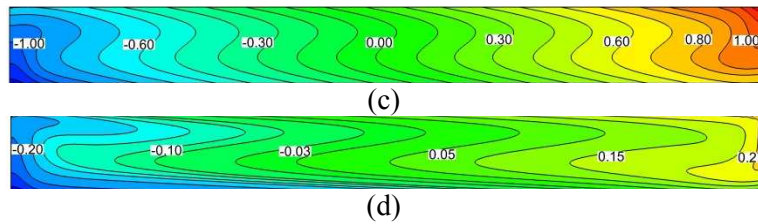


FIG.3- Isoconcentrations et variation du champ de fraction massique en fonction du nombre de Péclet Pe (a) $Pe = 0.05, Ra = 2$, (b) $Pe = 0.5, Ra = 2$,(c) $Pe = 0.05, Ra = 300$ (d) $Pe = 0.5, Ra = 300$ avec $Le = 230, \psi = 0.1, Pr = 10$ et $A = 10$.

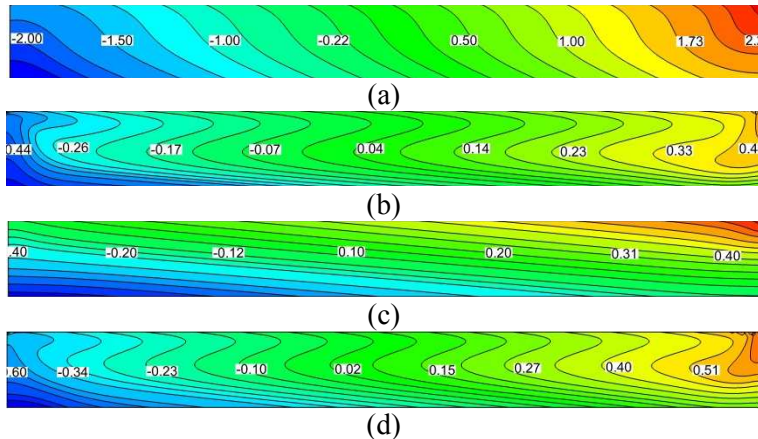


FIG.4- Isoconcentrations et variation du champ de fraction massique en fonction du nombre de Péclet Pe (a) $Pe = 0.05, Ra = -2$, (b) $Pe = 0.5, Ra = -2$,(c) $Pe = 0.05, Ra = -300$ (d) $Pe = 0.5, Ra = -300$ pour $Le = 230, \psi = 0.1, Pr = 10$ et $A = 10$.

6 Conclusion

Dans cette étude, nous avons proposé une nouvelle méthode permettant la séparation des espèces dans une cavité rectangulaire, remplie d'un fluide binaire. Cette méthode consiste à mettre en mouvement, avec une vitesse uniforme, la paroi supérieure de la cavité soumise au flux de chaleur uniforme. Cette technique permet de disposer de deux paramètres de contrôle que l'on peut faire varier indépendamment l'un de l'autre contrairement à ce qui est fait habituellement dans les colonnes de diffusion thermogravitationnelle où le gradient thermique imposé induit l'importance de la thermodiffusion et du mouvement convectif. Nous avons déterminé analytiquement la séparation en fonction du nombre de Péclet et du nombre de Rayleigh, qui constituent les deux paramètres de contrôle indépendants. Des simulations numériques directes ont montré un très bon accord entre résultats numériques et analytiques.

Références

- [1] K. Clusius, and G. Dickel, *Naturwissenschaften* 26, 33 (1938).
- [2] W.H.Furry, R.C.Jones, and L.Onsager, *Phys. Rev.* 55, 1083 (1939).
- [3] F. H. Horne and R. J. Bearman, *Chemical Physics* 49, 3 (1968).
- [4] O. Ecenarro, J.A. Madriaga, J. Navarro, C.M. Santamaria, J.A. Carrion, J.M. Saviron, *Journal of Physics-Condensed Matter* 1, 9741 (1989).
- [5] M. Lorenz and A.H. Emery, *The packed thermodiffusion column*, *Chem. Eng. Sc.*, pp. 16-23, (1959).
- [6] M. Marcoux, and M. C. Charrier-Mojtabi, *Comptes Rendus Serie II,B - Mécanique Physique Astronomie* 326, 539 (1998).
- [7] J. K. Platten, M. M. Bou-Ali, and J. F. Dutrieux, *Journal of Physical Chemistry B* 107, 11763 (2003).
- [8] B. Elhajjar, M. C. Charrier-Mojtabi, and A. Mojtabi, *Physical Review E* 77, 6 (2008).
- [9] B. Elhajjar, A. Mojtabi, P. Costesque, M.C. Charrier-Mojtabi, *Int. J. H.M.T.* 53, 4844 (2010).