



HAL
open science

Nouvelle approche pour la séparation des constituants d'un mélange binaire en milieu poreux

Bilal Elhajjar, Marie-Catherine Charrier-Mojtabi, Abdelkader Mojtabi

► **To cite this version:**

Bilal Elhajjar, Marie-Catherine Charrier-Mojtabi, Abdelkader Mojtabi. Nouvelle approche pour la séparation des constituants d'un mélange binaire en milieu poreux. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. hal-03361683

HAL Id: hal-03361683

<https://hal.science/hal-03361683>

Submitted on 1 Oct 2021

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.

Nouvelle approche pour la séparation des constituants d'un mélange binaire en milieu poreux

Bilal Elhajjar^a, Marie-Catherine Charrier-Mojtabi^{b*}, Abdelkader Mojtabi^a

^a IMFT, UMR CNRS/INP/UPS N°5502, UFR MIG, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062, Toulouse Cedex, France.

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

*(auteur correspondant : cmojtabi@cict.fr)

Résumé :

Nous étudions la séparation thermogravitationnelle des constituants d'un mélange de fluide binaire saturant une couche poreuse horizontale, en présence de l'effet Soret. Les parois horizontales de la cavité sont imperméables à la matière et maintenues à des températures constantes et différentes. Le système d'équations régissant le problème admet une solution d'équilibre avec une stratification verticale de la température et de la concentration. Cette solution perd sa stabilité via une bifurcation stationnaire pour des valeurs du facteur de séparation, $\Psi > \Psi_0$ et pour $\Psi < \Psi_0$, elle perd sa stabilité via une bifurcation de Hopf. Pour un chauffage par le bas, l'écoulement issu de la bifurcation stationnaire devient monocellulaire à partir d'une certaine valeur de $\Psi \geq \Psi_{\text{mono}} > 0$ et conduit à une séparation des espèces entre les deux extrémités de la cellule. On se propose de déterminer si la perte de stabilité de l'écoulement monocellulaire a lieu après l'optimum de séparation.

Abstract :

We study the thermogravitational separation of the components of a binary fluid mixture saturating a horizontal porous layer, in the presence of the Soret effect. The horizontal walls of the cavity are impermeable and maintained at constant and different temperatures. The system of equations governing the problem admits an equilibrium solution with a vertical stratification of temperature and concentration. This solution loses its stability via a stationary bifurcation for values of the separation ratio $\Psi > \Psi_0$ and for $\Psi < \Psi_0$, it loses its stability via a Hopf bifurcation. For a cavity heated from below, the flow resulting from the stationary bifurcation becomes monocellular beyond a certain value of $\Psi \geq \Psi_{\text{mono}}$ and leads to a separation of the species between the two ends of the cell. We propose to determine if the monocellular flow loses its stability after the optimum of separation.

Mots-clés :

Convection, Effet Soret, Stabilité linéaire

1 Introduction

Un fluide binaire placé dans le champ de la pesanteur et soumis à un gradient thermique, est le siège non seulement des mouvements convectifs mais aussi de la thermodiffusion qui se manifeste par un gradient de concentration induit par le gradient thermique. Dans ce cas le vecteur densité de flux de matière \vec{J} , du constituant le plus lourd de fraction massique C est donné par la relation suivante :

$$\vec{J} = -\rho D \vec{\nabla} C - \rho C(1-C) D_T \vec{\nabla} T \quad (1)$$

D désigne le coefficient de diffusion massique, D_T le coefficient de thermodiffusion et ρ la masse volumique.

La combinaison de la convection et de la thermodiffusion s'appelle thermogravitation, elle est utilisée pour la séparation des constituants d'un mélange binaire.

Ce sont Furry et al. (1939) qui les premiers ont développé la théorie de la thermodiffusion pour interpréter les processus expérimentaux de séparation d'isotopes. Ils ont utilisé pour cela une cavité parallélépipédique verticale de grand rapport d'aspect, différentiellement chauffée. Ensuite plusieurs auteurs ont essayé d'améliorer ce dispositif pour augmenter la séparation. Emery et al. (1963) ont proposé d'introduire un milieu poreux dans la cavité, Platten et al. (2003) ont proposé d'incliner la cavité d'un certain angle par rapport à la verticale pour augmenter la séparation. Elhajjar et al. (2006) ont proposé d'utiliser une cavité horizontale avec des gradients thermiques imposés sur les parois horizontales pour disposer de deux paramètres physiques indépendants qui permettent de mieux contrôler la séparation.

Le phénomène de la double-diffusion dans un milieu poreux dû aux gradients de température et de concentration a été largement étudié en raison de ses nombreuses applications fondamentales et industrielles. Un bilan des recherches récentes dans ce domaine a été fait par Nield et Bejan (1998).

2 Formulation mathématique

On considère une cavité de longueur L et de hauteur H remplie d'un milieu poreux et saturée par un mélange binaire. Le domaine étudié est défini par : $(x, z) \in \Omega = [0, L] \times [0, H]$. Les parois horizontales sont maintenues à des températures constantes et différentes T_1 et T_2 , les parois verticales sont adiabatiques et toutes les parois sont imperméables à la matière. On utilise les hypothèses suivantes :

- Les différences de température sont suffisamment faibles pour pouvoir utiliser l'approximation de Boussinesq.
- On néglige l'effet de Dufour.

La masse volumique en fonction de la température et de la fraction massique du constituant le plus lourd est donnée par :

$$\rho = \rho_0[1 - \beta_T(T - T_r) - \beta_C(C - C_r)] \quad (2)$$

β_T et β_C sont les coefficients d'expansion thermique et massique, T_r et C_r sont la température et la fraction massique de référence.

La formulation mathématique adimensionnelle du problème est donnée par :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \\ \vec{\nabla} P + \vec{V} = Ra(T + \Psi C) \vec{e}_z \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T = \nabla^2 T \\ \varepsilon^* \frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} C = \frac{1}{Le} \nabla^2 (C - T) \end{cases} \quad (3)$$

Les équations (3) sont rendues adimensionnelles en utilisant les grandeurs de référence suivantes : H pour les longueurs, $\lambda^*/(H(\rho c)_f)$ pour la vitesse, $((\rho c)^* H^2) / \lambda^*$ pour le temps, $(\lambda^* \mu)/(K(\rho c)_f)$ pour la pression, $\Delta T = T_1 - T_2$ pour la température, et $\Delta C = -\Delta T C_i (1 - C_i) (D_T^*/D^*)$ pour la fraction massique.

Le problème considéré dépend de cinq paramètres adimensionnels: le nombre de Rayleigh thermique, $Ra = (Kg\beta_T H \Delta T)/(a^* \nu)$, le facteur de séparation $\Psi = (-\beta_T/\beta_C)(D_T^*/D^*)C_i(1-C_i)$, le nombre de Lewis $Le = a^*/D^*$, la porosité normalisée $\varepsilon^* = \varepsilon(\rho c)_f/(\rho c)^*$ et le rapport de forme A . Où ν est la viscosité cinématique du fluide, K la perméabilité du milieu poreux, $(\rho c)^*$ la capacité calorifique volumique équivalente, $(\rho c)_f$ la capacité calorifique volumique du fluide,

λ^* la conductivité thermique équivalente, a^* la diffusivité thermique équivalente, ε la porosité du milieu poreux, D^* et D_T^* les coefficients de diffusion massique et de thermodiffusion en milieu poreux et C_i la fraction massique initiale du constituant le plus lourd.

Les conditions aux limites du problème sont données par :

$$\begin{cases} T = 1 \text{ pour } z = 0 ; T = 0 \text{ pour } z = 1 \\ \vec{\nabla} C \cdot \vec{n} = \vec{\nabla} T \cdot \vec{n} \text{ pour } z = 0,1 \\ \partial T / \partial x = \partial C / \partial x = 0 \text{ pour } x = 0, A \\ \vec{V} \cdot \vec{n} = 0 \forall M \in \partial\Omega \end{cases} \quad (4)$$

Ce système d'équations admet une solution d'équilibre $(T_0, C_0, \vec{V}) = (1 - z, cste - z, \vec{0})$. Sovran et al. (2001) ont étudié la stabilité linéaire de cette solution, ils ont trouvé analytiquement le Rayleigh critique à partir duquel cette solution perd sa stabilité. Ils ont montré que pour $\Psi \geq \Psi_{mono}$ avec $\Psi_{mono} = 1 / ((40/51)Le - 1)$, cette solution perd sa stabilité via une bifurcation stationnaire conduisant à un écoulement monocellulaire et que le Rayleigh critique associé est : $Ra_{cs} = 12 / (Le \Psi)$.

Dans un premier temps nous allons déterminer analytiquement le champ de vitesse, de température et de concentration associés à cet écoulement monocellulaire pour ensuite étudier sa stabilité.

3 Solution analytique de l'écoulement monocellulaire

Nous allons nous intéresser à une cellule de grand rapport d'aspect A et nous utilisons l'hypothèse d'écoulement parallèle utilisé par Ouriemi et al. (2006). L'écoulement de base indicé 0 est alors pris sous la forme :

$$\vec{V}_0 = U_0(z) \vec{e}_x ; T_0 = bx + f(z) ; C_0 = mx + g(z) \quad (5)$$

A l'état stationnaire, en utilisant les hypothèses déjà citées et les conditions aux limites on obtient les profils de vitesse, de température et de concentration.

$$\begin{cases} T_0 = 1 - z \\ U_0 = Ra m \Psi (1/2 - z) \\ C_0 = mx + (m^2 Ra Le \Psi (3z^2 - 2z^3)) / 12 - z - (m^2 Ra Le \Psi) / 24 + (1 - mA) / 2 \\ m = \pm \sqrt{(10 Le Ra \Psi - 120) / (Le Ra \Psi)} \end{cases} \quad (6)$$

Trois remarques sont à faire au niveau de l'expression du paramètre m dans le champ de concentration de base. L'expression sous la racine doit être positive soit $Ra > 12 / (Le \Psi)$ ce qui correspond au Rayleigh critique de déclenchement de la convection. m est négatif ou positif suivant que l'écoulement est dans le sens des aiguilles d'une montre ou dans le sens contraire et les deux écoulements sont possibles suivant la condition initiale. La séparation est définie comme la différence des fractions massiques du constituant le plus lourd entre les deux extrémités gauche et droite de la cellule : $S = mA$, il s'ensuit que la séparation maximale est obtenue pour $Ra = 24 / (Le \Psi)$.

La figure 1 montre la variation de la séparation en fonction du nombre de Rayleigh Ra . On remarque que la séparation admet un maximum, ce maximum correspond au couplage optimal entre la thermodiffusion et la convection. Si Ra est petit, la convection est faible et la séparation se fait principalement par thermodiffusion et dans ce cas elle est faible. Si Ra est grand, la convection est intense et l'écoulement ne permet pas d'obtenir une séparation suffisante. On

notera que l'adimensionnalisation de la fraction massique conduit à des valeurs de S supérieures à 1.

4 Etude de la stabilité linéaire de l'écoulement monocellulaire de grande extension

Pour étudier la stabilité de cette solution monocellulaire, on introduit les perturbations de la vitesse, \vec{v} , de la température, θ et de la concentration, c .

$$\vec{v} = \vec{V} - \vec{V}_0, \quad \theta = T - T_0, \quad c = C - C_0, \quad p = P - P_0.$$

En négligeant les termes du second ordre, on obtient les équations linéaires aux perturbations.

Pour simplifier la prise en compte des conditions aux limites de la température et de la concentration en $z=0,1$, on introduit la nouvelle fonction : $\eta=c-\theta$. En développant les perturbations en modes normaux $(w, \theta, \eta) = (w(z), \theta(z), \eta(z))e^{(Ikx+\sigma t)}$, on obtient le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} (D^2 - k^2)w = -Ra k^2(\theta(1 + \Psi) + \Psi \eta) \\ \sigma \theta - w + Ik \theta U_0 = (D^2 - k^2)\theta \\ \varepsilon \sigma Ik(\eta + \theta) - k^2 U_0(\eta + \theta) - mDw + Ik w DC_0 = (1/Le)Ik(D^2 - k^2)\eta \end{cases} \quad (7)$$

Où D désigne $\partial/\partial z$, k le nombre d'onde dans la direction horizontale ox , $\sigma = \sigma_r + I\sigma_i$ et $I^2 = -1$.

Les conditions aux limites correspondantes sont :

$$w = 0, \quad \theta = 0, \quad \frac{\partial \eta}{\partial z} = 0 \quad \text{en} \quad z = 0, 1 \quad (8)$$

On étudie la stabilité marginale de la solution de base, par la méthode de Galerkin à l'ordre 5. Pour cela les fonctions $(w(z), \theta(z), \eta(z))$ sont écrites sous la forme d'un développement de fonctions polynomiales vérifiant les conditions aux limites.

$$w = \sum_{i=1}^N a_i (z-1)z^i, \quad \theta = \sum_{i=1}^N b_i (z-1)z^i, \quad \eta = c_1 + c_2(z^2 - 2z^3/3) + \sum_{i=1}^{N-2} c_{i+2} (z-1)^2 z^{i+1}$$

Nous avons obtenu et comparé les valeurs critiques conduisant aux régimes stationnaire et instationnaire. Nous avons obtenu, pour les valeurs de Ψ et de Le étudiées que le nombre de Rayleigh conduisant à la transition instationnaire est toujours inférieur à celui conduisant à la bifurcation stationnaire. Nous présentons principalement dans cette étude les valeurs des nombres d'ondes critiques k_c , des Rayleigh critiques Ra_c et des pulsations critiques ω_c . Le nombre de Lewis Le est fixé à 10 dans ce cas $\Psi_{mono} = 0.146$. On détermine les diagrammes de stabilité, $Ra_c = f(\Psi)$, $k_c = f(\Psi)$ et $\omega_c = f(\Psi)$. Les résultats sont illustrés sur les figures 2, 3, et 4 pour le cas $Le=10$, $\varepsilon^*=0.5$. Pour une couche chauffée par le bas, on peut noter que Ra_c admet un maximum pour $\Psi=0.33$ alors que k_c admet un minimum pour $\Psi=0.44$. La pulsation critique augmente toujours avec Ψ . L'analyse de la stabilité nous a permis de définir l'intervalle de variation de Ra où l'écoulement monocellulaire reste stable permettant ainsi d'assurer la séparation des espèces.

5 Simulation numérique

Le système (3) avec les conditions aux limites (4) est résolu par un code d'éléments finis (Comsol). On a utilisé des maillages en quadrangles mieux adaptés pour la forme rectangulaire de la cellule utilisée. On retrouve avec un bon accord les résultats de séparation trouvés analytiquement pour $Le=10$, $\psi=0.2$, $\varepsilon^*=0.5$ et pour un rapport de forme $A=10$ (FIG. 1).

La figure 5 montre les isoconcentrations et les lignes de courant obtenus par la simulation numérique pour $Le=10$, $\Psi=0.2$, $Ra=8$ et $\varepsilon^*=0.5$. On observe un écoulement monocellulaire : dans ce cas par thermodiffusion le constituant le plus lourd du mélange se dirige vers la paroi froide du haut et l'autre constituant se dirige vers la paroi chaude du bas ($\Psi > 0$) puis l'écoulement monocellulaire entraîne l'un des constituants du mélange vers la partie droite de la cavité et l'autre constituant vers la partie gauche. Ceci se traduit par une concentration élevée de l'un des constituants dans la partie gauche de la cellule et une concentration élevée de l'autre constituant dans la partie droite, ce qui conduit à une stratification horizontale du champ de concentration.

Les résultats de la stabilité donnent $Ra_c=36.61$ et $k_c=2.53$ pour $Le=10$, $\Psi=0.2$ et $\varepsilon^*=0.5$ dans une cellule infinie. Par le code d'éléments finis, pour un rapport d'aspect $A=10$, on trouve $Ra_{cnum}=35.1$ et 9 cellules convectives ce qui correspond à $k_{cnum}=2.8$ ($k_{cnum}=(n\pi)/A$ où n est le nombre de cellules convectives). Les différences entre les valeurs trouvées par la méthode de Galerkin et par le code d'éléments finis peuvent résulter soit des approximations faites lors de la détermination de la solution analytique, soit du rapport de forme choisi pour la simulation numérique. En effet la stabilité linéaire a été faite pour une cellule infinie. Pour montrer l'influence du rapport de forme sur les résultats, on a fait d'autres simulations numériques pour une cellule de rapport de forme $A=50$.

Pour $Le=10$, $\Psi=0.2$, et $\varepsilon^*=0.5$, on a trouvé $Ra_{cs}=35.2$ et 43 cellules convectives ce qui correspond à $k_{cnum}=2.69$. On peut remarquer que les différences entre les valeurs trouvées numériquement pour les rapports d'aspect 10 et 50 sont faibles, ce qui montre que les différences observées entre les valeurs analytiques et numériques sont principalement dues aux approximations faites lors de la détermination de la solution analytique décrivant l'écoulement monocellulaire.

6 Conclusions

Nous avons étudié l'écoulement monocellulaire apparaissant à la naissance de la convection en fluide binaire dans une cellule horizontale chauffée par le bas et remplie d'un milieu poreux. Dans le cas où le facteur de séparation est positif et supérieur à une certaine valeur, nous avons montré qu'il est possible de réaliser la séparation des constituants du mélange entre les deux extrémités de la cellule. De plus l'écoulement monocellulaire obtenu après la perte de stabilité de la solution d'équilibre et qui permet la séparation, reste stable au-delà du nombre de Rayleigh assurant la séparation optimale.

Références

- Sovran, O., Charrier-Mojtabi, M.C & Mojtabi, A. 2001 Naissance de la convection thermosolutale en couche poreuse infinie avec effet Soret. *C.R.A.S., série II b*, N°4, 287-293.
- Furry, W.H., Jones, R.C. & Onsager, L. 1939 On the theory of isotope separation by thermal diffusion. *Phys. Rev.*, **55**, 1083-1095.
- Emery, A.H. & Lorenz, M. 1963 Thermal diffusion in packed column. *Amer. Inst. Chem. Engrg.*, **J. 9**, 661-663.
- Platten, J.K., Bou-Ali, M.M. & Dutrieux, J.F. 2003 Enhanced molecular separation in inclined thermogravitational columns, *J. Phys. Chem.*, **B 107**, 11763-11767.

Elhajjar, B., Mojtabi, A., Marcoux, M. & Charrier-Mojtabi, M.C. 2006 Étude de la thermogravitation dans une couche fluide horizontale, *Comptes Rendus Mécanique*, **Volume 334**, Issue 10, 621-627.

Nield, A.A., & Bejan, A. 1998 *Convection in porous media*, Springer Verlag, New-York.

Ouriemi, M., Vasseur, P., Bahloul, A., & Robillard, L. 2006 Natural convection in a horizontal layer of a binary mixture, *International Journal of Thermal Sciences*, **Volume 45**, Issue 8, 752-759.

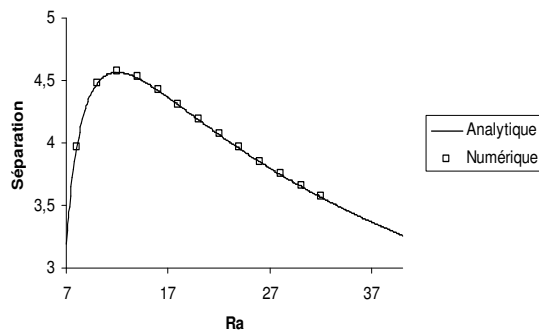


FIG. 1 – Courbe de séparation pour $Le=10$, $\Psi=0.2$, $\epsilon^*=0.5$

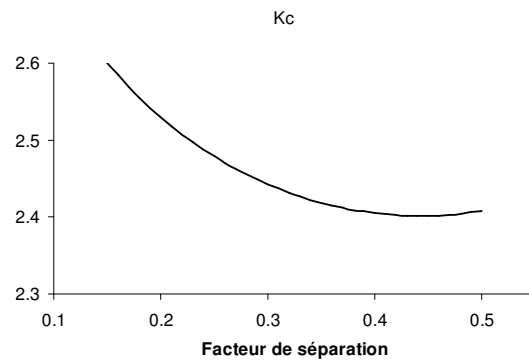


FIG. 2 – $kc=f(\Psi)$, $Le=10$, $\epsilon^*=0.5$

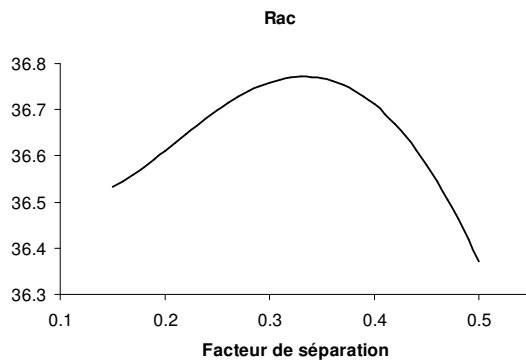


FIG. 3 – $Rac=f(\Psi)$, $Le=10$, $\epsilon^* = 0.5$

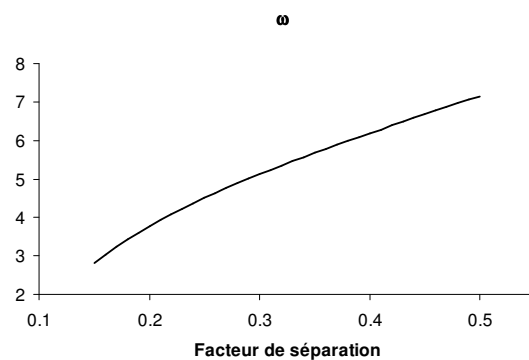


FIG. 4 – $\omega c=f(\Psi)$, $Le=10$, $\epsilon^* = 0.5$

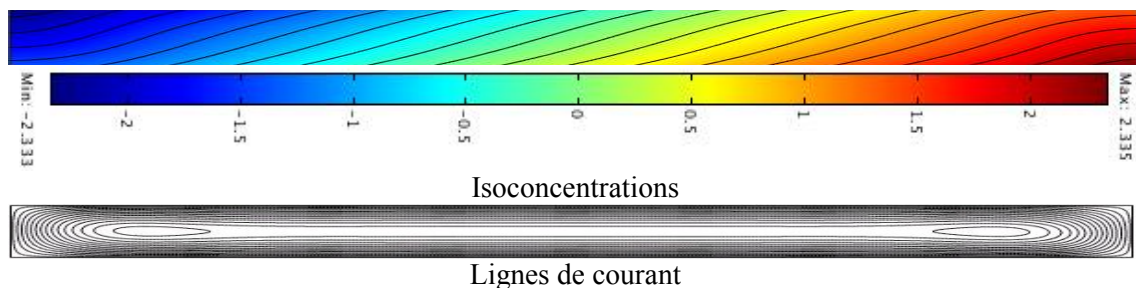


FIG. 5 – Isoconcentrations et lignes de courant pour $Le=10$, $\Psi=0.2$, $Ra=8$, $\epsilon^*=0.5$