



Analyse numérique du processus de condensation hétérogène pour la collecte d'agents pathogènes aéroportés par un filtre électrostatique semi-humide

Quentin Lancereau, Jean-Maxime Roux, Jean-Luc Achard

► To cite this version:

Quentin Lancereau, Jean-Maxime Roux, Jean-Luc Achard. Analyse numérique du processus de condensation hétérogène pour la collecte d'agents pathogènes aéroportés par un filtre électrostatique semi-humide. CFM 2011 - 20ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2011, Besançon, France. ⟨hal-03421179⟩

HAL Id: hal-03421179

<https://hal.science/hal-03421179v1>

Submitted on 9 Nov 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.



HAL Authorization

Analyse numérique du processus de condensation hétérogène pour la collecte d'agents pathogènes aéroportés par un filtre électrostatique semi-humide

Q. Lancereau^a, J-M. Roux^a, J-L. Achard^b

a. CEA-Leti, Minatec Campus – 17, rue des Martyrs 38054 Grenoble Cedex 9

b. Grenoble INP - Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels, 1023-1025 rue de la piscine
Domaine Universitaire 38400 Saint Martin d'Hères

Résumé :

On se propose de concevoir un dispositif portable de collecte d'agents pathogènes aéroportés (virus, bactéries et champignons : taille 10 nm - 10 µm). Un filtre électrostatique est utilisé à cet effet. Pour améliorer la collecte des particules submicroniques, de la vapeur d'eau est injectée en amont et mélangée à l'air porteur des particules de façon à augmenter leur taille par nucléation. Le processus de condensation doit être optimisé afin de limiter les besoins en eau et en énergie du dispositif. Un modèle numérique est développé pour analyser ce processus et tester différentes configurations d'injection.

Abstract :

We propose to design a portable device for collecting airborne pathogens (viruses, bacteria and fungi: size 10 nm - 10 microns). An electrostatic filter is used for this purpose. To improve the collection of submicron particles, water vapor is injected upstream and mixed with the air carrying the particles to increase their size by nucleation. The condensation process must be optimized to reduce water needs and energy of the device. A numerical model is developed to analyze this process and test various configurations of injection.

Mots clefs : aérosols, condensation hétérogène, collecteur

1 Introduction

La collecte des particules présentes dans l'air ambiant, afin de les analyser et les détecter, est devenue un enjeu majeur pour la surveillance de l'environnement et l'évaluation du risque sanitaire. Les particules nocives, pour l'homme ou l'animal, résultent de l'activité humaine dans les grandes villes (pollution dues aux nanoparticules), d'accidents (maladies nosocomiales, infections vétérinaires) ou encore d'agressions (attaques bioterroristes). Des dispositifs de collecte d'échantillons sont commercialisés mais ils présentent encore bien des défauts. En effet ils sont soit inefficaces pour les particules submicroniques, soit difficiles à transporter par suite de leur taille, leur poids et /ou de leur consommation d'énergie excessive, soit enfin incapables de traiter rapidement des volumes d'air représentatifs à cause de leur débit faible de fonctionnement.

On se propose donc de développer un dispositif portable de collecte de microorganismes dans l'air sur toute leur gamme de taille allant de 10nm à 10µm. Plusieurs technologies sont envisageables [1] :

- Les dispositifs de collecte fondés sur l'emploi des forces d'inertie (cyclones et impacteurs) sont peu efficaces pour la collecte de particules en dessous de quelques centaines de nanomètres et moins.
- Les filtres fondés sur l'emploi d'une membrane solide apparaissent comme le mode de collecte le plus performant pour les petites tailles. Toutefois, si ces filtres sont très utilisés pour nettoyer l'air, ils ne le sont pas pour la collecte de bioaérosols car la récupération des micro-organismes, collés ou coincés dans les fibres des filtres ou sur des surfaces solides, est extrêmement difficile.
- les précipitateurs électrostatiques fondés sur l'emploi d'une « décharge couronne » sont connus pour être très efficace y compris sur les nanoparticules. En outre ils présentent de très faibles pertes de charges et donc offrent un avantage important pour la réalisation de systèmes portables devant consommer peu d'énergie.

Cette dernière technologie est utilisée dans le dépoussiérage industriel, et plus récemment pour la

collecte de bioaérosols par Galbrun *et col.* [2, 3]. Il étudia un système de ce type qui tire par ailleurs parti d'un principe éprouvé dans les compteurs à noyaux de condensation [4, 5], en injectant de la vapeur d'eau dans un collecteur aux parois réfrigérées afin de faciliter la capture des plus petites particules.

Les particules, constituant pour la vapeur des noyaux de nucléation, croissent alors par condensation et sont plus facilement collectées par le précipitateur. De plus, la viabilité des agents biologiques est améliorée dans des gouttes d'eau, car elles sont protégées des possibles effets nocifs de la décharge couronne. Et enfin le film d'eau, qui se condense sur l'électrode de masse, limite d'une part le réentraînement des particules récoltées et permet d'autre part, en s'écoulant, une récupération plus aisée de l'échantillon à analyser.

De telles modifications ne vont pas sans rendre plus complexes à appréhender les phénomènes physiques mis en jeu : à l'effet couronne et ses interactions avec les particules à collecter, s'ajoutent le mélange de deux phases gazeuses, les transferts de chaleur diffusion/convection dans ce mélange, la condensation sur les particules solides charriées ainsi que sur les parois. Une modélisation de l'ensemble de ces phénomènes avec leurs couplages respectifs est donc nécessaire pour apporter une meilleure compréhension du dispositif et permettre un dimensionnement optimal. Cette communication présente une première étape de cette modélisation focalisée-sur le phénomène de condensation hétérogène ; le champ électrique et ses effets sont donc absents de cette étude. Pour un débit d'air à traiter donné, il s'agit en particulier de favoriser le déclenchement de la condensation sur les particules en jouant sur le débit de vapeur ainsi que sur la géométrie du système d'injection de vapeur.

2 Géométries

2.1 Géométrie initiale

Le modèle considéré (Figure 1) est un cylindre de longueur L_c et de diamètre D_c dont les parois sont refroidies à la température T_f . A l'intérieur de ce cylindre circule de l'air chargé en particules solides au débit d'entrée Q_a , à la pression p_a et la température T_{amb} . Une buse en verre de longueur L_b et de diamètre D_b introduit de la vapeur d'eau sèche, au débit Q_v et à la température T_{vap} , au centre de l'écoulement d'air. Ces deux écoulements sont supposés établis en entrée.

Les parois du cylindre étant refroidies sur toute leur longueur, la vapeur s'y condense en formant un film liquide. Un fil métallique constituant l'électrode de décharge est situé à une distance b de l'extrémité de la buse.

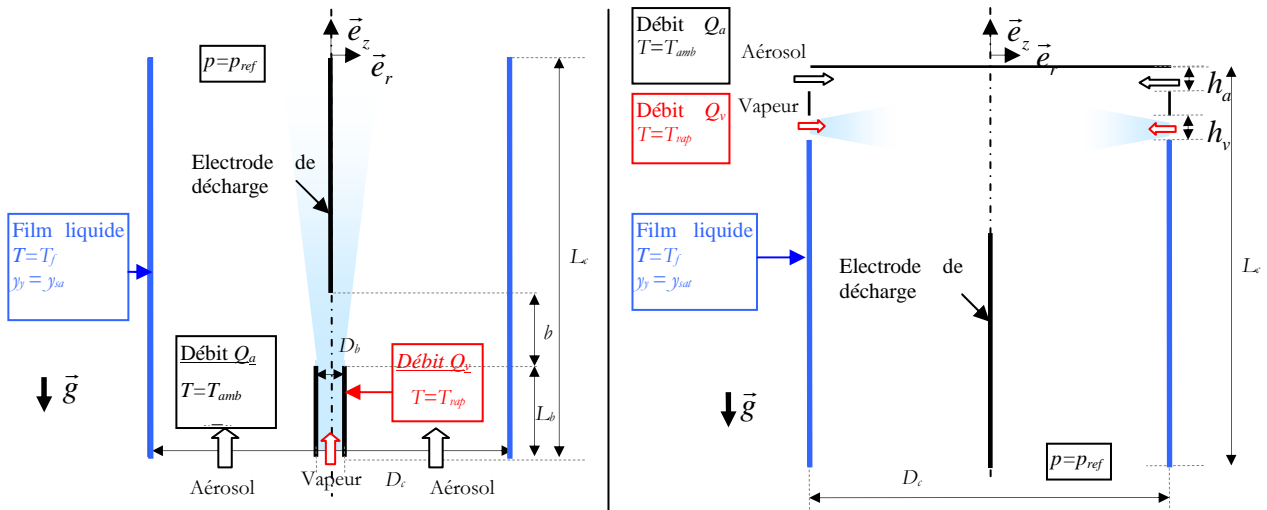


FIG. 1 – Géométries étudiées : à gauche la géométrie de Galbrun *et col.* [2, 3], à droite la nouvelle géométrie

2.2 Nouvelle Géométrie

Une évolution de cette géométrie consiste à introduire la vapeur et l'air de manière radiale afin de favoriser leur mélange et augmenter le nombre de particules s'encapsulant en gouttes. De plus, pour faciliter l'écoulement du film liquide sur la paroi le sens de l'écoulement a été inversé.

Pour permettre une comparaison des résultats, le diamètre, la longueur du cylindre, la longueur de l'électrode

et les vitesses débitantes d'injection pour l'air et la vapeur sont conservés.

3 Présentation de la modélisation

On se place en régime permanent dans une configuration axisymétrique (r, z) .

3.1 Modélisation de la phase continue

La phase gazeuse, appelée également phase continue, est considérée comme un gaz parfait compressible composé d'un mélange (grandeur sans indice) idéal d'air (grandeur indicée a) et de vapeur (grandeur indicée v). Les débits sont choisis pour que le régime soit laminaire afin de faciliter la collecte par le filtre électrostatique [6]. Dans cette étude, on place dans le cas où la concentration en particules et en gouttes est suffisamment faible pour que leur influence sur la phase continue soit négligeable (couplage à sens unique). Les équations classiques régissant la phase gazeuse sont présentées en annexe A.

On notera y_v la concentration massique de vapeur.

3.2 Modélisation de la phase dispersée : gouttes et particules

Une inclusion désignera une goutte ou une particule solide dans la série suivante d'hypothèses communes. Il sera admis que chaque inclusion, supposée sphérique, n'interagit pas avec ses voisines. La température en leur sein et à leur surface est supposée uniforme et la perturbation de l'écoulement autour d'elle, de type rampant. Dans ce cadre il n'existe pas de force de portance. On ne décrira pas la rotation de l'inclusion et on négligera les effets du cisaillement sur la traînée de Stokes. L'influence du mouvement sur les transferts entre une inclusion et le gaz qui l'entoure est prise en compte par le nombre de Nusselt introduit plus bas.

Enfin la dissolution de l'air dans une goutte n'a pas le temps de se produire dans les phénomènes considérés. On néglige les transferts de chaleur par rayonnement entre la goutte et le gaz. La coalescence ou le fractionnement des gouttes ainsi que l'agglomération des inclusions ne sont pas pris en compte.

D'une manière générale, pour décrire une population de gouttes (grandeur indicée g) ou de particules (grandeur indicée p), on introduit la fonction densité de probabilité $n_i(\vec{X}_i, v_i, \vec{V}_i, T_i)$ qui dépend de la position $\vec{X}_i = (r_i, z_i)$ des inclusions, de leur volume v_i , de leur vitesse et de leur température. Les bilans de population, qui sont des équations de continuité dans l'espace multidimensionnel des phases [6, 7], s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot (D_g \vec{\nabla} n_g) + \frac{\partial}{\partial \vec{X}_g} \left(n_g \frac{d\vec{X}_g}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial v_g} \left(n_g \frac{dv_g}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial \vec{V}_g} \left(n_g \frac{d\vec{V}_g}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial T_g} \left(n_g \frac{dT_g}{dt} \right) &= S_c \\ \vec{\nabla} \cdot (D_p \vec{\nabla} n_p) + \frac{\partial}{\partial \vec{X}_p} \left(n_p \frac{d\vec{X}_p}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial v_p} \left(n_p \frac{dv_p}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial \vec{V}_p} \left(n_p \frac{d\vec{V}_p}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial T_p} \left(n_p \frac{dT_p}{dt} \right) &= -S_c \end{aligned} \quad (1)$$

avec S_c le nombre de gouttes de taille critique « apparaissant » par unité de volume et de temps (particules activées comme sites de nucléation), qui sera déterminé par la suite ; D_i le coefficient de diffusion des inclusions, fonction de leur rayon r_i , corrigé du facteur de Cunningham Cm_i défini par rapport au libre parcours moyen λ :

$$D_i = \frac{k_B T Cm_i}{\mu r_i}, \quad Cm_i = 1 + 2,54 \left(\frac{\lambda}{2r_i} \right) + 0,8 \left(\frac{\lambda}{2r_i} \right) \exp \left(\frac{-0,55, 2r_i}{\lambda} \right), \quad \lambda = 6,61 \cdot 10^{-8} \left(\frac{T}{293} \right) \left(\frac{101,3 \cdot 10^3}{p} \right) \quad (2)$$

Le terme relatif aux coordonnées spatiales peut également s'écrire :

$$\frac{\partial}{\partial \vec{X}_i} \left(n_i \frac{d\vec{X}_i}{dt} \right) = \vec{\nabla} \cdot (n_i \vec{V}_i) = \vec{\nabla} \cdot (n_i \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (n_i \vec{V}_{di}) \quad (3)$$

Les inerties cinétique et thermique des inclusions peuvent être négligées à cause de leur petite taille. Les coordonnées de phase que sont la vitesse et la température des inclusions sont alors entièrement fixées par les coordonnées de position et de volume respectivement. En l'absence de changement de phase, les particules sont alors à la même température que la phase condensée. Les bilans de population deviennent donc :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot (n_g \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (n_g \vec{V}_{dg}) - \vec{\nabla} \cdot (D_g \vec{\nabla} n_g) + \frac{\partial}{\partial t} \left(n_g \frac{dv_g}{dt} \right) &= S_c \\ \vec{\nabla} \cdot (n_p \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (n_p \vec{V}_{dp}) - \vec{\nabla} \cdot (D_p \vec{\nabla} n_p) &= -S_c \end{aligned} \quad (4)$$

Avec $n_g = 0$ et $n_p = 1$ en entrée, et $\vec{n} \cdot (D_g \vec{\nabla} n_g) = 0$ et $\vec{n} \cdot (D_p \vec{\nabla} n_p) = 0$ sur les parois, avec \vec{n} la normale à la paroi.

On considère que la vitesse de dérive \vec{V}_{dp} ou \vec{V}_{dg} est uniquement due à la force de gravité qui s'équilibre avec la force de trainée où η_i est le coefficient de trainée. La force thermophorétique est négligée. On a donc :

$$\vec{V}_d^g = -\frac{\rho_l v_g g}{\eta_g} \vec{e}_z, \quad \vec{V}_d^p = -\frac{\rho_p v_p g}{\eta_p} \vec{e}_z, \quad \text{avec} \quad \eta_i = \frac{6\pi\mu r_i}{Cm_i} \quad (5)$$

La vitesse de croissance de gouttes est déduite du flux de vapeur reçus par une goutte sphérique isolée :

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{2\pi Sh_g M_v D_v}{\rho_l R} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}} v_g^{1/3} \left(\frac{p}{T} \frac{M_a y_v}{M_v + (M_a - M_v) y_v} - \frac{p_{v,s}}{T_g} \right), \quad (6)$$

avec $p_{v,s}$ la pression de vapeur à la surface de la gouttes déterminée par la formule de Kelvin, σ la tension de surface entre l'eau et l'air, et p_{sat} la pression de vapeur saturante calculée à partir de la loi empirique de Filonenko :

$$p_{v,s} = p_{sat}(T_g) \exp\left(\frac{2\sigma M_v}{\rho_l r_g R T_g}\right), \quad p_{sat}(T) = \exp\left(6.416 + \frac{17.3(T - 273.15)}{T - 35.15}\right) \quad (7)$$

De manière analogue la température des gouttes est déduite du flux de chaleur reçu par une goutte sphérique isolée dont l'inertie thermique a été négligée. On note L la chaleur latente de vaporisation de l'eau, et $Nu = 2,2$, le nombre de Nusselt.

$$T_g = T + \frac{L \rho_l}{2\pi \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}} v_g^{1/3} Nu k} \frac{dv_g}{dt}, \quad (8)$$

4 Méthode de résolution

Ces équations ont été adimensionalisées afin d'effectuer une analyse d'ordre de grandeur et ainsi de valider nos hypothèses. Elles ont été ensuite résolues par le logiciel de résolution éléments finis Comsol Multiphysique® version 3.5. Le domaine de l'écoulement qui est axisymétrique a été discrétisé par environ 35 000 mailles. La troisième dimension (le volume des inclusions) a été discrétisée par différences finies sur seulement 13 mailles pour limiter la durée de résolution. Leur taille augmente géométriquement selon la raison $a = 10^{1/5}$ sur une plage d'étude allant du rayon de 25nm à 10µm. Pour les gouttes, la dérivé première selon v a été discrétisée de manière orientée à l'ordre 1 pour faciliter la convergence. Comme le remarque Okuyama [8], les gouttes grossissent très rapidement pour les rayons inférieurs à 100µm. Les particules de taille inférieure sont donc supposées grossir instantanément jusqu'à cette taille.

Le terme S_c a été choisi pour qu'il annule la densité de particules si celles-ci sont d'une taille supérieure au rayon critique r_c , calculé à partir de la formule de Kelvin linéarisée :

$$S_c = 5000 n_p f l c 2 h s \left(v_p - v_{cp}, \frac{v_p}{10} \right) \times (v_{cp} \geq 0), \quad \text{avec} \quad r_c = \frac{2\sigma T_{sat}}{L \rho_L (T_{sat} - T)} \quad (9)$$

Les valeurs numériques utilisées sont présentées en Annexe B.

5 Résultats

Les équations ont été résolues pour les deux géométries présentées avec différents débits de vapeur. La Figure 2 présente le pourcentage de particules ayant nucléées en fonction de leur taille dans les deux configurations étudiées et, en encarts, les fractions de vapeur dans les deux dispositifs pour le débit de vapeur le plus élevé (5 L/min. pour un débit d'air de 30 L/min.).

Il apparaît, dans la première géométrie, que le nombre de particules servant de noyaux de nucléation est non

seulement faible mais il plafonne très rapidement. De plus le débit de vapeur a peu d'influence sur le résultat. Or on observe, comme on pourrait l'attendre, que le cône de vapeur représenté schématiquement sur la Figure 1 ne s'élargit pas avec le débit. La faible condensation semble donc due à un mauvais mélange des deux gaz. L'augmentation du débit de vapeur n'est donc pas la solution pour augmenter l'efficacité de la condensation ; il faut, au préalable, optimiser la géométrie de son injecteur.

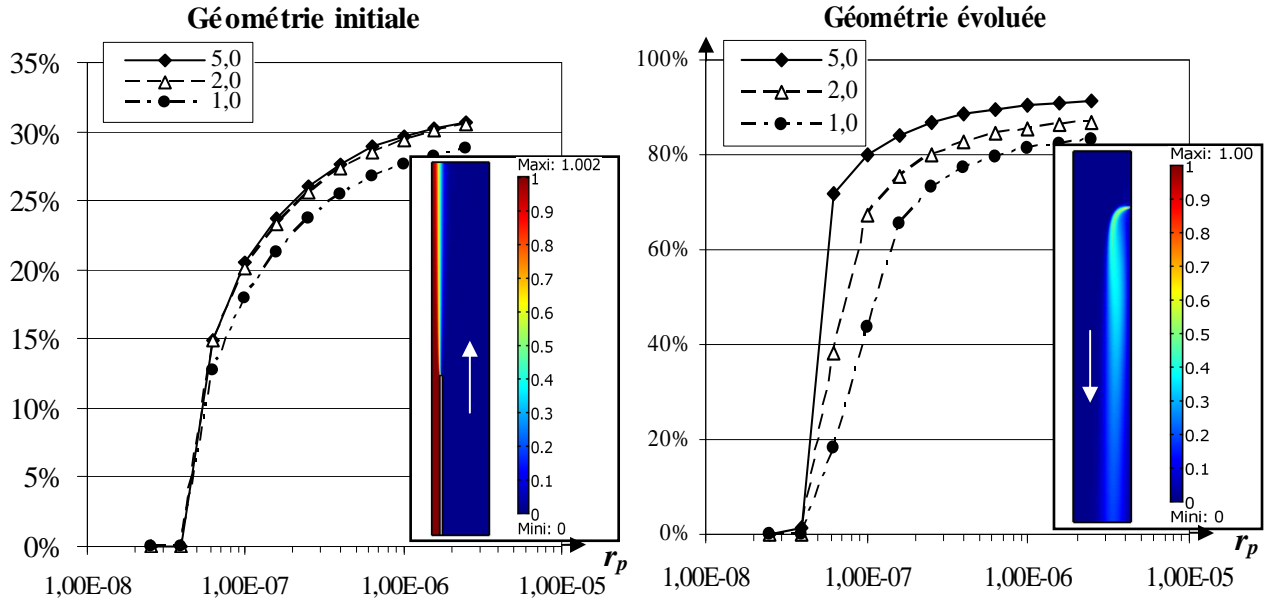


FIG. 2 – Rapport entre le nombre de particules ayant nucléées et le nombre de particules entrant dans le dispositif en fonction de leur rayon pour différents débits de vapeur (L/min) et en encart le taux de vapeur massique pour 5 L/min de vapeur injectée, la flèche blanche indiquant le sens de l'écoulement.

Dans la nouvelle configuration, on observe que le jet de vapeur est très vite dilué (Figure 2, à droite). L'injection radiale des gaz améliore donc considérablement le mélange et l'effet recherché sur l'augmentation de la condensation est atteint. En outre cette géométrie conduit le processus de nucléation à être sensible au débit de vapeur si bien que l'étude et l'optimisation de ce paramètre devient pertinent.

6 Conclusion

Le processus de nucléation de vapeur sur des particules submicroniques a été modélisé dans un écoulement laminaire avec un gaz inerte. Le modèle développé fut résolu par une méthode d'éléments finis combinée avec une méthode aux différences finies. La difficulté à laquelle nous sommes confrontés est de favoriser le mélange de deux jets de gaz en demeurant dans le régime laminaire (nombre Reynolds respectivement de 114 et 321 pour la vapeur et l'air). Le modèle met en évidence l'inadéquation, si l'on respecte cette contrainte, de l'utilisation de jets coaxiaux et montre l'intérêt d'un changement radical de géométrie. L'injection radiale des gaz permet d'augmenter grandement l'effet recherché sur la condensation.

Les prochaines étapes de développement consisteront à valider expérimentalement le modèle, tester cette nouvelle géométrie dans le cas d'une concentration forte en particules puis enfin d'intégrer les phénomènes électriques associés à l'effet couronne.

7 Annexe A : Equations

Equations résolus	Expressions
Conservation de la masse en compressible	$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0$ (10)
Navier Stokes en compressible	$\rho \vec{V} \cdot \vec{\nabla} \vec{V} + \vec{\nabla} p - \vec{\nabla} \cdot \left(\mu \left[\vec{\nabla} \vec{V} + (\vec{\nabla} \vec{V})^T - \frac{2}{3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \vec{I} \right] \right) = \rho \vec{g}$ (11)
gaz parfaits	$p = \rho RT / M$ (12)
transport de la vapeur	$\rho \vec{V} \cdot \vec{\nabla} y_v + \vec{\nabla} \cdot (-\rho D_v \vec{\nabla} y_v) = 0$ (13)

transport de la chaleur	$\rho C_p \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T + \vec{\nabla} \cdot (-k \vec{\nabla} T) = 0$ (14)
Compléments	$\frac{1}{M} = \frac{y_a}{M_a} + \frac{y_v}{M_v}, C_p = \sum_{i=a,v} y_i C_{pi}, \mu = \sum_{i=a,v} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{j=a,v} x_j \phi_{ij}}, k = \sum_{i=a,v} \frac{x_i k_i}{\sum_{j=a,v} x_j \phi_{ij}}$ (15)
	où x_a et x_v sont respectivement la fractions molaire d'air et de vapeur
	$x_v = \frac{M_a y_v}{M_v + (M_a - M_v) y_v}, x_a = \frac{M_v y_a}{M_a + (M_v - M_a) y_a}$, avec $y_a + y_v = 1$ (16)
	et la fonction ϕ_{ij} est donné par la formule de Wilke : (17)
	$\phi_{ij} = 1/\sqrt{8} (1 + M_i/M_j)^{-1/2} [1 + (\mu_i/\mu_j)^{1/2} (M_j/M_i)^{1/4}]^2$

8 Annexe B : Données numériques

Dimensions du dispositif (m)	Paramètres de fonctionnement	Constantes	Propriétés physiques
$D_c = 0,043$	$T_f = 283$ K	$k_B = 1,38.10^{-23}$ J/kg	$L = 2,25.106$ J/kg
$L_c = 0,14$	$T_{amb} = 293$ K	$R = 8,314$ J/K/mol	$D_v = 2,4.10^{-5}$ m ² /s (à 20°C)
$D_b = 0,006$	$T_{vap} = 373$ K	$g = 9,8$ m/s ²	$\sigma = 7,3.10^{-2}$ N/m
$L_b = 0,06$	Humidité relative de l'air ambiant en entrée : 50%		
$b = 0,013$	$p_{ref} = 0,95 \cdot 10^5$ Pa		
Parois de la buse : 0,001	$Q_a = 30$ L/min		

	Masse volumique ρ (kg.m ⁻³)	Masse molaire M (kg.mol ⁻¹)	Viscosité dynamique μ (Pa.s)	Conductivité thermique k (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	Capacité thermique massique C_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
Particules (polystyrène)	1050			(0,11)	(1200)
Eau liquide	998	18.10^{-3}	$6,41.10^{-4}$	0,63	4179
Vapeur d'eau	0,597	18.10^{-3}	$1,85.10^{-5}$	0,0195	1850
Air sec	1,111	29.10^{-3}	$2,15.10^{-5}$	0,0262	1011
Verre	2230			1,2	720

Références

- [1] Svarovsky, L., Solid-gas separation. Handbook of powder technology. Vol. 1. 1981, Amsterdam, Oxford, New York: Elsevier
- [2] Galbrun, E., et al. Mise au point d'un dispositif de collecte d'aérosols nanométriques pour l'analyse biologique in Congrès Français de la Mécanique. 2007.
- [3] Galbrun, E., Conception et caractérisation d'un dispositif innovant de collecte de nanoparticules de l'air pour l'analyse biologique. 2008, Institut National Polytechnique de Grenoble: Grenoble.
- [4] Hering, S., et al., A Laminar-Flow, Water-Based Condensation Particle Counter (WCPC). Aerosol Science and Technology, 2005. 39: p. 659-672
- [5] Sem, G.J., Design and performance characteristics of three continuous-flow condensation particle counters: a summary. Atmospheric Research, 2002. 62(3-4): p. 267-294
- [6] Leonard, G.L., M. Mitchner, and S.A. Self, An experimental study of the electrohydrodynamic flow in electrostatic precipitators. Journal of Fluid Mechanics Digital Archive, 1983. 127(1): p. 123-140
- [7] Pulvermacher, B. and E. Ruckenstein, Similarity solutions of population balances. Journal of Colloid and Interface Science, 1974. 46(3): p. 428-436
- [8] Sirignano, W.A., Formulation of spray combustion models: resolution compared to droplet spacing. Journal of Heat Transfer, 1986. 108(3): p. 633-639
- [9] Okuyama, K., Y. Kousaka, and T. Motouchi, Condensational growth of ultrafine aerosol particles in a new particle size magnifier. Aerosol Science & Technology 1984. 3(4): p. 353-366