

Séparation thermo-gravitationnelle d'un fluide binaire en cellule inclinée chauffée par le bas

M.C. Charrier-Mojtabi
Laboratoire PHASE, EA 3028,
Université Paul Sabatier, UFR PCA, Toulouse, France

A. Cheddadi
Ecole Mohammadia d'Ingénieurs,
Av. Ibn Sina, Rabat, Maroc, Auteur correspondant : cheddadi@emi.ac.ma

L. Figuigui
Ecole Mohammadia d'Ingénieurs,
Av. Ibn Sina, Rabat, Maroc

B. Elhajjar
Institut de Mécanique des Fluides,
Université Paul Sabatier, UMR 5502 CNRS/INP/UPS, UFR MIG, Toulouse, France

A. Mojtabi
Institut de Mécanique des Fluides,
Université Paul Sabatier, UMR 5502 CNRS/INP/UPS, UFR MIG, Toulouse, France

Résumé

Ce papier présente une étude analytique et numérique de l'action conjuguée de la thermodiffusion et de la convection sur un mélange binaire. Le couplage optimal de ces deux phénomènes permet d'obtenir une forte séparation des constituants du mélange. Une nouvelle technique pour la séparation thermogravitationnelle est proposée. Elle consiste à utiliser une cellule inclinée d'un certain angle par rapport à la verticale et chauffée par le bas. Dans cette configuration, on dispose de deux paramètres de contrôle extérieurs indépendants : ΔT et θ , respectivement l'écart de température entre les 2 parois actives de la cellule et l'angle d'inclinaison. Des séparations appréciables ont été obtenues pour des valeurs raisonnables de l'épaisseur de la cellule, de l'ordre de 2mm. Les résultats numériques obtenus par un code éléments finis sont en bon accord avec ceux obtenus par la résolution analytique.

Abstract

This paper presents an analytical and numerical study of the combined action of thermo-diffusion and convection on a binary mixture. The optimal coupling of these two phenomena results in a strong separation of mixture components. A new technique for thermo-gravitational separation is proposed. It involves the use of a cell inclined at an angle to the vertical, and heated from below. In this configuration, there are two external independent parameters: ΔT and θ , respectively the temperature difference applied to the cell and the tilt angle. Significant separations are obtained for reasonable values of the cell thickness (about 2mm). The numerical results obtained by a finite element code are in good agreement with those obtained by the analytical solution.

1. INTRODUCTION

Il est connu depuis les travaux de Ludwig (1856) [1] et Soret (1880) [2] que dans une solution initialement homogène constituée d'au moins deux espèces chimiques, un gradient thermique engendre des transferts de matière au sein du mélange. Il en résulte la formation d'un gradient de concentration (effet Soret). Les variations de la masse volumique en fonction de la température et de la concentration, donnent naissance à un écoulement convectif au sein du mélange. Si celui-ci est confiné dans une colonne verticale de très grand rapport d'aspect, le couplage de la convection et de la thermodiffusion, appelé diffusion-thermogravitationnelle, peut conduire à une séparation des composants du mélange. Le maximum de séparation est obtenu dans des cellules de quelques dixièmes de millimètres d'épaisseur et la séparation décroît rapidement avec l'espacement entre les parois thermiquement actives, imposant une construction délicate de ces colonnes, ce qui en augmente le coût (Furry, Jones et Onsager[3]). Lorentz et Emery [4] ont proposé de mettre un garnissage fin (milieu poreux) saturé par le fluide binaire afin de pouvoir travailler avec des épaisseurs de colonnes thermogravitationnelles plus élevées. On citera les travaux expérimentaux récents de Costesèque et al. [5], et théoriques et numériques de Elhajjar et al. [6], en milieux poreux. D'autre part de nombreux travaux ont été menés en milieu fluide en vue d'augmenter la séparation et de déterminer le coefficient Soret de différents mélanges avec des cellules de différentes configurations géométriques et des conditions aux limites appropriées. Platten et al. [7], ont montré qu'en inclinant la colonne remplie d'un fluide binaire par rapport à la verticale, celle-ci étant chauffée par le haut, il était possible d'augmenter la séparation. Nous présentons ici une étude analytique et numérique de l'effet de l'inclinaison d'une colonne thermogravitationnelle sur la séparation, celle-ci étant chauffée par le bas, configuration non encore étudiée dans la littérature.

2. FORMULATION MATHÉMATIQUE

Compte tenu des conditions aux limites choisies, c'est à dire cellule chauffée par le bas, la première difficulté qui se pose est d'éviter l'apparition de régimes multicellulaires ce qui empêcherait la séparation des constituants. Pour cela on impose un gradient de température bien choisi. L'avantage attendu de cette nouvelle approche est que l'on peut accélérer la séparation et travailler avec des cellules moins étroites que les cellules classiquement utilisées. En effet dans le cas vertical on ne dispose que d'un seul paramètre extérieur à savoir la différence de températures ΔT entre les parois. Cette différence de température induit non seulement l'importance du mouvement convectif mais également l'importance de la thermodiffusion entre les deux plaques isothermes maintenues respectivement à T_c et T_f avec $\Delta T = T_c - T_f$.

Dans notre étude, on considère une cellule rectangulaire de hauteur H et d'épaisseur e , de grand rapport d'aspect $H \gg e$, inclinée d'un angle θ par rapport à la verticale (i.e. $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_z$, cf. fig.1). La cavité est remplie d'un fluide binaire pour lequel on prend en compte l'effet Soret. Dans le cadre de l'approximation de Boussinesq, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la conservation des espèces s'écrivent sous la forme:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\
 \rho_0 \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} \right) = -\nabla P + \rho_0 [1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_c (c - c_0)] (-g) (\sin \theta \vec{e}_x + \cos \theta \vec{e}_z) + \mu \nabla^2 \vec{V} \\
 \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) T = a \nabla^2 T \\
 \frac{\partial c}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) c = D \nabla^2 c + D_T c(1-c) \nabla^2 T
 \end{array} \right. \quad (1)$$

où : β_T et β_c sont respectivement les coefficients d'expansion thermique et massique, c , D_T et D sont respectivement la fraction massique, le coefficient de thermodiffusion et le coefficient de diffusion de Fick du composant le plus dense. μ est la viscosité dynamique et a la diffusivité thermique. On suppose que le produit $c(1-c)$ peut-être remplacée par le produit $c_0(1-c_0)$ où c_0 est la fraction massique initiale du constituant le plus dense.

Les conditions aux limites associées sont :

$$T(x=0, z) = T_c; T(x=e, z) = T_f \quad (2)$$

Les deux autres parois sont thermiquement isolées :

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \forall x, z = 0, H \quad (3)$$

Les parois délimitant l'enceinte sont supposées rigides, d'où l'adhérence au niveau de ces parois :

$$\vec{V} = \vec{0} \quad (4)$$

D'autre part, toutes les parois étant supposées imperméables à la matière on a :

$$\vec{J}_m \cdot \vec{n} \quad \text{avec} \quad \vec{J}_m = -\rho D \nabla c - \rho c(1-c) D_T \nabla T \quad (5)$$

Cette dernière condition aux limites traduit le couplage du champ de température et de concentration dû à l'effet Soret.

3. RESOLUTION ANALYTIQUE

Pour résoudre analytiquement le système (1) associé avec les conditions aux limites (2-5), un certain nombre d'hypothèse sont introduites :

– on s'intéresse à l'état stationnaire qui s'établit au bout d'un certain temps, (qui en pratique peut varier de 15 jours à 2 voir 3 mois suivant la géométrie de la cellule),

– on admet que la composante suivant \vec{e}_x de la vitesse est nulle, et que la composante suivant \vec{e}_z ne dépend que de l'abscisse x soit : $\vec{V} = W(x) \vec{e}_z$,

– on ne tient pas compte de la structure complexe de l'écoulement près des bords. On suppose de plus que la température au sein du mélange varie seulement suivant x , c'est-à-dire $T(x, z) = T(x)$.

Une autre hypothèse nécessaire à la résolution analytique et qui a été utilisée précédemment par Furry, Jones et Onsager [3] traduit que $\frac{\partial c}{\partial x}$ est indépendante de z et $\frac{\partial c}{\partial z}$ est indépendante de x , et on suppose

de plus que la fraction massique c varie linéairement suivant z d'où : $c(x, z) = C_1(x) + \delta z$ avec $\delta = \text{cste}$ □ .

Compte tenu de ces hypothèses et après quelques transformations des équations, on est ramené à la résolution du problème différentiel suivant :

$$\nu \frac{\partial^3 W}{\partial x^3} = -\beta_c g \cos \theta \frac{dC_1}{dx} - \beta_T g \cos \theta \frac{dT}{dx} + \beta_c g \delta \sin \theta \quad (6)$$

$$\frac{d^2 T}{dx^2} = 0 \quad (7)$$

$$W\delta = D \frac{d^2 C_1}{dx^2} \quad (8)$$

où ν est la viscosité cinématique. Notons que les termes en $\beta_c \delta g$ dans l'équation (6) ne sont pas pris en compte dans la théorie développée par Furry, Jones et Onsager [3], hypothèse qui porte le nom "d'effet oublié" et qui a été reprise dans de nombreux travaux par la suite dans un souci de simplification. La résolution des trois équations différentielles couplées (6), (7) et (8) nécessite l'ajout de conditions aux limites à celles déjà mentionnées ci dessus. On traduit donc la conservation du débit à travers une section droite quelconque de la cellule soit :

$$\int_0^e W(x) dx = 0 \quad (9)$$

De plus en régime stationnaire, le flux net de masse à travers toute section droite est nul soit :

$$\int_0^e (W(x)c - D \frac{\partial c}{\partial z} - D_T c_0 (1 - c_0) \frac{\partial T}{\partial z}) dx = 0 \quad (10)$$

et enfin il y a conservation de la masse du soluté soit :

$$\int_0^H dz \int_0^e c dx = c_0 H e \quad (11)$$

où c_0 est la concentration initiale du soluté.

L'intégration de l'équation (7) donne:

$$T(x) = -\frac{(T_c - T_f)}{e} x + T_c \quad (12)$$

Pour notre étude on supposera $\beta_c < 0$ et le coefficient de thermodiffusion $D_T > 0$ (donc $\delta < 0$): le facteur de séparation défini par $\varphi = -\frac{\beta_c D_T}{\beta_T D} c_0(1-c_0)$ est alors positif car D est toujours positif et β_T aussi (cas des mélange eau-éthanol, eau et sulfate de cuivre). Dans ces conditions le profil de vitesse s'écrit :

$$W(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} \omega \left[e^{\frac{\sqrt{2}}{2} \omega x} \left((k_1 + k_2) \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \omega x\right) + (k_1 - k_2) \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \omega x\right) \right) - e^{-\frac{\sqrt{2}}{2} \omega x} \left((k_3 + k_4) \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \omega x\right) + (k_4 - k_3) \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \omega x\right) \right) \right] \quad (13)$$

avec :

$$\omega^4 = \frac{\delta \beta_c g \cos \theta}{D \nu}$$

et on obtient une séparation des constituants du mélange avec le constituant le plus lourd en bas de la cellule comme indiqué sur la figure ci dessous (figure 1).

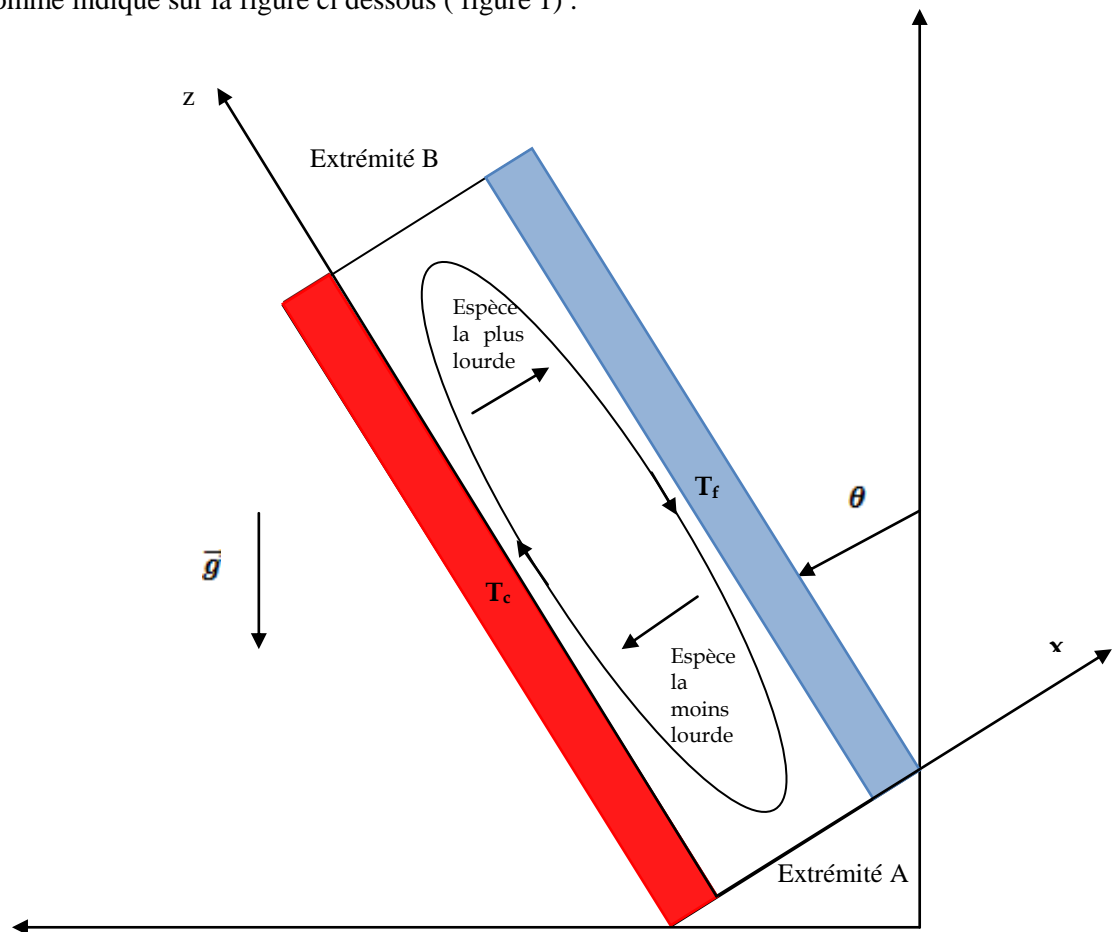


Figure 1 : Schéma de définition Cas $D_T > 0$ (facteur de séparation > 0)

Les constantes figurant dans l'expression de $W(x)$ dépendent de ω , e , et d'une constante K .
Le profil de concentration selon x est alors donné par :

$$c(x) = \frac{\delta\sqrt{2}}{2\omega D} \left[e^{\frac{\sqrt{2}}{2}\omega x} \left((k_2 - k_1) \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\omega x\right) + (k_2 + k_1) \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\omega x\right) \right) - e^{-\frac{\sqrt{2}}{2}\omega x} \left((k_3 + k_4) \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\omega x\right) + (k_3 - k_4) \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\omega x\right) \right) + k_5 x + k_6 \right] \quad (14)$$

La constante δ se déduit de la condition (10).

Des calculs ont été effectués pour une cellule d'épaisseur $e = 1.58$ mm, $H=530$ mm, une inclinaison variable, $\Delta T = 15$, $D_T = 1.37 \cdot 10^{-12} \text{ K}^{-1}$, $D = 4,32 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $\beta_T = 7.86 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, $\beta_c = -0.212$, $\nu = 2.716 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ et $c_0=0.6088$. On trouve bien une forme cubique pour le champ de vitesse à travers une section droite, profil de vitesse nécessaire à la séparation. Les caractéristiques thermophysiques ci-dessus (mélange eau-éthanol) ainsi que les valeurs de H et e ont été choisies en vue de comparer nos résultats avec ceux de Platten et al. [7].

En ce qui concerne la variation de la séparation $S = -\delta H$, en fonction de l'angle d'inclinaison θ de la cellule on obtient la courbe suivante (figure 2). On remarque que la courbe présente un maximum pour $\theta = 82^\circ$.

On peut interpréter ce résultat en constatant que pour une différence de température donnée et une épaisseur de cellule donnée supérieure à celle conduisant à la séparation maximale en configuration verticale, plus la cellule est inclinée par rapport à la verticale plus la composante horizontale du gradient thermique est faible et plus la vitesse convective est faible : la séparation peut donc atteindre un optimum pour un choix bien approprié de ΔT et de θ .

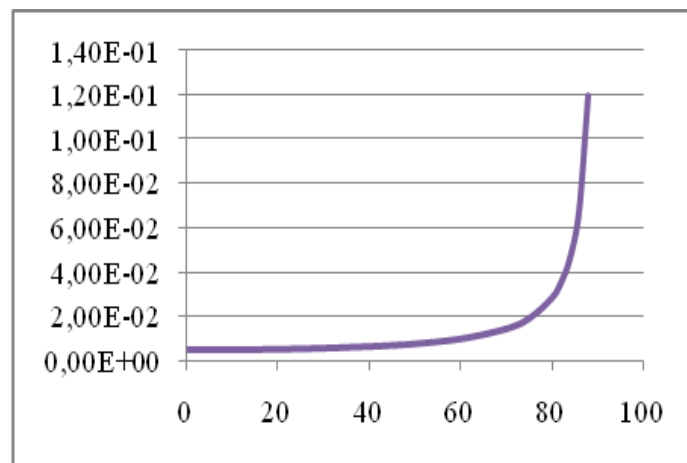


Figure 2 : variation de la séparation en fonction de l'angle d'inclinaison θ de la cellule pour $\Delta T = 15^\circ$.

4. RÉSOLUTION NUMÉRIQUE

La résolution numérique a été effectuée à l'aide du logiciel industriel Comsol, basé sur la méthode des éléments finis. Le maillage utilisé est un maillage quadrangle (20x300). L'état stationnaire est atteint au bout d'un temps très long, variable en fonction de θ . On vérifie alors que la quantité de soluté est bien égale à c_0 .

Les résultats numériques obtenus concernant la séparation sont en bon accord avec ceux obtenus par la résolution analytique. On précisera seulement que l'écart entre les résultats numériques et analytiques est le plus faible au voisinage du maximum de séparation, là où le champ de concentration est bien stratifié horizontalement et où les effets de bord non pris en compte dans la résolution analytique sont les moins importants comme le montre la figure 3(b) $\theta = 82^\circ$ (maximum de séparation) à comparer avec les cas 3(a) et 3(c) où $\theta = 50^\circ$ et 25° respectivement. Au delà de $\theta = 82^\circ$, nous obtenons un régime multicellulaire ne permettant plus la séparation. Dans la configuration inclinée et chauffée par le haut, Platten et al.[7] obtiennent un maximum de séparation pour $\theta = 88^\circ$.

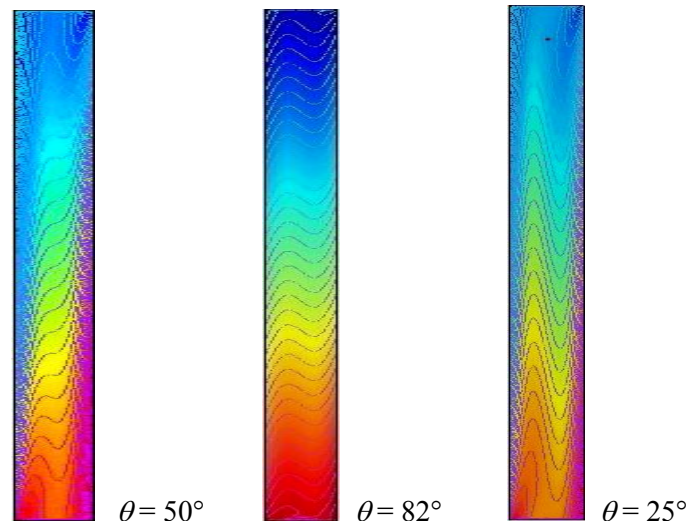


Figure 3 : champ de concentration pour $\theta=50^\circ$, 82° et 25° , séparation maximale pour $\theta=82^\circ$.

5. CONCLUSION

Nous proposons une nouvelle technique pour la séparation des espèces d'un mélange binaire. On utilise une cellule inclinée par rapport à la verticale, chauffée par le bas, contrairement aux autres configurations décrites dans la littérature. Dans cette configuration, on dispose de deux paramètres de contrôle extérieurs indépendants (ΔT et θ) alors que pour la cellule verticale, on dispose uniquement de la différence de température imposée entre les deux plaques verticales.

On peut ainsi obtenir des séparations appréciables pour des valeurs raisonnables de l'épaisseur (de l'ordre de 2mm) ce qui présente un avantage par rapport aux cellules verticales dont les épaisseurs doivent être très faibles (de l'ordre de 0.4mm) pour obtenir le maximum de séparation.

6. REFERENCES

1. Ludwig C., Diffusion Zwischen Ungleicherwärmten Oretn Gleich Zusammengesetzter. Lösungser, *Akad. Wiss. Wien, Math. Naturw. Kl.* 20 (1856) 539.
2. Soret C., Influence de la Température sur la Distribution des Sels dans leurs Solutions, *C.R. Acad. Sci.* 91(1880).289-291.
3. Furry W. H., Jones R. C. and Onsager L., On the Theory of Isotope Separation by Thermal Diffusion, *Physical Review* 55 (1939). 1083-1095.
4. Lorenz M. ORENZ M. and Emery A. H., The Packed Thermodiffusion Column, *Chemical Engineering Science* 11 (1959). 16-23.
5. Costeseque P., Hridabba M. et Sahores J., Possibilité de Différenciation des Hydrocarbures par Diffusion Thermogravitationnelle dans un Pétrole Brut Imprégnant un Milieu Poreux, *C. R. Acad. Sci.* 304 (17) (1987) 1069-1074.
6. Elhajjar B., Charrier-Mojtabi M.C. and Mojtabi A., Separation of a binary fluid mixture in a porous horizontal cavity, *Physical review E* 77(2008) 026310.
7. Platten J. K., Bou-Ali M. M. and Dutrieux J. F., Enhanced Molecular Separation in Inclined Thermogravitational Columns, *J. Phys. Chem. B* 107 (2003). 11763-11767.