

Modélisation de la formation d'une couche de particules sur une paroi poreuse

Franck Noël (*), Philippe Schmitz (**) & Marc Prat(*)

noel_franck@hotmail.fr

(*) IMFT – GEMP, 1 Allée du Professeur Camille Soula 31400 Toulouse

(**)UMR5504, UMR792 Ingénierie des Systèmes Biologiques et des Procédés, CNRS, INRA, INSA, F-31400 Toulouse

Résumé :

En filtration frontale, le colmatage du filtre par accumulation de particules en surface s'accompagne d'une augmentation de la résistance hydraulique du système couche de particules + paroi filtrante. L'approximation classique consistant à additionner la résistance de la paroi sans particule et celle de la couche de particules ne tient compte ni de la modification de l'écoulement par les pores de la paroi, qui augmente la résistance hydraulique par l'allongement des lignes de courant, ni du caractère discret des particules lorsque leur taille est comparable à celle du pore. La détermination exacte de la résistance hydraulique de l'ensemble du système nécessite la connaissance détaillée de la structure de l'écoulement au niveau du pore de la paroi. Une étude de la morphologie du dépôt, de la variation du débit en fonction de son volume, de la taille des pores de la paroi et des particules est proposée.

Abstract:

In dead end filtration, filter fouling by particle accumulation on the filter surface increases the hydraulic resistance of the system particle + filter surface. The approximation consisting in adding the resistance of the filter surface (without particle) and the one of the particle layer doesn't take into account neither the modification of the flow near the pores of the wall, which increases hydraulic resistance by the lengthening of the streamlines, nor the discrete character of the particles when their size is of the order of the pore size. The exact determination of the hydraulic resistance of the system requires the detailed knowledge of the flow structure near the pores of the wall. A study of deposit morphology and the variations of the volumetric flow rate according to deposit volume, pore size and particle size are presented in this paper.

Mots-clefs : Filtration, colmatage, équation de Brinkman

1 Introduction

Dans la majorité des systèmes filtrants, il est nécessaire de déterminer la variation du débit (à pression imposée) ou de la différence de pression (à débit imposé) en fonction des divers paramètres caractérisant la surface filtrante et le dépôt de particules. En déterminant la porosité de la surface filtrante, par exemple, par examen microscopique, et la perméabilité de la couche de particules, on cherche à évaluer le débit en fonction de la différence de pression imposée : Benmachou et al (2004), Benmachou (2005), Oxarango et al (2003), Oxarango (2004). Une première approche consiste à considérer la paroi filtrante et la couche de particules déposées comme 2 résistances hydrauliques en série Reyman *et al.*(2000), Civan (1998), Kim *et al.*(2002), ainsi on écrit :

$$\delta P = \frac{\mu}{S} (R_c + R_m) Q \quad (1)$$

avec μ la viscosité dynamique du fluide, S la surface de contact entre le haut de la couche de particules et le fluide, R_m la résistance hydraulique de la paroi, R_c la résistance hydraulique de la couche de particules et Q le débit du fluide.

Cependant, cette approche sous-entend une variation linéaire de la pression avec la hauteur de la couche de particules, pour un gradient de pression uniforme, ce qui n'est pas le cas pour les couches de faible épaisseur. En effet, les lignes de courant au voisinage du pore se courbent entraînant une augmentation significative de la résistance hydraulique du système du fait de la non uniformité du champ de pression. La détermination précise de la résistance hydraulique totale du système paroi + dépôt de particules nécessite la connaissance détaillée de la structure de l'écoulement au niveau du pore de la paroi. Suivant la taille relative des particules par rapport

aux pores de la paroi (Cf. FIG. 1), on peut distinguer 2 cas. Si la taille caractéristique des particules est faible devant la taille des pores de la paroi (*séparation des échelles*), l'écoulement au sein du milieu poreux peut alors être modélisé, dans le cas où la vitesse à l'échelle des pores du dépôt n'est pas trop grande, par des équations moyennées de type Darcy ou Brinkman. Dans le cas où la taille des particules est de l'ordre de la taille des pores de la paroi (*pas de séparation des échelles*), l'écoulement et le transport des particules doivent être directement calculés à partir des équations locales de Stokes.

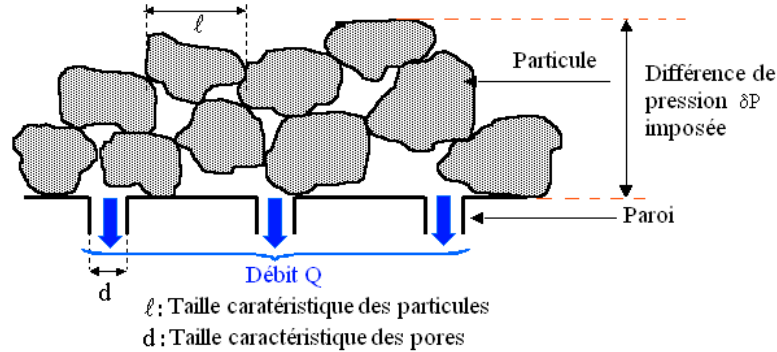


FIG. 1 – Echelles de longueur caractéristiques du système dépôt de particules + paroi.

Lorsqu'il y a *séparation des échelles*, la résistance hydraulique a pu être déterminée par le calcul de l'écoulement (équation de Darcy) au niveau d'un pore en supposant que le dépôt avait une épaisseur uniforme sur la paroi. En 2 dimensions, des formulations analytiques de la résistance hydraulique ont pu être obtenues à l'aide des transformations conformes : Dufrèche *et al.* (2002), Pavan (2004). En 3 dimensions des calculs montrent que la résistance hydraulique est plus importante que celle déterminée en 2 dimensions pour une porosité de paroi et une épaisseur de dépôt identiques : Noël *et al.* (2004). Ces modèles ne tiennent pas compte du rôle de l'écoulement : le dépôt est formé par un empilement successif de couches de particules d'épaisseur uniforme. Si on suppose que l'accumulation des particules a lieu où le débit est le plus important on constate que le dépôt se forme préférentiellement au droit du pore : Dufrèche (2000), Noël (2006). On démontre dans ce cas que, pour un même volume de particules déposées, la résistance hydraulique est plus importante que pour un dépôt d'épaisseur uniforme lors des premiers instants de la formation du dépôt.

Lorsqu'il n'y a *pas de séparation des échelles*, le calcul de la résistance hydraulique devient plus délicat : l'écoulement ne peut être modélisé que par l'équation de Stokes. En effet, les équations moyennées de type Darcy ou Brinkman ne rendent pas bien compte de l'hétérogénéité de l'écoulement au niveau de la paroi induite par la présence des particules. Plus la taille des particules est comparable à celle du pore, plus la résistance hydraulique déterminée par les modèles de Darcy ou Brinkman est différente de celle déterminée par le modèle de Stokes. La détermination de la résistance hydraulique à l'aide de ce modèle nécessite des moyens de calcul importants et impose le maillage d'un domaine de résolution complexe. On peut trouver dans la littérature 2 approches. La première tient compte de l'aspect discret des particules et des pores sans modéliser la modification de l'écoulement due à la présence du dépôt : en microfiltration Seminario (2002), en ultrafiltration Fu *et al.* (1998) et en nanofiltration Tarabara *et al.* (2002). Un second type de méthodes permet de résoudre les équations de Stokes sans mailler le domaine de résolution. La technique des éléments de frontière est particulièrement bien adaptée à la résolution de l'équation de Stokes dans des domaines complexes, Pozrikidis (1992), Pozrikidis (2002). Elle nécessite des temps de calculs, notamment en 3 dimensions, non compatibles avec les phénomènes de filtration à modéliser. On peut également noter que cette méthode devient instable lorsque les particules sont proches : Nasser *et al.* (2000). La *Dynamique Stokesienne* développée par Brady, Brady (1988) et la *Force Coupling Method* développée par Maxey, Maxey *et al.* (2001), sont plus simples à mettre en

œuvre que la méthode de éléments frontière tout en réduisant les ressources informatiques et les temps de calculs. Elles deviennent, comme la méthode des éléments frontières, difficiles à maîtriser lorsque les particules sont proches. L'utilisation de l'une de ces 2 méthodes implique la prise en compte des interactions hydrodynamiques d'une particule et d'un pore dans le cas où la particule est soit en approche du pore soit déposée sur la paroi. L'expression analytique de cette force est dans le premier cas très complexe, Frey *et al.* (2000), et dans le second cas n'est pas documentée.

L'approche que nous proposons est l'étude de la formation d'un dépôt à l'échelle du pore, lorsqu'il n'y a pas séparation des échelles. Nous nous proposons également d'étudier l'influence du dépôt sur l'écoulement par le biais de l'étude de la morphologie du dépôt ainsi que la variation du débit filtré en fonction du volume de particules déposées. Le domaine fluide et le domaine poreux sont modélisés par l'équation de Brinkman en modélisant les particules par un champ de porosité et un champ de perméabilité. En effet, bien que cette équation ne puisse rendre compte de façon détaillée de l'hétérogénéité de l'écoulement au niveau de la paroi lorsqu'il y a séparation des échelles, elle permet néanmoins de modéliser les frottements à la paroi. En effet, ces derniers ne sont plus négligeables par rapport à la résistance du dépôt, comme dans le cas où il y a séparation des échelles.

2 Modélisation de la formation du dépôt

2.1 Modélisation de l'écoulement

On suppose que la paroi filtrante est constituée de pores identiques répartis périodiquement suivant un arrangement carré (FIG. 2). Cette dernière simplification permet de limiter l'étude de l'écoulement à un élément unitaire représentatif de la paroi perforée, constitué d'une paroi comportant un seul pore, muni de conditions aux limites périodiques. De plus, la forme du pore est supposée carrée afin de simplifier le maillage du domaine de calcul. L'écoulement est ainsi modélisé dans l'ensemble du domaine par l'équation de Brinkman (on suppose que l'écoulement est suffisamment lent pour négliger l'inertie du fluide). Sa forme adimensionnelle est :

$$\frac{\mu_{\text{eff}}(\vec{r})}{\mu} \Delta \vec{v} - \vec{\nabla} P - \frac{1}{K_i(\vec{r})} \vec{v} = 0 \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (3)$$

avec \vec{v} est la vitesse moyenne de filtration, P la pression, μ la viscosité dynamique du fluide et $\vec{r} = \{x, y, z\}$. $K_i(\vec{r})$ est le champ de perméabilité modélisant la résistance des particules à l'écoulement et $\mu_{\text{eff}}(\vec{r})$ la viscosité effective du fluide dont le modèle sera présenté plus bas.

Les longueurs sont adimensionnalisées par L_x . Dans le cadre de cet article, on impose une différence de pression entre $z'=0$ (dans le pore) : $P'=P_1$ et $z'=L_z$: $P'=P_0$. P' est la pression dimensionnelle. La pression et la vitesse moyenne de filtration sont adimensionnalisées de la manière suivante :

$$P' = (P_1 - P_0)P + P_0 \quad (4)$$

$$\vec{v}' = \frac{L_x (P_1 - P_0)}{\mu} \vec{v} \quad (5)$$

On impose des conditions aux limites de périodicité en $x=0, L_x$ et $y=0, L_x$. Sur la paroi on impose des conditions de vitesse et de gradient normal de pression nuls. Enfin, en plus de la condition de pression sur le pore et en haut du domaine, on impose une condition de type sortie

libre pour la vitesse : $\frac{\partial v_{x,y,z}}{\partial z} = 0$.

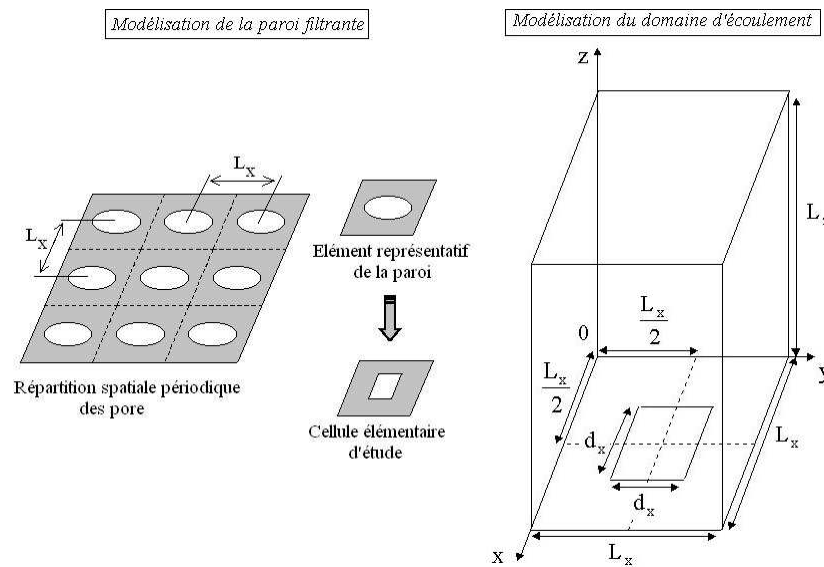


FIG. 2 – Modélisation du domaine de calcul.

2.2 Modélisation de la formation du dépôt de particules

On commence par calculer l'écoulement de type Stokes (aucune particule n'est présente dans le domaine de calcul) dans le domaine décrit sur la figure 2 :

$$\Delta \vec{v} - \vec{\nabla} P = 0 \quad (6)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (7)$$

On tire aléatoirement la position d'une première particule en $z = 0$. On considère que la particule (supposée sphérique) suit les lignes de courant : les forces de Van der Waals compensent les forces de lubrification. Ainsi, on peut supposer qu'une particule en approche du pore ou d'une particule déposée ne subit pas de force extérieure. Lorsque la particule arrive à proximité de la paroi elle peut être capturée par la paroi (par interception directe) ou passer par le pore (Cf. FIG. 3a). Lorsque la particule est capturée on modifie le champ de porosité ε et de perméabilité K_i . Le maillage permettant de calculer le champ de porosité et de perméabilité (que l'on désignera par la suite comme maillage K) est différent du maillage permettant de calculer l'écoulement (que l'on désignera par la suite comme maillage F). La taille des mailles du maillage K est égale à la taille des particules : (FIG. 3b).

La porosité est calculée à chaque maille K comme étant le rapport entre le volume non occupé par les particules et le volume total de la cellule du maillage K. La perméabilité est calculée à l'aide de la relation de Kozeny-Carman, Zick et Homsy. (1982) :

$$K_i(\vec{r}) = \frac{d_p^2 \varepsilon(\vec{r})^2}{180(1 - \varepsilon(\vec{r}))^2} \quad (8)$$

d_p est le diamètre des particules adimensionnalisé par L_x .

La viscosité effective qui traduit une modification de la viscosité par la présence des particules aura l'expression suivante, Golfier *et al.* (2003):

$$\mu_{\text{eff}}(\vec{r}) = \frac{\mu}{\varepsilon(\vec{r})} \quad (9)$$

On considère que toutes les cellules du maillage F qui sont contenues dans une même cellule de maillage K ont toutes la même perméabilité : la perméabilité est considérée comme constante par maille K. Les champs de perméabilité et de porosité étant déterminés, on peut alors recalculer l'écoulement (équations (2) et (3) avec les conditions aux limites). On suppose

que l'évolution de l'écoulement au cours du temps est une suite d'états stationnaires. Une fois l'écoulement recalculé, on tire aléatoirement la position de la nouvelle particule et on teste cette fois-ci si elle est capturée par la paroi ou la première particule déposée.

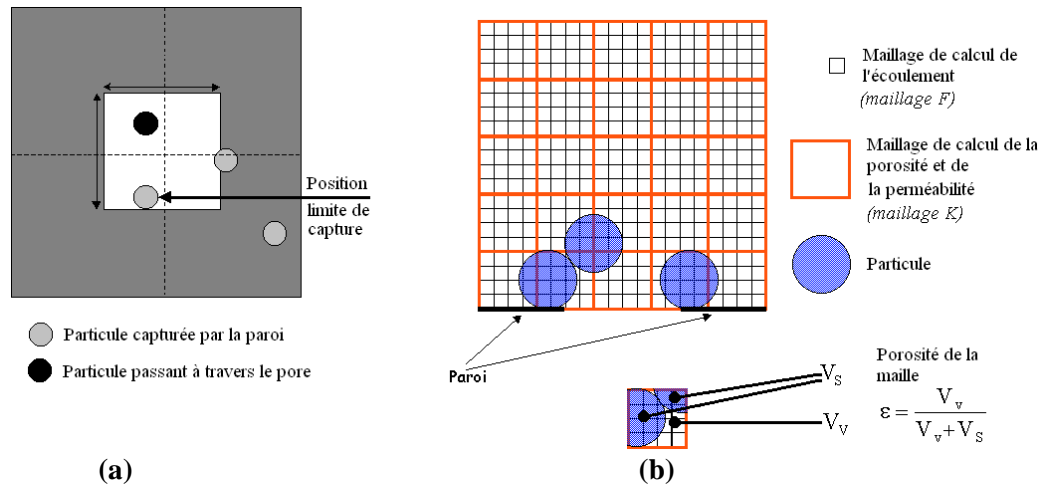


FIG. 3 – Modélisation de la capture des particules (3a), calcul du champ de porosité modélisant le dépôt de particules (3b).

3 Résultats

Les simulations ont été réalisées pour 3 tailles de pore $d_x = 0.2, 0.4, 0.6$ et 2 tailles de particules $d_p = 0.05, 0.1$. La taille des mailles du maillage K est 0.1 pour $d_p = 0.1$ et 0.05 pour $d_p = 0.05$. La hauteur du domaine est fixée à $L_z = 2.0$. Pour le maillage F, le nombre de mailles suivant x et y est 40 et 80 suivant z. Le nombre de particules formant le dépôt est toujours égal à 100. Dans tous les cas étudiés, le tirage des positions initiales aléatoires des particules est identique. Sur la figure 5 on a représenté l'évolution du débit en fonction du volume du dépôt pour les 3 tailles de pore et les 2 tailles de particule. Les courbes avec des symboles carrés représentent l'évolution du débit si la perméabilité du dépôt est celle d'un empilement de sphère en arrangement cubique pour les 2 tailles de particules. Dans ce cas là, le débit est simplement donné par $Q = K_i / V$ (V étant le volume du dépôt) : ceci équivaut à la relation (1) adimensionnalisée dans laquelle $R_m = 0$. La perméabilité K_i est calculée à l'aide de la relation (8). Le modèle de formation permet d'obtenir des courbes de débit sensibles à la taille des particules et du pore. Pour une même taille de pore, le débit (Cf. figure 5) obtenu pour $d_p = 0.05$ reste inférieur à celui pour $d_p = 0.1$: le modèle génère des dépôts d'autant plus compact que le diamètre des particules est faible. On peut également noter que le débit obtenu avec le modèle peut être bien supérieur à celui obtenue par la relation (1) (FIG. 5 pour les dépôt 2 et 3). Les dépôts obtenus dans ces cas là sont très dendritiques (caractéristique du modèle de capture des particules ; FIG. 4 pour les dépôts 5 et 6) et la porosité calculée dans les mailles K est grande ; la perméabilité correspondante est donc grande également. Si $d_p = 0.05$ et $d_x = 0.2$ on constate que le débit du modèle est plus faible que le débit calculé avec la relation (1) si V le volume du dépôt est inférieur à 0.25 et devient supérieur au-delà de cette valeur. Si $V < 0.25$, les particules forment un dôme (FIG 4 : dépôt 3 et 4) compact au-dessus du pore, puis le resserrement des lignes de courant devient moins marqué et le dépôt devient plus dendritique. Le même comportement peut être observé pour $d_p = 0.05$ et $d_x = 0.2$, la pente de la courbe de débit diminue fortement au voisinage de $V = 0.25$.

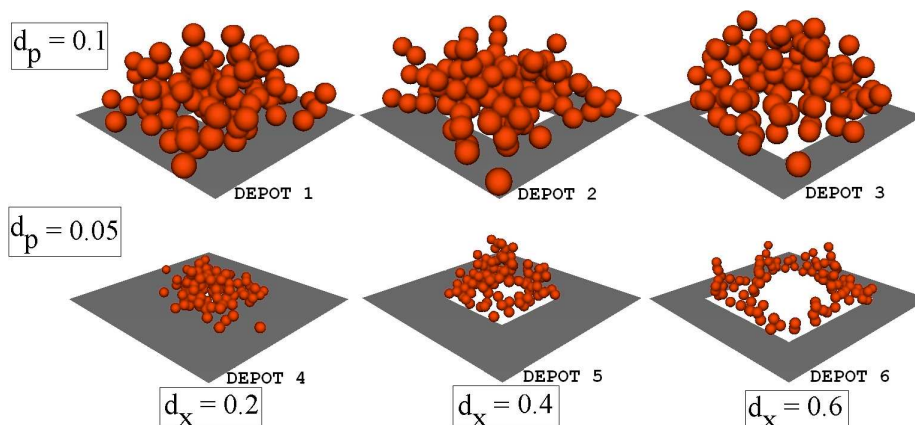


FIG. 4 – Morphologie des dépôts formés (100 particules) dans les 6 cas simulés. d_p : diamètre des particules, d_p taille des pores de la paroi.

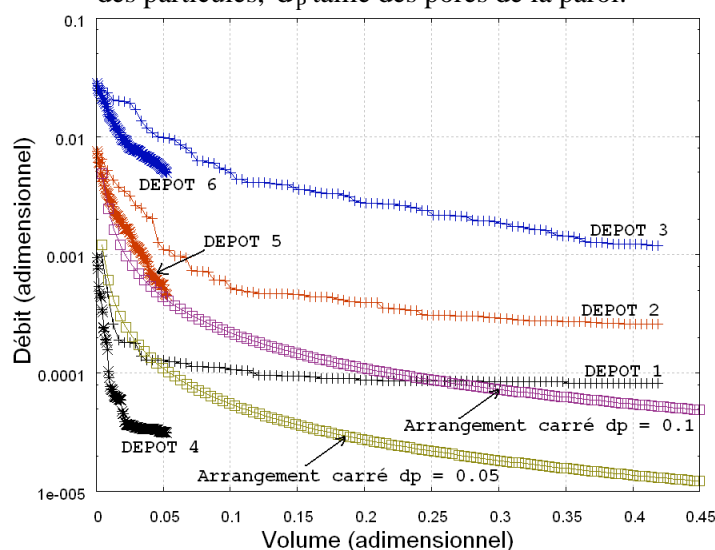


FIG. 5 – Variation du débit en fonction du volume du dépôt

4 Conclusions

La méthode proposée permet, grâce à l'équation de Brinkman, de résoudre l'écoulement sans avoir à décomposer le domaine en 2 parties : la partie fluide transportant les particules (écoulement de Stokes) et la partie dépôt (écoulement de Darcy ou Darcy-Brinkman). L'influence des particules déposées sur la paroi est modélisée par un champ de perméabilité calculé à l'aide d'un champ de porosité représentatif de la structure du dépôt. Bien que, les temps de calcul puissent paraître longs (30-40h pour la formation d'un dépôt de 100 particules avec le maillage le plus fin utilisé sur PC Linux Xéon 3.2Ghz), cette méthode ouvre la possibilité de mener des études statistiques (effet du modèle de capture, moyenne sur plusieurs réalisations, systèmes avec plusieurs pores etc...) en prenant en compte la modification de l'hydrodynamique liée à la formation du dépôt. Cette approche est un compromis entre les modèles purement balistiques qui ne tiennent pas compte de la modification des lignes de courant avec l'évolution du dépôt et les modèles très rigoureux de type dynamique Stokesienne beaucoup plus gourmands en temps de calcul et qui restent mal adaptés à la simulation de systèmes comprenant des zones denses (le dépôt). Il paraît donc intéressant d'exploiter davantage l'outil mis au point.

Références

- Benmachou, K, Etude et modélisation du colmatage d'un filtre plissé, thèse, INPT, 2005.
- Benmachou, K., Schmitz, P., Meireles, M., Cartridge liquid filtration: A theoretical approach for dynamic clogging in an elementary pleat, 9th World Filtration Congress, New Orleans, USA, Avril 2004
- Brady, J.F., Stokesian dynamics. Annual of Fluid Mechanics, 20: 111–157, 1988.
- Civan, F., Incompressible cake filtration: mechanism, parameters, and modeling. AIChE Journal, 44(11) :2379–2386, 1998.
- Dufrèche, J., Écoulement à travers une couche poreuse limitée par une paroi perforée : Comparaison entre approche de Darcy et simulation numérique à l'échelle microscopique, thèse, INPT, 2000.
- Dufrèche, J., Prat, M., Schmitz, P. and Sherwood, J.D. On the apparent permeability of a porous layer backed by a perforated plate. Che. Eng. Sc., 57 :2933–2944, 2002.
- Frey, J.M. and Schmitz, P., Particle transport and capture at the membrane surface in cross flow microfiltration. Chem. Eng. Sc., 55 :4053–4065, 2000.
- Fu, F., Dempsey, B., Modelling the effect of particle size and charge on the structure of the filter cake in ultrafiltration. Journal of membrane Science, 149 :221–240, 1998.
- Golfier, F., Zarcone, C., Bazin, B., Lenormand, R., Lasseux, D. and Quintard M., On the ability of a darcy-scale model to capture wormhole formation during the dissolution of a porous medium. Journal of fluid Mechanics, 457 :213–254, 2003.
- Kim, A.S. and Hoek, E.M.V., Cake structure in dead-end membrane filtration : Monte carlo simulations. Environmental Engineering Science, 19(6) :373–386, 2002.
- Maxey, M.R. and Patel, B.K. Localized force representation for particles sedimenting in stokes flow. International Journal of Multiphase Flow, 27 :1603–1626, 2001.
- Nasserri, S., Phan-Tien, N. and Fan, X.-J, Lubrication approximation in complete double layer boundary element method. Computational Mechanics, 26 :388–397, 2000.
- Noël, F., Simulation numérique de la formation d'un dépôt de particules sur une surface poreuse, application à la filtration d'arrêt, thèse, INPT, 2006.
- Noel, F., Schmitz P., Prat M., Effective hydraulic resistance of the first cake layer : a three dimensional solution" 9th World Filtration Congress, New Orleans, April 18-22, 2004.
- Oxarango, L., Bardon, S., Schmitz, P., Quintard, M., 3D macroscopic model for fluid flow and soot deposit in wall flow honeycomb DPF, *J. of Fuels and Lubricants*, 2003-01-0834, 2003
- Oxarango, L., Transferts de chaleur et de masse dans des structures poreuses multi-échelle, thèse, INPT, 2004.
- Pavan, V ; Contribution à la modélisation et à l'optimisation de la fabrication des noyaux de fonderie par le procédé cold-box. thèse, INPT, 2004.
- Pozrikidis, C. Boundary integral and singularity methods for linearized viscous flow. ISBN 0521406935. Cambridge University Press, 1992.
- Pozrikidis, C. A Practical Guide to Boundary-Element Methods with the software library. ISBN 1-58-488323-5. Chapman et Hall/CRC Press, 2002.
- Reymann, S., and M.A. Koenders. Filter cake formation and volume-time curves in dead-end filtration. Chem. Eng. Technol., 23(6) :501–504, 2000.
- Seminario, L., Rozas, R., Borquez, R., and Toledo, P.G., Pore blocking and permeability reduction in cross-flow microfiltration. Journal of membrane Science, 209 :121–142, 2002.
- Tarabara, V., Pierrisnard, F., Parronand, C., Bottero, J.Y., and Wiesner, M.R., Morphology of deposits formed from chemically heterogeneous suspensions : application to membrane filtration. Journal of colloidal and interface science Science, 256 :367–377, 2002.
- Zick, A.A. and Homsy, G.M., Stokes flow through a periodic array of spheres. Journal of Fluid Mechanics, 115 :13–26, 1982.