

# Influence des parois sur la séparation des espèces dans un mélange binaire en milieu poreux.

B. OUATTARA <sup>a</sup>, A. MOJTABI <sup>a</sup>, M.C. CHARRIER-MOJTABI <sup>b</sup>, A. KHOUZAM <sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> CNRS, IMFT, F-31400 Toulouse, France

<sup>c</sup> Laboratoire PHASE, EA 3028, UFR PCA, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062, Toulouse Cedex, France

## Résumé :

*Le couplage entre la convection et la thermodiffusion peut conduire à la séparation des constituants d'un mélange. Dans cette étude, nous considérons une cavité rectangulaire horizontale, de grand rapport d'aspect, remplie d'un milieu poreux saturé par un fluide binaire. La cavité est délimitée par des plaques minces de même épaisseur et soumise à un flux de chaleur constant. Nous montrons que la séparation dépend notablement du rapport  $\delta$  des épaisseurs de la couche poreuse et des parois ainsi que du rapport  $d$ , de leur conductivité thermique. La séparation est déterminée analytiquement et les résultats obtenus sont corroborés par les résultats de simulation numérique directe.*

## Abstract :

*The coupling between convection and thermodiffusion may lead to species separation. In this study, we consider a horizontal rectangular cavity of large aspect ratio, saturated by a binary fluid. The cavity is delimited by thin plates of equal thickness and subjected to a constant heat flux. We show that the separation of the species depends significantly on the plates over the porous layer thickness,  $\delta$ , and their relative conductivities ratio,  $d$ . The species separation is obtained analytically and the results are corroborated by direct numerical simulations.*

**Mots-clefs :** Convection; thermodiffusion; thermogravitation; stabilité linéaire; milieu poreux, effet Soret

## 1 Introduction

La diffusion thermogravitationnelle est la combinaison de la convection et la thermodiffusion. Le couplage de ces deux phénomènes peut conduire à la séparation des espèces d'un mélange. La séparation thermogravitationnelle dans les milieux poreux a été largement étudiée en raison de ses nombreuses applications fondamentales et industrielles. Une revue des travaux dans ce domaine est donnée par Nield et Bejan [1], Ingham et Pop [2], Vafai [3] et plus récemment par Vadász [4]. Au cours des dix dernières années, de nombreux travaux ont été consacrés à l'amélioration du dispositif expérimental afin d'augmenter la séparation. Platten et al. [5] ont utilisé une cavité inclinée chauffée par le haut. Elhajjar et al. [6] ont étudié l'écoulement unicellulaire apparaissant au début de la convection dans un fluide binaire saturant un milieu poreux au sein d'une cavité horizontale chauffée par le bas. Si le facteur de séparation  $\psi$  est positif est supérieur à une certaine valeur  $\psi_{\text{mono}}$ , les auteurs ont montré qu'il est possible de séparer les espèces d'un mélange de fluide binaire entre les deux extrémités de la cellule.

L'un des intérêts du présent travail réside dans le fait, qu'à notre connaissance, il n'y a pas de travaux sur la séparation des espèces où l'influence de l'épaisseur et de la nature des parois ait été pris en compte alors que l'épaisseur des parois, dans certaines applications, peut être supérieure à celle de la couche fluide. En 1983 Riahi [7] a pris en compte l'effet de la conductivité des plaques horizontales délimitant une couche poreuse sur l'apparition de la convection thermique. Plus récemment, Mojtabi et Rees [8], 2010, ont étudié l'influence de la conductivité et de l'épaisseur des parois sur l'apparition de la convection d'Horton-Roger-Lapwood; ces auteurs ont développé une analyse de stabilité linéaire et non linéaire.

L'objectif de notre travail, est d'étudier l'influence de la prise en compte de la conductivité et de l'épaisseur des parois sur la séparation des espèces d'un fluide binaire saturant une couche poreuse horizontale. Après avoir présenté une étude de stabilité linéaire de la solution d'équilibre en cellule d'extension horizontale infinie, on étudie analytiquement et numériquement la séparation obtenue dans une couche de grand rapport d'aspect, pour des valeurs du nombre de Rayleigh conduisant à un écoulement monocellulaire.

## 2 Formulation mathématique

On considère une cavité rectangulaire de rapport d'aspect  $A = L/H$ , où  $H$  est la hauteur de la cavité et  $L$  est sa longueur, la profondeur de la cavité est supposée infinie (figure 1). Cette cavité rectangulaire est remplie d'un milieu poreux saturé par un mélange binaire. La cavité est placée entre deux plaques métalliques d'épaisseur uniforme  $h$ . Les parois horizontales imperméables ( $y=-h$ ,  $y=H+h$ ) sont soumises à un flux de chaleur uniforme  $q'$ . Les parois verticales ( $x=0$ ,  $x=L$ ) sont imperméables et adiabatiques. Toutes les parois sont rigides. Nous considérons que la couche poreuse est homogène et isotrope. Nous supposons que l'approximation d'Oberbeck-Boussinesq est valable. En désignant par  $C$  la fraction massique du composant le plus lourd et par  $T$  la température du mélange, sa masse volumique s'écrit sous la forme:  $\rho = \rho_0[1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_C(C - C_0)]$  où  $\beta_T$  et  $\beta_C$  sont respectivement les coefficients d'expansion thermique et massique du fluide binaire, ( $T_0$  et  $C_0$  correspondent à l'état de référence).

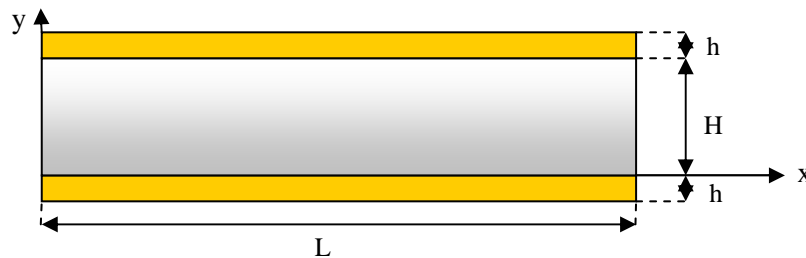


FIG. 1 – Configuration géométrique de la cellule

Dans toute l'étude, l'indice (1) est relatif à la paroi inférieure, l'indice (2) à la couche poreuse et l'indice (3) à la paroi supérieure.

La formulation mathématique adimensionnelle du problème est donnée par :

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi = -Ra \frac{\partial}{\partial x} (T_2 + \psi C) \\ \frac{\partial T_2}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} T_2 = \nabla^2 T_2 \\ \varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} C = \frac{1}{Le} (\nabla^2 C - \nabla^2 T_2) \\ \frac{\partial T_1}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T_1 \\ \frac{\partial T_3}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T_3 \end{cases} \quad (1)$$

Dans cette étude les variables sont rendues adimensionnelles par les grandeurs de références suivantes:  $H$  pour les longueurs,  $a/H$  pour la vitesse avec  $a = \lambda_p / (\rho c)_f$  ( $a$ , diffusivité thermique effective),  $\phi H^2/a$  pour le temps,  $\Delta T = q'H/\lambda_p$  pour la température,  $\Delta C = -\Delta T C_i (1 - C_i) (D_T^*/D^*)$  pour la fraction massique, où  $C_i$ ,  $D_T^*$  et  $D^*$  sont respectivement, la fraction massique initiale, les coefficients de thermodiffusion et de diffusion massique du constituant le plus lourd.  $\vec{g} = -g\vec{e}_y$  est l'accélération de la pesanteur. L'équation de continuité est satisfaite en introduisant la fonction de courant comme suit:  $u = \partial\phi/\partial y$  et  $v = -\partial\phi/\partial x$ . Le problème considéré dépend de huit paramètres adimensionnels: le nombre de Rayleigh thermique,  $Ra = (Kg\beta_T H \Delta T_2)/(a\nu)$ , le facteur de séparation  $\psi = -(\beta_C/\beta_T)(D_T^*/D^*)C_i(1 - C_i)$ , le nombre de Lewis  $Le = a/D^*$ , la porosité normalisée,  $\varepsilon = \varepsilon^*/\phi$  (avec  $\phi = (\rho c)_p/(\rho c)_f$ ), le rapport des diffusivités thermiques,  $\alpha = a_s/a_p$  où  $a_s = \lambda_s/(\rho c)_s$  et  $a_p = \lambda_p/(\rho c)_p$  sont respectivement la diffusivité thermique des plaques métalliques et du milieu poreux, le rapport des conductivités thermiques,  $d = \lambda_s/\lambda_p$ , le rapport de l'épaisseur des parois sur l'épaisseur de la couche poreuse,  $\delta = h/H$  et le rapport d'aspect de la cavité poreuse,  $A = L/H$ . Les conditions aux limites correspondantes sont:

$$\begin{aligned} \text{pour } y = -\delta, & \quad \frac{\partial T_1}{\partial y} = -\frac{\lambda_p}{\lambda_s} = \frac{-1}{d}; \\ \text{pour } y = 0, & \quad \frac{\partial T_1}{\partial y} = \frac{1}{d} \frac{\partial T_2}{\partial y}, \quad T_1 = T_2, \quad \phi = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial T_2}{\partial y} = 0; \\ \text{pour } y = 1, & \quad \frac{\partial T_3}{\partial y} = \frac{1}{d} \frac{\partial T_2}{\partial y}, \quad T_2 = T_3, \quad \phi = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial T_2}{\partial y} = 0; \\ \text{pour } y = 1 + \delta, & \quad \frac{\partial T_3}{\partial y} = \frac{-1}{d}. \end{aligned} \quad (2)$$

### 3. Stabilité linéaire de la solution d'équilibre dans une cellule horizontale d'extension infinie : bifurcation stationnaire

Le problème considéré possède une solution d'équilibre caractérisée par :

$$\vec{V} = 0, T_{1,0} = -y/d + T_a, T_{2,0} = T_a - y, T_{3,0} = (1 - y)/d + T_a - 1, C_0 = C_i + 1/2 - y \quad (3)$$

où  $T_a$  est une constante arbitraire. Dans le but d'analyser la stabilité de cette solution d'équilibre, on introduit la perturbation de la fonction de courant  $\phi$ , les perturbations de température  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  et  $\theta_3$  et de la fraction massique  $c$ . On suppose que les perturbations  $(\phi, \theta_1, \theta_2, \theta_3, c)$  sont infinitésimales, et afin de simplifier l'étude de la stabilité linéaire, on introduit la fonction  $\eta = c - \theta_2$ . Les perturbations sont choisies comme suit :

$(\varphi, \theta_1, \theta_2, \theta_3, \eta) = (\tilde{\varphi}, \tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \tilde{\theta}_3, \tilde{\eta})(y) \exp(ikx + \sigma t) + \text{c.c.}$ , où  $k$  est le nombre d'onde dans la direction horizontale ( $x$ ),  $i^2 = -1$  et  $\sigma$  est le facteur d'amplification temporelle de la perturbation. En combinant les équations de Darcy et de l'énergie, on obtient, les équations aux perturbations linéarisées suivantes où  $\sigma$  est pris égal à zéro:

$$\begin{cases} (D^2 - k^2)^2 \tilde{\theta}_2 - Rak^2[1 + \psi + \psi Le] \tilde{\theta}_2 = Rak^2 \psi [A \sinh(ky) + B \cosh(ky)] \\ (D^2 - k^2) \tilde{\theta}_1 = 0 \\ (D^2 - k^2) \tilde{\theta}_3 = 0 \end{cases} \quad (4)$$

où  $D = \partial/\partial y$  et A et B vérifient:

$$\begin{aligned} Le(d\tilde{\theta}_2/dy) + kA &= 0 \quad \text{pour } y = 0; \\ Le(d\tilde{\theta}_2/dy) + kA \cosh(k) + kB \sinh(k) &= 0 \quad \text{pour } y = 1. \end{aligned} \quad (5)$$

Les conditions aux limites associées sont:

$$\begin{aligned} \text{pour } y = -\delta, \quad \frac{\partial \tilde{\theta}_1}{\partial y} &= 0; \\ \text{pour } y = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\theta}_1}{\partial y} = \frac{1}{d} \frac{\partial \tilde{\theta}_2}{\partial y}, \quad \tilde{\theta}_1 = \tilde{\theta}_2, \quad (D^2 - k^2) \tilde{\theta}_2 &= 0; \\ \text{pour } y = 1, \quad \frac{\partial \tilde{\theta}_3}{\partial y} = \frac{1}{d} \frac{\partial \tilde{\theta}_2}{\partial y}, \quad \tilde{\theta}_2 = \tilde{\theta}_3, \quad (D^2 - k^2) \tilde{\theta}_2 &= 0; \\ \text{pour } y = 1 + \delta, \quad \frac{\partial \tilde{\theta}_3}{\partial y} &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

La solution générale de l'équation différentielle en  $\tilde{\theta}_2$  du quatrième ordre, du système (4) s'écrit comme une combinaison de quatre fonctions indépendantes dont l'expression dépend du signe de  $Ra(1 + \psi + \psi Le)$ . Ces considérations nous permettent de distinguer quatre régions du plan  $(Ra, \psi)$ . La solution de cette équation est la somme de la solution générale de l'équation homogène associée et de la solution particulière :  $-\psi(A \sinh(ky) + B \cosh(ky))/(1 + \psi(1 + Le))$ . La solution du système d'équation (4) est :

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}_2(y) &= C \cosh(\sqrt{k^2 + k\sqrt{Ra(1 + \psi + \psi Le)}} y) + D \sinh(\sqrt{k^2 + k\sqrt{Ra(1 + \psi + \psi Le)}} y) \\ &\quad + E \cos(\sqrt{k\sqrt{Ra(1 + \psi + \psi Le)} - k^2} y) + F \sin(\sqrt{k\sqrt{Ra(1 + \psi + \psi Le)} - k^2} y) \\ &\quad - \psi(A \sinh(ky) + B \cosh(ky))/(1 + \psi + \psi Le); \\ \tilde{\theta}_1(y) &= G \cosh(ky) + H \sinh(ky); \\ \tilde{\theta}_3(y) &= M \cosh(ky) + N \sinh(ky). \end{aligned} \quad (7)$$

La solution obtenue dépend de dix constantes arbitraires A, B, C, D, E, F, G, H, M et N. Quand on utilise les conditions aux limites données en (5) et (6), nous obtenons un système algébrique homogène linéaire avec dix équations à dix inconnues correspondant aux dix constantes. Ce système admet une solution non triviale si le déterminant de la matrice associée,  $\det(Ra(k), k, \delta, d, \psi, Le)$  est égal à zéro. L'expression de ce déterminant a été obtenue en utilisant le logiciel Maple. Quand on calcule le déterminant, on obtient l'équation de dispersion reliant le nombre de Rayleigh, le nombre d'onde, le rapport d'aspect  $\delta$ , le rapport des conductivités thermiques  $d$ , le nombre de Lewis  $Le$  et le facteur de séparation  $\psi$ . En raison de la longueur de l'expression du déterminant, il n'est pas donné ici afin de ne pas alourdir le texte. On a aussi déterminé les valeurs du nombre de Rayleigh critique et du nombre d'onde critique correspondant à la transition stationnaire en utilisant un code d'éléments finis (Comsol).

Les Figures 2(a) et 2(b) montrent respectivement les diagrammes de stabilité  $k_c = f(\psi)$  et  $Ra_c = f(\psi)$  et obtenus pour  $(Le, \delta, d) = (3, 10, 1)$ .

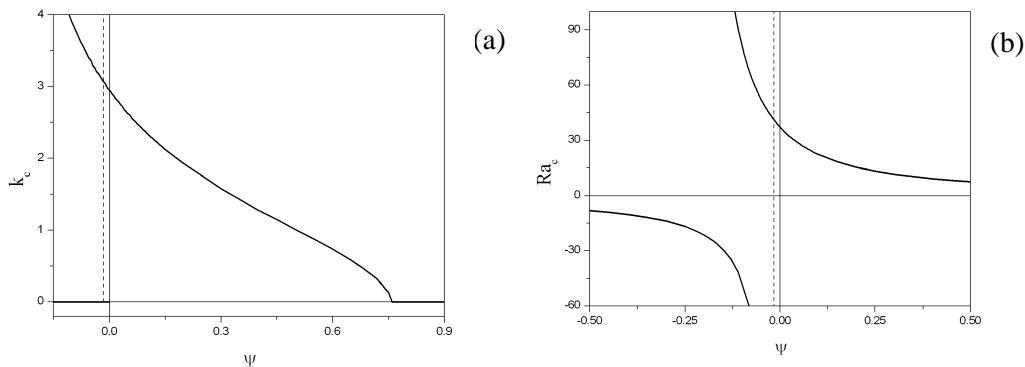


FIG. 2 – Diagramme de stabilité pour  $(Le, d, \delta) = (3, 10, 1)$ . (a)  $k_c = f(\psi)$ , (b)  $Ra_c = f(\psi)$

## 5 Etude de la séparation : comparaison entre résultats analytiques et numériques

Le système (1) associé aux conditions aux limites (2) a été résolu numériquement en utilisant le code industriel COMSOL avec un maillage rectangulaire bien approprié pour le domaine d'étude. Les influences de  $d$ ,  $\delta$ ,  $Le$  et  $\psi$  pour différentes valeurs de  $Ra$  ont été étudiées. On considère le mélange binaire utilisé par Platten et al. [5]. Il s'agit d'un mélange eau-éthanol à 60,88% en masse d'eau et à 22,5°C. La figure 3, montre la variation de la séparation en fonction du nombre de Rayleigh pour  $Le=232$  et  $\psi=0,2$  sans l'influence des parois ( $d=0, \delta=0$ ) et avec leur influence ( $d=41, \delta=2$ ). La solution analytique en traits continus est en bon accord avec les résultats numériques représentés par des symboles. Si l'optimum de séparation est le même avec ou sans prise en compte des parois, il n'en n'est pas de même de l'évolution des courbes  $S=f(Ra)$  qui diffèrent notablement à partir de  $Ra \approx 2,5$ . ( $S$  est la différence des fractions massiques du constituant le plus lourd entre les deux extrémités verticales de la cellule).

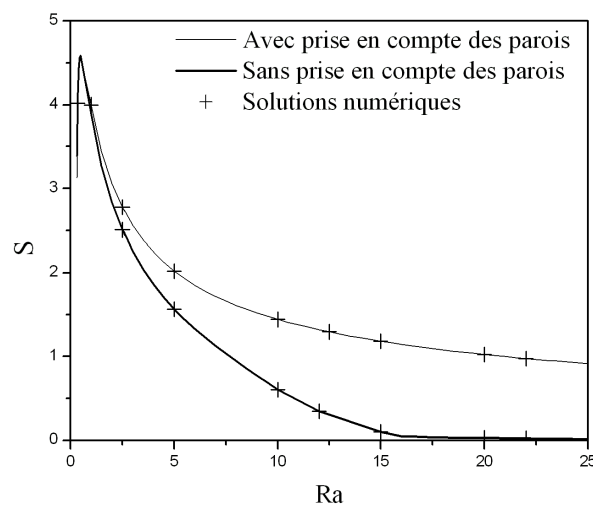


FIG. 3- Séparation fonction du nombre de Rayleigh pour  $Le=232, \psi=0,2, (d=0, \delta=0)$  (sans prise en compte des parois) et  $(d=41, \delta=2)$  (avec prise en compte des parois)

La figure 4, montre les iso-concentrations pour  $Le=232$ ,  $\psi=0,2$ , et  $Ra=10$  sans prise en compte de l'influence des parois ( $d=0$ ,  $\delta=0$ ). La séparation obtenue dans ce cas est  $S=0,60$ .

La figure 5, présente les iso-concentrations pour le même mélange avec les mêmes paramètres mais en prenant en compte l'influence des parois ( $d=41$ ,  $\delta=2$ ) ; la séparation obtenue est de  $S=1,44$ . On constate donc que la non prise en compte de l'influence des parois sous-estime la séparation des espèces.

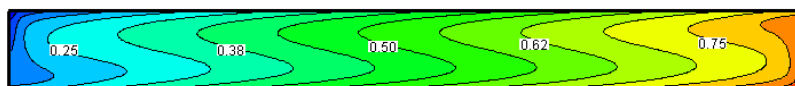


FIG. 4- Iso-concentrations pour  $Le=232$ ,  $\psi=0,2$  et  $Ra=10$  : cas sans influence des parois ( $d=0$ ,  $\delta=0$ ),  $S=0,60$ .

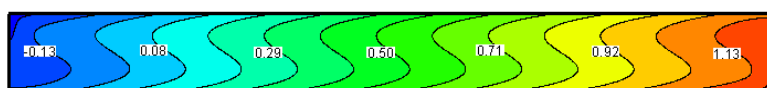


FIG. 5- Iso-concentrations pour  $Le=232$ ,  $\psi=0,2$  et  $Ra=10$  : avec influence des parois ( $d=41$ ,  $\delta=2$ ),  $S=1,44$ .

## 5 Conclusion

On a étudié analytiquement et numériquement, l'influence de la conductivité thermique et de l'épaisseur des parois délimitant une couche poreuse, horizontale, saturée par un fluide binaire et soumise à un flux thermique constant sur la séparation thermogravitationnelle des constituants du mélange. L'un des résultats importants qui ressort de cette étude est que la séparation est sous-estimée lorsqu'on ne prend pas en compte l'effet des parois.

## Références

- [1] Nield D.A., Bejan A., Convection in Porous Media, Springer-Verlag, New-York, 1998.
- [2] Ingham D.B., Pop I., Transport Phenomena in Porous Media, Vol. III, Pergamon Press, 2005.
- [3] Vafai K., Handbook of Porous Media, Vol. 2, Marcel Dekker New York/Basel, pp. 269-320, 2005.
- [4] Vadász P., in: Peter Vadász(Ed), Theory and Applications of Transport in Porous Media, Vol. 22, Springer, Hardcover ISBN: 978-1-4020-8177-4, 2008.
- [5] Platten J.K., Bou-Ali M.M., Dutrieux J.F., Enhanced molecular separation in inclined thermogravitational columns, The Journal of Physical Chemistry B, 107 (42), 11763–11767, 2003.
- [6] Elhajjar B., Charrier-Mojtabi M. C., Mojtabi A., Separation of a binary fluid mixture in a porous horizontal cavity, Physical Review E 77, 026310, 1-6, 2008.
- [7] Riahi D.N., "Nonlinear convection in a porous layer with finite conducting boundaries" Journal of Fluid Mechanics, 129, 153-171, 1983.
- [8] Mojtabi A., Rees D.A.S., The effect of conducting bounding plates on the onset of Horton-Rogers-Lapwood convection, Int. J. Heat Mass Transfer, 54, 293-301, 2010.
- [9] Charrier-Mojtabi M.C., Elhajjar, B., Mojtabi A., Analytical and numerical stability analysis of Soret-driven convection in a horizontal porous layer, Phys Fluid , 19 (12), 124104, 1-14, 2007.
- [10] R. Bennacer, A. Mahidjiba, P. Vasseur, H. Beji, R. Duval, The Soret effect on convection in a horizontal porous domain under cross temperature and concentration gradients, Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow, 13 (2-3) (2003) 199-215.