

Modélisation thermodynamique et simulation numérique du procédé de purification d'une solution aqueuse par Osmose Inverse

M. AMOKRANE^a, D. SADAOUI^a, M. DUDECK^b

a. Laboratoire de Mécanique Matériaux et Energétique (L2ME), Université A. MIRA, Béjaïa 06000, Algérie

b. Institut d'Alembert, Université Pierre et Marie Curie, 4 place Jussieu, 75252 Paris, France

Résumé :

Le procédé de purification par osmose inverse est actuellement le procédé le plus utilisé à travers le monde par la plupart des unités de dessalement de l'eau de mer. Ce procédé consiste à utiliser des membranes semi perméables denses avec l'application d'un écart de pression supérieur à celui de la pression osmotique. Durant les dernières années, ce procédé a connu de véritables avancées technologiques qui ont considérablement diminué le coût de l'eau dessalée, néanmoins cela reste un procédé coûteux en terme d'énergie et comporte des risques environnementaux. L'étude présentée décrit le principe thermodynamique de l'osmose inverse avec une approche entropique et phénoménologique à l'équilibre ou en proche équilibre pour obtenir des lois d'échanges au travers des membranes semi perméables. La résolution des équations gouvernantes (équations de la dynamique, de la thermique (énergie) et du transfert de masse) associées aux conditions aux limites appropriés est rendue possible grâce à l'utilisation de la méthode des volumes finis. Une attention particulière est portée à la condition aux limites modélisant la membrane et permettant d'étudier la région proche de la surface membranaire afin de prévoir le champ de concentration en sel ainsi que la formation de sel. On s'est aussi intéressé à l'effet de certains paramètres qui contrôlent le phénomène physique du transfert membranaire (taux de rejet intrinsèque, pression transmembranaire, l'hydrodynamique etc.). Les résultats obtenus pour une géométrie plane sont confrontés à ceux expérimentaux de Pinho et al [4] et numériques d'Ahmad et al [8].

Abstract:

Currently, reverse osmosis is the most widely process used for desalination of sea water .It use a dense semi-permeable membranes and a high pressure more than the osmotic pressure. In recent years, the process has developed and the cost of desalinated water was significantly reduced, nevertheless it remains costly in term of energy and includes environmental risks. The present study describes the thermodynamic principle of reverse osmosis in a phenomenological approach in equilibrium or near equilibrium. The Navier-Stokes equations, thermal (energy) and mass transfer associated were resolved by the finite volume method and appropriate boundary conditions were applied. Particular attention was taken for modeling the membrane boundary condition. We have study the region near the membrane surface in order to predict the concentration field and the salt formation. We are also interested in the effect of some parameters that control the physical phenomenon of membrane transfer (intrinsic rejection coefficient and transmembrane pressure, hydrodynamics, etc....). The obtained results in planar geometry were compared with the experimental work of M.N. Pinho and al [4], and numerical study of A.L. Ahmad and al [8]

Mots clefs : osmose inverse, CFD, dessalement, membrane, semi perméable

1 Introduction

L'osmose inverse est un procédé de production de l'eau douce à partir d'une eau saline en utilisant une membrane dense et en appliquant une différence de pression dite pression transmembranaire supérieure à la pression osmotique. Plusieurs travaux ont traité le phénomène de la séparation membranaire expérimentalement et numériquement. Berman [1] a développé une solution analytique de la dépression dans un canal avec parois poreuses valable à vitesse de perméation constante (osmose inverse), puis Karode [2] a suivi la même démarche pour le cas d'un canal plan et axisymétrique à vitesse de perméation constante (osmose inverse, nanofiltration) et variable (ultrafiltration, microfiltration). Geraldès et al [3] ont développé un code de calcul qui prédit la polarisation de concentration en osmose inverse et en nanofiltration en fonction des facteurs de rejections. Plusieurs schémas de discrétisation des équations de convection ont été testés et les résultats numériques comparés à ceux de l'expérience. Pinho et al [4] ont utilisé les données expérimentales des tests effectués sur un canal muni d'une membrane de nanofiltration comme condition aux limites dans un code de calcul, par suite ils ont comparé les coefficients intrinsèques de rejection obtenus numériquement avec ceux de l'expérience. Wiley et Fletcher [5] ont simulé numériquement l'écoulement des deux cotés de la membrane en utilisant le code CFX, en considérant une vitesse de perméation selon la formule de Brian [6]. La viscosité et la diffusivité varient selon la concentration. Le modèle a été validé en comparant les résultats obtenus avec ceux des travaux antérieurs. L'étude numérique du transfert hydrodynamique et de masse dans une géométrie axisymétrique avec parois poreuses (microfiltration) a été réalisée par Damak et al [7] en utilisant une discrétisation par différences finies. Le nombre de Reynolds à l'entrée, le nombre de Reynolds de perméation et le nombre de Schmidt ont été variés afin d'étudier les profils de concentration au niveau de la surface de la membrane. Ahmad et al [8] ont utilisé une condition modifiée pour modéliser la condition de convection-diffusion au niveau d'une membrane imperméable pour prévoir les profils de concentration au niveau de la membrane et étudier la couche limite de polarisation de concentration. Les résultats obtenus sont très acceptables même avec une vitesse de perméation nulle.

Notre travail consiste en l'intégration des résultats expérimentaux de Pinho et al [4] comme conditions aux limites dans un code de calcul CFD, pour des géométries qui contiennent des parois ondulées. On étudie l'effet de la géométrie sur les profils de concentration, la dépression et le facteur de rejection intrinsèque qui caractérisent le transfert.

2 Approche thermodynamique et proche équilibre osmotique

L'osmose est un phénomène physique qui est décrit par la thermodynamique des phénomènes irréversible (TPI). La variation interne d'entropie rapportée à l'unité de temps s'écrit sous la forme :

$$\frac{\dot{S}}{\delta_i} = \frac{\mu_{eau}^1 - \mu_{eau}^2}{T} \dot{N}_{eau}^{(2)} + \frac{\mu_{soluté}^1 - \mu_{soluté}^2}{T} \dot{N}_{soluté}^{(2)} \quad (1)$$

μ_i^j et \dot{N} étant respectivement le potentiel chimique molaire et le nombre de moles par unité de temps.

L'équilibre thermodynamique entraîne l'absence de force et de flux thermodynamiques généralisés et donc l'égalité des potentiels ce qui conduit à la loi de Van t'Hoff. Dans le domaine du proche équilibre thermodynamique, il y a proportionnalité entre la force et le flux par intermédiaire d'un coefficient phénoménologique L positif, $\dot{N}_{eau}^{(2)} = L(\mu_{eau}^1 - \mu_{eau}^2)$. Dans le cas d'une membrane qui n'est pas parfaitement sélective, les relations phénoménologiques sont [9] :

$$\begin{bmatrix} \dot{N}_{eau}^{(2)} \\ \dot{N}_{soluté}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{eau} & 0 \\ 0 & L_{soluté} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mu_{eau}^1 - \mu_{eau}^2 \\ \mu_{soluté}^1 - \mu_{soluté}^2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Dans l'hypothèse d'une faible concentration en soluté et après développement, le transfert membranaire est donné par :

$$\dot{M}_{eau}^{(2)} \approx \rho_{eau} \bar{V}_{eau} L(\Delta\pi - P') \quad (3)$$

où \dot{M} , \bar{V} , $\Delta\pi$ et P' sont respectivement le débit massique, le volume molaire, la pression osmotique et la pression dans le compartiment 2.

3 Procédure numérique et résultats

La CFD est un outil indispensable et peu coûteux pour l'étude des phénomènes liés à la mécanique des fluides. Les étapes à suivre sont : le dessin de la géométrie, le maillage du domaine étudié et enfin la simulation numérique. La géométrie de référence est un canal identique à celui de Pinho et al [4] et Ahmad et al [8] mais admettant des parois ondulées. Les distances b et c sont constantes et a varie en fonction du nombre d'onde (figure 1).

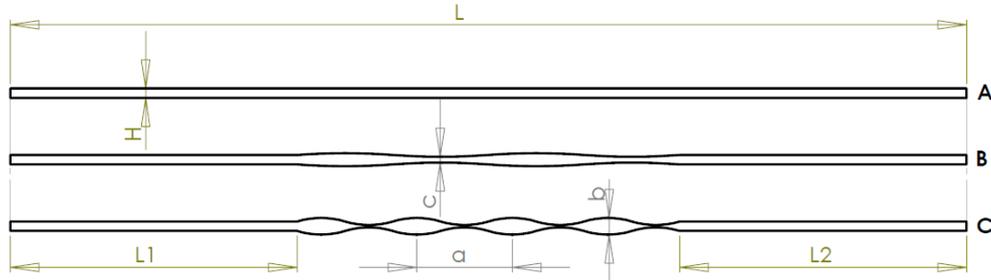


FIG. 1- Dimensions des canaux étudiés

Le transfert hydrodynamique couplé au transfert de masse est modélisé en régime laminaire, bidimensionnel suivant les axes x , y et stationnaire. L'équation de continuité et l'équation de conservation du soluté sont associées à l'équation de Navier-Stokes. Le fluide utilisé est un mélange du soluté (A : solution aqueuse de NaCl) et du solvant (B : eau). Les propriétés thermochimiques de la solution aqueuse varient en fonction de la concentration ($m_A < 0,09 \text{ kg / kg}$) selon Geraldès et al [3] :

$$\mu = 0,89 \cdot 10^{-3} (1 + 1,63m_A), \rho = 997,1 (1,0 + 0,696m_A), D_{AB} = \max(1,61 \cdot 10^{-9} (1 - 14m_A), 1,45 \cdot 10^{-9})$$

Plusieurs maillages grilles ont été testés. La partie voisine de la membrane ondulée doit avoir un maillage très fin selon l'axe des x (supérieur à 600) et suivant l'axe des y (75 % du maillage vertical) selon [8]. Les équations sont transformées en une équation générale de convection diffusion qui est discrétisé suivant la méthode des volumes finis. La pression transmembranaire ΔP , la vitesse de perméation J_v et les fractions en sel à l'entrée et au perméat m_{A0} et m_{Ap} sont fonction de données expérimentales [4]. A l'entrée du canal, la vitesse axiale u_o et la fraction massique en sel m_{A0} sont constantes. A la sortie, les dérivés des vitesses et de la concentration sont nulles. Le mur supérieur et la membrane sont imperméables au soluté, (vitesse normale à la membrane nulle), en revanche la condition sur la concentration prend en compte la perméabilité et la vitesse de perméation [8].

3.1 Facteur de polarisation et concentration

Les simulations sont réalisées pour le cas d'une géométrie plane et les résultats sont comparés avec ceux des références [4] et [8] en utilisant la même géométrie et les mêmes conditions aux limites (figure 2).

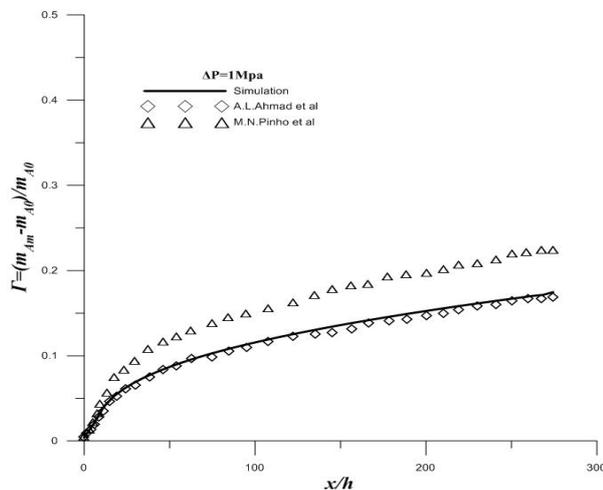


FIG. 2 - Facteur de polarisation de concentration. Comparaison avec la littérature

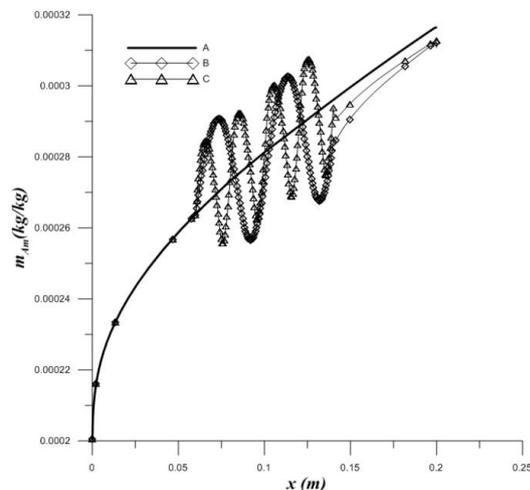


FIG. 3 - Profils de concentration en sel à la surface de la membrane ($Re = 100$ et $\Delta P = 1 \text{ MPa}$)

L'évolution du facteur de polarisation Γ donné par l'équation (4) pour un $\Delta P = 1$ MPa et représenté sur la figure 2, montre que le pourcentage d'erreur ne dépasse pas 5% comparés aux résultats numériques de Ahmad et al [8].

$$\Gamma = (m_{Am} - m_{Ao}) / m_{Ao} \quad (4)$$

En l'absence d'une vitesse de perméation, nos résultats et ceux de [8], ont des valeurs relativement inférieures aux résultats expérimentaux de [4]. La figure 3 montre une comparaison entre les profils de concentration en sel au niveau de la surface de la membrane m_{Am} pour les trois configurations (A : surface plane ; B et C : géométries ondulées). On distingue trois régions, la région d'entrée (L1), la zone ondulée (L2), et la région de sortie (L3). Les profils de la fraction massique en sel m_{Am} sont identiques pour les cas A , B et C dans la région d'entrée (L1), car la forme du canal est la même pour les trois cas. La région à parois ondulées est caractérisée par des profils de concentration sinusoïdaux, la concentration augmente brusquement jusqu'à atteindre une valeur maximale correspondant à la section b (section la plus importante du canal), puis diminue au niveau le plus bas correspondant à la section c (section la plus faible). Une fois la région ondulée dépassée, les profils de la fraction en sel m_{Am} reprennent la même allure, cependant avec des valeurs moins importantes que celle du canal de référence, en raison du rétrécissement à la fin de la région ondulée. En fonction du nombre d'onde, les profils de la concentration en sel admettent plus ou moins de valeurs maximales et minimales.

3.2 Chute de pression

Dans les procédés de séparation membranaire utilisant un gradient de pression, la chute de pression est un paramètre essentiel. La chute de pression présentée sur figure 4, montre des profils identiques pour les différentes pressions transmembranaires, 1, 2, 3 MPa. Ils sont semblables dans la région d'entrée pour les trois configurations, en revanche dans la région ondulée, la pression statique admet une importante chute due aux pertes de charges singulières. A la sortie du canal, la pression varie linéairement.

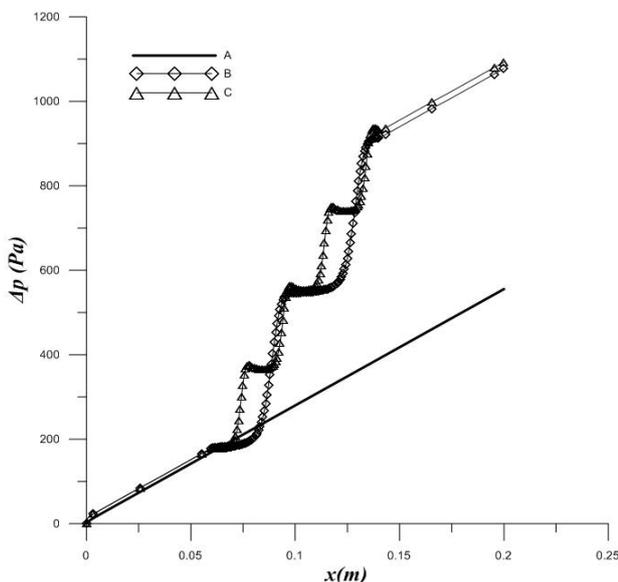


FIG. 4 - Profils de la dépression pour les cas A , B et C avec $Re = 100$ et $\Delta P = 1, 2, 3$ MPa

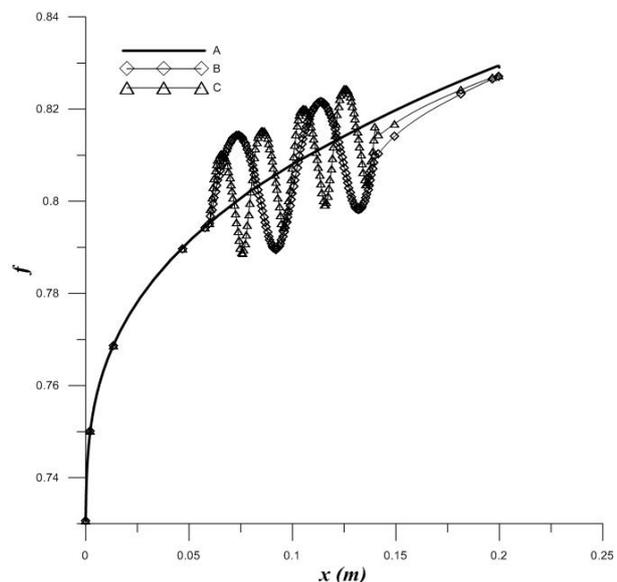


FIG.5 - Taux de rejet intrinsèque pour les cas A , B et C avec $Re = 100$ et $\Delta P = 1$ MPa

La figure 5, représente le facteur de rejection intrinsèque caractérisant le rejet du sel en chaque point de la membrane, il est donné par :

$$f = (m_{Am} - m_{Ap}) / m_{Am} \quad (5)$$

Ce paramètre varie en fonction de la fraction en sel à la surface de la membrane m_{Am} , il a la même allure que la fraction massique. On constate que la rejection admet des maximum au niveau des sections les plus importantes b et des minimums au niveau des sections rétrécies c . Le nombre d'onde n'a pas un effet significatif sur les valeurs maximales et minimales. Comme le taux de rejet est un paramètre qui varie en fonction de la fraction en sel m_{Am} à la surface de la membrane, ce dernier a la même allure que la fraction massique. Sur la figure 6, on remarque que la rejection admet des pics de maximum au niveau des sections les plus importantes b et des pics de minimums au niveau des sections rétrécies c . Le nombre d'onde n'a pas un effet notable sur les valeurs maximales et minimales.

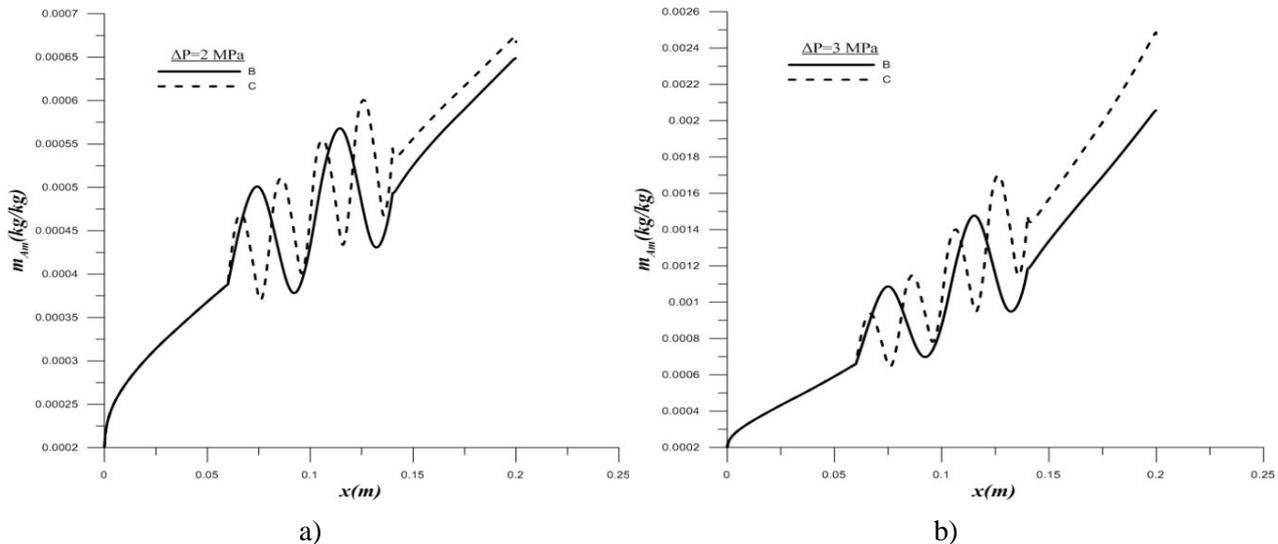


FIG. 6 - Profils de concentration à la surface de la membrane pour les cas B et C
Re = 100 a) $\Delta P = 2$ MPa b) $\Delta P = 3$ MPa

L'augmentation de la pression transmembranaire augmente le taux de rejet apparent et la fraction en sel du côté de retentât [4]. Pour les deux cas, les valeurs sont toujours plus élevées pour des nombres d'ondes supérieurs du fait d'une surface d'échange plus conséquente. La variation du nombre de Reynolds permet d'examiner l'influence de la vitesse d'entrée u_0 sur les profils de la concentration à la surface de la membrane m_{Am} (figure 7).

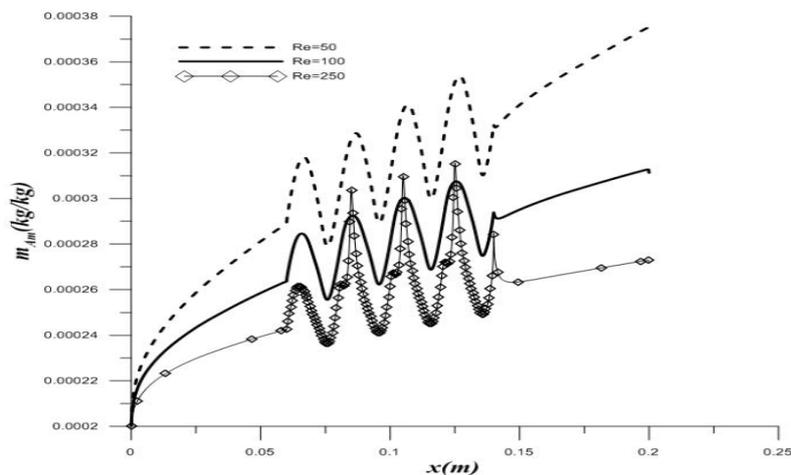


Fig. 7 - Fraction massique en sel à la surface de la membrane m_{Am} pour le cas C ($\Delta P = 1$ MPa)

Pour un régime restant laminaire, le nombre de Reynolds d'entrée est choisi entre 50 et 250 et pour la même pression transmembranaire, les profils de la fraction en sel évoluent inversement au nombre de Reynolds car les concentrations les plus importantes correspondent aux Reynolds les plus faibles. La chute de pression moyenne et le facteur de rejection intrinsèque moyen sont calculés numériquement par :

$$\overline{\Delta p} = (1/l) \int_0^l \Delta p(x) dx \quad (6)$$

$$\overline{f} = (1/l) \int_0^l f(x) dx \quad (7)$$

Les résultats obtenus (table 1) montrent que la dépression moyenne est proportionnelle au nombre de Reynolds et donc à la vitesse d'entrée, quant au facteur de rejection intrinsèque moyen, il est inversement proportionnel au nombre de Reynolds d'entrée.

Re	$\overline{\Delta p}$ (Pa)	\overline{f}
50	254.68	0.8281
100	526.18	0.8077
250	1495.38	0.7911

Table .1 - Dépression moyenne et facteur de rejection intrinsèque ($\Delta P = 1\text{MPa}$)

4 Conclusion

L'osmose inverse est actuellement le procédé le plus utilisé pour dessaler l'eau de mer, il est utilisé par la majorité des unités de dessalement d'eau de mer d'où l'intérêt de poursuivre des études sur le procédé afin de mieux comprendre les paramètres qui le contrôlent pour pouvoir optimiser le processus et réduire le cout de production. L'écoulement de l'eau saline au dessus d'une proie plane (concentrât) a été modélisé thermodynamiquement et numériquement. Les simulations numériques ont été effectuées avec un code de calcul CFD et les équations de l'hydrodynamique et du soluté ont été résolues par la méthode des volumes fins. Les conditions aux limites ont été utilisées en prenant en considération le transfert au niveau de la membrane semi perméable. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux obtenus par Pinho et al [4] et Ahmad et al [8] pour une validation, par la suite nous avons traité le cas d'une membrane ondulée. Les résultats montrent que la fraction en sel au niveau de la membrane dépend fortement du nombre d'ondulations et de la longueur d'onde, la dépression est plus importante dans la région ondulée, et le facteur de rejection intrinsèque évolue avec la géométrie ondulée.

Références

- [1] A. S. Berman, Laminar flow in channels with porous walls, J. Appl. Phys. 24, (1953) 1232.
- [2] S. K. Karode, Laminar flow in channels with porous walls, revisited, Journal of Membrane Science 191 (2001) 237–241.
- [3] V. Geraldes, V. Semiao, M.N. Pinho, Numerical modelling of mass transfer in slits with semi-permeable membrane walls, Engineering Computations, Vol. 17 No. 3, (2000) 192-217.
- [4] M. N. Pinho, V. Semiao, V. Geraldes, Integrated modeling of transport processes in fluid/nanofiltration membrane systems, Journal of Membrane Science 206 (2002) 189–200.
- [5] D. E. Wiley, D. F. Fletcher, Techniques for computational fluid dynamics modeling of flow in membrane channels. Journal of Membrane Science, 211(2003) 127–137.
- [6] P.L.T. Brian, Concentration polarization in reverse osmosis desalination with variable flux and incomplete salt rejection, Ind. Eng. Chem. Fund. 4, (1965) 439.
- [7] K. Damak, A. Ayadi, P. Schmitz, B. Zaghmati, Modeling of crossflow membrane separation processes under laminar flow conditions in tubular membrane, Desalination 168 (2004) 231-239.
- [8] A. L. Ahmad, K.K. Lau, M.Z. Abu Bakar, S.R. Abd. Shukor, Integrated CFD simulation of concentration polarization in narrow membrane channel, Computers and Chemical Engineering 29 (2005) 2087-2095.
- [9] M. Dudeck, Thermodynamique - Les irréversibilités, Editions ESKA, Paris France (1993).