



## Open Archive TOULOUSE Archive Ouverte (OATAO)

OATAO is an open access repository that collects the work of Toulouse researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in : <http://oatao.univ-toulouse.fr/>  
Eprints ID : 10559

**To cite this version** : Yacine, loujaine and Mojtabi, Abdelkader and Bennacer, Rachid and Khouzam, Ali Séparation des constituants d'un fluide binaire remplissant une cavité horizontale soumise à des flux croisés de chaleur. (2013) In: 21 ème Congrès Français de Mécanique (CFM 2013), 26 August 2013 - 30 August 2013 (Bordeaux, France)

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository administrator: [staff-oatao@listes-diff.inp-toulouse.fr](mailto:staff-oatao@listes-diff.inp-toulouse.fr)

# Séparation des constituants d'un fluide binaire remplissant une cavité horizontale soumise à des flux croisés de chaleur

LOUJAINÉ YACINE<sup>a</sup>, ABDELKADER MOJTABI<sup>a</sup>, RACHID BENNACER<sup>b</sup>, ALI 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> ENS-Cachan Dpt GC/ LMT /CNRS UMR 8535,61, Av du Président Wilson 94235 Cachan Cedex, France

## Résumé :

*On étudie numériquement et analytiquement l'influence de l'effet Soret sur la séparation des espèces d'un mélange binaire confiné dans une enceinte parallélépipédique horizontale soumise à des flux de chaleur uniformes et croisés. L'écoulement unicellulaire induit par le flux de chaleur latéral peut conduire à une importante séparation des espèces. L'hypothèse d'écoulement parallèle est utilisée pour déterminer la solution analytique associée à l'écoulement de double diffusion unicellulaire. Le problème étudié en plus de l'allongement  $A$ , dépend de cinq nombres adimensionnels qui sont les nombres de Rayleigh  $Ra$ , de Prandtl  $Pr$ , le facteur de séparation  $\psi$ , le nombre de Lewis  $Le$  et le rapport des densités horizontale et verticale de flux  $\alpha$ . Les applications numériques choisies correspondent au mélange binaire d'eau (60%) et d'éthanol (40%). Les résultats analytiques sont corroborés par ceux obtenus par des simulations numériques directes.*

## Abstract:

*We study numerically and analytically the influence of the Soret effect on the species separation of a binary mixture confined in a horizontal parallelepiped enclosure subjected to uniform cross heat fluxes. The unicellular flow induced by the lateral heat flux may lead to significant species separation. The hypothesis of parallel flow is used to determine the analytical solution which describes the unicellular double diffusive flow. The separation is calculated as function of: the Rayleigh number  $Ra$ , the Prandtl number  $Pr$ , the separation ratio  $\psi$ , the Lewis number  $Le$  and the ratio of horizontal to vertical heat flux densities  $\alpha$ . Numerical selected applications correspond to binary mixture of water (60%) and ethanol (40%). These analytical results are corroborated by direct numerical simulations.*

**Mots clefs:** thermodiffusion, convection, séparation, fluide binaire, effet Soret.

## 1 Introduction

La thermodiffusion, appelée effet Soret, décrit le couplage entre le gradient de température et le flux massique résultant au sein d'un système multiconstituants. Le couplage de la thermodiffusion et de la convection naturelle appelée diffusion thermogravitationnelle peut conduire à une séparation des constituants du mélange beaucoup plus importante que celle induite par la thermodiffusion seule. Un regain d'intérêt a été initié sur la pertinence de la thermodiffusion sur la convection dans un liquide binaire confiné dans une enceinte rectangulaire par le groupe de Bruxelles[1; 2]. Bennacer et al.[3] ont examiné l'existence de solutions multiples et l'influence de l'effet Soret sur la convection dans une couche poreuse horizontale soumise à des gradients croisés de température et de concentration. L'apparition de la convection induite par l'effet Soret dans une enceinte poreuse horizontale soumise à des flux de chaleurs croisés a été étudiée par Bahloul et al.[4].L'imperfection apportée par le chauffage latéral sur les courbes de bifurcation a également été étudiée par ces auteurs. Kalla et al.[5] ont analysé l'effet d'un faible gradient de température horizontal sur l'écoulement convectif induit dans une couche poreuse chauffée par le bas. Ils ont montré que plusieurs

états stationnaires sont possibles et certains d'entre eux sont instables. Ce type de situation est considéré également par Mansour et al.[6], qui ont étudié analytiquement et numériquement l'effet combiné de la thermodiffusion et du chauffage latéral sur la convection double diffusive dans une couche poreuse horizontale, saturée par un fluide binaire et soumise à des flux uniformes de chaleur et de masse sur ses grands côtés. Une étude numérique tridimensionnelle de la convection induite par l'effet Soret dans une cellule cubique remplie d'un mélange binaire d'eau (90%) et d'isopropanol (10%) a été réalisée par Shevtsova et al.[7]. Historiquement la prise en compte de la séparation des espèces, a été étudiée en 1938 par Clusius et Dickel [8] dans une colonne thermogravitationnelle (**TGC**), constituée de deux cylindres coaxiaux, verticaux de grande extension chauffés différemment. Pour augmenter le taux de séparation, Lorenz et Emery[9] ont utilisé des colonnes **TGC** poreuses. Platten et al.[10] ont étudié expérimentalement la séparation des constituants dans une cavité inclinée, chauffée par le haut. Charrier-Mojtabi et al. [11, 12] ont montré qu'il est possible d'obtenir la séparation des espèces d'un mélange binaire en configuration de Rayleigh-Bénard. De plus la quantité de constituant séparé est beaucoup plus importante dans une cavité horizontale que dans les colonnes **TGC**. En effet l'optimum de séparation dans les colonnes verticales est obtenu pour une épaisseur de l'ordre du 1/10 de millimètre alors que dans la cavité horizontale cette épaisseur peut-être de l'ordre de 2 à 3 millimètres.

Dans le présent travail, on se propose d'étudier analytiquement (écoulement de type parallèle) et numériquement l'écoulement de double diffusion convective généré au sein d'une cavité horizontale remplie d'une solution binaire et soumise à des flux de chaleur croisés. L'écoulement dans ces conditions peut-être généré soit en raison du gradient horizontal du flux thermique imposé et quel que soit l'importance de ce gradient soit en raison du gradient thermique vertical lorsque ce gradient est supérieur au gradient thermique critique. Nous disposons ainsi par ce nouveau procédé de séparation de deux paramètres de contrôle indépendants pour agir sur l'importance de la séparation des espèces contrairement aux colonnes thermogravitationnelles verticales utilisées par les nombreux auteurs [8,9] où le gradient thermique horizontal imposé engendre à la fois l'importance de la thermodiffusion et de la convection.

## 2 Modèle mathématique

On considère une cavité rectangulaire de grand rapport d'aspect  $A = L / H$ , où  $H$  est la hauteur de la cavité selon l'axe des  $z$  et  $L$  sa longueur le long de l'axe des  $x$  (FIG.1). La cavité est remplie d'une solution binaire de masse volumique  $\rho$  et de viscosité dynamique  $\mu$ . Les quatre parois sont soumises à des flux de chaleur de densité uniforme  $q$  sur les faces horizontales et  $aq$  sur les parois verticales, les faces opposées étant respectivement chauffées et refroidies, et sont supposées respectivement imperméables.

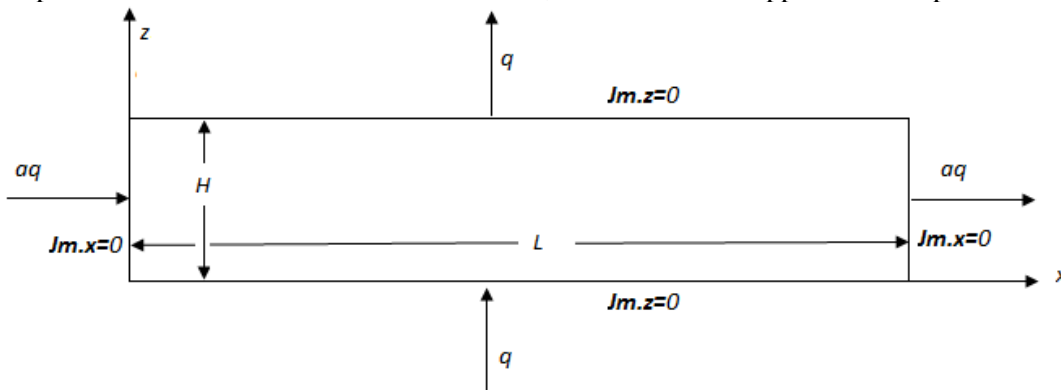


FIG.1- Configuration géométrique.

On suppose que l'approximation de Boussinesq est valide. Cette approximation suppose que les grandeurs thermo-physiques du mélange binaire sont constantes à l'exception de la masse volumique du mélange dans le terme de force volumique générateur de la convection naturelle où la masse volumique est donnée par son approximation linéaire:

$$\rho_0 = \rho[1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_C(C - C_0)] \quad (1)$$

où :  $\beta_T = -\frac{1}{\rho_0} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_C$  ,  $\beta_C = -\frac{1}{\rho_0} \left( \frac{\partial \rho}{\partial C} \right)_T$  sont respectivement les coefficients d'expansion thermique et massique du fluide binaire,  $T$  la température et  $C$  la fraction massique du constituant le plus lourd,  $(\rho_0, T_0, C_0)$  les valeurs de ces grandeurs à l'état de référence).

Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces sont formulées sous forme adimensionnelle par:

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} = -\nabla P + Ra Pr (T - \psi C) \vec{e}_z + Pr \nabla^2 \vec{V} \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T = \nabla^2 T \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla C = \frac{1}{Le} (\nabla^2 C + \nabla^2 T) \quad (5)$$

### 3 Conditions aux limites adimensionnelles

Les conditions aux limites dynamiques, thermiques et massiques sont données par :

$$z = 0, 1 : \vec{V} = \vec{0}; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{\partial C}{\partial z} = -1 \quad (6)$$

$$x = 0, A : \vec{V} = \vec{0}; \quad \frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{\partial C}{\partial x} = -a \quad (7)$$

Où les variables adimensionnelles sont données par:

$$(x, y, z) = \frac{(x^*, y^*, z^*)}{H}, t = \frac{t^*}{t_{ref}}, (u, v, w) = \frac{(u^*, v^*, w^*)}{V_{ref}}, P = \frac{P^*}{P_{ref}}, T = \frac{T^* - T_{ref}^*}{\Delta T^*}, C = \frac{C^* - C_{ref}^*}{\Delta C^*}$$

Avec :  $\Delta T^* = T_2^* - T_1^*$ ,  $\Delta C^* = \Delta T^* C_0^* (1 - C_0^*) \frac{DT}{D}$

Où :  $V_{ref} = \frac{\alpha}{H}$ ,  $t_{ref} = \frac{H^2}{\alpha}$ ,  $P_{ref} = \rho_0 \frac{\alpha^2}{H^2}$ ,  $q_{ref} = q$ ,  $C_{ref} = C_0$

Le problème considéré dépend de six paramètres adimensionnels qui sont le nombre de Rayleigh thermique  $Ra = (g\beta_T q H^4) / (v\alpha\lambda)$ , le nombre de Lewis  $Le = \alpha/D$ , le nombre de Prandtl :  $Pr = v/\alpha$ , le facteur de séparation  $\psi = -\frac{\beta_C DT}{\beta_T D} C_0 (1 - C_0)$  et le rapport d'aspect  $A = L/H$ , où  $\alpha$ ,  $\lambda$  et  $v$  désignent respectivement la diffusivité thermique, la conductivité thermique et la viscosité cinématique du fluide binaire.

### 4 Solution analytique

Pour cette étude, les résultats sont obtenus dans le cadre de l'hypothèse de grand rapport d'aspect ( $A \gg 1$ ). Dans ces conditions, l'écoulement étudié est unicellulaire à l'exception du voisinage immédiat des deux parois verticales de la cavité. La solution associée à l'écoulement unicellulaire est cherchée sous la forme suivante:

$$\vec{V}(x, z) = u(z)\vec{e}_x, \quad T(x, z) = ax + f(z), \quad C(x, z) = mx + g(z) \quad (8)$$

Où  $a$  désigne le rapport des densités de flux et  $m$  le gradient de la fraction massique le long de l'axe horizontal. Avec les hypothèses précédemment mentionnées et à l'état stationnaire, le système d'équations (2-5) se ramène après élimination de la pression et en tenant compte des conditions aux limites (6-7) au système d'équations aux dérivées partielles suivant:

$$\frac{\partial^3 u(z)}{\partial z^3} - Ra \frac{\partial}{\partial x} (T - \psi C) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + a u(z) = 0,$$

$$\frac{\partial^2 (C + T)}{\partial z^2} - m Le u(z) = 0$$

Pour résoudre le système (9), les hypothèses suivantes ont été utilisées:

- Le débit massique à travers une section droite perpendiculaire à l'axe x est égal à zéro:

$$\int_0^1 u(z) \cdot dz = 0$$

- La fraction massique d'un des constituants, ici le plus lourd, sur la totalité de la cellule est conservée:

$$\int_0^A \int_0^1 C \cdot dx \cdot dz = 0$$

Les expressions du champ de vitesse, de température et de concentration sont données par les relations suivantes:

$$u = \frac{-(a + \psi m)}{12} Ra(z - 1)(2z - 1) \quad (10)$$

$$T = -ax + aRa(a + \psi m)\left(\frac{1}{5}z^5 - \frac{1}{2}z^4 + \frac{1}{3}z^3\right) - z \quad (11)$$

$$C = mx - \frac{Ra(a + \psi m)}{12} (a + mLe)\left(\frac{1}{10}z^5 - \frac{1}{4}z^4 + \frac{1}{6}z^3\right) + z \quad (12)$$

$$- \frac{1}{120} aRa \left( a + mLe + \frac{\psi m^2 Le}{a} + \psi m \right) - \frac{1}{2} (mA + 1)$$

La séparation, définie par la différence des fractions massiques du constituant le plus lourd entre les deux parois verticales de la cellule, est donnée par l'expression  $S = mA$ .

Pour déterminer l'équation donnant la valeur de m, on écrit que le flux massique, associé à l'espèce de fraction massique C, à travers toute section verticale de la cavité est égale à zéro à l'état stationnaire:

$$\int_0^1 (Leu(z)C(x, z) - \frac{\partial(C + T)}{\partial x}) dz = 0 \quad \forall x \quad (13)$$

Cette dernière condition conduit à l'équation algébrique suivante donnant m en fonction des paramètres adimensionnels du problème: A, Ra, Le et  $\psi$ .

$$m^3 + a\left(\frac{2}{\psi} + \frac{1}{Le}\right)m^2 - \left(\frac{504}{Le\psi Ra} - \frac{a^2}{\psi^2} - \frac{2a^2}{Le\psi} - \frac{362880a}{Le^2\psi^2 Ra^2}\right)m \quad (14)$$

$$+ \frac{a}{Le\psi^2}\left(a^2 - \frac{362880}{LeRa^2} - \frac{504}{Ra}\right) = 0$$

## 5 Résultats et discussion

### 5.1 Détermination des paramètres de contrôle conduisant à la séparation optimale :

A partir de la relation implicite du troisième degré (Eq.14) donnant la valeur de m, on en déduit, en différenciant cette équation par rapport aux deux paramètres de contrôle a et Ra, les valeurs de ces deux paramètres conduisant à la séparation maximale fonction des deux nombres adimensionnels restant Le et  $\psi$ :

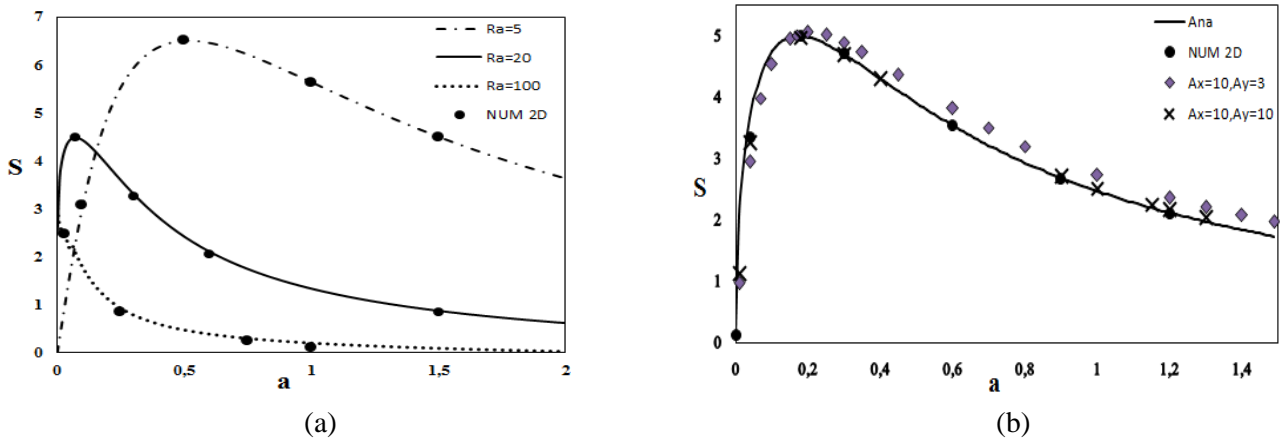
$$a_{\text{opt}} = \pm \frac{1}{20} \frac{(Le-1)\sqrt{70Le}}{1+Le}, \quad Ra_{\text{opt}} = -\frac{1440(Le+1)}{Le(Le-2\psi-1)} \quad (15)$$

On en déduit la valeur de  $m_{\text{max}}$  lorsque l'on remplace a et Ra par leur valeur optimale dans l'équation implicite (14):

$$m_{max} = \pm \frac{1}{10} \frac{\sqrt{70Le}}{(1 + Le)} \quad (16)$$

## 5.2 Comparaison des valeurs de séparation obtenues analytiquement à celles obtenue par simulations numériques directes 2D et 3D.

Des simulations numériques ont été effectuées pour corroborer les résultats analytiques obtenus. À cette fin, nous avons utilisé le logiciel Comsol Multiphysics avec un maillage quadrangle, bien adapté à la géométrie d'étude pour le cas 2D et un code maison en volumes finis pour le cas 3D. La résolution spatiale utilisée est de  $120 \times 30$  pour  $A=10$ . La figure 2 présente l'évolution de la séparation en fonction du rapport des densités de flux thermiques imposés sur les quatre parois avec  $Le = 203, \psi=0.203$  et  $Pr=30$ , pour une cavité chauffée par le bas, (FIG. 2-a) pour différentes valeurs du nombre de Rayleigh ( $Ra = 5, 20$ , et  $100$ ). La solution analytique est en bon accord avec la solution numérique représentée par des symboles (points). Pour  $Ra=10$ , nous avons comparé les résultats analytiques à ceux obtenus à partir des simulations numériques directes 2D et 3D pour un rapport de la cellule parallélépipédique de 10 selon  $x$  et pour deux valeurs particulières du rapport de cellule selon la direction  $y$  ( $Ay=3$  et  $10$ ) (FIG. 2-b). Un bon accord est trouvé entre les résultats analytiques obtenus pour une cellule d'extensions infinies dans les deux directions horizontales et ceux obtenus pour le couple de rapports de cellule ( $Ay=3$  et  $10$ ). Pour la valeur  $Ay=3$ , on relève une légère différence entre résultats analytiques et numérique 3D en raison de la prise en compte de l'adhérence du fluide aux deux parois verticales ( $y=0$ ) et ( $y=3$ ) de la cavité. Les résultats obtenus sont parfaitement concordants.



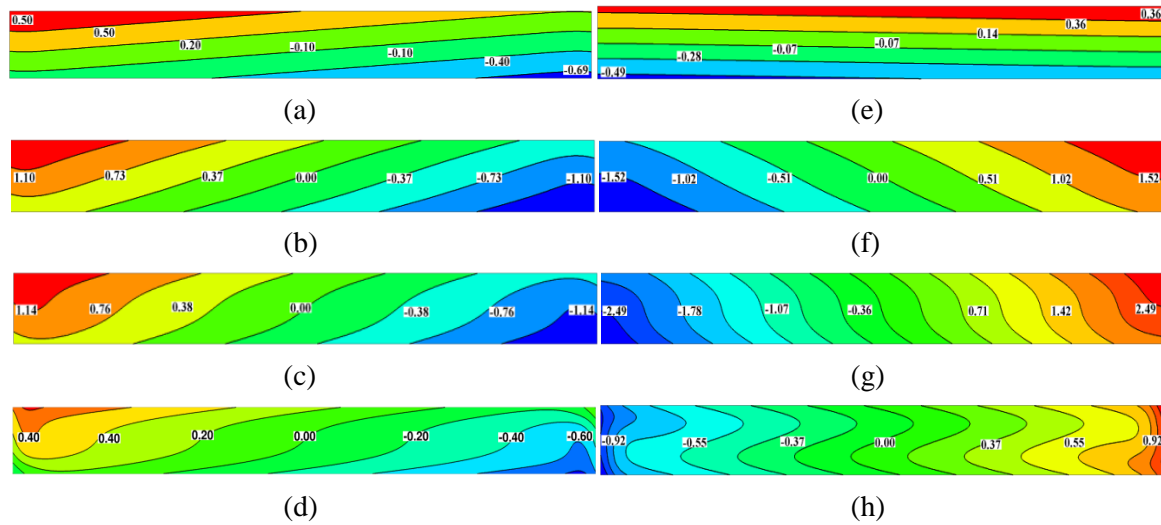
**FIG.2-** Variation de la séparation  $S$  en fonction du rapport des flux  $a$ , obtenue analytiquement et numériquement (a) 2D et pour différents nombres de Rayleigh ; (b) 2D et 3D pour  $Ra=10$  et pour différents rapports de cellules. (Cas d'un chauffage par le bas pour  $Le = 203, \psi = 0.203$ )

La figure 3 illustre clairement l'évolution du champ de concentration pour différentes valeurs du rapport de flux pour  $Ra = 10$  (FIG. 3 a-d) et  $Ra = -10$  (FIG. 3 e-h), pour  $Le = 203, \psi = 0.203$  et  $A = 10$ . Les lignes représentent les iso concentrations tandis que les couleurs représentent la valeur de la fraction massique du constituant le plus lourd. On observe que pour de très petites valeurs de  $a$ , la stratification du champ de concentration est verticale et pour des valeurs de  $a$  qui dépassent une valeur optimale, il y a une déformation importante du champ de concentration conduisant à l'affaiblissement du taux de séparation.

## 6 Conclusion

Nous avons étudié l'influence des densités de flux thermiques croisées caractérisées par deux paramètres de contrôle indépendants,  $a$  le rapport des densités de flux imposées et  $Ra$  le Rayleigh thermique sur la séparation des espèces d'une solution binaire remplissant une cavité parallélépipédique horizontale. Sous certaines conditions les flux croisés injectés au niveau des deux parois horizontales et verticales en vis à vis induisent un écoulement unicellulaire nécessaire à l'obtention de la séparation des espèces. Pour des cellules de grandes extensions horizontales, l'étude théorique menée nous a permis de déterminer analytiquement l'expression des champs de vitesse de température et de fraction massique en fonction des différents

paramètres adimensionnels du problème. A partir de cette étude théorique, on en déduit les valeurs optimales des deux paramètres de contrôles conduisant au maximum de séparation des constituants du mélange binaire étudié. Les résultats analytiques obtenus ont été corroborés par des simulations numériques directes 2D et 3D.



**FIG.3** Iso-concentrations et variation du champ de concentration pour différents rapports  $a$  des densités de flux, injectés aux niveaux des parois de la cavité pour une solution binaire caractérisée par  $Le = 203, \psi = 0.203, A = 10, Pr = 30$ .

- Cas du chauffage par le bas  $Ra=10$  : (a)  $a=0.001$ , (b)  $a= 0.04$ , (c)  $a=0.17$  et (d)  $a=1.4$ .
- Cas du chauffage par le haut  $Ra=-10$ : (e)  $a=0.05$ , (f)  $a= 0.2$ , (g)  $a= 0.5$  et (h)  $a= 1.4$ .

## Références

- [1] R.S. Schechter, I. Prigogine, and J.R. Hamm, Thermal diffusion and convective stability. *Physics of Fluids* 15 (1972) 379-386.
- [2] J.K. Platten, and G.Chavepeyer, Oscillatory motion in Benard cell due to the Soret effect. *Fluid Mechanics* 60 (1973) 14.
- [3] R. Bennacer, A. Mahidjiba, P. Vasseur, H. Beji, and R. Duval, The Soret effect on convection in a horizontal porous domain under cross temperature and concentration gradients. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* 13 (2003) 199-215.
- [4] A. Bahloul, P. Vasseur, and L. Robillard, Convection of a binary fluid saturating a shallow porous cavity subjected to cross heat fluxes. *Journal of Fluid Mechanics* 574 (2007) 317-342.
- [5] L. Kalla, M. Mamou, P. Vasseur, and L. Robillard, Multiple steady states for natural, convection in a shallow porous cavity subject to uniform heat fluxes. *International Communications in Heat and Mass Transfer* 26 (1999) 761-770.
- [6] A. Mansour, A. Amahmid, and M. Hasnaoul, Soret effect on thermosolutal convection developed in a horizontal shallow porous layer salted from below and subject to cross fluxes of heat. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 29 (2008) 306-314.
- [7] V.M. Shevtsova, D.E. Melnikov, and J.C. Legros, Onset of convection in Soret-driven instability. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys* 73 (2006) 047302.
- [8] K. Clusius, and G. Dickel, New Process for Separation of Gas Mixtures and Isotopes. *Naturwissenschaften* 26 (1938) 33.
- [9] M. Lorenz, Emery, A.H., The packed thermal diffusion column., 1959, pp. 16-23.
- [10] J.K. Platten, M.M. Bou-Ali, and J.F. Dutrieux, Enhanced molecular separation in inclined thermogravitational columns. *Journal of Physical Chemistry B* 107 (2003) 11763-11767.
- [11] M.C. Charrier-Mojtabi, B. Elhajjar, and A. Mojtabi, Analytical and numerical stability analysis of Soret-driven convection in a horizontal porous layer. *Physics of Fluids* 19 (2007).
- [12] B. Elhajjar, M.C. Charrier-Mojtabi, and A. Mojtabi, Separation of a binary fluid mixture in a porous horizontal cavity. *Physical Review E* 77 (2008) 6.