

Etude analytique et numérique de la diffusion thermo-gravitationnelle en cavité poreuse horizontale saturée par un fluide binaire

A. KHOUZAM^{a,b}, L. YACINE^{a,c}, A. MOJTABI^{a,c},
M.C. CHARRIER-MOJTABI^d

- a. Université de Toulouse ; INPT, UPS; IMFT , 2, Allée du Professeur Allée Camille Soula, 31400 Toulouse, France, akhouzam@imft.fr
b. ENSAM, 2 boulevard du Ronceray BP 93525, 49035 Angers, ali.khouzam@ensam.eu
c. CNRS; IMFT; F-31400 Toulouse, France, mojtabi@imft.fr
d. Laboratoire PHASE, EA 3028, UFR PCA, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062, Toulouse cedex, France, marie-catherine.mojtabi@univ-tlse3.fr

Résumé:

Lorsqu'un fluide binaire ou multi-constituant, initialement homogène, est soumis à un gradient thermique, un gradient de fraction massique apparaît au sein du mélange. Ce phénomène est connu sous le nom de thermodiffusion ou effet Soret. Ce phénomène peut conduire à une séparation des espèces plus importante qu'en thermodiffusion. Dans ce travail nous nous intéressons à l'étude de la diffusion thermogravitationnelle, en présence d'effet Soret, dans le cas d'une cavité poreuse horizontale saturée par un fluide binaire et soumise à un flux de chaleur uniforme sur la paroi inférieure et à une température constante et uniforme sur la paroi supérieure. On présente une étude analytique faite dans l'hypothèse d'un écoulement de type parallèle pour des cellules de grand rapport d'aspect. On s'intéresse en particulier à la séparation des espèces et à l'optimum de séparation entre les deux parois verticales de la cellule en fonction du nombre de Rayleigh. Les résultats analytiques obtenus sont en bon accord avec ceux obtenus par simulations numériques directes 2D et 3D pour des cellules de rapport d'aspect $A_x=10$ et $A_y=2$ et 3.

Abstract:

Thermodiffusion or Soret effect is a phenomenon which occurs when a thermal gradient is applied to a homogeneous multicomponent mixture. A mass transfer is induced inside the mixture and a concentration gradient appears. The interaction between the convection and thermodiffusion is called thermogravitational diffusion. In this paper a numerical and analytical study of Soret driven convection in a binary mixture, saturating a porous parallelepipedic cell is presented. The horizontal lower wall is submitted to a uniform heat flux while the upper wall is maintained at constant temperature. An analytical solution based on parallel flow approximation is developed and the optimal species separation is determined as function of the Rayleigh number. These analytical results are corroborated by direct 2D and 3D numerical simulations.

Mots clefs : Convection , Thermodiffusion, Thermogravitation, Effet Soret, Milieux Poreux, mélange binaire, séparation des espèces.

Convection, Thermodiffusion, thermogravitation , Soret effect, Porous media, binary mixture, species separation

1-Introduction

La thermo-diffusion est un phénomène de transport massique ayant fait l'objet de nombreux travaux, ce processus est aussi appelé effet Soret ou Ludwig-Soret [1]. Cet effet décrit la séparation relative des composants d'un mélange de fluide multi-constituants lorsqu'il est soumis à un gradient thermique. En effet, lorsqu'un fluide multiconstituants, initialement homogène, est soumis à un gradient de température, on observe une migration relative des constituants du mélanges. Cette migration s'effectue vers les parois chaude ou froide, et ce dépendant des espèces et des conditions thermodynamiques. La naissance de la convection en présence d'effet Soret conduit à un autre phénomène, appelé diffusion thermo-gravitationnelle, il en résulte une séparation des espèces du mélange beaucoup plus importante qu'en thermo-diffusion pure. La diffusion thermo-gravitationnelle a été utilisée pour la première fois par Clusius et Dickel [2] pour la séparation d'isotopes en mélanges gazeux dans une colonne verticale. Depuis lors, la plupart des travaux relatifs à la séparation des espèces par diffusion thermo-gravitationnelle ont été restreints à la configuration de type colonne verticale (TGC).

Plus récemment, Charrier-Mojtabi et al.[3], El Hajjar et al. [4-6] ont mené des études sur la séparation thermo-gravitationnelle en cavité horizontale. Ils ont montré qu'il était possible de réaliser la séparation des espèces dans cette configuration lorsque le facteur de séparation est négatif ($Ra < 0$) ou supérieur à une valeur positive conduisant à la naissance d'un écoulement monocellulaire. Ils ont montré que le nombre de Rayleigh conduisant à la séparation optimale dans une cellule horizontale était supérieur à celui obtenu dans une cellule verticale, ce qui permet d'effectuer la séparation dans une cellule de plus grande épaisseur. Khouzam et al. [7] ont étudié la séparation des espèces en cavité horizontale chauffée par le bas en présence de convection mixte. Ils ont montré, qu'en disposant de deux paramètres de contrôle indépendants (le nombre de Rayleigh et le nombre de Péclet), la quantité des espèces séparées peut être notablement augmentée dans cette configuration.

Dans ce travail, nous considérons une cavité horizontale parallélépipédique de longueur L' selon l'axe horizontal x , de profondeur l' selon y et de hauteur H' selon z . La paroi horizontale inférieure de la cavité est soumise à une densité de flux constante et uniforme et la paroi supérieure est maintenue à une température constante. Les parois verticales sont parfaitement isolées. L'ensemble des parois délimitant la cavité sont supposées imperméables. Le milieu poreux saturé par une solution binaire est supposé homogène et isotrope Les équations de Darcy-Boussinesq sont utilisées pour la formulation mathématique du problème. Le but de cette étude est de caractériser les champs de vitesse, de température, de concentration ainsi que le gradient horizontal de la fraction massique. On détermine également la valeur optimale du nombre de Rayleigh conduisant au maximum de séparation des espèces du mélange binaire. Les résultats obtenus sont ensuite comparés avec ceux obtenus par simulations numériques directes 2D et 3D effectuées en utilisant un code aux éléments finis (Comsol Multiphysics).

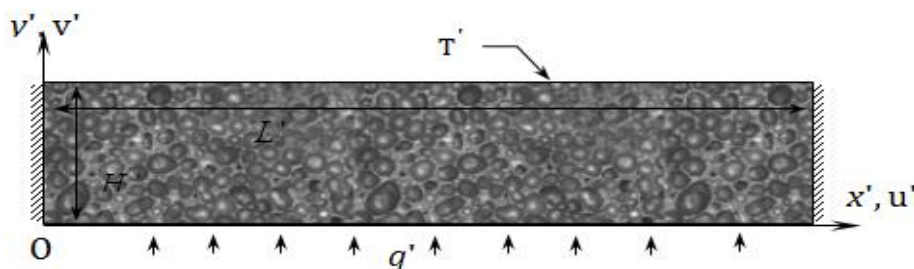


Figure 1. Configuration géométrique.

2-Formulation mathématique

Pour un milieu poreux, l'écoulement laminaire est régi par la loi de Darcy, de telle sorte que l'on puisse négliger l'effet des forces d'inertie. Nous considérons également que l'écoulement satisfait à l'approximation de Boussinesq. On suppose que la masse volumique ρ varie linéairement avec la température et la concentration, ce qui se traduit par :

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

Où : $\beta_T = -\frac{1}{\rho_0}(\frac{\partial \rho}{\partial T})_C$, $\beta_C = -\frac{1}{\rho_0}(\frac{\partial \rho}{\partial C})_T$ 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, (ρ_0, T_0, C_0 les valeurs de ces grandeurs à l'état de référence). Les équations de conservation de ce problème s'écrivent sous la forme adimensionnelle suivante :

$$\nabla^2 \varphi = -Ra \left[\frac{\partial T}{\partial x} - \psi \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T = \nabla^2 T \quad (3)$$

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla C = \frac{1}{Le} (\nabla^2 C + \nabla^2 T) \quad (4)$$

Dans ce système φ désigne la fonction de courant, Ra le nombre de Rayleigh thermique, Le , le nombre de Lewis, ψ , le facteur de séparation et ε la porosité normalisée.

3-Conditions aux limites adimensionnelles

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

$$\left\{ \begin{array}{l} x = 0, A: \quad \varphi = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} = 0; \quad \forall z \in [0, 1] \\ z = 0: \quad \varphi = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{\partial C}{\partial z} = -1; \quad T = 1 \quad \forall x \in [0, A] \\ z = 1: \quad \varphi = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{\partial C}{\partial z} = -1, \quad T = 0; \quad \forall x \in [0, A] \end{array} \right. \quad (5)$$

où $A = L/H'$ est le rapport d'aspect de la cellule en 2D.

Les variables du problème sont rendues adimensionnelles par les grandeurs de références suivantes: H pour les longueurs, $a\mu/K$ pour la pression, a^*/H' pour la vitesse, $\sigma H'^2/a^*$ pour le temps. Le rapport de la capacité calorifique volumique effective du milieu poreux saturé par le mélange binaire à la capacité calorifique volumique de fluide est noté : $\varepsilon = \frac{(\rho c)^*}{(\rho c)_f} \varepsilon'$ où $(\rho c)^*$ et $(\rho c)_f$ désignent respectivement la capacité calorifique volumique effective du milieu poreux saturé et la capacité calorifique volumique de fluide. ε' est la porosité du milieu poreux, a^* est la diffusivité thermique effective du milieu poreux: $a^* = \lambda^*/(\rho c)_f$. Les expressions adimensionnelles de la température et de la fraction massique sont données par :

$$T = \frac{T' - T_0}{\Delta T'}, \quad c = \frac{C' - C_0}{\Delta C'} \quad \text{avec} \quad \Delta T' = q'H'/\lambda^*, \quad \Delta C' = \Delta T' C_0 (1 - C_0) (D_T/D).$$

4-Résolution analytique

Les équations du problème peuvent être simplifiées en utilisant l'hypothèse de l'écoulement de type parallèle (Bejan & Tien [9]). En fait, dans le cas d'une cavité de grand rapport d'aspect ($A \gg 1$), l'écoulement peut-être considéré comme parallèle dans la région centrale de la cavité. La fonction de courant ne dépend donc plus que de la coordonnée z selon l'axe vertical de la cavité. Les profils de température et de concentration sont donnés par la somme d'un terme définissant une variation longitudinale linéaire et d'un autre terme donnant la distribution transversale :

$$\varphi(x, z) = \varphi(z), \quad T(x, z) = C_T x + f(z), \quad C(x, z) = C_S(x) + g(z) \quad (6)$$

où C_T et C_S sont des constantes qui représentent respectivement les gradients de température et de fraction massique selon la direction horizontale Ox .

En substituant les équations (6) dans les équations (2-4), nous obtenons le système d'équations différentielles ordinaires suivant (7) :

$$\begin{cases} \frac{d^2 \varphi}{dz^2} + Ra[C_T - \psi C_S] = 0 \\ C_T \frac{d\varphi}{dz} - \frac{d^2 f(z)}{dz^2} = 0 \\ C_T \frac{d\varphi}{dz} - \frac{1}{Le} \left(\frac{d^2 g(z)}{dz^2} + \frac{d^2 f(z)}{dz^2} \right) = 0 \end{cases} \quad (7)$$

Les conditions aux limites au niveau des parois verticales ne sont pas prises en compte. Aussi la structure de l'écoulement au voisinage de ces dernières n'est pas étudiée. D'autres conditions aux limites sont nécessaires pour résoudre le système d'équations (7). On utilise pour ceci le fait que le débit volumique à travers toute section droite verticale est nul et que l'intégrale de la fraction massique dans tout le volume de la cavité est nulle, soit :

$$\int_0^1 u \, dz = 0 \quad \forall x \in [0, A], \quad \int_0^1 \int_0^A C \, dz dx = 0 \quad (8)$$

Cette dernière condition est également introduite au niveau du programme éléments finis pour toutes les simulations numériques directes effectuées.

4.1 Détermination analytique des champs de vitesse, de température et de fraction massique dans le cas $A \gg 1$.

Les profils de vitesse, de température et de fraction massique sont obtenus en intégrant le système d'équations (7) et en appliquant les conditions aux limites (5), et les 2 conditions supplémentaires (8):

$$\begin{cases} \varphi = \Psi_0(z - z^2) \\ T = 1 - z \\ C = C_S x + \Psi_0 C_S Le \left(\frac{1}{2} z^2 - \frac{1}{3} z^3 - \frac{1}{12} \right) - z + \frac{1 - C_S A}{2} \\ \Psi_0 = \mp \frac{1}{2} \frac{\sqrt{10 Ra \psi Le - 120}}{Le} \end{cases} \quad (9)$$

4.2 -Détermination du gradient de fraction massique C_S

Pour la détermination du gradient de fraction massique selon Ox, C_S , on utilise le fait qu'à l'état stationnaire le débit d'un des constituants à travers toute section verticale est nul soit :

$$\int_0^1 (Le v C - C_S + C_T) dz = 0.$$

En résolvant l'équation ainsi obtenue, l'expression de C_S en fonction des nombres adimensionnels du problème est la suivante :

$$C_S = \frac{\sqrt{10Ra\psi Le - 120}}{LeRa\psi} \quad (10)$$

4 –Simulations numériques directes 2D et 3D

Des simulations numériques instationnaires 2D et 3D, ont été effectuées en utilisant le code aux éléments finis COMSOL Multiphysics afin de corroborer les résultats analytiques obtenus et d'analyser l'influence de la prise en compte de la troisième dimension sur l'écoulement étudié.

La cavité étant parallélépipédique, nous avons utilisé un maillage quadrangle. La résolution spatiale utilisée en 2D est de 150 x 30 pour $A = 10$. Pour les simulations numériques 3D, nous avons utilisé un maillage hybride comprenant 6555 éléments tétraèdres et 1644 éléments triangles. Afin de calculer la séparation des espèces ($C_S = m A$), la courbe donnant la fraction massique $C = f(x)$ est tracée pour des valeurs fixées de z et de y ($z = 0.5, y = 1$) et la pente, m , de cette courbe qui doit être parfaitement constante dans la partie centrale de la cellule, lorsque l'état stationnaire est atteint, est calculée et ensuite comparée à celle obtenue analytiquement. La séparation C_S est définie comme la différence des fractions massiques du constituant le plus lourd, entre les deux extrémités gauche et droite de la cellule.

5 -Résultats et discussion

L'évolution de la séparation en fonction du nombre de Rayleigh Ra pour $\psi = 0.1$ et pour deux valeurs du nombre de Lewis, $Le = 200, 50$ est présentée sur la figure 2. La solution obtenue analytiquement est représentée en trait continu. Les résultats de simulations numériques directes (représentés par des étoiles) sont en très bon accord avec les résultats analytiques. On peut relever que la séparation présente un maximum correspondant au couplage optimal entre la thermo-diffusion et la convection et ce pour de faibles valeurs du nombre de Rayleigh.

En effet, la séparation augmente en augmentant le nombre de Rayleigh jusqu'à une valeur maximale $C_{Smax} = \frac{\sqrt{120}}{24} \approx 0.456$, obtenue pour une valeur optimale du nombre de Rayleigh : $Ra_{opt} = \frac{24}{\psi Le}$. La séparation diminue ensuite quand on augmente la valeur de Ra à partir de Ra_{opt} .

Ceci s'explique par le fait que, lorsque le nombre de Rayleigh est trop faible (i.e. la vitesse du rouleau convectif est faible), ou lorsque le nombre de Rayleigh est trop élevée forte, le temps de diffusion thermique n'est alors plus en bonne adéquation avec le temps convectif.

On peut également noter que si le nombre de Rayleigh est inférieur à une valeur critique, $Ra_c = \frac{12}{\psi Le}$, caractérisant le déclenchement de la convection, la séparation est obtenue uniquement par diffusion

pure entre les deux plaques horizontales de la cellule. La séparation maximale pour $Le = 50$ est obtenue pour une valeur optimale de nombre de Rayleigh $Ra_{opt} = 4.8$, valeur quatre fois plus grande que celle correspondant à la séparation maximale pour $Le = 200$.

La figure 3 montre l'évolution du nombre de Rayleigh critique (associé à la perte de la stabilité de la solution d'équilibre) et du nombre de Rayleigh optimal en fonction du facteur de séparation pour $Le = 100$. La ligne continue représente le Rayleigh critique Ra_{cr} de la transition conduction-convection. La ligne en traits discontinus représente le Rayleigh optimal, Ra_{opt} , pour lequel la séparation maximale est obtenue. La zone hachurée de la figure 3 représente les régions où la séparation n'est pas réalisable.

Sur les figures 4 (a), (b), (c) et (d), on présente les iso-fractions massiques pour différentes valeurs de $Ra = 2, 5$ et 10 et pour $Le = 200$, $\psi = 0.1$ et $A = 10$. Les valeurs de la fraction massique du constituant le plus lourd en différents endroits de la cavité sont représentées par les couleurs. On observe que la déformation des iso-fractions massiques augmente avec Ra , cette distorsion est due à l'augmentation de la vitesse convective quand Ra augmente.

Sur la figure 5, on présente les résultats obtenus à partir de simulations numériques directes 3D. Le gradient de fraction massique selon x, m , est tracé en fonction de Ra , pour $A_z = 1$, $A_x = 10$ et $A_y = 2$. On relève une différence de l'ordre de 12% entre les résultats analytiques obtenus dans le cadre de l'hypothèse d'écoulement parallèle et ceux obtenus en 3D en raison de la prise en compte de la troisième dimension.

6-Conclusion

Dans le présent travail on a présenté une étude de la séparation des espèces d'un fluide binaire saturant un milieu poreux, en cavité parallélépipédique horizontale chauffée par le bas. La séparation a été déterminée analytiquement et numériquement. L'influence du nombre de Rayleigh thermique sur la séparation des espèces a été analysée, pour des valeurs données du nombre de Lewis et du facteur de séparation, ψ du mélange. La séparation optimale est obtenue pour une valeur optimale de nombre de Rayleigh qui a été déterminée. Des simulations numériques directes 2D et 3D ont été effectuées et les résultats obtenus ont été comparés aux résultats analytiques. Un bon accord entre ces deux approches a été trouvé. Le but des simulations numériques 3D était entre autre, de montrer l'influence de la prise en compte de la troisième dimension (A_y) sur la séparation des espèces.

Références:

- [1] C. Ludwig, Diffusion zwischen ungleich erwärmten Orten gleich zusammengesetzter, (1856), pp. 539.
- [2] K. Clusius, G. Dickel, New Process for Separation of Gas Mixtures and Isotopes, Naturwissenschaften, 26 (1938) 33.
- [3] M.C. Charrier-Mojtabi, B. Elhajjar, A. Mojtabi, Analytical and numerical stability analysis of Soret-driven convection in a horizontal porous layer, Physics of Fluids, 19 (2007).
- [4] B. Elhajjar, M.C. Charrier-Mojtabi, A. Mojtabi, Separation of a binary fluid mixture in a porous horizontal cavity, Physical Review E, 77 (2008) 6.
- [5] B. Elhajjar, A. Mojtabi, M.C. Charrier-Mojtabi, Influence of vertical vibrations on the separation of a binary mixture in a horizontal porous layer heated from below, International Journal of Heat and Mass Transfer, 52 (2009) 165-172.
- [6] B. Elhajjar, A. Mojtabi, P. Costeseque, M.C. Charrier-Mojtabi, Separation in an inclined porous thermogravitational cell, International Journal of Heat and Mass Transfer, 53 (2010) 4844-4851.
- [7] A. Khouzam, A. Mojtabi, M.-C. Charrier-Mojtabi, B. Ouattara, Species separation of a binary mixture in the presence of mixed convection, International Journal of Thermal Sciences, 73 (2013) 18-27.
- [8] A. Bejan, C.L. Tien, Natural-convection in a horizontal porous-medium subjected to an end-to-end temperature difference, Journal of Heat Transfer-Transactions of the Asme, 100 (1978) 191-198.

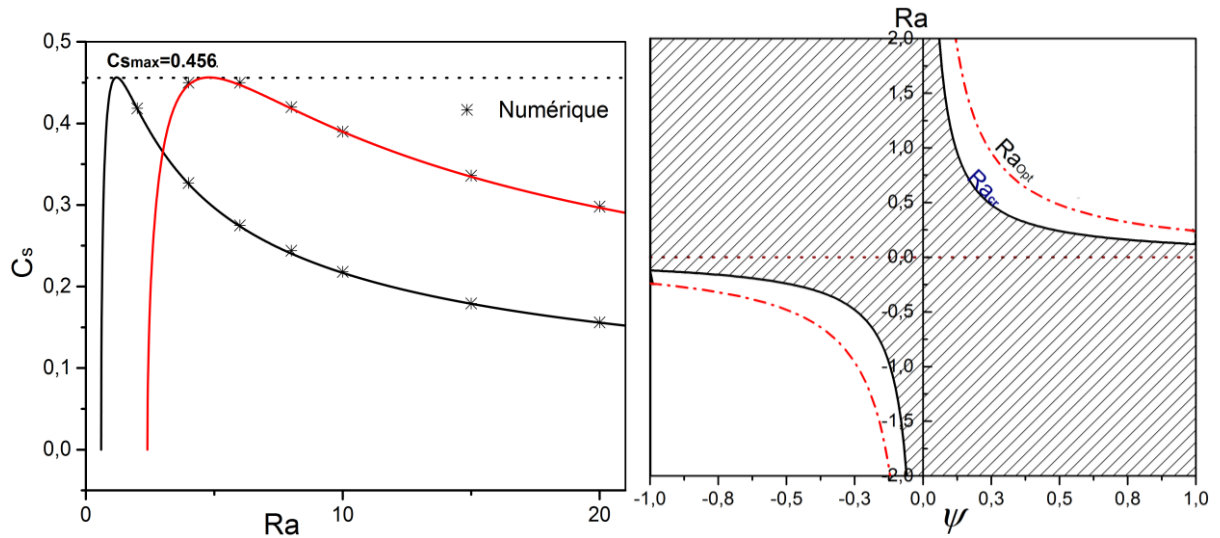


Figure 2 : $C_s=f(Ra)$, $Le = 200$, 50 et $\psi = 0.1$

Figure 3 : $Ra=f(\psi)$ pour l'écoulement monocellulaire et la séparation optimale ($Le = 100$)

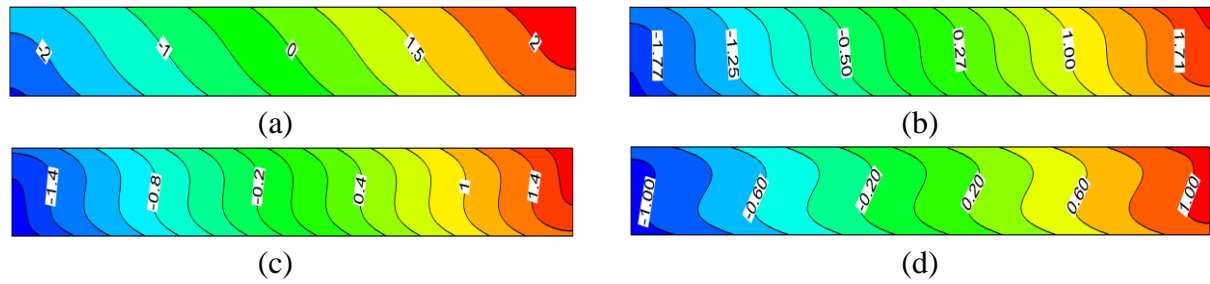


Figure 4 : Iso-fractions massiques pour : (a) $Ra = 4$, $Le = 50$; (b) $Ra = 10$, $Le = 50$; (c) $Ra = 4$, $Le = 200$; (d) $Ra = 10$, $Le = 200$ ($\epsilon = 0.2$, $A = 10$)

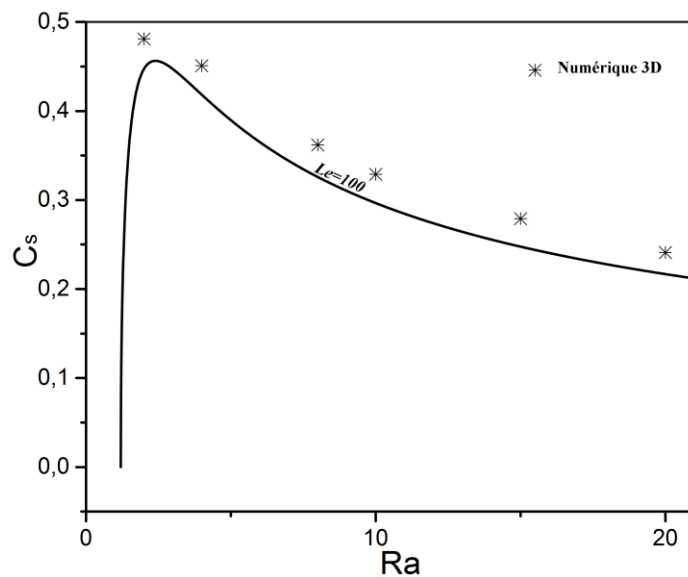


Figure 5 : $C_s= f(Ra)$; Comparaison résultats analytiques- résultats numériques 3D

$A_z = 1$, $A_x = 10$ et $A_y = 2$. ($\psi = 0.1$; $Le = 100$).