

UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA

Faculté des Sciences de l'Ingénieur

Département de chimie industrielle

MEMOIRE DE MAGISTER

En Chimie Industrielle

Spécialité : Génie Chimique

LA MODELISATION DES PHENOMENES DE
TRANSFERT DANS LES PROCEDES DE
DISTILLATION MEMBRANAIRE

Par

Salim CHELOUCHE

Devant le jury composé de :

A. AOUABED	Professeur, U.S.D.B, Blida	Président
H. LOUNICI	Professeur, E.N.P, Alger	Examineur
D.TOUIL	Professeur, U.S.D.B, Blida	Examineur
M. W. NACEUR	Professeur, U.S.D.B, Blida	Rapporteur
S. SOUKANE	Docteur, U.S.D.B, Blida	Rapporteur

Blida, Octobre 2014

DEDICACES

Je tiens à dédier ce modeste travail, aux êtres les plus chers au monde à mon cœur :

Pour toi chère mère, merci encore une fois pour tes sacrifices et toutes les peines que tu t'es données pour ma réussite,

À ma fiancée Hanane, merci pour ta constante disponibilité et ton soutien permanent,

À la mémoire de mon père,

À ma petite et grande famille,

*Pour tous mes amis de la promotion sortante 2014 :
Mohammed, Samir, Madjid, Tayeb, Farah et Assia*

REMERCIEMENTS

Je tiens à exprimer ma plus profonde gratitude et reconnaissance à mes promoteurs M.W. NACEUR et S. SOUKANE pour les aides précieuses, les conseils éclairés et constructifs et surtout pour les encouragements, qu'il s m'ont prodigués tout au long de ce travail.

Mes remerciements s'adressent également à tous le cadre professorale et administratif de l'institut de Chimie Industrielle de l'université de Saad DAHLAB de Blida pour avoir veillé sur la qualité de notre formation scientifique.

J'exprime également ma reconnaissance au Lt.Col Sofiane chef du département physico-chimique du centre de recherche et de développement de Blida pour m'avoir permis de continuer mes études.

J'espère que les membres de jury trouvent ici l'expression de mon haute considération pour avoir accepté de juger mon travail.

RÉSUMÉ

La production des eaux destinées à la consommation humaine à partir des eaux non conventionnelles connaît un essor considérable. L'osmose inverse s'est montrée comme un choix très attractif durant ces décennies, et a atteint sa maturité. En revanche, la distillation membranaire dans les applications du dessalement est au stade de la recherche, présente un intérêt incontestable, vu que les conditions opératoires sont moins exigeantes et beaucoup plus adaptés aux eaux à très fortes salinité.

La distillation membranaire sous vide VMD est l'une des configurations de la DM qui reçoit le plus d'attention pour sa grande capacité de produire de l'eau potable à faible coût. En se basant sur l'analyse du transfert de masse à travers les membranes poreuses, un modèle d'écoulement balistique est développé dont l'objectif principal est la prédiction des flux de perméation à travers la membrane. Le modèle est basé sur l'estimation de la probabilité de transmission directe et indirecte par l'intégration directe du flux des molécules d'eau. Une loi de puissance dépendant du ratio d'aspect des pores est développée pour permettre une estimation rapide de la fraction du flux quittant le pore. Le flux entrant dans le pore est calculé en utilisant l'équation d'Hertz-Knudsen-Schrage et dépend des valeurs des coefficients de condensation et d'évaporation des espèces transférées. Les résultats de simulation sont confrontés aux prédictions de la diffusion classique de Knudsen et aux données expérimentales de différents travaux dans la littérature.

Par ailleurs, Les flux calculés par le modèle établi sont très sensibles aux changements du coefficient d'évaporation qui est étroitement dépendant du taux de contamination de la surface siège de la réaction d'évaporation. A cet effet, des simulations de mécanique des fluides numériques CFD à l'échelle micro du système ont été réalisées et une attention particulière est accordée au calcul des vitesses d'entrée de l'écoulement et la représentation de la réaction d'évaporation. Le taux de recouvrement en particules de sels de la surface du ménisque créé à l'entrée du pore est déterminé selon des conditions opératoires expérimentales de la littérature.

Les résultats révèlent que l'augmentation de la concentration du soluté dans la solution d'alimentation conduit à une réduction du flux de perméation suite à une hausse du taux de recouvrement du ménisque, révélant ainsi, une diminution du coefficient d'évaporation.

ABSTRACT

Production of water intended for human consumption from non-conventional waters knows a considerable growth. Reverse Osmosis has proven to be a very attractive choice during these decades and has reached maturity. However, membrane distillation in desalination applications is at research stage, presents an incontestable interest, since the operating conditions are less demanding and more adapted to the very high salinity water.

Vacuum Membrane Distillation (VMD) is one of membrane distillation configurations who receive more attention for its great ability to produce drinking water at low cost. Aiming to analyze the VMD process and particularly mass transfer through porous membranes, a ballistic flow model is developed to predict fluxes out from high aspect ratio cylindrical pores. The model is based on the estimation of direct and indirect transmission probabilities by direct integration of water species flux. A power law that uses the pore aspect ratio is developed to enable a quick estimation of the flux fraction exiting the pore. The flux entering the pore is calculated using Hertz–Knudsen–Schrage equation and depends on the values of the condensation and evaporation coefficients of the transferred species. Simulation results are compared to classical Knudsen diffusion predictions as well as to experimental data.

Otherwise, Model fluxes calculated are very sensitive to evaporation coefficient changes, which are closely related to the surface contamination level which is the location of the evaporation reaction. For this purpose, Computational Fluid Dynamics simulations at micro-scale system were performed and special attention is given to flow velocity inlet calculation and evaporation reaction representation. The salt particles recovery rate of the meniscus surface created at the entrance of the pore is determined according to experimental operating conditions from the literature.

The results reveal that increasing solute concentration in the feed solution results in a reduction of flux permeability owing to an increase in the meniscus rate recovery revealing a decrease in the coefficient of evaporation.

ملخص

إنتاج المياه المخصصة للاستهلاك البشري من المياه غير الطبيعية تشهد نموا كبيرا. أثبت النفاذ العكسي قدرته ليكون خيارا جذابا للغاية على مدى عقود من الزمن حيث تمكن من الوصول إلى درجة النضج، من ناحية أخرى لا تزال تطبيقات التقطير الغشائي في مجال تحلية المياه في مرحلة البحث و التطوير كما أنها أظهرت عدة جوانب إيجابية حيث أن شروط التشغيل هي أقل تطلبا وأكثر ملاءمة للمياه ذات الملوحة العالية جدا.

التقطير الغشائي الفراغي هو واحد من تشكيلات التقطير الغشائي التي تلقي المزيد من الاهتمام لقدرتها على إنتاج مياه الشرب بتكلفة منخفضة. بغرض تحليل إنتقال الكتلة عبر أغشية مسامية، تم إنجاز نموذج للتدفق الباليستي بهدف التنبؤ بمقدار النفاذية. ويستند هذا النموذج على تقدير احتمال الإنتقال المباشر وغير المباشر عن طريق الحساب التكاملي المباشر لتدفق الجزيئات. تم تحديد علاقة قوة مرتبطة بنسبة العرض إلى ارتفاع المسامات تسمح بتقدير سريع للجزء من التدفق الخارج من المسام. يتم حساب تيار دخول المسام باستخدام معادلة هرتز-كنودسن- شراج التي تعتمد على قيم معاملات التبخر والتكثيف للجزيئات المنقولة. وتتم مقارنة نتائج المحاكاة مع تنبؤات كنودسن للإنتشار التقليدي فضلا عن معطيات تجريبية لأعمال سابقة.

مقادير النفاذية المحسوبة بواسطة النموذج المنشأ سابقا حساسة جدا للتغيرات في معامل التبخر، هذا الأخير مرتبط أساسا بمقدار تعبئة السطح الهلالي مقرّ تفاعل التبخر بالجزيئات. أنجزت عمليات محاكاة باستعمال ميكانيكا السوائل الحاسوبية على مستوى ميكروجزيئي للمنظومة حيث تم إعطاء إهتمام خاص لحساب سرعات دخول التيار و كيفية تمثيل عملية تفاعل التبخر. تم حساب معدل تغطية السطح الهلالي المتشكل عند مدخل المسام بجزيئات الملح بالإستناد إلى ظروف تشغيل تجريبية. النتائج تبين أن الزيادة في تركيز المذاب في سائل الدخول يؤدي إلى انخفاض في مقدار النفاذية في أعقاب زيادة معدل تعبئة السطح الهلالي المرادف لانخفاض في معامل التبخر.

TABLE DES MATIERES

DEDICACES & REMERCIEMENTS	1
RESUME	3
TABLE DES MATIERES	4
LISTE DES FIGURES, TABLEAUX, ABREVIATIONS & SYMBOLES	7
INTRODUCTION	14
CHAPITRE I : LA DISTILLATION MEMBRANAIRE	
I.1. Introduction	17
I.2. Historique	18
I.3. Les différentes configurations de DM	19
I.4. Comparaison entre les différentes configurations	21
I.5. Les caractéristiques des membranes utilisées en DM	22
I.6. Les modules membranaires en DM	24
I.7. Les mécanismes de transfert massique à travers la membrane en DM	25
I.8. Les paramètres de fonctionnement en DM	28
CHAPITRE 2 : LA DISTILLATION MEMBRANAIRE SOUS VIDE	
II.1. Introduction	30
II.2. La modélisation théorique dans la distillation membranaire sous vide	32
II.3. Effets des conditions opératoires sur le flux de perméation en VMD	33
II.4. Les applications de la VMD	35
II.5. La technologie VMD dans le dessalement	35
CHAPITRE III : NOTIONS D'ANALYSE NUMERIQUE ET D'OPTIMISATION	
III.1. L'intégration numérique	36
III.2. L'optimisation des procédés	38
CHAPITRE IV : MECANIQUE DES FLUIDES NUMERIQUES (CFD)	
IV.1. Introduction	42

IV.2. Méthodologie d'une simulation par CFD	42
IV.3. Générateur de maillage GAMBIT	44
IV.4. FLUENT (Processing et Post-processing)	49
CHAPITRE V : MODELISATION DES PHENOMENES DE TRANSFERT DE MASSE EN VMD	
V.1. Introduction	52
V.2. Etat de l'art de la modélisation en VMD	52
V.3. La diffusion Knudsen en VMD	53
V.4. Le développement du modèle balistique	55
V.5. Implémentation numérique	67
V.6. Résultats des simulations de l'écoulement sans collisions	69
V.7. Application du modèle à la Distillation Membranaire sous Vide	72
V.8. Conclusions et perspectives	78
CHAPITRE VI : SIMULATION PAR CFD DE L'EFFET DE LA CONCENTRATION EN SEL SUR LE TAUX DE RECOUVREMENT DU MENISQUE	
VI.1. Problématique	80
VI.2. Revue bibliographique	81
VI.3. Fondements expérimentaux	82
VI.4. Préparation de la géométrie par GAMBIT	84
VI.5. Calcul des solutions par FLUENT (Processing)	92
VI.6. Traitement de la solution (Post-processing)	105
VI.7. Résultats et discussions	106
VI.8. Conclusions et perspectives	111
CONCLUSION GENERALE	112
ANNEXE 1 : Caractéristiques des membranes commerciales utilisées en DM	113
ANNEXE 2 : Flux de perméabilité en VMD	114
ANNEXE 3 : Méthode de Blasius.	116
Revue Bibliographiques	120

Liste des figures

Figure n°	Titre	Page
I.1	Principe de la Distillation Membranaire	17
I.2	Les principales configurations en MD	21
I.3	Les différents modules membranaires en DM	24
I.4	Résistances au transfert de matière en MD	25
II.1	Le transfert de masse et de chaleur en VMD	30
II.2	Schéma d'un système VMD expérimental typique à l'échelle laboratoire	31
III.1	Méthode des trapèzes	37
III.2	Méthode de Simpson	38
VI.1	Comparaison entre une expérience réelle et une simulation CFD	42
VI.2	La méthodologie d'une simulation CFD	43
VI.3	Les différents types de fonctions de dimensionnement en GAMBIT	49
V.1	Principe de transport balistique dans le pore en VMD	57
V.2	Probabilité de transmission et angles de vue	59
V.3	Probabilité de transmission directe et indirecte	60
V.4	Schéma de discrétisation du pore	62
V.5	Variation de la Fraction du flux frappant les parois internes du pore en fonction de la position en profondeur pour différents ratios d'aspect	62
V.6	Variation de la Fraction du flux sortant du pore en fonction de la position radiale pour différents ratios d'aspect	63
V.7	Schéma du modèle de réémission	65
V.8	Variation de la mémoire allouée en fonction du ratio d'aspect	69
V.9	Contribution directe, indirecte et le flux total obtenu en fonction de ratio d'aspect (0 à 10)	70

V.10	Contribution directe, indirecte et le flux total obtenu en fonction de ratio d'aspect (0 à 200)	71
V.11	Variation du flux sortant en fonction du ratio d'aspect pour le modèle établi et les travaux de Shi et Knudsen	72
VI.1	Schéma des deux configurations principales à préparer par GAMBIT	84
VI.2	Détermination du rayon de la sphère d'entrée	84
VI.3	Détermination de la distance inter-pores	85
VI.4	Dimensions de la surface membranaire	86
VI.5	Etapas de création de la géométrie en un seul ménisque par GAMBIT	86
VI.6	Etapas de création de la géométrie en neuf ménisques par GAMBIT	87
VI.7	Schéma des Géométries maillées	89
VI.8	Désignation des conditions aux limites/zones continues	91
VI.9	Choix du type des simulations	93
VI.10	Importation de la géométrie (fichier .msh)	93
VI.11	Vérification, lissage et mise à l'échelle du maillage importé	94
VI.12	Choix du solveur et ces paramètres	94
VI.13	Activation du modèle de transport des espèces et réactions chimiques	95
VI.14	Définition des propriétés des matériaux	96
VI.15	Création du mélange réactionnel	96
VI.16	Définition des paramètres du modèle de transport des espèces et réactions chimiques	98
VI.17	Définition des conditions opératoires	98
VI.18	Définition des paramètres de la condition au limite « velocity inlet ».	102
VI.19	Définition des paramètres de la condition au limite « Miniscus »	103
VI.20	Initialisation du calcul	103

VI.21	Choix des critères de convergence	104
VI.22	Définition des paramètres de contrôle de la solution	104
VI.23	Développement des résidus au cours d'une simulation	105
VI.24	Rapport d'intégrale surfacique moyen de la fraction massique en sel	106
VI.25	Contour de la fraction massique pour une configuration en un seul ménisque et une concentration d'entrée de 0,5 M	107
VI.26	Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 0,62 M (eau de mer)	109
VI.27	Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 1,5 M	109
VI.28	Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 3 M	110
VI.29	Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 4 M	110

Liste des tableaux

Tableau n°	Titre	Page
I.1	Avantages, Inconvénients et domaines d'application des configurations de DM	22
IV.1	Les options des éléments de maillage dans GAMBIT	45
IV.2	Les options des types de maillage dans GAMBIT	46
IV.3	Les combinaisons permises des éléments pour chaque type de maillage	46
IV.4	Les différents coefficients de qualité existant en GAMBIT	47
IV.5	Les différents types de zones existant dans GAMBIT	48
V.1	Caractéristiques des membranes et les flux VMD relevés de Khayet et al	73
V.2	Nombre de Knudsen pour toutes les membranes aux conditions d'expérimentation	74

V.3	Coefficients de condensation et d'évaporation et les résidus de minimisation relatifs à chaque membrane	76
V.4	Valeurs du flux VMD sortant : expérimental, par le biais du modèle développé et par le modèle de Knudsen et les erreurs relatives correspondant	77
VI.1	Caractéristiques du module membranaire expérimental	83
VI.2	Caractéristiques de la membrane dans l'étude expérimentale	83
VI.3	Conditions opératoires de l'expérimentation	83
VI.4	Flux de perméation expérimentaux	83
VI.5	Paramètres des fonctions de dimensionnement employés	88
VI.6	Nombre de mailles et de nœuds des géométries créés	89
VI.7	Qualité de maillage en fonction de Q_{EAS}	90
VI.8	Coefficient de qualité de maillage des géométries créés	91
VI.9	Désignation des conditions aux limites/zones continues	92
VI.10	Valeurs de la viscosité cinématique pour chaque concentration d'entrée	100
VI.11	Nombre de Reynolds en fonction de la molarité d'entrée	100
VI.12	Vitesses d'entrée du liquide et fractions massiques en sel	101
VI.13	Fractions massiques du sel au niveau du ménisque pour toutes les concentrations d'entrée et les différentes densités de maillage	107
VI.14	Taux de recouvrement du ménisque en fonction de la concentration en sel de la solution d'entrée	108

Liste des abréviations et des symboles

A	-	Matrice de probabilité de transmission
A_R	-	Ratio d'aspect du pore
B	$\text{s.mol}^{1/2}.\text{m}^{-1}.\text{kg}^{-1/2}$	Perméabilité de la membrane
CFD	-	Mécanique des fluides numériques (computationnels)
DM	-	Distillation Membranaire
I	-	Intégrale
\mathfrak{J}	Mol/s.m^2	Flux molaire
J	kg/s.m^2	Flux massique
J^{top}	kg/s.m^2	Flux massique net en évaporation/condensation
J^{out}	kg/s.m^2	Flux massique sortant du pore
J_i^n	kg/s.m^2	Flux massique au segment i après n rebonds
J^A	kg/s.m^2	Flux massique absorbé par la base du pore
J^R	kg/s.m^2	Flux massique réfléchi par la base du pore
K_c	-	Coefficient de condensation
K_e	-	Coefficient d'évaporation
K_n	-	Nombre de Knudsen
LEP	-	Pression d'Entrée du Liquide
L	m	Longueur du pore
M	Kg/mol	Masse molaire
N_{mbr}	-	Nombre de valeurs expérimentales
OI	-	Osmose Inverse
P	Pa	Pression
P_a	Pa	Pression partielle de l'air
P_{avg}	Pa	Pression moyenne dans les pores

P_f	Pa	Pression coté alimentation de la membrane
P_p	Pa	Pression coté perméat de la membrane
P_{mf}^*	Pa	Pression partielle de la vapeur d'eau pure côté alimentation (feed)
P_{mf}	Pa	Pression partielle de la vapeur d'eau côté alimentation
P_{mp}	Pa	Pression partielle de la vapeur d'eau côté perméat
Q_{EAS}	-	Coefficient de qualité de maillage (EquiAngleSize)
R	m	Rayon des pores
R_{avg}	m	Rayon moyen des pores
R_{max}	m	Rayon maximal des pores
Re	-	Nombre de Reynolds
R_g	J/mol.K	Constante des gaz parfaits
T	K	Température
T_{avg}	K	Température moyenne
T_m	K	Température de la membrane
U	m/s	Vitesse bulk de l'écoulement
VMD	-	Distillation Membranaire sous Vide
X_{H_2O}	-	Fraction molaire d'eau dans le fluide d'alimentation
a, b, c	-	Coefficients de l'équation d'Antoine
a_{ij}	-	Coefficient de la matrice des probabilités de transmission
d_p	m	Diamètre du pore
$\overline{d_p}$	m	Diamètre moyen du pore
f	-	Fonction de distribution de taille des pores
g	m/s ²	Pesanteur
k	s/m	Coefficient de transfert de matière dans la membrane
k_b	m ² .kg/s ² .k	Constante de Boltzmann

l_i	m	Longueur du segment i
n	-	Nombre total de segments
\vec{n}_A	-	Normal à la surface A
nb	-	Nombre de rebonds (collisions)
n_m	m^{-3}	Nombre de molécules par unité de volume
p_m	m	profondeur du ménisque
r	m	Position radiale à la base du pore
v	m/s	Vitesse linéaire (m/s)
v_r	$Mol/m^3.s$	Vitesse de réaction
y	m	Position en profondeur dans le pore
α_{ij}	-	Probabilité de transmission entre deux sites i et j
α_{H_2O}	-	Coefficient d'activité de l'eau
β	-	Pourcentage du flux de l'entrée quittant le pore par sa base
δ	m	Épaisseur de la membrane
ε	-	Porosité de la membrane
ε_s	-	Porosité surfacique de la membrane
λ	m	Parcours libre moyen
μ	$Kg/s.m^2$	Viscosité dynamique
ν	m^2/s	Viscosité cinématique
ζ	-	Précision
ρ_m	kg/m^3	Masse volumique de la membrane
ρ_{pol}	kg/m^3	Masse volumique du polymère de la matrice membranaire.
χ	-	Facteur de tortuosité de la membrane
ω	-	Fraction massique
$\Psi_{i,j}$	-	Facteur de visibilité entre deux sites i et j
Δ	-	Gradient (différentiel)

INTRODUCTION

La pénurie en eau semble devenir une perspective inquiétante pour l'humanité. Aujourd'hui les pays en situation de stress hydrique sont de plus en plus nombreux tandis que les besoins ne cessent de grandir. Face à ce constat, un certain nombre de solutions techniques a été apporté, notamment celles qui sont destinées au traitement des eaux non conventionnelles. Le dessalement de l'eau de mer et des eaux saumâtres constituent à l'heure actuelle une alternative de taille.

Cette activité est en pleine développement du fait d'une amélioration constante des techniques de dessalement et par conséquent, un coût du mètre cube produit nettement plus faible durant cette décennie, qui est due à la bonne maîtrise énergétique et la mise en œuvre des matériaux membranaires.

Les usines de dessalement actuellement en service font appel à deux grandes familles de procédés, les procédés thermiques et les procédés membranaires.

En général, le traitement membranaire est basé sur la filtration de l'eau salée par le biais d'un support appelé membrane, et utilise deux techniques d'entraînement qui sont ou bien un entraînement par pression qui englobe : l'Osmose Inverse (RO), la Nanofiltration (NF) et l'Ultrafiltration (UF) ou bien un entraînement électrique : l'Electrodialyse (ED) et l'Electrodialyse inversée (EDI).

Le traitement thermique est basé sur le cycle naturel d'évaporation et de condensation de l'eau, elle est la plus ancienne et comporte : la Distillation Solaire (DS), la Distillation Subite (Flash), la Distillation à Détentes Étagées, la Distillation Multi-Effet, la Distillation Thermo-Compression à Vapeur et la Distillation de Compression Mécanique à Vapeur.

Le procédé thermique de distillation à détentes étagées et le procédé de séparation par membranes d'osmose inverse sont les plus répandus dans le monde.

Ces différentes techniques de dessalement (distillation et OI) de l'eau de mer nécessitent des quantités d'énergie très élevées (chauffage ou compression de l'eau) par rapport aux volumes d'eau produits. L'inconvénient principal de ces systèmes est donc leur

coût, ce qui génère un problème de rentabilité. Le prix de l'eau sortie d'usine varie en fonction de la capacité de l'usine et du procédé. Ces dernières années, il était de **0,4 à 0,8 euro/m³** par osmose inverse, et de **0,6 à 1,8 euros/m³** par distillation thermique, ce qui reste deux à trois fois plus cher que la production à partir d'eau de surface [1].

Les techniques de dessalement encore en recherche et développement

Puisque le dessalement est une des avenues qui permet de remédier aux problèmes d'approvisionnement en eau douce et potable, des équipes de recherches s'affairent à trouver des procédés toujours plus efficaces. Certaines de ces recherches prometteuses pourraient remédier aux principaux problèmes rencontrés lorsqu'il est question de traitement de l'eau salée, le coût prohibitif et le rendement qui n'est pas toujours intéressant associés à la production de l'eau.

Parmi les technologies de dessalement qui présentent un potentiel important pour des applications industrielles futures, on rencontre l'électrodeionisation (combinaison entre l'électrodialyse et l'échange ionique), séparation par congélation (freeze separation), désionisation capacitive, l'évaporation de pulvérisation rapide, la congélation par hydrates et la distillation membranaire.

La distillation membranaire est une technologie émergente pour le dessalement. Elle diffère des autres technologies membranaires : la force agissante pour le dessalement est la différence de la pression de vapeur d'eau à travers la membrane, plutôt que la pression totale. Les membranes de MD sont hydrophobes, ce qui permet à la vapeur d'eau (mais pas à l'eau liquide) de passer. On s'attend à ce que le coût total de l'eau produite soit inférieur à **0,38 euro/m³**, et même **0,20 euro/m³**. Cette technique est encore à l'état expérimental et semi pilote [2].

C'est dans ce contexte que s'inscrit le présent travail qui s'étale sur deux parties. Le challenge à travers la première partie sera d'établir un modèle balistique au niveau du pore afin de déterminer le flux de perméation à travers une configuration de distillation membranaire sous vide, le paramétrage du modèle dépendra des coefficients de condensation et d'évaporation de l'eau au niveau de l'interface liquide/vapeur siège de la réaction d'évaporation. Le coefficient d'évaporation est très sensible aux impuretés (les particules de sel), ainsi la deuxième partie sera consacrée à la réalisation des simulations de mécanique des fluides numériques (CFD) à l'échelle microscopique du système (pore)

pour déterminer l'influence de la concentration initiale en soluté de la solution d'entrée sur le taux de recouvrement du ménisque formé à l'ouverture du pore autrement dit le coefficient d'évaporation et par conséquent le flux de perméabilité.

Concernant la rédaction du mémoire, il a été structuré sous forme de deux volets principaux :

- ✓ L'introduction générale dans laquelle est présentée la problématique de l'étude ;
- ✓ Le premier volet est composé de quatre (04) chapitres théoriques dont le premier est dédié à la description générale du procédé de distillation membranaire, les caractéristiques de l'une des configurations de la DM qui est la distillation membranaire sous vide sont explicitées dans un deuxième chapitre. Le troisième chapitre est consacré aux différents principes du calcul numériques et l'optimisation des procédés chimiques, alors que le quatrième chapitre est réservé à la mécanique des fluides numérique (CFD) où on présentera les différentes étapes à suivre pour une simulation réussie.
- ✓ Le deuxième volet est composé de deux (02) chapitres consacrés au travail expérimental. On présente dans le premier chapitre les différentes étapes suivies pour l'établissement de notre modèle balistique ainsi que les résultats obtenus à l'aide de ce modèle, une comparaison avec des résultats expérimentaux et les résultats d'un autre modèle théorique est faite dans le but de valider notre modèle.

Le deuxième chapitre traite de l'influence de la concentration d'entrée en soluté sur le taux de recouvrement de la surface du ménisque à l'entrée du pore et le flux de perméabilité par la suite. Des simulations CFD seront réalisées à l'échelle microscopique du système.

- ✓ La conclusion générale permet d'aboutir à une synthèse globale de l'étude et à exposer les perspectives recommandées.

CHAPITRE I : LA DISTILLATION MEMBRANAIRE

I.1. Introduction

La distillation membranaire est un procédé de séparation membranaire émergent, non-isotherme, connue depuis 1963 mais qui n'est pas encore développée à l'échelle industriel [3], elle pourra surmonter quelques limites des autres technologies membranaires en particulier celles des solutions à grandes concentrations, ainsi qu'une eau ultra-pure peut être produite à partir d'une eau à très forte salinité.

Il s'agit (DM) d'un procédé hybride à entrainement thermique combinant à la fois un système thermique et un système membranaire [4]. La membrane met en contact direct un liquide côté alimentation et une phase liquide, gazeuse ou un vide côté perméat. La force de transfert du procédé est la différence de pression partielle de la vapeur d'eau entre les deux côtés de la membrane.

Tout d'abord le fluide à traiter, sous forme liquide, s'évapore au voisinage des pores. Les molécules du fluide sont ensuite transportées, sous forme vapeur uniquement, à travers les pores de la membrane. Enfin, la vapeur se condense de l'autre côté de la membrane par diverses techniques (figure I.1). La membrane sert uniquement de support à l'interface liquide-gaz et permet de transporter la phase vapeur et n'intervient pas dans le procédé séparatif.

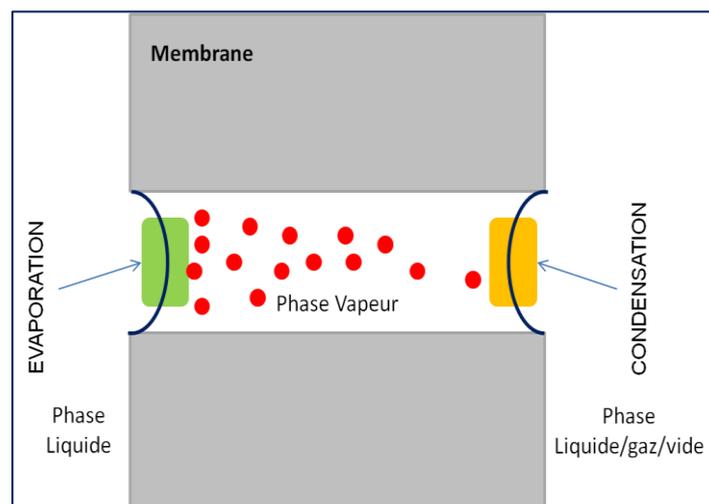


Figure I.1. Principe de la Distillation Membranaire

La DM peut être appliquée dans différents domaines : le dessalement, le traitement des eaux saumâtres et eaux usées, l'industrie alimentaire et médical...etc. Ainsi la DM propose plusieurs avantages par rapport aux autres procédés séparatifs, ce qui la rend plus attractive pour la communauté scientifique et industrielle [4, 5].

- Des conditions opératoires plus rentables que les autres procédés séparatifs : pressions faibles et des températures nettement plus faibles que la température d'ébullition du liquide à traiter ;
- Une grande sélectivité du procédé avec un taux de rejet en sel théorique de 100% ;
- Un faible espace nécessaire pour le procédé et une zone limitée où appliquer le vide dans le cas de la distillation membranaire sous vide ;
- Un colmatage plus faible relativement aux autres procédés séparatifs ;
- Des propriétés mécaniques de la membrane moins exigeantes que celles des autres procédés membranaires ;
- Une plus faible sensibilité aux concentrations du fluide d'alimentation en comparaison des autres procédés membranaires ;
- Une possibilité de couplage avec des énergies renouvelables

Cependant, la DM présente quelques inconvénients qui l'ont empêchée jusqu'à maintenant d'être développée industriellement :

- Un flux de perméat relativement inférieur à celui obtenu par l'osmose inverse ;
- Un manque des membranes et des modules spécifiques à la DM ;
- La nécessité de couplage avec des énergies renouvelables ou un système performant de récupération d'énergie.

I.2. Historique

Le procédé de DM fut breveté pour la première fois en 1963 par B.R.R. Bodell aux Etats Unis d'Amérique (United States Patent n°285,032) et la première publication date de 1967. Cependant, les recherches furent rapidement abandonnées en raison des faibles productions de perméat comparées à l'OI et de l'absence de membranes adaptées et utilisables pour ce nouveau procédé.

Dans les années 1980, les recherches sur la distillation membranaire ont connu un renouveau avec l'apparition sur le marché de nouvelles membranes poreuses et

hydrophobes, qui conviennent parfaitement à la DM (Gore 1982, Anderson et al. 1985, Schnieder et al. 1984).

L'intérêt pour la DM a connu une envolée à partir des années 90 avec un nombre toujours croissant de publications sur le sujet. Certains aspects de la DM ont été largement étudiés comme l'influence des conditions opératoires tandis que d'autres phénomènes, comme le colmatage et les aspects énergétiques n'ont été abordés que sporadiquement.

Les principes de la distillation membranaire ont été examinés et résumés par Lawson et Lloyd [6] dans une publication décrivant l'état de l'art de la distillation membranaire suivi par une autre d'El-Bourawi et al [7] et une plus récente et plus complète d'Abdullah Alkudhiri et al [8]. Une nouvelle publication par M. Khayet a fait le point sur l'état de l'art de la DM en ce qui concerne les différents modules et membranes utilisés ainsi qu'un développement des modèles de transport de masse et de transfert de chaleur pour les différentes configuration de DM [5].

I.3. Les différentes configurations de DM

En vue d'établir la force motrice en DM une multitude de configurations peuvent être appliqués, dont la différence réside uniquement dans le coté perméat et dépend de la façon avec laquelle est générée la différence transmembranaire de pression partielle (figure I.2).

I.3.1. La Distillation Membranaire de Contact Direct (DCMD)

Pour la DCMD ou Direct Contact Membrane Distillation (Figure I.2-A), la différence transmembranaire de pression partielle est générée par une différence de température entre un liquide chaud et un liquide froid (recueillant le perméat) de part et d'autre de la membrane hydrophobe. Les molécules volatiles s'évaporent ainsi à l'interface liquide chaud/vapeur et traversent la membrane sous forme gazeuse pour ensuite être recondensées à l'interface vapeur/liquide froid. La DCMD est de loin la configuration qui a été la plus étudiée au détriment des autres configurations.

I.3.2. La Distillation Membrane à Intervalle Gazeux (AGMD)

Pour l'AGMD ou Air Gap Membrane Distillation (Figure I.2-B), la différence transmembranaire de pression partielle est générée par une différence de température entre un liquide chaud et une surface froide de part et d'autre de la membrane hydrophobe. Un

intervalle gazeux inerte et immobile est placé entre la membrane et cette surface froide. Les molécules volatiles s'évaporent ainsi à l'interface liquide chaud/vapeur et traversent la membrane sous forme gazeuse puis l'intervalle gazeux avant de se recondenser au contact de la surface froide. Il est à noter la présence d'une résistance supplémentaire aux transferts de chaleur et de matière due au film gazeux (transfert par diffusion moléculaire dans le film gazeux). Son épaisseur joue un rôle important mais reste difficile à contrôler pour des raisons techniques.

I.3.3. La Distillation Membranaire à Entraînement Gazeux (SGMD)

Pour la SGMD ou Sweeping Gas Membrane Distillation (Figure I.2-C), la différence transmembranaire de pression partielle est générée par une différence de température entre l'alimentation liquide chaude et un gaz vecteur froid et inerte de part et d'autre de la membrane hydrophobe. Les molécules volatiles s'évaporent ainsi à l'interface liquide chaud/vapeur et traversent la membrane sous forme gazeuse puis sont entraînées par le gaz vecteur. La recondensation de cette vapeur aura lieu grâce à un condenseur à l'extérieur du module membranaire.

La SGMD permet d'obtenir des flux de perméat plus importants, mais entraîne des coûts supplémentaires.

I.3.4. La distillation membranaire sous vide (VMD)

Pour la VMD ou Vacuum Membrane Distillation (Figure I.2-D), la différence transmembranaire de pression partielle est générée, non plus par une différence de température, mais par une basse pression (pression de vide) inférieure à la pression partielle de vapeur de l'alimentation liquide chaude et appliquée au côté perméat de la membrane hydrophobe. Les molécules volatiles s'évaporent ainsi à l'interface liquide chaud/vapeur et traversent la membrane sous forme gazeuse.

La recondensation de la vapeur se fait grâce à un condenseur placé à l'extérieur du module membranaire.

La VMD est l'une des configurations qui a été la moins étudiée.

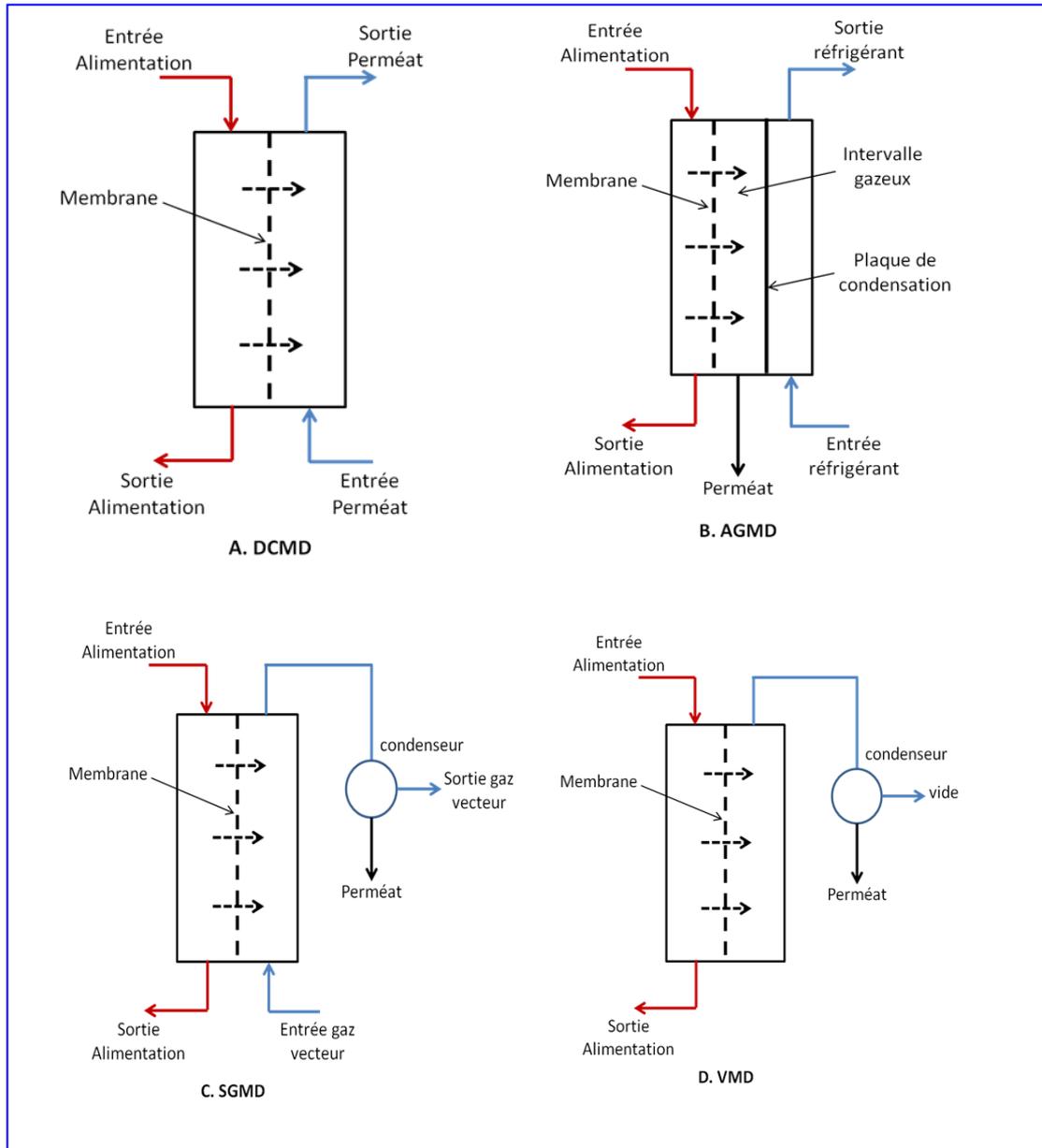


Figure I.2. Les principales configurations en DM [3]

I.4. Comparaison entre les différentes configurations

Le tableau I.1 rassemble les avantages, les inconvénients ainsi que les domaines d'application de chaque configuration.

Tableau I.1. Avantages, Inconvénients et domaines d'application des configurations de DM [3]

Configuration MD	Avantages	Inconvénients	Domaines d'application
<i>DCMD</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Flux de perméat élevé. • Possibilité de récupération interne d'énergie. • Faible résistance au transfert de matière 	<ul style="list-style-type: none"> • Perte de chaleur par conduction élevée. • Effet de polarisation de température et de concentration élevé. • Risque de mouillage plus important. • Risque de contamination massive du perméat. 	<ul style="list-style-type: none"> • Dessalement et traitement des eaux. • Industrie nucléaire. • Industrie alimentaire. • Industrie chimique et pharmaceutique. • Industrie de textile.
<i>AGMD</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Perte de chaleur par conduction faible. • Effet de polarisation de température faible. • Possibilité de récupération interne d'énergie. 	<ul style="list-style-type: none"> • Faible flux de perméat dû à la résistance supplémentaire causée par film gazeux. 	<ul style="list-style-type: none"> • Dessalement et traitement des eaux. • Industrie alimentaire. • Industrie chimique.
<i>SGMD</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Perte de chaleur par conduction faible. • Faible résistance au transfert de matière • Flux de perméabilité élevé. 	<ul style="list-style-type: none"> • Manipulation compliquée du gaz de balayage. • Récupération d'énergie interne difficile. • Coût supplémentaire (apport d'un gaz vecteur) 	<ul style="list-style-type: none"> • Dessalement et traitement des eaux. • Industrie chimique.
<i>VMD</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Perte de chaleur par conduction faible. • Flux de perméat élevé. • Faible polarisation de température. 	<ul style="list-style-type: none"> • Risque élevé de mouillage des pores. • Récupération d'énergie interne difficile. 	<ul style="list-style-type: none"> • Dessalement et traitement des eaux. • Industrie alimentaire. • Industrie chimique. • Industrie de textile.

I.5. Les caractéristiques des membranes utilisées en DM

I.5.1. Matériaux de fabrication

Des membranes hydrophobes microporeuses sont utilisées dans les procédés MD afin d'empêcher le liquide de pénétrer à l'intérieur des pores de la membrane, elles sont fabriquées à partir du Polytetrafluoroéthylène (PTFE) ou Polypropylène (PP) ou

Polyvinylidène Fluoride (PVDF) [5]. En général les membranes utilisées dans les systèmes MD doivent présenter une faible résistance au transfert de masse et une faible conductivité thermique pour minimiser les pertes de chaleur. Elles doivent avoir aussi une bonne stabilité thermique aux températures extrêmes et une résistance élevée aux produits chimiques comme les acides et les bases.

Le PTFE, représente le matériau idéal pour la conception des membranes en MD, car il manifeste le caractère hydrophobe le plus élevé et l'un des matériaux les plus résistants chimiquement et les plus stables thermiquement [5], il faut juste mentionner que la plupart des membranes utilisées en MD ont été destinées au départ pour les applications de microfiltration (MF).

I.5.2. La pression d'entrée du liquide (pression de mouillage)

Afin de maintenir l'hydrophobicité de la membrane et le non mouillage des pores, la pression d'entrée appliquée du fluide d'alimentation ne doit pas dépasser une certaine valeur nommée : la pression d'entrée du liquide LEP (Liquid Entry Pressure)

La LEP dépend de la taille maximale des pores ainsi que l'hydrophobicité de la membrane, elle est directement liée à la concentration du fluide d'alimentation et la présence des solutés organiques qui la réduisent souvent.

I.5.3. L'épaisseur

L'une des caractéristiques les plus importantes des systèmes de DM est l'épaisseur de la membrane, car elle influe linéairement sur le flux de perméat sans autant dépasser une certaine épaisseur optimale afin d'éviter le mouillage des pores.

I.5.4. La porosité

La porosité de la membrane est la fraction du vide définie comme étant le volume des pores rapporté au volume total de la membrane, en MD, elle varie de 30 à 85% [7] et peut être déterminée par la relation de Smolder-Francken [9] :

$$\varepsilon = 1 - \frac{\rho_m}{\rho_{pol}} \dots \dots \dots (I.1)$$

I.5.5. La tortuosité

La tortuosité est la déviation de la structure du pore de la forme cylindrique, par conséquent une tortuosité élevée correspond à un flux de perméat faible. La corrélation la

plus utilisée pour la détermination de la tortuosité des membranes de DM est établie par Macki-Mears [10] :

$$\chi = \frac{(2 - \varepsilon)^2}{\varepsilon} \dots \dots \dots (I.2)$$

I.5.6. La taille moyenne et la distribution des pores

En DM, on utilise des pores avec des tailles comprises entre 100 nm et 1µm [6, 7]. La distribution des pores dans une membrane n'est pas uniforme et la tendance actuelle se dirige vers l'exploitation de la distribution des pores au lieu de la taille moyenne dans la détermination du flux de perméation.

I.6. Les modules membranaires en MD

1. Module en feuillet plat (flat and sheet) : la configuration en feuillet plat est largement utilisée en laboratoire à cause de son nettoyage et remplacement facile.
2. Module en fibres creuses : l'avantage principal est sa compacité élevée et sa faible consommation d'énergie, cependant, il présente une grande tendance à l'encrassement et il est difficile au nettoyage et à la maintenance.
3. Module tubulaire : commercialement les modules tubulaires sont les plus attractifs, une faible tendance à l'encrassement, une grande surface d'échange, mais il présente une faible compacité et un coût d'opération élevé.
4. Module enroulée en spirale : présente une bonne compacité, une tendance moyenne à l'encrassement et une consommation acceptable d'énergie.

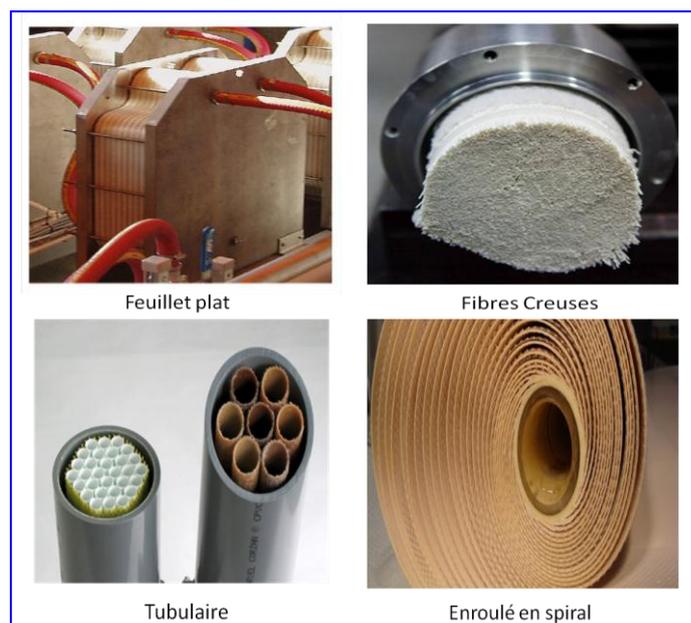


Figure I.3. Les différents modules membranaires en DM

I.7. Les mécanismes de transfert massique à travers la membrane en DM

Le procédé de distillation membranaire est régi par différents mécanismes de transfert de matière qui interviennent à la fois du côté alimentation, dans la membrane et du côté perméat.

Dans le coté alimentation et perméat (selon la configuration), le transfert de matière est lié au phénomène de polarisation de concentration, alors qu'à travers la membrane le transfert de matière est lié aux différents régimes de diffusion moléculaire (diffusion moléculaire ordinaire, Knudsen, Poiseuille, diffusion surface).

Le transfert de matière en distillation membranaire peut être modélisé par analogie avec les résistances d'un circuit électrique dont certaines sont en série et d'autres en parallèle comme illustré sur la figure I.4. [6]

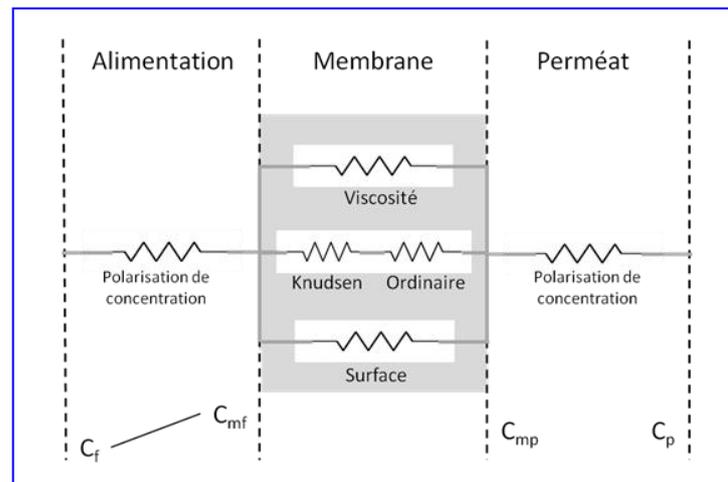


Figure I.4. Résistances au transfert de matière en MD [6]

Dans ce qui suit, les mécanismes de transfert de masse dans la membrane seront développés. Prenant l'exemple du dessalement, la force de transfert de matière dans le milieu poreux de la membrane est due à un gradient de pression partielle de vapeur $\Delta P_{(H_2O)}$ de part et d'autre de la membrane. Il en résulte l'équation suivante :

$$\Delta P_{H_2O} = P_{mf} - P_{mp} = \alpha_{H_2O} \omega_{H_2O} P_{mf}^* - P_{mp} \dots \dots \dots (I.3)$$

L'hypothèse principale est de considérer que l'équilibre liquide-vapeur est atteint à l'interface de la membrane (Vapor-Liquid Equilibrium ou VLE).

Pour l'eau pure, la pression partielle de vapeur est donnée en (Pa) à la température T (K) par l'équation d'Antoine [3] :

$$P_{H_2O} = \exp\left(a + \frac{b}{T + c}\right) \dots \dots \dots (I.4)$$

Avec a, b, c des constantes de l'équation.

Une notion importante est celle du parcours libre moyen λ des molécules qui va déterminer quel type de résistance est dominant dans le transfert de matière au sein de la membrane. Il est défini par la théorie cinétique des gaz.

$$\lambda = \frac{k_b T_{avg}}{\sqrt{2} \pi \sigma_w^2 P_{avg}} \dots \dots \dots (I.5)$$

σ_w : Le diamètre de collision de la molécule d'eau vapeur = 2,641 Å [5, 6, 8].

Le rapport entre le parcours libre moyen et le diamètre du pore définit un nombre adimensionnel appelé le nombre de Knudsen qui sera un support essentiel pour la détermination du type de régime de diffusion dans les milieux poreux.

$$K_n = \frac{\lambda}{d_p} \dots \dots \dots (I.6)$$

Dans le milieu poreux de la membrane, il est possible d'appliquer le modèle DGM (Dusty Gaz Model) qui utilise la théorie du film et distingue quatre types de mécanismes possibles au sein de la membrane suivant les types de résistances [4]:

- La diffusion de Knudsen,
- La diffusion interne ou de surface,
- La diffusion moléculaire,
- Le flux visqueux (l'écoulement Poiseuille).

Des simplifications peuvent être apportées en considérant comme dominante une des quatre résistances précédemment citées.

La première résistance est due aux collisions des molécules de gaz diffusantes avec les parois des pores sous l'action du gradient de pression. Il s'agit de la diffusion de Knudsen qui est dominante si le libre parcours moyen des molécules est très grand par rapport au diamètre moyen des pores. Le transfert de Knudsen peut avoir tendance à sous-évaluer le flux obtenu qui se traduit par l'équation suivante :

$$\mathfrak{J}_{H_2O} = k_k \Delta P_{H_2O} \dots \dots \dots (I.7)$$

k_k : Coefficient Knudsen de transfert de matière dans la membrane (s.m^{-1}).

$$k_k = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon R}{\chi \delta R_g T} \sqrt{\frac{8 R_g T_m}{\pi M_{\text{H}_2\text{O}}}} = \frac{K_m}{\sqrt{M_{\text{H}_2\text{O}}}} \dots \dots \dots (I.8)$$

K_{kn} : Perméabilité de Knudsen ($\text{s.mol}^{1/2}.\text{m}^{-1}.\text{kg}^{-1/2}$).

La seconde résistance est due à la diffusion interne dans la matrice membranaire. Elle est négligeable pour deux raisons. Tout d'abord, pour une membrane hydrophobe, les interactions entre les molécules et la membrane sont faibles. De plus l'aire de diffusion de surface dans la membrane est petite comparée à l'aire des pores en raison des porosités importantes des membranes [6, 11].

La troisième résistance est due aux collisions des molécules de gaz diffusantes entre elles. Il s'agit de la diffusion moléculaire dont le flux se traduit par l'équation suivante :

$$\mathfrak{J}_{\text{H}_2\text{O}} = k_o \Delta P_{\text{H}_2\text{O}} \dots \dots \dots (I.9)$$

k_o : Coefficient de transfert de matière dans la membrane (s.m^{-1}).

$$k_o = \frac{\varepsilon P_{\text{total}} D_{wa}}{\chi \delta R_g T_m} \frac{1}{P_a} \dots \dots \dots (I.10)$$

D_{wa} : Coefficient de diffusion de la vapeur dans l'air ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$).

En VMD, l'air est uniquement présent à l'état de traces dans les pores et cette résistance peut ainsi être négligée.

La quatrième et dernière résistance est due à la viscosité de la vapeur. Il s'agit d'un régime de Poiseuille qui est dominant si le libre parcours moyen des molécules est de l'ordre du diamètre moyen ou inférieur. Le transfert de Poiseuille peut avoir tendance à surévaluer le flux obtenu qui se traduit par l'équation suivante :

$$\mathfrak{J}_{\text{H}_2\text{O}} = k_p \Delta P_{\text{H}_2\text{O}} \dots \dots \dots (I.11)$$

k_p : Coefficient de transfert Poiseuille de matière dans la membrane (s.m^{-1}).

$$k_p = \frac{1}{8} \frac{\varepsilon R^2}{\chi \delta} \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{\mu R_g T_m} \dots \dots \dots (I.12)$$

Entre les régimes de Poiseuille et de Knudsen, il existe un régime de transfert transitoire [4] :

$$\mathfrak{J}_{H_2O} = k_{kp} \Delta P_{H_2O} \dots \dots \dots (I. 13)$$

k_{kp} : Coefficient de transfert de matière dans la membrane (s.m⁻¹).

$$k_{kp} = \frac{M_{H_2O} \cdot C_1 (C_2 + \frac{C_3}{\lambda})}{\delta} \dots \dots \dots (I. 14)$$

Avec u, k_1, k_2 coefficients déterminés expérimentalement par perméation gazeuse :

$$C_1 = \left(\frac{8R_g T_m}{\pi M_{H_2O}} \right)^{1/2} \quad C_2 = \frac{2}{3} \frac{R\varepsilon}{\chi R_g T_m} \quad C_3 = \frac{1}{32} \frac{\pi R^2 \varepsilon}{\chi R_g T_m}$$

I.8. Les paramètres de fonctionnement en Distillation Membranaire

I.8.1. La température du fluide d'alimentation :

L'augmentation du gradient de température entre les deux surfaces, affecte positivement les coefficients de diffusion qui augmente le flux de perméation [10, 12], de plus la polarisation de température diminue avec l'augmentation de la température du fluide d'alimentation [13].

L'influence de la température du compartiment froid pour une température fixe du compartiment chaud a été étudiée par [14, 15], cependant son effet est peu significatif et pourra être négligé car la pression de vapeur varie très peu à des températures basses.

I.8.2. La concentration et les caractéristiques de la solution

Les travaux d'Izquierdo-Gil et al [16] ont montré que l'augmentation de la concentration en soluté du fluide d'alimentation conduit à une réduction linéaire du flux de perméat due à la diminution de la pression de vapeur. Cependant cette diminution était trouvée insignifiante par Banat et Simandl [17], Qaishat et al [12] et Alklaibi et Lior [18].

I.8.3. La vitesse de recirculation

Les vitesses de recirculation élevées minimise la résistance de la couche limite et maximise le coefficient de transfert thermique, permettant ainsi, des flux de perméabilité élevés [10].

I.8.4. Caractéristiques de la membrane

Le flux de perméat est proportionnel à la porosité et inversement proportionnel à l'épaisseur de la membrane et la tortuosité [6].

Afin d'augmenter l'efficacité des procédés de DM, les membranes doivent être mises en œuvre avec des matériaux dont la conductivité thermique est faible [16].

I.8.5. Effet de la durée sur l'opération de la distillation membranaire

Izquierdo-Gil et al [16] n'ont remarqué aucun changement sur le flux de distillat durant une période d'environ d'un mois de fonctionnement. En revanche Scheider et al [19] a remarqué une diminution de 20% après 18 semaines de fonctionnement en DCMD en utilisant de l'eau du robinet en alimentation, cette diminution est due à l'encrassement ou bien au mouillage des pores.

Banat et Simandl [17] ont étudié l'effet de la longueur des opérations sur une durée de 60 jours sur le flux de perméat en utilisant de l'eau de robinet, ils ont constaté que le flux croit pour les 50 premières heures, puis chute pendant les 160 heures qui suivent avant d'atteindre un état quasi-stationnaire.

En ce qui concerne l'eau de mer, les expériences ont été menées sur une période de 10 jours, le flux décroît jusqu'à atteindre un état permanent [14]. Les mêmes résultats ont été enregistrés pour une solution en NaCl (1 Molaire) pendant 6 jours [20].

CHAPITRE 2 : LA DISTILLATION MEMBRANAIRE SOUS VIDE

II.1. Introduction

Une des techniques possible utilisée pour augmenter le flux de perméation en MD est de chasser l'air des pores par un dégazage (éliminer l'effet de la pression partielle de l'air à l'intérieur des pores de la membrane, en d'autre terme éliminer la diffusion moléculaire), ou bien par l'application d'un vide en continu au niveau du compartiment perméat.

La distillation membranaire sous vide (Vacuum Membrane Distillation) est une autre variante de la DM. Dans cette configuration une faible pression ou un vide est appliqué dans le côté perméat du module membranaire par des pompes à vide. La pression appliquée doit être obligatoirement inférieure à la pression saturante des molécules qu'on veut séparer du liquide d'alimentation, alors que la condensation s'effectue à l'extérieur du module membranaire à des températures inférieures à la température ambiante. La figure II.1, schématise le transfert de masse et de chaleur à travers une membrane hydrophobe poreuse en VMD tandis que la figure II.2 représente une unité expérimentale au laboratoire VMD en écoulement tangentiel.

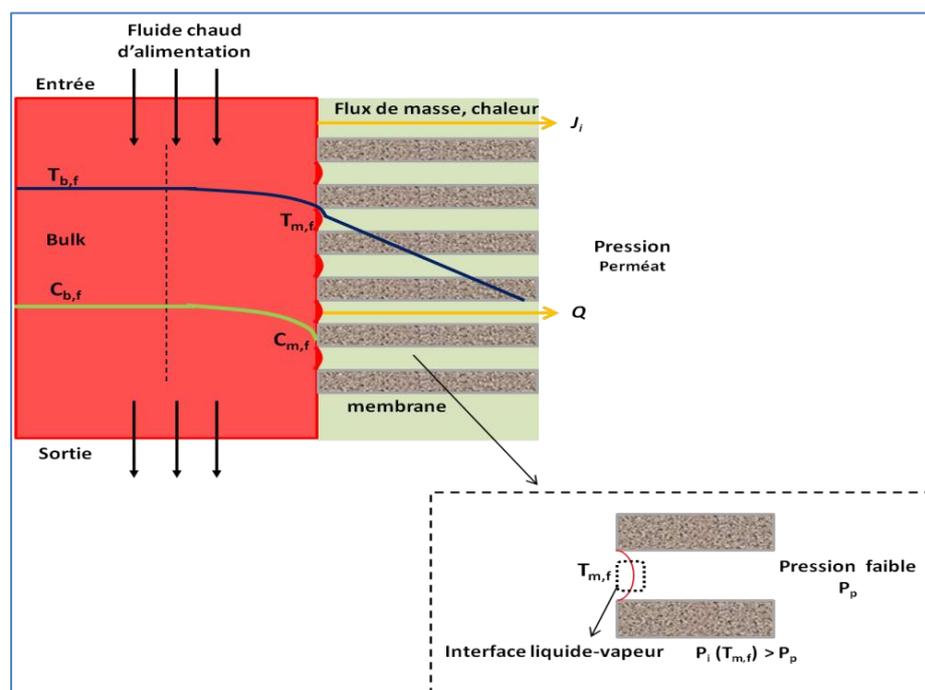


Figure II.1. Le transfert de masse et de chaleur en VMD [3]

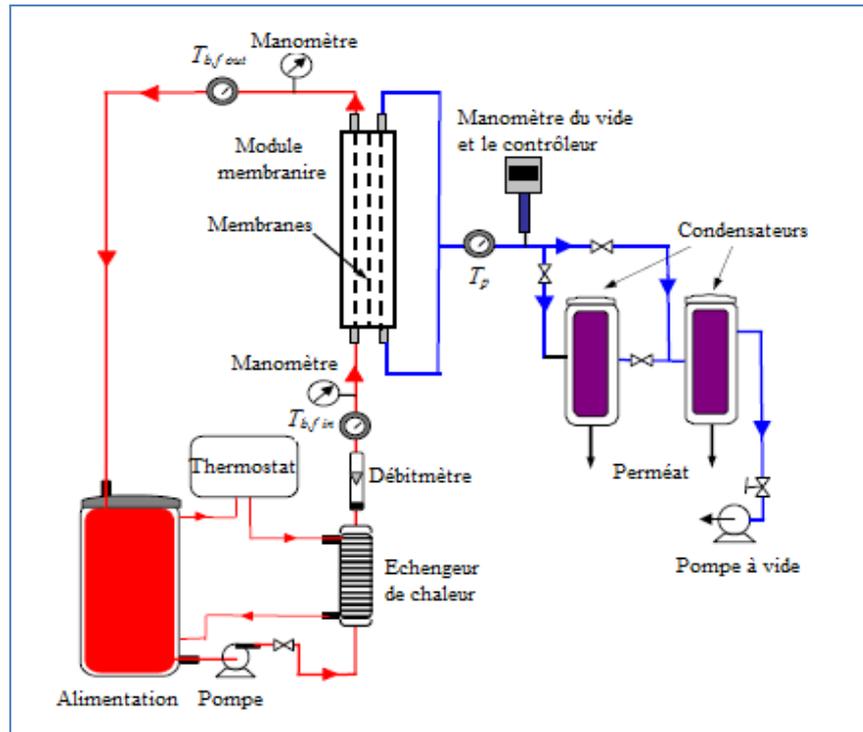


Figure II.2. Schéma d'un système VMD expérimental typique à l'échelle laboratoire [3]

Cette configuration procure deux avantages majeurs [3] :

- a. Une très faible perte de chaleur par conduction : cela est dû à l'isolation contre les pertes de chaleur par conduction suite à l'application du vide. La couche limite est négligeable dans le côté perméat, ce qui conduit à un abaissement de la quantité de chaleur transférée à travers la membrane et l'amélioration des performances.
- b. Une résistance au transfert de masse réduite : la diffusion à l'intérieur des pores des molécules évaporées à l'interface alimentation/membrane est favorisée.

Toutefois, le risque de mouillage des pores en VMD est plus élevé que les autres configurations à cause de la pression du vide appliquée qui pourra être considéré comme un sérieux inconvénient.

Une rétrospective de la littérature en DM permet d'affirmer que la VMD a attiré moins d'attention par rapport aux procédé DCMD, qui reste la configuration la plus utilisée, cela pourra être lié à la nécessité d'utilisation des condensateurs externes dans la collecte du perméat, offrant ainsi un design avec une plus faible compacité et impose un coût supplémentaire .

A titre d'illustration, dans l'annexe 2 sont consignés les flux de perméat, justifiant l'importance des flux en VMD pour certaines membranes commerciales et de laboratoires, comparativement aux autres configurations.

II.2. La modélisation théorique dans la distillation membranaire sous vide

En VMD, la force motrice est maintenue par une application d'un vide en continu au niveau du coté perméat. La solution d'alimentation (feed) est mise en contact avec la partie supérieure de la membrane.

Dans le cas du dessalement, le flux de perméat J_i est exprimé comme suit :

$$J_i = k_i \Delta P_i = B_i (P_{i,m} - P_{i,p}) \dots \dots \dots (II.1)$$

Avec

$P_{i,m}$: La pression partielle du composé i à l'interface alimentation / membrane.

$P_{i,p}$: La pression partielle du composé i à la surface membranaire coté perméat.

La VMD se distingue des autres configurations par une présence à l'échelle de traces de l'air à l'intérieur des pores (diffusion moléculaire négligeable). Par conséquent, le transport de masse à travers la membrane ne pourra s'exprimer que par les modèles d'écoulement Knudsen et d'écoulement visqueux et de leur combinaison [9, 11, 21, 22].

En réalité, la diffusion Knudsen est couramment considérée par la majorité de la communauté scientifique [4, 9, 23-25]. Cela est du, au fait qu'en VMD les pores doivent avoir de petites tailles afin d'éviter leur mouillage à des vides assez poussés du coté perméat. Le nombre de Knudsen est le paramètre permettant de spécifier le régime de diffusion à travers les pores de la membrane :

a. $\underline{Kn} > 10 (R_{avg} < 0.05 \lambda_i)$

Les collisions molécules-parois du pore sont dominantes par rapport aux collisions molécules-molécules et le régime de diffusion Knudsen est applicable via l'équation suivante [5] :

$$k_k = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon R_{avg}}{\chi \delta R_g T} \sqrt{\frac{8 R_g T_m}{\pi M_i}} \dots \dots \dots (II.2)$$

b. $10 > \text{Kn} > 0.01$ ($0.05 \lambda_i < R_{avg} < 50 \lambda_i$)

Le régime transitionnel domine et le mécanisme du transport est la combinaison de Knudsen et l'écoulement visqueux, le coefficient de transfert s'écrit alors :

$$k_{kp} = \frac{1}{R_g T \delta} \left(\frac{2 \varepsilon R_{avg}}{3 \chi} \sqrt{\frac{8 R_g T_m}{\pi M_i}} + \frac{\varepsilon R_{avg}}{8 \chi \mu_i} P_{avg} \right) \dots \dots \dots (II.3)$$

c. $\text{Kn} < 0.01$ ($R_{avg} > 50 \lambda_i$)

Dans ce cas, les collisions molécules-molécules dominant et la perméabilité à travers le pore est dans la région visqueuse (Poiseuille) et pourra être calculée par le biais de l'équation suivante :

$$k_p = \frac{1}{8} \frac{\varepsilon \bar{r}^2}{\chi \delta} \frac{\bar{p}}{\mu_i R T_m} \dots \dots \dots (II.4)$$

Si on considère une distribution de taille des pores, tous les mécanismes de transfert peuvent survenir simultanément, suivant les conditions opératoires appliquées. la perméabilité globale en VMD peut être calculé comme suit [11, 26] :

$$k_g = \frac{N}{\chi \delta} \left(\sum_{j=1}^{m(R=0.05\lambda_i)} G_i^k f_j R_j^3 + \sum_{j=m(R=0.05\lambda_i)}^{p(R=50\lambda_i)} (G_i^k f_j R_j^3 + G_i^v f_j G_j^4 P_{avg}) + \sum_{j=p(R=50\lambda_i)}^{n(R=R_{max})} G_i^v f_j R_j^4 P_{avg} \right) \dots (II.5)$$

$$G_i^k = \left(\frac{32\pi}{9M_i R T_m} \right)^{1/2} \quad G_i^v = \frac{\pi}{8\mu_i} \frac{1}{R T_m}$$

Où

f_j : La fraction des pores dont la taille est R_j .

N : Le nombre global des pores par unité de surface.

m : La dernière classe des pores dans la région Knudsen.

p : La dernière classe des pores dans la région de transition.

II.3. Effets des conditions opératoires sur le flux de perméation en VMD

II.3.1. Effet de la température du fluide d'alimentation

En VMD, l'effet de la température du fluide d'alimentation est similaire à celui des autres configurations MD, en effet, une augmentation de ce paramètre conduit à une augmentation exponentielle du flux de perméabilité [3].

La sensibilité du flux de perméabilité aux conditions opératoires a été investiguée par Banat et al [27]. Il a été constaté que le flux est fortement sensible à la température d'alimentation et spécifiquement à des pressions de perméat plus basses (vide poussé) et que ce dernier, pour les mêmes conditions opératoires est de 2,8 à 3,1 plus élevé que celui obtenu par l'utilisation d'une configuration DCMD.

II.3.2. Effet de la concentration en soluté dans la solution d'alimentation.

Dans toutes les configurations MD, l'augmentation de la concentration des solutés non volatiles dans la solution aqueuse d'alimentation conduit à une réduction du flux à cause de la diminution de la pression de vapeur saturante avec l'addition des solutés dans l'eau (diminution de la force motrice dans l'équation II.1) ainsi que la contribution de l'effet de la polarisation de température.

La VMD peut être utilisée dans le traitement des solutions aqueuses fortement concentrées en sels, sans incidence particulière sur la productivité, comparativement à la nanofiltration et l'osmose inverse [28-30].

II.3.3. Effet de la vitesse de circulation du liquide d'alimentation.

Dans le cas des solutions aqueuses contenant des solutés volatils, les flux global et partiel augmentent avec l'augmentation de la vitesse de circulation [31, 32], cela est dû aussi à l'augmentation des coefficients de transfert suite à une diminution de la résistance au transfert de masse.

II.3.4. Effet de la pression du vide

En général, le flux de perméat augmente avec l'augmentation de la pression du vide dans tous les systèmes VMD, toutefois, cela conduit à un risque du mouillage des pores très élevé. Il est important de mentionner que la diminution de la pression du vide s'accompagne toujours par une forte consommation d'énergie, par conséquent, des pressions du vide modérées sont à préconiser [33].

II.3.5. Interaction entre les différents paramètres de fonctionnement

L'interaction entre les différents paramètres de fonctionnement doit être étudiée afin d'optimiser les performances des systèmes VMD tout en prenant en considération la consommation d'énergie.

II.4. Les applications de la VMD

Les applications potentielles de la VMD sont généralement l'extraction des composés organiques volatiles (VOCs) à partir des solutions aqueuses, par exemple : le chloroforme, benzène, toluène, méthyle ter-butyle éther (MTBE), TCA, 2,4-dichlorophénol, tetrachloroéthylène, ...etc [11, 23, 24, 31].

Le traitement des solutions aqueuses d'alcools par la VMD est aussi une importante application [21, 22]. D'autres études et recherches traitent des solutions n'incluant pas des VOCs, comme le dessalement [28-30, 34-37] pour la production de l'eau distillée ou bien la concentration des solutions aqueuses de saccharose [38], traitement des solutions de colorant [25, 39], la concentration des extraits de ginseng dans les solutions aqueuses [40] et l'éthylène glycol à partir des liquides de produits réfrigérants usagés [41]. Par ailleurs, le procédé VMD a été utilisé dans l'élimination de l'Ammoniac [42], la concentration de jus de fruits et la récupération des composés aromatiques volatiles [43, 44], et le traitement des eaux usées issues de l'industrie des textiles [25, 39].

II.5. La technologie VMD dans le dessalement

Le procédé VMD a été utilisé avec succès pour la production d'eau distillée à partir de l'eau de mer ou des eaux saumâtres et aussi pour la concentration des saumures [28, 30, 34-37, 45]. Par l'utilisation des différentes membranes en PE et PP en fibres creuses et pour une solution aqueuse en chlorure du Sodium à 35 g/l, Li et al [34] ont révélé que le flux de perméat en VMD est plus important que celui enregistré en DCMD.

Une installation pilote VMD pour le dessalement d'eau de mer sur des navires à l'aide des membranes en PP en fibres creuses [37], le chauffage de l'eau de mer du côté alimentation est assuré par la chaleur dégagée par le moteur du navire, ainsi, différentes conditions opératoires ont été investiguées. Il apparaît, que le facteur de rejet avoisinant les 99.99% avec un flux de perméat de 5,4 kg/m².h ont pu être maintenus après 5 mois de fonctionnement.

Wirth et Cabassaud [28] ont réalisé des expériences VMD pour des solutions aqueuses dont les concentrations varient de 15 à 300 g/l. Il est à noter que la qualité de l'eau ultra pure obtenue est comparable pour les deux solutions salines.

CHAPITRE III : NOTIONS D'ANALYSE NUMERIQUE ET D'OPTIMISATION

L'objet de l'analyse numérique est de concevoir des méthodes de résolution de certains problèmes mathématiques, en général issus de la modélisation des problèmes "réels", et dont on cherche à calculer la solution à l'aide d'un ordinateur. Les méthodes numériques trouvent des applications naturelles dans de nombreux problèmes posés par la physique, les sciences de l'ingénieur, les sciences biologiques l'économie et la finance.

III.1. L'intégration numérique

III.1.1. Introduction

Toute méthode d'intégration numérique consiste à former une approximation à une intégrale par une expression du type :

$$\int_{\phi} f(x)dx = I \cong I_n = L(\phi) \sum_{i=1}^n p_i f(x_i) \dots \dots \dots (III. 1)$$

Où les poids p_i et les points x_i varieront selon la méthode, sujet toutefois à une condition de normalisation ($\sum p_i = 1$) et $L(\phi)$ représente la longueur de l'intervalle ou le volume de la région d'intégration [46].

Les différentes méthodes seront caractérisées par :

1. L'erreur de la méthode $I_n - I$ qui représente la qualité de l'approximation.
2. Le nombre (n) d'évaluation de la fonction nécessaire pour atteindre la précision voulue.
3. Le nombre de points supplémentaires Δn nécessaire pour améliorer une approximation jugée insuffisamment précise.

III.1.2. L'intégration unidimensionnelle

Dans le cas où la fonction f ne dépend que d'une seule variable réelle, c.-à-d. la région d'intégration ϕ est unidimensionnelle, trois régions différentes se distinguent : finie, semi-finie et infinie

L'intégration numérique unidimensionnelle dite **quadrature** est depuis longtemps le sujet des études très poussées qui ont abouti à des méthodes élégantes et puissantes.

A. La méthode du trapèze

La méthode est simple, elle consiste à diviser la région d'intégration en $n - 1$ parties égales et à prendre les x_i les n points ainsi déterminés, elle est d'ordre 1.

Cette méthode équivaut à approximer l'intégrale sur chaque intervalle par le trapèze inscrit dans la fonction sur cet intervalle. La surface en rouge représente la valeur de l'intégrale estimée par la méthode des trapèzes

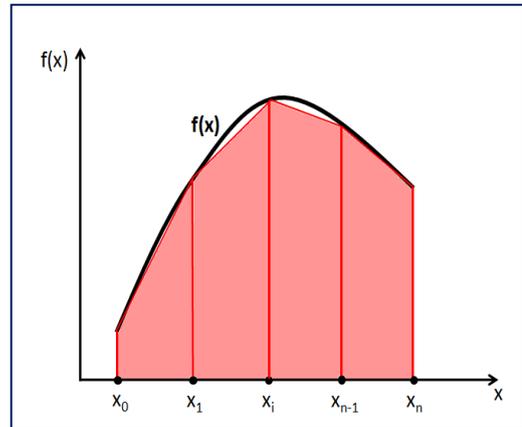


Figure III.1. Méthode des trapèzes

Soit $x_{i+1} - x_i = L(\phi)$

Alors :

$$I_i = (x_{i+1} - x_i)f(x_i) + \frac{(x_{i+1} - x_i)(f(x_{i+1}) - f(x_i))}{2} = (x_{i+1} - x_i) \left(\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} \right) \dots (III.1)$$

Avec

$$I_n = \sum_{i=1}^n I_i \dots \dots \dots (III.2)$$

D'où :

$$I_n = L(\phi) \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} \dots \dots \dots (III.3)$$

On vérifie facilement que tous les poids p_i sont égaux à 1 sauf les deux extrémités qui sont égales à 0,5.

Quant à l'estimation de l'erreur, nous la déterminons en supposant que la fonction admet un développement en série de Taylor en s'arrêtant à la deuxième dérivée puis calculer l'intégrale exacte de la fonction dans sa nouvelle forme et déduire la différence avec l'intégrale calculée par la méthode des trapèzes.

$$E_{rr} = I - I_n = -\frac{(x_n - x_0)^3}{12} f''(\Phi), \quad \Phi \in [x_0, x_n] \dots \dots \dots (III.4)$$

B. Méthode de Simpson

Pour réduire encore l'erreur de troncature, il est normal de chercher une méthode qui va plus loin dans le développement de Taylor pour intégrer exactement des termes de degré supérieur.

Cette méthode utilise l'approximation d'ordre 2 de f par un polynôme quadratique P prenant les mêmes valeurs que f aux points d'abscisse x_i, x_{i+1} et $\theta_i = (x_i + x_{i+1})/2$.

Pour déterminer l'expression de cette parabole (polynôme de degré 2), on utilise l'interpolation lagrangienne.

Un polynôme étant une fonction très facile à intégrer, on approche l'intégrale de la fonction f sur l'intervalle $[x_0, x_n]$, par l'intégrale de P sur ce même intervalle. On a ainsi, la simple formule :

$$I_n = \frac{L(\phi)}{6} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + 4f(\theta_i) + f(x_{i+1}) \dots \dots \dots (III.5)$$

L'erreur de cette méthode est donnée par la formule suivante :

$$E_{rrr} = I - I_n = \frac{(x_n - x_0)^5}{2880} f^{(4)}(\Phi), \quad \Phi \in [x_0, x_n] \dots \dots \dots (III.6)$$

III.2. L'optimisation des procédés

III.2.1. Introduction

L'optimisation est l'utilisation des méthodes spécifiques pour déterminer la solution la plus rentable et efficace à un problème, un modèle ou une conception d'un processus [47]. Cette technique est l'une des principaux outils quantitatifs dans la prise de décision industrielle. Une grande variété de problèmes de modélisation, conception, construction, l'exploitation et l'analyse des procédés chimiques (ainsi que de nombreux autres procédés industriels) peut être résolu par l'optimisation.

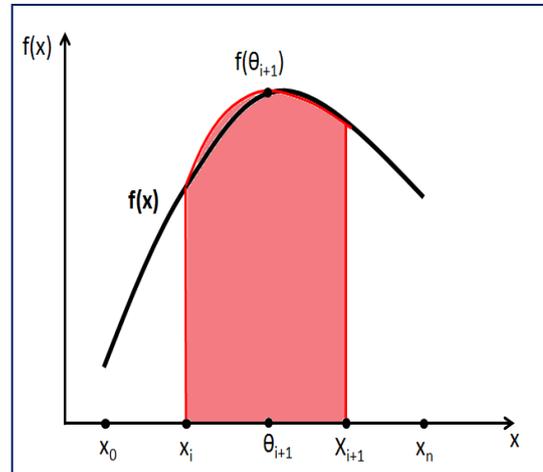


Figure III.2. Méthode de Simpson

III.2.2. Les éléments essentiels d'un problème d'optimisation

Le fait que la solution des problèmes d'optimisation implique diverses fonctionnalités mathématiques, la formulation d'un problème d'optimisation devra employer des expressions mathématiques qui ne doivent pas être nécessairement très complexes. Beaucoup de problèmes d'optimisation ont des structures similaires, en effet, c'est cette similitude qui a permis les progrès continus des techniques d'optimisation.

Chaque problème d'optimisation est constitué de trois catégories essentielles [47] :

- a. Au moins une fonction objective à optimiser.
- b. Contraintes d'égalités (équations).
- c. Contraintes d'inégalités.

On entend par une solution d'un problème d'optimisation, un ensemble de variables qui satisferont les contraintes (b) et (c) à un degré de précision souhaitée.

III.2.3. Procédure générale pour la résolution des problèmes d'optimisation

Aucune méthode ou un algorithme d'optimisation ne peut être appliqué de manière efficace à tous les problèmes. La méthode retenue pour un cas particulier dépend principalement du caractère de la fonction objective et si elle est connue explicitement, de la nature des contraintes, et du nombre de variables dépendantes et indépendantes.

La liste citée ci-dessus représente les six (6) étapes générales de l'analyse et la résolution des problèmes d'optimisation :

1. Analyser le processus lui-même de sorte que les variables et les caractéristiques spécifiques présentant un intérêt soient définies, c'est faire une liste de toutes les variables.
2. Déterminer le critère d'optimisation, et préciser la fonction objective en termes de variables définies dans l'étape 1 avec leurs coefficients. Cette étape procure le modèle.
3. Par le biais des expressions mathématiques, développer une procédure valide qui lie les variables d'entrée-sortie du processus et les coefficients associés. Inclure à la fois les contraintes d'égalité et d'inégalité. Utilisez les principes physiques (les bilans massiques, les bilans d'énergie, les relations empiriques, les concepts implicites et

les restrictions externes). Identifier les variables dépendantes et indépendantes pour obtenir le nombre de degrés de liberté.

4. Si la formulation du problème est assez large :
 - a. Le décomposer en parties gérables.
 - b. Simplifier la fonction objective et le modèle.
5. Appliquer une technique d'optimisation adaptée à l'énoncé mathématique du problème.
6. Vérifiez les résultats obtenus, et examiner leur sensibilité aux variations des coefficients et hypothèses du problème.

Les étapes 1, 2 et 3 portent sur la définition mathématique du problème, c'est-à-dire l'identification des variables, la spécification de la fonction objective, et la déclaration des contraintes. Si le processus à être optimisé est très complexe, il pourrait être nécessaire de reformuler le problème afin qu'il puisse être résolu avec un effort raisonnable.

L'étape 4 indique que l'énoncé mathématique du problème doit être simplifié autant que possible sans perdre son essentiel.

L'étape 5 implique le calcul du point optimal. Très peu de techniques existent pour obtenir la solution optimale pour un problème. Pratiquement toutes les méthodes d'optimisation numérique impliquent l'itération, alors que l'efficacité d'une technique donnée repose souvent sur une bonne première estimation des valeurs des variables à la solution optimale.

La dernière entrée consiste à vérifier la solution afin de déterminer s'il s'agit bien d'une solution optimale. Le plus souvent, une solution optimale peut exister, mais on ne peut pas démontrer que les conditions nécessaires sont satisfaites. Une deuxième considération est la sensibilité de l'optimum aux modifications des paramètres dans l'énoncé du problème.

III.2.4. Minimisation des erreurs par la méthode des moindres carrés

La méthode des moindres carrés, élaborée par Legendre en 1805 et Gauss en 1809, permet de comparer des données expérimentales, généralement entachées d'erreurs de mesure, à un modèle mathématique censé décrire ces données.

La méthode des moindres carrés permet alors de minimiser l'impact des erreurs expérimentales en « ajoutant de l'information » dans le processus de mesure.

Dans le cas le plus courant, le modèle théorique est une famille de fonction $f(x, \vartheta)$ d'une ou plusieurs variables muettes x , indexées par un ou plusieurs paramètres ϑ inconnus. La méthode des moindres carrés permet de sélectionner parmi ces fonctions, celle qui reproduit le mieux les données expérimentales. On parle dans ce cas d'*ajustement par la méthode des moindres carrés*.

La méthode consiste en une prescription (initialement empirique), qui est que la fonction $f(x, \vartheta)$ qui décrit mieux les données est celle qui minimise la somme quadratique des déviations des mesures aux prédictions de $f(x, \vartheta)$. Si, par exemple, nous disposons de N mesures y_i , $i = 1, \dots, N$ les paramètres ϑ au sens de la méthode des moindres carrés sont ceux qui minimisent la quantité :

$$S(\vartheta) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i, \vartheta))^2 = \sum_{i=1}^N r_i^2(\vartheta) \dots \dots \dots (III.7)$$

Où les $r_i(\vartheta)$ sont les *résidus* du modèle, qui correspondent à l'écart entre la mesure y_i et la prédiction $f(x_i, \vartheta)$ donnée par le modèle. $S(\vartheta)$ peut être considérée comme une mesure de la *distance* entre les données expérimentales et le modèle théorique qui prédit ces données. La prescription des moindres carrés commande que cette distance soit minimale.

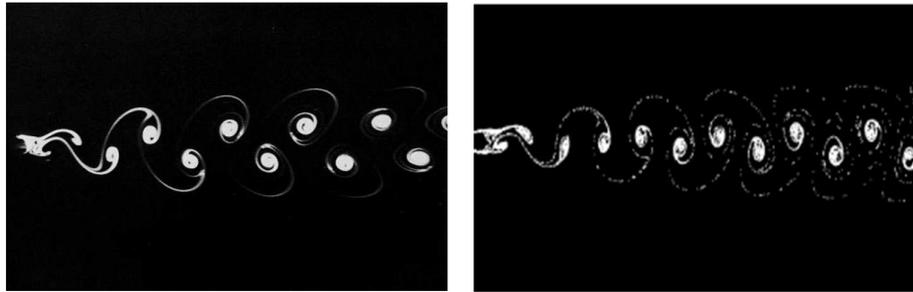
CHAPITRE IV : MECANIQUE DES FLUIDES NUMERIQUES (CFD)

IV.1. Introduction

La mécanique des fluides numérique, plus souvent désignée par le terme anglais : *computational fluid dynamics* (CFD), consiste à étudier les mouvements d'un fluide, ou leurs effets, par la résolution numérique des équations gouvernant le fluide.

Les écoulements des fluides sont gouvernés par des équations différentielles partielles (EDP) qui représentent les lois de conservation de masse, de mouvement et d'énergie. La CFD est l'art de substitution d'un système pareil d'EDP par un ensemble d'équations algébriques qui peut être résolu par le biais des calculateurs numériques.

La CFD a grandi d'une curiosité mathématique pour devenir un outil essentiel dans pratiquement toutes les branches de la dynamique des fluides, transfert de masse et de chaleur, les réactions chimiques...etc. Dans le domaine de la recherche, cette approche est l'objet d'un effort important, car elle permet l'accès à toutes les informations instantanées (vitesse, pression, concentration...etc.) pour chaque point du domaine de calcul pour un coût global généralement modique par rapport aux expériences correspondantes.



Expérience réelle

Simulation CFD

Figure IV.1. Comparaison entre une expérience réelle et une simulation CFD

IV.2. Méthodologie d'une simulation par CFD

De manière générale, la résolution d'un problème de CFD passe par trois (03) phases principales :

- a. la préparation du problème (*Pré-processing*) : ceci passe par la définition de la géométrie et le maillage discrétisant le domaine de calcul.

- b. *la résolution numérique du problème (processing)* : qui passe par l'exécution d'un programme informatique de résolution numérique.
- c. *l'exploitation des résultats (post-processing)* : on vérifie leur cohérence, exactitude et précision

Chaque étape de la procédure nécessite l'utilisation d'outils informatiques spécifiques, on distingue pour la préparation de la géométrie et son maillage : Gambit, Gmsh, MeshLab, CM2Mesh, pour la résolution numérique, on cite : Cast3M, SC/Tetra et Stream, adapco (starCD), CFX et fluent, PowerFlow, Acusolve, Open FOAM...

Pour l'exploitation des résultats (post-processing) certains logiciels commerciaux sont dotés de leurs propres post-processeurs quoiqu'il existe d'autres logiciels destinés uniquement au traitement des résultats à l'image de Tecplot.

Dans notre travail réalisé le générateur de maillage GAMBIT version 2.2.30 est utilisé pour la préparation des géométries en revanche le code dynamique des fluides computationnelles FLUENT versions 6.3.26 sera utilisé pour les simulations et le traitement des résultats.

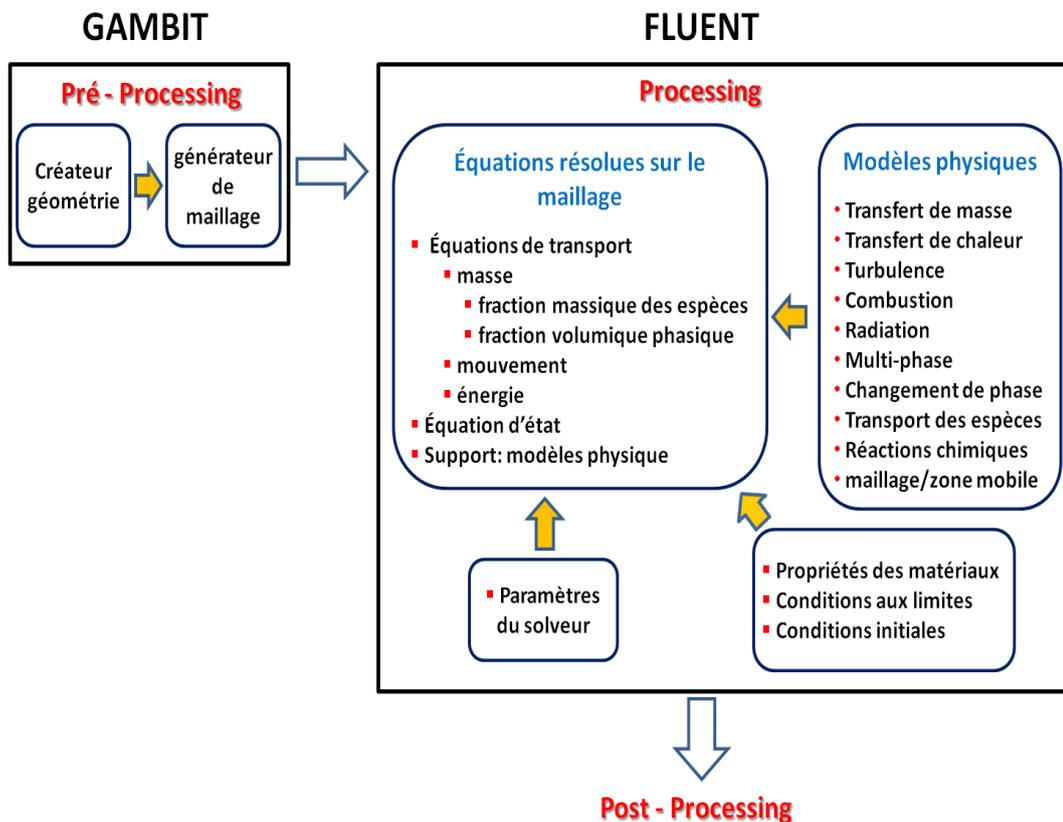


Figure IV.2. La méthodologie d'une simulation CFD

IV.3. Générateur de maillage GAMBIT

Le logiciel GAMBIT¹ est conçu pour aider les analystes et les concepteurs à construire et à mailler des modèles géométriques pour une exploitation antérieure en mécanique des fluides numérique (CFD) et d'autres applications scientifiques [48].

GAMBIT reçoit les instructions de l'utilisateur principalement par le biais de son interface graphique, qui rend les étapes de base de construction et de maillage d'un modèle simple et intuitive, encore, elle présente une souplesse qui lui permet de s'adapter à une large gamme d'applications de modélisation.

IV.3.1. Création du modèle géométrique

GAMBIT permet de créer, déplacer, copier, modifier, supprimer et donner un récapitulatif détaillé d'une grande variété de type d'entités topologiques réelles et mêmes virtuelles à savoir : *point*, *ligne*, *face*, *volume* et *groupe*.

Une géométrie peut être créée en GAMBIT par deux approches différentes :

- a. *Approche ascendante (bottom-up)* : on commence par créer l'entité inférieure qui sera utilisée par la suite pour la création des entités supérieures ex : ensemble de point pour créer des lignes puis aller jusqu'au volume.
- b. *Approche descendante (top-down)* : on crée directement notre entité voulue : un volume ou une face par l'introduction directe de ses paramètres.

L'approche descendante est rapide mais génère des volumes complexes et limités en termes d'alternatives de maillage, à l'inverse, l'approche ascendante nécessite plus de temps mais procure plus de possibilité lors de maillage.

IV.3.2. Maillage du modèle géométrique

La génération du maillage est une étape cruciale et déterminante de la qualité des simulations réalisées en mécanique des fluides numérique (CFD). Dans ce qui suit, on citera les principales étapes à suivre pour garantir un meilleur maillage de notre modèle.

a. Création des couches limites

Les couches limites définissent l'espacement des nœuds de mailles dans les régions immédiatement adjacentes aux bords et / ou des faces. Ils sont principalement utilisés pour

¹ GAMBIT : Generation And Meshing Building Intelligent Toolkit

contrôler la densité de maillage, et par conséquent, de contrôler la quantité d'informations disponible auprès du modèle de calcul dans des zones d'intérêt spécifiques.

Pour définir une couche limite, on doit définir les informations suivantes:

- L'algorithme de la couche limite,
- Facteur de croissance qui définit la hauteur des rangées qui succèdent,
- Nombre total de lignes qui définit la profondeur de la couche limite,

GAMBIT permet de créer, modifier, visualiser en 3D, modifier l'étiquette, avoir un résumé récapitulatif et supprimer une couche limite.

b. Maillage des entités géométrique

La création du maillage est une étape décisive dans la suite d'un process de simulation en CFD, le choix du schéma de maillage, le type d'éléments dépend essentiellement de la forme géométrique et nécessite une connaissance approfondie du mailleur. GAMBIT permet de mailler les lignes, les faces et les volumes en offrant une multitude d'options. Encore, il permet de diviser, résumer, lisser, supprimer un maillage et connecter/déconnecter plusieurs maillages.

Dans ce que suit on se concentre sur le maillage des volumes puisque le maillage des faces en fait partie. Lorsqu'on maille un volume, GAMBIT crée des nœuds de maillage dans tout le volume en fonction des paramètres prédéfinis.

1. Spécification du schéma de maillage

Pour spécifier le schéma de maillage, on doit spécifier les paramètres suivants :

- **Les éléments** : Définit la forme qui sera utilisée pour mailler le volume.

Tableau IV.1. Les options des éléments de maillage dans GAMBIT [48]

<i>Option</i>	<i>Description</i>
Hex	Le maillage comprend exclusivement des éléments hexaédriques.
Hex/Wedge	Le maillage est composé principalement d'éléments hexaédriques mais comporte des éléments de coins s'il ya lieu.
Tet/Hybrid	Le maillage est composé d'éléments tétraédriques, hexaédriques, pyramidaux, et des éléments de coins s'il ya lieu.

- **Le type :** c'est un paramètre qui définit l'algorithme de maillage et, par conséquent, la structure globale des éléments de maillage du volume.

Tableau IV.2. Les options des types de maillage dans GAMBIT [48]

<i>Option</i>	<i>Description</i>
Map	Crée une grille régulière, structurée d'éléments hexaédriques.
Submap	Divise un volume non mappable en régions mappables et crée un réseau structuré d'éléments hexaédriques dans chaque région.
Tet Primitive	Divise un volume à quatre faces en quatre régions hexaédriques et crée un maillage mappé dans chaque région.
Cooper	Reproduit par un glissement le maillage des faces spécifiques appelées « source » à travers le volume.
Stairstep	Crée un maillage hexaédrique réguliers et un volume correspondant à facettes qui se rapproche de la forme du volume d'origine.
TGrid	Crée un maillage qui se compose principalement d'éléments tétraédriques mais qui peut également contenir des éléments hexaédriques, pyramidaux, et des éléments de coins.
Hex Core	Crée un noyau d'éléments hexaédriques réguliers entourés par des couches de transition des tétraédriques, pyramidaux.

Tableau IV.3. Les combinaisons permises des éléments pour chaque type de maillage [48]

Type (option)	Eléments (option)		
	Hex	Hex/Wedge	Tet/Hybrid
Map	x		
Submap	x		
Tet Primitive	x		
Cooper	x	x	
Stairstep	x		
TGrid			x
Hex Core			x

- **Le lisseur** (uniquement dans le cas du type Map) : Détermine le type d'algorithme de lissage utilisé pour lisser un maillage mappé au cours de l'opération de maillage.

2. l'inspection de la qualité du maillage

Elle permet de visualiser de manière interactive un maillage existant, de personnaliser les caractéristiques de son affichage et surtout d'examiner la qualité de nos mailles générées (voir user guide pour plus de détails).

La qualité de maillage est un facteur primordial dans la prise de décision de faire passer notre modèle à l'étape suivante de processing (simulation numérique), pour se faire, plusieurs coefficients analytiques permettent le calcul des coefficients appelés coefficients de qualité qui mesurent la déviation de nos mailles de la forme géométrique parfaite (hexaédrique, pyramidal, tétraédrique parfaite).

Tableau IV.4. Les différents coefficients de qualité existant en GAMBIT [48]

Coefficient de qualité	Eléments en 2D		Eléments en 3D			
	Quadrilatère	triangulaire	hexaédrique	triangulaire	pyramidal	Cunéiforme
Area	×	×				
Aspect Ratio	×	×	×	×	×	×
Diagonal Ratio	×		×			
Edge Ratio	×	×	×	×	×	×
EquiAngle Skew	×	×	×	×	×	×
EquiSize Skew	×	×	×	×	×	×
MidAngle Skew	×		×			
Size Change	×	×	×	×	×	×
Squish			×	×	×	×
Stretch	×		×			
Taper	×		×			
Volume			×	×	×	×
warpage	×					

c. Spécification du type des zones

Les spécifications du type de zone définissent les caractéristiques physiques et opérationnelles du modèle aux frontières et à l'intérieur des régions spécifiques de son domaine. Il existe deux classes de spécifications du type de zone :

- Types des zones frontières (limites),
- Types des zones continues.

Tableau IV.5. Les différents types de zones existant en GAMBIT [48]

Zone frontière	Zone frontière	Zone continue
Wall	Axis	fluid
Exhaust_Fan	Fan	Solid
Inlet_Vent	Intake_Fan	
Interface	Interior	
Internal	Mass_Flow_Inlet	
Outflow	Outlet_Vent	
Periodic	Porous_Jump	
Pressure_Far_Field	Pressure_Inlet	
Pressure_Outlet	Radiator	
Recirculation_Inlet	Recirculation_Outlet	
Symmetry	Velocity_Inlet	

d. Utilisation des outils de modélisation

GAMBIT procure aux utilisateurs certains outils qui leur donne accès à plusieurs opération concernant : le système de coordonnées, les fonctions de dimensionnement, la fonction Turbo, nettoyage des géométries importées et la fonction Plug-in.

- **Fonction de dimensionnement**

Les fonctions de dimensionnement permettent de contrôler la taille des intervalles de maillage pour les arrêtes (lignes) et la densité du maillage pour les faces et les volumes. Elles sont similaires aux couches limites dans la mesure où elles contrôlent les

caractéristiques du maillage en proximité des entités auxquelles elles sont attachées. Elles diffèrent des couches limites en ce qui concerne la manière selon laquelle elles sont définies et la manière dont elles contrôlent le maillage.

Pour créer une fonction de dimensionnement, on doit définir ces caractéristiques :

- *Le type* : détermine l'algorithme utilisé par la fonction de dimensionnement pour contrôler la taille de maille de l'élément (ligne).
- *Les entités* : détermine quelles entités géométriques sont utilisées en tant que *source* ou *attachement*.
- *Les paramètres* : définissent les caractéristiques exactes de la fonction de dimensionnement à savoir : la dimension de départ, facteur de grossissement et la dimension limite.

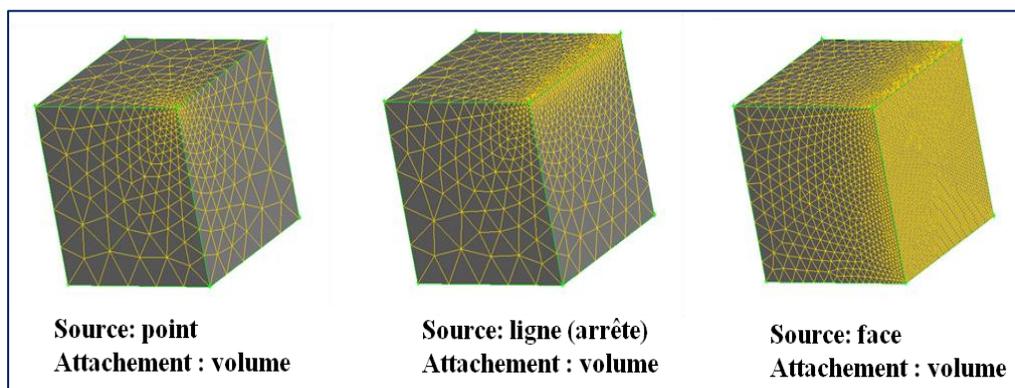


Figure IV.3. Les différents types de fonctions de dimensionnement en GAMBIT

IV.4. FLUENT (Processing et Post-processing)

IV.4.1. Introduction

FLUENT est un ensemble de programmes informatiques élaborés et destinés à la modélisation des écoulements de fluides et les différents phénomènes de transfert dans les géométries les plus complexes. FLUENT offre une flexibilité de maillage, y compris la capacité de résoudre les problèmes de flux en utilisant des maillages non structurés qui peuvent être générés sur des géométries complexes avec une facilité relative [49]. Les types de mailles pris en charge incluent : mailles 2D triangulaire / quadrilatérale, 3D tétraédrique / hexaédrique / pyramide / cunéiforme / polyédrique, et mixte (hybride).

FLUENT est écrit en langage C et fait plein usage de la flexibilité et la robustesse offertes par ce langage.

IV.4.2. Fonctionnalités du programme

Le solveur de FLUENT comprend un grand nombre fonctionnalités on en cite :

- Traiter les écoulements planaire 2D, axisymétrique 2D, axisymétrique 2D avec turbulence (symétrie de révolution) et les écoulements 3D.
- Traiter les problèmes aux maillages quadrilatérale, triangulaire, hexaédrique, tétraédrique, prismatique, pyramidal, polyédrique et les maillages mixtes.
- Traiter les écoulements stationnaires et transitoires.
- Traiter les écoulements compressibles et incompressibles dans tous les régimes de vitesse : un flux subsonique faible, transsonique, supersonique et hypersonique.
- Traiter les écoulements Newtonien et non Newtonien.
- Traiter le transfert de chaleur y compris la convection naturel, forcée et mixte, le transfert de chaleur conjugué (solide/fluide) et la radiation.
- Traiter le mélange des espèces chimiques et les réactions entre elles, y compris les modèles de combustion homogène et hétérogène et les modèles de réaction de déposition surfacique.
- Modèles de surface libre et de multiphase pour les écoulements gaz-liquide, gaz-solide et liquide-solide.
- Calcul de la trajectoire de Lagrange pour la phase dispersée (particules, gouttelettes, bulles), y compris le couplage avec la phase continue et la modélisation de pulvérisation.
- Modèle de changement de phase pour les applications de fusion/solidification.
- Sources volumétriques des espèces massiques, quantité de mouvement, de chaleur, et espèces chimiques.
- Base de données des propriétés des matériaux à employer.
- Capacité de personnalisation importante via des fonctions prédéfinies par l'utilisateur.

IV.4.2. Les étapes de la résolution d'un problème CFD par FLUENT

Une fois que la géométrie maillée, les étapes citées ci-dessous doivent être suivies pour garantir la réussite d'une simulation :

a. La définition des objectifs de la modélisation

- Comprends la définition des options de modélisation, les modèles physiques à inclure, hypothèses simplificatrices nécessaires, les hypothèses simplificatrices possibles et déterminer la possibilité d'inclure des fonctions prédéfinies
- Déterminer le degré de précision nécessaire et le type des conditions aux bords.

b. La configuration appropriée du solveur et des modèles physiques.

- Importer et vérifier la grille.
- Sélectionner le solveur.
- Sélectionner le modèle physique approprié (turbulence, combustion, multiphase...)
- Définir les propriétés des matériaux (fluide, solide, mélange).
- Prescrire les conditions opératoires et les conditions aux limites.
- Initier le calcul des solutions.
- Configurer les régulateurs de la solution ainsi que les moniteurs de convergence.

c. Le calcul et l'inspection des résultats.

- Les équations de conservation sont résolues itérativement : un certain nombre d'itérations est nécessaire pour atteindre une solution qui converge.
- La convergence est atteinte lorsque le changement de la solution d'une itération à une autre est négligeable ou bien on atteint les propriétés de conservation globale.
- La précision d'une solution convergée dépend de l'adéquation et la précision des modèles physiques, la résolution de la grille et la configuration du problème global.

d. L'étude et l'enregistrement des résultats.

- Des outils de visualisation graphique peuvent être utilisés détecter des anomalies.
- Des outils de rapports numériques peuvent être utilisés pour calculer les résultats quantitatifs (forces, moments, quantités intégrées sur une surface ou un volume, bilan de l'écoulement...).

e. La révision des paramètres numériques ou physiques du modèle.

Une fois la solution est convergée, les modèles physiques employés doivent être vérifiés en terme d'adéquation (existence des effets de turbulence, de permanence, de compressibilité, de 3D), d'exactitude et de convenance des conditions limites et d'adaptation du maillage au problème résolu

CHAPITRE V : MODELISATION DES PHENOMENES DE TRANSFERT DE MASSE EN VMD

V.1. Introduction

La Distillation Membranaire sous Vide (VMD) reçoit plus d'attention [27, 31, 43] puisqu'elle se montre prometteuse dans de diverses applications annexant la séparation des solutions aqueuses et l'élimination des gaz et des composés organiques volatiles de l'eau. La VMD présente plusieurs avantages dans le dessalement de l'eau de mer [30, 45], et elle est peu concernée par le problème de la polarisation de température à la surface membranaire. Tang et al [36] ont mené des expériences VMD par des membranes en PVDF en fibres creuses pour séparer NaCl à partir des solutions aqueuses, ils suggèrent que la VMD est une alternative viable pour le traitement des saumures de haute salinité. Par ailleurs les pertes de chaleur par conduction à travers la membrane sont considérablement réduites et dans certains cas négligeables. Cependant le risque de mouillage des pores reste important en VMD [30].

V.2. Etat de l'art de la modélisation en VMD

L'analyse et la modélisation de la distillation membranaire sont toujours en développement intensif et des efforts sont déployés en vue d'une utilisation efficace de la VMD dans le dessalement [30, 50]. Des études expérimentales ont été menées et des modèles ont été établis pour déterminer les paramètres les plus importants qui pourront affecter les modules membranaires en VMD, le flux de perméation et l'énergie consommée [45]. La sensibilité du procédé pour une membrane donnée est communément liée à la température du fluide d'alimentation, la pression du vide appliquée et la concentration en soluté dans le fluide d'alimentation.

Le modèle du gaz poussiéreux (the Dusty Gaz Model), établi pour la description du transfert de masse dans les milieux poreux [51, 52] est utilisé pour estimer le flux de perméation à travers les membranes en MD. Soni et al [44] ont développé un modèle mathématique pour décrire les phénomènes de transport en VMD tout en considérant la dépendance de la température des propriétés physiques du fluide, les résultats expérimentaux et de la modélisation montrent que le flux de perméat augmente lorsque la

pression du vide décroît (vide poussé) aussi bien que lorsque le débit du fluide d'alimentation est augmenté. Banat et al [27] ont réalisé une analyse de sensibilité vis-à-vis des conditions opératoires, les auteurs ont montré que le transfert de masse à travers la membrane est très sensible à la température d'alimentation et plus particulièrement à des vides plus poussés alors qu'il est plus sensible à la pression du vide lorsque de faibles températures d'alimentation sont utilisées. Dans une approche similaire, Upadhyaya et al [53] ont mené une étude de sensibilité du procédé de dessalement par VMD, le flux massique est remarquablement affecté (épaisseur, tortuosité, porosité, diamètre du pore), tandis qu'il reste sensible à la pression du vide et la température d'alimentation. De manière analogue, Cabassud et Wirth [45] ont souligné l'effet important de la perméabilité de la membrane et la possibilité de la compétitivité énergétique de la VMD par rapport à la OI à condition qu'une membrane adéquate soit choisie.

V.3. La diffusion Knudsen en VMD

L'écoulement à travers des pores longs et fins est généralement classifié en différentes catégories tout dépend des conditions opératoires. A des pressions relativement élevées, où le milieu est considéré continu, les collisions molécules-molécules dominant et l'écoulement est décrit par la diffusion moléculaire ordinaire. En effet, une molécule en déplacement à travers un tube est plus susceptible d'heurter une autre molécule que les parois latérales de tube. Avec la diminution de la pression les collisions molécules-parois deviennent plus fréquentes et l'écoulement est considéré transitionnel et sera décrit par la combinaison de la diffusion moléculaire ordinaire et la diffusion Knudsen. Lorsque le milieu devient raréfié, les collisions molécules-parois du pore dominant, et la diffusion Knudsen prend place.

Le nombre de Knudsen K_n permet la détermination du régime prévalant. Il est souvent exprimé comme étant le rapport entre le parcours libre moyen d'une molécule transférée (λ) et la longueur caractéristique du milieu, souvent assimilée en MD au diamètre du pore.

$$K_n = \frac{\lambda}{d_p} \dots \dots \dots (V. 1)$$

Où le parcours libre moyen est toujours exprimé de la sorte [54] :

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} (\pi d^2) n_m} \dots \dots \dots (V. 2)$$

Avec

σ : Le diamètre de collision,

n_m : Le nombre de molécules

En utilisant la loi des gaz parfait, l'équation (V.2) se présentera comme suit :

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} (\pi \sigma^2) P} \dots \dots \dots (V. 3)$$

En MD, l'application de la pression moyenne P_{avg} et la température moyenne T_{avg} entre les deux cotés du pore de la membrane (le coté d'alimentation et le coté perméat) a été utilisée [3]. Le nombre de Knudsen est simplement exprimé comme suit :

$$K_n = \frac{k_b T_{avg}}{\sqrt{2} (\pi \sigma^2) P_{avg} d_p} \dots \dots \dots (V. 4)$$

Les valeurs de K_n supérieures à 10 indiquent un mécanisme Knudsen de diffusion, alors que pour des valeurs inférieures à 0,01 le mécanisme de diffusion classique domine. Par conséquent, un large régime de transition existe entre les deux extrémités citées où les deux régimes contribuent à la fois dans le transport des espèces [3].

Le développement des modèles prédictifs en VMD est un processus continu. La prédiction des flux de perméabilité d'une espèce s est généralement approchée par la résolution de la forme différentielle de la diffusion de Knudsen [51].

$$\mathfrak{J} = -\frac{4}{3} K \bar{v}_s \nabla C_s \dots \dots \dots (V. 5)$$

Avec

\bar{v}_s : La vitesse moléculaire moyenne de l'espèce s donnée par l'équation suivante

$$\bar{v}_s = \sqrt{\frac{8R_g T}{\pi M_s}}$$

K : Le coefficient de perméabilité dont l'unité est en (m), et qui dépend uniquement de la géométrie du pore et la loi de diffusion surfacique des gaz, il est souvent

mesuré expérimentalement mais rarement déterminé par précision [51]. Pour des pores cylindriques et une diffusion dispersive, K est assumé à $R/2$ avec R est le rayon du pore.

C_s : La concentration de l'espèce s (mol.m^3).

La correction du coefficient de diffusion par la porosité (ε), le facteur de tortuosité (χ) et en utilisant la loi des gaz parfait nous amène à la forme suivante de l'équation (V.5)

$$\mathfrak{J} = -\frac{2R\varepsilon}{3\chi} \sqrt{\frac{8}{\pi R_g T M_s}} \nabla P_s \dots \dots \dots (V.6)$$

Une approximation linéaire du gradient de la pression partielle sur toute la longueur L du pore et la multiplication par la masse moléculaire donne lieu au flux massique J_s ($\text{kg/m}^2.\text{s}$) de l'espèce s :

$$J_s = -\frac{2R\varepsilon}{3L\chi} \sqrt{\frac{8M_s}{\pi R_g T}} \Delta P_s \dots \dots \dots (V.7)$$

Bien que les valeurs du facteur porosité / tortuosité sont à préciser, l'équation (V.7) est souvent utilisée pour la prédiction des flux de perméabilité sans connaissance explicite de la géométrie des pores de la membrane.

Toutefois, et dans le présent travail, l'aptitude des simulations à l'échelle de pore pour la prédiction des données expérimentales est appréciée. Les calculs sur toute la longueur du pore, et dont l'approche est détaillée dans ce qui suit, sont réalisés par l'intégration des flux des espèces venant de l'interface liquide-vapeur et la sommation de la contribution de la réémission résultant des collisions avec les parois intérieurs du pore.

V.4. Le développement du modèle balistique

Depuis les premiers travaux de Knudsen [55], plusieurs travaux de recherche sont destinés à l'étude de l'écoulement dans les milieux raréfiés. Steckelmacher [56] présente l'évolution des modèles de flux sur soixante-quinze ans, fournissant une analyse et une comparaison des différentes avancées dans le domaine, y compris ceux de Knudsen, Smoluchowski, Langmuir, Clausing...L'intérêt principal est clairement la prédiction du flux d'espèces quittant le tube ou le capillaire et plutôt l'évaluation de la contribution

directe de l'entrée du pore et la contribution indirecte résultant des différentes collisions avec les parois latérales du pore. La fraction des espèces quittant le tube est souvent reliée à la probabilité de transmission ou bien le facteur de Clausing faisant référence à Clausing [57] qui a initialement abordé le problème.

Shi et al [58] ont souligné récemment que Clausing a développé une équation intégrale afin de calculer la contribution indirecte mais a échoué de prédire la limite asymptotique où la longueur du pore devient suffisamment plus large que le diamètre. Les auteurs présentent une analyse comparative de Knudsen [55], Walsh [59], Pollard [60] et leurs travaux respectifs pour développer une approche analytique cohérente avec un comportement asymptotique observé pour les très longs et les très courts tubes. Ils ont présenté une expression analytique pour la contribution indirecte avec comparaison à des simulations Monte Carlo. A ce stade, des expressions analytiques précises concernant les probabilités de transmission pour des tubes cylindriques, coniques et aussi bombés sont disponibles [57].

Toutefois, des approches numériques sont requises pour investiguer l'effet des structures des pores plus complexes sur le transport des espèces. Bien que des simulations Monte Carlo ont été largement utilisées pour simuler l'écoulement Knudsen [58, 61, 62], le transport balistique a également été entrepris par l'intégration directe des flux d'espèces. L'approche a été particulièrement utilisée pour prédire le transport avec des mécanismes réactionnels surfaciques survenant dans des éléments de taille micro/nano rencontrés en procédés de semi-conducteurs [63, 64]. La plupart des applications se sont focalisées sur le pore lui même avec des ratios d'aspect relativement modérés, même si les avancées récentes de modélisation valident les implémentations pour des ratios d'aspect de 100 [65]. Mais, l'approche n'est pas encore mise en œuvre pour les applications de DM.

Dans le présent travail, la contribution directe de la probabilité de transmission est estimée par l'intégration des flux d'espèces à partir de l'entrée du pore et une procédure itérative est utilisée pour estimer la contribution indirecte résultant des collisions molécules-parois latérales. L'approche présente plusieurs avantages, notamment la possibilité de traiter des géométries complexes et aidera d'une façon approfondie l'analyse de l'effet de la structure du pore sur les performances de la VMD.

V.4.1. Hypothèses d'établissement du modèle

L'implémentation du modèle d'écoulement sans collisions implique les hypothèses suivantes :

- Les espèces quittant le ménisque à l'entrée du pore ont une distribution Maxwellienne ;
- Pas de diffusion de surface des espèces au niveau des parois latérales du pore. Dans le cas de la VMD, les membranes sont hydrophobes et la diffusion de surface de l'eau n'est effectivement pas susceptible de se produire ;
- Les espèces réfléchies diffusent à partir des surfaces intérieures des pores ;
- Les espèces qui s'échappent de l'interface liquide-vapeur entrent en collision avec les parois latérales des pores et finissent par quitter le pore. On suppose qu'aucune espèce n'entre dans les pores du côté perméat.

V.4.2. Les conditions aux limites

Puisque il s'agit des pressions modérées qui sont appliquées du coté d'alimentation, un ménisque d'eau est formé à l'entrée du pore à cause de la nature hydrophobe de la membrane. Durant le procédé de distillation, les molécules d'eau s'échappent du liquide à cause des conditions de non équilibre provoquées par la différence de température et de pression entre les deux cotés de la membrane (alimentation et perméat) (voir figure V.1)

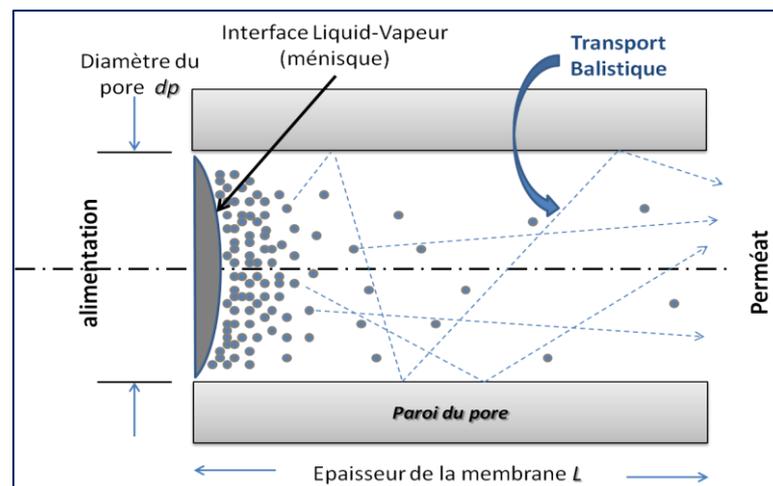


Figure V.1. Principe de transport balistique dans le pore en VMD

Dans le présent modèle, l'interface liquide-vapeur est supposée se comporter comme une source uniforme de molécules entrant dans le pore avec une distribution

Maxwellienne. Le flux massique net J^{top} des espèces s en évaporation/condensation à l'interface est donné par l'équation Hertz-Knudsen-Schrage [66] :

$$J^{top} = \frac{2}{2 - K_c} \sqrt{\frac{M_s}{2\pi R_g}} \left(K_c \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} - K_e \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \right) \dots \dots \dots (V.8)$$

K_c : Le coefficient de condensation,

K_e : Le coefficient d'évaporation,

T_v : La température de la vapeur (K),

T_l : La température du liquide, prise dans ce travail comme étant la température du fluide d'alimentation (K),

P_v : La pression de la vapeur (Pa), prise dans ce travail comme étant la pression du vide appliqué,

P_l : La pression du liquide (Pa), prise comme étant la pression de vapeur saturante régnant à l'interface vapeur-liquide. Elle est toujours estimée par le biais de l'équation d'Antoine dont l'expression :

$$P_l = \exp \left(a - \frac{b}{T - c} \right) \dots \dots \dots (V.9)$$

Inversement, si la pression de vapeur saturée est connue, la température pourra être calculée en utilisant l'équation (10)

$$T = c - \frac{b}{\ln(P) - a} \dots \dots \dots (V.10)$$

Pour l'eau, les coefficients sont :

$$a = 23.1964, b = 3816.44, c = 46.13 [3].$$

V.4.3. Les lignes principales du modèle

L'approche du transport balistique est essentiellement basée sur l'évaluation directe des intégrales des flux des espèces. Si on considère un pore cylindrique ouvert d'un côté et soumis à une faible pression de l'autre côté, la tâche sera d'estimer la quantité des espèces entrant par l'ouverture puis s'écoulant à travers le pore. Initialement, Patterson [67] a

développé l'approche pour les figures ouvertes, ce qui va inspirer par la suite Cale et Raupp [64] à développer la même approche pour les figures fermées.

Le transport balistique prévoit une faible fréquence de collisions molécules-molécules et souvent une diffusion par réflexion des particules à partir des surfaces. Le modèle est essentiellement basé sur une relation entre le flux des particules tapant un site donné comme un résultat d'un autre flux de particules quittant un autre site sachant que les deux sites sont visibles entre eux dans l'espace.

Dans le but d'illustrer le concept, considérant deux surfaces élémentaires dA et dA' dont les centres sont séparés par une distance donnée (voir figure V.2). Soit \vec{n}_A , $\vec{n}_{A'}$ les normales aux surfaces dA et dA' respectivement. Le flux arrivant (incoming) dJ_A^I à la surface différentielle dA est le produit du flux $J_{A'}^L$, quittant (leaving) la surface différentielle dA' par la probabilité de transmission $\alpha_{AA'}$, entre les deux surfaces c'est-à-dire :

$$J_A^I = \int_{A'} J_{A'}^L \alpha_{AA'} dA' \dots \dots \dots (V.11)$$

Où les exposants I et L font référence aux flux arrivant et quittant une surface donnée.

La probabilité de transmission $\alpha_{AA'}$ est donnée par l'expression suivante [64, 68] :

$$\alpha_{AA'} = \Psi_{AA'} \frac{\cos(\vec{n}_A, \overrightarrow{AA'}) \cos(\vec{n}_{A'}, \overrightarrow{A'A})}{\pi \|\overrightarrow{AA'}\|^2} \dots \dots \dots (V.12)$$

Où $\Psi_{AA'}$ représente le facteur de visibilité et prend la valeur de 0 si les surfaces différentielles ne sont pas visibles entre eux et 1 si elles le sont.

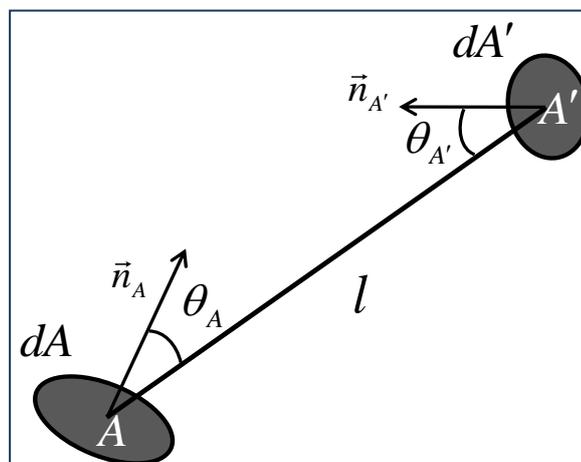


Figure V.2. Probabilité de transmission et angles de vue

Dans une application VMD avec une géométrie cylindrique idéale, après que les espèces s'échappent de la phase liquide, elles se déplacent vers la sortie du pore par une succession de collisions avec les parois internes du pore. Le flux massique supposé émis par diffusion à l'entrée du pore est donnée par l'équation (V.8), tandis que la surface interne, de l'entrée jusqu'à la sortie du pore, reçoit seulement une portion de ce flux, cela est dû à la diminution des angles de vue par rapport à l'entrée du pore. Le flux des espèces quittant l'ouverture du pore et heurtant sa paroi interne à une position i peut être exprimé par l'équation (V.13) similairement à [64].

$$J|_i^0 = \pi R^2 \alpha_{sw} J^{top} \dots \dots \dots (V.13)$$

Où α_{sw} est la probabilité de transmission entre l'entrée du pore et la paroi interne.

Par analogie, le flux des espèces qui traversent la sortie du pore à une certaine location i est donné par [64] :

$$J|_i^0 = \pi R^2 \alpha_{sb} J^{top} \dots \dots \dots (V.14)$$

Où α_{sb} est la probabilité de transmission entre l'entrée du pore et sa base (sortie)

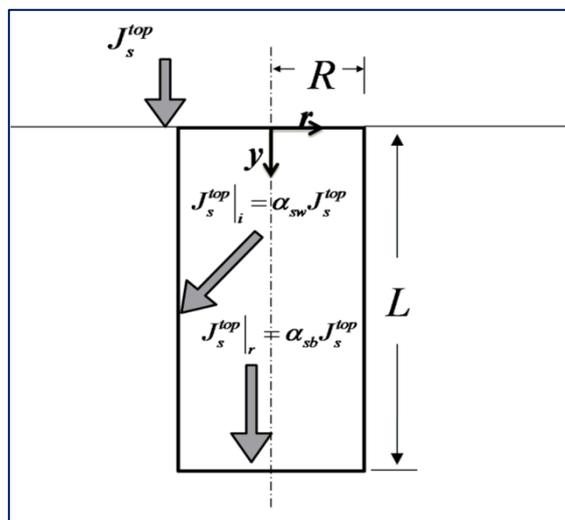


Figure V.3. Probabilité de transmission directe et indirecte

Le flux frappant les parois dans un second impact est la contribution de toutes les particules quittant la surface interne après le premier impact, menant à :

$$J|_i^1 = \int_{l_{wall}} 2\pi R J|_{wall}^0 \alpha_{ww} dl_{wall} \dots \dots \dots (V.15)$$

Où α_{ww} est la probabilité de transmission entre les sites (locations) sur les parois.

Une équation analogue peut être écrite pour le troisième impact :

$$J|_i^2 = \int_{l_{wall}} 2\pi R J|_{wall}^1 \alpha_{ww} dl_{wall} \dots \dots \dots (V.16)$$

Ce qui nous mène à la relation de récurrence ci-dessous :

$$J|_i^{nb+1} = \int_{l_{wall}} 2\pi R J|_{wall}^{nb} \alpha_{ww} dl_{wall} \dots \dots \dots (V.17)$$

Par analogie, une relation de récurrence est obtenue pour les espèces s'échappant de la sortie du pore après un nb impact.

$$J|_i^{nb+1} = \int_{l_{wall}} 2\pi R J|_{wall}^{nb} \alpha_{wb} dl_{wall} \dots \dots \dots (V.18)$$

Où α_{wb} est la probabilité de transmission entre les parois et la sortie du pore.

Le flux total résultant sortant du pore est obtenu par la sommation de toutes les équations intégrales pendant toute l'histoire des collisions.

L'approche a été formulée dans une *forme discrète* pour une implémentation numérique.

Considérant un pore cylindrique de rayon R et de longueur L et dont les parois et la sortie ont été discrétisées en un ensemble de segments (voir figure V.4), le pore est ainsi représenté par un modèle axisymétrique où les expressions analytiques des probabilités de transmission sont données par l'équation (V.12) et qui sont disponibles en coordonnées locales du système [64, 69]. Les équations (V.19) et (V.20) procurent la fraction α_{sw} du flux qui entre en collision avec les parois du pore à une profondeur y et la fraction α_{sb} qui traverse la sortie du pore à n'importe quelle position radiale r :

$$\alpha_{sw} = \frac{1}{4\pi R^3} \left[\sqrt{y^2 + 4R^2} + \frac{y^2}{\sqrt{y^2 + 4R^2}} - 2y \right] \dots \dots \dots (V.19)$$

$$\alpha_{sb} = \frac{1}{4\pi R^2} \left[1 - \frac{r^2 + L^2 - R^2}{\sqrt{(r^2 + L^2 - R^2)^2 + 4L^2 R^2}} \right] \dots \dots \dots (V.20)$$

A noter que pour les pores cylindriques idéaux, tous les facteurs de visibilité Ψ sont égaux à 1.

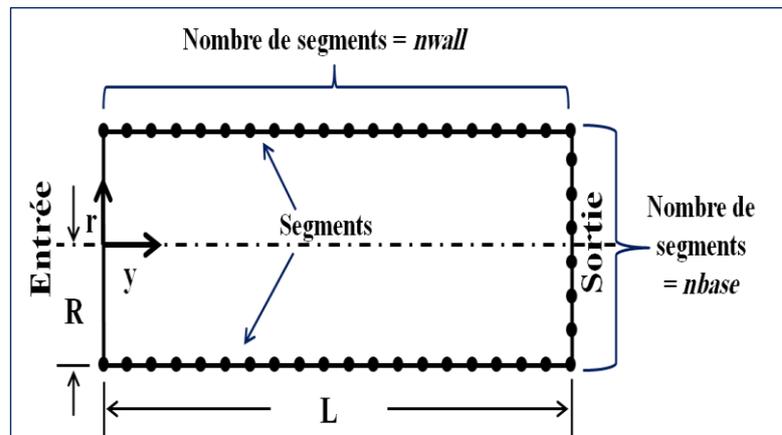


Figure V.4. Schéma de discrétisation du pore

Pour un ratio d'aspect de 5, on peut facilement vérifier par le biais de l'équation (V.19) que la fraction du flux à la sortie du pore est déjà plus faible de trois ordres de grandeur que celui à l'entrée. Par conséquent, la fraction la plus élevée qui doit contribuer par un mécanisme de réémission est supposée émaner des surfaces internes proches de l'entrée du pore.

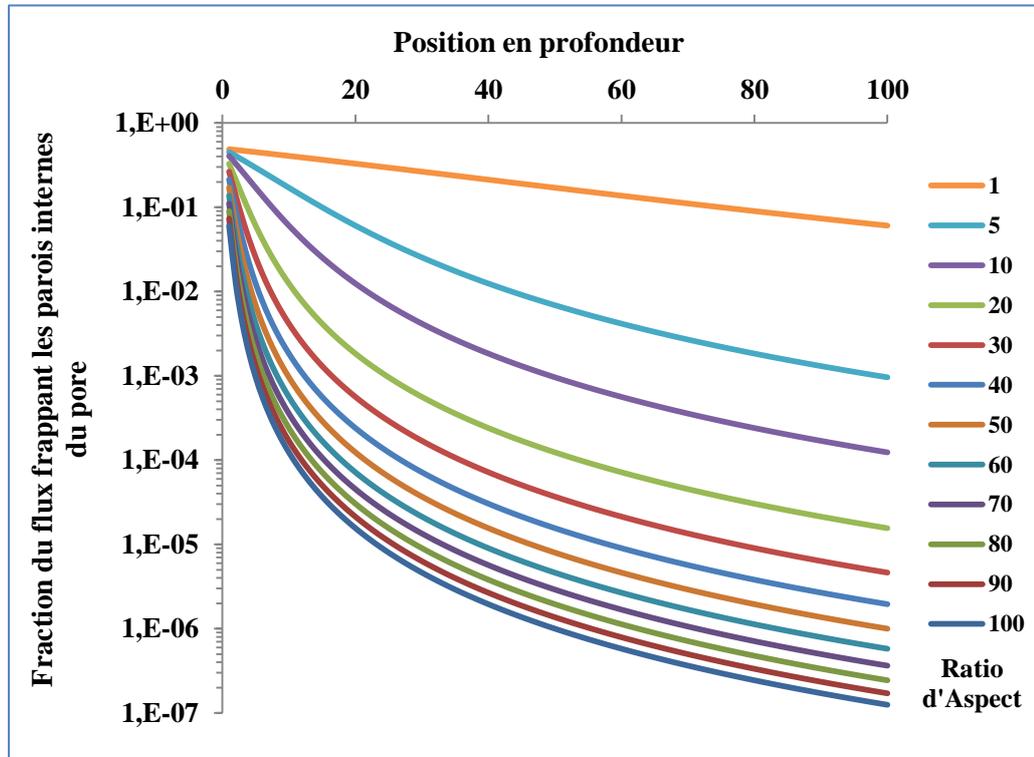


Figure V.5. Variation de la Fraction du flux frappant les parois internes du pore en fonction de la position en profondeur pour différents ratios d'aspect

Par analogie aux parois du pore, l'équation (V.20) montre qu'un flux négligeable traverse le pore avec l'augmentation du ratio d'aspect (une chute de trois ordres de grandeur pour un ratio d'aspect de 20). Ainsi, la contribution directe du flux est supposée être insignifiante pour les pores avec des ratios d'aspect trop élevés.

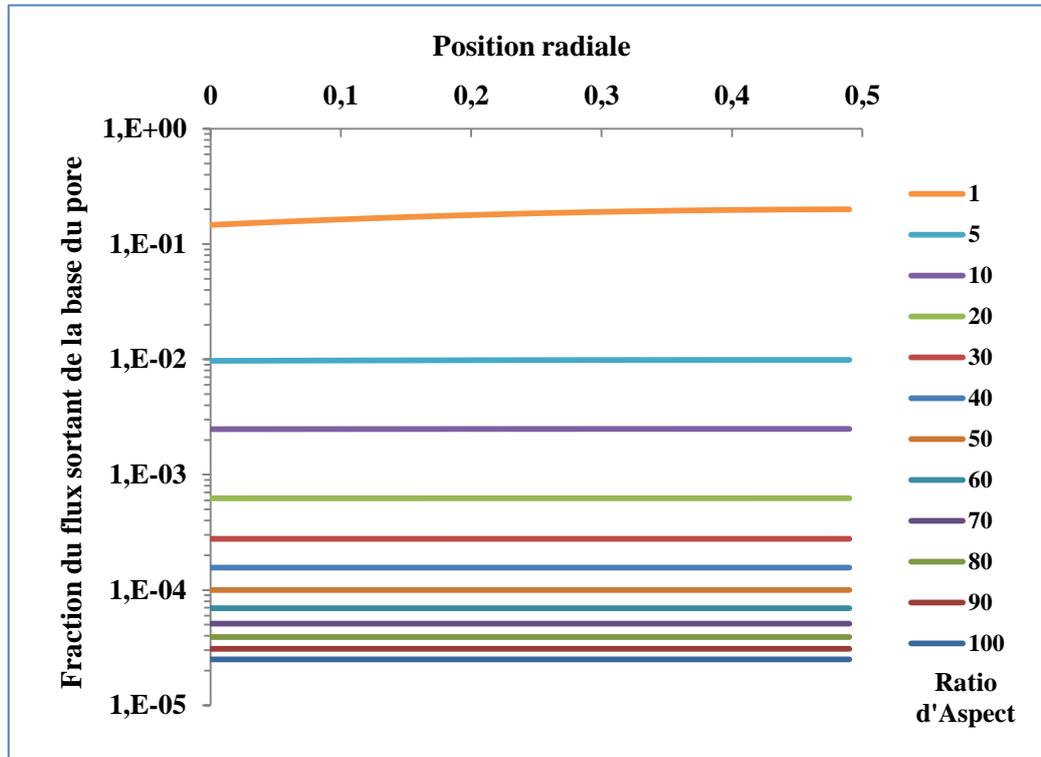


Figure V.6. Variation de la Fraction du flux sortant du pore en fonction de la position radiale pour différents ratios d'aspect

Les points de control des flux sont localisés au centre des segments et la forme discrète des relations de récurrence (V.17) et (V.18) peut être écrite comme suit pour tous les segments de la paroi et de la base de pore :

$$J|_i^{nb+1} = 2\pi R \sum_{j=1}^{nwall} \left[J|_j^{nb} \sum_{k=1}^m c_k \alpha_{ww} \Delta l_j \right] \dots \dots \dots (V. 21)$$

$$J|_i^{nb+1} = 2\pi R \sum_{j=1}^{nwall} \left[J|_j^{nb} \sum_{k=1}^m c_k \alpha_{wb} \Delta l_j \right] \dots \dots \dots (V. 22)$$

A noter que c_k sont les coefficients d'intégration qui correspondent à n'importe quelle méthode numérique d'intégration (trapézoïdal, Simpson...) et m est le nombre des intervalles d'intégration.

La probabilité de transmission entre chaque couple de segments est évaluée. Pour un pore cylindrique, la probabilité de transmission α_{ww} entre deux points i et j localisés sur la paroi à des positions y_i et y_j respectivement, est donnée par [64] :

$$\alpha_{ww} = \frac{1}{8\pi R^2} \left(2 - \frac{3|y_i - y_j|}{\sqrt{(y_i - y_j)^2 + 4R^2}} + \frac{|y_i - y_j|^3}{\sqrt{((y_i - y_j)^2 + 4R^2)^3}} \right) \dots \dots \dots (V.23)$$

Tandis que la probabilité de transmission α_{wb} entre un point i à une position y sur la paroi et un point j à une position radiale r sur la sortie du pore est donnée par [64] :

$$\alpha_{wb} = \frac{(L - y)R}{\pi} \left(\frac{((L - y)^2 + R^2 - r^2)}{\sqrt{(((L - y)^2 + R^2 - r^2)^2 - 4R^2r^2)^3}} \right) \dots \dots \dots (V.24)$$

V.4.4. Le modèle de réémission

Lorsque les espèces quittent l'interface liquide-vapeur, une fraction α_{sb} des molécules sort de la base du pore sans entrer en collision avec la paroi intérieure. Cette fraction est souvent appelée la probabilité de transmission directe [58]. Tel qu'illustré dans la figure V.1, le reste des espèces se déplacent vers la sortie des pores par des collisions successives avec les parois latérales.

En outre, la nature des collisions est souvent supposée suivre une réémission suivant la loi en cosinus. L'hypothèse a été discutée par Steckelmacher [56], qui a souligné des cas connus où une déviation par rapport à la loi du cosinus est observée. Ceux-ci incluent la réflexion à partir des monocristaux ou la survenance d'interaction chimique avec la surface réémettant, ce qui n'est pas le cas pour les membranes utilisées en VMD.

Par conséquent, la loi en cosinus de la diffusion par réflexion est adoptée dans la suite de notre travail. L'utilisation d'une telle distribution implique la supposition d'un équilibre thermique régnant dans le pore. Il s'agit d'une supposition majeure puisque ce n'est pas le cas en VMD où la différence de température entre les deux côtés de la membrane (alimentation et perméat) qui entraîne la distillation, qui est ensuite rehaussée par une pression relativement plus faible sur le côté perméat.

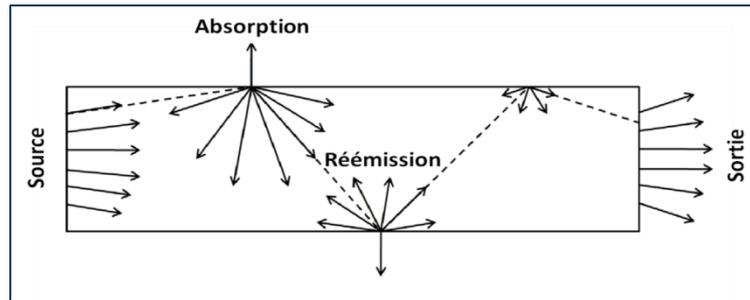


Figure V.7. Schéma du modèle de réémission

Notre objectif est de déterminer le flux total sortant du pore en se basant sur les équations intégrales développées dans la section V.4.3, Nous suivons une procédure itérative pour résoudre les équations intégrales telle que développée par Sethian et Adalsteinsson [68, 70]. Les flux seront exprimés en termes de quantité absorbée au niveau de chaque segment et quantité réfléchi après chaque rebond au lieu des flux entrant et sortant. Il est clair qu'en VMD, les parois latérales reflètent toutes les espèces frappants et par conséquent présentent une absorption zéro tandis que la sortie des pores ne reflète pas et donc absorbe toutes les espèces qui arrivent.

Le flux $J^A|_i^0$ des espèces s absorbées au niveau d'un segment i donné lors de la première frappe est :

$$J^A|_i^0 = \kappa J^0|_i \dots \dots \dots (V.25)$$

$J^0|_i$: est donné par les équations (V.13) et (V.14), selon la localisation du segment i (les parois ou la sortie du pore)

κ : Coefficient entre 0 et 1, définit la fraction des espèces absorbées au niveau du segment i . Il est clair que κ est égal à 0 à n'importe quel segment appartenant aux parois du pore (une réflexion totale à partir des parois du pore) et égal à 1 à la sortie du pore (pas d'espèces s'écoulant dans le domaine une fois sorties du pore).

Après la première collision, le flux $J^R|_i^0$ réfléchi par le segment i est exprimé :

$$J^R|_i^0 = (1 - \kappa) J^0|_i \dots \dots \dots (V.26)$$

Le segment i recevra une quantité donnée des espèces réfléchies par les autres portions visibles de la surface. Cette quantité dépend de la probabilité de transmission entre le segment i et les autres segments de la surface. La quantité réfléchi $J^R|_i^1$ par le segment i après le second rebond peut être exprimée comme suit :

$$J^R|_i^1 = (1 - \kappa) \left(2\pi R \sum_{j=1}^n J^R|_j^0 \sum_{k=1}^m c_k \alpha_{ij} \Delta l_j \right) \dots \dots \dots (V.27)$$

Où n représente le nombre total de segments.

A noter que la somme dans l'équation (V.27) exclut le segment i puisqu'il ne pourra pas réémettre des espèces sur lui-même.

Pour tous les segments, l'équation (V.27) peut être écrite sous forme matricielle :

$$J^R|_i^1 = (1 - \kappa) A J^R|_i^0 \dots \dots \dots (V.28)$$

Avec A est la matrice de probabilité de transmission dont la forme générale est la suivante :

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & & \\ \cdot & & \cdot & & \\ \cdot & & & \cdot & \\ a_{n1} & & & & a_{nn} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (V.29)$$

Les coefficients a_{ij} sont données par :

$$a_{ij} = 2\pi R \sum_{k=1}^m c_k \alpha_{ij} \Delta l_j \dots \dots \dots (V.30)$$

Avec α_{ij} est donné par l'équation (V.23) ou l'équation (V.24) tout dépend de la position des segments i et j (paroi latérale ou bien la sortie du pore).

L'équation (V.28) est valable pour tous les rebonds successifs, ce qui conduit à la relation itérative suivante :

$$J^R|_i^{nb+1} = (1 - \kappa) A J^R|_i^{nb} \dots \dots \dots (V.31)$$

Avec nb est le nombre de rebonds.

Afin d'assurer la conservation de masse, l'équation ci-dessous doit être vérifiée à chaque rebond :

$$(1 - \kappa) J^A|_i^{nb} = \kappa J^R|_i^{nb} \dots \dots \dots (V.32)$$

Ce qui conduit à l'expression itérative pour le flux des espèces absorbées à un certain nombre de rebonds $nb + 1$:

$$J^A|^{nb+1} = (1 - \kappa) A J^A|^{nb} \dots \dots \dots (V.33)$$

La différence entre deux itérations successives $J^A|^{nb+1}$ et $J^A|^{nb}$ peut être utilisée comme un critère d'arrêt de la procédure des collisions itératives.

Dans ce cas, la somme de l'erreur relative à chaque segment est comparée à une certaine précision désirée, à savoir :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|J^A|_i^{nb+1} - J^A|_i^{nb}|}{|J^A|_i^{nb}|} < \zeta \dots \dots \dots (V.34)$$

Où ζ dénote la précision.

V.5. Implémentation numérique

L'intégration directe du flux au niveau du pore peut être coûteuse, de ce fait et pour des simulations efficaces, une implémentation numérique appropriée est essentielle. Etant donné un flux d'entrée, l'algorithme simplifié suivant est implémenté avec toutes les intégrations de flux qui sont effectuées en utilisant la règle de Simpson.

1. Construire la géométrie cylindrique du pore : la construction d'une géométrie axisymétrique du pore est triviale, sa discrétisation est cruciale. Plus la surface de discrétisation est fine, plus le nombre de segment résultant est grand et par conséquent les simulations nécessitent un temps d'exécution irréaliste. Dans le but de bien choisir la subdivision appropriée, plusieurs simulations ont été effectuées sur des pores à différents ratios d'aspect. Un diamètre du pore unitaire qui sera augmenté par la suite est utilisé. Un segment de taille 0,01 est sélectionné, en dessous de laquelle aucun changement important dans les résultats des simulations, et en particulier le flux quittant les pores n'a été observé.
2. Estimer les coefficients non nuls de la matrice des probabilités de transmission par le biais des équations (V.30), (V.23) et (V.24) : afin de minimiser le temps de calcul et la taille mémoire dédiée durant l'exécution du programme. Les calculs sont réalisés sur une plate-forme 64 bits, où 8 TB de données allouées dynamiquement sont permis. Donc, la probabilité de transmission non-zéro est calculée et enregistrée dans un seul vecteur.
3. Calculer le flux absorbé aussi que le flux réfléchi après le premier rebond : le flux absorbé résultant après la première frappe à n'importe quel segment est directement

donnée par l'équation (V.25) alors que la fraction de la source du flux entrant est donnée par les équations (V.13) et (V.14) pour les segments situés sur les parois latérales et la base du pore respectivement. Le flux réfléchi après le premier rebond est déduit à partir de l'équation (V.26).

4. Boucle pour assurer l'équilibre de masse dans le pore :

- Pour chaque segment, on somme les flux réémis par les autres segments visibles (les valeurs initiales des flux réfléchis sont calculées dans l'étape 3) pondérés par les probabilités de transmission comme indiqué dans l'équation (V.31).
- Calculer les flux absorbés en chaque segment en utilisant l'équation (V.32). Il est rappelé que dans la VMD la sortie du pore "absorbe" tout le flux frappant à chaque rebond alors que les parois latérales du pore reflètent tous les flux à chaque rebond. Si la différence entre les flux absorbés à deux rebonds successifs devient négligeable comparée à une précision donnée comme mentionné dans l'équation (V.34), le calcul se termine.
- Calculer les nouvelles valeurs des flux réémis en utilisant l'équation (V.31) et exécuter la boucle 4 à nouveau.

En vue d'accélérer les calculs, toutes les boucles sont parallélisées avec OpenMP et donc exécutés dans plusieurs parties, les simulations sont effectuées sur un CPU Intel Core i5-2430M avec une vitesse maximale d'horloge de 2.40 GHz et une RAM de 4GB.

Des tests ont été aussi effectués pour évaluer la mémoire utilisée lors des computations. La figure V.8 représente l'évolution de la mémoire allouée en fonction du ratio d'aspect du pore. Pour des ratios d'aspect de 10, 50, 100, 150 une mémoire utilisée approximative de 40, 230, 830, 1810 sera allouée.

Toutefois, on constate qu'on ne peut pas dépasser avec la machine utilisée (4GB de RAM) un ratio d'aspect de 200. À moins que les probabilités de transmission soient recalculées à chaque pas de temps, ce qui conduit à des temps de calcul irréalistes.

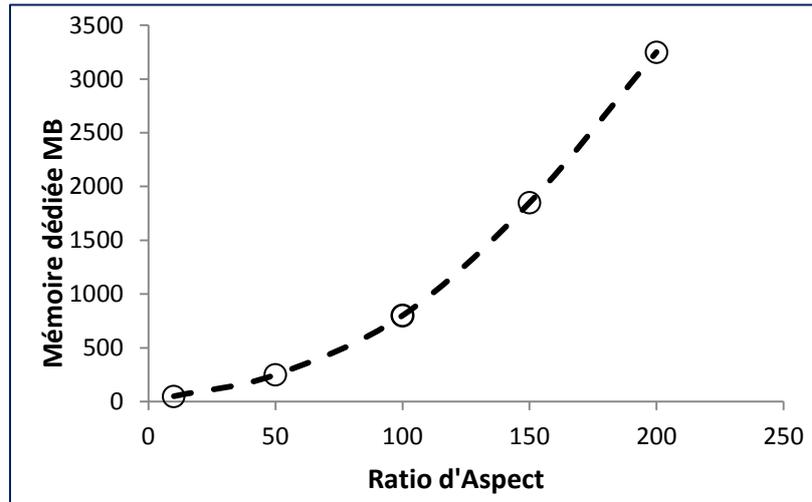


Figure V.8. Variation de la mémoire allouée en fonction du ratio d'aspect

V.6. Résultats des simulations de l'écoulement sans collisions

Les conditions opératoires typiques dans un procédé VMD comportent des pressions entre 1000 et 3000 Pa et des températures allant de 285 et 315 K. Avec un diamètre de pore aussi faible que 0,2 μm , les parcours libres moyens indiquent souvent des régimes de diffusion en Knudsen. Le procédé VMD fait appel à des membranes de diverses caractéristiques où le ratio d'aspect peut varier de 150 [44] jusqu'à 1000 [26].

Pour cette raison, les simulations de l'écoulement sans collisions doivent être réalisées sur un domaine de ratio d'aspect large.

Pour toutes les simulations, un flux unité adimensionnel est supposé. Lors de convergence, le flux moyen sortant du pore est évalué. Le flux sortant peut être directement pris en fraction β (%) du flux d'entrée puisque un flux unitaire est utilisé. Il est obtenu par la sommation des flux sortants du centre de chaque segment représentant la sortie du pore (la base du pore) pondéré par la longueur du pore, donc :

$$\beta = \frac{\sum_{i=1}^{nbase} (J^A|_i^{nbf} \cdot l_i)}{\sum_{i=1}^{nbase} l_i} \dots \dots \dots (V.35)$$

$nbase$: Le nombre des segments à la base du pore,

l_i : La longueur du segment i .

nbf : Le nombre total de rebonds au-delà duquel plus aucun changement (à une certaine précision donnée) n'est observé dans les flux absorbés,

$J^A|_i^{nbf}$: Le flux des espèces s absorbées au niveau du segment i après nbf rebonds,

La figure V.9 expose les résultats des simulations pour des ratios d'aspect allant de 1 à 10. La contribution directe à partir de l'ouverture du pore jusqu'à sa base et la contribution indirecte résultant des collisions molécules-parois sont représentées. La contribution directe décroît rapidement et devient négligeable pour un ratio d'aspect de 10 où le flux total sortant du pore est principalement dû aux collisions avec les parois internes du pore (indirecte/directe = 43 pour un ratio d'aspect = 10).

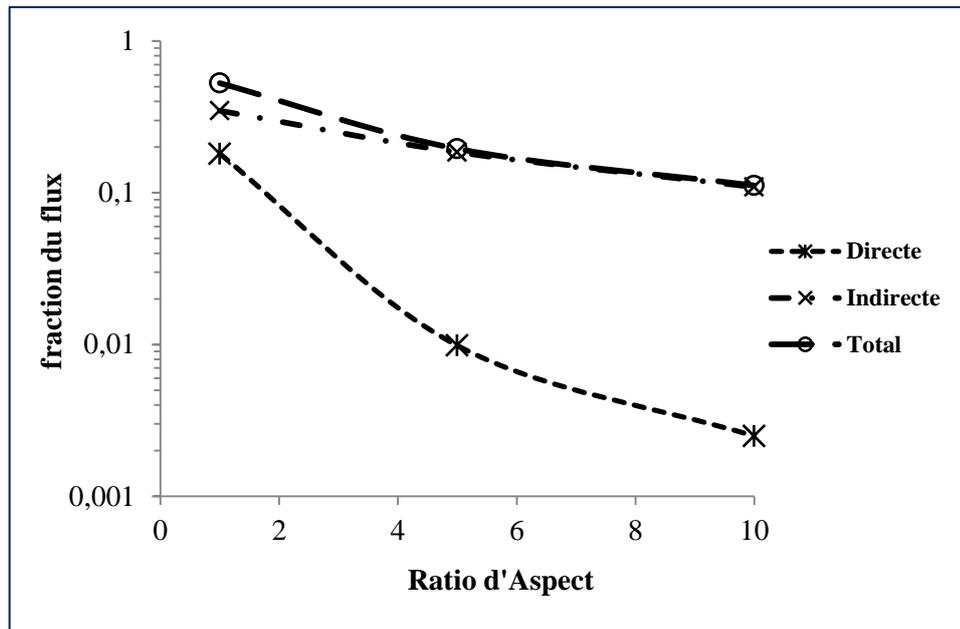


Figure V.9. Contribution directe, indirecte et le flux total obtenu en fonction de ratio d'aspect (0 à 10)

L'ensemble des simulations pour un ratio d'aspect allant de 1 à 200 est représenté dans la figure V.10. Pour des valeurs supérieures à 10, la transmission totale est pratiquement égale à la contribution indirecte. Le flux total est mieux approché par une loi de puissance :

$$\beta = 0.6 A_R^{-0.77} \dots \dots \dots (V.36)$$

Avec un coefficient de détermination de 0.994.

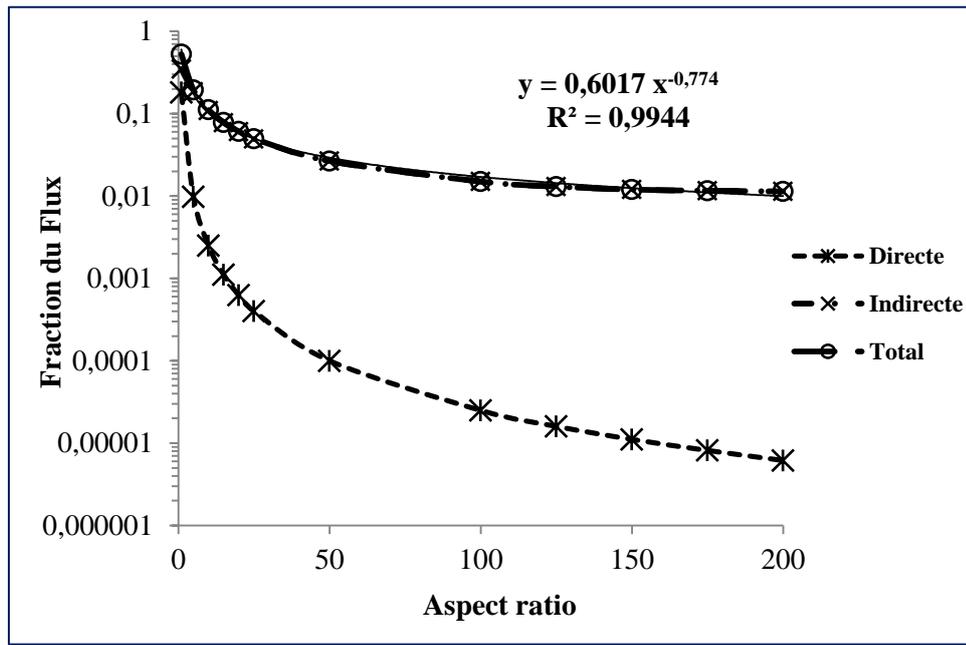


Figure V.10. Contribution directe, indirecte et le flux total obtenus en fonction de ratio d'aspect (0 à 200)

L'équation (V.36) est comparée à la fraction du flux β_{Shi} quittant le pore développé par Shi et al [58] et la fraction de flux β_{Kn} proposée par Knudsen [55], donnée respectivement par les équations suivantes :

$$\beta_{Shi} = \underbrace{\frac{\sqrt{A_R^2 + 1} - A_R}{\sqrt{A_R^2 + 1} + A_R}}_{Directe} + \underbrace{\frac{4}{3A_R} \left(1 - \frac{1}{4}A_R^3 + \frac{1}{4}(A_R^2 - 2)\sqrt{A_R^2 + 4} \right)}_{Indirecte} \dots \dots \dots (V.37)$$

$$\beta_{Kn} = \frac{2}{3A_R} \dots \dots \dots (V.38)$$

Le premier terme de la partie droite de l'équation (37) est dû à Clausing [58, 59] alors que le deuxième terme est un résultat du développement de Shi et al [58] . L'équation (V.38) est le comportement prédit par Knudsen [55] pour les ratios d'aspect élevés. A partir de la figure V.11, l'équation (V.36) présente un comportement asymptotique plus marqué que l'équation développée par Shi et al [58] qui propose une nouvelle expression pour la probabilité de transmission indirecte tandis que les prédictions de Knudsen [55] sont connues pour ne pas se comporter asymptotiquement avec un rapport d'aspect croissant.

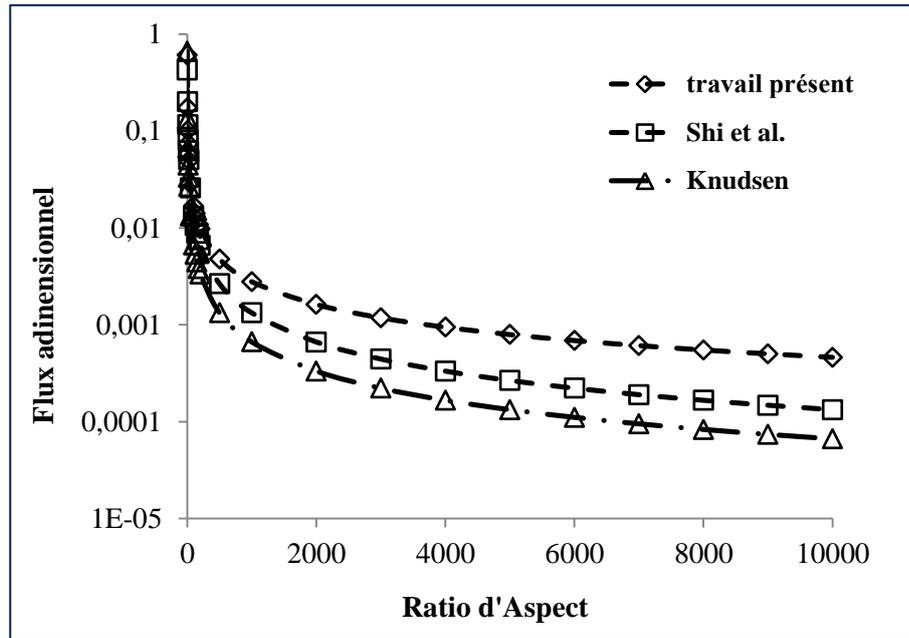


Figure V.11. Variation du flux sortant en fonction du ratio d'aspect pour le modèle établi et les travaux de Shi et Knudsen

Pour des conditions opératoires et un taux d'évaporation données, le flux sortant du pore est obtenu par la multiplication de l'équation (V.8) par la corrélation (V.36), donnant lieu :

$$J^{out} = 0.6 A_R^{-0.77} \frac{2}{2 - K_c} \sqrt{\frac{M_s}{2\pi R_g}} \left(\kappa_c \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} - \kappa_e \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \right) \dots \dots \dots (V.39)$$

V.7. Application du modèle à la Distillation Membranaire sous Vide (Vacuum Membrane Distillation)

Le travail de Khayet et al [26] est utilisé pour l'évaluation et la validation du modèle. Les auteurs sont focalisés sur la caractérisation des membranes commerciales et d'autres préparées au laboratoire.

Sept (07) membranes ont été élaborées par la technique de l'inversion de phases en utilisant polyvinylidène fluorure (PVDF), N,N-diméthylacétamide (DMAC) et l'eau pure, tandis que les membranes commerciales comprennent des feuillets plats en PVDF, à savoir la GVHP et la HVHP procurées par Millipore (voir Khayet *et al.* [26] pour plus de détails). Seules les membranes qui ont abouti à des expériences réussies en VMD seront prises en compte, et dont les caractéristiques estimées ainsi que les flux VMD résultant des expériences sont rassemblés dans le tableau V.1.

Tableau V.1. Caractéristiques des membranes et les flux VMD relevés de Khayet et al. [26]

Membrane	δ (μm)	d_p (nm)	χ	ε_s	Flux sortant (VMD) $J_{\text{exp}}^{\text{out}}$ ($10^{-3} \text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$)
W0	50,7	45,4	1,3	0,154	0,189
W1	50,2	55,2	1,6	0,168	0,349
W2	53,1	95,2	1,4	0,264	0,646
W3	49,8	116,5	1,4	0,228	0,927
W4	52,8	143,3	1,6	0,275	1,44
W5	50,6	299,5	1,4	0,336	2,57
W6	61,8	573,6	1,5	0,379	4,777
GVHP	118,0	495,7	1,7	0,253	1,809

Toutes ces caractéristiques sont déduites après des analyses de microscopie à force atomique (Atomic Force Microscopy), alors que le flux de perméation est obtenu expérimentalement (flux sortant).

Les expériences ont été réalisées avec une température d'alimentation $T_l = 298 \text{ K}$ et une pression de vide $P_v = 1666.5 \text{ Pa}$.

La pression liquide P_l au niveau du coté alimentation est estimée en substituant T_l par sa valeur dans l'équation (V.9), alors que la température T_v du coté perméat est calculée en utilisant P_v dans l'équation (V.10), ce qui donne $P_l = 3143.2 \text{ Pa}$ et $T_v = 288 \text{ K}$.

La température et la pression moyennes au sein du pore sont prises respectivement :

$$T_{\text{avg}} = \frac{T_l + T_v}{2} \dots \dots \dots (40) \quad \text{et} \quad P_{\text{avg}} = \frac{P_l + P_v}{2} \dots \dots \dots (V.41)$$

Pour donner

$$T_{\text{avg}} = 293.08 \text{ K}$$

$$P_{\text{avg}} = 2404.8 \text{ Pa}$$

En utilisant les valeurs moyennes calculées et le diamètre de collision de l'eau pris égale à $2,64 \cdot 10^{-10}$ m [5, 6, 71], le parcours libre moyen est estimé par l'intermédiaire de l'équation (V.3) tandis que le nombre de Knudsen est calculé à partir de l'équation (V.4) en utilisant la taille moyenne du pore listée dans le tableau V.1.

Tableau V.2. Nombre de Knudsen pour toutes les membranes aux conditions d'expérimentation

Membrane	Kn
W0	119,6
W1	98,4
W2	57,1
W3	46,6
W4	37,1
W5	18,1
W6	9,5
GVHP	11,0

Toutes les valeurs du nombre de Knudsen calculées et listées dans le tableau V.2 indiquent qu'il s'agit bel et bien d'un milieu raréfié et par conséquent les collisions molécules-parois du pore dominant. Cependant, ces valeurs sont évaluées en prenant le diamètre moyen du pore, des valeurs plus élevées dans la distribution des pores peuvent conduire à un régime transitionnel.

De nombreux efforts de recherche portent sur le thème de la distribution de la taille des pores [72-74] qui est souvent mieux prédite par une distribution log-normale :

$$\frac{df(d_p)}{d(d_p)} = \frac{1}{d_p \ln \chi \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln d_p - \ln \bar{d}_p)^2}{2(\ln \chi)^2}\right) \dots \dots \dots (V.42)$$

En utilisant la règle des trapèzes (voir chapitre III), la fraction des pores dont le diamètre est compris entre d_{p1} et d_{p2} est exprimée comme suit :

$$f_{1,2} = 0.5 (d_{p2} - d_{p1}) \left(\frac{1}{d_{p2} \ln \chi \sqrt{2\pi}} e^{\left(-\frac{(\ln d_{p2} - \ln \bar{d}_p)^2}{2(\ln \chi)^2}\right)} + \frac{1}{d_{p1} \ln \chi \sqrt{2\pi}} e^{\left(-\frac{(\ln d_{p1} - \ln \bar{d}_p)^2}{2(\ln \chi)^2}\right)} \right) \dots (V.43)$$

Considérant une distribution log-normal de la taille des pores, le flux sortant du pore est la somme des flux correspondant à chaque diamètre du pore (ratio d'aspect) pondéré par la fraction correspondante. Une forme discrète peut être exprimée comme suit:

$$J^{out} = 0.6 \frac{2}{2 - K_c} \sqrt{\frac{M_s}{2\pi R_g}} \left(\kappa_c \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} - \kappa_e \frac{P_l}{\sqrt{T_l}} \right) \sum_{i=1}^m f\left(i - \frac{\Delta}{2}, i + \frac{\Delta}{2}\right) A_{Ri}^{-0.77} \dots \dots \dots (V.44)$$

Avec

Δ : L'intervalle d'intégration dans la règle de trapèzes,

m : Le nombre total des intervalles d'intégration,

A_{Ri} : Le ratio d'aspect du pore dont le diamètre est d_{pi} au centre de l'intervalle d'intégration

Un ajustement approprié de l'équation (V.44) aux données expérimentales nécessite la connaissance du coefficient de condensation K_c et le coefficient d'évaporation K_e . Des études précédentes ont montré que les valeurs de ces paramètres s'étalent sur deux ordres de grandeur [75]. Toutefois, la simplification est souvent introduite en supposant les coefficients de condensation et d'évaporation égaux.

Les valeurs $K_c = 1$ et $K_e = 1$ sont utilisées comme des valeurs initiales dans un process de minimisation d'erreurs. Le solveur du gradient réduit généralisé d'Excel [47, 76] est utilisé pour minimiser la fonction objective suivante :

$$\text{minimize } F(K_e, K_c) = \sum_{i=1}^{N_{exp}} (J^{out} - J_{exp}^{out})^2 \dots \dots \dots (V.45)$$

$$\text{assujetti à : } \begin{cases} 0 \leq K_e \leq 1 \\ 0 \leq K_c \leq 1 \end{cases}$$

N_{exp} : Le nombre de valeurs expérimentales.

On suppose que les expériences ont été réalisées dans le même appareillage et les mêmes conditions opératoires, dans ce cas de figure, on s'attend à avoir les mêmes valeurs de coefficients de condensation et d'évaporation pour toutes les expériences. Dans un premier temps, le processus de minimisation est effectué séparément pour chaque expérience $N_{mbr} = 1$. Les valeurs de K_c et K_e résultants avec respectivement les résidus de minimisation sont listés dans le tableau V.3.

Tableau V.3. Coefficients de condensation et d'évaporation et les résidus de minimisation relatifs à chaque membrane

Membrane	κ_c	κ_e	Résidus
W0	1	0.608	$1,90 \cdot 10^{-32}$
W1	1	0,635	$4,93 \cdot 10^{-32}$
W2	1	0,619	$4,93 \cdot 10^{-32}$
W3	1	0,652	$4,93 \cdot 10^{-32}$
W4	1	0,658	$4,43 \cdot 10^{-31}$
W5	1	0,637	$1,97 \cdot 10^{-31}$
W6	1	0,670	$7,10 \cdot 10^{-30}$
GVHP	1	0,678	$1,97 \cdot 10^{-31}$

A partir des résidus obtenus et listés dans le tableau V.3, on peut constater que la minimisation individuelle par rapport à chaque valeur expérimentale conduit à une correspondance exacte des flux VMD répertoriés dans le tableau V.1. Pour tous les cas, la valeur de 1 est obtenue pour le coefficient de condensation, qui est en accord avec le coefficient de condensation de l'eau à une pression de 2404 Pa \sim 0.024 bar reporté par plusieurs auteurs [77-80]. A la pression d'opération en VMD, les valeurs du coefficient d'évaporation obtenues sont en accord avec ceux reportés dans la littérature [81-83]. De plus, les coefficients d'évaporation calculés conduisent à un rapport évaporation/condensation près des données théoriques rapportés [84, 85].

La différence relative maximale observée entre les valeurs calculées du coefficient d'évaporation est d'environ 10% (entre les membranes W0 et GVHP). Tandis que l'écart type de l'ensemble est estimé près de 0,02, bien que de petites variations du coefficient conduisent à un changement significatif des taux transférés.

Ces différences enregistrées entre les valeurs des coefficients d'évaporation K_e peuvent être attribuées aux différents degrés de recouvrement de l'interface pendant le processus de transfert. Marek et Straub [75] ont reporté dans la littérature des données sur les variations du coefficient d'évaporation en fonction du taux de recouvrement de

l'interface [86], montrant qu'une augmentation de ce dernier de 0,45 à 1,0 conduit à une chute de trois ordres de grandeur du coefficient d'évaporation.

Une tentative de minimisation globale sur l'ensemble des données expérimentales prévoit une valeur de $\kappa_c = 1$ et $\kappa_e = 0.659$ et une minimisation des résidus de 0.69.

Les résultats du flux sortant du pore sont reportés dans le tableau V.4 conjointement avec ceux calculés à partir de l'équation (V.7) ainsi que les données expérimentales. Les valeurs obtenues en utilisant le présent modèle du flux sans collisions présente une erreur relative faible comparé à ceux issues de l'équation (V.7) qui résultent de l'application de l'approche de Knudsen. A noter que l'équation (V.7) a été également sommée sur toute la distribution log normale des diamètres des pores. Cependant, le modèle établi a été forcé à la valeur globale de minimisation des coefficients de transfert, même si les variations de K_e ont trouvé une justification plausible lorsque la minimisation a été effectuée séparément pour chaque membrane.

Tableau V.4. Valeurs du flux VMD sortant : expérimental, par le biais du modèle développé et par le modèle de Knudsen et les erreurs relatives correspondant

Membrane	J_{exp}^{out} (10^{-3} kg.m ⁻² .s ⁻¹)	J_S^{out} (10^{-3} kg.m ⁻² .s ⁻¹)	Erreur relative %	J_{Kn}^{out} (10^{-3} kg.m ⁻² .s ⁻¹)	Erreur relative %
W0	0,189	0,327	73,2	0,308	63,0
W1	0,349	0,438	25,5	0,444	27,1
W2	0,646	0,973	50,6	1,075	66,4
W3	0,927	0,983	6,0	1,135	22,4
W4	1,440	1,445	0,3	1,785	24,0
W5	2,57	3,134	21,9	4,498	75,0
W6	4,777	4,355	9,7	6,797	42,3
GVHP	1,809	1,555	16,3	2,055	13,6

L'exception est faite pour les membranes W0, W1 et W2 où et la méthode développée et le modèle Knudsen n'arrivent pas à reproduire les résultats expérimentaux, la corrélation établie de l'écoulement sans collisions semble donner de meilleurs résultats.

Toutefois, l'utilisation d'une valeur unique des coefficients de condensation et d'évaporation qui résultent du processus de minimisation globale conduit à des divergences qui ne pouvaient pas être liées à l'une des propriétés de la membrane (taille moyenne des pores, épaisseur, porosité, tortuosité) exceptée les deux premières membranes qui ont la plus faible porosité surfacique. Il est important de rappeler que le phénomène de polarisation n'est pas pris en compte dans l'approche actuelle alors qu'il est connu qu'il affecte les prédictions du modèle, même si le phénomène de polarisation est moins important en VMD. Par ailleurs, toutes les expériences utilisent de l'eau pure.

Néanmoins, il convient de souligner à nouveau que l'ajustement des données pour chaque membrane séparément conduit à la même valeur du coefficient de condensation et des valeurs proches du coefficient d'évaporation dont les variations peuvent être attribuées à la contamination de l'interface liquide-vapeur. Il est important de noter que la distribution de taille des pores s'est résumée sur des rapports d'aspect allant de 50 à 50000 qui correspondent à des diamètres de pores allant de 1 nm à 1 μ m. Pour les pores avec les diamètres les plus larges (1 μ m) le nombre de Knudsen est égal à 7,5 et donc chute sous la limite de 10 où le régime de diffusion devient transitionnel. Dans ce cas, les prédictions du modèle tendent à sous-estimer les résultats expérimentaux.

Toutefois, les modèles tendent à surestimer les aboutissements expérimentaux (voir tableau V.4), ce qui ramène à dire que la contribution des régimes de transition pourrait être négligeable. Les résultats obtenus avec le présent modèle présente les simulations à l'échelle de pore comme une importante alternative. La corrélation en loi de puissance développée se comporte asymptotiquement avec les données, notamment ceux effectuées en ajustant les paramètres de l'équation d'Hertz-Knudsen-Schrage conduisent à des résultats intéressants.

V.8. Conclusions et perspectives

Une connaissance approfondie du procédé VMD est nécessaire pour une bonne conception à grande échelle des équipements de production. Un modèle de flux sans collisions à l'échelle des pores a été développé. Une approche balistique a été implémentée afin de calculer le flux sortant par des pores cylindriques. Il permet l'estimation des deux contributions directe et indirecte. L'écoulement indirect qui résulte des collisions molécules-parois du pore est obtenu en utilisant une procédure itérative. Les calculs ont été

réalisés pour des ratios d'aspect allant jusqu'à 200, suivi par une extrapolation selon une corrélation en loi de puissance.

L'utilisation de l'équation d'Hertz-Knudsen-Schrage à l'interface liquide-vapeur et les prédictions du flux sans collisions ont permis l'estimation des flux de VMD pour un ensemble de membranes choisies de la littérature. Des résultats intéressants ont été obtenus après simulations/minimisation d'erreur des expériences avec un ajustement des coefficients de condensation et d'évaporation.

Physiquement parlant, des valeurs cohérentes des coefficients ont été trouvées, même si les écarts de flux prédits sont encore difficiles à expliquer lorsque les mêmes valeurs des coefficients de condensation et d'évaporation sont utilisées pour toutes les prédictions.

D'autres développements complémentaires sont nécessaires pour parvenir à des modèles de simulation en VMD à l'échelle du pore plus fiables ce qui aidera particulièrement à relier la géométrie des pores aux propriétés de la membrane.

CHAPITRE VI : SIMULATION PAR CFD DE L'EFFET DE LA CONCENTRATION EN SEL SUR LE TAUX DE RECOUVREMENT DU MENISQUE

VI.1. Problématique

Dans l'étude précédente répertoriée dans le chapitre (V), la différence relative maximale observée entre les valeurs calculées du coefficient d'évaporation K_e est d'environ 10%. Ces différences enregistrées peuvent être attribuées aux différents degrés de recouvrement de l'interface pendant le processus d'évaporation.

Marek et Straub [75] ont reporté dans la littérature des données sur les variations du coefficient d'évaporation en fonction du recouvrement de l'interface, montrant qu'une augmentation de 0,45 à 1,0 de ce dernier conduit à une chute de trois ordres de grandeur du coefficient d'évaporation.

Généralement, les coefficients de condensation et d'évaporation peuvent être obtenus théoriquement à partir des calculs moléculaires dynamiques ou empiriquement à partir des expériences d'évaporation et de condensation.

Dés lors que la réalisation des études expérimentales parvenant à vérifier pour les conditions opératoires d'un procédé de distillation membranaire si les particules de sel parviennent à atteindre le ménisque formé et si c'est le cas, déterminer sa fraction est quasiment irréalisable, l'orientation vers les méthodes numériques est une approche intéressante.

L'engouement vers les méthodes de simulations numériques est justifié, puisqu'elles permettent en un temps assez réduits d'aboutir à des résultats largement suffisants. L'une de ces techniques est la mécanique des fluides numérique (CFD).

La problématique qui se pose dans ce travail actuel est de vérifier par des simulations CFD l'effet des impuretés (particules des sels dans les fluides à traiter en DM) et leurs concentrations sur le taux de recouvrement du ménisque formé au niveau de l'ouverture du pore et donc le flux de perméation résultant.

VI.2. Revue bibliographique

Appliquer la mécanique des fluides numériques (CFD) en tant qu'une technique d'investigation dans le procédé de DM est récente et date de quelques années seulement, toutefois les quelques travaux existants traitent des transferts thermiques et de l'effet de la turbulence (notamment les espaceurs) sur les performances du module membranaire.

Dans ce contexte, M. Chakaib et al [87] ont examiné l'effet de l'orientation des espaceurs, l'espacement entre ces filaments et la vitesse d'entrée du fluide sur la distribution des contraintes de cisaillement et la polarisation de température en DM. Aussi, Des simulations 3D code CFD/OpenFOAM ont été réalisées par S. Al-Sharif [88] pour mettre en évidence l'effet de trois géométries différentes d'espaceurs sur la polarisation de température et la chute de pression correspondant, la génération de maillage est réalisée en utilisant l'utilitaire SnappyHexMesh OpenFOAM, qui génère un maillage non structuré à dominance hexagonale pour améliorer la précision numérique.

Neuf modules à fibres creuses modifiées avec différents promoteurs de turbulence étaient conçus et modélisés à l'aide d'un modèle CFD de transfert de chaleur en 2D pour investiguer leur potentiel d'amélioration du transfert thermique et les performances des modules membranaires [89]. Les auteurs ont réalisé des simulations en 2DD (précision double) sur des géométries simples en fibres creuses à l'aide du logiciel FLUENT 6.3 les résultats montrent que l'effet enregistré dépend de la configuration et le type de promoteur de turbulence

Les processus de transfert de chaleur et de masse d'un écoulement laminaire en DCMD ont été analysés par la CFD. Hui Yu et al [90], ont développé un modèle 2D par le couplage de la chaleur latente générée lors d'un procédé DM dans l'équation de conservation de l'énergie.

D'autres études numériques ont été consacrées à l'investigation de l'influence des conditions opératoires sur les performances du procédé DM. A cet égard, Tang et al [91], ont réalisé des simulations par CFD/FLUENT où la VMD était considérée comme un écoulement multiphasique alors que la membrane était réduite en une géométrie 2D. Les simulations ont examinées pour une solution aqueuse en NaCl, l'effet des conditions opératoires sur le transfert massique et la réaction d'évaporation, cette dernière était

modélisée par une fonction prédéfinie (UDF). Les résultats montrent une concordance entre les résultats numériques et la littérature.

Néanmoins, on ne rencontre pas dans la littérature des études numériques par CFD consacrées à l'investigation de l'effet de la concentration en solution d'alimentation sur le flux de perméat à l'échelle microscopique du système.

À l'inverse, Beaucoup d'études expérimentales ont été effectuées pour déterminer l'effet de la concentration en solutés des solutions d'alimentation sur les performances des systèmes de DM et plus exactement le flux de perméabilité.

Les travaux d'Izquierdo-Gil et al [16] ont montré que l'augmentation de la concentration en soluté du fluide d'alimentation conduit à une réduction linéaire du flux de perméation due à la diminution de la pression de vapeur. Cependant cette diminution était trouvée légère par Banat et Simandl [17], Qaishat et al [12] et Alklaibi et Lior [18].

Schofield et al [92] ont étudié l'impact de la fraction moléculaire massique et la viscosité de la solution d'alimentation sur le flux, ils ont conclu que la viscosité est un facteur important dans la réduction du flux.

Marek et Straub [75] ont montré que la contamination de la surface quasi-statique de l'eau entrave de manière significative l'évaporation puisque les impuretés s'accumulent le long de l'interface et ne seront pas emportées. En raison de l'important moment dipolaire, les surfaces de l'eau sont très sensibles à la contamination.

On constate également, que la plupart des simulations réalisées sont à l'échelle macroscopique (compartiment alimentation du module membranaire), notre étude sera réalisée à l'échelle microscopique du module (pore de la membrane)

VI.3. Fondements expérimentaux

L'étude de L. Martinez, J.M. Rodriguez-Maroto [93] est utilisée comme un support pour la validation des résultats des simulations. En effet, les auteurs ont réalisé une étude expérimentale afin de déterminer l'influence de la concentration en soluté de la solution d'alimentation sur le flux de perméabilité.

Les caractéristiques de la membrane, du module membranaire ainsi que les conditions opératoires sont regroupées dans les tableaux ci-dessous.

Tableau VI.1. Caractéristiques du module membranaire expérimental [93]

Longueur (mm)	Largeur (mm)	Hauteur (mm)	Diamètre hydraulique (mm)
55	7	0,45	0.84

Tableau VI.2. Caractéristiques de la membrane dans l'étude expérimentale [93]

Nom commercial	fabricant	matériau	d_p (μm)	ε (%)	δ (μm)
TF200	Gelman	PTFE/PP	0,20	80	178

Tableau VI.3. Conditions opératoires de l'expérimentation [93]

T_{feed} ($^{\circ}\text{C}$)	V_{feed} (m/s)
36	0,35

Les flux de perméation obtenus pour chaque concentration seront utilisés par la suite dans une approche CFD pour la détermination du taux de recouvrement du ménisque et ses variations en fonction de la concentration d'entrée. Le tableau VI.4 rassemble les valeurs de flux de perméation surfacique et volumique (pour des besoins du modèle) obtenus pour chaque concentration d'entrée.

Tableau VI.4. Flux de perméabilité expérimentaux [93]

C_{NaCl} (molaire)	fraction massique NaCl à l'entrée	$J \cdot 10^{-3}$ ($\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$)	J ($\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$)
0,5	0,029	2,44	13,71
0,62	0,036	2,40	13,48
1	0,058	2,28	12,81
1,5	0,088	2,24	12,58
2	0,116	2,15	12,08
2,5	0,146	2,04	11,46
3	0,175	1,95	10,95
3,5	0,204	1,84	10,34
4	0,233	1,68	9,44

Le flux volumique est obtenu par la division du flux surfacique par l'épaisseur de la membrane.

VI.4. Préparation de la géométrie par GAMBIT

VI.4.1. La création de la géométrie

Pour la création de la géométrie, le maillage, la vérification du maillage et l'établissement des conditions aux limites, on utilise GAMBIT version 2.2.30 (maillageur 2D/3D). Deux géométries principales sont à réaliser, une composée d'une partie de compartiment d'alimentation plus un seule ménisque formé suite à la différence de pression partielle entre les deux cotés de la membrane : alimentation et perméat, l'autre sera composé de neuf ménisques.

Il est à noter que pour les conditions opératoires utilisées la profondeur du ménisque p_m sera égale à $d_p/4$ [94].

La deuxième géométrie est conçue afin de vérifier la reproductibilité des résultats.

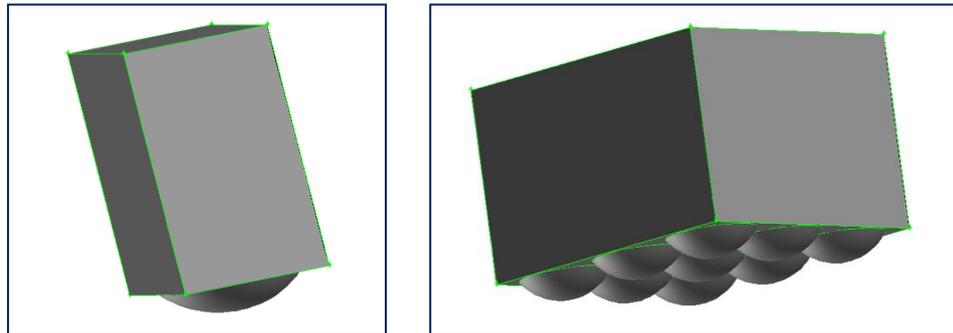


Figure VI.1. Schéma des deux configurations principales à préparer par GAMBIT

Avant d'entamer la procédure de création de nos géométries, deux paramètres doivent être déterminés au préalable pour une reproduction parfaite de la géométrie réelle:

a. Détermination du rayon de la sphère d'entrée R_s

$$R_p^2 + (R_s - p_m)^2 = R_s^2$$

D'où :

$$R_s = \frac{R_p^2 + p_m^2}{2p_m}$$

$$\text{Mais } p_m = R_s/2$$

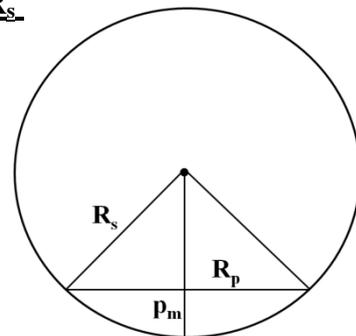


Figure VI.2. Détermination du rayon de la sphère d'entrée

On obtient :

$$R_s = \frac{5R_p}{4} \dots \dots \dots (VI.1)$$

L'application numérique nous donne :

$$R_s = 0,125 \mu m$$

b. Détermination de la distance inter-pores

On considère une distribution uniforme des pores sur toute la surface membranaire (longueur et largeur).

Soit x la distance entre deux pores adjacents et w la largeur de la membrane.

Soit S_m la surface membranaire

$$S_m = largeur \times longueur = 3,85 \cdot 10^{-4} m^2$$

Alors la porosité surfacique est égale à :

$$\varepsilon_s = S_m \times porosité = 3,08 \cdot 10^{-4} m^2$$

La surface d'un seul pore est égale à :

$$S_p = \pi R_p^2 = \pi \cdot 10^{-14} m^2$$

Soit n le nombre de pores existant sur la largeur w , on aura :

$$n \times \frac{5,5}{0,7} n \times S_p = \varepsilon_s \dots \dots \dots (VI.2)$$

Ce qui donne $n = 33005$

$$x = \frac{w - (n \times d_p)}{n + 1} \dots \dots \dots (VI.3)$$

Finalement :

$$x = 0,012 \mu m$$

La figure suivante représente les dimensions de la surface membranaire des deux configurations qui seront créées par la suite.

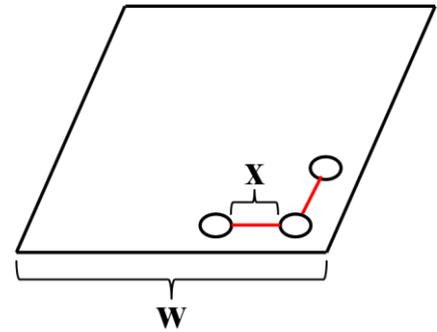


Figure VI.3. Détermination de la distance inter-pores

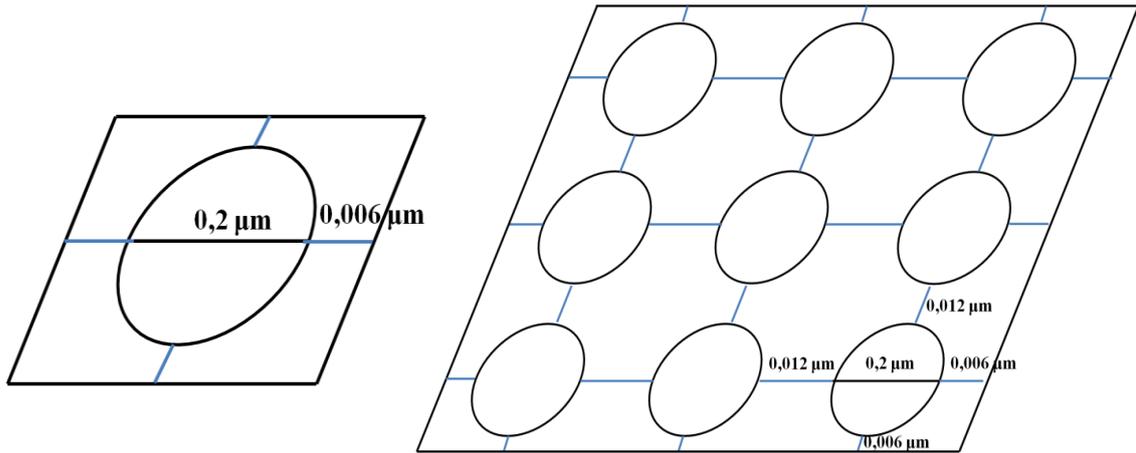


Figure VI.4. Dimensions de la surface membranaire

L'idée idéale sera d'adopter une approche up-down, où on crée une sphère dont le rayon est déjà déterminé, puis une brique (parallélépipède) et suivre les étapes suivantes :

L'approche suivie pour les deux configurations diffère dans quelques étapes, on commencera par la première qui sera nommée par la suite « un_ménisque »

- a- Création de la sphère d'entrée d'un rayon de $0,125 \mu\text{m}$.
- b- Création d'une brique (parallélépipède) de dimensions $0,212 \times 0,212 \times 0,4 \mu\text{m}$
- c- Déplacer la brique d'une distance de $0,125 \mu\text{m}$. (pour créer la profondeur du ménisque adéquate)
- d- Diviser (split) la sphère par la brique avec l'activation de l'option « retain ».
- e- Supprimer les nouveaux volumes ainsi créés par l'opération de division.
- f- Unir les deux volumes créés (volume et calotte sphérique)
- g- Supprimer les faces supplémentaires qui appartaient aux anciens volumes et ne garder que les entités topologiques liées au nouveau volume (opération importante pour éviter la non-conformité des faces lors de l'exportation du maillage)

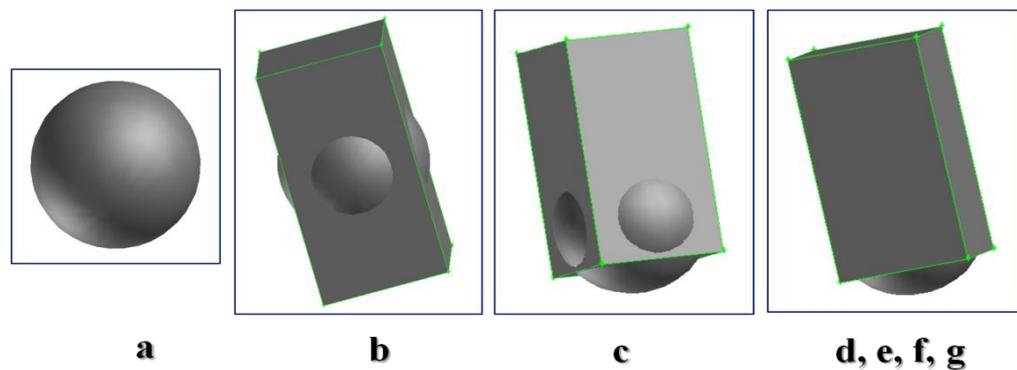


Figure VI.5. Etapes de création de la géométrie en un seul ménisque par GAMBIT

La deuxième configuration sera nommée « neuf_ménisques », elle diffère de la première dans :

- Les dimensions de la brique : $0,636 \times 0,4 \times 0,636 \mu\text{m}$.
- Copier la calotte sphérique résultat de la division de la sphère par la brique dans les huit autres positions pour créer une distribution uniforme des pores sur la surface membranaire avec un espacement entre les pores égale à $0,012 \mu\text{m}$.

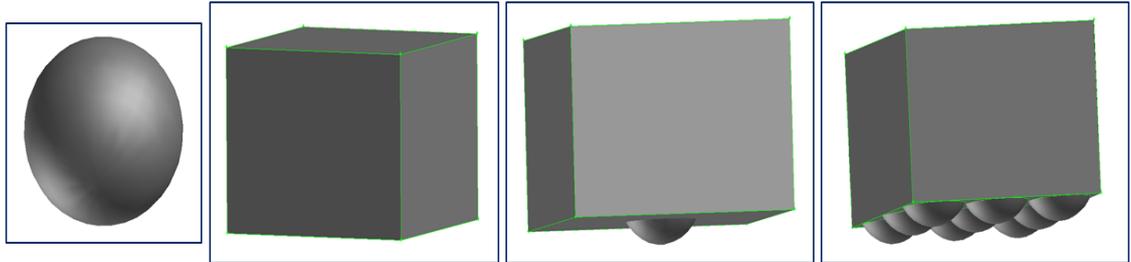


Figure VI.6. Etapes de création de la géométrie en neuf ménisques par GAMBIT

VI.4.2. Le maillage des géométries

Le maillage est une étape très importante si on veut aboutir à des simulations dont les résultats sont représentatifs, un bon maillage consiste en :

- Un choix adéquat des éléments constituant le maillage.
- Un choix adéquat du type des éléments.
- Déterminer la nécessité de densifier le maillage dans des zones spécifiques où on veut plus de précision dans les calculs.
- Utiliser les conditions limites appropriées et les lier à leurs propres entités topologiques pour éviter tout problème de conformité.

Dans notre présent travail, deux configurations sont créées, pour chaque configuration trois géométries sont distinguées (selon la densité du maillage), ce qui fait en totale six géométries à mailler, et qui seront nommée comme suit :

- Un_ménisque_non_dense (géométrie 1) ;
- Un_ménisque_dense (géométrie 2) ;
- Un_ménisque_très_dense (géométrie 3) ;
- Neuf_ménisques_non_dense (géométrie 4) ;
- Neuf_ménisques_dense (géométrie 5) ;
- Neuf_ménisques_très_dense (géométrie 6).

La différence qui existent entre ces géométries est le nombre total de mailles dans le volume, dans notre cas, un maillage est dit très dense si on ne constate pas de changement dans les résultats des simulations avec la densification du maillage.

Vu le caractère non homogène des deux volumes constituant le volume global (calotte sphérique + parallélépipède), un maillage non structuré est préféré comme type, par conséquent, des éléments tétraédriques/hybride dont le type est TGrid sont utilisés pour le maillage de nos géométries (voir chapitre IV pour plus de détails).

L'objectif recherché à travers ce travail nous impose de densifier le maillage au niveau du ménisque et la surface membranaire par rapport aux autres domaines de la géométrie, ainsi une fonction de dimensionnement doit être employée. La fonction de dimensionnement prendra comme source la surface du ménisque et comme attachement le volume global. Le tableau ci-dessus présente les différents paramètres de la fonction de dimensionnement pour les six géométries en question :

Tableau VI.5. Paramètres des fonctions de dimensionnement employés

Géométrie	Type de la FD	Dimension de départ (μm)	Coefficient de grossissement	Dimension d'arrêt (μm)
Un_ménisque_non_dense	Fixée	0,01	1,2	0,08
Un_ménisque_dense	Fixée	0,004	1,15	0,04
Un_ménisque_très_dense	Fixée	0,0175	1,15	0,04
Neuf_ménisques_non_dense	Fixée	0,01	1,2	0,08
Neuf_ménisques_dense	Fixée	0,004	1,15	0,04
Neuf_ménisques_très_dense	Fixée	0,0175	1,15	0,04

Reste une étape importante avant de procéder au maillage des géométries c'est la connexion des deux faces latérales du volume globale (qui présente un caractère périodique sur toute la largeur du compartiment d'alimentation) avec l'activation des options : périodique et orientation inversée.

Le tableau ci-dessus regroupe le nombre de mailles et de nœuds du volume global, éléments essentiels pour la précision des résultats.

Tableau VI.6. Nombre de mailles et de nœuds des géométries créées

Géométrie	Nombre de mailles	Nombre de nœuds
Un_ménisque_non_dense	15 869	3 266
Un_ménisque_dense	114 588	21 452
Un_ménisque_très_dense	396 129	68 880
Neuf_ménisques_non_dense	133 118	25 476
Neuf_ménisques_denses	855 908	152 429
Neuf_ménisques_très_denses	3 250 091	553 919

On parvient aux géométries maillées suivantes :

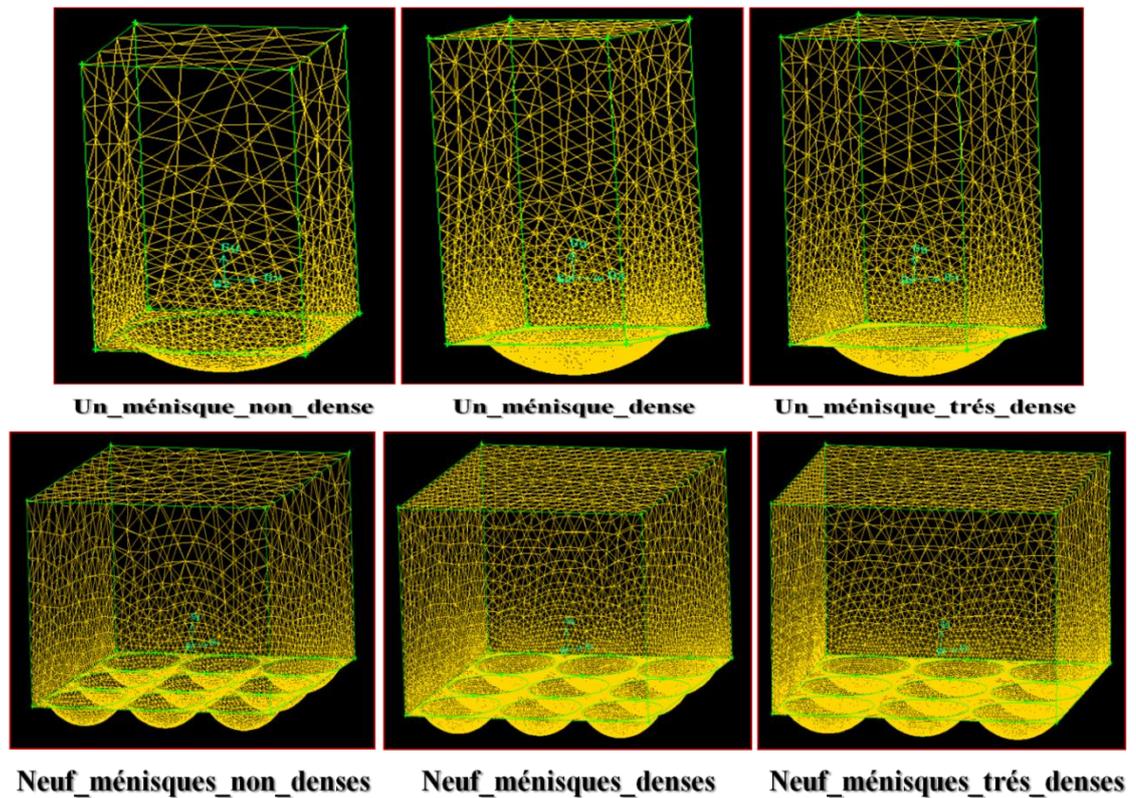


Figure VI.7. Schéma des Géométries maillées

VI.4.3. La vérification de la qualité du maillage

La génération d'une très bonne qualité de maillage est essentielle pour l'obtention d'un résultat de calcul précis, robuste et signifiant. La qualité de maillage a un sérieux impact sur la convergence, la précision de la solution et surtout le temps de calcul.

Il existe plusieurs formules mathématiques qui permettent de déterminer un coefficient de qualité d'un maillage donné (voir chapitre IV pour plus de détails)

Dés lors qu'il s'agit des mailles tétraédriques, l'évaluation de la qualité de notre maillage généré sera réalisée en considérant le coefficient $EquiAngleSkew^2$ dont l'expression mathématique est la suivante :

$$Q_{EAS} = Max \left\{ \frac{\theta_{max} - \theta_{eq}}{180 - \theta_{eq}}, \frac{\theta_{eq} - \theta_{min}}{180 - \theta_{eq}} \right\} \dots \dots \dots (VI. 4)$$

Où θ_{max} et θ_{min} sont les angles maximum et minimum (en degré) entre les arêtes de l'élément alors que θ_{eq} est un angle caractéristique correspondant à une cellule équilatérale de forme similaire (forme parfaite sans déformation). Pour les formes tétraédrique et triangulaire $\theta_{eq} = 60$ tandis que pour les éléments quadrilatères et hexaédrique $\theta_{eq} = 90$.

Il est clair que Q_{EAS} est compris entre 0 (forme parfaite) et 1 (forme dégénérée). En général, un maillage de bonne qualité doit avoir un Q_{EAS} au voisinage de 0,1 (2D) et 0,4 (3D)

Tableau VI.7. Qualité de maillage en fonction de Q_{EAS}

Q_{EAS}	Qualité de maillage
0	Parfaite
$0 < Q_{EAS} \leq 0,25$	Excellente
$0,25 < Q_{EAS} \leq 0,5$	Bonne
$0,5 < Q_{EAS} \leq 0,75$	Acceptable
$0,75 < Q_{EAS} \leq 0,9$	Mauvaise
$0,9 < Q_{EAS} < 1$	Médiocre
1	Dégénérée

Les coefficients de qualité obtenus pour toutes les géométries créées sont présentés dans le tableau suivant :

²EquiAngleSize = Egalité des angles d'inclinaison

Tableau VI.8. Coefficient de qualité de maillage des géométries créées

Géométrie	Q_{EAS}	Qualité de maillage
Un_ménisque_non_dense	0,34	Bonne
Un_ménisque_dense	0,34	Bonne
Un_ménisque_très_dense	0,35	Bonne
Neuf_ménisques_non_dense	0,34	Bonne
Neuf_ménisques_denses	0,34	Bonne
Neuf_ménisques_très_denses	0,37	Bonne

VI.4.4. La désignation des conditions aux limites

Les conditions aux limites définissent les caractéristiques physiques et opérationnelles du modèle aux frontières et à l'intérieur de notre volume, de ce fait, une déclaration appropriée des conditions aux limites doit être réalisée.

Le tableau ci-dessous énumère les différents types des zones frontières et zones continues suivant les numéros affichés dans le graphique suivant :

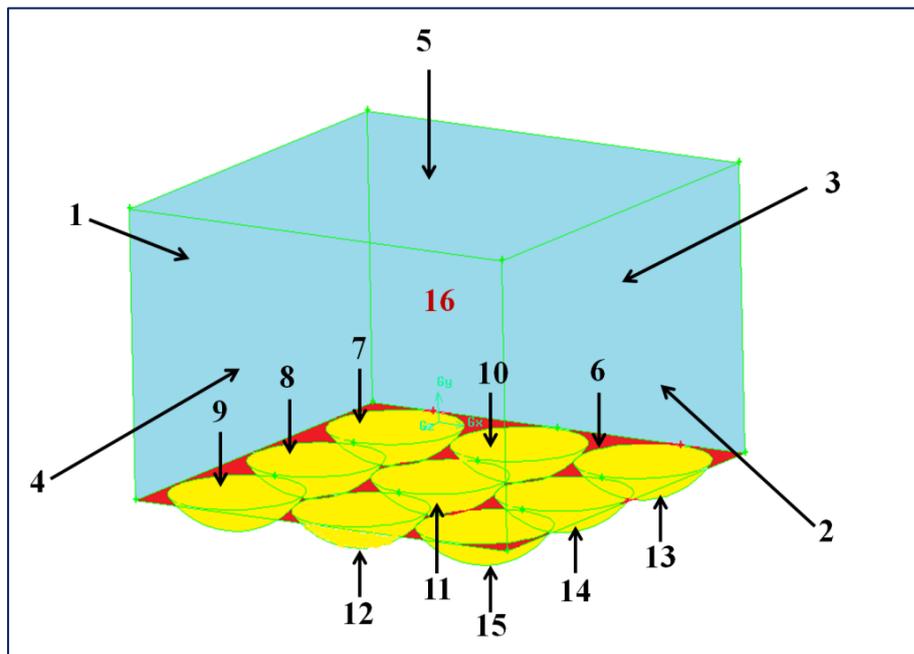


Figure VI.8. Désignation des conditions aux limites/zones continues

Tableau VI.9. Désignation des conditions aux limites/zones continues

Numéro de la frontière/la zone	Désignation	Type de la condition aux limite/région continue
1	Inlet	<i>Velocity inlet</i>
2	Outlet	<i>Outflow</i>
3-4	Surface_Periodic	<i>Periodic</i>
5	Top	<i>Wall</i>
6	Membrane_Surface	<i>Wall</i>
7	Miniscus1	<i>Wall</i>
8	Miniscus2	<i>Wall</i>
9	Miniscus3	<i>Wall</i>
10	Miniscus4	<i>Wall</i>
11	Miniscus5	<i>Wall</i>
12	Miniscus6	<i>Wall</i>
13	Miniscus7	<i>Wall</i>
14	Miniscus8	<i>Wall</i>
15	Miniscus9	<i>Wall</i>
16	Volume	<i>fluid</i>

Il est clair que pour les géométries en un seul ménisque on aura huit (8) conditions limites en moins car elles ne possèdent que la frontière numéro 11 (ménisque5).

La dernière étape sera d'exporter les géométries maillées dans des fichiers séparés sous format .msh.

VI.5. Calcul des solutions par FLUENT (Processing)

Une fois les géométries préparées, des simulations numériques vont être réalisées par le biais de FLUENT version 6.3.26 qui est un logiciel qui résout par la méthode des

volumes finies des problèmes de mécanique de fluides et des transferts thermiques (voir chapitre IV pour plus de détails)

Dans ce qui suit, nous allons expliciter les étapes nécessaires pour réussir les simulations de notre problématique. Les mêmes étapes seront refaites pour chaque géométrie.

VI.5.1. Choix du type des simulations

Avant d'afficher l'interface graphique de FLUENT, un choix du type de simulation doit être fait, quatre types s'imposent : 2D, 2DD (2D en double précision), 3D, 3DD (3D en double précision).

Puisque notre géométrie se constitue d'un volume, il est évident qu'on va choisir le type 3D en simulation complète (full simulation).

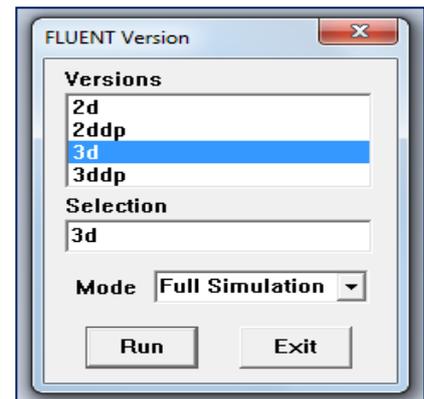


Figure VI.9. Choix du type des simulations

VI.5.2. Importation de la géométrie (fichier .msh)

Avant de commencer la simulation, il faut importer tout d'abord notre géométrie

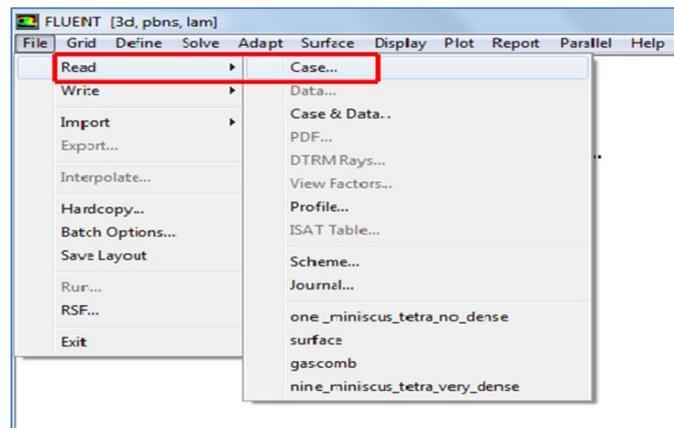


Figure VI.10. Importation de la géométrie (fichier .msh)

VI.5.3. Vérification, lissage et mise à l'échelle du maillage importé

Ceci permet de vérifier si le maillage importé ne contient pas d'erreurs (connexion incorrecte des mailles) ou des volumes négatifs. La vérification fournit un résumé complet de notre géométrie : l'étendu du domaine, types d'éléments topologiques, informations sur les conditions aux limites de type spécifique (périodique, asymétrique...etc.) et la vérification de la position de chaque nœud.

Pour s'assurer de la qualité du maillage, il est pratique de le lisser en cliquant sur le bouton Smooth une fois puis le bouton Swap jusqu'à ce que le logiciel nous affiche qu'il n'existe plus de surface à échanger (number faces swapped : 0)

La dernière phase dans cette étape de vérification et de remettre à l'échelle le système de coordonnées de dimensionnement qui est par défaut en mètre. Dans notre cas, on doit multiplier les trois directions x, y, z par 10^{-6} pour avoir des micromètres le long de notre géométrie.

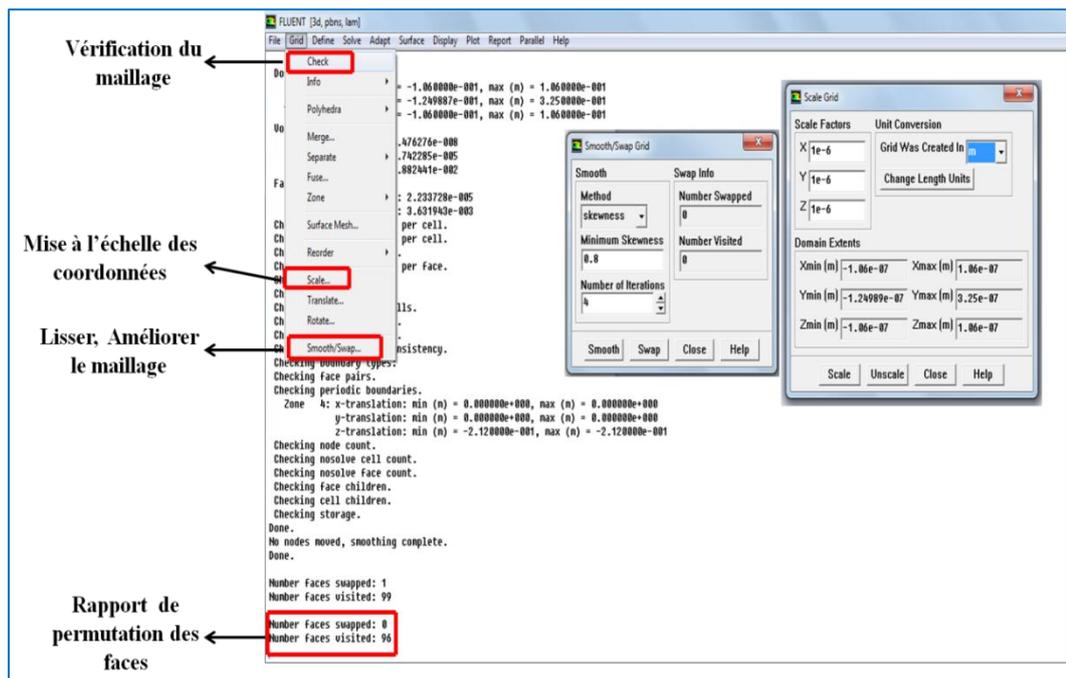


Figure VI.11. Vérification, lissage et mise à l'échelle du maillage importé

VI.5.4. Choix du solveur et ces paramètres.

FLUENT propose deux types de solveurs :

- Basé sur la pression : plus approprié aux écoulements incompressibles³, il existe en une seule formulation (implicite)
- Basé sur la densité : réservé aux écoulements compressibles à grande vitesse, il existe en deux formulations (implicite et explicite).

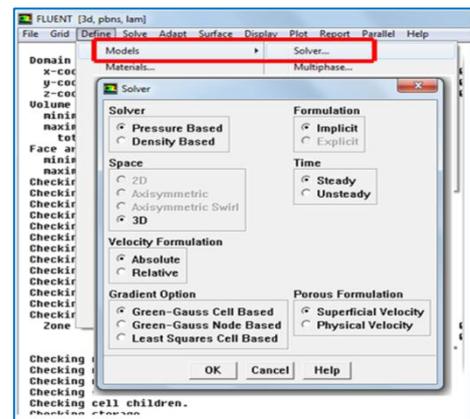


Figure VI.12. Choix du solveur et ces paramètres

³ Un fluide est dit en **écoulement incompressible** si sa masse volumique est constante au cours du mouvement

Dans notre problème l'écoulement est incompressible, ainsi un solveur pressure-based sera choisi en formulation implicite et en régime permanent, les autres paramètres du solveur sont laissés par défaut.

VI.5.5. Activation du modèle de transport des espèces et réactions chimiques

Fluent peut modéliser le mélange et le transport des espèces chimiques par la résolution des équations de conservation, les équations descriptives de la convection, la diffusion et les sources réactionnelles pour chaque espèce. Les réactions chimiques multiples et simultanées peuvent être modélées, avec des réactions surgissant dans la phase Bulk (réactions volumétriques) et/ou en surface (parois ou site) et même dans les régions poreuses.

Dans notre travail un écoulement constitué de l'eau et de chlorure de Sodium traversera notre modèle géométrique, la formation d'un tel mélange (solution aqueuse) ne pourra se faire sans l'activation du modèle de transport des espèces et réactions chimiques de FLUENT, sans oublier d'activer la case des réactions volumiques et les réactions de surface.

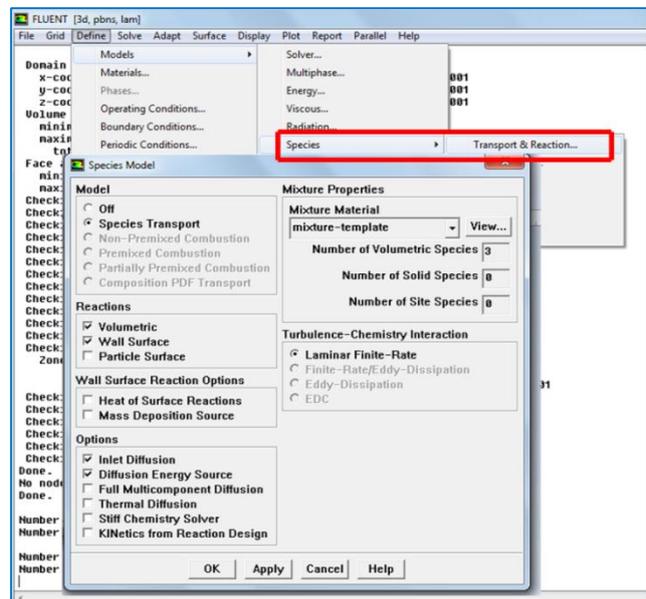


Figure VI.13. Activation du modèle de transport des espèces et réactions chimiques

VI.5.6. Définition des propriétés des matériaux

Deux espèces chimiques forment le mélange : l'eau et le chlorure du Sodium, la base de données de FLUENT contient les propriétés de l'eau liquide à la température de référence de 20°C, ainsi un réajustement des paramètres est nécessaire. A la température de travail de 36°C la masse volumique de l'eau est de 993,5 kg/m³ alors que la viscosité dynamique est de 7,19 10⁻⁴ kg/m.s. c'est ces deux paramètres qui nous importe dans une caractérisation d'un transfert massique.

Le chlorure du Sodium n'existe pas dans la base de données de FLUENT, on doit créer un nouveau matériau nommé chlorure du Sodium puis introduire ces paramètres spécifiques aux conditions de travail (masse volumique de 1549 kg/m³).

L'eau vapeur sera défini à partir de la base de données sans avoir recours à la modification de ces paramètres puisque elle ne contribue pas dans le mélange et sera évacuer à travers la surface du ménisque par une réaction de surface décrivant un processus d'évaporation.

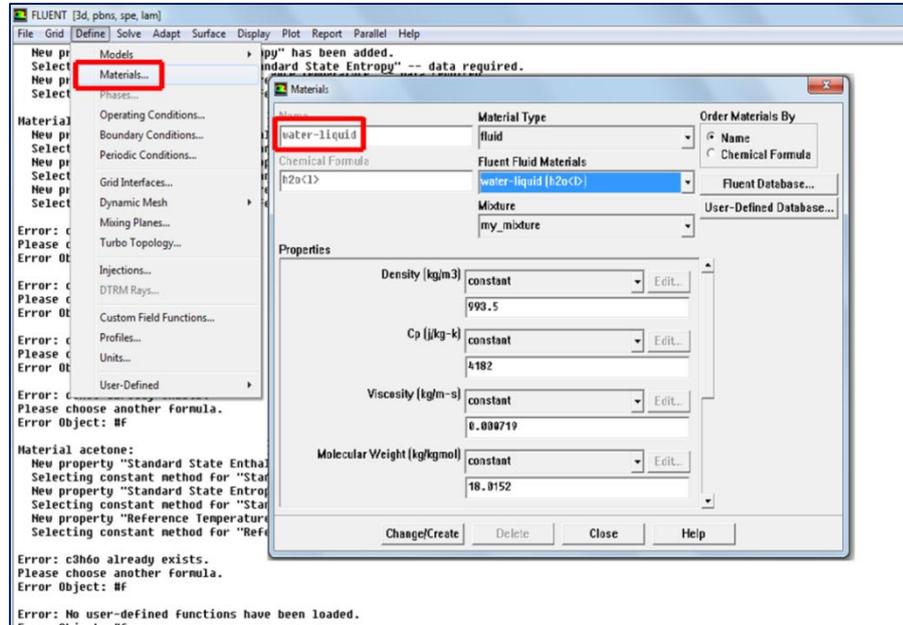


Figure VI.14. Définition des propriétés des matériaux

On crée maintenant un mélange constitué de l'eau liquide et de chlorure de Sodium avec l'option de loi de mélange pondéré par volume pour le calcul de la densité et pondéré par masse pour le calcul de la viscosité du mélange, le coefficient de diffusion entre les deux espèces en question étant $1,9 \cdot 10^{-9}$.

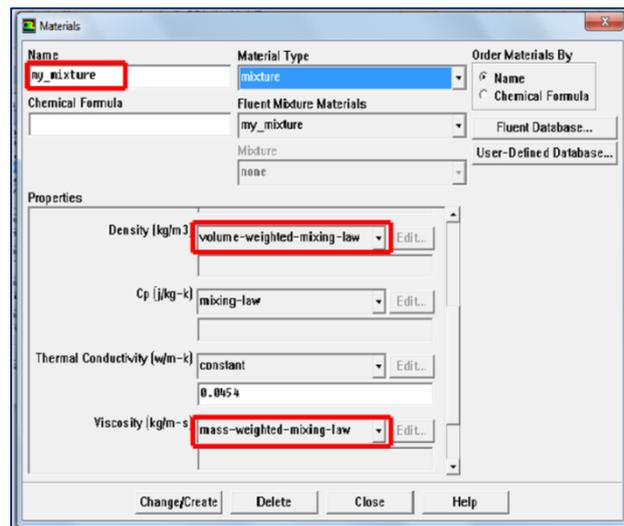


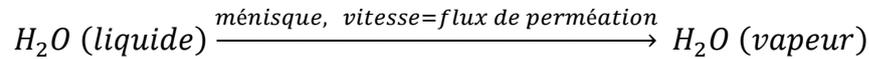
Figure VI.15. Création du mélange réactionnel

VI.5.7. Définition des paramètres du modèle de transport des espèces et réactions chimiques

Dans le cas d'une réaction surfacique, plusieurs paramètres doivent être introduits avec précision : le nombre de réactants et de produits, les coefficients stœchiométriques,

l'ordre de réaction par rapport à chaque réactif et les facteurs de la loi d'Arrhenius (facteur pré-exponentiel, l'énergie d'activation et l'exposant de température).

Dans l'identification du problème, on a simulé la réaction d'évaporation de l'eau au niveau du ménisque par une réaction chimique de surface (au niveau du ménisque).



Reste à trouver un moyen pour considérer la vitesse de cette réaction d'évaporation comme étant le flux de perméation à travers la longueur du pore membranaire.

L'idée était de considérer que cette réaction surfacique est d'ordre 0 par rapport aux deux réactants du mélange, où on aura une consommation de l'eau liquide avec une vitesse de disparition :

$$v_r = k [\text{réactant}]^0 \Rightarrow v_r = k \dots \dots \dots \text{(VI. 5)}$$

Ainsi on arrive à déterminer le premier paramètre qui est l'ordre de la réaction par rapport au réactant (eau liquide) et qui sera égale à 0.

Afin de préserver l'équilibre de la réaction les coefficients stœchiométriques du réactant et du produit doivent être égaux à 1.

Dans le présent modèle la définition du coefficient de vitesse k n'est pas permise, il faut introduire tous les paramètres de la loi d'Arrhenius qui est de la forme suivante :

$$k = A e^{\frac{-E_a}{RT^e}} \dots \dots \dots \text{(VI. 6)}$$

Où A est le facteur pré-exponentiel, E_a est l'énergie d'activation de la réaction et e est l'exposant de température souvent égale à 1.

Il est clair, qu'en imposant à l'énergie d'activation et l'exposant de la température des valeurs nulles le facteur pré-exponentiel dans la loi d'Arrhenius sera égale au coefficient de vitesse qui est lui même égale au flux de perméat dans un procédé de distillation membranaire.

De cette manière on arrive à simuler la réaction d'évaporation surgissant dans la distillation membranaire par une réaction chimique se passant à la surface du ménisque. La dernière étape est d'activer le mécanisme qu'on vient de créer dans le panneau *Mechanism*

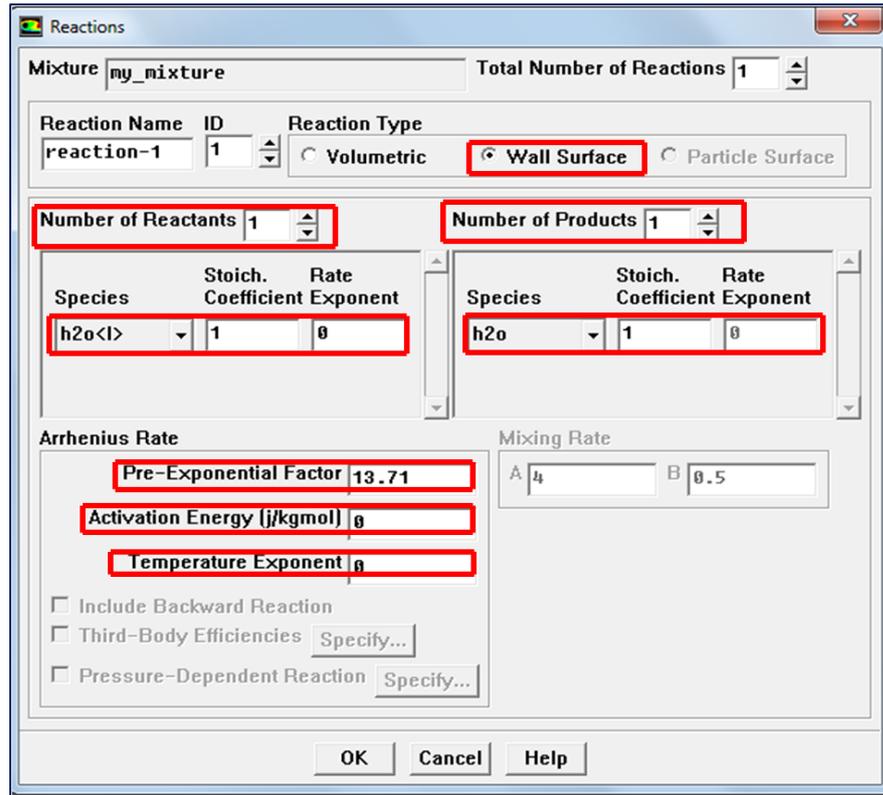


Figure VI.16. Définition des paramètres du modèle de transport des espèces et réactions chimiques

VI.5.8. Définition des conditions opératoires

Avant de passer à la définition des conditions aux limites, il faut préciser tout d'abord la valeur de la pression de référence.

En effet, FLUENT effectue tous les calculs avec une pression appelée « pression de jauge » et ce afin d'éviter les erreurs d'ordre numérique lors du calcul pour des écoulements à faible nombre de Mach. La relation liant la pression absolue à la pression de jauge est donnée par :

$$P_{abs} = P_{op} + P_{jauge} \dots \dots (VI.7)$$

FLUENT prend par défaut la valeur de la pression atmosphérique comme pression d'opération.

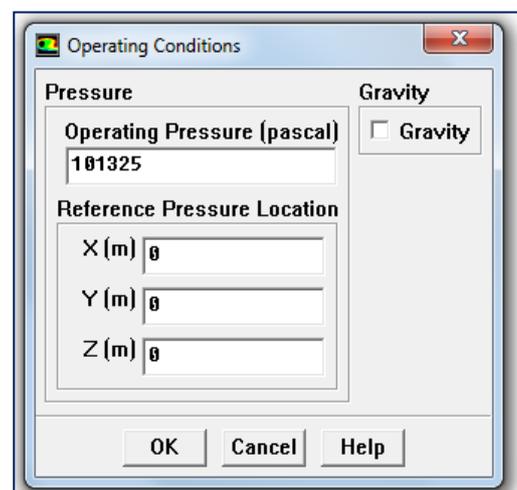


Figure VI.17. Définition des conditions opératoires.

VI.5.9. Définition des conditions aux limites

Les types des conditions aux limites sont déjà imposés lors de la création de la géométrie par GAMBIT, il ne reste que la spécification des valeurs physiques spécifiques à chaque type. Les conditions aux limites précisent les caractéristiques de l'écoulement et les propriétés des surfaces constituant notre modèle physique. Ils sont, par conséquent, un élément essentiel des simulations FLUENT et il est important qu'elles soient spécifiées d'une manière appropriée.

a. Frontière « Inlet » - type « Velocity Inlet » (vitesse d'entrée)

Utilisé pour des écoulements incompressibles ou moyennement incompressibles quand la vitesse d'entrée du fluide est connue.

La vitesse du fluide bulk est connue et égale à 0,35 m/s, mais cette vitesse est moyenne sur toute la longueur du compartiment d'alimentation qui est très grande relativement à la hauteur correspondante dans notre modèle géométrique (0,4 μm). Il est évident que cette hauteur se situe dans la couche limite avoisinante la surface membranaire, il est nécessaire de déterminer la vitesse de l'écoulement à la mi-hauteur de notre modèle et la considérée comme une vitesse moyenne à l'entrée.

La détermination de la vitesse d'entrée de notre modèle est un travail délicat, Blasius a réussi à déterminer le profil de la vitesse dans la couche limite d'un écoulement newtonien, bidimensionnel, laminaire et incompressible (voir annexe 3 pour plus de détails), mais on doit tout d'abord déterminer le régime d'écoulement pour les neuf concentrations.

- Détermination de la viscosité des solutions aqueuses de chlorure de Sodium

Les variations de la viscosité cinématique des solutions aqueuses de chlorure de sodium suivant la pression (de 1 à 350) restent négligeables.

La littérature [95] fournit les valeurs de la viscosité cinématique des solutions aqueuses de chlorure de Sodium entre 30°C et 40°C, on détermine la viscosité cinématique à la température de travail (36°C) par une extrapolation linéaire. On remarque qu'il nous manque la valeur de viscosité cinématique spécifique à l'eau de mer (0.62M), de même et par une extrapolation linéaire entre les valeurs de la viscosité entre 0,5M et 1M on retrouve la valeur de cette dernière.

Ainsi, on obtiendra toutes les valeurs de la viscosité cinématique pour chaque molarité expérimentale à la température de travail.

Tableau VI.10. Valeurs de la viscosité cinématique pour chaque concentration d'entrée

Molarité	0,5	0,62	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4
ν (10^{-6} m ² /s)	0,716	0,722	0,739	0,764	0,792	0,823	0,858	0,896	0,938

- Détermination du régime d'écoulement dans la couche limite

Le Reynolds spécifique à la couche limite sera calculé suivant la formule [54] :

$$Re = \frac{U * x_c}{\nu} \dots \dots \dots (VI.8)$$

Avec U la vitesse de l'écoulement, ν la viscosité cinématique et x_c est la distance complète à partir du bord d'attaque pris dans notre cas égale à la longueur du canal d'alimentation (5,5 cm),

$$\text{Une couche limite est dite } \begin{cases} \textit{laminaire} \textit{ si } Re \leq 2,10^5 \\ \textit{transitoire} \textit{ si } 2,10^5 < Re \leq 3,10^6 \\ \textit{turbulente} \textit{ si } Re > 3,10^6 \end{cases}$$

Les résultats obtenus sont représentés dans le tableau ci-dessus :

Tableau VI.11. Nombre de Reynolds en fonction de la molarité d'entrée

Molarité	0,5	0,62	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4
$Re \cdot 10^{-4}$	2,69	2,67	2,61	2,52	2,43	2,34	2,24	2,15	2,05
Régime d'écoulement	<i>laminaire</i>								

La méthode de Blasius n'est applicable que si l'écoulement est laminaire.

- Détermination de la vitesse d'écoulement dans la couche limite

Blasius a introduit dans sa démonstration deux nouvelles fonctions qui dépendent des positions x et y définis comme suit :

$$\eta(x, y) = \frac{y}{2} \left(\frac{U}{\nu x} \right)^{1/2} \dots \dots \dots (VI.9)$$

$$f(\eta) = \varphi \left(\frac{\rho}{\mu U x} \right)^{1/2} \dots \dots \dots (VI.10)$$

$$\text{Avec } \begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = v_x \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -v_y \end{cases}$$

On vérifie aisément que les changements de vitesse transversale le long de la longueur du canal d'alimentation (5,5 cm) et la hauteur de notre modèle restent faibles ($4.10^{-4} - 9.10^{-4}$ m/s), Par conséquent, la position choisie pour la détermination de la vitesse moyenne régnant dans notre modèle géométrique sera le centre de la membrane et la mi-hauteur de nos géométries,

En utilisant cette position on détermine par la méthode de Blasius la vitesse moyenne du fluide traversant nos géométries,

Deux paramètres sont à introduire dans le panneau réservé à la première condition de limite (*velocity Inlet*) et qui sont : la vitesse moyenne du fluide et la fraction massique en NaCl dans la solution d'entrée, Les valeurs de ces paramètres sont présentées dans le tableau suivant :

Tableau VI.12. Vitesses d'entrée du liquide et fractions massiques en sel

Molarité	Fraction massique NaCl	η	V_x (10^{-4} m/s)
0,5	0,029	6,99E-03	4,85
0,62	0,036	6,96E-03	4,85
1	0,058	6,88E-03	4,84
1,5	0,088	6,77E-03	4,82
2	0,116	6,65E-03	4,80
2,5	0,146	6,52E-03	4,79
3	0,175	6,39E-03	4,77
3,5	0,204	6,25E-03	4,75
4	0,233	6,11E-03	4,73

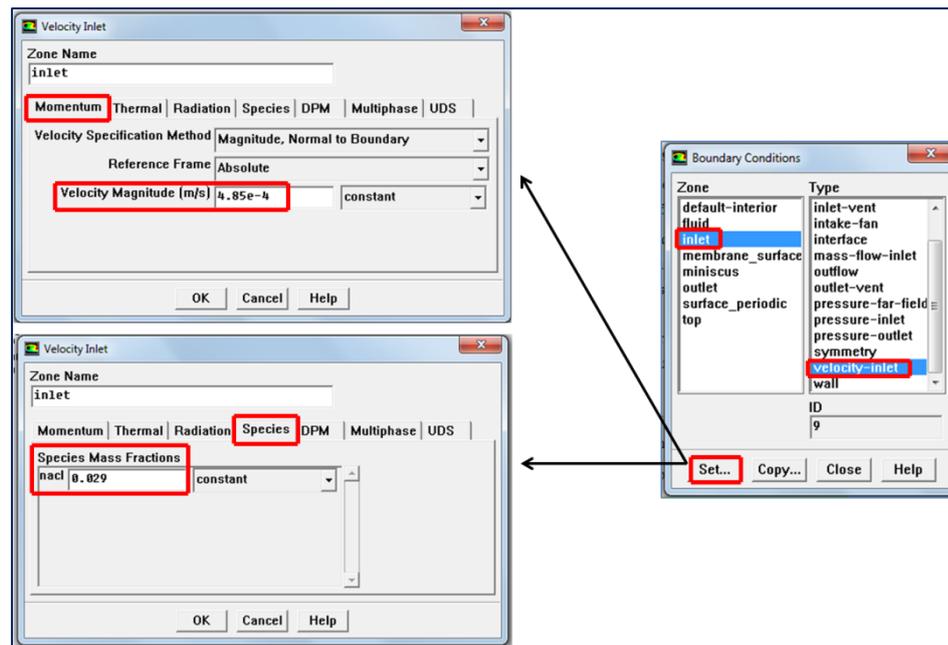


Figure VI.18. Définition des paramètres de la condition au limite « velocity inlet ».

b. Frontière « Outlet » - type « OutFlow » (sortie de l'écoulement)

Ce type est utilisé pour modéliser les sorties de fluide dont on ne connaît pas a priori les détails de la vitesse sortie.

Ce type de condition ne dépend qu'un seul paramètre qui est la fraction du débit sortant par rapport à celui d'entrée, On le met égale à 1 dans notre cas puisque les flux de perméabilité sont faibles relativement au débit d'entrée.

c. Frontière « Surface Periodic » type « Periodic » (périodique)

Comme son nom l'indique un type périodique signifie la reproductibilité des solutions selon un domaine bien défini, FLUENT propose deux types de périodicité : translationnelle et rotationnelle, Dans notre modèle la périodicité est de type transrationnel.

d. Frontière « Membrane Surface » type « wall » (paroi)

Il s'agit de la surface membranaire, on lui implique des paramètres convenables : paroi stationnaire et condition de non glissement

e. Frontière « Top » type « Wall »

Les mêmes paramètres que précédemment s'appliqueront pour cette zone.

f. Frontière « Miniscus1 – 9 » type « Wall »

La particularité de ces zones (les deux types de géométries : un et neuf ménisques) qu'elles sont le siège de la réaction d'évaporation de l'eau liquide déjà expliquée antérieurement. Cependant, l'activation de l'option « reaction » est obligatoire avec le choix précis du mécanisme réactionnel,

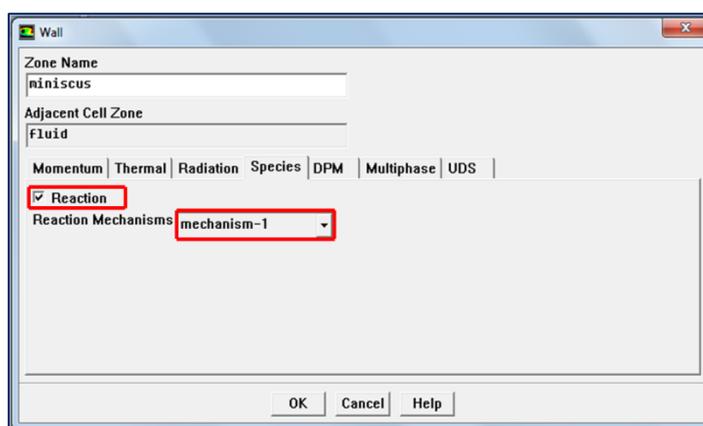


Figure VI.19. Définition des paramètres de la condition au limite « Miniscus ».

e. Zone « Fluid » type « Fluid »

La zone « fluid » englobe le domaine intérieur de notre modèle géométrique et dont le type était déjà défini (un fluide s'écoulant de l'entrée à la sortie),

VI.5.10. L'initialisation du calcul des solutions

Initialiser le calcul c'est imposer aux variables des valeurs de début des itérations. Il est conseillé dans la plupart des cas d'initialiser les calculs aux conditions d'entrée. Toutefois, il est préférable d'initialiser encore une autre fois le calcul lors d'un changement d'un paramètre pour un nouveau calcul de solution.

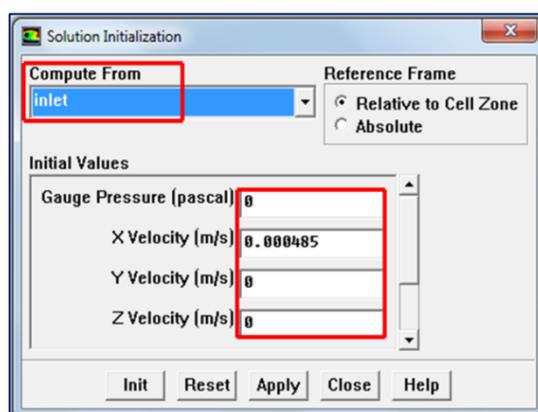


Figure VI.20. Initialisation du calcul

VI.5.11. Le choix des critères de convergence des solutions

Il s'agit de choisir les critères à vérifier pour que les calculs de la simulation s'arrêtent, les résidus sont calculés à partir des variations des valeurs des variables entre deux itérations successives.

En effet, et dans la plupart des cas le calcul des résidus est suffisant

Lorsqu'on utilise le solveur (pressure-based), les valeurs optimales des résidus sont de 10^{-3} pour les paramètres de l'équation de continuité et les valeurs de vitesse et de 10^{-6} pour l'équation d'énergie alors que pour le calcul des espèces, elle est de 10^{-5} , ces valeurs peuvent être poussées d'avantage en cas de nécessité [49],

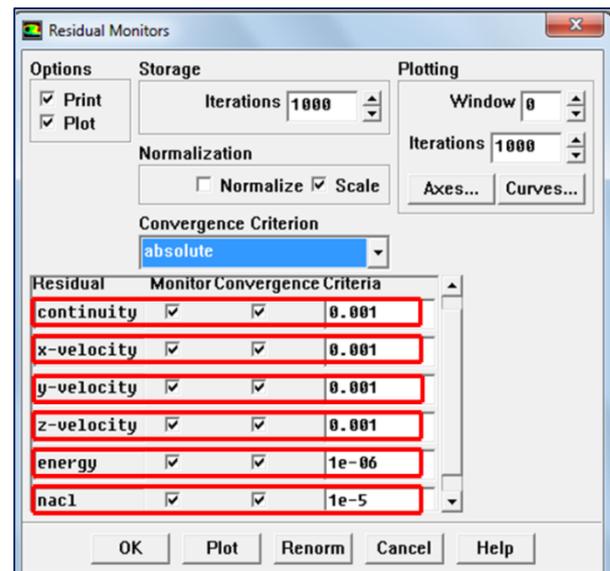


Figure VI.21. Choix des critères de convergence

Il existe d'autres critères de vérification de la convergence des solutions (la conservation de masse, des espèces...)

VI.5.12. La définition des paramètres de contrôle de la solution

Il s'agit de déterminer la méthode de calcul de la solution ainsi que le schéma de discrétisation des équations, et les coefficients de sous relaxation.

Il est préférable de prendre les paramètres par défaut de FLUENT et ne toucher ces paramètres que pour la vérification des solutions une fois convergées.

Dans nos simulations un schéma de discrétisation en premier ordre est employé, par la suite, un schéma de deuxième ordre est utilisé pour la vérification des résultats.

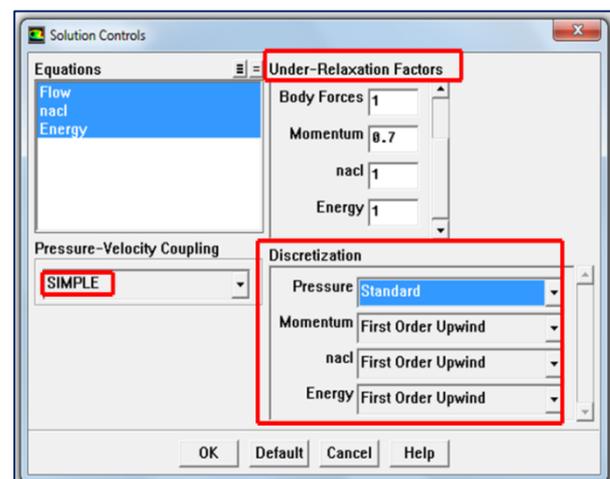


Figure VI.22. Définition des paramètres de contrôle de la solution

VI.5.13. Lancement de la simulation

Le paramétrage étant effectué, il ne reste plus qu'à déterminer le nombre maximal d'itérations que FLUENT ne devra pas dépasser.

VI.6. Traitement de la solution (Post-processing)

L'arrêt du processus d'itération est synonyme de la convergence de la solution, toutefois, une solution convergée n'est pas nécessairement correcte, le passage pour un schéma de discrétisation de deuxième ordre est préférable pour vérifier l'exactitude de la solution. La discrétisation de premier ordre est plus rapide mais de deuxième ordre est plus exacte [49].

La figure V.19 présente le développement des résidus au cours d'une des simulations réalisées. La durée d'une simulation dépend essentiellement de la densité du maillage, les paramètres du contrôle de la solution et le degré de précision recherché.

Les outils intégrés à FLUENT ont l'avantage de permettre de passer rapidement au traitement numérique et graphique de la solution.

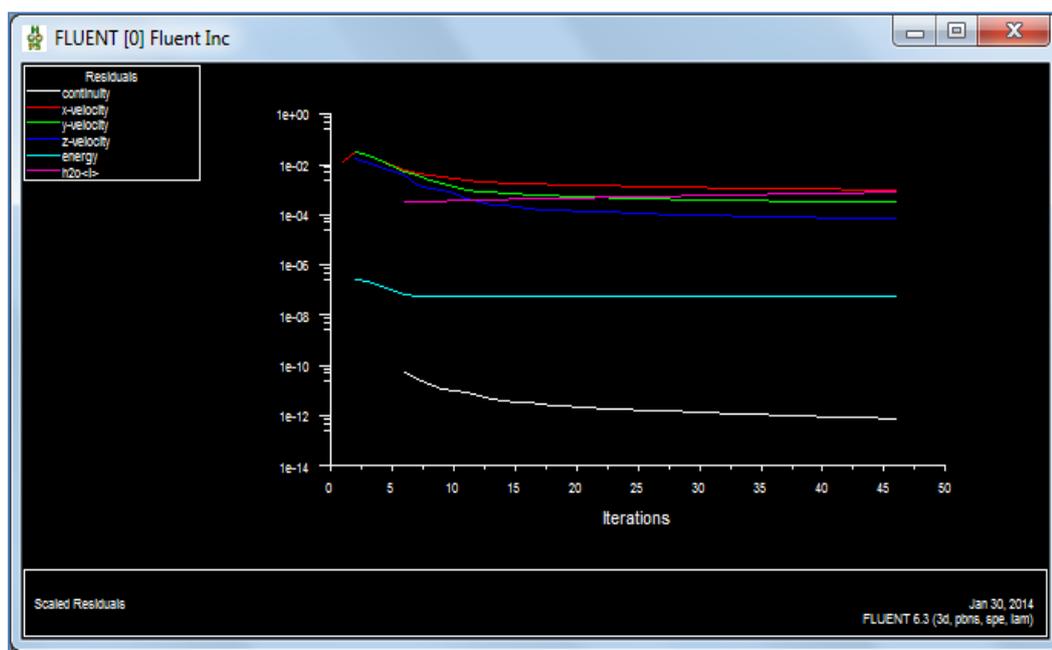


Figure VI.23. Développement des résidus au cours d'une des simulations

Les principaux outils du traitement numérique sont les rapports des flux massique et thermique, le rapport des intégrales surfaciques (il sera utilisé par la suite dans notre traitement) et les intégrales volumiques.

Plusieurs outils sont utilisés pour le traitement graphique, on en cite l'affichage de la grille, l'affichage des contours des variables, l'affichage des vecteurs des variables, l'affichage des lignes de courant, le tracé de l'évolution d'une variable et la création d'une animation vidéo.

VI.7. Résultats et discussions

En total, deux (02) configurations (un ou neuf ménisques) sont créés, chacune est constituée de trois (03) géométries. Chaque géométrie sera le siège de neuf (09) simulations (9 molarités), ce qui fait un ensemble de cinquante quatre (54) simulations à réaliser. La procédure de simulation est déjà expliquée en détails antérieurement.

Le résultat et qui est l'objectif recherché à travers cette étude est la détermination de l'évolution de la fraction massique du soluté (le sel NaCl) au niveau de la surface du ménisque. L'option de FLUENT qui permet d'avoir cette valeur est le rapport d'intégrale surfacique moyen de la fraction massique de l'espèce en question,

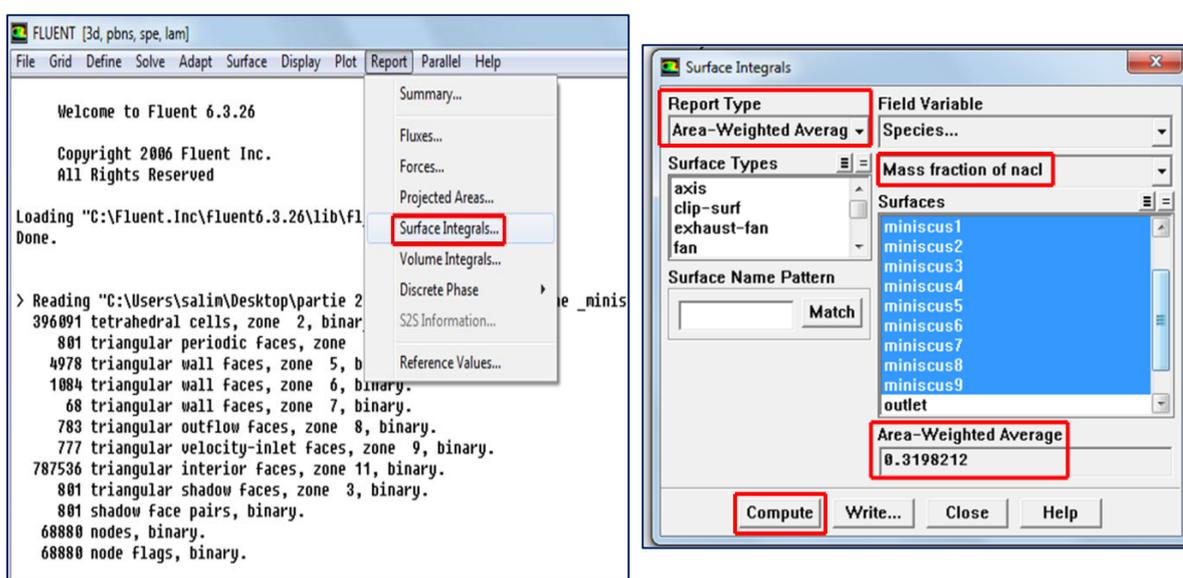


Figure VI.24. Rapport d'intégrale surfacique moyen de la fraction massique en sel

A noter que le passage à un schéma de discrétisation de deuxième ordre n'a aucun effet sur les résultats obtenus. Le tableau VI.14 regroupe les résultats de toutes les simulations.

On constate que les résultats obtenus pour chaque type de maillage sont proches, par conséquent, les géométries en un seul ménisque peuvent bien représenter l'écoulement dynamique du fluide. Aussi, les valeurs des fractions massiques obtenus ont le même ordre de grandeur que celles reportées dans la littérature [75], ce qui valide notre approche et donne un sens physique au modèle géométrique établi.

La figure VI.21 présente le contour (distribution) de la fraction massique pour une géométrie en un seul ménisque

Tableau VI.13. Fractions massiques du sel au niveau du ménisque pour toutes les concentrations d'entrée et les différentes densités de maillage

C_{NaCl} molaire	fraction massique NaCl à l'entrée	$J, 10^{-3}$ ($\text{kg}/\text{m}^2, \text{s}$)	J ($\text{kg}/\text{m}^3, \text{s}$)	Fraction massique NaCl au niveau du ménisque (moyenne pondérée par surface)					
				1 ménisque maillage non dense	1 ménisque maillage dense	1 ménisque maillage très dense	9 ménisques maillage non dense	9 ménisques maillage dense	9 ménisques maillage très dense
0,5	0,029	2,44	13,71	0,2867	0,1398	0,1112	0,3003	0,1651	0,0993
0,62	0,036	2,40	13,48	0,2887	0,1447	0,1166	0,3021	0,1694	0,1050
1	0,058	2,28	12,81	0,2962	0,1605	0,1340	0,3088	0,1838	0,1230
1,5	0,088	2,24	12,58	0,3194	0,1875	0,1618	0,3316	0,2102	0,1511
2	0,116	2,15	12,08	0,3359	0,2106	0,1862	0,3475	0,2321	0,1760
2,5	0,146	2,04	11,46	0,3524	0,2347	0,2118	0,3632	0,2549	0,2023
3	0,175	1,95	10,95	0,3703	0,2589	0,2372	0,3803	0,2779	0,2282
3,5	0,204	1,84	10,34	0,3861	0,2823	0,2621	0,3957	0,3001	0,2537
4	0,233	1,68	9,44	0,3974	0,3037	0,2855	0,4061	0,3198	0,2778

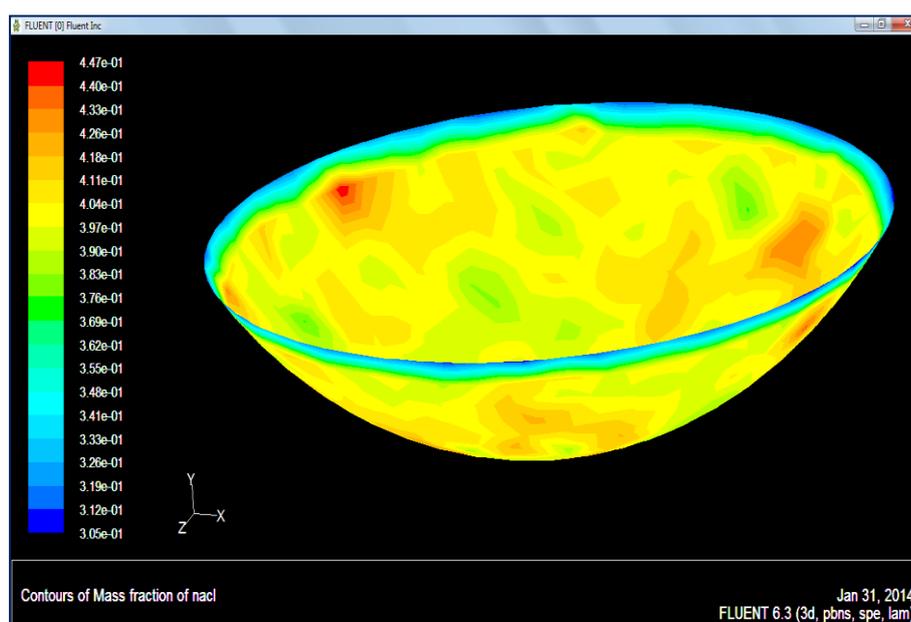


Figure VI.25. Contour de la fraction massique pour une configuration en un seul ménisque et une concentration d'entrée de 0,5 M

Lorsqu'il s'agit d'une géométrie à neuf ménisques la fraction massique que procure FLUENT est une moyenne arithmétique des neuf ménisques,

Les résultats obtenus pour la géométrie en neufs ménisques avec maillage très dense représentent la solution la plus précise et la plus exacte, elles seront réservées pour l'interprétation des résultats.

Il est préférable de présenter la fraction massique du sel au niveau du ménisque par le taux de recouvrement du ménisque.

Tableau VI.14. Taux de recouvrement du ménisque en fonction de la concentration en sel de la solution d'entrée

C_{NaCl} molaire	$C_{massique}$ (g[NaCl]/ Kg[H ₂ O])	fraction massique NaCl à l'entrée	$J, 10^{-3}$ (kg/m ² ,s)	J (kg/m ³ ,s)	Fraction massique NaCl au niveau du ménisque (moyenne pondérée par surface)	Taux de recouvrement du ménisque %
0,5	29,22	0,029	2,44	13,71	0,0993	9,93
0,62	36,23	0,036	2,40	13,48	0,1050	10,50
1	58,44	0,058	2,28	12,81	0,1230	12,30
1,5	87,66	0,088	2,24	12,58	0,1511	15,11
2	116,44	0,116	2,15	12,08	0,1760	17,60
2,5	146,1	0,146	2,04	11,46	0,2023	20,23
3	175,32	0,175	1,95	10,95	0,2282	22,82
3,5	204,54	0,204	1,84	10,34	0,2537	25,37
4	233,76	0,233	1,68	9,44	0,2778	27,78

Une évolution de la fraction massique en sel (NaCl) de 703% conduit à une augmentation du taux de recouvrement de la surface du ménisque de 179%.

Les figures suivantes présentent le contour des fractions massiques au niveau des neufs ménisques pour quelques molarités choisies.

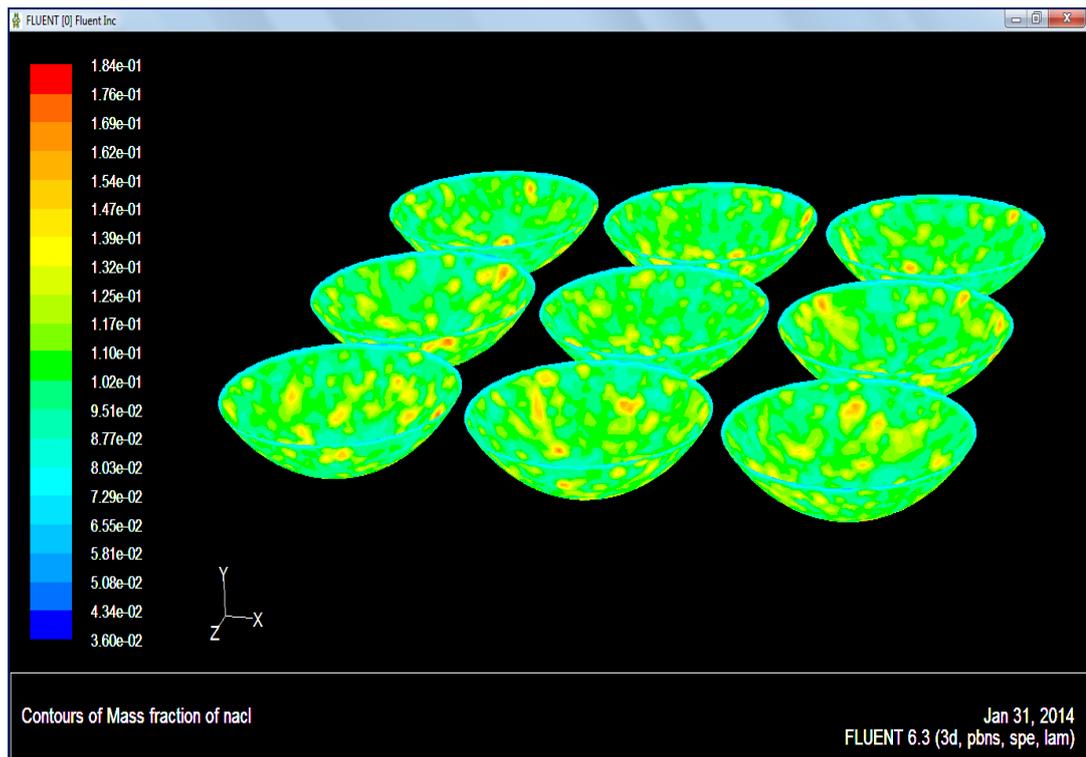


Figure VI.26. Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 0,62 M (eau de mer)

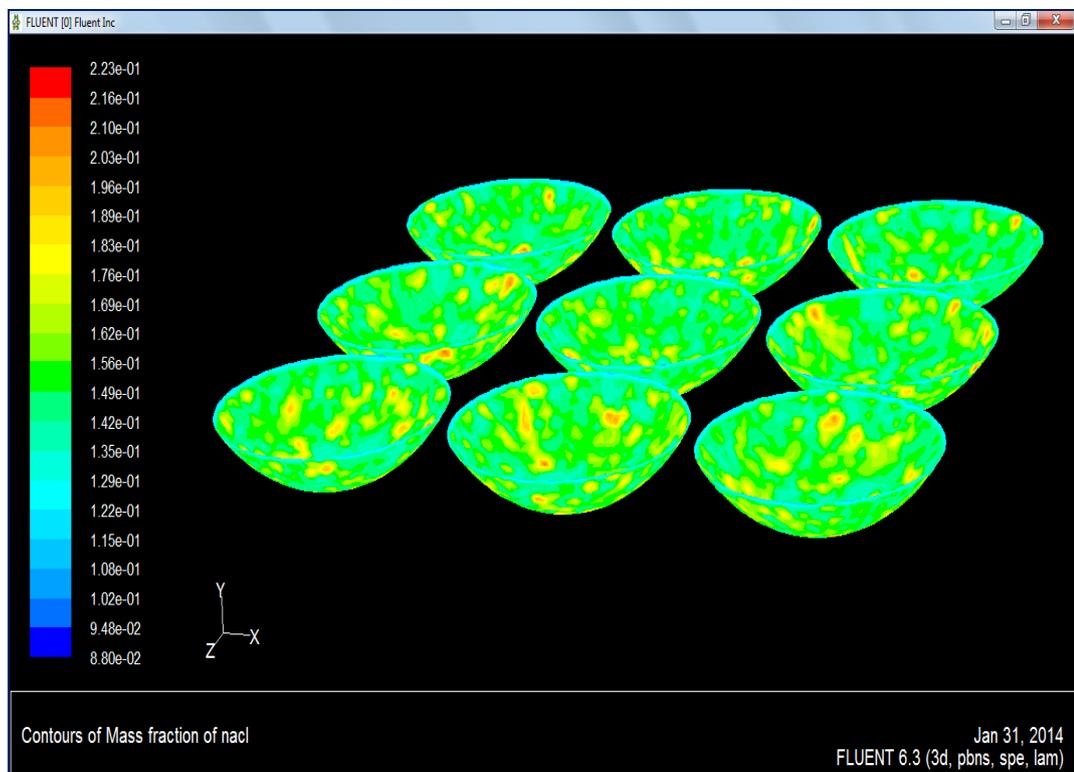


Figure VI.27. Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 1,5 M

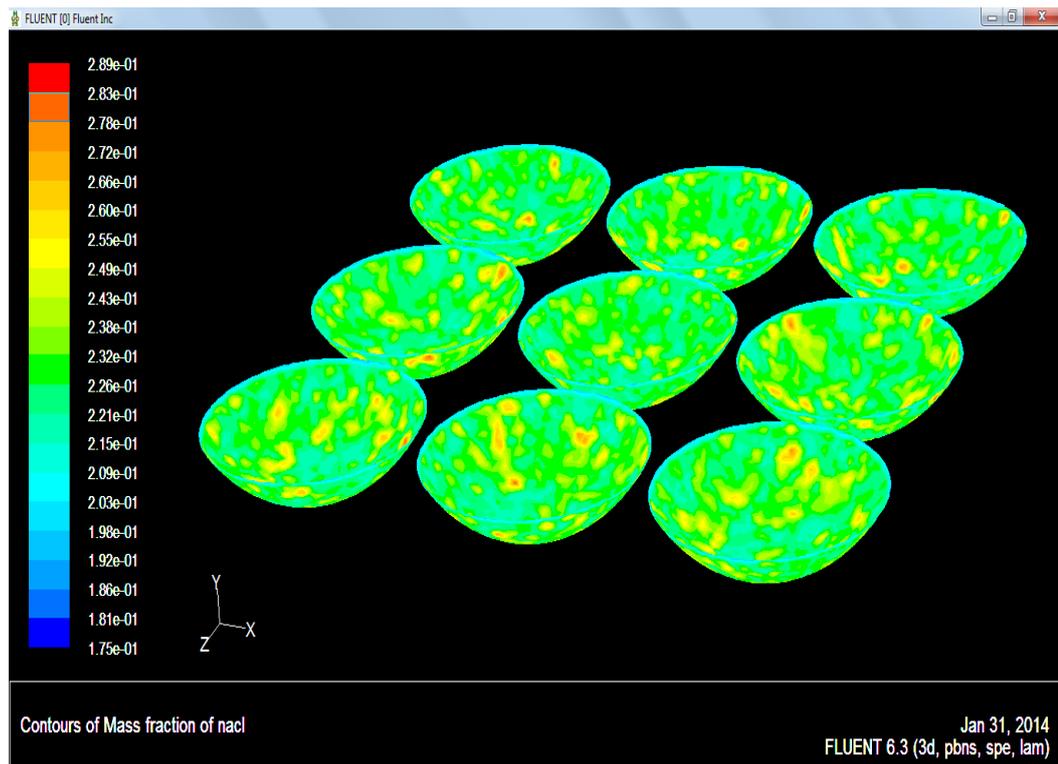


Figure VI.28. Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 3 M

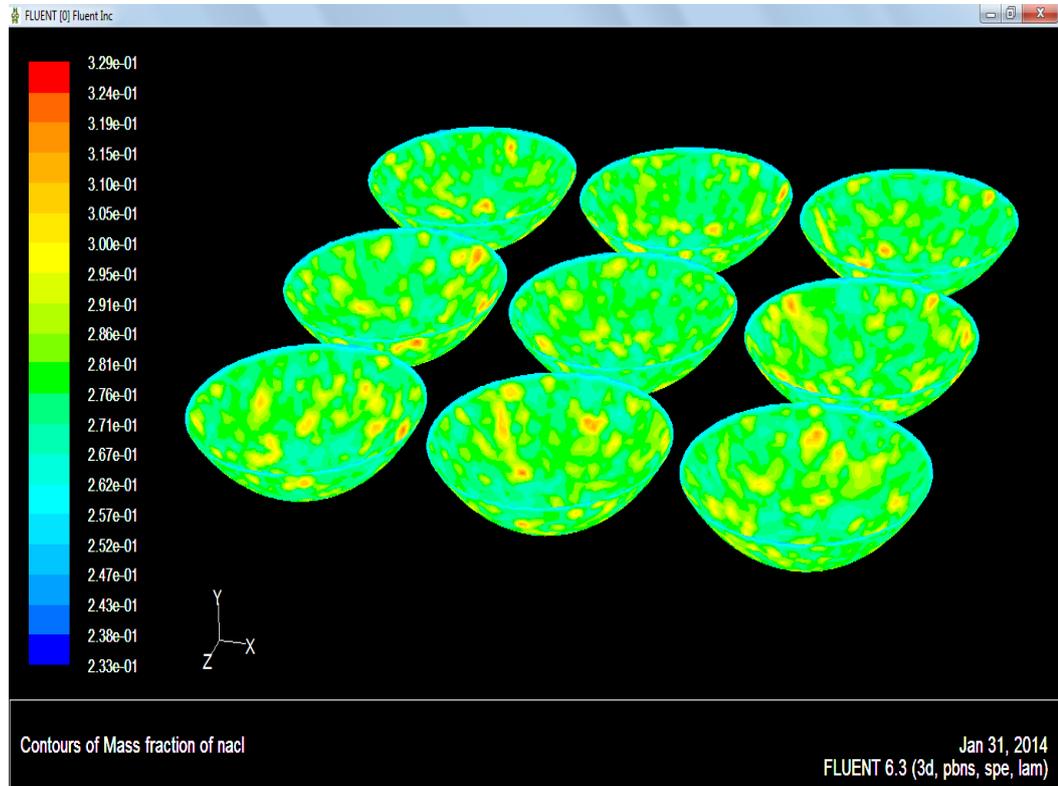


Figure VI.29. Contour de la fraction massique pour une configuration en neuf ménisques et une concentration d'entrée de 4 M

VI.8. Conclusions et perspectives

La conclusion principale qu'on peut tirer à partir de ces simulations est que l'augmentation de la concentration en soluté dans la solution de l'alimentation (considérée comme taux d'impuretés) conduit à une augmentation du taux de recouvrement de la surface du ménisque formé ce qui conduit à une diminution du flux de perméation.

Dans un procédé de distillation membranaire et pour les vitesses opérationnelles utilisées, on remarque que les particules du sel sont entraînées au niveau du ménisque siège du processus d'évaporation.

De ces simulations, on déduit aussi que les impuretés ont tendance à s'accumuler au niveau des interfaces et de réduire le coefficient d'évaporation des liquides, même de faibles contaminations de la surface réduisent le transfert de matière inter-faciale.

L'hypothèse fréquemment appliqué qui stipule que les coefficients d'évaporation et de condensation sont des propriétés constantes d'une substance n'est pas confirmée par l'analyse effectuée pour l'eau, Les coefficients d'évaporation et de condensation de l'eau obtenus théoriquement ou expérimentalement s'éparpillent plutôt sur une large gamme avec un coefficient de condensation supérieure à celui d'évaporation.

Les simulations CFD ont été d'un apport considérable dans la mesure où la détermination expérimentale de la fraction massique d'un soluté au niveau d'un ménisque dont le diamètre est de l'ordre de micromètres est quasiment impossible.

Comme perspectives :

- Refaire le même travail tout en inspectant l'effet d'autres conditions opératoires sur le taux de recouvrement de la surface du ménisque,
- Refaire le même travail pour d'autre type de modules membranaire,
- Réaliser des simulations CFD à l'échelle micro du système pour investiguer le transfert thermique dans le compartiment d'alimentation et déterminer par la suite la température au niveau de l'interface membrane/fluide d'alimentation qui est considérée comme étant le paramètre clé dans le calcul du flux de perméation, en d'autre terme c'est quantifier la polarisation de température.

CONCLUSION GENERALE

La DM est une technologie prometteuse pour les procédés de séparation et de purification. C'est un procédé de séparation à entraînement thermique dans lequel seulement les molécules vapeur passent à travers une membrane poreuse et hydrophobe.

Un potentiel espace de recherche existe pour bien explorer cette nouvelle technique :

- La plupart des travaux réalisés en MD pour investiguer l'influence des conditions opératoires sont à l'échelle expérimentale laboratoire, un large domaine de recherche couvrant les applications industrielles existe,
- l'effet de l'interaction de plusieurs conditions opératoires à la fois n'est pas étudié, on se contente souvent de déterminer l'influence de chaque condition au dépend des autres paramètres de fonctionnement,
- A l'exception de la DCMD qui a été largement étudiée, d'autres configurations n'ont pas été étudiées de la même ampleur, d'où l'orientation pour d'autres configurations est nécessaire,
- Le nombre des études concernant l'influence de la concentration élevée sur le mécanisme de transfert de masse et de chaleur est limité, il doit être examiné plus,
- Développement de nouvelles membranes poreuses avec de grandes caractéristiques hydrophobes,
- La consommation d'énergie en MD et l'effet des paramètres opérationnels nécessitent des investigations plus approfondies que celles existant de nos jours,
- Plus de systèmes hybrides pour rendre le procédé plus rentable à l'échelle industrielle,
- Les systèmes DM sont souvent couplés à des sources d'énergie solaire, d'autres sources pourront faire l'objet des recherches (énergie géothermale, éolienne.....etc.)
- Malgré son importance majeure, rares sont les études consacrées à l'effet des longues opérations de fonctionnement et à l'évaluation de l'encrassement au niveau des pores des membranes utilisées dans les différentes configurations de la distillation membranaire.

ANNEXE 1 : Caractéristiques des membrane commerciales utilisées en DM [3]

Nom commercial	Fabricant	Matériaux	ϵ (%)	δ (μm)	d_p (μm)
GVHP	Millipore	PVDF	75	110	0,22
HVHP	Millipore	PVDF	75	140	0,45
TF200	Gelman	PTFE/PP	80	178	0,2
TF450	Gelman	PTFE/PP	80	178	0,20
Sartorius	Sartorius	PTFE	70	70	0,2
TS22	Osmonics Corp	PTFE/PP	70	175	0,22
TS45	Osmonics Corp	PTFE/PP	70	175	0,45
FGLP	Millipore	PTFE/PE	70	130	0,20
PP22	Osmonics Corp	PP	70	150	0,22
Membrana	M,Germany	PP	-	91	0,2
3MA	3M Corporation	PP	66	91	0,29
3MB	3M Corporation	PP	76	81	0,4
3MC	3M Corporation	PP	79	76	0,51
3MD	3M Corporation	PP	80	86	0,58
3ME	3M Corporation	PP	85	79	0,73
TF1000	Gelman	PTFE/PP	80	178	1,00
Taflen	Gelman	PTFE/PP	50	60	0,8
TS1,0	Osmonics Corp	PTFE/PP	70	175	1,0
GVSP	Millipore	PVDF	80	108	0,22
FHLP	Millipore	PTFE/PE	85	175	0,5
Gore	Gore	PTFE	90	64	02
Gore	Gore	PTFE	89	77	0,45
Gore	Gore	PTFE/PP	44	184	0,2
Gore	Gore	PTFE/PP	78	8,5	0,2
Enka	Sartorius	PP	75	100	0,1
Enka	Sartorius	PP	75	140	0,2
Celgard2500	Hoechst Celanese	PP	45	28	0,05
Celgard2500	Hoechst Celanese	PP	38	25	0,02

- ^a module enroulé en spirale (Spiral-wound Module)

ANNEXE 2 : flux de perméation en VMD [5]

Désignation commerciale	J (10^{-3} kg/m ² ,s)	Observations
TF200	5,54	5% (fraction massique) éthanol/eau, $\Phi_1 = 4,75$ l/min, $T_{b,f} = 35^\circ\text{C}$, $P_p = 25$ torr, 27fm% éthanol dans le perméat, facteur de séparation = 7,0
	2,48	5% (fm) éthanol/eau, $\Phi_1 = 4,75$ l/min, $T_{b,f} = 35^\circ\text{C}$, $P_p = 40$ torr, 37,1fm% éthanol dans le perméat, facteur de séparation = 8,8
	5,7	9 %fm, acétone/eau, $\Phi_1 = 2,5$ l/min, $T_{b,f} = 25^\circ\text{C}$, $P_p = 20$ mbar, 40% fm acétone dans le perméat
GVHP	1,81	Eau distillée, $T_{b,f} = 25^\circ\text{C}$, $P_p = 1,7$ kPa,
PP Membrana, Germany	15,61	Ecoulement transversal, eau distillée, $\Phi_1 = 200$ l/h, $T_{b,f} = 59,1^\circ\text{C}$, $P_p = 6$ kPa,
	13,86	Ecoulement transversal, eau distillée, $\Phi_1 = 235$ l/h, $T_{b,f} = 59,2^\circ\text{C}$, $P_p = 1$ kPa,
3MB	117,0	Eau distillée, $\Phi_1 = 63$ cm ³ /s, $T_{b,f} = 74^\circ\text{C}$, $P_p = 3$ kPa.
3MC	160,2	
3MA	103,5	
PP Accurel S6/2 MD020CP2N	7,9	Eau distillée, $V_1 = 0,8$ m/s, $T_{b,f} = 65^\circ\text{C}$, $P_p = 3,5$ kPa.
PVDF non supporté	5,0	Eau distillée, $T_{b,f} = 25^\circ\text{C}$, $P_p = 1666,5$ Pa,
	4,46	Chloroforme/eau (1000 mg/l), facteur de séparation = 7,89.
PVDF ^a	0,076	1,1,1-trichloroéthane (TCA) 620 ppm/eau d'alimentation $T_{b,f} = 50^\circ\text{C}$, $P_p = 2,67$ kPa, $T_{b,f} = 60^\circ\text{C}$, $P_p = 10,7$ kPa, Élimination du TCA jusqu'à 97%
	0,056	
PVDF ^b M2 M3	0,142 0,140	TCA 430 ppm dans l'eau, $T_{b,f} = 50^\circ\text{C}$, $P_p = 5,3$ kPa flux total, élimination du TCA jusqu'à 83% flux total, élimination du TCA jusqu'à 85%
PE ^c	1,11	$T_{b,f} = 60,5^\circ\text{C}$, $P_p = 5,3$ kPa, 35 g/l NaCl
ZrO ₂ (Zr50) ^d modifié	2,08	$T_{b,f} = 40^\circ\text{C}$, $P_p = 0,3$ kPa, 0,5 M NaCl, sel rétention 96,1%

PP MXFR 3 ^e modifié	19,72 19,16	T _{b,f} = 40 °C, P _p = 0,3 kPa, eau distillée 1% f-m NaCl
SMM/PESV3 ^f	0,54 0,127 0,074	Eau pure, T _{b,f} = 26 °C, P _p = 400 Pa, 1000 ppm éthanol/eau, T _{b,f} = 26 °C, P _p = 650 Pa, flux total flux partiel d'eau
TIPS iPP ^g	8,03 6,89	Φ _l = 50 l/h, T _{b,f} = 70 °C, P _p = 3 kPa, eau distillée 0,5Mol/l NaCl, 99,9 % taux de rejet du sel

^a PVDF membrane en fibre creuse ($d_i/d_e = 0,52/0,90$ mm ; $d_p = 3,24 \cdot 10^{-7}$ m ; $\varepsilon/L_p = 118$ m⁻¹) préparée par le procédé d'inversion de phase humide,

^b PVDF membrane en fibre creuse, M2 ($d_i/d_e = 0,53/0,84$ mm ; $d_p = 1,36 \cdot 10^{-7}$ m ; $\varepsilon/L_p = 542$ m⁻¹) et M3 ($d_i/d_e = 0,52/0,82$ mm ; $d_p = 6,2 \cdot 10^{-8}$ m ; $\varepsilon/L_p = 1516$ m⁻¹) préparées par le procédé d'inversion de phase humide,

^c Polypropylène (PP : $d_i/d_e = 342,5/442,5$ μm ; $\varepsilon = 53,3$ % ; $d_p = 7,4 \cdot 10^{-2}$ μm) et Polyéthylène (PE : $d_i/d_e = 267,5/367,5$ μm ; $\varepsilon = 66,3$ % ; $d_p = 8,7 \cdot 10^{-2}$ μm), membrane en fibre creuse préparées par fusion extrusion/étirement à froid,

^d Membrane céramique greffée par 1H,H,2H,2H-perfluorodecyltriéthoxysilane (Dioxyde de Zircon, ZrO₂ : $d_p = 5$ nm) ; (Alumine, Al₂O₃ : $d_p = 200$ nm) ; (Dioxyde de Titane, TiO₂ : $d_p = 5$ nm),

^e Polypropylène (PP), membrane poreuse en fibre creuse (Accurel Membrana : PP 150/330 ; $d_i/d_e = 0,33/0,63$ mm ; $\varepsilon = 65$ % ; taille maximale du pore = 0,2 μm), revêtue par polymérisation par plasma à l'aide de silicone fluoré,

^f Membrane en feuillet plat avec surface modifiée par des macromolécules de modification de surface (SMMs),

^g Membrane en feuillet plat préparée par la séparation de phase thermiquement induite (TIPS) à l'aide du polypropylène isostatique (PPi),

T_{b,f} : la température Bulk du fluide d'alimentation (feed),

Φ_l : le débit volumique du liquide,

V_l : la vitesse de recirculation du liquide d'alimentation,

P_p : la pression du coté perméat,

ANNEXE 3 : Méthode de Blasius [54]

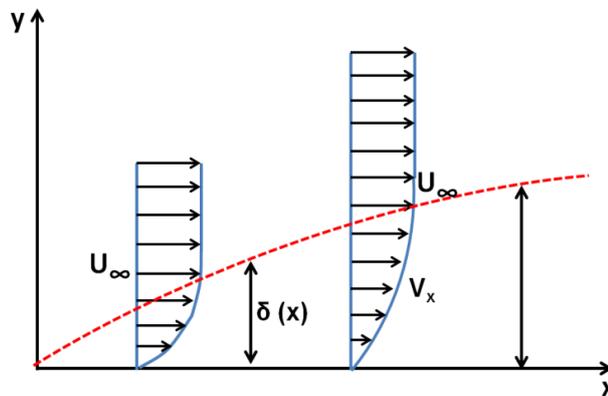
Dans cette démonstration le plan (x,y) fait référence un plan longitudinal du compartiment alimentation de n'importe quel module membranaire en feuillet plat (flat sheet), les équations de mouvement pour un écoulement bidimensionnel d'un fluide Newtonien incompressible sont :

1. Direction des x :

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + g_x \dots \dots \dots (1)$$

2. Direction des y :

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + g_y \dots \dots \dots (2)$$



Une analyse d'ordre de grandeur des termes est faite en se basant sur les simplifications de PRANDTL :

- a. L'écoulement est permanent :

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} = \frac{\partial v_y}{\partial t} = 0 \dots \dots \dots (3)$$

- b. L'épaisseur de la couche limite est très petite par rapport à la distance du bord d'attaque :

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \dots \dots \dots (4)$$

- c. La vitesse en direction de y est très faible par rapport à celle en x, par conséquent, on peut négliger tout les termes contenant v_y :

$$v_y \ll v_x \dots \dots \dots (5)$$

- d. La pression à travers la couche limite est constante :

$$\frac{\partial P}{\partial y} \cong 0 \dots \dots \dots (6)$$

- e. L'écoulement est horizontal, on néglige l'effet de la pesanteur : $g_x = g_y = 0 \dots \dots \dots (7)$

En prenant en considération les simplifications citées ci-dessus les deux équations de mouvement (1) et (2) se simplifient en :

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \dots \dots \dots (8)$$

L'équation de continuité s'écrit comme suit : $\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \dots \dots \dots (9)$

Blasius a obtenu la solution exacte des deux équations régissant l'écoulement (8) et (9) en réduisant le nombre des inconnus à deux,

En effet, à la frontière de la couche limite, la vitesse du fluide est égale à la vitesse bulk U , en remplaçant v_x par U dans l'équation (8), on aura :

$$U \frac{\partial U}{\partial x} + v_y \frac{\partial U}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \dots \dots \dots (10)$$

Cependant, U ne varie pas en direction des y , l'équation (10) se simplifie :

$$U \frac{\partial U}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \dots \dots \dots (11)$$

En substituant l'équation (11) dans l'équation (8) :

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + U \frac{\partial U}{\partial x} \dots \dots \dots (12)$$

Dans un écoulement sur une plaque plane (membrane), la vitesse à la frontière de la couche limite et dans le courant non perturbé est constante, alors elle est indépendante de x : $\frac{\partial U}{\partial x} = 0$

L'équation (12) deviendra :

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \dots \dots \dots (13)$$

L'équation (13) et l'équation de continuité (9) représentent la description de l'écoulement laminaire sur une plaque fine,

L'équation (13) est une équation différentielle de second ordre, Pour la résoudre on doit spécifier les conditions aux limites :

$$\begin{cases} y = 0, & v_x = v_y = 0 \\ y = \infty & v_x = U \end{cases}$$

Pour pouvoir résoudre cette équation caractéristique, Blasius a introduit la fonction du courant φ définit par :

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = v_x \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -v_y \end{cases}$$

On vérifie aisément que l'équation de continuité (9) satisfait ce changement de variable :

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y \partial x} = 0$$

L'introduction d'une deuxième fonction $\eta(x, y)$ définit par :

$$f(\eta) = \varphi \left(\frac{\rho}{\mu U x} \right)^{1/2} \dots \dots \dots (14)$$

$$\text{Où } \eta(x, y) = \frac{y}{2} \left(\frac{U\rho}{\mu x} \right)^{1/2} \dots \dots \dots (15)$$

$$\text{Et par conséquent : } \varphi = \left(\frac{\mu U x}{\rho} \right)^{1/2} f(\eta) \dots \dots \dots (16)$$

Par ailleurs,

$$v_x = \frac{\partial \varphi}{\partial y} \xrightarrow{\text{après calcul}} v_x = \frac{U}{2} f'(\eta) \dots \dots \dots (17)$$

$$v_y = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \xrightarrow{\text{après calcul}} v_y = \frac{U}{2} \left(\frac{\mu U}{\rho x} \right)^{1/2} [\eta f'(\eta) - f] \dots \dots \dots (18)$$

Alors :

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = \frac{U}{2} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \left(\frac{-\eta}{2x} \right) \dots \dots \dots (19)$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{U}{4} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \left(\frac{U}{xv} \right)^{1/2} \dots \dots \dots (20)$$

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} = \frac{U}{4} \left(\frac{U}{xv} \right)^{1/2} \frac{d^3 f}{d\eta^3} \frac{1}{2} \left(\frac{U}{xv} \right)^{1/2} \dots \dots \dots (21)$$

En substituant les équations (17) (18) (19) (20) (21) dans l'équation (13) :

$$f, f'' + f''' = 0 \dots \dots \dots (22)$$

L'équation (23) est une équation différentielle ordinaire non linéaire de troisième ordre, pour pouvoir la résoudre, la fonction f est éxpandue en forme de série de Taylor :

$$f = c_0 + c_1 \eta + c_2 \frac{\eta^2}{2!} + c_3 \frac{\eta^3}{3!} + \dots + c_n \frac{\eta^n}{n!}$$

$$f' = 0 + c_1 + 2c_2 \frac{\eta}{2!} + 3c_3 \frac{\eta^2}{3!} + \dots + \eta c_n \frac{\eta^{\eta-1}}{\eta!}$$

Lorsque $\eta = 0$ on a : $f = f' = 0$ et donc $c_0 = c_1 = 0$

$$f'' = \frac{2c_2}{2!} + 6c_3 \frac{\eta}{3!} + \dots + \eta(\eta-1)c_n \frac{\eta^{\eta-2}}{\eta!}$$

$$f''' = \frac{6c_3}{2!} + \dots + \eta(\eta-1)(\eta-2)c_n \frac{\eta^{\eta-3}}{\eta!}$$

En substituant f, f', f'' par leurs expressions dans l'équation (22), on obtient :

$$c_3 + c_4 \eta + \left(\frac{c_2}{2!} + \frac{c_5}{2!} \right) + \dots \dots \dots = 0$$

$$\eta \text{ peut varier de } 0 \text{ à } \infty, \text{ donc } c_3 = c_4 = 0 \text{ et } \left(\frac{c_2}{2!} + \frac{c_5}{2!} \right) = 0$$

Si on exprime toutes les constantes par c_2 , on obtient :

$$f = \frac{c_2 \eta^2}{2!} - \frac{c_2 \eta^5}{5!} + \frac{11c_2 \eta^8}{8!} - \frac{375c_2 \eta^{11}}{11!} + \dots \dots \dots (23)$$

L'équation (23) est la série des solutions de l'équation (22)

η	f	f'	f''	v_x/U
0	0	0	1,3282	0
0,2	0,0266	0,2655	1,3260	0,1328
0,4	0,1061	0,5294	1,3096	0,2647
0,6	0,2380	0,7876	1,2664	0,3938
0,8	0,4209	1,0336	1,1867	0,5168
1,0	0,6500	1,2596	1,0670	0,6298
1,2	0,9223	1,4580	0,9124	0,7290
1,4	1,2310	1,6230	0,7360	0,8115
1,6	1,5641	1,7522	0,5565	0,8761
1,8	1,9295	1,3466	0,3924	0,9233
2,0	2,3058	1,9110	0,2570	0,9555
2,2	2,6924	1,9518	0,1558	0,9759
2,4	3,0853	1,9756	0,0875	0,9873
2,6	3,4819	1,9886	0,0454	0,9943
2,8	3,8809	1,9950	0,0217	0,9962
3,0	4,2796	1,9980	0,0096	0,9990
3,2	4,6794	1,9992	0,0039	0,9996
3,4	5,0793	1,9998	0,0013	0,9999
3,6	5,4793	1,9999	0,0005	1,0000
3,8	5,8792	2,0000	0,0002	1,0000
4,0	6,2792	2,0000	-	1,0000
4,4	7,0792	2,0000	-	1,0000

La représentation graphique de η en fonction de $\frac{v_x}{U}$ nous permet de déceler la corrélation suivante :

$$\frac{v_x}{U} = y = -0,005 \eta^5 + 0,059 \eta^4 - 0,2264 \eta^3 + 0,1878 \eta^2 + 0,6147 \eta + 0,0011$$

Références Bibliographiques

- [1] J.Salomon, Le dessalement de l'eau de mer est il une voie d'avenir? , *Journal of Geography and Planning*, (2012) 237-262.
- [2] F.T.DUCRO, Dessalement de l'eau de mer : bilan des dernières avancées technologiques ; bilan économique ; analyse critique en fonction des contextes, Agence Française de Développement, ENGREF Centre de Montpellier, (2009).
- [3] M. Khayet, T. Matsuura, *Membrane Distillation Principles and Applications*, Edition Elsevier Amsterdam, The Netherlands, 2011.
- [4] J.P.Mericq, Approche intégrée du dessalement d'eau de mer : Distillation membranaire sous vide pour la réduction des rejets salins et possibilités de couplage avec l'énergie solaire, in: *l'institut national des sciences appliquées de Toulouse, l'université de Toulouse*, 2009.
- [5] M. Khayet, *Membranes and theoretical modeling of membrane distillation: A comprehensive review*, *Advances in Colloid and Interface Science*, 164 (2011) 56-88.
- [6] K.W. Lawson, D.R. Lloyd, review : *Membrane distillation*, *Journal of Membrane Science*, 124 (1997) 1-25.
- [7] M.S. El-Bourawi, Z. Ding, R. Ma, M. Khayet., A framework for better understanding membrane distillation separation process, *Journal of Membranes Sciences*, 285 (2006) 4-29.
- [8] A. Alkudhiri, N. Darwish, N. Hilal, *Membrane distillation : A comprehensive review*, *Desalination*, 287 (2012) 2-18.
- [9] M. Khayet, T. Matsuura, Preparation and characterization of polyvinylidene fluoride membranes for membrane distillation, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40 (2001) 5710–5718.
- [10] S. Srisurichan, R. Jiraratananon, A.G. Fane, Mass transfer mechanisms and transport resistances in direct contact membrane distillation process, *Journal of Membrane Science*, 277 (2006) 186–194.
- [11] M. Khayet, T. Matsuura, Pervaporation and vacuum membrane distillation processes: Modeling and experiments, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 73 (2004) 217-229.
- [12] M. Qtaishat, al, Heat and mass transfer analysis in direct contact membrane distillation, *Desalination*, 219 (2008) 272–292.
- [13] J. Phattaranawik, R. Jiraratananon, A.G. Fane, Heat transport and membrane distillation coefficients in direct contact membrane distillation, *Journal of Membrane Science*, 212 (2003) 177–193.
- [14] F.A. Banat, J. Simandl, Desalination by membrane distillation: a parametric study, *Sep. Sci. Technol.*, 33 (1998) 201–226.
- [15] M. Matheswaran, al, Factors affecting flux and water separation performance in air gap membrane distillation, *J. Ind. Eng. Chem.*, 13 (2007) 965–970.

- [16] M.A. Izquierdo-Gil, M.C. García-Payo, C. Fernández-Pineda, Air gap membrane distillation of sucrose aqueous solutions, *Journal of Membrane Science*, 155 (1999) 291–307.
- [17] F.A. Banat, J. Simandl, Theoretical and experimental study in membrane distillation, *Desalination*, 95 (1994) 39–52.
- [18] A.M. Alklaibi, N. Lior, Transport analysis of air-gap membrane distillation, *Journal of Membrane Science*, 77 (2005) 279–294.
- [19] K. Schneider, al, Membranes and modules for transmembrane distillation, *Journal of Membranes Sciences*, 39 (1988) 25–42.
- [20] E. Drioli, Y. Wu, Membrane distillation: an experimental study, *Desalination*, 53 (1985) 339–346.
- [21] K.W. Lawson, D.R. Lloyd, Membrane Distillation. I. Module design and performance evaluation using vacuum membrane distillation, *Journal of Membrane Science*, 120 (1996) 111-121.
- [22] M.A. Izquierdo-Gil, G. Jonsson, Factors affecting flux and ethanol separation performance in vacuum membrane distillation (VMD), *Journal of Membrane Science*, 214 (2003) 113-130.
- [23] G.C. Sarti, C. Gostoli, S. Bandini, Extraction of organic components from aqueous streams by vacuum membrane distillation, *Journal of Membrane Science*, 80 (1993) 21-33.
- [24] N. Couffin, C. Cabassud, V. Lahoussine-Turcaud, A new process to remove halogenated VOCs for drinking water production: Vacuum membrane distillation, *Desalination*, 117 (1998) 233-245.
- [25] F. Banat, S. Al-Asheh, M. Qtaishat, Treatment of waters colored with methylene blue dye by vacuum membrane distillation, *Desalination*, 174 (2005) 87-96.
- [26] M. Khayet, K.C. Khulbe, T. Matsuura, Characterization of membranes for membrane distillation by atomic force microscopy and estimation of their water vapor transfer coefficients in vacuum membrane distillation process, *Journal of Membrane Science*, 238 (2004) 199-211.
- [27] F. Banat, F.A. Al-Rub, K. Bani-Melhem, Desalination by vacuum membrane distillation: Sensitivity analysis, *Sep. Purf. Tech*, 33 (2003) 75-87.
- [28] D. Wirth, C. Cabassud, Water desalination using membrane distillation : Comparison between inside/out and outside/in permeation, *Desalination*, 147 (2002) 139-145.
- [29] T. Mohammadi, M.A. Safavi, Application of Taguchi method in optimization of desalination by vacuum membrane distillation, *Desalination*, 249 (2009) 83-89.
- [30] J.P.Mericq, S. Laborie, C. Cabassud, Vacuum membrane distillation of seawater reverse osmosis brines, *Water Res*, 44 (2010) 5260-5273.

- [31] B. Wu, X. Tan, K. Li, W.K. Teo, Removal of 1,1,1-trichloroethane from water using a poly(vinylidene fluoride) hollow fiber membrane module : Vacuum membrane distillation operation, *Sep. Purif. Tech.*, 52 (2006) 301-309.
- [32] S. Bandini, A. Saavedra, G.C. Sarti, Vacuum membrane distillation : Experiments and modeling, *AIChE J.*, 43 (1997) 398-408.
- [33] A. Criscuoli, M.C. Carnevale, E. Drioli, Evaluation of energy requirements in membrane distillation, *Chem. Eng. Process.*, 47 (2008) 1098-1105.
- [34] J. Li, Z. Xu, Z. Liu, W. Yuan, H. Xiang, S. Wang, Y. Xu, Microporous polypropylene and polyethylene hollow fiber membranes: Part 3. Experimental studies on membrane distillation for desalination, *Desalination*, 155 (2003) 153-156.
- [35] Z. Jin, D.L. Yang, S.H. Zhang, X.G. Jian, Removal of 2,4-dichlorophenol from wastewater by vacuum membrane distillation using hydrophobic PPESK hollow fiber membrane, *Chin. Chem. Lett.*, 18 (2007) 1543-1547.
- [36] N. Tang, Q. Jia, H. Zhang, H. Li, S. Cao, Preparation and morphological characterization of narrow pore size distributed polypropylene hydrophobic membranes for vacuum membrane distillation via thermally induced phase separation, *Desalination*, 256 (2010) 27-36.
- [37] Y. Xu, B. Zhu, Y. Xu, Pilot test of vacuum membrane distillation for seawater desalination on a ship, *Desalination*, 189 (2006) 165-169.
- [38] S. Al-Asheh, F. Banat, M. Qtaishat, M. Al-Khateeb, Concentration of sucrose solutions via vacuum membrane distillation, *Desalination*, 195 (2006) 60-68.
- [39] A. Criscuoli, J. Zhong, A. Figoli, M.C. Carnevale, R. Huang, E. Drioli, Treatment of dye solutions by vacuum membrane distillation, *Water Res.*, 42 (2008) 5031-5037.
- [40] Z. Zhao, F. Ma, W. Liu, D. Liu, Concentration of ginseng extracts aqueous solution by vacuum membrane distillation. 1. Effects of operating conditions, *Desalination*, 234 (2008) 152-157.
- [41] T. Mohammadi, M. Akbarabadi, Separation of ethylene glycol solution by vacuum membrane distillation (VMD), *Desalination*, 181 (2005) 35-41.
- [42] M.S. EL-Bourawi, M. Khayet, R. Ma, Z. Ding, Z. Li, X. Zhang, Application of vacuum membrane distillation for ammonia removal, *Journal of Membrane Science*, 301 (2007) 200-209.
- [43] R. Bagger-Jorgensen, A.S. Meyer, C. Varming, G. Jonsson, Recovery of volatile aroma compounds from black currant juice by vacuum membrane distillation, *J. Food Eng.*, 64 (2004) 23-31.
- [44] V. Soni, J. Abildskov, G. Jonsson, R. Gani, Modelling and analysis of vacuum membrane distillation for the recovery of volatile aroma compounds from black currant juice, *Journal of Membrane Science*, 320 (2008) 442-455.

- [45] C. Cabassud, D. Wirth, Membrane distillation for water desalination: How to choose an appropriate membrane?, *Desalination*, 157 (2003) 307-314.
- [46] F. James, *L'intégration numérique*, Data Handling Division, CERN, 1983.
- [47] T. F. Edgar, D. M. Himmelblau, L.S. Lasdon, *Optimization of Chemical Processes*, second ed., McGraw-Hill, New York, 2001.
- [48] GAMBIT 2.2.30 User's Guide.
- [49] FLUENT 6.3.26 User's Guide.
- [50] J. P. Mericq, S. Laborie, C. Cabassud, Vacuum membrane distillation for an integrated seawater desalination process, *Desalin. Water. Treat.*, 9 (2009) 287-296.
- [51] E. A. Mason, A.P. Malinauskas, *Gas Transport in Porous Media : The Dusty Gas Model*, Elsevier Science Ltd, Amsterdam, 1983.
- [52] R. Jackson, *Transport in Porous Catalysts*, Elsevier Science Ltd, Amsterdam, 1977.
- [53] S. Upadhyaya, K. Singh, S. P. Chaurasia, M. Agarwal, R.K. Dohare, Parametric Sensitivity Analysis of Vacuum Membrane Distillation for Desalination Process, in: *Proceedings of the International Conference on Chemical, Ecology and Environmental Sciences*, ICCEES, Pattaya, December 2011.
- [54] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, second ed, John Wiley and Sons, New York, 2002.
- [55] M. Knudsen, Die gesetze der molekularströmung und der inneren reibungs-strömung der gase durch röhren, *Ann. Phys*, 333 (1909) 75-130.
- [56] W. Steckelmacher, Knudsen flow 75 years on : the current state of the art for flow of rarefied gases in tubes and systems, *Rep. Prog. Phys.*, 49 (1986) 1083–1107.
- [57] P. Clausing, The flow of highly rarefied gases through tubes of arbitrary length (Translated from German [Ann. Phys. (5)12,961(1932)]), *J. Vac. Sci. Technol.*, A8 (1971) 11.
- [58] Y. Shi, Y. T. Lee, A.S. Kim, Knudsen diffusion through cylindrical tubes of varying radii : theory and Monte Carlo simulations, *Transp. Porous. Media*, 93 (2012) 517-541.
- [59] J. W. T. Walsh, Radiation from a perfectly diffusing circular disc (Part I), *Proc. Phys. Soc. London*, 32 (1919) 59–71.
- [60] W. G. Pollard, R.D. Present, On gaseous self-diffusion in long capillary tubes, *Phys. Rev.*, 73 (1948) 762–774.
- [61] D. H. Davis, Monte Carlo calculation of molecular flow rates through a cylindrical elbow and pipes of other shapes, *J. Appl. Phys.*, 31 (1960) 1169–1176.

- [62] W. K. Talley, S. Whitaker, Monte Carlo analysis of Knudsen flow, *J. Comput. Phys.*, 4 (1969) 389–410.
- [63] T. S. Cale, G.B. Raupp, A unified line-of-sight model of deposition in rectangular trenches, *J. Vac. Sci. Technol.*, B 8 (1990) 1242–1248.
- [64] T. S. Cale, G.B. Raupp, Free molecular transport and deposition in cylindrical features, *J. Vac. Sci. Technol.*, B 8 (1990) 649–655.
- [65] R. A. Adomaitis, A ballistic transport and surface reaction model for simulating atomic layer deposition processes in high-aspect-ratio nanopores, *Chem. Vap. Deposition*, 17 (2011) 353–365.
- [66] R. W. Schrage, *A Theoretical Study of Interphase Mass Transfer*, Columbia University Press, New York, (1953).
- [67] G. N. Patterson, *Introduction to the Kinetic Theory of Gas Flows*, University of Toronto Press, (1971).
- [68] J. A. Sethian, *Level Set Methods and Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*, Cambridge University Press, (1999).
- [69] T. W. Reynolds, E.A. Richley, Analysis of free-molecule flow with surface diffusion through cylindrical tubes, , in : *NASA Technical Note*, National Aeronautics and Space Administration, Washington, DC, (1966).
- [70] D. Adalsteinsson, J.A. Sethian, A unified level set approach to etching, deposition and lithography III : complex simulations and multiple effects, *J. Comput. Phys.*, 138 (1997) 193–223.
- [71] A. Alkudhiri, N. Darwish, N. Hilal, Membrane distillation : a comprehensive review, *Desalination*, 287 (2012) 2–18.
- [72] K. H. Youm, W.S. Kim, Prediction of intrinsic pore properties of ultrafiltration membrane by solute rejection curves : effects of operating conditions on pore properties, *J. Chem. Eng. Jpn.*, 24 (1991) 1–7.
- [73] A. L. Zydney, P. Aimar, M. Meireles, J. M. Pimbley, G. Belfort, Use of the log-normal probability density function to analyze membrane pore size distributions : functional forms and discrepancies, *Journal of Membrane Science*, 91 (1994) 293–298.
- [74] S. Singh, K. C. Khulbe, T. Matsuura, P. Ramamurthy, Membrane characterization by solute transport and atomic force microscopy, *Journal of Membrane Science*, 142 (1998) 111–127.
- [75] R. Marek, J. Straub, Analysis of the evaporation coefficient and the condensation coefficient of water, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 44 (2001) 39–53.
- [76] Microsoft Excel, (2007).

- [77] K. Nabavian, L.A. Bromley, Condensation coefficient of water, *Chem. Eng. Sci*, 18 (1963) 651-660.
- [78] A. Tamir, D. Hasson, Evaporation and condensation coefficient of water, *J. Chem. Eng*, 2 (1971) 552-562.
- [79] M. A. Vietti, J. L. Fastook, Water droplet growth in an expansion cloud chamber operating at small super-saturations, *J. Rech. Atmos*, 9 (1975) 181-195.
- [80] Y. Finkelstein, A. Tamir, Interfacial heat transfer coefficients of various vapors in direct contact condensation, *Chem. Eng. J*, 12 (1976) 199-209.
- [81] K.C.D. Hickman, Evaporation coefficient of water, *Ind. Eng. Chem*, 46 (1954) 1442-1450.
- [82] K. C. D. Hickman, W.A.Torpey, Evaporation of resting water,, *Ind. Eng. Chem*, 46 (1954) 1446-1450.
- [83] J. C. Bonacci, A. L. Myers, G. Nongbri, L.C. Eagleton, The evaporation and condensation coefficient of water, ice and carbon tetrachloride, *Chem. Eng .Sci*, 31 (1976) 609-617.
- [84] N.N. Kochurova, The problem of condensation coefficients, *Ind. Eng. Chem*, 4 (1964) 603-605.
- [85] S. Fujikawa, M. Maerefat, A study of the molecular mechanism of vapour condensation, *JSME Int. J*, 33 (1990) 634-641.
- [86] B. V. Deryagin, L. F. Leonov, S. V. Mogilat, V.M. Borisova, Dependence of water condensation coefficient on degree of interface coverage by cetyl alcohol monolayer, *Colloid J. USSR*, 44 (1982) 775-780.
- [87] M. Shakaib, S.M.F. Hasani, Iqbal Ahmed, R.M. Yunus, a CFD study on the effect of spacer orientation on temperature polarization in membrane distillation modules, *desalination*, 284 (2012) 332–340.
- [88] Sharaf Al-Sharif, Mohammed Albeirutty, Andrea Cipollina, G. Micale, Modelling flow and heat transfer in spacer-filled membrane distillation channels using open source CFD code, *Desalination*, 311 (2013) 103-112.
- [89] Xing Yang, Hui Yu, Rong Wang, A. G.Fane., Analysis of the effect of turbulence promoters in hollow fiber membrane distillation modules by computational fluid dynamic (CFD) simulations, *journal of Membrane Science*, 415 (2012) 758–769.
- [90] Hui Yu, Xing Yang, Rong Wang, A.G. Fane, Numerical simulation of heat and mass transfer in direct membrane distillation in a hollow fiber module with laminar flow, *journal of Membrane Science*, 384 (2011) 107-116.
- [91] Na Tang, Huanju Zhang, W. Wang, Computational fluid dynamics numerical simulation of vacuum membrane distillation for aqueous NaCl solution, *Desalination*, 274 (2011) 120-129.

- [92] R.W. Schofield, al, Factors affecting flux in membrane distillation, *Desalination*, 77 (1990) 279–294.
- [93] L. Martínez-Díez, M.I. Vázquez-González, Temperature and concentration polarization in membrane distillation of aqueous salt solutions, *Journal of Membrane Science*, 156 (1999) 265–273.
- [94] J.F. Daïan, *Equilibre et transfert en milieux poreux : Première partie Etats d'équilibre*, Institut National Polytechnique de Grenoble (INPG), 2012.
- [95] J. Kestin, H. Ezzat Khalifa, R.J. Correia, Tables of the dynamic and kinematic viscosity of aqueous NaCl solutions in the temperature range 20-150 °C and the pressure range 0.1-35 MPa, *J. Physic. Chem*, 10 (1981).