



République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf

Faculté de Chimie

Département de Génie Chimique

THÈSE

En vue de l'obtention du

Diplôme de Doctorat en Sciences

Présentée et Soutenue par :
BEKRENTCHIR Khalida

Intitulé

***Contribution à l'étude de l'hydrodynamique dans
un réacteur torique***

Spécialité : Chimie

Option : Génie des Procédés

Le jury est composé de :

Pr. HADDOU Boumediene

Pr. DEBAB Abdelkader

Pr. YUCEFI Abdelkader

Pr. RETIEL Nouredine

Pr. NEHARI Driss

Pr. DRAOUI Belkacem

Président de Jury

Directeur de Thèse

Examineur

Examineur

Examineur

Examineur

USTO

USTO

USTO

Université de Mostaganem

Centre Univ Ain Temouchent

Université de Béchar

Année Universitaire 2015 / 2016

Contribution à l'étude de l'hydrodynamique dans un réacteur torique

Résumé

Le but de ce travail est l'étude numérique de l'écoulement et de mélange dans un réacteur torique en utilisant le code de calcul FLUENT. Différents modèles de turbulence et schémas numériques, couplés au modèle repères tournant de référence (Multiple Reference Frame, MRF) pour modéliser l'écoulement tourbillonnaire induit par la rotation de l'agitateur, ont été comparés entre eux. Après la validation par comparaison des résultats numériques aux données expérimentales disponibles dans la littérature, l'outil numérique est utilisé pour étudier l'effet du type du mobile d'agitation, le diamètre de la pale et l'angle d'inclinaison de la pale sur le temps de mélange. Se rapprochant de l'étude expérimentale, le temps de mélange est estimé en déterminant l'évolution temporelle de la concentration du traceur dans le réacteur, qui est obtenu à partir de la résolution de l'équation moyenne de transport du traceur. L'analyse des résultats obtenus a permis de corréler le temps de mélange aux caractéristiques géométriques du réacteur et du mobile d'agitation et à la puissance consommée spécifique.

Mots clé : CFD, Réacteur torique, Agitateur, Hydrodynamique, Temps de mélange, Puissance consommée.

Table des matières

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur DEBAB Abdelkader, mon directeur de thèse, pour ses conseils et son aide scientifique, qui m'ont beaucoup aidé à réaliser ce travail.

Je tiens ensuite à remercier Monsieur HADDOU Boumédiène professeur à université des sciences et de la technologie d'Oran Mohamed Boudiaf de m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider mon jury de thèse.

Je tiens aussi à remercier Monsieur DRAOUI Belkacem professeur à l'université de Béchar, Monsieur YUCEFI Abdelkader professeur à l'U.S.T.O, Monsieur RETIEL Noureddine professeur à l'université de Mostaganem et Monsieur NEHARI Driss professeur au centre universitaire d'Ain Temouchent pour avoir accepté de lire et de juger ce travail.

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre I : Généralités sur l'agitation	5
I.1 Définition du mélange.....	6
I.2 Systèmes de mélange.....	7
I.2.1 Cuve agitée.....	8
I.2.1.1 Nomenclature de la cuve de mélange.....	8
I.2.1.2 Types de cuves de mélange.....	8
I.2.2 Types d'agitateurs.....	9
I.2.2.1 Hélices.....	9
I.2.2.2 Turbines.....	10
I.2.2.3 Ancres.....	12
I.2.2.4 Critères de choix.....	12
I.2.3 Parties internes dans les cuves.....	12
I.2.4 Impact de la géométrie de l'agitateur.....	13
I.2.4.1 Diamètre de l'agitateur.....	13
I.2.4.2 Dégagement au fond.....	13
I.2.4.3 Présence de contre-pales.....	14
I.3 Régime d'écoulement.....	15
I.4 Caractérisation des systèmes de mélange.....	16
I.4.1 Puissance dissipée par un agitateur.....	16
I.4.1.1 Mesure de la consommation d'énergie.....	18
I.4.1.2 Puissance consommée par des agitateurs à pales.....	18
I.4.2 Débit de pompage et de circulation.....	19
I.4.2.1 Débit de pompage.....	19
I.4.2.2 Débit de circulation.....	20
I.4.3 Temps de mélange.....	21
I.5 Écoulements secondaires.....	23
I.5.1 Phénomène des recirculations de Dean.....	23
I.5.2 Régime d'écoulement.....	26
I.5.3 Paramètres géométriques et nombre de Dean critique.....	26
Chapitre II : Synthèse bibliographique sur l'étude des réacteurs toriques	29
II.1 Travaux antérieurs.....	30
II.2 Etude des principaux paramètres influant sur l'écoulement et le mélange dans le réacteur à boucle.....	35

II.2.1 Etude de la vitesse de circulation.....	35
II.2.2 Etude de la distribution de la vitesse de circulation.....	44
II.2.3 Etude du mélange dans le réacteur torique.....	45
II.2.4 Etude des pertes de charge.....	49
II.2.5 Puissance consommée par un mobile d'agitation.....	51
Chapitre III : Simulations numériques d'un réacteur torique : Mise en œuvre	55
III.1 Les équations de Navier-Stokes incompressibles.....	56
III.2 Modélisation de la turbulence.....	58
III.2.1 Les modèles de turbulence.....	62
III.2.1.1 Le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ standard.....	62
III.2.1.2 Modèle $k-\varepsilon$ RNG.....	62
III.2.1.3 Modèle $k-\varepsilon$ Low-Re.....	63
III.2.1.4 Modèle à contrainte de Reynolds (Reynolds Stress Model : RSM).....	63
III.3 Modélisation de l'agitation.....	63
III.3.1 Approche des valeurs fixées.....	63
III.3.2 Prise en compte de la géométrie exacte de l'agitateur..	64
III.3.2.1 La technique du maillage glissant.....	64
III.3.2.2 Repères tournant de référence (Multiple Reference Frame, MRF)	65
III.4 Techniques de simulation des DTS par mécanique des fluides numérique (MFN).....	67
III.4.1 Dispersion axiale et mécanique des fluides numérique.....	68
III.4.1.1 Transport d'un scalaire passif.....	69
III.4.1.2 Suivi de particules.....	70
III.5 Configuration et maillage du réacteur.....	71
III.5.1 Dimensions du réacteur et de l'agitateur.....	71
III.5.2 Maillage.....	72
III.6 Conditions aux limites et conditions opératoires.....	74
III.7 Méthode numérique.....	74
III.7.1 Discrétisation.....	75
III.7.1.1 Discrétisation spatiale.....	75
III.7.1.2 Discrétisation temporelle.....	76
III.8 Résolution.....	77
III.8.1 Sous-relaxation.....	78
III.8.2 Couplage vitesses-pression.....	78
III.8.3 Critères de convergence.....	79
Chapitre IV : Résultats et discussion	81
IV.1 Etude de sensibilité.....	82
IV.1.1 sensibilité au maillage.....	82
IV.1.2 sensibilité aux schémas numériques.....	84
IV.1.3 Sensibilité aux modèles de turbulence.....	87
IV.2 Etude de l'écoulement dans le réacteur torique.....	90
IV.2.1 Profil de vitesse.....	90
IV.2.2 Influence de la vitesse d'agitation.....	94

IV.2.3 Influence des caractéristiques géométriques du réacteur.....	97
IV.2.4 Influence des caractéristiques géométriques du mobile d'agitation.....	98
IV.2.5 Régime d'écoulement.....	99
IV.2.6 Puissance d'agitation.....	100
IV.3 Etude de mélange dans le réacteur torique.....	103
IV.3.1 Influence de type du mobile d'agitation.....	107
IV.3.2 Influence des caractéristiques géométriques du mobile d'agitation.....	109
IV.3.2.1 Influence de diamètre du mobile d'agitation.....	109
IV.3.2.1 Influence de l'angle d'inclinaison des pâles du mobile d'agitation.....	111
Conclusion générale	114
Bibliographie	
Annexes	

Nomenclature

Nomenclature

A : constante

a : rayon intérieur de la section de la conduite courbée (m)

C : concentration du traceur (mole/l)

C, C_1, C_2, C_3 : constante

D : diamètre de la conduite (m)

D_{AB} : coefficient de diffusion de l'espèce A vers B (m^2/s^1)

De : nombre de Dean

D_{equ} : le diamètre équivalent (m)

d_t : diamètre intérieur de la section du réacteur (m)

d_1 : diamètre du mobile d'agitation (m)

d_2 : diamètre de l'arbre d'agitation (m)

E_p : efficacité de pompage

f : facteur de friction

F_{g1}, F_{g2} : facteurs géométriques.

g : accélération de la pesanteur (m/s^2)

H : hauteur du liquide (m)

k : Energie cinétique turbulente (m^2/s^2)

K' : coefficient de proportionnalité

L_a : largeur de la conduite (m)

L_m : longueur de la conduite (m).

L_t : longueur moyenne du tore (m)

N : vitesse de rotation du mobile d'agitateur (tr/s)

n : nombre de section

N_θ : nombre de circulation
 N_p : nombre de puissance
 N_{qp} : nombre de pompage
 P : puissance dissipée (W/m³)
 P_w : puissance consommée (w)
 ΔP : perte de pression (Pa)
 Q_c : débit de circulation (m³/s)
 Q_e : débit d'entraînement (m³/s)
 Q_p : débit de pompage (m³/s)
 r : rayon intérieur de la section de la conduite courbée (m)
 r_1 : rayon du mobile d'agitation (m)
 r_2 : rayon de l'arbre d'agitation (m)
 r_t : rayon intérieur de la section du réacteur torique (m)
 R_C : rayon de courbure du tore (m)
 R_t : rayon de courbure du réacteur (m)
 Re_c : nombre de Reynolds de circulation $\left(Re_c = \frac{\rho U_c d_1}{\mu} \right)$
 Re_m : nombre de Reynolds de mélange $\left(Re_m = \frac{\rho N d_1^2}{\mu} \right)$
 t_c : temps de circulation (s)
 t_m : temps de mélange (s)
 t_{ms} : temps de mélange spécifique (s/l)
 U : vitesse du fluide (m/s)
 U_c : vitesse moyenne de circulation (m/s)
 U_{Exp} : vitesse expérimentale (m/s)
 U_t : vitesse tangentielle (m/s)
 U_z : vitesse axiale (m/s)
 V_R : volume du réacteur (litres)

SYMBOLES GRECS

$\alpha = a/R_c$: Coefficient de courbure
 φ : angle d'inclinaison des pales du mobile réacteur d'agitation (degré)
 ε : Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente (m²/s³)
 μ : Viscosité dynamique absolue (kg/m.s)
 μ_t : Viscosité dynamique turbulente (kg/m.s)

Nomenclature

ρ : masse volumique (kg/m^3)

$\dot{\gamma}$: vitesse de cisaillement (s^{-1})

ξ : coefficient

β : l'angle de courbe du coude (degré)

Liste des figures

Figure I.1	Nomenclature d'un système de mélange.....	8
Figure I.2	Divers fonds de cuve cylindrique.....	9
Figure I.3	Types de circulations engendrées par les divers mobiles d'agitation.....	10
Figure I.4	Agitateurs de type « hélice » : A. Hélice marine à 3 pales. B. Mobile à 6 pales inclinées. C. Hélice multiplans (MIXEL)	11
Figure I.5	Agitateurs de type « turbine ». A. Turbine à 6 pales plates. B. Turbine à 8 pales incurvées. C. Turbine à 6 pales montées sur disque. D. Turbine à 6 pales courbées montées sur disque.....	11
Figure I.6	Exemples d'agitateurs à grand rayon d'action.....	12
Figure I.7	Effet du diamètre de l'agitateur sur une turbine radiale.....	13
Figure I.8	Effet du dégagement au fond.....	14
Figure I.9	Profil engendré par un agitateur axial en présence de contre-pales.....	15
Figure I.10	Evolution du nombre de puissance N_p en fonction du nombre de Reynolds Re	17
Figure I.11	Procédure d'obtention du débit de pompage selon le type de mobile.....	19
Figure I.12	Débit de circulation.....	20
Figure I.13	Cellules de Dean.....	23
Figure I.14	Profil de distribution de vitesse dans le plan normal à l'écoulement en sortie de coude en fonction du nombre de Dean.....	25
Figure I.15	Cellules de recirculations secondaires et vortex de Dean dans une section de passage carrée pour $De=150$	26
Figure I.16	Influence du facteur de forme, b/a , sur le nombre de Dean critique.....	27
Figure I.17	Evolution du nombre de Dean critique avec le rapport de courbure R_c/d_h	27
Figure I.18	Evolution du nombre de Dean critique avec l'angle des coudes.....	28
Figure II.1	Schéma d'un réacteur torique.....	31

Figure II.2	Schéma des deux mobiles d'agitation.....	36
Figure II.3	Schéma représentatif caractérisant le débit de décharge engendré par un mobile d'agitation dans un réacteur à boucle.....	36
Figure II.4	Corrélation des résultats de l'approche « classique »	38
Figure II.5	Corrélation des résultats de l'approche « spécifique »	39
Figure II.6	Variation du nombre de Reynolds d'écoulement en fonction du nombre de Reynolds de mélange : influence de la position géométrique.....	40
Figure II.7	Variation du nombre de Reynolds d'écoulement en fonction du nombre de Reynolds de mélange dans différents réacteurs à boucle et pour différentes solutions visqueuses.....	41
Figure II.8	Dépendance des conditions d'écoulement en fonction des caractéristiques des mobiles d'agitation.....	42
Figure II.9	Variation du rapport Re_c / Re_m en fonction du nombre de Reynolds de mélange.....	43
Figure II.10	Variation de la déviation standard de la vitesse de circulation.....	45
Figure II.11	Variation de la vitesse tangentielle dans les différentes sections du réacteur à boucle.....	46
Figure II.12	Variation du rapport t_m / t_c en fonction du nombre de Reynolds de mélange pour différentes valeurs du débit d'entrée dans le réacteur torique continu....	48
Figure II.13	Variation de la chute de pression le long de la circonférence du réacteur.....	49
Figure II.14	Variation de la vitesse moyenne de circulation en fonction des pertes de pression pour les deux positions géométriques.....	50
Figure II.15	variation du nombre de puissance en fonction du nombre de Reynolds de mélange.....	51
Figure II.16	variation du nombre de puissance en fonction de $\sin \varphi$	52
Figure II.17	Influence du nombre de Reynolds de mélange Re_m sur la puissance dissipée dans le réacteur torique.....	53
Figure III.1	Cadres de référence fixe et rotationnel.....	65
Figure III.2	Relation entre les grandeurs globales d'une distribution de temps de séjour et les phénomènes locaux.....	69
Figure III.3	Représentation schématique de la géométrie simulée.....	72
Figure III.4	Maillage de la géométrie (la zone tournante, la zone stationnaire et l'agitateur).....	73
Figure III.5	Principe du solveur <i>segregated</i> de FLUENT.....	77
Figure IV.1	Mailles proposées dans le plan XZ (de gauche à droite) : le maillage raffiné (1084528 mailles), le maillage présenté au chapitre III (415514 mailles) et le maillage combiné (774003 mailles).....	83
Figure IV.2	Etude de sensibilité au maillage pour la vitesse moyenne de circulation ($\theta = 270^\circ$, $N = 100$ rpm, $Re_m = 5503$).....	83

Figure IV.3	Etude de sensibilité au maillage pour l'énergie cinétique turbulente ($\theta = 270^\circ$, $N = 100$ rpm, $Re_m = 5503$).....	84
Figure IV.4	Comparaison des schémas numériques en termes de vitesse moyenne de circulation (modèle $k-\varepsilon$ standard, $\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$).....	85
Figure IV.5	Comparaison des schémas Second-Order Upwind et QUICK en termes de dissipation turbulente (modèle $k-\varepsilon$ standard, $\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm et $N = 1600$ rpm).....	86
Figure IV.6	Comparaison des schémas numériques en termes de dissipation turbulente (modèle $k-\varepsilon$ standard, $\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$).....	86
Figure IV.7	Comparaison des modèles de turbulence : profils de vitesse moyenne de circulation ($\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$).....	88
Figure IV.8	Comparaison des modèles de turbulence : profils de dissipation turbulente ($\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$).....	88
Figure IV.9	Définition des positions angulaires.....	90
Figure IV.10	Contours de vitesse sur une coupe verticale et huit positions angulaires pour une vitesse de rotation de l'hélice marine $N = 500$ rpm.....	91
Figure IV.12	Evolution des profils moyens de la vitesse axiale et circumférentielle pour une vitesse de rotation de l'hélice marine $N = 500$ rpm.....	92
Figure IV.13	(a) Détail du réacteur torique et des sections de mesure par SATO et coll. [15].....	93
Figure IV.13	(b) Contours de vitesse dans le réacteur torique [15].....	94
Figure IV.14	Comparaison de l'évolution des profils moyens de la vitesse axiale et circumférentielle.....	95
Figure IV.15	Comparaison des champs moyens des vitesses obtenues pour $N_1 = 100$ rpm et $N_3 = 900$ rpm.....	96
Figure IV.16	Variation de la vitesse de circulation en fonction de la distance par rapport à l'agitateur.....	97
Figure IV.17	Evolution de la vitesse moyenne de circulation en fonction de la vitesse d'agitation : influence des caractéristiques géométriques du réacteur.....	98
Figure IV.18	Evolution de la vitesse moyenne de circulation en fonction de la vitesse d'agitation : influence des caractéristiques géométriques du mobile d'agitation.....	99
Figure IV.19	Variation de Re_c/Re_m en fonction de Re_m	100
Figure IV.20	Evolution de la puissance dissipée dans le réacteur torique en fonction de la vitesse d'agitation : influence de diamètre du mobile d'agitation.....	102
Figure IV.21	Diagramme de parité entre la puissance dissipée calculée par FLUENT et la prédiction par l'équation IV.4.....	103
Figure IV.22	Concentration d'un traceur en fonction du temps [84].....	104
Figure IV.23	Localisation du point d'injection et du plan d'évaluation de la concentration du traceur injecté.....	106
Figure IV.24	Dispersion du traceur pour les deux mobile d'agitation pour $N = 900$ rpm et $N = 1000$ rpm.....	106
Figure IV.25	Variation du temps de mélange en fonction du nombre de Reynolds.....	107

Figure IV.26	Variation du temps de mélange et temps de circulation en fonction de la puissance dissipée volumique.....	108
Figure IV.27	Influence du diamètre du mobile d'agitation sur le temps de mélange pour différents vitesses d'agitation ($\varphi = 45^\circ$).....	110
Figure IV.28	Champs de vitesse dans la zone de l'agitateur pour $Re_m = 22721$ (gauche : $d/D = 0,5$; droite : $d/D = 0,75$)	110
Figure IV.29	Influence de l'angle d'inclinaison des pâles du mobile d'agitation sur le temps de mélange pour différentes vitesses d'agitation ($d/D = 0,64$)	112
Figure IV.30	Diagramme de parité entre le temps de mélange calculé par FLUENT et les prédictions par l'équation IV.12 et l'équation IV.13.....	113

Liste des tableaux

Tableau I.1	Valeurs de $N_p Re$ et N_{po} pour différents agitateurs.....	18
Tableau I.2	Nombre de puissance, nombre de pompage et efficacité énergétique de divers agitateurs.....	20
Tableau I.3	Nombre de pompage et de circulation en régime turbulent.....	21
Tableau I.4	Corrélations empiriques relatives au produit $N \cdot tm$ dans le cas d'un réacteur.....	22
Tableau II.1	Caractéristiques géométriques des turbines utilisées.....	42
Tableau II.2	Les différents mobiles d'agitation utilisés.....	43
Tableau II.3	Caractéristiques géométriques des différents réacteurs à boucle.....	47
Tableau II.4	Caractéristiques géométriques, type de réacteur, type de mobile d'agitation et corrélations principales.....	54
Tableau III.1	Constantes empiriques du modèle $k-\varepsilon$ standard.....	62
Tableau III.2	Constantes recommandées par Fluent (2005) pour le modèle stochastique..	71
Tableau III.3	Caractéristiques du maillage utilisé pour les simulations.....	73
Tableau III.4	Valeurs des coefficients de sous-relaxation utilisées pour les simulations...	78
Tableau IV.1	Caractéristiques géométriques des mobiles d'agitation.....	98

INTRODUCTION
GENERALE

Depuis plusieurs années, les chercheurs, dans le domaine de génies des procédés, ont montré que les réacteurs agités présentent des limites de performances dans certains procédés de polymérisation ou biologique (dépôt de polymères ou des microorganismes, l'existence de volume mort, une faible capacité de transfert d'oxygène, ect...). Tous ces inconvénients ont incité les chercheurs à envisager de nouveaux types de réacteur caractérisés par des coefficients d'échange de matière ou de chaleur élevés et nécessitent une faible puissance d'entraînement, et c'est dans ce contexte que les réacteurs toriques ont fait leur apparition, ils présentent une alternative à l'utilisation des réacteurs de type cuve agitée. En effet, les réacteurs de forme toroïdale possèdent de nombreux avantages. Leur construction est simple et leurs conditions d'écoulement sont à peu près identiques en tout point. Ils induisent de faibles taux de cisaillement ainsi que de faibles pertes de charge, ce qui permet une extrapolation relativement simple de ces performances. De plus, leur puissance consommée est relativement faible. De par leurs avantages, les réacteurs toriques ont été envisagés pour de potentielles applications industrielles telles que la polymérisation en suspension, la production des microorganismes, l'hydrolyse enzymatique et l'acétylation des protéines de petit pois.

Cependant et malgré nombreux travaux ont montré la potentialité et l'intérêt des réacteurs toriques, la conception optimale de ces réacteurs et leurs utilisation dans la production à l'échelle industrielle est loin d'avoir atteint ses limites. Des recherches théoriques sont donc encore nécessaires pour mieux comprendre les différents phénomènes engendrés au sein du réacteur, notamment l'interaction entre les tourbillons de Dean induits par la présence des coudes et le mouvement giratoire provoqué par le mobile d'agitation. Cette particularité rend l'étude expérimentale de comportement hydrodynamique de ces réacteurs extrêmement complexe, car l'intensité des tourbillons de Dean dépend fortement de l'écoulement imposé par l'agitateur, lui-même dépendant de la géométrie de l'agitateur et leur vitesse de rotation, l'apparition de ces tourbillons perturbe l'écoulement imposé par l'agitateur et diminue leur persistance dans la géométrie, créant ainsi une complexe compétition entre ces deux effets. En contrepartie, les techniques de mesures disponibles sont difficilement utilisables dans telle géométrie. Par exemple, les méthodes utilisant des sondes telles que les tubes de Pitot ou les anémomètres à fil chaud sont très sensibles à la direction de l'écoulement. Le positionnement de telles sondes dans un écoulement tourbillonnaire est donc difficile et les perturbations de l'hydrodynamique qu'elles engendrent donneraient des résultats ambigus. De même, les distorsions optiques apparaissent lors du passage de faisceaux lumineux au travers les interfaces courbées nécessite

une procédure d'acquisition particulière, ce qui complexifie l'emploi des techniques optiques non intrusives, comme l'anémométrie laser à effet Doppler (LDA) ou la Vélocimétrie par Images de Particules (PIV). A ce titre, la mécanique des fluides numérique (CFD) apparaît comme un outil intéressant pour mieux caractériser les différents phénomènes engendrés au sein des réacteurs toriques. Elle offre la possibilité d'accéder aux caractéristiques hydrodynamiques souvent difficiles à mesurer expérimentalement, ce qui permet d'améliorer la conception de ces réacteurs et d'optimiser les différents paramètres de fonctionnement. La technique consiste à résoudre les équations fondamentales de la mécanique des fluides, couplées éventuellement aux équations de transfert de matière, et de chaleur de manière à caractériser les écoulements.

Ainsi, l'objectif de ce travail de thèse est d'étudier le comportement hydrodynamique dans le réacteur torique en utilisant le code commercial FLUENT. Différents conditions de fonctionnement sont considérées afin de mieux comprendre l'influence de la conception torique sur les l'écoulement dans le réacteur. La simulation numérique est ensuite étendue à l'étude de processus de mélange dans le but de caractériser l'influence de la vitesse d'agitation, les caractéristiques géométriques du réacteur et du mobile d'agitation sur le temps de mélange. Cette caractérisation est en effet très importante, car elle permet de déterminer les différents régimes de fonctionnement et les paramètres contrôlant la transition entre eux.

Cette étude est organisée en quatre chapitres :

Dans le premier chapitre, nous présentons un rappel théorique sur les systèmes de mélange couramment rencontrés en génie des procédés. L'accent est mis sur les principales grandeurs globales d'évaluation des performances des systèmes agitations, tel que la consommation de puissance, la capacité de pompage et le temps de mélange. Ensuite, on aborde l'écoulement dans les conduites courbées, où nous donnant un aperçu général sur les différents paramètres gouvernant les écoulements secondaires.

Le deuxième chapitre est consacré à la synthèse bibliographique relative aux travaux effectués sur le réacteur torique, ceci en montrant l'intérêt et les domaines d'applications qu'il présente vis-à-vis d'une cuve agitée de forme cylindrique.

Le troisième chapitre est consacré à la modélisation numérique de l'écoulement et le mélange dans le réacteur torique. Dans un premier temps, les équations fondamentales des écoulements sont évoquées. Par la suite, nous présenterons la mise au point des simulations réalisées, des modèles de turbulence jusqu'à la méthode numérique utilisés par FLUENT, en

passant par la conception du maillage. Finalement, la méthode de discrétisation pour résoudre ce système d'équations ainsi que les étapes de résolution sont abordés. Cette partie servira à familiariser le lecteur non spécialiste à la terminologie propre de la CFD.

Le quatrième chapitre synthétise l'ensemble des résultats obtenus par simulation numérique et qui concernent la répartition des vitesses dans les différentes sections du réacteur de part et d'autres du mobile d'agitation, ainsi que les courbes de performances du système d'agitation (puissance consommée, courbe de DTS, temps de mélange,...).

En conclusion, nous synthétisons les résultats marquants obtenus lors de ce travail et nous faisons ressortir les perspectives envisageables au terme de cette thèse.

CHAPITRE I

GENERALITES SUR L'AGITATION

Le mélange industriel aurait été rapporté pour la première fois au 16^{ème} siècle avec les travaux de Georgius Agricola [1]. Avec le développement de la deuxième vague de la révolution industrielle et technologique dans la deuxième moitié du 19^{ème} siècle, William Froude (1868) et Osborne Reynolds (1885) proposent des nombres adimensionnels qui marquent le début de la mécanique des fluides : les nombres de Froude et de Reynolds. Suite à ces développements, des agitateurs sous forme d'hélice marine commencent à être utilisés dans le mélange.

Soixante-quinze ans plus tard, John Henry Rushton propose le premier agitateur ayant une géométrie devenue standard de nos jours [2]. Dans les années 1950, avant même l'apparition du premier livre dédié au mélange industriel [3], des scientifiques se posaient déjà des questions sur les surfaces libres dans des cuves de mélange car des publications scientifiques apparaissent [4-6].

La décennie suivante fut celle qui a marqué le plus l'histoire de la surface libre avec de nombreuses publications [7-10] et avec l'édition du livre de mélange compilant tous les travaux de Shinji Nagata [11].

Les années 1980 marquent le début de la simulation numérique appliquée au mélange. Depuis, le mélange a pris une place importante dans la recherche académique et industrielle. Actuellement, la recherche sur le mélange est présente en Amérique du Nord / Sud, en Europe, en Inde et dans l'Asie de l'est [12].

I.1 Définition du mélange

Afin de présenter une courte introduction sur le mélange, il faut tout d'abord comprendre ce que c'est et en quoi il consiste. Le mélange se définit donc comme étant la réduction d'un manque d'homogénéité dans un volume d'étude. Cette inhomogénéité peut être reliée à une concentration, à une phase ou même à une température. Mélanger consiste donc à réduire les différences des propriétés dans un volume [13]. Mais, un mélange parfait n'existe pas car, le degré d'homogénéisation dans un volume est relatif à l'échelle et au point de vue de l'étude (mélange à l'échelle macro / méso / micro) [13]. Par exemple, une émulsion est considérée mélangée à l'échelle méso / macroscopique tandis qu'un mélange dans un réacteur chimique est considéré mélangé à l'échelle microscopique (à cause que la réaction se déroule au niveau moléculaire).

L'étude du mélange est essentielle pour réguler un procédé. Le mélange permet souvent de contrôler l'efficacité des réacteurs chimiques [14]. C'est-à-dire qu'il permet de contrôler le transfert de masse, la réaction et ultérieurement les propriétés des produits désirés afin d'affecter le rendement, la qualité et les coûts de production des produits désirés. Il est donc important de mentionner quelques systèmes de mélange et comment ces derniers sont caractérisés.

I.2 Systèmes de mélange

Il existe plusieurs systèmes de mélange qui diffèrent selon les applications industrielles : les cuves mécaniquement agitées, les mélangeurs statiques, les cuves de résonance, les lits fluidisés, les cuves à ultrasons et bien d'autres. Parmi ces divers systèmes, la cuve agitée et le mélangeur statique sont les plus utilisés actuellement dans l'industrie. Les inconvénients présentés par les cuves agitées, dans certains procédés de polymérisation ou biologiques, tels que, le dépôt des polymères et des microorganismes sur les contre-pales et le mobile d'agitation, l'existence de volume mort et une faible capacité de transfert d'oxygène [15] et la nécessité d'une puissance d'entraînement élevée [16], ont incité les chercheurs à envisager de nouveaux systèmes de mélange caractérisés par des coefficients d'échange de matière et de chaleur élevés, permettant ainsi de minimiser les coûts de production.

Depuis une dizaine d'années les réacteurs toriques ont fait leur apparition, ils présentent une alternative à l'utilisation des réacteurs de type cuve agitée. En effet, les réacteurs de forme toroïdale possèdent de nombreux avantages. Leur construction est simple et leurs conditions d'écoulement sont à peu près identiques en tout point. Ils induisent de faibles taux de cisaillement ainsi que de faibles pertes de charge [17]. De plus, la présence de conduites coudées et la mise en circulation par une hélice marine permettent d'éviter les zones mortes dans le procédé et d'avoir ainsi un milieu réactionnel plus homogène. Ceci est dû principalement aux tourbillons secondaires générés au sein des éléments coudés. Grâce à cet écoulement secondaire, les déplacements transversaux des particules augmentent et la dispersion axiale diminue, et par conséquent le mélange s'intensifie. En plus, les cellules de Dean [18, 19] induites par la présence des coudes jouent le rôle d'agitateurs internes qui homogénéisent le mélange. Compte tenu du fait que cette étude est effectuée dans un réacteur agité mécaniquement « le réacteur torique », le mélangeur statique est écarté de la présente étude.

I.2.1 Cuve agitée

I.2.1.1 Nomenclature de la cuve de mélange

La nomenclature générale utilisée dans les cuves de mélange est celle présentée dans la figure I.1. Le diamètre de l'agitateur et celui de la cuve sont désignés respectivement par les lettres D et T .

La hauteur du fluide au repos est souvent représentée par la lettre H et la hauteur de l'agitateur par rapport au fond de la cuve est représentée par la lettre C . En plus, le terme W_b correspond à la largeur des chicanes.

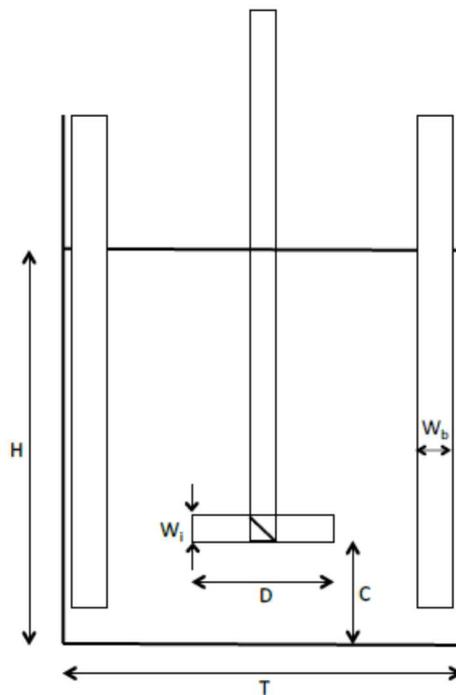


Figure I.1 Nomenclature d'un système de mélange [14]

I.2.1.2 Types de cuves de mélange

Il existe plusieurs géométries possibles pour les cuves de mélange : la géométrie cylindrique à proportions égales ($H \approx T$), celle en forme de cigare ($H > T$), celle en forme de pastille ($H < T$) et les géométries cubiques / parallélépipédiques. La plus commune dans l'industrie est la cuve cylindrique à proportions égales. Toutefois, il existe plusieurs types de fonds de cuve pour cette géométrie (Figure I.2). Afin d'éviter la création des zones mortes, le fond le plus utilisé est le deuxième : le fond semi-elliptique.



Figure I.2 Divers fonds de cuve cylindrique ($H \approx T$) [14]

I.2.2 Types d'agitateurs

Un agitateur rotatif est constitué d'un moteur imprimant, par l'intermédiaire d'un arbre, un mouvement de rotation à un mobile d'agitation qui brasse le fluide à agiter. L'effet primaire de ces agitateurs est de créer une circulation du fluide à l'intérieur de la cuve ; cette circulation peut être essentiellement axiale, radiale ou périphérique. Pour s'adapter à chaque cas, différentes formes de mobiles d'agitation sont utilisées. En pratique, elles peuvent se classer en trois catégories :

- 1) Les agitateurs de type « hélice »,
- 2) Ceux du type « turbines à pales »,
- 3) Ceux à grand rayon d'action (ancre, grandes pales),

La figure I.3 illustre la variété des types de circulation des fluides qu'ils engendrent.

I.2.2.1 Hélices

Les premières hélices utilisées étaient directement dérivées des hélices marines utilisées pour la propulsion des bateaux. Depuis, pour améliorer l'efficacité énergétique, des modèles variés sont maintenant disponibles avec des pales minces, plates, profilées ou multiplans (Figure I.4). Elles provoquent un mouvement essentiellement axial, avec un faible cisaillement et trouvent donc de nombreux usages pour homogénéiser les milieux fluides. Ces agitateurs sont caractérisés par :

- Le diamètre, D , souvent égal au tiers, sinon entre $1/5$ et $2/3$, du diamètre du réacteur, T ; les rapports D/T les plus élevés conduisant à favoriser un débit plutôt axial, donc l'homogénéisation et le transfert de chaleur, alors que les rapports les plus faibles, associés à des vitesses plus grandes, sont favorables à la turbulence et au micromélange ;
- Le nombre de pales (généralement 2, 3 ou 4) ;

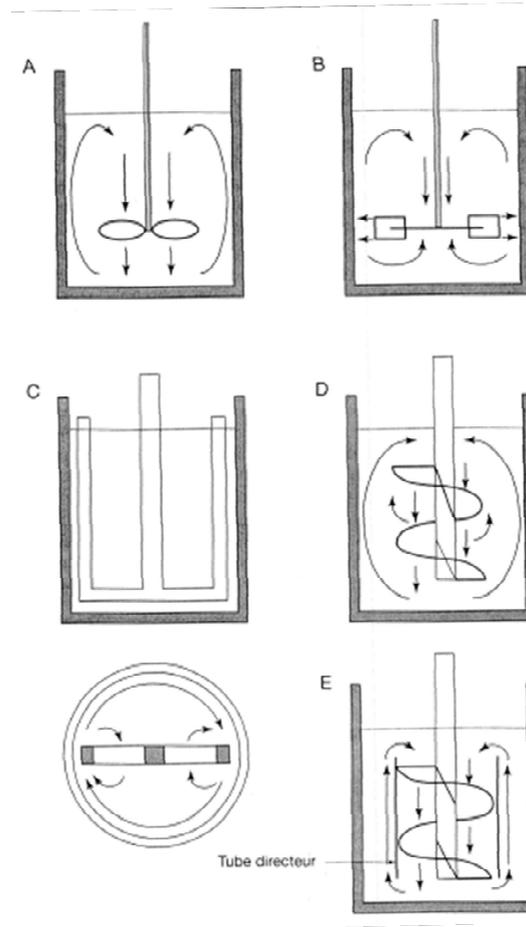


Figure I.3 Types de circulations engendrées par les divers mobiles d'agitation

- Le pas, souvent égal au diamètre de l'hélice, mais plus généralement compris entre 0,5 et 3 fois ce diamètre ;
- Le sens de rotation qui induit un mouvement ascendant ou descendant du fluide.

I.2.2.2 Turbines

Les turbines typiquement constituées de pales radiales, plates, verticales, montées sur un disque horizontal, délivrent essentiellement un débit radial, avec un fort cisaillement en bout de pales (Figure I.5). Elles sont donc très souvent utilisées dès qu'il s'agit de fragmenter un fluide en bulles ou en gouttes. Le modèle de base à pales plates (dite « turbine Rushton ») est caractériser par :

- Le diamètre souvent égal au tiers, sinon entre $1/5$ et $2/3$, du diamètre du réacteur ;
- Le nombre de pales (le plus souvent 6) ;
- Les dimensions des pales rapportées au diamètre de la turbine, en particulier largeur entre $1/10$ et $1/4$ du diamètre de la turbine.

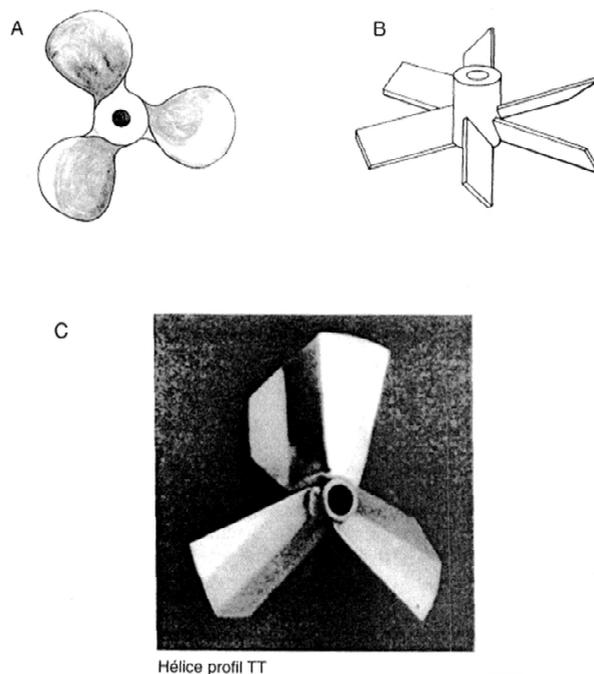


Figure I.4 Agitateurs de type « hélice » :

A. Hélice marine à 3 pales. B. Mobile à 6 pales inclinées. C. Hélice multiplans (MIXEL)

De très nombreuses variantes, se distinguent par le nombre, la forme, l'inclinaison des pales, leur courbure, la présence ou non d'un disque central. Elles sont souvent plus efficaces en termes de puissance, débit maximum de gaz tolérable, mais provoquent, en contrepartie, un cisaillement moins accentué [20].

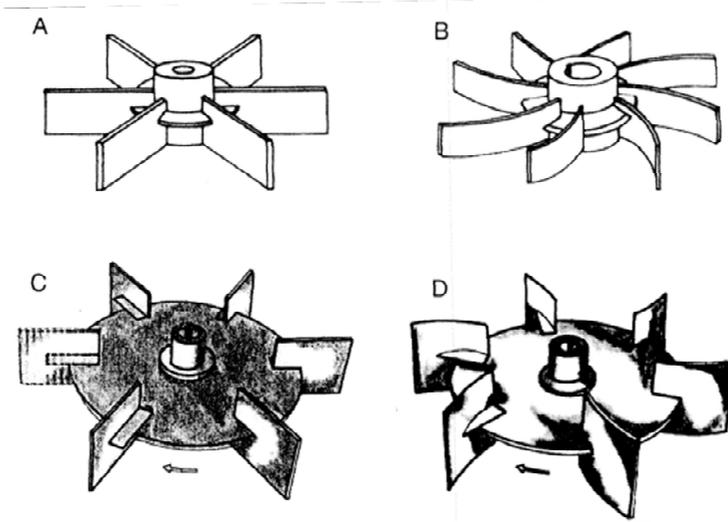


Figure I.5 Agitateurs de type « turbine ».

A. Turbine à 6 pales plates. B. Turbine à 8 pales incurvées. C. Turbine à 6 pales montées sur disque. D. Turbine à 6 pales courbées montées sur disque

I.2.2.3 Ancres

Les agitateurs à ancres sont constitués d'un tube ou d'un ruban plat, en forme de U de largeur réduite, qui tourne dans un diamétral à proximité de la paroi du réacteur (Figure I.3 et Figure I.6). Ils produisent un flux plutôt périphérique, tangentiel et sont adaptés au brassage des produits visqueux à proximité des parois, en particulier pour améliorer le transfert de chaleur.

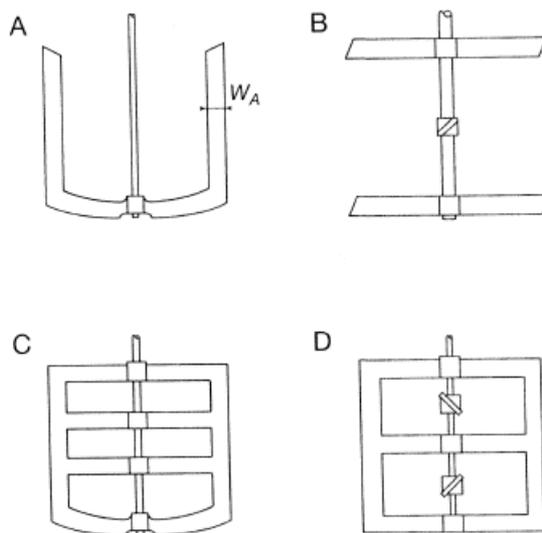


Figure I.6 Exemples d'agitateurs à grand rayon d'action

I.2.2.4 Critères de choix

La réussite de l'opération de mélange nécessite plusieurs étapes de réflexion pour concevoir un système d'agitation [21]. Dans un premier temps, le choix du type de mobile d'agitation dépend de :

- La puissance consommée,
- La viscosité propre du milieu à agité.

La deuxième étape consiste à définir les conditions optimales d'utilisation du système, comme entre autre la position, le diamètre et la vitesse de rotation. Le choix est aussi guidé par des critères économiques et d'investissement.

I.2.3 Parties internes dans les cuves

L'ajout de chicanes, de contre-pales ou même de serpentins a souvent pour effet de réduire considérablement la formation d'un vortex. Pour un nombre de Reynolds de 300 ou plus, les vortex commencent à se développer et la présence des chicanes devient indispensable afin de créer une circulation optimale du fluide dans la cuve.

Bien qu'il existe des applications où la présence du vortex est bénéficiaire, les chicanes sont presque toujours nécessaires. D'un point de vue optimal, il est conseillé d'utiliser autant de contre-pales dans la cuve que l'agitateur a de pales (par exemple le Maxblend^(TM) utilise juste deux chicanes [22]).

I.2.4 Impact de la géométrie de l'agitateur

I.2.4.1 Diamètre de l'agitateur

La taille de l'agitateur joue un rôle très important dans la formation des profils et dans la mise en mouvement du fluide. Tout d'abord l'énergie mécanique qu'il fournit au fluide est reliée à la surface de ses pales et donc à son diamètre, ainsi plus un agitateur est grand plus il transmet de l'énergie au fluide.

De plus, la largeur de l'agitateur affecte les profils d'écoulement. Ainsi un agitateur axial à très large diamètre présentera un profil radial [23].

Enfin, une turbine dont le diamètre est supérieur à une certaine longueur verra sa consommation de puissance augmenter [24], et sa capacité de pompage diminuer. La proximité avec les parois occasionne une pression importante et gêne la décharge de l'agitateur (Figure I.7). Le diamètre critique est de $0.4T$ pour les agitateurs radiaux et $0.5T$ pour les agitateurs axiaux.

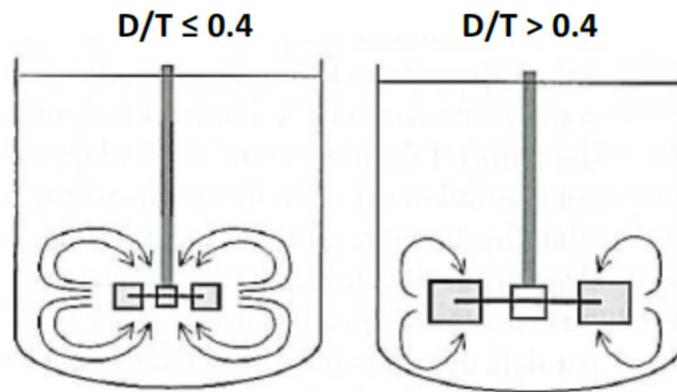


Figure I.7 Effet du diamètre de l'agitateur sur une turbine radiale

I.2.4.2 Dégagement au fond

La position de l'agitateur dans la cuve joue un rôle non négligeable sur la consommation de puissance, la capacité de pompage et l'efficacité de mélange d'un agitateur. Ainsi un agitateur axial tournant trop près du fond de la cuve présente un profil radial, menant à un pompage réduit

et à une puissance consommée plus grande (Figure I.8). Si l'agitateur est positionné trop proche de la surface, il se crée également un profil radial [25], et la formation de vortex provoque un entrainement d'air parfois dommageable pour la qualité du mélange.

Dans le cas du mélange solide-liquide, la présence d'une turbine près du fond de la cuve facilite la mise en suspension mais l'homogénéisation est fortement limitée par la faible circulation produite [23].

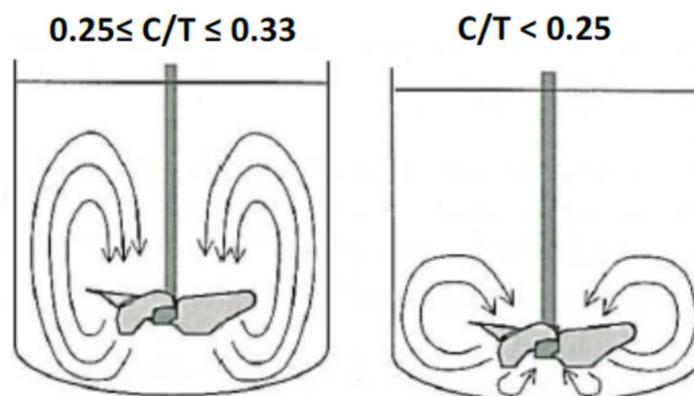


Figure I.8 Effet du dégagement au fond

Il est important de mentionner que les profils d'écoulement sont également largement affectés par la géométrie du fond de la cuve. Lorsque le fond de la cuve est plat, il se forme des boucles de recirculation dans les coins au niveau de la paroi [23]. Généralement un fond elliptique est plus adapté à la suspension de solides car aucune zone d'accumulation de particules ne sera formée.

I.2.4.3 Présence de contre-pales

En régime turbulent et transitoire, les contre-pales assurent une meilleure circulation axiale et augmentent la capacité de brassage des turbines. Elles empêchent la formation de vortex par lequel l'air est entrainé dans la cuve, et créent des boucles de circulation radiale qui réduisent l'écoulement tangentiel propre aux cuves sans contre-pales [26]. La figure I.9 montre les boucles secondaires créées entre chacune des contre-pales qui augmentent la turbulence au sein de la cuve. En mélange solide-liquide en régime turbulent, la suspension des particules est améliorée par la présence des contre-pales qui stoppent le phénomène de rotation de solides appelé « swirling ». Cependant, leur utilisation en milieu visqueux peut engendrer des zones de stagnation qui rendent le mélange inefficace [27]. Il a également montré que la présence de contre-pales était défavorable à la suspension de boues très concentrées [28].

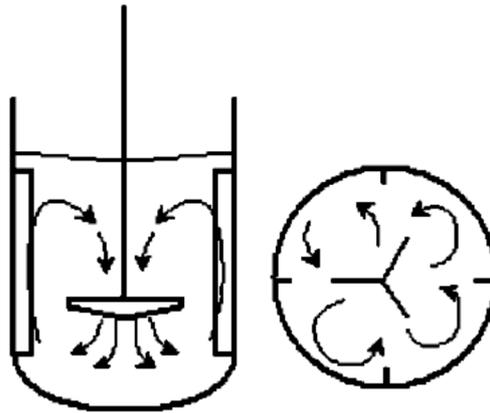


Figure I.9 Profil engendré par un agitateur axial en présence de contre-pales

I.3 Régime d'écoulement

Les écoulements générés par la rotation de l'agitateur à l'intérieur d'une cuve sont complexes et difficiles à étudier. Ils dépendent de la vitesse de rotation N de l'agitateur et des propriétés physicochimiques des fluides. Pour caractériser de façon macroscopique ces écoulements, plusieurs concepts spécifiques sont utilisés.

Comme dans n'importe quel système d'écoulement, il est possible d'évaluer l'intensité de mouvements en utilisant un nombre de Reynolds. La définition exacte du nombre de Reynolds d'agitation est :

$$Re = \frac{\rho N D^2}{\mu} \quad \text{Équation I.1}$$

Quel que soit le système d'agitation, on distingue traditionnellement trois régimes d'écoulement :

- Régime laminaire : $Re < 10$; dans ce régime les forces visqueuses sont prédominantes sur les forces inertielles. En se basant sur le modèle d'Ottino, ce régime se décrit en trois étapes : l'étirement, le repli et la cassure d'une phase.
- Régime turbulent : $Re > 1000$; dans ce régime les forces inertielles prédominent sur les forces visqueuses. Habituellement, la turbulence est complètement atteinte à un nombre de Reynolds compris entre 10000 et 100000. De plus, ce régime induit un écoulement aléatoire et asymétrique dans le système de mélange.
- Régime transitoire : $10 < Re < 1000$; ce régime est, comme son nom l'indique, la transition entre le régime laminaire et le régime turbulent.

Les valeurs présentées ci-haut demeurent toutefois arbitraires (par exemple : le régime turbulent est atteint vers un $Re = 20000$ dans un système utilisant une turbine Rushton).

I.4 Caractérisation des systèmes de mélange

La caractérisation globale d'un système de mélange est souvent effectuée en analysant trois caractéristiques : la consommation de puissance, la capacité de pompage et le temps de mélange. Au cours de cette section, les quatre caractéristiques seront abordées brièvement afin de donner une vue globale sur la caractérisation des systèmes de mélange.

I.4.1 Puissance dissipée par un agitateur

La connaissance du besoin énergétique est un critère nécessaire pour le calcul de la motorisation mais aussi un élément essentiel pour la comparaison de l'efficacité de mobiles entre eux. Dans le cas de l'agitation d'une phase liquide unique, la puissance d'agitation P dépend d'un grand nombre de variables qui se classe en trois catégories :

- Caractéristiques du fluide à agiter : masse volumique ρ , viscosité dynamique μ ;
- Caractéristiques cinématiques et dynamiques : vitesse de rotation N , accélération de la pesanteur g ;
- Toutes les caractéristiques géométriques du système d'agitation : diamètre de l'agitateur D , diamètre de la cuve T , hauteur de liquide H , l'largeur des chicanes W_b , élévation de l'agitateur par rapport au fond de la cuve C , etc.

Toutes ces grandeurs physiques indépendantes peuvent être reliées par une équation de la forme :

$$P = f(\rho, \mu, \sigma, N, g, T, D, H, W_b, C \dots) \quad \text{Équation I.2}$$

Après analyse dimensionnelle et pour un ensemble d'appareils tous en similitude géométrique, cette relation prend la forme beaucoup plus simple :

$$N_p = f(Re, Fr) \quad \text{Équation I.3}$$

Dans laquelle :

- $N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5}$, est le nombre de puissance ;
- $Re = \frac{\rho N D^2}{\mu}$, est le nombre de Reynolds d'agitation ;
- $Fr = \frac{D N^2}{g}$, est le nombre de Froude d'agitation.

Lorsque le système d'agitation est muni de chicanes pour empêcher la formation d'un vortex, le nombre de Froude n'intervient pas et la relation précédente devient :

$$N_p = f(Re) \tag{Équation I.4}$$

Il suffit alors, pour chaque classe de systèmes d'agitation en similitude géométrique, de déterminer expérimentalement la relation entre N_p et Re , en utilisant un appareil de taille pilote, suffisamment grand pour que la précision des mesures soit acceptable (entre 150 et 700 L). La puissance dissipée est calculée à partir de la mesure du couple qu'il faut exercer sur l'arbre de l'agitateur. De nombreux résultats sont disponibles dans la littérature.

A titre d'exemples, la figure I.10 présente l'allure des variations de N_p en fonction du Re pour quelques agitateurs de grande importance industrielle, dans le cas des géométries standards ; ces figures sont tracées en échelles logarithmiques.

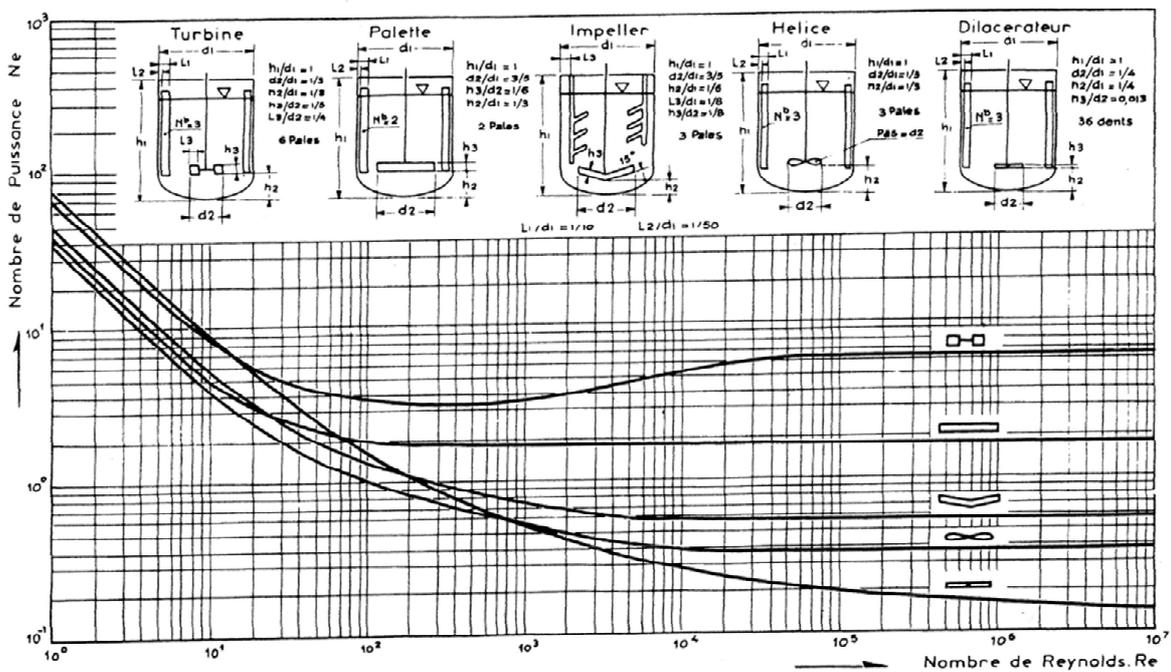


Figure I.10 Evolution du nombre de puissance N_p en fonction du nombre de Reynolds Re

En régime laminaire, l'enregistrement est linéaire, de pente -1, marquant ainsi que le produit $N_p Re$ reste constant. En régime turbulent, le nombre de puissance devient indépendant du nombre de Reynolds, soit $N_p = N_{p0}$. Le tableau I.1 fournit quelques valeurs des constantes $N_p Re$ et N_{p0} .

I.4.1.1 Mesure de la consommation d'énergie

I.4.1.1.1 Mesure de la puissance électrique

On peut évaluer la puissance d'agitation en mesurant la puissance électrique absorbée sur le réseau et en retranchant les diverses pertes par effet de Joule dans les enroulements du moteur, les pertes mécaniques et les pertes magnétiques. Cette technique est assez peu précise en particulier pour les faibles puissances.

Tableau I.1 Valeurs de $N_p Re$ et N_{po} pour différents agitateurs

Type de l'agitateur	Constante $N_p Re$	N_{po}
Hélice marine	40	0,35
Hélice à 3 pales minces	40	0,43
Turbine à 4 pales inclinées à 45°	80	1,50
Turbine à 4 pales droites	80	3,3
Turbine disque à 6 pales droites (Rushton)	80	5,5
ancres	150	0,2

I.4.1.1.2 Mesure du couple nécessaire à faire tourner l'agitateur

La puissance est calculée d'après une détermination du couple nécessaire pour faire tourner l'agitateur [29], par l'utilisation d'un assemblage de dynamomètre permettant de mesurer le couple qui s'exerce sur l'arbre entraînant l'agitateur. Les pertes dues aux frictions sur les parties en mouvement sont évaluées aux essais à vide dans lesquels l'agitation tourne dans l'air.

La puissance consommée est obtenue par l'équation :

$$P = 2\pi N(C - C_0) \quad \text{Équation I.5}$$

Avec C est le couple en charge, C_0 le couple à vide et N la vitesse de rotation de l'agitateur.

I.4.1.2 Puissance consommée par des agitateurs à pales

Il existe une corrélation entre le nombre de Reynolds et la puissance consommée par un agitateur à pales ; elle est due à [11] :

$$N_p \cdot Re = A + B Re \left(\frac{1000 + 1,2 Re^{0,66}}{1000 + 3,2 Re^{0,66}} \right)^{-0,33} \left(\frac{H}{D} \right)^{\left(0,35 + \frac{W}{D} \right)} (\sin \theta)^{1,2} \quad \text{Équation I.6}$$

Dans cette équation, le produit $N_p Re$ augmente légèrement avec Re . A titre d'exemple pour :

$$\theta = \frac{\pi}{2}, \text{ agitateur à pales droites ; } H = D, d = \frac{D}{2}, W = 0,9D$$

L'équation I.6 devient :

$$N_p \cdot Re = 187 + 1,23Re \left(\frac{1000 + 1,2 Re^{0,66}}{1000 + 3,2 Re^{0,66}} \right)^{-0,33} \quad \text{Équation I.7}$$

Lorsque $Re = 1$, $N_p Re = 188$ lorsque $Re = 10$, $N_p Re = 199$, les variations ne sont pas, très importantes.

I.4.2 Débit de pompage et de circulation

I.4.2.1 Débit de pompage

C'est le débit qui circule réellement à l'intérieur du mobile d'agitation. Il est fonction de la géométrie de l'ensemble cuve-agitateur, de la vitesse d'agitation, de la taille de l'installation, et des propriétés physiques du fluide (Figure I.11).

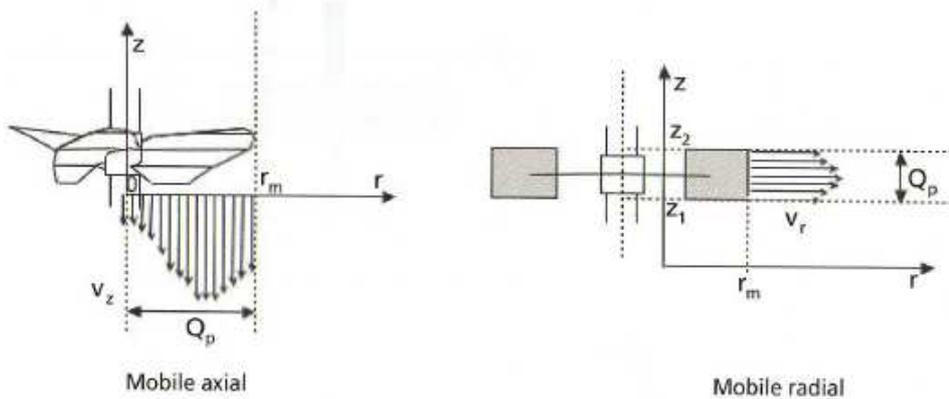


Figure I.11 Procédure d'obtention du débit de pompage selon le type de mobile [30]

Le débit de pompage Q_p est calculé par la relation :

$$Q_p = N_{qp} * N * D^3 \quad \text{Équation I.8}$$

ou N_{qp} est une constante appelée nombre de pompage. Pour des systèmes fonctionnant en régime turbulent, le nombre de pompage reste sensiblement indépendant du rapport D/T , dans le domaine 0,20 à 0,5.

A partir de ce nombre de pompage et du nombre de puissance caractéristiques d'un agitateur en régime turbulent, on peut définir une efficacité énergétique :

$$E_p = \frac{N_{qp}^3}{N_p} \quad \text{Équation I.9}$$

Ce critère correspond à la puissance consommée pour obtenir un débit de pompage donné. Il est bien adapté pour comparer des agitateurs différents destinés au pompage comme le montre le tableau I.2 [31].

Tableau I.2 Nombre de puissance, nombre de pompage et efficacité énergétique de divers agitateurs

Type de l'agitateur	N_p	N_{qp}	E_p
Turbine Rushton	4,3 - 5,0	0,75 - 0,84	0,08 - 0,14
Turbine à 4 pales inclinées à 25°	0,51	0,47	0,20
Turbine à 6 pales inclinées à 25°	1,7	0,83	0,34
Hélice marine	0,3 - 0,35	0,52 - 0,56	0,40 - 0,59
Hélices multiplans	0,65	0,73	0,60

I.4.2.2 Débit de circulation

Le courant de liquide sortant de l'agitateur entraine les éléments de fluide voisins, créant ainsi, dans la cuve, un débit plus important, dit de circulation Q_c , qui est la somme du débit de pompage et du débit de liquide entraîné par le mobile d'agitation (Figure I.12).

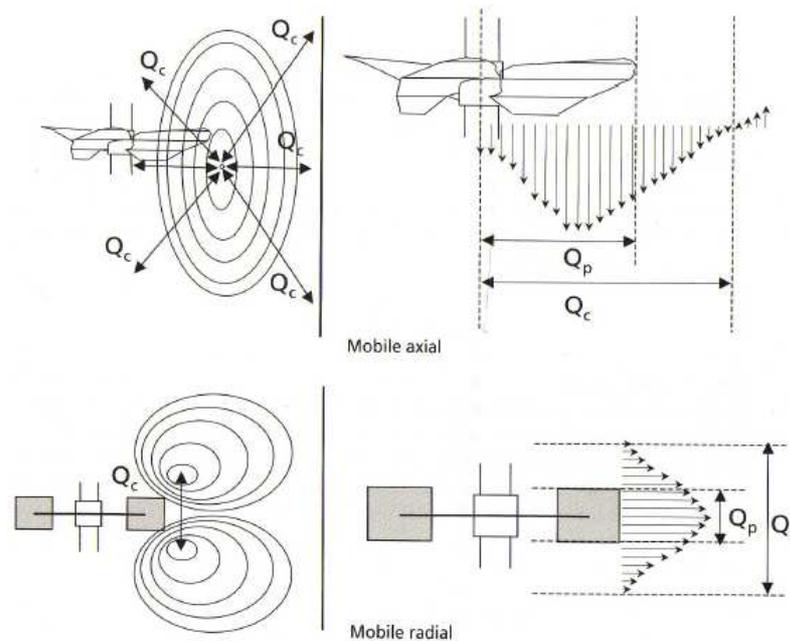


Figure I.12 Débit de circulation [30]

On a donc :

$$Q_c = Q_e + Q_p \quad \text{Équation I.10}$$

Q_c peut s'écrire ainsi :

$$Q_c = N_\theta * N * D^3 \quad \text{Équation I.11}$$

ou N_θ est une constante appelée nombre de circulation. Pour des systèmes fonctionnant en régime turbulent, ce nombre est fonction du type d'agitateur et du rapport D/T .

Le tableau I.3 présente des valeurs de N_{qp} et N_θ pour plusieurs types d'agitateurs. On observe que la valeur de Q_c/Q_p reste de l'ordre de 1,8.

Tableau I.3 Nombre de pompage et de circulation en régime turbulent

Type de l'agitateur	N_{qp}	N_θ pour $D/T=1/3$
Hélice marine	0,50	0,85
Turbine disque à 6 pales droites	0,47	0,90
Turbine disque à 6 pales droites (Rushton)	0,80	1,40

I.4.3 Temps de mélange

Le temps de mélange t_m est défini comme étant l'intervalle de temps nécessaire entre le début de l'agitation et le moment où un degré d'homogénéisation choisi est obtenu dans des conditions d'agitations bien déterminées. L'état initial est généralement réalisé par l'injection instantanée d'une certaine quantité de traceur. La définition d'une composition uniforme dépend de l'échelle à laquelle on se situe. Il est bien évident que le temps de mélange ne sera pas le même si on se situe à l'échelle du millilitre ou à l'échelle moléculaire. Le temps de mélange est fonction des caractéristiques physico-chimiques du fluide à mélanger, des conditions d'agitation et du système cuve-agitateur.

Il existe peu de corrélations générales permettant d'estimer de manière précise le temps de mélange. Pour les turbines de Rushton et les turbines à pales inclinées, Rewatkar et Joshi proposent [32] :

$$t_m = \frac{5,37}{N} A^{-0,87} \left(\frac{W}{D}\right)^{-0,314} n_p^{-0,842} \left(\frac{D}{T}\right)^{1,83} \left(\frac{C}{T}\right)^{-0,27} \left(\frac{H}{T}\right)^{0,413} \quad \text{Équation I.12}$$

Avec les limitations suivantes :

$$0,57 < T < 1,5 \text{ m}, \frac{1}{6} < \left(\frac{D}{T}\right) < \frac{1}{2},$$

$$\frac{\pi}{6} < A < \frac{\pi}{3}, 4 < n_p < 8,$$

$$\frac{1}{8} < \left(\frac{C}{T}\right) < \frac{3}{4}, \quad \frac{1}{4} \leq \left(\frac{W}{D}\right) \leq \frac{1}{3}, \quad \frac{2}{3} \leq \left(\frac{H}{T}\right) \leq 1.$$

Comme le temps de mélange est toujours inversement proportionnel à la vitesse de rotation de l'agitateur, on trouvera quelques corrélations spécifiques reliant le groupe Nt_m aux variables caractéristiques de systèmes particulière.

En régime turbulent, le produit Nt_m est à peu près constant pour un système donné. Selon la géométrie, cette constante peut s'exprimer simplement par des relations du type :

$$Nt_m \cong a \left(\frac{T}{D}\right)^b \quad \text{Équation I.13}$$

Les Principales corrélations empiriques proposées par différents auteurs caractérisant le mélange dans des réacteurs agités sont rassemblées dans le tableau I.4.

Tableau I.4 Corrélations empiriques relatives au produit $N.t_m$ dans le cas d'un réacteur

Auteurs	Mobiles	n_p	$\frac{D}{T}$	H	Corrélations
Roustan et coll., [33]	Hélice marine	3	-	$\frac{H}{3}$	$Nt_m = 6 \left(\frac{T}{D}\right)^2$
Roustan et coll., [33]	Turbine (Rushton)	6	-	$\frac{H}{3}$	$Nt_m = 4 \left(\frac{T}{D}\right)^2$
Khang et coll., [34]	Hélice marine	3	0,1-0,45	$\frac{H}{2}$	$Nt_m = 0,9 \left(\frac{T}{D}\right)^2 \ln\left(\frac{2}{A}\right)$
Khang et coll., [34]	Turbine (Rushton)	6	0,23-0,45	$\frac{H}{2}$	$Nt_m = 0,5 \left(\frac{T}{D}\right)^{2,3} \ln\left(\frac{2}{A}\right)$
Prochazka et coll., [35]	Turbine (Rushton)	6	0,1-0,33	$\frac{H}{2}$	$Nt_m = 0,394 \left(\frac{T}{D}\right)^{2,57} \ln\left(\frac{2}{A}\right)$

avec : $A = \frac{100 - (\text{degré de mélange souhaité en \%})}{100}$

I.5 Écoulements secondaires

I.5.1 Phénomène des recirculations de Dean

Ce type de mouvement concerne l'écoulement dans une conduite courbe. Lors du passage d'un écoulement stationnaire dans une conduite courbe, deux forces opposées agissent sur les particules de fluides perpendiculairement à la direction de l'écoulement principal : la force centrifuge due à la courbure de conduite et la force générée par le gradient de pression. Si on appelle la paroi plus proche du centre de courbure « paroi interne » et celle plus loin de ce centre « la paroi externe » (Figure I.13), la force centrifuge agit selon la direction qui est de la paroi interne vers la paroi externe alors que la force de pression agit dans le sens inverse. Dans le plan médian, présenté par une ligne de symétrie sur la figure I.13, c'est la force centrifuge qui l'emporte sur la force de pression et donc les particules de fluide se déplacent vers la paroi externe. Ce mouvement des particules est ralenti proche de la paroi externe à cause des forces visqueuses. A ce moment, pour assurer la conservation de la quantité de mouvement, les particules de fluide reviennent vers la paroi interne en passant par voisinage des parois supérieure et inférieure où les vitesses sont faibles et l'équilibre des forces est à la faveur de la force de pression par rapport à la force centrifuge. Ainsi la compétition entre la force centrifuge et la force de pression, forme deux cellules contrarotatives dans le plan perpendiculaire à l'écoulement principal (Figure I.13). Ces cellules sont nommées cellules de Dean [18, 19]. En 1929, White a expérimentalement confirmé l'existence des cellules de Dean mais il faut quand-même citer le travail expérimental d'Eustice [36] comme la première étude qui a présenté ces cellules contrarotatives dans un coude.

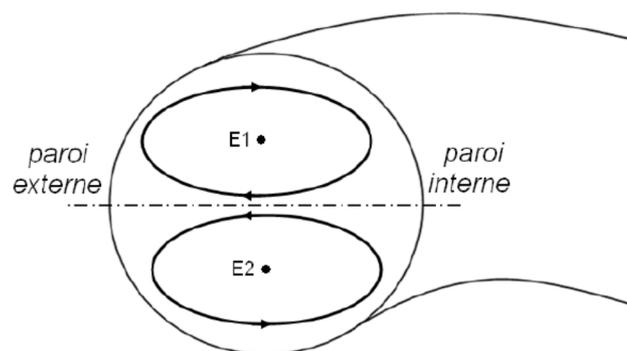


Figure I.13 Cellules de Dean

Un écoulement de Dean est gouverné par les trois paramètres suivants :

- 1) φ : L'angle d'ouverture de la conduite.

- 2) γ : Le rapport de courbure de la conduite. Si r est le rayon de la section circulaire de la conduite et R_c est le rayon de courbure de la conduite, le rapport de courbure est défini comme:

$$\gamma = \frac{r}{R_c} \quad \text{Équation I.14}$$

- 3) De : Le nombre de Dean qui caractérise l'importance des forces centrifuges et inertielles par rapport aux forces visqueuses. Le nombre de Dean est défini par :

$$De = Re\sqrt{\gamma} \quad \text{Équation I.15}$$

Dans le cas d'une conduite dont le rayon de courbure est très grand devant le diamètre de la conduite (hypothèse de W.R. Dean), les premières structures secondaires apparaissent à :

$$Re = 36\sqrt{\frac{R_c}{r}} \text{ soit } De = 36 \quad \text{Équation I.16}$$

La littérature est très riche sur le sujet des écoulements de Dean. De nombreux travaux, expérimentaux ou numériques, concernent les écoulements dans un tube hélicoïdal, un tube en U ou un coude unique [37, 38], le plus souvent en conduite de section circulaire. Les équations établies précédemment sont vraies quel que soit la géométrie, à condition de remplacer le diamètre par le diamètre hydraulique défini pour une section rectangulaire par l'équation I.17 :

$$d_h = \frac{4S}{P_m} = 2\frac{ab}{a+b} \quad \text{Équation I.17}$$

a et b étant respectivement la hauteur et la largeur du coude. Lorsque la section de passage est carrée ($a=b$) alors $d_h=a$.

Dans une conduite courbée, lorsque le nombre de Dean augmente, soit en modifiant les paramètres géométriques (rayon de courbure ou diamètre) soit en augmentant la vitesse d'écoulement, l'équilibre entre force centrifuge, pression radiale et forces de viscosité est rompu et ne parvient plus à maintenir la structure des deux vortex stable. De plus, l'accroissement du nombre de Dean pour un écoulement et une géométrie donnés tend à déplacer le pic de vitesse axiale vers la paroi externe de la courbure (Figure I.14).

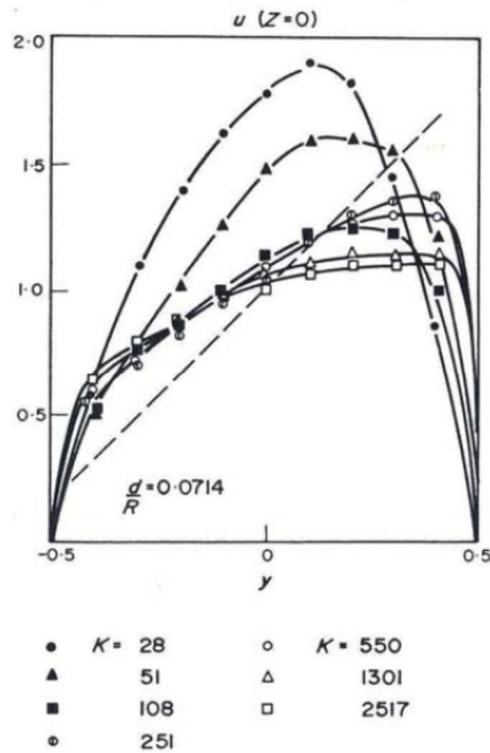


Figure I.14 Profil de distribution de vitesse dans le plan normal à l'écoulement en sortie de coude en fonction du nombre de Dean ($De=K$) [39]

Le gradient de vitesse devient donc très fort de même que le gradient de pression, déstabilisant de fait encore plus l'écoulement secondaire. Une nouvelle paire de boucles de recirculation apparaît alors, elles sont nommées vortex de Dean (Figure I.15).

L'étude analytique de Dean [18, 19] a été effectuée pour un cas où l'écoulement est établi (l'angle d'ouverture assez grand) et le rapport de courbure est très faible. Dans ce cas spécial, l'écoulement est gouverné seulement par le nombre de Dean. Par contre pour un cas général, il faut considérer les trois paramètres qui sont présentés au-dessus (φ, γ, De).

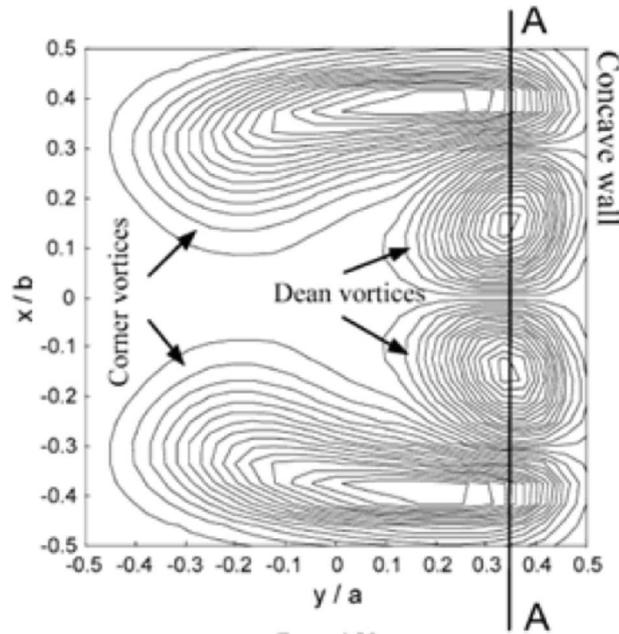


Figure I.15 Cellules de recirculations secondaires (corner vortices) et vortex de Dean dans une section de passage carrée pour $De=150$ [40]

I.5.2 Régime d'écoulement

Le nombre de Dean représente le rapport de la racine carrée du produit des forces centrifuges et d'inertie aux forces visqueuses. Il joue le rôle du nombre de Reynolds de l'écoulement dans un tube coudé. Basé sur le nombre de Dean, trois différents régimes d'écoulement dans les conduites circulaires coudées ont été identifiés. Petit nombre de Dean ($De \leq 17$). Nombre de Dean intermédiaire ($17 \leq De \leq 370$) ; tous les deux sont dans le régime laminaire. Grand nombre de Dean ($De > 370$), est dans le régime turbulent.

I.5.3 Paramètres géométriques et nombre de Dean critique

Le nombre de Dean critique, De_c , correspond à la valeur au-delà de laquelle apparaissent les vortex de Dean (Figure I.15). Il dépend de la géométrie de la conduite, notamment du facteur de forme, du rayon de courbure et de l'angle comme le montrent les figures I.16, I.17 et I.18.

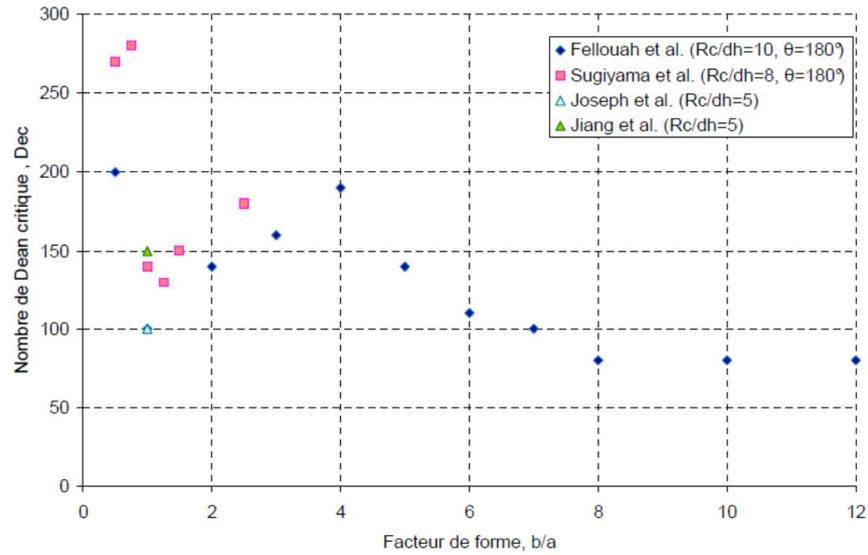


Figure I.16 Influence du facteur de forme, b/a , sur le nombre de Dean critique [40-43]

Le nombre de Dean critique présente un minimum lorsque le facteur de forme vaut 1, i.e. lorsque la section du canal est carrée. Dans ce cas, le rayon de courbure n'a aucune influence sur l'apparition des vortex de Dean.

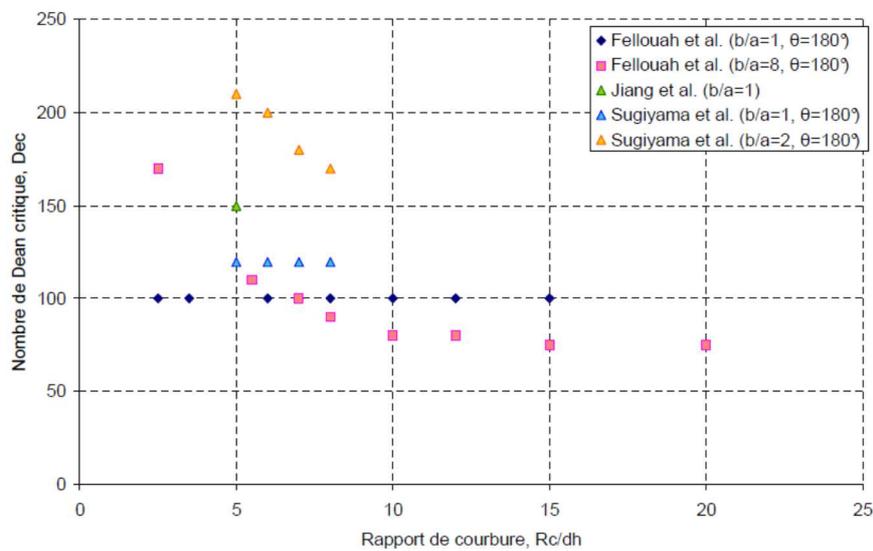


Figure I.17 Evolution du nombre de Dean critique avec le rapport de courbure Rc/dh [40-42]

Enfin, la figure I.18 représente l'évolution du nombre de Dean critique avec la valeur de l'angle du coude :

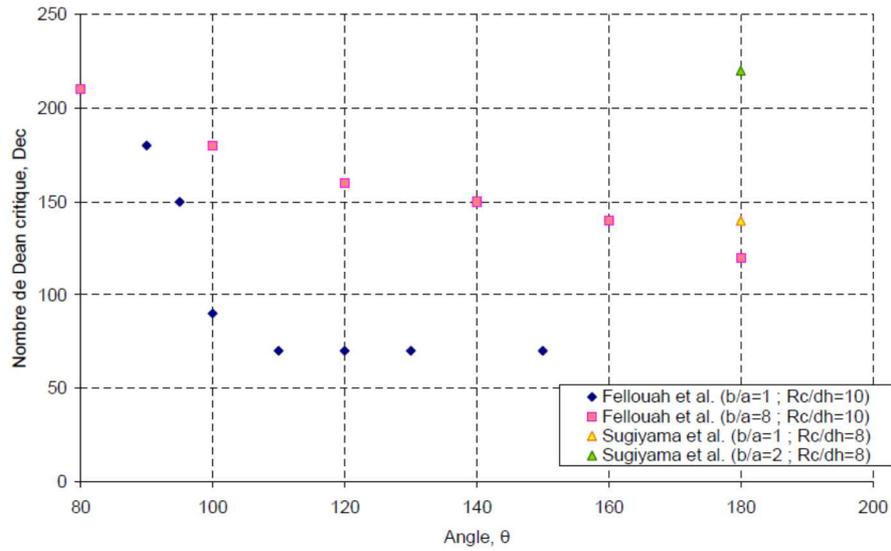


Figure I.18 Evolution du nombre de Dean critique avec l'angle des coudes [40, 41]

Les trois graphes montrent que la plage d'apparition de la seconde paire de boucles de recirculation, i.e. le nombre de Dean critique, se situe entre 80 et 250 pour un coude unique. Les différences entre les travaux sont principalement dues aux méthodes de détection des vortex de Dean, d'où une gamme plutôt large concernant le nombre de Dean critique.

CHAPITRE II

SYNTHESE BIBLIOGRAPHIQUE SUR L'ETUDE DES REACTEURS TORIQUES

Depuis plusieurs années, les recherches dans le domaine du génie des procédés ont pris une importance grandissante en ce qui concerne la transformation de matière et des économies d'énergie. Cet intérêt est directement lié au coût énergétique élevé et à la régression du potentiel des ressources naturelles.

Tous ces inconvénients ont incité les chercheurs à envisager de nouveaux types de réacteurs caractérisés par des coefficients d'échange de matière et de chaleur élevés, permettant ainsi de minimiser les coûts de production.

C'est dans ce contexte que le réacteur à boucle a été envisagé pour de potentielles applications, notamment en biologie.

Par comparaison aux réacteurs de type agité, le réacteur à boucle présente de nombreux avantages :

- Extrapolation aisée de ses performances,
- Effets de cisaillements faibles,
- Consommation énergétique moindre,
- Mélange radiale efficace,
- Dissipation efficace de la chaleur,
- Absence de dépôt de polymère sur la paroi du réacteur et sur les pales du mobile d'agitation pour de grandes vitesses d'agitation.

II.1 Travaux antérieurs

D'une manière générale, le réacteur à boucle est constitué de quatre coudes à 90° chacun de forme circulaire, carrée ou rectangulaire. Ce dernier peut se présenter sous forme d'un Réacteur Parfaitement Torique (RPT) (Figure II.1a) ou Réacteur Torique à Longueurs Droites (rectangulaire) (RTLTD) (Figure II.1b) et est utilisé en configuration horizontale ou verticale.

Le mélange et la recirculation des réactifs à l'intérieur du réacteur sont assurés par la rotation d'un mobile d'agitation. Dans ce qui suit, nous tenterons de rapporter dans l'ordre chronologique les différentes études consacrées à ce type de réacteur.



Figure II.1 (a) Schéma d'un Réacteur Parfaitement Torique (RPT)



Figure II.1(b) Schéma d'un Réacteur Torique à Longueurs Droites (rectangulaire) (RTLTD)

Ainsi nous commencerons par NORWOOD et coll., [44], qui en 1962 ont proposé ce réacteur pour la polymérisation des oléfines, suivi en 1979 par SATO et coll., [15] qui ont étudié l'hydrodynamique dans un réacteur à boucle ouvert de forme rectangulaire; ces derniers ont montré que la distribution des vitesses est influencée par la présence des chicanes et par le type de mobile d'agitation utilisé ; aussi, ils ont évalué et comparé les pertes de charge occasionnées dans les parties droites et coudées du réacteur.

L'étude qui va suivre est celle de MURAKAMI et coll., (1982) [45], Elle porte essentiellement sur l'aspect énergétique c'est-à-dire l'évaluation de la puissance consommée dans un réacteur de forme rectangulaire. Pour cela ils ont étudié l'influence des chicanes, du diamètre, de l'angle d'inclinaison du mobile d'agitation ainsi que la longueur du réacteur (en système ouvert ou fermé) sur la puissance dissipée.

L'étude proposée par LAEDERACH et coll., (1984) [16] concerne les systèmes biphasiques gaz-liquide et elle porte sur la comparaison des réacteurs toriques et agités. Cette comparaison est basée particulièrement sur la détermination de l'effet du mélange spécifique et la production de biomasse. C'est ainsi qu'ils ont montré l'avantage net du réacteur torique sur le réacteur agité. Cependant, ils ont constaté que le réacteur agité à vitesse élevée présente des valeurs d'effet de mélange du même ordre de grandeur par rapport au réacteur torique.

Plus tard, KREBSER et coll., en 1988 [46] ont montré l'intérêt du bioréacteur continu par rapport au réacteur parfaitement agité pour la production du *Xanthomonas Campestris* sur la base du taux de transfert en oxygène et sur la production de xanthane. Ils ont trouvé que la quantité de glucose transformée en xanthane est plus importante dans le cas du bioréacteur torique, de plus la puissance consommée est moins importante dans ce dernier cas.

TANAKA et coll., (1988) [47] ont réalisé la polymérisation en suspension du styrène dans un réacteur à boucle fermé de forme rectangulaire. Ils ont étudié la distribution finale de la taille des particules ainsi que la taille moyenne de ces dernières. Ils ont établi une corrélation entre la taille moyenne finale des particules et les paramètres opératoires, telles que les conditions de mélange dans la zone de l'agitateur et les propriétés physique initiales des suspensions. D'autre part, ils ont montré qu'une vitesse élevée de circulation permet d'éviter le dépôt de polymères sur la paroi du réacteur.

Dans une autre étude, TANAKA et coll., (1989) [48] ont caractérisé l'écoulement dans le réacteur à boucle de forme torique par la détermination de la vitesse moyenne de circulation et la distribution des pertes de charge. Ils ont recherché des relations pouvant exister entre les conditions d'agitation et les caractéristiques d'écoulement du fluide dans le réacteur torique. Enfin, ils ont procédé à une comparaison des résultats obtenus dans le cas d'un réacteur de forme rectangulaire avec ceux de SATO et coll., [15] et MURAKAMI et coll., [45].

DER YUAN et coll., (1990) [49,50] ont mis en évidence les performances du réacteur torique continu dans la polymérisation en suspension du styrène. Les résultats obtenus montrent

que le taux de conversion du monomère et le diamètre des particules sont proportionnels au temps de séjour dans le réacteur.

HOSOGAI et coll., (1992) [51] ont aussi utilisé le réacteur à boucle de forme circulaire pour la polymérisation en suspension du styrène. Ils ont étudié la distribution de la taille finale des particules en faisant varier le diamètre du mobile d'agitation et la vitesse de rotation de l'agitateur. Par conséquent, une corrélation a été établie entre la taille moyenne des particules et la puissance dissipée.

BELLEVILLE et coll., (1992 et 1994) [52,53] ont étudié l'écoulement et le mélange dans le réacteur à boucle de forme torique. Ils ont proposé d'une part une corrélation liant la vitesse moyenne de circulation et la vitesse d'agitation et d'autre part, un modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale pour caractériser l'écoulement dans le réacteur.

KHALID., (1993) [17] a caractérisé l'écoulement tourbillonnaire dans un réacteur à boucle de forme rectangulaire par deux méthodes : méthode électrochimique et la méthode conductimétrique. Une corrélation liant la vitesse de circulation à la vitesse d'agitation a été proposée. Cette corrélation fait intervenir un facteur géométrique dépendant des caractéristiques géométriques du mobile et du réacteur. Il a également montré l'efficacité du mélange radial et a évalué le nombre de circulation dans ce type de réacteur.

NOURI., (1994) [54] a caractérisé l'écoulement et le mélange dans trois réacteurs à boucle de forme carrée et torique. A travers ces études, des corrélations empiriques ont été proposées reliant le nombre de Reynolds d'écoulement en fonction des conditions d'agitation et des caractéristiques géométriques des réacteurs. Dans cette étude, l'écoulement et le mélange dans ces différents réacteurs fermés à boucle ont été caractérisés par un modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale. L'application dans ce type de réacteur est une mise en œuvre d'hydrolyse enzymatique des gliadines de blé [55]. Par la suite, une étude comparative portant sur le comportement hydrodynamique entre les réacteurs toriques fermés et continus a été réalisée pour l'évaluation de la performance de chacun.

LEGRAND et coll., (1997) [56] ont introduit un nouveau type de réacteur, Il s'agit de micro réacteur à boucle de 0.1 litre, considéré comme réacteur torique. Celui-ci été employé dans l'acétylation des protéines de petit pois (isolate pea), permettant ainsi d'améliorer leurs propriétés fonctionnelles.

Benkhelifa et coll., (2000) [57] a étudié l'hydrodynamique des réacteurs toriques en fonctionnement fermé et ouvert en utilisant la distribution des temps de séjour (DTS) par une

méthode conductimétrique. Elle a constaté que le réacteur torique se comporte lors de chaque circulation comme un réacteur de type piston, caractérisé par une faible dispersion axiale aussi bien en fonctionnement fermé que ouvert et cela quel que soit le régime d'écoulement, ce qui le rend industriellement intéressant. Pour tester les potentialités du réacteur torique, elle a étudiée la mise en œuvre de la transformation des protéines de lait par des enzymes immobilisées sur des billes.

BOESINGER et coll., (2003) [58] ont étudié expérimentalement le mélange réactif au sein d'un Réacteur Torique Ondulé (RTO) et comparé ses performances à d'autres réacteurs : un Réacteur Torique Plat (RTP) et un Réacteur de type Cuve Agitée (RCA). Ensuite, ils ont analysé l'effet de la dispersion axiale sur la cinétique d'une réaction chimique pour les RTO, RTP et RCA. Les temps de mélange sont légèrement plus longs dans le RTO en raison d'une plus faible dispersion axiale et ils ont constaté une amélioration du taux de conversion à faible puissance dissipée.

RIHANI et coll., (2006) [59] ont déterminé la distribution des pertes de charge du système biphasiques (eau/air) dans un réacteur torique en pyrex en utilisant des manomètres air- eau. Ils ont testé certains paramètres hydrodynamiques et physico-chimiques, tels que la vitesse d'agitation et le débit d'air injecté. Les résultats obtenus ont permis de suivre l'évolution de la puissance dissipée en fonction du nombre d'aération.

Nasrallah et coll., (2008) [60] ont montré qu'en écoulement monophasique le changement d'échelle permettait de reproduire les résultats obtenus à petite échelle. En effet, l'écoulement est stable au sein du réacteur torique et ce pour les trois volumes testés à savoir : 2 ; 4,2 et 13 litres. Aussi, le nombre de Péclet qui caractérise la dispersion axiale au sein du réacteur est constant pour les volumes étudiés et vaut 12,5. Ils ont montré que le passage d'une configuration fermée à une configuration ouverte améliore considérablement les performances des différents réacteurs utilisés. Ils ont constaté que, quel que soit le mode de fonctionnement, ouvert ou fermé, le réacteur torique reste plus performant que le réacteur agité.

Nouri et coll., (2008) [61] ont caractérisé le mélange à l'échelle micromoléculaire dans un réacteur torique fermé. L'étude du micro mélange a été établie à l'aide d'une méthode chimique test basée sur un système de réactions de type parallèles concurrentes, il s'agit du système iodite-iodate dans le but de déterminer les paramètres caractéristiques du micro mélange, à savoir l'efficacité du micro mélange (α) et le temps de micro mélange (t_m).

Rihani et coll., (2009) [62] ont caractérisé l'écoulement et l'hydrodynamique d'un système diphasique (air-eau) dans un réacteur torique de 1,14l. L'effet du nombre d'aération et la vitesse de rotation de l'agitateur a été étudié, ils ont constaté que l'homogénéisation du traceur à l'intérieur du réacteur diphasique est achevée après plus de recirculations que ceux obtenus dans un réacteur monophasique et que l'écoulement dépend de la vitesse de rotation de l'agitateur et le nombre d'aération.

II.2 Etude des principaux paramètres influant sur l'écoulement et le mélange dans le réacteur a boucle

II.2.1 Etude de la vitesse de circulation

Les réacteurs à boucle semblent être particulièrement adaptés à des systèmes nécessitant des conditions d'écoulement bien définies dans l'ensemble du volume réactionnel. L'un des principaux paramètres permettant d'optimiser les conditions d'agitation est la vitesse de circulation.

Les études réalisées par SATO et coll., [15], TANAKA et coll., [48] et HOSOGAI et coll., [51] sur différentes géométries de réacteurs à boucle avec différents mobiles d'agitation à savoir l'hélice marine et la turbine à pales inclinées (Figure II.2), ont montré qu'il existe une relation de proportionnalité entre la vitesse de circulation U_c et la vitesse d'agitation N .

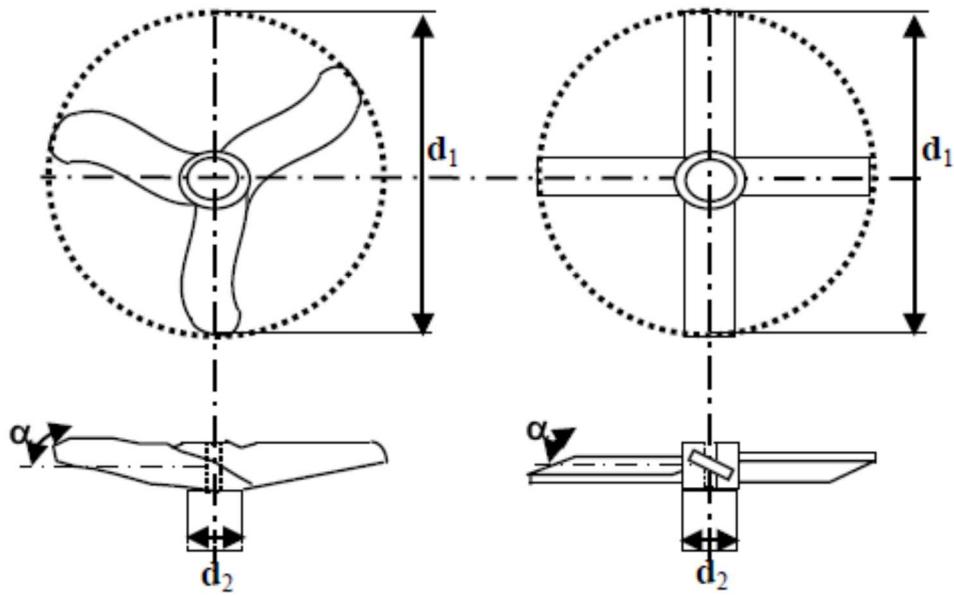
Cette vitesse de circulation est définie expérimentalement par :

$$U_c = \frac{L_t}{t_c} \quad \text{Équation II.1}$$

Avec : L_t : longueur moyenne du réacteur,

U_c : vitesse moyenne de circulation.

t_c : étant le temps de circulation nécessaire à un élément fluide pour effectuer une boucle dans le réacteur.



a)- Hélice marine

b)- turbine à pale inclinée

Figure II.2 Schéma des deux mobiles d'agitation utilisés par [15, 48,51]

SATO et coll., [15] ont été parmi les premiers à s'intéresser à ce facteur de proportionnalité et ceci pour prédire la vitesse de circulation en se basant sur le modèle de débit de décharge (Figure II.3).

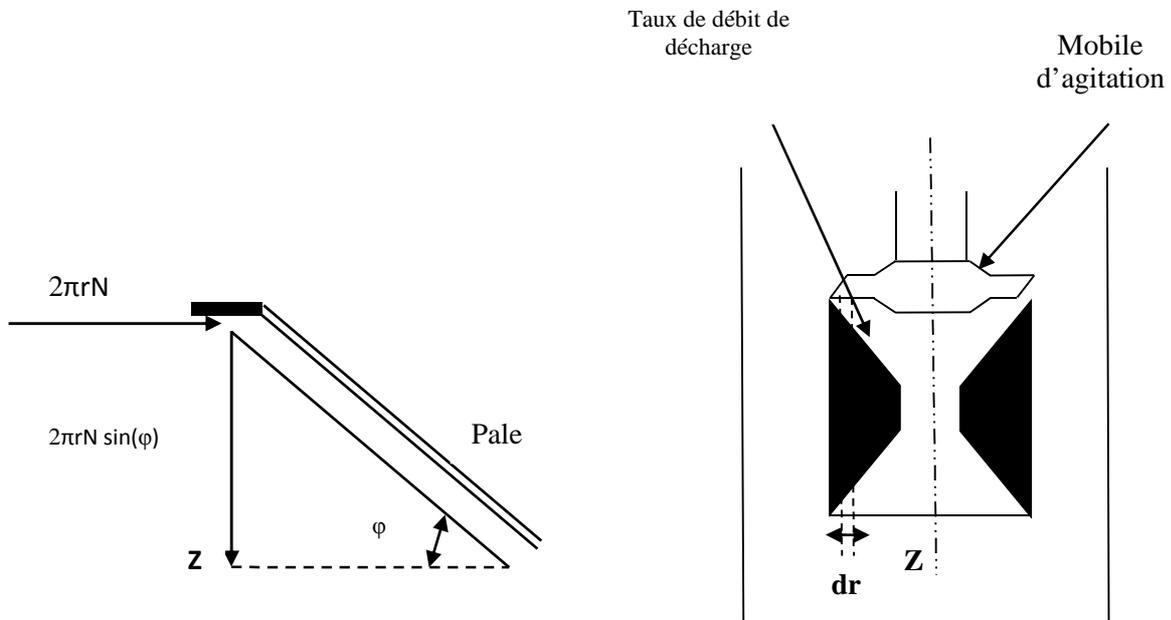


Figure II.3 Schéma représentatif caractérisant le débit de décharge engendré par un mobile d'agitation dans un réacteur à boucle [15]

Comme le montre la figure II.3, la vitesse tangentielle entre la pale et le fluide est égale à la vitesse au niveau de l'agitateur et est définie par :

$$U_t = 2\pi rN \quad \text{Équation II.2}$$

Avec :

N : vitesse de rotation du mobile d'agitation.

En supposant que c'est la vitesse axiale U_z qui prédomine pour de faibles angles d'inclinaison des pales on aura :

$$U_z = 2\pi r.N.\sin\varphi \quad \text{Équation II.3}$$

Avec :

r : rayon du mobile d'agitation.

φ : angle d'inclinaison des pales du mobile d'agitation.

Par suite on définit le débit de décharge engendré par l'agitateur par :

$$Q_c = \int_{r_2}^{r_1} 2\pi r.N.(\sin\varphi)2\pi r.dr \quad \text{Équation II.4}$$

Sachant que la rotation de l'agitateur crée un débit de circulation Q_c , d'où :

$$U_z = \frac{4\pi}{3} \frac{r_1^3 - r_2^3}{r_t^2} N \sin \varphi \quad \text{Équation II.5}$$

Pour comparer la vitesse expérimentale et calculée, SATO et coll., [15] proposent de représenter le rapport de U_z expérimentale et calculée en fonction du nombre de Reynolds de circulation, ceci a permis de corriger l'écart existant entre les deux valeurs par l'équation :

$$\frac{U_{Exp}}{U_z} = 0.744 \frac{Re_c^{0.7}}{Re_c^{0.7} + 250} \frac{r_1^2 - r_2^2}{r_t^2} \quad \text{Équation II.6}$$

r_t : rayon intérieur de la section du réacteur à boucle.

Cette vitesse présente un écart de l'ordre de 5% par rapport aux valeurs expérimentales sauf pour le cas des mobiles d'agitation dont l'angle est égale à 60° , ceci pouvant être dû au fait que c'est la vitesse tangentielle qui prédomine et non la vitesse axiale. Ils ont aussi montré que la présence des chicanes dont la largeur est comprise entre 15 et 12 mm n'a aucune influence sur la vitesse de circulation.

Se référant toujours au modèle de débit de décharge, BELLEVILLE et coll., [52] proposent l'équation suivante pour corriger l'écart :

$$U_{Exp} = U_Z \left[1 - N^{-0.246} \left(\frac{r_1^2 - r_2^2}{r_t^2} \right)^{1.57} \right] \quad \text{Équation II.7}$$

Ces mêmes auteurs ont effectué une autre étude [53] qui a permis de mettre en évidence deux approches permettant de représenter avec une bonne précision l'évolution de la vitesse de circulation en fonction de la vitesse d'agitation d'une hélice marine dans un réacteur torique. Ils proposent deux corrélations dans lesquelles, les deux paramètres suscités sont reliés linéairement et dont la constante de proportionnalité (K) est indépendante des grandeurs géométriques du réacteur et du mobile d'agitation.

La première relation est obtenue à partir des équations classiques établies pour les cuves agitées « approche classique » (Figure II.4).

$$U_C = KF_{g_1} N = A \cdot N \quad \text{Équation II.8}$$

Avec : $F_{g_1} = \frac{d_1^2}{d_t^2} t g \varphi$ Équation II.9

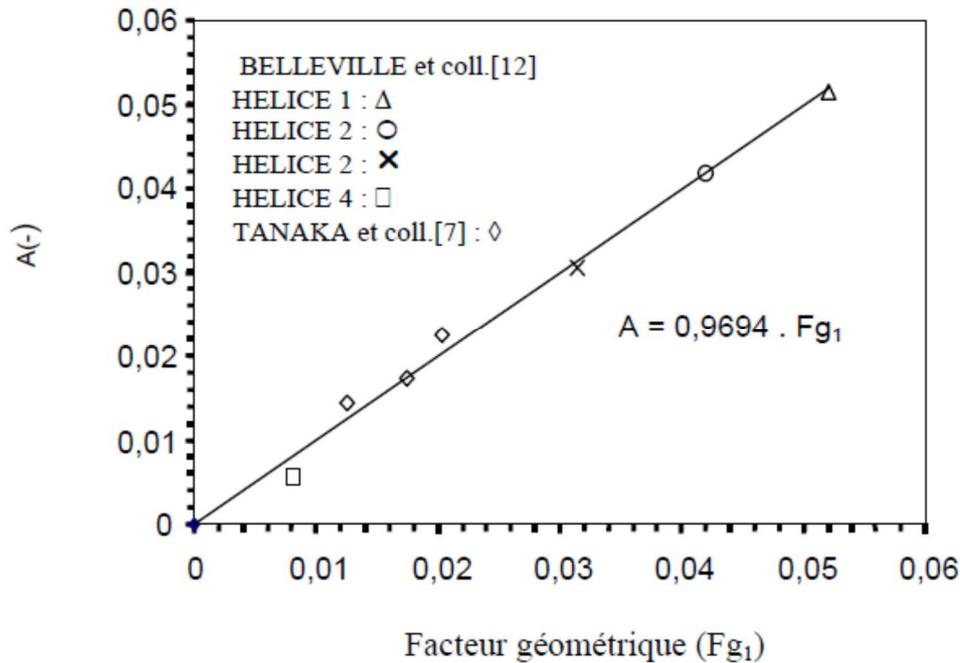


Figure II.4 Corrélation des résultats de l'approche « classique » [53]

La seconde relation permet d'intégrer un nouveau facteur géométrique plus spécifique à une géométrie toroidale tenant compte du rapport entre la surface balayée par les pales de l'hélice et la section de la veine fluide « approche spécifique » (Figure II.5).

$$U_C = K F_{g_2} N \quad \text{Équation II.10}$$

$$F_{g_2} = \frac{d_1^2 - d_2^2}{d_f^2} \operatorname{tg} \varphi \quad \text{Équation II.11}$$

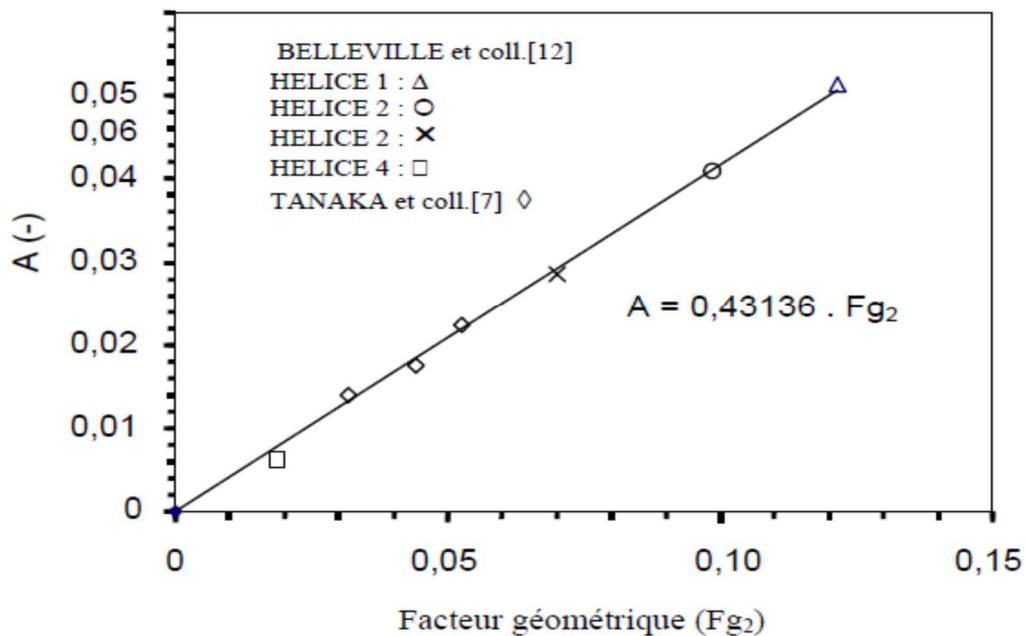


Figure II.5 Corrélation des résultats de l'approche « spécifique » [53]

Il semble donc en conclusion que grâce à une approche plus spécifique on puisse définir à la fois une constante et un facteur géométrique qui caractérisent de manière satisfaisante le système d'agitation composé de l'hélice marine et de la géométrie torique.

Ceci est confirmé par comparaison avec les résultats expérimentaux obtenus par TANAKA et coll., [48]. Dans une configuration similaire à hélice marine dont l'angle d'inclinaison varie de 30 à 45°. NOURI [54] a constaté qu'à partir d'un nombre de Reynolds de mélange (Re_m) supérieur à 4000, la vitesse moyenne de circulation dans les différents réacteurs à boucle varie linéairement en fonction de Re_m . Ces résultats sont similaires à ceux obtenus par SATO et coll., [15], HOSOGLI et coll., [51] et TANAKA et coll., [48].

Pour un nombre de Reynolds de mélange donné ($Re_m > 4000$), la vitesse moyenne de circulation semble être indépendante du diamètre du mobile d'agitation.

Pour Re_m inférieur à 4000 l'étude de l'évolution de la vitesse moyenne de circulation a été réalisée avec des solutions plus visqueuses. Les résultats obtenus par NOURI [54] ont montré que cette vitesse varie linéairement avec Re_m et d'une façon similaire quelle que soit la viscosité de la solution étudiée. Néanmoins, pour une vitesse d'agitation donnée, la vitesse moyenne de circulation dans le réacteur torique décroît au fur et à mesure que la viscosité de la solution augmente.

Une relation adimensionnelle a été établie entre la vitesse moyenne de circulation et la vitesse d'agitation en introduisant les nombres de Reynolds de l'écoulement et ceux du mélange sur les différents réacteurs étudiés.

Le même auteur a fait une étude comparative entre le réacteur torique fermé placé en position verticale et horizontale (Figure II.6). Il ressort de cette étude que la position du réacteur influe sur la variation du nombre de Reynolds de circulation Re_c en fonction du nombre de Reynolds de mélange Re_m et l'écart observé est d'autant plus important que le nombre de Reynolds du mélange Re_m augmente.

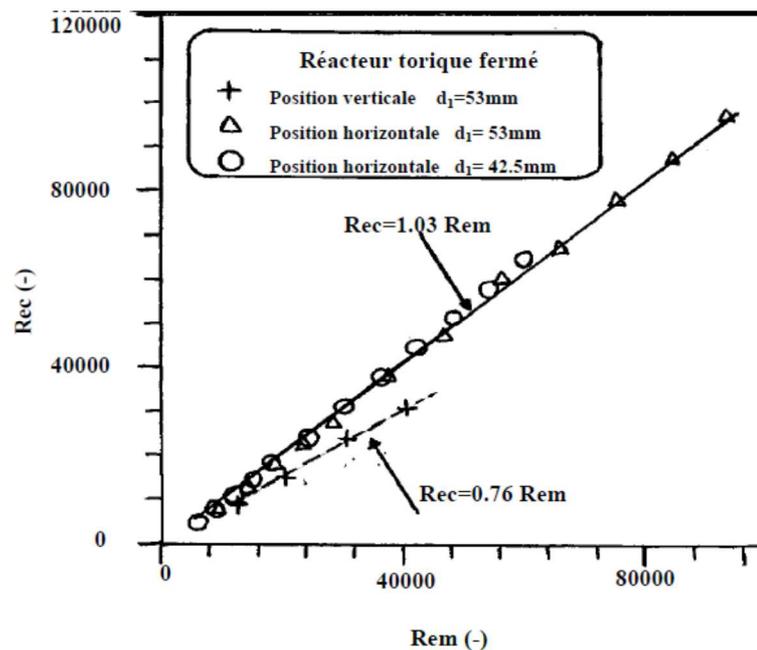


Figure II.6 Variation du nombre de Reynolds d'écoulement en fonction du nombre de Reynolds de mélange : influence de la position géométrique [54]

L'étude menée sur un réacteur torique continu a permis de constater que la variation du débit d'entrée n'a pratiquement aucune influence sur le temps moyen de circulation et par conséquent les vitesses de circulation sont indépendantes du débit d'entrée.

La représentation du nombre de Reynolds de l'écoulement Re_c en fonction du nombre de Reynolds du mélange Re_m a permis de mettre en évidence l'existence d'une zone de transition (Figure II.7). Par conséquent, deux lois régissent cette variation :

$$Re_m > 4000 - 6000 \quad Re_c = 1.3 \left[\frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2} \right]^{0.025} (\sin\varphi) Re_m \quad \text{Équation II.12}$$

$$Re_m < 4000 - 6000 \quad Re_c = 0.004 \left[\frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2} \right]^{0.025} (\sin\varphi) Re_m^{1.67} \quad \text{Équation II.13}$$

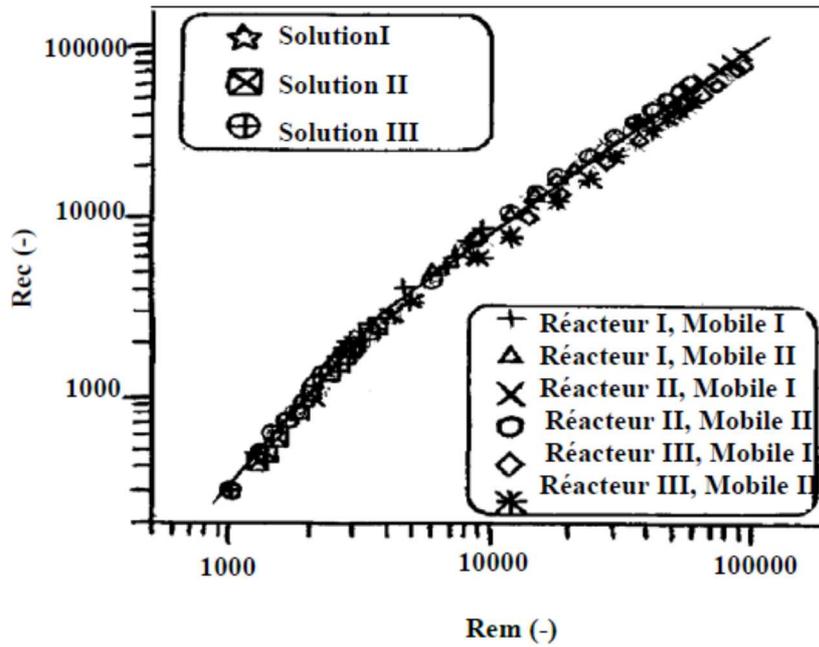


Figure II.7 Variation du nombre de Reynolds d'écoulement en fonction du nombre de Reynolds de mélange dans différents réacteurs à boucle et pour différentes solutions visqueuses [54]

TANAKA et coll., [48] et HOSOGAI et coll., [51] ont caractérisé l'écoulement dans le réacteur à boucle de forme torique en fonction des conditions d'agitation par la corrélation suivante :

$$\frac{Re_c}{Re_m} = \left[\frac{c_1}{Re_m^{c_2}} + c_3 \right]^{-1} \quad \text{Équation II.14}$$

C_1, C_2, C_3 sont des coefficients qui dépendent du type d'agitateur.

D'après HOSOGAI et coll., [51], la figure II.8 représente graphiquement le rapport de $\frac{Re_c}{Re_m}$ en fonction de Re_m , ils constatent que $\frac{Re_c}{Re_m}$ tend vers 1 pour $2 \cdot 10^4 \leq Re_m \leq 10^5$ dans le cas

d'une agitation avec des turbines de même angle d'inclinaison des pales mais de diamètres différents.

Tableau II.1 Caractéristiques géométriques des turbines utilisées [51]

mobile	d_l (mm)	Φ (degré)	d_l / d_t
turbine	30	45	0.6
turbine	35	45	0.7
turbine	40	45	0.8
turbine	45	45	0.9

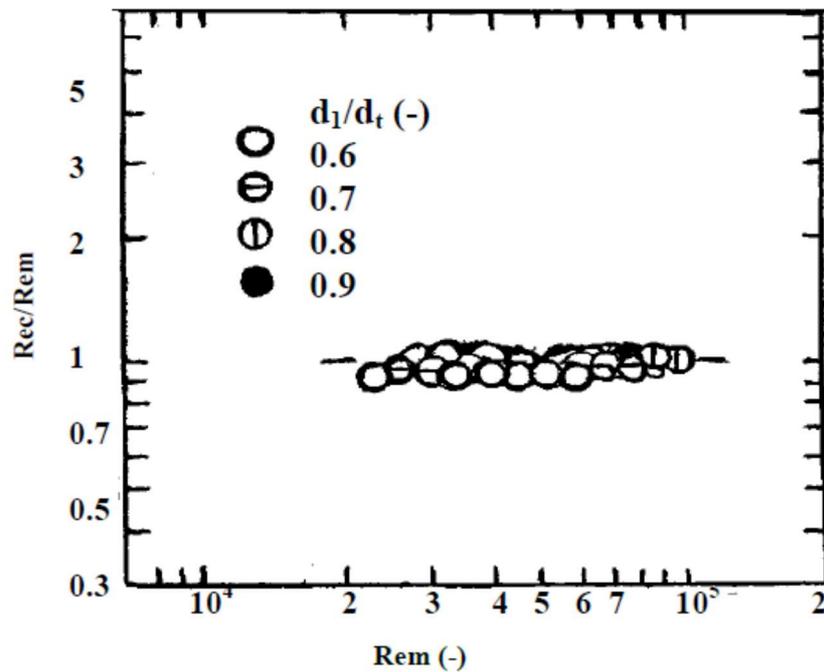


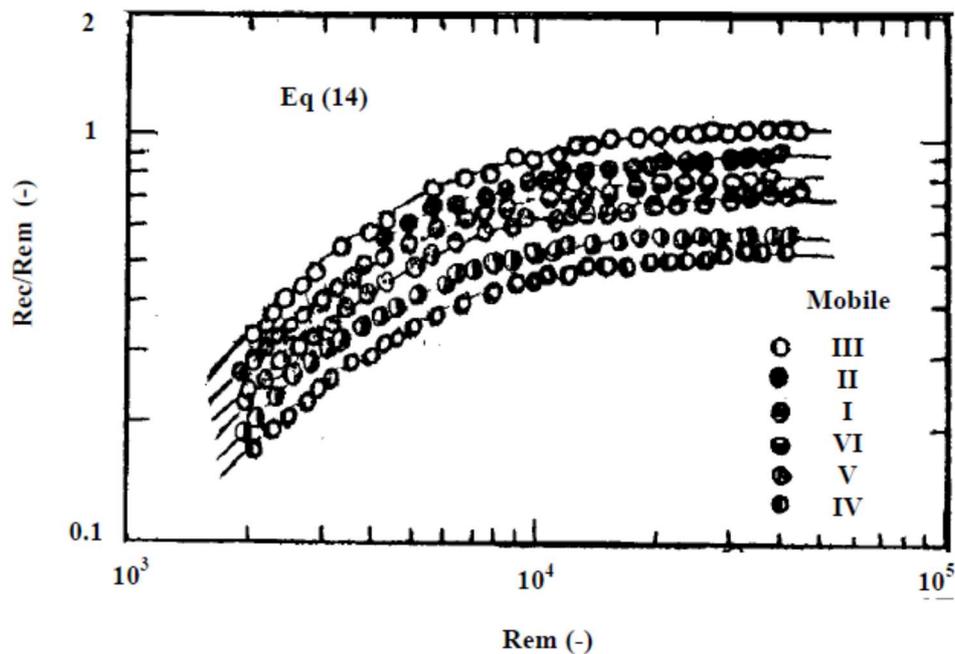
Figure II.8 Dépendance des conditions d'écoulement en fonction des caractéristiques des mobiles d'agitation [51]

D'après la figure II.9, TANAKA et coll., [48] constatent que le rapport Re_c / Re_m dépend de l'angle d'inclinaison des pales φ et du type d'agitateur utilisé. A partir d'un Re_m supérieur à $1.5 \cdot 10^5$ ce rapport tend vers une constante. Ils constatent que l'écart maximal entre les valeurs calculées par l'équation II.14 et ceux obtenues expérimentalement n'excède pas 9.6%.

L'hélice marine engendre une vitesse de circulation plus importante que la turbine à pales inclinés et pour différents types d'agitateurs, l'angle d'inclinaison le plus élevé donne de grandes vitesses.

Tableau II.2 Les différents mobiles d'agitation utilisés [48]

mobile	N°	d_1 (mm)	d_2 (mm)	Φ (degré)
Hélices marines	I	3.2	1.4	30
	II	3.2	1.4	40
	III	3.2	1.4	45
Turbine à pales inclinées	IV	3.2	1.4	30
	V	3.2	1.4	40
	VI	3.2	1.4	45

**Figure II.9** Variation du rapport Re_c / Re_m en fonction du nombre de Reynolds de mélange [48]

KHALID [17] a mis en évidence l'efficacité du mélange radial et trouve que l'évolution de la vitesse de circulation en fonction de la vitesse d'agitation déterminée par la méthode électrochimique est identique à celle obtenue par la méthode conductimétrique. Il en déduit une corrélation liant ces deux grandeurs pour le réacteur de forme rectangulaire, définie par :

$$U_c = KN \frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2} \operatorname{tg} \varphi \quad \text{Équation II.15}$$

Ces résultats ont été comparés à ceux d'un réacteur de forme torique et pour lequel la corrélation proposée est la suivante :

$$U_c = 0.06N \frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2} \operatorname{tg} \varphi \quad \text{Équation II.16}$$

Le résultat de cette comparaison montre que jusqu'à une vitesse de rotation $N = 800$ tr/min, la géométrie du tore n'a que peu d'influence sur la circulation du fluide et qu'au-delà de celle-ci, une légère divergence entre les résultats expérimentaux et les ceux obtenues par la corrélation II.16 est constatée.

Les résultats expérimentaux corrélés sous forme adimensionnelle s'écrivent :

$$\frac{Re_c}{Re_m} = \left[1 + \frac{c}{Re_m^{0.7}} \right]^{-1} \quad \text{Équation II.17}$$

Ce rapport demeure constant pour $2 \cdot 10^4 < Re_m < 10^5$.

II.2.2 Etude de la distribution de la vitesse de circulation

La connaissance de la distribution des vitesses dans le réacteur à boucle donne d'importantes informations pour la caractérisation du mélange et de l'écoulement.

TANAKA et coll., [48] ont établi cette distribution dans le réacteur torique en le subdivisant en sept sections, dans chacune d'elles le nombre de mesures effectuées étant de 30 points. Ils ont montré que dans chaque section, la vitesse dans la région externe est plus grande que celle dans la région interne. Ce résultat est similaire à celui de SATO et coll., [15].

Dans le but de représenter l'évolution de la distribution de la vitesse de circulation, ils ont introduit l'écart type de la distribution de vitesse calculée à partir de l'équation suivante :

$$\frac{\delta U_Z}{U_Z} = \left[\frac{\sum_{i=1}^n \left(\frac{u_i}{U_c} - n \left(\frac{\bar{u}_i}{U_c} \right) \right)^2}{n-1} \right]^{1/2} \quad \text{Équation II.18}$$

La représentation de $\frac{\delta U_Z}{U_Z}$ fonction de la distance par rapport au mobile d'agitation (Figure II.10), montre que cette déviation pour toute vitesse d'agitation est plus importante juste en aval de l'agitateur et diminue brusquement pour atteindre enfin une valeur constante pour $L_t / d_t = 10$.

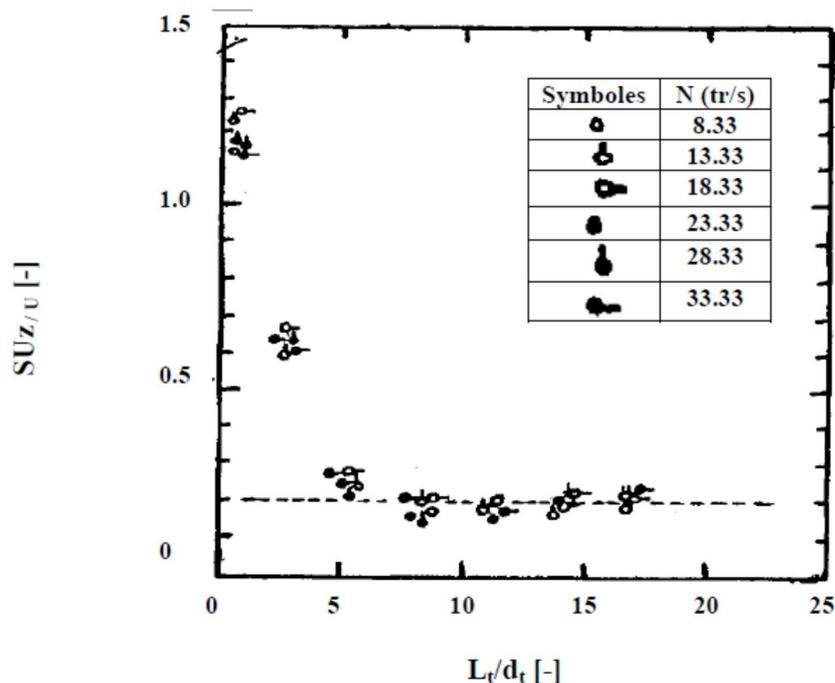


Figure II.10 Variation de la déviation standard de la vitesse de circulation [48]

Dans leurs études SATO et coll., [15], ont évalué la distribution des vitesses axiales et tangentielle (Figure II.11) à l'aide d'un tube de Pitot dans un réacteur à boucle de forme rectangulaire. Ils ont examiné l'influence de la géométrie du mobile d'agitation qui est une turbine à pales inclinées et de la présence de chicane sur cette distribution.

En absence des chicanes (Figure II.11a) l'écoulement est caractérisé par une composante de vitesse tangentielle qui a tendance à s'atténuer au fur et à mesure que l'on s'éloigne du mobile d'agitation tel que représenté précédemment par la figure II.11. Par ailleurs l'intensité de la vitesse tangentielle croît avec l'augmentation de la vitesse d'agitation et l'angle d'inclinaison des pales.

En présence des chicanes (Figure II.11b) La composante de la vitesse tangentielle est brusquement atténuée, par ailleurs, la distribution de vitesse axiale est indépendante du type d'agitateur et de la vitesse d'agitation.

II.2.3 Etude du mélange dans le réacteur torique

Connaissant l'importance de la qualité du mélange lors de la mise en œuvre d'une transformation chimique ou biologique, on a recours souvent au temps de mélange t_m pour caractériser des processus de mélange dans les bioréacteurs. Ce temps est défini comme étant l'intervalle de temps s'écoulant entre l'injection d'un traceur et sa répartition sur tout l'espace réactionnel jusqu'à un degré d'homogénéité donné.

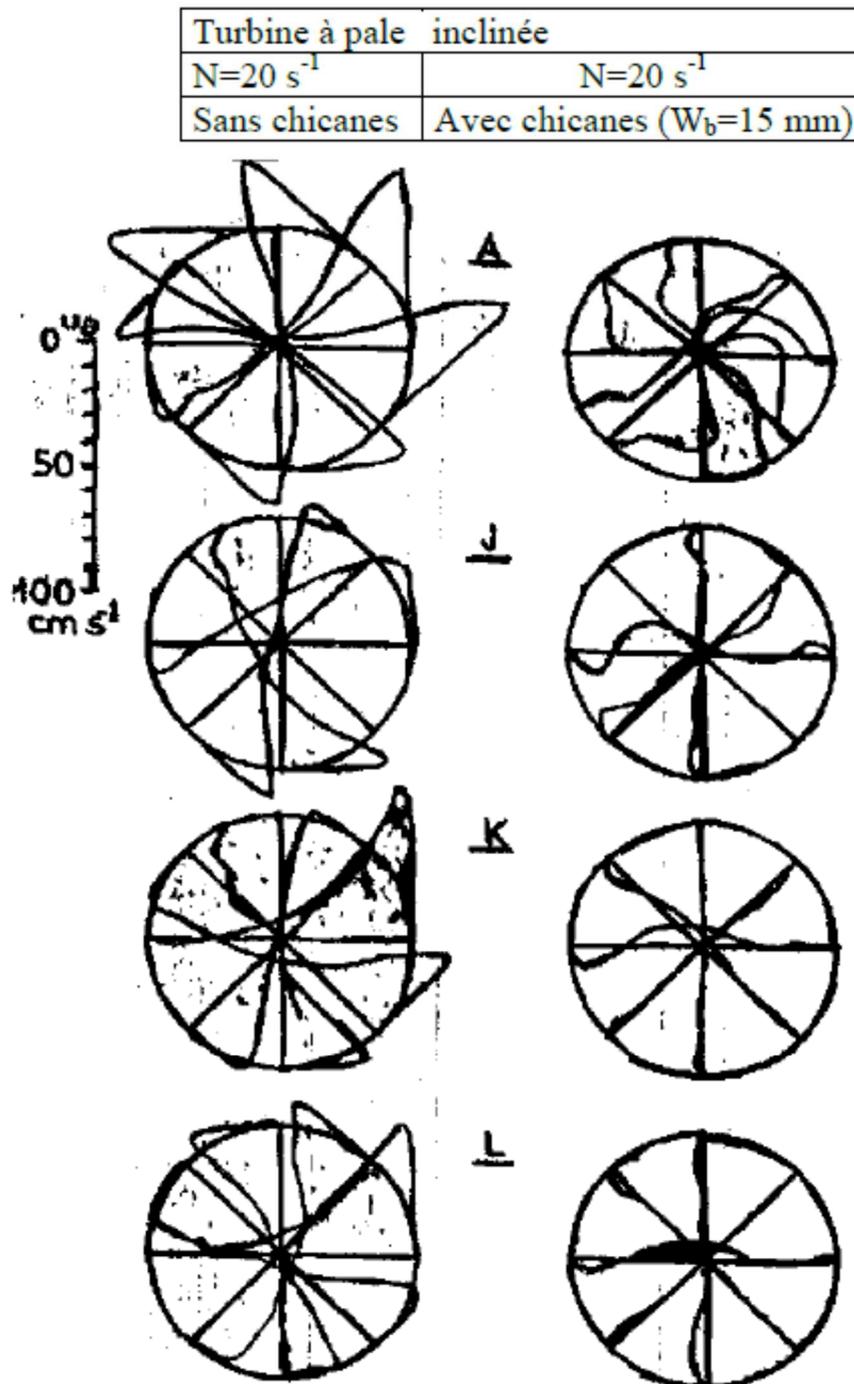


Figure II.11 Variation de la vitesse tangentielle dans les différentes sections du réacteur à boucle [15]

Le point A correspond à la position située juste en aval du mobile d'agitation, J est un point situé à la sortie d'un coude, K et L sont deux points situés dans la partie droite du tore.

BELLEVILLE et coll., [52] ont introduit les critères adimensionnels (t_m/t_c) et le nombre de Reynolds pour caractériser le degré d'homogénéité. Ils trouvent que pour $Re_m > 5000$ la variation de (t_m/t_c) en fonction de Re_m est très peu significative et que ce rapport tend vers une constante égale à 15.

NOURI [54] a caractérisé le mélange et la qualité du mélange dans les réacteurs à boucle par deux approches :

1. Un temps de mélange spécifique (t_{ms}) défini comme étant le rapport entre le temps de mélange et le volume du liquide dans le réacteur.

Il a constaté que pour un Re_m donné, le degré de mélange souhaité est plus rapidement atteint dans les réacteurs à boucle de forme torique que dans les autres formes de réacteurs à boucle ou le temps de mélange spécifique t_{ms} varie suivant une loi de la forme :

$$t_{ms} = \alpha Re_m^\beta \quad \text{Équation II.19}$$

Pour $Re_m = 5.10^5$, le coefficient β est pratiquement identique pour tous les réacteurs utilisés.

2. Un nombre de circulation N_θ défini par :

$$N_\theta = \frac{t_m}{t_c} \quad \text{Équation II.20}$$

N_θ est le nombre de circulation nécessaire pour un degré d'homogénéité. Il permet de caractériser le mélange global dans les différents réacteurs. Il a été remarqué que quel que soit le nombre de Reynolds de mélange Re_m et les dimensions des mobiles d'agitation, le nombre de circulation N_θ reste constant dans les réacteurs présentés dans le tableau II.3.

Tableau II.3 Caractéristiques géométriques des différents réacteurs à boucle [54]

réacteurs	géométrie	V_R (litre)	d_t (mm)	L_t (mm)	R_c (mm)	L_t / d_t	N_θ
I	torique	2.1	55	884	135	16.07	14
II	torique	5.25	77	1130	18	14.67	15
III	carrée	9.1	68	2500	415	36.76	40

Pour un degré d'homogénéité donné, les réacteurs toriques I et II présentent un nombre de circulation plus faible que le réacteur à boucle (III) de forme carré, ceci pouvant être attribué à l'influence des longueurs droites.

D'une part, le même auteur [54] montre que le mélange global dans les réacteurs toriques est relativement indépendant du volume du réacteur, une relation empirique permettant de déterminer le nombre de circulation en fonction des caractéristiques géométriques des différents réacteurs a été proposée et l'écart relatif moyen avec les résultats expérimentaux n'excède pas 6%.

Il a également étudié l'effet de la viscosité de la solution sur le mélange, il en ressort que la variation du temps de mélange en fonction de la vitesse d'agitation est indépendante de la viscosité de la solution.

D'autre la figure II.12 nous constatons qu'à partir d'un Re_m d'environ 30000, N_θ tend vers une valeur constante et décroît légèrement avec l'augmentation du débit dans le réacteur.

Les résultats présentés par KHALID [17] sur les caractéristiques du mélange montrent que le rapport entre le temps de mélange et de circulation peut atteindre une valeur de 40 pour un réacteur à boucle de forme rectangulaire de volume égale à 9.1 litres. Par contre, il est de l'ordre de 15 pour le réacteur torique de volume 5.25 litres.

Ces valeurs restent relativement assez grandes devant celles obtenues pour un réacteur agité et qui sont autour de 5 d'après [17].

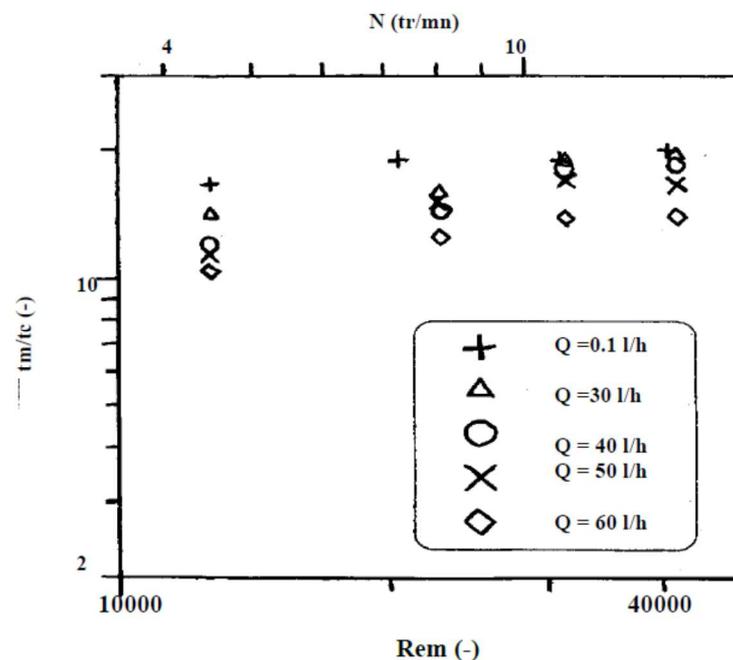


Figure II.12 Variation du rapport t_m / t_c en fonction du nombre de Reynolds de mélange pour différentes valeurs du débit d'entrée dans le réacteur torique continu [54]

II.2.4 Etude des pertes de charge

La connaissance des pertes de charge dans le cas des réacteurs à boucle est importante pour l'analyse de leurs performances et de la puissance dissipée.

SATO et coll., [15] ont évalué les pertes de charge occasionnées dans les coudes et les longueurs droites et ils les ont comparés aux résultats expérimentaux.

Ils ont constaté que les pertes de charge dues aux deux contributions sont en bon accord avec celles calculées dans les parties droites et les coudes d'un réacteur à boucle de forme rectangulaire.

Le facteur de friction « f » dans les parties droites cylindrique du réacteur torique est déterminée par la formule de DREW'S :

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 3.2 \log(Rec\sqrt{f}) + 1.2 \quad \text{Équation II.21}$$

et le coefficient de perte de charge dans les coudes par la formule d'ITO [63] :

$$\xi = 0.00241\alpha\beta Rec^{-0.17} \left(\frac{R_t}{r_t}\right)^{0.84} \quad \text{pour } Rec \left(\frac{r_t}{R_t}\right)^2 > 19.7 \quad \text{Équation II.22}$$

$$\alpha = 0.95 + 17.2 \left(\frac{R_t}{r_t}\right)^{-1.96} \quad \text{pour } \frac{R_t}{r_t} < 19.7 \quad \text{Équation II.23}$$

β : l'angle de courbure du coude en degrés.

TANAKA et coll., [48] ont montré que la chute de pression dans le cas d'un réacteur torique diminue en fonction de la distance par rapport au mobile d'agitation.

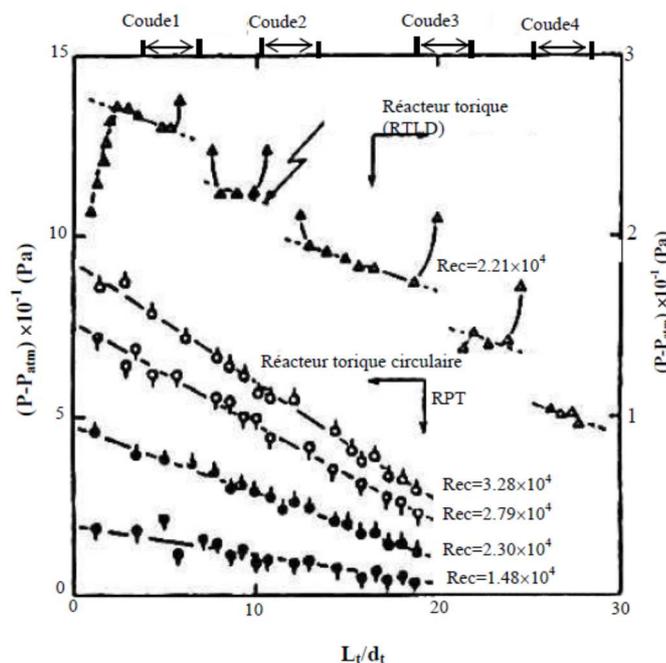


Figure II.13 Variation de la chute de pression le long de la circonférence du réacteur [48]

Les résultats obtenus dans la figure II.13 montrent que les chutes de pression occasionnées dans un réacteur à boucle de forme rectangulaire sont nettement importantes par rapport à celles obtenues dans un réacteur torique et notamment au niveau des coudes où cette chute est brusque.

La chute de pression est déterminée par l'équation de DARCY et WEISBACH :

$$\Delta P = f \left(\frac{L_t}{d_t} \right) \left(\frac{U_c^2 \rho}{2} \right) \quad \text{Équation II.24}$$

et le coefficient de perte de charge par :

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 2 \log(Re_c \sqrt{f}) - 0.8 \quad \text{Équation II.25}$$

Après représentation des facteurs de friction en fonction de Re_c , il a été observé que pour un Re_c donné, ce facteur est plus important dans le cas du réacteur torique que dans des conduites à longueurs droites, L'écart étant de 20%.

NOURI [54] a étudié l'influence de la position (horizontale ou verticale) du réacteur torique sur les pertes de pression. La représentation graphique donne par la figure II.14 caractérise l'influence des pertes de pression sur la vitesse moyenne de circulation. Il a été constaté que pour une vitesse moyenne de circulation, les pertes de pression sont plus importantes dans le réacteur torique en position verticale que celles en position horizontale.

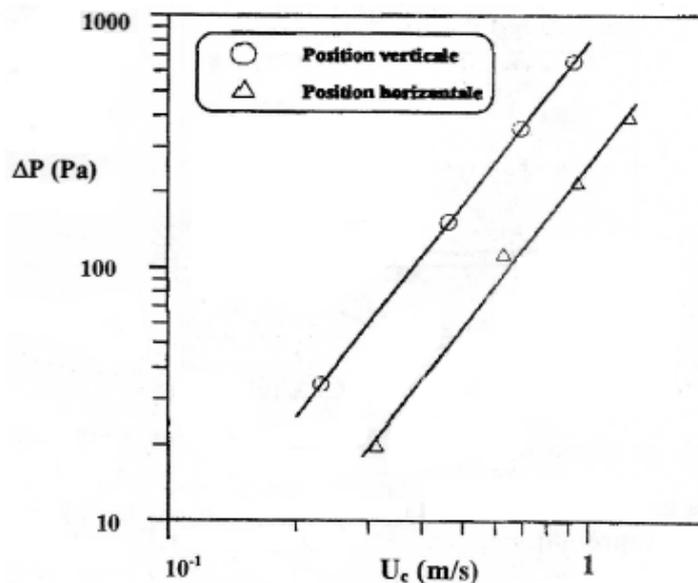


Figure II.14 Variation de la vitesse moyenne de circulation en fonction des pertes de pression pour les deux positions géométriques [54]

II.2.5 Puissance consommée par un mobile d'agitation

La puissance consommée P par un mobile d'agitation peut être considéré comme l'énergie par unité de temps nécessaire pour vaincre la résistance que le milieu agité oppose à la rotation des pales.

MURAKAMI et coll., [45] ont mesuré la puissance consommée dans un réacteur à boucle de forme rectangulaire. Ils ont constaté que la variation du nombre de puissance N_p en fonction de nombre de Reynolds de mélange Re_m dans le réacteur torique sans chicane est similaire à celle observée dans un réacteur agité. La figure II.15 montre que pour Re_m inférieur à 200, la puissance consommée est très peu influencée par la variation de l'angle d'inclinaison de la pale de la turbine, contrairement au cas où Re_m est supérieur à 200, on note une influence importante.

Pour un nombre de Reynolds compris entre 10^4 et 10^5 , le nombre de puissance est proportionnel à $(\sin \varphi)^2$. La présence des chicanes à très peu d'influence sur le nombre de puissance, contrairement au réacteur agité où leur présence affecte l'écoulement et par conséquent la puissance consommée augmente. D'autre part, le mode de fonctionnement du réacteur (fermé ou continu) n'influe pas sur la puissance consommée.

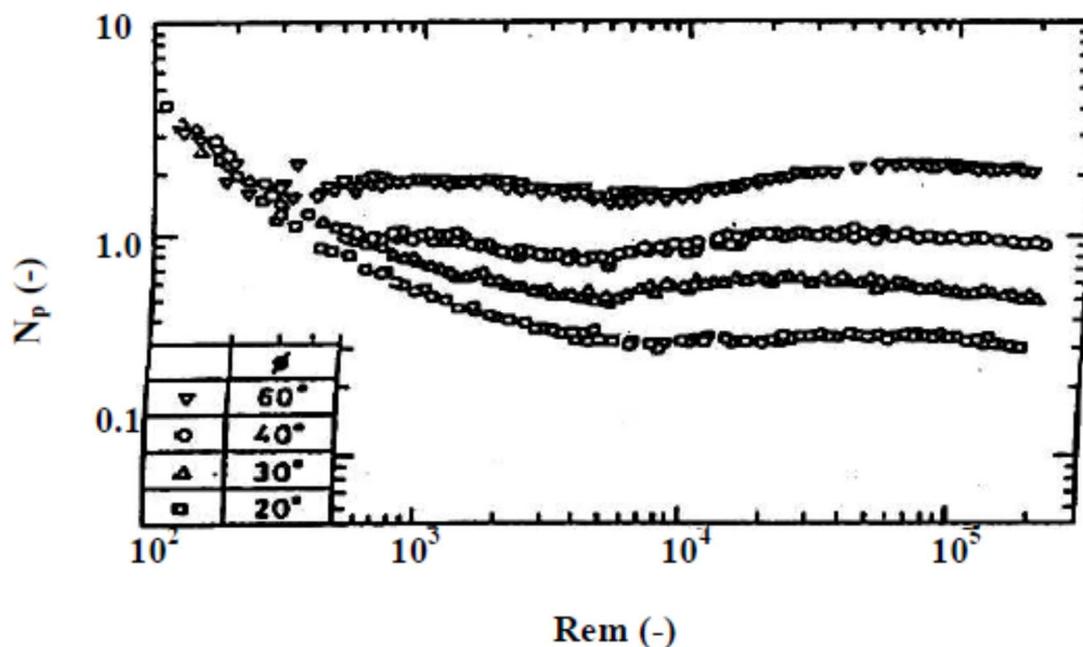


Figure II.15 Variation du nombre de puissance en fonction du nombre de Reynolds de mélange [45]

TANAKA et coll., [48] ont montré dans le cas d'un réacteur torique que la dépendance entre N_p et Re_m est similaire à celle du réacteur agité et du réacteur à boucle de forme rectangulaire étudié d'après [15].

La représentation de N_p en fonction de $\sin \varphi$ (Figure II.16) montre que pour Re_m supérieur à 10^4 , N_p est proportionnel à $(\sin \varphi)^{1.5}$ et que le nombre de puissance dans le cas d'un agitateur à pales inclinées est plus grand que celui obtenu pour une hélice marine.

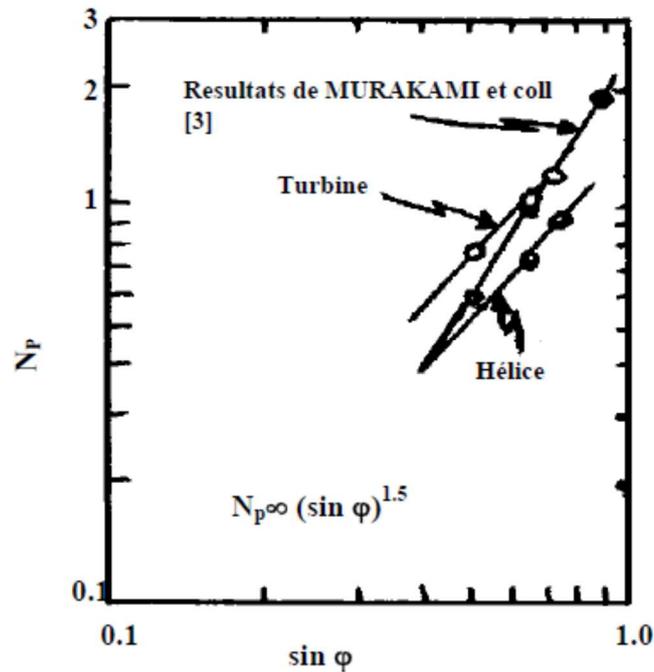


Figure II.16 Variation du nombre de puissance en fonction de $\sin \varphi$ [48]

La puissance dissipée dans un réacteur torique à longueur droites a été estimée par KHALID et coll., [17]. Cette puissance dissipée est directement liée à la chute de pression dans le réacteur, au volume du réacteur, à la vitesse moyenne de circulation du fluide et est inversement proportionnelle à la longueur totale du réacteur tel que :

$$P = U_c \Delta P \frac{V_R}{L_t} \quad \text{Équation II.26}$$

Les résultats obtenus sont représentés sur la figure II.17 et comparés à ceux de TANAKA et coll., [48], qui ont corrélié la puissance dissipée à la vitesse d'agitation dans un réacteur parfaitement torique. La différence constatée entre les deux types de réacteurs, pour différents nombres de Reynolds de mélange, est probablement due à la contribution des parties droites sur les pertes de charge dans le réacteur torique à longueur droites et par conséquent sur la puissance dissipée dans cette région du tore.

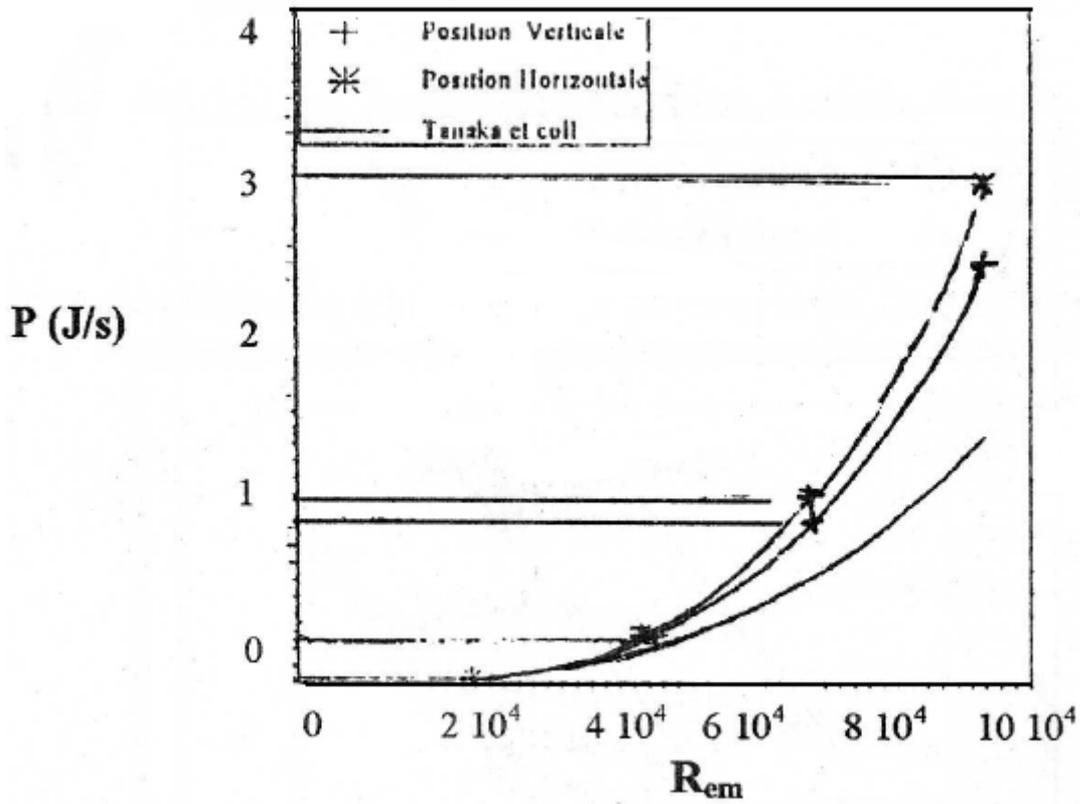


Figure II.17 Influence du nombre de Reynolds de mélange Re_m sur la puissance dissipée dans le réacteur torique [17]

A la fin de ce chapitre, nous avons regroupé sur le tableau II.4 les différentes corrélations proposées par les différents auteurs ainsi qu'un détail sur la géométrie, la forme du réacteur et le type de mobile d'agitation utilisé dans le réacteur.

Tableau II.4 Caractéristiques géométriques, type de réacteur, type de mobile d'agitation et corrélations principales

AUTEURS	Géométrie du réacteur	Mobile utilisé	Principales corrélations
BELLEVI LE et coll., [52].	Réacteur torique $R_t = 135$ mm, $L_t = 850$ mm, $d_t = 55$ mm, $V_R = 2000$ cm ³	Hélice marine	$\frac{U_Z^*}{U_Z} = 1 - N^{-0.246} F_g^{1.57}$ avec $F_g = \frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2}$
SATO et coll., [15].	Réacteur de forme rectangulaire $R_t = 11.7$ cm, $L_t = 280$ cm, $d_t = 10$ cm, $V_R = 22$ litres	Hélice marine Turbine à pales inclinées	$\frac{U_Z^*}{U_Z} = K_1 F_g \frac{Re^{0.7}}{250 + Re^{0.7}}$ $K_1 = 0.744$ avec $F_g = \frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2}$
HOSOGAI et coll., [51].	Réacteur torique $R_t = 160$ mm, $d_t = 50$ mm, $V_R = 2.3$ l	Turbine à pales inclinées	$\frac{Re_c}{Re_m} = \left[\frac{C_1}{Re_m c^2} + C_3 \right]^{-1}$ $\frac{Re_c}{Re_m} = 1$ pour $2.10^4 < Re_m < 10^5$
TANAKA et coll., [48].	Réacteur torique $d_t = 50$ mm, $V_R = 2.3$ litres	Hélice marine Turbine à pales inclinées	$\frac{Re_c}{Re_m} = \left[\frac{C_1}{Re_m c^2} + C_3 \right]^{-1}$ $\frac{Re_c}{Re_m} = \text{constante}$ pour $Re_m > 1.510^4$
MURAKA MI et coll., [45].	Réacteur de forme rectangulaire $R_t = 11.7$ cm, $L_t = 280$ cm, $d_t = 10$ cm, $V_R = 22$ litres	Turbine à pales inclinées	Pour $Re_m = 10^4 - 10^5$ $N_p = f(\sin \varphi)^2$ Pour Réacteur agité $N_p = f(\sin \varphi)^{0.5}$ Turbine à 40° est recommandé
NOURI [54].	Réacteur torique $V_R = 2.1$ l, $d_t = 5.5$ cm, $V_R = 5.2$ l, $d_t = 7.7$ cm, Réacteur de forme rectangulaire $V_R = 9.1$ litres, $d_t = 6.8$ cm,	Hélice marine	$N_0 = 0.60 (L_t / d_t)^{1.17}$ $Re = 1.3 F_g \cdot Re_m$ pour $Re_m > 4000 - 6000$ $Re = 4.10^{-3} F_g \cdot Re_m^{1.67}$ pour $Re_m < 4000 - 6000$ $F_g = \left[\frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2} \right]^{0.025} \sin \varphi$
KHALID [17].	Réacteur de forme rectangulaire $R_t = 41.5$ mm, $L_t = 68$ mm, $d_t = 2.5$ m ; $V_R = 9.2$ litres	Hélice marine	$U_c = K \cdot N \cdot \frac{d_1^2 - d_2^2}{d_t^2} \operatorname{tg} \varphi$ $\frac{Re_c}{Re_m} = \left[1 + \frac{c}{Re_m^{0.7}} \right]^{-1}$ C : dépend du type et de la géométrie de l'hélice Ce rapport tend vers une constante pour $2.10^4 < Re_m < 10^5$

CHAPITRE III

SIMULATIONS NUMERIQUES D'UN REACTEUR TORIQUE : MISE EN ŒUVRE

Généralement, il existe trois manières de résoudre l'écoulement des fluides : l'approche analytique, expérimentale et numérique. La méthode analytique offre des solutions exactes, mais elle est limitée à quelques problèmes typiques (exemple : profil de vitesse d'écoulement d'un fluide dans une conduite cylindrique) puisque les solutions analytiques ne s'obtiennent que pour des équations différentielles très particulières. Cette méthode permet toutefois d'obtenir une solution continue pour une variable d'intérêt. La méthode expérimentale permet d'étudier plusieurs problèmes. Son inconvénient est qu'elle nécessite beaucoup de temps pour l'installation et que son coût est parfois, sinon toujours, élevé. Qui plus est, l'approche expérimentale ne permet d'obtenir la valeur des variables d'intérêt que pour certains cas très particuliers : l'étude paramétrique est le plus souvent impossible. L'approche numérique est flexible, universelle et n'est pas aussi chère que l'approche expérimentale. Son défaut est qu'elle n'offre pas une solution exacte, comparée à la solution analytique lorsque cette dernière est possible. Cependant, elle donne une description raisonnable pouvant être utile pour l'analyse expérimentale [64]. Parmi les différentes approches numériques possibles, la CFD utilise les principes fondamentaux de la mécanique des fluides et du transfert de masse et de chaleur. Les aspects physiques de l'écoulement des fluides reposent sur trois principes fondamentaux : conservation de la masse, conservation de la quantité de mouvement et conservation de l'énergie. Ces trois principes peuvent être exprimés à l'aide d'équations aux dérivées partielles. La CFD emploie des méthodes numériques qui permettent de résoudre les équations mathématiques discrétisées, représentations discrètes des équations différentielles, dans l'espace et dans le temps, pour obtenir une description numérique finale du problème traité. Le choix des méthodes de résolution de ces équations ainsi que le choix des relations de fermeture associées sont nécessaires.

Dans cette partie, nous évoquons dans un premier temps les modèles de turbulence utilisés. Dans un second temps, nous présentons la géométrie de réacteur et de l'agitateur étudiés, ainsi que le maillage réalisé pour les simulations numériques. Pour finir, la méthode numérique ainsi que les paramètres associés sont abordés.

III.1 Les équations de Navier-Stokes incompressibles

Les équations de Navier-Stokes, qui expriment des lois physiques de conservation, se déduisent des lois newtoniennes du mouvement. Elles relient la vitesse et la pression en chaque

point de l'écoulement. Quatre grandeurs inconnues doivent être déterminées pour caractériser un écoulement monophasique, isotherme et homogène : les trois composantes de la vitesse et la pression. A l'ensemble de ces équations doivent être ajoutées les conditions aux frontières de manière à garantir l'existence et l'unicité de la solution. Pour permettre une résolution numérique, une discrétisation spatiale et temporelle est nécessaire. Le schéma numérique où maillage, donne les points dans l'espace et dans le temps pour lequel on souhaite déterminer les inconnues du système. Il est à noter enfin que le choix des conditions initiales et des conditions aux limites est extrêmement important.

Si un écoulement de densité constante, tridimensionnel, instationnaire et en présence des scalaires passifs est considéré, l'équation de conservation de la quantité de mouvement (équation de Navier- Stokes) s'exprime par l'équation III.1 (en notation d'Einstein où chaque indice représente une somme) :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + g_i \quad \text{Équation III.1}$$

Où P est la pression, ρ la masse volumique de l'écoulement, u_i la vitesse dans la direction i , g_i l'accélération de la pesanteur et τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses, défini par :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \text{ et } \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad \text{Équation III.2}$$

Où μ représente la viscosité dynamique du fluide.

L'équation de continuité est représentée par l'équation III.3 :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Équation III.3}$$

Finalement, l'équation III. 4 représente la conservation d'un scalaire ϕ_α (e.g. concentration des réactifs, moments de distribution des tailles de particules, etc.) :

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} + u_j \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j} = \Gamma_\alpha \nabla^2 \phi_\alpha + S_\alpha(\phi) \quad \text{Équation III.4}$$

avec Γ_α le coefficient de diffusion moléculaire de ϕ_α et $S_\alpha(\phi)$ son terme source.

Il faut noter que ces équations présentent de fortes non-linéarités (e. g. 2^{ème} terme à gauche de l'équation III.1) ainsi que des forts couplages (e. g. terme source $S_\alpha(\phi)$), ce qui rend difficile l'obtention d'une solution analytique. Le comportement d'un écoulement dépend du rapport vitesse/viscosité (forces inertielles / forces visqueuses). Le nombre adimensionnel reliant ces

deux phénomènes est le nombre de Reynolds qui permet de qualifier l'écoulement, équation III.5 :

$$Re = \frac{uL_{car}}{\gamma} \quad \text{Équation III.5}$$

Où L_{car} est la dimension caractéristique de l'écoulement, et γ la viscosité cinématique du fluide ($\gamma = \mu/\rho$). Pour de faibles valeurs du nombre de Reynolds, les phénomènes associés aux forces visqueuses sont prépondérants par rapport aux forces inertielles, l'écoulement est dit laminaire. Si ce nombre est grand, les forces inertielles sont prépondérantes et l'écoulement est dit turbulent.

Pour l'équation de transport, il existe le nombre de Schmidt, permettant de comparer le transport visqueux au transport diffusif :

$$Sc = \frac{\gamma}{\Gamma_\alpha} \quad \text{Équation III.6}$$

III.2 Modélisation de la turbulence

La turbulence est un phénomène naturel qui a lieu au sein des fluides lorsque les gradients de vitesse sont importants, cela dérive en une perturbation dans le domaine de l'écoulement comme une fonction d'espace et de temps. (e. g. la fumée dans l'air, la condensation de l'eau sur une paroi, les vagues, entre autres). Un écoulement turbulent est caractérisé par :

- son irrégularité dans le temps et dans l'espace. L'écoulement est très sensible aux perturbations, même faibles, celles-ci ayant tendance à s'amplifier pour de faible viscosité. Ainsi, l'état turbulent n'est connu qu'à travers des grandeurs moyennes et fluctuantes. L'analyse de tels écoulements se fait ainsi de manière statistique. Sa modélisation est donc très délicate ;
- la présence des structures de tailles très différentes qui interagissent entre elles. Plus le nombre de Reynolds est important, plus la différence de taille entre les plus petites structures et les plus grandes présentées dans l'écoulement est importante ;
- son caractère dissipatif. La viscosité du fluide est à l'origine de la dissipation de l'énergie cinétique turbulente produite aux grandes échelles. Cette énergie se transforme en chaleur ;
- son caractère diffusif. La turbulence augmente le taux de mélange et de diffusion des espèces chimiques.

La turbulence a été activement étudiée au cours des derniers siècles, nonobstant, au jour d'aujourd'hui il existe des difficultés non résolues, particulièrement pour des Reynolds très importants. Afin de prendre en compte la turbulence, chaque variable est décomposée en deux termes, un terme qui représente la moyenne et un terme fluctuant. Par exemple, une composante de la vitesse $u_i = (u, v, w)$ s'écrit à un instant donné sous la forme suivante :

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad \text{Équation III.7}$$

D'où \bar{u}_i est la vitesse moyenne dans la direction i (aussi appelée moyenne de Reynolds) de et u'_i est le terme fluctuant.

La vitesse moyenne est donnée par l'équation III.8 :

$$\overline{u_i(x_i, t)} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u_i(x_i, t) dt \quad \text{Équation III.8}$$

Par définition, le second terme de l'équation III.7, qui est le terme fluctuant, lié aux petites échelles, a une valeur moyenne nulle :

$$\overline{u'_i} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u'_i dt = 0 \quad \text{Équation III.9}$$

Il est alors possible de quantifier localement l'intensité en énergie turbulente par l'équation III.10 :

$$I_e = \frac{\sqrt{\overline{u'^2 + v'^2 + w'^2}}}{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2} \quad \text{Équation III.10}$$

Ce ratio permet de classer les champs turbulents. Ils sont considérés faibles pour des valeurs de $I_e \sim 1\%$, moyens si $I_e \sim 10\%$ et forts pour $I_e \sim 20\%$ et au-delà. L'intensité de l'énergie turbulente correspond au rapport du transport diffusif / transport convectif.

La résolution des équations de Navier-Stokes ne peut se faire que pour des cas simples à très faible nombre de Reynolds, et nécessite une puissance de calcul considérable. Si l'opérateur « moyenne de Reynolds » est appliqué aux équations équation III.1 et équation III.3, les équations RANS, i. e. Reynolds Averaged Navier-Stokes, équation III.11 et III.12 sont obtenues :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} + R_{ij}) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} \quad \text{Équation III.11}$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \text{ et } \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Équation III.12}$$

Les composantes (Équation III.13) sont appelées contraintes de Reynolds ou tenseurs de Reynolds :

$$R_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = -\rho \begin{bmatrix} \overline{u' u'} & \overline{u' v'} & \overline{u' w'} \\ \overline{u' v'} & \overline{v' v'} & \overline{v' w'} \\ \overline{u' w'} & \overline{u' w'} & \overline{w' w'} \end{bmatrix} \quad \text{Équation III.13}$$

Elles sont analogues à des contraintes supplémentaires issues du mouvement de l'écoulement. L'équation III.11 diffère de l'équation III.1 par la présence de ce terme qui représente l'effet du champ fluctuant sur le champ moyen. Ce tenseur introduit six équations supplémentaires, pour lesquelles il est nécessaire d'introduire des équations supplémentaires pour déterminer les inconnues. Il est possible alors d'écrire une équation de transport pour les tenseurs de Reynolds en introduisant la décomposition de Reynolds dans les équations instantanées et en soustrayant les équations moyennes correspondantes :

$$\frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial t} + \overline{u_k} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} = P_{ij} + T_{ij} + \Pi_{ij} + D_{ij} - \varepsilon_{ij} \quad \text{Équation III.14}$$

Où $P_{ij}, T_{ij}, \Pi_{ij}, D_{ij}, \varepsilon_{ij}$ et sont respectivement les termes de production, de transport turbulent, de gradient pression-vitesse, de diffusion visqueuse et de tenseur de dissipation.

Le terme P_{ij} caractérise les échanges d'énergie par interaction avec le mouvement moyen et apparaît sous forme fermée (Équation III.15). Le terme T_{ij} correspond à une diffusion par effet de fluctuation de la vitesse ; ce terme n'est pas fermé (Équation III.16). Le terme Π_{ij} représente le transfert d'énergie cinétique par l'interaction des champs fluctuants de vitesse et de pression ; ce terme n'est pas fermé. Le terme de diffusion turbulente est négligé à fort Reynolds. Le dernier terme de l'équation III.14 est la dissipation turbulente, correspondant à la dissipation de l'énergie cinétique sous forme de chaleur à l'échelle de Kolmogorov.

$$P_{ij} = -\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} - \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k} \quad \text{Équation III.15}$$

$$T_{ij} = -\frac{\partial \overline{u'_i u'_j u'_k}}{\partial x_k} \quad \text{Équation III.16}$$

$$\Pi_{ij} = -\frac{1}{\rho} \overline{u'_i \frac{\partial P}{\partial x_j}} + \overline{u'_j \frac{\partial P}{\partial x_i}} \quad \text{Équation III.17}$$

$$\varepsilon_{ij} = 2\gamma \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}} \quad \text{Équation III.18}$$

Ainsi, le problème de la représentation de toutes les échelles de la turbulence est déplacé : il s'agit maintenant d'être capable de modéliser les termes de contraintes de Reynolds. Le nombre d'inconnues est supérieur au nombre d'équations : 10 équations et 35 inconnues. Dans les sections suivantes, des modèles de turbulence seront décrits, afin de « fermer » le système d'équations.

Plusieurs méthodes ont été développées pour « fermer » le système d'équations de transport : des commentaires sur leurs limites d'utilisation sont présentés dans la littérature [65-68]. Parmi eux, les modèles à deux équations sont réputés présenter le meilleur compromis entre précision et complexité pour simuler des écoulements turbulents dans un réacteur. Actuellement le modèle $k-\varepsilon$ est de loin le plus utilisé en mécanique des fluides numérique pour le procédé. Ses principales limitations sont une vision isotrope de la turbulence et des paramètres adaptés pour des nombres de Reynolds élevés.

Le modèle $k-\varepsilon$ s'avère moins adapté aux écoulements tourbillonnaires, ses constantes étant calées sur des données issues d'écoulements plans. Il est alors recommandé d'en changer les constantes. Le modèle RNG $k-\varepsilon$ est davantage adapté aux écoulements tourbillonnaires. Cependant il repose également sur l'hypothèse d'isotropie de la turbulence. Dans le cas d'écoulements notablement anisotropes, le modèle RSM (Reynolds Stress Model) sera à privilégier. En effet, il fait appel à la description de toutes les composantes du tenseur de Reynolds et s'affranchit de l'hypothèse d'isotropie de la turbulence. Il demande de résoudre 7 équations (à la place de 2), il est donc consommateur en temps de calcul et en ressource mémoire.

La simulation rigoureuse des écoulements fortement tourbillonnaires est impossible avec les modèles de type RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes), ceux-ci n'arrivant pas, en général, à simuler correctement la turbulence et les champs de vitesse. Les différences entre l'expérience et la simulation proviennent de deux sources : l'erreur numérique et le modèle de turbulence. La première génère la majeure partie de l'erreur même si elle est souvent négligée. Un schéma de discrétisation d'ordre supérieur (>3) devrait être employé notamment pour les problèmes en 3 dimensions [69]. La deuxième n'est pas non plus négligeable et difficilement remédiable, ainsi même le modèle RSM n'est pas très bon lorsque la géométrie est complexe. Il faut dans ce cas utiliser un modèle de turbulence de type simulation des grandes échelles (LES, Large Eddy Simulation). Ce type de modèle souffre encore d'un manque de développement dans le domaine des écoulements gaz-liquide à cause de la nature même de la turbulence.

En intégrant toutes ces caractéristiques, quatre modèles de turbulence seront testés dans ce travail :

- Le modèle k - ε standard ;
- Le modèle k - ε RNG ;
- Le modèle k - ω standard ;
- Le modèle RSM : le modèle tenant compte de l'effet de la paroi.

III.2.1 Les modèles de turbulence

III.2.1.1 Le modèle de turbulence k - ε standard

Le modèle k - ε standard, proposé par Launder et Spalding., [65], est l'un des plus utilisés dans l'industrie dans les cas des écoulements incompressibles à faible vitesse. Il s'agit d'un modèle semi-empirique, basé sur les hauts nombres de Reynolds. Deux équations de conservation doivent être résolues : l'énergie cinétique turbulente, k , et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente, ε .

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \gamma_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\gamma_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \gamma \frac{\partial^2 k}{\partial x_i \partial x_j} - \varepsilon \quad \text{Équation III.19}$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \gamma_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\gamma_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \quad \text{Équation III.20}$$

Avec

$$\gamma_t = \frac{\mu_t}{\rho} \text{ et } \mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Les grandeurs $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k , σ_ε et C_μ sont des constantes empiriques déterminées d'écoulements simples en air et eau, à très haut nombre de Reynolds. Leurs valeurs sont rassemblées dans le tableau III.1.

Tableau III.1 Constantes empiriques du modèle k - ε standard

$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε	C_μ
1,44	1,92	1	1,3	0,09

III.2.1.2 Modèle k - ε RNG

Le RNG k - ε modèle est dérivé d'une technique statistique rigoureuse (appelée la théorie de groupe de renormalisation). Il est similaire au modèle k - ε standard, par contre il comporte les améliorations suivantes :

- Il tient en compte les effets des tourbillons sur la turbulence, ce qui améliore la précision dans le cas d'écoulements tourbillonnaires.
- Le modèle RNG fournit une formule analytique pour les nombres de Prandtl turbulents, tandis que le $k-\varepsilon$ modèle utilise des constantes empiriques.

III.2.1.3 Modèle $k-\varepsilon$ Low-Re

Ce modèle satisfait certaines contraintes mathématiques relatives aux tensions de Reynolds, qui restent cohérentes avec la physique des écoulements turbulents.

Le développement du modèle $k-\varepsilon$ réalisable est relativement récent, il diffère du $k-\varepsilon$ standard selon :

- Ce modèle contient une nouvelle formulation de la viscosité turbulente.
- Pour le taux de dissipation ε , une nouvelle équation a été développée à partir de la moyenne des carrés de l'équation de transport de vorticité de fluctuations.

Il est à signaler que ce modèle est plus précis concernant la prédiction de la vitesse de diffusion autour des jets ainsi que dans le cas des écoulements rotationnels.

III.2.1.4 Modèle à contrainte de Reynolds (Reynolds Stress Model : RSM)

Ce modèle est encore plus sophistiqué. Il évite de faire l'hypothèse d'isotropie de la viscosité turbulente, car il résout les équations pour les six composantes des contraintes de Reynolds et pour ε . Ce modèle est donc très lourd numériquement et la convergence est souvent difficile. Il existe de nombreuses variantes de ce modèle, qui concernent en particulier la façon de modéliser la corrélation de la fluctuation de la pression et la déformation. Ce modèle est préconisé dans le cas des écoulements fortement tourbillonnaires, comme par exemple dans le cas d'un cyclone ou d'un injecteur dans une chaudière à combustion.

III.3 Modélisation de l'agitation

L'agitation mécanique peut être simulée par deux méthodes distinctes [70] :

- La méthode des valeurs fixes dans laquelle les valeurs correspondant à l'écoulement induit par l'agitation dans la zone de pompage de l'agitateur sont fixées ;
- La prise en compte de la géométrie exacte de l'agitateur (maillage tournant).

III.3.1 Approche des valeurs fixées

Cette méthode consiste à simplifier la résolution numérique en ne résolvant pas l'écoulement traversant l'agitateur. Les grandeurs caractéristiques de l'écoulement induit par

l'agitation (les trois composantes de la vitesse, l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente) sont imposées sur une zone de maillage de surface correspondant à l'emplacement de l'agitateur.

Les conditions aux limites pour la turbulence (k et ε) pour un jet sont suggérées par l'expérience [71] et sont données par :

$$k = 0,003 U_p^2 \quad \text{Équation III.21}$$

$$\varepsilon = 6 \frac{k^{3/2}}{D} \quad \text{Équation III.22}$$

Avec :

U_p la vitesse moyenne en sortie de jet ;

D le diamètre de l'agitateur.

Chatellier., [72] note toutefois que ces conditions influencent peu le résultat car il estime que la turbulence est principalement générée par la contrainte de cisaillement en périphérie du jet. Djebbar., [73] quant à lui propose de modéliser l'agitateur comme une source de quantité de mouvement et de ne pas imposer de conditions sur la turbulence.

III.3.2 Prise en compte de la géométrie exacte de l'agitateur

Le code Fluent comprend deux techniques qui permettent de prendre en compte la géométrie exacte de l'agitateur :

- le maillage glissant
- les repères à références multiples.

Dans cette étude l'approche MRF a été retenue pour la modélisation de l'agitateur en raison de l'absence de chicane, de sa facilité d'utilisation, de son faible coût en temps de calcul, et compte tenu de la qualité satisfaisante des résultats obtenus.

III.3.2.1 La technique du maillage glissant

Cette approche est basée sur la nature instationnaire de l'écoulement. La cuve est découpée en deux maillages :

- un maillage fixe lié aux parois,
- un maillage mobile devant l'agitateur, celui-ci restant fixe, permettant de simuler sa rotation,
- une interface entre les deux maillages.

Les deux maillages vont glisser l'un par rapport à l'autre. La solution est instationnaire et périodique.

III.3.2.2 Repères tournant de référence (Multiple Reference Frame, MRF)

Le modèle repères tournant de référence [74] ou «Multiple Reference Frame» (MRF) est l'un des plus simples des approches pour modéliser des éléments en mouvement avec un maillage de zones multiples. Il s'agit d'une approximation stationnaire dans laquelle l'écoulement se déplace à des vitesses différentes (rotationnelles ou translationnelles) dans différents zones du maillage. Pour modéliser les zones en mouvement, il est nécessaire de rajouter des équations supplémentaires dans le modèle. Une des options est d'utiliser des équations rapportées à un MRF. La méthode consiste à rendre stationnaire la zone en mouvement par rapport au repère tournant. Les équations de mouvement sont modifiées en ajoutant des termes d'accélération associés à ce changement de repère. Aucune modification n'est nécessaire pour les zones stationnaires. Aux interfaces entre une zone en mouvement et une zone stationnaire, une transformation locale est faite pour permettre le calcul des flux entre les zones.

Si on considère un système de coordonnées rotationnelles en régime stationnaire à une vitesse angulaire, ω_i relative au repère stationnaire de référence (fixe), voir figure III.1. L'origine du système en rotation s'identifie par un vecteur de position $r_{o,i}$.

L'axe de rotation s'exprime par le vecteur unitaire de direction a_i de la façon suivante :

$$\omega_i = \omega a_i \quad \text{Équation III.23}$$

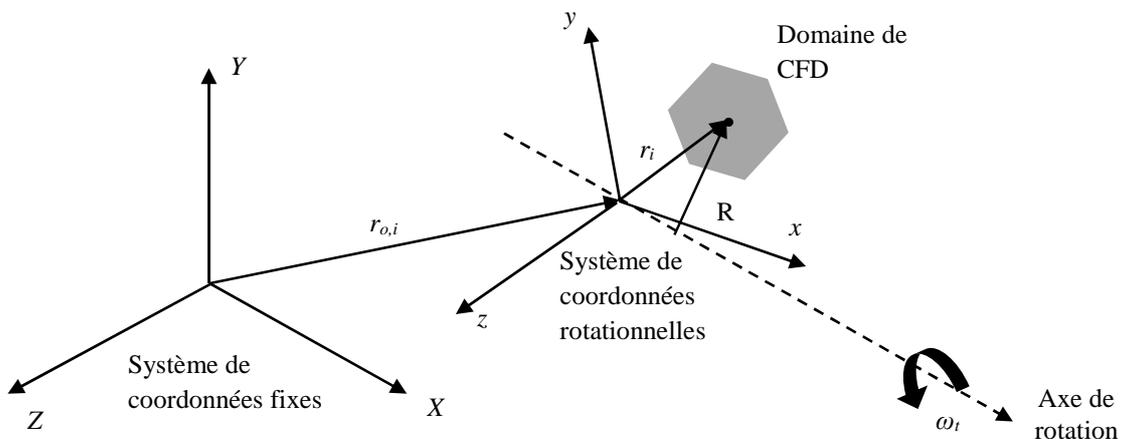


Figure III.1 Cadres de référence fixe et rotationnel

Le domaine numérique pour le problème en CFD est exprimé par rapport au repère de référence rotationnel de la façon suivante : un point arbitraire dans le domaine de la CFD est localisé par le vecteur de position r_i (de l'origine du cadre en mouvement au point arbitraire du domaine de CFD). Les vitesses des écoulements sont transformées du repère stationnaire au repère en mouvement avec les expressions III.24 et III.25 :

$$\mathbf{u}_{r,i} = \mathbf{u}_i - \mathbf{v}_{r,i} \quad \text{Équation III.24}$$

Ou

$$\mathbf{v}_{r,i} = \boldsymbol{\omega}_i \cdot \mathbf{r}_i \quad \text{Équation III.25}$$

Avec : $\mathbf{u}_{r,i}$ vitesse relative (vitesse vue du MRF) ;

\mathbf{u}_i la vitesse absolue (vitesse vue du repère stationnaire) ;

$\mathbf{v}_{r,i}$ la vitesse de « tourbillon » (vitesse résultant du repère en mouvement).

Lorsque les équations de mouvement sont résolues selon cette méthode, l'accélération de l'écoulement permet le changement de repère. Les équations peuvent être formulées en utilisant des vitesses absolues ou relatives.

A l'interface, la formulation appliquée dépendra du type de vitesse employée. Il est recommandé d'utiliser la formulation de vitesse absolue dans les cas où l'écoulement est stationnaire dans la majorité du domaine. En revanche, la formulation de vitesse relative est préférée quand la majorité du domaine est en rotation. Dans le cas intermédiaire, les deux méthodes peuvent être utilisées indifféremment. Ce changement de repères n'a une influence que sur les vitesses, aucun changement n'est réalisé sur dès les espèces réactifs.

III.3.2.2.1 Formulation de la vitesse relative

Dans la formulation de la vitesse relative, l'équation d'écoulement du fluide pour une vitesse de rotation constante peut être exprimée par les équations :

$$\frac{\partial \mathbf{u}_{r,i}}{\partial t} + \mathbf{u}_{r,j} \frac{\partial \mathbf{u}_{r,i}}{\partial x_j} + (2\boldsymbol{\omega}_i \cdot \mathbf{u}_{r,i} + \boldsymbol{\omega}_i \cdot \boldsymbol{\omega}_j \cdot \mathbf{r}_i) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} \quad \text{Équation III.26}$$

Avec

$$\frac{\partial \mathbf{u}_{r,i}}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Équation III.27}$$

Les équations de conservation de mouvement ont deux termes supplémentaires d'accélération : l'accélération de Coriolis ($2\omega_i \cdot u_{r,i}$) et l'accélération centripète ($\omega_i \cdot \omega_j \cdot r_i$). Le tenseur des contraintes visqueuses est le même que l'équation III.2, mais les dérivées de la vitesse relative sont utilisées.

En ce qui concerne l'interface, la vitesse et le gradient de vitesse seront transposés d'un repère de référence relative à un repère inertiel absolu avec l'équation III.28 :

$$u_i = u_{r,i} + (\omega_i \times r_i) \quad \text{Équation III.28}$$

Le vecteur du gradient de la vitesse absolue peut s'obtenir à partir de l'équation III.29 :

$$\nabla u_i = \nabla u_{r,i} + \nabla(\omega_i \times r_i) \quad \text{Équation III.29}$$

III.3.2.2.2 Formulation de la vitesse absolue

Dans la formulation de vitesse absolue, l'équation d'écoulement du fluide pour une vitesse de rotation constante peut être exprimée par les équations :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_{r,i} \frac{\partial u_{r,i}}{\partial x_j} + (\omega_i \cdot u_i) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} \quad \text{Équation III.30}$$

$$\frac{\partial u_{r,i}}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Équation III.31}$$

Ici, l'accélération de Coriolis et l'accélération centripète sont réduites à un seul terme ($\omega_i \cdot u_i$). Quand la formulation de la vitesse absolue est utilisée, les équations dans chaque sous domaine sont écrites par rapport au repère de référence, mais les vitesses sont enregistrées dans le repère absolu. En conséquence, aucune transformation n'est nécessaire à l'interface entre le deux sous domaines.

III.4 Techniques de simulation des DTS par mécanique des fluides numérique (MFN)

La distribution des temps de séjour (DTS) est un paramètre important pour la caractérisation du type d'écoulement au sein des réacteurs. C'est un moyen de comparaison entre les performances de différentes configurations, et elle reste un outil de base permettant la réussite de l'extrapolation des réacteurs. Elle peut être atteinte expérimentalement par diverses techniques et qui sont toutes basées sur l'utilisation des traceurs. Les différentes méthodes de caractérisation de cette grandeur sont présentées en annexe I. La méthode des traceurs consiste à marquer des molécules entrant dans le réacteur et à suivre leur déplacement au sein du réacteur. Pour cela on utilise une substance colorée ou chimique, ayant les mêmes propriétés

hydrodynamiques que le fluide, mais décelable par une propriété caractéristique telle que la conductivité électrique, thermique, etc...Souvent deux types de stimulations sont utilisées à savoir la stimulation impulsion et la stimulation échelon. Leur avantage réside dans le fait qu'elles sont faciles à mettre en œuvre dans tout type de réacteur quel que soit son volume.

La méthode conductimétrique est une des méthodes permettant la détermination expérimentale de la DTS. Cette technique est basée sur la mesure de la variation de la conductivité électrique du fluide après y avoir introduit une petite quantité d'électrolyte (acide, base, sel). La conductivité électrique étant directement proportionnelle à la concentration, cette mesure permet l'obtention de l'évolution temporelle de la concentration du traceur, représentative de la DTS au sein du réacteur.

En mécanique des fluides numérique, il existe deux façons de réaliser une DTS numérique. Dans le cas d'un écoulement en régime permanent, il faut dans un premier temps calculer le champ vitesse de l'écoulement. Ensuite, deux options sont disponibles :

- Définir un traceur (scalaire passif) ayant les mêmes propriétés que le fluide de l'écoulement, en faire une injection en entrée par le biais des conditions aux limites et suivre la concentration de ce pseudo-composé à la sortie. Cette méthode oblige à résoudre le transport du traceur en transitoire ce qui est très consommateur en temps de calcul.
- Définir des particules solides ayant la même densité que le fluide de l'écoulement et un diamètre très petit, en injecter une quantité suffisamment importante pour donner des résultats statistiquement significatifs et observer le temps que met chaque particule à sortir du domaine. La quantité de particules qu'il faut injecter dépend de la précision que l'on veut obtenir.

III.4.1 Dispersion axiale et mécanique des fluides numérique

Lors de la simulation par mécanique des fluides numérique d'une distribution de temps de séjour, l'erreur due aux schémas numériques de discrétisation utilisés pour résoudre les équations de transport s'additionne à ces trois contributions. On appelle cette contribution supplémentaire la diffusion numérique. On a donc :

$$D = D_m + D_s + D_t + D_{num} \quad \text{Équation III.32}$$

Dispersion turbulente (D_t) La simulation locale de l'écoulement permet d'estimer la dispersion turbulente. Dans le cas d'un écoulement turbulent, les phénomènes de transport

turbulent de quantité de mouvement et d'une concentration ont la même origine : la viscosité turbulente et la diffusivité turbulente ont donc le même ordre de grandeur. Par conséquent, le nombre de Schmidt Sc est proche de l'unité ; FLUENT recommande 0.7 pour les écoulements gaz-liquide, il est donc possible de déduire une estimation de la dispersion axiale dans le réacteur à partir de la viscosité turbulente (Équation III.33).

$$Sc = \frac{\mu_t}{\rho D_t} \quad \text{Équation III.33}$$

Diffusion numérique (D_{num}) La diffusion numérique est le résultat de l'ensemble d'erreurs d'approximation commises au cours de la résolution des équations de transport. Les sources de diffusion numérique principales sont les schémas de discrétisation spatiale et temporelle, le maillage (discrétisation spatiale) et le pas de temps (discrétisation temporelle).

La figure III.2 représente de façon schématique les relations entre les phénomènes physiques et les différentes sources de dispersion dans le réacteur en MFN. Les zones blanches représentent les causes et les bleus les conséquences.

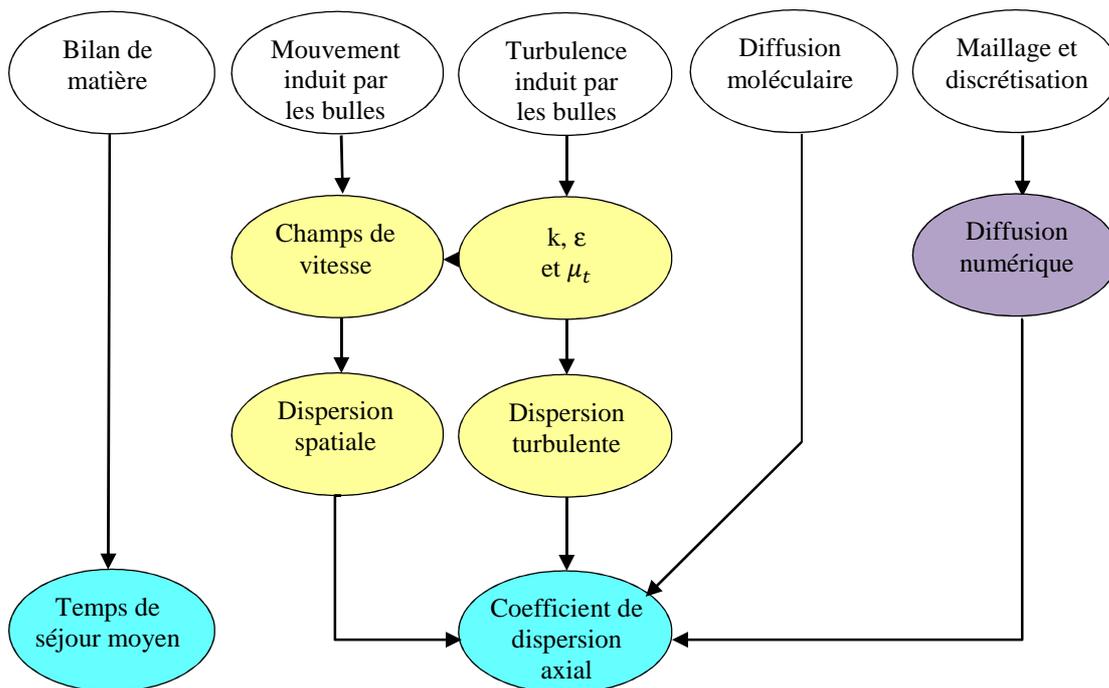


Figure III.2 Relation entre les grandeurs globales d'une distribution de temps de séjour et les phénomènes locaux

III.4.1.1 Transport d'un scalaire passif

La distribution de temps de séjour est déduite de la résolution des équations de transport pour un traceur passif. Celui-ci est injecté en modifiant pendant un pas de temps la concentration d'entrée du traceur (par une modification des conditions aux limites). La définition d'un traceur passif est un composé ayant les mêmes propriétés physico-chimiques. L'équation de transport pour la concentration C_{tr} du traceur dans un écoulement turbulent s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_t C_{tr}) + \nabla \cdot (\rho_t \mathbf{u}_t C_{tr}) = \nabla \cdot \left(\left(\rho_t D_m + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla C_{tr} \right) \quad \text{Équation III.34}$$

La valeur du Schmidt turbulent Sc_t conseillé par FLUENT, par défaut, est 0,7.

III.4.1.2 Suivi de particules

La distribution de temps de séjour est déduite de l'analyse d'un grand nombre de trajectoires de particules dans le réacteur. Cette approche a fait l'objet de moins d'études [74,75]. La trajectoire d'une particule est prédite en intégrant le bilan de forces appliquées sur la particule dans un référentiel Lagrangien [76]. Les particules sont choisies de la même densité que la phase continue de sorte que les forces de gravité et d'Archimède soient négligées et que seule la force de traînée soit à prendre en compte. La dispersion des particules par la turbulence est prise en compte par une approche stochastique qui considère que la particule interagit avec une succession de tourbillons générés par la turbulence, les vitesses fluctuantes au sein des tourbillons sont considérées isotropes et obéissant à une distribution Gaussienne. Le temps d'interaction τ_l est considéré suffisamment court pour que la vitesse d'un tourbillon donné soit constante durant le processus. La trajectoire de la particule est calculée par le bilan de force suivant :

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{3}{4} C_d \frac{\rho_l}{d_p \rho_p} |u_p - u_l| (u_p - u_l) \quad \text{Équation III.35}$$

$$\text{avec} \quad \mathbf{u}_l = \bar{\mathbf{u}}_l + \mathbf{u}'_l \quad \text{Équation III.36}$$

$$\text{et} \quad u'_{ij} = \xi \sqrt{\frac{2}{3} k_l} \quad \text{Équation III.37}$$

Avec $j = x, y, z$, ξ un nombre suivant une distribution centrée réduite selon une loi normale et C_d est calculé par la corrélation de Morsi et Alexander., [77]. Une nouvelle valeur de ξ est recalculée à chaque fois que le temps d'interaction τ_l s'est écoulé. Ce temps d'interaction est pris

comme le minimum de l'espérance de vie des tourbillons τ_e et le temps nécessaire pour traverser ces tourbillons τ_{ct} .

$$\tau_e = -C_L \frac{k_l}{\epsilon_l} \log(\xi) \quad \text{Équation III.38}$$

avec ξ distribué aléatoirement, uniformément, dans l'intervalle [0 ; 1]

$$\tau_{ct} = -\tau \ln \left(1 - \left(\frac{L_e}{\tau |u_p - u_l|} \right) \right) \quad \text{Équation III.39}$$

avec

$$\tau = \frac{4}{3} \frac{\rho_p^2 d_g}{\rho_l^2 C_d |u_p - u_l|} \quad \text{Équation III.40}$$

et

$$L_e = \sqrt{\frac{3}{2}} C_\mu \frac{k_l^{\frac{3}{2}}}{\epsilon_l} \quad \text{Équation III.41}$$

Différentes valeurs de C_L sont recommandées selon le modèle de turbulence utilisé (Tableau III.2).

Tableau III.2 Constantes recommandées par Fluent (2005) pour le modèle stochastique

C_L modèle $k-\epsilon$	C_L modèle RSM
0.15	0.3

III.5 Configuration et maillage du réacteur

La première étape de la mise en œuvre des simulations consiste à discrétiser le volume physique sous forme de volumes élémentaires ou mailles. Cette étape a été réalisée à l'aide du logiciel GAMBIT.

III.5.1 Dimensions du réacteur et de l'agitateur

Pour notre étude, nous avons utilisé une géométrie toroïdale composée de quatre coudes à 90° et de section circulaire. Les quatre cadrans sont reliés par des brides formant ainsi un espace réactionnel fermé de forme parfaitement torique (Figure III.3a). Le réacteur de diamètre intérieur $d_t = 50$ mm et de rayon de courbure $R_C = 160$ mm, l'ensemble forme un espace réactionnel torique de longueur totale $L_t = 1005,3$ mm et de volume de 2 litres.

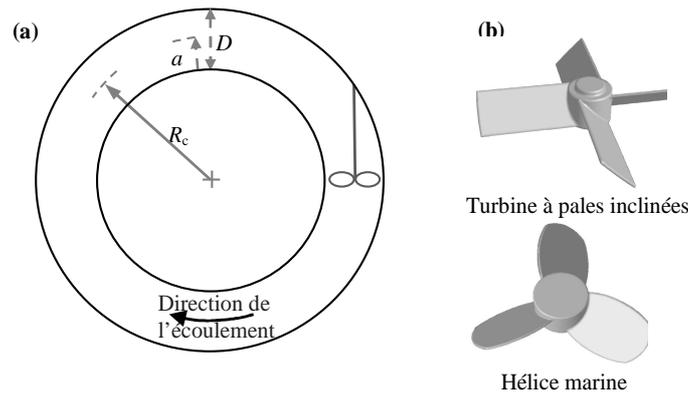


Figure III.3 Représentation schématique de la géométrie simulée

Le mélange et la circulation du fluide à l'intérieur de la boucle torique sont assurés par un mobile d'agitation à débit axial de type hélice marine à trois pales ou de type turbine à quatre pales inclinées (Figure III.3b). Les dimensions de ces deux mobiles d'agitation sont identiques à celles utilisées dans les travaux expérimentaux de Tanaka et coll., [48], chacun à un diamètre d_1 de 32 mm et un angle d'inclinaison des pales de 45° . Le diamètre de l'axe du mobile d'agitation est $d_2 = 14$ mm.

III.5.2 Maillage

La construction de la géométrie et de maillage ont été réalisés avec le logiciel " Gambit ". La création du maillage est un des piliers de la CFD et la qualité des résultats de simulation en dépend fortement voire l'obtention même des résultats peut être compromise si le maillage n'a pas une qualité minimale. De manière à implémenter la méthode Multiple Reference Frame (MRF) pour modéliser l'agitation, le réacteur est divisé en deux parties : une zone tournante et une zone stationnaire. La première zone est cylindrique ; elle est définie de manière à contenir l'agitateur et une partie de l'axe d'agitation (Figure III.4), elle est maillée à l'aide d'un maillage non structuré tétraédrique. Pour le maillage de la zone stationnaire nous choisissons de diviser le volume du réacteur en deux parties tel que indiquée par la figure III.4. La première partie, contient le mobile d'agitation, elle est maillée à l'aide d'un maillage non structuré tétraédrique. La distribution axiale de maillage augmente à l'approche du mobile d'agitation. L'autre partie, de volume plus important, est maillée avec deux zones de maillage. Près de la paroi, nous avons appliqué un maillage curviligne structuré hexaédrique plus raffiné au voisinage de la paroi pour bien modéliser l'écoulement dans cette zone où les gradients de vitesses sont importants. Cette particularité est assez importante en cas d'un régime d'écoulement turbulent. La deuxième zone d'écoulement (partie centrale) est discrétisée à l'aide d'un maillage non structuré. Les mailles

qui font les liaisons entre les hexaèdres et les tétraèdres sont des prismes ou des pyramides. La distribution radiale de maillage augmente à l'approche de la paroi de la conduite. Ce découpage permet d'utiliser au maximum les mailles de forme hexaédrique ayant la propriété de posséder des facettes parallèles ou perpendiculaires à l'écoulement. Cette particularité permet de minimiser les erreurs d'approximation des dérivées partielles issues de la discrétisation des équations de transport et d'obtenir un maillage de bonne qualité (coefficient de déformation géométrique, $\Xi < 0,95$ (Annexe II)). Ces paramètres génèrent un maillage d'environ 415514 mailles. Les maillages obtenus pour la simulation de l'hydrodynamique du réacteur torique sont représentés ci-dessous (Tableau III.3). Dans le chapitre IV, une comparaison de trois maillages structurés similaires est réalisée de manière à valider l'échelle du maillage. La même procédure est répétée pour les autres configurations.

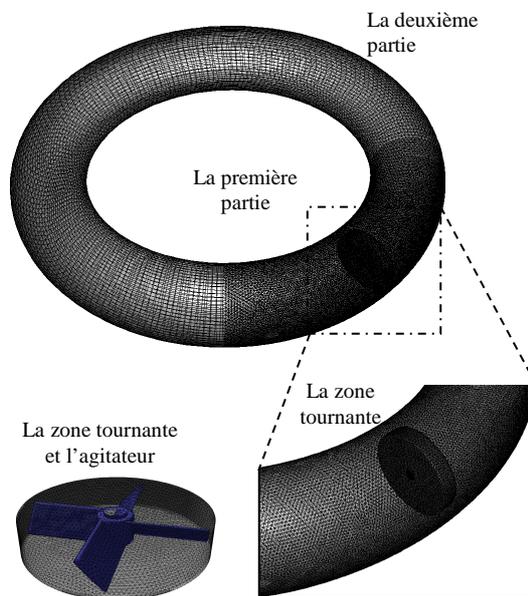


Figure III.4 Maillage de la géométrie (la zone tournante, la zone stationnaire et l'agitateur)

Tableau III.3 Caractéristiques du maillage utilisé

	La zone tournante	La zone stationnaire	
		La première partie	La deuxième partie
La taille moyenne des éléments	0,7	2	4
Nombre total des éléments	92612	276102	46800

III.6 Conditions aux limites et conditions opératoires

En mode de fonctionnement ferme, le mouvement giratoire impose par l'agitateur gouverne l'écoulement au sein du réacteur torique et donc la vitesse de rotation de l'agitateur est la seule condition à définir. Pour accélérer la convergence à l'état stationnaire, la vitesse de rotation de l'agitateur a été augmentée en deux ou trois étapes successives, en fonction de difficultés de convergence. Les résultats convergés des simulations intermédiaires sont ensuite utilisés pour initialiser les valeurs hydrodynamiques pour les vitesses plus élevées. Le maillage associé à l'agitateur (la zone tournante) glisse dans un mouvement de rotation par rapport au maillage fixe comprenant le reste du réacteur (la zone stationnaire). La vitesse imposée à la zone de fluide en rotation correspond à la vitesse de rotation du mobile d'agitation. Sur chaque paroi (les parois du réacteur, l'axe et les pales de l'agitateur), est imposée une vitesse relative nulle par rapport à la zone de fluide adjacente.

Les conditions opératoires dans tout le domaine sont une pression de 101325 Pa (pression atmosphérique) et l'accélération due à la pesanteur est de $9,81 \text{ m/s}^2$ dans le sens vertical, ce qui correspond à une position vertical du réacteur. Le fluide considéré est de l'eau (masse volumique : $\rho = 998,2 \text{ kg.m}^{-3}$, viscosité dynamique : $\mu = 1,003 \cdot 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$). La température est considérée constante et égale à 25°C .

III.7 Méthode numérique

L'écoulement a été résolu avec le code de calcul FLUENT (version 6.2.16). Ce code de calcul résout les équations de conservation gouvernant l'écoulement (quantité de mouvement, masse, énergie, scalaires) par la méthode des volumes finis. Cette méthode consiste en trois étapes :

1. Discrétisation du domaine physique en volumes de contrôle (mailles),
2. Intégration des équations dans chaque volume de contrôle afin de construire des équations algébriques pour les variables dépendantes discrètes (inconnues du problème),
3. Linéarisation des équations discrétisées et résolution du système d'équations linéaires résultant.

FLUENT propose deux approches pour résoudre les systèmes d'équations : la méthode *segregated* et la méthode *coupled*. Dans les deux cas, les équations sont discrétisées de la même manière mais linéarisées et résolues différemment. Dans nos simulations seule la première

approche (*segregated solver*) est utilisable compte tenu des limitations relatives à l'espace mémoire de la machine de calcul utilisée.

III.7.1 Discrétisation

Considérons l'équation-bilan suivante pour une variable ϕ :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = F(\phi) = -\frac{\partial(\rho u_i \phi)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S_\phi \quad \text{Équation III.42}$$

Γ_ϕ : Coefficient de diffusion de la quantité ϕ

S_ϕ : Terme source pour la variable ϕ

Cette équation doit être à la fois discrétisée dans l'espace et dans le temps afin d'obtenir une équation algébrique pour chaque volume de contrôle.

III.7.1.1 Discrétisation spatiale

L'intégration de l'équation III.42 sur le volume de contrôle V_i conduit à l'équation algébrique III.43. Dans cette équation, le terme instationnaire n'est pas pris en compte, son intégration est traitée ultérieurement.

$$\int_{V_t} F(\phi) = -\sum_f^N \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot A_f \vec{n}_f + \sum_f^N \Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)_n \cdot A_f \vec{n}_f + S_\phi V_i \quad \text{Équation III.43}$$

N : nombre de faces

ϕ_f : Valeur de ϕ au centre de la face f

$\rho_f \vec{v}_f \phi_f$: Flux à travers la face f

A_f : Aire de la face f

\vec{n}_f : Vecteur unitaire normal à la face f (dirigé vers l'extérieur du volume de contrôle)

$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)_n$: Gradient de ϕ normal à la face f

V_i : volume de la maille

Dans cette équation apparaissent des flux (convection, diffusion) à travers les faces qui délimitent le volume de contrôle. Il est donc nécessaire de connaître la valeur des variables sur chaque face. Avec la méthode des volumes finis, ces valeurs sont stockées au centre de chaque cellule et non sur chaque face. Les valeurs sur chaque face sont alors déduites par interpolation des valeurs stockées au centre de la cellule. Par analogie avec les différences finies, cette

interpolation est définie sous FLUENT sous le terme de « schéma de discrétisation » (Annexe III).

Dans le but d'étudier l'influence des schémas numériques sur la modélisation de l'écoulement dans le réacteur torique et d'évaluer une éventuelle nécessité d'avoir recours à des schémas d'ordre élevé, nous avons testé les quatre principaux schémas de discrétisation disponibles dans le code commercial : le schéma First-Order Upwind, le schéma Second-Order Upwind, le schéma QUICK, et le schéma Power Law. Lorsque le schéma First-Order Upwind est utilisé, la valeur de la variable ϕ au niveau de la face est égale à celle de la cellule qui se trouve en amont. Tandis qu'avec le schéma Second-Order Upwind, cette valeur est calculée en utilisant les valeurs de ϕ et ses gradients dans les cellules qui se trouvent en amont. Le schéma QUICK se base sur une moyenne pondérée du schéma Second-Order Upwind et une interpolation centrée de premier ordre. Ainsi, en fonction de la solution et de la configuration de l'écoulement, ce schéma peut consister en une interpolation centrée ou en une discrétisation type Second-Order Upwind. Enfin, le schéma Power Law fait une interpolation de la valeur de ϕ au niveau de la face en utilisant la solution exacte d'une équation de convection-diffusion unidimensionnelle.

III.7.1.2 Discrétisation temporelle

Avec l'approche découplée (*segregated*) de résolution des équations de conservation, FLUENT impose l'utilisation d'un schéma implicite en temps. Le schéma utilisé dans nos simulations étant du second ordre, si l'évolution temporelle de la variable ϕ est régie par l'équation III.44, la valeur de cette variable au pas de temps $n + 1$ est donnée par l'équation III.45.

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = F(\phi) \quad \text{Équation III.44}$$

$$\phi^{n+1} = \frac{4}{3}\phi^n - \frac{1}{3}\phi^{n-1} + \frac{2}{3}\Delta t F(\phi^{n+1}) \quad \text{Équation III.45}$$

ϕ^n : Valeur de ϕ au pas de temps n

Δt : Pas de temps de la simulation

Il est à noter que la discrétisation spatiale présentée précédemment est prise en compte dans la fonction $F(\phi^{n+1})$.

III.8 Résolution

En instationnaire, la solution au pas de temps $n + 1$ est obtenue en résolvant les équations de conservation de la forme III.45 à partir d'une condition initiale connue : la solution au pas de temps précédent n ou les valeurs initiales fournies par l'utilisateur pour le premier pas de temps $n = 0$. Les équations sont résolues par une méthode itérative de type substitution.

Avec la méthode de résolution découplée (*segregated solver*), les équations du modèle sont résolues de manière séquentielle entre chaque itération. A chaque itération i , les propriétés du fluide sont mises à jour à partir de l'itération précédente $i - 1$ (ou à partir des valeurs initiales ou du pas de temps précédent). Les équations de conservation de la quantité de mouvement sont alors résolues en utilisant les valeurs à l'itération $i - 1$ de la pression et des flux aux faces des mailles. L'équation de continuité est ensuite résolue et la valeur de la pression et des flux sont alors mises à jour pour l'itération courante i . Si nécessaire, les équations des scalaires sont ensuite résolues. Tant que la solution n'a pas convergé ou que le nombre maximal d'itérations autorisé par pas de temps n'est pas atteint, cette opération est répétée. Le principe de fonctionnement est représenté sur la figure III.5.

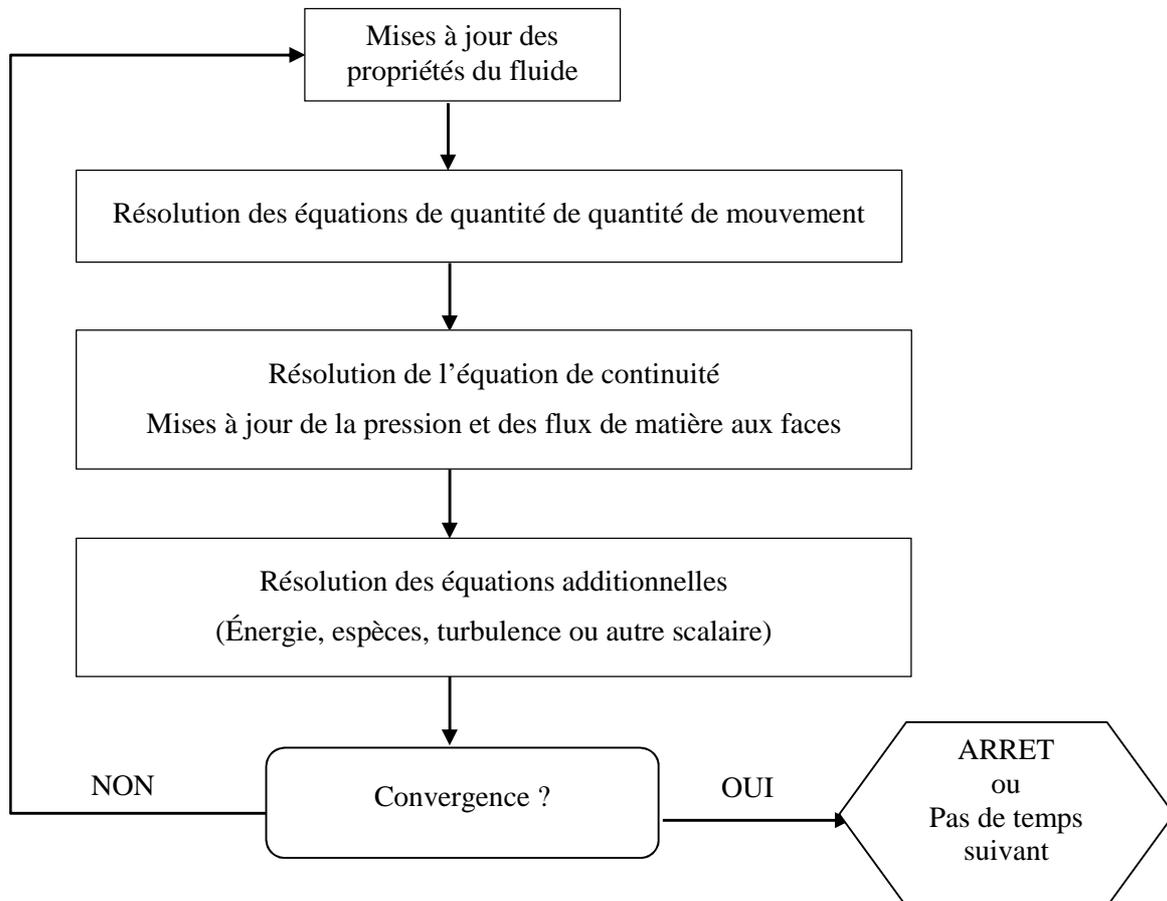


Figure III.5 Principe du solveur *segregated* de FLUENT

III.8.1 Sous-relaxation

A cause de la non-linéarité du système d'équations, la valeur d'une variable peut fortement varier entre deux itérations successives et provoquer la divergence de la solution calculée par le solveur. Pour prévenir ce problème, on introduit un coefficient dit de sous-relaxation dont le rôle est d'accroître la stabilité numérique.

Ainsi la nouvelle valeur de la variable ϕ à la fin d'une itération dépend à la fois de l'ancienne valeur ϕ_{old} , de la différence de ϕ entre l'itération courante et l'itération précédente $\Delta\phi$ et du coefficient de sous-relaxation α selon :

$$\phi = \phi_{old} + \alpha(\phi - \phi_{old}) \quad \text{Équation III.46}$$

Notons qu'à la convergence, on a l'égalité $\phi = \phi_{old}$, donc la valeur des coefficients de sous-relaxation α ne modifie pas les champs de ϕ obtenus pour le pas de temps n .

Dans nos simulations, nous avons laissé les coefficients de sous-relaxation à leur valeur par défaut implémentée dans FLUENT. Ces valeurs sont répertoriées dans le tableau III.4.

Tableau III. 4 Valeurs des coefficients de sous-relaxation utilisées pour les simulations

Pression	0,3
Quantité de mouvement	0,7
Energie cinétique turbulente	0,8
Taux de dissipation de l'ECT	0,8

III.8.2 Couplage vitesses-pression

La pression est traitée de manière différente des autres variables du système d'équations résolu. En effet, cette variable n'est pas régie par une équation indépendante mais son gradient est cependant nécessaire pour résoudre les équations de quantité de mouvement. Avec le *segregated solver*, l'équation de continuité est utilisée pour déterminer la pression. Cependant, la pression n'apparaît pas explicitement dans l'équation de continuité et on utilise donc un algorithme dit de couplage vitesses-pression pour introduire la pression dans cette équation.

Sous FLUENT, plusieurs algorithmes de couplage sont disponibles. Celui utilisé pendant nos simulations est nommé *SIMPLEC* (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Consistent).

III.8.3 Critères de convergence

Pour vérifier la convergence de la solution, FLUENT propose d'examiner l'évolution du résidu d'une équation à chaque itération.

Les valeurs des variables obtenues à la fin de chaque itération ne satisfont pas exactement les équations de conservation correspondantes. Le résidu correspond à la somme sur toutes les mailles des erreurs effectuées sur l'équation discrétisée considérée.

Après discrétisation et intégration, l'équation de conservation pour une variable ϕ peut s'écrire dans une cellule P de la manière suivante :

$$a_P \phi_P = \left(\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \right) + e_P \quad \text{Équation III.47}$$

nb : Réfère aux cellules voisines a la cellule considéré

a_i : Coefficients linéarisés

b : Contribution du terme source et des conditions aux limites

e_P : Erreur sur la variable ϕ dans la cellule P

Ainsi, le résidu de la variable à la fin de l'itération sur l'ensemble des cellules est déterminé par l'équation suivante :

$$R^\phi = \sum_P \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_P \phi_P \right| \quad \text{Équation III.48}$$

Cette définition du résidu est appelée sous FLUENT résidu *unscaled*. FLUENT permet également de calculer les résidus sous deux autres formes. Pour nos simulations, les résidus dits *scaled* ont été suivis pour s'assurer de la convergence de la solution (Équation III.49).

$$R_{SC}^\phi = \frac{R^\phi}{\sum_P |a_P \phi_P|} \quad \text{Équation III.49}$$

Dans certains cas, les résidus ne suffisent pas pour juger de la convergence d'une solution, notamment en instationnaire et dans le cas d'un système fermé où la conservation de la masse sur toutes les mailles est assurée. Il est alors préférable de juger la convergence à partir de l'évolution d'une grandeur caractéristique de l'écoulement en régime établi.

Pour les simulations présentées dans ce travail, le critère de convergence sur les résidus normés a été fixé à 10^{-4} pour toutes les équations résolues.

En parallèle, le caractère établi de l'écoulement instationnaire a été apprécié en suivant le couple sur les parois mobiles (agitateur et arbre). Cette grandeur a été choisie, car elle intègre les effets de pression et les effets visqueux liés aux gradients de vitesse locaux.

CHAPITRE IV

Résultats et discussion

Ce chapitre exploite et complète la simulation présentée au chapitre précédent dans l'objectif d'étudier l'hydrodynamique et le mélange dans le réacteur torique. Avant de discuter les résultats de l'écoulement dans le réacteur torique, il est nécessaire de valider les modèles mathématiques utilisés. Pour ce faire, les résultats des prédictions numériques sont comparés à des données expérimentales afin d'indiquer la justesse des résultats que les modèles sont capables d'offrir pour représenter le phénomène physique étudié. La validation des modèles est effectuée avec les données expérimentales présentées au chapitre II. Pour s'assurer de comparer tous les résultats sous les mêmes bases, on reproduira numériquement les essais expérimentaux selon les valeurs des paramètres adimensionnels Re et Re_m

IV.1 Etude de sensibilité

IV.1.1 sensibilité au maillage

Le choix de la taille des VC du maillage est toujours un compromis entre la qualité des résultats et le nombre final des éléments qui pénalise le temps de calcul. Dans le cas idéal, il faut trouver un maillage où les résultats ne dépendent pas de la taille des cellules. Dans le cas contraire, il faut réduire la taille des éléments pour arriver à un maillage dont les résultats ne varient que peu par rapport à l'échelle, mais qui soit solvable dans des délais raisonnables. Ci-dessous, une étude comparative de trois maillages est réalisée de manière à valider le maillage présenté au chapitre III (Figure IV.1). Un premier essai consiste à réduire la taille caractéristique des éléments de moitié (Maillage raffiné), et un deuxième essai consiste à combiner des éléments de ces deux tailles (Maillage combiné). Pour cela, le maillage est affiné seulement près des parois (les coudes et l'agitateur) où les gradients de vitesse sont plus élevés en raison de la turbulence de l'agitateur et des tourbillons de Dean induits par la présence des coudes. L'étude a été réalisée pour les conditions présentées au chapitre III.

L'indépendance des résultats vis-à-vis du maillage a été vérifiée pour les grandeurs moyennes tout comme pour la turbulence. En effet, nous pouvons constater, à partir des figures IV.2 et IV.3 qu'en ce qui concerne les grandeurs moyennes, représentées ici par la vitesse axiale dans le plan $\theta = 270^\circ$ pour une vitesse de rotation de l'agitateur $N = 100$ rpm ($Re_m = 5503$), la convergence est atteinte dès 415514 mailles. Cependant, le maillage a besoin d'être raffiné d'avantage pour atteindre une convergence des quantités turbulentes, représentées ici par l'énergie cinétique. Ainsi,

le maillage à 701496 mailles a été retenu pour la suite de l'étude, car il offre le meilleur compromis entre précision et temps de calcul.

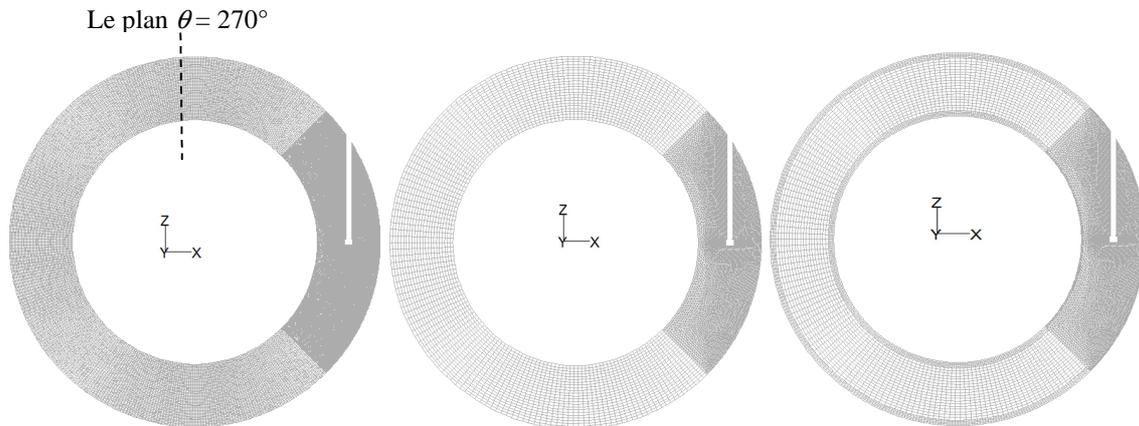


Figure IV.1 Mailles proposées dans le plan XZ (de gauche à droite) : le maillage raffiné (1084528 mailles), le maillage présenté au chapitre III (415514 mailles) et le maillage combiné (774003 mailles)

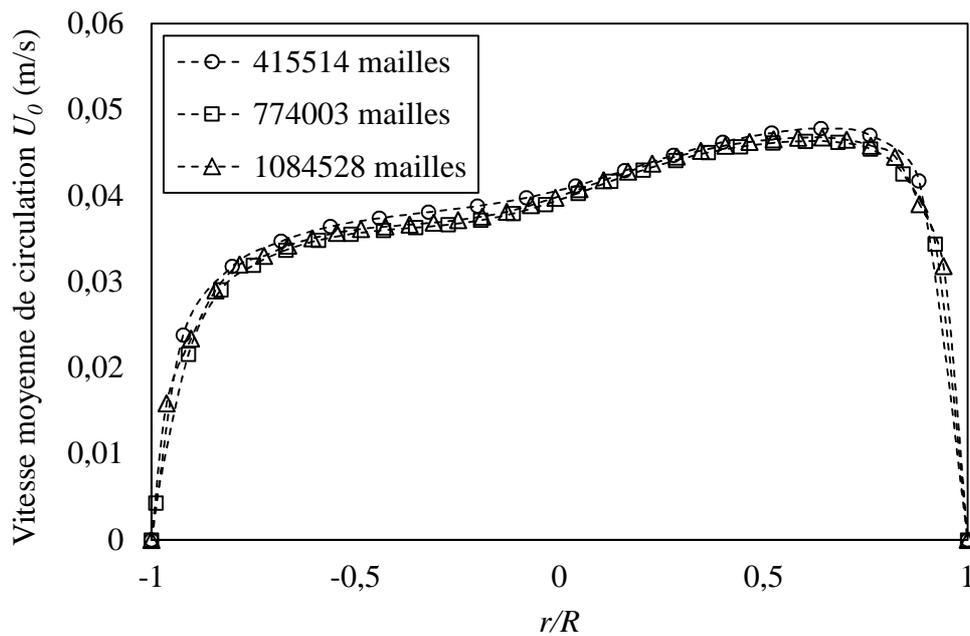


Figure IV.2 Etude de sensibilité au maillage pour la vitesse moyenne de circulation ($\theta=270^\circ$, $N = 100$ rpm, $Re_m=5503$)

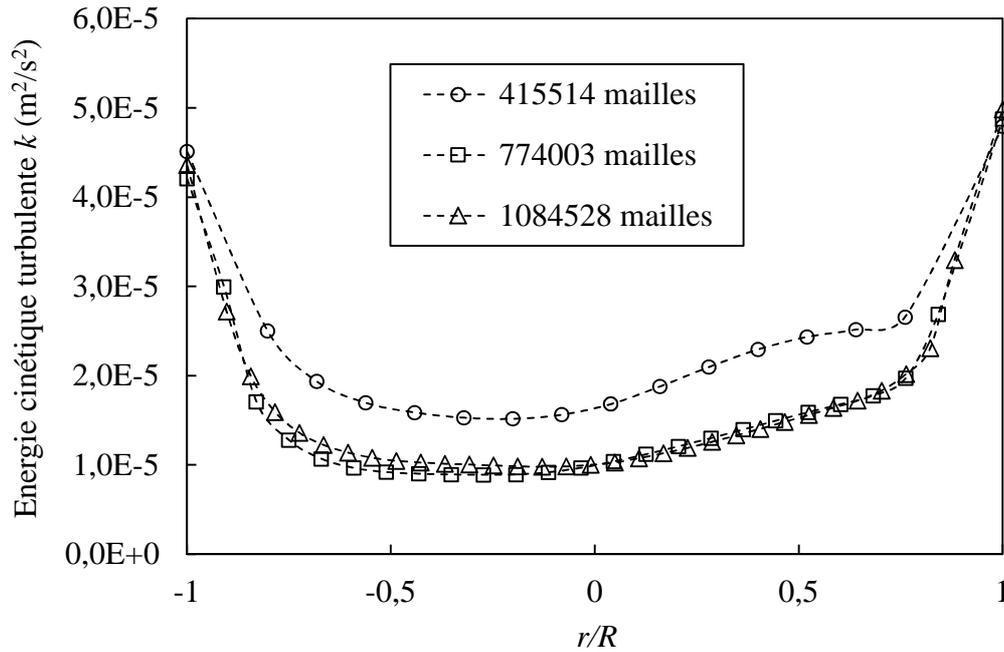


Figure IV.3 Etude de sensibilité au maillage pour l'énergie cinétique turbulente ($\theta = 270^\circ$, $N = 100$ rpm, $Re_m = 5503$)

IV.1.2 sensibilité aux schémas numériques

A notre connaissance, aucune étude n'a traité de l'influence des schémas numériques sur la simulation de l'écoulement dans le réacteur torique. Pourtant, le choix du schéma numérique est important pour une modélisation fidèle des écoulements et ce d'autant plus que les quantités turbulentes sont recherchées [78]. Ce point a été bien illustré par Aubin et coll., [79] dans sa modélisation de l'écoulement dans un réacteur parfaitement agité.

Les quatre schémas numériques décrits dans la section III.7.1.1 ont été combinés avec tous les modèles de turbulence décrits dans la section III.2.1 afin d'identifier la combinaison appropriée entre "schéma numérique" et "modèle de turbulence". Le nombre de simulations numériques réalisées étant important, seulement quelques profils seront montrés dans ce qui va suivre pour illustrer et mettre en avant les tendances globales qui en ressortent.

Comme attendu, et en accord avec la littérature [79], les profils de vitesse axiale représentatifs de l'écoulement moyen, sont peu sensibles au schéma numérique (Figure IV.4).

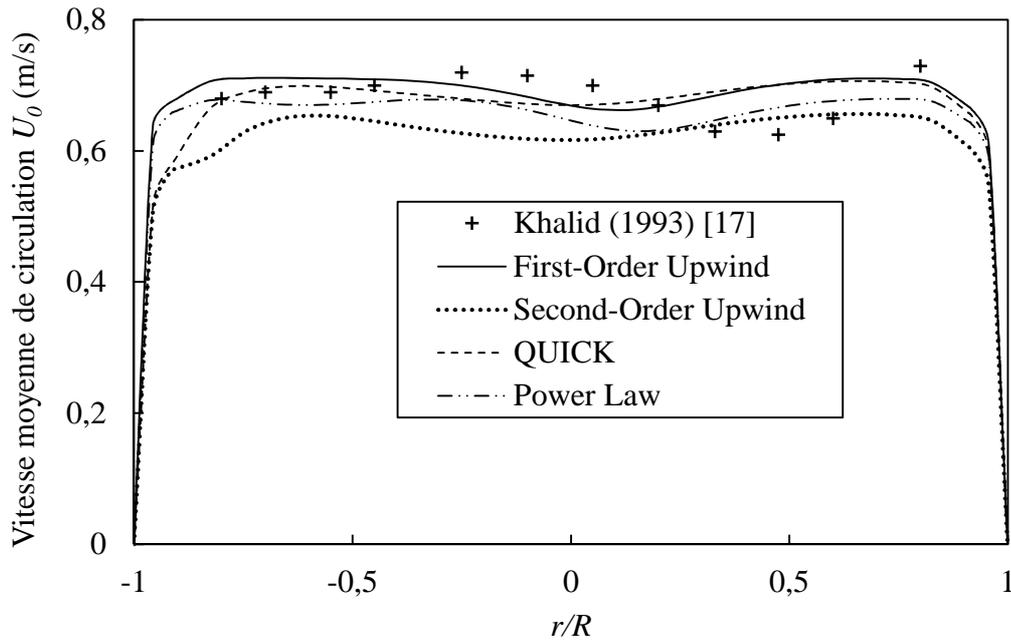


Figure IV.4 Comparaison des schémas numériques en termes de vitesse moyenne de circulation (modèle $k-\varepsilon$ standard, $\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$)

Le schéma QUICK est le plus gourmand en termes de temps de calcul. Cependant, comme on peut l'observer sur la figure IV.5, ce modèle donne des résultats similaires à ceux du schéma Second-Order Upwind. Nous avons expliqué dans la section III.7.1.1 que le schéma QUICK est une moyenne pondérée du Second-Order Upwind et une interpolation centrée de premier ordre. Il est clair que dans notre cas, le schéma QUICK s'apparente au schéma Second-Order Upwind. Ce modèle est conditionnellement stable mais sa convergence est moins facile à atteindre qu'avec les autres schémas. Pour ces différentes raisons, nous considérons que le schéma QUICK n'est pas approprié pour notre application.

Les grandeurs turbulentes obtenues avec les schémas Second-Order Upwind, Power Law et First-Order Upwind sont comparées aux mesures expérimentales de Khalid., [17] (Figure IV.6). La tendance générale qui se dégage de ces comparaisons est que le schéma Power Law semble donner les résultats qui se rapprochent le plus de l'expérimentale. Ce modèle se base sur une solution exacte d'une équation de convection-diffusion monodimensionnelle ce qui peut expliquer sa bonne performance. En outre, ce schéma est stable et peu gourmand en temps de calcul. Les résultats du schéma Second-Order Upwind ne sont pas forcément les plus proches de l'expérience, malgré son ordre élevé censé limiter la diffusion numérique, mais ils restent corrects. D'ailleurs, les mesures expérimentales se situent entre les prédictions des deux schémas Power Law et Second-Order Upwind. Pour ce qui est du temps de calcul, le schéma Second-Order Upwind est plus coûteux mais reste raisonnable.

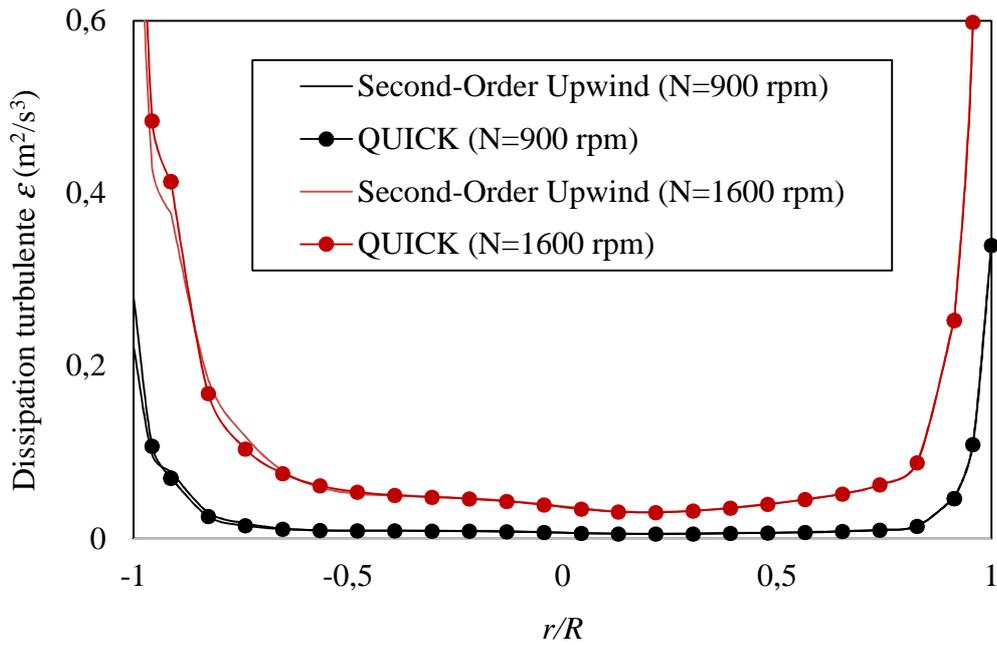


Figure IV.5 Comparaison des schémas Second-Order Upwind et QUICK en termes de dissipation turbulente (modèle $k-\epsilon$ standard, $\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm et $N = 1600$ rpm)

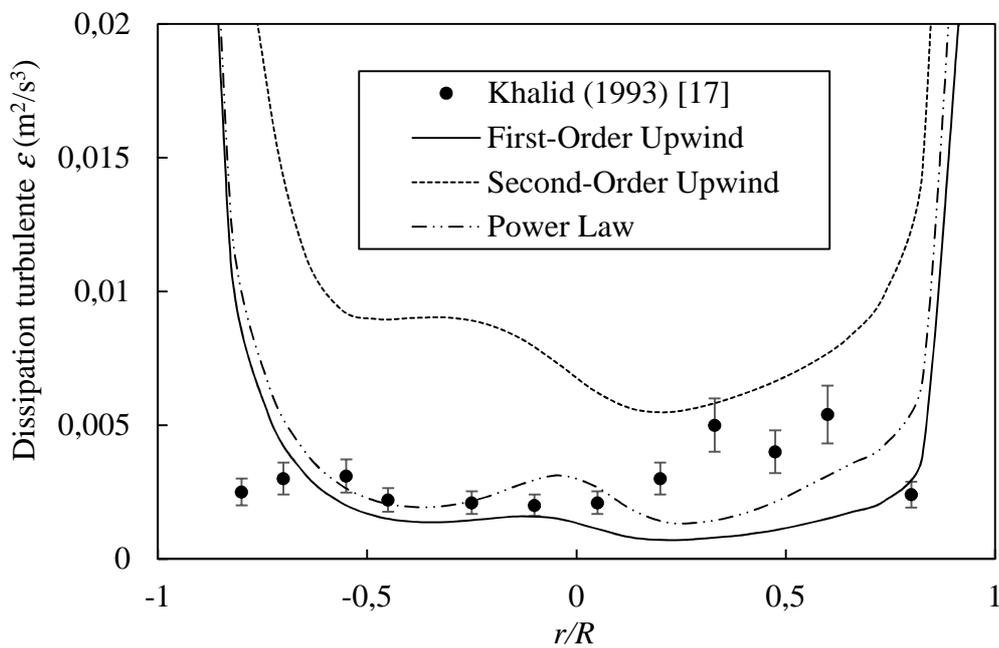


Figure IV.6 Comparaison des schémas numériques en termes de dissipation turbulente (modèle $k-\epsilon$ standard, $\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$)

Parmi les différents schémas numériques investigués, le schéma First-Order Upwind est celui qui présente les résultats les moins satisfaisants. L'énergie cinétique turbulente est sous-estimée dans tous les cas, ce qui vient certainement du fait qu'il est seulement de premier ordre, et donc probablement diffusif. Les avantages de ce modèle sont, sans conteste, sa grande stabilité et la rapidité de calcul. En outre, la convergence en maillage est atteinte avec un maillage de taille raisonnable. Il est intéressant de noter ici que le schéma First-Order Upwind donne des résultats comparables à ceux des autres schémas pour les grandeurs moyennes. Ainsi, selon de ce qui est attendu du modèle numérique, le schéma First-Order Upwind peut être suffisant.

En résumé, il n'existe pas une et une seule combinaison optimale de modèle de turbulence et de schéma numérique. Le modèle $k-\varepsilon$ combiné au Power Law offre dans tous les cas des résultats satisfaisants. Il peut être intéressant dans certains cas d'utiliser le schéma Second-Order Upwind si la précision le nécessite, avec un coût de calcul supplémentaire. Pour la modélisation des grandeurs moyennes, le schéma First-Order Upwind suffit amplement.

IV.1.3 Sensibilité aux modèles de turbulence

Les différents modèles de turbulence ont été comparés entre eux et confrontés aux mesures expérimentales de Khalid., [17]. La figure IV.7 représente une comparaison des profils de vitesse moyenne de circulation calculés par les différents modèles de turbulence dans le plans $\theta = 270^\circ$ et pour une vitesse de rotation de l'agitateur de $N=900$ rpm ($Re_m = 49528$).

La vitesse axiale est correctement prédite par les quatre modèles de turbulence. On observe parfois quelques petits écarts, mais ces derniers restent toujours négligeables compte tenu de la précision de la mesure. Ce résultat peut être jugé cohérent puisque les modèles de turbulence calculent l'écoulement moyen et ne modélisent que la turbulence.

Les différences deviennent plus visibles lorsqu'on compare les quantités turbulentes (dissipation turbulente, ε). Ceci est illustré sur la figure IV.8 où les profils calculés par ces différents modèles sont comparés aux mesures expérimentales de Khalid., [17].

Les résultats obtenus sont complètement différents. Les modèles $k-\varepsilon$ standard et RNG donnent les résultats qui se rapprochent le plus de mesures expérimentales, avec des performances légèrement meilleures pour ce dernier, plus approprié pour les écoulements présentant des recirculations et des courbures dans les lignes de courant. L'écoulement dans un réacteur torique subit, en effet, des recirculations créées par la présence des coudes. On peut remarquer que dans les conditions opératoires étudiées ici, l'écoulement est moyennement cisailé, ce qui explique les résultats assez proches de ces deux modèles. Dans la perspective de modélisation d'écoulements

à l'échelle industrielle, le modèle $k-\varepsilon$ RNG devrait être préféré, puisque ces écoulements-là peuvent présenter des cisaillements plus importants.

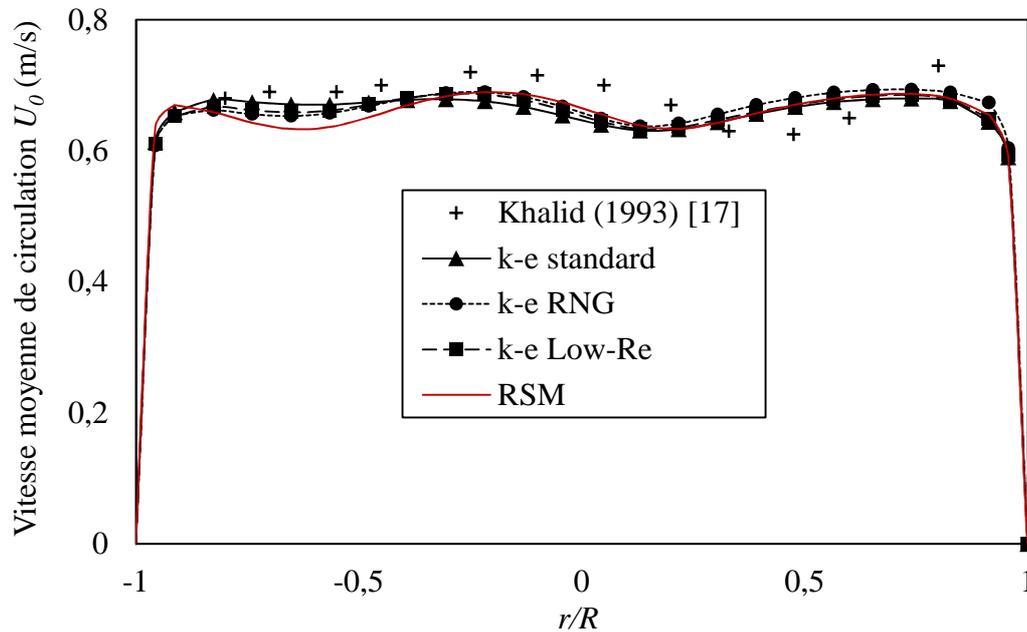


Figure IV.7 Comparaison des modèles de turbulence : profils de vitesse moyenne de circulation ($\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$)

Le modèle $k-\varepsilon$ Low-Re surestime complètement les grandeurs turbulentes. Hrenya et coll., [80] ont étudié les performances de plusieurs modèles de turbulence $k-\varepsilon$ Low-Re dans le cas d'un écoulement turbulent pleinement développé dans une conduite, en les confrontant à des mesures expérimentales et des simulations DNS publiées dans la littérature. Les auteurs ont pu montrer que la plupart des modèles, y compris celui que nous avons utilisé ici (et qui a été utilisé par ailleurs par Bujalski et coll., [81]), surestiment l'énergie cinétique turbulente et la diffusivité turbulente. Les auteurs de cette étude ont attribué ces mauvaises performances au faible rapport de $\sigma_k/\sigma_\varepsilon$. Ils ont trouvé que les modèles utilisant un rapport plus élevé obtenaient des résultats bien meilleurs.

Ce constat étant fait, nous pouvons remarquer que le modèle $k-\varepsilon$ Low-Re donne des résultats plus intéressants que les autres en proche paroi, car il calcule la turbulence jusqu'à la paroi, tandis que les autres reposent sur des lois de paroi et font une projection des valeurs calculées en proche paroi. On peut aussi mentionner que l'étude de Charton et coll., [82] a montré que, pour modéliser la dispersion axiale, sous certaines conditions opératoires où l'écoulement s'écarte de la configuration pleinement développée, ce modèle obtient des résultats intéressants, qui peuvent notamment venir des fonctions d'amortissement utilisées.

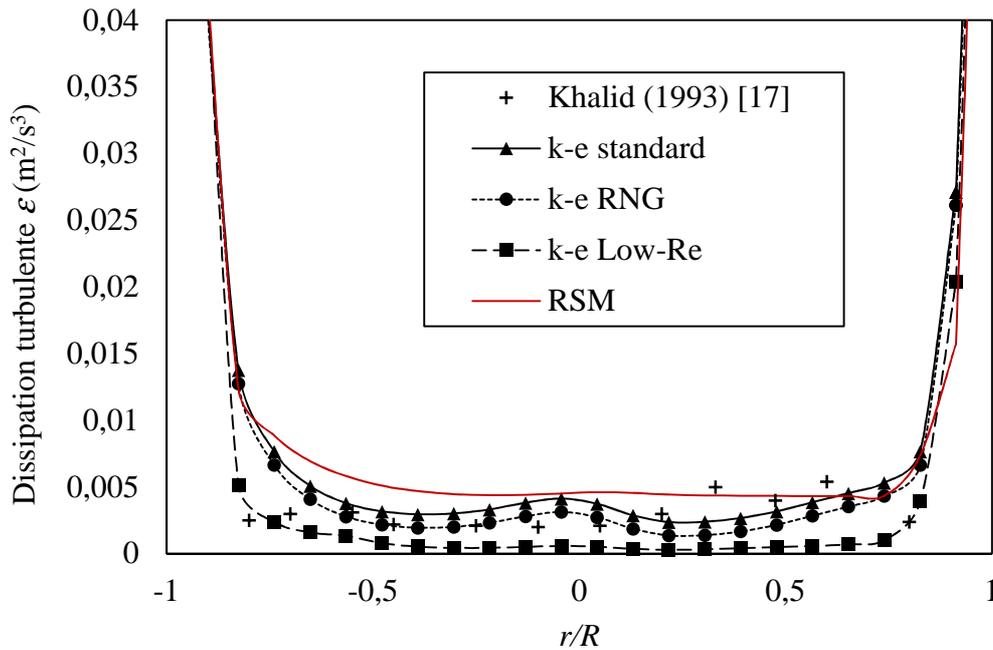


Figure IV.8 Comparaison des modèles de turbulence : profils de dissipation turbulente
 ($\theta = 270^\circ$, $N = 900$ rpm, $Re_m = 49528$)

Le modèle RSM est celui qui a obtenu les résultats les moins satisfaisants. Les performances de ce modèle peuvent être expliquées par son caractère probablement trop diffusif. En plus, il a nécessité un temps de calcul sensiblement plus long que les variantes du modèle $k-\varepsilon$, vu qu'il résout plus d'équations. Nous pouvons par conséquent conclure que ce coût supplémentaire ne se justifie pas.

Nous pouvons conclure qu'en fonction de ce qui attendu, le choix du modèle de turbulence et du schéma numérique peut varier. Ainsi, si seules les grandeurs moyennes sont recherchées, le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ standard (alternativement $k-\varepsilon$ RNG) combiné au schéma numérique First Order Upwind est largement suffisant. Dans le cas où les grandeurs turbulentes sont nécessaires, le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ RNG devrait être préféré avec le schéma Power Law. Cette combinaison a montré une aptitude à simuler correctement la dissipation turbulente dans le réacteur torique, et peut donc être utile pour déterminer les paramètres nécessaires au dimensionnement des réacteurs torique, comme la vitesse moyenne de circulation, le temps de mélange et la puissance consommée par le mobile d'agitation.

IV.2 Etude de l'écoulement dans le réacteur torique

IV.2.1 Profil de vitesse

Un exemple de résultat numérique est montré sur la figure IV. 10 sous forme de contour de la vitesse moyenne normalisé par la vitesse moyenne de circulation pour une vitesse de rotation de l'hélice marine $N=500$ rpm ($Re_m=27516$) et pour différents plan transversale (Figure IV.9). Les représentations de vitesses mettent en évidence la nature complexe de l'écoulement tridimensionnel au sein du réacteur torique, caractérisé par une grande interaction entre l'effet de l'agitation et celui de la courbure. Afin de mieux comprendre l'influence de l'écoulement tourbillonnaire provoqué par l'hélice marine sur le comportement hydrodynamique du réacteur torique, et plus particulièrement sur les tourbillons de Dean, les profils moyennes de la vitesse axiale et circumférentielle sont représentées dans la figure IV.11 pour les huit positions angulaires (Figure IV.9).

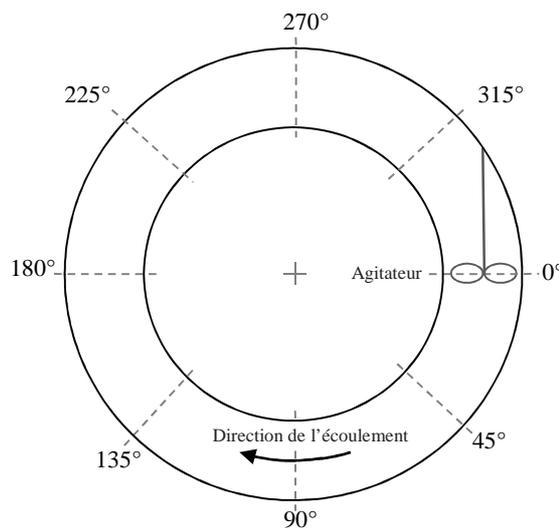


Figure IV.9 Définition des positions angulaires

Les représentations de vitesses, juste en aval de l'hélice ($\theta=0^\circ$), mettent en évidence la nature complexe de l'écoulement généré par le mobile d'agitation avec une intensité tourbillonnaire importante qui met en rotation le fluide et un profil axisymétrique de la vitesse axiale. Cette symétrie comporte une zone de recirculation qui correspond à un écoulement en retour du fluide en dehors de cette partie une augmentation de vitesse est observée. Au milieu du premier coude ($\theta=45^\circ$), l'effet de l'écoulement secondaire dû à la force centrifuge sera couplé avec l'effet de l'agitation pour perturber la symétrie du profil initial. Or, on sait que l'écoulement secondaire, crée dans les tubes coudés, a tendance à accélérer le mouvement plutôt dans la partie extérieure. Ainsi, il donne naissance à des tourbillons appelés tourbillons de Dean.

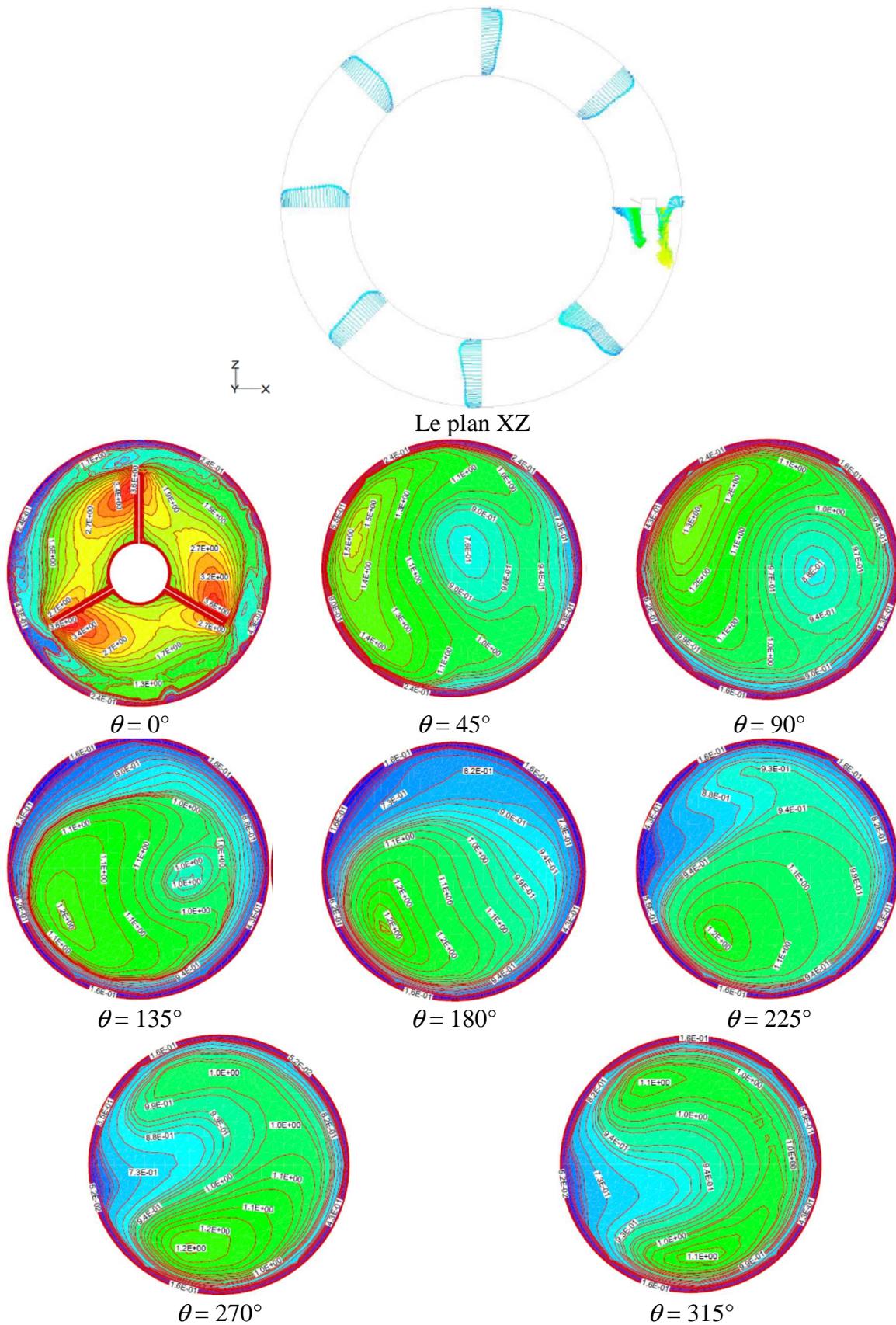


Figure IV.10 Contours de vitesse sur une coupe verticale et huit positions angulaires pour une vitesse de rotation de l'hélice marine $N=500$ rpm ($Re_m=27516$)

Ceux-ci disparaissent à la sortie du coude afin de redonner à l'écoulement l'aspect initial qu'il possédait avant l'entrée du coude. Contrairement au cas d'une géométrie coudée avec une entrée axiale, le profil de vitesse juste à la sortie du premier coude du réacteur torique présente une accélération du côté intérieur. Par contre, l'effet décélération de l'écoulement est toujours observé dans la région centrale avec une zone de recirculation située au milieu du tube.

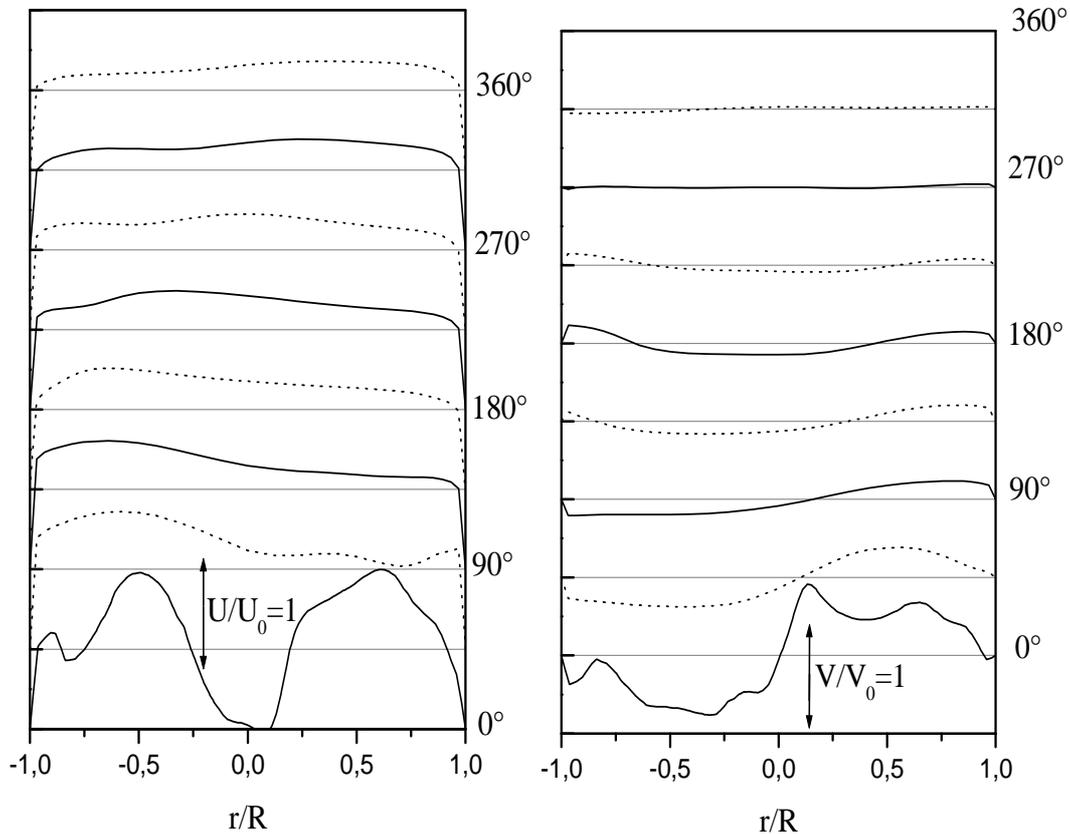


Figure IV.12 Evolution des profils moyens de la vitesse axiale et circumférentielle pour une vitesse de rotation de l'hélice marine $N=500$ rpm ($Re_m=27516$)

En s'éloignant de l'hélice, dans le deuxième coude ($\theta = 135^\circ$), une augmentation significative de tourbillons de Dean est observée avec la décroissance rapide de l'intensité de la composante circumférentielle. Dans cette partie du réacteur, l'écoulement a tendance à s'axialiser, mais l'effet de la courbure laisse des traces au niveau de la paroi intérieure. A l'entrée du troisième coude ($\theta = 180^\circ$), en aval de l'hélice, on note une légère influence de la courbure avec une augmentation de vitesse à la paroi intérieure. A la sortie du coude ($\theta = 270^\circ$), le maximum de vitesse est déporté vers la paroi extérieure. Ce comportement est probablement dû à l'atténuation de l'écoulement tourbillonnaire généré par le mobile d'agitation. Ce résultat est confirmé par le profil de la composante circumférentielle à la sortie du coude ($\theta = 270^\circ$). En amont de l'hélice, le mouvement semble se réorganiser pour donner un profil uniforme suivant la distance radiale. On pense que la

rotation de l'agitateur entraîne une aspiration des particules fluides se trouvant en amont de l'hélice ; ce qui provoque une axialisation des lignes de courant.

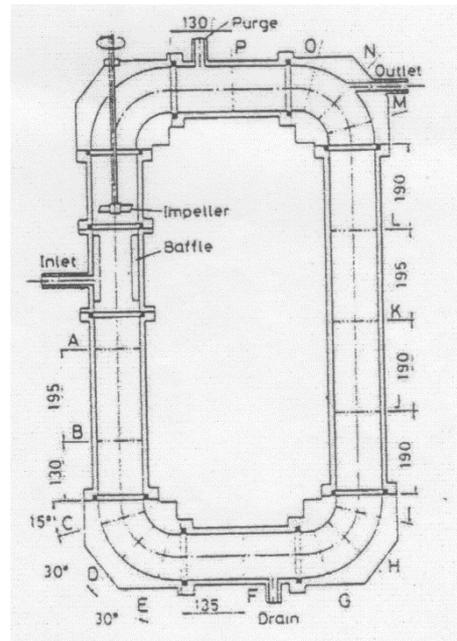


Figure IV.13-a Détail du réacteur torique et des sections de mesure par SATO et coll., [15]

Ces résultats sont comparables à ceux de SATO et coll., [15]. Ces auteurs ont étudié la distribution de vitesse dans différentes sections d'un réacteur torique présentant des longueurs droites (Figure IV.13-a). Les mesures de vitesse ont été effectuées avec un tube de Pitot. La figure IV.13-b donne le contour de vitesse axiale normalisée par la vitesse moyenne de circulation. Dans la section A située juste après l'hélice, la région où la vitesse axiale est très faible apparaît autour de l'axe central du tube. En aval, dans la section D qui se trouve au milieu du coude, la distribution de vitesse est presque uniforme avec une légère accélération des particules se trouvant près de la paroi intérieure. A partir de la section N, les particules fluides ayant une vitesse axiale élevée sont observées du côté de la paroi extérieure. Ces résultats expérimentaux sont en bon accord avec les nôtres. Ceci montre que l'écoulement dans un réacteur torique généré par une hélice est composé d'une vitesse axiale qui assure la circulation du fluide suivant la trajectoire longitudinale, d'une vitesse circonférentielle responsable de la forme hélicoïdale induite par la rotation de l'hélice et enfin d'une vitesse transversale générée par un gradient de pression transversal. Cette dernière est due à la géométrie courbée que présentent les coudes.

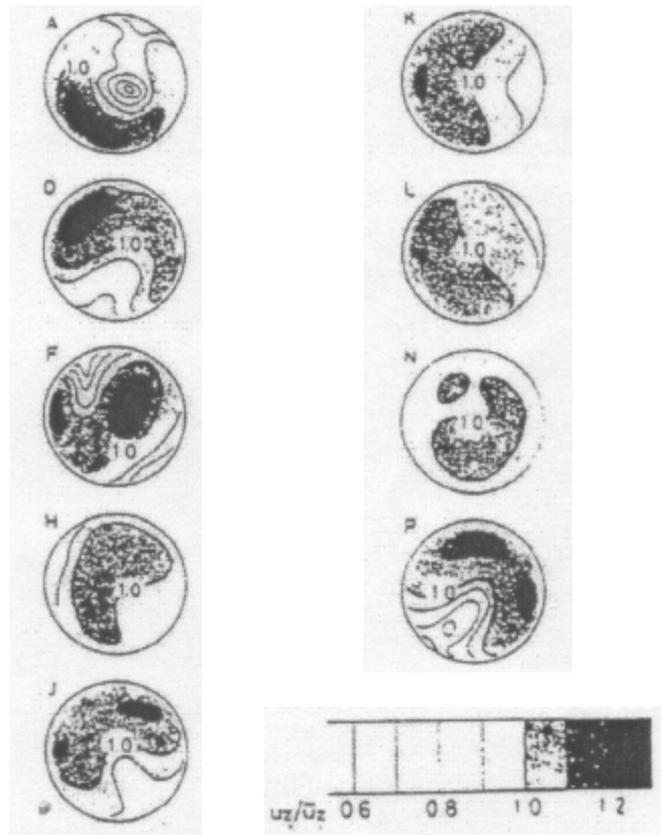


Figure IV.13-b Contours de vitesse dans le réacteur torique [15]

IV.2.2 Influence de la vitesse d'agitation

La figure IV.14 donne l'évolution de la vitesse axiale et circumférentielle en fonction de la distance longitudinale par rapport à l'agitateur pour trois vitesses de rotation de l'agitateur $N_1=100$ rpm, $N_2=500$ rpm et $N_3=900$ rpm correspondant à des nombres de Reynolds de mélange respectifs de $Re_{m1}=5503$, $Re_{m2}=27516$ et $Re_{m3}=49528$.

Ces résultats montrent que l'intensité du mouvement hélicoïdal induit par la rotation de l'hélice marine a une grande influence sur l'évolution de l'écoulement le long de la circonférence du réacteur torique. Pour les faibles intensités ($N_1=100$ rpm), juste en aval de l'hélice ($5^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$), les particules fluides suivent un mouvement hélicoïdal caractérisé par une composante circumférentielle importante et un profil de la composante axiale déporté vers la paroi intérieure. En s'éloignant de l'agitateur, cette dissymétrie s'atténue pour s'axialiser à la sortie du premier coude ($\theta = 90^\circ$). Ce comportement correspond au début de l'atténuation de l'effet de mouvement giratoire provoqué par l'hélice marine. A partir du milieu du deuxième coude ($\theta = 135^\circ$), on constate un profil de vitesse axiale déporté vers la paroi extérieure avec une composante circumférentielle presque nulle. Ceci est dû à l'amortissement de l'écoulement hélicoïdal induit par l'hélice marine et, par conséquent, l'apparition d'un mouvement secondaire. Cet effet est conforme au comportement hydrodynamique de l'écoulement dans une conduite courbée.

Avec l'augmentation de la vitesse de rotation ($N_2=500$ rpm), le mouvement hélicoïdal s'étend jusqu'à la moitié du troisième coude ($\theta=225^\circ$).

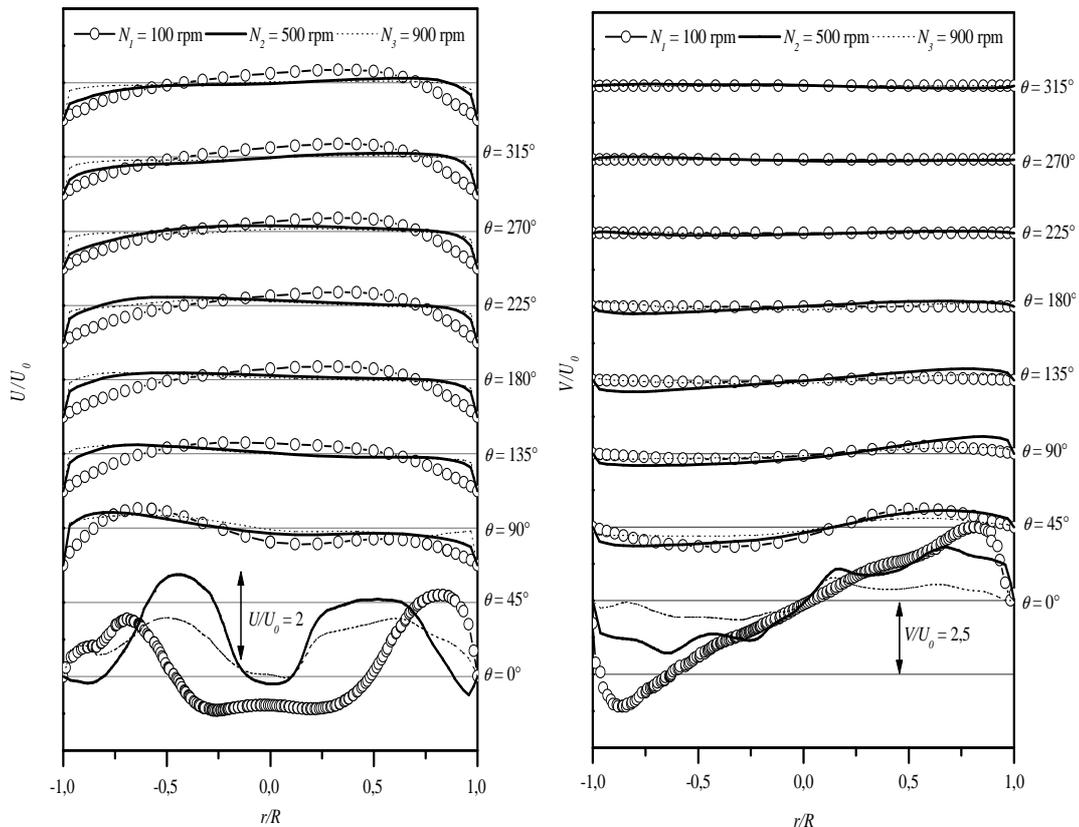


Figure IV.14 Comparaison de l'évolution des profils moyens de la vitesse axiale et circumférentielle

En comparant les représentations de vecteurs de vitesses sur la figure IV.15, on remarque que les cellules de Dean apparaissent au milieu du deuxième coude ($\theta=135^\circ$) pour $N_1=100$ rpm tandis que ces structures sont déjà observées à la sortie du premier coude ($\theta=90^\circ$) pour $N_3=900$ rpm. Ce résultat s'explique par le comportement hydrodynamique de l'écoulement développé juste en aval de l'hélice marine. Pour une vitesse de rotation de 100 rpm, les profils de la composante axiale et circumférentielle montre un mouvement radial caractérisé par une zone de recirculation dans la partie centrale du tube avec une survitesse près des parois (extérieure et intérieure) et composante circumférentielle importante. La contribution de la composante axiale de vitesse est, dans ce cas, faible, ce qui empêche l'apparition des tourbillons de Dean dans cette partie du réacteur. Avec l'augmentation de la vitesse d'agitation, on observe une augmentation significative de la composante axiale par rapport à la composante circumférentielle, ce qui correspond à un comportement axial (Figure IV.14). Cette augmentation de la vitesse axiale favorise l'apparition des cellules de Dean malgré l'importance de l'écoulement tourbillonnaire développé par l'agitateur.

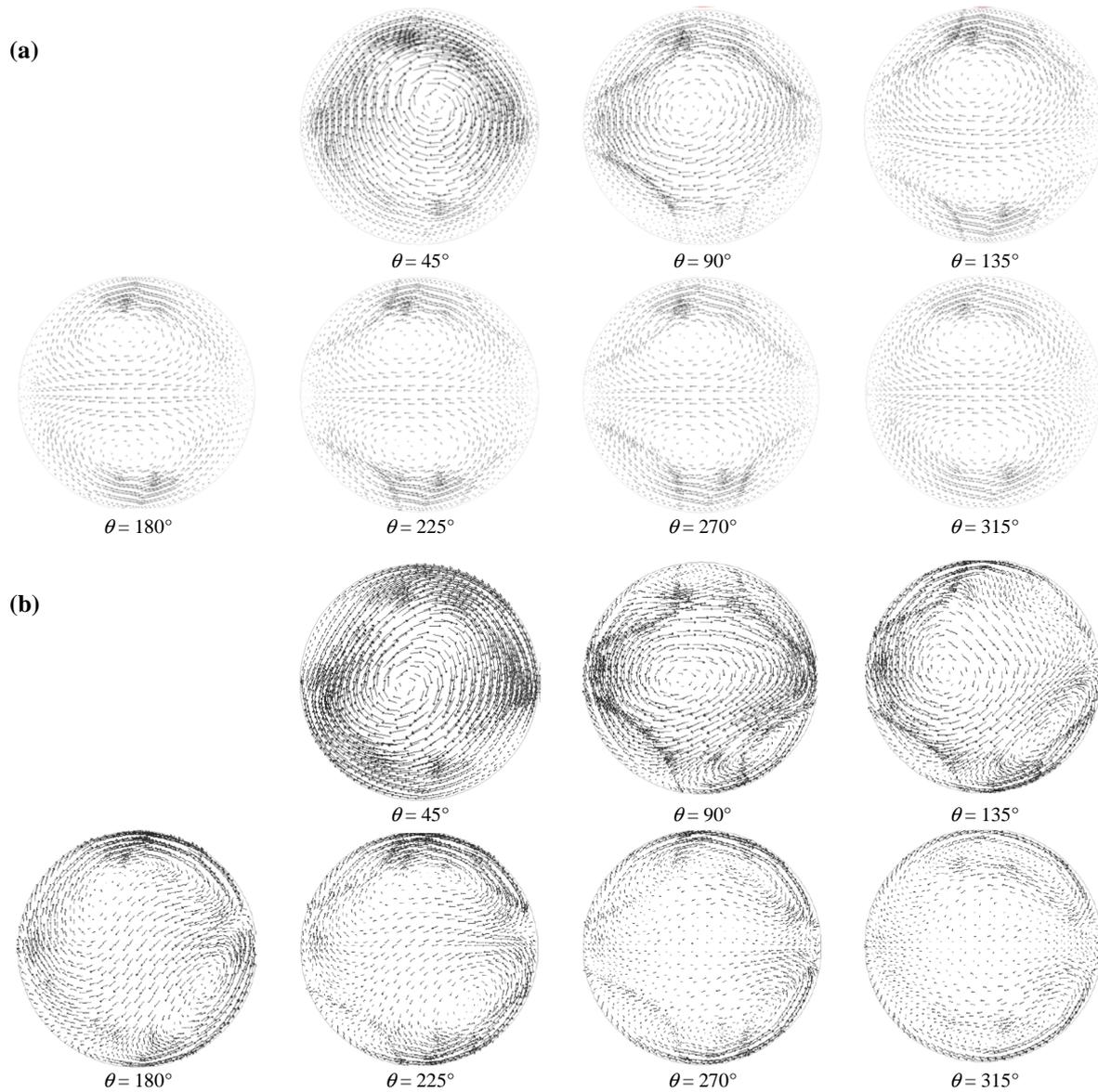


Figure IV.15 Comparaison des champs moyens des vitesses obtenues pour $N_1 = 100$ rpm (a),
et $N_3 = 900$ rpm (b)

Sur la figure IV.16, nous avons reporté les vitesses moyennes de circulation calculées pour les différentes positions angulaires et pour trois valeurs de la vitesse de rotation. La valeur numérique de la vitesse moyenne de circulation est définie comme la moyenne des composantes axiale de la vitesse (direction-Z) sur une section du réacteur. On constate que la vitesse reste pratiquement constante, pour une vitesse de rotation de l'agitateur donnée dans toute la configuration torique. La seule variation notable est obtenue près de l'agitateur, où une zone de recirculation a été détectée. Nous avons également mis en évidence que le débit fluide circulant dans le tore est directement proportionnel à la vitesse de rotation de l'agitateur.

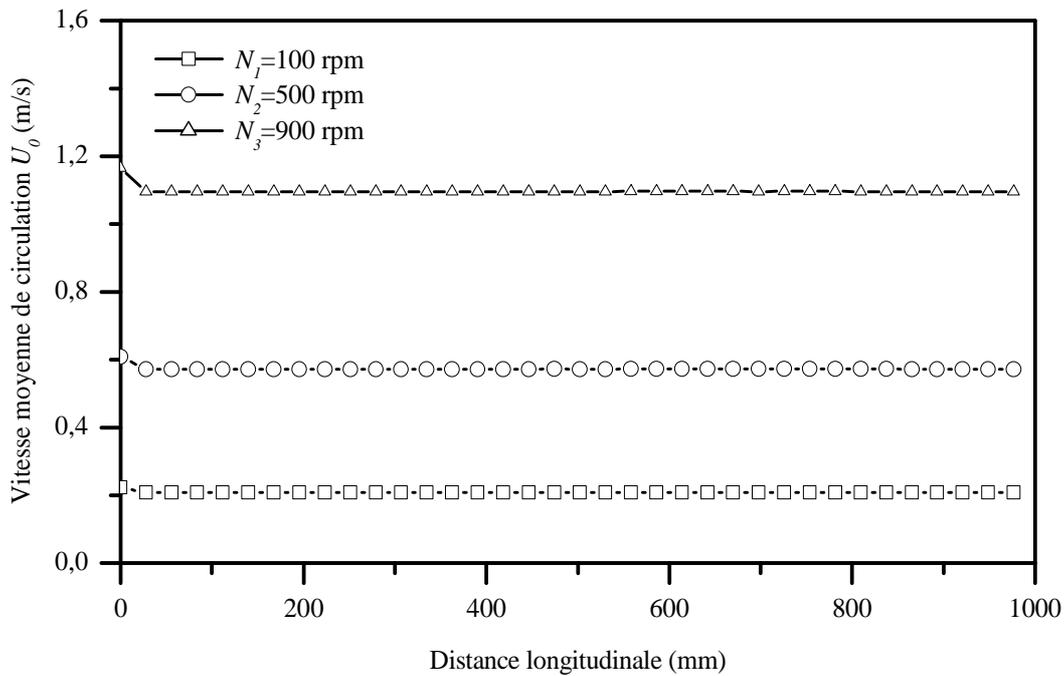


Figure IV.16 Variation de la vitesse de circulation en fonction de la distance par rapport à l'agitateur

IV.2.3 Influence des caractéristiques géométriques du réacteur

La figure IV.17 montre l'évolution de la vitesse moyenne de circulation du fluide dans le réacteur torique en fonction de la vitesse de rotation de l'agitateur. Cette figure comporte aussi, la corrélation empirique obtenue par Tanaka et coll., [48] dans le même type de réacteur que celui utilisé dans cette étude (Équation II.10). Les résultats numériques sont en parfait accord avec la corrélation et ce, pour large gamme de vitesse de rotation du mobile $100 < N < 2500$ rpm.

Les résultats expérimentaux obtenus par Khalid [17] dans un réacteur torique à longueurs droites sont données sur la même figure. En comparant ces résultats à nos résultats numériques, on constate qu'ils sont comparables jusqu'à une vitesse d'agitation limitée à $N=800$ rpm. Au-delà de celle-ci, une légère divergence entre les résultats est constatée. Ces résultats montrent que la géométrie du tore, n'a que peu d'influence sur les caractéristiques de la circulation du fluide.

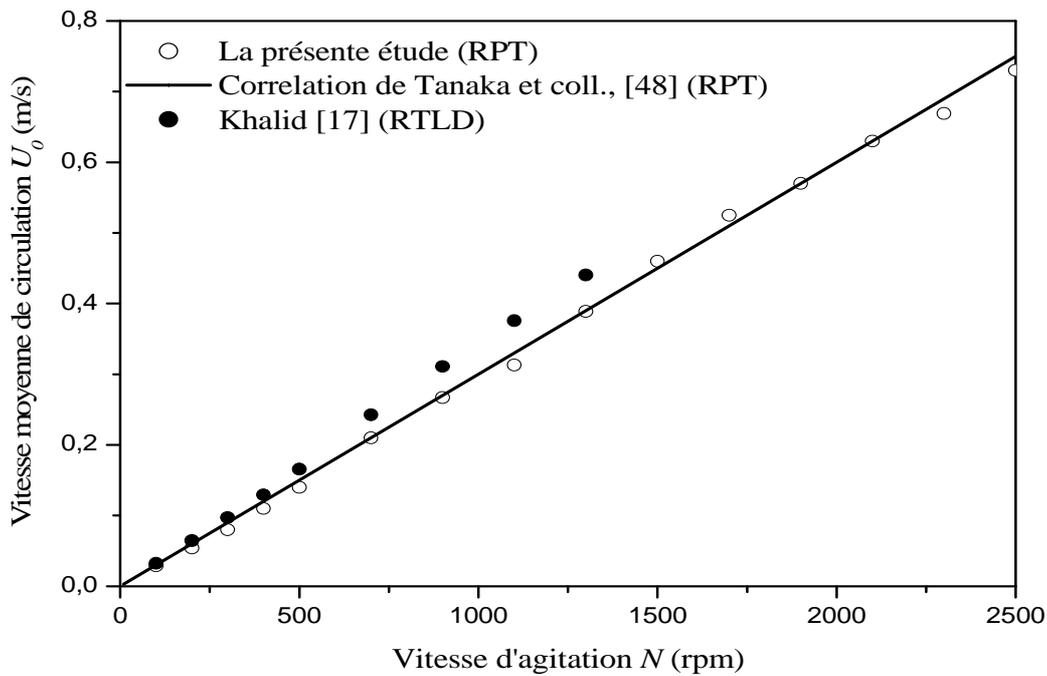


Figure IV.17 Evolution de la vitesse moyenne de circulation en fonction de la vitesse d'agitation : influence des caractéristiques géométriques du réacteur

IV.2.4 Influence des caractéristiques géométriques du mobile d'agitation

Nous avons utilisé dans cette étude une hélice marine (I), quatre turbine à pale inclinée de différents diamètres (II, III, IV et V) et deux turbine à angle d'inclinaison des pales différents (VI et VII). Les caractéristiques géométriques des mobiles d'agitation utilisés sont identiques à celles utilisées dans les travaux expérimentaux de Tanaka et coll., [48] (Tableau IV.1).

Tableau IV.1 Caractéristiques géométriques des mobiles d'agitation

Agitateur	Géométrie	d_1/d_t	α (degré)
I	Hélice marine	0,64	45°
II, III, IV et V	Turbine à pale inclinée	0,33 ; 0,5 ; 0,64 et 0,75	45°
VI et VII	Turbine à pale inclinée	0,64	30° et 60°

L'ensemble de nos résultats numériques est rapporté sur la figure IV.18 où l'on présente la variation de la vitesse moyenne de circulation du fluide U_0 en fonction de la vitesse d'agitation N . On remarque que la vitesse de circulation varie linéairement avec la vitesse de rotation quel que soit le type et les caractéristiques géométriques des mobiles, ce résultat est similaire à ceux trouvés par Sato et Coll., [15], Nouri [54] et Khalid [17]. Pour toute vitesse d'agitation, la vitesse moyenne de circulation augmente avec l'angle d'inclinaison des pales. Si on compare les résultats obtenus pour les quatre diamètres, on constate que la turbine avec un rapport d_1/d_t de 0,64 donne une vitesse de circulation importante que celle engendrée par le plus grand diamètre ($d_1/d_t=0,75$). Ceci

est dû au fait que c'est la vitesse tangentielle qui prédomine lorsque le rapport d_1/d_t est important ($d_1/d_t > 0,65$).

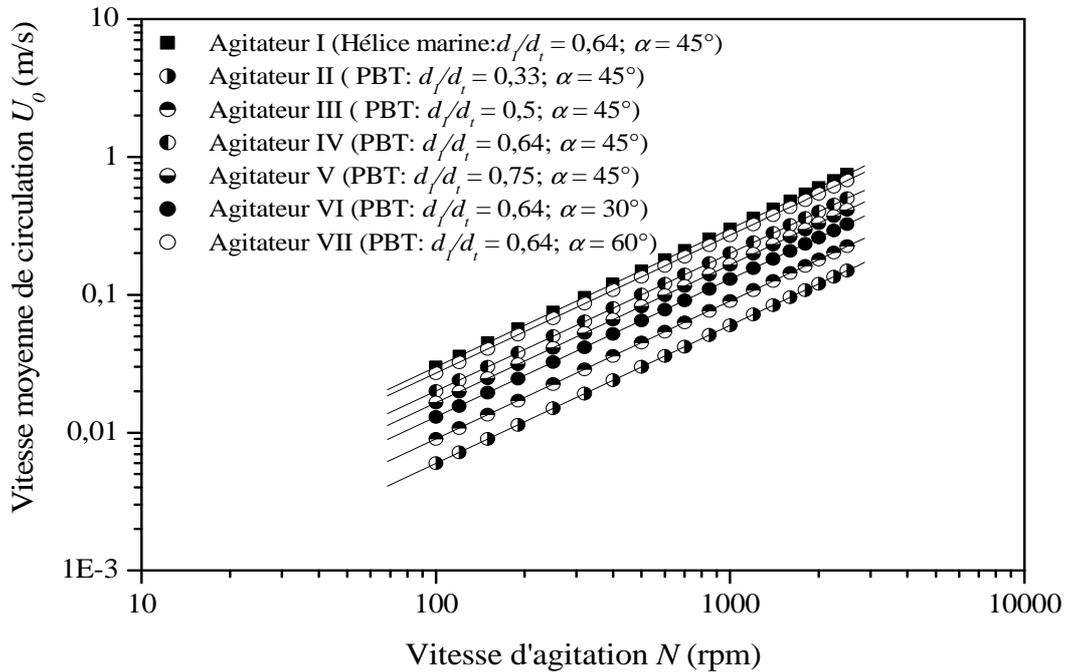


Figure IV.18 Evolution de la vitesse moyenne de circulation en fonction de la vitesse d'agitation : influence des caractéristiques géométriques du mobile d'agitation

IV.2.5 Régime d'écoulement

Afin d'étudier la dépendance entre la vitesse moyenne de circulation et la vitesse d'agitation, nous allons essayer de donner les résultats de l'agitateur I (Hélice marine, $d_1/d_t=0,64$, $\alpha=45^\circ$) et l'agitateur IV (Turbine à pale inclinée, $d_1/d_t=0,64$, $\alpha=45^\circ$) sous forme adimensionnelle en tenant compte des caractéristiques géométriques du fluide en circulation ainsi que des conditions qui génèrent le mouvement. Nous avons présenté nos résultats sous forme adimensionnelle en faisant intervenir le nombre de Reynolds du mélange Re_m et le nombre de Reynolds d'écoulement, puis nous l'avons comparé aux résultats obtenus par Tanaka et coll., [48] dans le même type de réacteur que celui utilisé dans cette étude (Figure IV.19).

Nous remarquons que ce rapport augmente légèrement avec l'augmentation de Re_m jusqu'à une valeur évaluée à $Re_m=1,5 \cdot 10^4$ et au-delà de celle-ci on obtient un rapport relativement constant. Donc, Selon les valeurs de Re_m , l'hydrodynamique du réacteur torique est caractérisée par trois régimes d'écoulement : un régime laminaire pour un nombre de Reynolds de mélange inférieur à 10^4 , un régime turbulent pour $Re_m > 1,5 \cdot 10^4$, et régime transitoire, entre le régime laminaire et le régime turbulent pour un nombre de Reynolds de mélange compris dans l'intervalle de 10^4 - $1,5 \cdot 10^4$, où ce rapport dépend sur le nombre de Reynolds.

Si on compare les deux mobiles d'agitation, on trouve que le rapport (Re_c/Re_m) est plus grand pour l'hélice, ceci est confirmé par le fait que l'hélice marine engendre une vitesse de circulation plus importante par rapport à celle de la turbine, ce résultat est en bon accord avec celui de Tanaka et coll., [48].

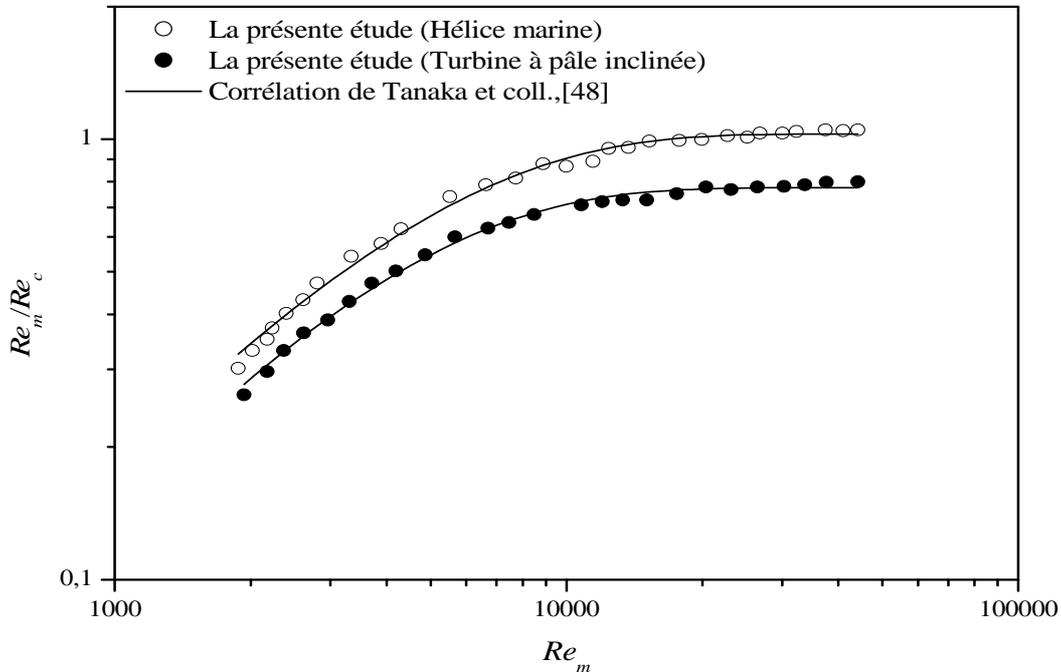


Figure IV.19 Variation de Re_c/Re_m en fonction de Re_m

IV.2.6 Puissance d'agitation

La puissance dissipée est un paramètre clé dans l'étude des réacteurs agités. Cette grandeur détermine à la fois la majeure partie des coûts opératoires de l'unité mais influence aussi les transferts de matière et de chaleur ainsi que le mélange. De plus, la puissance dissipée volumique est un paramètre d'extrapolation qui est parfois maintenu constant.

Expérimentalement, des mesures de couple conduisent à la consommation de puissance. Une mesure de la puissance à vide permet d'évaluer les différentes pertes mécaniques, essentiellement dues aux frottements sur les divers roulements et aux frottements sur l'arbre de rotation et électriques (effet Joule).

La puissance consommée s'obtient par l'équation IV.1 :

$$P = 2\pi N(T - T_0) \quad \text{Équation IV.1}$$

où N est la vitesse de rotation (tr/s), T_0 le couple à vide, et T le couple en charge (N.m). Cette relation suppose évidemment que la puissance à vide est représentative des différentes pertes et que ces dernières sont, à une vitesse de rotation donnée, les mêmes en charge qu'à vide. Numériquement, la puissance utile pour un système d'agitation peut être estimée suivant deux méthodes :

Dans la première méthode la puissance est aussi calculée à partir du couple, qui correspond au moment des forces exercées sur l'agitateur (Équation IV.1).

La deuxième méthode, utilise le taux de dissipation de l'énergie. À chaque agitateur la puissance est déterminée par l'intégrale de la dissipation visqueuse ε sur tout le volume du domaine. Il est équivalent de dire que la puissance d'agitation est entièrement transmise par le mobile d'agitation au milieu du fluide au sein duquel est dissipé sous forme de chaleur.

$$P = \iiint_V \mu \varepsilon dv \quad \text{Équation IV.2}$$

ε étant le taux de dissipation visqueux et V : est le volume totale du réacteur.

Dans ce travail nous avons utilisé la première méthode. La valeur du couple visqueux est obtenue directement par le module de post-traitement des résultats de FLUENT qui intègre la contrainte de cisaillement aux parois.

La figure IV.20 montre l'évolution de la puissance dissipée dans le réacteur torique en fonction de la vitesse d'agitation pour quatre turbine à pale inclinée de 45° et de différents diamètres (II, III, IV et V). Nous remarquons que la puissance dissipée augmente lorsque la vitesse de rotation et le diamètre du mobile augmente, et elle est proportionnelle à $N^3 (d_1/d_i)^{4,5}$.

Murakami et Coll., [45] ont mesuré la puissance dissipée dans le réacteur à boucle de forme rectangulaire. Ils ont trouvé que pour Re_m inférieur à 1000, la puissance consommée est très peu influencée par la variation de l'angle d'inclinaison des pâles du mobile d'agitation. Pour $10^3 < Re_m < 10^4$, ils ont trouvé que le nombre de puissance est proportionnel à $(\sin \alpha)^2$. Ceci est en accord avec les travaux de Lelan et coll., [83] dans un réacteur agité. Des observations similaires ont été reportées par Tanaka et coll., [48] dans le réacteur parfaitement torique avec un exposant égal à 1,5. Pour les réacteurs agités mécaniquement, la puissance dissipée est souvent corrélée à la vitesse d'agitation, aux caractéristiques géométriques du réacteur et du mobile d'agitation. En s'appuyant sur ces résultats, la puissance dissipée dans le réacteur torique peut se mettre sous la forme suivante :

$$P = K D^\varepsilon N^\tau \left(\frac{d_1}{d_t}\right)^\sigma (\sin \alpha)^\omega \quad \text{Équation IV.3}$$

Où les valeurs K , ε , τ , σ et ω sont constantes et dépendent des configurations géométriques du système et des propriétés physico-chimiques du fluide utilisé.

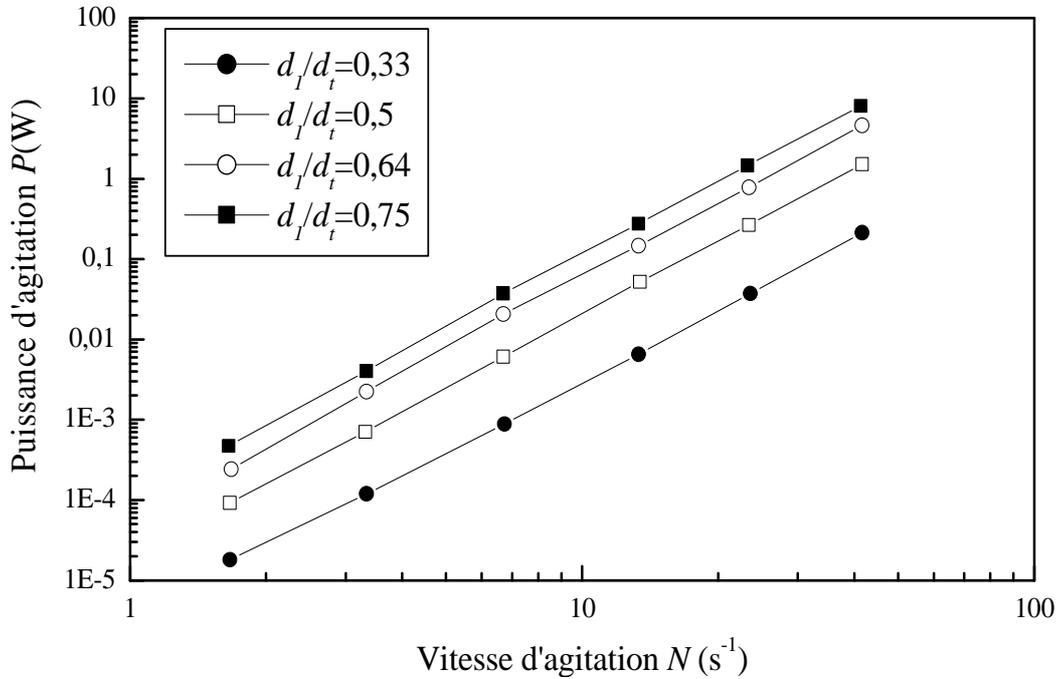


Figure IV.20 Evolution de la puissance dissipée dans le réacteur torique en fonction de la vitesse d'agitation : influence de diamètre du mobile d'agitation

En faisant la régression des résultats numériques sur l'équation IV.3, on trouve les valeurs suivantes pour les constantes : $K = 6,998$, $\varepsilon = \tau = 3$, $\sigma = 4,46$ et $\omega = 2$. On constate que l'exposant de $\sin \alpha$ est moins important que celui de d_1/d_t (équation IV.4). Ceci montre que l'angle d'inclinaison des pâles du mobile d'agitation a un faible effet sur la puissance dissipée.

$$P = 6,998 D^3 N^3 \left(\frac{d_1}{d_t}\right)^{4,46} (\sin \alpha)^2, R^2 = 0,99 \quad \text{Équation IV.4}$$

La comparaison entre le modèle de l'équation IV.4 et les résultats numériques est faite sur la figure IV.21. On constate que les données sont relativement bien prédites si l'on considère les multiples configurations testées. L'erreur moyenne est de $\pm 10\%$.

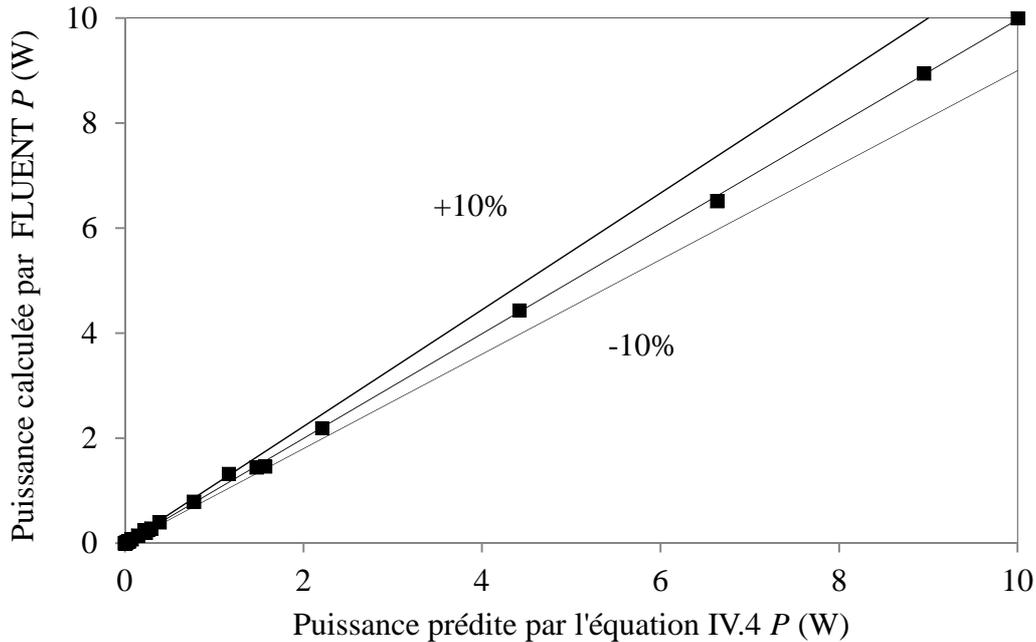


Figure IV.21 Diagramme de parité entre la puissance dissipée calculée par FLUENT et la prédiction par l'équation IV.4

IV.3 Etude de mélange dans le réacteur torique

Une des façons les plus simples de quantifier le mélange dans un réacteur agité est de mesurer une grandeur appelée « temps de mélange ». On définit le temps de mélange t_m comme le temps à partir duquel les variations de concentration suite à l'injection du traceur restent dans une bande de $\pm 5\%$ autour de la valeur finale (cas du t_m , 95%).

Notons ici que le mélange s'effectue à trois échelles différentes [13] :

Macromixing : le mélange est effectué à la plus haute échelle de mouvement du fluide dans la cuve et est caractérisé par le temps de mélange global ;

Mésomixing : le mélange s'effectue à une échelle plus petite que le mouvement général précédent, c'est-à-dire à des tailles inférieures au diamètre de la cuve. Le mélange à cette échelle se rencontre principalement aux points d'alimentation des réacteurs par exemple ;

Micromixing : le mélange s'effectue des plus petites échelles du mouvement du fluide, (échelle de Kolmogorov) jusqu'à la diffusion moléculaire (échelle de Batchelor). Le mélange à l'échelle micro est la principale limitation des réactions chimiques.

Les échelles de mélange considérées dans cette étude sont l'échelle macro et méso. Le temps de mélange sera donc le temps nécessaire pour atteindre l'homogénéité à ce niveau. Il est

supérieur et directement proportionnel au temps de circulation d'une particule dans le réacteur. Ce temps de circulation correspond au temps nécessaire à une particule pour revenir à sa position initiale en suivant une ligne de courant et est mathématiquement défini de la façon suivante :

$$t_c = \frac{V}{Q} \quad \text{Équation IV.5}$$

où Q est le débit de fluide généré par l'agitateur.

Dans une configuration donnée, le temps de circulation (Figure IV.22) est estimé à partir de la courbe temporelle en concentration réduite de traceur. Il correspond aux passages successifs du traceur devant la sonde de mesure. Ce temps est représentatif de la dispersion axiale or que le temps de mélange est représentatif de la dispersion axiale et radiale.

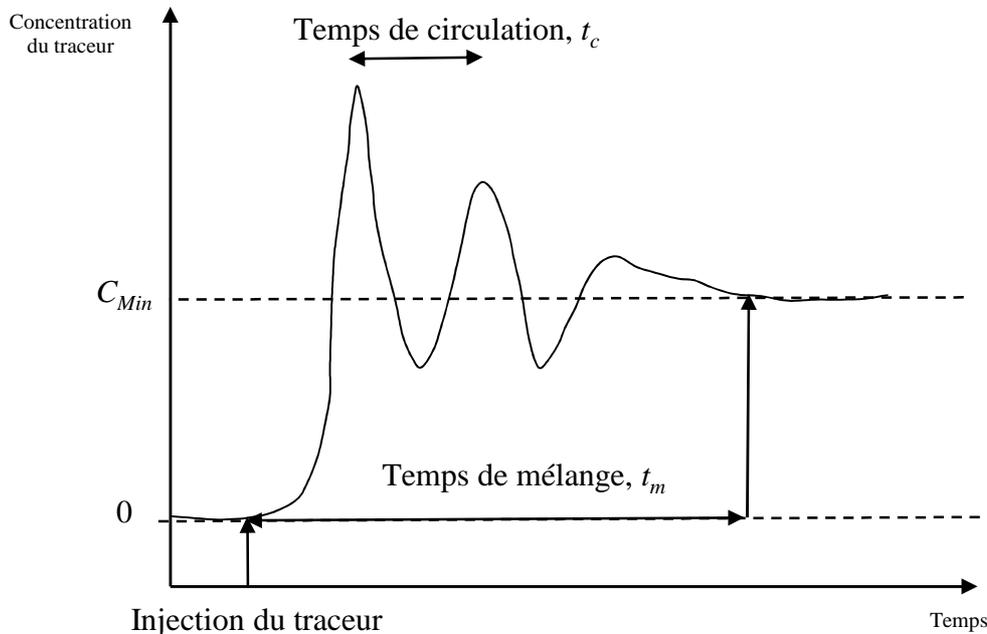


Figure IV.22 Concentration d'un traceur en fonction du temps [84]

Dans cette partie, l'outil numérique est utilisé pour étudier l'effet du type du mobile d'agitation, le diamètre de la pale et l'angle d'inclinaison de la pale sur le temps de mélange. Se rapprochant de l'étude expérimentale, le temps de mélange est estimé en déterminant l'évolution temporelle de la concentration du traceur dans le réacteur, qui est obtenu à partir de la résolution de l'équation moyenne de transport du traceur. Cette équation de transport est définie par Fluent, comme suit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(D_j + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial C}{\partial x_i} \right] \quad \text{Équation IV.6}$$

où C est la concentration du traceur passif, D_j est le coefficient de diffusion de la masse dans le régime laminaire et U_i est la composante de vitesse moyenne. Les valeurs locales de la viscosité turbulente μ_t sont obtenues à partir du modèle de turbulence, et seules les valeurs de turbulence du nombre de Schmidt doivent être définies pour calculer le coefficient de diffusion turbulente Dj_t (Équation IV.7).

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D j_t} \quad \text{Équation IV.7}$$

Dans cette étude, les différentes valeurs du nombre de Sc_t sont comprises entre 0 à 1, en fonction du régime d'écoulement [85-87].

La simulation de mélange a été démarrée en ajoutant instantanément le traceur au centre de la sortie du premier coude. Le champ d'écoulement n'est pas affecté par l'équation de transport de masse puisque le traceur utilisé est passif ; ainsi, seule l'équation de transport de masse est résolue en utilisant les résultats de flux de champ convergent. Pour déterminer l'évolution moyenne de la concentration du traceur par rapport au temps, une résolution instationnaire a été réalisée. Le schéma implicite du second ordre a été utilisé pour la discrétisation du temps. Pour chaque cas simulé différentes résolutions ont été effectuées pour vérifier que le temps de calcul est suffisamment faible pour ne pas affecter le calcul de la dispersion. L'évolution temporelle de la concentration du traceur a été enregistrée à la même position où a été injecté le traceur, à savoir, à la sortie du premier coude (Figure IV.23).

L'évolution typique des concentrations du traceur pour l'hélice à deux vitesses d'agitation est représentée dans la figure IV.24 : $N = 900$ rpm et $N = 1000$ rpm, ce qui correspond au nombre de Reynolds respectivement égal à 68000 et à 75500. La concentration moyenne du traceur sur le plan d'évolution a été normalisée par la concentration obtenue après la dilution totale C_{min} , qui représente la concentration homogène du traceur. En général, on constate que tous les profils de concentration du traceur prédit présentent des fluctuations initiales, qui se désintègrent avec le temps et finissent par atteindre une valeur stable. Cependant, le temps nécessaire pour l'apparition du premier pic de concentration, la hauteur relative à ce pic et le temps nécessaire pour que le profil de concentration atteigne la concentration homogène finale dépend principalement du type de l'agitateur et de sa vitesse d'agitation.

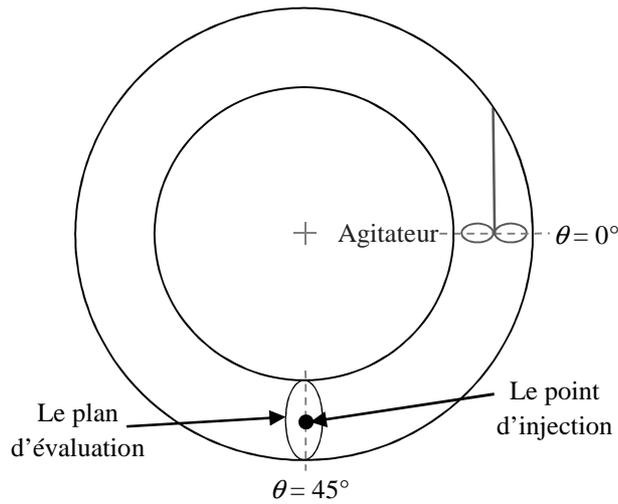


Figure IV.23 Localisation du point d'injection et du plan d'évaluation de la concentration du traceur injecté

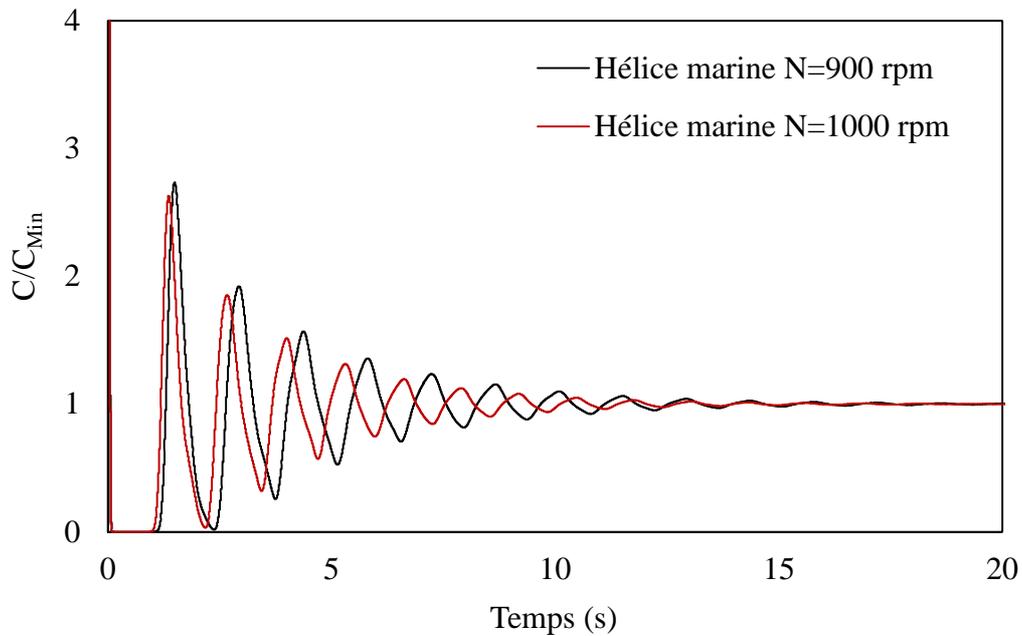


Figure IV.24 Dispersion du traceur pour l'hélice marine pour deux vitesse d'agitation $N=900$ rpm et $N=1000$ rpm

IV.3.1 Influence de type du mobile d'agitation

Les valeurs obtenues du temps de mélange pour les différentes conditions sont affichées en fonction du nombre de Reynolds dans la figure IV.25. Le temps de mélange a été déterminé à l'instant où la concentration prédite a atteint la concentration finale homogène avec une valeur seuil de 5%.

Comme cela est représenté sur la figure IV.25, le temps de mélange diminue rapidement avec l'augmentation du nombre de Reynolds de mélange et atteint une valeur constante pour Re_m supérieure à 30000. Cependant, les temps de mélange obtenus avec la turbine à pale inclinée apparaissent inférieurs à ceux obtenus avec l'hélice marine, en particulier pour de faibles nombres de Reynolds de mélange. Ce résultat est en bon accord avec celui de Tanaka et coll., [48]. Un autre paramètre important est à analyser, c'est le temps de mélange adimensionnel Nt_m [88]. Dans des cuves agitées, ce paramètre est indépendant du nombre de Reynolds de mélange pour le régime turbulent ($Re_m > 10^4$). Dans la géométrie étudiée, l'évolution du temps de mélange adimensionnel suggère qu'un régime d'écoulement hautement turbulent tend à atteindre à un nombre de Reynolds $Re_m = 30000$ (Figure IV.25).

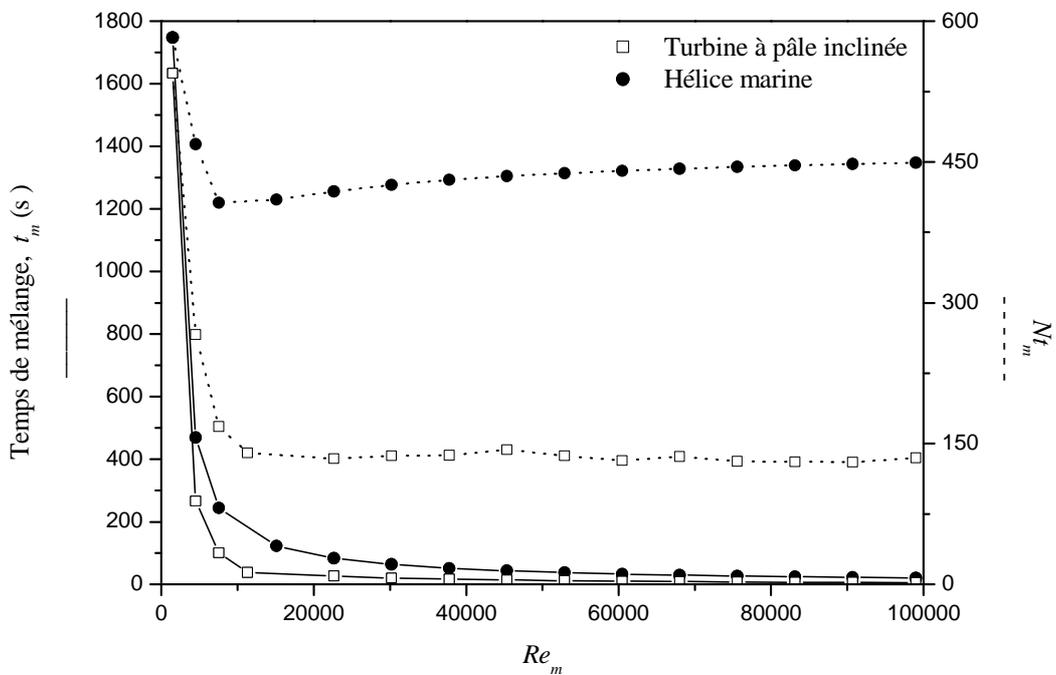


Figure IV.25 Variation du temps de mélange en fonction du nombre de Reynolds

Afin d'évaluer l'efficacité des différents systèmes de mélange, le modèle original de Nienow [89] est appliqué dans les cas d'un réacteur torique. Ce modèle relie l'évolution du temps de mélange à la puissance consommée spécifique par l'équation suivante :

$$t_m = b \left(\frac{P}{V} \right)^{-1/3} \quad \text{Équation IV.8}$$

Où t_m est le temps de mélange, P/V est la puissance consommée spécifique et b est une constante en fonction du type du mobile d'agitation et des caractéristiques géométriques du réacteur. La constante de proportionnalité b est déterminée en ajustant les données expérimentales du temps de mélange avec cette équation.

La figure IV.26 montre l'évolution du temps de mélange et du temps de circulation en fonction de la puissance consommée spécifique pour l'hélice marine et la turbine à pôle inclinée. Comme l'ont montré les valeurs du temps de mélange, l'hélice marine semble donner un temps de mélange plus lent pour une puissance dissipée spécifique donnée. La turbine à pôle inclinée permet ainsi un mélange efficace par rapport à l'hélice marine. Ceci est expliqué par la turbulence intense causée par la turbine à pôle inclinée, permettant une amélioration de l'efficacité du mélange dans le réacteur torique.

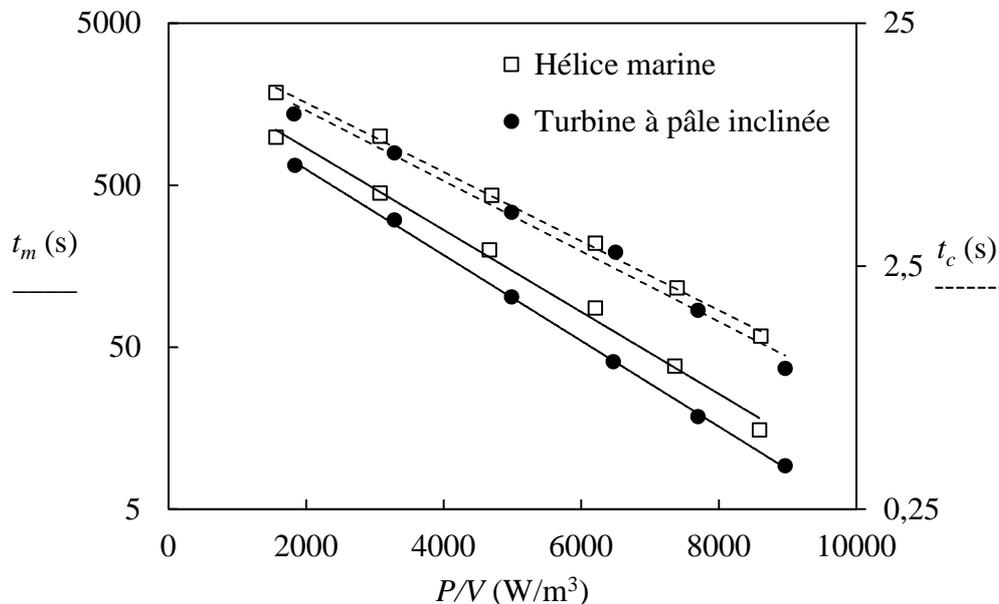


Figure IV.26 Variation du temps de mélange et temps de circulation en fonction de la puissance consommée spécifique

En se basant sur l'équation IV.8, l'évolution du mélange déterminée en termes de puissance dissipée spécifique et les corrélations quantitatives pour les deux mobiles d'agitation, sont données dans la figure IV.26. Les valeurs de b obtenues dans la présente étude comparées avec des valeurs classiques, dans les cuves agitées montrent que le temps de mélange dans le réacteur torique reste largement plus élevé que dans des cuves agitées équipées de turbine à pôle inclinée, où les valeurs de b varient entre 80 et 100 [90]. Cela confirme les résultats obtenus par Boesinger et coll., [58], où ils ont comparé les performances de réacteur torique et de la cuve

agitée en se basant sur la même puissance consommée. En comparant les résultats de temps de circulation, malgré l'effet de pompage intense de l'hélice marine, un temps de circulation presque similaire est constaté pour les deux mobiles d'agitation, ceci est certainement expliqué par l'importance de la surface de pompage (nombre de pâles), dans le cas de la turbine à pale inclinée, et ainsi compense la différence d'efficacité de pompage axial avec l'hélice marine.

IV.3.2 Influence des caractéristiques géométriques du mobile d'agitation

IV.3.2.1 Influence de diamètre du mobile d'agitation

Le diamètre du mobile d'agitation joue un rôle important dans le régime d'écoulement, ce qui affecte directement le temps de mélange et la puissance dissipée volumique. Dans ce travail, l'effet du diamètre du mobile d'agitation sur le temps de mélange a été étudiée en utilisant une turbine à pale inclinée de 45° . Les valeurs du rapport du diamètre du mobile d'agitation sur le diamètre du réacteur utilisées ont été respectivement 0,33, 0,5, 0,64 et 0,75. Pour déterminer la valeur optimale de ce rapport (d_1/d_t), les valeurs du temps de mélange sont représentées dans la figure IV.27 en fonction du rapport du diamètre du mobile d'agitation sur le diamètre du réacteur d_1/d_t .

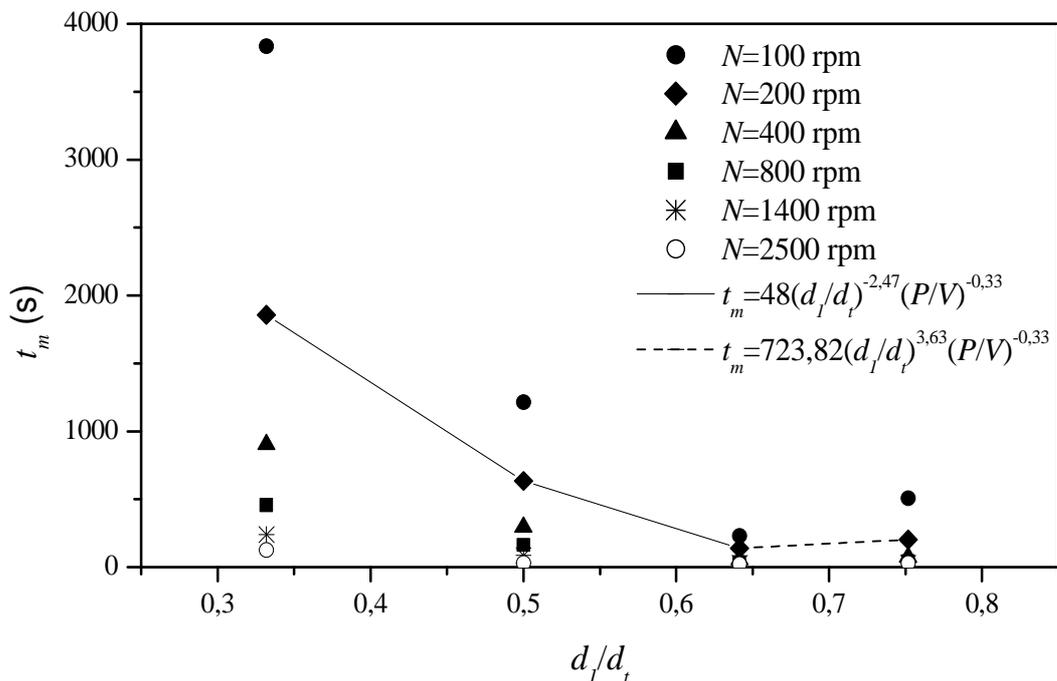


Figure IV.27 Influence du diamètre du mobile d'agitation sur le temps de mélange pour différentes vitesses d'agitation ($\varphi = 45^\circ$)

Ces résultats montrent que le temps de mélange obtenu par la turbine à pale inclinée avec un rapport d_1/d_t de 0,64 est inférieur à celui obtenu pour la turbine à pale inclinée avec un

rapport d_1/d_t plus grand, qui présente un du temps de mélange réduit par rapport aux mobiles d'agitation avec un rapport d_1/d_t de 0,5 et de 0,33. La diminution de l'efficacité du mélange d'un mobile d'agitation de grand diamètre peut être expliquée par la variation de l'écoulement en aval de la turbine à pale inclinée due au rapport du diamètre du mobile d'agitation sur le diamètre du réacteur, qui s'avère plus proche de l'écoulement radial si le rapport d_1/d_t est supérieur à 0,55 [13]. Pour vérifier cela, les structures d'écoulement générées par deux mobiles d'agitation avec d_1/d_t égal à 0,5 et à 0,75 ont été représentées dans la figure IV.28 en traçant les champs de vitesse dans la zone d'agitateur pour $Re_m = 22721$.

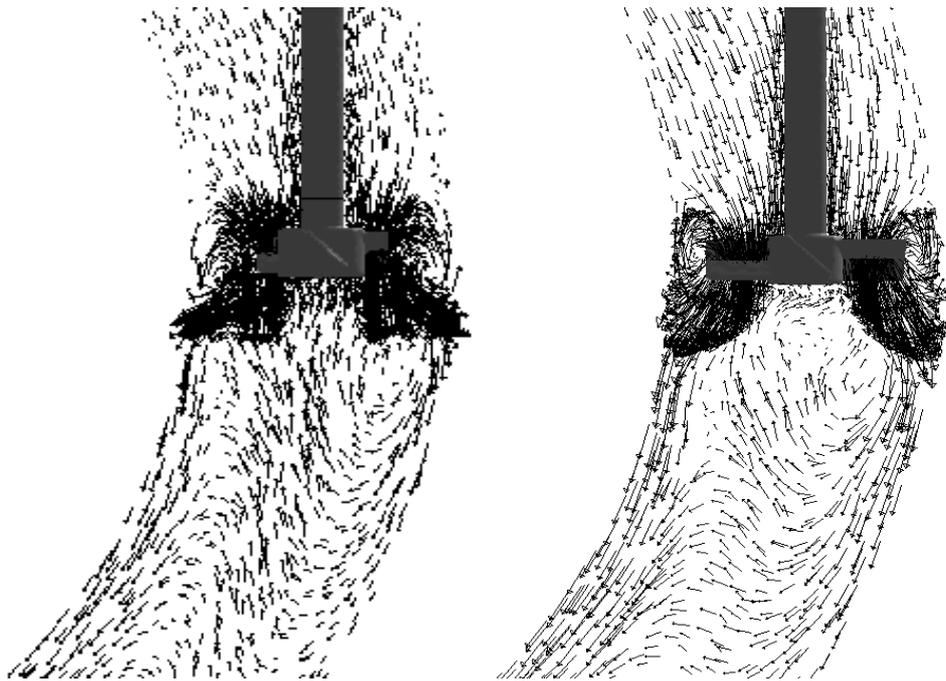


Figure IV.28 Champs de vitesse dans la zone de l'agitateur pour $Re_m = 22721$
(gauche : $d_1/d_t = 0,5$; droite : $d_1/d_t = 0,75$)

La différence de la structure d'écoulement est clairement visible. Pour le plus petit agitateur ($d_1/d_t = 0,5$), l'écoulement en aval de l'agitateur est déchargé dans les deux directions axiale et radiale et une petite boucle de circulation secondaire est formée dans la partie externe du coude, alors que, pour le plus grand diamètre de l'agitateur ($d_1/d_t = 0,75$), la déviation de l'angle de décharge de l'écoulement de la direction axiale vers la direction radiale a augmenté la taille et l'intensité de la boucle de circulation secondaire, ce qui se traduit par une mauvaise circulation dans le réacteur torique, et donc des valeurs plus élevées du temps de mélange. Ces modèles d'écoulement concordent bien avec les résultats expérimentaux obtenus par Mao et coll., [91], Kresta et coll., [92] et Tsuiet coll., [93]. Enfin, il faut noter que les valeurs élevées du temps de

mélange obtenues pour le petit rapport ($d_1/d_t = 0,33$ et $d_1/d_t = 0,5$), en particulier pour les faibles vitesses d'agitation, sont expliquées par les faibles vitesses de circulation dans ces conditions en raison du piégeage des particules de fluide dans l'écoulement tourbillonnaire en aval de la turbine à pôle inclinée.

Afin d'obtenir la relation quantitative entre le temps de mélange t_m et le rapport du diamètre de l'agitateur sur le diamètre du réacteur, le temps de mélange t_m peut être exprimé par l'équation IV.9 :

$$t_m = c \left(\frac{d_1}{d_t} \right)^\beta \left(\frac{P}{V} \right)^\gamma \quad \text{Équation IV.9}$$

En comparaison avec les résultats numériques (Figure IV.27), deux corrélations sont obtenues :

$$t_m = 48 \left(\frac{d_1}{d_t} \right)^{-2,47} \left(\frac{P}{V} \right)^{-0,33} \quad \frac{d_1}{d_t} \leq 0,65 \quad \text{Équation IV.10}$$

$$t_m = 723,82 \left(\frac{d_1}{d_t} \right)^{3,63} \left(\frac{P}{V} \right)^{-0,33} \quad \frac{d_1}{d_t} \geq 0,65 \quad \text{Équation IV.11}$$

On constate que la valeur absolue de l'exposant de d_1/d_t est supérieure à celle de la puissance dissipée spécifique, ce qui signifie que l'effet du rapport d_1/d_t sur le temps de mélange est supérieur à celui de la puissance dissipée. L'équation IV.11 montre également que, l'exposant de d_1/d_t est positif, ce qui reflète l'augmentation du temps de mélange pour un diamètre d'agitateur plus grand ($d_1/d_t > 0,64$).

IV.3.2.1 Influence de l'angle d'inclinaison des pâles du mobile d'agitation

L'effet de l'angle de pôle de l'agitateur est étudié en utilisant la turbine à pôle inclinée avec un rapport d_1/d_t de 0,64. Les angles d'inclinaison de la pôle sont $\alpha = 30^\circ$, $\alpha = 45^\circ$ et $\alpha = 60^\circ$. Les valeurs du temps de mélange obtenues pour différentes conditions sont représentées en fonction de $\sin \alpha$ dans la figure IV.29. Ces résultats montrent que, le temps de mélange est proportionnel au carré de $(\sin \alpha)$ et la constante de proportionnalité dépend de la vitesse d'agitation.

Pour montrer l'effet de la puissance dissipée spécifique, le rapport du diamètre de l'agitateur sur le diamètre du réacteur et l'angle de pôle de l'agitateur sur le temps de mélange, l'équation IV.9 s'écrit sous la forme :

$$t_m = f \left(\frac{d_1}{d_t} \right)^\beta \left(\frac{P}{V} \right)^\gamma (\sin \alpha)^\delta \quad \text{Équation IV.12}$$

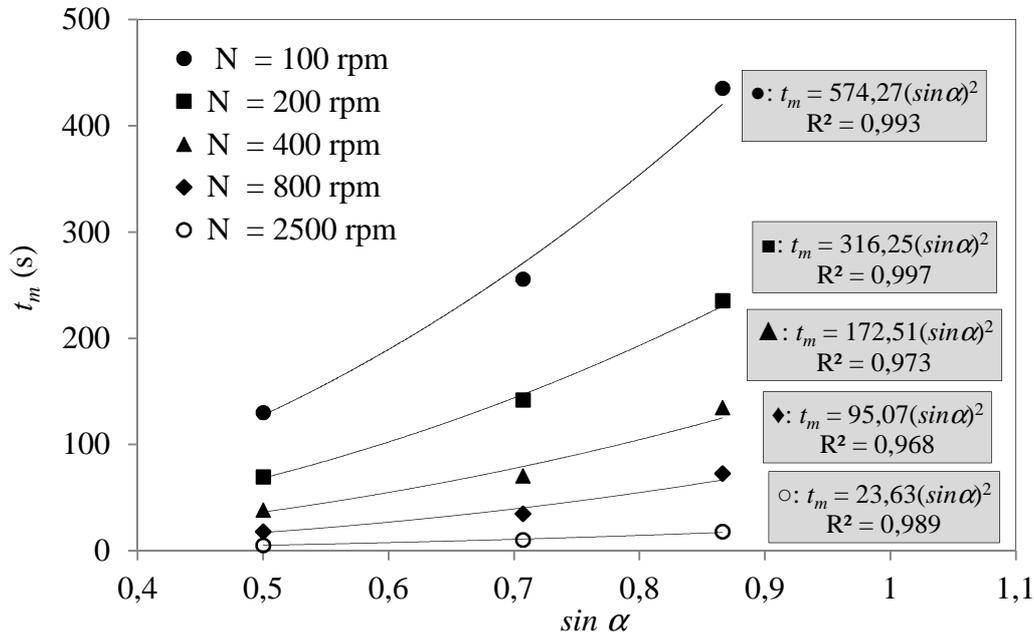


Figure IV.29 Influence de l'angle d'inclinaison des pâles du mobile d'agitation sur le temps de mélange pour différents vitesses d'agitation ($d_1/d_t = 0,64$)

En fonction des résultats numériques de cette étude, deux corrélations pour le temps de mélange sont données par :

$$t_m = 75,86 \left(\frac{d_1}{d_t} \right)^{-2,47} \left(\frac{P}{V} \right)^{-0,33} (\sin \alpha)^{1,55} \quad \frac{d_1}{d_t} \leq 0,65 \quad \text{Équation IV.13}$$

$$t_m = 1144,43 \left(\frac{d_1}{d_t} \right)^{3,63} \left(\frac{P}{V} \right)^{-0,33} (\sin \alpha)^{1,55} \quad \frac{d_1}{d_t} \geq 0,65 \quad \text{Équation IV.14}$$

La figure IV.30 montre la comparaison entre les résultats numériques de t_m et ceux prédits par les corrélations empiriques. On note que toutes les données prédites sont déviées des résultats numériques avec une erreur moyenne de $\pm 10\%$. La corrélation est applicable dans un intervalle de P/V de $0,05-4000 \text{ W/m}^3$, un intervalle de d_1/d_t de $0,33-0,75$ et un intervalle de $\sin \alpha$ de $0,50-0,87$. D'autres recherches sont recommandées afin de minimiser l'erreur pour l'application de la corrélation dans des intervalles plus larges de P/V et de d_1/d_t .

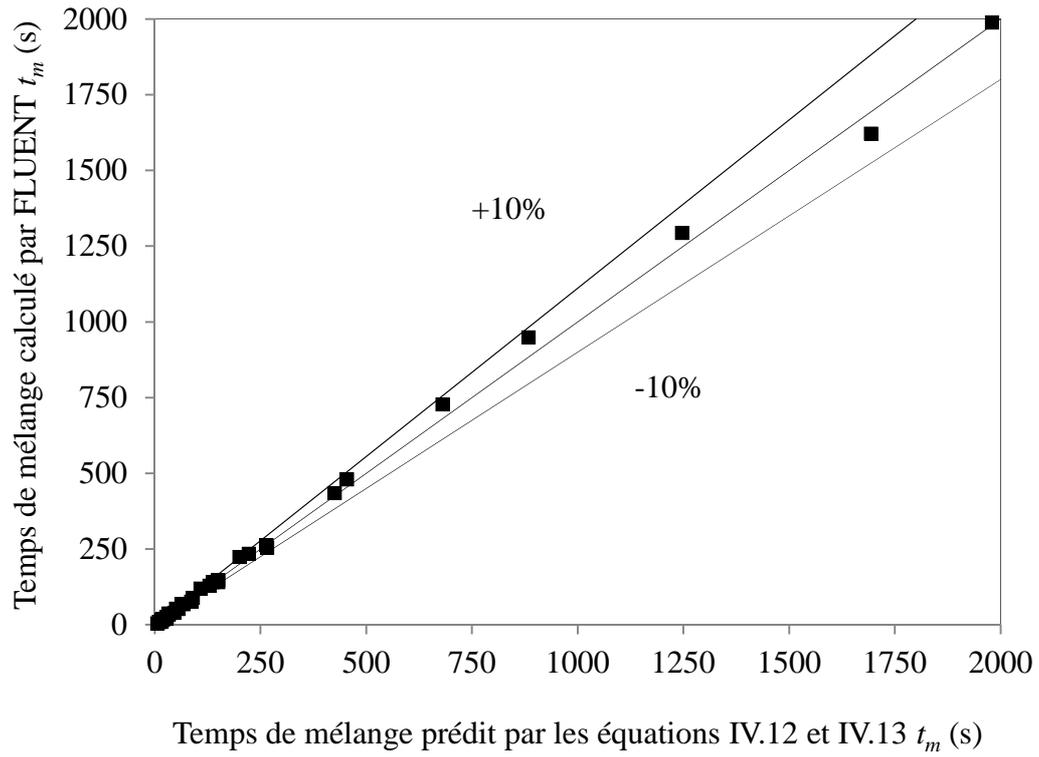


Figure IV. 30 Diagramme de parité entre le temps de mélange calculée par FLUENT et les prédictions par l'équation IV.13 et l'équation IV.14

CONCLUSION

L'objectif de ce travail a été d'utiliser les capacités de la CFD pour modéliser le comportement l'hydrodynamique d'un réacteur torique. Dans le but de valider les différents modèles développés, les résultats des prédictions numériques sont comparés aux résultats expérimentaux de Khalid., [17]. Les différents paramètres que nous avons modélisés sont les champs de vitesse et de turbulence dans le réacteur la puissance consommée par le mobile d'agitation et la distribution des temps de séjour (DTS).

La comparaison des modèles testés avec les profils expérimentaux nous a permis de dire que la combinaison optimale de modèle de turbulence/schéma numérique dépend de ce qui est attendu du modèle. En effet, nous avons pu constater que la plupart des modèles représentent les champs de vitesse moyens assez fidèlement. Ainsi, un surcout de calcul s'avère inutile si ce sont les grandeurs moyennes qui sont recherchées, et un schéma simple de premier ordre (First Order Upwind) est largement suffisant, sachant que ceci permet de gagner en temps de calcul et en finesse du maillage. En revanche, la modélisation de la turbulence nécessite plus de précaution. La combinaison du modèle de turbulence $k-\varepsilon$ RNG au schéma numérique Power Law (PL) semble donner les meilleurs résultats, même si ces derniers ne s'éloignent pas de ceux donnés par le modèle $k-\varepsilon$ standard combiné au schéma Second Order Upwind (SOU). Cependant ce dernier est plus coûteux en termes de temps de calcul. Les performances du schéma PL viennent certainement du fait qu'il est dérivé à partir de la solution exacte d'un problème de convection-diffusion. Enfin, pour des raisons liées à la stabilité des calculs, le schéma FOU peut également être utilisé en prenant le soin de réduire la diffusion numérique. Ainsi, nous avons démontré que le modèle $k-\varepsilon$ RNG est satisfaisant sur une plus large gamme de conditions opératoires.

L'analyse des résultats de la simulation numérique nous a permis d'avoir une vue d'ensemble de l'écoulement dans le réacteur torique. Elle met en évidence trois types de structures hydrodynamiques, sensiblement différents, suivant la distance par rapport à l'emplacement de l'agitateur :

- Une zone de mélange dans la partie située juste en aval de l'agitateur qui crée une zone de recirculation dans la partie centrale accompagné d'une élévation de la vitesse locale en dehors de l'axe centrale. Ce mélange s'accroît avec l'augmentation de la vitesse d'agitation.

- Une zone d'interaction entre le mouvement hélicoïdale généré par la rotation de l'agitateur et l'écoulement secondaire induit par la présence des coudes. Ce comportement est dû à l'atténuation rapide de l'écoulement tourbillonnaire généré par le mobile d'agitation le long de la circonférence du réacteur torique. Avec l'augmentation de la vitesse d'agitation, cette zone de compétition s'étend jusqu'à la moitié du troisième coude ($\theta=225^\circ$).
- Enfin, un écoulement axial en amont de l'agitateur dû à l'aspiration de celui-ci.

La caractérisation de l'écoulement et du mélange dans des réacteurs toriques a permis de faire les constatations suivantes :

- La géométrie toroïdale a l'avantage de présenter un mélange radial efficace dû à l'écoulement hélicoïdal généré par le mobile d'agitation et accentué au niveau des coudes. Par conséquent, ce type de réacteur ne présente pas de volume mort, ce qui permet une extrapolation plus aisée de ces performances par rapport à un réacteur agité.
- Les paramètres influant sur l'écoulement et le mélange sont la vitesse d'agitation, le diamètre du mobile, l'angle d'inclinaison des pales et le type de mobile d'agitation. En effet lorsque la vitesse augmente, les temps moyens de circulation diminuent et leurs variations ont été formulées sous forme de corrélations.
- L'hydrodynamique du réacteur torique est caractérisée par trois régimes d'écoulement : un régime laminaire pour un nombre de Reynolds de mélange inférieur à 10^4 , un régime turbulent pour $Re_m > 1,5 \cdot 10^4$, et régime transitoire, entre le régime laminaire et le régime turbulent pour un nombre de Reynolds de mélange compris dans l'intervalle de 10^4 - $1,5 \cdot 10^4$.
- La connaissance des caractéristiques hydrodynamiques de l'écoulement nous a permis d'évaluer l'influence de la vitesse d'agitation, le diamètre du mobile et l'angle d'inclinaison des pales d'un point de vue énergétique. Ces résultats ont permis de corréler la puissance dissipée dans le réacteur torique aux conditions d'agitation et aux caractéristiques géométriques du réacteur et du mobile d'agitation.
- Pour la caractérisation du mélange à l'intérieur du réacteur, nous avons recours souvent au temps de mélange. La représentation de ce dernier en fonction la puissance consommée spécifique a permis de montrer que la turbine à pale inclinée avec un rapport d_1/d_t de 0,64 et un angle d'inclinaison des pales de 30° présente une meilleure efficacité pour le mélange.

- L'étude de temps de mélange dans le cas d'une turbine à pôle inclinée a montré que ce dernier est proportionnellement à la puissance consommée spécifique et à l'angle d'inclinaison des pales. Les valeurs de la constante de proportionnalité obtenue dans la présente étude comparées avec des valeurs classiques, dans les cuves agitées a montré que le temps de mélange dans le réacteur torique reste largement plus élevé que dans des cuves agitées équipées de turbine à pôle inclinée
- L'étude de l'influence de diamètre du mobile d'agitation a montré que le temps de mélange diminue avec l'augmentation de diamètre du mobile d'agitation jusqu'à un rapport d_1/d_t de 0,64 et au-delà de celle-ci le temps de mélange augmente. Afin de prédire cette variation, nous avons proposé des corrélations en se basant sur le modèle original de Nienow tenant compte des caractéristiques du mobile d'agitation.

Ce travail constitue une première étude numérique de l'hydrodynamique dans un réacteur de forme toroïdale. Pour une meilleure connaissance de cet écoulement toroïdal et notamment de l'interaction entre les tourbillons de Dean générés dans les courbures et la structure tourbillonnaire due à l'agitateur, il serait intéressant de mettre en œuvre une visualisation expérimentale de l'écoulement dans les différentes sections transversales du tore. D'autre part, l'approfondissement de la relation entre les caractéristiques du mélange et les paramètres hydrodynamiques est nécessaire, en particulier, en analysant l'écoulement toroïdal généré par les différents types d'agitateur. De même, l'influence de rayon de courbure et des longueurs droites sur la structure de l'écoulement semble aussi des paramètres importants à étudier. En conclusion, le domaine d'investigation sur le réacteur torique reste très ouvert, d'autant que l'application industrielle de ce type de réacteur nécessite l'étude du réacteur torique continu, avec l'évolution de l'écoulement due à la présence du système d'entrée-sortie du fluide.

Bibliographie

Bibliographie

- [1] Agricola, Georgius. (1556). *De Re Metallica*.
- [2] Rushton, J. H., Costich, E. W., Everett, H. J. (1950). Power characteristics of mixing impellers. *Chemical Engineering Progress*, 46(9), 467-476.
- [3] Uhl, V.M., Gray, J.B. (1966). *Mixing: Theory and Practice*. Academic Press, New York, USA.
- [4] Nagata, S., Yamamoto, K. (1966). Criteria for the Scaling Up of Mixing Vessels. *Department of Chemical Engineering, Tokyo University*, 76-85.
- [5] Nagata, S., Yamamoto, K., Hashimoto, K. (1959). Flow patterns of liquids in a Cylindrical Mixing Vessel with Baffles. *Department of Chemical Engineering, Tokyo University*, 260-274.
- [6] Nagata, S., Yoshioka, N., Yokoyama, T. (1955). Studies on the Power Requirement of Mixing Impellers (I). *Department of Chemical Engineering, Tokyo University*, 185-175.
- [7] Brennan, D. J., Lehrer, I. H. (1976). Impeller mixing in vessels: experimental studies on the influence of some parameters and formulation of a general mixing time equation. *Chemical Engineering Research and Design*, 54, 139-152.
- [8] Le Lan, A., Angelino, H. (1972). Etude du vortex dans les cuves agitées. *Chemical Engineering Science*, 27(11), 1969-1978.
- [9] Rieger, F., Ditl, P., Novák, V. (1979). Vortex depth in mixed unbaffled vessels. *Chemical Engineering Science*, 34(3), 397-403.
- [10] Zlokarnik, M. (1971). Trombentiefe beim Rhren in unbewehrten Behltern. *Chemie Ingenieur Technik*, 43(18), 1028-1030.

- [11] Nagata, T., Yamamoto, T., Yokoyama, T. (1957). Studies on the Power Requirement of Mixing Impellers. *Memoirs. Kyoto University Japan*, 19, 274-290,
- [12] Heniche, M., Tanguy, P. A. (2008). Finite element modeling of viscous mixing: A review. *Chemical Product and Process Modeling*, 3(1), 1934-2659.
- [13] Paul, E.L., Atiemo-Obeng, V.A., Kresta, S.M. (2004). Handbook of industrial mixing: science and practice. Ed Wiley Interscience
- [14] Cabaret, F., Fradette, L. (2011). Conception des opérations industrielles d'agitation et de mélange. *GCH6112a, Montréal, Canada*.
- [15] Sato, Y., Murakami, Y., Hirose, T., Hashiguchi, Y. (1979). Flow pattern, circulation velocity and pressure loss in loop reactor. *Journal of chemical Engineering of Japan*, 12(6), 448-453.
- [16] Laederach, H., Widmen, F. (1984). Le bioréacteur torique. *Information chimie*, 249, 157-160.
- [17] Khalid, A. (1993). Etude de l'écoulement généré par une hélice dans un réacteur de forme toroïdale. *Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Nantes, Université de Nantes, Nantes, France*.
- [18] Dean, W.R. (1927). Note on the motion of fluid in a curved pipe. *Philosophical Magazine*, 4(20), 208-223.
- [19] Dean W.R. (1928). The streamline motion of fluid in a curved pipe. *Philosophical Magazine*, 5(30), 673-695.
- [20] Nienow, A.W. (1996). Mixing in the Process Industries. Second edition, *Butterworth Heinemann, London*.
- [21] Naude, I. (1998). Simulation des écoulements en cuve agitée : Contribution à l'optimisation du choix d'un agitateur. *Thèse de doctorat, INP Toulouse, Toulouse, France*.
- [22] Guntzburger, Y., Fradette, L., Farhat, M., Heniche, M., Tanguy, P. A., Takenaka, K. (2009). Effect of the geometry on the performance of the Maxblend (TM) impeller with viscous Newtonian fluids. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 4(5), 528-536.
- [23] Herrajani, R., Tatterson, G. B. (2004). Mechanically Stirred Vessels. In E. L. Paul, V. A. Atiemo-Obeng, S. M. Kresta (Eds.), *Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice*, 345-390.

- [24] Nienow, A. W., Miles, D. (1971). Impeller Power Numbers in Closed Vessels. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 10(1), 41-43.
- [25] Bakker, A., Fasano, J. B., Myers, K. J. (1994). Effects of flow pattern on solid distribution in a stirred tank. , *Proceedings 8th European Conference of Mixing (IChemE Symp Series)*, 136, 1-8.
- [26] Oldshue, J. Y. (1961). Mixing of solid-liquid suspensions. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 50(6), 523-530.
- [27] Tamburini, A., Cipollina, A., Micale, G., Brucato, A. (2009). Particle distribution in an unbaffled stirred vessel by a novel laser image analysis technique. *AIDIC Conference Series*, 9, 319-328.
- [28] Wang, S., Parthasarathy, R., Bong, E. Y., Wu, J., & Slatter, P. (2012). Suspension of ultrahigh concentration solids in an agitated vessel. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 58(4), 1291-1298.
- [29] Damas, M. (2005). Méthodologie de Modélisation et D'optimisation d'opération de Dispersion Liquide-Liquide en Cuve Agitée. *Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, France.*
- [30] Xuereb, C., Poux, M., et Bertrand, J. (2006). Agitation et Mélange Aspects fondamentaux et applications industrielles.
- [31] Baudou, C. (1997). Agitation par des Systèmes Axiaux Simples ou Multi-Etages. Obtention de L'Hydrodynamique par Vélocimétrie Laser à Effet Doppler. *Thèse de doctorat, INP, Toulouse, France.*
- [32] Rewatkar, V., Joshi J.B. (1991). Effect of Impeller Design on Liquid Phase Mixing in Mechanically Agitated Reactors. *Chemical Engineering Communications*, 102(1) ,1-33.
- [33] Roustan, M., Pharamond, J. C. (1999). Agitation et Mélange : Concepts théoriques de base. *Technique de l'ingénieur*, J 3800.
- [34] Khang, J.S., Levenspiel, O. (1976). New scale up and design method for stirred agited batch mixing vessels. *Chemical Engineering Science*, 31,569-577
- [35] Prochazka, J., Landau, J. (1961). Homogenisation of miscible liquids in the turbulent region. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, 26, 2961-2973.

- [36] Eustice, J. (1911). Experiments on streamline motion in curved pipes. *Proceedings of the Royal Society of London*, 85(576), 119-131.
- [37] Vastisth, S., Kumar, V., Nigam, K.D.P. (2008). A review on the potential applications of curved geometries in process industry, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47, 3291-3337.
- [38] Naphon, P., Wongwises, S. A. (2006). Review of flow and heat transfer characteristics in curved tubes, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 10, 463-490.
- [39] Mori, Y., Uchida Y., Ukon T. (1971). Forced convective heat transfer in a curved channel with a square cross section, *International Journal of heat and Mass Transfer*, 14, 1787-1805.
- [40] Fellouah, H., Castelain, C., Ould el Moctar, A., Peerhossaini, H. (2006). A criterion for detection of the onset of Dean instability in Newtonian fluids, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 25, 505-531.
- [41] Sugiyama, S., Hayashi T., Yamazaki K. (1983). Flow characteristics in the curved rectangular channels, *Bulletin of the Japan Society of Mechanical Engineering*, 26 (216), 964-969.
- [42] Jiang, F., Drese, K.S., Hardt, S., Küpper, M., Schönfeld, F. (2004). Helical flows and chaotic mixing in curved micro channels, *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 50(9), 2297-2305.
- [43] Joseph, B., Smith, E.P., Adler, R.J. (1975). Numerical treatment of laminar flow in helically coiled tubes of square cross section, *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 21 (5), 965-974.
- [44] Norwood, K.W., Metzner, B. (1960). Flow patterns and mixing rates in agitated vessels. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 6, 432-437.
- [45] Murakami, Y., Hirose. (1982). Power consumption and pumping characteristics in a loop reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 21, 273-276.
- [46] Krebsler, U., Meyer, H. P., Fichter, A. (1988). A comparison between the performance of continuously stirred-tank bioreactor and a torus bioreactor with respect to highly viscous culture broths. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 43(2), 107-116.

- [47] Tanaka, M., Oshimae. (1988). Dispersing behaviour of droplets in suspension polymerisation of styrene in a loop reactor. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 66, 29-35.
- [48] Tanaka, M., Sendai, T., Hosogai, K. (1989). Flowing characteristics in a circular loop reactor. *Chemical Engineering Research and Design*, 67, 423- 427.
- [49] Der yuan, Le., Kuo, J. F. (1990). Study on the continuous loop tubular reactor for emulsion polymerisation of styrene. *Polymer Engineering and Science*, 30(3), 187-192.
- [50] Der yuan, Le., Kuo, J. F., Wang, J. H. (1990). The performance of a continuous loop tubular reactor for emulsion polymerisation of styrene. *Journal of chemical Engineering of Japan*, 23(3) 290-296.
- [51] Hosogai, K., Tanaka, M. (1992). Study of suspension polymerisation of styrene with a circular loop reactor. *Polymer Engineering and science*, 32(6), 431-437.
- [52] Belleville, P., Nouri, L., Legrand, J. (1992). Mixing characteristics in the torus reactor. *Chemical Engineering Technology*, 15, 282-289.
- [53] Belleville, P., Legrand, J., Bruxelmane, M. (1994). Etude de la vitesse de circulation dans un système agité en géométrie toroïdale, 99-100.
- [54] Nouri, L. (1994). Etude des performances du réacteur torique, application à l'hydrolyse Enzymatique des protéines végétales. *Thèse de doctorat, école centrale de Nantes-Universités de Nantes, Nantes, France*.
- [55] Nouri, L., Legrand, J., Popineau, Y., Belleville, P. (1997). Enzymatic hydrolysis of wheat proteins. Part I: enzymatic kinetics and study of limited hydrolysis in a batch stirred reactor. *Chemical Engineering Journal*, 65, 187-194.
- [56] Legrand, J., Gueguen, J., Berot, S., Popineau, Y., Nouri, L. (1997). Acetylation of pea isolate in a torus micro reactor. *Biological and Bioengineering*, 53(4), 410-414.
- [57] Benkhelifa, H., Legrand, J., Legentilhomme, P., Montillet, A. (2000). Study of the hydrodynamic behaviour of the batch and continuous torus reactor in laminar and turbulent flow regimes by means of tracer methods. *Chemical Engineering Science*, 55, 1871-1882.
- [58] Boesinger, C., Le Guer, Y., Legentilhomme, P. (2003). Etude expérimentale du mélange réactif au sein d'un réacteur torique ondulé (RTO), *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 81, 1-11.

- [59] Rihani, R., Bensmaïli, A., Kaïdi, F., Belhamel, M. (2006). Etude de la distribution des pertes de charge des systèmes diphasiques dans un réacteur torique en pyrex. *Revue des Energies Renouvelables*, 9(3), 355-361.
- [60] Nasrallah, N., Legrand, J., Bensmaili, A., Nouri, L. (2008). Effect of impeller type on the mixing in torus reactor. *Chemical Engineering and Processing*, 47, 2175-2183.
- [61] Nouri, L., Legrand, J., Benmalek, N., Imerzoukene, F., Yeddou, R., Halet, F. (2008). Characterization and comparison of the micromixing efficiency in torus reactor and batch stirred reactors. *Chemical Engineering Journal*, 142, 78-86.
- [62] Rihani, R., Guerri, O., Legrand, J. (2011). Three-dimensional CFD simulations of gas-liquid flow in milli torus reactor without agitation. *Chemical Engineering and Processing*, 50, 369-376.
- [63] ITO, H. (1987). Flow in curved pipe. *JSME, International Journal*, 30(262), 543-552.
- [64] Zikanov, Oleg. (2010). Essential computational fluid dynamics. John Wiley & Sons
- [65] Launder, B. E., Spalding, D. B. (1972). Lectures in mathematical models of turbulence. *Academic Press, London, UK*.
- [66] Rodi, W. (1984). Turbulence models and their application in hydraulics. *International Association for Hydraulic research, Delft, Netherlands*.
- [67] Markatos, N. C. (1986). The mathematical modelling of turbulent flows. *Applied Mathematical Modelling*, 10(3), 190-220.
- [68] Nallaswamy, M. (1987). Turbulence models and their applications to the prediction of internal flows. *A review, Computers and Fluids*, 15(2), 151-194.
- [69] Ranade, V.V. (2002). Computational flow modeling for chemical reactor engineering. *Academic Press, San Diego, CA, USA*.
- [70] Essemiani, K. (2000). Analyse locale des cuves agitées mécaniquement : Potentialités de la mécanique des fluides numérique. *Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, France*.
- [71] Nassalmy, M. (1987). Turbulence models and their applications to the prediction of internal flows: a review. *Computers and Fluids*, 15(2), 151-194.

- [72] Chatellier, P. (1991). Simulation de l'hydrodynamique des chenaux d'oxydation par l'utilisation des équations de Navier-Stokes associées au modèle $k-\varepsilon$: Evaluation de la vitesse de circulation. *Thèse de doctorat, INSA, Toulouse, France.*
- [73] Djebbar, R. (1996). Etude hydrodynamique des réacteurs de type chenaux d'oxydation par la mécanique des fluides numérique. *Thèse de doctorat, INSA, Toulouse, France.*
- [74] Stropky, D., Pouqatch, K., Nowak, P., Salcudean, M., Pagorla, P., Gartshore, I., Yuan, J. W. (2007). RTD predictions in large mechanically aerated lagoons. *Water Science and Technology*, 55 (11), 29-36.
- [75] Thyn, J., Ha, J. J., Strasak, P., Zitny, R. (1998). RTD prediction, modelling and measurement of gas flow in reactor. *Nukleonika*, 43 (1), 95-114.
- [76] Fluent. (2005). *Fluent User's guide 6.2: Discrete phase models.* Fluent Inc.
- [77] Morsi, S. A., Alexander, A. J. (1972). An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. *Journal of Fluids Dynamics*, 55 (2), 193-208.
- [78] Patankar, S. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* Mac Graw Hill Company, New York, USA.
- [79] Aubin, J., Fletcher, D. F., Xuereb, C. (2004). Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 28, 431-445.
- [80] Hrenya, C. M., Bolio, E. J., Chakrabarti, D., Sinclair, J. L. (1995). Comparison of low Reynolds number $k-\varepsilon$ turbulence models in predicting fully developed pipe flow. *Chemical Engineering Science*, 50, 1923-1941.
- [81] Bujalski, J. M., Yang, W., Nikolov, J., Solnordal, C. B., Schwartz, M.P. (2006). Measurement and CFD simulation of single-phase flow in solvent extraction column. *Chemical Engineering Science*, 61, 2930-2938.
- [82] Charton, S., Duhamet, J., Borda, G., Ode, D. (2012). Axial dispersion in pulsed disk and doughnut columns: a unified law. *Chemical Engineering Science*, 75, 468-477.
- [83] Lelan, A., Moritz, S.A. (1981). Caractéristiques hydrodynamiques et géométrie des systèmes d'agitation. *Information chimie*, 210, 157-160.

- [84] Coulson, J. M., Richardson, J. F., Harker, J. H., Backhurst, J. R. (1999). *Chemical Engineering, Fluid flow, Heat transfert and Mass transfert, Volume 1, Sixième édition, Butterworth-Heinemann.*
- [85] Ranade, V.V., Bourne, J.R., Joshi, J.B. (1991). Fluid mechanics and blending in agitated tanks. *Chemical Engineering Science*, 46, 1883-1893.
- [86] Patwardhan, A.W., Joshi, J.B. (1999). Relation between flow pattern and blending in stirred tanks. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 38, 3131-3143.
- [87] He, G., Guo, Y., Hsu, A.T. (1999). The effect of Schmidt number on turbulent scalar mixing in a jet-in-cross flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42, 3727-3738.
- [88] Bouaifi, M., Roustan, M. (2001). Power consumption, mixing time and homogenization energy in dual-impeller agitated gas-liquid reactors. *Chemical Engineering and Processing*, 40, 89-95.
- [89] Nienow, A. W. (1997). On impeller circulation and mixing effectiveness in the turbulent flow regime. *Chemical Engineering Science*, 52(15), 2557-2565.
- [90] Norwood, K. W., Metzner, A. B. (1960). Flow patterns and mixing rates in agitated vessels. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 6(3), 432-437.
- [91] Mao, D. M., Feng, L. F., Wang, K., Li, Y.L. (1997). The Mean Flow Field Generated by a Pitched Blade Turbine: Changes in the Circulation Pattern due to Impeller Geometry. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 75(2), 307-316.
- [92] Kresta, S. M., Wood, P. E. (1993). The Mean Flow Field Produced by a 45° Pitched Blade Turbine: Change in the Circulation Pattern due to Off Bottom Clearance. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 71(1), 42-53.
- [93] Tsui, Y. Y., Chou, J. R., Hu, Y. C. (2006). Blade Angle Effects on the Flow in a Tank Agitated by the Pitched-Blade Turbine. *Journal of Fluids Engineering*, 128(4), 774-782.

Annexes

ANNEXE-I

Les méthodes de caractérisation du mélange

Une des façons les plus simples de quantifier le mélange dans un réacteur agité est de mesurer une grandeur appelée « temps de mélange ». On définit le temps de mélange t_m comme la durée nécessaire, à partir de l'injection du traceur, à l'obtention d'un degré d'homogénéité donné, par exemple l'obtention de 95% de la concentration de mélange du traceur ayant des propriétés différentes du milieu. Il existe plusieurs méthodes pour déterminer le temps de mélange.

A-I. 1 Les méthodes visuelles

Une méthode simple consiste à injecter un traceur coloré dans un système transparent et à visualiser l'écoulement. Malheureusement, lorsqu'un traceur est ajouté, il n'est pas possible d'observer la zone située à l'arrière de cette coloration [A.1]. C'est pourquoi les méthodes de décoloration sont parfois préférées. Deux méthodes de décoloration sont utilisées :

- les réactions acides bases en présence d'indicateur coloré approprié comme le bleu de bromotymol (bleue vers jaune) ou phénolphtaléine (rose vers transparent) ;
- les réactions entre iode et thiosulfate en présence d'amidon.

Dans de nombreuses études, les méthodes de décoloration sont utilisées. Le temps de mélange est calculé entre l'injection de traceur et la disparition de la dernière trace de couleur [A.2]. Bien entendu, le problème avec ces méthodes, c'est qu'il est difficile de relier le dernier pic de décoloration avec un degré de mélange.

A-I. 2 Les méthodes quantitatives

Pour obtenir des mesures les plus fiables et quantitatives possibles, un certain nombre de précautions doivent être prises. La méthode idéale pour obtenir une bonne mesure du temps de mélange devrait respecter ces spécifications suivantes :

- le diamètre du réacteur ne devra pas être trop grand pour éviter les problèmes d'effets de moyenne ;

- la sonde devra avoir un temps de réponse négligeable par rapport au temps de mélange ;
- l'effet de ou des sondes sur l'hydrodynamique devra être négligeable ;
- les paramètres physico-chimiques du milieu ne devront pas être modifiés par l'ajout du traceur ;
- la mesure pourra être applicable à la mesure en présence de gaz ;
- idéalement, la méthode pourra être applicable plusieurs fois sur le milieu sans avoir besoin de le changer.

En réalité, aucune méthode ne respecte toutes ces conditions. Dans la partie suivante, les différentes méthodes sont présentées ainsi que leurs avantages et inconvénients.

A-I. 2.1 Les méthodes conductimétriques

La méthode la plus utilisée pour déterminer le temps de mélange dans un réacteur agité est basée sur la mesure de la conductivité suite à l'ajout d'un traceur contenant des sels. L'avantage de cette méthode réside dans le fait que les sondes conductimétriques ont un temps de réponse assez court. Le principal inconvénient de cette méthode c'est qu'elle est peu utilisable sans précautions en présence de gaz. Lorsque c'est le cas, les bulles d'air, non conductrices, passent entre les électrodes et provoquent une augmentation du bruit de la mesure qui rend la mesure du temps de mélange impossible. Pinelli et coll., [A.3] ont montré que la méthode conductimétrique pouvait être utilisée de façon satisfaisante en présence de gaz si la sonde était protégée par une petite cage contenant des trous d'un diamètre de 0,5 mm. Les mesures de temps de mélange en monophasique avec et sans la cage ont donné des valeurs similaires. Néanmoins, cette méthode s'est avérée efficace sur la réduction du bruit de mesure seulement si de petites bulles étaient entraînées à l'intérieur de la cage de la sonde. L'autre inconvénient de cette méthode est que chaque mesure nécessite un ajout important dans le milieu, ce qui rend le saut de conductivité de moins en moins marqué. De même, si le temps de mélange est mesuré dans un milieu de fermentation, le changement de conductivité sera faible car les milieux de culture sont souvent très salés.

A-I. 2.2 Les méthodes pH-métriques

De même que les méthodes conductimétriques, les méthodes pH-métrique ont souvent été utilisées pour mesurer le temps de mélange dans les réacteurs agités [A.4]. Cette technique consiste à mesurer l'évolution du pH après ajout d'une solution concentrée en acide ou en base. L'avantage de cette méthode est que la mesure n'est pas influencée par la présence de gaz. Par le temps de réponse de ces sondes est souvent long. C'est pourquoi cette méthode n'est pas

adaptée à des réacteurs de laboratoire qui peuvent avoir un temps de mélange de quelques secondes. De plus, les quantités d'acide ou de base pour avoir une bonne sensibilité de mesure peuvent être très élevées.

A-I. 2.3 Les méthodes thermiques

Dans la méthode thermique, un liquide ayant une température différent du milieu est injecté et la température est mesurée par des thermocouples [A.5]. L'inconvénient de cette méthode, c'est lorsque le milieu est sensible à la température. De plus, les quantités à injecter sont très grandes lorsque le réacteur est grand.

Bibliographie

- [A.1] Brown, D. A. R., Jones, P. N., & Middleton, J. C. 2004. *Experimental methods, Part A: Measuring tools and techniques for mixing and flow visualization studies*. Wiley-Interscience. Pages 145-202.
- [A.2] Cronin, D.G., Nienow, A.W., & Moody, G.W. 1994. An experimental study of mixing in a proto-fermenter agitated by dual Rushton turbines. *Food and Bioprocess Processing*, 72(C1), 35-40.
- [A.3] Pinelli, D., Bujalski, W., Nienow, A. W., & Magelli, F. 2001. Comparison of experimental techniques for the measurement of mixing time in gas-liquid systems. *Chemical Engineering and Technology*, 24(9), 919-923.
- [A.4] Marten, M. R., & Wenger, K. S. 1997. Rheology, mixing time, and regime analysis for a production-scale *Aspergillus oryzae* fermentation. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*, 213, 243-BIOT.
- [A.5] Hoogendoorn, C.J., & den Hartog, A.P. 1967. Model studies on mixers in the viscous flow region. *Chemical Engineering Science*, 22(12), 1689-1699

ANNEXE-II

Le coefficient de déformation géométrique

L'utilisation de maillages mixtes ou hybrides est une alternative intéressante pour des systèmes complexes. Il est possible de créer des VC structurés dans des zones avec des géométries simples et non-structurés dans les zones avec des géométries plus complexes. La principale difficulté lors de l'utilisation des maillages mixtes vient de la nécessité de concordance aux interfaces des zones structurées et non-structurées. La qualité de chaque VC est mesurée par le coefficient de déformation géométrique, Ξ (Equiangle Skew, en anglais) qui est défini par l'équation suivante :

$$\Xi = \max \left[\frac{\theta_{max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{min}}{\theta_e} \right]$$

Où est l'angle d'élongation idéale : $\theta_e = 90^\circ$ Quad/Hex et $\theta_e = 60^\circ$ Tri/Tet (Figure A.1). La grandeur Ξ varie de 0 à 1, zéro correspond à un maillage de très bonne qualité et 1 correspond à un maillage de mauvaise qualité. La valeur limite recommandée est $\Xi = 0,9$. Des VC de bonne qualité permettront une convergence plus rapide en réduisant les erreurs de calcul numérique.

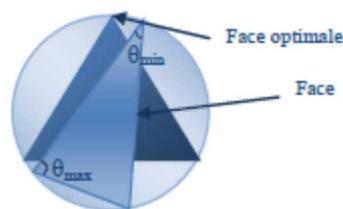


Figure A.1 éléments du VC

ANNEXE-III

Schémas de discrétisations spatiale

La principale difficulté dans la discrétisation des termes convectifs est le calcul d'une propriété transportée, ϕ , au niveau des volumes de contrôle et de ses flux au niveau de leurs frontières. Pour ce faire, différents schémas numériques peuvent être utilisés. Le choix du schéma numérique approprié peut être basé sur quatre catégories de critères [A.6] :

- La conservativité (conservativeness) est la capacité du schéma à conserver ϕ sur tout le domaine de calcul.
- La transportivité (transportiveness) exprime la capacité du schéma à reconnaître et à tenir compte de la direction de l'écoulement pour le calcul de la valeur de ϕ au niveau des faces du volume de contrôle en fonction de sa valeur au centre de ceux situés en amont.
- Pour satisfaire la condition de bornage (boundedness) les coefficients de l'équation discrétisée doivent présenter le même signe (tous positifs ou négatifs). En cas de non satisfaction de cette condition, des problèmes de divergence peuvent être rencontrés. Il est possible dans certains cas que la solution converge malgré la non satisfaction de cette condition, mais dans ce cas, la solution peut présenter des oscillations autour d'une valeur moyenne, ce qui est communément appelé "undershoots" et "overshoots".
- L'ordre du schéma traduit l'erreur de troncature des séries de Taylor pour écrire l'équation discrétisée. Plus l'ordre du schéma est élevé, moins cette erreur de troncature est importante, et par conséquent plus la diffusion numérique (fausse diffusion) est faible.

Le tableau A.1 compare les propriétés de ces différents schémas numériques. Nous pouvons constater que les deux critères de "transportiveness" et "conservativeness" sont satisfaits par tous les schémas. Le schéma QUICK est conditionnellement stable et peut, dans certaines

conditions, présenter des oscillations numériques ("undershoots" et "overshoots") [A.6]. Le schéma First-Order Upwind est de premier ordre, ce qui le rend susceptible de présenter de la fausse diffusion. Ce risque peut cependant être minimisé en raffinant le maillage.

Tableau A.1 Propriétés des différents schémas numériques

Schéma numérique	First-Order Upwind	Second-Order Upwind	QUICK	Power Law
Conservativeness	Oui	Oui	Oui	Oui
Transportiveness	Oui	Oui	Oui	Oui
Boundedness	Oui	Oui	Conditionnellement stable	Oui
Précision	1er ordre	2nd ordre	3me ordre	1er ordre

Bibliographie

- [A.6] Versteeg, H.-K. & Malalasekera, W. 2007: An introduction to Computational Fluid Dynamics: the Finite Volume Method. Pearson Education.