

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie d'Oran <<Mohamed oudiaf>>

Faculté des Sciences

Département de Chimie Industrielle

Spécialité : Chimie

Option : Transport et transfert dans les procédés polyphasiques

Mémoire Présenté par :

BOUAMAMA AMAR

Pour l'obtention du diplôme de Magister

Thème

**SIMULATION DE L'HYDRODYNAMIQUE DANS
UNE COLONNE A BULLES**

devant le jury composé de :

Président	M^r.ABDELOUAHAB Mohamed	MCA	USTMB
Rapporteur	M^r.DEBAB Abdelkader	MCA	USTMB
Examineur	M^r.LAGHOUATI Yacine	MCA	USTMB
Examineur	M^r.NEHARI Idriss	MCA	U. Mostaganem
Invité	M^r.BENTOUAMI Abdelhadi	MCB	USTMB

Année universitaire : 2009-2010

Résumé

Les colonnes à bulles sont largement utilisées comme contacteurs gaz/liquide. Leurs applications touchent l'industrie chimique, la biologie tels que la chloration, l'oxydation, l'hydrogénation et l'alkylation des composés organiques

Dans ce contexte, nous avons montré la possibilité de modéliser le comportement hydrodynamique dans les colonnes à bulles biphasique en utilisant un code de calcul (FLUENT).

La comparaison des résultats numériques avec des résultats expérimentales (a partir de littérature) a permis d'en déduire le type de maillage et le nombre de cellules nécessaires, les conditions aux limites utilisables ainsi que le modèle de turbulence pertinent.

La validation des modèles 2D de dispersion gaz/liquide a été faite grâce à des données expérimentales provenant de l'étude bibliographique. Le modèle testé est fondé sur une approche eurlienne-eurlienne (VOF). Les résultats de comparaison entre l'expérimental et le calcul de ces retentions sont proches de 6 %.

Mots clés : Hydrodynamique, Modélisation 2D, rétention, colonnes à bulles, dispersion, gaz/liquide

REMERCIEMENTS

Par le présent manuscrit, je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à mon encadreur Monsieur DEBAB Abdelkader, responsable du laboratoire des phénomènes de transfert au département de chimie industrielle de l'USTO de m'avoir proposé ce sujet, pour sa réactivité et ses conseils, et m'avoir fait partager sa connaissance scientifique, pour sa confiance et pour la qualité de son encadrement. Ses compétences et ses orientations m'ont souvent facilité la tâche.

Mes remerciements s'adressent à Monsieur le docteur ABDELOUAHAB Mohamed du département physique de L'USTO qui m'a fait l'honneur d'accepter la présidence de ce jury.

Que Monsieur le Docteur LAGHOUATI Yacine du département de physique de L'USTO, Monsieur NEHARI Idriss Docteur à l'université de Mostaganem et Monsieur le Docteur BENTOUAMI Abdelhadi du département chimie industrielle de L'USTO, reçoivent ici l'expression de tous mes remerciements pour l'intérêt accordé à ce travail et pour avoir accepté leur participation au jury de ce travail.

J'adresse mes remerciements aussi à :

Tous les magisters et doctorants du laboratoire *des* phénomènes de transfert au département de chimie industrielle de l'USTO.

Je remercie l'ensemble du personnel du département de chimie industrielle pour l'aide et la sympathie qu'ils m'ont apportés au cours de mes années d'études.

Enfin, Je remercie toutes les personnes, qui, de près ou de loin, ont contribué à l'aboutissement de ce travail.

Je dédie ce travail:

A mes parents

A mes frères et mes soeurs

Vous êtes toujours présents dans mon cœur et mon esprit

Amar

NOMENCLATURE

Nomenclature

A	Aire interfaciale spécifique	(L^{-1})
C_T	la concentration totale	(M/L^3)
C_e	concentration en oxygène dans le liquide entrant dans le contacteur	(M/L^3)
C_μ	Constante adimensionnelle	(-)
C_A	la concentration volumique de A	(M/L^3)
C_L	Concentration en oxygène dans le liquide du contacteur	(M/L^3)
D_{AB}	Coefficient de diffusion de l'espèce A vers B	(L^2/T^1)
D_C	Diamètre de la colonne	(L)
D_{equ}	Diamètre équivalent	(L)
Fr	Nombre de Froude	(-)
g	Accélération de la pesanteur	(L/T^2)
H	Hauteur du liquide	(L)
K	Energie cinétique turbulente	(L^2/T^2)
k_L	Coefficient de transfert de matière cote liquide	$(L.T^{-1})$
k_G	Coefficient de transfert de matière cote gaz	$(L.T^{-1})$
k_{LA}	Coefficient de transfert volumique	(T^{-1})
N_A	Flux de matière transféré du composé A	$[mol.L^{-2}.T^{-1}]$
ΔP	Perte de pression	(Pa)
Q_L	Débit de gaz	(L^3/T)
Q_G	Débit de liquide	(L^3/T)
Re	Nombre de Reynolds	(-)
r_A	la vitesse de disparition par réaction chimique	$(M.L^{-2}.T^{-1})$
U	Vitesse du fluide	(L/T)
U_{gs}	Vitesse superficielle du gaz	(L/T)
u_T	vitesse de chute terminale	(L/T)
U_L	Vitesse du liquide	(L/T)
U_G	Vitesse du gaz	(L/T)
V_R	Volume liquide du contacteur	(L^3)
w	quantité de solide dans le réacteur.	(M/L^3)
X_A	Fraction molaire de A	(-)
Y_s	Pourcentage d'oxygène dans l'air sortant	(%)
Y_e	Pourcentage d'oxygène dans l'air entrant	(%)
Y_k		(-)
Y_ω		(-)
ρ		$M.L^{-3}$
ρ_L		$M.L^{-3}$
ρ_q		$M.L^{-3}$
ε		$(L^2/T^3).$
μ		$(M/L.T).$
μ_t		$(M/L.T).$
ε_g		(-)
ε_l		(-)
ε_{gmoy}		(-)

Γ_k
 Γ_ω
 σ_k
 σ_ω

(-)
(-)
(-)
(-)

Sommaire

	Introduction générale	1
Chapitre :I	Généralités Sur Les Contacteurs Gaz/Liquide	
I.1	Introduction	3
I.2	Présentation des différents types de contacteurs gaz-liquide	3
I.2.1	Colonne à bulles	4
I.2.2	Gazosiphon (ou Airlift)	5
I.2.3	Tube en U	6
I.2.4	Réacteurs agitées mécaniquement	7
I.2.5	Lit fixe	8
I.2.6	Les mélangeurs statiques	9
I.2.7	Hydroéjecteur	10
I.3	Types de distributeurs de gaz	10
I.4	Caractéristiques et spécificités des contacteurs gaz-liquide	11
I.4.1	Phase dispersée	12
I.4.2	Phase continue	12
I.4.3	Les rétentions de phase	12
I. 4.3.1	Rétention de gaz	12
I. 4.3.2	Rétention de liquide	13
I.5	transfert de matière gaz-liquide	14
I.5.1	Equation de continuité du transfert de matière	14
I.5.2	La diffusion moléculaire	14
I.5.2.1	Le coefficient de diffusion D_A	15
I.5.2.2	Notion de coefficient de transfert de matière gaz-liquide	15
I.5.2.3	Bilan matière en O_2 sur un contacteur à bulles	17
I.5.3	Le coefficient volumique de transfert de matière ($k_{L,a}$)	18
I.5.3.1	Méthodes de mesure du coefficient volumique de transfert de matière ($k_{L,a}$)	18
	Références bibliographiques	20
Chapitre :II	Synthèse bibliographique sur l'étude des colonnes à bulles	
II.1	Introduction	21
II.2	applications industrielles des colonnes à bulles	22
II.3	caractéristiques hydrodynamiques et de transfert de matière gaz-liquide des colonnes à bulles	23
II.3.1	Coefficient de dispersion en phase gazeuse	26
II.3.2	Régimes hydrodynamiques	27
II.3.3.	Rétention gazeuse	28
II.3.3.1	corrélations pour calcul de la Rétention du gaz	31
II.3.4.	Transfert de matière gaz-liquide en colonnes à bulles classiques	34
II.3.4.1	Coefficient de transfert gaz liquide	36
II.3.4.2	Corrélations pour le calcul des valeurs de $k_{L,a}$	37

II.4.	Régimes et aspect de l'écoulement dans une colonne de bulles	40
II.4.1	Colonne à bulles 3D	42
II.4.2	Colonne à bulles 2D	43
	Références bibliographiques	45

Chapitre :III Modélisation de la turbulence

III.1	Introduction	50
III.2	Modélisation de la turbulence	50
III.2.1	Généralités sur les équations de Navier-Stokes	50
III.2.2	Équations et approches de résolution pour un écoulement turbulent	51
III.2.2.1	Définition et caractéristiques de l'écoulement	51
III.2.2.2	Approches de résolution des équations de l'écoulement turbulent	52
III.2.2.2.1	La résolution directe	52
III.2.2.2.2	L'approche statistique	53
III.2.2.2.2-1	Modèles K-ε :	54
III.2.2.2.2-2	Model de turbulence SST (Shear stress transport)	55
III.2.2.2.2-3	Le modèle des contraintes de Reynolds RSM	58
III.3	Simulation par les codes de calcul CFD	63
III.3.1	Présentation du code de calcul FLUENT	64
III.3.1.1	Architecture du logiciel	64
III.3.1.2	Etapes de calcul	64
III.3.1.2.1	Intégration des équations de transport	65
III.3.1.2.2	Discrétisation spatiale	65
III.3.1.2.3	Couplage pression-vitesse	66
III.3.1.2.4	Convergence	68
	Références bibliographiques	69

Chapitre :IV Simulation de l'hydrodynamique dans les réacteurs à bulles

IV.1	Introduction	70
IV.2	simulation de l'écoulement dans les colonnes a bulles	71
IV.2.1	Géométrie de la colonne	71
IV.2.2	Maillage	72
IV.2.2	Conditions aux limites	73
IV.2.1	Ecoulement de fluide	74
IV.3	Problème posé	75
IV.4	Critères de convergence	76
IV.4 .1	Validation du modèle	76
IV.5	Etude de la sensibilité du maillage et du modèle de turbulence	79
IV.6	Simulation du champ d'écoulement	79
IV.6.1	Champs de vitesse	79
IV.6.2	Champ de pression	83
IV.6.3	Variation de la fraction volumique	84
IV.6.4	Champs de turbulence	85
IV.7	Profil radial	87
IV.8	Influence de la vitesse du gaz sur la coalescence des bulles	89
	Conclusion générale	91

***INTRODUCTION
GENERALE***

Introduction générale

Dans le domaine du traitement des eaux urbaines ou industrielles, l'aération des effluents dans les bassins de traitement biologique, la désinfection à l'ozone ou au chlore de l'eau potable ou des eaux usées reposent sur une étape essentielle qui est la dissolution d'un gaz sous forme de bulles dans l'eau à traiter.

Les colonnes à bulles sont largement utilisées comme contacteurs gaz/liquide. Leurs applications touchent l'industrie chimique, la biologie tels que la chloration, l'oxydation, l'hydrogénation et l'alkylation des composés organiques. Divers procédés, tels que la synthèse Fischer-Tropsch, la liquéfaction du charbon et le traitement biologique des eaux. La compréhension de l'hydrodynamique des colonnes à bulles est nécessaire pour leur dimensionnement. Bien qu'une grande quantité d'informations puisse être trouvée dans la littérature, l'hydrodynamique des colonnes à bulles n'est pas encore bien maîtrisée et les études portent souvent seulement sur une des phases; liquide ou gazeuse. Parce que l'hydrodynamique de chaque phase est intimement liée, l'étude de leurs interactions est d'intérêt. Les mesures concernant l'hydrodynamique locale sont très utiles dans ce genre d'études. Les objectifs de ce travail sont d'étudier l'hydrodynamique locale de la phase liquide et ses interactions avec l'hydrodynamique de la phase gazeuse.

La mécanique des fluides numérique (CFD) est de plus en plus utilisée pour répondre à ces questions. Appliquée aux réacteurs de traitement de l'eau, elle permet d'obtenir des informations sur l'hydrodynamique locale : caractérisation des vitesses des différentes phases mises en jeu, du taux de présence, des champs de turbulence, qui jouent un rôle essentiel dans le mélange, le transport et les transferts. L'utilisation de la modélisation des procédés a suivi l'essor des ordinateurs et l'augmentation de leur puissance.

Dans ce travail de Magister, le réacteur utilisé est une colonne à bulles de forme cylindrique munie d'un distributeur pour la dispersion du gaz dans le liquide. Les simulations ont été effectuées en utilisant le code de calcul FLUENT.

Ce mémoire est organisé en quatre chapitres:

Dans le premier chapitre, nous présentons des généralités sur les contacteurs gaz liquide qui sont mise en œuvre dans le domaine du traitement des effluents liquides. Ces réacteurs mettent de façon spécifique plusieurs phases en présence pour assurer le transfert d'un

constituant d'une phase (gaz ou liquide) dans une autre phase (liquide ou gaz), ensuite nous avons présenté quelques types de distributeurs de gaz.

Le deuxième chapitre est consacré à la synthèse bibliographique relative aux travaux effectués sur les réacteurs à bulles, ceci en montrant l'intérêt et les domaines d'applications qu'ils présentent avec les caractéristiques hydrodynamiques.

Le troisième chapitre fut consacré à la description de la modélisation de la turbulence, cela inclut les équations moyennées de Reynolds. Nous terminerons ce chapitre par une présentation du code de calcul Fluent que nous avons utilisé.

Le quatrième et dernier chapitre résume l'ensemble de nos résultats sur les écoulements par simulation numérique à l'aide du code de calcul Fluent et qui ont été validé avec les résultats publiés.

CHAPITRE I

Généralités sur les contacteurs gaz /liquide

I.1-INTRODUCTION :

Différents types de contacteurs gaz-liquide sont mis en oeuvre dans le domaine du traitement des eaux et des effluents liquides ou gazeux. Fonctionnant généralement en continu, ces réacteurs mettent de façon spécifique plusieurs phases en présence pour assurer le transfert d'un constituant d'une phase (gaz ou liquide) à une autre phase (liquide ou gaz). Dans le cas du transfert d'un composé présent dans une phase gazeuse vers une phase liquide, il s'agit du phénomène d'absorption gaz-liquide qui peut être:

- soit simplement physique, basé sur la solubilité du composé dans la phase liquide ;
- soit favorisé par la présence d'une réaction chimique entre le gaz dissous et l'un des constituants de la phase liquide, ce qui a pour effet d'augmenter la quantité de matière transférée.

Lorsqu'un composé dissous dans une phase liquide est transféré vers une phase gazeuse, il s'agit de l'opération de désorption liquide-gaz, encore appelée stripping. L'objectif est de réaliser un simple transfert physique de la phase liquide vers la phase gazeuse.

Dans les deux opérations unitaires, absorption et désorption, de la matière est transférée d'une phase vers une autre à travers une interface gaz-liquide, grâce à la mise en oeuvre de contacteurs gaz-liquide appelés également échangeurs de matière. L'objectif de ce chapitre est de faire une présentation générale des contacteurs gaz-liquide susceptibles d'être utilisés dans les procédés de traitement des eaux et des effluents gazeux.

I.2. Présentation des différents types de contacteurs gaz-liquide :

Les différents appareils de mise en contact d'un gaz et d'un liquide utilisés sont présentés selon deux familles :

- les contacteurs dans lesquels le gaz est dispersé sous forme de bulles dans un liquide ;
- les contacteurs dans lesquels un liquide est dispersé sous forme de gouttes dans un gaz.

Certains d'entre eux peuvent appartenir aux deux catégories. Il faut préciser que la taille des installations rencontrées au niveau industriel peut varier dans de très larges proportions de quelques m^3 à plusieurs milliers de m^3 .

Dans la plupart des contacteurs, il est nécessaire d'utiliser un distributeur de gaz pour disperser ce dernier sous forme de bulles afin de créer une mise en contact intime entre les deux phases. Dans certains contacteurs, c'est la turbulence de la phase liquide qui disperse le gaz sous forme de bulles.

I.2.1. Colonne à bulles :

Sur les figures (I.1-a et I.1-b) est schématisée d'une part la forme habituelle d'une colonne à bulle et d'autre part la forme modifiée. Les bulles générées montent en ascension libre au sein de la phase liquide.

La forme classique correspond à une colonne ayant un rapport hauteur sur diamètre très supérieur à un (jusqu'à 10 et plus). Elle peut fonctionner à cocourant ou à contre-courant de liquide et de gaz. En pied de colonne, le gaz est injecté par des distributeurs présentés sur la figure (Tableau I.1). Ils permettent une distribution du gaz sur toute la section de la colonne. La vitesse superficielle du gaz U_g , définie par le rapport entre le débit volumique et l'aire de la section droite, varie dans de larges proportions de 0,1 à 20 cm/s et voire plus. La forme modifiée concerne les bassins d'aération ou les tours d'ozonation figure (I.1-b), La géométrie est différente, la hauteur d'eau est en général comprise entre 3m et 7m, tandis que la longueur n'est pas limitée. La gamme de U_g s est plus restreinte et varie entre 0,2 et 1 cm/s.

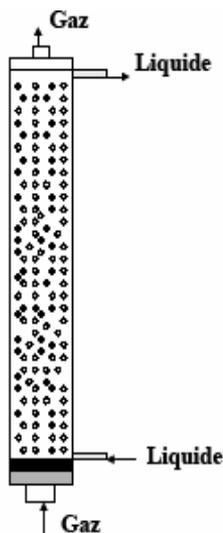


Figure. I.1-a : schéma d'une colonne à bulles.

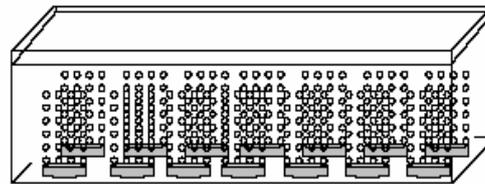


Figure. I.1-b: schéma d'un bassin d'aération.

L'utilisation des colonnes à bulles est conseillée pour réaliser des échanges gaz-liquide soit dans le cas des composés peu solubles dans l'eau, par exemple l'oxygène et l'ozone, soit en présence de réactions chimiques lentes au sein du liquide.

Les colonnes à bulles ont les principales caractéristiques suivantes :

- taux de rétention et temps de séjour du liquide élevés ;
- bons transferts de masse et de chaleur et bonne inertie thermique ;
- aire interfaciale modérée ;Construction simple ;
- peu couteuse en investissement.en fonctionnement et en entretien ;
- possibilité de traiter des solutions contenant des particules solides. Trambouze P (2002,1984)

I.2.2. Gazosiphon (ou airlift) :

Le gazosiphon, encore appelé airlift, fonctionne avec le même principe qu'une colonne à bulles mais il possède un organe interne qui peut prendre diverses formes. La figure (I.2) présente plusieurs variantes de gazosiphons : cylindriques ou rectangulaires et à boucle externe ou interne.

Une caractéristique essentielle des gazosiphons est leur élancement (rapport hauteur sur diamètre). Si l'on admet que les pertes énergétiques sont essentiellement liées aux singularités (changement de direction, séparation, distribution, branchement...), ces pertes sont relativement indépendantes de la hauteur du système et grossièrement proportionnelles au carré de la vitesse du liquide. On constate sans qu'il soit besoin d'effectuer de calcul que, plus le réacteur sera haut pour un débit de gaz donné, plus on dissipera d'énergie de détente dans le système et plus le débit de liquide circulé sera élevé. On améliorera ainsi le rendement hydraulique du dispositif. [Dhaouadi H (1997) ,Awwa(1998)].

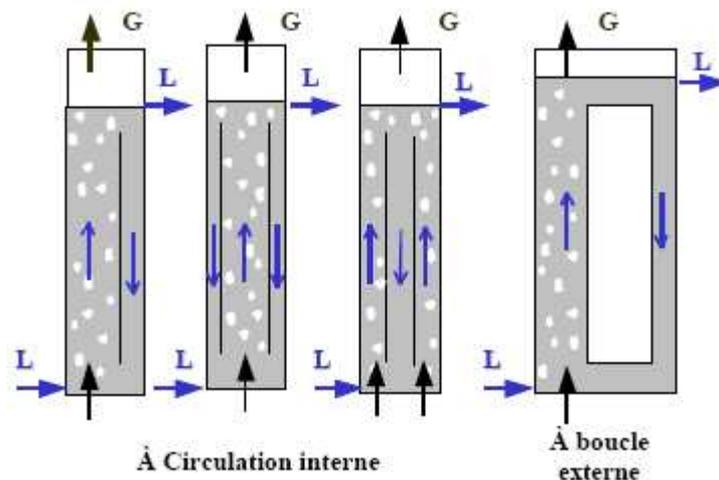


Figure I.2.Schéma des réacteurs gazosiphons à recirculation interne et externe

La figure (I.3) représente le schéma de fonctionnement d'un airlift rectangulaire avec cloison centrale. Le distributeur de gaz est décentré et n'occupe qu'une partie de la section droite de la colonne; la différence de poids de la colonne d'eau ainsi générée permet de créer une circulation du liquide et de maintenir en suspension une phase solide de densité proche de celle de l'eau .

Applications :

Le champ d'application de l'airlift est très vaste notamment dans les procédés industriels qui nécessitent un grand transfert de matière et un bon mélange, par exemple : dans le domaine de traitement biologique des eaux usées et des effluents industriels, et dans l'industrie chimique et les biotechnologies. La conception d'un réacteur airlift est essentiellement axée sur l'hydrodynamique qui est un facteur clé et joue un rôle très important sur ses performances.

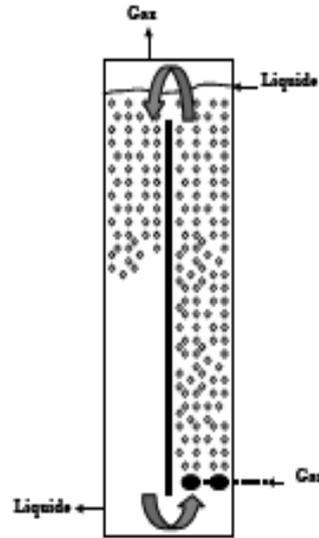


Figure I.3. Principe de fonctionnement des gazosiphons.

De plus, ils permettent à moindre coût la mise en circulation du liquide et d'une phase solide dispersée de masse volumique proche de l'eau tout en assurant une certaine stabilité d'écoulement. (Merchuk et Gluz, 1999).

I.2.3. Tube en U :

Le tube en U est composé de deux colonnes concentriques verticales communiquant dans la partie basse. Le principe de fonctionnement est présenté sur la figure (I.4). L'alimentation en liquide et en gaz est réalisée dans la colonne centrale opérant avec la phase liquide descendante. La dispersion du gaz sous forme de bulles est obtenue dans la partie descendante grâce au niveau important de turbulence, la vitesse du liquide étant d'environ 1.5 m/s. Dans un deuxième temps, le liquide et le gaz remontent dans la partie annulaire. La hauteur de la colonne est comprise entre 20m et 30 m et permet d'augmenter le transfert de matière gaz-liquide. Le temps de séjour des bulles est important et l'aire interfaciale d'échange est optimisée par la diminution du diamètre des bulles, due à l'effet de la pression statique.

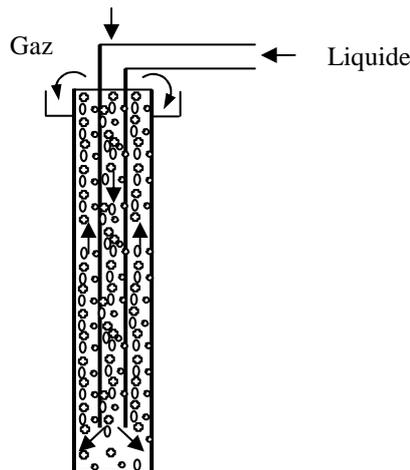


Figure I.4. Principe de fonctionnement du tube en U.

Les tubes en U sont utilisés dans le domaine de la production des eaux potables. Ils permettent de transférer de l'ozone dans l'eau afin de réaliser soit la désinfection soit l'oxydation de la matière organique ou minérale présente.

Les hauteurs des tubes en U couramment rencontrés sont de l'ordre de 20 m, avec des diamètres externes pouvant aller jusqu'à 4 m . De ce fait, ils occupent une place au sol réduite en comparaison avec les tours classiques d'ozonation. De plus, l'écoulement de la phase liquide est plus proche de l'écoulement piston et ils fonctionnent sous l'effet des forces de gravité. L'inconvénient est que le coût d'investissement est supérieur à celui d'une tour classique.

I.2.4 Réacteurs agités mécaniquement :

Les cuves agitées mécaniquement peuvent fonctionner en continu ou en discontinu. La dépense énergétique est de l'ordre du KW par m³. Dans un réacteur gaz-liquide agité mécaniquement, le gaz est introduit sous l'agitateur dont le rôle est de favoriser la dispersion du gaz en fines bulles dans le liquide, tout en augmentant l'aire d'échange et les flux de matière transférées. Ces réacteurs sont conseillés pour réaliser des oxydations avec des cinétiques de réactions moyennement rapides. Ils peuvent être équipés d'un seul mobile d'agitation ou de plusieurs superposés; le rapport hauteur sur diamètre est alors supérieur à l'unité comme l'indique la figure (I.5). Pour des applications très particulières, les cuves peuvent être équipées d'agitateurs auto aspirants. L'arbre d'agitation possède des orifices qui permettent d'aspirer le gaz situé dans le ciel du réacteur. Roustan M (2002)

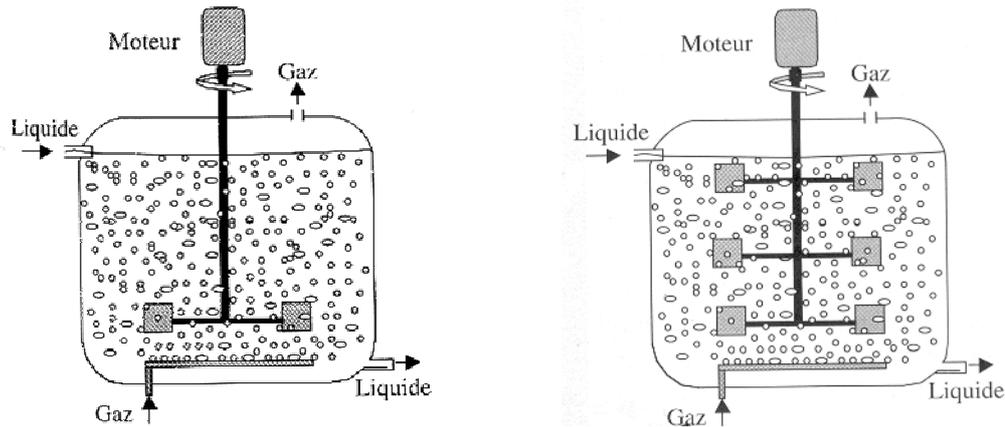


Figure I.5. Schémas des cuves agitées mono ou multi étagées.

I.2.5. Lit fixe :

Les réacteurs à lit fixe se composent d'un milieu réactionnel rempli d'un solide sur lequel vont se fixer les bactéries. Le garnissage est un support inerte de nature variée (roche, verre, plastique) et de forme diverse (sphères, cubes, grillage, lamelles). Ces réacteurs fonctionnent avec un flux ascendant ou descendant (Figure I.6).

Plusieurs variantes ont été conçues, se distinguant par :

- La nature et la granulométrie du matériau, flottant ou non flottant.
- Le sens de l'écoulement de l'eau, ascendant ou descendant.
- Le sens de l'écoulement du gaz, ascendant ou descendant.

Les principaux avantages de ce type de procédés sont leur facilité de fabrication et l'absence de mélange mécanique. Ils présentent également une robustesse et une bonne stabilité vis à vis des chocs organiques, ainsi qu'un recouvrement rapide d'activité après une longue période d'arrêt. Ces procédés sont particulièrement adaptés au traitement de rejets liquides pauvres en matières en suspension. Les filtres anaérobies peuvent être utilisés pour traiter des effluents de concentration faible ou moyenne. (Belkhadir, R. 1986).

Le temps de séjour de l'eau dans un lit fixe est compris entre 30 et 50 min. L'inconvénient majeur des lits fixes est leur fonctionnement cyclique. En effet le colmatage du lit est systématique, ce qui impose un nettoyage régulier qui s'effectue en soulevant le lit par apport d'un débit instantané important. Ceci nécessite la présence de plusieurs filtres en parallèle, indispensables au fonctionnement en continu de la chaîne de traitement.

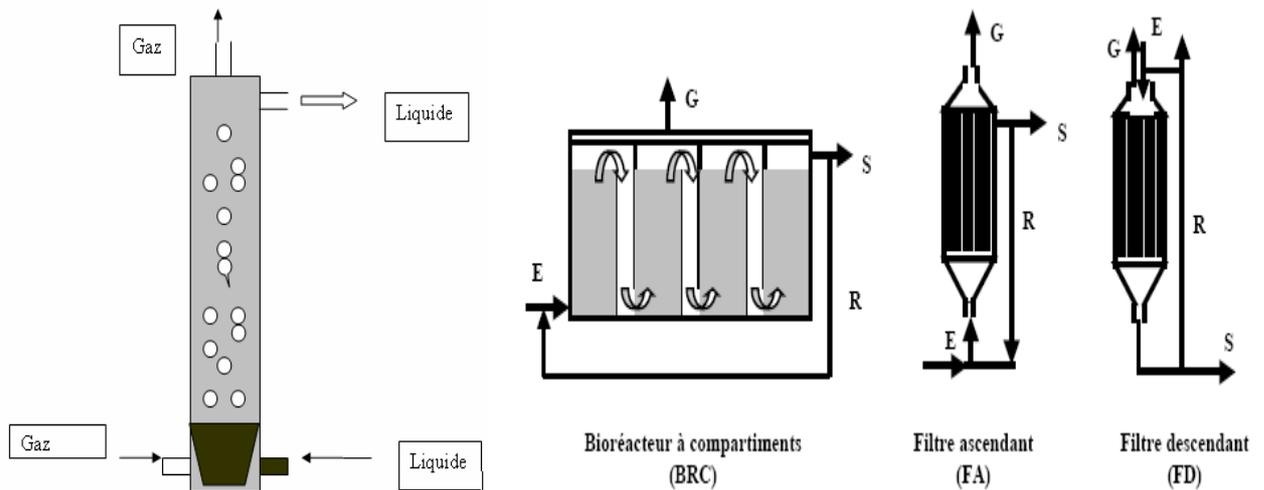


Figure I.6. Procédé compartimenté et différentes configurations des réacteurs à lit fixe.

I.2.6. Les mélangeurs statiques :

Les mélangeurs statiques, représentés sur la figure (I.7), sont constitués d'éléments mécaniques fixes montés les uns à la suite des autres dans des conduites. Le fluide est mis en circulation par une pompe. Les éléments fixes provoquent un effet de mélange par divisions successives de l'écoulement en courant partiel. Le gaz est introduit en amont de l'écoulement au travers d'une simple buse.



Figure I.7. Schémas de mélangeurs statiques.

L'avantage des mélangeurs statiques est de générer une hydrodynamique stable avec des tailles de bulles relativement petites, de l'ordre du mm, et par conséquent de créer de très fortes aires interfaciales et pouvant atteindre $1000 \text{ m}^2/\text{m}^3$ pour une puissance dissipée de l'ordre de $50 \text{ kw}/\text{m}^3$. Il en est de même pour les coefficients volumiques de transfert qui peuvent atteindre des valeurs de $0, 1 \text{ s}^{-1}$.

L'inconvénient majeur est la consommation d'énergie qui peut atteindre $50 \text{ kw}/\text{m}^3$ comparée au $1 \text{ kw}/\text{m}^3$ des cuves agitées. Il faut tirer profit de l'aire interfaciale créée au sein du mélangeur, car en sortie du mélangeur, la coalescence des bulles peut faire diminuer l'aire interfaciale générée. Roustan M (2002)

Les domaines d'application des mélangeurs statiques concernent le cas de l'absorption avec des réactions chimiques rapides qui demandent des aires interfaciales importantes. Ils peuvent

être utilisés comme système de dispersion et être placés juste à l'entrée d'une colonne à bulles, en remplacement d'un distributeur classique

I.2.7. Hydroéjecteur :

L'hydroéjecteur permet de réaliser l'entraînement et la dispersion d'un gaz grâce à l'énergie mécanique d'un liquide moteur comme l'indique la figure (I.8). La dépression nécessaire à l'entraînement naturel du gaz est obtenue par contraction de la veine liquide. En sortie de l'hydroéjecteur, le jet diphasique contient des bulles de gaz finement dispersées. La mise en oeuvre de cet appareil est simple et son fonctionnement nécessite peu de maintenance. La réalisation simultanée de l'aération et du mélange permet d'obtenir des rendements de transfert, autour de 1,5 à 02.kw/h.

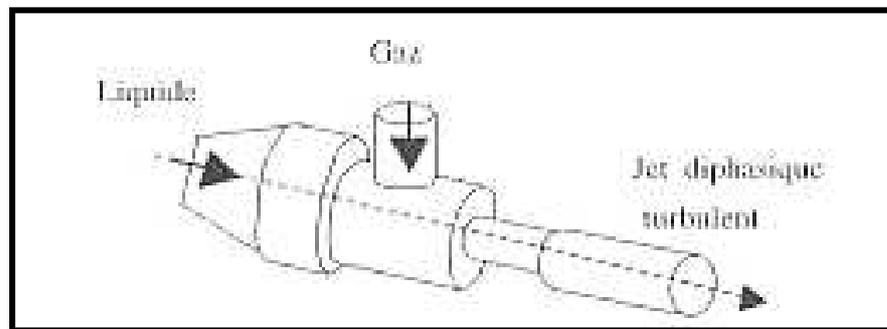


Figure I.8. Schéma d'un hydroéjecteur.

Cette technologie est adaptée pour les procédés de traitements aérobies d'effluents d'origine industrielle ou urbaine dans des bassins d'aération ou de lagunage. Elle peut s'appliquer pour la réhabilitation de sites naturels pollués, en fermentation aérobie, aquaculture, pisciculture.

I.3. Types de distributeurs de gaz :

La dispersion d'un gaz dans une phase liquide est assurée par des systèmes d'aération qui génèrent des bulles par passage du gaz à travers des orifices immergés dans la phase liquide. Selon le domaine d'application, différents types de distributeurs de gaz sont utilisés.

Le distributeur de gaz joue un rôle important car il conditionne l'hydrodynamique de la phase gazeuse et de la phase liquide. Au niveau de l'injection, le distributeur de gaz impose la taille initiale des bulles et la distribution. Même si elle évolue ensuite dans la colonne, la taille des bulles générées par le distributeur de gaz influence directement la valeur de la rétention de gaz et sa distribution radiale dans la colonne. Le distributeur a aussi un effet prépondérant sur les valeurs des vitesses superficielles de gaz associées aux transitions entre les différents régimes d'écoulement homogène et hétérogène. En conséquence, il conditionne

l'hydrodynamique de la phase liquide et les transferts de matière gaz-liquide. Le dimensionnement du distributeur de gaz est délicat, il doit prendre en considération :

- L'aire interfaciale générée.
- L'aspect énergétique lié au débit de gaz appliqué et à la perte de charge associée au fonctionnement du distributeur.
- La longévité du distributeur et la durabilité de ses performances (phases de nettoyage).
- Les conditions de température, de pression et d'agressivité du milieu.

Le tableau (I.1) présente quelques types de distributeurs de gaz avec leurs performances.

Distributeur de type « rigide »		Distributeur de type « flexible »
Poreux	Plaque Percée	Membrane
		
<ul style="list-style-type: none"> ➤ Perte de charge (faible ou moyenne) ➤ Résistances aux agressivités du milieu et aux hautes températures et pressions. ➤ Risque de colmatage 		<ul style="list-style-type: none"> ➤ Perte de charge plus élevée ➤ Petites bulles homogènes en tailles ➤ Risque de colmatage

Tableau I.1. Quelques types de distributeurs de gaz :

Le dimensionnement et le choix du distributeur de gaz sont délicats, ils doivent prendre en considération : l'aire interfaciale générée, le coût énergétique, la longévité, la durabilité des performances et les conditions de travail (température, pression et agressivité du milieu).

Afin d'appréhender l'importance de la nature du distributeur de gaz sur les bulles formées et sur l'hydrodynamique, Deckwer (1992) et Hébrard et al. (1996) ont étudié le rôle essentiel du distributeur de gaz, en particulier son impact sur l'hydrodynamique, dans l'approche globale du réacteur.

I.4. Caractéristiques et spécificités des contacteurs gaz-liquide :

Les performances globales des contacteurs gaz-liquide dans lesquels s'effectue le transfert de matière, dépendent des phénomènes physiques et chimiques mis en jeu et des caractéristiques hydrodynamiques liées à l'écoulement des phases. Ainsi, les grandeurs hydrodynamiques caractéristiques des contacteurs telles que, le taux de gaz (ou rétention gazeuse), le diamètre des bulles ou des gouttes, l'aire interfaciale d'échange et le coefficient

volumique de transfert, conditionnent directement le dimensionnement et les performances des contacteurs gaz-liquide.

I.4.1.Phase dispersée :

Dans le contacteur gaz-liquide, la phase dispersée caractérise la phase dont la fraction est inférieure à 50 %. Cette phase peut-être constituée soit de bulles de gaz dans un liquide, soit de gouttes dans une phase gazeuse, soit de film liquide s'écoulant sous l'effet de la gravité le long d'une paroi inclinée ou d'un garnissage en vrac ou structuré.

I.4.2. Phase continue :

Par opposition, la phase continue caractérise la phase dont la fraction est supérieure à 50 %.

I.4.3.Les rétentions de phase :

Les deux phases liquide et gazeuse sont généralement présentes dans les échangeurs de matière. Une troisième phase solide est parfois présente. Elle correspond soit à un amas de microorganismes (boues activées ou biofilm), soit à un support solide sous forme de grains ou de garnissage.

I.4.3.1.Rétention de gaz :

La rétention gazeuse notée ε_G , est une mesure qui caractérise l'hydrodynamique d'un réacteur polyphasique gaz-liquide et plus particulièrement, la qualité du contact entre les deux phases. En fonction de sa valeur numérique, l'écoulement gaz-liquide dans le réacteur peut être décrit par trois régimes : le régime de type homogène, le régime transitoire et le régime hétérogène. La rétention de gaz, correspond au rapport du volume de la phase gazeuse rapportée au volume total du réacteur qui peut être constitué de trois phases :

$$\varepsilon_G = \frac{V_G}{V_L + V_S + V_G} \quad \text{I.1}$$

- Parmi les méthodes de détermination de la rétention de gaz pour un réacteur fermé ou ouvert au débit de liquide, la fraction de gaz peut être estimée globalement en mesurant le volume du réacteur avant et après coupure du débit de gaz.

La différence de volume rapportée au volume total du mélange gaz-liquide correspond au taux de gaz dans le réacteur.

- La rétention de gaz peut aussi être estimée par utilisation de prises de pression statique positionnées le long des parois du réacteur à différentes hauteurs. Comme il est indiqué sur la figure(I.9), la rétention de gaz est égale au rapport entre la différence de hauteur

d'eau manométrique Δh et la distance ΔX séparant les deux piquages le long de la colonne. $\varepsilon_G = \frac{\Delta h}{\Delta X}$

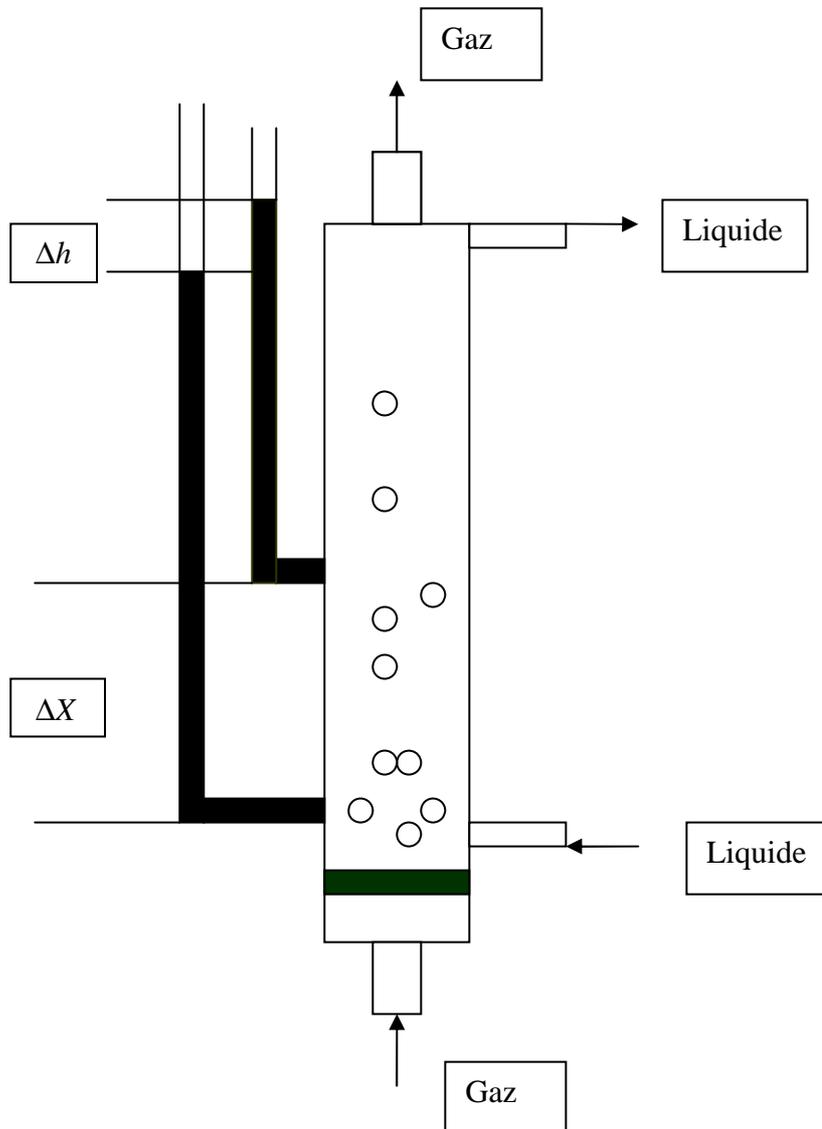


Figure I.9. Méthode de détermination de la rétention de gaz par utilisation de prises de pression.

D'autres méthodes intrusives, comme les sondes à fibre optique ou l'anémométrie à fil chaud, permettent d'accéder aux rétentions locales de gaz ainsi qu'aux profils radiaux du taux de gaz dans le réacteur. Roustan M (2002)

I.4.3.2. Rétention de liquide :

La rétention de liquide, notée \mathcal{E}_L , est définie par le rapport du volume de liquide, rapporté au volume total du réacteur qui peut être constitué de trois phases :

$$\mathcal{E}_L = \frac{V_L}{V_L + V_G + V_S} \quad \text{I.2}$$

I.5. Transfert de matière gaz-liquide :

Pour optimiser les performances des contacteurs à bulles, il est indispensable de prendre en considération non seulement l'hydrodynamique des phases qui définit la surface d'échange, mais aussi le transfert de matière entre les bulles de gaz et le liquide associé.

I.5.1. Equation de continuité du transfert de matière :

Cette équation permet de considérer l'évolution de la concentration d'un constituant dans l'espace et le temps, comme un fluide en mouvement sous l'influence d'un gradient de pression.

Dans l'établissement d'un bilan de matière sur un élément de volume dV parallélépipédique de côtes dx , dy et dz , plusieurs termes sont à considérer : entrée, sortie, disparition ou création et accumulation ou variation interne.

En appliquant la loi de conservation de la masse sur la phase dispersée A dans les contacteurs gaz-liquide, la variation de la concentration du constituant A dans l'espace (x, y, z) et le temps t devient alors :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \overline{U}_{fluide} \cdot \nabla C_A - D_A \cdot \nabla^2 C_A - r_A = 0 \quad \text{I.3}$$

C_A et \overline{U}_{fluide} sont respectivement la concentration volumique molaire de A et la vitesse molaire d'écoulement du fluide dans les 3 directions (x, y, z) . Le coefficient de diffusion D_A est constant et r_A est la vitesse de disparition par réaction chimique.

I.5.2. La diffusion moléculaire :

La diffusion moléculaire est le mécanisme de transfert d'un constituant au sein d'une phase par migration des molécules de ce constituant sous l'influence d'un gradient de concentration.

Elle est, par définition, le flux de matière (molaire ou massique) qui passe à travers une unité de surface normale à la direction du transfert par unité de temps ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ou $\text{kmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$).

Cette définition peut être appliquée pour considérer le mécanisme de transfert de l'oxygène à travers l'interface de la bulle vers la solution liquide dans les contacteurs à bulles.

En supposant un phénomène de transport du constituant A (comme l'oxygène dans la bulle) par les mouvements moyens du fluide en écoulement, deux flux de matière N_{AZ} et J_{AZ} sont utilisés. Ils représentent le flux de matière de gaz A transféré dans la direction z respectivement pour une unité de surface fixe et mobile avec le mouvement d'ensemble du fluide. La relation entre les flux molaires N_A et J_A est :

$$N_A = C_A \cdot U_A = J_A + C_A \cdot U^0 \quad \text{I.4}$$

U^0 est la vitesse moyenne molaire de déplacement de chacune des espèces (m.s^{-1}) définie par l'expression suivante :

$$U^0 = \frac{\sum_{i=1}^n C_i \cdot U_i}{\sum_{i=1}^n C_i} \quad \text{I.5}$$

$$J_A = -D_A \cdot \text{grad} (C_A) = -D_A \cdot \text{grad} (X_A \cdot C_T) \quad \text{I.6}$$

C_T et X_A sont respectivement la concentration totale et la fraction molaire de A. En combinant les équations (I.5) et (I.6), nous pouvons déduire que :

$$N_A = -D_A \cdot \text{grad} (C_A) + X_A \cdot (N_A + N_B) \quad \text{I.7}$$

A partir de l'équation (I.7), nous pouvons constater que le flux transféré d'oxygène N_A dans la bulle est la somme d'un terme de flux N_B et d'un terme de flux J_A superposé au mouvement d'ensemble. C'est la grandeur qui est utilisée pour le calcul des échanges de matière.

I.5.2.1. Le coefficient de diffusion D_A :

Le coefficient de diffusion D_A peut être estimé par des méthodes expérimentales et aussi des corrélations prenant en compte l'effet d'un certain nombre de paramètres tels que la température, la pression de travail et la nature des constituants des deux phases (Roustan et al. 2002). Il est compris entre 10^{-9} et $2.10^{-9} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ pour la diffusion de l'oxygène dans l'eau à la température de 20°C .

I.5.2.2. Notion de coefficient de transfert de matière gaz-liquide :

Pour calculer le flux transféré d'oxygène N_A ($\text{kmol}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$) à partir d'une bulle d'air vers la solution liquide représenté par la figure (I.10), il est préférable de définir une expression généralisée du flux de matière transféré, soit :

$$N_A = K.\Delta C$$

I. 8

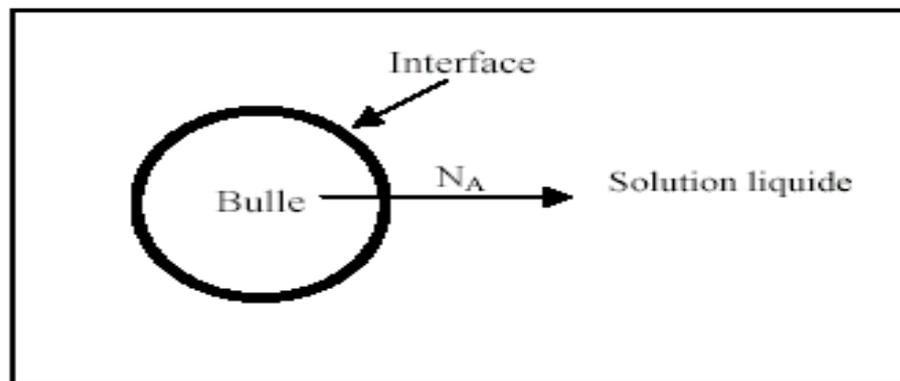


Figure I.10. Phénomène de diffusion d'une bulle d'air vers la phase liquide.

C'est le potentiel d'échange régnant dans l'échangeur ($\text{kmol}.\text{m}^{-3}$). La constante K ($\text{m}.\text{s}^{-1}$) est le coefficient de transfert de matière au niveau de l'interface.

Le coefficient K dépend de la forme de la géométrie de l'échangeur et est une fonction plus ou moins complexe du coefficient de diffusion, de l'épaisseur du film, du temps de contact, de la vitesse d'écoulement du film et de la constante de vitesse de réaction. Il est un indicateur sur la phase qui contrôle ou limite le transfert entre les phases (k_L ou k_G). Dans le cas des contacteurs à bulles et notamment en traitement des eaux, nous pouvons constater que toute la résistance au transfert est localisée côté liquide (k_L). En effet, les gaz employés (oxygène, ozone...) sont très peu solubles dans l'eau. De ce fait, la résistance côté gaz peut être négligée. Dans l'expression généralisée du flux transféré d'oxygène dans la solution liquide, la surface d'échange (S) peut être aussi prise en compte. Elle est exprimée par une aire d'échange par unité de volume, soit du liquide V_L , soit du réacteur V_R , notée a ou a^0 :

$$a = \frac{S}{V_L} \quad \text{et} \quad a^0 = \frac{S}{V_R}$$

L'équation (1.9) déduit le flux transféré par unité de temps Φ :

$$N_A \cdot S = \phi = K_L \cdot a \cdot V_L \cdot \Delta C = K_L \cdot a^0 \cdot V_R \cdot \Delta C \quad \text{I.9}$$

Dans le but de pouvoir caractériser de façon globale le transfert, il est recommandé de déterminer le coefficient volumique de transfert ($k_L \cdot a$). Cette valeur est très utilisée pour l'extrapolation des contacteurs gaz-liquide.

I.5.2.3. Bilan matière en O₂ sur un contacteur à bulles :

Sur un contacteur à bulles considéré comme parfaitement agité schématisé par la figure (I.11), en présence d'une réaction chimique ou biologique r_A , le bilan matière sur l'O₂ s'exprime par :

$$Q_G \cdot \rho_G \cdot (Y_e - Y_s) = V_R \cdot \frac{dC}{dt} + r_A \cdot V_R + Q_L \cdot (C_L - C_e) \quad \text{I.10}$$

Avec :

C_L : concentration en oxygène dans le liquide du contacteur (kg/m³).

C_e : concentration en oxygène dans le liquide entrant dans le contacteur (kg/m³).

Q_G : débit d'air (m³/h).

Q_L : débit de liquide entrant (m³/h).

r_A : respiration (kg/l.h).

V_R : volume liquide du contacteur (m³).

Y_e : pourcentage d'oxygène dans l'air entrant (%).

Y_s : pourcentage d'oxygène dans l'air sortant (%).

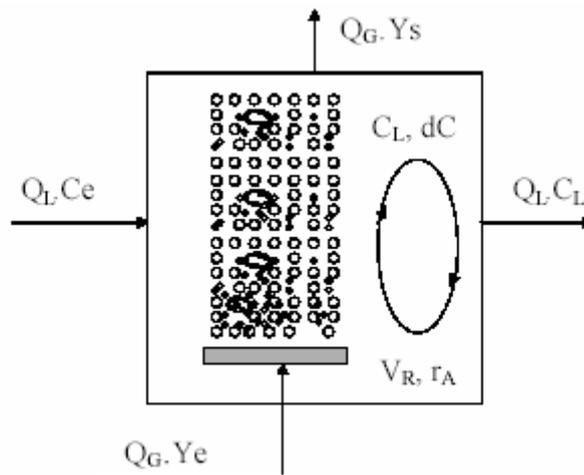


Figure I .11: Contacteur à bulles parfaitement agité.

La partie gauche de l'équation ci-dessus représente le transfert d'oxygène de la phase gazeuse vers la phase liquide ou le flux transféré d'oxygène par unité de temps. Elle peut également être exprimée sous la forme suivante :

$$Q_G \cdot \rho_G \cdot (Y_e - Y_s) = \phi = K_L \cdot a^0 \cdot V_R \cdot (C_L^* - C_L) \quad \text{I.11}$$

Avec :

$k_L a$: coefficient volumique en présence d'une réaction (h^{-1}),

C^* : teneur en oxygène à saturation dans le liquide (kg/m^3),

C_L : teneur en oxygène dans le liquide (kg/m^3).

En combinant les deux équations précédentes, l'expression générale de la variation de la concentration d'oxygène dans le contacteur à bulles parfaitement agité devient :

$$K_L \cdot a^0 \cdot (C_L^* - C_L) = \frac{dC}{dt} + r_A + \frac{Q_L}{V_R} \cdot (C_L - C_e) \quad \text{I.12}$$

I.5.3. Le coefficient volumique de transfert de matière ($k_L a$) :

Le coefficient de transfert de matière gaz-liquide, désigné par le terme $k_L a$, a été estimé sur plusieurs séries de couples de données de vitesses superficielles de gaz (U_g) et de liquide recirculé (U_l). Ce coefficient est classiquement utilisé pour caractériser globalement le transfert de matière dans les contacteurs à bulles.

I.5.3.1. Méthodes de mesure du coefficient volumique de transfert de matière ($k_L a$) :

Les méthodes de mesure du coefficient de transfert de matière $k_L a$ sont très diverses. Elles peuvent être physiques ou chimiques, en régime stationnaire ou transitoire. (Van't Riet, 1979).

I.5.3.1.1. Méthodes physiques :

Ces méthodes sont dites directes. Le flux de transfert de matière est mesuré par absorption ou désorption physique du gaz dans le liquide. Pour mettre en œuvre une méthode par absorption physique, il faut alimenter le réacteur avec des débits gazeux et liquides qui ne se trouvent pas en équilibre l'un avec l'autre. Ainsi, les méthodes physiques permettent de mesurer le flux de transfert de matière en absence de réaction chimique. L'absorption ou la désorption physique du gaz dans le liquide peut avoir lieu en régime transitoire ou en régime permanent.

I.5.3.1. 1.1. Régime transitoire :

Les méthodes consistent après avoir ramené la teneur en oxygène dissous à zéro, à réoxygéner le milieu jusqu'à la valeur de saturation en oxygène. En appliquant l'équation (I.12) à un réacteur fermé au débit liquide sans réaction, l'équation suivante est obtenue :

$$K_L \cdot a \cdot (C_L^* - C_L) = \frac{dC}{dt} \quad \text{I.13}$$

Par intégration de cette équation différentielle sur la période transitoire, la courbe de remontée de la concentration en oxygène en fonction du temps permet d'atteindre le $k_L a$ en faisant l'hypothèse d'un réacteur parfaitement mélangé. La désoxygénation peut se faire soit par :

- ✓ dégazage à l'azote, ceci convient à des réacteurs de faibles volumes,
 - ✓ ajout d'une faible quantité de sulfite en présence d'ions cobalt. Cette technique est plutôt conseillée pour des réacteurs de grands volumes. Il faut supposer donc qu'il n'y a pas d'accélération du taux de transfert par la réaction entre l'oxygène et le sulfite.
- Hatzfotiadou (1989)

I.5.3.1.1.2. Régime permanent (stationnaire) :

Ces méthodes mettent en œuvre un état stationnaire. Dans ce cas, la concentration d'oxygène C_e avant l'entrée du réacteur et C_L , la concentration en oxygène à l'intérieur du réacteur sont mesurées. La phase liquide dans le réacteur est supposée parfaitement mélangée.

Le coefficient $k_L a$ peut être déduit de l'expression suivante dérivant du bilan matière décrit par l'équation I.12:

$$K_L \cdot a \cdot V_L (C^* - C_L) = Q_L \cdot (C_L - C_{Le}) \quad \text{I.14}$$

Q_L et V_L sont respectivement le débit liquide et le volume liquide dans le réacteur. Il faut remarquer que lorsque le liquide n'est pas parfaitement mélangé, il est indispensable de connaître l'hydrodynamique du réacteur. L'interprétation des profils de concentration d'oxygène est alors nettement plus compliquée et aléatoire même si elle reste possible.

Contrairement à la méthode en régime transitoire, aucune hypothèse sur l'écoulement de la phase liquide n'est à réaliser puisque dans ce cas, la concentration en oxygène de la phase liquide reste nulle. Seule une hypothèse d'écoulement piston sur la phase gaz peut être envisagée pour accéder facilement au calcul de la concentration moyenne d'équilibre en oxygène.

L'inconvénient de cette méthode est que dans certaines conditions de débit de liquide une concentration supérieure à 2g/l peut être nécessaire pour parvenir à désoxygéner totalement le liquide. Dans ce cas une telle concentration peut modifier l'hydrodynamique du réacteur.

I.5.3.1. 2. Méthodes chimiques :

Les méthodes chimiques sont beaucoup plus utilisées que les méthodes physiques. Elles sont basées sur l'absorption d'un gaz suivie d'une réaction chimique de cinétique connue. Il faut mettre en œuvre une réaction lente dans la phase liquide (Hatzfotiadou, 1989, Bigot, 1990 et Beck, 1994). Dans ce cas, le flux d'absorption est indépendant de la composition du liquide et donc de l'état de mélange de la phase liquide. Pour appliquer cette méthode, il faut choisir un système chimique qui ne modifie pas l'hydrodynamique du milieu et qui vérifie les conditions de régime de réaction lente.

Références bibliographiques

Awwa ; Water treatment plant design .3^e edition. Mc Graw-Hill.New york. (1998).

Beck, Etude de la mise en suspension par bullage de particules synthétiques de faible densité dans un réacteur triphasique : le lit turbulent Thèse de 3^{ème} cycle, INSA Toulouse. (1994).

Belkhadir, R. Etude fondamentale des biomasses fixées : description et modélisation des films biologiques anaérobies. Thèse INSA Toulouse. (1986).

Bigot, Etude des paramètres caractéristiques d'un réacteur à lit fluidisé triphasique : rétention des phases, cartes d'écoulement du gaz et transfert de matière gaz-liquide. Thèse de 3^{ème} cycle, INSA Toulouse. (1990).

Deckwer W.D. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, England. Mixing and mass transfer in tall bubble column Chemical Engineering Science.vol 29, pp. 2177 – 2188. (1992).

Dhaouadi H."Etude d'un réacteur gazosiphon à recirculation externe", Thèse de doctorat, INPL, France(1997).

Hatzfotiadou Contribution à l'étude hydrodynamique et du transfert de matière gaz-liquide dans un réacteur à lit fluidisé triphasique Thèse N° 83, INSA Toulouse. (1989).

Hebrard G, Bastoul D, & Roustan M. Influence of the gas sparger on the hydrodynamic behaviour of bubble columns Transaction. I Chemical Engineering., Vol.74, Part A, pp. 406-414. (1996).

Merchuk.J.C,Gluz.M.Airlift reactors.Encyclopedia of Bioprocess Technology,vol1,p320-353 (1999).

Roustan M. Transferts Gaz-Liquide dans les procédés de traitement des eaux et des effluents gazeux TEC&DOC (2002)

Trambouze P, Van Landeghen h, Vauquier JP les réacteurs chimiques : conception, calcul et mise en œuvre,édition technip Paris (1984)

Trambouze P, Euzen JP les réacteurs chimiques : de la conception à la mise en œuvre edition technip paris (2002)

Van't Riet reviewing of measuring methods and results in non viscous gas-liquid mass transfer in stirred vessels Ind. Eng. Chem. Process Res. Dev., pp. 18 – 213. (1979)

CHAPITRE II

***Synthèse bibliographique sur l'étude
des colonnes à bulles***

II.1-INTRODUCTION :

Les colonnes à bulles classiques sont de construction simple. La figure II.1 montre le schéma général d'une telle colonne. Elle est constituée d'un tube cylindrique dans lequel le liquide (qui peut contenir des particules en suspensions) s'écoule en phase de façon continue. Le liquide et le gaz alimentent la colonne en co-courant ou en contre-courant à travers un distributeur situé en bas de la colonne. Il existe plusieurs configurations possibles de distributeurs de gaz, soit une plaque perforée ayant des trous disposés très variés et des plaques poreuses ayant des structures poreuses très diversifiées. Ces distributeurs dispersent le gaz sous forme de bulles qui montent dans la colonne et qui se dégagent du liquide à la surface de ce dernier. Le gaz sort donc en continu en haut de la colonne. Dans les cas industriels, le haut de la colonne est plus large afin de faciliter le dégagement du gaz.

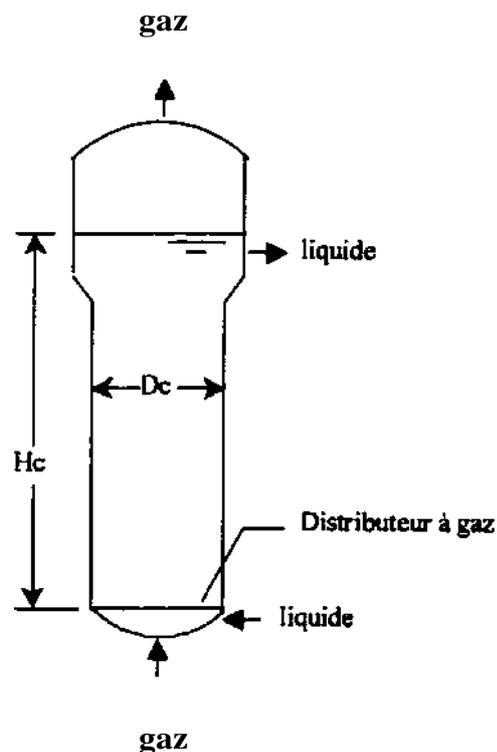


Figure II.1. Structure générale d'une colonne à bulles.

L'agitation du liquide se fait par le passage des bulles dans le liquide. Ainsi, l'agitation ne se fait pas à l'aide de composantes mécaniques. L'énergie nécessaire au fonctionnement des colonnes à bulles est en général plus faible que celle fournie aux agitateurs mécaniques. Cette simplicité de configuration fournit cependant un environnement libre qui engendre des interactions hydrodynamiques très complexes.

II.2- Applications industrielles des colonnes à bulles :

Les colonnes à bulles sont des réacteurs gaz/liquide ou gaz/liquide/solide. Elles permettent l'échange de matière entre les phases mises en jeu. La qualité de ces échanges a un effet direct sur les performances des réacteurs car ils les alimentent en réactifs nécessaires à la réalisation du ou des réactions chimiques. La vitesse de ces échanges dépend quant à elle des caractéristiques d'écoulement et de mélange des phases en contacts.

Les principales caractéristiques géométriques des colonnes à bulles sont : le rapport entre la hauteur du liquide relativement au distributeur à gaz et le diamètre de la colonne (H_c/D_c), le volume du réacteur et la configuration du distributeur à gaz. Le rapport H_c/D_c varie généralement entre 3 à 6 et peut quelquefois atteindre des valeurs proches de 10. Dans l'industrie chimique le volume des colonnes à bulles va de 100 à 200 m³. En biotechnologie leur volume peut être de un à deux ordres de grandeur plus élevées. On peut observer dans la littérature que le volume des colonnes à bulles utilisées en laboratoire est généralement de quelques dizaines de litres.

En plus des caractéristiques géométriques, les facteurs influençant la performance des colonnes à bulle sont : les propriétés physiques de chacune des phases (densité, viscosité, comportement newtonien et non-newtonien, tension de surface, etc.) et les conditions opératoires, soit la pression, la température et la vitesse des phases. La pression et la température peuvent varier considérablement d'une application à une autre et dépendent de la cinétique et de la thermodynamique des réactions mises en jeu. Il est possible d'observer dans la littérature que le liquide est souvent en cuvée ou qu'il est alimenté à des vitesses superficielles plutôt faibles, inférieures à 0.03 m/s. La vitesse superficielle du gaz se situe souvent entre 0.03 et 0.12 m/s dans les cas industriels, mais les études en laboratoire se font quelques fois à des vitesses aussi faibles même moins de 0.01 m/s et dépassent quelquefois 0.12 m/s.

Les applications industrielles des colonnes à bulles touchent principalement trois secteurs : l'industrie chimique, l'environnement et les biotechnologies. Le nombre d'exemples d'applications des colonnes à bulles dans l'industrie chimique est très grand. Ainsi, elles sont utilisées entre autres dans la production de l'acide acétique (Steiner, 1987), du méthanol (Frank et Klosek, 1984) et dans la chloration en chaîne des aromatiques alkylés (Steiner, 1987). En environnement, elles sont utilisées dans le traitement des eaux usées (Forster et coll.1986), comme unité de flottaison (Foot et

coll.1986), dans la décontamination de gaz comme l'absorption du monoxyde d'azote (Sada et al., 1979), etc. En biotechnologie les colonnes à bulles sont utilisées dans la production de pénicilline (Kobayashi et coll.1990), de protéines (Gerstenberg, 1979), de cellules animales (Katinger et coll.1979), etc. Des listes des nombreuses applications des colonnes à bulles peuvent être trouvées dans les ouvrages de (Fan 1989 et de Nigam et Schumpe 1996).

Il existe des variantes de colonnes à bulles. Il est en effet possible d'y insérer plusieurs plateaux (colonnes à bulles multi-étagées), du garnissage (colonnes à garnissage), un autre tube concentrique à celui de la colonne (réacteurs « airlift »), etc. Ces ajouts de structures engendrent des différences fondamentales dans l'écoulement et dans le mélange des phases.

II.3. Caractéristiques hydrodynamiques et de transfert de matière gaz-liquide des colonnes à bulles :

Dans sa forme la plus simple, une colonne à bulles est un cylindre vertical dans lequel du gaz est introduit à sa base à travers un distributeur. Ces colonnes peuvent fonctionner soit en réacteur fermé soit en réacteur ouvert pour la phase liquide. La vitesse superficielle de liquide y est généralement faible (figure II.2).

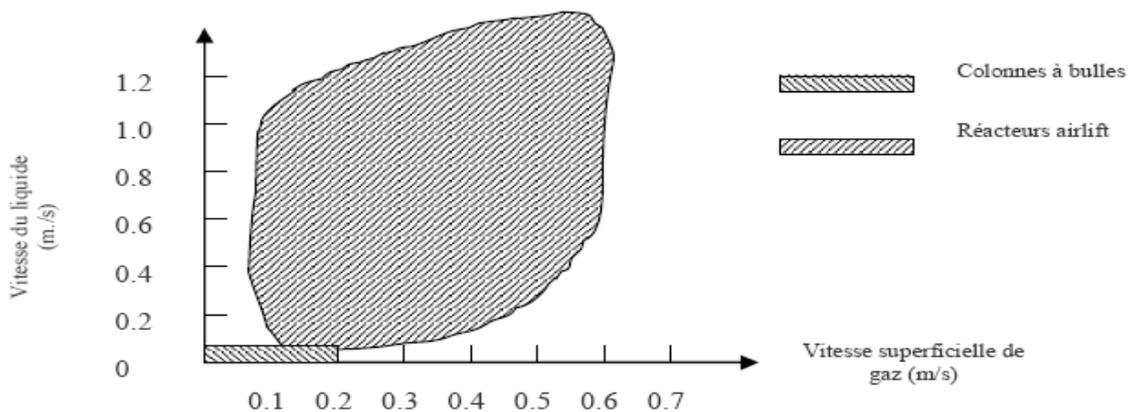


Figure II.2. Domaines de variation de la vitesse superficielle du liquide en colonnes à bulles et airlifts (Merchuk, 1993).

Il existe de nombreuses variantes des colonnes à bulles (Shah et coll., 1982 ; Deckwer, 1992). Les réacteurs à boucle de recirculation interne ou externe appelés réacteurs airlifts, forment une classe importante de ces colonnes à bulles modifiées (Merchuk et Gluz 1999).

Plusieurs travaux de la littérature (Sarraf et coll., 1999; Camarasa et coll., 1999;) ont montré que les principaux facteurs qui influent sur les transitions entre les deux régimes homogène et hétérogène sont:

Le débit de gaz, les propriétés physico-chimiques du système gaz-liquide, le type du distributeur ainsi que les dimensions géométriques de la colonne. (Sarraf et coll.1999) ont examiné l'influence de la géométrie de la colonne sur la transition entre régimes homogène et hétérogène. En se basant sur leurs propres résultats et ceux d'une dizaine de travaux de la littérature, ces auteurs ont montré que la transition est favorisée par une augmentation de la hauteur du liquide dans la colonne (H_C) ou une diminution de son diamètre (D_C). Une augmentation du rapport H_C/D_C tend à favoriser le régime hétérogène. Dans le cas d'un distributeur de gaz de type plateau perforé, les mêmes auteurs ont noté que l'augmentation du diamètre de l'orifice tend à avancer la transition tandis que l'augmentation de la distance entre les orifices tend au contraire à la retarder.

La figure II.3 présente un diagramme des domaines d'existence des différents régimes d'écoulement en fonction du diamètre de la colonne avec un distributeur de type fritté pour le système air-eau (Shah et coll., 1982).

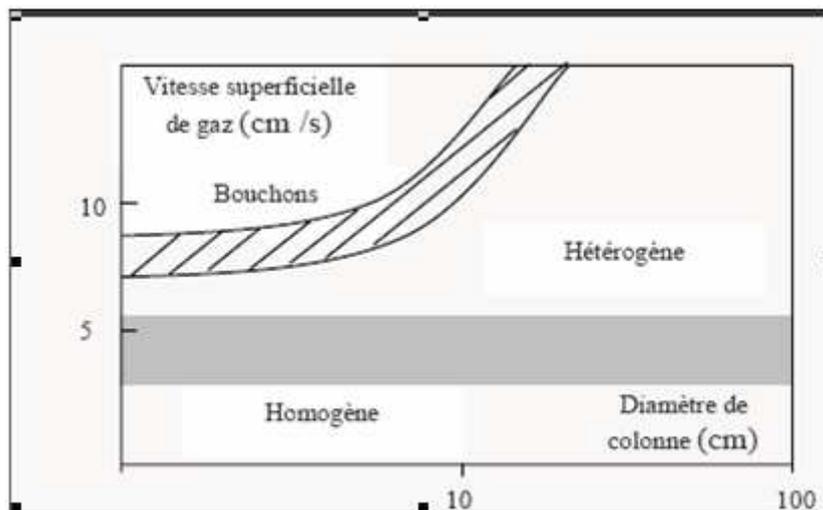


Figure II.3. Transitions entre régimes d'écoulement en colonne à bulles avec un fritté pour le système air-eau d'après (Shah et coll.1982).

Certains auteurs (Deckwer, 1992 ; Garcia-Ochoa et coll.1997) ont précisé que la transition homogène/hétérogène débute au voisinage d'une vitesse superficielle de gaz $U_g \approx 4$ cm/s dans le cas du système air-eau. Cependant, elle apparaît plus tardivement pour les systèmes inhibiteurs de coalescence (Camarasa et coll., 1999).

Le dimensionnement et l'extrapolation des colonnes à bulles nécessitent la connaissance des paramètres hydrodynamiques et de transferts de matière et de chaleur qui sont fortement influencés par les régimes d'écoulement. Dans l'industrie, la majorité des colonnes à bulles fonctionnent en régime hétérogène. Cependant, le régime homogène est aussi bien rencontré, en particulier dans les colonnes à bulles fonctionnant à pression élevée. La plupart des auteurs (Garcia-Ochao et coll., 1997; Zahradnik et coll., 1997) ont montré que le régime homogène est observé pour les faibles débits de gaz ($U_g < 5 \text{ cm/s}$) et est caractérisé par une distribution de taille des bulles uniforme et un taux de rétention du gaz radialement uniforme (figure II.4). Les phénomènes de coalescence et de rupture des bulles sont négligeables; la taille des bulles et la rétention gazeuse sont donc contrôlées par le type de distributeur de gaz et les propriétés physico-chimiques du système gaz-liquide utilisé. Les bulles se déplacent à peu près verticalement avec de faibles oscillations latérales et il n'y a pas de circulation liquide à grande échelle.

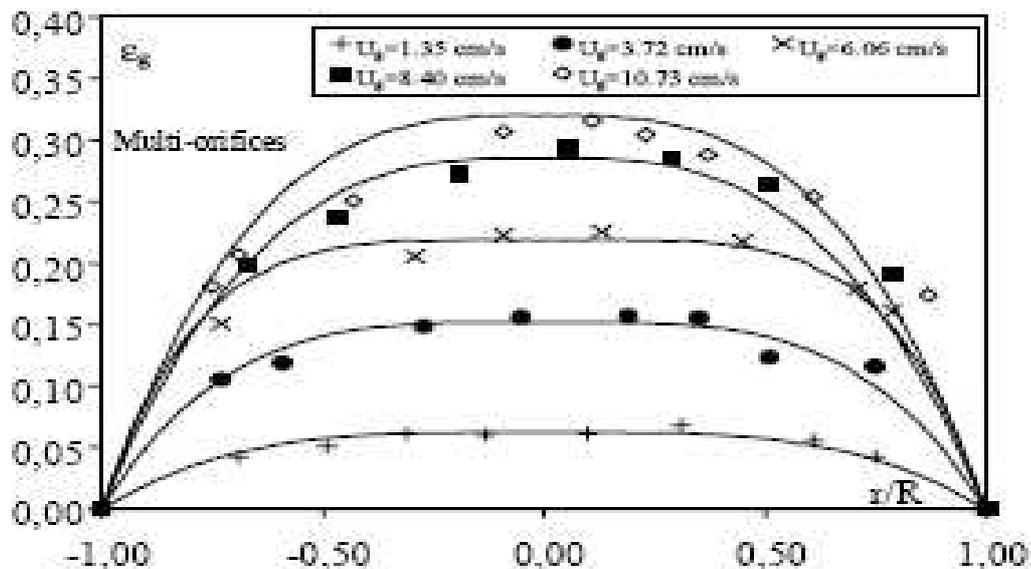


Figure II.4. Evolution du taux de vide local avec le distributeur multi-orifices (Camarasa et coll., 1999).

Le régime hétérogène apparaissant aux grands débits de gaz ($U_g > 7 \text{ cm/s}$). Dans ce cas, le régime homogène ne peut pas être maintenu et un écoulement instable apparaît. On observe la formation des bulles de grande taille. Si le diamètre de la colonne est petit, ces grosses bulles atteignent la taille de la colonne et on obtient l'écoulement en bouchons. La transition et

le régime hétérogène établi sont caractérisés par une large distribution de taille des bulles et l'existence d'un profil radial de la rétention gazeuse. Une partie du gaz est transportée sous forme de grosses bulles, tandis que les petites se déplacent au voisinage des parois avec des vitesses ascensionnelles plus faibles. Les phénomènes de coalescence et de rupture jouent donc un rôle important dans la formation des grosses bulles et la distribution des tailles des bulles ne dépend plus du distributeur à partir d'une hauteur de colonne supérieure à cinq fois son diamètre (Joshi et coll., 1990).

Dans de nombreux travaux de la littérature, la transition et le régime hétérogène établi sont confondus (Chen et coll., 1994; Zahradnik et coll., 1997). Ces auteurs ont proposé une description spatiale plus fine de la transition et du régime hétérogène établi en colonnes à bulles qu'ils ont nommées respectivement écoulement en spirale et turbulent. Le premier correspond à la transition et au début du régime hétérogène, tandis que le second correspond au régime hétérogène établi. L'écoulement en spirale est caractérisé par la présence de trois zones :

- une zone centrale en forme de spirale avec les grosses bulles où se déroulent les phénomènes de coalescence et de rupture. Les bulles groupées en agrégats, se déplacent en suivant la forme de la spirale avec des vitesses élevées. Cette zone oscille sans cesse latéralement et contrôle la structure globale de l'écoulement.
- une zone avec des vortex qui recirculent localement le liquide vers le bas et les bulles de petite taille vers le haut. Les vortex, en forme de petites spirales, s'enroulent autour de la zone centrale et oscillent verticalement en suivant les oscillations de cette zone.
- une zone de liquide descendant proche de la paroi caractérisée soit par l'absence de bulles, soit par la présence de très petites bulles.

Lorsque de très grosses bulles se forment, la structure de l'écoulement en spirale est détruite. Le mouvement du liquide est assuré par les grosses bulles qui le dispersent en montant et le transportent dans leur traînée. Cependant, le mélange est finalement moins bon qu'avec l'écoulement en spirale selon ces auteurs.

II.3.1 Coefficient de dispersion en phase gazeuse :

Le coefficient de dispersion en phase gazeuse est lié au mouvement des bulles. Il est gouverné par la circulation du liquide induite par les phénomènes de coalescence et de rupture des bulles. Contrairement à la phase liquide, les performances des colonnes à bulles sont fortement influencées par la dispersion en phase gazeuse (Deckwer et Schumpe, 1993).

Cependant, le modèle piston avec dispersion axiale peut être utilisé pour représenter globalement l'écoulement de la phase gazeuse (Towell et Ackerman, 1972).

(Heijnen et Van't Riet.1984) ont précisé que dans une colonne de faible diamètre ($H_c/D_c > 10$), la phase gazeuse peut être considérée comme en écoulement piston, tandis que dans une colonne de grand diamètre ($H_c/D_c \leq 3$), l'écoulement est considéré comme parfaitement mélangé. La plupart des auteurs (Shah et coll. 1978) s'accordent sur le fait que lorsque la hauteur de la colonne est suffisamment importante par rapport au diamètre, l'écoulement de la phase gazeuse peut être considéré comme celui d'un réacteur piston parfait. Un résumé exhaustif des corrélations permettant d'évaluer le coefficient de dispersion axiale en phase gazeuse a été présenté par (Deckwer et Schumpe .1993).

Un modèle théorique a été proposé par (Shetty et coll.1992 et Kantak et coll.1995) pour la prédiction du coefficient de dispersion en phase gazeuse. Ce modèle suppose une distribution bimodale de la phase gazeuse avec les grosses bulles en écoulement piston tandis que les petites bulles sont partiellement mélangées.

II.3.2. Régimes hydrodynamiques :

Suivant la vitesse superficielle du gaz u_G , trois types d'écoulement peuvent se présenter dans le cas d'un fluide newtonien.

- A faible vitesse superficielle de gaz (généralement $u_G < 5$ cm/s), on observe le régime homogène encore appelé écoulement à bulles ou bubbly flow (figure II.5). Le gaz s'écoule sous forme de bulles sphériques (dont le diamètre dépend des orifices du distributeur et des propriétés des autres phases). Il n'y a pas de coalescence, la rétention de gaz varie linéairement avec la vitesse superficielle du gaz (figure II.6).

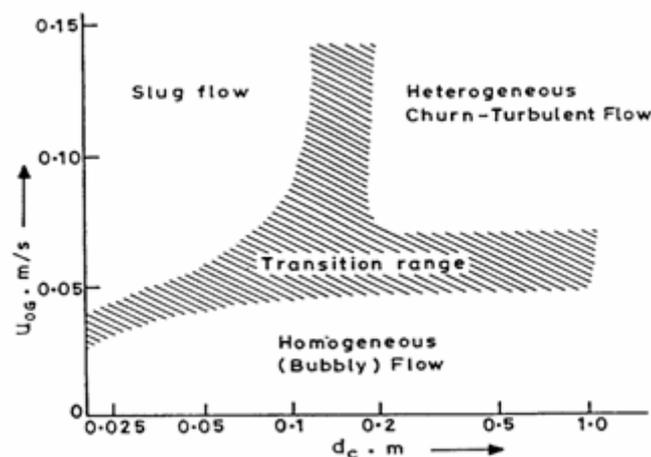


Figure II.5. Influence du diamètre des colonnes sur le régime d'écoulement.

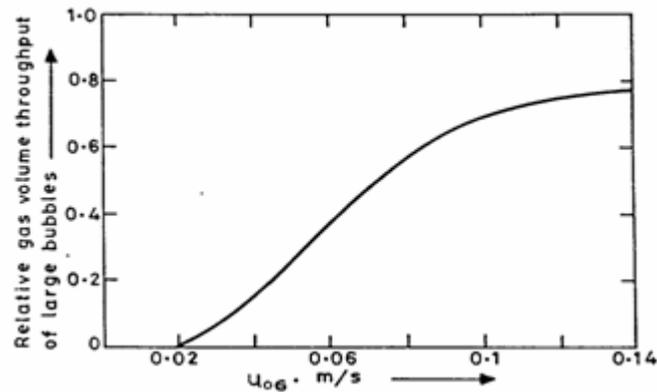


Figure II.6. Evolution du volume de gaz en fonction de la vitesse.

-Lorsque la vitesse superficielle du gaz augmente (u_G aux environ de 10 cm/s), on observe le régime hétérogène encore appelé churn flow. Des bulles, dont seule la partie avant est de forme sphérique sont de diamètres différents et se créent par coalescence de bulles plus petites. Elles se déplacent avec des vitesses ascensionnelles différentes. Ce phénomène diminuant l'aire de transfert est néfaste vis à vis du transfert gaz-liquide. La relation entre la vitesse superficielle du gaz et la rétention devient plus complexe (elle dépend même du distributeur). C'est le régime de fonctionnement des applications industrielles.

-Enfin, lorsque le diamètre de la colonne est petit (<15 cm) et la vitesse superficielle du gaz suffisante (peut être le cas des colonnes de laboratoire), On peut observer un troisième régime : l'écoulement slug flow, des bouchons de gaz du diamètre de la colonne se déplacent dans la colonne.

La définition du régime d'écoulement d'une colonne industrielle (toujours opaque) en fonctionnement est difficile et constitue actuellement un sujet de recherche. Le design de ces colonnes par la mécanique des fluides numériques en est à ses débuts. Le principal obstacle aux développements réside dans la méconnaissance des phénomènes physico-chimiques relatifs aux bulles et à leur coalescence.

II.3.3. Rétention gazeuse :

Le taux de rétention de la phase gazeuse est une caractéristique hydrodynamique importante des colonnes à bulles car il contribue à la détermination d'autres paramètres tels que la nature des régimes d'écoulement, les coefficients de transfert et l'aire interfaciale. Ce taux est défini comme étant le rapport du volume occupé par les bulles au volume total de la dispersion gaz-liquide. Dans la littérature ont conduit à un grand nombre de corrélations empiriques. Un résumé des différentes études avec les conditions opératoires utilisées a été présenté par (Shah et coll.,1982). La dispersion des résultats expérimentaux ne permet pas de retenir une

corrélation unique. Cela s'explique en grande partie par la sensibilité de la rétention gazeuse aux propriétés physico-chimiques du système gaz-liquide et à la présence d'impuretés dans la phase liquide (Camarasa et coll.1999). La plupart des auteurs (Deckwer, 1992) ont montré que la rétention gazeuse globale varie linéairement avec la vitesse superficielle du gaz (U_g) et leurs résultats expérimentaux sont bien corrélés par une relation de type:

$$\varepsilon_g = f(U_g^n)$$

Où l'exposant n dépend du régime d'écoulement. En régime homogène, n est compris entre 0,7 et 1 pour le système air-eau. Des valeurs supérieures à 1 ont été obtenues pour des systèmes inhibiteurs de coalescence dans le cas d'un distributeur de gaz du type fritté (Shah et coll.1982). Un résumé exhaustif des corrélations a été présenté par (Deckwer et Schumpe 1993 et Behkish et coll. 2005). La rétention gazeuse peut être aussi estimée à partir de la vitesse relative des phases (U_{gL}) par la relation suivante :

$$U_{gL} = \frac{U_g}{\varepsilon_g} - \frac{U_L}{1 - \varepsilon_g} = V_{b\infty} (1 - \varepsilon_g)^{\alpha-1} \quad \text{II.1}$$

Où $V_{b\infty}$ est la vitesse terminale ascensionnelle d'une bulle (m/s).

Pour un fonctionnement en système fermé à la phase liquide ($U_L=0$), l'équation (II.1) peut s'écrire :

$$\frac{U_g}{\varepsilon_g} = V_{b\infty} (1 - \varepsilon_g)^{\alpha-1} \quad \text{II.2}$$

L'exposant α dépend des caractéristiques des bulles qui dépendent de la vitesse superficielle du gaz, des propriétés physico-chimiques du système gaz-liquide et du distributeur de gaz. Cependant, il est nécessaire de connaître la taille des bulles pour calculer la rétention gazeuse à partir de cette approche. Les principales corrélations de la littérature entre la rétention gazeuse et la vitesse relative en régime homogène sont résumées dans le tableau (II.1). La corrélation de Richardson et Zaki (1954) est souvent recommandée, car elle s'applique jusqu'à une rétention gazeuse de l'ordre de 30% (Shah et coll., 1982).

Références	Corrélations
Turner (1966)	$U_{gL} = V_{b\infty}$
Davidson et Harrisson (1966)	$U_{gL} = \frac{V_{b\infty}}{1 - \varepsilon_g}$
Richardson et Zaki (1954)	$U_{gL} = V_{b\infty} (1 - \varepsilon_g)^{1,39}$
Lockett et Kirkpatrick (1975)	$U_{gL} = V_{b\infty} (1 - \varepsilon_g)^{1,39} (1 + 2,55\varepsilon_g^3)$

Tableau II. 1. Principales corrélations de la littérature entre ε_g et U_{gL} en régime homogène.

En régime homogène, l'uniformité de la distribution des bulles sur la section droite de l'écoulement y induit celle de la rétention gazeuse sauf à proximité des parois (Camarasa et coll., 1999). Sa variation locale peut être représentée par une relation du type (Vial et coll., 2001) :

$$\varepsilon_{g,locale}(r) = \varepsilon_{g,globale} \left(\frac{m+2}{m} \right) \cdot \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^m \right) \quad \text{II.3}$$

Tel que : $2 \leq m \leq 12$

Selon les travaux de (Fransolet et coll., 2001) on spécifie les points suivantes peuvent être tirées:

- La vitesse superficielle du gaz a un effet notable sur ε_g surtout en régime homogène
- En général, la rétention gazeuse diminue lorsque la viscosité du liquide augmente. Ceci peut être interprété par une augmentation de la taille des bulles due au phénomène de coalescence et donc une augmentation de leur vitesse ascensionnelle. Il semble qu'il n'y ait plus d'influence de la viscosité au-delà de 0,04 à 0,05 Pa s.

La diminution de ε_g est représentée par diverses corrélations de la littérature intégrant l'effet de la viscosité (**Shah** et coll. 1982; Fransolet et coll, 2005). Elles sont habituellement de la forme $\varepsilon_g = aU_g^b \mu_{eff}^{-c}$. μ_{eff} est la viscosité effective.

- **Shah** et coll. (1982) : a=0,225 ; b= 0,532 et c=0,146 pour les solutions de CMC
- **Fransolet** et coll. (2005) : a=0,26 ; b= 0,54 et c=0,147 pour les solutions de xanthane

II.3.3.1. corrélations pour calcul de la Rétention du gaz

La rétention du gaz est une fonction croissante du débit de gaz. , elle croît tout d'abord linéairement avec celui-ci puis tend vers un palier et dépend du distributeur. Lorsque les systèmes ont tendance au moussage, il ne faut pas espérer que des corrélations générales donnent de bons résultats, le problème devenant spécifique. Diverses corrélations ont été proposées par plusieurs auteurs :

Akita et Yoshida (1973) :

$$\frac{\varepsilon_G}{(1-\varepsilon_G)^4} = C \left(\frac{\rho_L g D_C^2}{\sigma} \right)^{1/8} \left(\frac{g D_C^3}{v_L^2} \right)^{1/12} \frac{u_G}{\sqrt{g D_C}} \quad \text{II.4}$$

D_C diamètre de la colonne (n'intervient pas dans le résultat).

$C = 0.2$ sans électrolytes et 0.25 avec électrolytes.

u_G vitesse superficielle du gaz.

Koide (1984) a donné la corrélation suivante :

$$\frac{\varepsilon_G}{(1-\varepsilon_G)^4} = \frac{C \left(\frac{u_G \mu_L}{\sigma} \right)^{0.918} \left(\frac{g \mu_L^4}{\rho_L \sigma^3} \right)^{-0.252}}{1 + 4.35 \left(\frac{\phi_S}{\rho_S} \right)^{0.748} \left(\frac{\rho_S - \rho_L}{\rho_L} \right)^{0.881} \left(\frac{D_C u_G \rho_L}{\mu_L} \right)^{-0.168}} \quad \text{II.5}$$

ϕ_S : masse de solide par unité de volume liquide.

$C = 0.277$ sans électrolytes et 0.364 avec électrolytes.

Van Dierendonck(1970) a proposé une corrélation testée sur des systèmes organiques (polyéthylène basse pression, oxydation du cyclohexane, toluène) réputée non fiable pour l'hydrogène.

$$\varepsilon_G = 1.2 \left(\frac{\mu_L u_G}{\sigma} \right)^{1/4} \left(\frac{u_G}{\left(\frac{\sigma g}{\rho_L} \right)^{1/4}} \right)^{1/2} \quad \text{II.6}$$

Tandis que l'équation II.7 a été donnée par Mashelkar (1970).

$$\varepsilon_G = \frac{1000 u_G \left(\frac{\sigma_{H20}}{\sigma \rho_L} \right)^{1/3}}{30 + 200 u_G} \quad \text{II.7}$$

En fin Yamashita et Inoue (1975) ont proposé l'équation qui suit.

$$\varepsilon_G = \frac{u_G}{2.2 u_G + 0.3 (g D_C)^{1/2}} \quad \text{II.8}$$

Pour des systèmes particuliers, (Deckwer 1979) suggère pour la synthèse Fischer Tropsch la corrélation suivante :

$$\varepsilon_G = 0.015 + 0.053 (100 u_G)^{1.1} \quad \text{II.9}$$

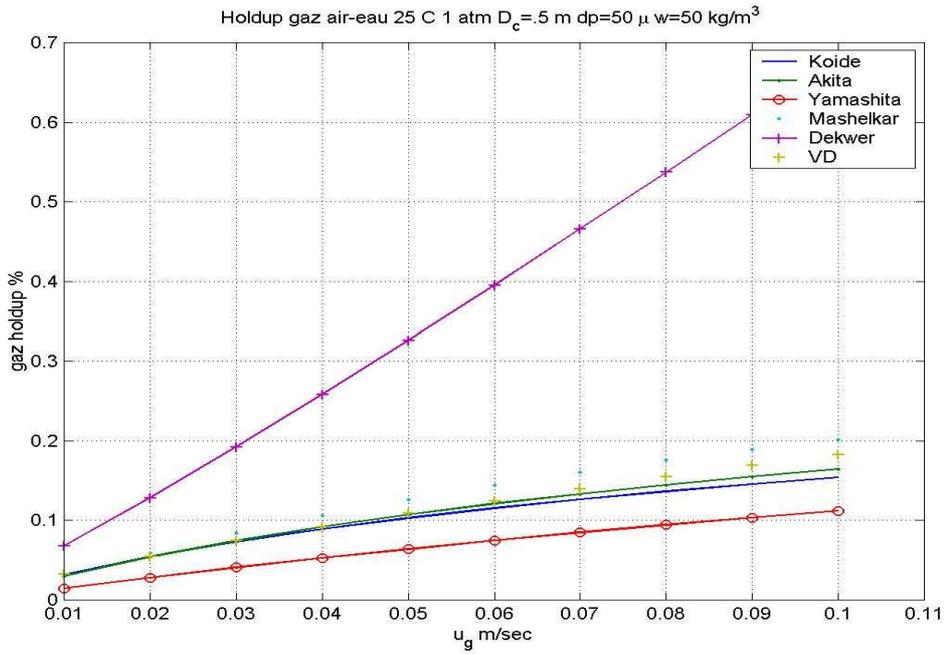


Figure II.7. Evolution de la rétention en fonction de la vitesse.

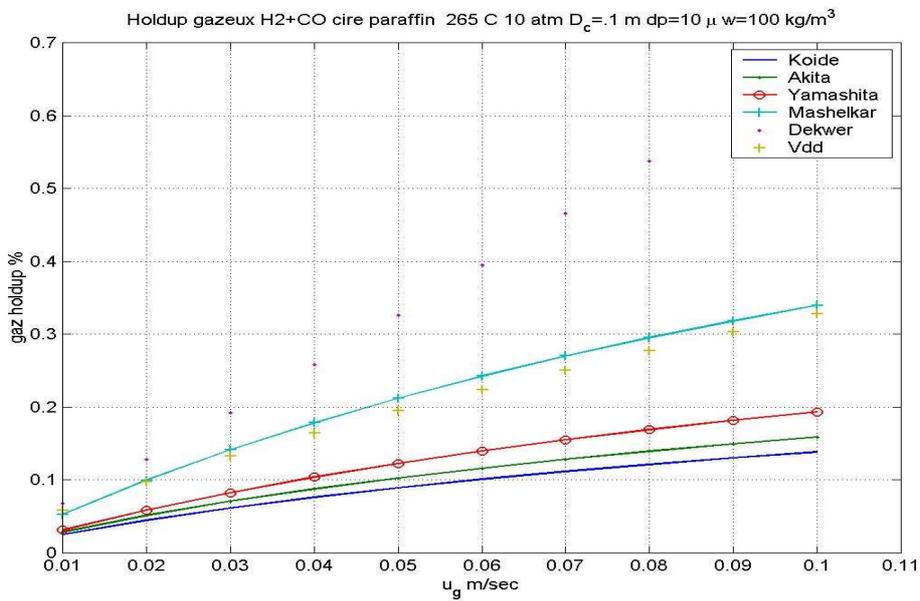


Figure II.8. Rétention gazeuse en fonction de la vitesse pour H₂-CO.

II.3.3.2. Vitesse minimale du gaz :

Il existe une vitesse minimale du gaz au dessus de laquelle le solide est

entièrement en suspension dans la colonne. Afin d'obtenir une suspension homogène, il est nécessaire d'utiliser une vitesse de 3 à 5 fois supérieure à cette limite.

Selon Roy (1964) l'équation II.14 est la suivante:

$$\frac{w}{\rho_L} = 6.810^{-4} C_\mu \frac{D_C u_G \rho_G}{\mu_G} \left(\frac{\sigma \varepsilon_G}{u_G \mu_L} \right)^{-0.23} \left(\frac{\varepsilon_G u_T}{u_G} \right)^{-0.18} (1 + \cos \theta)^{-3} \quad \text{II.10}$$

$$u_T = \frac{g d_p^2 (\rho_L - \rho_S)}{18 \mu_L} \quad Re_P < 0.4 \text{ (régime de Stokes)}$$

$$u_T = \frac{0.0178 g^2 (\rho_L - \rho_S)^2}{\rho_L \mu_L} \quad 0.4 < Re_P < 500$$

$$Re_P = \frac{u_T \rho_L d_p}{\mu_L}$$

$$C_\mu = 0.232 - 0.1788 \log_{10} \mu_L + 0.1026 (\log_{10} \mu_L)^2 \quad \mu_L \text{ en unités CGS}$$

w kg de solide par m^3 de réacteur.

θ angle de contact gaz liquide solide.

u_T vitesse de chute terminale.

Alors que Koide (1984) propose l'équation ci-dessous :

$$\frac{u_G}{u_T} = 0.801 \left(\frac{\rho_S - \rho_L}{\rho_L} \right)^{0.6} \left(\frac{w}{\rho_S} \right)^{0.146} \left(\frac{\sqrt{g D_C}}{u_T} \right)^{0.24} \left(1 + 807 \left(\frac{g \mu^4}{\rho_L \sigma^3} \right)^{0.578} \right) \quad \text{II.11}$$

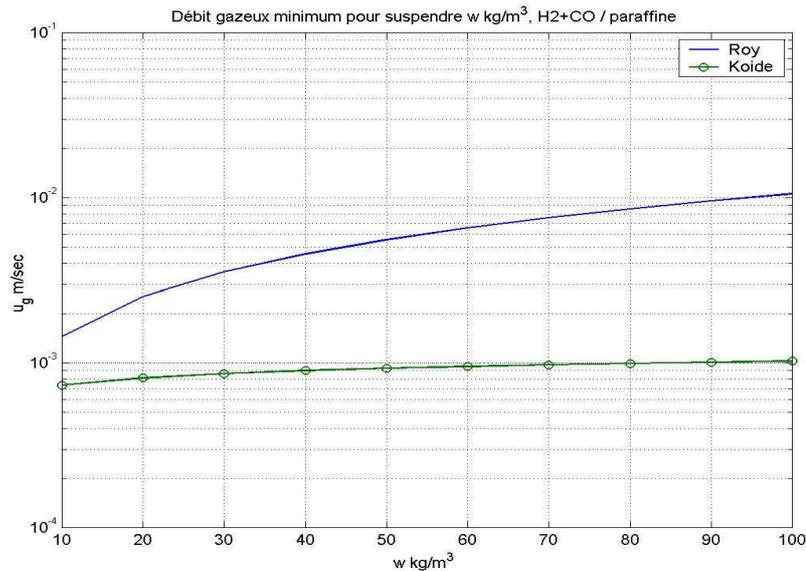


Figure II.9. Débit gazeuse minimum pour H₂-CO /paraffine.

II.3.4- Transfert de matière gaz-liquide en colonnes à bulles classiques :

L'étude des phénomènes de transfert de matière gaz-liquide est incontournable dans n'importe quel procédé réactionnel gaz-liquide ou gaz-liquide-solide. Aussi, les performances globales de ces procédés en dépendent généralement.

Les colonnes à bulles sont des réacteurs polyphasiques qui sont largement utilisées dans les industries chimiques et biotechnologiques pour mettre en œuvre des réactions lentes.

L'influence du coefficient de transfert de matière côté gaz k_{Ga} est souvent négligeable (Deckwer et Schumpe, 1993). Le coefficient volumique de transfert de matière côté liquide k_{La} est suffisant pour décrire le flux de transfert de matière gaz-liquide (Deckwer, 1992). Le transfert de matière entre les phases peut intervenir au niveau de la sélectivité des réactions, dans la mesure où le flux de transfert de matière, pour un système réactionnel donné, diffère d'un soluté gazeux à un autre.

Plusieurs travaux concernant le transfert de matière gaz-liquide dans les colonnes à bulles ont été publiés (Akita et Yoshida, 1973 ; Hikita et coll., 1981) et malgré cela un désaccord existe entre certaines études, surtout en ce qui concerne l'effet de la présence du solide. A partir de ces travaux, les conclusions suivantes peuvent être tirées :

- Le coefficient volumique de transfert de matière gaz-liquide (K_{La}) est une fonction croissante de la vitesse superficielle du gaz, cependant cette augmentation est fortement liée aux régimes d'écoulement. En régime homogène, le rythme d'augmentation de K_{La} avec la vitesse superficielle de gaz est plus important que celui du régime hétérogène. En effet,

l'augmentation de la taille des bulles due au phénomène de coalescence induit une faible croissance de l'aire interfaciale et donc le rythme d'augmentation de K_{La} baisse.

De même, certains auteurs (Vandu et Krishna, 2004), ont conclu que le rapport K_{La}/ϵ_g , représentant le transfert de matière volumique par unité de volume gazeux, s'avère pratiquement indépendant de la vitesse superficielle du gaz en régime hétérogène.

- Le coefficient volumique de transfert de matière gaz-liquide est indépendant de la vitesse superficielle du liquide surtout aux faibles valeurs (Garcia- Ochoa et coll., 1997).

- K_{La} diminue lorsque la viscosité du liquide augmente et donc le transfert d'oxygène peut devenir un facteur limitant dans le cas des fermentations aérobies. Cette baisse a été attribuée à une diminution importante de l'aire interfaciale et du coefficient de transfert de matière côté liquide (Schumpe et Deckwer, 1982). De même, (Akita et Yoshida ,1973) et ont noté que K_{La} diminue lorsque la tension superficielle du liquide s'accroît. L'influence de la force ionique sur K_{La} a été examinée par (Chang et coll.,1986). Ces auteurs ont montré que K_{La} augmente avec la force ionique.

- La plupart des auteurs (Garcia-Ochoa et coll.1997, Behkich et coll., 2002) confirment que K_{La} diminue en présence du solide. Cependant, l'écart entre les valeurs de K_{La} pour les systèmes diphasique et triphasique dépend du diamètre et de la densité des particules.

Cela a été confirmé par (Garcia-Ochoa et coll.1997) qui ont noté que les valeurs de K_{La} relatives aux billes de verre de densité 2450 kg/m^3 sont plus faibles que celles obtenues avec des particules de pyrite de densités plus élevées (4482 et 4700 kg/m^3). Les mêmes auteurs ont trouvé que, dans le cas des billes de verre, K_{La} augmente légèrement avec la taille des particules pour des diamètres inférieurs à $85 \mu\text{m}$, mais diminue fortement au delà de cette valeur. (Koïde et coll.,1984) ont expliqué ce comportement par l'augmentation du phénomène de coalescence qui peut être attribuée à l'accroissement de la viscosité apparente de la suspension. En revanche, l'obtention des valeurs de K_{La} avec des particules de pyrite plus forte que celles en présence des billes de verre peut être liée aux fines particules de pyrite (diamètre inférieur à $10 \mu\text{m}$) qui inhibent la coalescence des bulles.

Par ailleurs,(Nigam et Schumpe.1987) confirment que, pour des particules de diamètre supérieur à $50 \mu\text{m}$, K_{La} diminue quand la concentration du solide augmente.

- Certains auteurs (Jordan et Schumpe, 2001) ont étudié l'effet de la densité du gaz sur K_{La} . Ils ont rapporté que K_{La} dépend fortement de la vitesse du gaz et de la densité dont elle est une fonction croissante.

- Le coefficient volumique de transfert de matière est indépendant du diamètre de la colonne .

Le coefficient volumique de transfert de matière est déterminé soit expérimentalement, soit estimé par des corrélations de la littérature. Un résumé exhaustif des corrélations usuelles a été présenté par (Deckwer, 1992 ; Deckwer, 1993 ; Behkish et coll., 2002).

Les corrélations recommandées par ces auteurs pour la prédiction des paramètres de transfert sont regroupées selon les conditions opératoires et selon le système gaz-liquide-solide utilisé.

II.3.4.1 Coefficient de transfert gaz liquide :

La résistance au transfert de matière est généralement négligeable du côté gaz (sauf cas de gaz très solubles). Des corrélations de k_G , K_{GL} et $K_{GL}a$ existent mais négligent souvent le rôle du solide. On sait qu'à forte concentration, le solide favorise la coalescence des bulles et modifie l'aire de transfert.

Akita et Yoshida (1974)

$$\frac{k_{GL}aD_C^2}{D} = 0.6 \left(\frac{v_L}{D} \right)^{0.5} \left(\frac{\rho_L g D_C^2}{\sigma_L} \right)^{0.62} \left(\frac{g D_C^3}{v_L^2} \right)^{0.31} \varepsilon_G^{1.1} \quad \text{II.12}$$

D diffusion moléculaire.

D_C : diamètre de colonne, il doit être limité à 0.6 m. Dans cette corrélation. L'effet de la vitesse superficielle du gaz est introduit par l'intermédiaire de la rétention de gaz.

Kastanek (1977)

$$k_{GL}a = 0.02875(100u_G)^{0.65} \varepsilon_G^{0.35} (1 - \varepsilon_G)^{0.65} \quad \text{II.13}$$

Gestrich (1978)

$$k_{GL}a = 0.0424(100u_G)^{0.21} \left(\frac{L}{D_C} \right)^{-0.561} \left(\frac{\rho_L \sigma^3}{g \mu_L^4} \right)^{0.116} \varepsilon_G \quad \text{II.14}$$

L est la hauteur de liquide.

Les résultats de ces 3 relations sont illustrés en utilisant la relation de Mashelkar (1970) pour le calcul de la rétention du gaz.

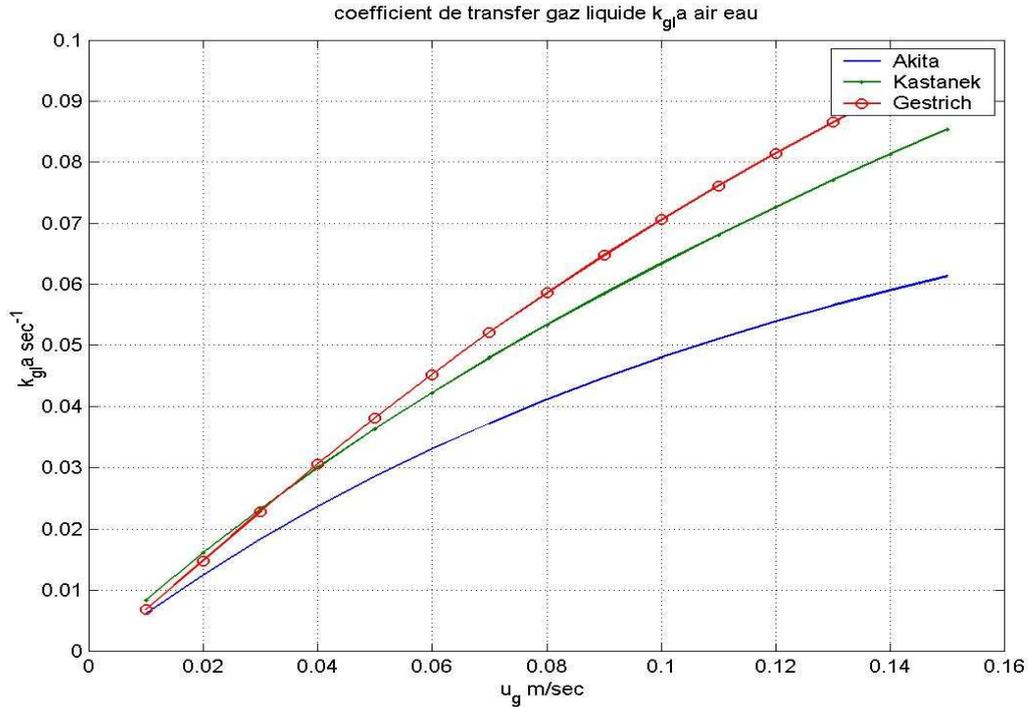


Figure II.10. Variation du coefficient de transfert en fonction de la vitesse.

II.3.4.2. Corrélations pour le calcul des valeurs de k_{La} :

Pour les contacteurs à bulles, les valeurs de k_{La} rencontrées dans la bibliographie sont souvent très variables et différentes selon les paramètres étudiés (Akita et Yoshida, 1973, Bouaifi et coll.2001, Kastanek et coll.1977) :

Conditions opératoires :

- Régime de bullage
- Vitesse et direction du gaz et du liquide
- Puissance dissipée

Distributeurs de gaz :

- Type (poreux, plaque percée, membrane)
- Diamètre des orifices des distributeurs
- Nombre des distributeurs

Réacteur :

- Type (colonne à bulle, air lift et mélangeur statique)
- Taille (diamètre et hauteur de la colonne)

Propriété du liquide :

-Physico-chimie (viscosité, tension superficielle).

A partir des paramètres influençant les valeurs du $k_L a$, certains auteurs ont établi des corrélations pour différents types des contacteurs à bulles.

Dans le cas des colonnes à bulles (Kastanek et coll.1977) ont établi leur équation à partir du modèle de Higbie et de la théorie de la turbulence isotrope de Kolmogoroff :

$$K_L a = \frac{U_G \cdot (U_G + c)^{\frac{13}{20}}}{2 \cdot U_G} \quad \text{II.15}$$

+

où « c » est une constante dimensionnelle.

Deckwer et coll. (1974) proposent une corrélation empirique du type :

$$K_L a = b \cdot U_G^n \quad \text{II.16}$$

Selon (Deckwer et coll. 1974 et Kastanek et coll. 1977), la valeur de l'exposant n varie de 0,78 à 0,82. La valeur de la constante b rapportée par Deckwer et coll. (1974), est fortement influencée par le type de distributeur utilisé (poreux ou plaque percée) et par les propriétés du milieu (eau pure ou solution de NaCl).

Akita et Yoshida (1973) mesurent les coefficients de transfert en utilisant la méthode chimique au sulfite avec différents diamètres de colonnes à bulles. Leurs résultats conduisent à la corrélation adimensionnelle suivante :

$$\frac{K_L a \cdot D_c^2}{D_{AB}} = 0.6 \left(\frac{V_L}{D_A} \right)^{0.5} \cdot \left(\frac{g \cdot D_c^2 \cdot \rho_L}{\sigma} \right) \cdot \left(\frac{g \cdot D_c^3}{V_L^2} \right) \cdot \mathcal{E}_G^{1.1} \quad \text{II.17}$$

Il est donc possible de définir l'équation II.16 par :

$$K_L a = D_c^{0.17} \cdot U_G^{0.7}$$

Cette corrélation donne de bons résultats dans le cas où le gaz est dispersé dans la colonne par des distributeurs de type plaque percée ou buse unique. Pour des distributeurs poreux ou des membranes, les valeurs de $k_L a$ prédites par l'équation II.17 sont sous-estimées.

(Hikita et coll.1981) ont proposé la corrélation empirique suivante en considérant différents gaz et des diamètres de colonne de 10 et 19 cm :

$$k_L a = \frac{14.9 \cdot g \cdot f_o}{U_G} \cdot \left(\frac{U_G \cdot \eta_L}{\sigma_L} \right)^{1.76} \cdot \left(\frac{\eta_L^4 \cdot g}{\rho_L \cdot \sigma_L^3} \right)^{-0.284} \cdot \left(\frac{\eta_G}{\eta_L} \right)^{0.243} \cdot \left(\frac{\eta_L}{\rho_L \cdot D_A} \right)^{-0.604} \quad \text{II.18}$$

La valeur de f_o est égale à 1 pour les solutions non-électrolytiques (eau, butanol, méthanol et sucre). Elle est de 1.0681 et de 1.114 pour les solutions électrolytiques respectivement inférieures à 1 g ion/l et supérieures à 1 g ion/l.

II.3.4.3. Dispersion axiale du liquide :

Divers auteurs ont corrélié le coefficient de dispersion axiale du liquide avec la vitesse superficielle du gaz et du diamètre de la colonne.

Deckwer (1974)

$$D_L = 2.710^{-4} (100D_C)^{1.4} (100u_G)^{1.3} \quad \text{II.19}$$

Hikita et al. (1975)

$$\frac{D_L}{\sqrt{gD_C^3}} \left(\frac{g\mu_L^4}{\rho_L \sigma^3} \right)^{0.03} = 0.037 + 0.188 Fr^{0.36} \quad \text{II.20}$$

$$Fr = \frac{u_G^2}{gD_C}$$

Kato et al. (1972)

$$\frac{u_G D_C}{D_L} = \frac{13 Fr^{0.5}}{1 + 6.5 Fr^{0.4}} \quad \text{II.21}$$

Le résultat de ces corrélations est reporté pour le système air-eau-silice pour $D_C = 0.1$ m en rappelant que le nombre de Péclet utilisé dans les équations de bilans est rapporté à la longueur de la colonne et à la vitesse interfacielle.

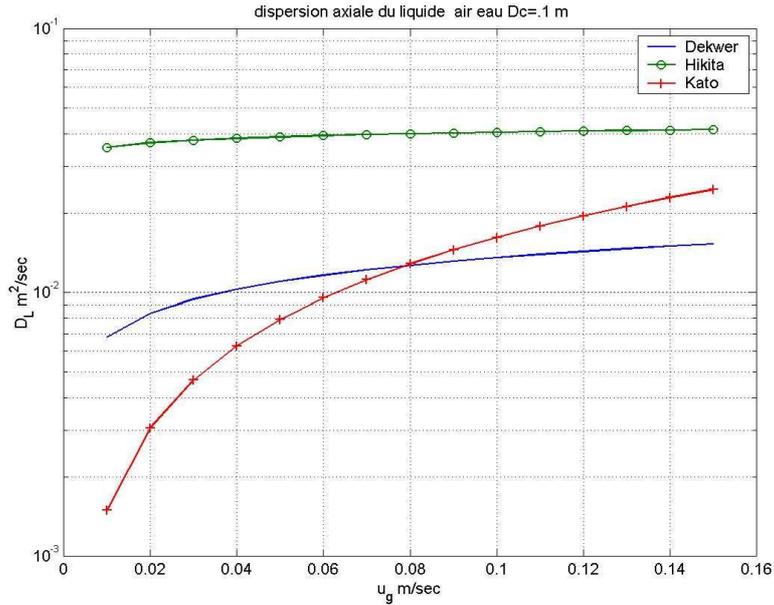


Figure II.11. Variation de la dispersion axiale en fonction de la vitesse.

II.3.4.4. Dispersion axiale du gaz :

Les résultats expérimentaux semblent rares et dispersés. Field et Davidson (1980) obtiennent sur des colonnes de grands diamètres la relation suivante :

$$D_G = 56.4 D_C^{1.33} \left(\frac{u_G}{\mathcal{E}_G} \right)^{3.56} \quad \text{II.22}$$

Mangartz et Pilhofer (1981) donnent une corrélation obtenue sur des colonnes de diamètre égale à 0.1 m

$$D_G = 50 D_C^{1.5} \left(\frac{u_G}{\mathcal{E}_G} \right)^3 \quad \text{II.23}$$

II.4. Régimes et aspect de l'écoulement dans une colonne à bulles :

Puisque l'étude de l'écoulement dans une colonne à bulles se limite le plus souvent aux cas où la vitesse superficielle du gaz est plutôt faible, la phase gazeuse sera présente sous forme de bulles dispersées et l'écoulement sera en général constitué de deux régimes différents : homogène et hétérogène (Joshi 2002). L'écoulement homogène est observé pour les vitesses superficielles de gaz les plus faibles. Il est caractérisé par une taille des bulles presque uniforme de même qu'une répartition régulière des bulles dans la direction transversale. Le régime hétérogène est observé, pour une même géométrie, à une vitesse superficielle de gaz plus élevée. Il est caractérisé par une répartition non uniforme de la fraction de gaz dans la direction transversale (fraction de gaz plus élevée au centre que sur les côtés), de même que

par l'établissement d'un régime global de circulation. La vitesse superficielle de gaz nécessaire à l'apparition du régime hétérogène, pour des substances données, sera en fonction de la géométrie de la conduite. Les expériences réalisées par (Ruzicka 2001) ont montré que l'augmentation du diamètre de la colonne ou encore de sa hauteur avait tout deux pour effet de diminuer la vitesse superficielle de gaz nécessaire à la transition vers le régime hétérogène. Le schéma global d'écoulement s'établissant en régime hétérogène est illustré par la figure (II .12), consiste en une zone de montée de gaz et de liquide entraîné au centre, ainsi que d'une zone de retour de liquide (faible en gaz) près des parois.

Une explication des mécanismes menant à la formation de ce schéma d'écoulement est avancée par (Tzeng 1993) suite à des observations pour le cas d'une colonne en 2D. Le schéma de circulation global serait initié par l'effet de la paroi sur les bulles s'élevant proche de celle-ci. Pour ces bulles, la présence de la paroi fait en sorte que la dissipation d'énergie dans le liquide est différente de part et d'autre de la bulle et résulte en une force nette sur la bulle dirigée vers l'intérieur de la colonne.

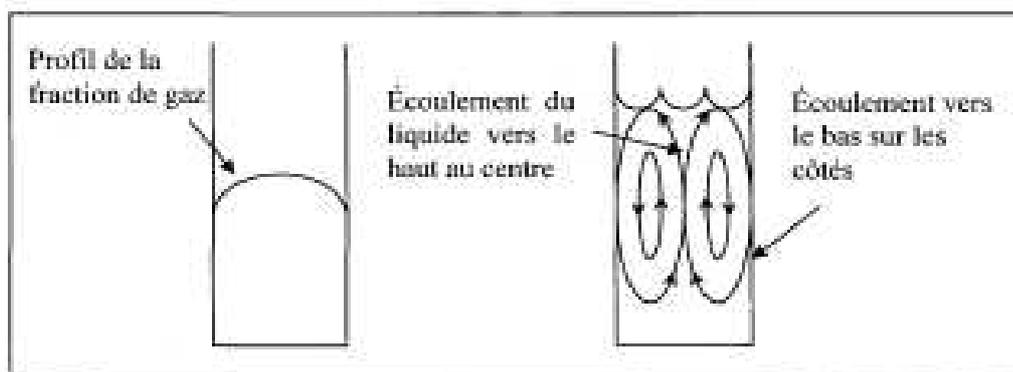


Figure II.12. Aspect typique de la distribution radiale de la fraction de gaz et du liquide dans une colonne à bulle en régime hétérogène (Joshi 2002).

Les bulles subiront ainsi une migration les éloignant de la paroi. Cette migration est d'autant plus intense que la taille de la bulle est grande et qu'elle est près de la paroi. Les bulles déviant vers le centre interagissent avec d'autres bulles créant des groupes ou des bulles coalescées qui ont une grande vitesse ascendante. Le liquide entraîné par ces bulles ascendantes redescend près des parois dans la zone où il n'y a presque pas de bulles. Le schéma d'écoulement général d'une colonne à bulles tel que présenté, correspond au comportement moyen sur une longue période de temps. De façon instantanée, l'écoulement est beaucoup plus complexe et consiste en de nombreuses structures de forme et de taille différentes qui ne sont pas nécessairement stationnaires en espace et en temps. Cette cascade de structures tourbillonnaires est également présente dans le cas d'un écoulement à une seule

phase. Il a néanmoins été remarqué que l'intensité de turbulence sera généralement beaucoup plus élevée pour une colonne à bulles que pour un écoulement à une seule phase.

II. 4.1-Colonne à bulles 3D :

Le schéma d'écoulement moyen décrit plus tôt et ne comportant que deux vortex (pour une vue en coupe) n'est observé que pour les colonnes dont la hauteur est à peu près identique au diamètre. En faisant varier la hauteur du liquide dans une colonne ayant une section de 175 mm par 15 mm, (Chen 1989) a montré que le schéma d'écoulement standard n'était possible que pour les colonnes 3D ayant un rapport géométrique (H/D) inférieur à 1.

Pour les colonnes ayant une hauteur de liquide plus élevée, plusieurs cellules sont observées dans la dimension de la hauteur. Ces vortex ne sont pas nécessairement vis-à-vis, mais plutôt décalés l'un par rapport à l'autre, à la façon d'une allée de Karman. Une description très précise de ce type d'écoulement, basée sur l'expérimentation, est proposée par (Chen 1994). Ses expériences furent réalisées dans une colonne ayant un grand rapport géométrique (hauteur de 2,2 m et diamètre de 10,2 cm). Trois régimes d'écoulement sont répertoriés par les chercheurs à mesure que la vitesse superficielle de gaz augmente. Ces régimes sont baptisés bulles dispersées, bulles coalescées et slugging. Le régime de bulles dispersées ressemble au régime homogène généralement rapporté dans les études portant sur les colonnes à bulles. Une différence notable est le fait qu'il permettra une certaine non-homogénéité dans l'écoulement et dans la distribution des phases. À la fin de ce régime, certains vortex et groupes de bulles sont observés et un schéma global de circulation est établi. La limite du régime de bulles dispersées est fixée lorsque les regroupements de bulles deviennent importants. Cette transition a été observée par les chercheurs lorsque la vitesse superficielle de gaz atteint 1,7 cm/s. Le régime appelé bulles coalescées correspond approximativement au régime hétérogène décrit dans plusieurs autres études portant sur les colonnes à bulles. Les chercheurs ont divisé ce régime en deux, en se basant sur l'observation de la morphologie de l'écoulement. Il sera appelé vortex spiral pour une vitesse superficielle du liquide variant entre 1,7 et 4,2 cm/s, alors qu'il sera nommé turbulent pour des vitesses variant entre 4,2 et 4,9 cm/s. La morphologie du régime vortex spiral décrit dans cette étude correspond au schéma de circulation global. Étant donné que la hauteur de la colonne est ici beaucoup plus grande que le diamètre, il y aura plusieurs vortex à différentes hauteurs décalés l'un par rapport à l'autre. En plus des vortex eux-mêmes, trois autres zones sont décrites pour ce régime d'écoulement, soit une zone de liquide descendant le long de la paroi et deux zones de bulles montantes (rapides et lentes) au centre. La zone de bulles montant rapidement est continuellement soumise à un mouvement en spirale, ce qui a pour effet d'amplifier les vortex

qui l'entourent. Le régime nommé turbulent sera beaucoup plus chaotique. L'apparition de grosses bulles formées par coalescence est alors remarquée. Ces bulles viennent peu à peu perturber le schéma global d'écoulement lorsque leur traînée induit des mouvements désordonnés dans le liquide.

II.4.2-Colonne à bulles 2D :

Dans une grande colonne (H beaucoup plus grande que D) mais cette fois en 2D, les régimes d'écoulement seront très similaires au cas 3D, comme l'ont démontré (Tzeng 1993). La colonne utilisée pour cette étude possédait une section de 48 cm par 1.27 cm et une hauteur de 1.6 m. Opérant à des vitesses superficielles de gaz relativement faible, les régimes de bulles dispersées et de bulles coalescées furent observés. Ce dernier régime possédait une structure très similaire à celui d'une colonne en 3D, un schéma de circulation globale incluant les 4 mêmes zones, soit du bord vers le centre : liquide descendant, vortex, bulles rapides et bulles lentes. Il fut cependant observé que la transition entre ces régimes se faisait plus tôt pour la colonne 2D que pour la colonne 3D. Le régime bulles coalescées apparaît en effet à une vitesse superficielle de gaz de seulement 0.9 cm/s pour la colonne 2D alors qu'il apparaît vers 2 cm/s pour une colonne 3D. Ce phénomène est expliqué par le fait que les bulles ont une moins grande liberté de mouvement dans une colonne 2D. Ces résultats sur la transition entre les régimes de bulles dispersées et bulles coalescées sont confirmés par une autre étude réalisée sur une colonne en 2D (Lin 1996). Pour une colonne ayant la même épaisseur que dans l'étude précédente, soit 1.27 cm, et une hauteur de 2.40 m, les chercheurs ont pu étudier, entre autre l'effet de la largeur de la colonne sur la transition entre les régimes d'écoulement. Il a ainsi été observé que, pour une colonne d'une largeur supérieure à 20 cm, la transition vers le régime de bulles coalescées se produisait toujours autour d'une vitesse superficielle de 1 cm/s. En régime de bulles coalescées, les mêmes structures que dans les études précédentes sont observées, soit retour de liquide, vortex, bulles rapides et bulles centrales. Il a cependant été remarqué qu'à partir d'une vitesse superficielle de gaz de 3 cm/s, les régions de bulles rapides et bulles centrales fusionnent et l'écoulement ne comporte plus que trois régions distinctes. L'épaisseur d'une colonne 2D semble avoir un effet important sur le régime d'écoulement. En effet, pour une colonne beaucoup moins épaisse (possédant une section de 20 cm par 2 mm et une hauteur de 60 cm), (Spicka 1999) a observé une transition plus tardive vers le régime hétérogène. Cette transition s'est effectuée à une vitesse superficielle de gaz d'approximativement 2.5 cm/s. Pour cette même étude, la transition vers le régime turbulent s'est produite à une vitesse superficielle d'environ 40 cm/s. Cette étude démontre également que le patron moyen de

distribution des vitesses dans le liquide et de la fraction de gaz pour une grande colonne correspond bien au patron de circulation global dans une colonne à bulles. Ainsi, l'effet moyen des multiples vortex verticaux sur une longue période de temps semble similaire au patron global de circulation.

Peu d'études détaillées concernent les colonnes de bulles ayant un faible ratio géométrique H/D comme c'est le cas pour la rainure. Ceci est vraisemblablement dû au fait que peu de procédés industriels font appel à ce type de colonne. Il a cependant déjà été remarqué que les colonnes beaucoup plus larges que hautes n'adopteront pas directement le régime d'écoulement global décrit par la figure II.12. Pour ces colonnes, l'apparition de plusieurs cellules sur la largeur de la colonne est remarquée, le nombre de ces cellules dépendant de la géométrie. Ce nouveau régime d'écoulement est observé pour un rapport géométrique H/D inférieur à 0.5 selon (Joshi 2002).

En conclusion, le coefficient k_{La} est généralement utilisé pour considérer de façon globale le transfert dans les contacteurs à bulles et dépend de beaucoup de paramètres (la vitesse d'introduction du gaz, les propriétés physico-chimiques de la phase liquide, le type de distributeur utilisé, la puissance dissipée...). Nous pouvons constater que les corrélations existantes et les efforts de modélisation (par exemple Cockx et al., 2005 et Krishna et Van Baten, (2003) ne s'appliquent qu'à des conditions opératoires particulières. Il est donc difficile et insuffisant, pour comprendre clairement la complexité du transfert de matière gaz-liquide, de se baser sur une interprétation exclusive des variations du k_{La} . Il sera donc intéressant d'étudier la dissociation des valeurs du coefficient de transfert de matière côté liquide (k_L) et de l'aire interfaciale (a) pour pouvoir interpréter correctement les variations de k_{La} induites par la modification de certains paramètres opératoires.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIES:

- Akita, K., Yoshida, F.** Gas hold-up and volumetric mass transfer coefficient in bubble columns. Institute of Engineering Chemical Process Design and Development 12,76-80. (1973)
- Akita, K., and Yoshida, F.** Bubble size, interfacial area and liquid-phase mass transfer coefficient in bubble column, Institute of Engineering Chemical Process Design and Development. 13, 84 (1974).
- Behkich .A, Men, Z., Inga, J.R, Morsi, B.I,** “Mass Transfer Characteristics in a Large-Scale Slurry Bubble Column Reactor with Organic Liquid Mixtures,” Chemical Engineering science, Vol. 57, pp. 3307-3324. (2002),
- Behkich A, R. Lemoine, L. Sehabiague, R. Oukaci, B.I. Morsi,** Gas holdup and bubble size behavior in a large-scale slurry bubble column reactor operating with an organic liquid under elevated pressures and temperatures, Chemical Engineering. Journal. (2005)
- Bouaifi, M., Hebrard, G., Bastoul, D., Roustan, M.,** “A Comparative Study of Gas Holdup and Mass Transfer Coefficients in Stirred Gas-Liquid Reactors and Bubble Columns,” Chemical Engineering and Proceeding, Vol. 40, pp. 97-111 (2001),
- Camarasa, E. Vial, C. Poncin, S. Wild, G. Midoux, N. Bouillard, J.** Influence of the coalescence behaviour of the liquid and of gas sparging on hydrodynamics and bubble characteristics in a bubble column. Chemical Engineering and Processing 38, 329-344. (1999)
- Chang, S.K., Kang, Y., Kim, S.D.,** Mass transfer in two- and three-phase fluidized beds. Canadian Journal of Chemical Engineering 19, 524-530. (1986)
- Chen R. C, Reese J., Fan L. S.,** "Flow structure in a three dimensional bubble column and three-phase fluidized bed", American institute of Chemical Engineering. Vol. 40, No. 7, pp. 1093-1104. (1994),
- Chen, J. J. J., Jamialahmadi, M., Li, S. M.,** "Effect of liquid depth on circulation in bubble columns: a visual study", Chemical Engineering. Research and Design, Vol. 676, pp.203-207. (1989)
- Cockx, A., Roustan, M., Line, A., Hebrard, G.,** “Modelling of Mass Transfer Coefficient k_L in Bubble Columns”, Chemical Engineering Research and Design, Vol. 73 pp. 627-631 (1995),
- Deckwer, W.D., Burckhart, R., Zoll, G.** Mixing and mass transfer in tall bubble columns. Chemical Engineering Science 29, 2177- 2188. (1974).

Deckwer, W.D., Louisi, Y., Zaidi, A. and Ralek, M. Gas holdup and physical transport properties for the Fischer-Tropsch synthesis in slurry reactor. 72nd Annual American Institute of Chemical Engineering Meeting, San Francisco, (1979).

Deckwer, W.-D. Bubble column reactors. J. Wiley & Sons, Chichester, UK. (1992)

Deckwer, W.-D., Schumpe, A., Improved tools for bubble column reactor design and scale-up. Chemical Engineering Science 48, 889-911. (1993).

Forster CF., Boyes, A.P., Hay, B.A. et Butt, J.A. An aerobic fluidized bed reactor for waste water treatment, Chemical Engineering Research and Design 64, 425- 430 (1986).

Frank, M.E. et Klosek, J. Liquid phase methanol project status, 6th International Symposium. Alcohol Fuels Technology, Ottawa, Canada, 3, C 11, 425-433. (1984).

Fransolet, E., Crine, M., l'homme, G., Toye D and P. Marchot, Analysis of electrical resistance tomography measurements obtained in bubble column: dynamics aspects, first results, proceedings of the 2nd world congress on industrial process tomography, Hannover, August 29-31, 677 (2001)

Fransolet, E., Crine, M., Marchot, P., Toye D. Analysis of gas hold-up in bubble columns with non Newtonian fluid using electrical resistance tomography and dynamic gas disengagement technique, Chemical Engineering Science 60, 6118-6123. (2005)

García-Ochoa, J., Khalfet, R., Poncin, S., Wild, G. Hydrodynamics and mass transfer in a suspended solid bubble column with polydispersed high density particles. Chemical Engineering Science 52, 3827-3834. (1997).

Gestrich, W., Eisenstein, H., and Krauss, W. Liquid-side mass transfer in bubble layers. Transactions of the Institute of Chemical Engineering. 18, 38 (1978).

Heijnen, J.J., Van't Riet, K., Mass transfer, mixing and heat transfer phenomena in low viscosity bubble column reactors. Chemical Engineering Journal 28, B21-B42. (1984)

Hikita, H., Asai, S., Tanigawa, K., Segawa, K., Kitao, M., The volumetric mass transfer coefficient in bubble columns. Chemical Engineering Journal 22, 61-67. (1981).

Hikita, H., and Kikukawa, H. Dimensionless correlation of liquid-phase dispersion coefficient in bubble columns. Chemical Engineering Journal. Japan 8, 412 (1975).

Joshi, J.B., Ranade, V.V., Gharat, S.D., Lele, S.S. Sparged loop reactors. Canadian Journal of Chemical Engineering 68, 705-741. (1990).

Joshi J. B., et al., "Coherent flow structures in bubble column reactors", Chemical Engineering Science, Vol. 57, pp. 3157-3183. (2002),

- Kantak**, M.V., Hesketh, R.P., Kelkar, B.G.,. Effect of gas and liquid properties on gas phase dispersion in bubble columns. *Chemical Engineering Journal and Biochemical Engineering Journal* 59, 91-100. (1995).
- Kastanek**, F. Volume mass transfer coefficient in a bubble column. *Collect Czechoslov. Chemical. Communication* 42, 2491 (1977).
- Kato**, Y., and Nishiwaki, A. Longitudinal dispersion coefficient of a liquid in a bubble column. *Transactions of the Institute of Chemical Engineering* . 12,182 (1972).
- Katinger**, H.W., Scheirer, W.et Kromer, E. Bubble column fermentor formass suspension culture of animai cells, *German Chemical Engineering* 2, 31-38 (1 979).
- Kobayashi**, T., Suda, T. Nagamime, T. et Endo, 1. Continuous production of penicillin in a fluidized bed bioreactor, 23, 409-413 (1990) [cité par Nigam et Schumpe (1996)].
- Koide**, K., Takazawa, A., Komura, M., Matsunaga, H. "Gas Holdup and Volumetric Liquid-Phase Mass Transfer Coefficient in Solid-Suspended Bubble Columns," *Journal of Chemical Engineering of Japan*, Vol. 17, pp. 459-466. (1984).
- Krishna** R. and van Baten J.M.,. Mass transfer in bubble columns. *Catalysis Today* vol.79–80 .pp. 67–75. (2003)
- Lin**, T. J., Reese J., Hong T., Fan L. S., "Quantitative analysis and computation of two dimensional bubble columns", *American institute of Chemical Engineering*. 1, Vol. 42, No. 2, pp. 301-318. (1996),
- Mangartz**, K. H., and Pilhofer, T. Interpretation of mass transfer measurements in bubble columns considering dispersion of both phases. *Chemical Engineering Science*. 36,1069 (1981).
- Mashelkar**, R. A. Bubble columns. *Britannic Chemical Engineering*. 15, 1297 (1970).
- Merchuk**, J.C. Hydrodynamics and hold-up in airlift reactors. *Encyclopedia of Fluid Mechanics*, Chap. 49,1495-1511, N. Cheremisinoff,Gulf Publishing Editions., Houston, USA. (1993).
- Merchuk**, J.C., Gluz, M.,. Airlifts reactors, in: M.C. Flickinger, S.W. Drew (Eds.), *Encyclopedia of Bioprocess Technology*, vol. 1, Wiley, New York, USA, 320-353.(1999)
- Nigam**,K.D.P. et Schumpe,A. Three-phase sparged reactor, *Gordon and Breach Publishers*(1996)
- Nigam**, K.D.P., Schumpe, A. Gas-liquid mass transfer in a bubble column with suspended solids. *American Institute of Chemical Engineering. Journal* 33, 328 . 330. (1987).
- Roy**, N. K., Guha, D. K., and Rao, M. N. Suspension of solids in a bubbling liquid. *Chemical Engineering Science*. 19, 215 (1964).

Ruzicka, M.C., Draho., J., Fialova, M., Thomas, M.H., , Effect of bubble column dimensions on flow regime transition. *Chemical Engineering Science* 56, 6117-6124. (2001)

Sada, E., Kumazawa, H. Kudo, I. et Kondo, T. Absorption of lean in aqueous slurries of Ca(OH)₂ with NaClO₂ or Mg(OH)₂ with NaClO₂ *Chemical Engineering Science* 34,7 19-724 (1979)

Sarrafi, A., Jamialahmadi, M., Müller-Steinhagen, H., Smith, J.M. Gas hold-up in homogeneous and heterogeneous gas-liquid bubble column reactors. *Canadian Journal of Chemical Engineering* 77, 11-21. (1999)

Schumpe, A., Deckwer, W.D., Gas holdups, specific interfacial areas, and mass transfer coefficients of aerated carboxymethyl cellulose solutions in a bubble column. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design Development* 21, 706–711 (1982).

Schumpe, A., Saxena, A.K., Fang, L.K. “Gas/Liquid Mass Transfer in a Slurry Bubble Column,” *Chemical Engineering Science*, Vol. 42, pp. 1787-1796 (1987).

Shah, Y.T., Stiegel, G.J., Sharma, M.M., Backmixing in gas-liquid reactors. *American Institute of Chemical Engineering Journal* 24, 369-400. (1978)

Shah Y.T., B.G. Kelkar, S.P. Godbole, W.-D. Deckwer, Design parameters estimations for bubble column reactor. *American Institute of Chemical Engineering Journal*. 28- 353. 379. (1982)

Shetty, S.A., Kantak, M.V., Kelkar, B.G., Gas-phase back mixing in bubble-column reactors. *American Institute of Chemical Engineering Journal* 38, 1013-1026. (1992)

Spicka P., Martins A. A., Dias M. M., Lopes J. C, "Hydrodynamics of gas-liquid flow in 2D packed/unpacked rectangular reactor", *Chemical Engineering Science*, Vol. 54, pp. 5127-5137. (1999)

Steiner, R Operation characteristics of special bubble column reactors, *Chemical Engineering and Processing* 21,1-8 . (1987)

Towell, G.D., Ackermann G.H., Axial mixing of liquid and gas in large bubble reactors. *Proceedings of the 5th European Conference on Chemical Reaction Engineering*. Amsterdam, (1972).

Tzeng, J. W., Chen R. C, Fan L. S., "Visualization of flow characteristics in a 2-D bubble column and three phase fluidized bed", *American institute of Chemical Engineering*. Vol. 39, No. 5, pp. 733-744. (1993).

Vandu, C.O., Ellenberger, J., Krishna, R., Hydrodynamics and mass transfer in an up flow monolith loop reactor. *Chemical Engineering and Processing* 44, 363-374. (2004)

Van Dierendonck Vergrotingsregels voor gasbelwassers, PhD. Thesis, Twente Universiteit, Nederland, (1970) (cité par Nigam 1996)

Vial, C., Lainé, R., Poncin, S., Midoux, N., Wild, G., Influence of gas distribution and regime transitions on liquid velocity and turbulence in a 3-D bubble column. Chemical Engineering Science 56, 1085-1093. (2001)

Yamashita, F., and Inoue, H. Gas holdup in bubble columns. Journal of Chemical Engineering, Japan 8, 334 (1975).

Zahradník, J., Fialová, M., M., Draho., J., Kastanek, F., Thomas, N.H., Duality of the gas-liquid flow regimes in bubble column reactors. Chemical Engineering Science 52, 3811-3826. (1997).

CHAPITRE III

Modélisation de la turbulence

III.1.Introduction :

La plus part des modèles de turbulence ont été développés dans un contexte d'écoulement stationnaire en moyenne, là ou les propriétés de stationnarité ont été implicitement supposées.

Le caractère instationnaire est une situation plus générale alors que les problèmes stationnaires ne constituent souvent qu'un état asymptotique particulier.

Nous allons présenter dans ce chapitre l'équation de Navier-Stokes qui gouverne le mouvement d'un fluide newtonien, puis nous passerons au traitement moyen, au sens de la moyenne statistique, cette opération par le biais de l'équation de *Navier-Stokes* génère des contraintes inconnues qu'il faudra modéliser ; dans notre étude nous avons utilisé le modèle de turbulence standard (K, ϵ).

III.2.Modélisation de la turbulence :

D'après l'hypothèse de Boussinesq qui repose sur la relation directe entre les contraintes de cisaillement et le mouvement moyen. Les facteurs représentant la turbulence sont exprimés par des équations en fonction du tenseur de déformation moyen δ_{ij} et la viscosité turbulente μ_t .

$$-\rho \overline{u_i u_j} = \mu_t \left[\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad \text{III.1}$$

Avec l'énergie cinétique: $\bar{k} = \frac{1}{2} \overline{u_i u_i}$ III.2

Et la viscosité turbulente : $\mu_t = \alpha \rho l u$ III.3

III.2.1. Généralités sur les équations de Navier-Stokes :

La modélisation des écoulements tridimensionnels est fondée sur les lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie (Frey, 1991).

Dans le cas des fluides incompressibles, de viscosité constante et en régime permanent, ces lois s'expriment de la façon suivante :

♦ Équation de continuité (Conservation de la masse) :

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{III.4}$$

◆ Équations de Navier – Stokes (Conservation de la quantité de mouvement) :

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad \text{III.5}$$

U_i : composante du vecteur de vitesse instantanée

P : pression

ν : viscosité cinématique

ρ : masse volumique

III.2.2. Équations et approches de résolution pour un écoulement turbulent :

III.2.2.1. Définition et caractéristiques de l'écoulement turbulent :

Un écoulement turbulent est composé de "filets fluide" qui, au lieu de conserver leur individualité en glissant uniquement les uns sur les autres comme dans un écoulement laminaire, échangent entre eux des particules fluides. Ainsi, le fluide ondulé de manière complexe, s'enroule sur lui même et semble se déplacer de façon aléatoire autour de la direction principale de l'écoulement. Chassaing (2000) définit la turbulence comme étant un "chaos" spatio-temporel. Cet état désordonné survient en réalité lorsque la vitesse du fluide devient supérieure à une limite au-delà de laquelle la viscosité ne suffit plus à régulariser les mouvements.

Il est courant de caractériser le régime d'un écoulement par un nombre adimensionnel, le nombre de Reynolds, qui correspond au rapport des forces d'inertie aux forces visqueuses :

$$\text{Re} = \frac{\rho U L}{\mu} \quad \text{III.6}$$

où :

ρ est la masse volumique, μ est la viscosité dynamique moléculaire, U la vitesse moyenne de l'écoulement et L étant une distance caractéristique de l'écoulement.

Pour un écoulement dans une conduite, la transition entre un régime laminaire et un régime turbulent s'effectue généralement pour un nombre de Reynolds critique égal à 2500.

Un écoulement est considéré pleinement turbulent lorsque le nombre de Reynolds est supérieur à 5000.

Le mouvement d'un fluide est dit turbulent lorsque les différentes caractéristiques physiques (vitesse, pression, température) peuvent être décrites par des variables aléatoires du temps et de l'espace, et pour lesquels on peut définir une valeur moyenne.

Les tourbillons de différentes tailles apparaissent, formant ce qui est communément appelé un spectre. Les grands tourbillons sont associés aux basses fréquences et les petits tourbillons aux hautes fréquences. Plus le nombre de Reynolds est important, plus l'écoulement est turbulent et plus la largeur du spectre est importante. Bien qu'ils soient différenciés les uns des autres, les tourbillons sont liés par un processus de transmission de l'énergie appelé couramment "cascade" d'énergie (Kolmogorov, 1941).

Les grands tourbillons interagissent dans un premier temps avec l'écoulement moyen, leurs échelles de longueur étant similaires. La présence de gradients de vitesse moyenne dans l'écoulement provoque la distorsion de ces tourbillons. Lors de ce processus d'étirement, de l'énergie cinétique est extraite de l'écoulement moyen pour alimenter les mouvements turbulents de grande échelle. La plus grande part de l'énergie cinétique étant contenue dans les tourbillons de plus grande taille, cela permet de maintenir la turbulence (Lesieur, 1994).

À force d'être étirés, les gros tourbillons sont scindés en tourbillons de plus en plus petits. L'énergie cinétique est transmise des tourbillons de grande taille vers ceux de petite taille, jusqu'à ce que les forces de viscosité deviennent actives, dissipent cette énergie en détruisant les petits tourbillons et la convertissent en énergie interne thermique.

Le taux d'énergie dissipée est déterminé par les mouvements turbulents de grande échelle, les forces visqueuses interviennent au niveau des tourbillons les plus petits. En effet, c'est le taux d'énergie extrait de l'écoulement moyen et transmis aux gros tourbillons qui est ensuite véhiculé aux petits tourbillons.

III.2.2.2. Approches de résolution des équations de l'écoulement turbulent :

III.2.2.2.1. La résolution directe : Les équations de Navier-Stokes traduisent complètement les écoulements à surface libre turbulents. Cependant, malgré les récents progrès réalisés au niveau technologique, leur résolution numérique complète pose problème.

En effet, les tourbillons peuvent être de l'ordre du millimètre alors que le domaine peut s'étendre sur des mètres et même des kilomètres. Une grille assez fine pour une description assez précise de toutes les échelles de la turbulence exigerait un nombre considérable de cellules (Chassaing, 2000). Or, la capacité de stockage et la vitesse des ordinateurs demeurent à l'heure actuelle insuffisantes.

Un autre inconvénient de cette approche est le fait que la grande finesse de la structure de la turbulence exige la prescription de données initiales et aux limites à un niveau important, ce

qui n'est pas sans poser parfois de sérieuses difficultés.

Afin de surmonter ses difficultés, deux solutions sont utilisées : l'approche statistique et la simulation des grandes structures turbulentes.

III.2.2.2.2. L'approche statistique

Les modèles qui se fondent sur l'approche statistique sont les plus répandus. Ils reposent sur la décomposition classique de Reynolds en quantités moyenne et fluctuante :

$$\begin{aligned} U_i &= \overline{U_i} + u_i' \\ P &= \overline{P} + p' \end{aligned} \quad \text{III.7}$$

$$\text{Avec : } \quad \overline{u_i'} = \frac{1}{T} \int_0^T u_i' dt = 0 \quad \text{et} \quad \overline{U_i} = \frac{1}{T} \int_0^T U_i dt \quad \text{III.8}$$

$$\overline{P} = \frac{1}{T} \int_0^T P dt \quad \text{Et} \quad \overline{p'} = \frac{1}{T} \int_0^T p' dt = 0 \quad \text{III.9}$$

Cette décomposition en valeur moyenne et fluctuante entraîne au niveau physique, une considération du mouvement moyen et du mouvement d'agitation turbulente.

Les équations III.4 et III.5 deviennent :

♦ Conservation de la masse (équation de continuité) :

$$\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_i} = 0 \quad \text{III.10}$$

♦ Conservation du mouvement (équations de Navier-Stokes):

$$\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial t} + \overline{U_j} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} - \overline{u_i' u_j'} \right) \quad \text{III.11}$$

Les termes $-\rho \overline{u_i' u_j'}$ appelés contraintes de Reynolds proviennent de la décomposition de Reynolds. Ils posent un problème de fermeture.

Le but de l'ensemble des modèles de transport de quantités moyennes consiste à estimer les contraintes de Reynolds. Le code de calcul Fluent propose trois méthodes de fermeture basées sur l'approche statistique :

- ♦ Le modèle k-ε et ses variantes
- ♦ Le modèle de turbulence k-ω (modèle de Wilcox)
- ♦ Le modèle des contraintes de Reynolds (RSM)

III.2.2.2.2-1. Modèles K-ε :

Le modèle k-ε est le plus simple des modèles complets dits à deux équations.

Ce modèle suppose que le régime de turbulence est pleinement établi dans tout le domaine et que les effets de la viscosité moléculaire sont négligeables par rapport à ceux de la viscosité turbulente (loin des parois).

Il est possible de développer des équations de transport similaires pour d'autres paramètres de la turbulence y compris le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε . L'équation exacte de ε contient cependant certain nombre de termes non mesurables. Le modèle K-ε présenté est le modèle développé par Launder et Spalding. Il comporte deux équations, l'une pour K et l'autre pour ε , basé sur une meilleure compréhension des processus causant le changement de ces variables.

On utilise K et ε pour définir une échelle de longueur l représentative des grandes échelles de la turbulence par :

$$v = k^{1/2} \text{ et } l = \frac{k^3}{\varepsilon} \quad \text{III.12}$$

En utilisant la même approche que celle utilisée pour le modèle de longueur de mélange, on spécifie la viscosité turbulente par :

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{III.13}$$

C_μ : Constante adimensionnelle.

Le modèle standard utilise les équations de transport suivantes pour K et ε :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k U) = \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad}(k) \right] + 2\mu_t \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} - \rho \varepsilon \quad \text{III.14}$$

et :

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon U) = \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \text{grad}(\varepsilon) \right] + 2\mu_t C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad \text{III.15}$$

La signification physique de ces équations est la suivante :

Taux de variation de k (ou ε) + Transport de k (ou ε) par convection = Transport de k (ou ε) par diffusion + Taux de production de k (ou ε) – Taux de destruction de k (ou ε).

Ces équations contiennent 5 constantes ajustables : $C_\mu, \sigma_k, \sigma_\varepsilon, C_{1\varepsilon}$ et $C_{2\varepsilon}$.

Ces constantes utilisées dans ce modèle ont obtenues à partir des données expérimentales d'une variété de configuration d'écoulement.

Le terme de production de l'équation de K est dérivé directement des termes exacts de production dans la première équation en utilisant la relation exprimant le tenseur de Reynolds

$$\tau_{i,j} = -\rho \overline{u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho k \quad \text{III.16}$$

Une forme modélisée des processus de transport apparait dans le second membre de l'équation, les termes turbulente de transporte sont représentés par un terme de diffusion de la variable scalaire considérée K ou ϵ . Les nombres de Prandtl σ_k et σ_ϵ . Relient la diffusivité de K et ϵ avec la viscosité turbulente μ_t , le terme de pression de l'équation de K ne peut directement être mesuré et ses effets sont pris en compte dans le terme de diffusion dans l'équation.

Les valeurs utilisées par défaut dans le code Fluent sont groupées dans le tableau suivant :

Constantes	C_μ	σ_k	σ_ϵ	$C_{1\epsilon}$	$C_{2\epsilon}$
Valeurs	0.09	1.00	1.30	1.44	1.92

Tableau III-1 : Valeurs des constantes empiriques du modèle k- ϵ :

Le modèle k- ϵ est très largement utilisé en ingénierie. Il est en effet robuste, économique en temps de calcul et suffisamment précis et validé pour une large gamme d'écoulements turbulents.

III.2.2.2.2-2. Model de turbulence SST (shear stress transport):

Le modèle Shear-Stress transport $k - \omega$ (SST) a été élaboré par Menter (1994) pour amortir efficacement la formulation robuste et exacte du modèle $k - \omega$ dans la région proche de la paroi avec un retour au modèle $k - \epsilon$ pour le traitement des régions lointaines de la paroi. Le modèle en question a pris cette appellation car la viscosité turbulente est modifiée de telle façon que les équations de transports tiennent compte des contraintes du cisaillement turbulentes (Shear-Stress). Une autre modification est à signaler et qui se résume dans l'implémentation du terme de diffusion dans l'équation de ω et une fonction d'amortissement

pour assurer au modèle un meilleur comportement aussi bien que dans les zones proches de la paroi que dans les régions éloignées. Ceci donne à ce modèle une longueur d'avance en termes de performance par rapport aux modèles $k - \omega$ standard et $k - \varepsilon$ standard. Le modèle $k - \omega$ (SST) ressemble au modèle $k - \omega$ standard en plus des modifications suivantes :

-Le modèle $k - \omega$ standard et le modèle $k - \varepsilon$ transformé sont multiplié par une fonction d'amortissement et rajouter l'un à l'autre. La fonction d'amortissement prend l'unité près de la paroi, ce qui active le modèle $k - \omega$ standard et prend la valeur zéro loin des surfaces, ce qui active le modèle $k - \varepsilon$ transformé. Le modèle $k - \omega$ standard proposé par FLUENT est fondé sur le modèle de Wilcox (Wilcox, 1998). Sa structure est proche de celle du modèle $k - \varepsilon$. Ce modèle fait intervenir deux équations de transport : une pour l'énergie cinétique turbulente k et l'autre pour le taux de dissipation spécifique ω .

Le taux de dissipation spécifique est défini par :

$$\omega = \frac{\varepsilon}{k} \quad \text{III.17}$$

- Le modèle $k - \omega$ (SST) introduit un terme d'amortissement de la diffusion dans l'équation de taux de dissipation ω .
- La viscosité turbulente est modifiée pour prendre en considération les contraintes de cisaillement turbulentes (Shear-Stress) dans les équations de transport.
- Les constantes du modèle sont différentes.

Ces modifications caractéristiques rendent le modèle $k - \omega$ (SST) plus précis et plus fiable pour une large gamme d'écoulements que le modèle $k - \omega$ standard.

L'énergie cinétique turbulente k et le taux spécifique de dissipation ω sont obtenus respectivement à partir des deux équations de transport suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k U_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k + S_k \quad \text{III.18}$$

Et

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega U_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega \quad \text{III.19}$$

Avec :

G_k : production d'énergie cinétique turbulente par les gradients de vitesse moyenne

G_ω : production de ω

Γ_k et Γ_ω : coefficients de diffusion de k et ω

Y_k et Y_ω : les dissipations de k et ω dues à la turbulence.

S_k et S_ω : les termes sources.

Les coefficients Γ_k et Γ_ω sont donnés par :

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \quad \text{III.20}$$

$$\Gamma_\omega = \mu + \frac{\mu_\omega}{\sigma_\omega} \quad \text{III.21}$$

σ_k et σ_ω sont les nombres de Prandtl pour k et ω respectivement, et μ_t la viscosité turbulente.

La viscosité turbulente est estimée comme suit :

$$\mu_t = a^* \frac{\rho k}{\omega} \quad \text{III.22}$$

α^* est un coefficient qui tient compte des variations de la viscosité turbulente. Pour de faibles nombres de Reynolds, α^* est défini de la façon suivante :

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left(\frac{\alpha_0^* + \text{Re}_t / R_k}{1 + \text{Re}_t / R_k} \right) \quad \text{III.23}$$

$$\text{Re}_t = \frac{\rho k}{\mu \omega} \quad \text{III.24}$$

$$a_0^* = \frac{\beta_i}{3} \quad \text{III.25}$$

Les termes de production G_k et G_ω sont définis respectivement par :

$$G_k = -\rho u_i' u_j' \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \quad \text{III.26}$$

$$G_\omega = \alpha \frac{\omega}{k} G_k \quad \text{III.27}$$

$$\alpha = \frac{\alpha_\infty}{\alpha^*} \left(\frac{\alpha_0 + \text{Re}_t / R_\omega}{1 + \text{Re}_t / R_\omega} \right) \quad \text{III.28}$$

La dissipation de k due à la turbulence est donnée par :

$$Y_k = \rho \beta^* f_{\beta^*} k \omega \quad \text{III.29}$$

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & \chi_k \leq 0 \\ \frac{1+680\chi_k^2}{1+400\chi_k^2} & \chi_k > 0 \end{cases}$$

$$\chi_k = \frac{1}{\omega^3} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad \text{III.30}$$

$$\beta^* = \beta_i^* [1 + \zeta^* F(M_t)]$$

$$\beta_i^* = \beta_{\infty}^* \left(\frac{4/15 + (Re_t / R_{\beta})^4}{1 + (Re_t / R_{\beta})^4} \right) \quad \text{III.31}$$

F(Mt) est une fonction de compressibilité.

La dissipation de ω due à la turbulence est donnée par :

$$Y_{\omega} = \rho \beta_i f_{\beta} \omega^2 \quad \text{III.32}$$

avec :

$$f_{\beta} = \frac{1+70\chi_{\omega}}{1+80\chi_{\omega}}$$

$$\chi_{\omega} = \left| \frac{\Omega_{ij} \Omega_{jk} \Omega_{ki}}{(\beta_{\infty}^* \omega)^3} \right|$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

L'avantage du modèle k- ω par rapport au modèle k- ϵ réside au niveau de la prise en compte des effets dus à la turbulence des écoulements à faible nombre de Reynolds. Il est utilisable pour les écoulements compressibles et permet de prendre en compte les transferts pariétaux.

Finalement, les constantes du modèle k- ω sont regroupées dans le tableau suivant :

α_{ω}^*	α_{ω}	α_0	β_{ω}^*	β_i	R_{β}	R_K	R_{ω}	ξ^*	σ_K	σ_{ω}
1	0.52	1/9	0.09	0.072	8	6	2.95	1.5	2.0	2.0

Tableau III-2 : Valeur des constantes du modèle k- ω :

III.2.2.2.2.3 Le modèle des contraintes de Reynolds RSM :

Le modèle des contraintes de Reynolds (RSM) est un modèle de fermeture du second ordre. Dans certains cas (couches limites courbes, écoulements tourbillonnaires, écoulements en rotation), l'approximation basée sur l'hypothèse de Boussinesq pour représenter les tensions de Reynolds n'est plus applicable [Versteeg et Malalaszka (1995)].

Des équations de transport sont alors établies pour les contraintes cinématiques de Reynolds $R_{ij} = \overline{u_i u_j}$. Ces équations s'écrivent sous la forme générale suivante :

$$\frac{DR_{ij}}{Dt} = P_{ij} + D_{ij} + \varepsilon_{ij} + \Pi_{ij} + \Omega_{ij} \quad \text{III.33}$$

Taux de variation de R_{ij} + Transport de R_{ij} = Taux de production de R_{ij} + Transport de R_{ij} par diffusion – Taux de dissipation de R_{ij} + Transport de R_{ij} du aux interactions turbulentes Pression / Contraintes + Transport de R_{ij} du au mouvement de rotation.

Nous avons alors six nouvelles équations aux dérivées partielles, une pour le transport de chacune des six contraintes de Reynolds :

$$\overline{u_1^2}, \overline{u_2^2}, \overline{u_3^2}, \overline{u_1' u_2'}, \overline{u_1' u_3'} \text{ et } \overline{u_2' u_3'}$$

Le terme de production est donné par

$$P_{ij} = - \left(R_{im} \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_m} + R_{jm} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_m} \right) \quad \text{III.34}$$

Le terme de transport par diffusion est donné par :

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_m} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_m} \right) \quad \text{III.35}$$

Avec : $C_\mu = 0.09$ et $\sigma_k = 1.0$

Les interactions turbulentes Pression / Contraintes modélisées sont les plus délicates mais aussi les plus importantes à modéliser.

Elles sont dues aux fluctuations de pressions dues, d'une part à deux tourbillons interagissant l'un avec l'autre, et d'autre part à l'interaction d'un tourbillon avec une région de l'écoulement de vitesse moyenne différente. Le terme modélisant ces interactions a pour effet de redistribuer l'énergie suivant les contraintes normales de Reynolds ($i = j$) afin de les rendre isotropique et de réduire les contraintes de cisaillement de Reynolds ($i \neq j$).

Des corrections supplémentaires sont nécessaires pour prendre en compte l'effet de la paroi.

Les effets de paroi augmentent l'anisotropie des contraintes normales de Reynolds.

$$\Pi_{ij} = -C_1 \frac{\varepsilon}{k} \left(R_{ij} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right) - C_2 \left(P_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) \quad \text{III.36}$$

avec :

$$C_1 = 1.8, C_2 = 0.06 \text{ et } k = \frac{1}{2} (\overline{u_1'^2} + \overline{u_2'^2} + \overline{u_3'^2})$$

Le transport dû au mouvement de rotation est donné par :

$$\Omega_{ij} = -2\omega_k \left(R_{jm} e_{ikm} + R_{im} e_{jkm} \right) \quad \text{III.37}$$

ω_k étant le vecteur rotation.

L'énergie cinétique de turbulence ε est donnée par la même équation que celle de la méthode $k - \varepsilon$.

Ce modèle est potentiellement le plus général et le plus complet des modèles de turbulences classiques, seules les conditions initiales et/ou limites sont à fournir. Les calculs sont satisfaisants pour les propriétés de l'écoulement moyen et toutes les tensions de Reynolds pour beaucoup d'écoulements simples et d'autres plus complexes incluant les jets de murs, les tunnels asymétriques, les écoulements en conduit non circulaire et les écoulements courbes. Il est très coûteux en moyens informatiques.

III.2.2.2.3-Approche spectrale :

Les tourbillons sont de taille et de fréquences multiples.

L'augmentation de la fréquence correspond à une diminution de la taille du tourbillon. Dans les spectres de fréquence (ou de nombre d'onde), trois zones de fréquence sont groupées, montrant le transfert de l'énergie turbulente en cascade, des basses aux hautes fréquences ou des grands aux petits tourbillons

i) Zone de basses fréquences : ce sont les tourbillons les plus gros, contenant davantage d'énergie ; ils sont générés par l'écoulement moyen.

ii) Zone de hautes fréquences : ce sont les tourbillons les plus petits, où la viscosité devient importante, l'énergie cinétique est dissipée en chaleur. La décroissance est donnée par

$$E(f) = f^{-7} \text{ selon Heisenberg}$$

iii) Zone de fréquences moyennes ou de transition entre les deux autres zones, appelée zone inertielle : les tourbillons les plus grands donnent naissance à des tourbillons moins grands et encore moins grands jusqu'à ce qu'on arrive aux plus petits tourbillons. Au cours de la diminution de la taille des tourbillons, l'énergie cinétique décroît selon une fonction universelle $E(f) = f^{-5/3}$ d'après Kolmogorov (1941a) et Kolmogorov (1941b).

III. 2.2.2.4-Simulation des grandes structures turbulentes (LES) :

La simulation des grandes structures turbulentes (LES ou 'Large Eddy Simulation') est une approche intermédiaire hybride utilisant une résolution partielle pour les grands tourbillons et une modélisation partielle pour les petits tourbillons [Schiestel (1993)].

L'idée est basée sur l'observation que si les grands tourbillons sont en fait très différents selon les géométries, leur structure variant beaucoup avec le type d'écoulement considéré, par contre les petits tourbillons ont un caractère plus universel.

La méthode consiste alors à calculer le mouvement tridimensionnel et instationnaire des gros tourbillons dans des réalisations particulières de l'écoulement considéré. Les propriétés statistiques sont obtenues ensuite dans un second temps, tout comme on le ferait sur des signaux issus de mesures en laboratoire.

De manière très générale, la modélisation consiste à faire un traitement statistique sur les équations de base et ensuite résoudre numériquement ces équations tandis que la simulation adopte la démarche inverse : résolution numérique des équations de base et ensuite le traitement statistique des bases de données ainsi constituées. La justification de ce type d'approche réside dans une idée simple : les grands tourbillons produits par l'écoulement moyen sont fortement dépendants de celui-ci, anisotropes et de longue durée de vie, ils sont difficiles à modéliser. Par contre les petits tourbillons produits par transfert ont un caractère plus universel et tendent vers l'isotropie, leur durée de vie est courte et ils sont relativement plus faciles à modéliser. Les simulations numériques à des nombres de Reynolds élevés, se basent donc sur un découpage des fluctuations turbulentes qui permet de ne calculer que les grandes structures énergétiques et modéliser les petites structures de caractère plus universel. Bien qu'elle soit une technique encore en cours de développement, la simulation des grandes structures turbulentes est actuellement un outil pour l'ingénieur. Elle permet de simuler des configurations très proches de celles rencontrées dans l'industrie; notamment celles pour lesquelles les modèles classiques, de type $k-\varepsilon$, échouent.

III.2.3. Modélisation de la surface libre

III.2.3.1. Généralités sur les modèles multiphasiques

Pour modéliser les écoulements multiphasiques, les deux approches principales sont :

Euler –Euler et Euler – Lagrange.

Fluent (2001) propose trois modèles principaux fondés sur l'approche eulérienne, à savoir : le modèle VOF (Volume Of Fluid), le modèle de mélange ou «Mixture» et le modèle d'Euler.

Dans le dernier modèle, une distinction est faite entre les écoulements fluide – fluide et les écoulements fluide – solide (modèle dit eulérien-granulaire).

L'approche lagrangienne sert de base au module de transport solide « particle track » ou modèle particulaire. Ce module est utilisé pour connaître la distribution et la trajectoire des particules. Les critères de choix d'un modèle multiphasique approprié dépendent du type d'écoulement, des forces mises en jeu. Ainsi, pour les écoulements à surface libre, sans

transfert ni distribution, le modèle VOF est le plus adapté. Nous utiliserons ce dernier pour simuler les écoulements à surface libre.

Le modèle VOF repose sur une méthode dite méthode de la fraction volumique. Elle permet de localiser l'interface entre deux domaines fluides différents. Elle est applicable pour des fluides non miscibles (eau-air par exemple) c'est-à-dire lorsqu'il n'y a pas d'interpénétration entre fluide.

En écoulements incompressibles, sans modèle d'énergie et sans prendre en compte les interactions entre domaines fluides, les méthodes VOF permettent une bonne résolution des problèmes hydrauliques à surface libre, en régime transitoire (time-dependent formulation) ou permanent (Fluent, 2001).

Les limites de ce modèle sont les suivantes :

1. Aucune cellule ne doit être vide (présence obligatoire d'une ou plusieurs phases combinées).
2. Une seule phase seulement peut être compressible mais pas les deux.
3. Les écoulements périodiques ne peuvent être simulés lorsqu'on active le modèle VOF (incompatibilité).
4. Ce modèle ne prend en compte actuellement ni mélange ni réaction.
5. Il est impossible d'utiliser actuellement le modèle de turbulence LES.

Fluent dispose de quatre schémas numériques pour localiser l'interface eau-air par exemple : Euler Explicit, implicit, géométric reconstruction, donor-acceptor.

Le schéma « implicit » est adapté en régime permanent. En régime transitoire, l'utilisation des méthodes VOF implique la donnée du nombre de Courant. C'est un nombre sans dimension qui compare le pas de temps de calcul Δt au temps caractéristique durant lequel un élément fluide transite à travers le volume de contrôle.

III.2.3.2. Équations multiphasiques

La modélisation de la surface libre nécessite un découpage du domaine global de calcul en deux sous domaines.

Le premier est constitué d'un volume d'eau et le deuxième, situé dans la partie supérieure du domaine d'étude, est rempli d'air. Le plan d'intersection des deux sous domaines représente la surface libre au démarrage du calcul.

Aucune contrainte n'est fixée au niveau de ce plan qui pourra donc se déformer. Dans ce cas, la pression atmosphérique est imposée sur la partie supérieure du domaine, constituée d'air.

Chaque phase est supposée être présente dans chaque volume de contrôle de la géométrie et est dotée de ses propres champs de variables. En outre, chaque phase possède une fraction volumique égale à la fraction du volume de contrôle qu'elle occupe (Lin Ma *et al.* 2002).

Dans notre cas, la fraction volumique α_q est définie par :

$$\alpha_q = \frac{\partial \Omega_q}{\partial \Omega_{maille}} \quad \text{III.38}$$

$\partial \Omega_{maille}$ représente le volume total de la maille de calcul et $\partial \Omega_q$ le volume de la partie de la maille occupée par la phase q. Si q représente la phase liquide (eau), nous avons alors :

eau $\alpha = 1$, la maille est entièrement remplie d'eau,

eau $\alpha = 0$, la maille contient exclusivement de l'air,

$0 < \alpha < 1$, la maille contient la surface libre

On suppose qu'il n'y a pas de transfert de masse entre phases, ni de tension à l'interface entre les fluides. Dans chaque cellule, la masse volumique ρ et la viscosité μ globale sont représentées par la moyenne pondérée par la fraction volumique :

$$\rho = \sum_{q=1}^n \alpha_q \rho_q \quad \text{et} \quad \mu = \sum_{q=1}^n \alpha_q \mu_q$$

La forme des équations aux dérivées partielles est la suivante :

♦ Conservation de la masse pour chaque phase q

$$\frac{\partial \alpha_q}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial \alpha_q}{\partial x_i} = 0 \quad ; \quad 0 \leq \alpha_q \leq 1 \quad \text{III.39}$$

La contrainte sur la fraction volumique est la suivante :

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1$$

n représente le nombre de phases.

III.3.Simulation par les codes de calcul CFD :

Les codes de calcul CFD ou « *Computational Fluid Dynamics* » (mécanique des fluides numérique) sont, applicables dans une large variété de problèmes en mécanique de fluides et disposent de modèles divers de turbulence. Parmi ces codes, les plus utilisés sont : CFX, FLUENT, PHOENICS, Star-CD et Flow-3D. Tous ces codes utilisent la méthode FVM (méthode des volumes finis) [Adamsson (1999)].

III.3.1. Présentation du code de calcul FLUENT :

Pour réaliser nos simulations, le choix s'est porté sur le code de calcul commercial Fluent que nous présentons dans cette partie.

III.3.1.1. Architecture du logiciel :

Comme tout logiciel de CFD, il est composé de trois éléments : le préprocesseur, le solveur et le post-processeur.

Le pré-processeur GAMBIT

Il permet à l'utilisateur de construire la géométrie du domaine de calcul et de subdiviser ce dernier en petits volumes de contrôle ou cellules de calcul. L'ensemble de ces volumes élémentaires constitue le maillage. La définition des conditions aux limites appropriées, au niveau des cellules qui coïncident ou touchent la frontière du domaine de calcul, se fait également à ce niveau.

- **Le solveur** permet de définir numériquement les conditions opératoires (gravité, pression) dans lesquelles est effectuée la simulation, ainsi que la spécification des conditions aux limites. Enfin, il permet de choisir le processus itératif, en proposant notamment plusieurs schémas numériques pour la discrétisation spatiale et temporelle, et pour le couplage de la vitesse et de la pression. Il offre également une interface permettant de contrôler à tout moment l'état d'avancement des calculs.

- **Le post-processeur** est l'élément qui permet de visualiser la géométrie et le maillage du domaine, mais surtout d'afficher les résultats obtenus. Il est ainsi possible de visualiser les champs de vitesse, les champs de pression, de turbulence ainsi que toutes les autres grandeurs calculées sur un segment, une section du domaine ou sur tout le volume. Il offre aussi la possibilité de tracer des courbes et de visualiser les lignes de courant ou la trajectoire des particules.

III.3.1.2 Etapes de calcul :

Les étapes décrites ci-dessous sont propres au régime permanent et concernant [Versteeg et Malalaszka (1995)] :

- L'intégration des équations de transport
- La discrétisation spatiale
- Le couplage pression – vitesse
- La convergence

III.3.1.2 1- Intégration des équations de transport :

Fluent est un logiciel utilisant la méthode des volumes finis. Il résout les équations de transport de la matière (équation de continuité), de la quantité de mouvement, de l'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente. Cette méthode est très répandue en mécanique des fluides tridimensionnelle. Son avantage est qu'elle est conservatrice, c'est à dire que tout le flux sortant d'un volume de contrôle entre dans le volume voisin. Son principe est décrit par Patankar (1980) : chaque équation continue est intégrée sur chaque volume de contrôle puis le théorème d'Ostrogradski est utilisé pour transformer certaines intégrales de surface en intégrales de volume.

L'expression générale de ces équations est :

$$\underbrace{\text{div}(\rho\phi\vec{U})}_I = \underbrace{\text{div}(\Gamma \text{grad}\phi)}_{II} + \underbrace{S_\phi}_{III} \quad \text{III.40}$$

I : représente le bilan entrée /sortie de la quantité ϕ dans le volume de contrôle V (de contour A , de normale sortante à la surface n) dû à la convection .

II : représente la variation de ϕ due à la diffusion et III est le terme puits/source.

Ces équations sont intégrées sur un volume de contrôle dV et leur forme intégrale devient alors :

$$\int_A n(\rho\phi U) dA = \int_A n(\Gamma \text{grad}\phi) dA + \int_A S_\phi dV \quad \text{III.41}$$

Cette méthode des volumes finis est dérivée de celle des éléments finis.

Elle présente l'avantage d'être facilement compréhensible par rapport à d'autres méthodes telles que celles des éléments finis ou la méthode spectrale. Elle a été, de plus, largement validée.

III.3.1.2 .2- Discrétisation spatiale :

Les équations de transport de ϕ sont ensuite discrétisées sous la forme :

$$a_p \Phi = \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} + b \quad \text{III.42}$$

où nb représente les indices des cellules voisines. Le nombre de cellules voisines dépend de la topologie du maillage (6 cellules voisines pour un maillage hexaédrique).

Cette équation est à écrire pour chaque cellule de centre P du domaine.

Le système d'équations aux dérivées partielles est donc transformé en un système algébrique représenté sous forme de produit de matrices comprenant un grand nombre de coefficients nuls.

Fluent propose deux schémas de discrétisation :

- Schéma amont du premier ordre : Ce schéma permet une certaine stabilité dans les calculs mais est responsable de diffusion numérique.
- Schéma amont du second ordre : L'utilisation de cette méthode permet de minimiser la diffusion numérique mais peut faire diverger le calcul.

III.3.1.2.3- Couplage pression-vitesse :

L'utilisation d'un algorithme pour corriger la pression et la vitesse afin que ces grandeurs vérifient l'équation de continuité est nécessaire.

Cet algorithme stipule l'existence d'une relation entre les vitesses corrigées et les pressions corrigées.

Nous utilisons l'algorithme SIMPLE, acronyme pour « *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations* » pour résoudre le système d'équations discrétisées.

Le schéma représentatif de ce processus itératif est décrit par la figure III.1. u , v et w sont les trois composantes du vecteur vitesse. P représente la pression. A l'issue de n itérations, les valeurs de ϕ sont obtenues. Pour éviter d'apporter des corrections trop grandes à ces grandeurs, et ainsi diminuer les risques de divergence du calcul, les nouvelles valeurs de ϕ utilisées pour l'itération $(n+1)$ sont calculées comme suit :

$$\Phi^* = \alpha\Phi + (1 - \alpha)\Phi^{(n-1)} \quad \text{III.43}$$

$\phi^{(n-1)}$ est le résultat de l'itération $(n-1)$. α est le facteur de sous relaxation. Il est compris entre 0 et 1.

Fluent propose plusieurs schémas de discrétisation. Les plus utilisés pour notre étude sont :

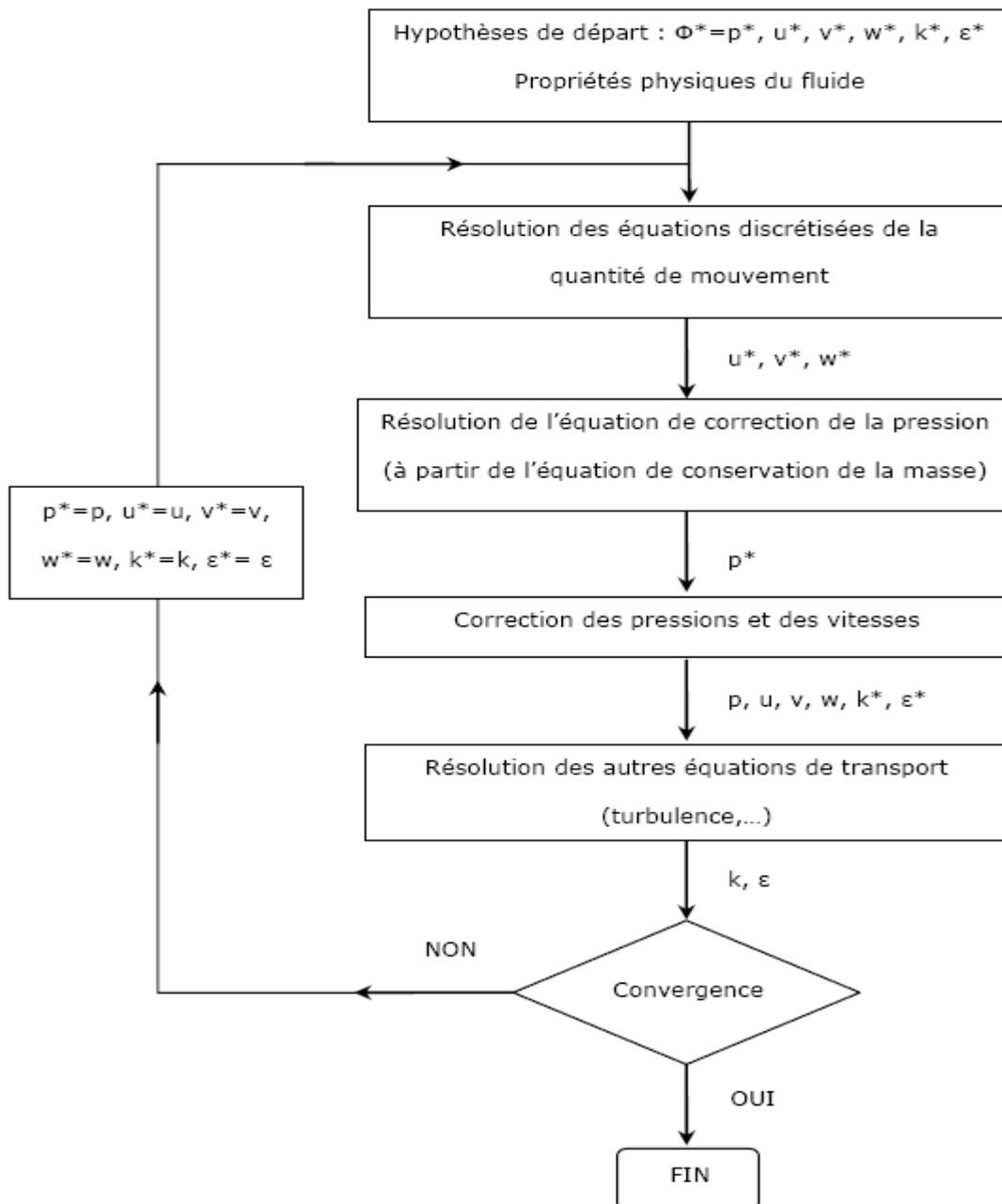
- ◆ Schéma amont du premier ordre : ce schéma permet une certaine stabilité dans les calculs mais est responsable de diffusion numérique.
- ◆ Schéma amont du second ordre : l'utilisation de cette méthode permet de minimiser la diffusion numérique mais peut faire diverger le calcul.
- ◆ Schéma d'ordre supérieur : le schéma d'ordre supérieur disponible dans Fluent est le schéma QUICK (Fluent, 2001). Il prend en compte le flux aux interfaces.

La résolution des systèmes d'équations aux différences finies se fait par une méthode itérative qui permet de calculer le champ de pression compte tenu de l'équation de conservation de la

masse par une méthode semi-implicite (c'est à dire qui utilise les valeurs du champ de pression calculées à l'itération précédente).

L'algorithme SIMPLE, acronyme pour « Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations » permet de résoudre le système d'équations discrétisées (Fluent, 2001). Cet algorithme stipule l'existence d'une relation entre les vitesses corrigées et les pressions corrigées, en vue de vérifier l'équation de conservation de la masse.

Le schéma représentatif de ce processus itératif est le suivant :



FigureIII.1- Schéma itératif de Fluent, avec l'algorithme SIMPLE

III.3.1.2.4. Convergence

A chaque itération, Fluent permet de juger de l'état de convergence par le biais du calcul des résidus. Le résidu R^Φ correspond au déséquilibre de l'équation sommé sur toutes les cellules du domaine. Il s'écrit donc sous la forme :

$$R^\Phi = \sum_{\text{cellules } P} \left| \sum_{=b} a_{nb} \Phi_{nb} + b - a_p \Phi_p \right| \quad \text{III.44}$$

En général, il est difficile de juger de la convergence à partir de ce résidu car il dépend de la taille du système.

L'utilisation du résidu normalisé permet de surmonter cette difficulté.

Fluent adimensionnalise le résidu précédent (Équation III .44) en utilisant un facteur d'échelle représentatif du débit de Φ à travers le domaine (Fluent, 2001). Ce résidu relatif ou normalisé est défini par :

$$R^\Phi = \frac{\sum_{\text{cellules } P} \left| \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} + b - a_p \Phi_p \right|}{\sum_{\text{cellules } P} \left| a_p \Phi_p \right|} \quad \text{III.45}$$

Pour les équations de quantité de mouvement, le dénominateur $a_p \Phi_p$ est remplacé par $a_p U_p$ où U_p est la norme de la vitesse au point P.

Pour l'équation de continuité, la définition du résidu est différente :

RC = $\sum_{\text{cellules } P}$ bilan de matière dans la cellule P

et le résidu relatif est calculé à partir du résidu maximal C itération 5 R sur les 5 premières itérations

$$R^c = \frac{R_{\text{iteration } N}^c}{R_{\text{iteration } 5}^c}$$

Les simulations ont été réalisées à l'aide du logiciel Fluent.les résultats des simulations numériques des écoulements turbulents en multiphasique seront exposés dans la quatrième partie du mémoire.

Références bibliographiques

Adamsson numerical simulation and large scale physical modeling of flow in a detention bassin (1999).

Chassaing P. « Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur », Polytech, édition. Cepadues. Vol.1, p 625 (2000).

FLUENT « Fluent 6.0 software User's Guide », Fluent Inc,(2001).

Frey P. « Étude expérimentale et simulation numérique du transport turbulent de particules solides dans un décanteur », Thèse de doctorat, École Centrale de Lyon p 144(1991).

Kolmogorov, A. N., "The local structure of turbulence in incompressible fluid at very high Reynolds numbers" Dokl. Akad. Nauk SSSR vol.30, pp 301-305. (1941a).

Kolmogorov, A. N., "On degeneration of isotropic turbulence in a incompressible viscous liquid." Dokl. Akad. Nauk SSSR vol. 31, pp 538-540 (1941b).

Lesieur M. « La turbulence », Presses universitaires de Grenoble, p 262 (1994).

Lin M., Ashworth P.J., Best J.L., Elliott L., Ingham D.B. AND Whitcombe L.J. «Computational fluid dynamics and the physical modelling of an upland urban river», *Geomorphology*, Vol. 44, 375-391. (2002)

Meneveau, C. and T. S. Lund, "On the lagrangian nature of the turbulence energy cascade." *Physics of Fluids* 8(6), 2820–2825 (1994).

Menter, F.R.two equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications *AIAA* vol 32 N 8 1598-1605 (1994)

Patankar, S. V., "Numerical heat transfert and fluid flow "Hemisphere Publishing Corporation, Washington (1980).

Schiestel, R.,"Modélisation et simulation des écoulements turbulents édition Hermès paris p 105 (1998).

Versteeg H. K., MalalasekeRA W. « An introduction to computational fluid dynamics, the finite volume method », Prentice Hall, p 257. (1995).

CHAPITRE IV

***Simulation de l'hydrodynamique
dans les réacteurs à bulles***

IV .1.Introduction :

L'écoulement bidimensionnel au sein des réacteurs à bulles résulte de l'interaction entre le mouvement imposé par le distributeur de gaz et les variations de la fraction volumique de chaque un des phases. Pour contribuer à une meilleure connaissance des caractéristiques de l'écoulement dans les réacteurs à bulles, nous avons choisi de faire dans une première étape l'étude numérique de l'écoulement laminaire dans le réacteur.

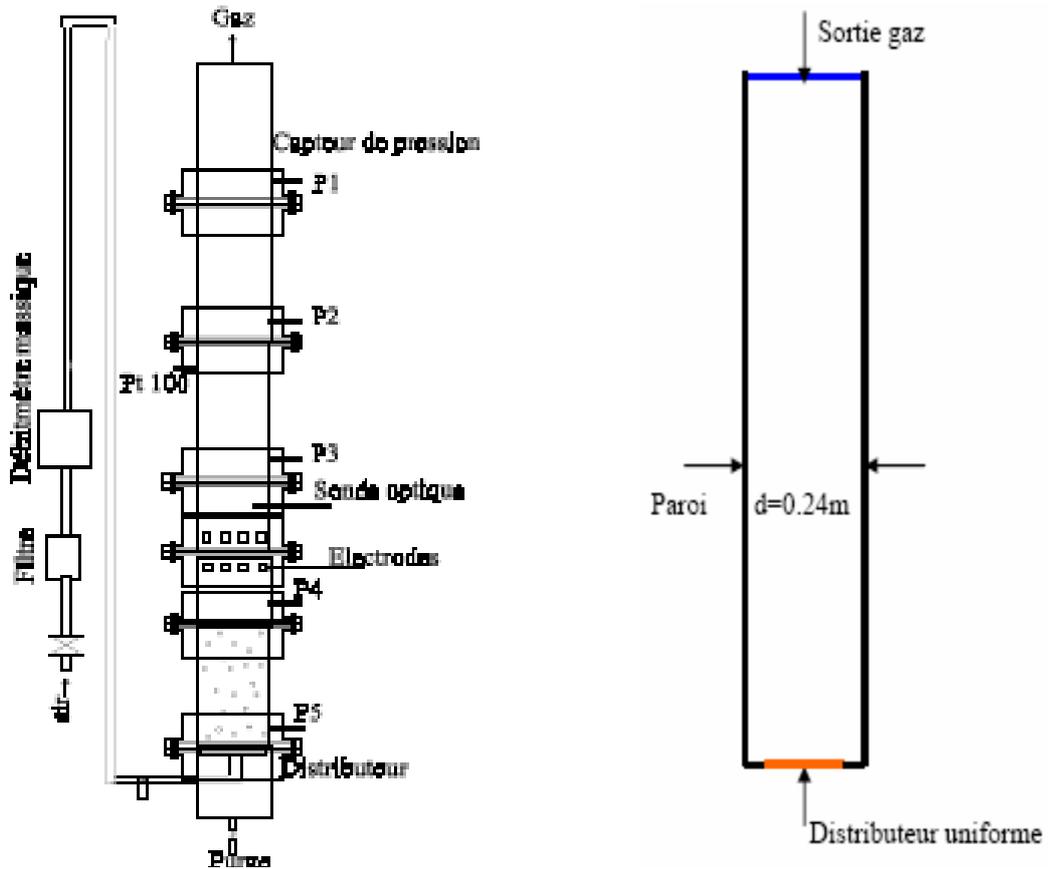
Le but de ce chapitre est de montrer l'intérêt du couplage des deux approches, numérique et expérimentale et de mettre en évidence certains phénomènes prépondérants à l'échelle des réacteurs à bulles.

Le calcul numérique a été mené à l'aide du code de calcul "Fluent" qui utilise la méthode des volumes finis. Le poste de travail utilisé pour ces simulations est un PC doté d'un microprocesseur Pentium 4HT avec une fréquence d'horloge de 3,0GHz et de 2 Go de mémoire vive.

IV.2. Simulation de l'écoulement dans les colonnes à bulles

IV.2.1 .Géométrie de la colonne

Le dispositif expérimental simulé (Fig.IV.1) consiste en une colonne de 2.75 m de haut et de 0.24 m de diamètre, remplie de liquide et alimentée en pied par de l'air via un distributeur uniforme de 203 trous de 1 mm de diamètre. La colonne fonctionne en mode semi-continu. Le liquide utilisé est de l'eau.



Distributeur dans la colonne expérimental

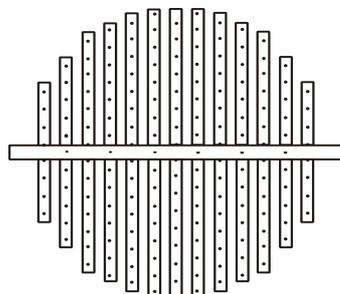


Figure IV.1 Géométrie de la colonne

IV.2.2. Maillage

La création de la géométrie ainsi que le maillage se font sous le progiciel "Gambit" 2.3.16. Ce mailleur propose des solutions étendues pour les géométries les plus compliquées. Cependant, pour notre cas, deux choix principaux du maillage se sont posés à nous. En l'occurrence, un maillage soit à base de cellules quadrilatères, soit à base de cellules triangulaires (soit à base de cellules hexaédriques, soit à base de cellules tétraédriques, pour le cas 3D).

L'utilisation d'un maillage triangulaire induirait un surplus du nombre de cellules par rapport aux cellules quadrilatères, d'où le besoin de plus de ressources et de temps de calcul. Cependant, notre géométrie est assez simple où l'écoulement suit pratiquement la forme de la géométrie. Donc, en utilisant un maillage à cellules quadrilatères, nous aurons un alignement de l'écoulement avec notre maillage, alors que ça ne sera jamais le cas avec des cellules triangulaires. Ce dernier point garantira un minimum de diffusion numérique.

Ainsi, le choix d'un maillage à cellules quadrilatères pour le cas bidimensionnel (hexaédriques pour le cas 3D), s'impose naturellement vu l'argumentaire développé plus haut. (figure IV.2).

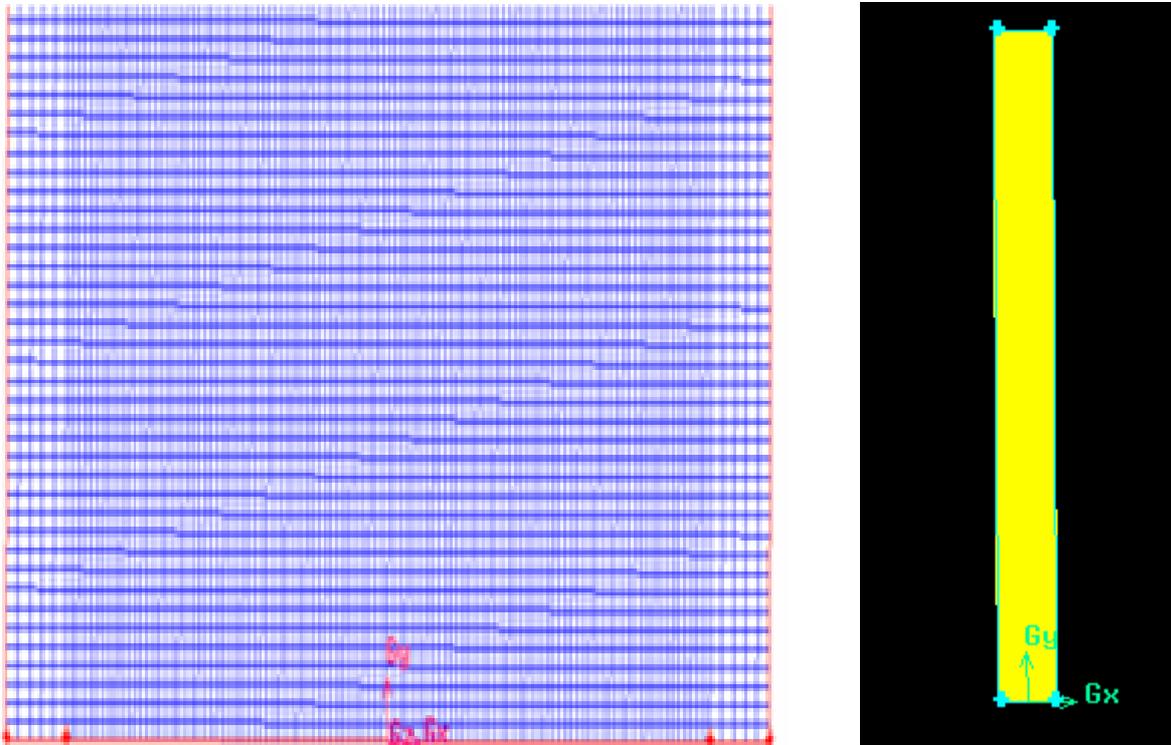


Figure IV-2 Représentation du maillage 2d (102704 mailles).

VI.2 Conditions aux limites

Dans une modélisation, on ne peut pas toujours représenter la totalité de l'ouvrage. Dans ce contexte, les conditions aux limites définissent la valeur des paramètres hydrauliques (débit, vitesse, pression,...) permettant de représenter l'effet en terme hydrodynamique de ce qui a été enlevé.

L'étude des conditions aux limites est déterminante dans une modélisation. Plusieurs types de conditions aux limites sont proposés dans le code de calcul Fluent. Nous en utilisons essentiellement quatre : vitesse d'entrée, pression de sortie, condition de paroi et hauteur d'eau imposée si on travaille en surface libre.

La première condition aux limites «*velocity-inlet*» correspond à une vitesse imposée. Nous injectons ainsi le débit à partir d'une vitesse et d'une section mouillée (conditions aux limites de type Dirichlet). La hauteur de la colonne nécessaire est de l'ordre de 10 fois le diamètre d'écoulement. La deuxième condition «*pressure-outlet*» (pression de sortie) est appliquée au niveau des sorties déversé ou conservé (sortie de fluide à la pression atmosphérique).

La troisième condition «*wall*» est une condition de flux nul. Elle est appliquée au niveau des parois ou des seuils.

Le logiciel fluent donne le choix entre un certain nombre de types de conditions aux limites, très différentes les unes des autres et pouvant décrire les frontières d'un très grand nombre de domaines d'écoulements. Il faut fournir les conditions qui représentent l'état de base du domaine à l'instant où commence la simulation. Si les variables possèdent des valeurs initiales constantes, il est possible de les livrer de manière directe au logiciel. Ce cas n'arrivant que très rarement, fluent met à la disposition de l'utilisateur un sous-programme dans lequel il est possible d'établir des profils initiaux non uniformes pour chacune des variables de l'écoulement.

« **Inlet** » :

Cette condition à la limite est généralement employée pour modéliser une entrée. En effet, les valeurs des variables de l'écoulement doivent être imposées sous forme de conditions de Dirichlet à l'exception de la pression pour les écoulements incompressibles qui est extrapolée des valeurs calculées au cœur de l'écoulement. Pour être plus précis, la viscosité turbulente est extrapolée de la même manière que la pression ; le code fluent n'exploite pas la formule classique la reliant à k et ε car les valeurs estimées de k et ε peuvent être dans certains cas très éloignées des vraies valeurs physiques et peuvent donc conduire à des erreurs importantes dans le calcul des termes visqueux des équations de quantité de mouvement.

Si elle est retenue pour caractériser l'entrée du fluide, la valeur de la pression doit également être imposée grâce à une condition de Dirichlet. Par contre, seules les composantes de vitesse et les quantités turbulentes vérifient des conditions de Neumann avec des gradients normaux nuls ; les autres variables doivent être exprimées grâce à des conditions de Dirichlet.

« Outlet » :

Cette condition limite est généralement employée pour modéliser une sortie, une condition de pression est utilisée pour modéliser la sortie du fluide, la valeur de la pression doit être fixée par l'intermédiaire d'une condition de Dirichlet. En ce qui concerne les variables transportées, elles vérifient toutes des conditions de Neumann avec des gradients normaux nuls.

Ainsi, à partir du moment où une condition de pression est utilisée dans le domaine, il n'est plus nécessaire d'avoir un bilan entrée-sortie strictement nul à chaque étape de la résolution, ce qui est très utile pour les écoulements non permanents. C'est pourquoi, dans ces cas là, il n'est pas nécessaire de se préoccuper de l'égalité entre les débits entrants et les débits sortants; cas d'utilisation de plusieurs entrée et sortie.

« Wall » :

La condition par défaut du logiciel est la condition de non glissement (vitesse tangentielle nulle). La condition de glissement (contrainte tangentielle nulle) est également directement disponible dans ce logiciel. En ce qui concerne les scalaires, si aucune condition n'est imposée, le logiciel considère qu'il n'existe aucun flux de scalaire à travers la paroi.

Pour les écoulements turbulents, il est préférable de ne pas employer ce type de conditions. Les lois classiques de proche paroi sur la vitesse tangentielle et sur les scalaires sont plus appropriées pour modéliser l'effet de la paroi sur l'écoulement. C'est pourquoi, le logiciel met à la disposition de l'utilisateur, des lois logarithmiques pour les parois lisses tout en sachant que l'utilisateur a la possibilité de modifier toutes les constantes associées à celles-ci. En revanche, aucune loi n'étant prévue pour les parois rugueuses, il est nécessaire dans ces cas là de faire appel à un sous-programme afin de définir les profils au voisinage de ces parois.

IV.2.1. Ecoulement de fluide

L'étude de la dynamique des fluides et des écoulements multiphasique dans les colonnes à bulles est très complexe par rapport à celle des écoulements monophasiques.

Le **Tableau IV-1** regroupe les valeurs des vitesses initiales utilisées dans les calculs, le nombre de Reynolds varie entre [277-2084].

Vitesse V (m/s)	nombre de Reynolds Re
0.02	277,94
0.04	555,88
0.06	833,83
0.09	1250,74
0.1	1389,71
0.11	1528,68
0.13	1806,62
0.15	2084,57

Tableau IV-1 : Vitesses initiales utilisées dans les calculs et les valeurs des nombres de Reynolds associées par rapport au diamètre de distributeur.

IV.3. Problème posé

Il s'agit de simuler l'écoulement dans une colonne à bulle. Dans un cylindre contenant de l'eau, et ouvert à l'air en haut, on injecte de l'air par le bas à travers le distributeur.

Les dimensions et paramètres du problème, sont identique à ceux de Fransolet et al (2005), ils sont les suivants :

- Cylindre vertical de hauteur 2.75m et de diamètre 0.24m;
- distributeur coaxial placé en bas, de diamètre équivalent 0.203 m;
- Vitesse débitante déjection du gaz de $0.02\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$.
- Le cylindre est ouvert en haut à la pression atmosphérique ;
- On utilisera de l'eau et de l'air aux conditions normales (tension interfaciale $72\text{mN}\cdot\text{m}^{-1}$).

La géométrie du problème est un rectangle de hauteur 2.75m et de largeur 0.24m. Le distributeur sera modélisé par une zone de 0.203m au centre de la face d'entrée. Il est préférable de centrer l'axe de symétrie sur le repère. En cas de difficultés, on se retrouvera avec trois zones pour les conditions aux limites :

- Le distributeur, en bas, de type velocity inlet ;
- La sortie du haut, de type pressure outlet ;
- Les parois latérales plus les deux parois de part et d'autre du distributeur, de type wall.

Le domaine sera maillé en éléments Quadratiques.

IV.4. Critères de convergence

A chaque itération, des résidus sont calculés pour chaque variable de calcul. La convergence est déterminée à partir de ces résidus. Il n'existe pas vraiment de critères absolus

pour l'évaluer mais il est recommandé d'examiner non seulement les résidus ainsi que leur évolution, mais aussi les valeurs des quantités calculées. Le critère de convergence par défaut est de 10^{-3} , cette valeur est généralement insuffisante dans les systèmes multiphasiques pour assurer une bonne convergence. Dans notre cas, le résidu de la continuité doit atteindre une valeur de 10^{-4} pour que le résultat ne soit plus modifié.

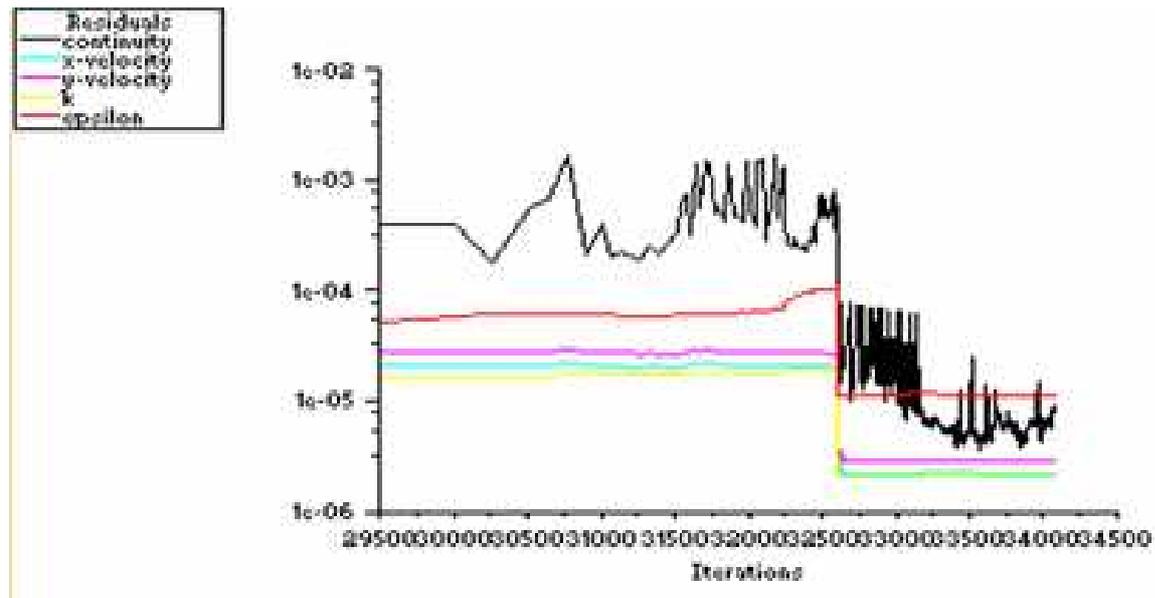
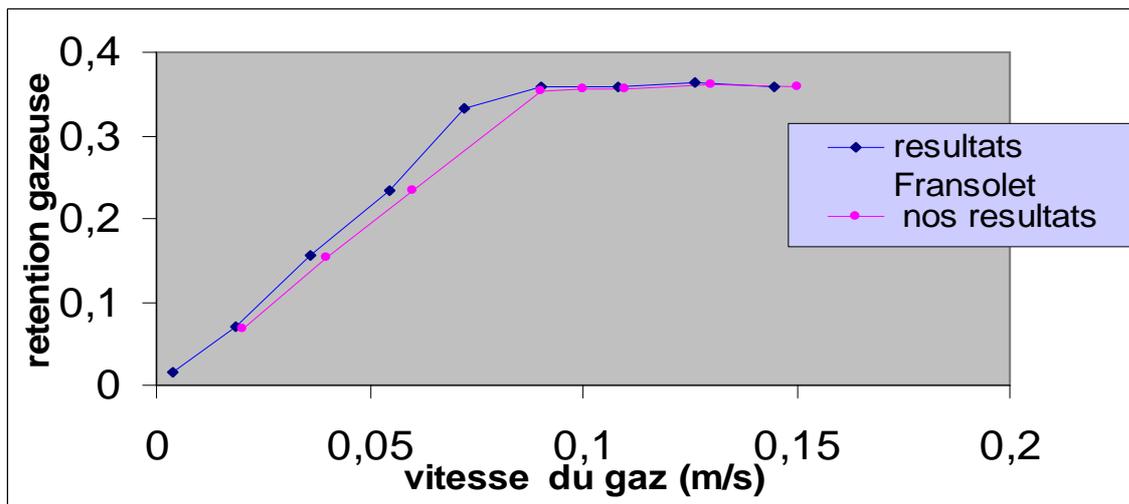


Fig IV-3 Convergence des résidus.

Le nombre d'itérations dépend du nombre de mailles totales de la géométrie et des paramètres inclus dans le modèle.

IV.4 .1.Validation du modèle

La **figure IV-4** présente la variation de la rétention gazeuse local en fonction des vitesses tester. Nous pouvons constater que l'écart entre les deux graphes expérimentale et numérique, pour les mêmes paramètres, est faible. L'erreur calculée ne dépasse pas 6% et est due au choix du maillage. Nous remarquons un bon degré de validité du modèle.



La **figure IV-4** évolution de la rétention local $\epsilon_{3.4}$ en fonction de la vitesse

La rétention gazeuse globale à l'échelle de la colonne, Consiste à mesuré la différence de pression entre le niveau supérieur et le niveau inférieur sénilaire au deux capteurs de pression existant sur la colonne de référence (colonne expérimentale).

La **Figure IV-5** représente la variation de la rétention gazeuse globale en fonction de la vitesse superficielle du gaz, les deux courbes qui représentent la variation de la rétention sont presque cemilaire, L'erreur calculée ne dépasse pas 4%.

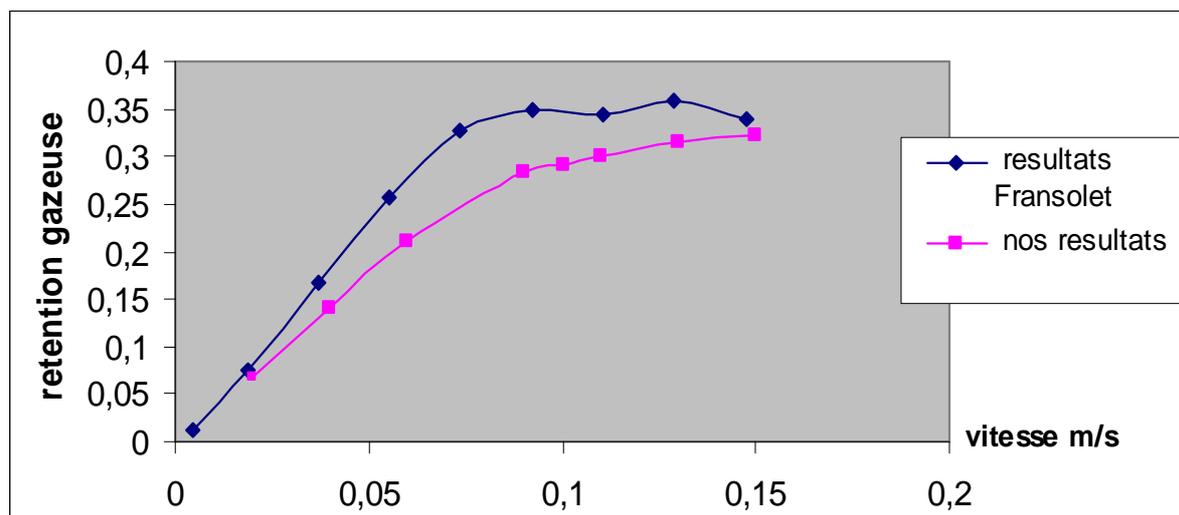


Figure IV-5 valeur global de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse

IV.5. Etude de la sensibilité du maillage et du modèle de turbulence

IV.5.1. Sensibilité au maillage

Une étude de sensibilité au maillage a été effectuée. Diverses configurations de maillages ont été testées afin de déterminer le meilleur compromis entre la précision des résultats et le temps de calcul (environ 1200,7500, 43200 ,100000 et 200000 mailles).

La densité de maillage se répercute évidemment sur les temps de calculs et le nombre d'itérations nécessaires pour la convergence d'une solution. A titre d'exemple, le calcul pour une vitesse du gaz égal à 0.15 m/s, avec le modèle de turbulence K-ε standard ; a convergé en 3080 itérations pour le premier maillage (1200), en 11400 itérations pour le deuxième maillage (7500), en 67600 itérations pour le troisième maillage (43000), en 172142 itérations pour le quatrième maillage (100000) et 284211 itérations pour le cinquième plus dense. L'emploi d'un maillage trop relâché (1200, 7500 et 43000 mailles) induit des pertes d'informations. Nous choisissons donc de simuler les écoulements pour la présentation des résultats à l'aide d'un domaine de calcul comprenant 102000 mailles (≈ 100000).

densité de maillage	Rétention globale
1200	0.15
7500	0.18
43000	0.24
102000	0.32
200000	0.318

Tableau IV-2 Comparaison entre les retentions gazeuse pour différents maillages

IV.5.2. Sensibilité du modèle de turbulence

on a utilisé la même densité de maillage (102704 mailles) pour différents modèles de turbulence testé.

on remarque que les modèles k-ε standard et RNG k-ε standard donnent des simulations des retentions de phase quasi-identiques, alors que l'apport du modèle RSM est négligeable (temps de calcul est très grand).

Model de turbulence	Retention gazeuse	Nombres d'itérations
K-ε	0.32	172142
k-ε rng	0.32	172150
k- ω	0.321	172148
Rsm	0.32	361100

Tableau IV-3 tableau représentatif des Résultats des différents modèles de turbulence

IV.5.3. Sensibilité du Modèle d'interaction biphasique (approche biphasique)

On a utilisé la même densité de maillage (102704maillages) et le même modèle de turbulence (K-ε) pour différentes approches biphasiques testées.

Approche biphasique	Retention gazeuse	Nombres d'itérations
eurlien	0.35	128142
VOF	0.32	172142

Tableau IV-4 tableau comparatif entre les résultats des approches biphasiques

IV.6. Simulation du champ d'écoulement

Dans cette partie, nous présentons les résultats des tests les plus concluants que nous avons réalisés. Nous avons cherché à représenter les champs de vitesse et de turbulence au voisinage du distributeur de gaz.

IV.6.1.Champs de vitesse

Nous représentons dans les figures IV.6, IV.7 et IV.8 les contours et le champ de vitesse de l'écoulement dans un tronçon de la colonne au voisinage du distributeur et la totalité de la colonne avec le modèle $k - \varepsilon$ standard et pour une vitesse moyenne imposée à l'entrée de **0.10** m/s. On peut vérifier l'influence de la géométrie du distributeur sur l'écoulement. La forme du distributeur a été optimisée pour qu'il soit d'une part, le moins intrusif possible à l'écoulement, et de créer d'autre part autour de lui une turbulence pour éliminer toute sorte de dépôt de particules qui limiteront à long terme son bon fonctionnement.

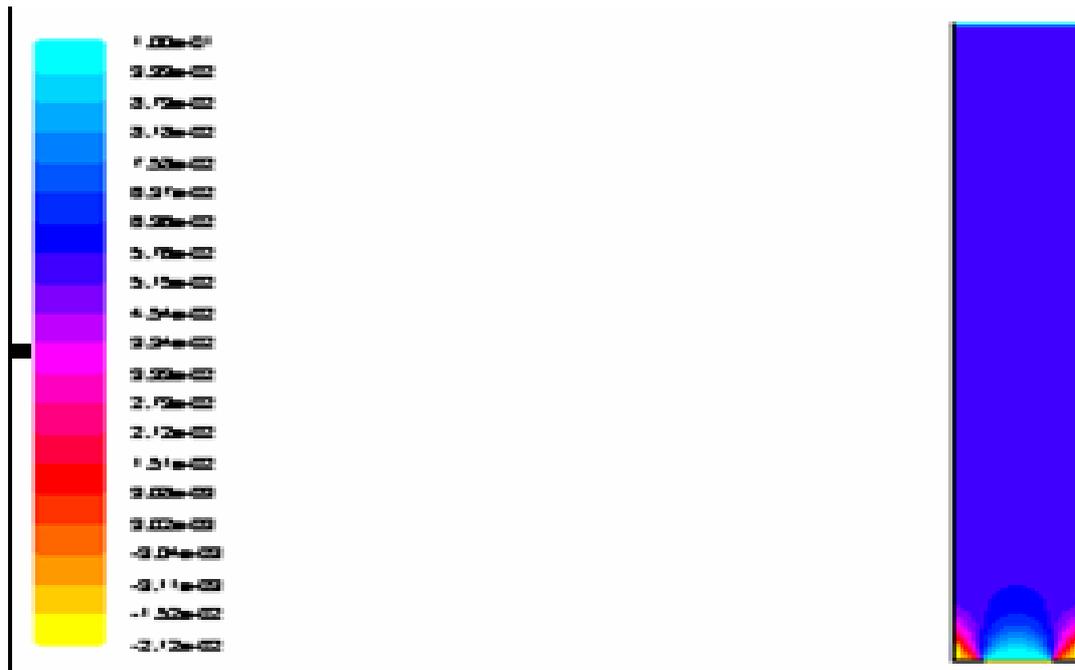


Figure IV.6- Représentation des contours de vitesse au voisinage du distributeur



Figure IV.7- Représentation des contours de vitesse sur la totalité de la colonne

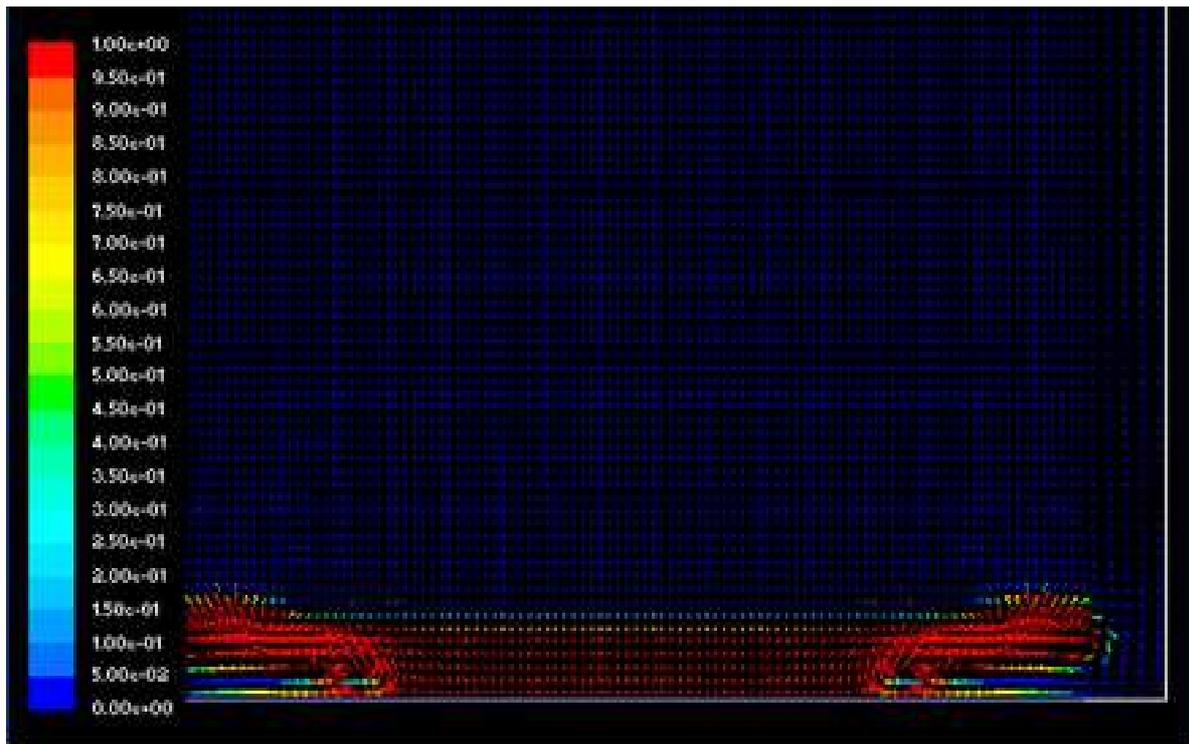


Figure IV.8-1- Représentation des vecteurs de vitesse au voisinage du distributeur

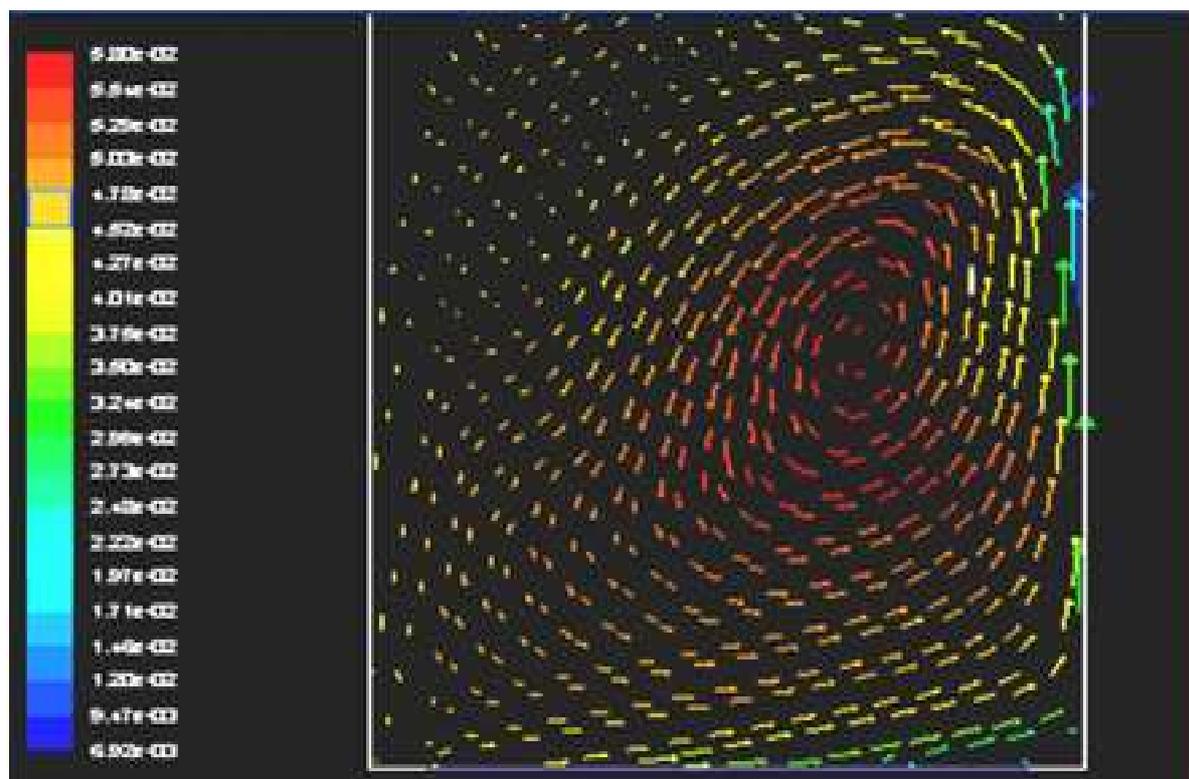


Figure IV.8-2 Représentation des vecteurs de vitesse au voisinage du distributeur

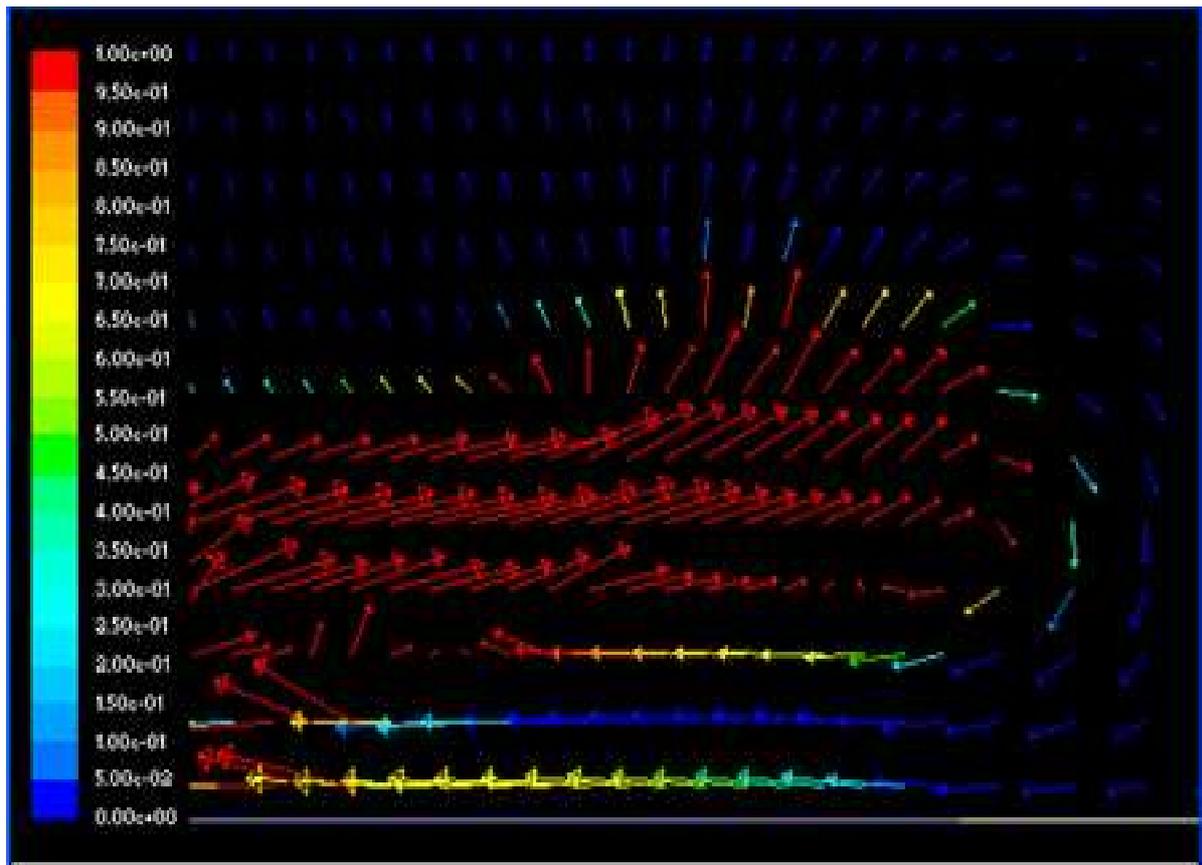


Figure IV.8-3 Représentation des vecteurs de vitesse au voisinage du distributeur

On remarque une recirculation des champs de vitesse au voisinage du distributeur (**Figures IV.8**), c'est un résultat de différence du poids entre les fluides (air/eau) d'une part et d'autre part l'un des intérêts de la dispersion pour un bon mélangeage.

IV.6.2. Champ de pression :

Nous représentons dans les figures IV.9 les contours de pression dans la totalité de la colonne avec le modèle $k - \varepsilon$ standard et pour une vitesse moyenne imposée à l'entrée de **0.10** m/s.

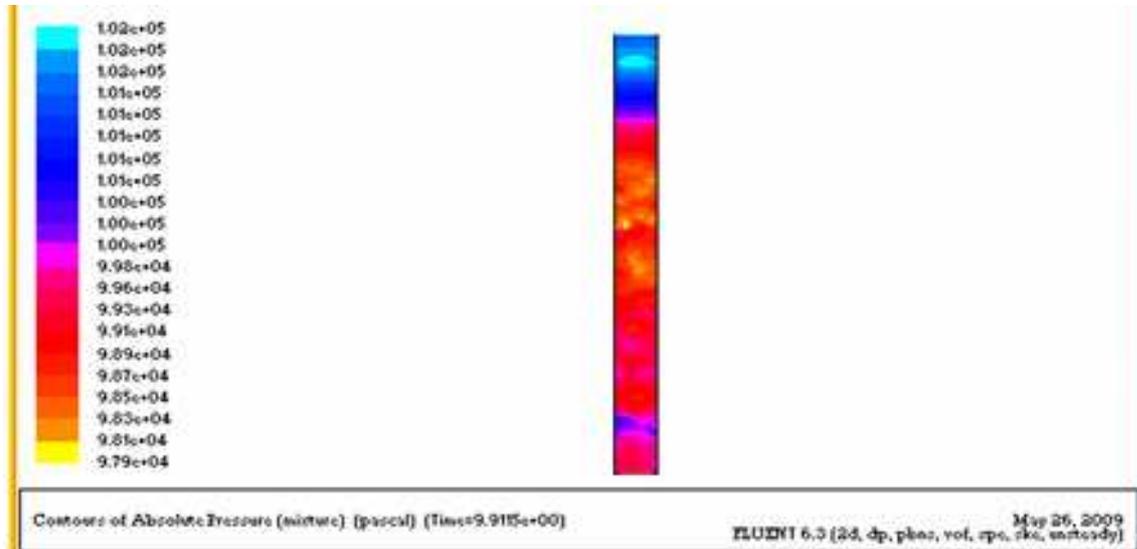


Figure IV.9-a. Représentation des contours de pression absolue sur la totalité de la colonne

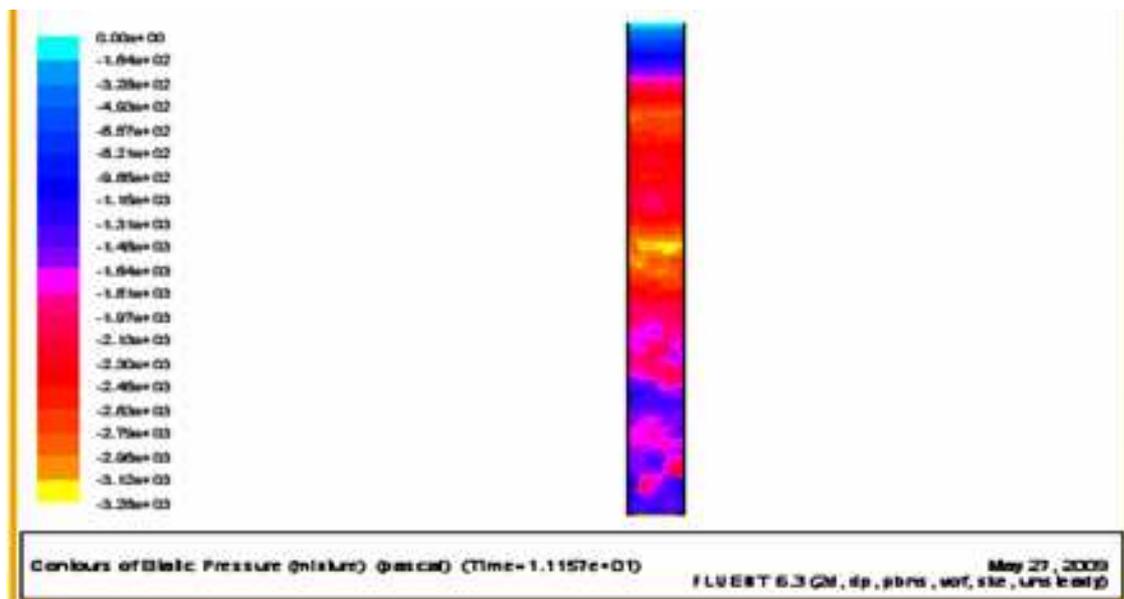


Figure IV.9-b. Représentation des contours de pression statique sur la totalité de la colonne

IV.6.3 Variation de la fraction volumique

Nous représentons dans les figures IV.10, IV.11 et IV.12 les contours de la fraction volumique au cours du temps des vitesses d'écoulement dans la colonne en utilisant le modèle $k - \varepsilon$ standard.

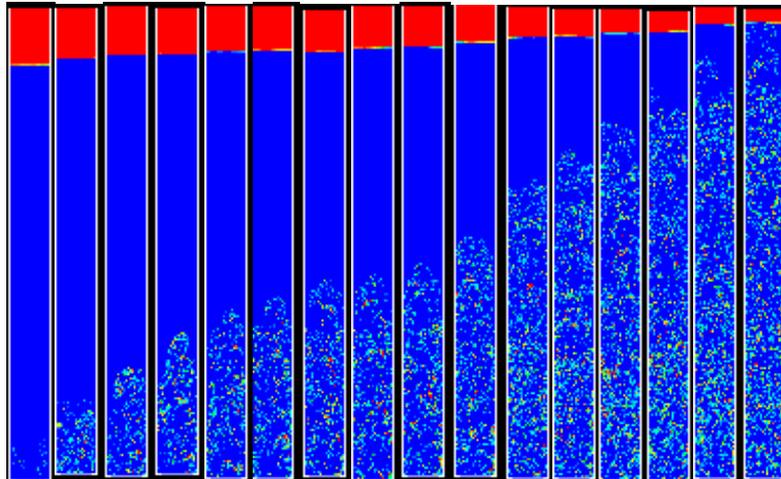


Figure IV.10- Représentation des Variations de la fraction d'air dans la colonne en fonction du temps ($v=0.02\text{m/s}$).

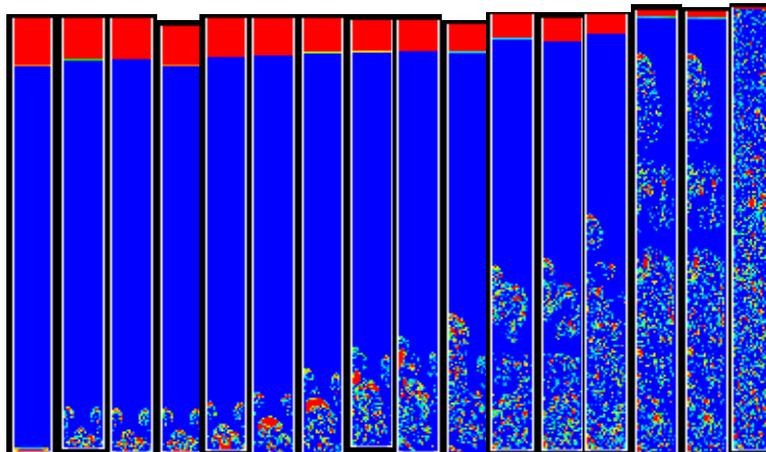


Figure IV.11- Représentation des Variation de la fraction d'air dans la colonne en fonction du temps ($v=0.06\text{m/s}$).

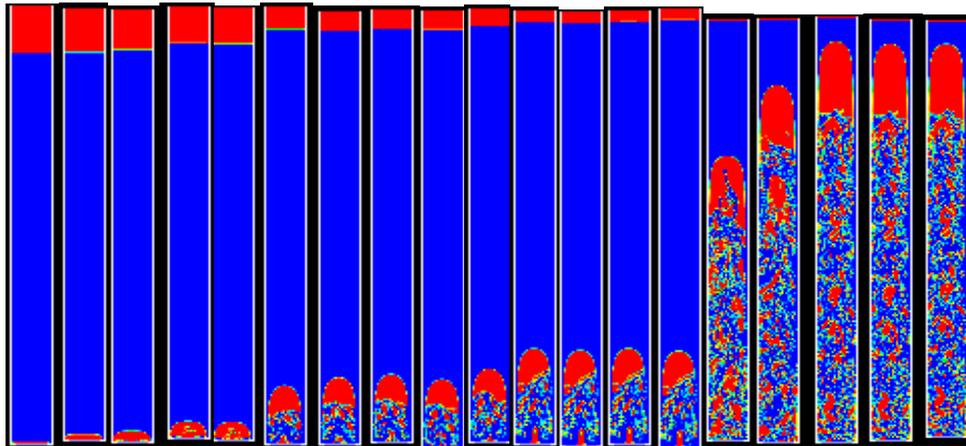


Figure IV.12- Représentation des Variations de la fraction d'air dans la colonne en fonction du temps ($v=0.13\text{m/s}$).

Dans les 3 figures précédentes, on remarque l'évolution de la fraction volumique de l'air dans la partie liquide (eau), avec diminution de la quantité d'air dans la partie supérieure de la colonne, l'explication du phénomène est la suivante ; l'air entrant remplace une quantité d'eau dans la partie liquide initial, avec augmentation du liquide dans la colonne (conservation de masse dans la colonne).

IV.6.4.Champs de turbulence

Nous représentons dans les figures **IV.13 et IV.14** Les contours de la turbulence dans la colonne. On peut vérifier que l'intensité turbulente est moins intense au centre de la colonne et augmente dès qu'on s'approche des parois. Le distributeur induit aussi une turbulence qui a pour incidence de refaire circuler les bulles d'air dans la colonne.

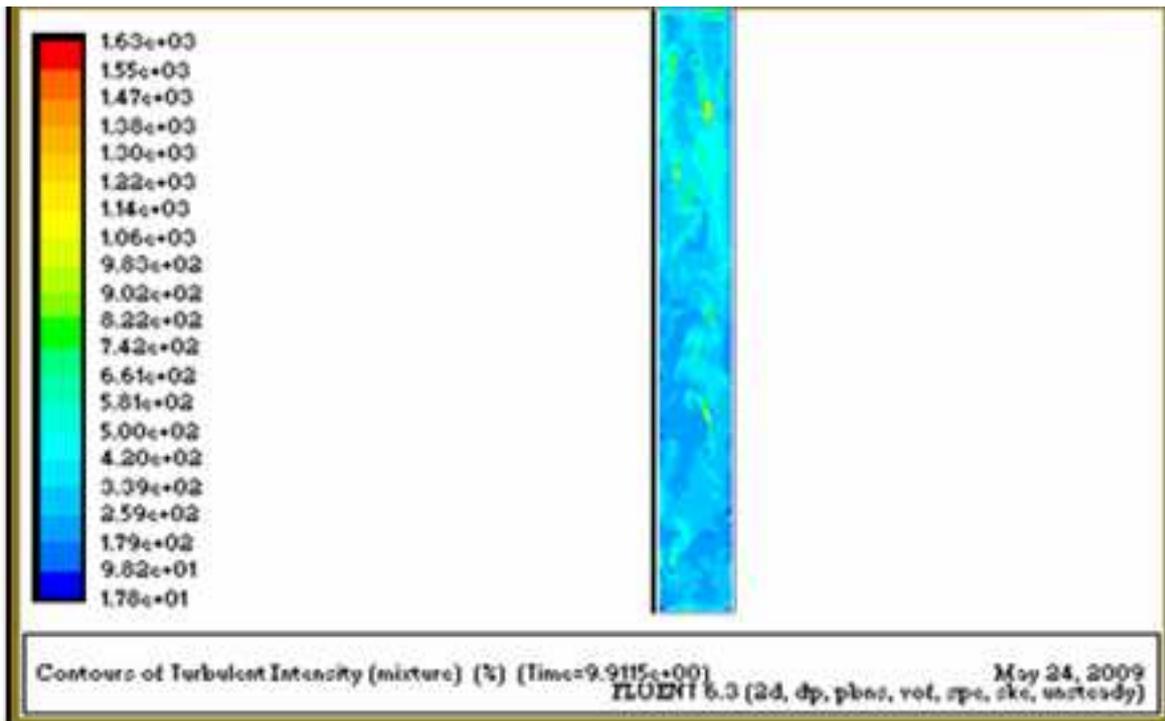


Figure.IV.13-Représentation des contours des intensités de turbulence dans la colonne.

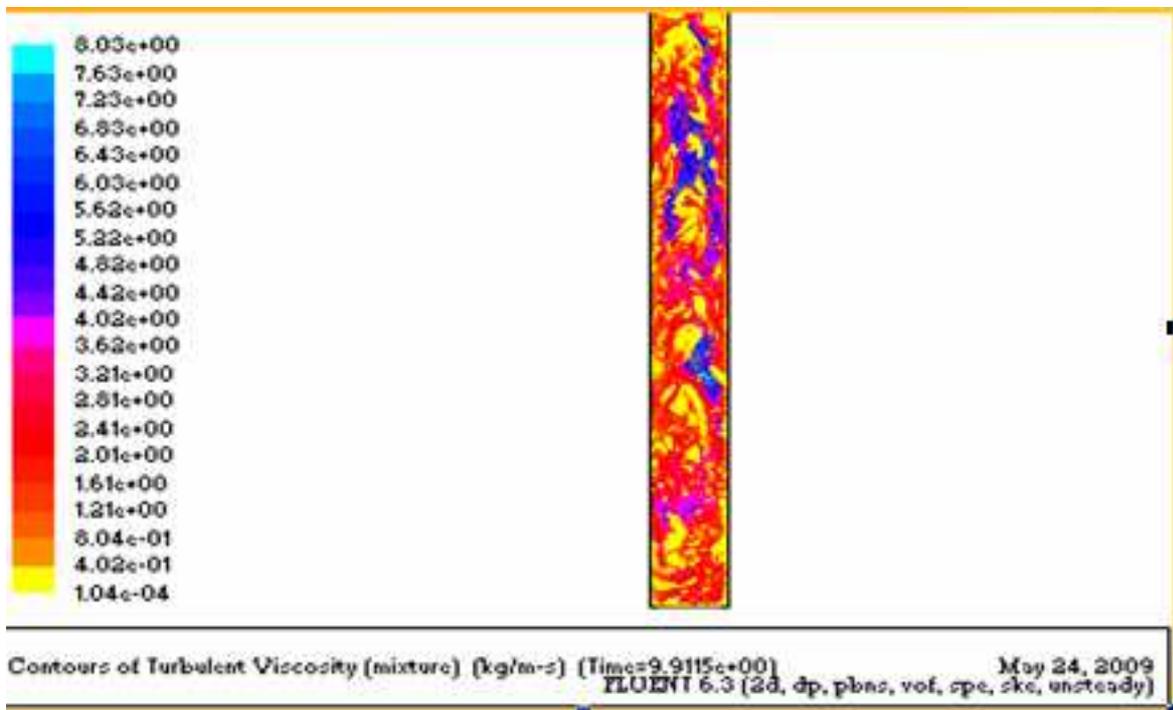


Figure IV.14 - Représentation des contours de la viscosité turbulente dans la colonne.

IV.7.Profil radial

Les figures (IV.15 ; IV.16 ; IV.17 ; IV.18 ;) représentent les profils radiaux de la rétention gazeuse sur une section droite de la colonne correspondant à un plan situé à 0.35 m du distributeur de gaz.

La loi de puissance à été ajusté sur les résultats de simulation en estimant les paramètres de rétention gazeuse moyenne et de n.

$$\varepsilon_g(r) = \varepsilon_{g\text{moy}} \left(\frac{n+2}{n+2-2c} \right) \cdot \left(1 - c \left(\frac{r}{R} \right)^n \right) \quad \text{IV.1}$$

Ug(m/s)	n
0.06	3.9
0.09	2.7
0.11	2.4
0.13	2.1
0.15	2

Tableau IV-2 : Valeurs du paramètre n ; ajustées base de profils radiaux de rétention gazeuse pour différentes valeurs de vitesse superficielle du gaz.

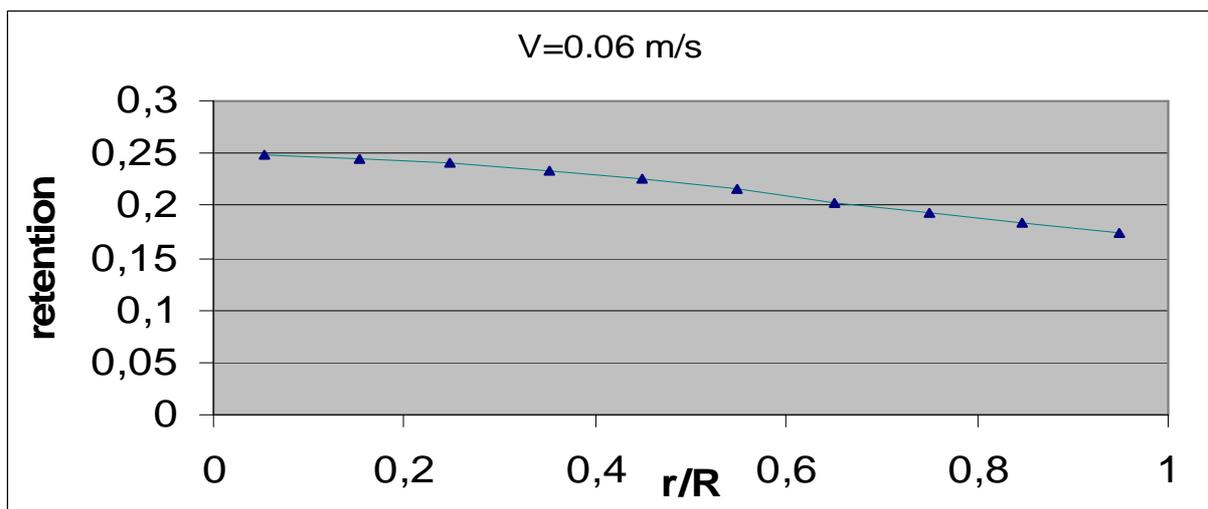


Figure IV.15:profil radial de la rétention gazeuse avec v=0.06 m/s

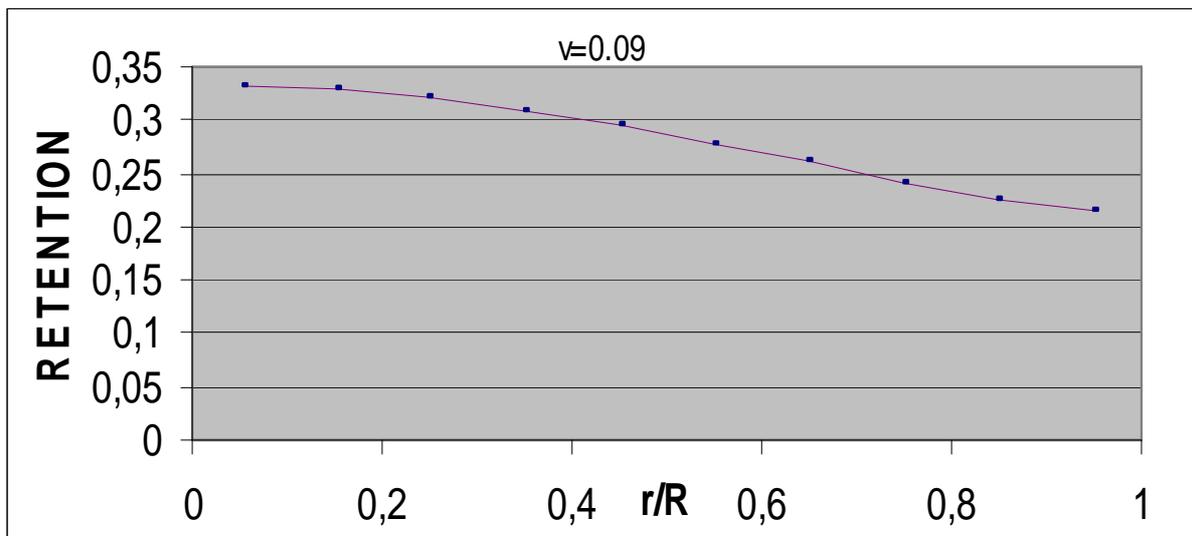


Figure IV.16:profil radial de la rétention gazeuse avec $v=0.09$ m/s

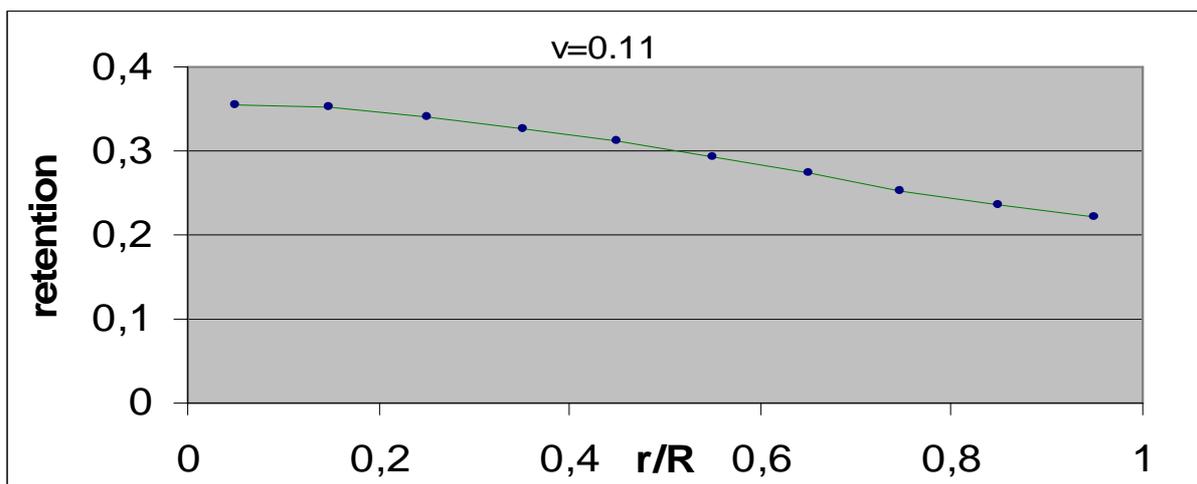


Figure IV.17:profil radial de la rétention gazeuse avec $v=0.11$ m/s

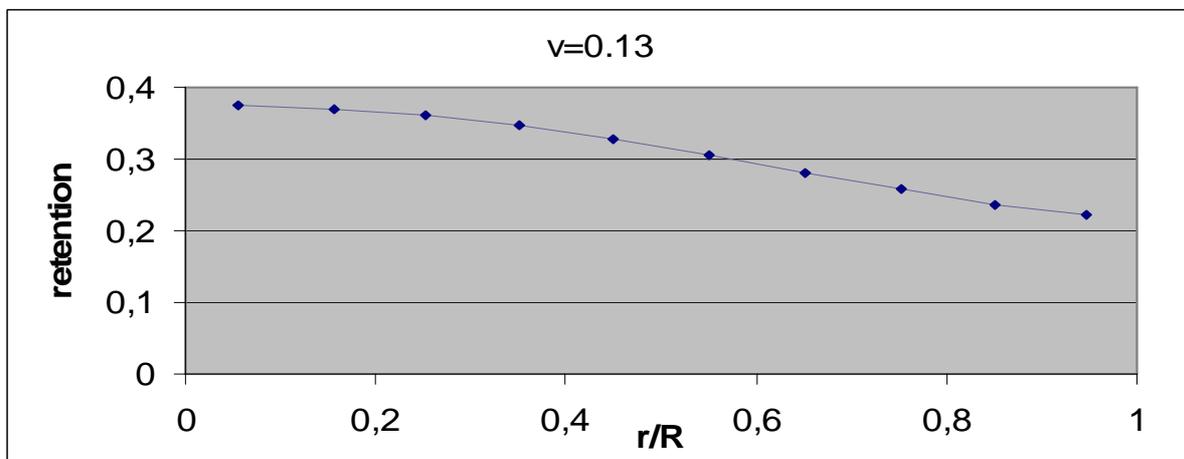


Figure IV.18:profil radial de la rétention gazeuse avec $v=0.13$ m/s

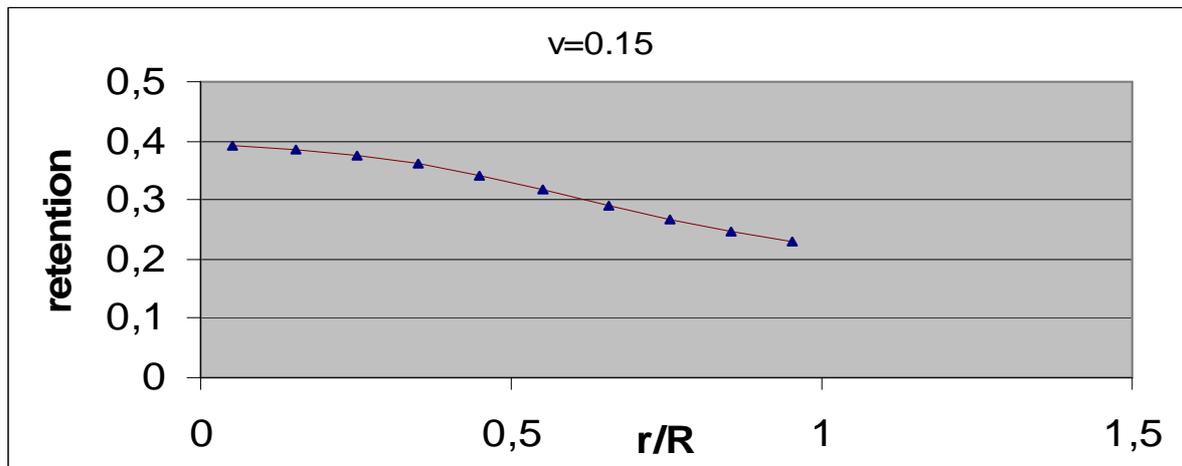


Figure IV.19:profil radial de la rétention gazeuse avec $v=0.15$ m/s

IV.8. Influence de la vitesse du gaz sur la coalescence des bulles

On présente sur la figure IV.20 la variation du diamètre des bulles selon les vitesses d'injection du gaz dans la colonne, il existe une grande différence entre les bulles d'air dans des vitesses d'injection supérieures à 0,06 m/s ; ce phénomène est dû à la coalescence des bulles.

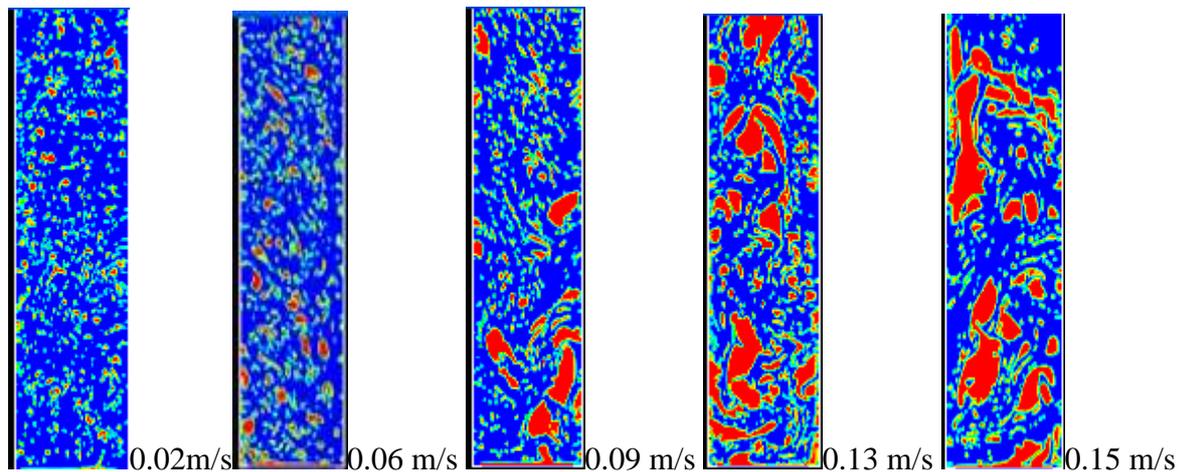


Figure IV.20 coalescence des bulles dans la colonne

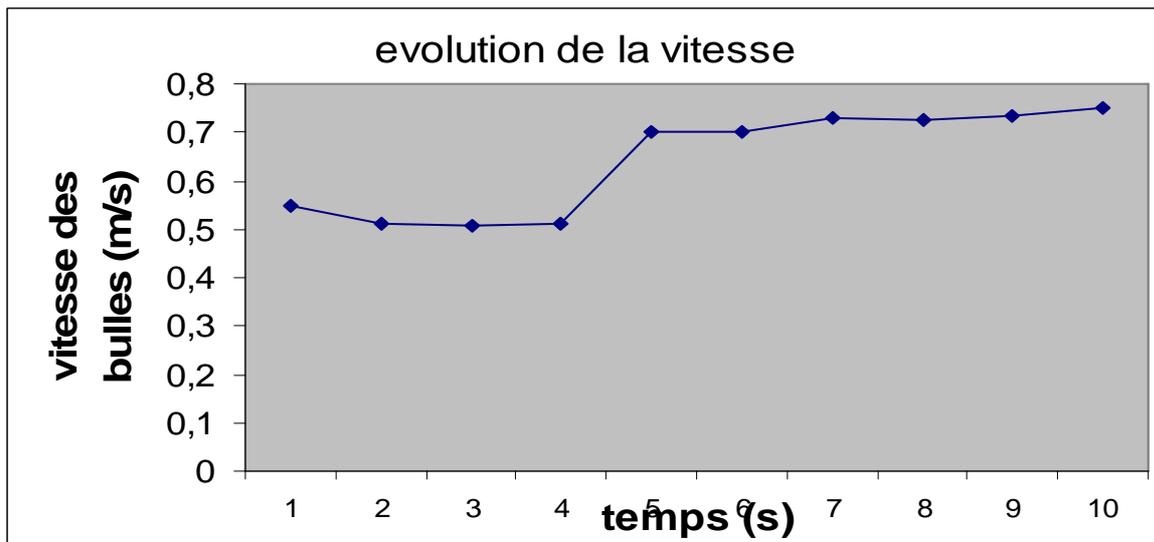


Figure IV.21 évolution de la vitesse des bulles dans la colonne

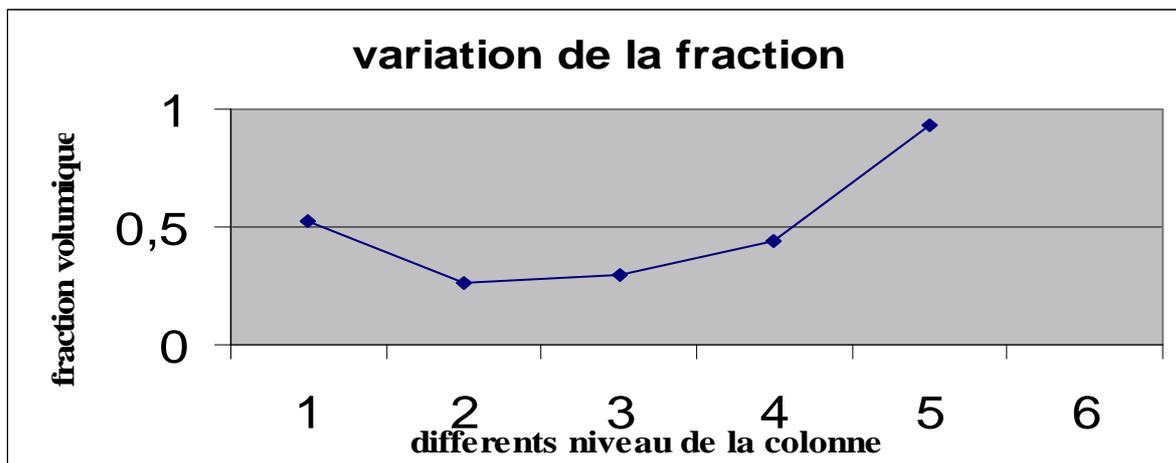


Figure IV.22 variation de la fraction volumique d'air dans différents niveaux de la colonne

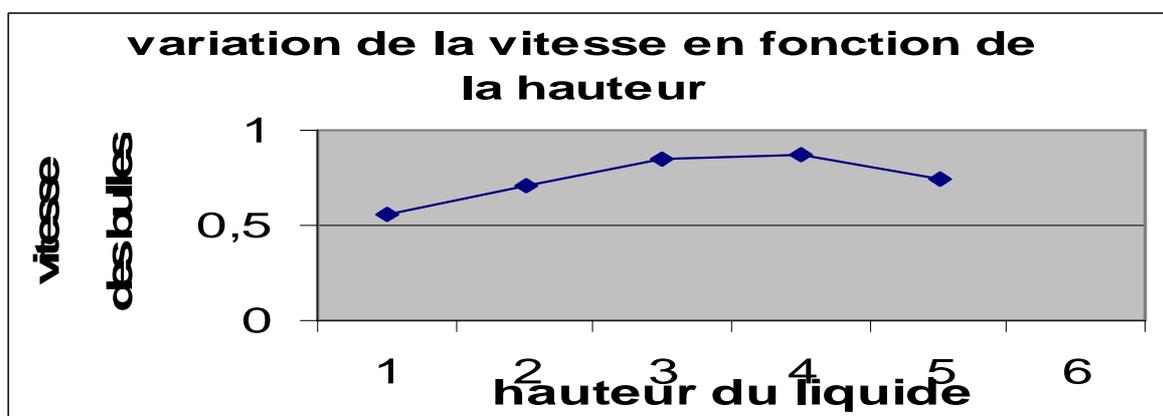


Figure IV.23 variation de la vitesse des bulles en fonction de la hauteur du liquide

CONCLUSION

Conclusion générale

Ce travail de simulation des écoulements dans les réacteurs à bulles a été dicté par le besoin d'une part, de comprendre les mécanismes qui régissent ces écoulements, et d'autre part, la possession de données expérimentales qui serviront de référence aux résultats du calcul numérique. Sans oublier notre but principal qui est la maîtrise du puissant code de calcul Fluent

Lors de cette étude, nous avons mis en évidence la capacité du logiciel Fluent à modéliser un écoulement turbulent biphasique dans une colonne à bulles. La confrontation des profils de vitesses moyennes simulés avec les résultats expérimentaux nous a permis de valider le modèle numérique.

Une étude de sensibilité par rapport au maillage nous a révélée qu'une densité moyenne (102704 mailles) est suffisante pour représenter correctement les profils de vitesse. L'emploi des mailles plus fines, si elles n'ont qu'une influence minimale sur les résultats, augmente en revanche considérablement le temps de calcul.

De même, l'application des modèles de turbulence de second ordre dans ce type d'écoulement s'avère inutile. En effet, le modèle standard de turbulence isotrope $k - \epsilon$ donne des résultats très satisfaisants et la différence entre les simulations des deux modèles est négligeable.

Enfin, nous dirons que ce travail nous a permis d'initier, surtout pour les écoulements biphasique, un code de calcul plus qu'utile et d'entrevoir les immenses possibilités qu'il offre aux ingénieurs et aux industriels pour faire des recherches à moindres coûts.