

N° D'ordre : 13/2012-M/GP

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**  
**Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene**  
*Faculté de Génie Mécanique et Génie Des Procédés*



**MEMOIRE**

**Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER**

**EN : GÉNIE DES PROCÉDÉS**

**Spécialité : Génie des Procédés Industriels**

**Par : MENDIL Rachida**

**Sujet**

**Modélisation hydrodynamique des réacteurs gaz/liquide**

**Soutenu publiquement le 27//11/2012 devant le jury composé de :**

<b>Mme F. BENTAHAR</b>	<b>Professeur à l'USTHB</b>	<b>Présidente</b>
<b>Mme A. BENSMAILI</b>	<b>Professeur à l'USTHB</b>	<b>Directrice de mémoire</b>
<b>Mme M. CHABANI</b>	<b>Maitre de conférences /A à l'USTHB</b>	<b>Examinatrice</b>
<b>Mr M. BELMEDANI</b>	<b>Maitre de conférences /A à l'USTHB</b>	<b>Examineur</b>
<b>Mr A.MOUHEB</b>	<b>Maitre de conférences /A à l'USTHB</b>	<b>Examineur</b>



## **Remerciements**

*Je remercie le bon dieu de m'avoir donné du courage afin que ce mémoire vous soit présenté aujourd'hui.*

*Le présent travail a été effectué au niveau du laboratoire du Génie de la réaction, sous l'encadrement de **M<sup>me</sup> A. BENSMAILI**, professeur à l'USTHB. Qu'elle trouve ici l'expression de ma profonde gratitude pour son soutien constant et ses précieux conseils tout au long de ce travail et qui m'a permis de faire les premiers pas au sein de son laboratoire pour la réalisation de ce projet*

*Madame **F.BENTAHAR**, professeur à l'USTHB m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du jury. Qu'elle trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance pour l'intérêt qu'elle a porté à mon travail.*

*Je suis très sensible à l'honneur que m'ont fait messieurs **A.MOUHEB**, **M.BELMADANI** et madame **M.CHABANI**, maîtres de conférence à l'USTHB, pour avoir bien voulu accepter de juger ce travail et d'avoir bien voulu faire partie du jury.*

*Que Madame **R. Rihani** enseignante à l'USTHB, soit remerciée pour les fructueuses discussions que j'ai eues à diverses occasions.*

*C'est avec une grande reconnaissance que j'adresse mes sincères remerciements aux enseignants qui ont contribué de près ou de loin à notre formation durant notre cursus à l'USTHB*

*Ma gratitude s'adresse également à tous mes amis pour leurs précieuses disponibilités et pour les années inoubliables que nous avons passées ensemble et surtout pour le temps et la patience qu'ils m'ont volontiers consacré à la réalisation de ce mémoire.*

*Enfin, tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la concrétisation de mon projet.*

## *Dédicaces*

*Avec tout mon Amour*

*A mes chers parents*

*Ainsi qu'à mes adorables frères et sœur*

*A tous mes tantes et oncles cousins et cousines*

*A tous mes amis*

*Rachida*

# SOMMAIRE

## Sommaire

### Nomenclature

Introduction générale .....	1
Chapitre I Généralités sur les réacteurs gaz-liquide	
I.1. Introduction .....	4
I.2. Classification des réacteurs gaz/liquide .....	5
I.2.1. Selon le mode de fonctionnement .....	5
I.2.2. Selon la mise en contact des phases .....	6
I.3. Différents types de contacteurs gaz/liquide .....	6
I.3.1. Domaine d'application .....	6
I.3.1.1. Traitement d'eaux usées urbaines et industrielles .....	6
I.3.1.1.a. Procédés biologiques d'épuration .....	7
I.3.1.1.b. Procédés chimiques de traitement ou de conditionnement .....	7
I.3.1.2. Production d'eaux potables et d'eaux à usages industriels .....	7
I.3.1.3. Traitement d'effluents gazeux contaminés .....	7
I.4. Caractéristiques des échangeurs gaz/liquide .....	8
I.4.1. Diamètre des inclusions : bulles ( $d_b$ ) et gouttes ( $d_g$ ) .....	8
I.4.2. Réentions de phases .....	8
I.4.3. Aire interfaciale volumique d'échange ( $a$ ) .....	8
I.5. Présentation des différents types de contacteurs gaz/liquide .....	8
I.5.1. Contacteurs dans lesquels le gaz est dispersé sous forme de bulles dans un liquide .....	8
I.5.1.1. Colonnes à bulles .....	9
I.5.1.2. Cuves agitées mécaniquement .....	11
I.5.2. Contacteurs dans lesquels le liquide est dispersé sous forme de gouttes ..	14
I.5.2.1. Colonnes à plateaux .....	14

I.5.2.2. Colonnes à garnissages .....	15
I.6. Aspects théoriques de la distribution des temps de séjour .....	15
I.6.1. Distributions des temps de séjour DTS .....	15
I.6.2. Test de traçage .....	16
I.6.2.1. Traceurs .....	16
I.6.2.2. Stimulations .....	17
I.6.3. Modélisation des écoulements .....	19
I.6.3.1. Modèle piston avec dispersion axiale .....	19
I.6.3.2. J réacteurs RCPA en série (ou en cascade).....	20
I.6.4. Diagnostic de mauvais fonctionnement .....	21
I.6.4.1. Présence de zones mortes .....	21
I.6.4.2. Présence de courts circuits .....	21
I.7. Conclusion .....	22

## Chapitre II Synthèse bibliographique

II.1. Introduction .....	23
II.2. Etude Hydrodynamique des réacteurs gaz/liquide .....	23
II.3. Etude du transfert de matière des réacteurs gaz/liquide .....	32
II.4. Modélisation des réacteurs gaz/liquide .....	34
II.5. Conclusion.....	37

## Chapitre III Modélisation hydrodynamique

III.1. Introduction .....	38
III.2. Modélisation de l'hydrodynamique globale du réacteur canal .....	38
III.2.1. Définition des critères de l'étude .....	40
III.2.1.1. Distribution des temps de séjour .....	40

III.2.1.2. Temps caractéristiques et coefficients d'étalement .....	40
III.2.2. Présentation et discussion des résultats.....	41
III.2.2.1. Analyse des résultats .....	41
III.2.3. Modélisation systémique pour les DTS .....	43
III.2.3.1. Principe de la modélisation des écoulements .....	43
III.2.3.2. Choix du modèle .....	44
III.2.3.3. Diagnostic de mauvais fonctionnement .....	48
III.2.3.4. Interprétation des résultats de modélisation.....	49
III.2.4. Techniques de simulation des DTS par MFN.....	49
III.2.4.1. Système monophasique (eau) .....	50
III.2.4.1.a. Formulation mathématique .....	51
III.2.4.1.b. Présentation des conditions de simulation .....	52
III.2.4.2. Système diphasique (air-eau) .....	53
III.2.4.2.a. Formulation mathématique .....	53
III.2.4.3. Comparaison entre système monophasique et diphasique .....	53
III.2.5. Conclusion .....	55
III.3. Etude de l'hydrodynamique globale du réacteur torique .....	56
III.3.1. Modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale .....	58
III.3.2. Application du modèle PDA et recirculation totale .....	59
III.3.4. Conclusion .....	62

III.4. Modélisation hydrodynamique d'une colonne à bulles .....	63
III.4.1. Formulation mathématique du problème .....	64
III.4.2. Présentation des conditions de simulation .....	65
III.4.3. Résultats de la modélisation.....	66
III.4.3.1. Evolution de $\epsilon_g$ fonction de la vitesse du gaz .....	67
III.4.3.2. Influence de la vitesse superficielle du liquide .....	69
III.4.3.3. Influence des propriétés physiques du liquide .....	71
III.4.3.4. Influence de la température .....	72
III.4.3.5. Influence de la position de l'orifice .....	73
III.4.4. Structure horizontale de la rétention gazeuse .....	74
III.4.5. Structure horizontale de la vitesse verticale du liquide .....	75
III.4.6. Conclusion .....	77
III.5. Modélisation hydrodynamique d'un réacteur airlift rectangulaire à recirculation interne .....	78
III.5.1. Formulation mathématique du problème .....	79
III.5.2. Présentation des conditions de simulation .....	80
III.5.3. Profil radial de la vitesse du liquide et de la rétention gazeuse .....	80
III.5.4. Evolution de la vitesse du liquide en fonction de la vitesse du gaz.....	83
III.5.5. Influence de la vitesse du gaz sur la rétention gazeuse.....	84
III.5.6. Influence de la géométrie du réacteur airlift .....	88
III.5.7. Influence de la géométrie de la base du réacteur airlift .....	91
III.5.8. Conclusion .....	93

## Chapitre IV Modélisation du transfert de matière

IV.1. Introduction.....	95
IV.2.Aspects théoriques du transfert de matière gaz- liquide .....	96
IV.2.1. Transfert de matière dans les réacteurs gaz- liquide.....	96
IV.2.3. Absorption sans réaction chimique.....	96
IV.2.4. Absorption avec réaction chimique .....	97
IV.3.Modélisation de la colonne d'absorption.....	98
IV.3.1.Formulation mathématique du problème .....	100
IV.3.2. Présentation des conditions de simulation.....	100
IV.3.2.1. Solubilité des gaz dans le liquide.....	100
IV.3.2.2. Domaine de calcul : maillage 2D axisymétrique .....	101
IV.3.2.3. Conditions aux limites .....	101
IV.4. Résultats et discussion .....	103
IV.4.1. Analyse de la phase gazeuse et de la phase liquide .....	103
IV.4.2. Evolution de la concentration du CO <sub>2</sub> le long de l'absorbeur .....	106
IV.4.3. Détermination du coefficient de transfert de matière .....	107
IV.5. Conclusion .....	110
Conclusion générale .....	111
Références bibliographiques .....	113
Annexes	
Annexe 1 Modèle de turbulence k-epsilon .....	120
Annexe 2 Présentation des résultats de la modélisation .....	122



## NOMENCLATURE

<i>Symbole</i>	<i>Désignation (unité)</i>
$a$	aire interfaciale par unité de volume de réacteur ( $m^{-1}$ )
$A_r$	section du riser ( $m^2$ )
$A_d$	section du downcomer ( $m^2$ )
$B_0$	nombre de Bodeinstein
$C$	concentration molaire du traceur (mol/l)
$C_0$	concentration molaire du traceur lorsque la dissolution est totale, mol. l <sup>-1</sup>
$C_{A,G}$	concentration du composé A dans la phase gazeuse (mol / m <sup>3</sup> )
$C_{A,G_i}$	concentration du composé A à l'interface côté gaz (mol/m <sup>3</sup> )
$C_{A,L}$	concentration du composé A dans la phase liquide (mol/m <sup>3</sup> )
$C_{A,L_i}$	concentration du composé A à l'interface côté liquide (mol.m <sup>-3</sup> )
$C_i$	concentration de A dans la phase i (mol/m <sup>3</sup> )
$C_\mu$	constantes du modèle k-epsilon
$d_t$	diamètre intérieur du réacteur torique (mm)
$d_b$	diamètre des bulles (mm)
$d_g$	diamètre des gouttes (mm)
$D$	coefficient de diffusion ( $m^2/s$ )
$D_{ax}$	coefficient de dispersion axiale ( $m^2/s$ )
$D_{agit}$	diamètre des agitateurs (m)
delta y	fraction molaire du CO <sub>2</sub> absorbée.
dZ	hauteur d'un élément de la colonne (m).
E(t)	distribution des temps de séjour
E	facteur d'accélération
F(t)	fonction cumulative de distribution des temps de séjour
$F_I$	nombre d'aération

$G_S$	débit molaire de l'air par unité de section droite de la colonne (mole d'air/m <sup>2</sup> .s)
$g$	accélération de la pesenteur (m/s <sup>2</sup> )
$H_{Oy}$	hauteur d'une unité de transfert (m)
$He$	constante de Henry (atm)
$J$	nombre de réacteurs RCPA en série
$k^*$	constante de la vitesse de la réaction(s <sup>-1</sup> )
$k$	énergie cinétique turbulente (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )
$kg$	coefficient partiel de transfert de matière côté gaz (mol/m <sup>2</sup> .s) défini par rapport aux fractions molaires
$k_L$	coefficient partiel de transfert de matière côté liquide (mol/m <sup>2</sup> .s) défini par rapport aux fractions molaires
$K_G$	coefficient global de transfert de matière côté gaz (mol/ m <sup>2</sup> .s) défini par rapport aux fractions molaires
$K_L$	coefficient global de transfert de matière côté liquide (mol/ m <sup>2</sup> .s) défini par rapport aux fractions molaires
$k_{La}$	coefficient volumétrique de transfert de matière côté liquide (mol/m <sup>3</sup> .s)
$L_t$	longueur du réacteur torique (m)
$L_S$	débit molaire de l'eau par unité de section droite de la colonne (mole d'eau/m <sup>2</sup> .s)
$N$	vitesse de rotation des agitateurs (tr.s <sup>-1</sup> )
$N_{qc}$	nombre de circulation
$N_P$	nombre de puissance
$N_A$	flux global d'absorption par unité de volume d'absorbeur ; (mol/ m <sup>3</sup> .s)
$N_{Oy}$	nombre d'unité de transfert
$P_{agit}$	puissance fournie aux agitateurs (kWh)

---

$P_e$	nombre de Peclet
$p$	pression en Pa ;
$Q$	débit volumique du fluide ( $m^3/s$ )
$R_i$	vitesse d'absorption ( $mol/m^3 \cdot s$ )
$R_t$	rayon de courbure du réacteur torique (mm)
$Re$	nombre de Reynolds
$r_A$	vitesse de consommation de A ( $mole/m^3 \cdot s$ )
$S$	surface d'échange ( $m^2$ )
$S^*$	coefficient d'étalement
$t$	temps (s)
$t_s$	temps de séjour moyen (s)
$t_c$	temps de circulation (s)
$t_{0.5}$	temps médian (s)
$t_{0.9}$	temps nécessaire à la récupération de 90% du traceur (s)
$t_{0.1}$	temps nécessaire à la récupération de 10% du traceur (s)
$t_m$	temps de mélange (s)
$T$	température ( $^{\circ}C$ )
$u_l$	vitesse du liquide (m/s)
$U$	vitesse d'écoulement du fluide dans le réacteur torique (m/s)
$U_c$	vitesse moyenne de circulation (m/s)
$V_G$	volume occupé par la phase gazeuse ( $m^3$ )
$V_T$	volume total du contacteur ( $m^3$ )
$V_L$	volume occupé par la phase liquide ( $m^3$ )
$V_A$	volume accessible au fluide ( $m^3$ )
$V_m$	volume mort ( $m^3$ )
$x_{A1}$	fraction molaire de A dans le liquide à la sortie de l'absorbeur (bas de colonne)

$x_{A2}$	fraction molaire de A dans le liquide à l'entrée de l'absorbeur (haut de colonne)
$y_A^*$	fraction molaire de A dans le gaz qui est en équilibre avec la phase liquide
$y_{A1}$	fraction molaire de A dans le gaz à l'entrée de l'absorbeur (bas de colonne)
$y_{A2}$	fraction molaire de A dans le gaz à la sortie de l'absorbeur (haut de colonne)
Z	hauteur de la colonne (m)

### Lettres grecques

$\varepsilon_g$	rétention gazeuse
$\varepsilon_L$	rétention liquide
$\mu$	moyenne de la distribution des temps de séjour
$\sigma^2$	variance de la distribution des temps de séjour
$\tau$	temps de passage (s)
$\theta$	temps adimensionnel, $t/t_c$
$\rho_l$	masse volumique du liquide ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )
$\eta$	viscosité dynamique du liquide ( $\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$ )
$\eta_T$	viscosité turbulente du fluide ( $\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$ )
$\varepsilon$	taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ( $\text{m}^2/\text{s}^3$ )
$\sigma_k$	constantes du modèle k-epsilon
$\Phi_1$	fraction volumique du liquide ( $\text{m}^3/\text{m}^3$ )
$\varphi$	flux spécifique moyen d'absorption par unité d'aire interfaciale ( $\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$ )

### Abréviations

PDA	piston dispersion axiale
RCPA	réacteur continu parfaitement agité
DTS	distribution des temps de séjour
MFN	mécanique des fluides numériques

## LISTE DES FIGURES

Figure I.1. Opération discontinue .....	5
Figure I.2. Opération continue .....	6
Figure I.3. Types de distributeurs de gaz .....	9
Figure I.4. Colonnes à bulles .....	10
Figure I.5. Différents types de réacteurs airlift .....	10
Figure I.6. Réacteur gaz-liquide de type cuve agitée .....	11
Figure I.7. Turbine de Rushton .....	12
Figure I.8. Hélice .....	12
Figure I.9. Ancre .....	13
Figure I.10. Réacteur gaz-liquide du type colonne à plateaux .....	14
Figure I.11. Réacteurs gaz-liquide du type colonne à garnissage .....	15
Figure I.12. Distribution des temps de séjour .....	16
Figure I.13. Parcours d'une molécule dans un réacteur ouvert .....	17
Figure I.14. Réponse à une injection échelon .....	18
Figure I.15. Réponse à une injection impulsion .....	18
Figure I.16. Présence de zones mortes dans un réacteur .....	21
Figure I.17. Présence de zones mortes dans un réacteur .....	22
Figure III.1. Schéma simplifié du réacteur canal .....	39
Figure III.2. Courbe de DTS expérimentale .....	40
Figure III.3. Courbe cumulée de la DTS pour un débit de liquide de $1280\text{m}^3/\text{h}$ .....	41
Figure III.4. Courbes expérimentales de DTS obtenues pour trois débits de liquide .....	42

Figure III.5. Evolution des temps des séjour en fonction du débit de liquide .....	42
Figure III.6. Evolution de $S^*$ en fonction de débit de liquide .....	43
Figure III.7. DTS pour différents réacteurs ou association de réacteurs .....	45
Figure III.8. Test du modèle J RCPA en série .....	47
Figure III 9. Test du modèle piston avec dispersion axiale .....	48
Figure III.10. Evolution du nombre de pécllet en fonction du débit de liquide.....	49
Figure III.11. Maillage 3D du réacteur canal.....	52
Figure III.12. Courbe de DTS obtenue pour un système monophasique (eau).....	54
Figure.III.13. Courbe de DTS obtenue pour un système diphasique (air-eau). .....	54
Figure III.14. Schéma du dispositif expérimental .....	57
Figure III.15.Exemple de courbe de la concentration du traceur en fonction du temps dans une géométrie toroïdale .....	58
Figure III.16. Modélisation de la réponse du traceur pour $N = 6.67 \text{ s}^{-1}$ : cas du système monophasique .....	60
Figure III.17. Modélisation de la réponse du traceur pour $N = 6.67 \text{ s}^{-1}$ , $FI = 0,0046$ : cas du système air-eau.....	60
Figure III.18. Modélisation de la réponse du traceur pour $N = 8.3 \text{ s}^{-1}$ : cas du système monophasique .....	61
Figure III.19. Modélisation de la réponse du traceur pour $N = 8.3 \text{ s}^{-1}$ , $FI = 0,0018$ : air- eau. ....	61
Figure III.20. Représentation 2D et 3D de la colonne à bulles .....	64
Figure III.21. Maillage de la colonne à bulles. ....	65
Figure III.22. Champs de la fraction volumique du gaz à différents temps .....	67
Figure III.23. Champs de la rétention gazeuse pour différentes vitesses de gaz. ....	68

Figure III.24. Evolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz. ....	68
Figure III.25. Evolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz. ....	69
Figure III.26. Champs de la rétention gazeuse pour différentes vitesses de liquide. .	70
Figure III.27. Evolution de la rétention gazeuse locale en fonction de la vitesse du gaz pour différents liquides .....	71
Figure III.28. Influence de la température sur la rétention gazeuse.....	72
Figure III.29. Evolution de la rétention gazeuse : orifice situé au milieu (à gauche), situé à une distance de 4cm de la paroi (à droite). ....	73
Figure III.30. Profil de la rétention gazeuse .....	74
Figure III.31. Profil de la rétention gazeuse pour différentes vitesses de gaz. ....	75
Figure III.32. Champs de la vitesse verticale du liquide à différentes vitesses de gaz : 0,0024m/s (à gauche) et 0,012m/s (à droite). ....	75
Figure III.33. Profil de la vitesse verticale du liquide .....	76
Figure III.34. Profil de la vitesse verticale du liquide pour différentes vitesses de gaz.	77
Figure III.35. Montage expérimental du réacteur airlift .....	79
Figure III.36. Maillage du réacteur airlift .....	80
Figure III.37. Champs de la fraction volumique du gaz .....	81
Figure III.38. Champs de la vitesse du liquide .....	81
Figure III.39. Profil radial de la rétention gazeuse à différentes vitesses du gaz .....	82
Figure III.40. Profil radial de la vitesse axiale du liquide .....	82
Figure III.41. Evolution de la vitesse du liquide en fonction de la vitesse du gaz .....	83
Figure III.42. Evolution de la rétention gazeuse dans le riser en fonction de la vitesse du gaz .....	84
Figure III.43. Comparaison entre expérience et modélisation .....	84

Figure III.44. Evolution de la rétention gazeuse dans le downcomer en fonction de la vitesse du gaz.....	85
Figure III.45. Evolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz....	86
Figure III.46. Relation entre $\xi_d$ en fonction de $\xi_r$ .....	86
Figure III.47. Evolution de la rétention globale en fonction de la vitesse du gaz .....	87
Figure III.48. Présentation de la géométrie des deux réacteurs airlifts.....	88
Figure III.49. Maillage du réacteur airlift avec $A_r/A_d = 0,5$ .....	89
Figure III.50. Profil radial de la vitesse du liquide pour les deux configurations.....	89
Figure III.51. Variation de la rétention gazeuse dans le riser en fonction de la vitesse du gaz.....	90
Figure III.52. Maillage du réacteur airlift (configuration II) .....	91
Figure III.53. Champs de la rétention gazeuse et de la vitesse du liquide (config II) .	92
Figure III.54. Profil radial de la rétention gazeuse à différentes vitesses de gaz.....	93
Figure III.55. Profil radial de la vitesse du liquide à différentes vitesses de gaz .....	93
Figure IV.1. Schéma de la colonne d'absorption.....	99
Figure IV.2. Maillage 2D axisymétrique de la colonne d'absorption.....	101
Figure IV.3. Présentation des conditions aux limites .....	102
Figure IV.4. Evolution de la fraction molaire du $CO_2$ dans le gaz le long de l'absorbeur à différents débits de liquide .....	103
Figure IV.5. Evolution de la fraction molaire du $CO_2$ dans le liquide le long de l'absorbeur à différents débits de liquide .....	104
Figure IV.6. Evolution de fraction du $CO_2$ absorbée en fonction du débit de liquide.....	105
Figure VI.7. Evolution de la concentration du $CO_2$ le long de l'absorbeur pour un débit de liquide de 0,284L/min dans le gaz (à gauche) et dans le liquide (à droite) .	106

Figure VI. 8. Variation de la concentration du CO <sub>2</sub> en fonction de la hauteur de la colonne.....	106
Figure IV.9. Evolution du coefficient du transfert de matière en fonction du débit de liquide.....	110

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau II.1. Corrélations relatives à l'hydrodynamique dans les réacteurs G/L.....	31
Tableau III.1. Principes de la modélisation des réacteurs réels .....	44
Tableau III.2. Paramètres des deux modèles PDA et J RCPA en série .....	47
Tableau III.3. Comparaison entre le temps de séjour moyen et le temps de passage...	48
Tableau III.4. comparaison entre les deux approches de modélisation : systémique et MFN .....	55
Tableau III.5. caractéristiques géométriques du milli réacteur torique.....	57
Tableau III.6. Valeurs de Bo obtenues pour différentes valeurs de vitesse d'agitation et nombre d'aération .....	62
Tableau III.7. Propriétés physiques des différents liquides à 20°C .....	71
Tableau III.8. Propriétés physiques de l'eau à différentes températures .....	72
Tableau III.9. Corrélations relatives à l'hydrodynamique dans un réacteur airlift rectangulaire.....	87
Tableau IV.1. valeurs des diffusivités et de la constante d'Henry.....	101
Tableau IV.2. Comparaison entre delta y simulées et expérimentales pour différents débits de liquide .....	104
Tableau IV.3. Evolution du coefficient de transfert de matière en fonction du débit de liquide.....	110
Constantes utilisées dans le modèle k-ε (annexe 1).....	122

# Introduction générale

## ***Introduction générale***

Les réacteurs gaz/liquide sont utilisés dans plusieurs domaines industriels (génie chimique, génie des procédés, génie énergétique, génie de l'environnement, etc...). Ces réacteurs sont souvent conçus pour mettre en contact les phases et pour assurer des phénomènes de transfert ou des transformations chimiques. L'ensemble des questions en relation avec le caractère diphasique des systèmes gaz-liquide recouvre des enjeux majeurs au plan des applications. Il suscite au plan scientifique, une forte activité de recherche pour comprendre et modéliser ces écoulements complexes.

Comme en génie chimique et en génie des procédés, les méthodes de calcul des systèmes multiphasiques se basent le plus souvent sur des approches globales. Ces approches reposent sur des bilans de matières, de quantité de mouvement et d'énergie.

La modélisation et la simulation des systèmes gaz-liquide industriels s'appuyait, donc, jusqu'à il y a une dizaine d'années, presque exclusivement sur cette approche globale qui simplifiait d'une manière drastique les équations qui décrivent le mouvement des fluides. Ces équations sont des bilans entrée-sortie ou des équations différentielles ordinaires qui traduisent les bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. La théorie de la dispersion axiale et le concept de la distribution des temps de séjour (DTS) ont, ainsi, été utilisés dès les années cinquante pour rendre compte dans les modèles des caractéristiques de l'écoulement dans les réacteurs. Cependant et malgré leur apport incontestable dans le développement des procédés et dans la maîtrise des techniques, les modèles hydrodynamiques globaux associés aux modèles cinétiques de transfert restent insuffisants pour représenter la physique complexe qui gouverne les transferts dans les écoulements multiphasiques.

Le progrès important réalisé au cours des dernières décennies dans le domaine de la mécanique des fluides numérique permet aujourd'hui une approche plus phénoménologique des problèmes de transferts dans les systèmes de fluides multiphasiques dispersés. Des progrès importants ont d'abord été réalisés dans la modélisation des écoulements turbulents monophasiques. Les modèles industriels disponibles aujourd'hui permettent de traiter des classes de problèmes d'écoulements turbulents variées (complexité géométrique, en présence d'écoulements secondaires, etc...).

La mécanique des fluides numérique (computational fluid dynamics ) est de plus en plus utilisée pour répondre à ces questions. 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 joue 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.

Face au progrès de la science et aux exigences des nouvelles technologies de l'énergie qui sont devenus de plus en plus pointus, il s'est avéré nécessaire de se tourner vers d'autres types de contacteurs gaz-liquides. Utilisés depuis plusieurs années avec succès, et qui ont suscité l'intérêt de plusieurs chercheurs dans divers domaines : chimie, biochimie, pétrochimie, agroalimentaire, traitement des eaux,...etc. Différentes configurations sont disponibles, on cite à titre d'exemple : les réacteurs mécaniquement agités et les réacteurs à boucle, en particulier les réacteurs toriques.

En revanche, on note aussi un intérêt croissant pour le développement des dispositifs polyphasiques sans système d'agitation mécanique. Les coûts opératoires élevés, dus à l'énergie dissipée dans les réacteurs mécaniquement agités, ont conduit à la conception et au développement de nouveaux types de réacteurs polyphasiques permettant l'amélioration du transfert d'oxygène dans un faible volume avec un degré de mélange élevé conjugué à une construction simple sans agitation mécanique. Les réacteurs de types pneumatique et à base de venturi répondent exactement à ces critères. Les réacteurs pneumatiques traditionnellement utilisés sont les colonnes à bulles qui permettent de mettre en contact une phase gazeuse sous forme de bulles avec une phase liquide continue.

Le présent travail aborde dans le premier chapitre des généralités sur les réacteurs gaz/liquide. Le deuxième chapitre concerne une synthèse bibliographique des principaux travaux de la littérature concernant les caractéristiques hydrodynamiques, de mélange et de transfert de matière gaz-liquide. Le troisième chapitre de ce mémoire a pour objectif d'étudier sur le plan théorique l'hydrodynamique de quatre types de réacteurs gaz-liquide, à savoir: réacteur canal, réacteur torique, colonne à bulles et réacteur airlift rectangulaire à recirculation interne.

En ce qui concerne le réacteur canal, deux approches de modélisation ont été appliquées : une approche systémique et une approche mécanique des fluides numériques. Ces deux approches ont été ensuite comparées.

L'approche systémique a été appliquée afin de modéliser d'une façon simple le processus dynamique de la dispersion d'un traceur dans un milli réacteur torique en présence et en absence du gaz.

L'étude des différents paramètres influençant sur la rétention gazeuse d'une colonne à bulle a été menée. Une étude de l'influence du rapport des sections riser/downcomer sur l'hydrodynamique du réacteur airlift a été étudiée. nous présenterons dans le dernier chapitre la caractérisation du point de vue transfert de matière dans une colonne d'absorption du dioxyde de carbone en déterminant les résultats concernant le coefficient volumétrique de transfert de masse côté gaz ainsi que l'influence du débit de liquide sur ce dernier

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

# Chapitre I

## Généralités sur les réacteurs gaz/liquide

## I.1. Introduction

Les réacteurs sont des appareils permettant de réaliser une réaction chimique, c'est-à-dire la transformation de produits de caractéristiques données en d'autres produits de caractéristiques et propriétés différentes. Il est à la fois le siège de phénomènes chimiques et de phénomènes physiques ; ces derniers se divisent en deux catégories : les phénomènes physiques à dominante hydrodynamique (écoulements monophasiques ou polyphasiques, création et suppression d'interface entre phases, etc.) et les phénomènes physiques à dominante cinétique relevant de la science des transferts, soit à l'intérieur d'une phase (homogénéisation des concentrations et des températures), soit entre phases (dissolution d'un gaz dans un liquide).

Son fonctionnement (conversion, distribution des produits) conditionne en grande partie la nature des installations de préparation de la charge et de séparation des produits. Un gain en conversion ou en sélectivité du réacteur peut conduire à supprimer une colonne à distiller en aval. La conception et l'optimisation du réacteur doivent donc faire l'objet d'une étude attentive. En ce sens, on peut dire que le réacteur est véritablement le *cœur du procédé*, qui requiert toute l'attention de l'ingénieur.

Les appareillages dont lesquels réagissent une phase gazeuse et une phase liquide, ont depuis longtemps de larges domaines d'applications : chimie, biochimie, raffinage, pétrochimie, métallurgie, agro-alimentaire, pharmacie, ... [Danckwerts, 1970]. De formes et de tailles très variées, ils diffèrent aussi par les dispositifs internes chargés de favoriser le contact entre les phases : supports physiques plus ou moins complexes de l'interface gaz/liquide, éléments statiques ou mobiles.

L'application de la mécanique des fluides numérique permet d'obtenir des informations sur le comportement hydrodynamique des réacteurs gaz/liquide [Kumar et al., 1995 ; Trmbose, 1996 ; Lubbert et Lapin, 1996 ; Lance et al., 1996 ; Cocks et al., 1997, entre autres] mais les phénomènes qui contrôlent les interfaces sont encore imparfaitement connus et mal représentés. Les méthodes globales restent donc des outils indispensables pour le dimensionnement de ces réacteurs.

Ces appareils sont chargés d'assurer le transfert de masse et la réaction chimique entre deux phases fluides (liquide et gaz). Leur efficacité est donc liée à la valeur de certaines grandeurs hydrodynamiques caractéristiques, comme l'aire interfaciale et le taux de rétention des phases.

## I.2. Classification des réacteurs gaz/liquide

Parmi la grande variété de contacteurs gaz/liquide, nous examinerons plus particulièrement ceux qui sont les plus utilisés en les classant selon les critères suivants.

### I.2.1. Selon le mode de fonctionnement

- En discontinu

On qualifie parfois ces appareils de *systèmes fermés*, car durant le laps de temps pendant lequel la réaction se déroule il n'y a pas de flux de matière entrant ou sortant du système ; ce type d'appareil a la faveur des industriels pour les opérations jugées très délicates et les petites productions.

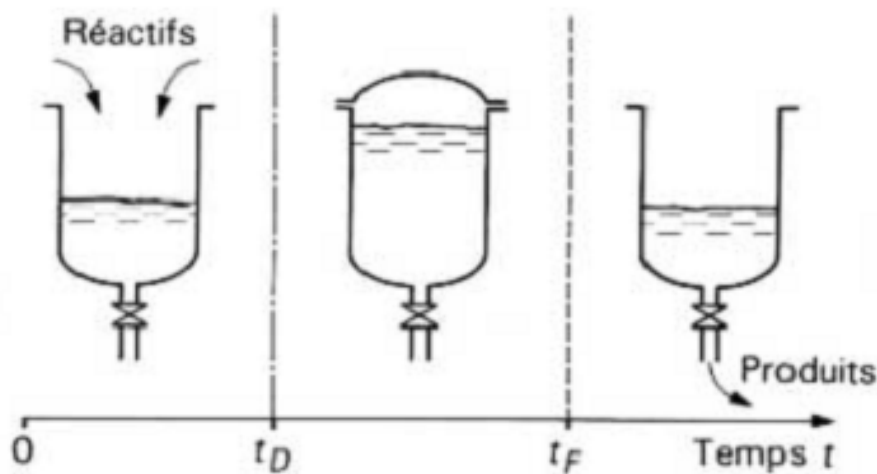


Figure I.1. Opération discontinue

avec :

$0 < t < t_D$  chargement des réactifs ;

$t_D < t < t_F$  système fermé : déroulement de la transformation chimique ;

$t > t_F$  déchargement des produits ;

$t_D$  début de la réaction ;

$t_F$  fin de la réaction.

- En continu

Les appareils fonctionnant en continu, qualifiés de *systèmes ouverts*, sont dotés d'une ou plusieurs entrées pour introduire les réactifs, et d'une ou plusieurs sorties par lesquelles les produits de la transformation sont évacués.

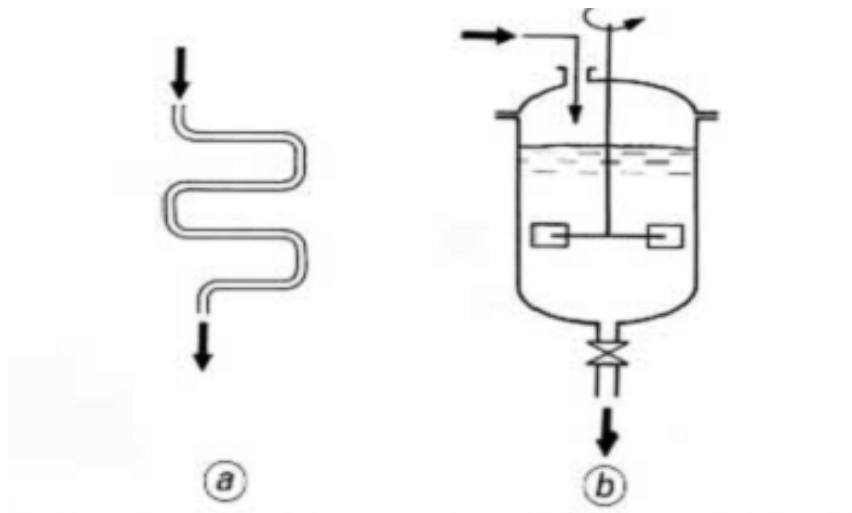


Figure I.2. Opération continue

Ainsi, il est possible de caractériser les deux modes d'opération définis ci-dessus par le fait que le système discontinu opère d'une manière non stationnaire, alors que le système continu est généralement conçu pour travailler en régime stationnaire.

### I.2.2. Selon la mise en contact des phases

On a le choix entre divers modes de circulation des phases : à courants parallèles, à courants croisés ou à contre courant. Si ce dernier mode est le plus utilisé, dans le cas des processus purement physiques c'est la rétention des phases (spécialement celle de la phase réactionnelle) qui constituera l'un des paramètres essentiels lors de l'étude d'un réacteur polyphasique.

## I.3. Différents types de contacteurs gaz/liquide

Différents contacteurs gaz-liquide-solide sont mis en œuvre dans le domaine du traitement des eaux et des effluents 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) dans une autre phase (liquide ou gaz).

### I.3.1. Domaine d'application

Les applications des contacteurs gaz-liquide dans le domaine du Génie des Procédés et de l'Environnement sont très variés. En effet, l'industrie chimique a de plus en plus recours à de tels contacteurs dans des procédés nécessitant le contact entre une phase liquide avec une phase gazeuse.

#### I.3.1.1. Traitement d'eaux usées urbaines et industrielles

Dans ces procédés de traitement, il s'agit, la plupart du temps, de réaliser une oxydation, soit par voie biologique, soit par voie chimique, de composés organiques ou minéraux présents dans les eaux usées.

**I.3.1.1.a. Procédés biologiques d'épuration**

- transfert d'oxygène vers le liquide pour la croissance des bactéries aérobies qui dégradent les pollutions carbonées et azotées ;
- transfert d'ozone pour réaliser la désinfection des eaux usées traitées avant leur rejet dans le milieu naturel, ou bien parvenir à l'oxydation de certaines molécules organiques permettant ensuite une meilleure biodégradation par les microorganismes présents.

**I.3.1.1.b. Procédés chimiques de traitement ou de conditionnement**

- transfert de dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) pour faciliter la précipitation de certains polluants présents dans l'eau ;
- transfert de dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) pour rééquilibrer le pH d'effluents aqueux.

**I.3.1.2. Production d'eaux potables et d'eaux à usages industriels**

En fonction de la qualité d'eau d'origine et de celle souhaitée, plusieurs opérations mettant en jeu un gaz et un liquide se rencontrent dans les filières de traitement ou de conditionnement des eaux :

- transfert de dioxyde de carbone comme moyen de rééquilibrage du pH d'une eau ;
- transfert d'ozone pour réaliser la désinfection des eaux (virus, bactéries, ) ;
- introduction de chlore gazeux et de dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ), pour préparer des solutions concentrées ;
- désorption par de l'air de composés organiques volatils (COV) dissous dans des eaux d'origine souterraine et de composés susceptibles d'être à l'origine de goûts et d'odeur ;
- désorption de composés inorganiques tels que le sulfure d'hydrogène ( $\text{H}_2\text{S}$ ), l'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ), dissous dans les effluents liquides ;
- désorption du dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) d'une eau avant l'introduction de chaux pour réaliser son adoucissement.

**I. 3.1.3. Traitement d'effluents gazeux contaminés**

Il s'agit de traiter des atmosphères contenant :

- des composés organiques volatils tels que, alcool, cétone, dérivés chlorés ;
- des fumées de combustion en vue de l'extraction de dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ) et le chlorure d'hydrogène (HCl) ;
- des gaz acides contenant le sulfure d'hydrogène ( $\text{H}_2\text{S}$ ), ou le dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) ;
- des gaz odorants chargés, par exemple, de mercaptans issus de procédés de traitement de boues.

### I.3.1.4. Traitement des boues

L'oxydation en voie humide (OVH) de composés organiques est réalisée dans des réacteurs fonctionnant à haute température et haute pression. Il s'agit de transférer de l'oxygène dans des conditions sévères de température et de pression.

## I.4. Caractéristiques des échangeurs gaz/liquide

Les échanges gaz-liquide sont réalisés dans des contacteurs où les phases sont dispersées sous diverses formes : bulles, gouttes ou films. Un certain nombre de grandeurs sont nécessaires pour mieux dimensionner un échangeur gaz-liquide.

### I.4.1. Diamètre des inclusions : bulles ( $d_b$ ) et gouttes ( $d_g$ )

Le diamètre des inclusions (bulles et gouttes) dépend du type de distributeur de gaz ou de liquide et des propriétés physico-chimiques des phases en présence. Le diamètre des bulles varie entre 1 et 5 mm avec une valeur moyenne autour de 3 à 4 mm pour des systèmes aqueux ne contenant pas d'électrolyte. Le diamètre des gouttes varie dans une gamme de 0,4 à 2 mm.

### I.4.2. Rétentions de phases

La rétention de gaz représente le rapport entre le volume occupé par la phase gazeuse ( $V_G$ ) et le volume total du contacteur ( $V_T$ ) :

$$\varepsilon_G = \frac{V_G}{V_T}$$

I.1

La rétention de liquide représente le rapport entre le volume occupé par la phase liquide ( $V_L$ ) et le volume total du contacteur ( $V_T$ ) :

$$\varepsilon_L = \frac{V_L}{V_T}$$

I.2

### I.4.3. Aire interfaciale volumique d'échange $a$

Cette grandeur représente la surface d'échange  $S$  rapportée à l'unité de volume du contacteur  $V_T$ . Elle s'exprime en  $m^2 \cdot m^{-3}$ .

$$a = S/V_T \tag{I.3}$$

## I.5. Présentation des différents types de contacteurs gaz/liquide

On distingue deux grandes classes ou familles de contacteurs gaz/liquide : contacteurs dans lesquels le gaz est dispersé sous forme de bulles dans un liquide, et contacteurs dans lesquels le liquide est dispersé sous forme de gouttes dans un gaz.

### I.5.1. Contacteurs dans lesquels le gaz est dispersé sous forme de bulles dans un liquide

Dans la plupart des contacteurs, il est nécessaire d'utiliser un distributeur de gaz pour disperser le gaz sous forme de bulles afin de créer une mise en contact intime entre les deux phases. Le distributeur de gaz joue un rôle important sur la taille des bulles initiales au niveau de l'injection, sur l'hydrodynamique de la phase gaz et de la phase liquide et donc sur l'aire interfaciale générée. Notons qu'il y a aussi, d'autre part, des phénomènes de rupture et de coalescence dans le réacteur qui peuvent également modifier ce paramètre. La Figure I.3 présente 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 durabilité des performances et les conditions de travail (température, pression et agressivité du milieu).




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

Figure I.3. Types de distributeurs de gaz

### I.5.1.1. Colonnes à bulles

#### - Principe de fonctionnement

Comme son nom l'indique, il s'agit d'une colonne cylindrique verticale, remplie de liquide et munie à la base d'un dispositif pour disperser le gaz. Ce dernier forme donc des bulles, qui montent à travers la phase liquide ; la fraction du gaz qui n'a pas été absorbée par le liquide s'échappe au sommet de la colonne (figure. I.4).

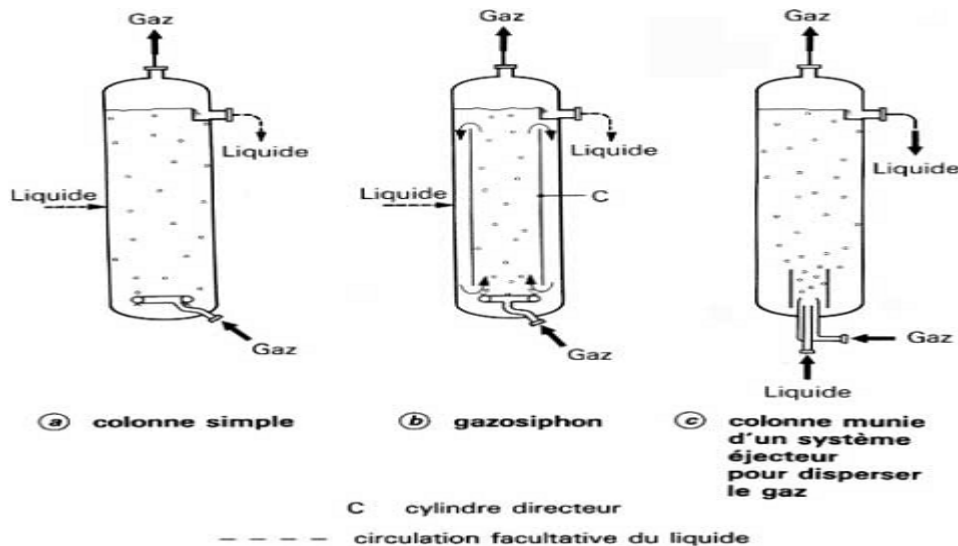


Figure I.4. Colonnes à bulles

Une autre variante des colonnes à bulles est le réacteur à boucle (réacteur airlift) qui assure une circulation dirigée du liquide. Leur domaine de prédilection est celui des fermentations, de la culture cellulaire, des traitements des eaux usées tels que la nitrification et dénitrification simultanées. Récemment, ces réacteurs ont été utilisés comme des photobioréacteurs pour la culture des algues à haute valeur ajoutée (Gourich et al 2006). Cette circulation du liquide peut être interne par ajout de chicanes cylindriques ou planes dans les colonnes à bulles (figure.I.5). Elle peut également être externe avec une jambe de retour séparée (downcomer), reliée à la montée (riser) par des jonctions de géométrie variable.

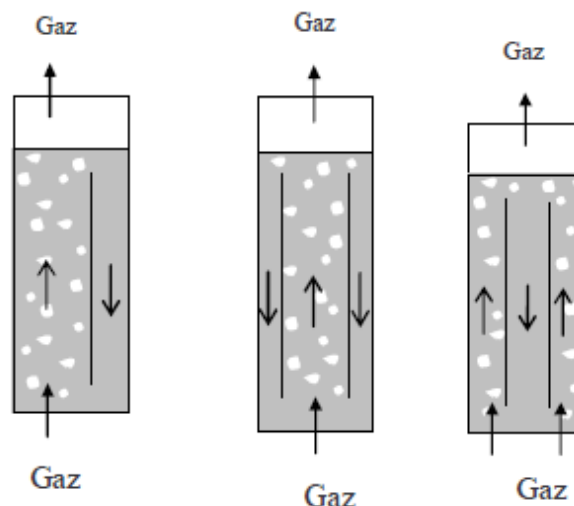


Figure I.5. Différents types de réacteurs airlift

Leur principe de fonctionnement est très simple. Ces dispositifs ne comportent pas d'internes mobiles et l'énergie nécessaire au fonctionnement du système est apportée par la détente quasi isotherme du gaz dans le riser et généralement introduit au pied de l'appareil à

une pression voisine de la pression hydrostatique assurée par la hauteur du liquide correspondante.

Le réacteur airlift diffère de la colonne à bulles par sa particularité de comporter quatre zones distinctes, chacune avec sa propre configuration d'écoulement. Une première zone, la montée (riser), dans laquelle le gaz est injecté et où le mélange gaz-liquide est en écoulement à co-courant ascendant. Cette zone possède la plus grande rétention de gaz et la majeure partie du transfert gaz liquide y a lieu. Le liquide quittant le riser entre dans la zone de désengagement du gaz, le séparateur gaz-liquide, qui, selon sa forme et sa taille, éliminera une partie ou la totalité du gaz dispersé. Le liquide totalement ou partiellement dégazé passe ensuite dans le downcomer pour arriver en bas de colonne où il est réintroduit dans le riser.

### I.5.1.2. Cuves agitées mécaniquement

Ces appareils ne diffèrent guère des réacteurs décrits précédemment, si ce n'est par l'injection de gaz, cette dernière étant généralement réalisée au moyen d'un tube perforé (couronne) placé au-dessous de la turbine d'agitation (figure. I.6).

Le choix du mobile d'agitation doit être fait en vue de réaliser un bon transfert gaz-liquide ; les systèmes du type turbine à pales plates sont souvent retenus, car ils engendrent un fort cisaillement permettant de disperser la phase gazeuse en fines bulles.

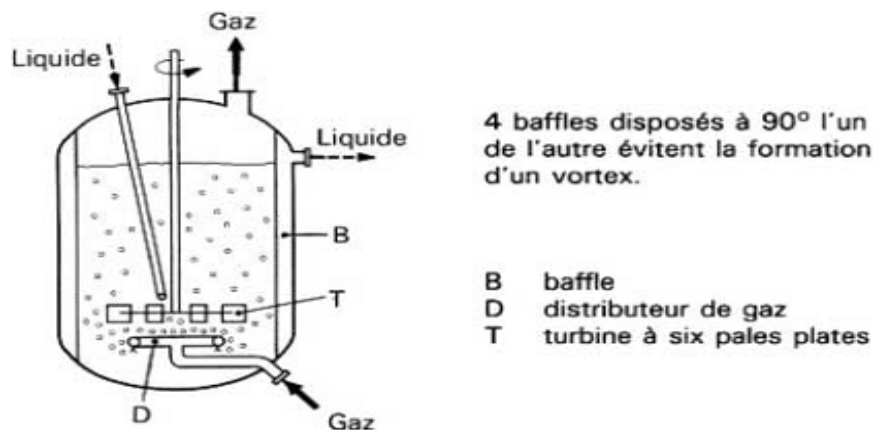


Figure I.6. Réacteur gaz-liquide de type cuve agitée

#### ➤ Organes d'agitation

Un agitateur est constitué d'une pièce mécanique mise en rotation dans un volume de fluide. L'énergie fournie au mobile d'agitation est transférée au fluide par le travail des forces de surface sur le contour de l'agitateur.

On peut regrouper les agitateurs en trois familles selon les écoulements générés (Roustan et Le Lan, 1999) :

-écoulements radiaux : on retrouve dans cette catégorie la turbine de Rushton. Ce type d'agitateur permet d'obtenir une forte turbulence, donc un fort mélange et des effets de cisaillements importants. Les applications les plus courantes de ce type d'agitateurs sont les mélanges de liquides non miscibles ou le mélange de liquide/solide ou liquide/gaz. Les turbines, constituent la famille des agitateurs à écoulement radial.



Figure I.7. Turbine de Rushton

- écoulements axiaux : Ce type de mobile produit des actions de pompage, c'est-à-dire que le fluide traverse l'air balayé par le mobile. Ces mobiles sont utilisés pour les opérations d'homogénéisation, pour la mise et le maintien en suspension de particules solides. On retrouve dans cette catégorie les hélices marines. C'est le type d'agitateur installé dans les bassins d'aération. Ce type d'écoulement est créé par des hélices.

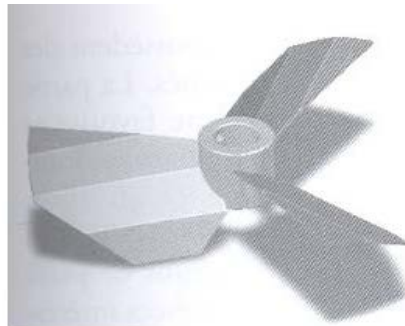


Figure I.8. Hélice

- écoulement tangentiel : le liquide a tendance à tourner d'un seul bloc autour de l'axe de rotation du mobile d'agitation. Ces mobiles assurent un renouvellement du fluide près des parois de la cuve. Ce sont des agitateurs de grands diamètres tels que les ancrés. Ils sont utilisés pour l'homogénéisation de la concentration et de la température des milieux visqueux.

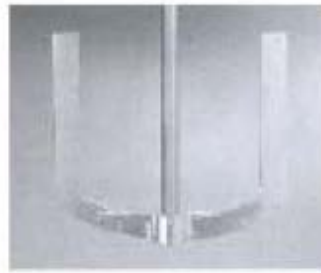


Figure I.9. Ancre

### ➤ Caractérisation des mobiles d'agitation

Plusieurs paramètres globaux ont été définis afin de caractériser les agitateurs mécaniques en matière de capacité de mélange, de consommation énergétique et de capacité de pompage.

-nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{\rho N D_{agit}^2}{\mu} \quad I.4$$

Avec :

$N$  : vitesse de rotation des agitateurs ( $tr.s^{-1}$ ) ;

$D_{agit}$  : diamètre des agitateurs (m).

Le nombre de Reynolds compare les effets d'inertie par rapport aux effets visqueux. Dans ce type d'appareil, on considère que le régime dit turbulent, c'est-à-dire lorsque les effets d'inertie prédominent, est atteint lorsque la valeur du nombre de Reynolds est supérieure à 103. Pour des valeurs inférieures à 10, on considère que le régime est laminaire. [S. Vermande, 2005].

- nombre de puissance :

$$N_p = \frac{P_{agit}}{\rho_L N^3 D_{agit}^5} \quad I.5$$

Avec :

$P_{agit}$  : puissance fournie aux agitateurs (kWh).

Ce nombre représente sous forme adimensionnelle la puissance consommée lors de l'agitation, et ainsi la puissance des efforts de contraintes (pression et contraintes visqueuses) exercés sur l'arbre et le mobile d'agitation

- nombre de circulation :

$$N_{qc} = \frac{Q_c}{N D_{agit}^3} \quad I.6$$

Avec :

$Q_c$  : débit de circulation ( $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ).

Le débit de circulation représente le débit total de fluide mis en mouvement par le brassage des pales du mobile.

### I.5.2. Contacteurs dans lesquels le liquide est dispersé sous forme de film ou gouttes

Dans cette catégorie de contacteurs, le liquide se présente sous forme de gouttes et /ou de film, dans une enceinte qui peut contenir soit une phase gazeuse uniquement soit un support solide fixe ou en mouvement. Les gouttes sont générées par pulvérisation du liquide, alors que les films sont générés par l'écoulement gravitaire le long d'une paroi ou d'un garnissage.

#### I.5.2.1. Colonnes à plateaux

##### - Principe de fonctionnement

Le liquide, injecté en haut de colonne, descend par gravité dans les déversoirs et coule horizontalement en nappe liquide peu épaisse (3 à 8 cm) sur chaque plateau. L'écoulement du liquide est globalement en contre-courant avec le gaz introduit à la base de la colonne. Le passage du gaz se fait de plateau en plateau par des orifices dont la taille et la forme sont très variées. De son côté, le liquide descend le plus souvent d'un plateau au suivant par des conduites à déversoirs (*down-comers*) situées le long de la paroi de la colonne ou, parfois, dans l'axe des colonnes de très grand diamètre.

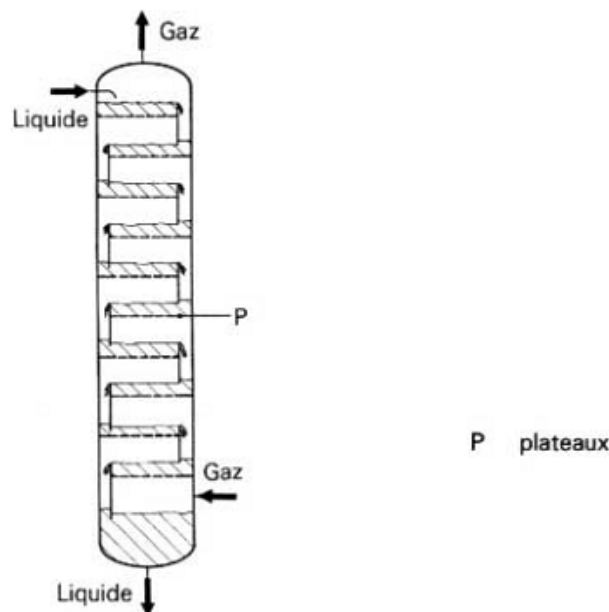


Figure I.10. Réacteur gaz-liquide du type colonne à plateaux

### I.5.2.2. Colonnes à garnissages

#### - Principe de fonctionnement

La colonne à garnissage structurée peut fonctionner à co-courant comme à contre-courant. Dans les installations industrielles, le fonctionnement à contre-courant (figure I.11) est le plus souvent utilisé parce qu'il permet une meilleure efficacité de transfert mais il limite le débit par des problèmes d'engorgement à l'inverse des appareils à co-courant.

Pour un fonctionnement à contre-courant, le liquide arrive en haut de la colonne. Il passe à travers un distributeur chargé de répartir uniformément le liquide sur la section de la colonne, et va ensuite ruisseler sous l'effet de la gravité sur un empilement d'éléments de garnissage. Ce ruissellement (étalement) du film liquide permet de développer une grande surface d'échange entre la phase liquide et la phase gazeuse. Les espèces chimiques acides présentes en phase gazeuse s'absorbent alors dans la phase liquide.

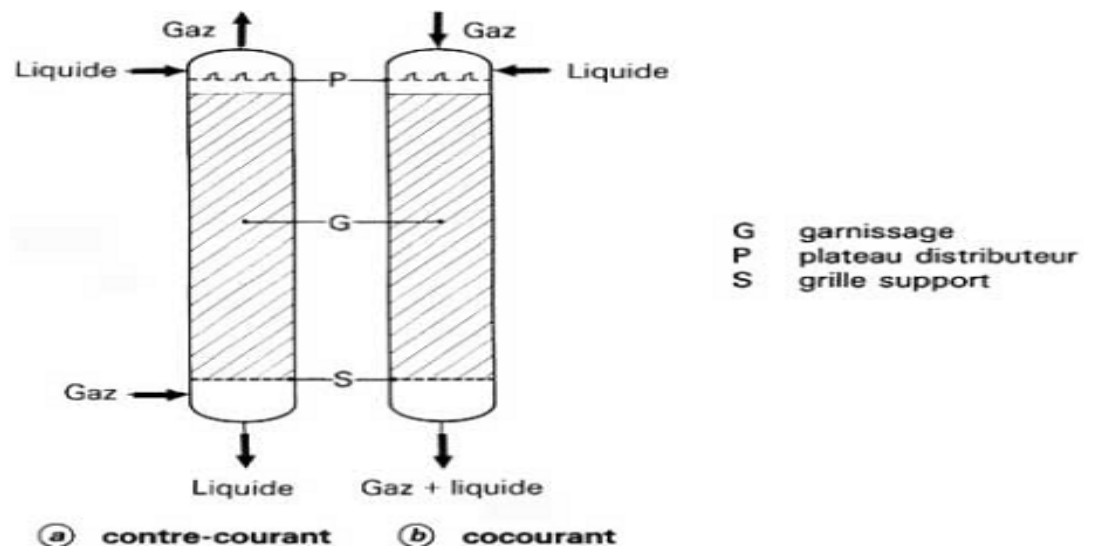


Figure I.11. Réacteurs gaz-liquide du type colonne à garnissage

## I.6. Aspects théoriques de la distribution des temps de séjour

### I.6.1. Distributions des temps de séjour DTS

Considérons une molécule à l'intérieur, on peut définir plusieurs fonctions de distribution dont la plus importante est la distribution des temps séjour  $E(t)$  ou encore en coordonnées réduites  $E(\theta) = \tau \cdot E(t)$ .

Alors, la DTS,  $E(t)$  est telle que:  $E(t).dt$  est la fraction du débit de sortie qui est restée dans le réacteur un temps compris entre  $(t)$  et  $(t + dt)$ .

Les conditions de normation implique que (figure I-12):

$$\int_0^{\infty} E(t). dt = 1 \quad \text{I.7}$$

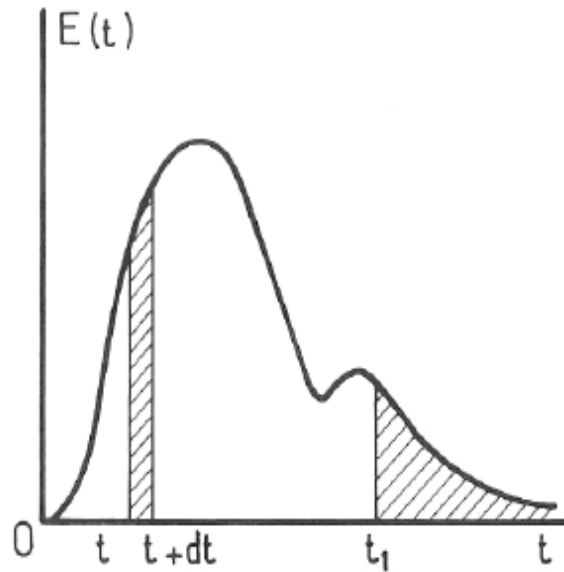


Figure I.12. Distribution des temps de séjour

Une fois déterminée la courbe de distribution des temps de séjour DTS, il est possible de calculer la moyenne  $\mu$  et la variance :  $\sigma_t^2$

Lorsqu'on calcule la moyenne et la variance de  $E(t)$  pour des intervalles de temps  $\Delta t$  réguliers, on peut utiliser les relations suivantes:

$$\mu = \frac{\sum t.E(t)}{\sum E(t)} \quad \text{I.8}$$

$$\sigma^2 = \frac{\sum t^2.E(t)}{\sum E(t)} - \mu^2 \quad \text{I.9}$$

## I.6.2. Test de traçage

### I.6.2.1. Traceurs:

La méthode des traceurs consiste à "marquer" les molécules entrant dans le réacteur et à suivre leur trajet jusqu'à la sortie où on examine leurs réponses. Pour cela, un traceur doit avoir nécessairement les mêmes propriétés hydrodynamiques que le fluide mais être inerte

(Colorant, solution aqueuse): L'utilisation d'une solution saline, PRASERTHDAM (1979), LESAUZE & LAPLANCHE (1992), ou d'un colorant non tensioactif comme le bleu de méthylène GBAHOUE (1977), présente l'avantage d'un coût faible et d'une grande facilité d'analyse. En principe, pour être détecté, si le traceur est une solution saline, il doit être injecté à des concentrations assez élevées pour avoir une certaine valeur de la conductivité. On peut donc craindre, dans ce cas, qu'il y ait diffusion moléculaire entre le traceur et le fluide qui s'écoule. Ceci peut entraîner une forte perturbation du signal de sortie. De même, la variation de la température entraîne une variation de la conductivité (+ 2% par degré celsius). Il est donc nécessaire de s'assurer que la température de l'eau entrante est constante pendant la durée de la manipulation.

En appliquant au traceur un certain signal à l'entrée du réacteur, si on veut avoir sa réponse à la sortie, il est nécessaire d'injecter et de détecter le traceur dans des zones rétrécies où règne un fort critère de Reynolds. En effet, il existe dans ces zones une turbulence spontanée assurant la condition de mélange. Plusieurs auteurs LEVENSPIEL & TURNER (1970) et VILLERMAUX (1993), ont montré que si l'on ne respecte pas ces précautions, les mesures sont dépourvues de signification.

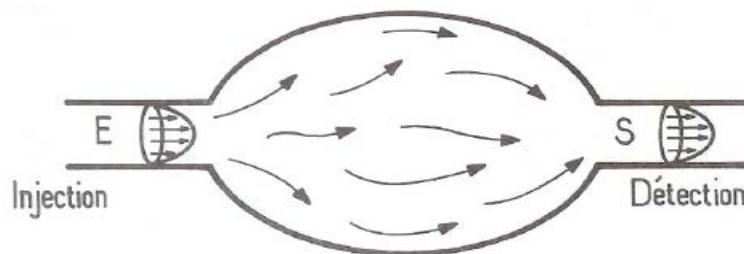


Figure I.13. Parcours d'une molécule dans un réacteur ouvert

### I.6.2.2. Stimulations

Deux types de stimulations sont couramment utilisées:

- Stimulation échelon: Courbe F

La concentration du traceur passe brusquement de 0 à  $C_0$  dans l'alimentation à l'instant  $t = 0$ .

Soit:  $t = 0 \Rightarrow C = 0$

$t > 0 \Rightarrow C = C_0$ .

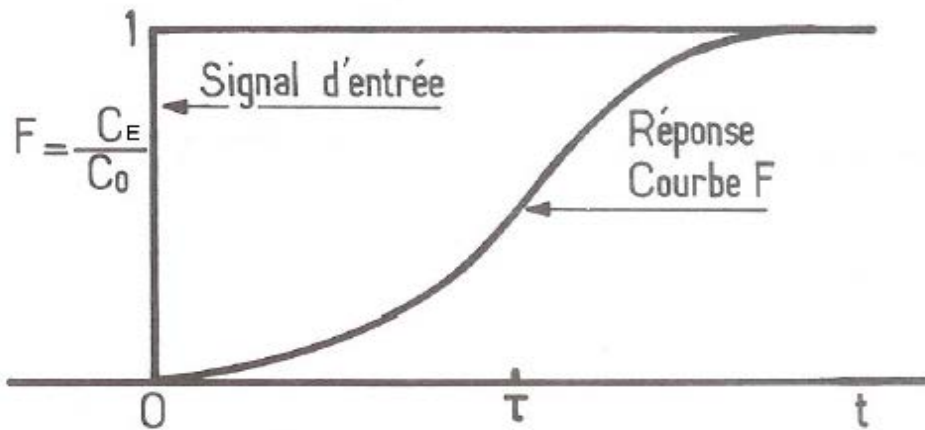


Figure I.14. Réponse à une injection échelon

Si  $C_S$  est la concentration du traceur dans le courant de sortie, la fraction  $C_S/C_0$  de fluide marqué correspond bien à la fraction de débit qui a séjourné un temps inférieur à  $t$  dans le réacteur, c'est-à-dire à  $F(t)$ :

$$F(t) = \frac{C_S(t)}{C_0} \quad \text{I.10}$$

- Stimulation impulsionnelle: Courbe C

On injecte à l'entrée  $n_0$  moles de traceur pendant un temps très court devant le temps de passage  $\tau$  ( $< 0,001\tau$ ). Cette quantité est telle que si elle était répartie dans tout le volume du réacteur, sa concentration serait  $C_0 = n_0/V_r$

Soit:  $t = 0 \Rightarrow C = C_0$

$t > 0 \Rightarrow C = 0$

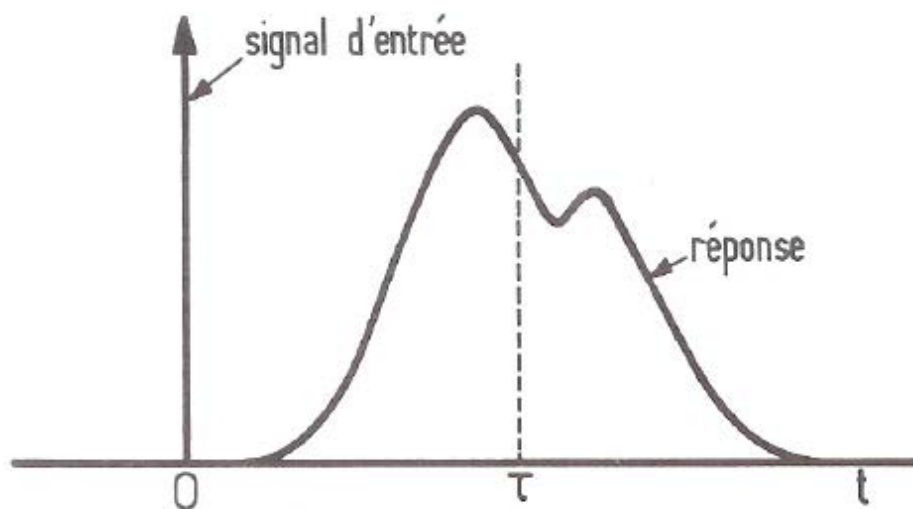


Figure I.15. Réponse à une injection impulsion

### I.6.3. Modélisation des écoulements

Afin de dimensionner le réacteur on recherchera un modèle hydrodynamique relativement simple pour rendre compte de l'allure expérimentale de la courbe de DTS obtenue par la méthode des traceurs. Ce modèle permet de caractériser l'écoulement dans le réacteur réel et de mettre en évidence ses écarts par rapport à l'idéalité. Parmi les nombreux modèles, il en existe deux principaux qui sont le modèle à dispersion axiale et celui des mélangeurs en série.

#### I.6.3.1. Modèle piston avec dispersion axiale

Le modèle piston avec dispersion axiale, appelé aussi, piston diffusionnel, a été développé pour caractériser les écoulements dans les réacteurs tubulaires dont les comportements sont très proches de l'écoulement piston. Cet écart par rapport à l'idéalité, se caractérise par un degré de mélange entre les différents éléments du fluide en écoulement, appelé dispersion axiale. Ce phénomène de dispersion axiale peut se représenter par une loi analogue à celle de Fick, établie pour le transport de la matière par diffusion moléculaire, dans laquelle le coefficient de diffusion moléculaire est remplacé par un coefficient de dispersion axiale, noté  $E_z$ , dont l'équation aux dimensions est  $L^2T^{-1}$ . Désignons par :

- U : vitesse d'écoulement du fluide dans le réacteur tubulaire ;
- L : longueur du réacteur ;
- Q : débit volumique du fluide ;
- $D_{ax}$  : coefficient de dispersion axiale.

Ce modèle peut être caractérisé par un nombre sans dimension, appelé nombre de Péclet et noté  $Pe$ .

$$Pe = \frac{UL}{D_{ax}} \quad I.11$$

L'écriture du bilan de matière en traceur en régime transitoire s'écrit :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U_L \frac{\partial c}{\partial x} = D_{ax,L} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad I.12$$

Pour ce modèle, l'équation de la courbe DTS n'est connue que pour le fonctionnement ouvert/ouvert. Son expression est donnée par l'équation suivante :

$$E(\theta) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Pe}{\pi\theta}} \exp \left[ \frac{-Pe(1-\theta)^2}{4\theta} \right] \quad I.13$$

### I.6.3.2.J réacteurs RCPA en série (ou en cascade)

Dans ce modèle, le réacteur de volume  $V_L$ , alimenté par le débit  $Q_L$ , est assimilé à une série de  $J$  réacteurs identiques parfaitement agités de volume  $V_L / J$ .

Le bilan transitoire dans un mélangeur ( $n^{\text{ème}}$  réacteur) s'écrit:

$$Q_L \cdot C_{n-1} = Q_L \cdot C_n + \frac{V_L}{J} \cdot \frac{dC_n}{dt}$$

I.14

Si  $C_0$  est la concentration du traceur à l'entrée, supposée dans  $V_L$ , et si  $\tau = \frac{Q_L}{V_L}$  est le temps de passage total, on a :

$$\theta = \frac{t}{\tau} \qquad y = \frac{C}{C_0}$$

L'équation (I.14) devient:

$$y_{n-1} = y_n + \frac{1}{J} \cdot \frac{dy_n}{d\theta} \qquad \text{I.15}$$

Pour trouver la courbe réponse à la sortie du réacteur, nous allons utiliser la transformation de Laplace:

$$y(\theta) \rightarrow F(s)$$

Alors :

$$F_{n-1} = F_n + \frac{1}{J} \cdot s \cdot F_n = \left[1 + \frac{s}{J}\right] \cdot F_n$$

I.16

Fonction de transfert du  $n^{\text{ème}}$  réacteur:

$$T_n(s) = \frac{F_n}{F_{n-1}} = \left[1 + \frac{s}{J}\right]^{-1}$$

I.17

Fonction de transfert des  $J$  réacteurs en série:

$$G(s) = [T_n(s)]^J = \left[1 + \frac{s}{J}\right]^{-J} \qquad \text{I.18}$$

Fonction transformée inverse de  $G(s)$ :

$$y(\theta) = E(\theta) = C/C_0 = E(\theta) = \frac{J^J}{(J-1)!} \theta^{J-1} e^{-J\theta} \qquad \text{I.19}$$

d'où l'expression de  $E(t)$  :

$$E(t) = \frac{J^J}{(J-1)!} \cdot \frac{t^{J-1}}{\tau^J} \cdot \text{Exp} \left[ -J \cdot \frac{t}{\tau} \right] \quad \text{I.20}$$

#### I.6.4. Diagnostic de mauvais fonctionnement

Il est fortement recommandé, une fois la détermination des paramètres effectuée, de corréler les valeurs numériques des paramètres aux conditions opératoires du réacteur. Cela s'avère intéressant lors de l'extrapolation des réacteurs à l'échelle industrielle. La présence de zones mortes et de courts circuits est à bannir sur un réacteur. Il faut modifier les conditions opératoires pour les réduire et les supprimer. Outre, la modélisation des écoulements non idéaux, la détermination de la distribution des temps de séjour nous permet aussi de diagnostiquer des mauvais fonctionnements: Zones mortes, court-circuits et retards.

Si tout le volume interne  $V_r$  est accessible au fluide, le temps de passage  $\tau$  est égal au temps de séjour moyen  $t_s$ .

##### I.6.4.1. Présence de zones mortes

Dans tout réacteur industriel, on peut remarquer des zones mal irriguées: Coins, chicanes, etc...). Le traceur va donc pénétrer dans ces zones par diffusion, puis il sera éliminé très lentement. On constatera sur les concentrations de sortie de longues traînées. Pour tenir compte simplement de ce phénomène dans un calcul de réacteur, on réduit le volume  $V$  du réacteur, en ne tenant compte que d'un volume actif ou accessible  $V_A = V_r - V_m$  et à ce moment là on obtiendra:  $t_s < \tau$

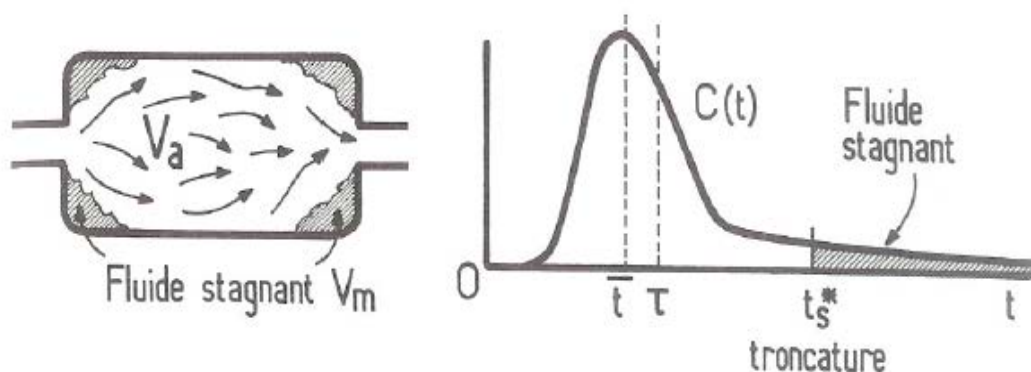


Figure I.16. Présence de zones mortes dans un réacteur

##### I.6.4.2. Présence de courts circuits

Des passages préférentiels dans le réacteur (mauvais remplissage d'un lit fixe, position d'une déverse trop proche de l'alimentation,...) vont diviser le débit d'entrée. Le débit de court circuit évitera une partie du réacteur et on observera alors une réponse impulsionnelle composée de deux pics: Le premier correspondant au court-circuit et le deuxième au reste du fluide (réponse du réacteur):  $t_s > \tau$

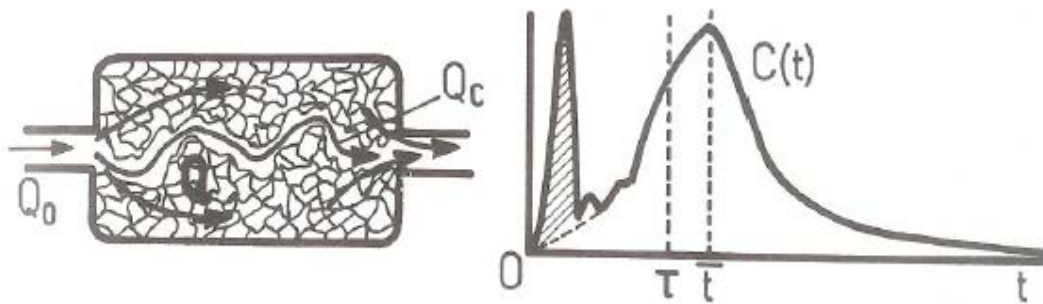


Figure I.17. Présence de zones mortes dans un réacteur

### I.7. Conclusion

Dans ce premier chapitre, les notions relatives aux réacteurs gaz/liquide ont été présentées (définitions, différents types de contacteurs gaz/liquide, modèles d'écoulement, etc...). Le prochain chapitre est consacré à une revue bibliographique sur l'hydrodynamique et le transfert de matière des réacteurs gaz/liquide.

# Chapitre II

## Travaux antérieurs

## II.1. Introduction

L'étude hydrodynamique et de transfert de matière des réacteurs gaz/liquide, a fait l'objet de nombreux travaux depuis les vingt dernières années. L'intérêt porté à ce problème est dû aux nombreuses applications pratiques dans le domaine du génie des procédés de l'environnement tel que le traitement d'eaux usées urbaines et industrielles, traitement d'effluents gazeux contaminés et le traitement des boues.

Nous essayerons dans ce qui suit, de présenter certains travaux entrepris dans ce domaine et aussi ceux qui ont aidé à l'enrichir. Pour ce faire, nous avons retenu la classification suivante :

- étant donné la complexité de la structure de l'écoulement dans les réacteurs gaz/liquide, nous avons jugé utile de consacrer la première partie de ce chapitre au comportement hydrodynamique de l'écoulement dans ces réacteurs.
- la deuxième partie est relative au transfert de masse dans les réacteurs gaz/liquide.
- modélisation, conception et optimisation requièrent une excellente connaissance de l'hydrodynamique, du transfert de masse et de chaleur : c'est l'objectif de la troisième partie de ce chapitre.
- enfin, en dernier lieu nous situons les objectifs de notre étude dans le contexte bibliographique.

## II.2. Etude Hydrodynamique des réacteurs gaz/liquide

De nombreuses publications traitent du comportement hydrodynamique des réacteurs gaz/liquide. Cependant, du fait des variations de géométrie et des procédés et des milieux utilisés, il est difficile de trouver des résultats et des méthodes permettant le dimensionnement ou la modélisation du fonctionnement de ces réacteurs.

Nous allons recenser, dans cette partie, l'essentiel des études effectuées dans le cas de réacteurs gaz/liquide.

**D.Ruen-ngam et al /2008/** ont étudié l'influence de la salinité du liquide sur les performances d'un réacteur de type airlift. Un système dit « draft tube » de diamètres différents ont été utilisés afin de varier le rapport entre la section du Riser et du Downcomer de 0.061 à 1.01. Les gammes de la vitesse superficielle du gaz et de la salinité ont été étendues

respectivement de 0.01 à 0.07 m/s et de 0 à 45 ppt. Les expériences ont montré que le diamètre de sauter des bulles est faible dans l'eau saline que dans l'eau fraîche. Ce dernier diminue avec la vitesse superficielle du gaz dans l'eau saline. Ceci est dû aux collisions et à la rupture des bulles à une rétention gazeuse élevée.

**J.Rui-qing et al /2008/** ont étudié l'effet de la structure d'un système dit « draft tube » et la quantité du solide sur la puissance consommée et la rétention gazeuse d'un réacteur agité avec « hydrofoil impeller ». Faible puissance consommée et forte rétention gazeuse ont été obtenues lorsque « hydrofoil impeller » est vers le haut. La puissance consommée augmente avec l'augmentation de la quantité du solide. Il a été trouvé que la rétention gazeuse d'un système gaz/liquide est plus élevée qu'un système gaz/liquide/solide.

**Luo et Al Dahhan /2008/** ont étudié le macromélange dans un draft tube airlift bioréacteur en régime d'écume. A cet effet, la technique CARPT (computer automated radioactive particle tracking) a été conduite pour mesurer le temps de séjour au sein du réacteur. Elle est basée essentiellement sur le suivi de la trajectoire de fines particules radioactives dans le liquide. A l'issue de leur travail, l'analyse du temps de séjour a révélé que le macromélange dans la partie ascendante et descendante du réacteur se rapproche plus de l'écoulement piston. Aussi, l'augmentation de la vitesse superficielle du gaz a conduit à la diminution du temps de circulation et ainsi du temps de séjour moyen dans les régions précitées. Ceci ne conduit pas forcément à l'amélioration du macromélange dans ces régions.

L'étude expérimentale entreprise par **M. Yoshimoto /2008/** a montré que la hauteur de la colonne et la concentration des particules solides dans le cas d'un réacteur airlift affecte peu l'aire interfaciale et diminue avec l'augmentation de la viscosité du liquide. L'étude a dévoilé une dépendance linéaire de l'aire interfaciale avec la rétention gazeuse.

**E.Olivo /2007/** a consacré son travail aux études hydrodynamiques conduites en utilisant les techniques de traçage conductimétrique au sein du photobioréacteur en fonction de différentes configurations (débit d'air et type de distributeur).

Différents types d'injecteurs de gaz ont été testés. Ils ont démontré l'intérêt des distributeurs de type membranaire ou tangentiel. Le distributeur tangentiel a été retenu pour équiper le photobioréacteur en raison de sa simplicité de mise en œuvre et de son faible coût.

Selon **M.Bennajah /2007/**, l'influence de la géométrie du réacteur airlift sur l'évolution des principaux paramètres hydrodynamiques se réduit en général, à l'effet du rapport des sections Downcomer/Riser ( $A_d/A_r$ ). Lorsque le rapport augmente, une diminution de la

rétenion de gaz dans le Riser est observée. En effet, l'augmentation du diamètre du Downcomer provoque une diminution des pertes de charge (perte de charge en haut à l'entrée du Downcomer et dans la jonction basse du réacteur) ce qui permet une augmentation de la vitesse de la circulation du liquide.

Selon **Sicula et al /2007/**, il est difficile de prédire les valeurs de la rétenion de gaz en l'absence de données expérimentales. En effet, la rétenion dépend de nombreux facteurs dont le distributeur de gaz, la géométrie du séparateur, les propriétés de la phase liquide, la présence d'impuretés, les dimensions de la colonne et de la vitesse superficielle du gaz. Tous les auteurs s'accordent à dire que la rétenion de gaz dans le Riser et le Downcomer est une fonction de la vitesse superficielle de gaz et du rapport des sections  $A_d/A_r$ .

Cette étude est l'œuvre de **G. Olivieri et al /2007/** qui ont identifié les conditions de transitions entre les différents régimes hydrodynamique par le biais d'une procédure classique et une méthode chaotique. L'hydrodynamique d'un système gaz/liquide en régime homogène semble être le résultat de la superposition de la dynamique de deux sous-systèmes. Le premier, relatif à l'écoulement de la phase liquide, est caractérisée par une structure turbulente fine, soulignée à mesure que la fraction des bulles augmente. Le second, relatif à la phase gazeuse, caractérisée par des fluctuations régulières liées au passage des bulles. La transition au régime hétérogène, marque la transition à une dynamique globale plus intimement couplée du système biphasé. Il s'avère que l'hydrodynamique d'un système gaz/liquide est contrôlée par la dynamique de la phase gazeuse.

**K.Thaker et D.P.Rao /2007/** quant à eux, ont étudié l'influence du distributeur de gaz et la hauteur du liquide clair sur la rétenion gazeuse globale et le coefficient de dispersion axial. Les résultats expérimentaux ont montré que le distributeur de gaz (multiorifice) utilisé dans cette étude a augmenté de manière significative la rétenion gazeuse globale et a diminué le coefficient de dispersion axial  $D_{ax}$ . Il ressort que ce dernier engendre des bulles plus fines et donc une rétenion gazeuse plus importante. Les résultats obtenus résultent aussi d'une augmentation de la hauteur du liquide clair.

L'étude entreprise par **H. Chaumat /2007/** a tenté avec succès d'étudier l'influence de la tension superficielle du liquide sur l'hydrodynamique d'une colonne à bulle. Pour ce faire, l'eau et le cyclohexane ont été utilisés. La différence qui réside entre ces deux liquides du point de vue propriétés physico-chimique est que la tension superficielle de l'eau est trois fois celle du cyclohexane. Lorsque l'eau et le cyclohexane sont utilisés à une même vitesse superficielle du gaz, mais à un régime hydrodynamique différent, l'auteur observa que la

rétenion gazeuse est plus élevée dans l'eau (tension superficielle élevée) et le diamètre des bulles est plus grand dans le cyclohexane.

**Chaumat** note que ces constatations à propos de l'influence de la tension superficielle du liquide sur l'hydrodynamique ne sont pas en accord avec la littérature et attribua cette divergence au fait que les expériences ont été menées avec une solution aqueuse (butanol). L'effet de la tension superficielle est moins important dans le liquide pur que dans une solution aqueuse, en raison du comportement spécifique des agents tensio-actifs.

L'hydrodynamique d'un système gaz/liquide dans un réacteur torique de forme carré, a été étudié par **L.Pramparo et al /2007/**, tant du point de vue numérique qu'expérimental et cela en mode fermé et ouvert. L'auteur compara ses résultats numériques à ses mesures obtenues expérimentalement. La concordance entre résultats numériques et expérimentaux est bonne. Les résultats ont révélé qu'il existe en mode fermé une évolution linéaire entre la vitesse de circulation de liquide et la vitesse de rotation de l'agitateur. Ces résultats sont en bon accord avec ceux trouvés par Belleville et al /1992/ dans le cas d'un réacteur torique mais de forme circulaire. Il a été trouvé que le temps de mélange est très court dans toutes les conditions opératoires (moins de 21 s).

En mode continu, la structure de l'écoulement est plus complexe. Cette complexité est due à la perturbation de l'écoulement à l'intérieur du réacteur au cours de l'injection de l'alimentation. Cela est remarquable pour des conditions particulières de la vitesse de rotation de l'agitateur et du débit d'alimentation. L'auteur conclut que l'hydrodynamique est fonction de la vitesse de rotation de l'agitateur.

**Lakota Ana /2007/** a étudié expérimentalement l'effet de la viscosité des liquides non-newtoniens et de la vitesse superficielle de gaz dans un réacteur gaz/liquide de type colonne à bulles. Différentes concentrations de solutions aqueuses ( Carboxyles cellulose et Xanthan) ont été utilisées comme liquide non-newtoniens. L'air constitue la phase gazeuse. Les résultats expérimentaux ont montré que l'effet de la vitesse superficielle sur la rétenion gazeuse est similiaire pour les deux solutions utilisées, alors que la viscosité a une grande influence sur la rétenion gazeuse dans le cas de la solution Xanthan. Par ailleurs, le débit de liquide affecte peu la rétenion gazeuse.

**Shariati et al /2006/** signalent que les propriétés physiques du liquide telles que la densité, la viscosité, la tension superficielle et la force ionique ont une grande influence sur

l'hydrodynamique du système. L'effet du changement des propriétés physiques du milieu dépend en outre de la géométrie du réacteur et des pertes de charge qui en résultent.

L'étude entreprise par **R.Rihani et al /2006/** a été réalisée dans le but d'étudier la distribution de la pression d'un système gaz/liquide dans un réacteur en verre de géométrie toroïdale. En effet, la connaissance de la perte de charge d'un système gaz/liquide dans le réacteur torique en pyrex aéré, a permis d'estimer la puissance d'agitation du fluide aéré  $P_f$  au niveau de l'hélice. Les résultats obtenus ont montré qu'en régime d'aération FI inférieur à 0.0023 et en utilisant un mobile axial de type hélice marine, l'augmentation de la vitesse d'agitation du mobile d'agitation a conduit à une augmentation relative de la perte de charge.

**Hajiev et al /2006/** ont reporté que la majeure difficulté souvent rencontrée dans les bioréacteurs agités réside dans l'identification des régimes d'écoulement. D'après ces auteurs, le temps de mélange est un critère utile pour l'estimation de l'intensité du mélange et ainsi que l'estimation des profils d'oxygène. La mesure du temps de mélange est pertinente car c'est le temps nécessaire pour détecter l'existence des inhomogénéités aux extrémités de la cuve et dans une certaine mesure les gradients de concentration dans le réacteur. Les essais ont été menés dans un réacteur aéré multi-étagés en utilisant la PH métrie.

**B.Gourich /2006/** a axé son travail à l'étude des caractéristiques hydrodynamiques de trois types de réacteurs à savoir une colonne à bulles, un réacteur airlift rectangulaire de recirculation interne et un réacteur polyphasique à base de venturi à émulsion (réacteur Emulsair). Ils ont identifié les régimes d'écoulement ainsi que les transitions de régime par l'analyse d'un signal de pression différentielle. Les résultats obtenus ont montré qu'en présence de systèmes inhibiteurs de coalescence (air-solution aqueuse de propanol 0.05 v/v), la transition d'un régime d'écoulement à un autre est retardé à des vitesses superficielles de gaz plus élevées, mais elle est beaucoup plus brutale que pour l'eau pure. Ainsi, la zone de transition classiquement observée avec cette dernière disparaît en présence d'une faible quantité de propanol au profit d'un régime homogène étendu qui se poursuit jusqu'à un « point de transition retardé ». Celle-ci est située approximativement à la même vitesse superficielle que le passage de la transition au régime hétérogène établi pour l'eau pure. En outre, le temps de mélange et le coefficient de dispersion axial étaient indépendants de la vitesse superficielle du gaz et ce dans le cas du réacteur airlift rectangulaire.

Dans un autre article, **B.Gourich et al /2005/** se sont attelés à déterminer l'effet de la vitesse superficielle du gaz et la concentration du solide sur l'hydrodynamique d'un airlift rectangulaire. Il a été trouvé que la rétention gazeuse dans le Riser et Downcomer augmente

avec l'augmentation de la vitesse superficielle du gaz. Quant à la vitesse du liquide dans le Downcomer augmente avec la vitesse du gaz jusqu'à une certaine valeur (0.033 m/s dans cette étude) puis décroît.

L'auteur proposa la corrélation empirique suivante :

$$\epsilon_g = 1.277U_{gr}^{1.06} \quad \text{II.1}$$

L'exposant 1.06 est le même reporté par Couvert et al (2000).

**El Azher et al /2005/**, montrent l'influence de la viscosité et de la tension superficielle, ils concluent en affirmant que lorsque la viscosité du liquide ou la tension superficielle augmente, le diamètre des bulles augmente, et leur vitesse ascensionnelle aussi et par conséquent, la rétention du gaz diminue.

**K.Edouard et al /2005/** ont proposé de coupler l'aération par système « airlift » à la recirculation externe de liquide en vue de contrôler séparément l'aération et le mélange dans un bioréacteur membranaire destiné à la nitrification partielle d'eaux ammoniacales. Le mélange dans le réacteur a été déterminé par des essais de traçage. Ceux-ci ont révélé que les temps de mélange et de circulation évoluent de manière inversement proportionnelle aux débits d'air  $Q_g$  et le liquide  $Q_l$ . Ils ont proposé la corrélation empirique suivante :

$$t_c = k (U_l + U_g)^\gamma$$

II.2

avec  $k$  et  $\gamma$  ont été estimés à 1.06 et -0.55 respectivement.

Selon **Mehrina et al /2004/**, le rythme de croissance de la rétention gazeuse avec la vitesse superficielle du gaz est fonction du régime d'écoulement. La rétention gazeuse augmente plus rapidement en fonction de la vitesse superficielle du gaz en régime homogène qu'en régime hétérogène. (obtenu à plus forte vitesse de gaz).

**Wong et al /2004/** ont étudié les performances de mélange des microréacteurs en fonction de la longueur et de la largeur du microcanal par rapport au nombre de Reynolds. La technique adoptée est celle basée sur la décoloration de l'eau bleue en contact avec de l'eau déminéralisée. La phase de mélange est observée avec un microscope muni d'une caméra vidéo, les images capturées sont traitées numériquement pour en déduire la concentration. Le temps de mélange est atteint au moment où la décoloration est totale dans le microcanal.

Dans le but de réduire la taille des bulles et obtenir une distribution radiale uniforme de la rétention gazeuse et réguler la vitesse de circulation du liquide, **T. Zhang et al /2004/** ont utilisé un système dit « internal » monté verticalement dans le Riser de la colonne.

L'analyse expérimentale a dévoilé que les profils radiaux de la rétention gazeuse et de la vitesse des bulles deviennent beaucoup plus uniformes après avoir traversé « l'internal ». Plus on s'éloigne de « l'internal », les profils changent et deviennent semblables à ceux observés au dessous de « l'internal ». En outre, ils ont observé une diminution significative du diamètre de sauter des bulles après avoir traversé « l'internal ». Plus on s'éloigne de l'« l'internal », plus ce dernier augmente.

**H.Umar /2000/** a consacré son travail à une étude hydrodynamique dans un réacteur gazosiphon à boucle interne pour des milieux gaz/liquide (visqueux ou non) et des milieux gaz/liquide/solide. Deux spécificités importantes ont été étudiées : utilisation d'un agitateur mécanique et de mélangeurs statiques dans la jambe montant du réacteur. Les paramètres hydrodynamiques globaux étudiés sont : la rétention de gaz, la vitesse de circulation et le temps de mélange du liquide. L'étude a montré des effets contrastés. L'utilisation d'un système d'agitation associé ou non à des mélangeurs statiques augmente globalement les rétentions de gaz dans les deux compartiments (ascendant et descendant) ce qui se traduit par une vitesse de circulation plus faible que celle qui résulterait de la simple addition des deux vitesses airlift seul et agitation seule.

**N. Lalaoui Bendjbellah /2000/** a consacré son travail à une étude hydrodynamique globale dans un réacteur à gazosiphon à recirculation externe pourvu d'une vanne placée sur la descente du liquide. Le système air/eau a été utilisé. Dans un premier temps, elle a entrepris une étude des paramètres hydrodynamiques globaux : vitesse de circulation du liquide, rétention de gaz et temps de mélange du liquide. L'augmentation de la hauteur du réacteur entraîne une augmentation de la vitesse du liquide, qui à son tour engendre une légère diminution de la rétention de gaz. Par ailleurs, la diminution du pourcentage d'ouverture de la vanne a une grande influence sur les paramètres globaux : vitesse superficielle du liquide et rétention de gaz au travers de la force motrice de circulation du liquide, ce qui affecte fortement le mélange de la phase liquide. En revanche, le pourcentage d'ouverture de la vanne affecte peu les transitions de régime. La comparaison de deux systèmes de distribution de gaz a montré que l'utilisation d'un distributeur multi-orifice permet l'obtention de rétention de gaz et de vitesse de liquide plus grandes que celles générées par un distributeur à orifice unique.

**Benkhelifa** /2000/ s'est intéressée à la caractérisation de l'écoulement d'une eau déminéralisée et de deux solutions visqueuses à savoir : le glucose et le saccharose dans un réacteur torique monté verticalement de volume 5.25 litres en fonctionnement fermé et ouvert. Cette étude a été réalisée pour deux régimes d'écoulement : laminaire et turbulent. En outre, elle a étudié l'influence du débit d'entrée/sortie sur la circulation au sein du réacteur. Elle a montré pour un rapport du temps de passage sur le temps moyen de circulation en fonctionnement ouvert inférieur à 20, que le débit d'entrée sortie accélère la réaction.

**S. Mousous** /2000/ a caractérisé l'écoulement et le mélange de deux réacteurs fermés de même volume, l'un torique et l'autre agité. En utilisant des solutions visqueuses à base de glycérine, il a constaté que pour une viscosité donnée l'augmentation de la vitesse fait diminuer les temps de mélange et de circulation.

**Couvert** /2000/, a effectué une étude hydrodynamique dans un réacteur airlift rectangulaire destiné au traitement d'une eau usée. Les paramètres étudiés sont : la rétention gazeuse, le diamètre des bulles, la vitesse du liquide et le coefficient de dispersion axial pour diverses conditions géométriques et opératoires. A l'issue de son travail, elle a trouvé que la rétention gazeuse varie peu axialement dans la partie ascendante au-delà d'une zone de perturbation d'environ 50 à 100 cm liée à la présence du distributeur de gaz. Par contre, elle augmente linéairement avec la hauteur dans la partie descendante. En outre, elle a montré que la vitesse de circulation du liquide est une fonction croissante de la vitesse superficielle du gaz, elle devient constante pour une vitesse de gaz de 4.5 cm/s. Par ailleurs, les paramètres globaux du mélange ( $t_m$ ,  $t_m/t_c$ ,  $D_{ax}$ ) dépendent aussi de la vitesse superficielle gazeuse critique. Leur évolution reste croissante avec  $U_g$  puis devient constante au-delà de la vitesse critique.

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 : nature des régimes d'écoulement, coefficients de transfert et aire interfaciale.

La plupart des auteurs (Gourich, 2006; Fransolet 2005) 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:

$$\varepsilon_g \propto U_g^n$$

### II.3

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.

Tableau II.1. Corrélations relatives à l'hydrodynamique dans les réacteurs gaz/liquide

référence	Corrélations	conditions
Gourich et al (2005)	$\varepsilon_{gr} = 0,83 u_g^{0,85}$	Airlift: $A_d/A_r = 1$ , système air –eau
Couvert et al (2001)	$\varepsilon_{gr} = 1,81 u_g^{1,03}$	Airlift avec $A_d/A_r = 1$ , système air –eau
K. Thaker et al (2007)	$\varepsilon_g = 1,95 u_g^{0,83}$	Colonne à bulles, système air-eau
M.Elena Diaz (2008)	$\varepsilon_g = 0,94 u_g^{0,81}$	Colonne à bulles, système air-eau

A partir des travaux consacrés à l'étude de l'influence des paramètres opératoires, des dimensions géométriques de la colonne et du type du distributeur sur la rétention gazeuse en colonnes à bulles, les conclusions suivantes peuvent être tirées:

- La vitesse superficielle du gaz a un effet notable sur  $\varepsilon_g$  surtout en régime homogène (Gourich, 2006; Fransolet 2005).
- En général, la rétention gazeuse diminue lorsque la viscosité du liquide augmente. Il semble qu'il n'y ait plus d'influence de la viscosité au-delà de 0,04 à 0,05 Pa s (Fransolet et coll., 2005). La diminution de  $\varepsilon_g$  est reflétée par diverses corrélations de la littérature intégrant l'effet de la viscosité (Fransolet et coll, 2005). La rétention gazeuse augmente avec la densité du gaz (Wilkinson et van Dierendonck, 2000). L'augmentation de la pression opératoire se traduit aussi par celle de  $\varepsilon_g$  jusqu'à  $5 \times 10^6$  Pa. A partir de cette valeur, l'influence de la pression devient négligeable. De même,  $\varepsilon_g$  augmente avec la température (Lin et coll.,2000).
- Le diamètre de la colonne n'a que peu d'effet sur  $\varepsilon_g$  s'il est supérieur ou égal à 10 cm (Vandu et Krishna, 2004; Jin et coll., 2005). De même, l'augmentation de la hauteur non aérée du liquide n'a qu'une très faible influence sur  $\varepsilon_g$  (Ruzicka et coll., 2001b; Jin et coll., 2005).
- Le distributeur de gaz joue un rôle essentiel sur l'évolution de  $\varepsilon_g$  surtout en régime homogène car il conditionne la taille des bulles primaires et l'uniformité de leur distribution sur la section de la colonne. En revanche, son influence est très faible en régime hétérogène établi (Vial coll., 2001).

En conclusion, on peut dire que la conception d'un réacteur gaz/liquide est essentiellement axée sur l'hydrodynamique qui est un facteur clé et joue un rôle très important sur ses performances.

### II.3. Etude du transfert de matière des réacteurs gaz/liquide

Contrairement aux études citées précédemment, plusieurs auteurs se sont intéressés à l'étude du transfert de matière des réacteurs gaz/liquide. 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. Nous synthétisons ici les grandes lignes.

**R. Maceiras et al /2007/** ont étudié expérimentalement le transfert de masse par la technique électrochimique pour tenir compte de l'effet des bulles sur le transfert de masse. En disposant plusieurs microélectrodes sur la surface intérieure de la colonne à bulles, il a obtenu le profil du coefficient local de transfert de masse. Le coefficient du transfert local est élevé au fond de la colonne où la taille des bulles est grande puis décroît lors de la montée des bulles le long de la colonne. En haut de colonne, le coefficient de transfert de masse prend sa valeur minimale où les bulles sont petites. Il ressort que la taille des bulles influe sur le coefficient de transfert de masse local.

**H.Dhaouadi et al /2007/** proposèrent une remarquable étude analytique du transfert de matière gaz/liquide où le coefficient volumétrique de transfert de masse a été estimé. Dans un deuxième lieu, ils ont adopté la méthode numérique pour valider les résultats analytiques et fournir des données dans le domaine non couvert par l'analyse théorique.

Dans les réacteurs gaz/liquide, la taille des bulles joue un rôle décisif sur les résultats de transfert de matière. Plus la taille des bulles est petite, plus le transfert de matière est bénéfique. Cette étude qui est l'œuvre de **Kulkarni.A.A et al /2007/**, ont étudié l'influence d'un distributeur de gaz sur le transfert de masse. Ils ont mesuré le coefficient de transfert de l'oxygène à différents débits d'air et à différentes vitesses d'agitation. Par l'utilisation de ce distributeur, il a été observé que le coefficient de transfert de l'oxygène augmente de 10% à 40%. Il s'avère que le distributeur de gaz peut améliorer le transfert de l'oxygène.

**K.Edouard et al /2005/** ont proposé de coupler l'aération par système « air-lift » à la recirculation externe de liquide en vue de contrôler séparément l'aération et le mélange dans un bioréacteur membranaire destiné à la nitrification partielle d'eaux ammoniacales. Les résultats de cette étude ont montré que le coefficient de transfert de matière gaz/liquide est

contrôlé à la fois par le débit d'air injecté et par le débit liquide recirculé. Ils ont corrélé cette double influence par :

$$K_L a = (aU_1 + b)U_g^\beta$$

II.3

avec  $a, b$  et  $\beta = (11.1635, 0.0902, 0.6434)$  ont été estimés par la méthode stastique du « Bootstrap ». Cette dernière est basée sur la réplication d'un échantillon initial de données statistiques  $U_L, U_g$  suivie de tirages avec remises dans l'échantillon virtuel global obtenu.

**B.Gourich et al /2004/** ont étudié les caractéristiques de transfert de masse gaz/liquide pour un réacteur à air ascendant rectangulaire divisé. Une recirculation partielle des petites bulles dans la colonne montante a été observée quand  $U_g$  est supérieure à 0.03 m/s, qui est attribuée à l'utilisation d'un seul orifice pour la distribution de la phase gazeuse. Les valeurs de  $K_L/d_B$  (rapport de transfert de masse côté liquide sur diamètre des bulles) sont plus grandes que celles des études antérieures, en raison de la recirculation partielle de la phase gazeuse dans la colonne montante. L'utilisation d'un distributeur de gaz favorisant cette recirculation partielle semble adéquate pour le transfert de masse dans les réacteurs à air ascendant rectangulaire divisé.

**W.Bang et al /2000/** ont étudié expérimentalement l'effet d'un agitateur sur le transfert de masse à l'intérieur d'un contacteur airlift à boucle interne. Les résultats ont montré que l'utilisation d'un agitateur rend le transfert gaz/liquide bénéfique, puisque pour certaines conditions opératoires, le coefficient de transfert est multiplié par quatre par rapport à celui obtenu sans agitation. L'analyse de diverses contributions énergétiques dans l'appareil montre que la présence de l'agitateur est justifié uniquement dans le cas où le débit de gaz doit rester faible.

**H.Umar /2000/** a consacré son travail à une étude de transfert de masse dans un réacteur gazosiphon à boucle interne pour des milieux gaz/liquide (visqueux ou non) et des milieux gaz/liquide/solide. Deux spécificités importantes ont été étudiées : utilisation d'un agitateur mécanique et de mélangeurs statiques dans la jambe montant du réacteur. Cette étude portant sur l'identification du coefficient volumétrique de transfert de matière a montré que l'agitation mécanique combinée à l'utilisation de mélangeurs statiques provoque une réduction des tailles des bulles qui permet un gain de transfert de masse en particulier pour de faibles débits de gaz. En ce qui concerne les milieux gaz/liquide/liquide, les résultats obtenus sont nettement différents de ceux enregistrés pour un milieu gaz/liquide/solide. L'auteur

conclut que les performances de transfert gaz/liquide dépendent essentiellement de la nature de la phase organique mise en jeu et ne sont pas directement liées à la rétention gazeuse.

Plusieurs travaux concernant le transfert de matière gaz-liquide dans les colonnes à bulles ont été publiés (Vandu et Krishna, 2004), 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. (Gourich, 2005).

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

- $K_{La}$  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 (P.Cécile, 2005). De même, Akita et Yoshida (200) ont noté que  $k_{La}$  diminue lorsque la tension superficielle du liquide s'accroît.

- 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 (Eickenbusch et coll., 2000).

## II.4. Modélisation des réacteurs gaz/liquide

Comme il a été mentionné en introduction, la connaissance de l'hydrodynamique, transfert de masse et de chaleur permet le développement de modèles rigoureux. Ces modèles sont utiles dans la conception et dans la mise à l'échelle et la caractérisation des réacteurs gaz/liquide, et ils fournissent une méthode directe pour la prédiction du comportement

hydrodynamique dans ces réacteurs. Des études ayant suivies celles citées ci-dessus ont été publiées concernant la modélisation des réacteurs gaz/liquide.

Afin de simuler l'hydrodynamique et le transfert de masse des réacteurs gaz/liquide, les deux approches souvent utilisées sont : l'approche systémique et la mécanique des fluides numériques (CFD). Cette dernière est une branche hybride de la mécanique et des mathématiques, à croissance rapide, doit certainement être considérée comme un outil potentiel efficace et très utile dans le domaine du génie chimique.

**Martin et al /2008/** ont étudié l'hydrodynamique générée par différents types de mobiles d'agitation (turbines à pâles inclinées, turbines modifiées, turbines Rushton et hélice marine) dans une cuve agitée ainsi que l'influence de la distance qui les séparent du diffuseur de gaz.

Pour cela, la mécanique des fluides numériques et la technique vidéo haute performance ont été utilisées. Ils ont analysé l'influence du type de mobile d'agitation sur les caractéristiques des bulles ainsi que les dispersions générées correspondantes. Ils ont constaté que la dispersion générée par chaque type de mobile d'agitation dépend essentiellement de sa géométrie qui est responsable du mécanisme de rupture et est conditionnée par un processus chaotique notamment l'effet de bullage. Ils sont parvenus à conclure que la rupture des bulles de petite taille est difficile. Par contre les plus grosses bulles se déforment facilement et leur fractionnement est aisé.

Poursuivant sur le même thème, **P.Moilanen et al /2008/** qui ont modélisé l'effet de la géométrie de trois types de mobiles d'agitation à savoir : Rushton, phasejet et Combijet sur les performances du transfert de matière gaz/liquide. L'étude a montré que la géométries de ces types de mobiles d'agitation influe sur le transfert de masse. Ils ont utilisé les deux approches suivantes : MUSIG (multiple size group) et BND (bubble number density).

**Y. Le Moullec et al /2008/** ont utilisé l'approche Euler-Euler pour simuler l'écoulement dans un réacteur gaz/liquide. Deux modèles ont été testés : le modèle k- $\epsilon$  et le modèle RSM (Reynolds Stress Model). Les résultats numériques ont été validé par LDV( laser doppler velocimetry). Les résultats montrent que la dispersion est dûe principalement à la turbulence. Le modèle RSM a prédit la dispersion contrairement au modèle standard k- $\epsilon$ .

**R.Lemoine et al /2008/** ont développé un algorithme basé sur l' EANNM (empirical and artificial neural network models) pour prévoir les paramètres hydrodynamiques (rétention gazeuse globale, diamètre de sauter des bulles) ainsi que les paramètres de transfert de matière

(coefficient volumétrique de transfert de masse, aire interfaciale) dans les colonnes à bulles opérant sous les conditions industrielles. Cet algorithme est aussi employé pour dégager l'effet des variables opératoire (vitesse superficielle du gaz, température, pression partielle du gaz et la concentration du liquide) sur les caractéristiques hydrodynamiques et celles de transfert de masse. Les prédictions ont montré que l'augmentation de la tension superficielle du liquide a augmenté de manière significative le diamètre de saut des bulles, la rétention gazeuse globale et le coefficient volumétrique de transfert de l'oxygène. L'augmentation du diamètre moyen de saut des bulles et la diminution de la rétention gazeuse globale résultent d'une diminution de l'aire interfaciale gaz/liquide et coefficient volumétrique de transfert de l'oxygène. Il ressort que les paramètres hydrodynamiques et du transfert de masse sont contrôlés à la fois par la rétention gazeuse des petites bulles et par l'aire interfaciale gaz/liquide.

**L.Chriastel et al /2006/** ont présenté un nouveau modèle de vitesse de circulation des liquides dans un réacteur à air ascendant (ALR). Le modèle repose sur le bilan énergétique pour la boucle d'écoulement couplée à une théorie de flux de dérive d'un système gaz/liquide d'écoulement diphasique, considérant un régime d'écoulement bullant. Les valeurs prédites des vitesses de circulation du liquide par le modèle développé sont comparées aux résultats expérimentaux obtenus dans un réacteur à air ascendant à boucle interne et aux résultats obtenus dans la littérature scientifique. Le modèle prédit très bien les résultats expérimentaux. L'étude montre que la disposition appropriée des différentes parties de bioréacteur interne peut influencer positivement la vitesse de circulation de liquide pour la même consommation d'énergie.

**Khopkar et al /2006/** ont utilisé la mécanique des fluides numériques pour simuler l'écoulement généré par trois turbines à pompage bas dans une cuve agitée. Pour cela le modèle standard  $k-\varepsilon$  a été utilisé. Des corrections ont été portées aux forces d'entraînement pour simuler les différents régimes d'écoulement. Le modèle numérique a pu reproduire les différents régimes d'écoulement observés expérimentalement. En outre, la simulation numérique du traceur a permis d'étudier l'influence des différents régimes d'écoulement sur l'évolution du temps de circulation. Par conséquent, le modèle dynamique a permis l'obtention de résultats prometteurs et apparaît capable de prédire l'écoulement des systèmes gaz/liquide et ce quelque soit le régime d'écoulement.

**D.Darman et al /2005/** ont tenté avec succès de développer un modèle mathématique pour modéliser l'écoulement dans un réacteur de type colonne à bulles. Avec ce modèle, ils

ont pu prédire la vitesse des bulles ainsi que la variation du diamètre des bulles en fonction du temps. La concordance entre les résultats de la simulation et les résultats expérimentaux de Deen et al /2001/ est bonne.

**Zhang et al /2005/** ont développé un modèle mathématique pour modéliser l'écoulement dans un réacteur de type airlift. Pour cela, ils ont appliqué le modèle à dispersion axial dans deux zones distinctes : zone ascendante et descendante. Notons que l'hydrodynamique de chaque zone est différente. Ils ont considéré que l'injection du traceur sous forme d'impulsion peut être considérée comme un écoulement dans un tube infini et consiste à une alternance entre les différentes zones précitées.

## **II.5.Conclusion**

L'étude bibliographique non exhaustive qui est réalisée, permet de constater que les recherches relatives à l'hydrodynamique et au transfert de matière des réacteurs diphasiques gaz/liquide sont nombreuses. Néanmoins, beaucoup plus rares sont les études qui portent simultanément sur la caractérisation hydrodynamique de ces réacteurs et sur la mesure des transferts de masse. Nous essayerons d'expliquer physiquement les modifications de comportements hydrodynamiques générées par les variations de paramètres opératoires sur quatre types de réacteurs gaz/liquide à savoir : canal, tore, colonne à bulles et un réacteur airlift à recirculation interne. Ainsi les conséquences associées en terme de transfert de matière gaz/liquide dans le cas d'une colonne d'absorption.

# Chapitre III

## Modélisation hydrodynamique

### III.1.Introduction

Il est bien connu que la grande majorité des écoulements de fluides rencontrés dans l'industrie sont polyphasiques. Parmi les nombreuses configurations possibles, le régime d'écoulement gaz-liquide à bulles est un des plus fréquents en industrie, puisqu'il conditionne le fonctionnement de nombreux réacteurs diphasiques. La conception de ces réacteurs utilise habituellement des méthodes relativement globales, qui s'appuient très largement sur l'étude expérimentale de modèles à échelle réduite. Relativement récemment s'est développée une approche plus locale, fondée sur la simulation numérique des écoulements. Que peut-on attendre de cette dernière ? Il semble que la perspective la plus immédiate porte sur l'analyse du fonctionnement des réacteurs. En effet, la simulation numérique offre un outil de caractérisation de l'hydrodynamique interne, qui permet d'identifier des problèmes de fonctionnement liés à la géométrie de telle ou telle partie du réacteur.

Une deuxième application de la simulation numérique est l'optimisation des réacteurs. Si l'état actuel de la modélisation ne permet pas encore de faire fonctionner virtuellement un réacteur purement numérique, il est en revanche possible d'améliorer localement une géométrie afin d'améliorer les performances globales. Les espoirs fondés sur la modélisation numérique des écoulements diphasiques sont évidemment tributaires de l'avancée des connaissances dans ce domaine. Il est cependant à prévoir un développement de plus en plus rapide de ce domaine, comme en témoigne l'apparition de logiciels commerciaux permettant déjà de calculer certains types d'écoulements diphasiques.

Ce travail a été consacré à l'étude des caractéristiques hydrodynamiques de quatre types de réacteurs gaz-liquide à savoir un réacteur canal, un réacteur torique, une colonne à bulles et un réacteur airlift rectangulaire à recirculation interne.

### III.2.Modélisation de l'hydrodynamique globale du réacteur canal

Pour pouvoir prévoir le comportement d'un réacteur, il faut savoir ce qui se passe à l'intérieur de celui-ci, c'est-à-dire connaître la nature de l'écoulement des phases. Il faut être capable de suivre l'évolution d'une particule de fluide (à la limite chaque molécule) à travers le réacteur afin de connaître son trajet, sa vitesse, pour quantifier le

rôle macroscopique de l'écoulement sur les performances du réacteur du point de vue de la réaction chimique ou biochimique. C'est ce qui est appelé couramment le concept de macromélange.

Cette section détaille l'étude de l'hydrodynamique globale qui a été menée. Les résultats de la modélisation seront confrontés à l'expérience inspirée des travaux de Yann Le Moullec et ses collaborateurs [15]. Ils ont étudié l'hydrodynamique locale à travers des champs de vitesse par vélocimétrie laser Doppler. Des mesures de distribution de temps de séjour complètent le jeu de données utilisé pour, d'une part, valider un modèle hydrodynamique de type systémique et d'autre part vérifier la prédictibilité de la mécanique des fluides numérique du point de vue de l'hydrodynamique globale.

Le montage expérimental utilisé par Yann Le Moullec pour l'étude hydrodynamique se compose d'un réacteur rectangulaire d'une longueur totale déployée de 102 mètres pour une largeur de 9m et une hauteur de 3,6m. Il est alimenté en eau par une pompe centrifuge dont le flux débitant est partiellement by-passé pour obtenir le débit souhaité et contrôlé par un rotamètre. Des tubes d'acier perforés d'orifices d'un millimètre tous les centimètres, situés au pieds des parois du réacteur, assurent l'admission d'air, issu du circuit comprimé. Le réacteur a été construit en plexiglas pour permettre les mesures de vélocimétrie laser Doppler. La figure (III.1) présente un schéma de principe simplifié du montage.

Dans un souci de simplification, le réacteur sera considéré comme un bassin parallélépipédique de dimension 102m×9m×3.6m, comme le montre la figure III.1.

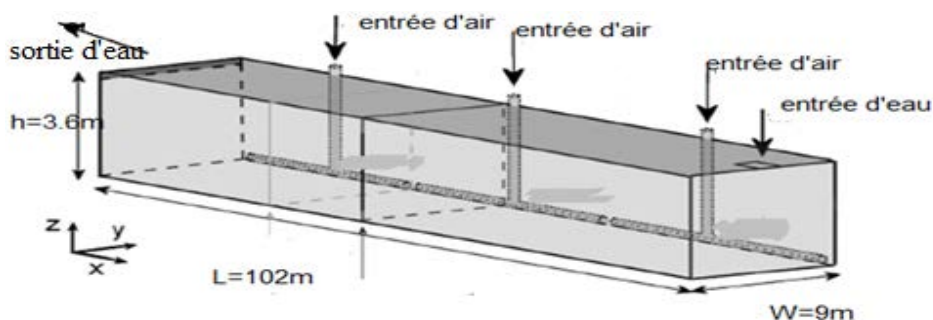


Figure.III.1. Schéma simplifié du réacteur canal

### III.2.1. Définition des critères de l'étude

#### III.2.1.1. Distribution des temps de séjour

Les différents essais réalisés par Yann Le Moulec et al.[15] sont présentés sous la forme de distribution des temps de séjour (DTS), notée  $E(t)$ . Elle est calculée à partir des mesures expérimentales de la concentration temporelle du traceur au point de prélèvement. La Figure (III.2) présente un exemple de distribution des temps de séjour obtenue pour un débit de liquide de  $1650\text{m}^3/\text{h}$  et un débit de gaz linéique de  $0.0175\text{m}^3/\text{m/s}$ .

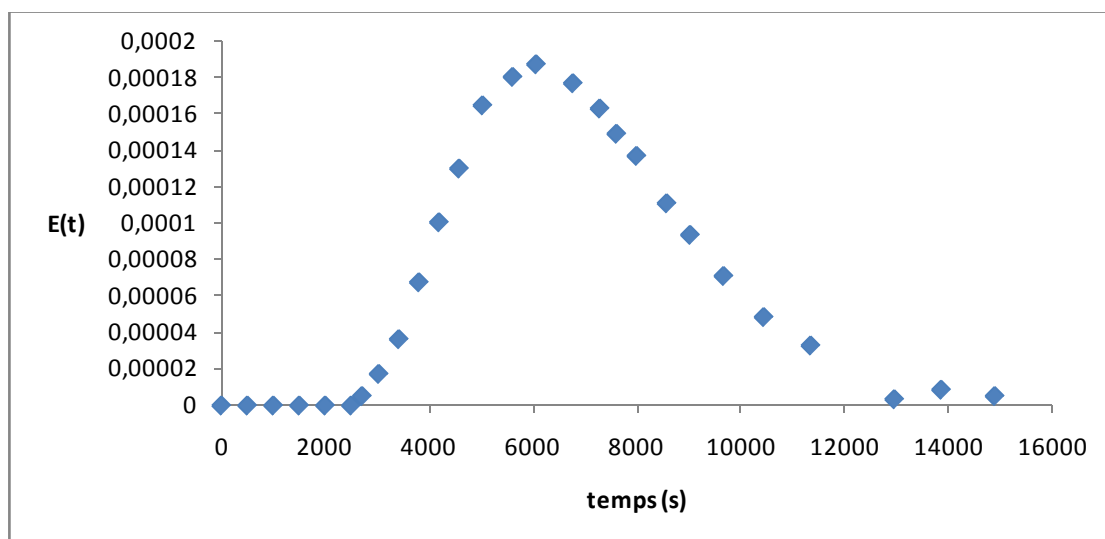


Figure.III.2. Courbe de DTS expérimentale [15]

#### III.2.1.2. Temps caractéristiques et coefficients d'étalement

Pour l'exploitation des résultats expérimentaux, le temps de séjour moyen  $t_s$  a été déterminé par la relation suivante :

$$t_s = \int_0^{\infty} tE(t)dt \approx \sum_{i=0}^{\infty} t_i E(t_i)\Delta t_i \quad \text{III.1}$$

De même, le temps médian  $t_{0,5}$  a été déterminé ; il correspond au temps nécessaire à la récupération de 50 % du traceur en sortie du réacteur. Ce dernier est calculé à partir de la courbe cumulée de la distribution des temps de séjour,  $F(t)$  (Figure.III.3). Cette courbe permet de définir un coefficient d'étalement noté  $S^*$  et défini comme suit :

$$S^* = \frac{t_{0,9} - t_{0,1}}{t_{0,5}}$$

III.2

Où  $t_{0,9}$  et  $t_{0,1}$  représentent les temps nécessaires à la récupération de respectivement 90 et 10 % du traceur.

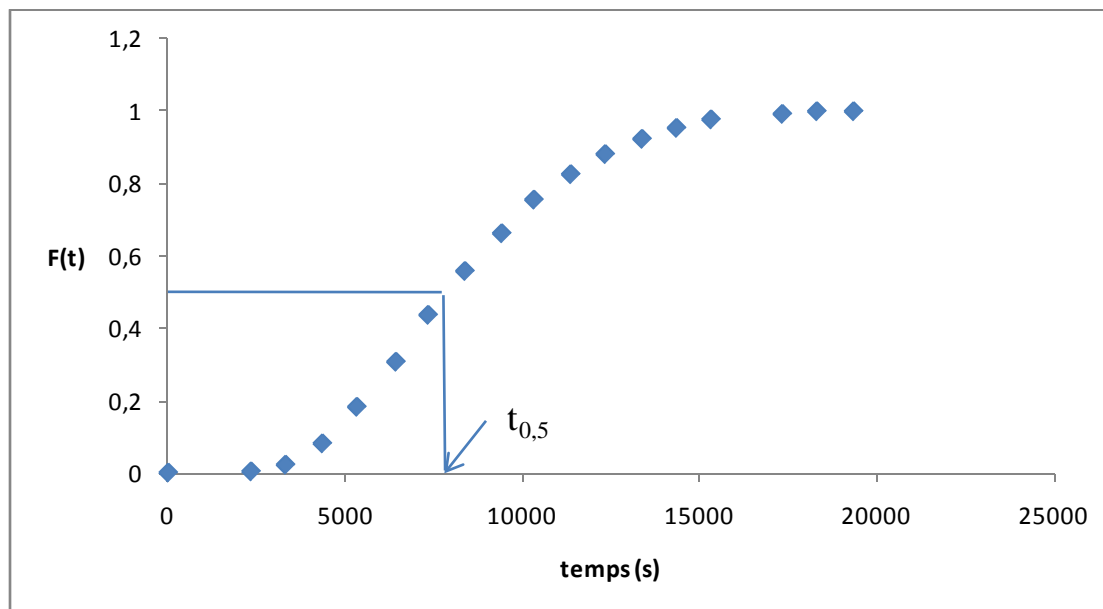


Figure III.3. Courbe cumulée de la DTS pour un débit de liquide de 1280m<sup>3</sup>/h

### III.2.2. Présentation et discussion des résultats

Dans cette partie, nous allons étudier l'influence du débit de liquide sur les différents temps de séjour ainsi que sur le coefficient d'étalement.

#### III.2.2.1. Analyse des résultats

Pour cette étude, l'influence du débit de liquide a été menée. L'effet de ce paramètre a été étudié pour trois débits de liquide : 1280, 1650 et 2200m<sup>3</sup>/h tout en gardant constant le débit de gaz linéique à 0,0175m<sup>3</sup>/m/s. Les DTS obtenues sont représentées dans la figure III.4.

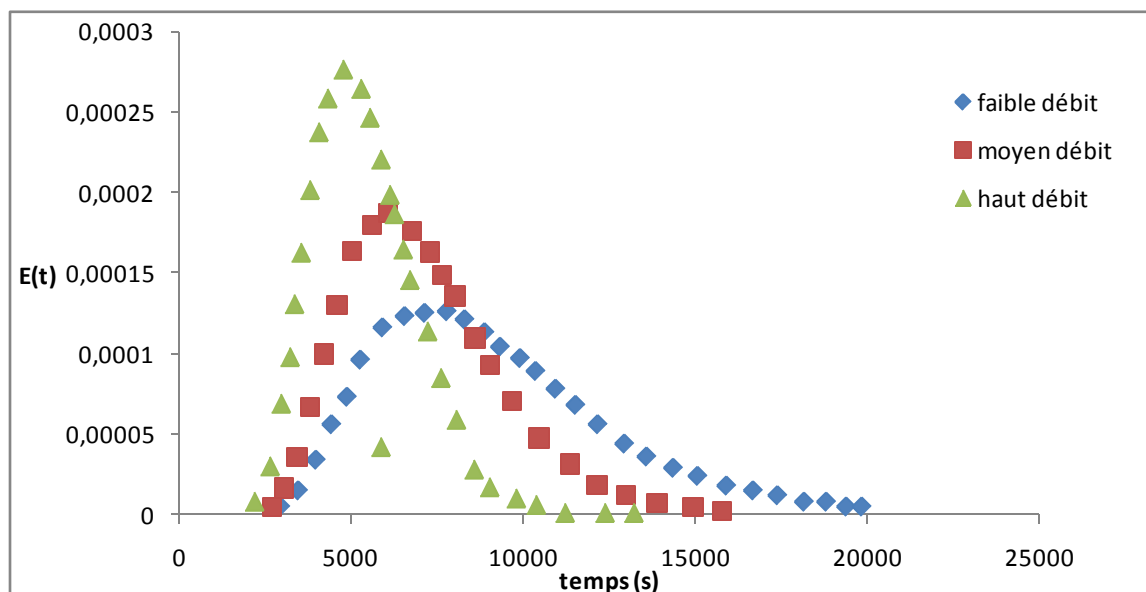


Figure III.4. Courbes expérimentales de DTS obtenues pour trois débits de liquide [15]

L'observation de ces figures montre que le débit de liquide a un effet notable sur le comportement du réacteur gaz/liquide. Son augmentation de 1280 à 2200 m<sup>3</sup>/h se traduit par une diminution du temps de séjour médian ( $t_{0,5}$ ) de 8210 à 4900 s (Figure III.5). Concernant les temps de séjour moyens, calculés par l'équation III.1, l'allure observée est identique à celle des temps médians avec des valeurs légèrement supérieures.

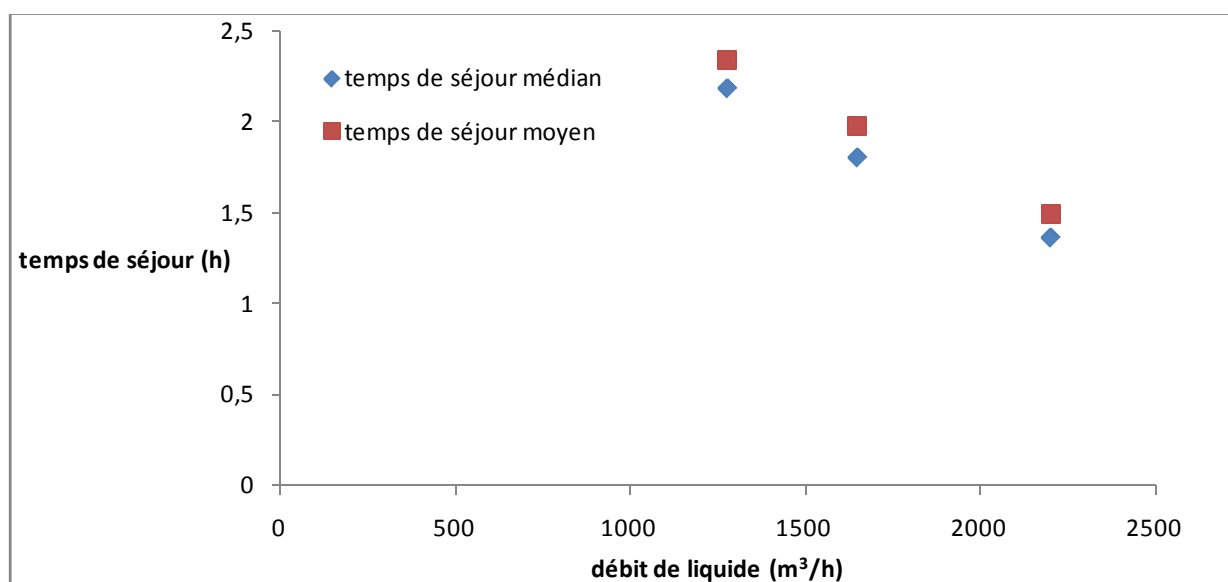


Figure III.5. Evolution des temps de séjour en fonction du débit de liquide.

Les distributions des temps de séjour (Figure III.4) apparaissent beaucoup plus resserrées à 2200 m<sup>3</sup>/h qu'à 1280m<sup>3</sup>/h. L'étalement de ces distributions est quantifié par le coefficient d'étalement, noté  $S^*$  (Equation III.2). L'influence du débit de liquide sur ce coefficient est représentée sur la Figure III.6. Elle montre que ce critère diminue avec l'augmentation du débit de liquide. Autrement dit, la distribution devient d'autant plus serrée que le débit de liquide est élevé.

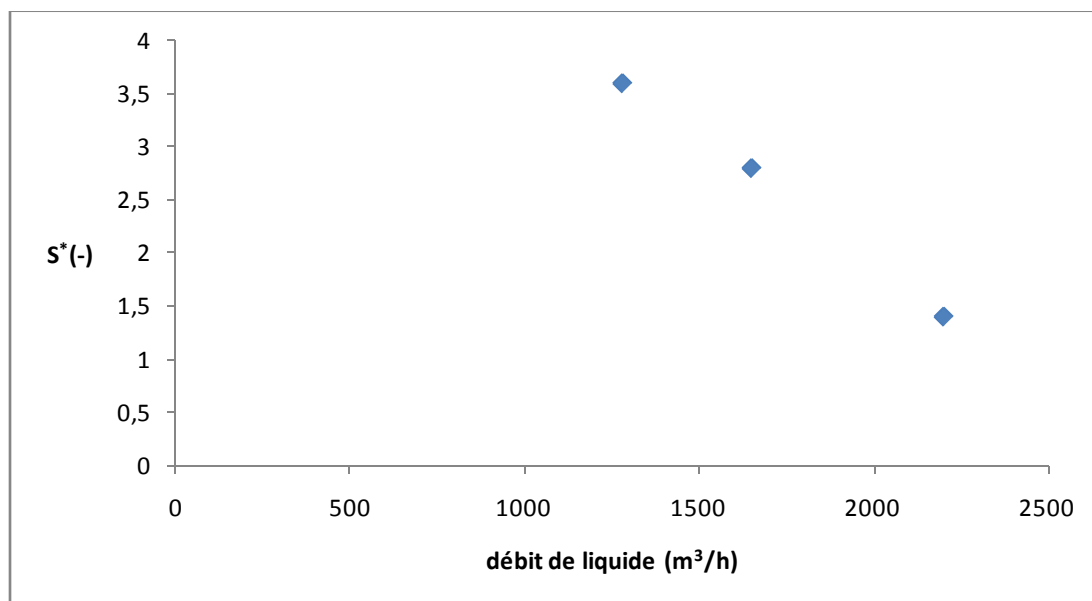


Figure III.6. Evolution du coefficient d'étalement,  $S^*$  en fonction de débit de liquide

### III.2.3.Modélisation systémique de l'écoulement

Dans ce paragraphe, nous présentons la modélisation des données expérimentales puis, l'effet du débit de liquide sur les DTS.

#### III.2.3.1.Principe de la modélisation des écoulements réels

Le principe de la modélisation des écoulements réels consiste à associer des types d'écoulements, correspondant à des réacteurs idéaux possédant des comportements particuliers, selon un schéma de fonctionnement qui met en œuvre différents modes d'enchainements, comme indiqué dans le tableau suivant.

Tableau III.1. Principes de la modélisation des réacteurs réels

Types d'écoulements	Modes d'enchainements
Écoulement piston	Série
Écoulement parfaitement agité	Parallèle
Zone morte	Recyclage
Court-circuit	Echange

### III.2.3.2. Choix du modèle

Le modèle proposé doit être bâti en essayant de se rapprocher le plus possible de l'écoulement réel. Il ne doit pas être toutefois trop complexe. Plus le modèle choisi est complexe, plus le nombre de paramètres est important. Un modèle comportant plus de trois paramètres peut être considéré comme complexe. Avec des modèles complexes, les expressions analytiques des fonctions de transfert sont parfois difficile à manipuler. Aussi, il est préférable de proposer un modèle relativement simple à un ou deux paramètres, tout en étant conscient que celui-ci ne représente pas parfaitement la réalité, capable de donner de bonnes prédictions.

Afin d'obtenir un modèle réaliste, il faut s'appuyer sur quelques idées simples suggérées par la physique d'une part, et sur la construction du réacteur d'autre part. La figure III.7 présente les DTS des réacteurs piston, parfaitement agité, de la cascade simple, et de la cascade avec échange à une zone stagnante. L'observation des courbes permet de se convaincre que la plupart des réacteurs réels ont des comportements voisins de ces cas limites idéaux, ou bien peuvent en dériver par des combinaisons judicieuses.

Il est **très difficile** d'explicitier une **méthodologie précise** de choix du modèle et ceci en raison du nombre important de configurations d'écoulement possibles. Cependant, certaines règles permettent de définir une stratégie générale. Par exemple,

l'allure générale des courbes permet d'estimer si l'écoulement est plutôt piston (allure de la DTS proche de la réponse à l'impulsion de Dirac) ou plutôt parfaitement agité (allure proche d'une exponentielle).

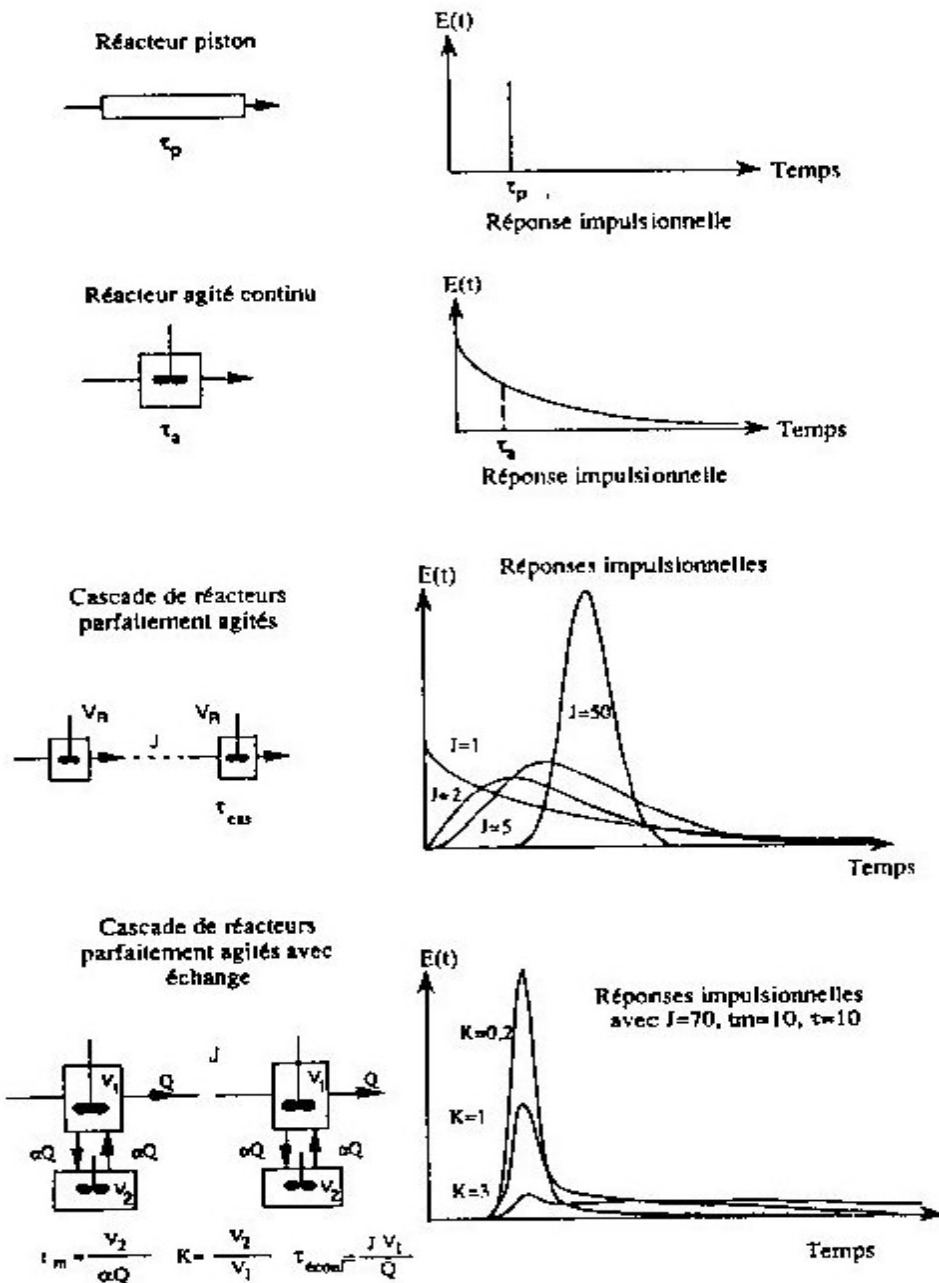


Figure III.7. DTS pour différents réacteurs ou association de réacteurs (Leclercet coll.1995)

Le choix du modèle le plus approprié passe obligatoirement par l'essai de différentes configurations pouvant prédire au mieux les essais expérimentaux. L'allure

expérimentale des DTS est toujours similaire. Cette allure de courbe apparaît être intermédiaire entre la réponse type d'un réacteur piston et celle d'un réacteur parfaitement agité.

L'allure des courbes expérimentales (figure III.4), indique un type d'enchaînement en série (RCPA en série) ou bien écoulement piston avec dispersion axiale. Avec le modèle J RCPA en série, la détermination du nombre de réacteurs parfaitement agités en série (J) s'effectue en utilisant l'expression de la variance donnée par :  $\frac{\sigma^2}{\tau^2} = 1/J$ . (Villermux). Compte tenu de la valeur de la variance de 0.1330 obtenue pour un débit de liquide de 1280 m<sup>3</sup>/h, une première estimation donnerait J compris entre 7 et 8. Pour lever l'indétermination, la méthode des moindres carrés permet de minimiser l'écart entre la courbe théorique et la courbe expérimentale. Pour cela, il suffit de calculer l'écart absolu pour chaque valeur de J comprise entre 6 et 8 par la formule suivante :

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\sum [E(\theta)_{\text{théorique}} - E(\theta)_{\text{expérimental}}]^2}{N-1}} \quad \text{III.3}$$

Avec N : nombre de points expérimentaux.

La valeur optimale de J est celle qui correspond à l'écart minimal. Pour un débit de liquide de 1280 m<sup>3</sup>/h, J est égal à 7.

Pour le modèle piston avec dispersion axiale, la détermination du nombre de pecllet Pe s'effectue en utilisant l'expression de la variance donnée par :

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} = \frac{2}{Pe} + \frac{8}{Pe^2} \quad \text{III.4}$$

Ce qui conduit à une valeur estimée de Pe = 15,13 pour un débit de liquide de 1280m<sup>3</sup> /h.

Le tableau suivant résume l'ensemble des paramètres des deux modèles testés pour les différents débits de liquide.

Tableau III.2. Paramètres des deux modèles PDA et J RCPA en série

Débit de liquide ( $\text{m}^3/\text{h}$ )	Variance réduite	Nombre de Peclet $Pe$	Nombre de réacteurs RCPA en série
1280	0,1330	15,13	7
1650	0,1033	19,41	9
2200	0,0908	22,02	11

La comparaison des modèles aux points expérimentaux est faite sur les figures ci-dessous.

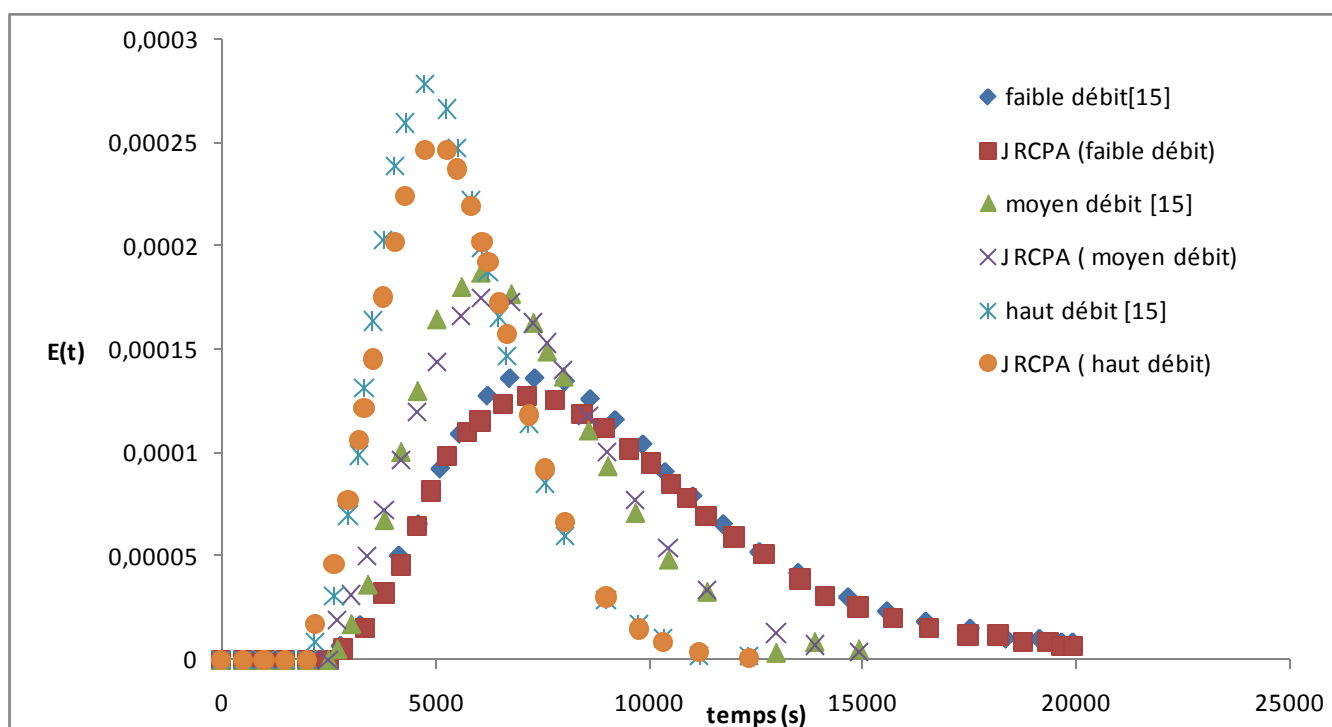


Figure III.8. Test du modèle J RCPA en série

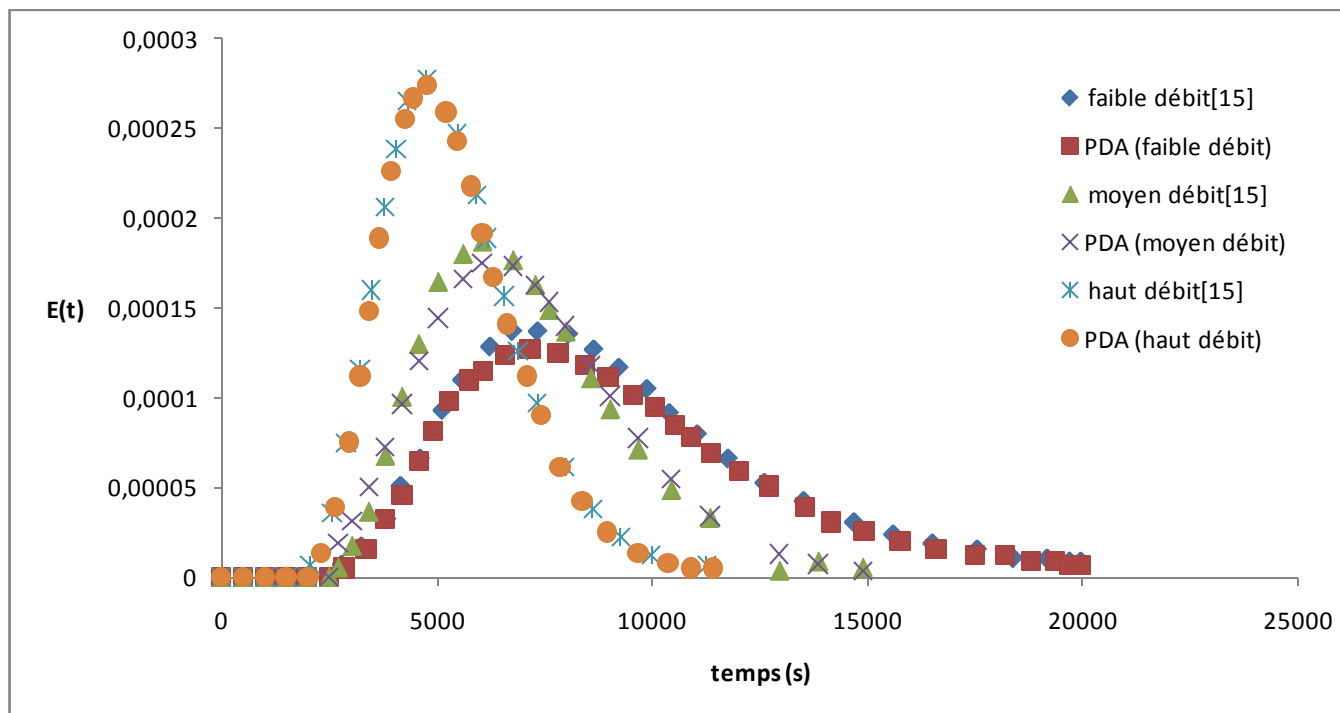


Figure III 9. Test du modèle piston avec dispersion axiale.

### III.2.3.3. Diagnostic de mauvais fonctionnement

La présence de zones mortes et de courts circuits est à supprimer sur un réacteur. Il faut modifier les conditions opératoires pour les réduire et les supprimer. Pour cela, nous avons comparé les valeurs du temps de passage à celles du temps de séjour pour chaque débit de liquide examiné que nous avons regroupé dans le tableau III.3. Le temps de séjour moyen a été calculé à l'aide de la formule III.1 et le temps de passage est donné par  $\tau = V_R/Q$  avec  $Q$  : débit du fluide.

Tableau III.3. Comparaison entre le temps de séjour moyen et le temps de passage.

Débit de liquide (m <sup>3</sup> /h)	Temps de séjour moyen (h)	Temps de passage (h)
1280	2,24	2,58
1650	1,98	2
2200	1,53	1,50

Il s'avère que le réacteur fonctionne correctement pour les moyen et haut débit de liquide. Pour le faible débit, le temps de séjour est légèrement inférieur au temps de passage. Cela indique la présence d'un très faible volume mort. Enfin, pour que l'efficacité soit meilleure, on recommande d'utiliser le réacteur en mettant en marche les débits de liquide de 1650 et 2200 m<sup>3</sup>/h.

#### III.2.3.4. Interprétation des résultats de modélisation

La Figure III.10 montre que le nombre de Péclet augmente avec le débit de liquide. Cela signifie que l'écoulement au sein du réacteur tend vers un écoulement piston lorsque le débit de liquide est augmenté.

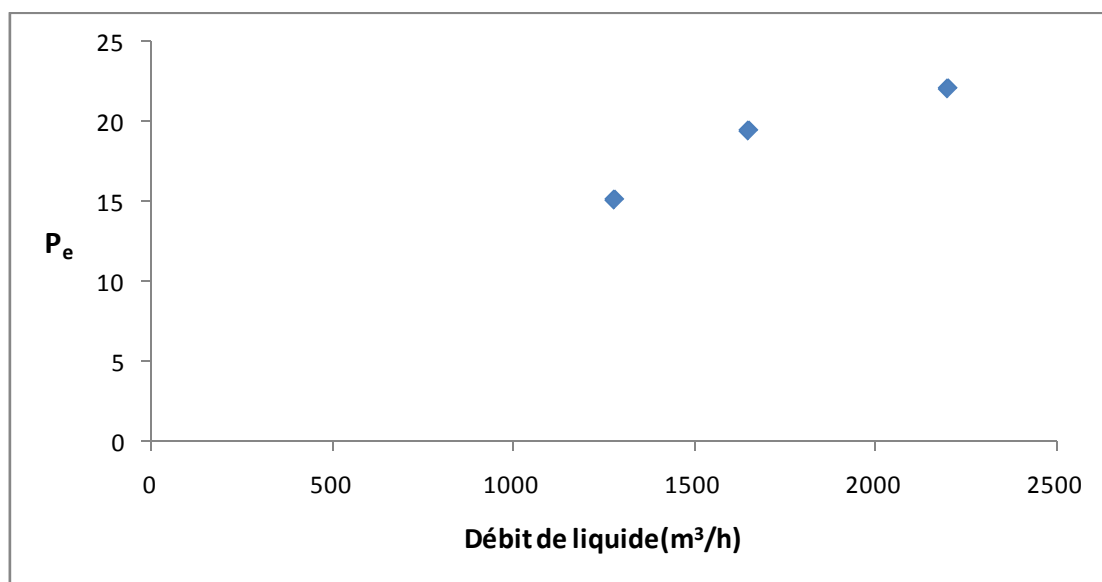


Figure III.10. Evolution du nombre de péclet en fonction du débit de liquide.

#### III.2.4. Techniques de simulation des DTS par MFN

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

-définir un traceur (scalaire passif) ayant les mêmes propriétés que le fluide de l'écoulement, en faire une injection en entrée par le biais des conditions aux limites et suivre la concentration de ce pseudo-composé à la sortie. Cette méthode oblige à

résoudre le transport du traceur en transitoire ce qui est très consommateur en temps de calcul.

-définir des particules solides ayant la même densité que le fluide de l'écoulement et un diamètre très petit, en injecter une quantité suffisamment importante pour donner des résultats statistiquement significatifs et observer le temps que met chaque particule à sortir du domaine. La quantité de particules qu'il faut injecter dépend de la précision que l'on veut obtenir. Dans notre cas, nous avons choisi la première méthode.

#### **III.2.4.1. Système monophasique (eau)**

La modélisation de la distribution des temps de séjour par mécanique des fluides numériques a été réalisé sur un réacteur canal de dimension : 3,6m de longueur, 0,18m de largeur et 0,2 m de hauteur et ce pour un débit de liquide de 3,6 L/min et un débit de gaz de 15L/min.

##### **➤ Présentation de l'outil de simulation (Femlab)**

Pour réaliser nos simulations, nous avons choisi d'utiliser le code de calcul commercial FEMLAB (installé avec MATLAB) que nous présentons dans cette partie.

Les modèles que nous développons se basent tous sur la résolution de systèmes d'équations différentielles. Il n'existe généralement pas de solution analytique à ces systèmes. Pour résoudre numériquement les systèmes d'équations, le logiciel est utilisé.

De nombreux phénomènes physiques sont modélisés par des systèmes d'équations différentielles partielles. Le logiciel est un outil de simulation, résolvant ces équations différentielles partielles en utilisant la méthode des éléments finis. Cette méthode consiste à diviser le domaine considéré en un nombre fini de sous-domaines appelés mailles. L'ensemble de ces mailles constituent le maillage. Des points, appelés nœuds, sont définis dans chaque maille. Au sein d'une maille, chacune des variables est approchée par une fonction d'interpolation polynomiale entre les valeurs aux nœuds; fonction dont les coefficients doivent être déterminés. Le sous-domaine muni de son interpolation est appelé élément. Le problème devient donc la détermination des coefficients du polynôme pour chacune des mailles.

Le logiciel propose une série de modules d'application pour les différents domaines scientifiques requérant de telles équations. Dans le cadre de ce travail, nous utilisons le module de génie chimique. Ce dernier dispose de plusieurs modèles pré-implémentés. Les fonctions d'interpolation utilisées sont des fonctions polynomiales quadratiques.

Le logiciel propose plusieurs méthodes de résolution, appelées solveurs. Ces solveurs résolvent un problème en cherchant la solution de un ou plusieurs systèmes d'équations linéaires. Les équations que nous utilisons sont non-linéaires. C'est pourquoi le logiciel procède préalablement à une linéarisation du problème.

Dans le cas d'équations stationnaires, le solveur linéarise le problème par une méthode de Newton. Si le problème est instationnaire, il utilise une méthode appelée méthode des lignes.

Une fois le problème linéarisé, le solveur sélectionné en résout les équations. Pour toutes les simulations réalisées dans ce travail, le solveur utilisé est le solveur UMFPAK. Ce dernier est un solveur direct (qui résout directement le problème, par opposition à un solveur itératif) particulièrement efficace pour la résolution de problèmes 1D non symétriques. Il a pour principe de résoudre un système de la forme  $Ax=B$  par factorisation LU de la matrice A.

#### III.2.4.1.a. Formulation mathématique

Une autre approche pour simuler la distribution des temps de séjour est la résolution de l'équation de transport d'un scalaire passif. L'équation de transport pour la concentration C du traceur s'écrit :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(-D\nabla c + cu)=0 \quad \text{III.5}$$

avec c : concentration du traceur ( $\text{mol/m}^3$ ) ;

D : coefficient de dispersion ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) ;

u : vitesse du fluide, est obtenue par la résolution de l'équation de quantité de mouvement en régime **stationnaire**.

L'équation de quantité de mouvement est donnée par l'équation suivante :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \left[ \left( \eta + \rho \frac{C_\mu k^2}{\sigma_k \varepsilon} \right) \cdot (\nabla u + (\nabla u)^T) \right] + \rho u \cdot \nabla u + \nabla p = 0 \quad \text{III.6}$$

$\rho$  : densité du fluide ( $\text{kg/m}^3$ ) ;

$u$  : vitesse du fluide ( $\text{m/s}$ ) ;

$\eta$  : viscosité dynamique d fluide ( $\text{kg/(m.s)}$ ) ;

$p$  : pression en Pa ;

$k$  : énergie cinétique turbulente ( $\text{m}^2/\text{s}^2$ ) ;

$\varepsilon$  : taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ( $\text{m}^2/\text{s}^3$ ) ;

$C_\mu, \sigma_k$  : constantes du modèle  $k$ -epsilon (voir annexe 1).

#### III.2.4.1.b. Présentation des conditions de simulation

- *Propriétés de la phase liquide (eau)*

densité :  $1000(\text{kg/m}^3)$  ;

viscosité :  $10^{-3}\text{Pa.s}$ .

- *Domaine de calcul : maillage 3D*

Nous avons effectué un maillage mixte composé de 2774 éléments tétraédriques et 1414 éléments triangulaires, avec taille de maillage prédéfinis « normal » comme le montre la figure III.11

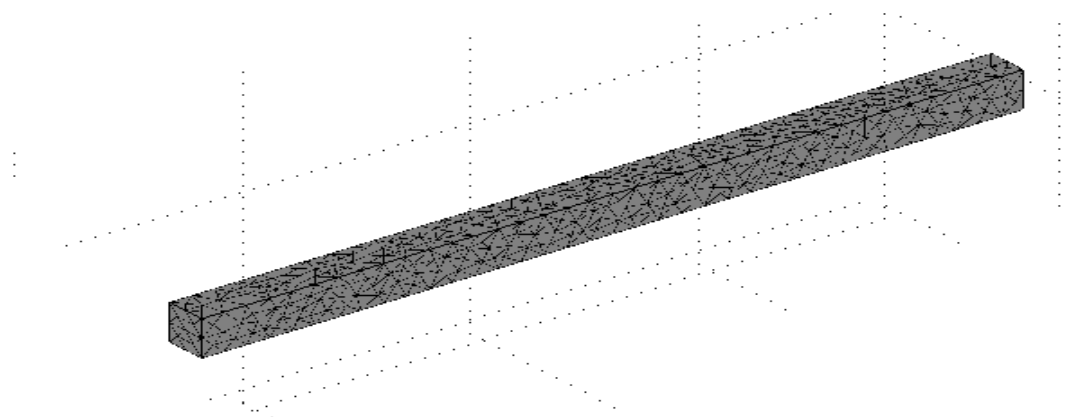


Figure III.11. Maillage 3D du réacteur canal.

- *Conditions limites*

Pour le liquide, une condition limite portant sur la vitesse d'entrée a été spécifiée et une condition de sortie (à pression atmosphérique) a été utilisée. Pour l'équation de transport (convection-diffusion), une condition d'entrée de type concentration du traceur a été utilisée.

### III.2.4.2. Système diphasique (air-eau)

#### Formulation mathématique

Dans ce cas, le logiciel résout l'équation de quantité de mouvement pour le mélange en régime stationnaire.

$$\Phi_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \nabla \mathbf{u}_1 = -\nabla p + \nabla \cdot [\Phi_1 ((\eta_1 + \eta_T)(\nabla \mathbf{u}_1 + \nabla \mathbf{u}_1^T))] + \Phi_1 \rho_1 \mathbf{g}$$

III.9

avec

$\Phi_1$  : fraction volumique du liquide ( $\text{m}^3/\text{m}^3$ ) ;

$\rho_1$  : densité du liquide ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) ;

$\mathbf{u}_1$  : vitesse de la phase liquide ( $\text{m}/\text{s}$ ) ;

$p$  : pression (Pa) ;

$\eta_1$  : viscosité dynamique du liquide ( $\text{Pa}\cdot\text{s}$ ) ;

$\mathbf{g}$  : la pesanteur ( $\text{m}/\text{s}^2$ ) ;

$\eta_T$  : viscosité turbulente de la phase liquide ( $\eta_T = \rho_1 C_\mu \frac{k_1^2}{\varepsilon_1}$ ) .

Pour le gaz, la condition limite utilisée est la aussi une vitesse d'entrée spécifiée de manière à imposer le débit d'aération souhaité.

### III.2.4.3. Comparaison entre système monophasique et diphasique

On remarque que la courbe obtenue pour un système diphasique est plus serrée que celle obtenue pour un système monophasique. Donc le fait d'ajouter du gaz au liquide entraîne un resserrement de la courbe de DTS.

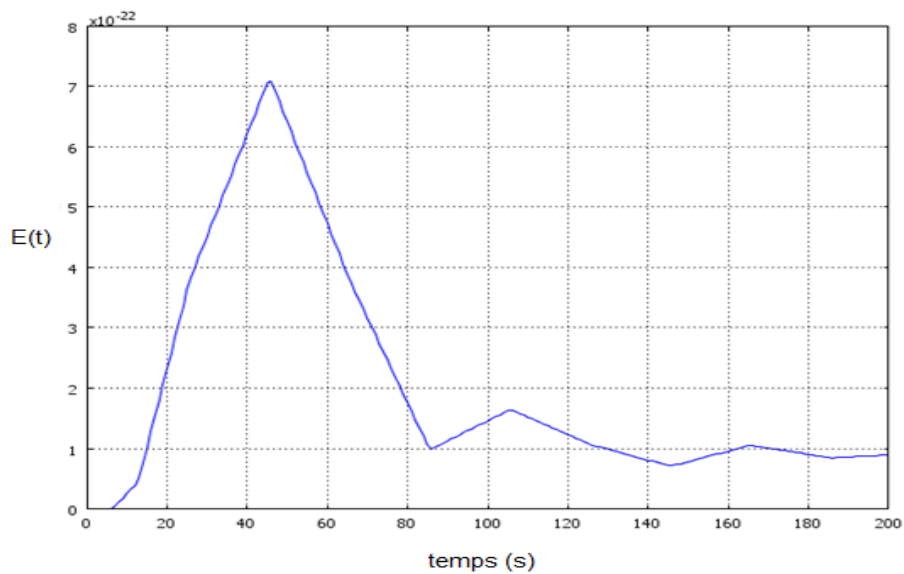


Figure.III.12. Courbe de DTS obtenue pour un système monophasique (eau).

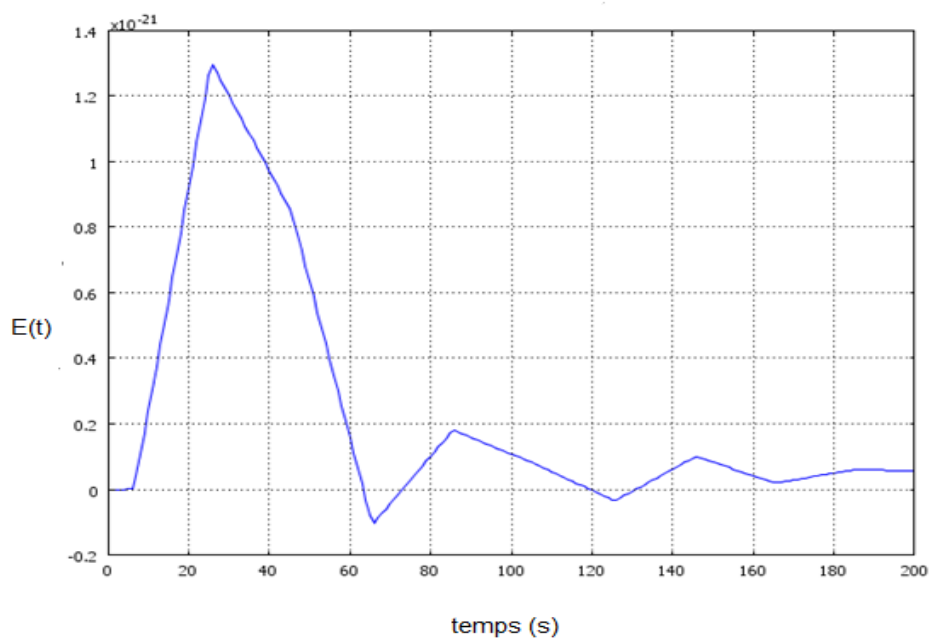


Figure.III.13. Courbe de DTS obtenue pour un système diphasique (air-eau).

### ➤ Comparaison entre les deux approches: systémique et MFN

Actuellement, l'approche systémique et l'approche mécanique des fluides numériques sont couramment utilisées. Chacune de ces deux approches a ses avantages et ses inconvénients : l'approche systémique permet d'accéder rapidement à des résultats

pertinents mais échoue régulièrement à modéliser des systèmes dépendant très fortement des aspects locaux ou géométriques, tandis que l'approche mécanique des fluides numériques permet des descriptions très fines des réacteurs mais souvent au détriment d'un temps de travail et de calcul considérable.

- **Comparaison des deux modèles aux expériences**

La comparaison entre les résultats du modèle et les résultats expérimentaux est un des critères les plus importants pour comparer plusieurs modèles entre eux.

Le tableau suivant résume les caractéristiques des deux approches de modélisation :

Tableau III.4. Comparaison entre les deux approches de modélisation : systémique et MFN

Modèle	Systémique	MFN
Fond scientifique		
Approche	Basée sur des observations expérimentales	Basée sur des équations phénoméno logiques
Structure du modèle		
Simplicité	Relativement simple	Complexe
Temps de préparation et de calcul		
Temps de préparation	Très court	Long : bibliographie, tests de validation
Temps de calcul	Très court	Très long
Comparaison à l'expérience		
Précision	bonne	n'est pas bonne dans ce cas

### III.2.5. Conclusion

Une étude systématique portant sur l'influence du débit de liquide a été examinée pour des valeurs respectives de 1280, 1650 et 2200 m<sup>3</sup>/h et en conservant le débit de gaz linéique à 0.0175 m<sup>3</sup>/m/s. Les résultats ont montré que pour ces conditions opératoires, l'augmentation du débit de liquide conduit à un resserrement des courbes de DTS,

autrement dit, à un écoulement plus proche du piston. La modélisation de ces résultats à l'aide d'un modèle de type piston avec dispersion axiale a montré que le nombre de Péclet augmente avec le débit de liquide, autrement dit, la dispersion axiale diminue avec l'augmentation du débit de liquide ainsi une réduction des temps de séjour de la phase liquide.

Enfin, bien que le code de calcul n'ait pas été validé dans la première partie de ce travail, nous avons tout de même pu voir l'influence de la présence de la phase gazeuse sur le comportement de la phase liquide. Le fait d'ajouter du gaz au liquide, entraîne un resserrement de la courbe DTS.

### **III.3. Etude de l'hydrodynamique globale du réacteur torique**

Depuis une vingtaine d'années les réacteurs toriques ont fait leur apparition, ils présentent une alternative à l'utilisation des réacteurs de type cuve agitée. En effet, les réacteurs de forme toroïdale possèdent de nombreux avantages. Leur construction est simple et leurs conditions d'écoulement sont à peu près identiques en tout point. Leur puissance consommée est relativement faible (Rihani et al., 2009). En fonctionnement fermé, le fluide est mis en mouvement par une hélice marine située à l'intérieur du réacteur. On observe un mélange radial très efficace (Belleville et al., 1992) ainsi que l'absence de volume mort, d'où l'intérêt de l'étude de ce type de réacteur.

#### **Dispositif expérimental**

Le dispositif expérimental qui a été utilisé par Rihani et ses collaborateurs [46] pour la détermination de la distribution du temps de séjour est représenté dans la figure III.14.

C'est un milli réacteur torique en pyrex de géométrie circulaire et de volume utile de 0,14 litres, remplie d'eau distillée à 22 °C et alimenté au fond du réacteur dans la partie latérale gauche par de l'air comprimé, ce dernier traverse un distributeur cylindrique mono-orifice, de diamètre 0.3 mm. Les principales caractéristiques géométriques du milli réacteur torique sont données dans le tableau III.5.

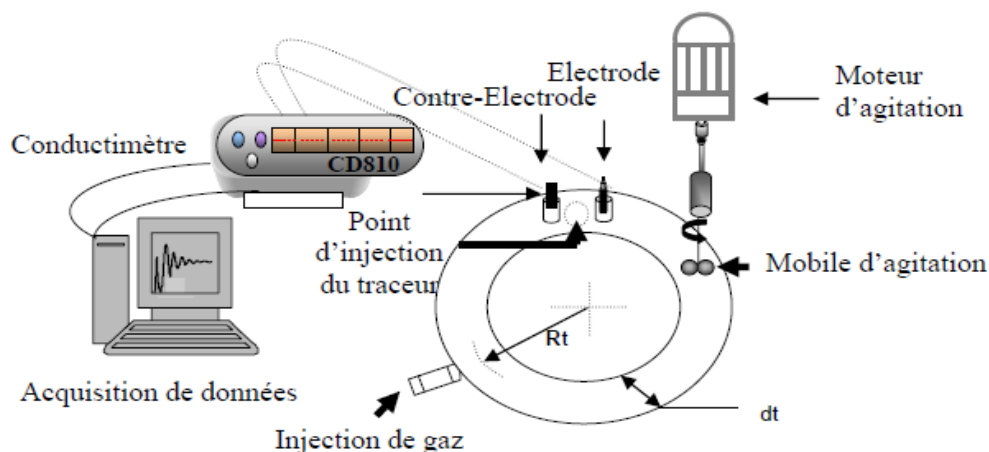


Figure III.14. Schéma du dispositif expérimental [46]

Tableau III.5. Caractéristiques géométriques du milli réacteur torique

Volume total du réacteur $V_R(l)$	Rayon de courbure du réacteur $R_t$ (mm)	Diamètre intérieur du tube $d_t$ (mm)	Longueur du réacteur $L_t$ (mm)
0.140	51	23.4	325

Les expériences ont été réalisées avec le système air-eau sous pression atmosphérique. Pour caractériser le mélange de la phase liquide au sein du milli réacteur torique ils ont adopté la méthode conductimétrique en effectuant des essais de traçage. Le traceur employé est l'hydroxyde de sodium NaOH (1M), injecté sous forme d'impulsion. La détection temporelle du signal de sortie a été obtenue par le biais de deux fils cylindriques respectivement en platine et en nickel de diamètre 0,18 mm placés en parallèle l'un de l'autre à une distance de 2,5 cm dans la partie supérieure du réacteur de sorte que l'un joue le rôle d'une électrode et l'autre de la contre électrode. L'électrode et la contre électrode sont connectées chacune à un conductimètre à fréquence variable (Tacussel CD810). L'injection a été réalisée perpendiculairement à la cellule conductimétrique. Le milli réacteur torique fonctionne en discontinu pour le liquide alors que l'alimentation gazeuse est continue. La vitesse superficielle du gaz a varié dans une gamme établie entre 0,011cm/s et 0,085 cm/s. Le débit d'air a été mesuré par un débit-mètre à bille de marque Brooks.

### III.3.1. Modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale

Le mélange a été caractérisé par l'intermédiaire du coefficient de dispersion axial qui est un paramètre important pour les réacteurs tubulaires. La figure III.15 présente un exemple de courbe enregistrée sur laquelle ont été reportés schématiquement  $t_c$ , le temps de circulation et  $t_m$  le temps de mélange. A partir de ce type de courbe, on calcule le temps de circulation du fluide  $t_c$ (s), pour différentes vitesses de rotation de l'hélice  $N$ . Il est égal à la durée nécessaire à un élément fluide pour parcourir un tour de réacteur. Expérimentalement, il correspond à l'intervalle de temps entre deux pics de concentration, cet intervalle étant constant pour chaque vitesse d'agitation.

On peut définir une vitesse moyenne de circulation  $U_c$  (m/s) par la relation suivante :

$$U_c = L_t / t_c \quad \text{III.10}$$

La valeur de la concentration du pic décroît avec le temps. Cette décroissance est due au mélange à l'intérieur du réacteur. Nous définissons le temps de mélange  $t_m$  comme l'intervalle de temps entre l'instant d'injection du traceur et sa répartition dans tout l'espace réactionnel jusqu'à un degré d'homogénéisation défini (95 % de la valeur finale  $C_0$  de la concentration : ce qui signifie que  $C \in [C_0 - 0,05C_0 ; C_0 + 0,05C_0]$ ).

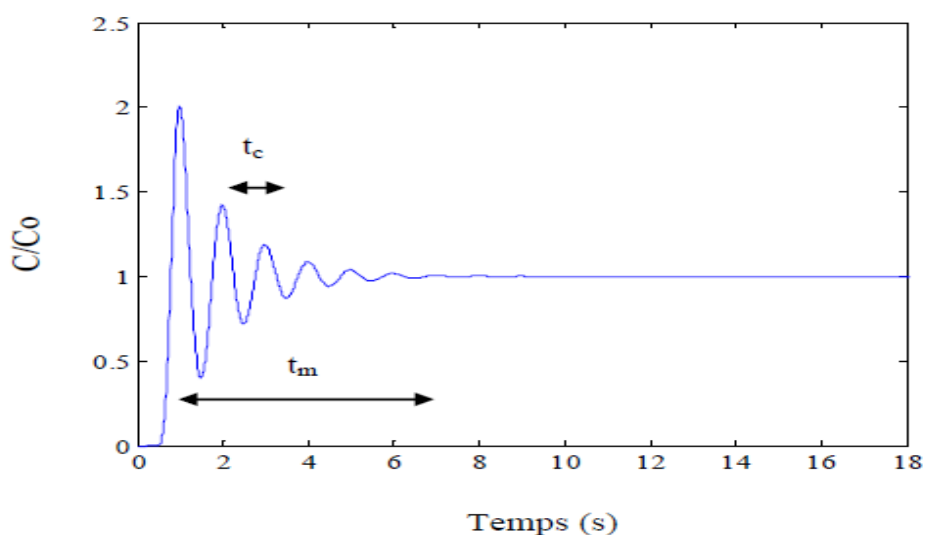


Figure.III.15.Exemple de courbe de la concentration du traceur en fonction du temps dans une géométrie toroïdale. [46]

Le processus de mélange dans les réacteurs est dû principalement aux différences de vitesse des éléments fluide, au mélange local provoqué par le mobile d'agitation, ainsi qu'aux phénomènes de diffusion turbulente et de diffusion moléculaire. Tous ces effets peuvent être caractérisés globalement par un coefficient de dispersion longitudinale ou axiale  $D_{ax}$  ( $m^2/s$ ).

Pour modéliser l'écoulement au sein du réacteur torique, on utilise un modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale du fluide. Ce modèle a été utilisé par de nombreux auteurs, notamment par **Voncken et al.** (1964) pour caractériser le mélange et l'écoulement dans un réacteur agité, Rihani et al.(2009), Atmani et al.(2002) et Nasrallah et al. (2008) dans un réacteur torique.

Si le traceur est  $n$  fois détecté à la position de mesure, la concentration réduite totale mesurée en ce point est la somme des concentrations réduites dues à chaque passage du traceur au niveau de la sonde :

$$\frac{C(\theta)}{C_0} = \sqrt{\frac{B_0}{4\pi\theta}} \sum_{j=1}^n \exp\left[-\frac{B_0(j-\theta)^2}{4\theta}\right] \quad \text{III.11}$$

Cette équation est celle établie par Voncken et al. (1964).  $B_0$  représente le nombre de Bodeinstein longitudinal,  $B_0 = U_c L_t / D_{ax}$  et  $\theta$ , le temps réduit,  $\theta = t/t_c$ . Le temps de circulation  $t_c$  a été déterminé à partir des courbes expérimentales. L'optimisation se fera donc uniquement sur le nombre de Bodeinstein.

### III.3.2. Application du modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale

L'application de ce modèle aux résultats expérimentaux permet de déterminer un paramètre caractéristique qui est le nombre de Bodenstein.

Ce paramètre est obtenu après superposition des courbes expérimentales et celles du modèle donnée par l'équation III.11.

L'erreur (RMSE) entre les courbes expérimentales et théoriques est donné par la formule suivante :

$$\text{RMSE} = \left[ \frac{\sum_{i=1}^n (C_{\text{imeas}}(t) - C_{\text{ical}}(t))^2}{\sum_{i=1}^n (C_{\text{imeas}}(t))^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{III.12}$$

Où : RMSE : Erreur quadratique moyenne, ; $C_{imeas}$  : Concentration mesurée du traceur en mole/l ;  $C_{ical}$  : Concentration calculée du traceur en mole/l.

Sur les figures suivantes nous avons représenté graphiquement les résultats de cette modélisation et ce pour différentes vitesses d'agitation et nombres d'aération.

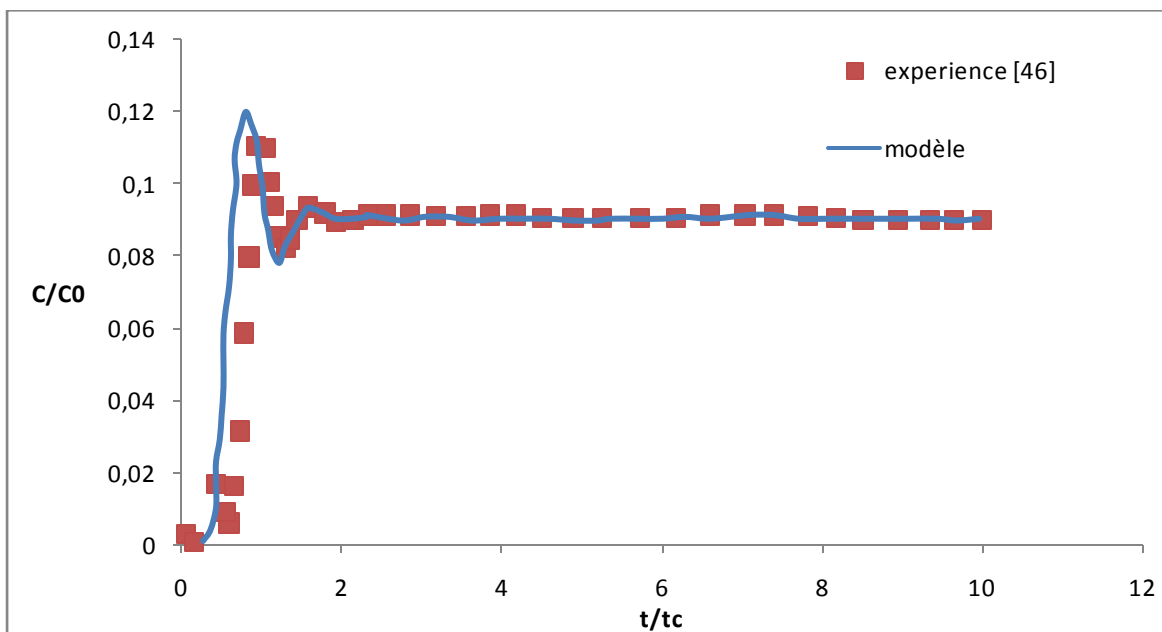


Figure.III.16.Modélisation de la réponse du traceur pour  $N = 6.67 \text{ s}^{-1}$ : cas du système monophasique (RMSE=0,10)

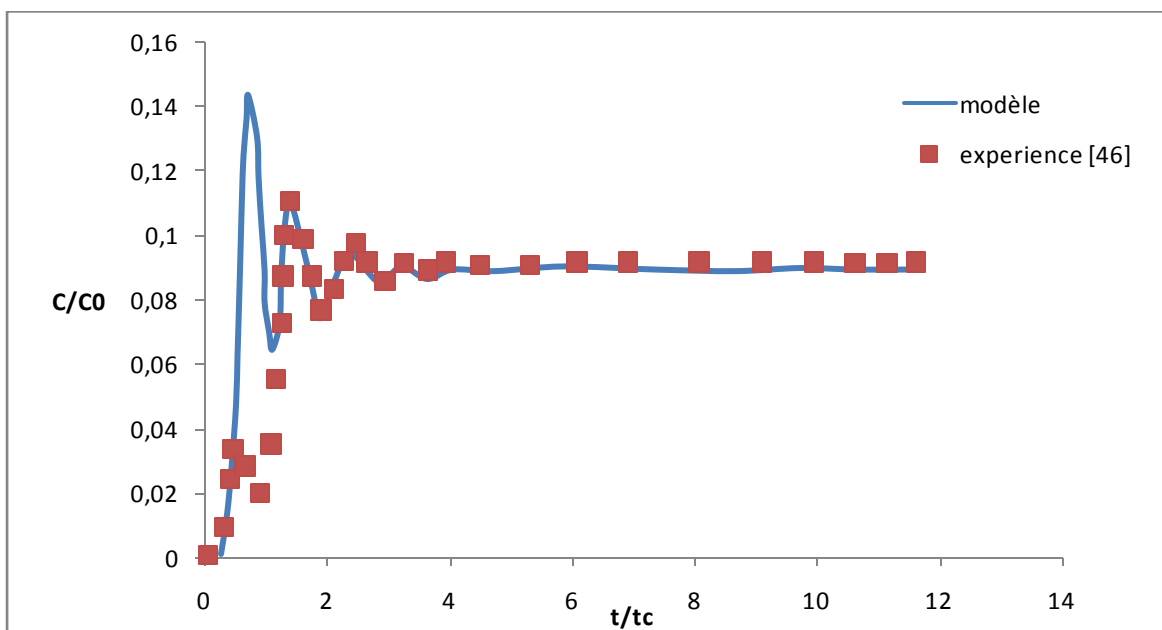


Figure.III.17.Modélisation de la réponse du traceur pour  $N = 6.67 \text{ s}^{-1}$ ,  $FI = 0,0046$ : cas du système air-eau (RMSE= 0,15)

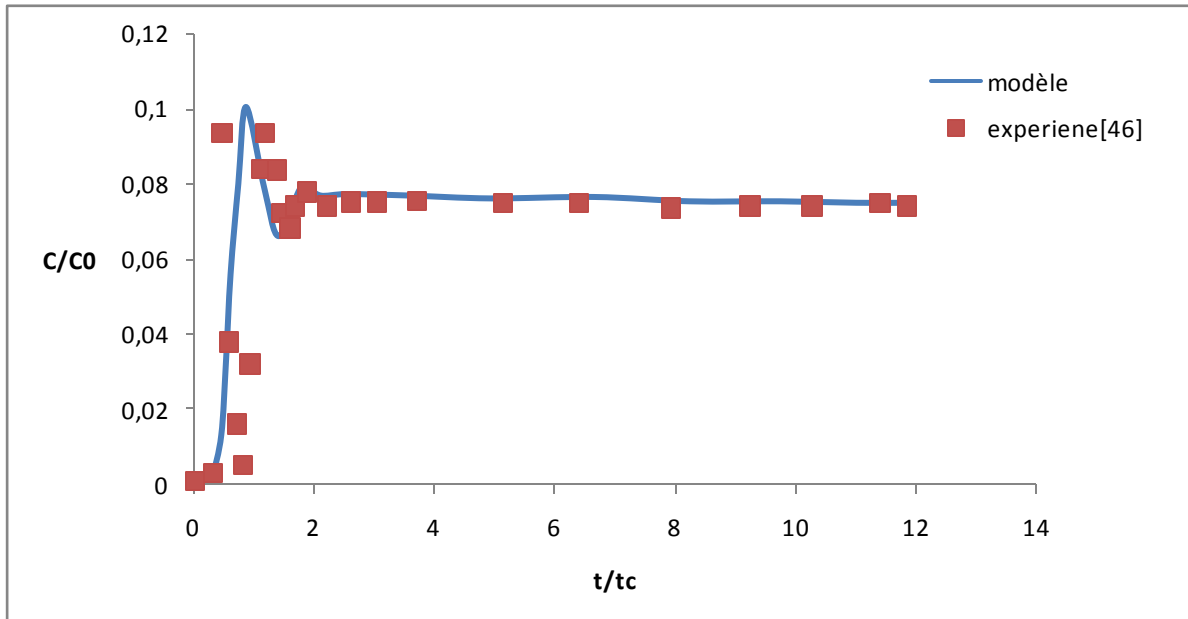


Figure.III.18.Modélisation de la réponse du traceur pour  $N = 8.3 \text{ s}^{-1}$ : cas du système monophasique (RMSE= 0,11)

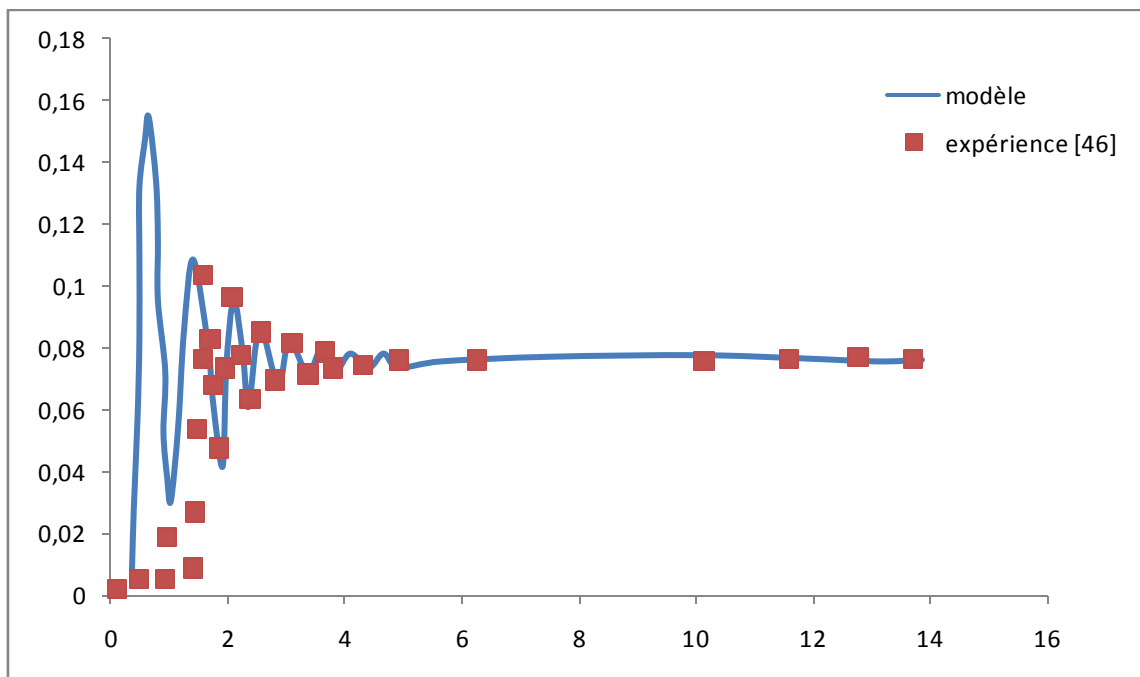


Figure.III.19.Modélisation de la réponse du traceur pour  $N = 8.3 \text{ s}^{-1}$ ,  $FI = 0,0018$ : air-eau. (RMSE =0,19)

On remarque que l'erreur est moins forte dans le cas où  $N = 6.67 \text{ s}^{-1}$ . On peut considérer que cela correspond à la limite de validité du modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale du fluide pour le réacteur torique.

Les valeurs du nombre de Bodenstein obtenues par superposition des courbes expérimentales avec le modèle de Voncken sont rassemblées dans le tableau suivant :

Tableau.III.6. Valeurs de Bo obtenues pour différentes valeurs de vitesse d'agitation et nombre d'aération

Nombre de Bodenstein				
N ( $\text{s}^{-1}$ )	6,67	8,3	11,67	13,33
FI				
0	23	30	32	33
0,0013			45	
0,0034				36
0,0018		42		
0,0046	31			

Nous constatons que les nombres de Bodenstein estimés pour un système monophasique sont presque indépendants des vitesses de rotation testées. Nous remarquons que le fait d'ajouter du gaz au liquide, entraîne une augmentation du nombre de Bodenstein. Généralement l'écoulement piston est assumé pour des nombres de Bodenstein supérieurs à 20 (Chisti, 1989 ; Mirón et al., 2004). Nous avons obtenu des nombres de Bodenstein supérieurs à 22, l'écoulement au sein du réacteur torique est proche de l'écoulement piston.

### III.3.4. Conclusion

La comparaison des courbes expérimentales au modèle classique de (Voncken et al., 1964) a montré que le modèle représente de façon assez acceptable les courbes expérimentales. Nous avons obtenu des nombres de Bodenstein supérieurs à 20. Il existe au sein du milli réacteur torique un écoulement proche de l'écoulement piston.

### III.4. Modélisation hydrodynamique d'une colonne à bulles

Les colonnes à bulles sont largement utilisées industriellement comme réacteurs chimiques et comme contacteurs gaz/liquide. Dans les deux cas, une phase gazeuse est dispersée sous forme de bulles dans une phase liquide continue.

Dans l'industrie chimique, les colonnes à bulles s'emploient dans de nombreuses réactions gaz/ liquide ou gaz/ liquide/solide comme la chloration, l'oxydation, l'hydrogénation et l'alkylation de composés organiques (Deckwer, 1992). Divers procédés, tels que la liquéfaction du charbon et le traitement biologique des eaux, reposent aussi sur l'utilisation des colonnes à bulles.

Malgré la simplicité de leur construction, l'absence de composants mécaniques en mouvement et le faible besoin d'apport d'énergie, les colonnes à bulles présentent un comportement hydrodynamique extrêmement complexe qui n'est pas encore complètement élucidé à l'heure actuelle. Or, l'efficacité de ces colonnes ne peut être appréhendée que par une bonne connaissance de l'hydrodynamique des systèmes diphasiques (liquide-gaz).

Pour répondre à ce besoin, la mécanique des fluides numériques ou « Computational Fluid Dynamics (CFD) est aujourd'hui un outil indispensable. L'intérêt principal de la CFD est qu'elle permet d'essayer " virtuellement " différents scénarios de réhabilitation d'une installation existante ou de conception d'un nouveau réacteur et de choisir la solution optimale en terme de performances et de coûts. Nous utiliserons donc cet outil pour étudier l'influence de différents paramètres sur l'hydrodynamique dans les colonnes à bulles.

#### Dispositif expérimental

Dans ce qui suit, nous allons comparer les résultats obtenus par la simulation avec ceux donnés expérimentalement par M. Elena Diaz et al.[2]. Le dispositif expérimental qui a été utilisé par ces derniers est principalement constitué d'une colonne de 1.80 m de haut et de 0.2 m de diamètre, remplie d'eau et alimentée en pied par de l'air comprimé via un distributeur en aluminium de 1.8 cm de longueur et de 0.6 cm d'épaisseur placé au centre de la paroi inférieure de la colonne. La hauteur de liquide au repos est fixée à

0.45m, afin que, à rétention gazeuse globale maximale, une hauteur maximale de la colonne soit utilisée. La vitesse superficielle du gaz est fixée entre 0.24 et 2.30 cm/s.

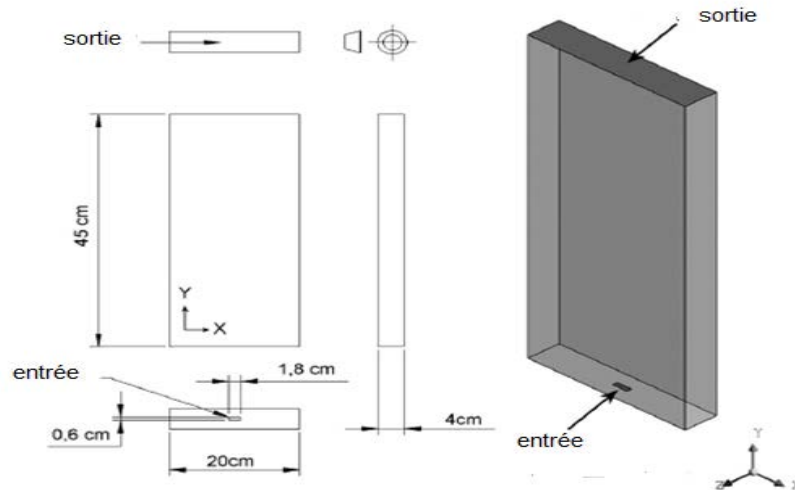


Figure.III.20. Représentation 2D et 3D de la colonne à bulles.

Un des paramètres fondamentaux de caractérisation de l'hydrodynamique des colonnes à bulles est la rétention gazeuse symbolisée par  $\varepsilon_g$ . Par définition, la rétention gazeuse est la fraction volumique de gaz dans la colonne à bulles. La grande importance de la rétention gazeuse nous conduit à l'étudier pour mieux connaître et modéliser l'hydrodynamique des colonnes à bulles. Pour répondre à ce besoin, la mécanique des fluides numériques est utilisée.

#### III.4.1. Formulation mathématique du problème

Le logiciel propose plusieurs modes d'applications, nous avons choisi le mode le plus simple : mode d'application « écoulement avec bulles laminaire ».

l'équation de conservation de quantité de mouvement pour le mélange est donnée par :

$$\Phi_1 \rho_1 \frac{\partial u_1}{\partial t} + \Phi_1 \rho_1 u_1 \cdot \nabla u_1 = -\nabla p + \nabla \cdot [\Phi_1 \eta_1 (\nabla u_1 + \nabla u_1^T)] + \Phi_1 \rho_1 g$$

III.13

avec :

$\Phi_1$  Fraction volumique du liquide ( $m^3/m^3$ ) ;

$\rho_1$  densité du liquide ( $kg/m^3$ ) ;

- $u_l$  vitesse de la phase liquide (m/s) ;  
 $p$  pression (Pa) ;  
 $\eta_l$  viscosité dynamique du liquide (Pa·s) ;  
 $g$  la pesanteur ( $m/s^2$ ).

### III.4.2. Présentation des conditions de simulation

- **Propriétés de la phase continue**

Les propriétés physiques de l'eau sont les suivantes :

Masse volumique de l'eau à 20°C :  $10^3 \text{ Kg/m}^3$  ;

Viscosité dynamique de l'eau à 20°C :  $10^{-3} \text{ Pa.s}$ .

- **Domaine de calcul : maillage 2D**

L'opération de maillage est très importante. De sa qualité dépend la précision des calculs. Un nombre de mailles insuffisant fera diverger les calculs ou sera responsable d'une diffusion numérique trop importante. Il faut trouver un compromis entre le nombre de mailles et le temps de calcul qui augmente considérablement avec le raffinement de la discrétisation du domaine.

Nous avons construit un maillage normal composé de 1184 cellules triangulaires. Il est à signaler que plusieurs tests ont été effectués (maillage grossier, fin, assez fin, maillage fin au niveau des parois) afin de vérifier l'invariance de la solution par rapport au maillage et ce nombre de cellules nous a permis de limiter le temps de calcul.

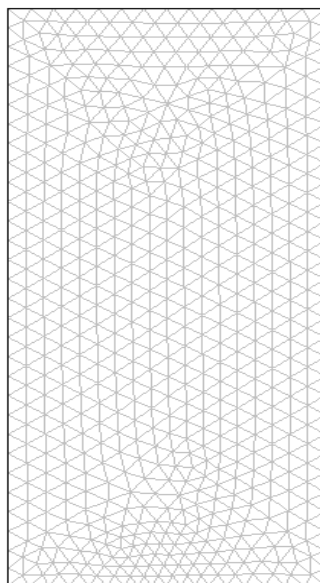


Figure.III.21. Maillage de la colonne à bulles.

- **Conditions limites (entrée, sortie et parois)**

Au modèle numérique, il est indispensable de lui fournir les conditions initiales qui représentent l'état de l'écoulement lors du lancement de la simulation. L'étude des conditions aux limites est déterminante dans une modélisation.

-paroi supérieure : sortie du gaz et du liquide (outlet) ;

-parois latérales et paroi inférieure : pour le gaz, c'est une isolation symétrie (insulation symmetry), pour le liquide c'est une frontière sans glissement (wall) ;

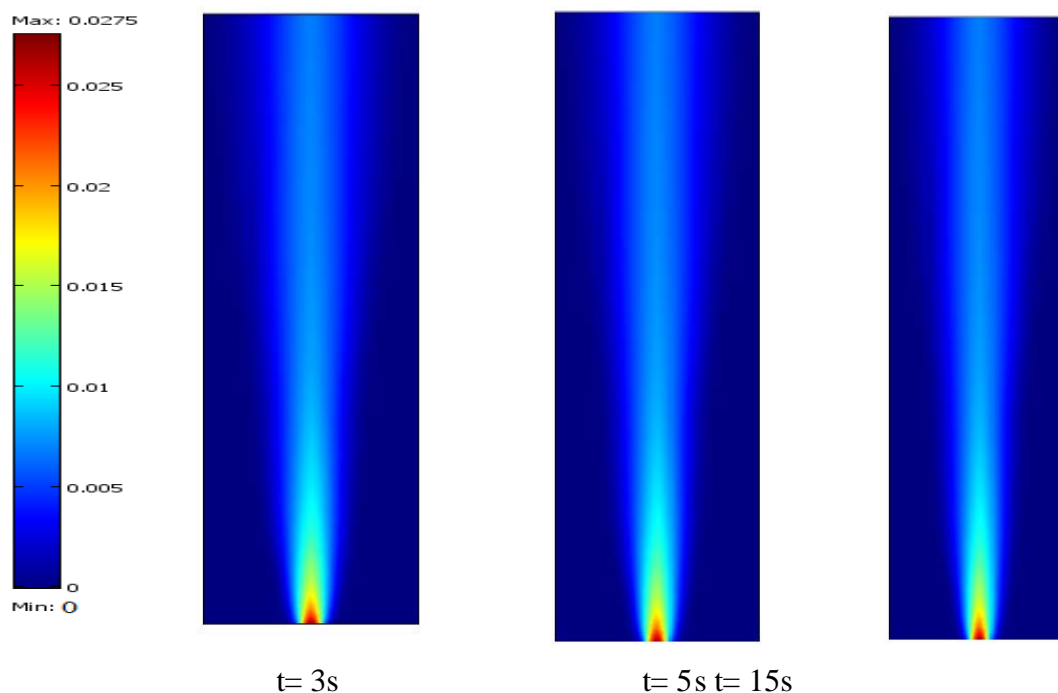
-droite (1.8cm de longueur) placée au centre de la paroi inférieure : représente une entrée pour le gaz (vitesse spécifiée) plus une entrée pour le liquide avec une vitesse nulle (inlet velocity).

- **Grandeurs de caractérisation**

Les différentes grandeurs que le code fournit sont : la vitesse des deux phases, la fraction volumique des deux phases, la pression et la densité du gaz.

### III.4.3. Résultats de la modélisation

La figure suivante montre l'évolution de la fraction volumique du gaz pour une vitesse de liquide nulle et une vitesse de gaz de 0.012m/s à différents temps.



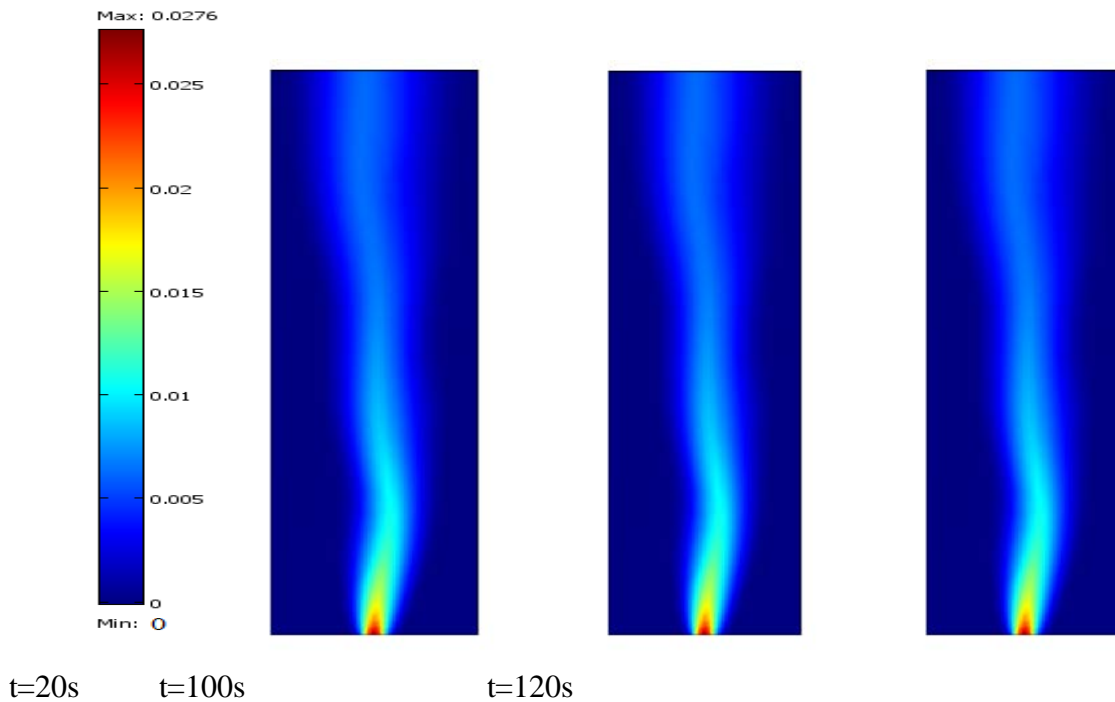


Figure.III.22.Champs de la fraction volumique du gaz à différents temps

On constate qu'à partir de  $t=20$ s, le champ de la fraction volumique de gaz devient inchangé. Pour cela, nous allons effectuer nos simulations à  $t=20$  secondes.

L'évolution de la rétention gazeuse est le plus souvent représentée en fonction de la vitesse superficielle de gaz.

#### III.4.3.1.Evolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz

La littérature montre que lorsque la vitesse superficielle de gaz croît, la rétention gazeuse augmente au sein de la colonne à bulles.

La figure suivante illustre le champ de rétention gazeuse pour une vitesse superficielle du liquide nulle.

Les résultats de la simulation montrent que la rétention gazeuse est maximale au centre de la colonne, et est nulle au niveau des parois et ce quelle que soit la vitesse du gaz injectée.

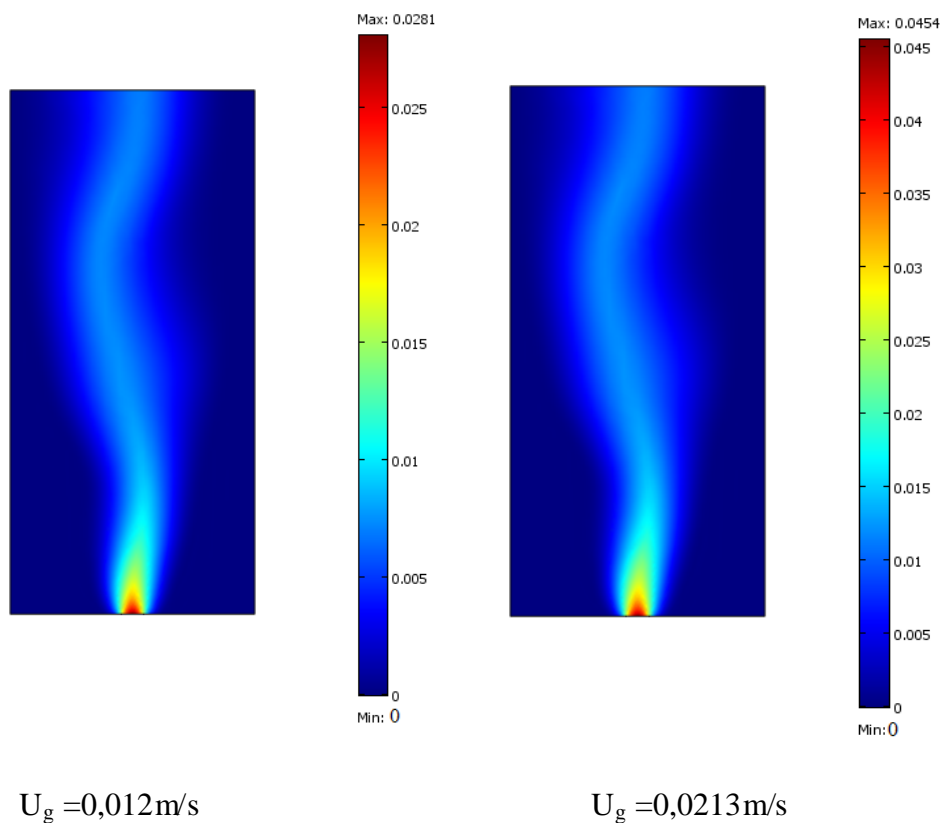


Figure.III.23.Champs de la rétention gazeuse pour différentes vitesses de gaz.

La figure suivante montre l'évolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz. (pour une vitesse de liquide nulle).

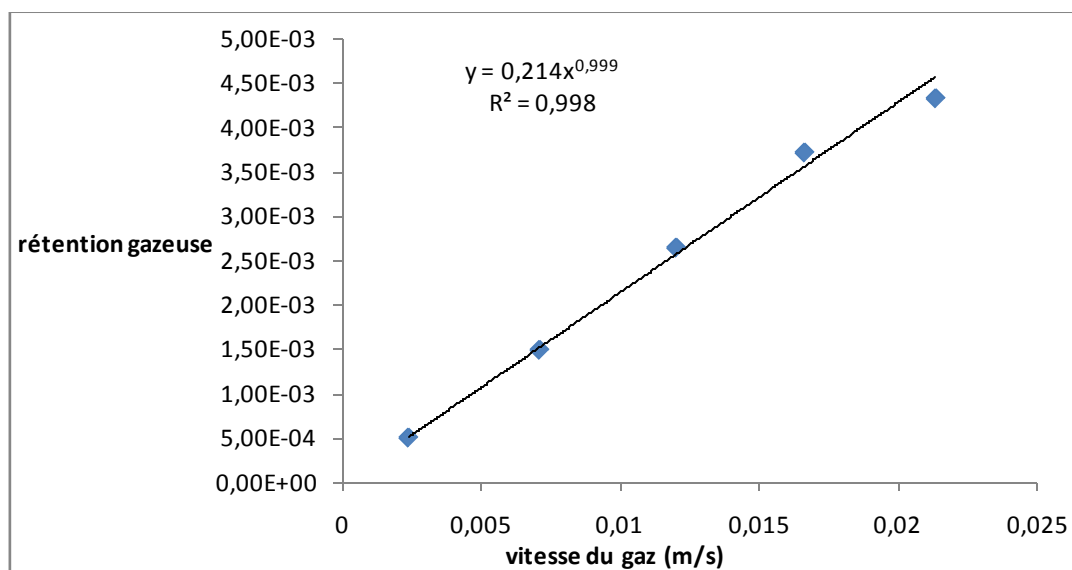


Figure.III.24.Evolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz

La figure III.24 montre une augmentation continue de la rétention gazeuse pour toute augmentation de la vitesse superficielle du gaz. La confrontation des résultats obtenus par la simulation avec ceux obtenus expérimentalement par M. Elena Diaz [2] est représentée dans la figure III.25.

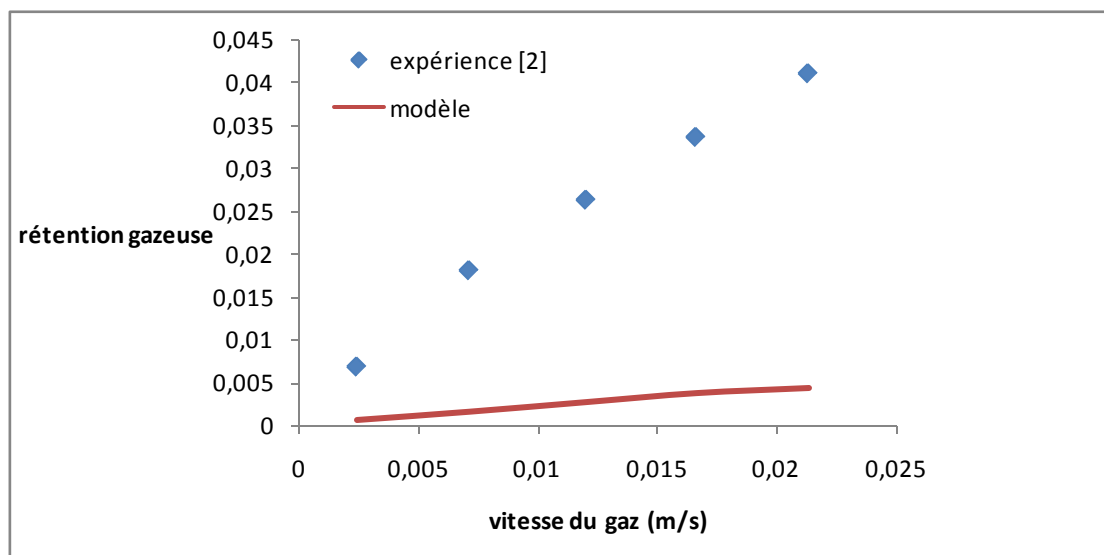


Figure III.25. Evolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz

Les deux courbes sont similaires, mais il existe un décalage systématique entre ces dernières. Ceci est dû à la négligence de la turbulence et peut être à une imprécision du maillage.

La plupart des auteurs[21] 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:  $\varepsilon_g \sim u_g^n$  où l'exposant  $n$  dépend du régime d'écoulement. En régime homogène (vitesse superficielle du gaz  $\leq 0,05$  m/s),  $n$  est compris entre 0,7 et 1 pour le système air-eau. Dans notre cas, nous avons obtenu la corrélation suivante :  $\varepsilon_g = 0,214u_g^{0,9996}$ . Ce qui est en bon accord avec les résultats de la littérature.

#### III.4.3.2. Influence de la vitesse superficielle du liquide

Généralement, la vitesse du liquide est relativement faible dans les colonnes à bulles (Wilkinson et al., 1992). Par conséquent, son influence sur la rétention gazeuse est souvent décrite comme négligeable (Akita et al., 1993) ou petite (Kelkar et al., 1983).

Otake et al (1981) montrent de leur côté, que la rétention gazeuse diminue lorsque la vitesse du liquide augmente.

La figure suivante montre l'évolution de la rétention gazeuse à différentes vitesses superficielles du liquide et à une vitesse superficielle du gaz constante (0.012m/s).

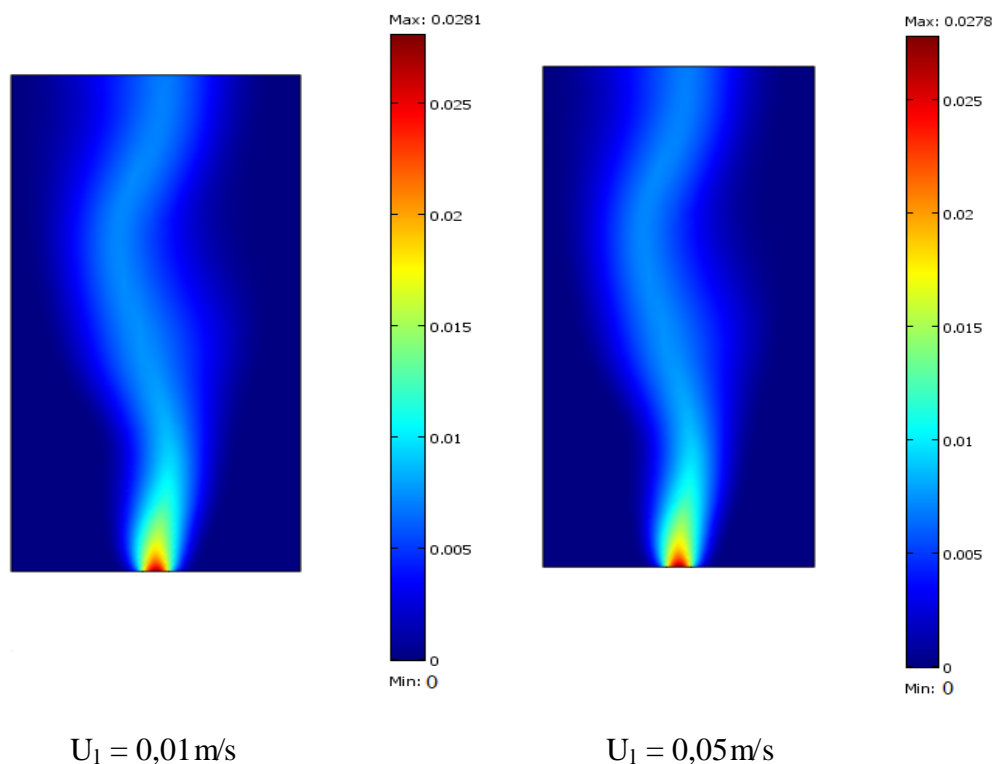


Figure.III.26. Champs de la rétention gazeuse pour différentes vitesses de liquide.

Lorsque la vitesse du liquide augmente, on constate une très légère diminution de la rétention gazeuse.

Comme le montre la figure III.26, la vitesse du liquide n'a pratiquement pas d'influence sur la rétention gazeuse (valeur maximale de 0,0281 pour  $U_1 = 0,01\text{ m/s}$  et 0,0278 pour  $U_1 = 0,05\text{ m/s}$ ), ce qui est en accord avec les résultats de Akita et al., 1993, Kelkar et al., 1983.

En revanche, quelques auteurs comme Otake et al (1981) montrent que la rétention gazeuse diminue lorsque la vitesse du liquide augmente. En effet, pour une vitesse de circulation du liquide élevée, le temps de séjour des bulles diminue, ce qui provoque une baisse de la rétention de gaz dans la colonne.

### III.4.3.3. Influence des propriétés physiques du liquide

Les différentes propriétés physiques des liquides à 20°C sont résumées dans le tableau ci-dessous :

Tableau.III.7. Propriétés physiques des différents liquides à 20°C [45]

liquides	Densité (Kg/m <sup>3</sup> )	Viscosité (Pa.s)	Tension superficielle (mN/m)
eau	998,29	10 <sup>-3</sup>	73
méthanol	791,5	0,59. 10 <sup>-3</sup>	22,6
n-décane	729	0,99. 10 <sup>-3</sup>	24,1

Les liquides ont été choisis de façon à représenter quelques natures chimiques :alcane et alcool.

La figure suivante montre l'évolution de la rétention gazeuse locale. Cette dernière a été déterminée au point (0,1, 0), là où la rétention gazeuse est maximale.

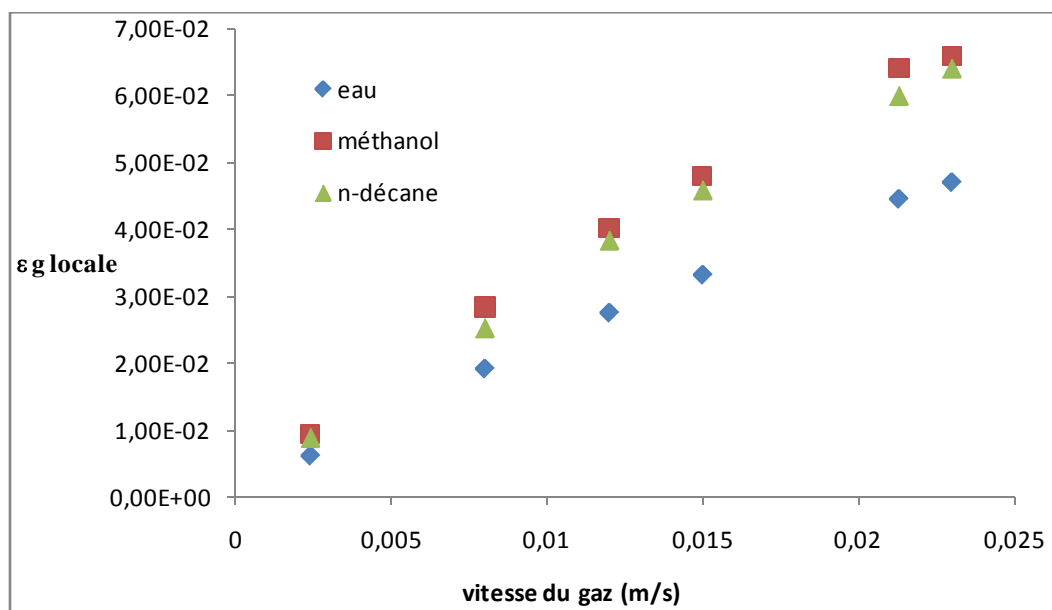


Figure III.27. Evolution de la rétention gazeuse locale en fonction de la vitesse du gaz pour différents liquides

La viscosité dynamique de l'eau est supérieure à celle du méthanol et le n-décane. 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. La diminution de la tension

superficielle (méthanol possède la tension superficielle la plus faible) provoque une augmentation de  $\varepsilon_g$ . Ceci peut être expliqué par la diminution de la taille des bulles liée à l'inhibition du phénomène de coalescence. Il semble qu'il n'y ait plus influence sur la rétention gazeuse lorsque les deux liquides ont la même tension superficielle.

#### III.4.3.4. Influence de la température liée aux propriétés physiques du liquide

La rétention gazeuse au sein d'une colonne à bulles est directement liée à la proportion entre petites et grosses bulles. En effet, plus ce rapport est élevé, plus grande est la valeur de rétention gazeuse pour une même vitesse superficielle de gaz.

Le tableau suivant résume les propriétés physiques de l'eau à deux différentes températures et à la pression atmosphérique.

Tableau.III.8. Propriétés physiques de l'eau à différentes températures [45]

Température(°C)	Densité( Kg/m <sup>3</sup> )	Viscosité (Pa.s).10 <sup>-3</sup>	Tension superficielle (mN/m)
0	999,82	1,792	75,6
100	958,05	0,282	58,85

La figure suivante montre le profil de la rétention gazeuse pour différentes températures à une vitesse superficielle de gaz de 0.012m/s. et une hauteur de 0.2m de la colonne.

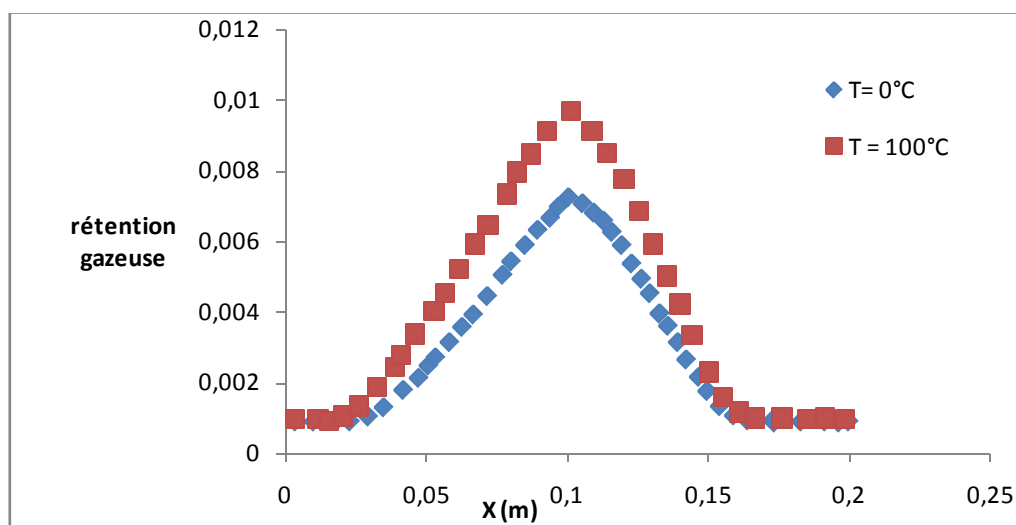


Figure.III.28. Influence de la température sur la rétention gazeuse

On remarque que la rétention gazeuse est proportionnelle avec la température. En effet, l'augmentation de la température provoque la diminution de la viscosité et de la tension superficielle du liquide, par conséquent, l'augmentation de la rétention gazeuse.

### III.4.3.5. Influence de la position de l'orifice

La figure suivante montre l'évolution de la rétention gazeuse dans le cas où l'orifice est situé au milieu de la paroi inférieure de la colonne et dans le cas où ce dernier est situé à une position de 4cm de la paroi de la colonne et ce à une vitesse de gaz de 0,012m/s.

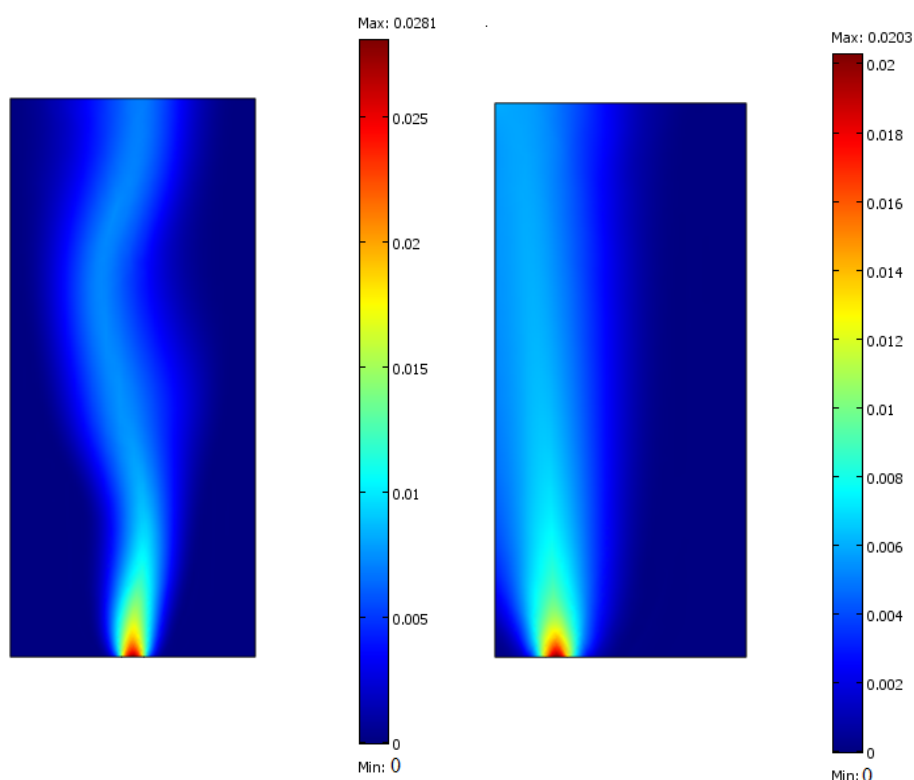


Figure.III.29.Evolution de la rétention gazeuse : orifice situé au milieu (à gauche), situé à une distance de 4cm de la paroi (à droite).

On remarque que le jet se propage en ligne droite lorsque l'orifice est placé au milieu de la paroi inférieure de la colonne. En approchant du bord du jet un corps présentant une paroi plane, le jet est dévié, c'est ce qu'on appelle le phénomène de *Coanda*. En plus, on observe une diminution de la rétention gazeuse. (une valeur maximale de 0,0203 a été obtenue dans le cas où l'orifice est situé à 4cm de la paroi).

### III.4.4. Structure horizontale de la rétention gazeuse

Comme les bulles et le liquide entraînés tendent à s'élever au centre de la colonne, un profil radial de rétention gazeuse et de vitesse du liquide tend à se développer lorsque l'on s'élève dans la colonne.

La figure suivante montre le profil de la rétention gazeuse à une hauteur de 0.2m et à une vitesse superficielle de gaz de 0,012m/s.

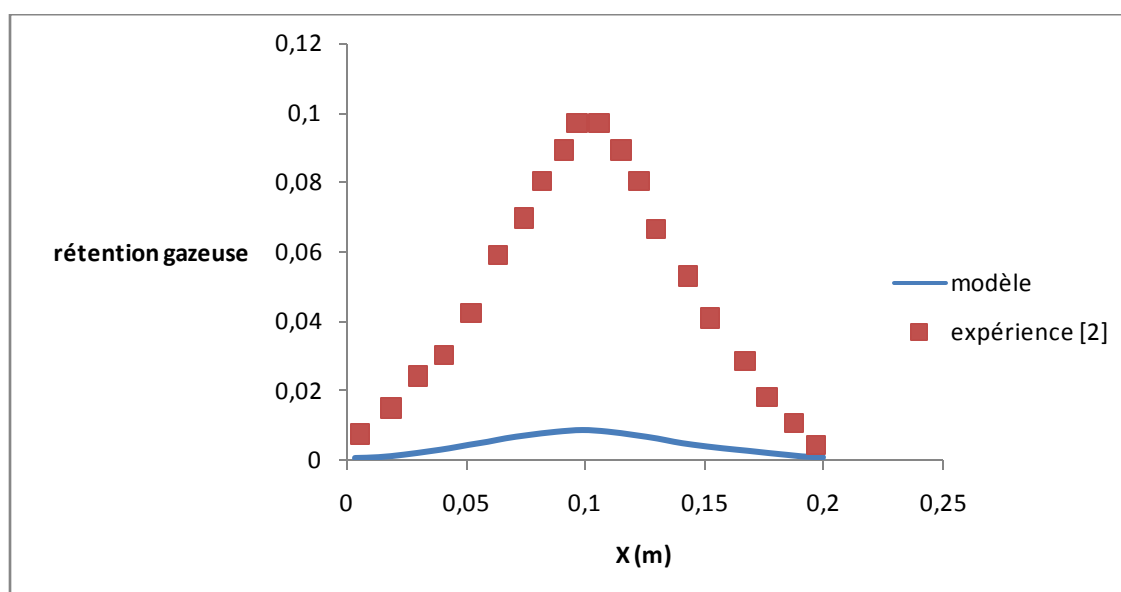


Figure.III.30.Profil de la rétention gazeuse

Les deux courbes ont la même allure mais il existe un décalage systématique et quasi proportionnel entre les valeurs simulées et expérimentales. Ceci est du à la négligence de la turbulence et peut être à une imprécision du maillage.

On remarque que la distribution de la fraction volumique du gaz est de forme parabolique (résultats obtenus à partir du modèle écoulement avec bulles laminaire) et ce quelque soit la vitesse du gaz injectée et ce à une hauteur de 0,2m. Elle est maximale au centre de la colonne et est nulle au niveau des parois.

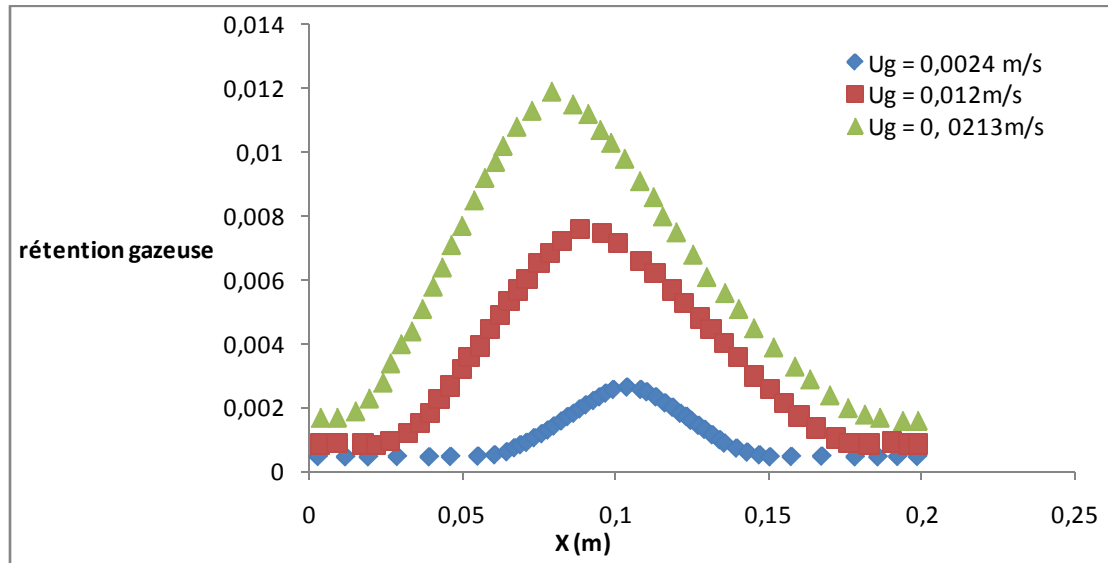


Figure.III.31.Profil de la rétention gazeuse pour différentes vitesses de gaz.

### III.4.5.Structure horizontale de la vitesse verticale du liquide

Le champs de la vitesse verticale du liquide est représenté dans la figure III.32

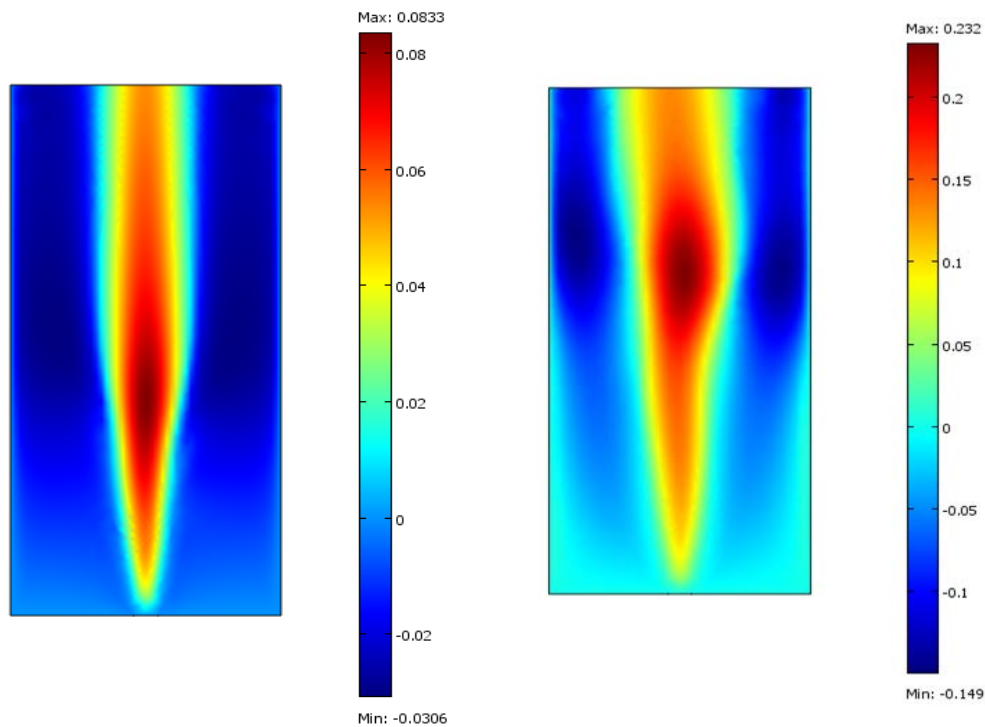


Figure. III.32. Champs de la vitesse verticale du liquide à différentes vitesses de gaz : 0,0024m/s (à gauche) et 0,012m/s (à droite).

D'après cette figure, la vitesse verticale du liquide est maximale au centre de la colonne. Elle augmente avec l'augmentation de la vitesse du gaz. On remarque que près des parois, le liquide se déplace vers le bas.

Le profil de la vitesse verticale du liquide dans la colonne à bulles pour une vitesse de gaz de 0.012m/s et à une hauteur de 0.4m est représenté dans la figure suivante:

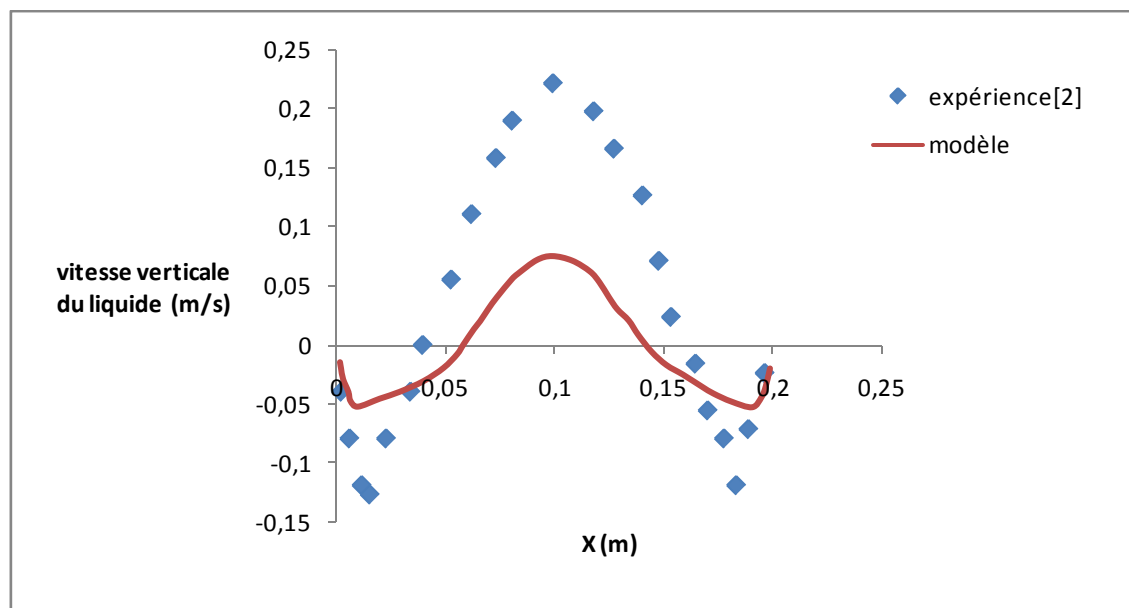


Figure.III.33.Profil de la vitesse verticale du liquide

Le mouvement ascendant du gaz sous forme de bulles provoque la mise en circulation du liquide selon des configurations compliquées. Comme les plus grosses bulles et le liquide entraîné tendent à s'élever au centre de la colonne, un profil axial de la vitesse du liquide tend à se développer lorsque l'on s'élève dans la colonne. On constate, que près de la paroi, le liquide se déplace vers le bas entrainant avec lui de petites bulles sur une certaine distance. Deux régions sont distinguées :

- une zone centrale, appelée "cœur" de l'écoulement, caractérisée par un mouvement ascendant des particules,
- une zone annulaire, appelée "anneau", caractérisée par un mouvement descendant ou faiblement ascendant.

Cette structure radiale est communément qualifiée de structure "cœur-anneau".

On remarque d'après la figure III.34 (résultats obtenus à partir du modèle choisi) que le profil de la vitesse verticale du liquide est de forme parabolique et ce quelque soit la vitesse du gaz injectée.

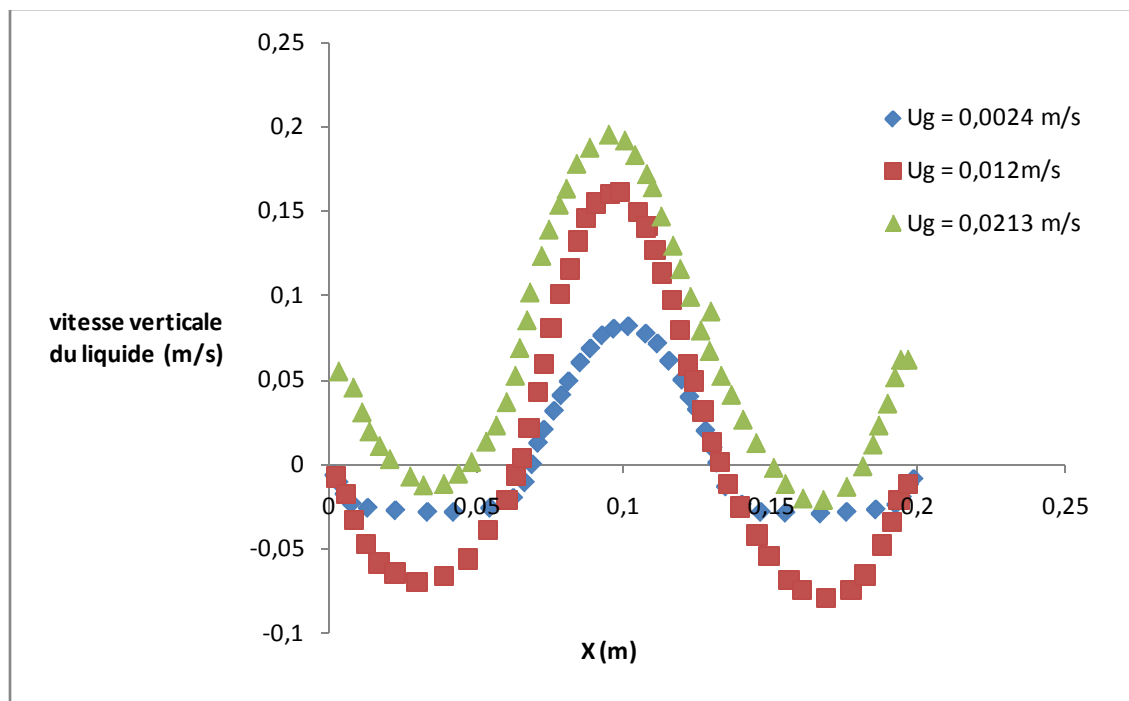


Figure.III.34.Profil de la vitesse verticale du liquide pour différentes vitesses de gaz.

### III.4.6. Conclusion

En définitive, nous pouvons résumer l'ensemble de ces influences de la manière suivante : la rétention gazeuse  $\varepsilon_g$  est une fonction croissante de la vitesse superficielle du gaz  $u_g$  et de la température, et est une fonction décroissante de la tension superficielle  $G_l$  et de la viscosité du liquide et de la vitesse superficielle du liquide. En ce qui concerne la structure horizontale de la vitesse verticale du liquide, deux régions sont distinguées :

- une zone centrale, appelée "cœur" de l'écoulement, caractérisée par un mouvement ascendant des particules,
- une zone annulaire, appelée "anneau", caractérisée par un mouvement descendant ou faiblement ascendant.

Cette structure radiale est communément qualifiée de structure "cœur-anneau".

L'écoulement des phases en colonnes à bulles peut donc s'éloigner fortement d'un écoulement piston, généralement recherché car il conduit aux conversions les plus élevées. Dès lors, afin de modifier l'hydrodynamique en se rapprochant de l'écoulement piston, divers internes sont souvent disposés à l'intérieur de la colonne à bulles. Des plateaux perforés et des tubes verticaux sont généralement utilisés.

### **III.5. Modélisation hydrodynamique d'un réacteur airlift rectangulaire à recirculation interne**

Les réacteurs de type airlift forment une classe particulière de contacteurs gaz-liquide de la famille des colonnes à bulles. Ils présentent la particularité de disposer d'une boucle de recirculation du mélange réactionnel.

Dans ce qui suit, nous allons modéliser l'hydrodynamique d'un réacteur airlift rectangulaire à recirculation interne qui a été étudié par GOURICH et ses collaborateurs [21].

#### **Dispositif expérimental**

Le réacteur analysé dans ce travail est un airlift à recirculation interne en plexiglas de section carrée (20 cm × 20 cm), de 2 m de haut et de 63 l de volume utile. Il est divisé par une paroi interne en deux sections de même surface appelées respectivement la montée ou riser (dans laquelle l'on introduit le gaz qui entraîne le liquide vers le haut) et la descente ou downcomer (dans laquelle le liquide appauvri en gaz circule vers le bas). Positionnée à 0,115 m au-dessus du fond du réacteur, la paroi interne à une hauteur de 1,3 m. Le distributeur de gaz est un système à orifice unique de 3,5 mm de diamètre placé au bas du riser. La vitesse superficielle du gaz dans le riser  $U_{gr}$  peut être ajustée entre 0,008 et 0,08 m/s. Les expériences ont été réalisées avec le système air-eau sous pression atmosphérique et à une température de 20°C.

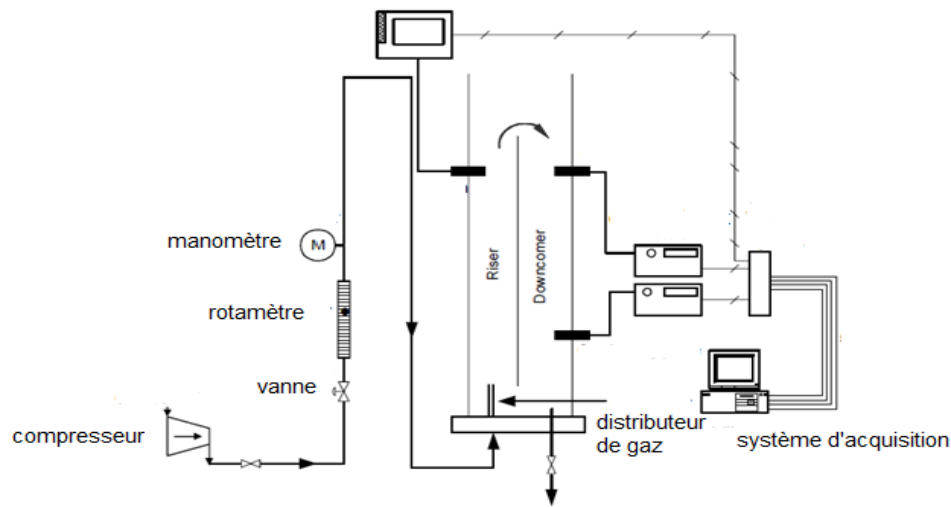


Figure.III.35.Montage expérimental du réacteur airlift

### III.5.1. Formulation mathématique du problème

Dans cette étude, le modèle de turbulence  $k-\varepsilon$  a été utilisé. L'équation de quantité de mouvement pour le mélange en régime stationnaire est la suivante :

$$\Phi_1 \rho_1 u_1 \cdot \nabla u_1 = -\nabla p + \nabla \cdot [\Phi_1 ((\eta_1 + \eta_T)(\nabla u_1 + \nabla u_1^T))] + \Phi_1 \rho_1 g$$

III.14

avec :

$\Phi_1$  : Fraction volumique du liquide ( $m^3/m^3$ ) ;

$\rho_1$  : densité du liquide ( $kg/m^3$ ) ;

$u_1$  : vitesse de la phase liquide ( $m/s$ ) ;

$p$  : pression (Pa) ;

$\eta_1$  : viscosité dynamique du liquide (Pa·s) ;

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

$\eta_T$  : viscosité turbulente du liquide ( $\eta_T = \rho_1 C_\mu \frac{k_1^2}{\varepsilon_1}$ ) ;

$k$  : énergie cinétique turbulente ( $m^2/s^2$ ) ;

$\varepsilon$  : taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ( $m^2/s^3$ ) ;

$C_\mu$  : constantes du modèle  $k$ - $\varepsilon$ .

### III.5.2. Présentation des conditions de simulation

- Domaine de calcul : maillage 2D axisymétrique
- tailles de maillage prédéfinies : normal ;  
- méthode de maillage : triangle ;  
- nombre d'éléments : 2136 éléments.

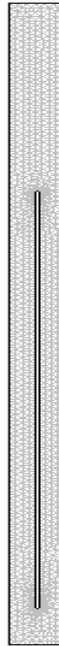


Figure.III.36. Maillage du réacteur airlift

- Conditions aux limites

Nous avons utilisé trois types de conditions aux limites:

- condition de type « débit de gaz imposé » à l'entrée (paroi inférieure côté riser),  
velocityinlet
- condition de type « axisymétrie » à  $r = 0$
- parois du réacteur, de type wall

### III.5.3. Profil radial de la vitesse du liquide et de la rétention gazeuse

Les figures suivantes montrent les champs de la fraction volumique du gaz et celui de la vitesse du liquide pour une vitesse de gaz de 0,012 m/s.

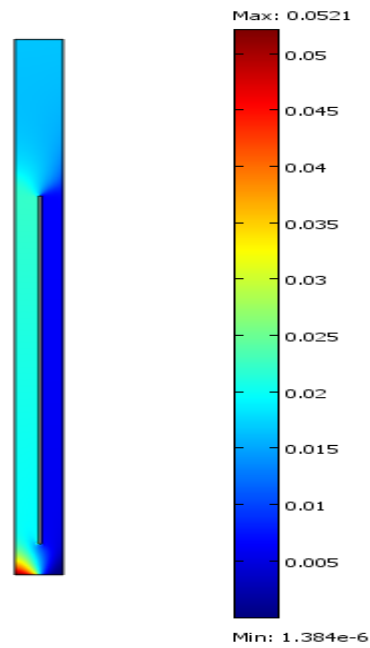


Figure.III.37.Champs de la fraction volumique du gaz

La figure montre que la rétention gazeuse dans le riser est supérieure à celle dans le downcomer. De même, on remarque que la rétention gazeuse est presque la même dans tout le riser ainsi que dans le downcomer.

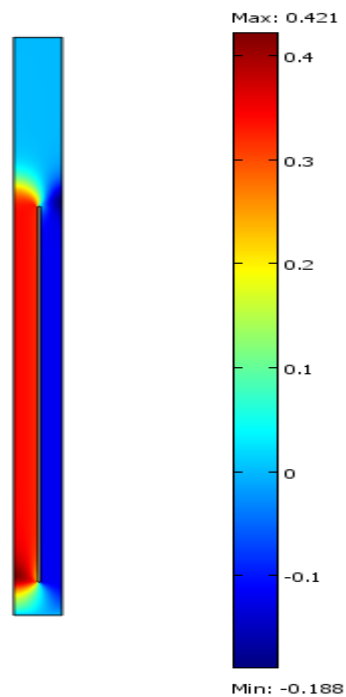


Figure.III.38.Champs de la vitesse du liquide

La figure III.38 illustre que la vitesse du liquide est à peu près constante dans le riser et dans le downcomer et dans ce dernier le liquide se déplace vers le bas entrainant avec lui de petites bulles.

Les figures suivantes montrent le profil radial de la vitesse du liquide ainsi que celui de la rétention gazeuse et ce à différente vitesse de gaz et à une hauteur de 0,8m.

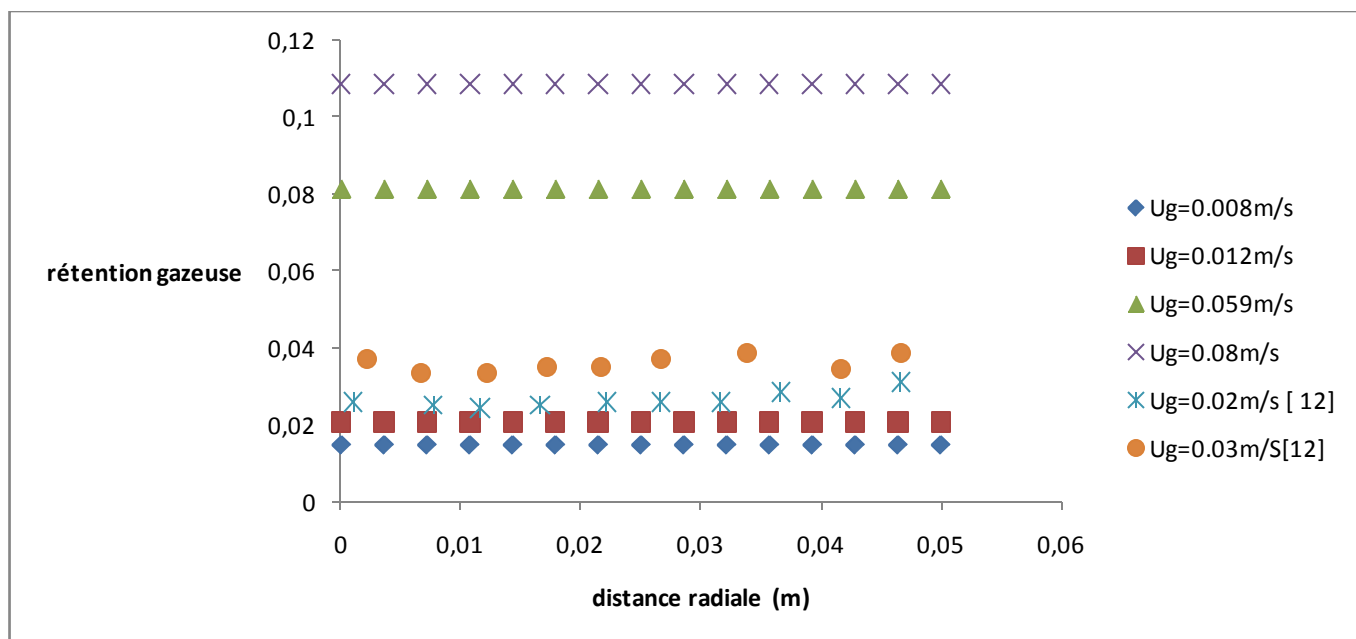


Figure.III.39.Profil radial de la rétention gazeuse à différentes vitesses du gaz

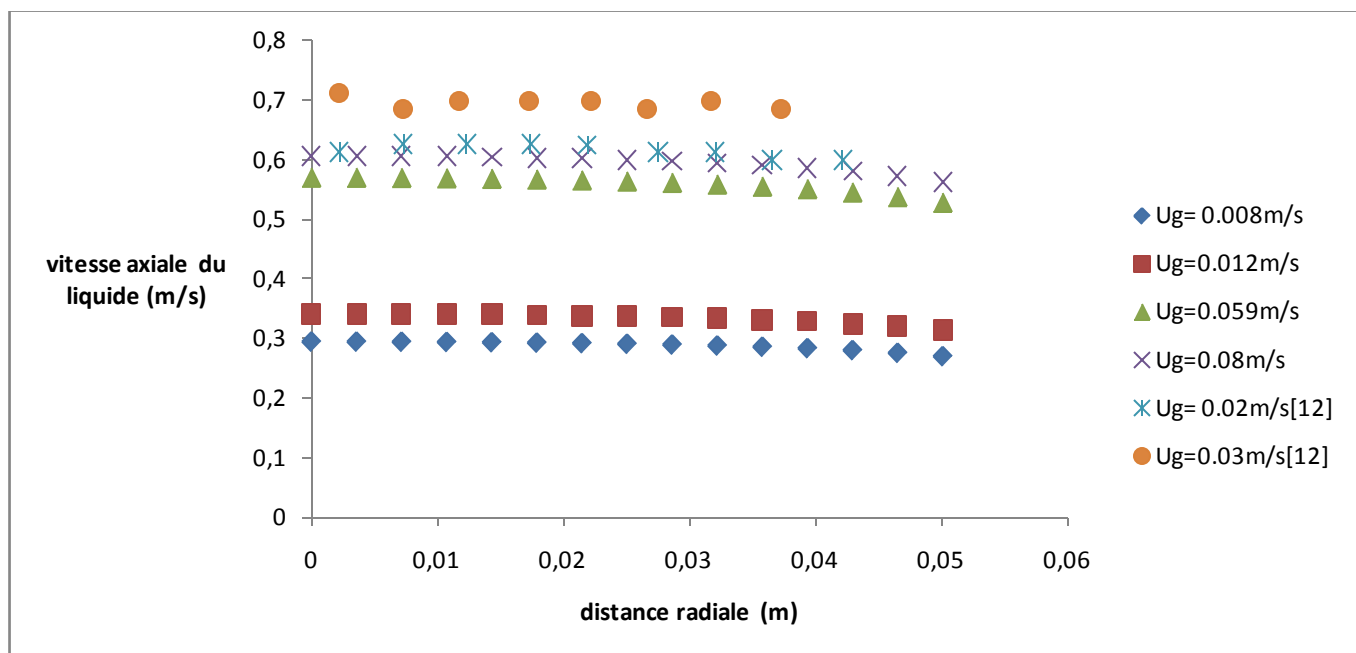


Figure.III.40.Profil radial de la vitesse axiale du liquide à différentes vitesses du gaz

Comme le montre les figures (III.39 et III.40) , les profils radiaux de la rétention gazeuse et la vitesse du liquide sont plats contrairement au colonnes à bulles qui sont paraboliques. Donc, on peut dire que l'écoulement au sien du réacteur airlift est un écoulement piston. Ces résultats sont en bon accord avec les résultats de J.M. Van Baten et R. Krishna[12] qui ont étudié l'hydrodynamique d'un réacteur airlift avec deux tubes verticaux (une section riser et deux sections downcomer).

### III.5.4. Evolution de la vitesse du liquide en fonction de la vitesse du gaz

La figure suivante montre l'évolution de la vitesse du liquide dans la colonne en fonction de la vitesse du gaz.

La vitesse du liquide est induite par la différence de rétention entre le Riser et le Downcomer, elle dépend donc de la vitesse superficielle du gaz.

On remarque que la vitesse du liquide augmente avec l'augmentation de la vitesse du gaz et que les mesures de la vitesse ont confirmé l'existence d'un palier dès que  $U_{gr} \geq 0,04\text{m/s}$ . Ces résultats sont en accord avec les résultats de la littérature [27,33].

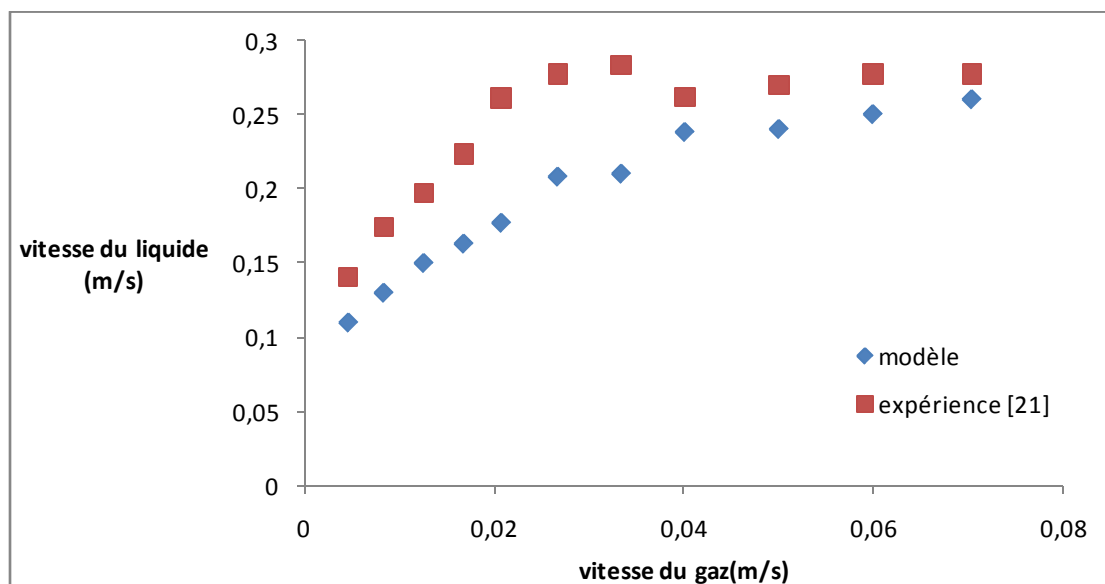


Figure.III.41. Evolution de la vitesse du liquide en fonction de la vitesse du gaz

Des bulles sont emprisonnées dans le downcomer, car leur vitesse ascensionnelle est égale à celle du liquide, ce qui explique l'existence d'un palier.

La courbure présente dans la figure III.41 correspond à la recirculation des bulles dans le downcomer.

### III.5.5. Influence de la vitesse du gaz sur la rétention gazeuse

La figure suivante montre l'évolution de la rétention gazeuse dans le riser pour différentes vitesses de gaz.

La rétention gazeuse augmente pour toute augmentation de la vitesse du gaz.

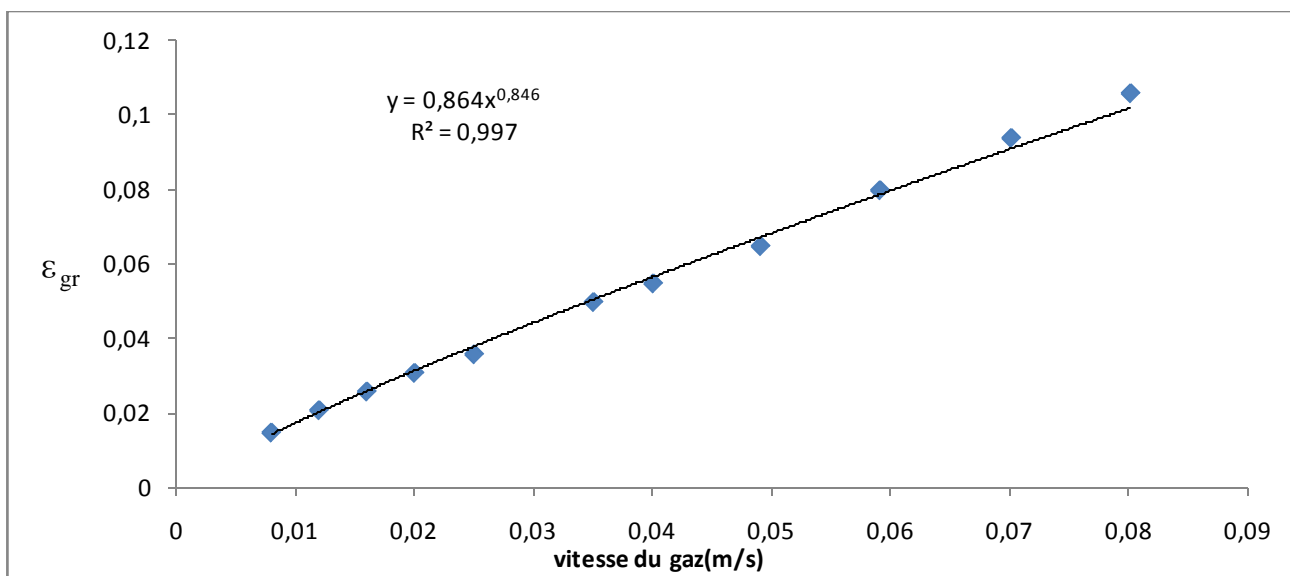


Figure.III.42. Evolution de la rétention gazeuse dans le riser en fonction de la vitesse du gaz

La confrontation des résultats expérimentaux avec ceux obtenus par la modélisation est montrée dans le figure ci-dessous.

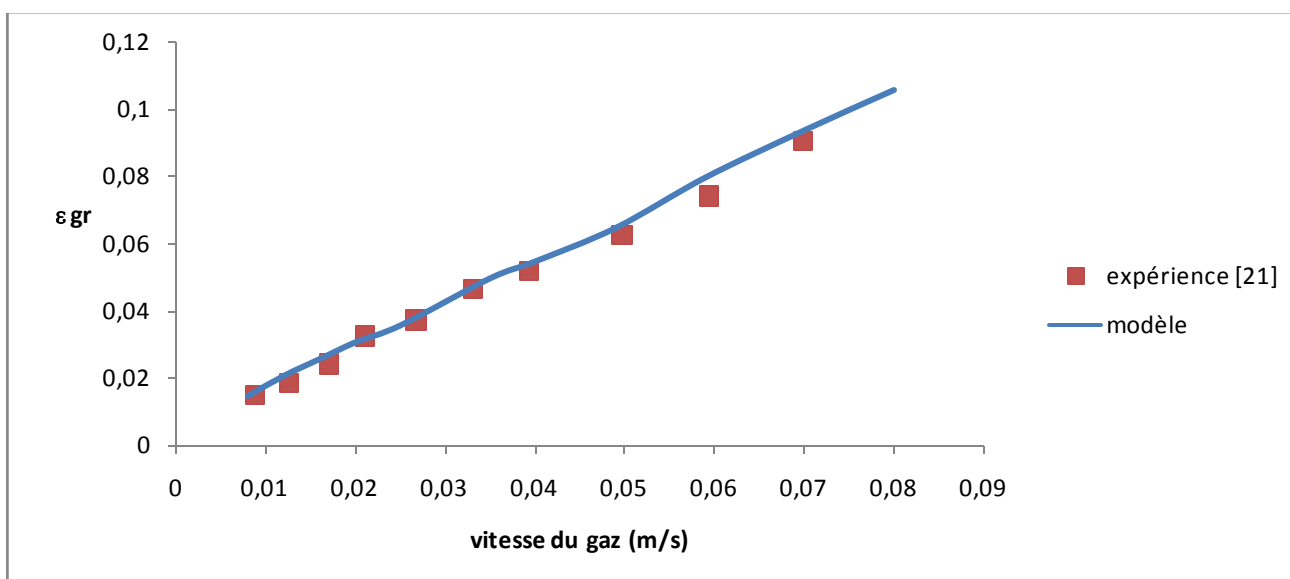


Figure.III.43. Comparaison entre expérience et modélisation

De même, la rétention gazeuse dans le downcomer augmente pour toute augmentation de la vitesse du gaz.

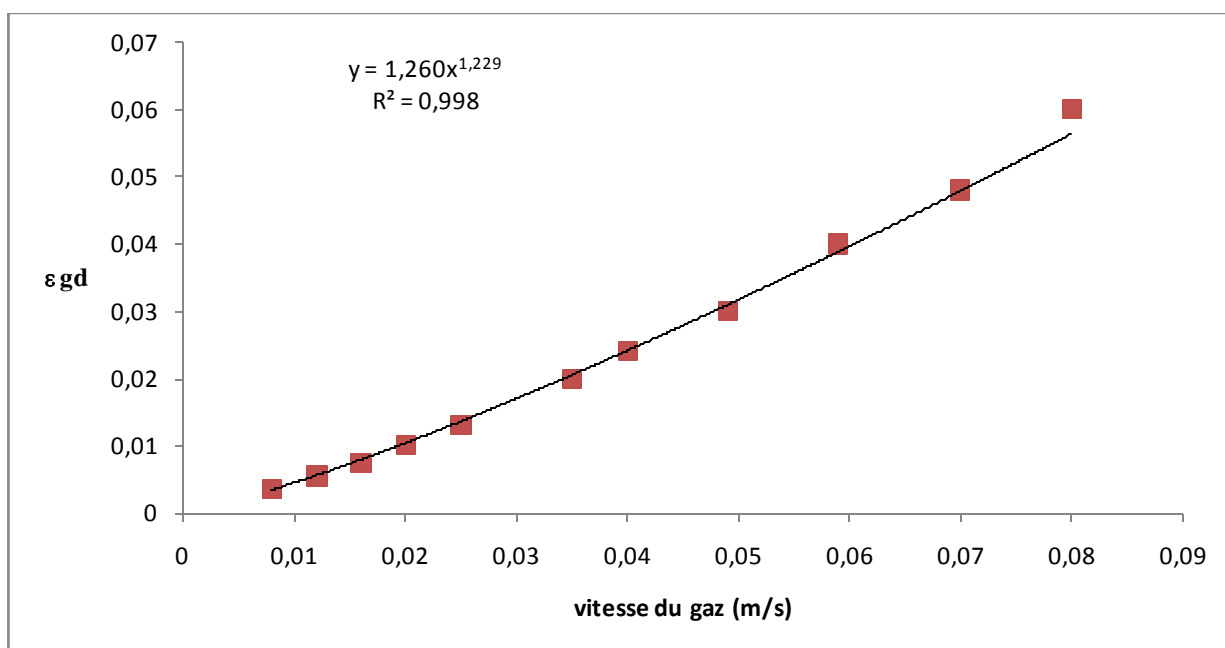


Figure.III.44. Evolution de la rétention gazeuse dans le downcomer en fonction de la vitesse du gaz

La plupart des auteurs[21] ont montré que la rétention gazeuse varie linéairement avec la vitesse superficielle du gaz ( $U_g$ ) et leurs résultats expérimentaux sont bien corrélés par une relation de type:  $\epsilon_g \sim U_g^n$  et qu'il existe une relation linéaire entre les rétentions dans le riser et le downcomer et est donnée par:  $\epsilon_{gd} = a\epsilon_{gr} - b$  ou  $a$  et  $b$  sont des paramètres qui dépendent de la géométrie du réacteur, des propriétés physicochimiques du liquide et du type du distributeur. Généralement, la rétention gazeuse dans le riser ( $\epsilon_{gr}$ ) est supérieure à celle dans le downcomer ( $\epsilon_{gd}$ ) comme le montre la figure III.45

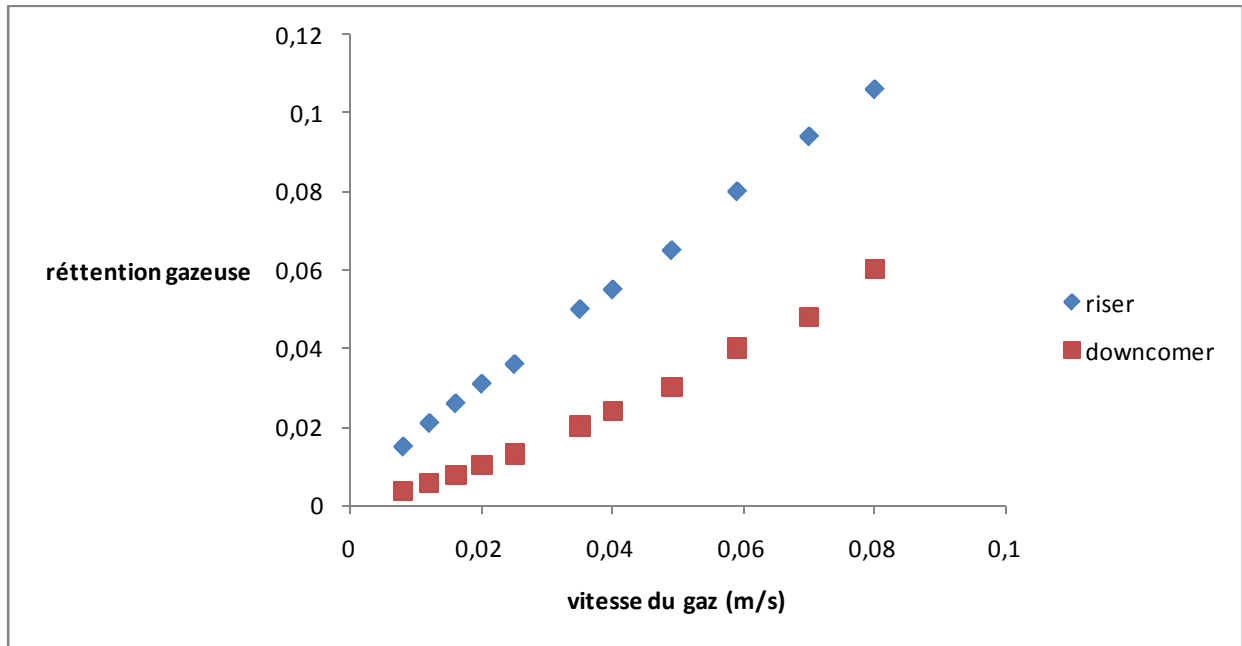


Figure.III.45. Evolution de la rétention gazeuse en fonction de la vitesse du gaz

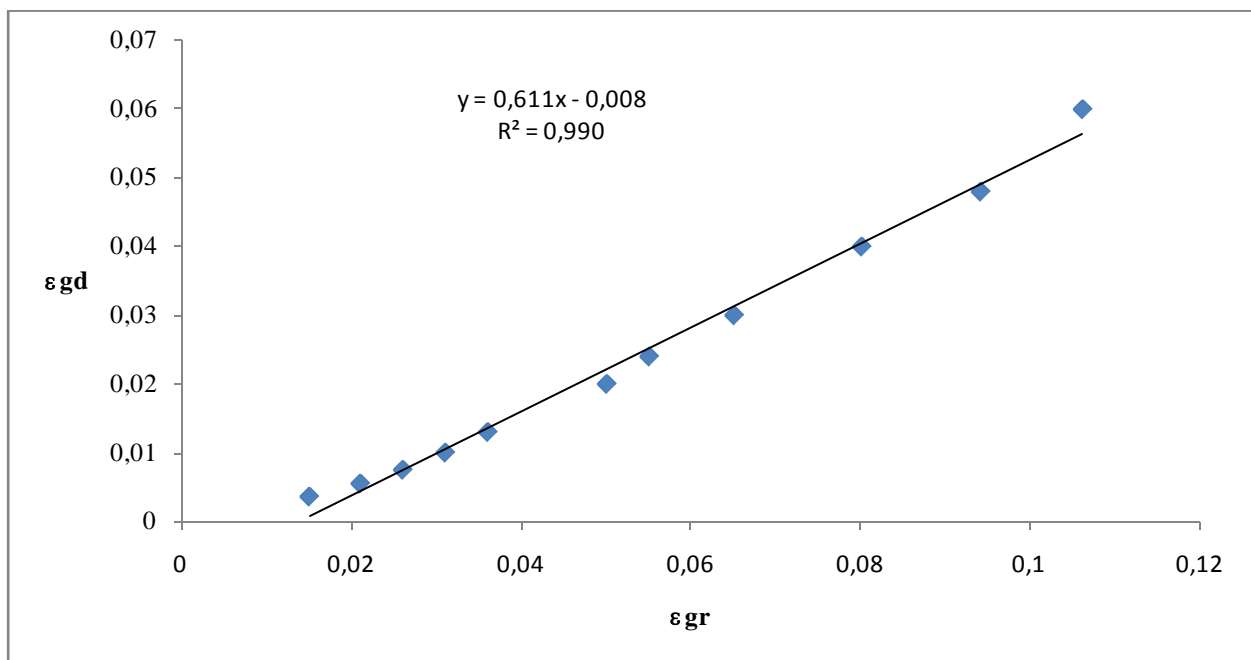


Figure.III.46. Relation entre  $\epsilon_{gd}$  en fonction de  $\epsilon_{gr}$

La rétention globale peut être aussi déduite à partir des mesures directes des rétentions gazeuses dans le riser et le downcomer[27].

$$\epsilon_g = \frac{A_r \epsilon_{gr} + A_{gd} \epsilon_d}{A_r + A_d} \tag{III.15}$$

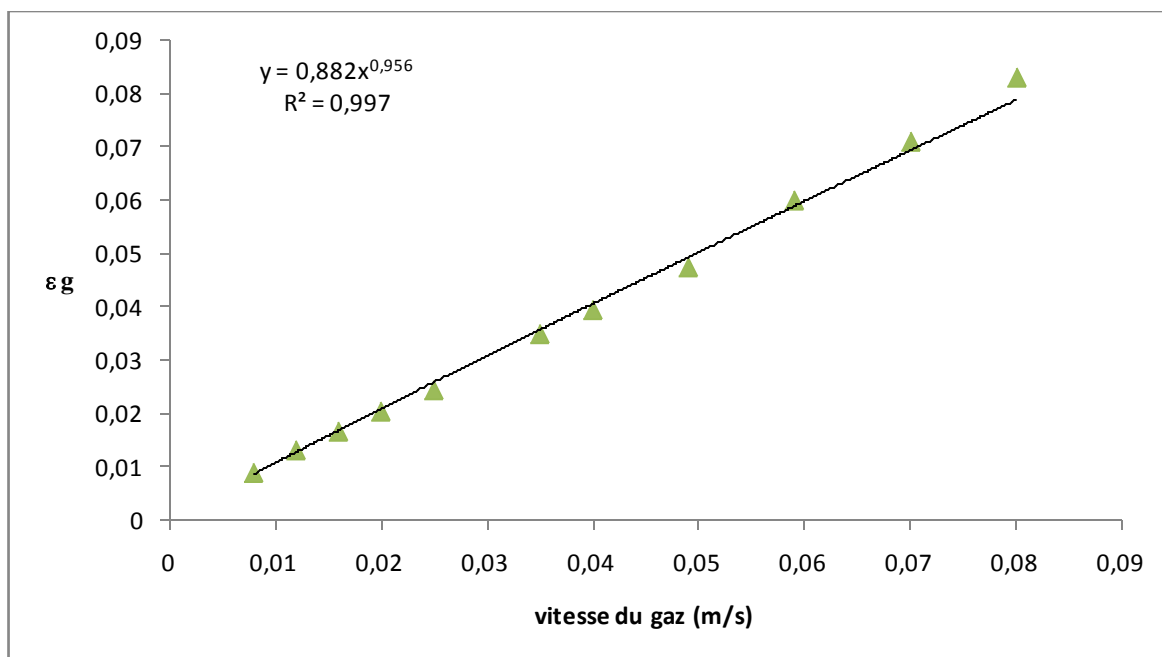


Figure III.47. Evolution de la rétention gazeuse globale en fonction de la vitesse du gaz

Le tableau suivant résume quelques corrélations obtenues dans le cas des réacteurs airlifts.

Tableau III.9. Corrélations relatives à l'hydrodynamique dans un réacteur airlift rectangulaire

référence	Corrélations	conditions
Gourich et al (2005)	$\varepsilon_{gr} = 0,83u_g^{0,85}$	$A_d/A_r = 1$ , système air-eau, $0,008 < U_{gr} < 0,08$ m/s
<b>Présent travail</b>	$\varepsilon_{gr} = 0,8641u_g^{0,8465}$	$A_d/A_r = 1$ , système air-eau, $0,008 < U_{gr} < 0,08$ m/s
Gourich et al (2005)	$\varepsilon_{gd} = 0,94\varepsilon_{gr} - 0,016$	$A_d/A_r = 1$ , système air-eau, $0,008 < U_{gr} < 0,08$ m/s
<b>Présent travail</b>	$\varepsilon_{gd} = 0,6116\varepsilon_{gr} - 0,0084$	$A_d/A_r = 1$ , système air-eau, $0,008 < U_{gr} < 0,08$ m/s
Choi et al (1996)	$\varepsilon_{gd} = 0,988\varepsilon_{gr} - 0,016$	$A_d/A_r = 1$ , système air-eau, $0 < U_{gr} < 0,08$ m/s
Couvert et al (2001)	$\varepsilon_{gr} = 1,81u_g^{1,03}$	$A_d/A_r = 1$ , système air-eau, $0 < U_{gr} < 0,04$ m/s

La différence obtenue entre les corrélations issues de la modélisation avec celles obtenues par Gourich et al [21] peut être attribuée à une imprécision du maillage et à la négligence du **terme transitoire** dans l'équation de quantité de mouvement.

Il existe aussi une différence entre les résultats obtenus par Gourich et ceux obtenus par Choi et Couvert. Ceci est dû au distributeur à orifice unique (3,5mm de diamètre utilisé par Gourich) qui crée des distributions de tailles de bulles assez larges ; ce qui favorise la recirculation du gaz et induit une diminution de la rétention gazeuse, contrairement au distributeur utilisé par Choi et al qui est un distributeur multi-orifice de 30 trous de 2mm de diamètre chacun. Les conditions opératoires ont aussi un effet sur les caractéristiques hydrodynamiques ( $0 < U_{gr} < 0,04\text{m/s}$  dans les travaux de Couvert et al).

### III.5.6. Influence de la géométrie du réacteur airlift

Pour les configurations simples, l'influence de la géométrie du réacteur airlift sur l'évolution des principaux paramètres hydrodynamiques se réduit, en général, à l'effet du rapport des sections Riser/Downcomer ( $A_r/A_d$ ).

Afin d'étudier l'influence du rapport des sections Riser/Downcomer, nous avons pris les cas suivants :

- le riser et le downcomer sont de sections égales, donc le rapport  $A_r/A_d = 1$ ,
- le diamètre du riser et du downcomer sont respectivement 0.05m et 0.1m. Par conséquent, le rapport des sections de ces deux compartiments ( $A_r/A_d$ ) est de 0.5.

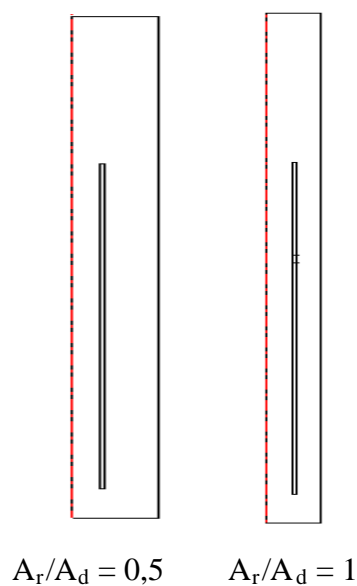


Figure.III.48.Présentation de la géométrie des deux réacteurs airlifts.

Le même maillage a été utilisé dans le cas où le rapport  $A_r/A_d = 1$  mais avec un nombre d'éléments de 2938 comme c'est illustré dans la figure suivante.

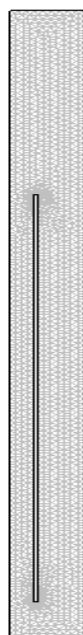


Figure.III.49. Maillage du réacteur airlift avec  $A_r/A_d = 0,5$

La figure suivante montre le profil radial de la vitesse du liquide pour les deux rapports de section.

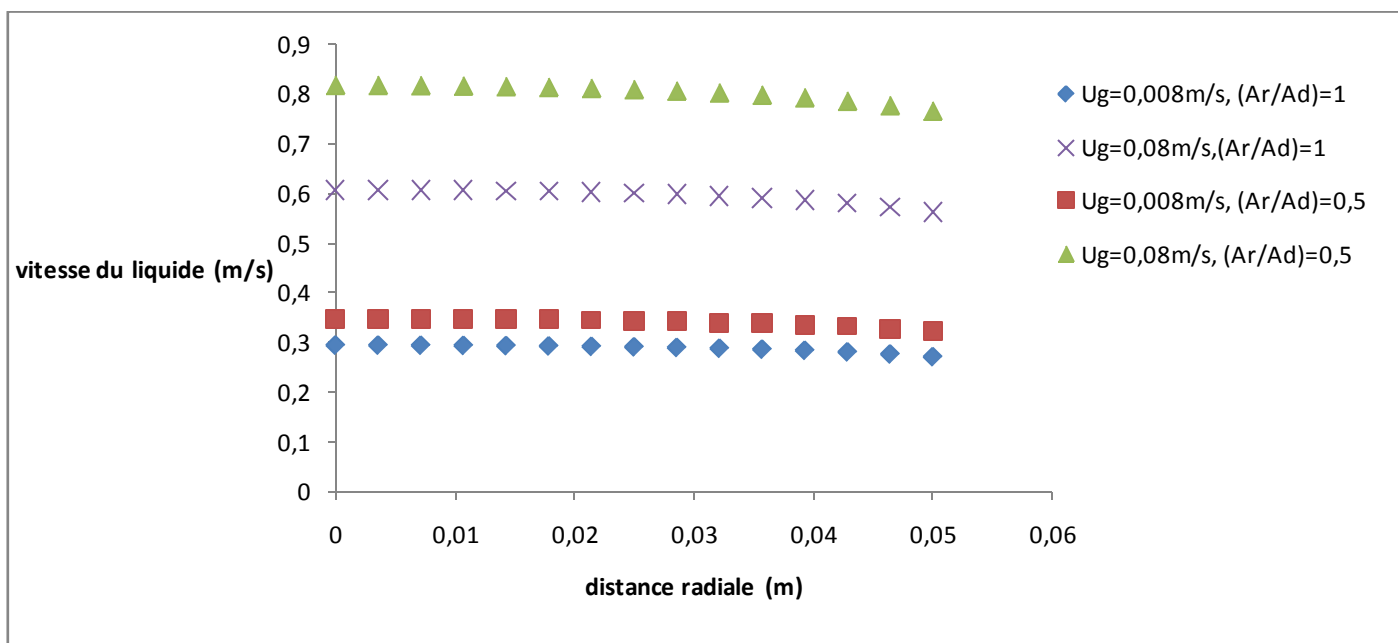


Figure.III.50.Profil radial de la vitesse du liquide pour les deux configurations

En effet, l'augmentation du diamètre du Downcomer provoque une diminution des pertes de charge (pertes de charges en haut à l'entrée du Downcomer et dans la jonction basse du réacteur) ce qui permet une augmentation de la vitesse de la circulation du liquide.

On remarque que l'écart entre la vitesse du liquide entre les deux configurations est très prononcé lorsque la vitesse du gaz est élevée.

La figure III.51 montre l'évolution de la rétention gazeuse dans le riser en fonction de la vitesse du gaz pour les deux configurations.

Lorsque le rapport  $Ad/Ar$  augmente, une diminution de la rétention de gaz dans le Riser est observée. En effet, l'augmentation du diamètre du Downcomer provoque une diminution des pertes de charge (pertes de charges en haut à l'entrée du Downcomer et dans la jonction basse du réacteur) ce qui permet une augmentation de la vitesse de la circulation du liquide, d'où une baisse du temps de séjour des bulles dans le réacteur et par conséquent une diminution de la rétention gazeuse.

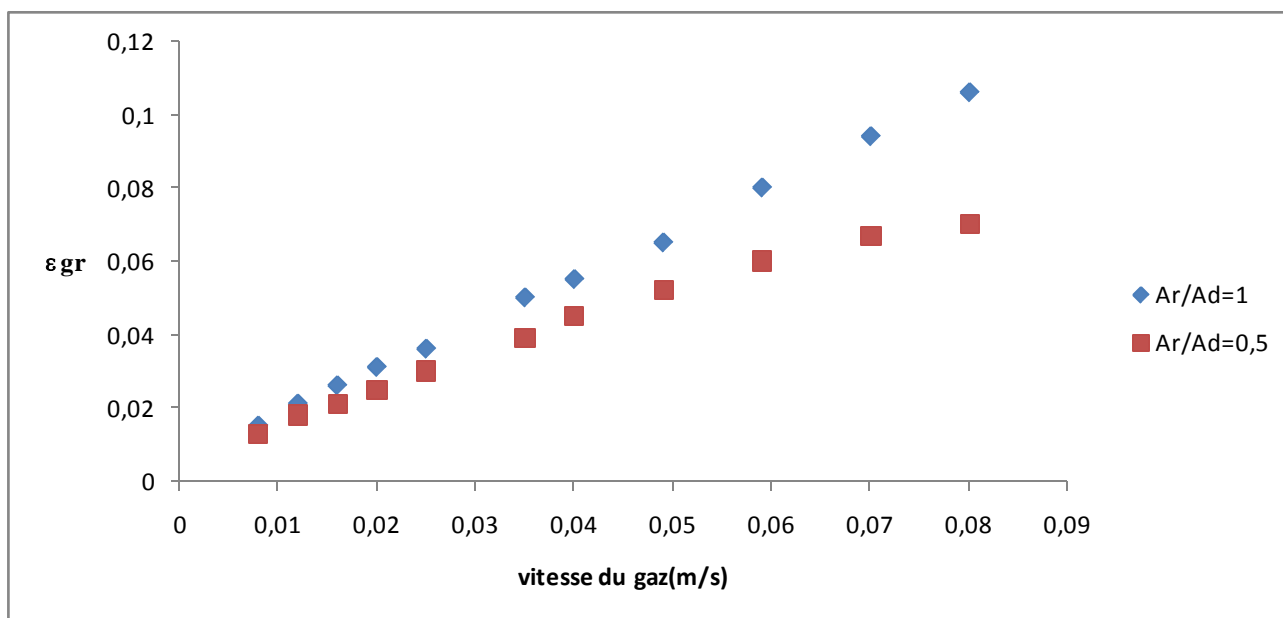
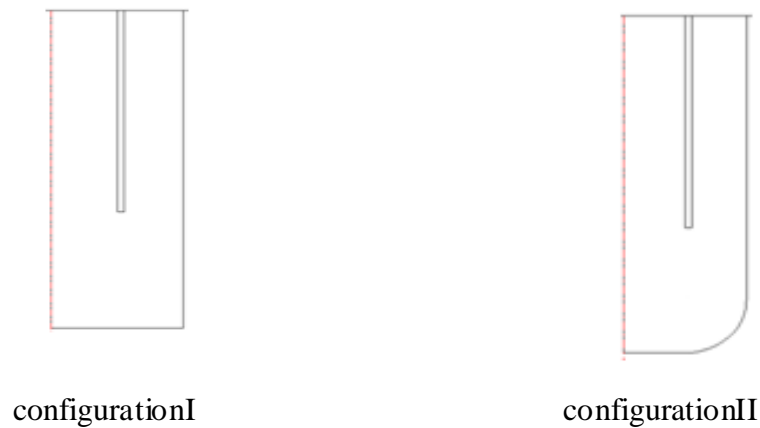


Figure.III.51.Variation de la rétention gazeuse dans le riser en fonction de la vitesse du gaz

### III.5.7. Influence de la géométrie de la base du réacteur airlift

D'après (Flickinger et Drew., 1999) [44], la géométrie de la base peut avoir une influence significative sur la rétention gazeuse et la vitesse du liquide. La figure suivante montre la géométrie de la base de deux réacteurs airlift : la première est celle étudiée par Gourich et al, et la deuxième présente une courbure au niveau de la section du downcomer.



La configuration II présente une courbure au niveau de la section basse du downcomer. D'après la littérature, la zone courbée nécessite un maillage plus raffiné.

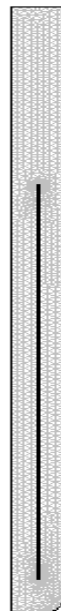


Figure .III.52. Maillage du réacteur airlift (configuration II)

La figure III.53. Montre les champs de la fraction volumique et de la vitesse du liquide pour une vitesse du gaz de 0,012 m/s et ce pour la configuration II.

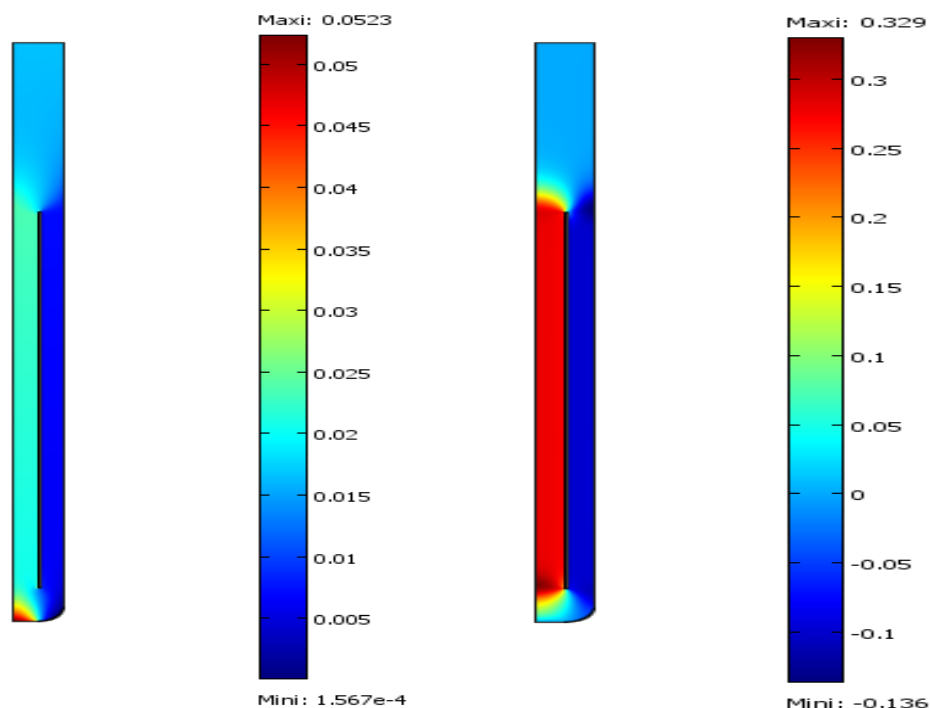


Figure.III.53.Champs de la rétention gazeuse et de la vitesse du liquide (config II)

Afin de voir l'influence de la géométrie de la base du réacteur airlift, nous avons représenté les profils radiaux de la vitesse du liquide et de la rétention gazeuse et ce pour différentes vitesses du gaz et à une hauteur de 0,8m.(Seule la section du riser du réacteur airlift est considérée).

D'après les figures III.54 et III.55, on remarque que la géométrie de la base du réacteur airlift a une légère influence sur la vitesse du liquide pour les différentes vitesses de gaz testées. Ceci est dû à la présence des coudes (changement de direction) aux extrémités du riser et du downcomer dans la configuration I contrairement à la configuration II où le coude est présent uniquement à l'extrémité du riser. Les pertes dues aux frottements sont d'ailleurs essentiellement localisées dans les singularités aux extrémités des compartiments où les vitesses sont généralement assez élevées. Cette influence diminue avec l'augmentation de la vitesse du gaz. En ce qui concerne la rétention gazeuse, aucune influence n'a été observée.

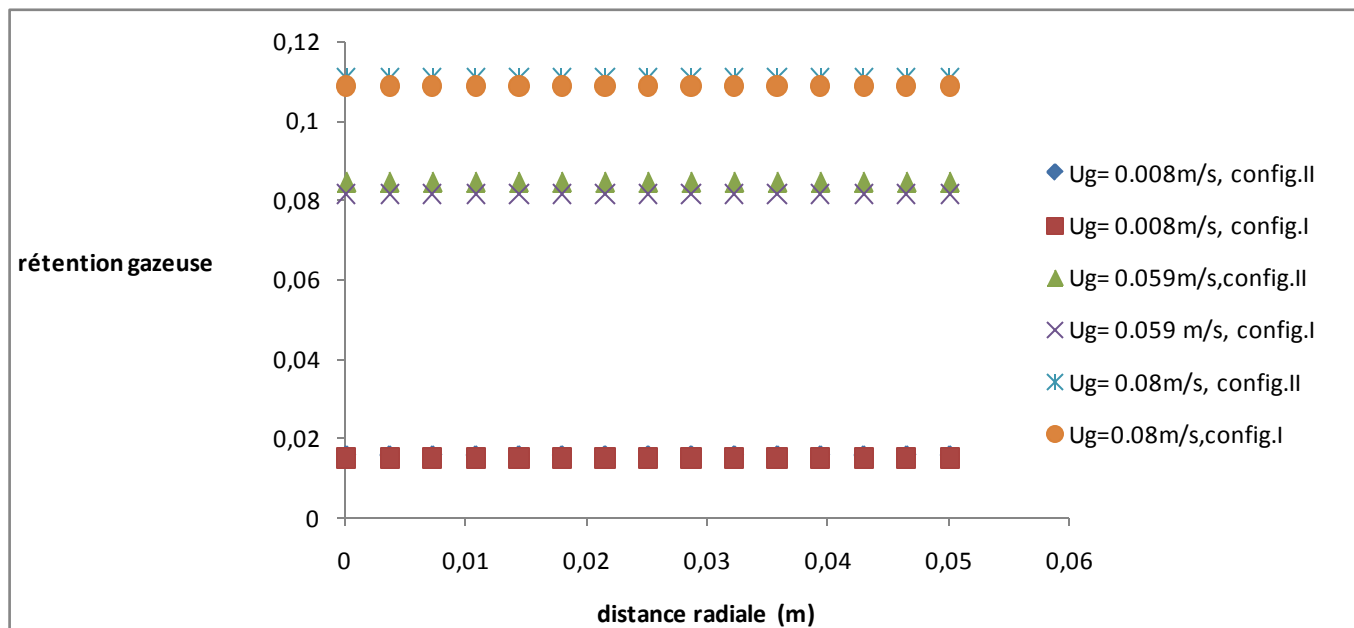


Figure .III.54.Profil radial de la rétention gazeuse à différentes vitesses de gaz

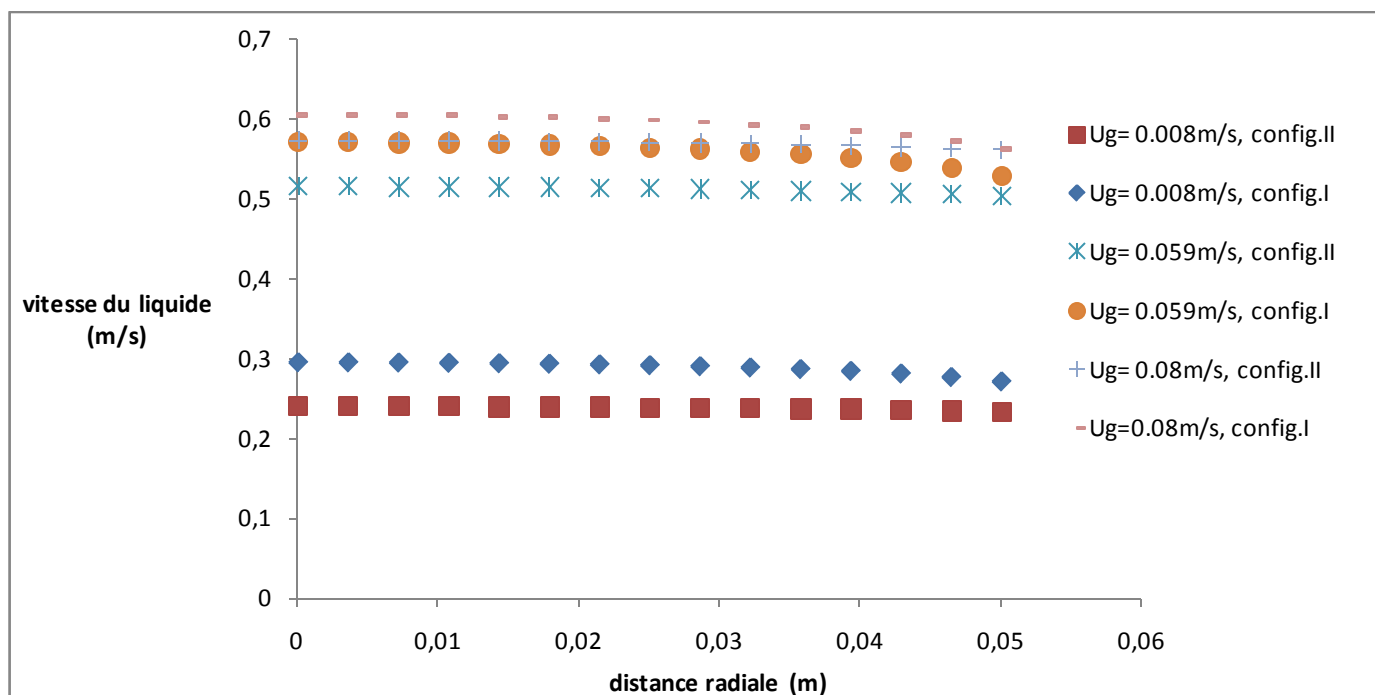


Figure .III.55. Profil radial de la vitesse du liquide à différentes vitesses de gaz

### III.5.8.Conclusion

L'étude hydrodynamique a montré que la rétention gazeuse dans le riser  $\epsilon_{gr}$  varie comme  $U_{gr}^{0.85}$  et qu'il existe une relation linéaire entre les taux de gaz dans le riser  $\epsilon_{gr}$  et le downcomer  $\epsilon_{gd}$  telle que  $\epsilon_{gr} \approx \epsilon_{gd} + \alpha$  où  $\alpha$  est une constante. Les mesures de la vitesse

du liquide ont confirmé l'existence d'un palier dès que  $U_{gr} > 0.04$  m/s. En ce qui concerne l'influence de la géométrie sur l'hydrodynamique, il a été trouvé que l'augmentation du diamètre du Downcomer provoque une diminution des pertes de charge (pertes de charges en haut à l'entrée du Downcomer et dans la jonction basse du réacteur) ce qui permet une augmentation de la vitesse de la circulation du liquide, d'où une baisse du temps de séjour des bulles dans le réacteur et par conséquent une diminution de la rétention gazeuse.

# Chapitre IV

## Modélisation du transfert de matière

## IV.1. Introduction

La nature des rejets de gaz issus principalement d'unités industrielles, est devenue un souci majeur pour les pouvoirs publics et les organisations internationales concernées par la protection de l'environnement. A titre d'exemple, les industries pétrochimiques peuvent être citées car elles peuvent constituer des sources de pollution de l'atmosphère assez importantes.

Par conséquent, ceci a motivé et encouragé le développement de nouvelles techniques de dépollution ou l'amélioration de celles déjà existantes, et dont l'objectif est de pouvoir se conformer aux normes imposées à l'échelle internationale aux concentrations des espèces polluantes renfermées par les rejets.

En effet différentes techniques de traitement des effluents gazeux surtout industriels, existent. Elles incluent principalement l'adsorption, la condensation, l'absorption avec ou sans réaction chimique, où cette dernière s'est avérée comme étant une opération assez performante dans la dépollution des effluents gazeux pollués, et qui a été retenue dans le présent travail, sous l'aspect de la modélisation. Par exemple, l'absorption réactive s'est montrée assez efficace pour l'élimination de certains gaz acides tels que le  $\text{CO}_2$  et le  $\text{H}_2\text{S}$  véhiculés par certains effluents industriels.

Ceci explique aussi l'expansion formidable montrée par les technologies de purification de gaz où parmi les éléments devant être éliminés lors d'un procédé de purification,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_4$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{CO}$ ... etc.

Les absorbeurs ont tous pour but de réaliser le meilleur échange de matière entre une phase liquide et une phase gazeuse. Ils doivent donc être équipés de dispositifs internes qui, d'une part et favorisent la dispersion de la phase gazeuse dans la phase liquide ou au contraire permet aussi l'obtention d'une grande surface de contact (aire interfaciale).

Après l'étude hydrodynamique effectuée sur quatre types de réacteurs gaz/liquide, nous présentons dans ce chapitre la caractérisation du point de vue transfert de matière dans une colonne d'absorption du dioxyde de carbone en déterminant les résultats concernant le coefficient volumétrique de transfert de masse côté gaz  $K_y a$  ainsi que l'influence du débit de liquide sur ce dernier.

Afin de déterminer ces paramètres nous avons mis en œuvre l'absorption sans réaction chimique.

## IV.2.Aspects théoriques du transfert de matière gaz-liquide

### IV.2.1. Transfert de matière dans les réacteurs gaz-liquide :

Pour caractériser le transfert de masse au niveau d'une interface gaz-liquide, un coefficient partiel ou local de transfert de matière  $k_L$  en phase liquide et  $k_G$  en phase gazeuse est généralement défini. Ces deux coefficients représentent le rapport entre le flux de transfert et une force motrice caractéristique qui peut être, un gradient de concentration ou de pression. Ici nous l'exprimons en fonction de l'écart de concentration entre l'interface et le milieu loin de celle-ci :

$$k_L = \frac{\varphi}{C_{A,Li} - C_{AL}} \quad k_G = \frac{\varphi}{C_{A,G} - C_{A,Gi}}$$

IV.1

On note :

$\varphi$  ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) : flux spécifique moyen d'absorption par unité d'aire interfaciale ;

$C_{A,G}, C_{A,Gi}$  ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ ) : concentration du composé A, au sein du gaz et à l'interface respectivement ;

$C_{A,L}, C_{A,Li}$  ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ ) : concentration du composé A, au sein du liquide et à l'interface respectivement.

A l'interface, les concentrations sont à l'équilibre et suivent la loi de Henry , à savoir qu'il y a proportionnalité entre la concentration du composé A dans la phase gazeuse et la concentration de A dissoute dans la phase liquide :

$$C_{A,Gi} = He \cdot C_{A,Li}$$

IV.2

He (-) : est la constante de Henry.

### IV.2.2. Absorption sans réaction chimique:

Dans le cas de l'absorption gaz-liquide sans réaction chimique, il y a transfert du soluté à travers l'interface de la phase gazeuse vers la phase liquide puis dissolution sans réaction dans le liquide. En appliquant le principe d'additivité des résistances en phase gazeuse et en phase liquide, définie par:

$$\frac{1}{K_g} = \frac{1}{k_g} + \frac{H_e}{k_L} \quad \text{IV.3}$$

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{k_L} + \frac{1}{H_e \cdot k_g} \quad \text{IV.4}$$

En négligeant la résistance interfaciale, le flux global d'absorption est donné par la relation suivante :

$$N_A = \varphi \cdot S = k_L \cdot S \cdot (C_{ALi} - C_{AL}) \quad \text{IV.5}$$

$N_A$  ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ) : flux global d'absorption par unité de volume d'absorbeur ;

$S$  ( $\text{m}^{-1}$ ) : aire interfaciale gaz-liquide rapportée à l'unité de volume ;

$C_{ALi}$  ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ ) : concentration de gaz dissous à l'interface ;

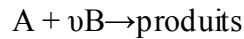
$C_{AL}$  ( $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ ) : concentration de gaz dissous au sein du liquide.

### IV.2.3. Absorption avec réaction chimique:

Généralement les procédés industriels d'épuration d'effluents liquide et gazeux, mettent souvent en œuvre une réaction chimique en phase liquide. Si on considère un système gaz liquide contenant un gaz absorbé A qui réagit de façon irréversible avec un réactif B dissous dans le liquide, A est transféré de la phase gaz vers la phase liquide où il se dissout et réagit avec B, en présence du catalyseur C.

L'absorption d'un gaz accompagnée de réaction chimique en phase liquide permettra d'améliorer l'efficacité de la séparation (par exemple l'absorption du  $\text{CO}_2$  dans une solution aqueuse de carbonate, d'amine, etc...), et la sélectivité de la séparation (par exemple l'absorption du  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{S}$  dans des solutions d'éthanolamine). La réaction chimique modifie le profil de concentration à proximité de l'interface et de ce fait affecte le flux de transfert vers la phase où se déroule la réaction.

Considérons donc la réaction stoechiométrique :



$\nu$  : Coefficient stoechiométrique /B.

La vitesse de consommation de A (en mole /m<sup>3</sup>.s) dans la phase liquide est de la forme

$$r_A = k^* \cdot C_A^m \cdot C_B^n$$

$k^*$  : constante de la vitesse de la réaction (s<sup>-1</sup>),

$m, n$  : ordres partiels respectifs par rapport à A et B,

$C_A$  : concentration du gaz dissous dans le liquide (mole/m<sup>3</sup>),

$C_B$  : concentration du réactif B dans la phase liquide (mole/m<sup>3</sup>),

Le flux spécifique d'absorption avec réaction chimique s'écrit d'après :

$$\varphi = E \cdot k_{AL} \cdot (C_{Ai} - C_{AL})$$

IV.6

$C_{AL}$  : concentration du gaz dans le liquide (mole.m<sup>-3</sup>),

$C_{Ai}$  : concentration du gaz à l'interface (mole.m<sup>-3</sup>),

$E$  : facteur d'accélération,

$\varphi$  : flux de transfert de matière (mole.m<sup>-2</sup>.s),

$k_{AL}$  : coefficient de transfert de matière partiel de composé A côté liquide (m.s<sup>-1</sup>).

### IV.3. Modélisation de la colonne d'absorption

Un contacteur doit surtout assurer des transferts de matière efficaces entre les phases en présence. Dans le cas des systèmes gaz-liquide, l'absorption d'un constituant gazeux peut se faire par simple dissolution ou bien par dissolution suivie d'une réaction dans la phase liquide. Pour ces deux utilisations, les transferts de matière sont basés sur l'existence d'une différence de concentrations entre les phases.

La colonne d'absorption qui a été étudiée expérimentalement par Michael Morin (2008) est une colonne à garnissages structurés avec une hauteur de 32.38cm, un diamètre de 4 cm, et est entièrement fabriquée en verre.

La circulation du liquide à travers toute la colonne est assurée à l'aide d'une pompe qui refoule des débits variant entre 0,23 et 0,4 L/min.



Figure IV.1. Schéma de la colonne d'absorption [50]

Dans cette étude, les débits de l'air et du  $\text{CO}_2$  sont constants et sont égaux à 1,5 L/min et 0,3 L/min respectivement. L'air entre dans la colonne avec une fraction molaire de 0,175 en  $\text{CO}_2$ . Nous nous intéressons à l'évolution de la concentration du  $\text{CO}_2$  le long de la colonne d'absorption dans les deux phases et ce à différents débits de liquide. La détermination du coefficient volumétrique du transfert de matière (côté gaz) à partir des corrélations a fait aussi l'objet de cette partie de ce travail.

### IV.3.1. Formulation mathématique du problème

Deux équations de convection-diffusion sont utilisées, l'une pour la phase liquide (eau) et l'autre pour la phase gazeuse (air +CO<sub>2</sub>). Cette équation est donnée

$$\text{par : } \frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \cdot \nabla C_i) = R_i - u \nabla C_i \quad \text{IV.7}$$

avec :

$C_i$  : concentration du CO<sub>2</sub> (mol/m<sup>3</sup>) ;

$D_i$  : coefficient de diffusion du CO<sub>2</sub> (m<sup>2</sup>/s) ;

$u$  : vitesse de l'écoulement (m/s) ;

$R_i$  : vitesse d'absorption.

Dans cette étude, la vitesse d'absorption est donnée par unité de volume. Elle est donnée par :  $R_i = K_y a \cdot (y_A - y_A^*)$

avec :

$y_A$  : fraction molaire du CO<sub>2</sub> dans le gaz ;

$y_A^*$  : fraction molaire du CO<sub>2</sub> dans le gaz qui est en équilibre avec la phase liquide.

➤ **Hypothèses simplificatrices :**

Afin de simplifier la résolution de l'équation du modèle, les hypothèses suivantes ont été proposées :

- l'écoulement est en régime permanent ;
- le processus est isotherme ;

### IV.3.2. Présentation des conditions de simulation

#### IV.3.2.1. Solubilité des gaz dans le liquide

La connaissance de la solubilité d'un gaz dans un liquide est essentielle pour le choix et le dimensionnement d'un contacteur.

Tableau IV.1. Valeurs des diffusivités et de la constante d'Henry [73]

Grandeur	valeur
Diffusivité du CO <sub>2</sub> dans l'eau (m <sup>2</sup> .s)	1,8.10 <sup>-9</sup>
Diffusivité du CO <sub>2</sub> dans l'air (m <sup>2</sup> .s)	1,6.10 <sup>-5</sup>
Constante d'Henry à 273K (atm)	1420

#### IV.3.2.2. Domaine de calcul : maillage 2D axisymétrique

Nous avons effectué un maillage standard (type triangulaire) avec 368 éléments.

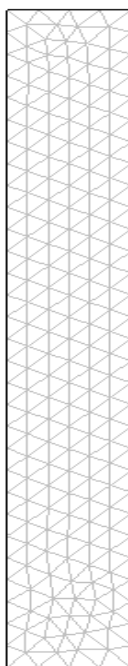


Figure IV.2. Maillage 2D axisymétrique de la colonne d'absorption.

#### IV.3.2.3. Conditions aux limites

Au modèle numérique, il est indispensable de lui fournir les conditions aux limites.



Figure IV.3. Présentation des conditions aux limites

➤ **Phase gazeuse**

limites		1	2	3	4
Types		Axisymétrie	concentration	Flux convectif	Isolation symétrie
concentration	mol/m <sup>3</sup>	0	<b>C10</b>	0	0

Avec **C10** : concentration initiale du CO<sub>2</sub> dans la phase gazeuse, et est déterminée à partir de la loi des gaz parfaits.

➤ **Phase liquide**

limites		1	2	3	4
Types		Axisymétrie	Flux convectif	concentration	Isolation symétrie
concentration	mol/m <sup>3</sup>	0	0	<b>C20</b>	0

Avec **C20** : concentration initiale du CO<sub>2</sub> dans la phase liquide, et est nulle.

## IV.4. Résultats et discussion

### IV.4.1. Analyse de la phase gazeuse et de la phase liquide

La figure suivante montre l'évolution de la fraction molaire du dioxyde de carbone le long de l'absorbeur. On voit bien que l'air entre dans l'absorbeur avec une composition de 0,175 et quitte l'absorbeur avec une composition de 0,163. (Donc une composition de 0,012 du  $\text{CO}_2$  a été absorbée). Une composition de 0,165 en  $\text{CO}_2$  quittant l'absorbeur a été obtenue expérimentalement. On peut conclure que les résultats expérimentaux et simulés pour un débit de liquide de 0,23 L/min sont comparables.

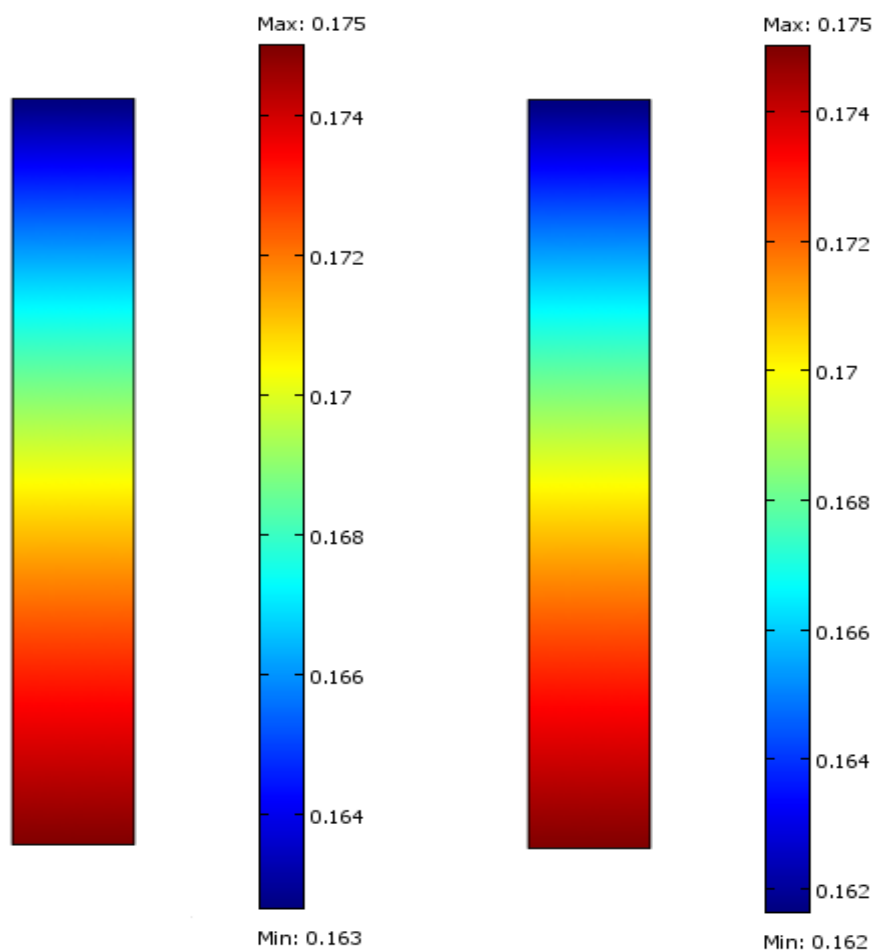


Figure IV.4. Evolution de la fraction molaire du  $\text{CO}_2$  dans le gaz le long de l'absorbeur à différents débits de liquide (à gauche 0,23L/min, à droite 0,284L/min)

De même, la figure suivante montre l'évolution de la fraction molaire du CO<sub>2</sub> dans le liquide le long de l'absorbeur.

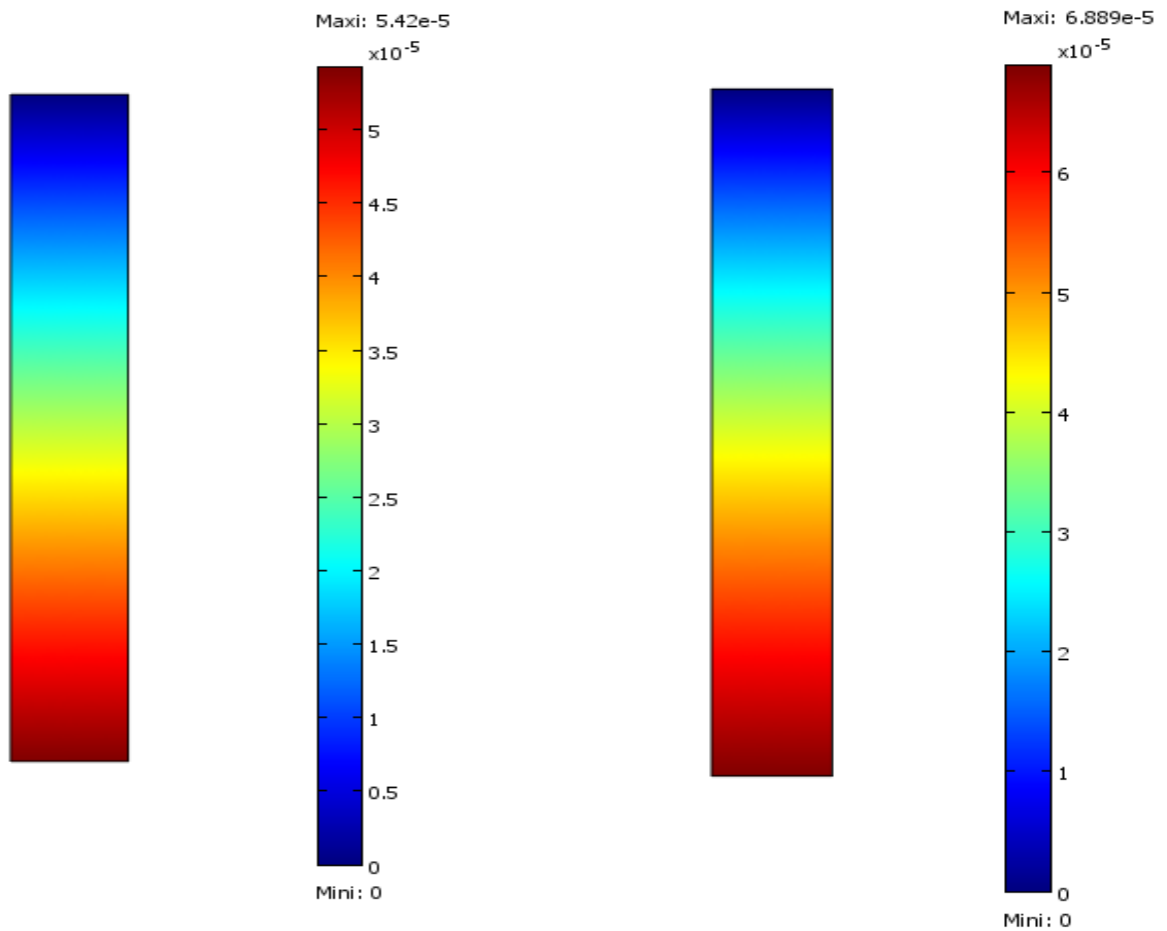


Figure IV.5. Evolution de la fraction molaire du CO<sub>2</sub> dans le liquide le long de l'absorbeur à différents débits de liquide (à gauche 0,4L/min, à droite 0,284L/min)

Le tableau suivant résume les résultats obtenus pour tous les débits de liquide testés.

Tableau IV.2. Comparaison entre delta y simulées et expérimentales pour différents débits de liquide

Débit d'air (L/min)	Débit du CO <sub>2</sub> (L/min)	Débit d'eau (L/min)	y <sub>A1</sub>	y <sub>A2</sub> expérimental [50]	y <sub>A2</sub> simulée	(y <sub>A1</sub> - y <sub>A2</sub> ) expérimental	(y <sub>A1</sub> - y <sub>A2</sub> ) simulée
1,5	0,3	0,23	0,175	0,165	0,163	0,01	0,012
1,5	0,3	0,284	0,175	0,164	0,162	0,011	0,013
1,5	0,3	0,348	0,175	0,162	0,161	0,013	0,014
1,5	0,3	0,4	0,175	0,161	0,160	0,014	0,015

Avec :

$y_{A1}$  : fraction molaire du  $\text{CO}_2$  dans le gaz à l'entrée de l'absorbeur (bas de colonne) ;

$y_{A2}$  : fraction molaire du  $\text{CO}_2$  dans le gaz à la sortie de l'absorbeur (haut de colonne) ;

$\text{delta } y = (y_{A1} - y_{A2})$  : fraction molaire du  $\text{CO}_2$  absorbée.

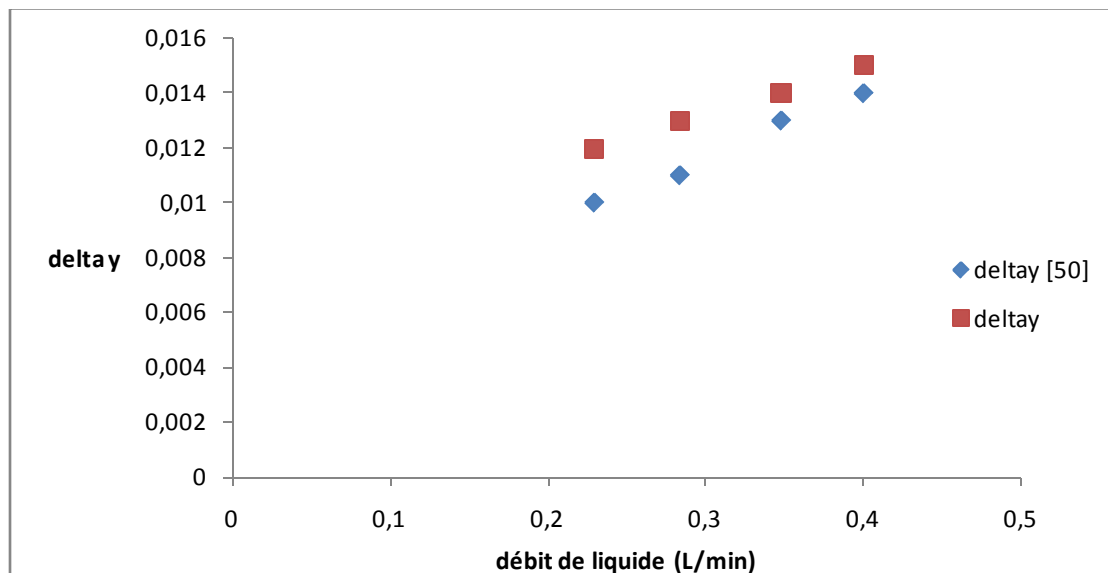


Figure IV.6. Evolution de fraction du  $\text{CO}_2$  absorbée en fonction du débit de liquide

On remarque que plus le débit de liquide utilisé est élevé, plus la concentration du dioxyde de carbone dans l'air diminue. D'après la littérature, on sait que pour un fonctionnement à contre-courant, le liquide arrive en haut de la colonne, il passe à travers un distributeur chargé de répartir uniformément le liquide sur la section de la colonne, et va ensuite ruisseler sous l'effet de la gravité sur un empilement d'éléments de garnissage. Ce ruissellement (étalement) du film liquide permet de développer une grande surface d'échange entre la phase liquide et la phase gazeuse. Plus le débit de liquide est élevé, plus l'étalement est meilleur (plus uniforme). Les espèces chimiques acides présentes en phase gazeuse s'absorbent alors dans la phase liquide. Donc, pour minimiser la concentration du  $\text{CO}_2$  dans la phase gazeuse, il serait souhaitable de travailler avec des débits de liquide élevés.

IV.4.2. Evolution de la concentration du CO<sub>2</sub> le long de l'absorbeur

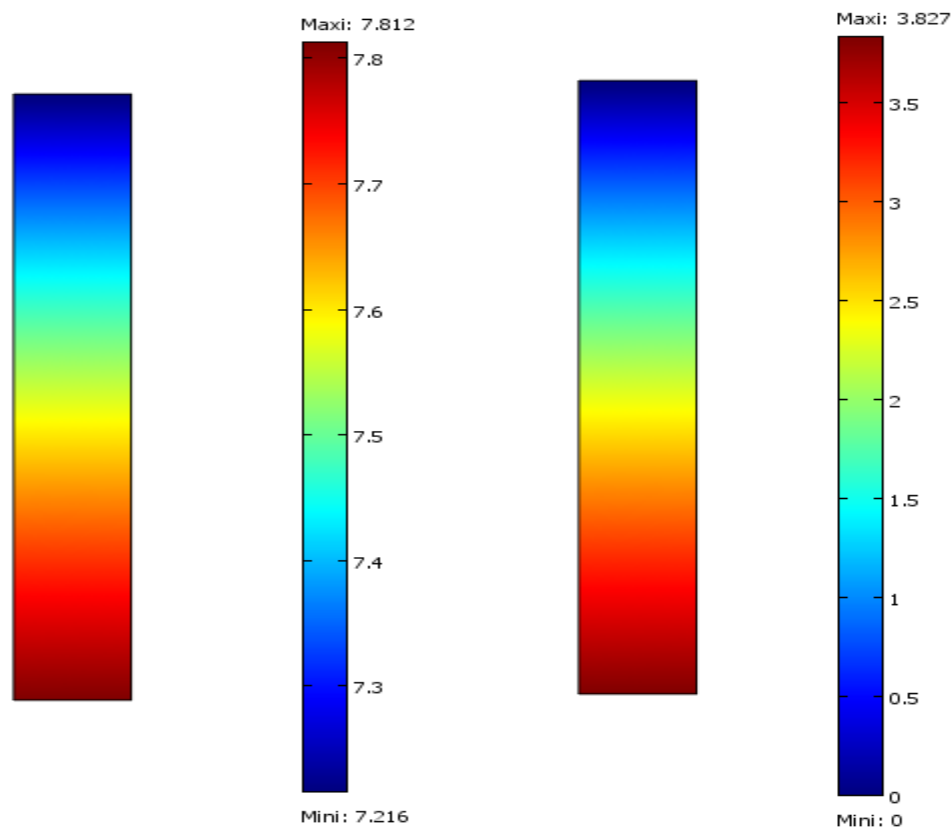


Figure VI.7. Evolution de la concentration du CO<sub>2</sub> le long de l'absorbeur pour un débit de liquide de 0,284L/min dans le gaz (à gauche) et dans le liquide (à droite).

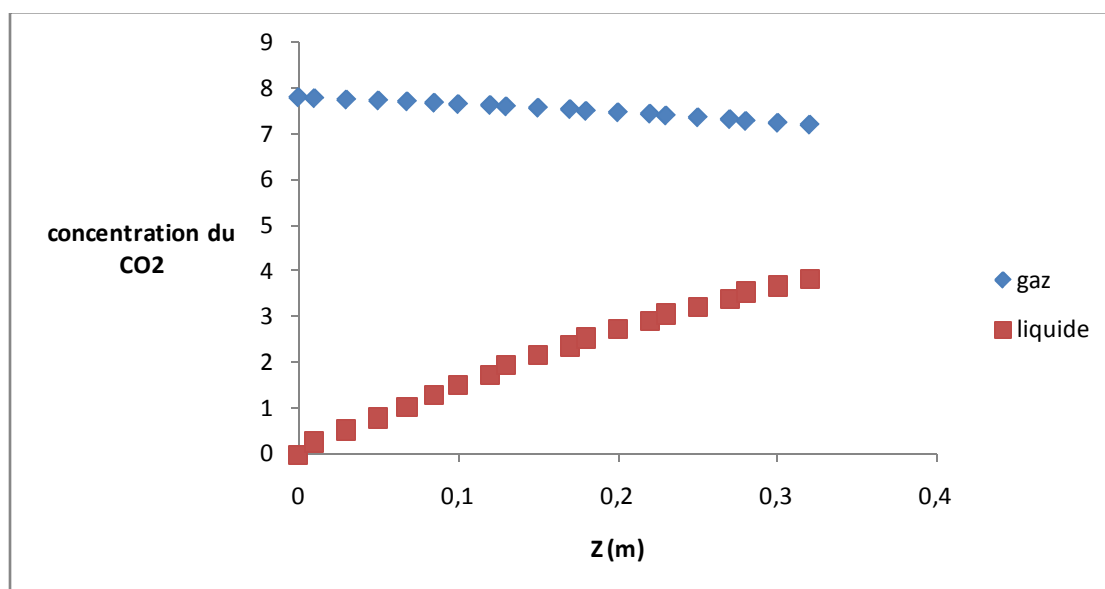
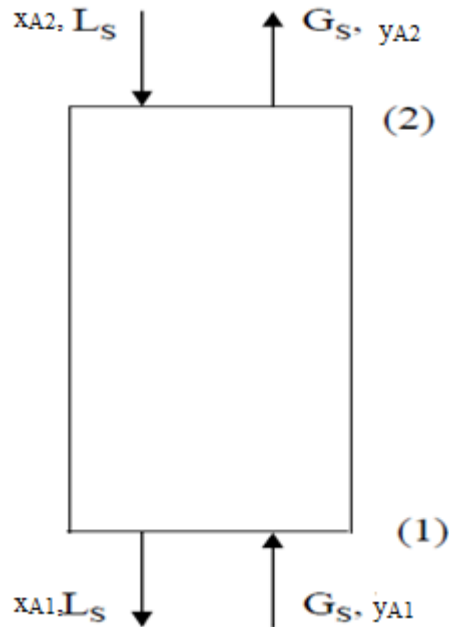


Figure IV. 8. Variation de la concentration du CO<sub>2</sub> en fonction de la hauteur de la colonne.

### IV.4.3. Détermination du coefficient de transfert de matière

Une autre relation importante est entre le débit de liquide et le coefficient de transfert de matière.

Soit une colonne d'absorption (voir figure 4) où circule à contre courant deux phases : liquide [eau] et gaz [air + CO<sub>2</sub> (A)] :



$L_S$  : débit molaire de l'eau (inerte) par unité de section droite de la colonne (mole d'eau/m<sup>2</sup>.s) ;

$G_S$  : débit molaire de l'air (inerte) par unité de section droite de la colonne (mole d'air/m<sup>2</sup>.s) ;

$x_{A1}$ ,  $x_{A2}$  : fraction molaire de A dans le liquide en bas et en haut de colonne ;

$y_{A1}$ ,  $y_{A2}$  : fraction molaire de A dans le gaz en bas et en haut de colonne ;

(1) : Bas de la colonne d'absorption ;

(2) : Sommet de la colonne d'absorption.

Le bilan de matière pour la colonne d'absorption, donne :

$$G_S \cdot y_{A1} + L_S \cdot x_{A2} = G_S \cdot y_{A2} + L_S \cdot x_{A1}$$

$$G_S (y_{A1} - y_{A2}) = L_S (x_{A1} - x_{A2}) \quad [\text{mole de A transféré} / \text{m}^2 \cdot \text{s}].$$

IV.9

La forme différentielle de l'équation (VI.9), s'écrit :

$$G_S \quad dy_A = L_S \quad dx_A$$

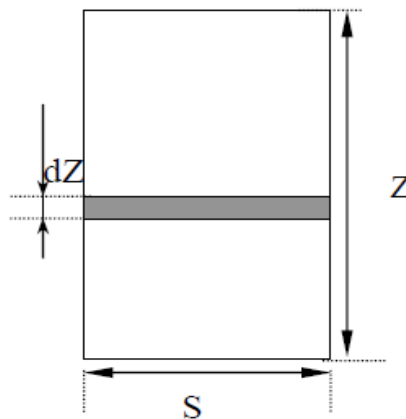
IV.10

Considérons une colonne d'absorption, où :

$S$  : Section droite de la colonne ( $\text{m}^2$ ) ;

$Z$  : Hauteur de la colonne (m) ;

$dZ$  : Hauteur d'un élément de la colonne (m).



Soient :

$[N_A \cdot a \cdot dZ] = [\text{mole de A transféré} / \text{aire interfaciale} \cdot \text{temps}] \cdot [\text{aire interfaciale} / \text{volume de la colonne}] \cdot [\text{hauteur d'un élément de la colonne}]$

$$[N_A \cdot a \cdot dZ] = [\text{mole de A transféré} / \text{m}^2 \cdot \text{s}] \quad \text{IV.11}$$

On constate que les équations (VI.10) et (VI.11) ont la même dimension, d'où :

$$N_A \cdot a \cdot dZ = G_S dy_A = L_S dx_A \quad \text{IV.12}$$

Nous avons aussi :

$$N_A = K_y (y_A - y_A^*) \quad \text{IV.13}$$

À partir des équations (VI.12) et (VI.13), on a :

$$N_A \cdot a \cdot dZ = K_y (y_A - y_A^*) \cdot a \cdot dZ = G_S dy_A \quad \text{IV.14}$$

D'où

$$\int_0^Z dZ = \frac{G_S}{K_y a} \int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{dy_A}{y_A - y_A^*} \quad \text{IV.15}$$

Donc, l'expression générale de la hauteur de la colonne s'écrit :

$$Z = \frac{G_S}{K_y a} \int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{dy_A}{y_A - y_A^*}$$

$\frac{G_S}{K_y a}$  : représente la hauteur d'une unité de transfert ( $H_{Oy}$ )

$\int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{dy_A}{y_A - y_A^*}$  : représente le nombre d'unité de transfert ( $N_{Oy}$ ).

$$Z = H_{Oy} \cdot N_{Oy}$$

$$\text{IV.16}$$

$$K_y a = \frac{G_S}{H_{Oy}}$$

$$\text{IV.17}$$

Pour déterminer la hauteur de l'unité de transfert, il faut d'abord déterminer le nombre d'unité de transfert. Ce dernier est donné par la relation suivante :

$$N_{Oy} = \frac{Y_{A1} - Y_{A2}}{\frac{(Y_{A2} - Y_{A2}^*) - (Y_{A1} - Y_{A1}^*)}{\ln \frac{Y_{A2} - Y_{A2}^*}{Y_{A1} - Y_{A1}^*}}} \quad \text{IV.18}$$

$y_{A1}^* = H \cdot x_{A1}$  ( $x_{A1}$  est donnée par la modélisation. Voir figure IV.5)

$y_{A2}^* = 0$  (car le liquide entre dans l'absorbeur avec une concentration nulle en  $\text{CO}_2$ ).

Tableau IV.3. Évolution du coefficient de transfert de matière en fonction du débit de liquide

Débit de liquide (L/min)	$K_{ya}$ (mol/m <sup>3</sup> .h)
0,23	739,71
0,284	783,41
0,348	927,008
0,4	981,38

La figure suivante montre l'évolution du coefficient du transfert de matière en fonction du débit de liquide.

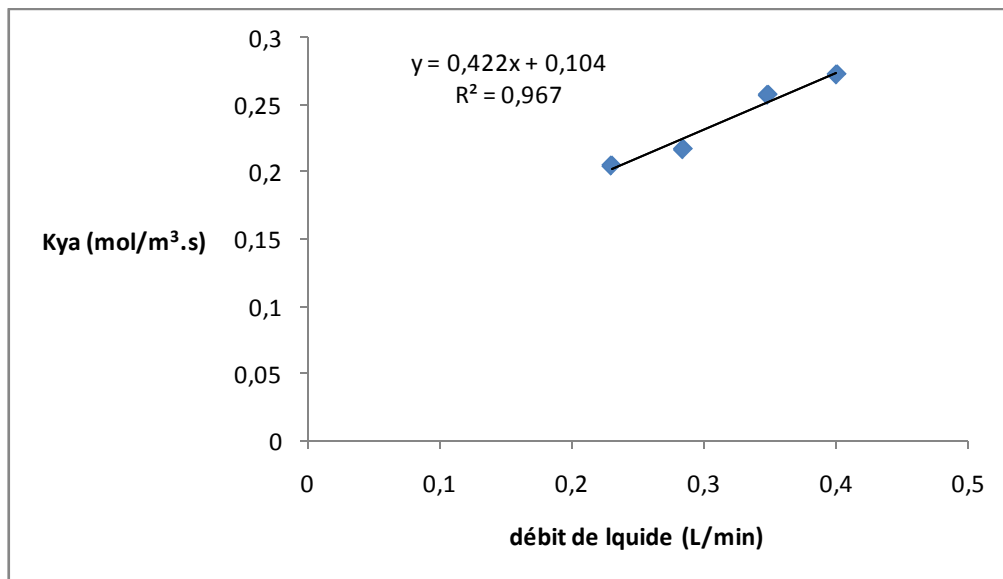


Figure IV.9. Evolution du coefficient du transfert de matière en fonction du débit de liquide.

D'après la figure, on remarque que le coefficient de transfert de matière augmente avec l'augmentation du débit de liquide. Ceci est dû au fait que le coefficient de transfert de matière est proportionnel à la vitesse d'absorption. Donc d'après la relation  $y = 0,423x + 0,104$ , on peut déterminer le coefficient de transfert de matière pour n'importe quel débit de liquide dans le domaine considéré.

#### IV.5. Conclusion

L'augmentation du coefficient volumique du transfert de matière avec la vitesse du liquide s'explique par le fait que l'augmentation de la vitesse du liquide crée une agitation des bulles plus importante. Il y a ainsi diminution de la coalescence, et donc

augmentation de l'aire interfaciale et par conséquent le coefficient volumique du transfert de matière augmente.

Nous pouvons conclure que le débit de liquide a un effet notable sur les performances du transfert de matière dans une colonne d'absorption. Il serait souhaitable de travailler avec des débits élevés.

# Conclusion générale

### *Conclusion générale*

Nous avons présenté dans ce travail une étude des caractéristiques hydrodynamiques de quatre types de réacteurs gaz/liquide : un réacteur canal, un réacteur torique, une colonne à bulles et un réacteur airlift rectangulaire à recirculation interne.

Le réacteur canal étudié est un réacteur gaz/liquide à courants croisés dont l'hydrodynamique globale a été modélisée par deux approches, à savoir : approche systémique et mécanique des fluides numériques. Il a été trouvé que les distributions des temps de séjour du réacteur de type canal peuvent être modélisées avec précision par un modèle piston avec dispersion axiale ou par une cascade de  $J$  réacteurs continus parfaitement agités en série dont les paramètres caractéristiques pour les deux modèles ont été déterminés pour un débit de gaz constant et trois différents débits de liquide. Pour l'approche mécanique des fluides numériques, la distribution de temps de séjour est déduite de la résolution de l'équation de transport pour un traceur passif.

Nous avons ensuite étudié le mélange au sein d'un réacteur torique fermé de 0,14 litres de volume. Il s'est avéré que le modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale représente de façon assez acceptable les courbes expérimentales et ce quelque soit la vitesse et le nombre d'aération utilisés. Par ailleurs, les nombres de Bodenstein obtenus sont supérieurs à 22, ceci peut être expliqué par l'existence au sein du milli réacteur torique d'un écoulement proche de l'écoulement piston.

Dans le cas d'une colonne à bulles, une étude de l'influence des conditions opératoires (vitesse superficielle du gaz et propriétés physiques du liquide) sur la distribution de la rétention gazeuse a été menée. Il ressort que la rétention gazeuse augmente avec l'augmentation de la vitesse du gaz, et diminue avec l'augmentation de la vitesse du liquide, ce qui est en accord avec les résultats de la littérature. La tension superficielle du liquide intervient également dans la distribution de la taille des bulles. En effet, une tension superficielle élevée du liquide favorise la formation de grosses bulles diminuant par conséquent les valeurs de rétention gazeuse au sein de la colonne. De même, la rétention gazeuse diminue avec l'augmentation de la viscosité du liquide. D'autre part, il a été trouvé que la rétention gazeuse est maximale au centre de la colonne.

Pour les configurations simples, l'influence de la géométrie du réacteur airlift sur l'évolution des principaux paramètres hydrodynamiques se réduit, en général, à l'effet du rapport des sections Riser/Downcomer ( $A_r/A_d$ ). Lorsque le rapport  $A_d/A_r$  augmente, une diminution de la rétention de gaz dans le Riser est observée. En effet, l'augmentation du

diamètre du Downcomer provoque une diminution des pertes de charge (pertes de charges en haut à l'entrée du Downcomer et dans la jonction basse du réacteur) ce qui permet une augmentation de la vitesse de la circulation du liquide, d'où une baisse du temps de séjour des bulles dans le réacteur et par conséquent une diminution de la rétention gazeuse.

Notre étude a fait ensuite l'objet de travaux sur le transfert de matière sur une colonne d'absorption. Ainsi les paramètres de transfert de matière les plus caractéristiques de l'efficacité, tels que le coefficient de transfert de matière  $K_L a$  a été déterminé. Il a été trouvé que ce dernier augmente avec l'augmentation du débit de liquide qui crée une agitation des bulles plus importante. Il ya ainsi diminution de la coalescence, et donc augmentation de l'aire interfaciale et par conséquent le coefficient volumique du transfert de matière augmente.

Les perspectives que nous envisageons à la suite de ce travail :

- rechercher une amélioration des performances hydrodynamiques dans la colonne à bulles en intégrant des dispositifs internes,
- étudier le transfert de matière gaz-liquide dans les quatre types de réacteurs considérés dans cette étude ;
- Enfin, envisager la mise au point d'applications de ces quatre types de réacteurs gaz-liquide dans un des domaines de Génie des procédés. Par exemple le traitement des eaux usées.

# Références bibliographiques

## References bibliographiques

- [1]. W.S.Tan, G.C.Dai, W.Ye, J.P.Shen, Local flow behavior of the liquid phase in an airlift bioreactor for potential use in animal cell suspension cultures, *Chemical Engineering Journal* 57 (1995) B31-B36.
- [2]. M. Elena Diaz, Alfredo Iranzob, Daniel Cuadras, Ruben Barberob, Francisco J. Montesa, Miguel A. Galan, Numerical simulation of the gas–liquid flow in a laboratory scale bubble column. Influence of bubble size distribution and non-drag forces, *Chemical Engineering Journal* 139 (2008) 363–379.
- [3]. Tongwang Zhang, Jinfu Wang, Tiefeng Wang, Jing Lin, Yong Jin, Effect of internal on the hydrodynamics in external-loop airlift reactors, *Chemical Engineering and Processing* 44 (2005) 81–87.
- [4]. Andriy Plugatyr, Igor M. Svishchev, Residence time distribution measurements and flow modeling in a supercritical water oxidation reactor: Application of transfer function concept, *J. of Supercritical Fluids* 44 (2008) 31–39.
- [5]. Romain Lemoine, Arsam Behkisha, Laurent Sehabiague, Yannick J. Heintza, Rachid Oukacib, Badie I. Morsia, An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in bubble column and slurry bubble column reactors, *Fuel Processing Technology* 89(2008)322–343.
- [6]. Laura Pramparo, Jeremy Pruvost, Frank Stuber, Josep Font, Agustí Fortuny, Azriel Fabregata, Patrick Legentilhomme, Jack Legrand, Christophe Bengoa, Mixing and hydrodynamics investigation using CFD in a square-sectioned torus reactor in batch and continuous regimes, *Chemical Engineering Journal* 137 (2008) 386–395.
- [7]. Rocio Maceiras, Sebastiao S. Alves, M. Angeles Cancela, Estrella Alvarez, Effect of bubble contamination on gas–liquid mass transfer coefficient on CO<sub>2</sub> absorption in amine solutions, *Chemical Engineering Journal* 137 (2008) 422–427.
- [8]. K. Thaker and D. P. Rao, Effects of gas redispersion and liquid height on gas–liquid hydrodynamics in a multistage bubble column, *Chemical Engineering Research and Design* 85 (2007) 1362–1374.
- [9]. Peter M. Kilonzo, Argyrios Margaritis, M.A. Bergougnou, Jun Tang Yu, YeQin, Influence of the baffle clearance design on hydrodynamics of a two riser rectangular airlift reactor with inverse internal loop and expanded gas–liquid separator, *Chemical Engineering Journal* 121 (2006) 17–26.
- [10]. Kazuhiro Shimizu, Satoshi Takada, Takanori Takahashi, Yoshinori Kawase, Phenomenological simulation model for gas hold-ups and volumetric mass transfer coefficients in external-loop airlift reactors, *Chemical Engineering Journal* 84 (2001) 599–603.

- [11]. Duangkamol Ruen-ngam, Porntip Wongsuchoto, Apiradee Limpanuphap, Tawatchai Charinpanitkul, Prasert Pavasant, Influence of salinity on bubble size distribution and gas–liquid mass transfer in airlift contactors, *Chemical Engineering Journal* 141 (2008) 222–232.
- [12]. J.M. van Baten, R. Krishna, Comparison of hydrodynamics and mass transfer in airlift and bubble column reactors using CFD, *Chemical Engineering Technology* (2003) 1074–1079.
- [13]. J.M. van Baten, J. Ellenberger, R. Krishna, Hydrodynamics of internal air-lift reactors: experiments versus CFD simulations, *Chemical Engineering and Processing* 42 (2003) 733–742.
- [14]. B. Gourich, N. El Azher, C. Vial, M. Belhaj Soulami, M. Ziyad, A. Zoulalianf, Influence of operating conditions and design parameters on hydrodynamics and mass transfer in an emulsion loop–venturi reactor, *Chemical Engineering and Processing* 46 (2007) 139–149.
- [15]. Yann Le Moullec, Olivier Potier, Caroline Gentric, Jean Pierre Leclerc, Flow field and residence time distribution simulation of a cross-flow gas-liquid wastewater treatment reactor using CFD, *Chemical Engineering Science* 63 (2008) 2436–2449.
- [16]. H. Chaumat, A.M. Billet, H. Delmas, Hydrodynamics and mass transfer in bubble column: Influence of liquid phase surface tension, *Chemical Engineering Science* 62 (2007) 7378–7390.
- [17]. G. Olivieri, A. Marzocchella, J.R. van Ommen, P. Salatino, Local and global hydrodynamics in a two-phase internal loop airlift, *Chemical Engineering Science* 62 (2007) 7068–7077.
- [18]. Bouchaïb Gourich, Christophe Vial, Abdel Hafid Essadki, Fouad Allam, Mohammed Belhaj Soulami, Mahfud Ziyad, Identification of flow regimes and transition points in a bubble column through analysis of differential pressure signal—Influence of the coalescence behavior of the liquid phase, *Chemical Engineering and Processing* 45 (2006) 214–223.
- [19]. P. Belleville, L. Nouri, J. Legrand, Mixing characteristics in the torus reactor, *Chemical Engineering and Technology* 15 (1992) 282–289.
- [20]. Marko Laakkonen, Pasi Moilanen, Ville Alopaeus, Juhani Aittamaa, Modelling local bubble size distributions in agitated vessels, *Chemical Engineering Science* 62 (2007) 721–740.
- [21]. B. Gourich, N. EL Azhera, M. Soulami Bellhaj, H. Delmas, A. Bouzidi, M. Ziyad, Contribution to the study of hydrodynamics and gas–liquid mass transfer in a two- and three-phase split-rectangular airlift reactor, *Chemical Engineering and Processing* 44 (2005) 1047–1053.
- [22]. H. Dhaouadi, S. Poncin, J.M. Hornut, N. Midoux, Gas–liquid mass transfer in bubble column reactor: Analytical solution and experimental confirmation, *Chemical Engineering and Processing* 47 (2008) 548–556.

- [23]. N. Bendjaballah, H. Dhaouadi, S. Poncin, N. Midoux, J.M. Hornut, G. Wild, Hydrodynamics and flow regimes in external loop airlift reactors, *Chemical Engineering Science* 54 (1999) 5211-5221.
- [24]. N. Bendjaballah, Hydrodynamique globale et locale dans un réacteur à gazosiphon à recirculation externe, Thèse de Doctorat, Inst.National.Poytech de Lorraine, France, 2000.
- [25]. H. Benkhelifa, J. Legrand, A. Legentihomme, A. Montillet, Study of the hydrodynamic behavior of the batch and continous reactor in laminar and turbulent flow Regimes by means of tracer methods *Chemical Engineering Science*.55 (2000)1871-1882.
- [26]. A. Couvert, M. Roustan, P. Chatellier, Two-phase hydrodynamic study of a rectangular airliftloop reactor with an internal baffle, *Chemical Engineering Science*. 54 (1999) 5245-5252.
- [27]. A. Couvert, Etude d'un réacteur airlift rectangulaire a recirculation interne, hydrodynamique et transfert de matière gaz-liquide, Thèse de Doctorat, INSA de Toulouse, 2000.
- [28]. B. Gourich, Analyse et étude comparative des performances hydrodynamiques et de transfert gaz-liquide dans trois types de réacteurs polyphasiques : colonne à bulles, airlift rectangulaire et emulsair, Thèse de Doctorat, Rabat, 2006.
- [29]. D. Hadjiev, N.E. Sabiri, A. Zanati, Mixing time in bioreactors under aerated conditions, *Biochemical Engineering J* 27 (2006) 323-330.
- [30]. N. Nasrallah, J. Legrand, A. Bensmaili, L. Nouri, Effect of impeller type on the mixing in torus reactors, *Chemical Engineering and Process* 47 (2008) 2175-2183.
- [31]. M. Roustan, Transferts gaz-liquide dans les procédés de traitement des eaux et des effluents gazeux, Ed. Lavoisier, 2003.
- [32]. P. Trambouze, J.P. Euzen, Les réacteurs chimiques, Ed. Technip. Paris, 2002.
- [33]. Puneet Gupta, Booncheng Ong, Muthanna H. Al-Dahhan, Milorad P. Dudukovic, Bernard A. Toseland, Hydrodynamics of churn turbulent bubble columns: gas-liquid recirculation and mechanistic modeling, *Catalysis Today* 64 (2001) 253-269.
- [34]. A. Couvert, D. Bastoul, M. Roustan, A. Line, P. Chatellier, Prediction of liquid velocity and gas hold-up in rectangular air-lift reactors of different scales, *Chemical Engineering and Processing* 40 (2001) 113-119.
- [35]. M. Blažej, G.M. Cartland Glover, S.C. Generalis, J. Markoš, Gas-liquid simulation of an airlift bubble column reactor, *Chemical Engineering and Processing* 43 (2004) 137-144.
- [36]. Ch. Vial, S. Poncin, G. Wild, N. Midoux, Experimental and theoretical analysis of the hydrodynamics in the riser of an external loop airlift reactor, *Chemical Engineering Science* 57 (2002) 4745-4762.

- [37]. Pasi Moilanen, Marko Laakkonen, Olli Visuri, Ville Alopaeus, Juhani Aittamaa, Modelling mass transfer in an aerated 0.2m<sup>3</sup> vessel agitated by Rushton, Phasejet and Combijet impellers, *Chemical Engineering Journal* 142 (2008) 95–108.
- [38]. M. Blažej, M. Kiša, J. Markoš, Scale influence on the hydrodynamics of an internal loop airlift reactor, *Chemical Engineering and Processing* 43 (2004) 1519–1527.
- [39]. B. Gourich, Ch. Vial, N. El Azher, M. Belhaj Soulami, M. Ziyad, Influence of hydrodynamics and probe response on oxygen mass transfer measurements in a high aspect ratio bubble column reactor: Effect of the coalescence behaviour of the liquid phase, *Biochemical Engineering Journal* 39 (2008) 1–14.
- [40]. E. Fransolet, Analyse multiechelle de la distribution spatio temporelle des phases dans une colonne à bulles, Thèse de doctorat, Liège, 2005.
- [41]. Guillaume Riboux, Hydrodynamique d'un essaim de bulles en ascension, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.
- [42]. E. Fransolet, V. Coumont, M. Crine, G. L'Homme, P. Marchot, D. Toye, Rétention gazeuse dans une colonne à bulles contenant un liquide visqueux non-newtonien, Laboratoires de Génie Chimique, B6, Université de Liège, Liège B4000, Belgique, 2005.
- [43]. C. Julcour Lebigue, P. SA Gomes, F. Omota, A. Bliet, H. Delmas, Etude hydrodynamique d'une colonne à bulles 2D en présence d'additifs faiblement concentrés, *Récents Progrès en Génie des Procédés*, Numéro 95 – 2007 ISBN 2-910239-69-1, Ed. SFGP, Paris, France.
- [44]. E. Fransolet, M. Crine, G. L'Homme, P. Marchot, D. Toye, Utilisation de la tomographie électrique résistive en vue de la caractérisation du fonctionnement d'une colonne à bulles, Laboratoires de Génie Chimique, B6, Université de Liège, Liège B4000, Belgique, 2005.
- [45]. Plais Cécile, Billet Anne-Marie, Julcour-Lebigue Carine, Delmas Henri, Etude du transfert gaz-liquide en présence d'une troisième phase finement divisée, *Récents Progrès en Génie des Procédés*, Numéro 92 – 2005, ISBN 2-910239-66-7, Ed. Lavoisier, Paris, France.
- [46]. Rihani Rachida, Etude d'un milli réacteur torique gaz/liquide et contribution à la production de l'hydrogène à partir des microalgues, Thèse de doctorat, USTHB, 2009.
- [47]. Rihani Rachida, Bensmaili Aicha, Chader Samira, Kaidi Fayrouz, Belhamel Maiouf, Caractérisation de l'efficacité du mélange des systèmes mono, di et triphasiques dans un réacteur torique en pyrex, *Récents Progrès en Génie des Procédés*, Numéro 92 – 2005 ISBN 2-910239-66-7, Ed. SFGP, Paris, France.
- [48]. Pisut Painmanakul, Analyse locale du transfert de matière associé à la formation de bulles générées par différents types d'orifices dans différentes phases liquides Newtoniennes : étude expérimentale et modélisation, Thèse de doctorat INSA toulouse, 2005.
- [49]. D. Zhang, N.G. Deen, J.A.M. Kuipers, Numerical simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column: A study of closures for turbulence and interface forces *Chemical Engineering Science* 61 (2006) 7593–7608.

- [50]. Michael Morin, Carbon dioxide absorption with chemical reaction, Worcester polytechnic institute, 2009.
- [51]. Waheed A. Al-Masry, Analysis of bubble column hydrodynamics using computational fluid dynamics, Research center college of engineering king saud university, 2006.
- [52]. M. Anil, V. K. Agarwal, M. Siraj Alam, K. L. Wasewar, CFD Modeling of Three-phase bubble column: Study of flow pattern, Chem. Biochem. Eng. (2007) 197–205.
- [53]. A. Sanchez Miron, M.-C. Ceron Garcia, F. Garcia Camacho, E. Molina Grima, Y. Chisti, Mixing in bubble column and airlift reactors, Chemical Engineering Research and Design, 82(2004) 1367–1374.
- [54]. Ammar Dabaliz, Etude d'un réacteur (contacteur) gaz-liquide à jet vertical immergé en vue de son application dans le traitement des eaux usées, Thèse de doctorat, Lyon, 2002.
- [55]. M. Roche, R. Bendounan, C. Prost, Modélisation de l'hydrodynamique d'un décanteur primaire de station d'épuration, Revue des sciences de l'eau / Journal of Water Science (1994) 153-167.
- [56]. Bellakhal Ghazi, Modélisation des écoulements turbulents a bulles, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.
- [57]. Chun-ChongFu ,Shih-Yuan Lu,Yung-JungHsu, Gia-Chi Chen, Yi-Ren Lin,Wen-Teng Wu Superior mixing performance for airlift reactor with a net draft tube, Chemical Engineering Science 59 (2004) 3021–3028.
- [58]. Andriy Plugatyr, Igor M. Svishchev, Residence time distribution measurements and flow modeling in a supercritical water oxidation reactor: Application of transfer function concept, J. of Supercritical Fluids 44 (2008) 31–39.
- [59].Mounir Bennajah, Traitement des rejets industriels liquide par électrocoagulation/électroflotation en réacteur airlift, Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2007.
- [60]. J. Villermaux, Génie de la réaction chimique, conception et fonctionnement des réacteurs, 1993.
- [61]. O.Levenspiel, Chemical reaction engineering, Wiley, 1972.
- [62].Cécile Boesinger, Yves Le Guer, Patrick Legentilhomme, Etude expérimentale du mélange réactif au sein d'un réacteur torique ondulé (RTO), The Canadian Journal of Chemical Engineering, Volume 81, Octobre 2003.
- [63]. L'hadi Nouri, Jack Legrand, Nabila Benmalek, Faiza Imerzoukene, Ahmed-Reda Yeddou, Farid Halet, Characterisation and comparison of the micromixing efficiency in torus and batch stirred reactors, Chemical Engineering Journal 142 (2008) 78–86.
- [64]. Ann Forret, Jean-Marc Schweitzer, Thierry Gauthier, Rajamani Krishna, Daniel Schweich, Liquid dispersion in large diameter bubble columns, with and without Internals, The Canadian Journal of Chemical Engineering, Volume 81, June-August 2003.

- [65]. Jasper M. van Baten, Jürg Ellenberger, Rajamani Krishna, Using CFD to describe the Hydrodynamics of Internal Air-lift Reactors, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Volume 81, June-August 2003.
- [66]. Kouakou Edouard, Salmon Thierry, Fransolet Emmanuelle, Toye Dominique, Marchot Pierre, Crine Michel, Transfert de matière gaz-liquide et mélange dans un bioréacteur membranaire à recirculation externe, *Récents Progrès en Génie des Procédés*, Numéro 92 – 2005 ISBN 2-910239-66-7, Ed. SFGP, Paris, France.
- [67]. Mounir Bouaifi, Michel Roustan, Power consumption, mixing time and homogenisation energy in dual-impeller agitated gas–liquid reactors, *Chemical Engineering and Processing* 40 (2001) 87–95.
- [68]. H.Chaumat, A.M.Billet-Duquenne, F.Augier, C.Mathieu, H.Delmas, Mass transfer in bubble column for industrial conditions—effects of organic medium ,gas and liquid flow rates and column design, *Chemical Engineering Science* 60 (2005) 5930–5936.
- [69]. A. Forret, J.M. Schweitzer, T. Gauthier, R. Krishna, and D. Schweich, Scale up of slurry bubble reactors, *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, Vol. 61 (2006) 443-458.
- [70]. Juan Gabriel Garcia Maldonado, Effet des caractéristiques physiques des matériaux sur l'hydrodynamique et le transfert de matière des lits fixes fonctionnant a co-courant ascendant de gaz et de liquide, INSA Toulouse, 2005.
- [71]. M.P. Dudukovic, Opaque multiphase reactors: experimentation, modeling and troubleshooting, *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, (2000) 135-158.
- [72]. Amrani Salah, Détermination de l'aire interfaciale d'une colonne d'absorption du CO<sub>2</sub> par une solution de mono éthanol amine (MEA), Mémoire de magistère, ENP El Harrach,2009.
- [73]. M. Geoffrey Petit, contribution a l'étude expérimentale et numérique du comportement des phases gaz et solide dans un lit fluidise circulant : application au procédé FCC, Thèse de doctorat, ENP de Toulouse, 2005.
- [74]. Yacine Haroun, Etude du transfert de masse réactif Gaz-Liquide le long de plans corrugués par simulation numérique avec suivi d'interface, Thèse de doctorat, INP de Toulouse, 2008.
- [75]. Imerzoukene Faiza, Caractérisation du micromélange dans un réacteur à géométrie torique, Mémoire de magistère, UMBB, 2008.
- [76]. Vinay Mahajan, CFD Analysis of Hydrodynamics and Mass Transfer of a Gas-Liquid Bubble Column, National Institute of Technology, Rourkela India, 2010.
- [77]. Matthieu Roudet, Hydrodynamique et transfert de masse autour d'une bulle confinée entre deux plaques, Thèse de doctorat, INP de Toulouse, 2008.
- [78]. TRAMBOUZE P. Réacteurs chimiques – Technologie, Techniques de l'ingénieur J4020, 1993.

[79]. P. Vraâbel, R. G. J. M. Van der lans, Y. Q. Cui and K. CH. A. M. Luyben, Compartment model approach: Mixing in Large Scale Aerated Reactors with Multiple Impellers, Trans IChemE, Vol 77, Part A, June 1999.

[80]. S.Roy, M.T.Dhotre and J.B.Joshi, CFD simulation of flow and axial dispersion in external loop airlift reactor, Chemical engineering research and design, 84(A8), (2006) 677–690.

[81]. Azeddine Kabouche, Etude de l'élimination de CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>S par absorption utilisant des solutions d'alcanol amines. Test du couplage de différentes théories de transfert de matière, Thèse de doctorat, EMC, 2007.

[82]. S. Vermande, Modélisation hydrodynamique et biologique des bassins d'aération, Thèse de doctorat, INSA Toulouse, 2005.

# ANNEXES

# Annexe 1

## Modèle de turbulence utilisé

### Modèle de turbulence utilisé

Les écoulements dans les réacteurs gaz/liquide sont turbulents. Nous devons donc recourir à un modèle de turbulence. Femlab en propose deux : le modèle k- $\omega$  et le modèle k- $\epsilon$ . Nous choisissons d'utiliser le modèle de turbulence k- $\epsilon$ , élaboré par Jones et Lauder en 1974 et largement utilisé depuis. Nous rappelons son principe ci-dessous, son domaine de validité et justifions notre choix.

### Principe de la modélisation k- $\epsilon$

Ce modèle calcule la viscosité turbulente en faisant intervenir l'énergie cinétique turbulente  $k$  et le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente  $\epsilon$ .

La viscosité turbulente  $\nu_T$  ( $m^2.s^{-1}$ ) est calculée comme suit :

$$\nu_T = \rho C_{\mu} \frac{k^2}{\epsilon}$$

L'énergie cinétique turbulente est déduite à partir de la résolution de l'équation suivante :

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} - \nabla \cdot \left[ \left( \nu + \rho \frac{C_{\mu} k^2}{\sigma_k \epsilon} \right) \nabla k \right] + \rho u \cdot \nabla k = \frac{1}{2} \rho C_{\mu} \frac{k^2}{\epsilon} (\nabla u) + (\nabla u)^T)^2 - \rho \epsilon$$

Et le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente par :

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \nabla \cdot \left[ \left( \nu + \rho \frac{C_{\mu} k^2}{\sigma_k \epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \rho u \cdot \nabla \epsilon = \frac{1}{2} \rho C_{\epsilon 1} C_{\mu} k (\nabla u) + (\nabla u)^T)^2 - \rho C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k}$$

### Domaine de validité et pertinence du modèle K- $\epsilon$

Le modèle k- $\epsilon$  est le plus simple des modèles complets dits à deux équations. Il s'agit d'un modèle semi-empirique. Il permet de calculer  $k$ ,  $\epsilon$ , les composantes  $V_i$  de la vitesse et le champ de pression  $P$  en tout point du domaine considéré.

Des constantes empiriques  $C_{\mu}$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_{\epsilon}$ ,  $C_1$  et  $C_2$  sont utilisées dans le modèle k- $\epsilon$ . Selon leur valeur, les résultats de calcul peuvent différer. Cela constitue la faiblesse de ce modèle. Cependant, les auteurs admettent le plus souvent les mêmes valeurs. Ainsi, les valeurs utilisées par CHATELLIER P. sont les mêmes que celles fournies par défaut dans le code Femlab

Elles sont les suivantes :

Constantes utilisées dans le modèle k- $\epsilon$ 

Constante	$C_\mu$	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$\sigma_k$	$\sigma_\epsilon$
valeur	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Malgré ses limitations et défauts, ce modèle est très largement utilisé en ingénierie. Il est en effet robuste, économique en temps de calcul et suffisamment précis pour une large gamme d'écoulements turbulents. C'est la raison pour laquelle nous avons choisi d'utiliser ce modèle pour nos simulations d'écoulement.

## Annexe 2

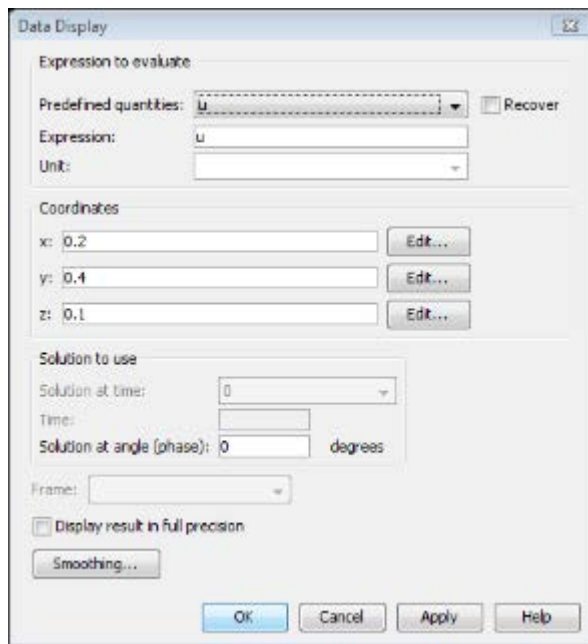
# Présentation des résultats de modélisation

Les résultats de la modélisation (sous forme de courbes) ont été obtenus comme suit :

Prenons comme exemple la figure III.39 : profil radial de la rétention gazeuse pour une vitesse de 0,059 m/s.

- 1- Cliquer sur le menu « Post-traitement »
- 2- Cliquer sur affichage des données

La fenêtre suivante apparaît



3- Nous choisissons une grandeur prédéfinie : fraction volumique du gaz  
La fraction volumique du gaz a été déterminée à une hauteur de 0,8 m, donc nous fixons z à 0,8 m.

Pour la coordonnée « r », nous cliquons sur la case « édition » et nous fixons les valeurs suivantes :

- Première valeur : 0
- Dernière valeur : 0,05 m (diamètre du riser)
- Nombre de valeurs : 20 (pour plus de précision)

Les résultats suivants apparaissent :

Valeur : 0.081538 [1], Position (0,0.8)

Valeur : 0.081539 [1], Position (0.003571,0.8)

Valeur : 0.081539 [1], Position (0.007143,0.8)

.

.

.

Valeur : 0.08154 [1], Position (0.05, 0.8)







## Résumé

Ce travail a été consacré à l'étude des caractéristiques hydrodynamiques des réacteurs gaz/liquide. Dans le cas d'un réacteur canal, le débit de liquide a un effet notable sur l'hydrodynamique. Son augmentation entraîne une augmentation du nombre de Peclet ainsi une réduction des temps de séjour. L'écoulement au sein d'un réacteur torique est modélisé à l'aide du modèle piston avec dispersion axiale et recirculation totale. Le fait d'ajouter du gaz au liquide entraîne une augmentation du nombre de Bodeinstein. L'étude hydrodynamique de la colonne à bulles a montré que la rétention gazeuse est une fonction croissante de la vitesse du gaz et de la température, et est une fonction décroissante de la vitesse de liquide. L'hydrodynamique, a été étudiée dans un réacteur airlift rectangulaire à recirculation interne. Des corrélations décrivant la rétention gazeuse globale, ont été comparées aux données de la littérature. Il s'est avéré que l'augmentation de la section du downcomer provoque une diminution de la rétention gazeuse au sein du riser. Enfin, le débit de liquide a un effet notable sur les performances du transfert de matière dans une colonne d'absorption. Ce dernier augmente avec le débit de liquide.

**Mots clés :** hydrodynamique, gaz/liquide, rétention gazeuse, Peclet, CFD, transfert de masse.

## Abstract

The purpose of this work is the study of the hydrodynamics of different types of gaz/liquid reactors. The global hydrodynamics of the channel reactor is well represented by a plug flow model with axial dispersion. Experimental determination is validated by a dispersed plug flow with recirculation in a circular-sectioned torus reactor. The presence of gas phase leads to increase the number of Bodeinstein. The hydrodynamics of bubble column shows that gas holdup increases with increasing gas velocity and temperature but decreases with increasing liquid velocity. Global hydrodynamic was studied in a split-rectangular airlift reactor. Correlations for gas hold-up derived for their-water system were compared to data and correlations of the literature. The increase of the section of downcomer leads to decrease the gas-holdup in the riser. Finally, the coefficient of mass transfer increases with increasing of the rate of liquid in an absorption column.

**Key words :** hydrodynamic, gas/liquid, gas holdup, Peclet, CFD, mass transfer.

## ملخص

يهدف هذا العمل إلى دراسة مختلف الشروط الهيدروديناميكية التي لها تأثير على مرد وديّة و نوعية النواتج النهائية في بعض المفاعلات الثنائية من نوع غاز سائل. لقد بينت الدراسة في مفاعل مجرى أن ارتفاع سرعة السائل تؤدي إلى ارتفاع عدد بكايت و انخفاض زمن البقاء قمنا بتطبيق نموذج سريان قلمي مع تشتت جزئي في اتجاه واحد في مفاعل طوقي مغلق النتائج المعملية لها مقارنات طيبة مع النتائج التجريبية طبق نموذج سي اف دي على عمود فقاعات و تبين أن النسبة الغازية ترتفع مع ارتفاع كل من سرعة الغاز ودرجة الحرارة و تنخفض مع ارتفاع سرعة السائل تم بعد ذلك تطبيق نموذج كلبسيلون على خزان ذو عوارض و أنبوب سحب من اجل تقدير معادلات قائمة تخص النسبة الغازية و لقد تحصلنا على نتائج مقبولة مقارنة مع تلك المحصل عليها في المراجع إن زيادة مساحة الماسورة النازلة تؤدي إلى انخفاض النسبة الغازية في الماسورة الصاعدة و أخيرا تبين أن معامل انتقال الكتلة يزداد مع زيادة سرعة السائل في عمود امتصاص الكلمات الدالة هيدروديناميك غاز سائل النسبة الغازية بكلي سي اف دي انتقال الكتلة