

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université Mohamed Khider – Biskra
Faculté des Sciences et de la technologie
Département : Chimie Industrielle.
Ref :.....



جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم و التكنولوجيا
قسم: الكيمياء الصناعيّة
المرجع:.....

Mémoire présenté en vue de l'obtention
Du diplôme de
Magistère

Spécialité : Chimie Industrielle
Option : Génie Chimique

***ETUDE DU TRANSFERT DE MATIERE DANS LES PROCÉDES
DE SEPARATION EN UTILISANT LE MODELE DE BILAN DE
POPULATION DES GOUTTES***

Présenté par :
SENOUCI SAMRA

Soutenu publiquement le

Devant le jury composé de :

MOUMMI Nouredine	Pr.	Uni. Biskra	Président
DJEKHABA Salim	M.C.A	Uni. Biskra	Examineur
BENTEMAM Hachemi	M.C.A	Uni. Biskra	Examineur
HASSEINE Abdelmalek	M.C.A	Uni. Biskra	Rapporteur

Remerciements

Avant tout, je dois remercier Dieu le tout puissant qui m'a donné la force pour mener à terme ce long et dur travail.

*Je tiens à remercier très sincèrement mon encadreur le maître de conférences **HASSEINE Abdelmalek** de l'université de Biskra. Ce fut un grand plaisir de travailler avec lui, durant la préparation du Magistère. Personnellement, je lui serai éternellement reconnaissante de la confiance qu'il m'a témoignée, et du soutien qu'il m'a porté. Sans son goût de la science, ses conseils et encouragements je ne serais jamais arrivée à ce stade de ma formation.*

*Je tiens aussi à remercier le Professeur **MOUMMI Noureddine** de l'université de BISKRA pour m'avoir fait un grand honneur en acceptant de présider le jury.*

*Je remercie aussi le maître de conférences **DJEKHABA Salim** de l'université de BISKRA, pour m'avoir fait honneur et plaisir en acceptant d'examiner ce travail.*

*Je tiens aussi à remercier le maître de conférences **BENTEMAM Hachmi**, de l'université de BISKRA, pour m'avoir fait honneur et plaisir en acceptant d'examiner ce travail.*

Je ne saurais oublier toutes les personnes qui plus ou moins directement, ont contribué aussi bien à la réussite de ce travail.

Et enfin, je remercie ma mère qui m'a tout donné, mes frères mes sœurs, et tous ceux qui j'ai aidé de près ou de loin durant la réalisation de ce travail.

A ma Chère mère

A mes chères sœurs

A mes chers frères

A Sèraj et Baïlassane

Spécialement A Saïd

A tous mes proches.

SENOUCI SAMRA



RÉSUMÉS

RESUME

Un nouveau code de calcul étendu au transfert de matière a été développé pour la simulation d'une colonne d'extraction liquide-liquide fonctionnant à contre-courant. Ce code est caractérisé par le couplage entre une description détaillée de l'hydrodynamique et un modèle de transfert de matière.

Une nouvelle méthode de résolution de l'équation de bilan de population nommée Méthode de décomposition d'Adomian, appliquée à l'hydrodynamique est également prise en compte, notamment pour le processus de coalescence, rupture, et croissance des particules. Aussi une étude élargie aux domaines de l'hydrodynamique et le transfert de matière a été élaborée par des simulateurs commerciaux tels que Comsol et Fluent.

Mots clés : Extraction liquide-liquide, Bilan de population

ABSTRACT

A new calculation code for the mass transfer a counter-current extraction process has been developed. This code is characterized by the combination of two main aspects in separation processes: hydrodynamics and mass transfer.

A new method of solving the population balance equation named Adomian composition method, applied to the hydrodynamics is also taken into account, especially for the process of coalescence, breakage and growth of particles. As expanded study the fields of hydrodynamics and mass transfer was developed by commercial simulators such as Comsol and Fluent.

Key words: Liquid-liquid extraction, Population balance.

ملخص

قد تم وضع عمل يمتد ليشمل نقل المواد لمحاكاة عمود تشغيل الاستخلاص السائل- السائل ضد التيار. ويتميز هذا العمل بالاقتران بين الوصف المفصل للنموذج الشامل للهيدروناميكا وتحويل المواد. يؤخذ أيضا طريقة جديدة لحل معادلة التوازن السكاني وتدعى طريقة التحلل **Adomian** ، وتطبيقها على الهيدروديناميكا، وخصوصا لعمليات: الالتحام، والتمزق، والنمو للجسيمات. كما تم إعداد دراسة موسعة لمجالات الهيدروديناميكا وتحويل المواد بواسطة برامج المحاكاة التجارية مثل **Fluent** و **Comsol**.

الكلمات المفتاحية : الاستخلاص السائل- السائل ، التوازن السكاني .



SOMMAIRE

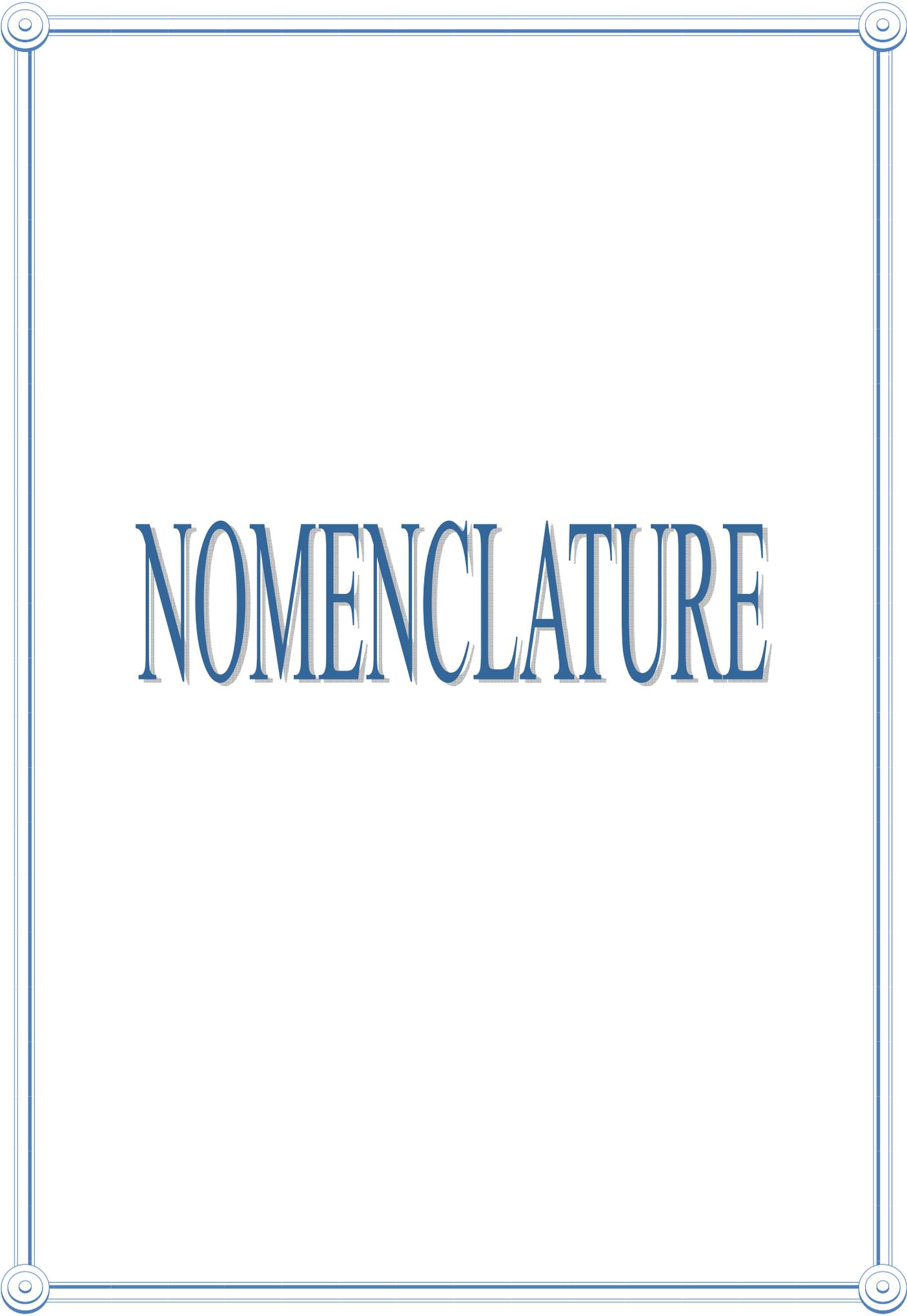
Sommaire

NOMENCLATURE	i
LISTE DES FIGURES	v
LISTE DES TABLEAUX	ix
INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE I – REVUE BIBLIOGRAPHIQUE	3
1.1 Introduction	3
1.2. Revue des méthodes numériques disponibles	6
1.2.1 Méthodes stochastiques	6
1.2.2 Méthodes d’ordre élevé	6
1.2.3 Méthodes d'ordre zéro.....	7
CHAPITRE II – MODELISATION D'UN CONTACTEUR D’EXTRACTION LIQUIDE- LIQUIDE.....	8
2.1.Introduction	8
2.2.Modélisation d’un contacteur diphasique	9
2.2.1. Généralités	9
2.2.2. Développement du modèle continu	10
2.2.2.1.Bilan volumique sur la phase dispersée	11
2.2.2.2.Bilan volumique sur la phase continue	13
2.2.2.3.Bilan matière sur la phase dispersée.....	14
2.2.2.4.Bilan matière sur la phase continue	15
2.2.2.5.Les conditions aux limites et initiales	16
2.2.3. Modélisation de l’hydrodynamique	19

2.2.3.1. Les paramètres hydrodynamiques	19
2.2.4. Les termes de production d'aire d'échange	24
2.2.4.1. Discrétisation par rapport à la taille des gouttes	25
2.2.4.2. Rupture des gouttes	25
2.2.4.3. Coalescences des gouttes	28
CHAPITRE III – METHODE DE RESOLUTION NUMERIQUE.....	30
3.1. Introduction	30
3.2. Discrétisation du modèle	31
3.2.1. Discrétisation par rapport à la variable interne	33
3.2.2. Discrétisation par rapport à la variable externe	36
3.2.2.1. Discrétisation des flux dispersif et des termes de sources	37
3.2.2.2. Discrétisation du flux convectif	37
3.2.3. Ecriture matricielle du système linéaire	38
3.3. Algorithme de calcul	38
3.4. Résultats de la modélisation du contacteur d'extraction liquide-liquide	40
3.4.1. Simulations en régime permanent	41
3.4.1.1. Etude sans transfert.....	41
A. Influence du taux de solvant	41
B. Influence de l'intensité d'agitation.....	42
3.4.1.2. Etude du transfert de matière de la phase dispersée vers la phase continue	44

A. Influence de l'intensité d'agitation	44
CHAPITRE IV – MODELE DE BILAN DE POPULATION	45
4.1. Introduction	45
4.2. Modélisation par modèle de bilan de population	45
4.2.1. Equation de bilan de population	45
4.2.1.1. Méthodes de résolution de l'équation de bilan de population	47
A. Méthode des classes	47
B. Méthode des moments	48
C. Méthode de quadrature des moments	48
D. Méthode de Monte Carlo.....	49
E. Méthode d'Adomian	49
4.3. Résolution de l'équation de bilan de population par la méthode d'Adomian	52
4.3.1. Résolution en processus discontinu	52
4.3.1.1. Présence seulement du terme de rupture.....	52
A. Rupture avec distribution uniforme des particules filles et $\Gamma(v) = v$ et la condition initiale $n_0(v, t) = ve^{-v}$	52
B. Rupture avec distribution uniforme des particules filles et $\Gamma(v) = v^2$	54
4.3.1.2. Présence des termes de coalescence et de croissance	55
A. Cas $w(v, v') = 1$ avec la condition initiale $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$	55
B. Cas $w(v, v') = v + v'$, $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$	57
C. Cas $w(v, v') = 1$, $n_0(v, t) = ve^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$	57
4.3.2. Résolution en processus continu	59
4.3.2.1. Absence du terme de croissance dans l'équation de bilan de population	59

A. Condition initiale et terme de source sous forme exponentielle	59
B. Terme de source sous forme de distribution de Dirac	60
CHAPITRE V – SIMULATION A L’AIDE DES SIMULATEURS FLUENT ET COMSOL	63
5.1.Introduction	63
5.2.Résultats et discussion	64
5.2.1. Etude de l’hydrodynamique de la colonne à disque rotatif	64
5.2.1.1. Ecoulement monophasique	64
A. Simulation utilisant le simulateur Comsol	64
B. Simulation utilisant le simulateur Fluent	67
C. Comparaison des résultats	68
5.2.1.2. Ecoulement à deux phases (diphasique)	69
A. Simulation utilisant le simulateur Comsol	69
B. Simulation utilisant le simulateur Fluent	72
C. Comparaison des résultats	73
5.2.2. Etude du transfert de matière	73
5.2.2.1. Colonne à bulles	73
5.2.2.2. Colonne RDC	82
CONCLUSION GENERALE	85
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	87
ANNEXE I	98
ANNEXE II	102



NOMENCLATURE

NOMENCLATURE

A	Section de la colonne (m^2)
A_k	Constante d'Hamaker (J)
a	Diamètre réduit (m) $=r_1 r_2 / (r_1 + r_2)$
a	Aire interfaciale (m^2)
C_1, C_2	Constantes de fréquence de collisions
C_3, C_4	Constantes d'efficacité de coalescence
C_d	Coefficient de traînée visqueuse
C_V	Constante de turbulence (damping)
c_w	Coefficient de traînée
D_{ax}	Coefficient de dispersion axial (m^2/s)
D_c	Diamètre de la colonne (m)
D_m	Coefficient de diffusion moléculaire
D_R	Diamètre du rotor (m)
D_s	Diamètre du stator (m)
d_1, d_2, d	Diamètre de la goutte (m)
d_{crit}	Diamètre critique de la goutte pour la rupture (m)
d_{eq}	Diamètre équivalent (m)
d_0	Diamètre de la goutte mère (m)
d_{23}	Diamètre de Sauter moyen de la goutte (m)

E	Faction de la surface libre du plateau
F	Terme de transfert de masse
F, F_1	Force (N)
G	Terme de génération
$g(z, d)$	Fréquence de la rupture (s^{-1})
g	Accélération de gravité (m/s^2)
H	Hauteur de la colonne
H	Constante d'Henry ($Pa \cdot m^3 / mole$)
H_c	Hauteur du compartiment (m)
$h(d_1, d_2)$	Fréquence de collision pour un volume unité (m^3/s)
h_1, h_2, h	Epaisseur du film (m)
K	Taux de dissipation d'énergie turbulente (m^2/s^2)
k	Energie cinétique (m^2/s^2) (modèle de $k - \varepsilon$ chapitre V)
k	Coefficient de transfert de masse (m/s)
k_v	Coefficient de ralentissement
M	Masse moléculaire
m_{gl}	Taux massique de transfert du gaz au liquide
N	Vitesse du rotor (s^{-1})
N_p	Nombre de puissance
$n(v, t)$	Fonction de densité en nombre
P	Fonction de densité de distribution (m^{-1})
P	Puissance d'entrée par compartiment (W)
$P(d)$	Probabilité de rupture pour une goutte de diamètre d
p_{in}	Distribution de l'alimentation de la phase dispersée

Q	Flux des phases (m^3/s)
R	Distribution en masse
Re_R	Nombre de Reynolds du rotor
r	Diamètre (m)
ρ_c	Masse volumique de la phase continue (g/l)
t	Temps (s)
\bar{t}	Temps de contact moyen (s)
$\bar{\tau}$	Temps de coalescence moyen (s)
$V(d)$	Volume d'une goutte de diamètre d (m^3)
v	Vitesse de phase (m/s)
v_r	Vitesse relative (m/s)
v_T	Vitesse terminale (m/s)
We_m	Nombre de Weber modifié
We_R	Nombre de Weber du rotor
x_{in}	Fractions molaires aux alimentations de la phase continue
x_m	Nombre moyen des gouttes filles
y_{in}	Fractions molaires aux alimentations de la phase dispersée
Z	Hauteur (m)
z	Côte, Hauteur (m)

Symboles grecques

$\beta(d_0, d)$	Distribution des tailles des gouttes filles (m^{-1})
δ	Distribution de Dirac
Γ	Taux de rupture

σ	Tension interfaciale (N/m)
θ	Temps de séjour (s)
$\Delta\rho$	Différence de masse volumique entre phases (kg/m ³)
ε	Puissance de dissipation mécanique par unité de mass (W/kg)
ε	Taux de dissipation turbulente (modèle de $k - \varepsilon$ chapitre V)
μ	Viscosité dynamique (Pa.s)
ρ	Masse volumique (kg/m ³)
ϕ	Fraction volumique (hold-up) de la phase dispersée (rétention)
$\lambda(d_1, d_2)$	Probabilité de coalescence
η_l	Viscosité dynamique du liquide (Pas)
η_T	Viscosité turbulente (Pas)
$\omega(d_1, d_2)$	Taux de coalescence (m ³ /s)

Subscripts

c	Phase continue
crit	Critique
d	Phase dispersée
eq	Equivalent
max, m	Maximale
Min	Minimale
ref	Référence



LISTE DES FIGURES

LISTE DES FIGURES

Figures	Titre	Page
Figure 2.1	Schéma général d'une colonne d'extraction liquide-liquide à contre-courant	9
Figure 2.2	Bilan sur un volume de référence $A.\Delta z$ pour la phase dispersée	11
Figure 2.3	Bilan sur un volume de référence $A.\Delta z$ pour la phase continue	13
Figure 2.4	Bilan matière sur un volume de référence $A.\Delta z$ pour la phase dispersée	14
Figure 2.5	Bilan matière sur un volume de référence $A.\Delta z$ pour la phase continue	15
Figure 2.6	Vitesse d'une goutte unique	20
Figure 2.7	Coefficient de traînée d'une goutte unique	20
Figure 2.8	Exemple de trajectoire simulée (Bardin, 1998)	22
Figure 2.9	Comportement des gouttes au voisinage d'un plateau	26
Figure 3.1	Volume de contrôle pour la méthode des volumes finis	36
Figure 3.2	Système linéaire à matrice dominante	38
Figure 3.3	Organigramme de l'algorithme de calcul	39

Figure 3.4	Comparaison dans la colonne RDC des hold-up calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de solvant. (300 r.p.m), ($Q_c=100$ l/h, $Q_d=112$ l/h)-○- Sim. - ►- Exp., ($Q_c=100$ l/h, $Q_d=56$ l/h) -*- Sim. - ◄- Exp)	41
Figure 3.5	Comparaison dans la colonne RDC des diamètres de Sauter calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de solvant. (300 r.p.m), ($Q_c =100$ l/h, $Q_d=112$ l/h) -○- Sim. - ►- Exp., ($Q_c=100$ l/h, $Q_d=56$ l/h) -*- Sim. - ◄- Exp)	42
Figure 3.6	Comparaison dans la colonne RDC des hold-up calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de l'agitation ($Q_c=100$ l/h, $Q_d=112$ l/h),(250 r.p.m.-*- Sim. -►- Exp.), (300 r.p.m. -○- Sim.-◄- Exp.)(350 r.p.m. +- Sim.)	43
Figure 3.7	Comparaison dans la colonne RDC des diamètres de Sauter calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de l'agitation ($Q_c=100$ l/h, $Q_d=112$ l/h), (250 r.p.m.-*- Sim. -►- Exp.), (300 r.p.m. -○- Sim.-◄- Exp.)(350 r.p.m. +- Sim. -x- Exp.)	43
Figure 3.8	Influence de l'agitation sur le transfert de matière dans la colonne RDC	44
Figure 4.1	Bilan de population	48
Figure 4.2	Comparaison entre les densités en nombre pour $\Gamma(v) = v$ et $\Gamma(v) = v^2$	56
Figure 4.3	Comparaison entre les solutions numériques et la solution analytique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = 1$ avec la condition initiale $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$	57
Figure 4.4	Comparaison entre les deux solutions analytique et numérique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = 1$ avec la condition initiale $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$	57
Figure 4.5	Solutions numérique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = v + v'$, $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$	58
Figure 4.6	Comparaison entre les solutions numériques et la solution analytique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = 1$, $n_0(v, t) = v \exp(-v)$ et le taux de croissance $G(v) = v$	59

Figure 4.7	Comparaison entre les deux solutions analytique et numérique de l'équation de bilan de population dans le cas où $(v, v') = 1$, $n_0(v, t) = v \exp(-v)$ et le taux de croissance $G(v) = v$	60
Figure 5.1	Maillage du réacteur RDC par Comsol	65
Figure 5.2	Vitesse de la phase continue	66
Figure 5.3	Vitesse de la phase continue dans une section de la colonne RDC	67
Figure 5.4	Maillage de la colonne RDC par Gambit	68
Figure 5.5	Vitesse de la phase continue par Fluent	69
Figure 5.6	Champ de vitesse de la phase continue dans le cas d'écoulement à deux phases à l'instant $t = 20s$	70
Figure 5.7	Fraction volumique de la phase aqueuse et les lignes de courants	71
Figure 5.8	Profil de vitesse de la phase continue en fonction de la hauteur au niveau de la limite droite	72
Figure 5.9	Profil de vitesse de la phase continue a la sortie de la colonne	72
Figure 5.10	Vitesse de la phase continue dans le cas d'écoulement diphasique par Fluent	73
Figure 5.11	Maillage de la colonne à bulles	75
Figure 5.12	Fraction volumique du gaz à $t = 5s$	76
Figure 5.13	Fraction volumique du gaz à $t = 10s$	76
Figure 5.14	Viscosité turbulente obtenue par le modèle k-ε	77
Figure 5.15	Fraction volumique du gaz et vitesse du liquide	78
Figure 5.16	Fraction volumique du gaz à l'instant $t = 10s$	79

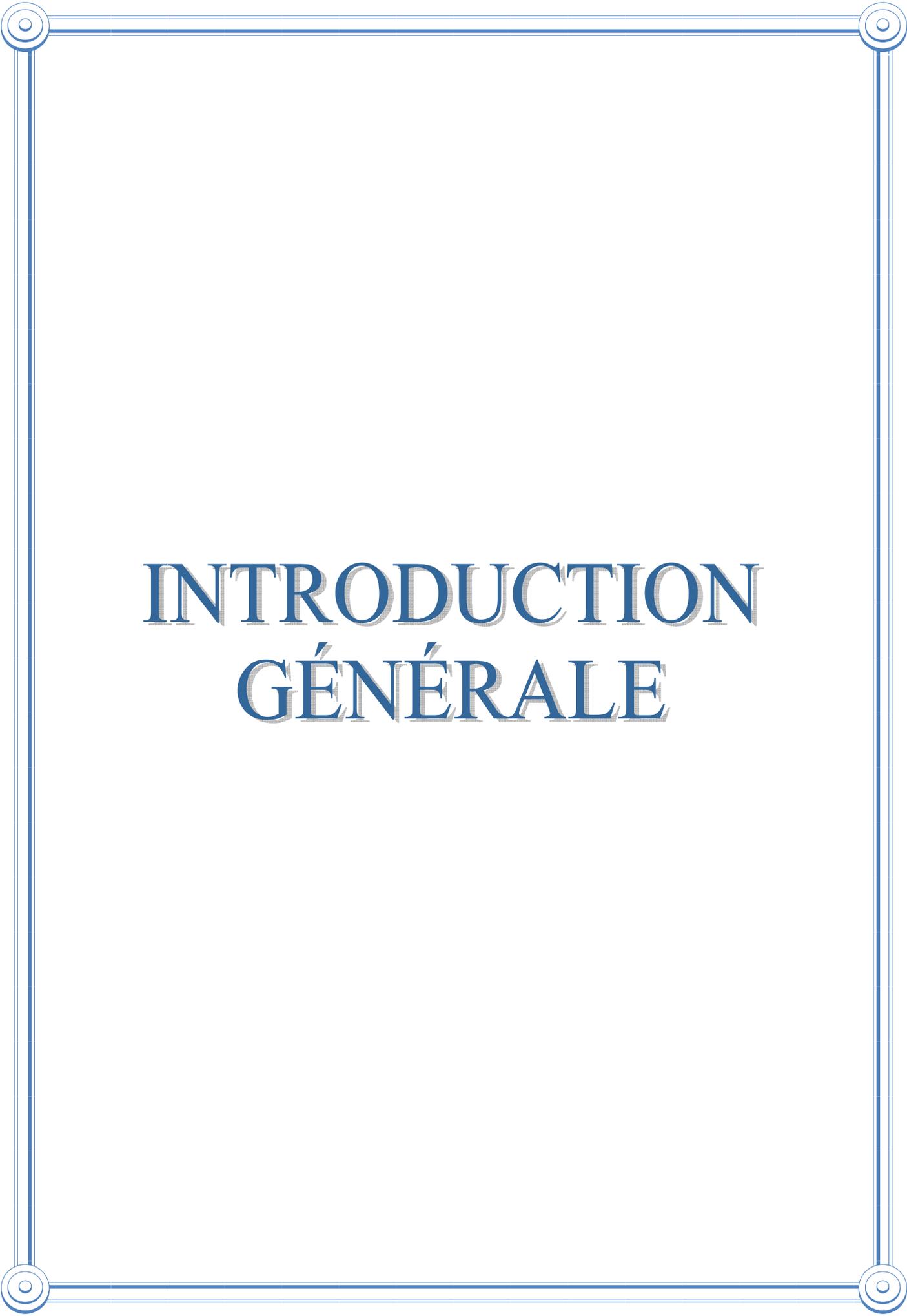
Figure 5.17	Fraction volumique du gaz à l'instant $t = 20s$	79
Figure 5.18	Concentration du gaz dans la colonne à bulles à l'instant $t=5s$	80
Figure 5.19	Concentration du gaz dans la colonne à bulles à l'instant $t=10s$	80
Figure 5.20	Concentration du gaz dans la colonne à bulles à l'instant $t = 20s$	81
Figure 5.21	Vitesse de la phase liquide avec l'utilisation du modèle de bilan de population	82
Figure 5.22	Concentration en toluène dans la phase aqueuse	83
Figure 5.23	Champ de vitesse de la phase continue en présence de la phase dispersée	84



LISTE DES TABLEAUX

LISTE DES TABLEAUX

Tableau	Titre	Page
Tableau 3.1	Caractéristiques de la colonne RDC et conditions opératoires	41
Tableau 3.2	Propriétés physiques de l'eau et du toluène	41
Tableau 4.1	Solutions analytiques disponibles dans le cas de la présence des termes de coalescence et de croissance	63



INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GENERALE

L'utilisation des contacteurs diphasiques dans des procédés industriels requiert une phase de dimensionnement. Or, s'il existe des simulateurs permettant de prédire avec une précision suffisante le fonctionnement en régimes permanent et dynamique des colonnes à phase continue, il existe moins, à l'heure actuelle, d'outil équivalent appliqué au contacteur à phase dispersée, du fait de la complexité et de l'interaction entre les phénomènes mis en jeu (hydrodynamique et transfert de matière).

L'objectif de ce travail est l'étude du transfert de matière dans les procédés de séparation en utilisant le modèle de bilan de population des gouttes.

Par conséquent, dans ce travail, les différentes étapes principales impliquées dans une opération de séparation dans les contacteurs diphasiques, comme le transport des gouttes ou des bulles, leur rupture et coalescence sont considérées pour deux types différents de contacteur: la colonne RDC et la colonne à bulle. L'objectif est de calculer la rétention locale et le diamètre de Sauter, paramètres essentiels et requis pour le processus de transfert de masse.

L'approche du modèle de bilan de population est adoptée et incluse dans la modélisation par le biais d'une équation intégral-différentielle à paramètres répartis et régit par une équation aux dérivées partielles, qui décrivent le comportement spatio-temporel des variables du modèle.

Ce manuscrit comporte cinq chapitres. Dans le premier chapitre, une revue bibliographique sur l'application de l'approche du modèle de l'équation de bilan de population de gouttes et les stratégies numériques de résolutions, sont présentées.

Le deuxième chapitre présente les équations du modèle. Celles-ci résultent d'une discrétisation du contacteur en une succession de compartiments dans lesquels les bilans volumiques macroscopiques et les bilans matières sont effectués. A une échelle plus locale, la description des lois décrivant l'hydrodynamique d'une population de gouttes dans une colonne d'extraction liquide-liquide, est aussi donnée.

Le troisième chapitre présente la méthode numérique retenue pour résoudre les équations du modèle, particulièrement la méthode de discrétisation et de résolution de ces équations.

Aussi, les résultats issus de la modélisation sont comparés aux données expérimentales acquises pour l'hydrodynamique de la colonne RDC fonctionnant en régime permanent avec le système toluène/eau.

Le quatrième chapitre présente les méthodes de résolution de l'équation de bilan de population et les résultats obtenus par l'utilisation de la méthode de décomposition d'Adomian dans les réacteurs continus et discontinus pour différents cas.

Le cinquième chapitre présente l'ensemble des résultats de simulation pour les contacteurs diphasique, ces résultats sont obtenus à l'aide de deux logiciels, Comsol et Fluent pour l'hydrodynamique et le transfert de matière dans les colonnes à disque rotatif (RDC) et les colonnes à bulles.

Enfin, une conclusion générale résume tous les résultats importants obtenus dans le cadre de ce travail.



CHAPITRE I

CHAPITRE I

REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

1.1. Introduction

Généralement, la modélisation des équipements de séparation tels que les contacteurs liquide-liquide, complètement agités et différentiels, est basée sur l'approche de bilan de population des gouttes, qui est surtout utilisée pour décrire le comportement hydrodynamique complexe de la phase dispersée, de par la nature des interactions macroscopiques de la phase dispersée, dans un champ continu d'écoulement, généralement turbulent. Ces interactions macroscopiques sont dues aux phénomènes de rupture et de coalescence, qui résultent dans une population distribuée de gouttes, non seulement dans un domaine spatial de l'équipement, mais également aléatoirement, en ce qui concerne l'état des gouttes (propriétés) comme la taille, la concentration et l'âge. Dans ce cadre, il apparaît que dans [1, 2], les auteurs étaient parmi les premiers à introduire le modèle de l'équation de bilan de populations dans la modélisation de certains procédés de génie chimique faisant intervenir une phase dispersée. De tels processus incluent les opérations unitaires effectuées dans les réacteurs discontinus et continus agités, ainsi que dans des contacteurs différentiels tel que rapporté, par exemple, dans [3-5] pour la cristallisation et dans [6, 7] pour les colonnes d'extraction liquide-liquide.

Dans de tels équipements d'opérations unitaires, le comportement dynamique des particules dispersées, telles que des bulles ou des gouttes comme pour le cas de ce travail, est assez variable. Par conséquent, il est nécessaire de considérer un modèle mathématique assez détaillé, afin de pouvoir décrire les événements engendrés par l'interaction entre la phase continue turbulente et la phase dispersée (gouttes), incluant les phénomènes de rupture et de coalescence.

D'une manière générale, le terme de rupture considère l'interaction d'une simple goutte avec la phase continue turbulente, où elle subit la rupture si l'énergie cinétique turbulente transmise à la goutte excède son énergie de surface [8].

D'autre part, la coalescence de gouttes peut avoir lieu en raison de l'interaction entre deux gouttes et la phase continue turbulente. La coalescence entre ces deux gouttes est considérée comme effective si le film liquide intervenant a suffisamment de temps de contact pour subir un drainage [9].

Par conséquent, une distribution des tailles des gouttes est générée le long de la coordonnée spatiale du contacteur liquide-liquide rendant les modèles inhérents en supposant des distributions de taille de gouttes uniformes ou basées sur un certain diamètre moyen de gouttes d_{32} de valeur pratique assez petite [10, 11].

En conséquence, la modélisation de ces phénomènes, basée sur les bilans de populations des gouttes, contribue non seulement à la détermination du hold-up de la phase dispersée (concentration volumique) mais également toute propriété intégrale liée à la distribution résultante de particules (gouttes), comme la taille moyenne des gouttes et la surface interfaciale spécifique requise pour le calcul du transfert de masse et de la chaleur [12-14].

L'approche du bilan de populations a été appliquée pour modéliser le comportement des dispersions interactives liquide-liquide de deux manières différentes, la première se basant sur la notion d'étage et l'autre sur les modèles différentiels.

Dans l'approche d'étage rapportée dans [13, 15, 16], la colonne est assimilée à une série de réacteurs agités interagissant l'un sur l'autre et traversés par des écoulements allant de l'avant vers l'arrière, pour compenser le comportement non idéal de chaque réacteur. Des exemples pratiques de telles colonnes peuvent être cités tels que la colonne perforée, la colonne pulsée, la colonne Scheible et les cascades de mélangeurs-décanteurs. Pour ce système, une équation de bilan de population doit être écrite pour chaque réacteur avec des conditions aux limites adéquates.

Dans l'approche basée sur le modèle différentiel, les phases sont en contact continu et se séparent seulement à la sortie du contacteur, comme pour le cas de la colonne de jet, du contacteur à disque rotatif (RDC), à plateaux pulsés, Kühni et la colonne d'Oldshue-Rushton. Dans tels équipements, le modèle de bilan de population est habituellement formulé comme étant une loi de conservation en termes de concentrations volumiques [6, 17-19]. Le modèle différentiel résultant tient compte du transport de gouttes, des ruptures et coalescences des gouttes, avec des conditions aux limites nécessaires. Cependant ces dernières ne sont pas clairement énoncées dans la littérature. Une revue assez complète de modélisation mathématique de ces colonnes d'extraction liquide-

liquide, ainsi que les avantages et inconvénients des modèles correspondants, est rapportée dans [20].

Globalement, l'application de l'approche de bilan de populations fournit des informations assez utiles pour toute modélisation incluant les phénomènes de rupture et de coalescence ainsi que les lois de transport de gouttes. Cependant, le développement des programmes de recherche visant à déterminer expérimentalement les cinétiques de rupture et de coalescence des gouttes ainsi que le transport des gouttes uniques ou par groupes, a grandement contribué à l'élaboration de modèles plus réalistes, grâce à la disponibilité de ces paramètres cinétiques et de lois de transport, comme démontré dans les travaux présentés dans [14, 15, 21-28].

Cependant, le niveau de développement des modèles acquis a induit des complexités mathématiques qui exigent ainsi un coût informatique assez élevé, du fait qu'aucune solution analytique n'est facile à obtenir pour l'équation de bilan de population générale. En conséquence, une solution numérique est nécessaire pour une simulation des processus de la phase dispersés assez précise. Depuis deux décennies plusieurs travaux ont été publiés, concernant seulement la solution numérique de nombreux cas particuliers, comme illustré dans [12, 17, 18, 29-67]. En dépit de toute cette recherche intensive, aucune approche numérique générale n'existe jusqu'à présent et qui est applicable systématiquement à l'équation de bilan de population quand les distributions à plusieurs variables tels que la taille, la concentration et l'âge des gouttes, connus comme étant des coordonnées internes, interviennent [1]. Une telle distribution multi-variables dans les dispersions liquide-liquide, est rapportée dans [68, 69]. Cependant, le problème devient plus compliqué quand des coordonnées externes formées par la phase continue, interviennent, comme dans le cas des modèles différentiels de bilan de population. Cet ensemble de coordonnées indépendantes est souvent mentionné dans la littérature de l'équation de bilan de population comme étant l'espace de phase de gouttes (particules). Une approche assez courante pour réduire la dimension de bilan de population est de faire la moyenne, par rapport à la coordonnée interne choisie, utilisant la méthode des moments décrite dans [57, 58, 70] et qui est considérée comme très attractive et facilement programmable, particulièrement pour le calcul des propriétés spécifiques moyennes de la population. Malheureusement, la méthode des moments n'est pas exempte de problèmes inhérents dus à la fermeture et à la complexité de reconstruction de la distribution [57]. Par conséquent d'autres méthodes sont nécessaires, comme le montre les sections suivantes.

1.2. Revue des méthodes numériques disponibles

Généralement, les méthodes numériques utilisées pour la solution de l'équation de bilan de population, sont groupées en trois catégories: méthodes stochastiques, d'ordre élevé et d'ordre zéro, qui sont décrites comme suit :

1.2.1. Méthodes stochastiques

Les approches stochastiques, à la différence des méthodes des différences finies, sont des techniques conçues pour la simulation du comportement du système par la génération des nombres aléatoires utilisés pour l'identification des fonctions de probabilité, régissant un tel comportement [72]. Cette approche stochastique de simulation a l'avantage d'être capable de simuler l'équation de bilan de population multi-variables, en ce qui concerne la coordonnée interne quand les autres méthodes numériques deviennent extrêmement coûteuses. La présentation d'algorithmes actuellement utilisés pour la simulation stochastique de l'équation de bilan de population dans les réacteurs continus agités ainsi que de la simulation directe et les algorithmes d'écoulement de la masse, sont données dans [67].

1.2.2. Méthodes d'ordre élevé

La plupart des méthodes à ordre élevé essaient d'approximer la fonction de distribution par un ensemble de fonctions linéairement indépendantes d'ordre plus grand que zéro, par la méthode d'éléments finis. Dans [30], l'équation de bilan de population pour la coalescence de gouttes dans un réacteur continu agité a été résolue, utilisant la collocation orthogonale en éléments finis avec des polynômes cubiques, avec une définition logarithmique du diamètre de gouttes.

Dans [50], les auteurs ont résolu l'équation de bilan de population pour le réacteur continu agité en régime permanent en utilisant le couplage entre les méthodes de Galerkin et de collocation orthogonales en éléments finis avec des polynômes cubiques. En dépit de leur exactitude, l'inconvénient principal de ces méthodes est le calcul excessif imposé pour l'évaluation des intégrales doubles. Cette particularité a lieu quand les fonctions de rupture et de coalescence sont dépendantes d'une certaine propriété de l'intégrale liée à la population telle que le hold-up de la phase dispersée qui dépend du temps.

Dans [60], cette question a été abordée, en plus des difficultés liées aux singularités de la fonction à intégrer où des suggestions sont présentées pour lever ces dernières pour des fréquences spécifiques de coalescence.

Dans [66], l'équation de bilan de population a été résolue pour le processus de cristallisation, en utilisant la méthode de Galerkin en éléments finis, qui est adaptée pour les tailles des gouttes et l'ordre élevé.

L'inconvénient principal de cette méthode est la difficulté pour découpler le temps où les fréquences des phénomènes de coalescence et de rupture dépendent des variables elles mêmes dépendantes du temps, et par conséquent le coût en terme de temps de calcul informatique devient excessivement important, particulièrement quand plus d'une coordonnée dans l'équation de bilan de population est impliquée. Un examen étendu de ces méthodes a été rapporté dans [71,75].

1.2.3. Méthodes d'ordre zéro

Les méthodes d'ordre zéro comme rapporté dans [73] sont celles concernées par une représentation de la distribution de population, après division de la taille de gouttes en un nombre fini de classes, par une valeur constante (polynôme d'ordre zéro) dans chaque classe. De cette façon l'équation originale intégró-différentielle partielle est transformée en système d'équations aux dérivées ordinaires pour lesquelles la solution numérique est bien établie.



CHAPITRE II

CHAPITRE II

MODELISATION D'UN CONTACTEUR D'EXTRACTION LIQUIDE-LIQUIDE

2.1. Introduction

La séparation des phases, est un problème majeur dans plusieurs industries, car la présence d'une phase dispersée peut produire l'érosion ou la dégradation des équipements. Les processus physiques de la séparation ne sont généralement pas complètement compris en raison de la complexité des phénomènes, différents acteurs impliqués, tels que, la coalescence et la rupture de la phase dispersée, résultant en un système complexe de phase polydispersée [74].

Généralement, la modélisation des équipements de séparation telle que les contacteurs liquide-liquide, complètement agités et différentiels, est basée sur l'approche de bilan de population des particules qui est surtout utilisée pour décrire le comportement hydrodynamique complexe de la phase dispersée [75]. Cette complexité due aux phénomènes de rupture et de coalescence, qui résultent dans une population distribuée des particules, Dans ce cadre, il apparaît que dans [76, 77], les auteurs étaient parmi les premiers à introduire le modèle de l'équation de bilan de populations dans la modélisation de certains procédés de génie chimique faisant intervenir une phase dispersée de tels processus incluent les opérations unitaires effectuées dans les réacteurs discontinus et continus agités, ainsi que dans des contacteurs différentiels tel que rapporté, par exemple, dans [78, 79] pour la cristallisation et dans [80, 81] pour les colonnes d'extraction liquide-liquide.

Le fonctionnement des contacteurs diphasiques est caractérisé par deux aspects fondamentaux l'hydrodynamique et le transfert de matière [82].

Dans le cas des opérations liquide-liquide à contre-courant, la modélisation de l'hydrodynamique est partie initialement d'une vision très simplifiée, selon laquelle la phase dispersée était considérée comme une pseudo-phase continue [76, 83, 84].

2.2. Modélisation d'un contacteur diphasique

2.2.1. Généralités

Le fonctionnement d'une colonne d'extraction liquide-liquide mécaniquement agitée est principalement caractérisé par l'hydrodynamique et le transfert de matière. La figure 2.1 montre une représentation schématique d'une telle colonne d'extraction. Globalement, celle-ci peut être divisée en trois parties bien distinctes : la partie active où les phases sont mises en contact, et les deux zones de décantation, en haut et en bas de la colonne, où les phases se séparent. Le niveau de l'interface au niveau du décanteur supérieur est maintenu constant par ajustement du débit de soutirage Q_s :

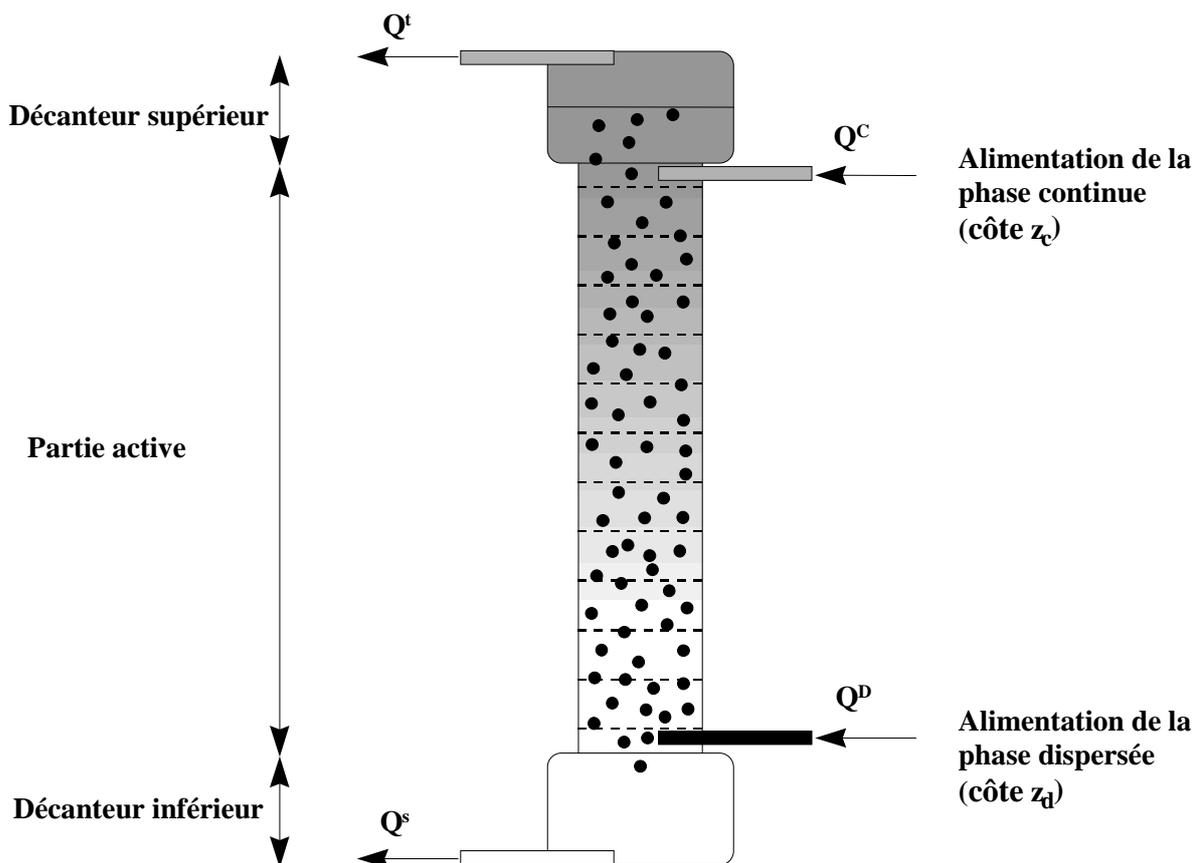


Figure 2.1. Schéma général d'une colonne d'extraction liquide-liquide à contre-courant

La phase légère est la phase dispersée, la séparation des phases s'effectue dans un décanteur en tête et on suppose que le niveau de l'interface est maintenu à la hauteur z par ajustement du débit

de soutirage Q_s . Ce type de fonctionnement est couramment réalisé dans nombreuses colonnes de laboratoire et industrielles. L'origine des côtes est placée au pied de la colonne et l'axe correspondant est orienté vers le haut. Ainsi, on admet, dans ce cas, que le débit de phase légère en tête ne contient aucune trace de la phase lourde. Donc la modélisation de la colonne est faite en décrivant son fonctionnement entre les côtes 0 et z [17, 18].

2.2.2. Développement du modèle continu

Le caractère polydispersé de l'une des phases est représenté par une loi de distribution en volume, notée $P(z, d, t)$. L'intégration de cette distribution sur l'ensemble des tailles présentes conduit à la fraction de volume de colonne occupée par la phase dispersée à une côte z dans la colonne, c'est-à-dire la rétention $\phi(z, t)$:

$$\phi(z, t) = \int_0^{d_{max}} P(z, d, t) \delta d. \quad (2.1)$$

d_{max} représentant le diamètre de goutte maximum observé dans la colonne.

Le développement du modèle est basé sur les équations suivantes qui résultent d'un bilan matière partiel autour d'un volume élémentaire dans le corps de la colonne et font intervenir quatre contributions : les entrées, les sorties, les termes de transfert et de production et enfin le terme d'accumulation.

2.2.2.1. Bilan volumique sur la phase dispersée

Le bilan fait intervenir différents termes qui apparaissent sur la figure 2.2

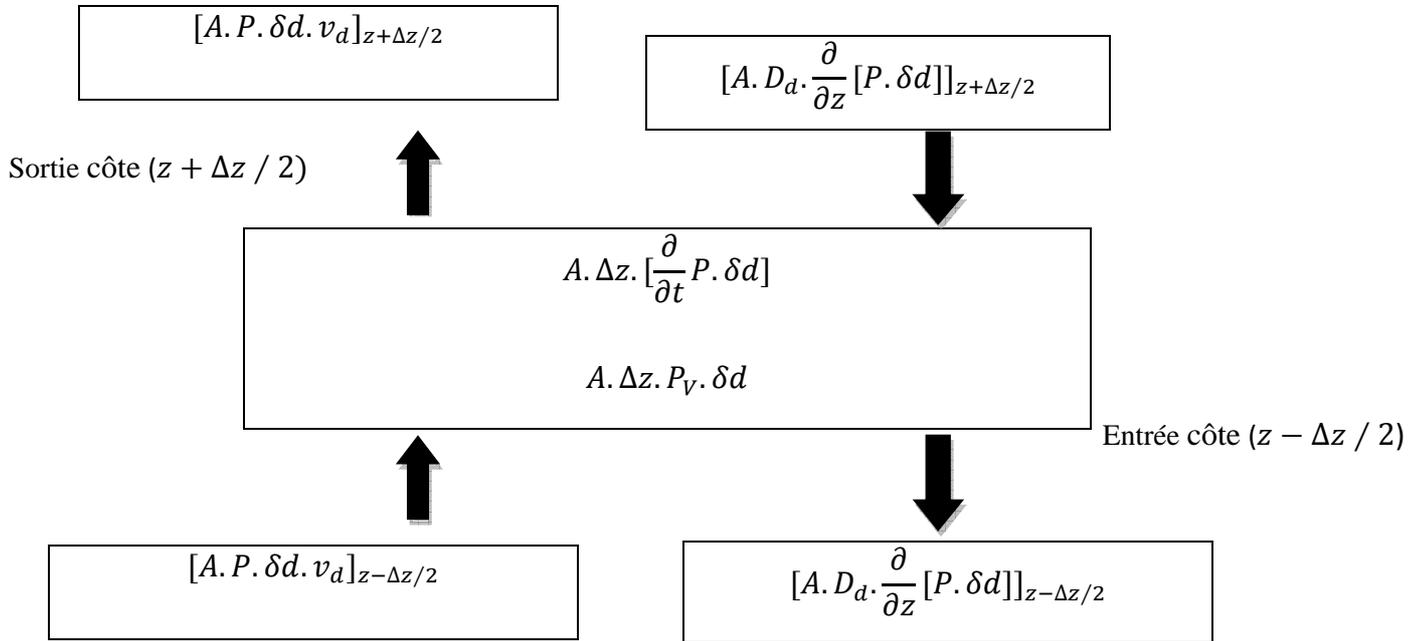


Figure 2.2. Bilan sur un volume de référence $A.\Delta z$ pour la phase dispersée

Supposant dans ce qui suit une phase dispersée ascendante (phase légère). Ainsi, pour des particules de taille $d \pm \delta d/2$, pour un volume défini entre $z + \Delta z/2$ et $z - \Delta z/2$ les différents termes intervenant dans le bilan sont comme suit:

Entrée (E):

$$[A.P.\delta d.v_d]_{z-\Delta z/2} - [A.D_d.\frac{\partial}{\partial z}[P.\delta d]]_{z-\Delta z/2}.$$

Sortie (S):

$$[A.P.\delta d.v_d]_{z+\Delta z/2} - [A.D_d.\frac{\partial}{\partial z}[P.\delta d]]_{z+\Delta z/2}.$$

Production (G):

$$A.\Delta z.P_v.\delta d.$$

Accumulation (A):

$$A. \Delta z. \left[\frac{\partial}{\partial t} P. \delta d \right].$$

En écrivant que, $E - S + G = A$, et par passage à la limite, $\Delta z \rightarrow 0$, le bilan volumique sur la phase dispersée pour des particules de tailles $d \pm \delta d/2$ conduit donc à l'équation suivante

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(t, z, d) + \frac{\partial}{\partial z} (v_d(t, z, d, \varphi) P(t, z, d)) \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \frac{\partial}{\partial z} P(t, z, d) \right) + \frac{Q_d}{A} p_{in}(d) \delta(z - z_d) + P_v(t, z, d). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Les termes transitoires et convectifs compensent le terme de rétromélange (Back mixing) caractérisé par le coefficient de dispersion. L'alimentation en phase dispersée étant alors une source ponctuelle décrite par la fonction delta (δ) de Dirac. Les processus de rupture et de coalescence des particules sont pris en considération dans le terme P_v , qui est donné par:

$$\begin{aligned} P_v(t, z, d) = \int_0^{d_{max}} \beta(d_0, d) g(t, z, d_0). P(t, z, d) \partial d_0 - g(t, z, d) P(t, z, d) \\ + \frac{V(d)}{2} \int_0^{\frac{d}{\sqrt[3]{2}}} \omega(d_1, d_2) \frac{P(t, z, d_1)}{V(d_1)} \frac{P(t, z, d_2)}{V(d_2)} \left(\frac{d}{d_2} \right)^2 \partial d_1 \\ - P(t, z, d) \int_0^{\sqrt[3]{d_{max}^3 - d^3}} \omega(d_1, d_2) \frac{P(t, z, d_1)}{V(d_1)} \partial d_1. \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.2.2.2. Bilan volumique sur la phase continue

Les différents termes qui interviennent dans le bilan apparaissent sur la figure 2.3.

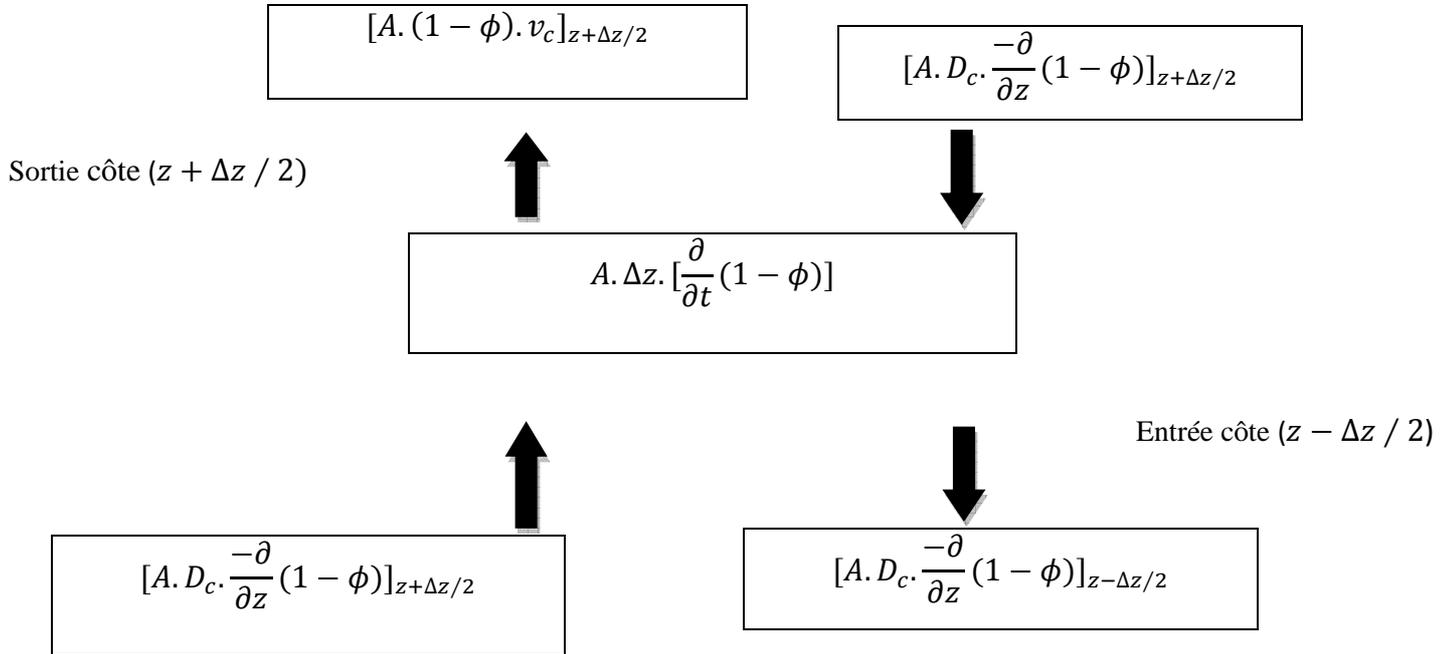


Figure 2.3. Bilan sur un volume de référence $A.\Delta z$ pour la phase continue

Pour ce système, le sens de l'écoulement est opposé à celui de la phase dispersée, et il est nécessaire de tenir compte de ce facteur pour les termes dispersifs. Ainsi, pour un volume défini entre $z + \Delta z/2$ et $z - \Delta z/2$, l'établissement du bilan conduit aux termes suivants :

Entrée (E):

$$[A.(1-\phi)]_{z+\Delta z/2} - [A.D_c \cdot \frac{-\partial}{\partial z}(1-\phi)]_{z-\Delta z/2}.$$

Sortie (S):

$$[A.(1-\phi).v_c]_{z-\Delta z/2} - [A.D_c \cdot \frac{-\partial}{\partial z}(1-\phi)]_{z-\Delta z/2}.$$

Accumulation (A):

$$A.\Delta z \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t}(1-\phi) \right].$$

Comme précédemment, par passage à la limite, $\Delta z \rightarrow 0$, le bilan volumique sur la phase continue conduit à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \phi(t, z))] + \frac{\partial}{\partial z} ((1 - \phi(t, z)) \cdot v_c(t, z)) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_c(z) \frac{\partial}{\partial z} (1 - \phi(t, z)) \right) + \frac{Q_c}{A} \delta(z - z_c). \quad (2.4)$$

2.2.2.3. Bilan matière sur la phase dispersée

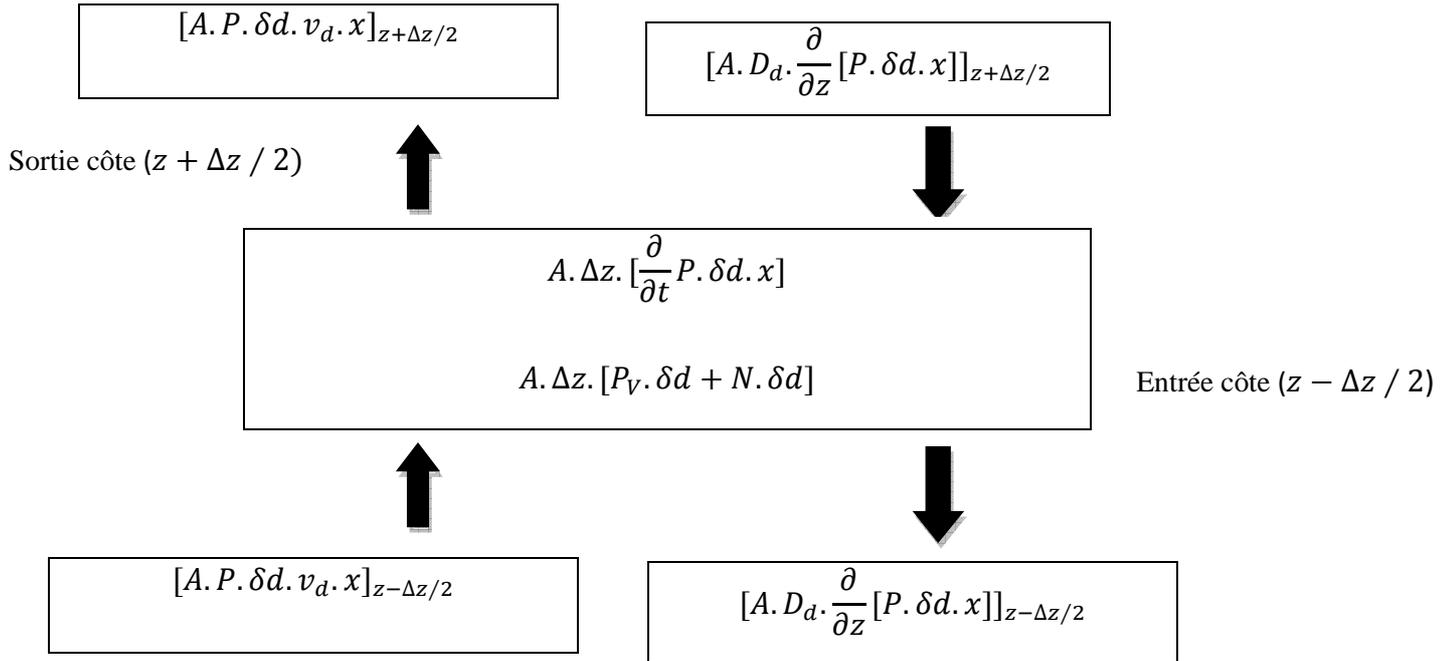


Figure 2.4. Bilan matière sur un volume de référence $A \cdot \Delta z$ pour la phase dispersée

Pour un volume défini entre $z + \Delta z/2$ et $z - \Delta z/2$ les différents termes intervenant dans le bilan matière sont comme suit:

Entrée (E):

$$[A \cdot P \cdot \delta d \cdot v_d \cdot x]_{z-\Delta z/2} - [A \cdot D_d \cdot \frac{\partial}{\partial z} [P \cdot \delta d \cdot x]]_{z-\Delta z/2}$$

Sortie (S):

$$[A \cdot P \cdot \delta d \cdot v_d]_{z+\Delta z/2} - [A \cdot D_d \cdot \frac{\partial}{\partial z} [P \cdot \delta d]]_{z+\Delta z/2}$$

Production (G):

$$A \cdot \Delta z \cdot [P_v \cdot \delta d + N \cdot \delta d]$$

Accumulation (A):

$$A. \Delta z. \left[\frac{\partial}{\partial t} P. \delta d. x \right].$$

Le bilan matière sur la phase dispersée pour des particules de tailles $d \pm \delta d/2$ conduit donc à l'équation suivante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [P(t, z, d). \delta d. x(t, z, d)] + \frac{\partial}{\partial z} (v_d(t, z, d, \varphi) P(t, z, d). x(t, z, d)) \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_d(z) \frac{\partial}{\partial z} P(t, z, d). x(t, z, d) \right) + N(z, d, t). \delta d + P_V(t, z, d). \delta d. \end{aligned} \quad (2.5)$$

2.2.2.4. Bilan matière sur la phase continue

Les différents termes qui interviennent dans le bilan matière sur la phase continue apparaissent sur la figure 2.5.

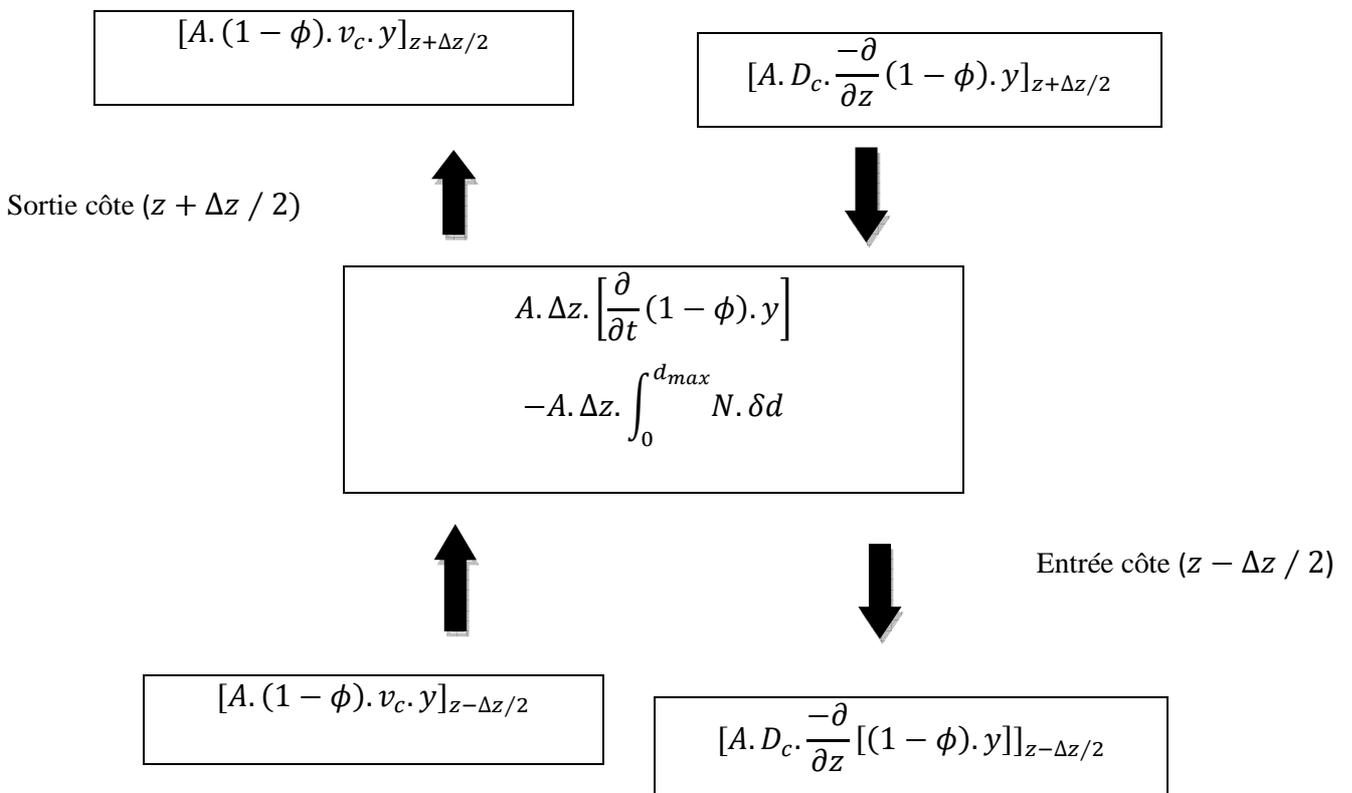


Figure 2.5. Bilan matière sur un volume de référence $A. \Delta z$ pour la phase continue

Pour un volume défini entre $z + \Delta z/2$ et $z - \Delta z/2$, l'établissement du bilan conduit aux termes suivants :

Entrée (E):

$$[A \cdot (1 - \phi) \cdot v_c \cdot y]_{z+\Delta z/2} - [A \cdot D_c \cdot \frac{-\partial}{\partial z} (1 - \phi) \cdot y]_{z-\Delta z/2}$$

Sortie (S):

$$[A \cdot (1 - \phi) \cdot v_c \cdot y]_{z-\Delta z/2} - [A \cdot D_c \cdot \frac{-\partial}{\partial z} (1 - \phi) \cdot y]_{z+\Delta z/2}$$

Production par transfert (G):

$$-A \cdot \Delta z \cdot \int_0^{d_{max}} N \cdot \delta d$$

Accumulation (A):

$$A \cdot \Delta z \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t} (1 - \phi) \cdot y \right]$$

Comme précédemment, par passage à la limite, $\Delta z \rightarrow 0$, le bilan matière sur la phase continue conduit à l'équation différentielle suivante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [(1 - \phi(t)) \cdot y(t)] + \frac{\partial}{\partial z} ((1 - \phi(z)) \cdot y(z) \cdot v_c(t, z, y)) \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_c(z) \frac{\partial}{\partial z} (1 - \phi(t, z) \cdot y(z)) \right) + \frac{Q_c}{A} \delta(z - z_c). \end{aligned} \tag{2.6}$$

2.2.2.5. Les conditions aux limites et initiales

Les équations différentielles établies ci-dessus permettent une description physique du contacteur. A ces équations différentielles sont associées des conditions aux limites qui sont définies pour quatre zones particulières de la colonne : les deux étages d'alimentations (pour la phase continue et la phase dispersée), l'étage de pied et l'étage de tête et qui sont exprimées comme suit :

- Pour la phase dispersée :

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \frac{\partial}{\partial z} (v_d \cdot P) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_d \frac{\partial}{\partial z} P \right) + S. \tag{2.7}$$

Avec le terme source

$$S = S_F + S_B + S_C.$$

Pour tout $t > 0$ et $d \in [0 d_{max}]$

- Condition en pied de la colonne (côte 0) :

$z = 0$:

$$v_d^+ \cdot P - D_d \cdot \frac{\partial P}{\partial z} = 0. \quad (2.8a)$$

Avec $v_d^+ = \max(v_d, 0)$

- Condition en tête de la colonne (côte H) :

$z = H$

$$D_d \cdot \frac{\partial P}{\partial z} = 0. \quad (2.8b)$$

- La condition initiale

A $t = 0$:

$$P(0, z, d) = P^0(z, d) \quad \text{Pour } z \in [0 H], d \in [0 d_{max}] \quad (2.8c)$$

Dans ce cas nous considérons au départ que la colonne ne contient que la phase continue d'où $P^0(z, d) = 0$

- Condition à l'alimentation de la phase dispersée :

$$S_F(z, d) = \frac{Q_d}{A} \cdot P_F(d) \delta(z - z_d). \quad (2.8d)$$

Avec $\int_0^{d_{max}} P_F(d) \partial d = 1$

- Pour la phase continue :

Posons :

$$\phi(t, z) + \theta(t, z) = 1,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta + \frac{\partial}{\partial z} (v_c \theta) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_c(z) \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + \frac{Q_c}{A} \delta(z - z_c). \quad (2.9)$$

Les conditions initiales et aux limites sont comme suit :

$$t = 0 \quad \theta(0, z) = \theta^0(z) \quad \text{pour } z \in [0, H] \quad (2.10a)$$

$$z = H \quad v_c \theta - D_c \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0 \quad \text{pour } t > 0 \quad (2.10b)$$

$$z = 0 \quad D_c \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0 \quad \text{pour } t > 0 \quad (2.10c)$$

Dans l'équation

$$\phi(t, z) = \int_0^{d_{max}} P(t, z, d) \partial d, \quad (2.11a)$$

$$v_d(t, z, d, \phi) = v_c(1 - \phi) - \frac{v_{c,sup}}{1 - \phi(t, z)}. \quad (2.11b)$$

Avec:

$$v_{c,sup} = \frac{Q_c}{A}.$$

De plus à la formulation initialement adoptée dans [83], ces équations sont écrites en terme de bilan volumique, complété par un terme d'alimentation en solvant qui est représenté comme une source ponctuelle décrite par la fonction delta (δ) de Dirac.

L'alimentation de la phase dispersée se fait avec une distribution en taille qui simule l'existence d'un distributeur.

Chacune de ces équations comprend une contribution dispersive, représentant le mélange axial et une contribution convective. Pour la phase dispersée, cela permet ainsi de tenir compte explicitement d'une part, du mélange en avant dû à la différence des vitesses de déplacement des gouttes de différentes tailles et d'autre part, du mélange en retour lié à l'agitation du milieu.

Les phénomènes de rupture et de coalescence des gouttes sont pris en compte dans le terme P_V appelé terme de génération ou de production d'aire d'échange.

L'établissement des équations du modèle mathématique détaillé nécessite une discrétisation spatiale du contacteur diphasique, par rapport aux diamètres des gouttes et la côte z .

2.2.3. Modélisation de l'hydrodynamique

Pour la simulation des colonnes d'extraction liquide-liquide, la modélisation de l'hydrodynamique est essentielle. Différentes lois, plus ou moins empiriques, qui permettent de décrire le comportement de chacune des phases, sont présentées. Pour la phase continue, la représentation repose sur l'évaluation du coefficient de dispersion axiale. Par contre, les phénomènes relatifs à la phase dispersée sont à la fois plus nombreux et plus complexes.

La prédiction de la distribution des tailles des gouttes est un élément clé, qui détermine entièrement la rétention (hold-up), le temps de séjour moyen ainsi que le comportement à l'engorgement. De plus, elle est intimement liée à la description du transfert de matière entre les phases puisqu'elle conditionne l'aire interfaciale et joue donc un rôle prépondérant sur la cinétique de transfert. Inversement, le sens et l'intensité du transfert peuvent affecter considérablement le comportement de la population de gouttes, ce qui peut se traduire par une diminution non négligeable de l'efficacité globale de la colonne [74].

2.2.3.1. Les paramètres hydrodynamiques

Vitesse des gouttes : Comme mentionné auparavant, l'établissement de notre modèle fait intervenir une relation cinématique entre les vitesses absolues de chaque phase où apparaît un terme représentant une vitesse de glissement. Celui-ci est généralement dérivé de la vitesse limite d'ascension d'une goutte unique dans un milieu infini stagnant. Cette vitesse est fonction de la taille des gouttes et des propriétés physicochimiques du système. Mais, dans une colonne agitée munie d'un garnissage, la trajectoire d'une goutte n'est pas rectiligne et peut être affectée par diverses conditions extérieures (turbulence, recirculation, interactions avec les parois, obstacles ou autres gouttes, etc.).

La vitesse effective résulte alors d'un modèle de vitesse de goutte unique en milieu stagnant que l'on corrige pour tenir compte de la présence de l'ensemble de la phase dispersée, de l'agitation et de la géométrie de la colonne. La figure 2.6 montre l'évolution de la vitesse d'une goutte unique en milieu stagnant en fonction de son diamètre.

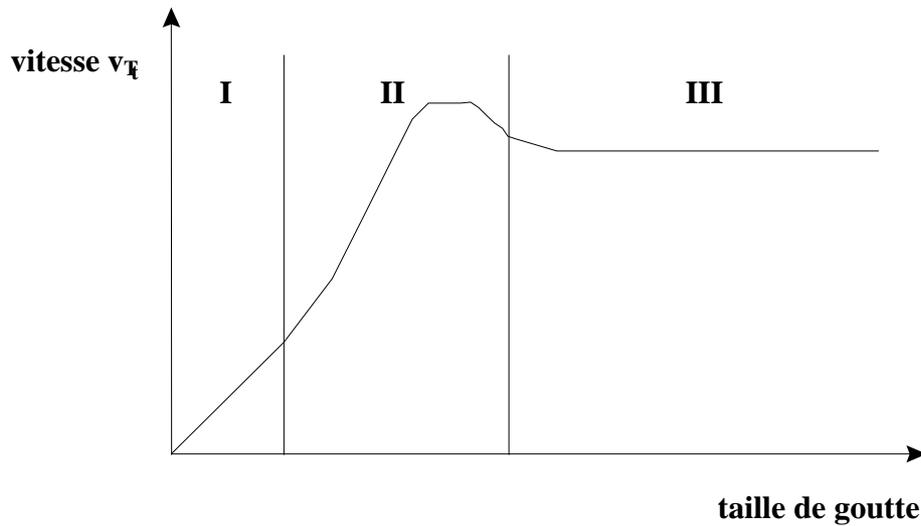


Figure 2.6. Vitesse d'une goutte unique [74].

Trois différents régimes peuvent être constatés dont les limites ne sont pas toujours clairement définies. Formellement, la vitesse terminale de déplacement est donnée par l'expression suivante:

$$v_T = \left(\frac{4}{3} \cdot g \cdot \frac{\Delta\rho}{\rho_c} \cdot d\right)^{\frac{1}{2}} \cdot c_w^{\frac{1}{2}} \tag{2.12}$$

Cette relation résulte d'un bilan des forces s'exerçant sur la goutte : équilibre entre force de pesanteur et force de traînée. L'application de ce type de relation requiert la connaissance du coefficient de traînée c_w qui est fonction du nombre de Reynolds, ramené à la goutte comme montré par la figure suivante :

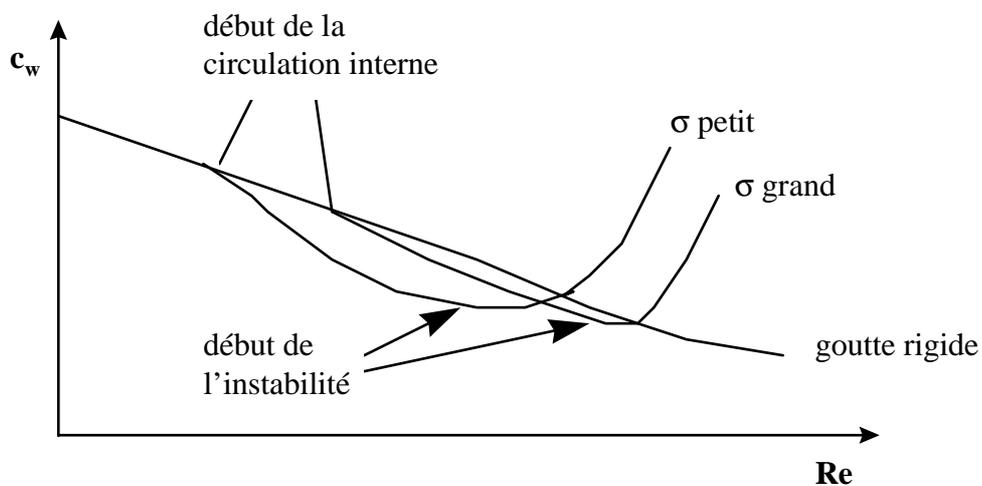


Figure 2.7. Coefficient de traînée d'une goutte unique [74].

Pour le premier régime, les gouttes sont assimilées à des particules solides sphériques. Cette situation correspond à de faibles nombres de Reynolds (écoulements rampants). Pour des valeurs supérieures, un mouvement de surface et une recirculation interne commencent à se développer, dues aux contraintes visqueuses (régime II). La résistance à l'ascension tend donc à diminuer puisque la goutte, tout en restant sphérique, roule quasiment dans la phase qui l'entoure. C'est au régime III que le comportement de la goutte s'écarte brusquement du modèle de la goutte sphérique. Cette différence intervient d'autant plus tôt que la tension interfaciale est faible. A cet instant, la goutte perd sa stabilité de forme et commence à s'aplatir puis finalement à osciller, du fait que la tension interfaciale ne compense plus les forces extérieures auxquelles elle est soumise. La vitesse d'ascension diminue à cause de la perte de forme et finit par atteindre une valeur constante, même pour des diamètres croissant jusqu'à ce que la goutte casse [74].

La détermination du coefficient de traînée c_w pour les gouttes rigides ne représente pas un problème majeur. Par contre, ce n'est plus le cas pour les gouttes avec circulation interne. Dans le cadre de notre étude, le calcul de la vitesse terminale est basé sur une des corrélations rapportées dans [88], selon la valeur du nombre adimensionnel de Morton joue un rôle prépondérant. Comme mentionné auparavant, les différents effets qui perturbent la montée d'une goutte isolée, sont surtout provoqués par la présence dans la colonne, du garnissage, des parois, des autres gouttes ou encore d'un système d'agitation.

Pour les colonnes pulsées à plateaux perforés, il a été démontré expérimentalement dans [88] que les effets de la pulsation pouvaient diminuer la vitesse d'une goutte unique d'environ 10%, pour les grands diamètres. Pour ce type de technologie, une autre source de ralentissement est la présence des plateaux perforés qui représentent un obstacle au passage des gouttes. Ce ralentissement est notamment lié à l'intensité d'agitation et au rapport du diamètre des gouttes par rapport à celui des perforations. Dans [87], il a été montré que la diminution engendrée peut atteindre 20% de la valeur de la vitesse, sans garnissage.

Pour les colonnes à disques et couronnes, on observe également de tels phénomènes, mais avec une plus grande ampleur, comme rapporté dans l'étude complète de [86]. Cet auteur a montré que la diminution est, dans ce type de géométrie, beaucoup plus accentuée puisqu'il n'est pas rare d'observer des diminutions de l'ordre de 40% à 50% par rapport à la vitesse sans garnissage. Ce dernier empêcherait la goutte d'avoir une trajectoire rectiligne (figure 2.8). Globalement, le ralentissement augmente avec la taille de la goutte et diminue avec l'intensité d'agitation.

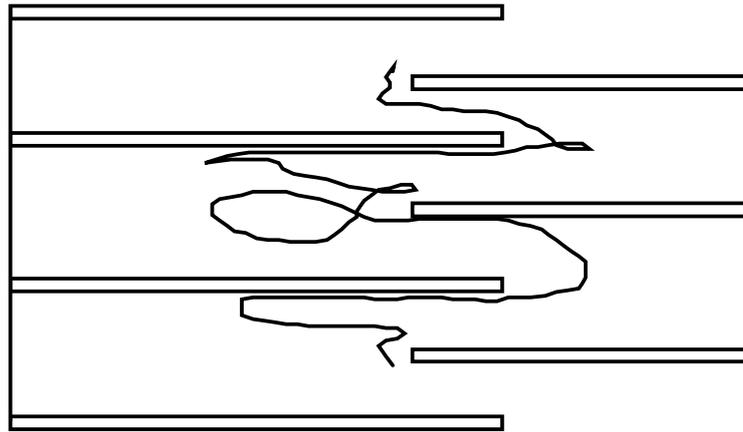


Figure 2.8. Exemple de trajectoire simulée (Bardin, 1998) [74].

Dans le cadre de notre modèle, tous ces effets sont rassemblés dans un coefficient de ralentissement k_v qui permet d'intégrer de façon simple l'ensemble de ces phénomènes. Il en résulte une expression de la vitesse d'une goutte unique dans une colonne :

$$v_r^* = k_v \cdot v_T . \quad (2.13)$$

Pour prendre en considération l'influence de la présence d'autres gouttes, il existe des corrélations dont une liste est donnée dans [86]. Dans le cadre de notre étude, nous avons adopté l'expression rapportée dans [84] qui s'est avérée tout à fait satisfaisante pour de nombreux fonctionnements dans diverses colonnes et qui est exprimée comme suit:

$$v_r = v_0(1 - \phi) . \quad (2.14)$$

Où v_0 est une vitesse caractéristique qui dépend des conditions opératoires, des propriétés physico-chimiques du système et des obstacles dans la colonne. Nous avons identifié cette vitesse à la vitesse d'ascension v_r^* définie dans l'équation (2.11), pour retenir l'expression suivante :

$$v_r = k_v \cdot v_T(1 - \phi) . \quad (2.15)$$

Le terme $(1 - \phi)$ revient à diminuer l'effet de la poussée d'Archimède qui s'exerce sur la goutte.

Le calcul de $k_v(d)$ dépend aussi du type de colonnes comme suit :

- Pour la colonne RDC, une corrélation tirée de la littérature et rapportée dans [87], est proposée et exprimée comme suit :

$$k_v(d) = 1 - 1.037 (N^3 D_R^5)^{0.12} - 0.62 \left(\frac{d}{D_S - D_R} \right)^{0.44} \quad (2.16)$$

Avec N la vitesse du rotor, D_S et D_R , sont respectivement, les diamètres du stator et du rotor. Le coefficient de dispersion axiale : La notion de dispersion axiale prend en considération le fait qu'un écoulement réel s'écarte de l'écoulement piston (idéal). Ce phénomène est essentiellement dû à l'agitation mécanique du contacteur. Le coefficient de dispersion axiale permet de décrire le rétro-mélange et pour la phase continue, il est exprimé comme suit :

$$\frac{D_{ax,c}}{v_c H} = 0.42 + 0.29 \cdot \left(\frac{v_d}{v_c} \right) + \left[c_1 \left(\frac{N D_R}{v_c} \right) + \frac{13.38}{3.18 + \frac{N D_R}{v_c}} \right] \left(\frac{v_c D_R \rho_c}{\eta_c} \right) \cdot \left(\frac{D_K}{D_R} \right)^{0.16} \cdot \left(\frac{D_K}{H_c} \right)^{0.1} \cdot e. \quad (2.17)$$

L'importance du coefficient de dispersion axiale pour la phase dispersée est beaucoup plus limitée, voire quasiment nulle, puisque dans ce cas, c'est le mélange en avant, dû à la différence des vitesses d'ascension des gouttes de différentes tailles, qui joue un rôle prépondérant. Il est exprimé comme suit :

$$\frac{D_{ax,d}}{v_d H} = 0.7 + 0.02 \cdot \left(\frac{N D_R}{v_T} \right). \quad (2.18)$$

Transport des gouttes : les vitesses des deux phases sont liées au modèle des deux couches qui sont exprimées comme suit [86]:

$$v_d(t, z, d, \phi) = v_r(t, z, d, \phi) + v_c(t, z, d, \phi). \quad (2.19)$$

Avec v_c la vitesse de la phase continue, v_d la vitesse de la phase dispersée et v_r la vitesse relative d'une goutte de diamètre d par rapport à la phase continue environnante. Afin de calculer $v_d(t, z, d, \phi)$, il convient de trouver une expression pour la vitesse de la phase continue.

On décrit l'hydrodynamique de la colonne en utilisant le modèle Piston – diffusion [91].

Le débit de la phase continue à travers une section droite de la colonne s'exprime selon l'expression suivante:

$$Q_c(z) = A \cdot v_c(z)(1 - \phi(z)) - A \cdot D_c(z) \cdot \frac{\partial}{\partial z}(1 - \phi(z)). \quad (2.20)$$

D'où :

$$v_c(z, d) = \frac{Q_c}{A(1 - \phi(z))} - D_c(z) \frac{1}{(1 - \phi(z))} \frac{\partial \phi(z)}{\partial z}. \quad (2.21)$$

2.2.4. Les termes de production d'aire d'échange

Le terme de production P_V qui intervient dans l'équation du bilan volumique de la phase dispersée et qui est une fonction de la hauteur dans la colonne et de la discrétisation du spectre de taille de gouttes, représente les effets relatifs à la rupture et à la coalescence des gouttes. C'est un paramètre crucial, car de son estimation dépendent la production d'aire d'échange et le mélange en avant de la phase dispersée.

Comme mentionné auparavant, chaque nombre de gouttes dans une classe peut augmenter ou diminuer par rupture et coalescence. En pratique, ce terme de génération est dissocié en deux contributions, l'une reflétant les effets de la rupture et l'autre ceux de la coalescence, soit :

$$P_V = P_{RG} + P_{CG}. \quad (2.22)$$

Chacun de ces deux termes résultent eux-mêmes de deux contributions : chaque classe de gouttes peut gagner de volume par rupture de gouttes de plus grandes tailles ou par coalescence des plus petites. Inversement, elle peut perdre de volume par rupture ou par coalescence avec n'importe quelle autre classe. Globalement, la rupture est entièrement décrite par un taux de rupture et par une distribution de gouttes-filles. Ces deux paramètres sont en général exprimés en fonction d'un nombre de Weber particulière qui dépend fortement de la tension interfaciale. La coalescence entre les gouttes est également décrite par un taux de coalescence qui résulte du produit d'une fréquence de collision et d'un facteur d'efficacité qui définit la probabilité de coalescence entre deux gouttes.

2.2.4.1. Discrétisation par rapport à la taille des gouttes

Une simulation impliquant des gouttes dont les tailles sont comprises entre d_{min} et d_{max} qui représentent les limites des gouttes observables dans la colonne, est généralement confrontée au problème de la manière de discrétisation de cet intervalle pour décrire au mieux la population de goutte. A cet effet, on peut choisir d'utiliser des suites arithmétiques, géométriques etc. Dans ce travail, l'approche arithmétique a été adoptée et généralement, elle donne de bons résultats. A ce stade, la population de gouttes est entièrement définie et l'étude des mécanismes fondamentaux, peut être abordée.

2.2.4.2. Rupture des gouttes

La rupture d'une goutte se produit lorsque la tension interfaciale ne permet plus de compenser les forces extérieures auxquelles la goutte est soumise. Pour les colonnes à plateaux perforés, diverses études expérimentales montrent que la rupture se produit au voisinage des plateaux qui constituent un obstacle à l'écoulement [92-94].

De plus, elle diffère selon que la goutte arrive au plateau au point mort de la pulsation ou à vitesse de pulsation maximale. Deux mécanismes de rupture peuvent intervenir :

- les tourbillons générés par la pulsation peuvent casser les grosses gouttes avant qu'elles ne passent à travers le plateau ;
- la déformation due à leur passage au travers des perforations conduit à la rupture.

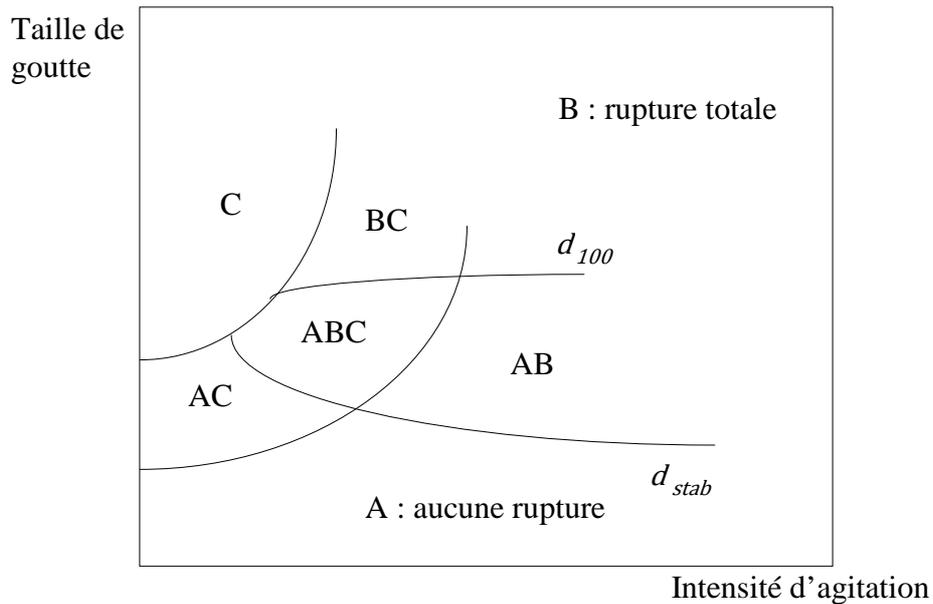


Figure 2.9. Comportement des gouttes au voisinage d'un plateau [74].

Dans [88] une étude des phénomènes de rupture au voisinage des plateaux a établi que le comportement des gouttes peut être entièrement décrit par un diagramme du type de celui décrit sur la figure 2.9. On y distingue trois domaines principaux :

- A : aucune rupture des gouttes (gouttes de petits diamètres) ;
- B : toutes les gouttes se cassent (grands diamètres de gouttes par rapport au diamètre des perforations) ;
- C : les gouttes ne traversent pas le plateau (faible intensité d'agitation, grands diamètres de gouttes par rapport au diamètre des perforations, systèmes à haute tension interfaciale).

Dans les domaines intermédiaires, le comportement des gouttes ne peut être décrit que par une probabilité de rupture représentant le nombre de gouttes qui se cassent sur le nombre initial de gouttes. Par ailleurs, ce diagramme fait apparaître deux lignes caractéristiques. La première, notée d_{100} définit le diamètre de goutte au-delà duquel toutes les gouttes se cassent, alors que d_{stab} définit le diamètre en dessous duquel aucune rupture ne se produit.

Des mécanismes différents de rupture existent et dépendent fortement des géométries.

Par exemple, dans la colonne RDC le procédé de rupture se produit seulement près du disque du rotor. La probabilité de rupture des gouttes est supposée homogène en chaque compartiment de la colonne et donc une approche locale est employée, prouvant que le mécanisme entier de la probabilité de rupture peut être décrit avec un nombre de Weber modifié. Ainsi, le diamètre de Sauter pour le mécanisme de rupture, comme décrit ci-dessus, peut être corrélé avec un nombre de Weber modifié.

Pour la colonne RDC la prédiction de la probabilité de rupture des gouttes $p(d)$ et la fréquence $g(z, d)$ sont calculées avec les corrélations rapportées dans [21, 95] et recommandées par Modes [29] :

$$\frac{p(d)}{1-p(d)} = 1.2 \cdot 10^{-6} We_m^{2.88}. \quad (2.23)$$

L'idée est de corréler la probabilité de rupture avec un nombre de Weber modifié, qui représente le rapport de l'énergie fournie à celle extérieure d'une gouttelette. La fréquence de rupture dépend alors du temps de séjour des gouttes :

$$g(z, d) = \frac{p(d)v_d(z, d)}{H_C}. \quad (2.24)$$

Où le rapport $v_d(z, d)/H_C$ représente l'inverse du temps de séjour moyen d'une goutte de diamètre d dans un compartiment de la colonne, délimité par deux plateaux successifs. Cette expression revient à moyenniser la rupture sur un volume de référence qui est le volume réel d'un compartiment de la colonne.

Avec :

$$We_m = \frac{\rho_c^{0.8} \mu_c^{0.2} d D_R^{1.6} (\bar{w}^{1.8} - \bar{w}_{crit}^{1.8})}{\sigma}. \quad (2.25)$$

$$\bar{w} = 2\pi N.$$

Pour le système toluène/eau :

$$\bar{w}_{crit} = 2\pi 1.148 \left(\frac{\rho_c D_R^3}{\sigma} \right) \left(\frac{d}{D_R} \right)^{-0.667} . \quad (2.26)$$

La distribution des tailles des gouttes filles est donnée par une fonction de distribution bêta, basée sur le diamètre de gouttelette mère d_0 :

$$\beta(d_0, d) = 3x_m(x_m - 1) \left(1 - \frac{d^3}{d_0^3} \right)^{(x_m-2)} \frac{d^5}{d_0^6} . \quad (2.27)$$

Avec x_m est le nombre moyen des gouttes filles donnés par :

$$x_m = 2 + 0.17 \left(\left(\frac{d_0}{d_{crit}} \right) - 1 \right)^{1.83} . \quad (2.28)$$

Le diamètre critique à partir duquel les gouttes commencent à se casser est :

$$d_{crit} = 1.23 D_R We_m^{-0.75} . \quad (2.29)$$

2.2.4.3. Coalescence des gouttes

La coalescence entre les gouttes est un phénomène extrêmement complexe et sa modélisation complète reste non complètement maîtrisée. Pour sa description, nous nous sommes appuyés sur les travaux de [88] où il est proposé de décomposer le processus de coalescence en deux phases successives. Pour ce processus l'hydrodynamique, les propriétés physico-chimiques des interfaces du système, l'intensité du choc et la durée de mise en contact sont les paramètres principaux. On a supposé que la coalescence se produit quand l'épaisseur du film entre deux gouttes atteint une valeur critique h_c peut être exprimé comme suit :

$$h_c = \left(A_k d_{eq} / 16\pi\sigma \right)^{1/3} , \quad (2.30)$$

$$d_{eq} = 2 \frac{d_1 d_2}{d_1 + d_2} . \quad (2.31)$$

Généralement le processus de coalescence est décrit par le taux de coalescence de gouttes qui est le produit de la fréquence de collision $h(d_1, d_2)$, et l'efficacité de coalescence $\lambda(d_1, d_2)$, entre deux gouttes du diamètre d_1 et d_2 . Cependant, la détermination de ce taux de coalescence

(paire de goutte) demeure un phénomène extrêmement complexe et son modélisation n'est pas entièrement maitrisable.

De la littérature [8, 74, 98], des expressions pour $h(d_1, d_2)$, et $\lambda(d_1, d_2)$ peuvent être dérivées pour la colonne RDC, respectivement, comme suit:

- Pour la fréquence de collision:

$$h(d_1, d_2) = C_1 \frac{\varepsilon^{1/3}}{(1+C_V\phi)} (d_1 + d_2)^{7/3}. \quad (2.32)$$

- Pour l'efficacité de coalescence:

$$\lambda(d_1, d_2) = \exp\left(-C_4 \frac{\mu_d \rho_c^{1/2} \varepsilon^{2/3} d_{eq}^{11/6} (d_1 + d_2)^{1/3}}{\sigma^{3/2} (1+C_V\phi) h_{crit}}\right). \quad (2.33)$$

La puissance de dissipation par unité de masse ε est un paramètre qui peut être expliqué par l'effet de l'agitation externe dans la colonne d'extraction liquide-liquide. Elle est exprimée en termes comme rapport de la puissance fournie P et de l'agitateur comme suit :

$$\varepsilon = P/m = P/\rho_c V_c = 4P/(D_c^2 H_c \rho_c). \quad (2.34)$$

Où P peut être calculé à partir de l'expression suivante :

$$P = N_p D_R^5 \rho_c. \quad (2.35)$$

Avec N_p est le nombre de puissance pour la colonne RDC comme suit [95] :

$$N_p = \frac{C_5}{Re_R} + C_6 \left[\frac{1000 + 1.2 Re_R^{m_2}}{1000 + 3.2 Re_R^{m_2}} \right]^{m_3}. \quad (2.36)$$

Avec: $C_5 = 109.4$, $C_6 = 0.74$, $m_2 = 0.72$, $m_3 = 3,30$.

Finalement, dans ce chapitre, les aspects relatifs à l'hydrodynamique d'une colonne liquide-liquide sont présentés. La phase dispersée est décrite par un bilan de population de gouttes, incorporant les phénomènes fondamentaux de transport, de rupture et de coalescence.



CHAPITRE III

CHAPITRE III

METHODE DE RESOLUTION NUMERIQUE

3.1. Introduction

Le caractère polydispersé d'une population donnée de gouttes turbulentes dans les équipements des contacteurs liquide-liquide agités, rend toute modélisation mathématique de ces systèmes assez complexe.

Généralement, cette polydispersion est modélisée comme une population des gouttes aléatoirement distribuées, en ce qui concerne certaines propriétés internes, utilisant l'équation de bilan de population.

Cependant, la solution de ce modèle mathématique est difficile à obtenir analytiquement, et par conséquent des méthodes numériques doivent être utilisées. Ceci est surtout dû aux non-linéarités induites dans les termes convectifs et diffusifs ainsi qu'à la présence de plusieurs intégrales dans le terme source.

Dans ce travail deux méthodes conservatrices de discrétisation pour les variables internes (état des gouttes) et externe (spatiales), sont utilisées pour résoudre l'équation de bilan de population décrivant l'hydrodynamique des contacteurs diphasiques d'extractions liquide-liquide à contre courant.

Pour la variable interne et contrairement à la technique de discrétisation utilisée dans [85] pour la solution de l'équation du bilan de population dans une colonne pulsée, la méthode de Galerkin décrite dans [26], est adoptée pour le contacteur à disque rotatif.

Pour la distribution spatiale de la population des gouttes, le système d'équations aux dérivées partielles résultant dans sa forme conservatif est discrétisé spatialement en utilisant une méthode des volumes finis à pas avancé.

Finalement la discrétisation temporelle est performée en utilisant une approche implicite fortement stable qui est formulée en tenant compte de la forte non linéarité des termes convectifs et de source.

3.2. Discrétisation du modèle

Les équations intégro-différentielles (sont discrétisées par rapport aux diamètres des gouttes (variables internes) en utilisant la méthode de Galerkin et par rapport à la hauteur de la colonne (variable externe) par la méthode des volumes finis. A titre de rappel, elles sont exprimées comme suit :

$$\phi(z, t) = \int_0^{d_{max}} P(z, d, t) \partial d. \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \frac{\partial}{\partial z} (v_d(d, \phi) P) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_d(z) \frac{\partial}{\partial z} P \right) + \frac{Q_d}{A} p_{in}(d) \delta(z - z_d) + F(d, P, R_d, R_c) + P_V(d, P). \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} R_d + \frac{\partial}{\partial z} (v_d(d, \phi) R_d) \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_d(z) \frac{\partial}{\partial z} R_d \right) + x_{in}(t) p_{in}(d) \delta(z - z_d) + F(d, P, R_d, R_c) + G_M(d, P, R_d). \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} R_c + \frac{\partial}{\partial z} (v_c(\phi) R_c) \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_c(z) \frac{\partial}{\partial z} R_c + D_m(1 - \phi) \frac{\partial}{\partial z} y \right) + y_{in}(t) \frac{Q_c}{A} \delta(z - z_d) \\ - \int_0^{d_{max}} F(d, P, R_d, R_c) \partial d. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Les processus de rupture et de coalescence des gouttes sont pris en considération dans le terme P_V .

v_c et v_d sont respectivement, les vitesses de la phase continue et la phase dispersée.

D_c , D_d , et D_m sont respectivement, les coefficients de dispersion de la phase continue, la phase dispersée, et la coefficient de diffusion moléculaire.

Q_c et Q_d sont, respectivement, les flux des phases continue et dispersée.

A est la section de la colonne

δ est la fonction delta de Dirac.

p_{in} est la distribution de l'alimentation de la phase dispersée.

x_{in} et y_{in} sont, respectivement, les fractions molaires aux alimentations des phases continue et dispersée.

F est le terme de transfert de masse entre les deux phases.

G_M est le terme de génération

R_c et R_d sont, respectivement, distribution en masse des phases continue et dispersée.

Où $R_c = P_V \cdot x$ et $R_d = (1 - \phi) \cdot y$.

Avec les conditions aux limites qui sont aussi données dans le chapitre précédent.

- Rupture et coalescence

Le terme de génération, prend en compte les effets de la rupture des gouttes et de la coalescence. Chaque classe de gouttes peut gagner ou perdre une masse, en raison de la rupture et la coalescence. Ainsi ce terme peut être écrit génération en deux contributions G_{MB} et G_{MC} .

Pour quelques gouttes de diamètre compris entre $d \pm \frac{\partial d}{2}$ à hauteur de la colonne à l'instant t , la perte de masse se produit par la rupture de cette goutte et le gain provient de la rupture des gouttes supérieures. Le terme de génération de surface d'échange par rapport à la rupture est donc monté de deux contributions:

$$G_{MB}(d, R_d)\delta d = G_{MB}^+(d, R_d)\delta d + G_{MB}^-(d, R_d)\delta d \quad (3.5)$$

Le terme correspondant à la perte de masse est calculé par l'expression suivante:

$$G_{MB}^-(d, R_d)\delta d = g(d) \cdot R_d(d)\delta d \quad (3.6)$$

Où g est le taux de rupture de gouttes.

Le terme correspondant au gain de masse est calculé par l'expression suivante :

$$G_{MB}^+(d, R_d)\delta d = \delta d \int_d^{d_{max}} \beta(\tau, d) \cdot g(\tau) \cdot R_d(\tau) \cdot \partial \tau \quad (3.7)$$

Où $\beta(\tau, d)$ est la distribution de gouttes-filles

Globalement, la rupture est entièrement décrite par un taux de rupture et par une distribution de gouttes-filles. Ces deux paramètres sont en général exprimés en fonction d'un nombre de Weber particulière qui dépend fortement de la tension interfaciale σ .

La coalescence entre les gouttes est également décrite par un taux de coalescence qui résulte du produit d'une fréquence de collision et d'un facteur d'efficacité qui définit la probabilité de coalescence entre deux gouttes.

Comme pour le terme de rupture, le phénomène de coalescence résultat deux contributions

$$G_{MC}(d, P, R_d) = G_{MC}^+(d, P, R_d) + G_{MC}^-(d, P, R_d). \quad (3.8)$$

La perte de gouttes dues à la coalescence entre deux gouttes de diamètre entre $d_1 \pm \frac{\partial d_1}{2}$ avec des gouttes de diamètre entre $d_2 \pm \frac{\partial d_2}{2}$ provoque des pertes de masse dans ces deux classes, le terme correspondant de coalescence est donnée par :

$$G_{MC}^-(d, P, R_d)\delta d = R_d(d)\delta d \int_0^{d_{max}} \omega(d, \tau) \cdot N(\tau) \partial \tau. \quad (3.9)$$

Le gain de masse due à le gain de gouttes de diamètre entre $d \pm \frac{\partial d}{2}$ est donnée par :

$$S_{d,c}(d, p, R_d) = \frac{1}{2} \int_0^d \omega(d_1, d_2) [R_d(d_1)N(d_2) + R_d(d_2)N(d_1)] \left(\frac{d}{d_2}\right)^2 dd_1 - R_d \int_0^\infty \omega(d, \tau)N(\tau)d\tau. \quad (3.10)$$

$$\omega(d, \tau) = \lambda(d, \tau)h(d, \tau). \quad (3.11)$$

Avec λ est l'efficacité de collision qui définit la probabilité de coalescence entre deux gouttes, et h la fréquence de collision.

Les vitesses des deux phases sont reliées par une relation cinématique

$$v_d(d, \phi) = v_r(d, \phi) + v_c(d, \phi). \quad (3.12)$$

Où v_r est la vitesse relative d'une goutte de diamètre d , v_c la vitesse de la phase continue et v_d la vitesse de la phase dispersée.

- Transfert de matière

Le transfert de matière entre la phase continue et les gouttes de diamètre d est décrit par le terme F . Et $\int_0^{d_{max}} F(d, P, R_d, R_c) \partial d$ représente le flux de transfert de matière entre la phase continue vers la phase dispersée.

$$F(d, P, R_d, R_c) = K_{0c}(d) \frac{6P(d)}{d} (y - m x(d)). \quad (3.13)$$

3.2.1. Discrétisation par rapport à la variable interne

Cette partie représente l'application de la méthode de Galerkin pour la simulation de l'hydrodynamique et le transfert de matière pour les contacteurs d'extraction liquide-liquide agités.

Le premier pas du traitement numérique de l'équation (3.2), est la discrétisation par rapport au diamètre d de la goutte. Afin d'obtenir un nombre fini d'équations, la méthode de Galerkin est utilisée : soit $\{d_k | k = 0, \dots, K\}$ les diamètres discrets avec $0 = d_0 < d_1 < \dots < d_K = d_{max}$. Une approximation de la distribution des tailles des gouttes par une fonction constante par morceau est appliquée comme suit:

$$P(t, z, d) \approx \sum_{k=1}^K p_k(t, z) b_k(d). \quad (3.14)$$

Avec $p_k(t, z)$ dépendant de la hauteur de la colonne et du temps et $b_k(d) = 1$ si d appartient à $[d_{k-1}, d_k]$, autrement $b_k(d) = 0$. La fraction volumique $\varphi_k(t, z)$ des gouttes de diamètre d appartenant à $[d_{k-1}, d_k]$ est donnée par:

$$\varphi_k(t, z) = p_k(t, z) \cdot (d_k - d_{k-1}) = \int_{d_{k-1}}^{d_k} P(t, z, d) dd. \quad (3.15)$$

En combinant (3.14) et (3.16), on obtient la relation suivante entre les fonctions $\varphi_k(t, z)$, et $p_k(t, z)$ suivante:

$$\varphi_k(t, z) = P(t, z) \cdot \Delta d_k. \quad (3.16)$$

L'application de la méthode de Galerkin consiste à l'insertion des relations (3.14) et (3.16) dans (3.2), la multiplication avec la fonction de base $b_i(d)$ et l'intégration de l'équation qui en résulte sur tout l'intervalle des diamètres $[0, d_{max}]$. Ceci donne finalement un système de K équations différentielles pour la fonction $\varphi_k(t, z)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi_k + \frac{\partial}{\partial z} (v_{d,k} \varphi_k) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{d,ax} \frac{\partial}{\partial z} \varphi_k \right) + \frac{Q_d}{A} \delta(z - z_{d,in}) + S_k(\varphi_1, \dots, \varphi_k). \quad (3.17)$$

Pour plus de précision, le résultat est un système couplé par des équations de convection et diffusion dans une forme conservative avec un terme de source non linéaire. Cette loi conservative est couplée avec φ_k , et le terme de couplage S_k . Comme résultat, les intégrales dans les termes de source de l'équation intégral-différentielle (3.2) sont transformées en sommations, comme suit:

$$S_k(\varphi_1, \dots, \varphi_k) = \sum_{i=k}^K b_{ki}^+ \cdot \varphi_i - b_k^- \cdot \varphi_k + \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^K c_{kij}^+ \cdot \varphi_i \cdot \varphi_j - \sum_{i=1}^K c_{ki}^- \varphi_i \cdot \varphi_k. \quad (3.18)$$

Ici b^+ , b^- , c^+ et c^- sont les intégrales d'interactions, qui ont été résolues numériquement, en utilisant la quadrature de Gauss. Les expressions pour b et c sont données comme suit :

$$b_{ki}^+ = \frac{1}{\Delta d_i} \int_{d_{i-1}}^{d_i} \int_{\max(d, d_{i-1})}^{d_i} \beta(d_0, d) \cdot g(d_0) \partial d_0 \partial d, \quad (3.19a)$$

$$b_k^- = \frac{1}{\Delta d_k} \int_{d_{i-1}}^{d_i} g_k(d) \partial d, \quad (3.19b)$$

$$c_{kij}^+ = \frac{1}{\Delta d_j \cdot \Delta d_i} \int_{d_{k-1}}^{d_k} \int_{\max(d_{j-1}, \sqrt[3]{d^3, d_i^3})}^{\min(d_j, \sqrt[3]{d^3 - d_i^3 \cdot d / \sqrt[3]{2}})} \frac{\omega(d_1, d_2)}{V(d_1) \cdot V(d_2)} \cdot \left(\frac{d}{d_2}\right)^2 \partial d_1 \cdot V(d) \partial d, \quad (3.19c)$$

$$c_{ki}^- = \frac{1}{\Delta d_k \cdot \Delta d_i} \int_{d_{i-1}}^{\min(d_j, \sqrt[3]{d_{max}^3 - d_i^3})} \frac{\omega(d_1, d_2)}{V(d)} \partial d_1. \quad (3.19d)$$

De la même manière nous pouvons exprimer le transfert de matière selon le système d'équations suivant

$$R_d(t, z, d) \approx \sum_{k=1}^K r_k(t, z) b_k(d), \quad (3.20)$$

$$\rho_k(t, z) = r_k(t, z) \cdot (d_k - d_{k-1}) = \int_{d_{k-1}}^{d_k} R_d(t, z, d) dd, \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k + \frac{\partial}{\partial z} (v_k(\phi) \rho_k) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_k \frac{\partial}{\partial z} \rho_k \right) + S_k(\rho_1, \dots, \rho_k), \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} R_c + \frac{\partial}{\partial z} (v_c(z) R_c) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_c \frac{\partial}{\partial z} R_c + D_m (1 - \phi) \frac{\partial}{\partial z} \varepsilon_0 y \right) - \sum_{k=1}^K (S_{ek}^+ R_c - S_{ek}^+ \rho_k) + S_{f0}. \quad (3.23)$$

3.2.2. Discrétisation par rapport à la variable externe

Afin de discrétiser l'équation de transport (3.17), la colonne est décomposée en L cellules qui correspondent à des volumes finis de longueur $\Delta z = H/L$ chacune. Le point du milieu de la l^{ème} cellule de contrôle est défini par $z_l = (l - 1/2) \cdot \Delta z$ (pour $l = 1, \dots, L$). Ces cellules de contrôles sont localisées par $z_{l+1/2}$. En se référant à la figure 3.1, l'intégration à travers la l^{ème} cellule et l'intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$ donne l'expression suivante:

$$\begin{aligned} \varphi_{kl}^{n+1} - \varphi_{kl}^n + \frac{1}{\Delta z} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (v_k \varphi_k) \Big|_{z_{l-1/2}}^{z_{l+1/2}} dt \\ = \frac{1}{\Delta z} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(D_d \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} - D_c \frac{\varphi_k}{1 - \varphi_k} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \Big|_{z_{l-1/2}}^{z_{l+1/2}} dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{z_{l-1/2}}^{z_{l+1/2}} S_k dz dt. \end{aligned} \tag{3.24}$$

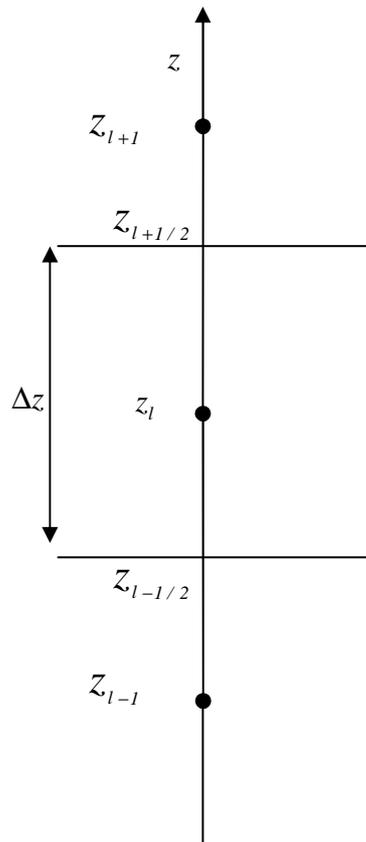


Figure 3.1. Volume de contrôle pour la méthode des volumes finis

Chaque terme de l'équation de transport est discrétisé comme suit:

3.2.2.1. Discrétisation des flux dispersif et des termes de sources

Flux dispersif:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(D_d \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} \right) \Big|_{z_{l+\frac{1}{2}}} dt \approx \Delta t \cdot D_d \left(z_{l+\frac{1}{2}} \right) \cdot \frac{1}{\Delta z} (\varphi_{k,l+1}^{n+1} - \varphi_{k,l}^{n+1}). \quad (3.25)$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(D_c \frac{\varphi_k}{1 - \varphi} \right) \Big|_{z_{l+\frac{1}{2}}} dt \approx \Delta t \cdot D_c \left(z_{l+\frac{1}{2}} \right) \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\varphi_{k,l}^n}{1 - \varphi_l^n} + \frac{\varphi_{k,l+1}^n}{1 - \varphi_{l+1}^n} \right) \frac{1}{\Delta z} (\varphi_{k,l+1}^{n+1} - \varphi_{k,l}^{n+1}). \quad (3.26)$$

Termes de sources:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{Q_d}{A} \cdot d(z - z_{d,in}) \cdot \Phi_{F,k} dz dt = \begin{cases} \Delta t \frac{Q_d}{A} \cdot \varphi_{F,k} & \text{si } z_l \in \left[z_{l-\frac{1}{2}}, z_{l+\frac{1}{2}} \right] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} & \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{z_{l-\frac{1}{2}}}^{z_{l+\frac{1}{2}}} (S_{B,k} + S_{C,k}) dz dt \\ & \approx \Delta t \Delta z \left(\sum_{i=k}^K S_{B,ki}^+ \cdot \varphi_{il}^n - S_{B,k}^- \cdot \varphi_{B,k}^{n+1} + \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^K S_{C,ki}^+ \varphi_{il}^n \cdot \varphi_{jl}^n - \varphi_{kl}^{n+1} \sum_{j=1}^k S_{C,ki}^- \varphi_{jl}^n \right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.2.2.2. Discrétisation du flux convectif

$$v_k \varphi_k \Big|_{z_{l+\frac{1}{2}}} = v_{k,l}^+ \varphi_{k,l} + v_{k,l}^- \varphi_{k,l+1}.$$

Où: $v_{k,l}^+ = \max(v_{kl}, 0)$, $v_{k,l}^- = \min(v_{kl}, 0)$ et $v_{k,z_l} = v_k(z_l, \varphi_l)$.

Donc

$$v_k \varphi_k \Big|_{z_{l-\frac{1}{2}}}^{z_{l+\frac{1}{2}}} \approx -v_{k,l-1}^+ \varphi_{k,l-1}^{n+1} + (v_{k,l}^+ - v_{k,l}^-) \varphi_{k,l}^n - v_{k,l-1}^- \varphi_{k,l+1}^{n+1}. \quad (3.29)$$

3.2.3. Ecriture matricielle du système linéaire

Après tout réarrangement, l'écriture matricielle suivante est obtenue:

$$\begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & 0 & \dots & \dots & & & \vdots \\ 0 & m_{32} & m_{33} & m_{34} & 0 & & & & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & m_{l,l-1} & m_{l,l} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{k1}^{n+1} \\ \varphi_{k2}^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \varphi_{kl}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ r_l \end{pmatrix}$$

Figure 3.2. Système linéaire à matrice dominante

Avec les termes du système à résoudre qui s'écrivent comme suit :

$$m_{l,l} = 1 + \frac{\Delta t}{\Delta z} (v_{k,l}^+ - v_{k,l}^-) + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (D_{d,l-\frac{1}{2}} + D_{d,l+\frac{1}{2}}) + \Delta t (S_{B,k}^- + \sum_{j=1}^k S_{C,kj}^- \cdot \varphi_{jl}^n), \tag{3.30}$$

$$m_{l,l+1} = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} \cdot D_{d,l+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\Delta z} v_{k,l+1}^-, \tag{3.31}$$

$$m_{l,l-1} = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} \cdot D_{d,l-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\Delta z} v_{k,l-1}^+, \tag{3.32}$$

$$r_l = \varphi_{k,l}^n + \frac{\Delta t}{\Delta z} (Diff^n) + \Delta t (S_{B,k}^+(\varphi^n) + S_{C,k}^+(\varphi^n)). \tag{3.33}$$

Avec $Diff^n$ le terme de dispersion qui est explicite et non linéaire.

Les distributions initiales de la phase dispersée et le diamètre de Sauter sont données en annexe 1et 2 respectivement.

3.3. Algorithme de calcul

L'écriture matricielle donne une matrice à diagonale dominante et pour cela nous utilisons la méthode d'élimination de Gauss qui s'avère très efficace pour ce genre de système. L'algorithme de calcul est donné comme suit:

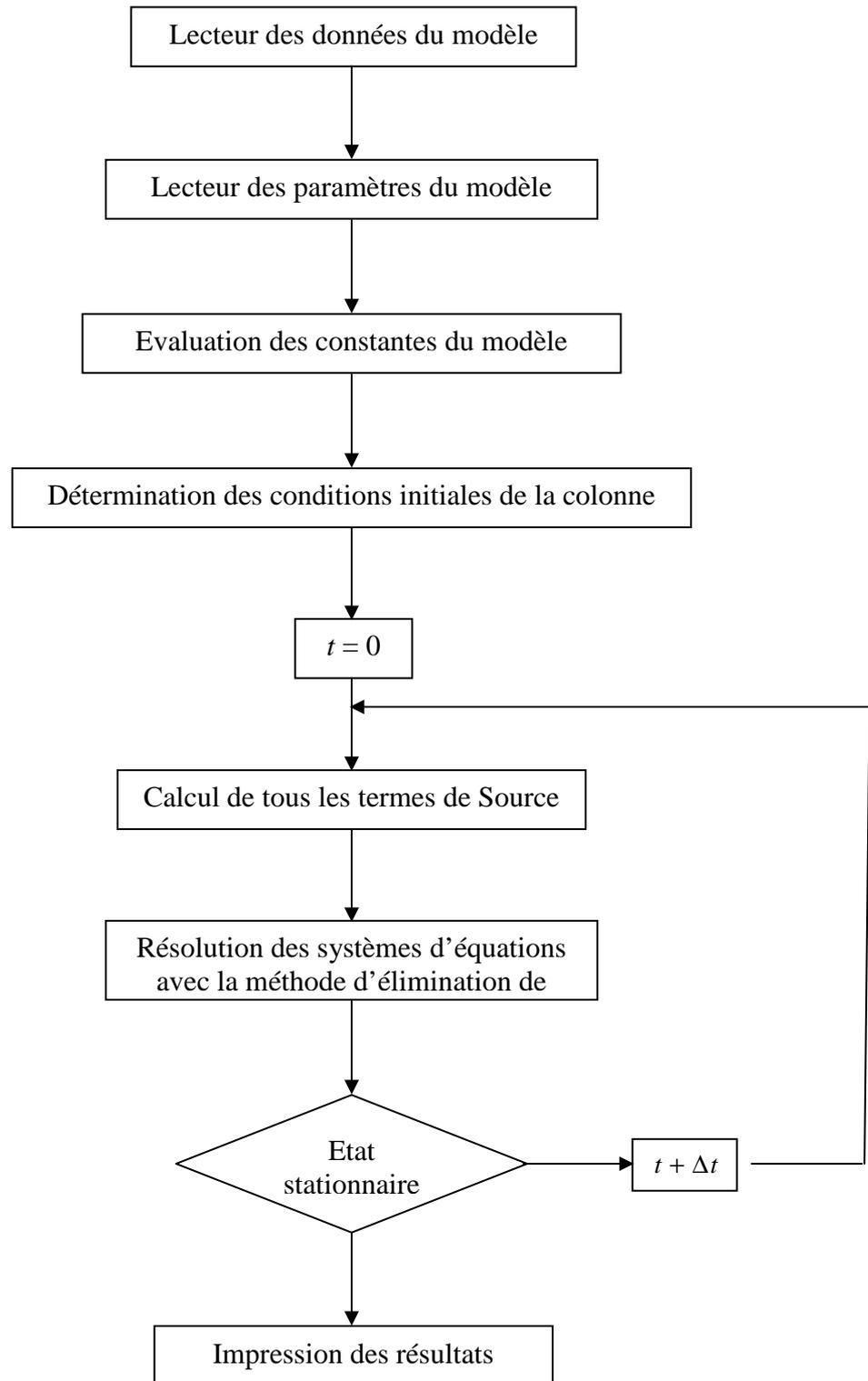


Figure 3.3. Organigramme de l'algorithme de calcul

3.4. Résultats de la modélisation des colonnes d'extraction liquide-liquide

Cette partie traite la validation du modèle de la probabilité de rupture en comparant les résultats issus du couplage entre la méthode de Galerkin et des volumes finis, avec les valeurs expérimentales et ce à différentes vitesses de rotation du rotor et différents taux de solvant dans la colonne RDC [23].

Ce travail considère la simulation de l'hydrodynamique et le transfert de matière. Les propriétés physiques de l'eau, et du toluène sont données dans le tableau 3.2 avec l'eau comme phase continue et le toluène comme phase dispersée. Les conditions de fonctionnement et les dimensions de la colonne sont présentées dans le tableau 3.1.

Le procédé de validation a été suivi par l'étude de l'influence des conditions de fonctionnement telles que le taux de solvant ou l'intensité de l'agitation sur les paramètres hydrodynamiques et le transfert de matière tels que le hold-up et le diamètre de Sauter.

Tableau 3.1. Caractéristiques de la colonne RDC et conditions opératoires

Diamètre de la colonne, mm	150
Hauteur des compartiments, mm	30
Partie active, mm	1740
Diamètre de la turbine, mm	90
Vitesse du rotor tr/min	300
Energie de dissipation, W/kg	0.0788

Tableau 3.2. Propriétés physiques de l'eau et du toluène

$\mu_{\text{toluène}}$ (mPa)	0.59
μ_{eau} (mPa)	1.00
$\rho_{\text{toluène}}$ (kg m ⁻³)	865.6
ρ_{eau} (kg m ⁻³)	997.7
σ mN m ⁻¹	36.1

3.4.1. Simulation en régime permanent

3.4.1.1. Etude sans transfert

L'objet de ce paragraphe est avant tout de déterminer l'influence des conditions opératoires (débits d'alimentation, intensité d'agitation) sur l'hydrodynamique. Nous avons donc procédé à la simulation du fonctionnement d'une colonne mettant en contact une phase aqueuse lourde (composée d'eau pure) et une phase dispersée composée de toluène pur. On examine dans ce paragraphe l'influence du taux de solvant et de l'intensité d'agitation.

A. Influence du taux de solvant

Dans les figures 3.4 et 3.5, les résultats de la simulation et les données expérimentales pour la colonne RDC sont présentés. La première série de simulations montre qu'une augmentation du taux de solvant a des répercussions significatives sur la rétention de la phase dispersée (figure 3.4), tandis que les variations sur le profil de diamètre de Sauter sont beaucoup plus limitées (figure 3.5).

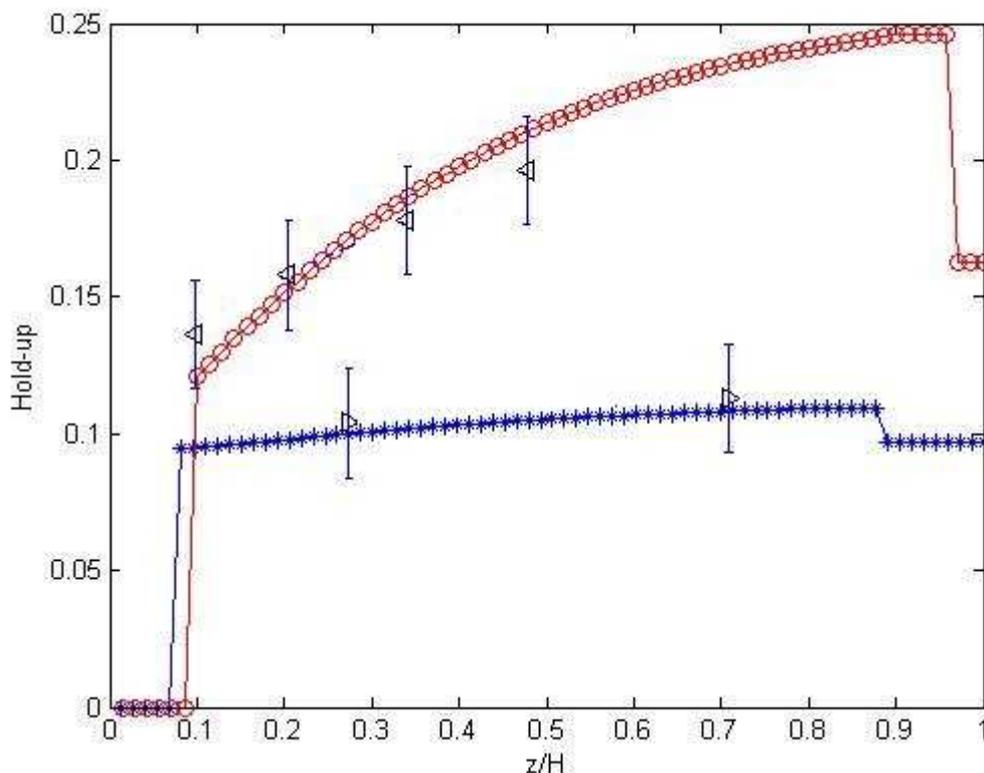


Figure 3.4. Comparaison dans la colonne RDC des hold-up calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de solvant. (300 tr/mn), ($Q_c = 100 \text{ l/h}$, $Q_d = 112 \text{ l/h}$)-○- Sim. - ►- Exp., ($Q_c=100 \text{ l/h}$, $Q_d=56 \text{ l/h}$)-*- Sim. - ◄- Exp)

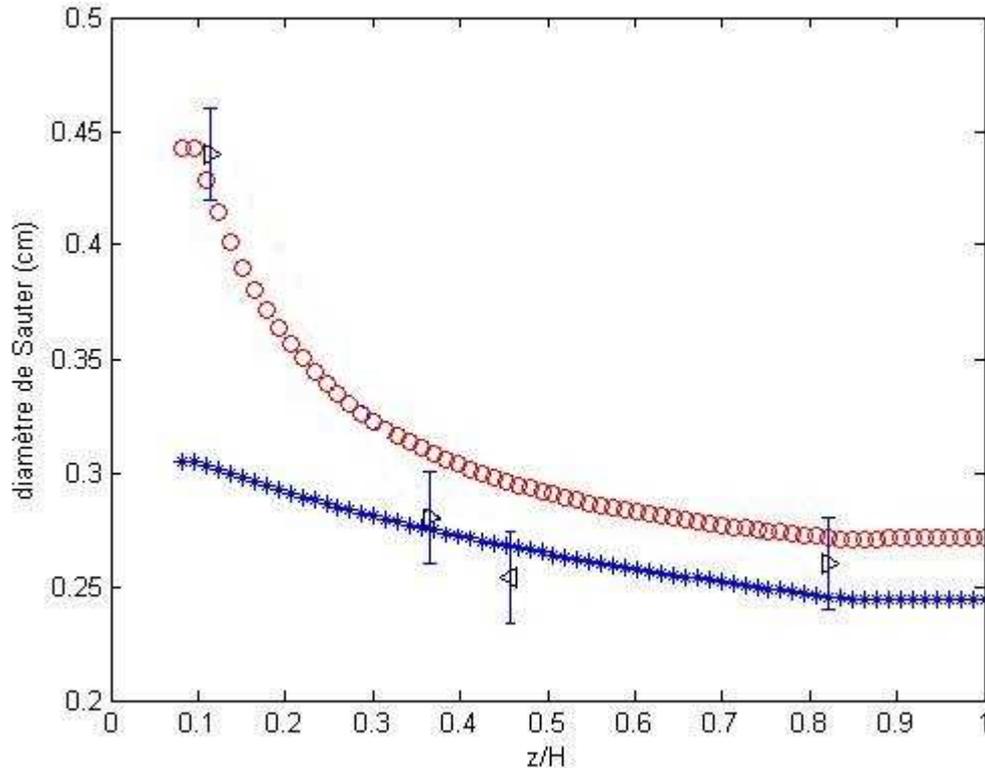


Figure 3.5. Comparaison dans la colonne RDC des diamètres de Sauter calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de solvant. (300 tr/mn), ($Q_c = 100$ l/h, $Q_d = 112$ l/h) -○- Sim. - ►- Exp., ($Q_c = 100$ l/h, $Q_d = 56$ l/h) -* - Sim. - ◄ - Exp)

Sur les figures 3.4 et 3.5, on peut voir qu'une augmentation ($Q_d = 56$ l/h, $Q_d = 112$ l/h) du taux de solvant a également des effets significatifs sur la rétention et les profils de diamètre de Sauter. Plus le taux de solvant de la phase dispersée augmente, et plus les rétentions et les diamètres de Sauter sont plus élevés.

B. Influence de l'intensité d'agitation

La seconde série de simulations met en exergue l'influence de l'intensité d'agitation sur l'hydrodynamique de la colonne. L'intensification de l'agitation a pour effet d'augmenter la rupture et de réduire fortement la coalescence entre les gouttes.

Il en résulte une diminution de la taille moyenne des gouttes, par conséquent une rétention considérable et des faibles diamètres de Sauter.

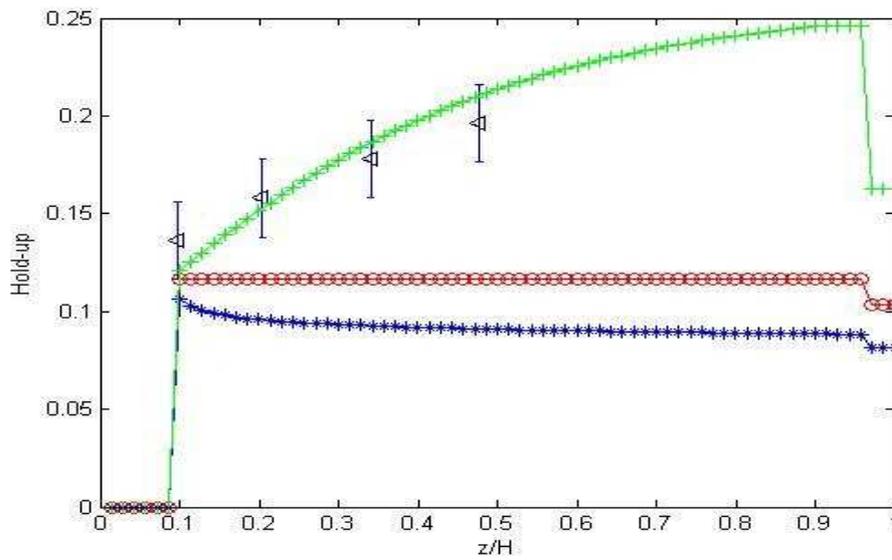


Figure 3.6. Comparaison dans la colonne RDC des hold-up calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de l'agitation ($Q_c=100$ l/h, $Q_d=112$ l/h), (250 tr/mn. -*- Sim. - \blacktriangleright - Exp.), (tr/mn. -○- Sim.- \blacktriangleleft - Exp.)(350 tr/mn. -+- Sim.)

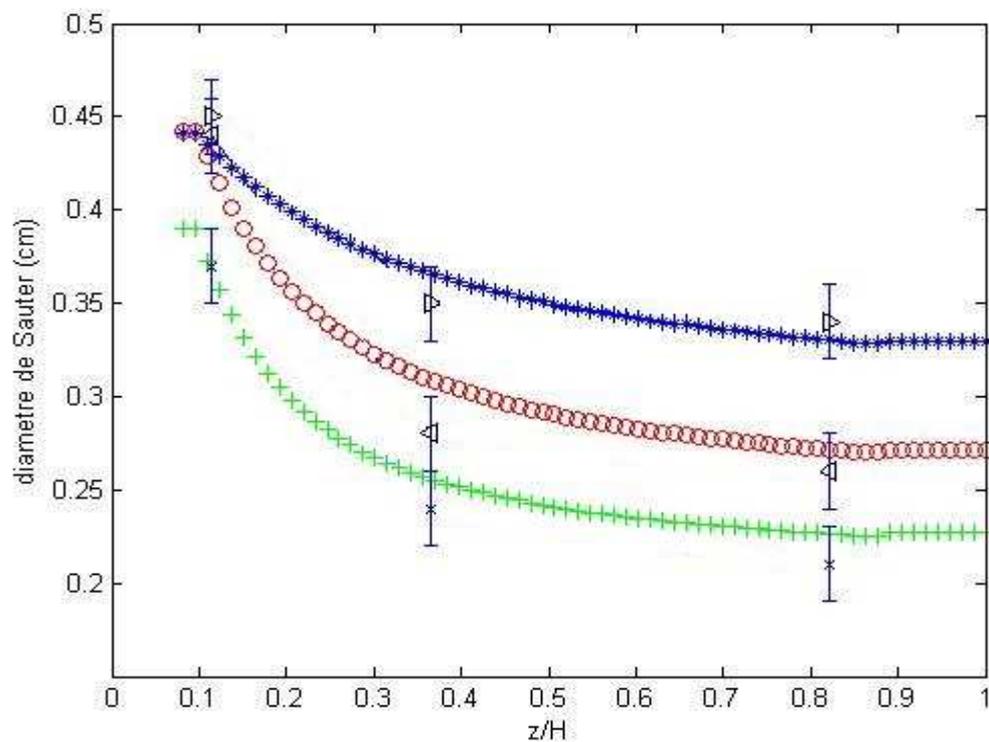


Figure 3.7. Comparaison dans la colonne RDC des diamètres de Sauter calculés avec les valeurs expérimentales. Influence de l'effet de l'agitation ($Q_c=100$ l/h, $Q_d=112$ l/h), (250 tr/mn. -*- Sim. - \blacktriangleright - Exp.), (300 tr/mn. -○- Sim.- \blacktriangleleft - Exp.)(350 tr/mn. -+- Sim. -x- Exp.)

D'après les figures 3.4, 3.5, 3.6 et 3.7, on peut conclure que les résultats prévus pour la rétention et le diamètre de Sauter sont dans une concordance tout à fait acceptable avec les valeurs expérimentales.

3.4.1.2. Etude du transfert de matière de la phase dispersée vers la phase continue

On examine ici l'influence de l'intensité d'agitation pour le système ternaire eau-acétone-toluène.

A. Influence de l'intensité d'agitation

Comme dans le cas sans transfert, l'effet principal d'une augmentation de l'intensité d'agitation est d'augmenter la rupture et de réduire fortement l'influence de la coalescence entre les gouttes.

Pour ce sens de transfert, c'est la phase continue qui joue le rôle d'extractant.

La diminution de la taille moyenne des gouttes augmente le temps de séjour moyen de la phase dispersée dans la colonne, et l'augmentation de la rétention qui en résulte implique que l'aire interfaciale augmente fortement.

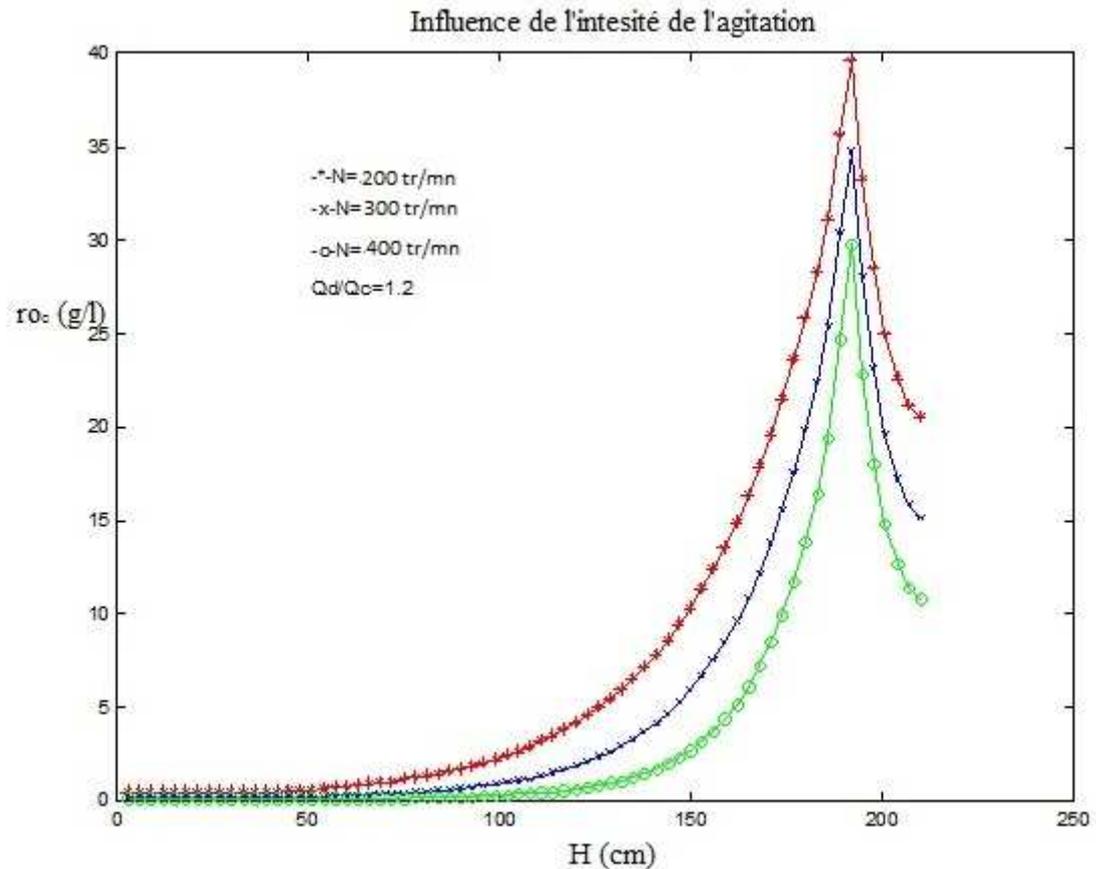


Figure 3.8. Influence de l'intensité l'agitation sur le transfert de matière dans la colonne RDC



CHAPITRE IV

CHAPITRE IV

MODELE DE BILAN DE POPULATION

4.1. Introduction

Ce chapitre porte sur la modélisation par modèle de bilan de population des particules (PBM) des réacteurs discontinus et continus. Dans un premier temps, l'équation générale de bilan de population sera présentée et différentes méthodes de résolution de cette équation seront mentionnées en donnant plus d'attention à la méthode d'Adomian qui fera l'objet principale de ce présent chapitre. Finalement, les distributions de taille des particules obtenues avec la méthode d'Adomian seront comparées aux solutions analytiques disponibles dans la littérature [98].

4.2. Modélisation par modèle de bilan de population

La modélisation des procédés industrielle est d'un grand intérêt industriel. Elle permet de prédire la qualité des produits obtenus par différent processus dans différentes condition opératoires, a priori sans avoir besoin de construire des unités expérimentales. Cela est d'autant plus intéressant lorsqu'il s'agit de produits dangereux ou radioactifs. Par exemple la prédiction de la distribution de taille de particules (PSD) est un élément clé pour le contrôle de la qualité des produits. Sa modélisation nécessite l'introduction de l'équation de bilan de population au système d'équations. Il existe différentes méthodes pour résoudre l'équation de bilan de population, les plus couramment utilisées sont: la méthode des classes, la méthode des moments et la méthode de quadrature des moments, entre autres. Elles seront décrites dans la section suivante en donnant une attention toute particulière à la méthode d'Adomian utilisée notamment dans ce travail.

4.2.1. Equation de bilan de population

L'équation du bilan de population a été utilisée pour la modélisation de variétés de systèmes particuliers. Un bilan de population (BP) est une manière de décrire l'évolution au cours du temps

et dans l'espace d'une population d'entités dénombrables qui possèdent un certain nombre de propriétés. Il existe différents modèles de bilan de population mais ils sont tous appropriés pour décrire les processus de transport et de cinétique réactionnelle des systèmes de phase dispersée. L'équation du bilan de population (EBP) fait alors le lien entre la cinétique réactionnelle, l'hydrodynamique du réacteur et la propriété des particules. La distribution continue des particules dans un réacteur bien agité est généralement décrite par une fonction de densité en nombre $n(v, t)$, qui possède de nombreuses définitions suivant les propriétés étudiées de la population. Ainsi, à chaque particule correspondent des coordonnées du vecteur propriété $\zeta (x_1, \dots, x_p)$ qui caractérisent son état interne (longueur, surface, densité). La fonction densité en nombre est alors définie comme une fonction de la vectrice propriété:

$$n(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_p, t) d\zeta_1, d\zeta_2, \dots, d\zeta_p = n(\zeta, t) d\zeta. \quad (4.1)$$

Dans notre cas n représente le nombre de particules dans une taille de volume différentiel par unité de volume de réacteur à l'instant t , où ζ représente le volume de particule.

Le taux de variation du nombre de densité des particules est décrit par une équation de bilan de population intégral-différentielle qui s'écrit:

$$\frac{\partial n(t, v)}{\partial t} + \frac{\partial [Gn(v, t)]}{\partial v} = \frac{1}{\theta} (n^{source}(v, t) - n(v, t)) + \phi(v, t). \quad (4.2)$$

Ici, il est supposé que, à tout instant, le nombre de particules $n(v, t)$ ne dépend que du temps et d'une coordonnée interne le volume de particules. La vitesse dans cette coordonnée interne est alors une vitesse de croissance des particules G due à la variation de pression, le transfert de masse, etc. Le flux global d'entrée détermine le temps de séjour θ de la dispersion. Ainsi, en supposant une agitation parfaite, où la distribution des volumes des particules à la sortie est toujours identique à la distribution à l'intérieur du réacteur. Les taux de distributions des rétentions des particules entrantes et sortantes qui en résultent deviennent, respectivement, $\frac{1}{\theta} n^{source}(v, t)$ et $\frac{1}{\theta} n(v, t)$

Le terme $\phi(v, t)$ représente la contribution à $n(v, t)$ par la variation du nombre des particules à cause de la rupture et de la coalescence des particules.

$$\begin{aligned} \phi(v, t) = & -\Gamma(v)n(v, t) \\ & - \int_0^\infty \omega(v-v', v')n(v, t)n(v', t)dv' \\ & + \int_0^\infty \beta(v, v')\Gamma(v')n(v', t)dv' + \frac{1}{2} \int_0^\infty \omega(v-v', v')n(v, t)n(v-v', t)dv'. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Où: $\Gamma(v)$ et $\omega(v, v')$ sont les fréquences de rupture et de coalescence, respectivement, et $\beta(v, v')dv$ est le nombre de gouttelettes filles ayant un volume dans la gamme de v à $v + dv$ formé lors de la rupture de la gouttelette mère de volume v .

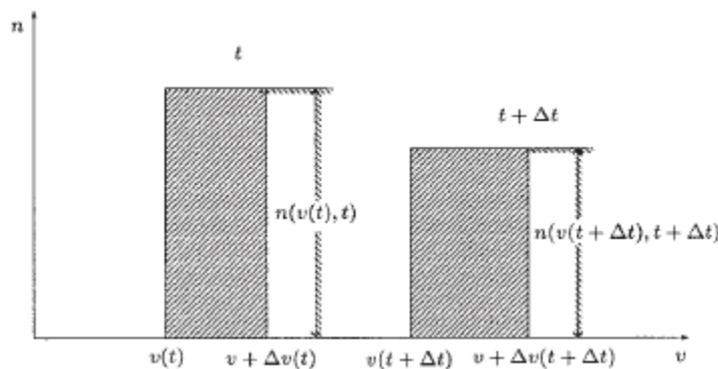


Figure 4.1. Bilan de population

4.2.1.1. Méthodes de résolution de l'équation de bilan de population

La résolution de l'équation de bilan de population est complexe. Plusieurs méthodes ont été proposées pour résoudre cette équation. Parmi les plus utilisées, on peut citer la méthode des moments, la méthode des classes, la méthode de Monte Carlo et la méthode de quadrature des moments. Dans les sections suivantes, une brève description de ces méthodes est faite. Une attention spéciale sera apportée à la méthode d'Adomian, qui a été retenue dans ces travaux pour la résolution numérique.

A. Méthode des classes (MDC)

La discrétisation de l'équation de bilan de population (DPB) ou méthode des classes est l'une des méthodes les plus utilisées en génie de la précipitation et de la cristallisation, car elle permet de simuler la distribution de taille des particules dans son ensemble. Cette méthode consiste à représenter la distribution de taille de particules en nombre. Cette méthode donne la PSD directement, néanmoins son utilisation est conditionnée à connaître a priori la gamme

de taille des particules et il est possible qu'un nombre important de classes soit nécessaire. Pour inclure l'équation de bilan de population dans la simulation, l'équation est écrite en fonction de la fraction volumique de la taille des particules, α_i de la i ème fraction, dont le volume se trouve entre v_i et v_{i+1} .

$$\alpha_i = N_i v_i \quad i = 0, 1, \dots, N - 1, \quad (4.4)$$

$$\alpha_i = N_i v_i = \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v, t) dv. \quad (4.5)$$

v_i est le volume qu'occupent les particules de taille L_i .

B. Méthode des moments (MDM)

La méthode standard des moments a été proposée par Randolph et Larson (1971). Elle consiste à transformer l'équation de bilan de population en un ensemble d'équations de transport des moments de la distribution. Le moment d'ordre k est défini par rapport à la coordonnée interne (La taille de particule L) à partir de l'équation :

$$m_k = \int_0^{\infty} n(L) L^k \quad k = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (4.6)$$

A partir des moments, des paramètres qui décrivent les propriétés du bilan de population sont obtenus. Ces propriétés sont le nombre, la longueur, l'aire et le volume total des particules par unité de volume.

Cette méthode est utilisée pour réduire la complexité du problème et la résolution est relativement simple pour des moments de faible ordre

C. Méthode de quadrature des moments (MDQM)

La méthode de quadrature des moments a été développée par McGraw (1997), pour décrire l'évolution des aérosols. Gélincourt a utilisé cette méthode pour modéliser par CFD la précipitation turbulente. Plus tard, Marchisio et Fox (2005) ont complété la méthode de quadratures des moments pour l'application des multi-fluides et l'ont appelé la méthode directe de quadrature des moments. Elle avait été postérieurement utilisée en Fan et al. (2004) pour modéliser l'agglomération et la brisure d'un polymère dans un lit fluidisé Gaz-Solide. Cette méthode offre une alternative attractive à la méthode des classes, quant il est plus intéressant d'étudier l'évolution des agglomérats à la place de l'exacte.

$$m_k = \int_0^{\infty} n(L)L^k dL = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i L_i^k. \quad (4.7)$$

Avec L_i et ω_i sont les tailles et leur poids respectivement, de la quadrature exprimés à partir des premiers moments de la distribution. L'idée de McGraw est de construire une matrice jacobéenne tridiagonale $J(x,t)$ à partir de $2N_q$ moments, puis de l'inverser afin d'obtenir les tailles et leur poids.

D. Méthode de Monte Carlo (MDMC)

La méthode de Monte Carlo est l'une des méthodes les plus utilisées pour modéliser la distribution de taille de particules, elle a été utilisée par (Zhao et Zheng, 2006), (Briesen, 2006), (Hollander et al. 2001) entre autres. Le but de cette méthode est de suivre l'évolution de l'ensemble des particules discrétisées en réalisant aléatoirement la sélection d'événements probables. Dans la méthode courante de Monte Carlo, il faut d'abord choisir l'intervalle de temps et un élément de volume.

E. Méthode d'Adomian

La méthode décompositionnelle d'Adomian permet de résoudre des problèmes fonctionnels de différents types: équations algébriques, différentielles, intégrales, intégral-différentielles, aux dérivées partielles (EDP).

La méthode s'adapte aussi bien aux problèmes linéaires qu'aux problèmes non linéaires. Il suffit qu'on puisse écrire l'équation sous la forme :

$$u - Nu = f.$$

Qui est appelée forme canonique d'Adomian. Le principe de la méthode est le suivant considérons l'équation fonctionnelle (sous la forme canonique) :

$$u - Nu = f. \quad (4.8)$$

Où N est un opérateur différentiel non linéaire et f une fonction connue.

La méthode d'Adomian consiste à rechercher la solution sous forme d'une série:

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n. \tag{4.9}$$

Et à décomposer le terme non linéaire Nu sous forme d'une série:

$$Nu = \sum_{n=0}^{\infty} u_n. \tag{4.10}$$

Les termes A_n sont appelés polynômes d'Adomian et sont obtenus grâce à la relation suivante [99, 100, 101, 102] :

$$A_n = \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{d\lambda^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right] \right]_{\lambda=0}, n = 0,1,2,.. \tag{4.11}$$

Où λ est un paramètre réel introduit par convenance. En remplaçant les relations (4.9) et (4.10) dans (4.8), on obtient

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n = f + \sum_{n=0}^{\infty} A_n. \tag{4.12}$$

Ce qui entraîne par identification :

$$\begin{cases} u_0 = f(t) \\ u_1 = A_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{n+1} = A_{n+1} \end{cases} \tag{4.13}$$

Il est à noter que cette identification n'est pas unique mais c'est la seule qui permet de définir explicitement les u_n . La relation (2.13) permet de calculer tous les termes de la série sans ambiguïté car les A_n ne dépendent que de u_0, u_1, \dots, u_n .

En pratique, il est presque toujours impossible de calculer la somme de la série $\sum_{n=0}^{\infty} u_n$, (sauf cas très particulier). Aussi se contente-t-on généralement d'une solution approchée φ_n sous la

forme de série tronquée :

$$\varphi_n = \sum_{i=0}^{n-1} u_i. \tag{4.14}$$

En résumé, après la détermination des $(A_n)_{n \geq 0}$ une sommation donne la solution approchée de l'équation. Cependant la question qu'on peut d'ores et déjà se poser, c'est comment déterminer les $(A_n)_{n \geq 0}$ et à quelles conditions converge la méthode.

- **Polynômes d'Adomian**

Les polynômes d'Adomian sont définis par la formule:

$$\begin{cases} A_0(u_0) = N(u_0) \\ A_n(u_0, u_1, \dots, u_n) = \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{d\lambda^n} \left[N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i u_i \right) \right] \right]_{\lambda=0}. \end{cases} \tag{4.15}$$

La formule proposée par G. Adomian pour le calcul des polynômes d'Adomian $(A_n)_{n \geq 0}$ est la suivante [100] :

$$A_0(u_0) = N(u_0),$$

$$A_1(u_0, u_1) = u_1 \frac{\partial}{\partial u} N(u_0),$$

$$A_2(u_0, u_1, u_2) = u_2 \frac{\partial}{\partial u} N(u_0) + \frac{1}{2!} u_1^2 \frac{\partial^2}{\partial u^2} N(u_0),$$

$$A_3(u_0, u_1, u_2, u_3) = u_3 \frac{\partial}{\partial u} N(u_0) + \frac{1}{2!} u_1 u_2 \frac{\partial^2}{\partial u^2} N(u_0) + \frac{1}{3!} u_1^3 \frac{\partial^3}{\partial u^3} N(u_0),$$

...

Cette formule s'écrit sous la forme :

$$A_n = \sum_{v=0}^n c(v, n) N^{(v)}(u_0), n \geq 1. \tag{4.16}$$

Où $c(v, n)$ représente la somme de tous les produits (divisées par $m!$) des v termes u_i dont la somme des indices i est égales à n , m étant le nombre de répétitions des mêmes termes dans le produit. La relation (4.16) permet de trouver les polynômes A_n , mais en pratique, il est difficile de les déterminer quand n devient grand $n > 5$. Par la suite d'autres formules ont été proposées mais elles s'avèrent inefficaces en pratique vu leur complexité d'une part et l'absence de justification de l'écriture de ces formules d'autre part.

C'est dans les années 1994 que K. Abbaoui propose et démontre une formule récurrente pratique de calcul des A_n [99]. La formule d'Abbaoui est déduite de la relation (4.15) donnée dans la définition des polynômes d'Adomian.

4.3. Résolution de l'équation de bilan de population par la méthode d'Adomian

Pour illustrer la méthode de décomposition d'Adomian nous comparons les solutions des modèles de différents mécanismes de l'équation de bilan de population, où les solutions analytiques sont disponibles dans la littérature, avec les solutions de la présente méthode, et ceci pour les réacteurs discontinu (batch) et continu.

4.3.1. Résolution en processus discontinu

4.3.1.1. Présence seulement du terme de rupture

A. Rupture avec distribution uniforme des particules filles et $\Gamma(v) = v$ et la condition initiale $n_0(v, t) = ve^{-v}$

Considérons le problème suivant:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t). \quad (4.17)$$

Intégrons l'équation (4.17) par rapport à t , nous obtenons

$$n(v, t) = n(v, 0) - \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - \Gamma(v) n(v, t) \right) dt. \quad (4.18)$$

Supposons que la solution de l'équation (4.18) donnée par la méthode de décomposition d'Adomian est :

$$n(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t). \tag{4.19}$$

Avec les termes de la série sont déterminés par l'algorithme récursif d'Adomian

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = ve^{-v}, \tag{4.20}$$

$$n_1(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n_0(v', t) dv' - \Gamma(v) n_0(v, t) \right) dt = te^{-v}(2 + 2v - v^2). \tag{4.21}$$

Et de la même manière nous calculons les termes $n_2(v, t), n_3(v, t), \dots, n_m(v, t)$

$$n_2(v, t) = e^{-v} t^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{11}{4}v - \frac{1}{4}v^2 + \frac{5}{8}v^3 - 120v^4 + v^5 \right),$$

$$n_3(v, t) = e^{-v} t^3 \left(-\frac{5}{3} + \frac{1}{3}v + \frac{203}{84}v^2 + \frac{49}{168}v^3 + \frac{1}{4}v^4 + \frac{7}{168}v^5 - \frac{1}{480}v^6 + v^7 \right),$$

en général $n_m(v, t)$ est la solution :

$$n_m(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n_{m-1}(v', t) dv' - \Gamma(v) n_{m-1}(v, t) \right) dt.$$

Enfin nous calculons le terme général $n_m(v, t)$ comme suit :

$$n_m(v, t) = \frac{(-1)^m}{m!} t^{m-1} e^{-v} v^m (1 + t)(-m - mt + 2t^2). \tag{4.22}$$

D'où la solution finale est :

$$\begin{aligned} n(v, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^m}{m!} t^{m-1} v^m (-m - mt + 2t^2) \right) e^{-v} \\ &= e^{-(1+t)v} (1 + t)(2t + v + tv). \end{aligned} \tag{4.23}$$

B. Rupture avec distribution uniforme des particules filles et $\Gamma(v) = v^2$

Dans ce cas, le taux de rupture des particules est proportionnel au carré de son volume. Les premiers termes sont calculés avec le même raisonnement que précédemment et l'algorithme reprend avec la condition initiale suivante :

$$n_0(v, t) = n(v, 0) = ve^{-v}, \quad (4.24)$$

$$n_1(v, t) = te^{-v}(4 + 4v + 2v^2 - v^3). \quad (4.25)$$

D'où le terme générale qui s'écrit ainsi

$$n_m(v, t) = \frac{(-1)^m}{m!} t^m v^{2m} (4t + v + 4tv + 2tv^2) e^{-v}. \quad (4.26)$$

Et par conséquent

$$\begin{aligned} n(v, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} n_m(v, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^m}{m!} t^m v^{2m} (4t + v + 4tv + 2tv^2) e^{-v} \right) \\ &= e^{-v(1+tv)} (v + 4tv + 4t + 2tv^2). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Qui converge vers solution exacte (tableau 4.1).

La figure 4.2 présente la comparaison de la distributions de densité en nombre au temps $t = 0.05$ pour les taux de rupture linéaire $\Gamma(v) = v$ et parabolique $\Gamma(v) = v^2$. Cette comparaison montre clairement que le taux parabolique produit beaucoup de particules que pour le taux de rupture linéaire, et ceci démontre la signification de cette fonction dans l'équation de rupture.

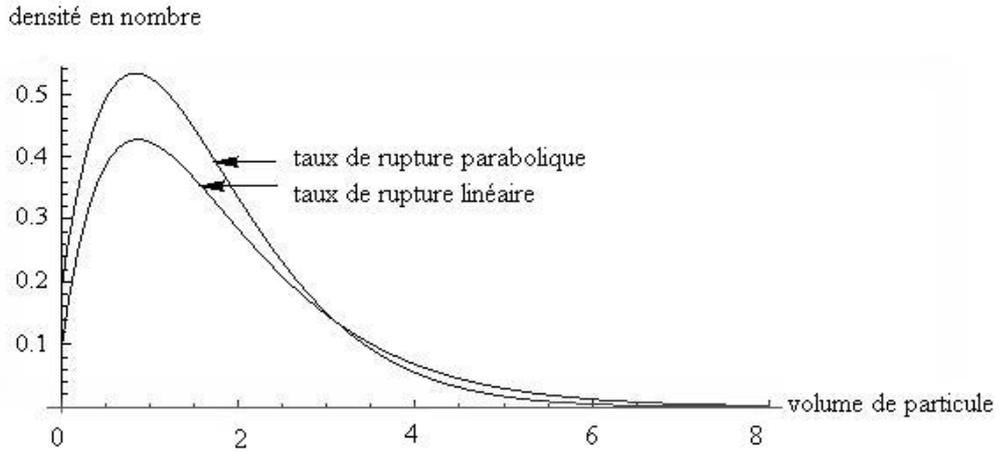


Figure 4.2. Comparaison entre les densités en nombre pour $\Gamma(v) = v$ et $\Gamma(v) = v^2$

4.3.1.2. Présence des termes de coalescence et de croissance

Dans ce cas l'équation de bilan de population s'écrit sous la forme suivante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + \frac{\partial(G(v)n(v, t))}{\partial v} &= \frac{1}{2} \int_0^v w(v - v')n(v - v', t)n(v', t)dv' \\ &- n(v, t) \int_0^\infty w(v, v')n(v', t)dv'. \end{aligned} \tag{4.28}$$

A. Cas $w(v, v') = 1$ avec la condition initiale $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

Les termes de la série sont déterminés par l'algorithme récursif d'Adomian

$$n_1(v, t) = \frac{1}{2}e^{-v}t(-4 + 3v),$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{8}e^{-v}t^2(18 - 34v + 9v^2),$$

$$n_3(v, t) = \frac{1}{48}e^{-v}t^3(-92 + 320v - 198v^2 + 27v^3),$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{384}e^{-v}t^4(536 - 2960v + 3168v^2 - 972v^3 + 81v^4).$$

Les figures 4.3 et 4.4 représentent les résultats obtenus par la méthode d'Adomian.

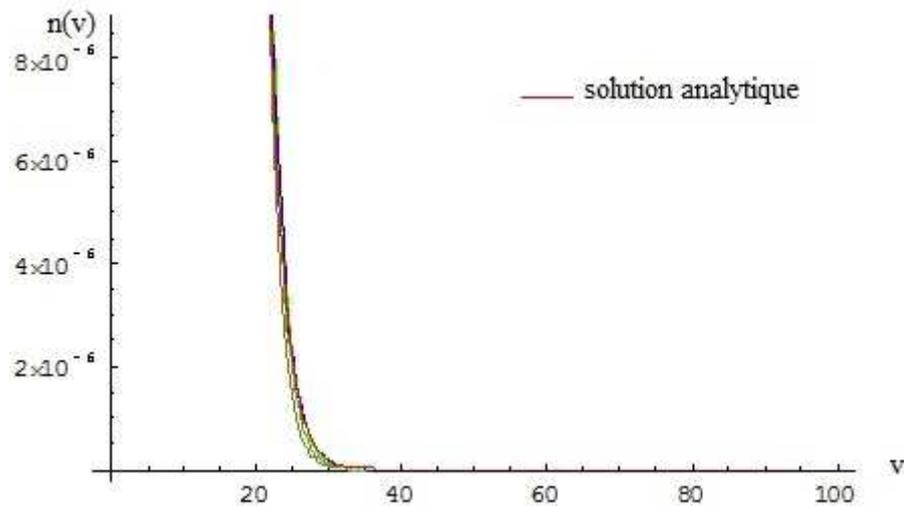


Figure 4.3. Comparaison entre les solutions numériques et la solution analytique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = 1$ avec la condition initiale $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

Cette figure représente la comparaison entre les solutions numériques tronquées et la solution analytique.

La troncature utilisée pour la solution est de onzième ordre, à cet ordre nous remarquons que les deux solutions sont identiques comme le montre la figure 4.4.

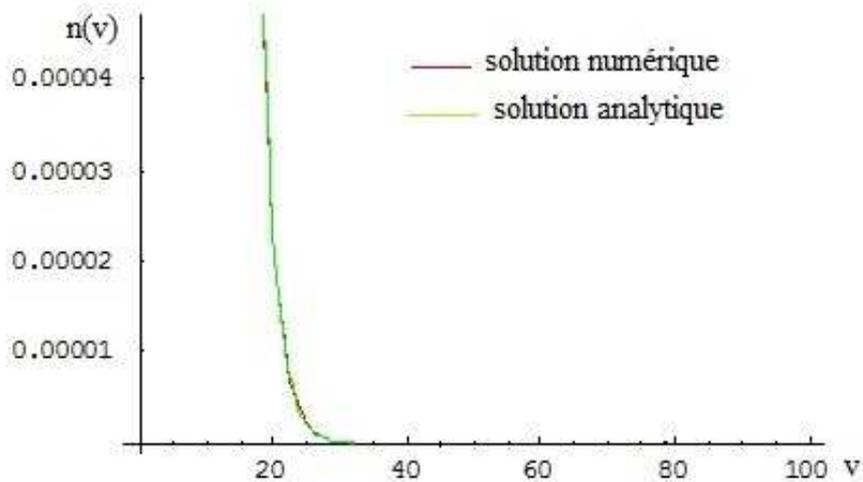


Figure 4.4. Comparaison entre les deux solutions analytique et numérique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = 1$ avec la condition initiale $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

B. Cas $w(v, v') = v + v'$, $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

Dans ce cas, les termes $n_1(v, t)$, $n_2(v, t)$, $n_3(v, t)$ et $n_4(v, t)$ de la série d'Adomian sont donnés par:

$$n_1(v, t) = \frac{1}{2} e^{-v} t (-2 + v)(2 + v),$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{12} e^{-v} t^2 (18 + 6v - 24v^2 + v^4),$$

$$n_3(v, t) = \frac{1}{144} e^{-v} t^3 (-72 - 168v + 528v^2 + 36v^3 - 72v^4 + v^6),$$

$$n_4(v, t) = \frac{1}{2880} e^{-v} t^4 (240 + 3120v + 11460v^2 - 3120v^3 + 4120v^4 + 120v^5 - 160v^6 + v^8).$$

La figure 4.5 représente la solution numérique obtenue par la méthode d'Adomian.

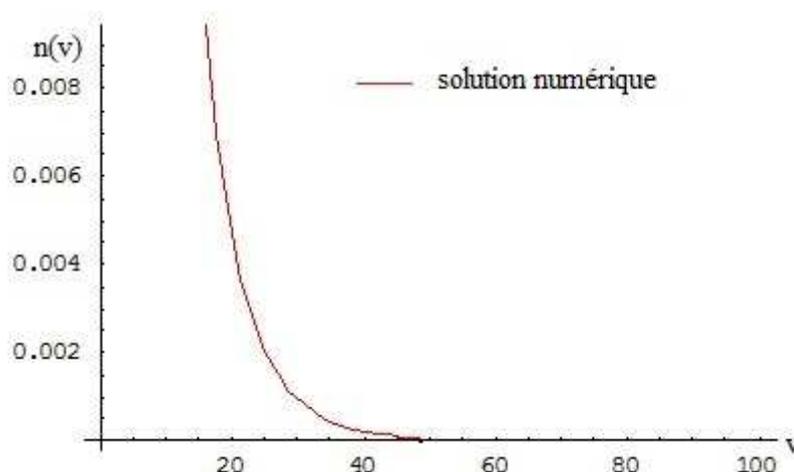


Figure 4.5. Solutions numérique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = v + v'$, $n_0(v, t) = e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

C. Cas $w(v, v') = 1$, $n_0(v, t) = ve^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

Dans ce cas nous résolvons l'équation de bilan de population par la méthode d'Adomian et nous comparons la solution obtenue avec la solution analytique.

Les premiers termes de la série sont déterminés par l'algorithme d'Adomian suivant

$$n_1(v, t) = \frac{1}{2} e^{-v} t (-36 + 12v + v^2),$$

$$n_2(v, t) = \frac{1}{480} e^{-v} t^2 (2280 - 1680v + 20v^2 + 40v^3 + v^4),$$

$$n_3(v, t) = \frac{1}{40320} e^{-v} t^3 (-215040 + 258720 v - 28560 v^2 - 13440 v^3 + 1008 v^4 + 84 v^5 + v^6).$$

D'où la solution tronqué à l'ordre 9.

$$n(v, t) \cong \sum_{i=0}^9 n_i(v, t).$$

Les figures suivantes représentent le résultat obtenu pour ce cas

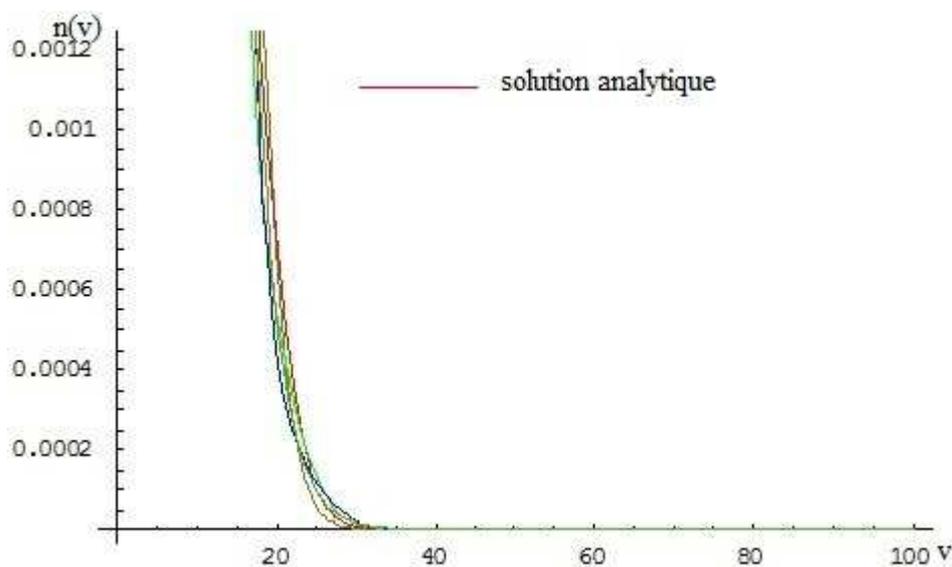


Figure 4.6. Comparaison entre les solutions numériques et la solution analytique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = 1$, $n_0(v, t) = v e^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

D'après la figure 4.7 en peut conclure qu'une troncature à l'ordre 9 est suffisante.

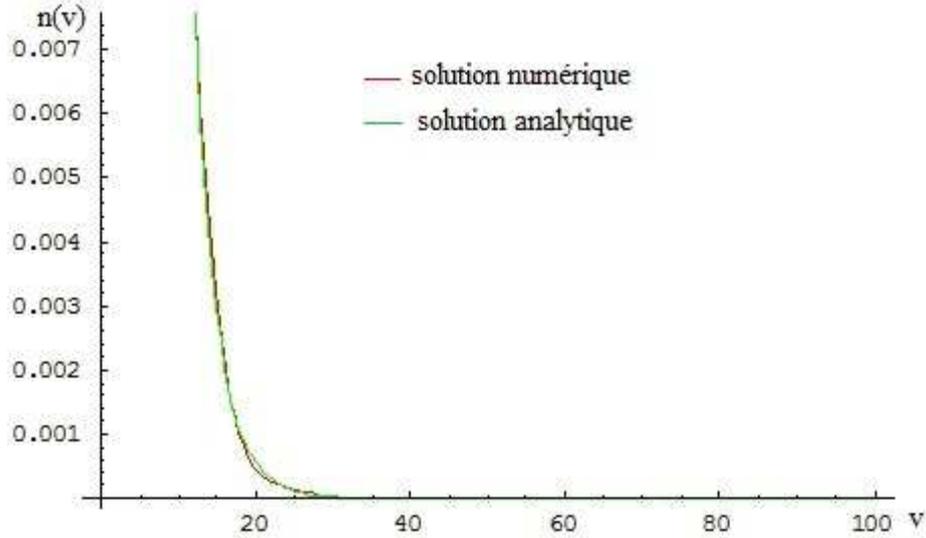


Figure 4.7. Comparaison entre les deux solutions analytique et numérique de l'équation de bilan de population dans le cas où $w(v, v') = 1$, $n_0(v, t) = ve^{-v}$ et le taux de croissance $G(v) = v$

4.3.2. Résolution en processus continu

4.3.2.1. Absence du terme de croissance dans l'équation de bilan de population

A. Condition initiale et terme de source sous forme exponentielle

Nous considérons le modèle suivant:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = a n^{source}(v) + \int_v^\infty \beta(v, v')\Gamma(v')n(v', t)dv' - n(v, t)(\Gamma(v) + a). \tag{4.29}$$

Donc:

$$n(v, t) = a n^{source}(v) + \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v')\Gamma(v')n(v', t)dv' - n(v, t)(\Gamma(v) + a) \right) dt. \tag{4.30}$$

Les étapes de la méthode d'Adomian sont:

$$n_0(v, t) = ate^{-v},$$

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v')\Gamma(v')n_m(v', t)dv' - n_m(v, t)(\Gamma(v) + a) \right) dt, m = 0,1,2, \dots \tag{4.31}$$

Le second terme est :

$$n_1(v, t) = \frac{1}{2} a e^{-v} t^2 (-2 + a + v).$$

Le terme général est :

$$n_m = (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} a e^{-v} (a+v)^{m-2} (m - (a+u))^2 - m). \quad (4.32)$$

Donc:

$$\begin{aligned} n(v, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{t^{m+1}}{(m+1)!} a e^{-v} (a+v)^{m-2} ((m - (a+u))^2 - m) \\ &= e^{-v} \frac{(1/a)^2 + (1/a + 1 + (1/a)v)^2}{(1/a + 1 + (1/a)v)^3} (1 - e^{-(at+tv)}) \\ &\quad - \frac{e^{-(at+tv+v)}}{(1 + (1/a)v)} \left(2t \left(1 + \frac{1}{a+1} \right) + t^2 \right). \end{aligned} \quad (4.33)$$

B. Terme de source sous forme de distribution de Dirac

Le terme de source est donné par:

$$n^{source}(v) = \delta(v - v_f). \quad (4.34)$$

La solution de l'équation de bilan de population est :

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{n^{source}(v)}{\tau} + \int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\tau} \right). \quad (4.35)$$

Dans ce cas l'opérateur $L = \frac{\partial}{\partial t}$ et $L_t^{-1}(\cdot) dt$

L'application de l'opérateur inverse donne:

$$n(v, t) = \frac{n^{source}(v)}{\tau} + \int_0^t \left(\int_v^{\infty} \beta(v, v') \Gamma(v') n(v', t) dv' - n(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\tau} \right) \right) dt. \quad (4.36)$$

La solution donnée par la méthode de décomposition d'Adomian est:

$$n_0(v, t) = \frac{\delta(v - v_f)}{\tau},$$

$$n_{m+1}(v, t) = \int_0^t \left(\int_v^\infty \beta(v, v') \Gamma(v') n_m(v', t) dv' - n_m(v, t) \left(\Gamma(v) + \frac{1}{\tau} \right) \right) dt \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.37)$$

De ce cas nous calculons les termes de la solution:

$$n_1(v, t) = \frac{t^2 \left((1 + \tau v) \delta(v - v_f) \right) - 2\tau \text{Heavyside}(v - v_f)}{2\tau^2},$$

$$n_m(v, t) = \frac{(-1)^m t^{m+1}}{(m+1)! \tau^{m+1}} (1 + \tau v)^{m-2} \left((1 + \tau v)^2 \delta(v - v_f) - (2m\tau - 2\Gamma^2 m(m-1)) \right) x\text{Heavyside}(\tau - v). \quad (4.38)$$

Donc :

$$n(v, t) = n_0(v, t) + n_1(v, t) + \sum_{m=2}^{\infty} \frac{(-1)^m t^{m+1}}{(m+1)! \tau^{m+1}} (1 + \tau v)^{m-2} \left((1 + \tau v)^2 \delta(v - v_f) - (2m\tau - 2\tau^2 m(m-1)) \right) x\text{Heavyside}(\tau - v). \quad (4.39)$$

Donc la solution exacte est :

$$n(v, t) = \frac{1}{(1 + \tau v)^3} \left(\left(1 - e^{-\frac{t(1+\tau v)}{\tau}} \right) (1 + \tau v)^2 \delta(v - 2) + \left(\frac{2\tau(1+2\tau)e^{-\frac{t(1+\tau v)}{\tau}} t^2 (-2+v)(1+\tau v)^2 - e^{-\frac{t(1+\tau v)}{\tau}}}{2\tau(1+2\tau)(4\tau - 2t(1+\tau v))} \right) x\text{Heavyside}(\tau - v) \right). \quad (4.40)$$

Les solutions analytiques disponibles pour ce cas sont présentées dans le tableau suivant:

Tableau 4.1. Solutions analytiques disponibles dans le cas de la présence des termes de coalescence et de croissance

Cas	$w(v, v')$	G	$n(v, 0)$	Solution analytique $n(v, t)$	Références
1	1	v	e^{-v}	$\frac{\left(\frac{2}{2+t}\right)^2}{e^t} e^{-\frac{\left(\frac{2}{2+t}\right)}{e^t} v}$	Ramabhadran et al. (1976)
2	$v + v'$	v	e^{-v}	$\frac{\left(\frac{2}{2+t}\right)^2}{e^t} e^{-\left(\frac{\left(\frac{2}{2+t}\right)}{e^t}\left(\frac{2}{2+t}-1\right)v\right)}$	Ramabhadran et al. (1976)
3	1	v	ve^{-v}	$\frac{\left(\frac{2}{2+t}\right)^2}{e^t} \frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{2}{2+t}\right)}} e^{\left(\frac{-v}{e^t}\right)} \sinh\left(\frac{v}{e^t} \sqrt{1-\left(\frac{2}{2+t}\right)}\right)$	Ramabhadran et al. (1976)



CHAPITRE V

CHAPITRE V

SIMULATION A L'AIDE DES SIMULATEURS FLUENT ET COMSOL

5.1. Introduction

Ce chapitre présente l'ensemble des résultats de simulation pour les contacteurs diphasique. Ces résultats sont obtenus à l'aide de deux logiciels: Fluent et Comsol.

Le simulateur Fluent, est un code de calcul CFD commercial édité par la société ANSYS. Le terme CFD désigne le calcul numérique appliqué à la mécanique des fluides, il est couramment nommé par l'acronyme CFD provenant de l'anglais « Computational Fluid Dynamics». Cette technique consiste à résoudre dans un domaine les équations fondamentales de la mécanique des fluides couplées éventuellement aux équations de transfert de matière, et de chaleur de manière à caractériser les écoulements. Les méthodes de discrétisation les plus souvent utilisées en CFD sont: les méthodes des différences finies, les méthodes des différences finies, les méthodes des volumes finis et les éléments finis. Dans le cas de logiciel commercial Fluent, la méthode des volumes finis est utilisée.

Fluent est un solveur qui supporte tous les régimes d'écoulements, Eulérien ou visqueux, stationnaire ou non. Initialement, la CFD a trouvé des applications en génie mécanique. Aujourd'hui, la CFD est de plus en plus utilisée dans différentes industries comme l'aéronautique, l'automobile, l'électrique et le génie des procédés, etc.

Le simulateur Comsol, anciennement appelé FEMLab, est avant tout un outil de résolution d'équations aux dérivées partielles par éléments finis. C'est un logiciel de simulation pour différentes applications de physique et d'ingénierie. Sa particularité est de disposer d'une base de données d'équations permettant de modéliser différents phénomènes physiques, comme l'électrostatique, l'écoulement des fluides ou encore la déformation des matériaux.

Sa spécificité est également de permettre de coupler différentes EDP, de manière à décrire des phénomènes multiphysiques.

5.2. Résultats et discussion

Les résultats obtenus par le biais de la simulation sont présentés et discutés selon deux parties. La première partie concerne l'étude de l'hydrodynamique de la colonne, et la seconde concerne l'étude du transfert de matière.

5.2.1. Etude de l'hydrodynamique de la colonne à disque rotatif

Nous divisons cette section en deux parties.

5.2.1.1. Ecoulement monophasique

Dans cette partie nous présentons les résultats obtenus à partir de la simulation de l'hydrodynamique en utilisant les deux simulateurs Comsol et Fluent.

A. Simulation utilisant le simulateur Comsol

Nous commençons par la création de la géométrie de la colonne RDC, la figure suivante représente le maillage de la colonne RDC par le simulateur Comsol.

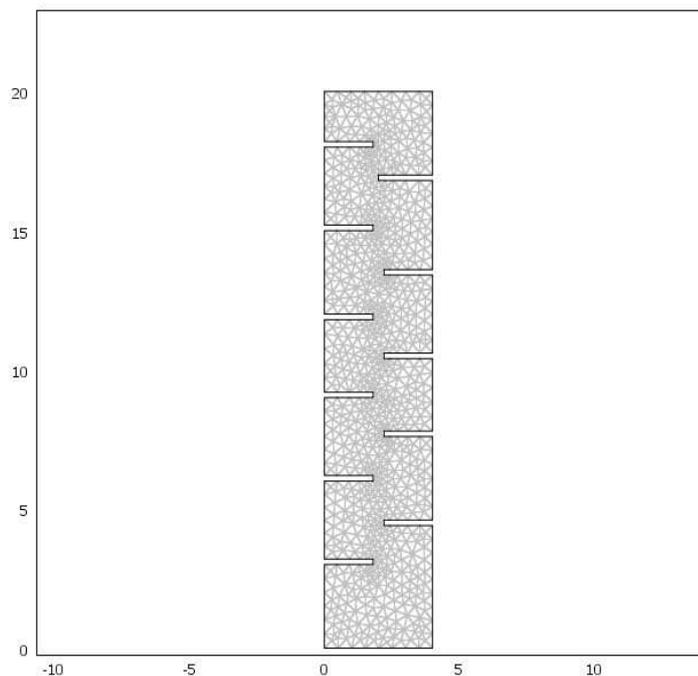


Figure 5.1. Maillage du réacteur RDC par Comsol

Dans le cas où une seule phase (phase aqueuse), la simulation du champ de vitesse pour la phase continue est représentée sur les figures 5.2 et 5.3 Ces résultats sont obtenus pour un débit volumique de 200 l/h et la vitesse de rotation des disques est 150 tr/mn. La simulation est faite pour $t = 20s$.

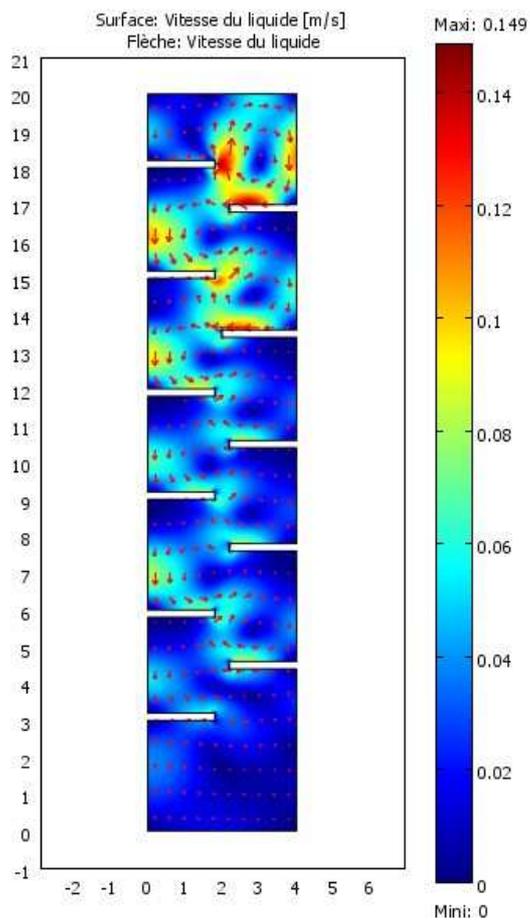


Figure 5.2. Vitesse de la phase continue

Pour une vue plus mieux on ajoute la figure 5.3 qui représente une partie de la colonne

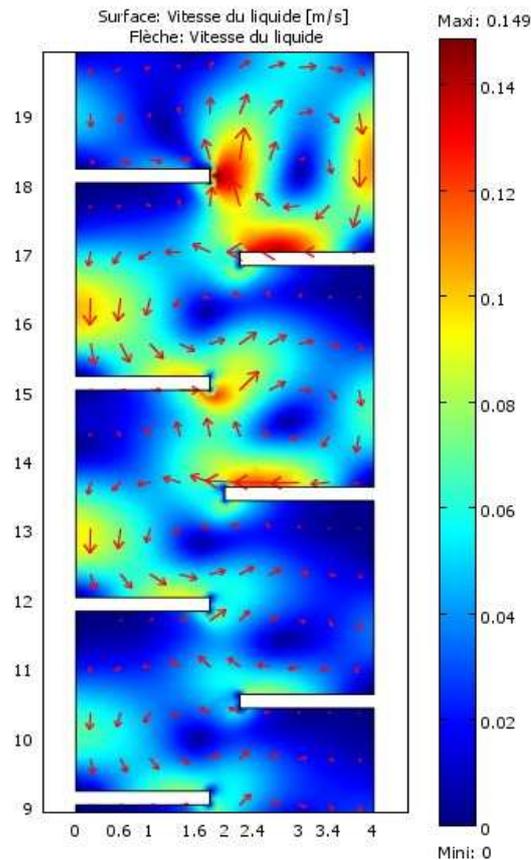


Figure 5.3. Vitesse de la phase continue dans une section de la colonne RDC

Dans ce cas le modèle de turbulence utilisé est le modèle k- ϵ , la vitesse est maximale au niveau des limites des stators et disques rotatifs, ceci peut être bien expliqué, car ces limites sont des obstacles au mouvement de la phase. On peut noter aussi que la vitesse près du mur est insignifiante et la vitesse dans les coins est presque nulle, ce qui est évident car il n'y pas de mouvement de la phase (eau) dans ces zones.

La figure 5.3 donne un intervalle de vitesse qui varie de 0 m/s à 0.149 m/s, par comparaison de ces vitesses avec la vitesse à l'entrée de la colonne (vitesse initiale égale à 0.0032m/s), on peut dire que le résultat est acceptable.

Cette figure montre aussi que la circulation des vitesses forme des anneaux qui sont situés dans la zone comprise entre deux disques rotatifs ou deux stators. Les flèches représentent le champ de vitesses de la phase continue et indiquent le sens de celle-ci.

B. Simulation utilisant le simulateur Fluent

Dans cette partie, nous présentons les résultats de simulation de l'hydrodynamique pour l'écoulement monophasique à l'aide de Fluent.

Même chose pour le cas précédent nous commençons par la création de la géométrie de la colonne à l'aide du préprocesseur Gambit. La figure 5.4 représente la géométrie ainsi que le maillage de la colonne RDC.

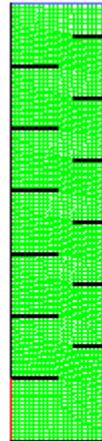


Figure 5.4. Maillage de la colonne RDC par Gambit

La figure 5.4 montre le champ de vitesses de la phase continue, qui est dans ce cas l'eau, issu de la simulation en utilisant la CFD à l'aide du logiciel Fluent et ceci pour un écoulement de débit de 200 l/h à l'entrée de la colonne pour une vitesse de rotation des disques de 150 tours/min.

La figure 5.4 montre le contour des vitesses dans la colonne RDC. Le modèle de turbulence utilisé est le modèle k-ε et les calculs ont été exécutés avec un maillage montré dans la figure 5.5 pour un temps de simulation égal à 20 s.

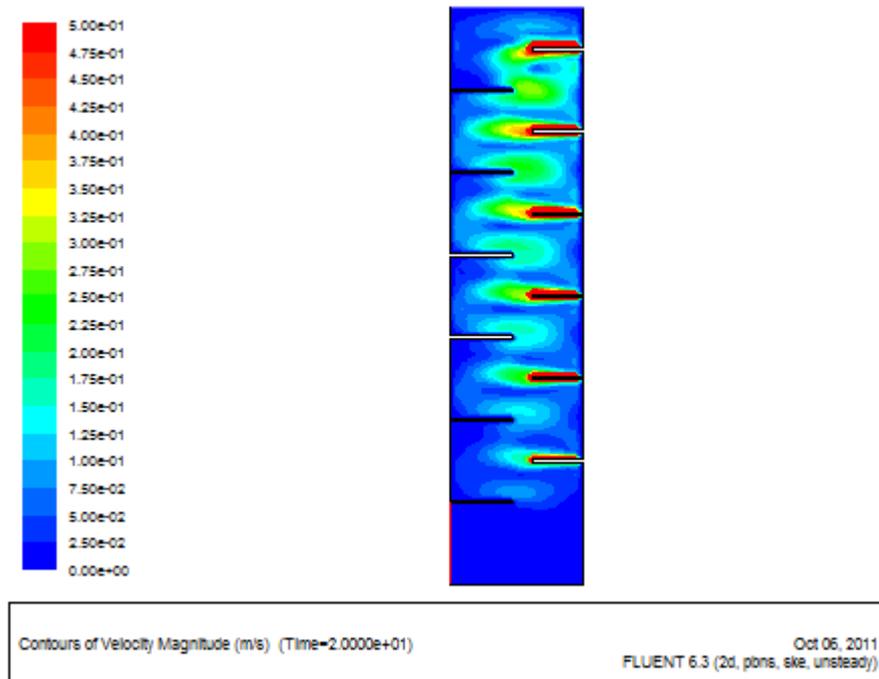


Figure 5.5. Vitesse de la phase continue par Fluent

Pour chaque compartiment de la colonne avec des caractéristiques mentionnées au tableau 3.1, on remarque deux grands vortex, un entre les deux stators consécutifs, et l'autre entre les disques tournants.

Les résultats de la simulation donnent aussi des valeurs de vitesses pour la phase aqueuse comprises entre 0 et 0.5 m/s, lorsque nous comparons la valeur (0.5 m/s) avec la valeur initiale de la vitesse, (0.0032 m/s) nous déduisons que ces deux valeurs sont proches. Nous avons pu constater que la vitesse près du mur est faible, la vitesse dans les coins formés par les stators est presque nulle, et ceci est justifié par la non présence du mouvement de l'eau dans ces lieux.

A partir de cette figure nous constatons que le champ des vitesses en bas de la colonne est faible et ceci peut expliquer que l'entrée de la phase aqueuse est située au sommet de la colonne.

C. Comparaison des résultats

Les figures précédentes présentent les résultats obtenus par les deux logiciels Comsol et Fluent. Nous remarquons que ces deux codes de calculs donnent des résultats proches et satisfaisants pour ce genre d'écoulement.

5.2.1.2. Ecoulement à deux phases (diphase)

Comme pour le cas précédent les deux simulateurs Comsol et Fluent sont utilisés

A. Simulation utilisant le simulateur Comsol

Pour ce deuxième cas, la phase continue est l'eau, entrant avec un débit de 100 l/h et la phase organique est le toluène, entrant avec un débit de 200 l/h et une vitesse de rotation constante de 150 tr/mn.

Les propriétés physiques de l'eau et du toluène sont données dans le tableau 3.2 :

La figure 5.6 représente la vitesse de la phase aqueuse dans une colonne RDC à instant $t = 20$ s.

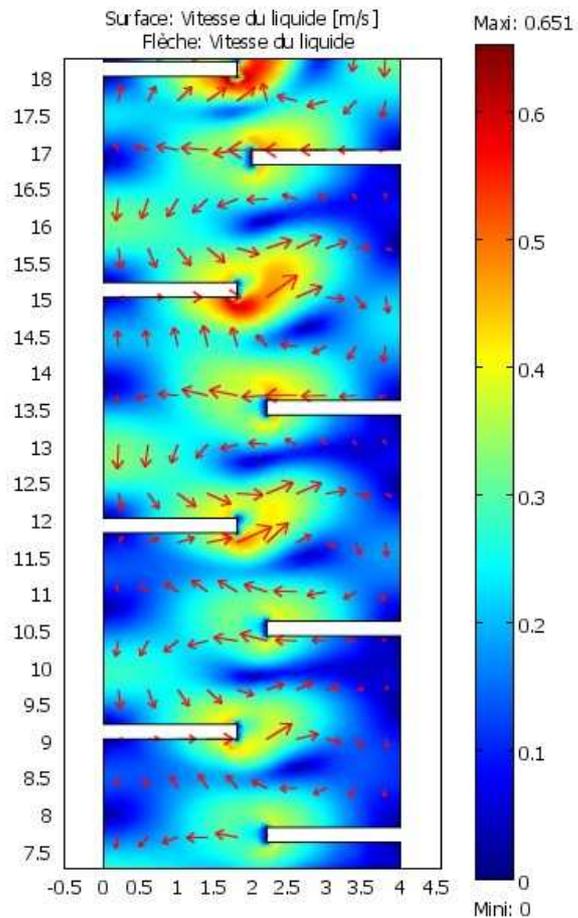


Figure 5.6. Champ de vitesse de la phase continue dans le cas d'écoulement à deux phases à l'instant $t = 20$ s

D'après la figure 5.6, nous remarquons clairement le sens de l'écoulement de la phase aqueuse dans la colonne entre les stators à l'aide du champ de vitesses qui est représenté par des vecteurs suivant des lignes courbées. La vitesse est maximale aux bords des disques avec un

intervalle de vitesse de 0 à 651 m/s. Par contre les vecteurs vitesse sont nuls aux coins et ceci peut être expliqué par l'absence totale du mouvement de l'eau dans ce lieu.

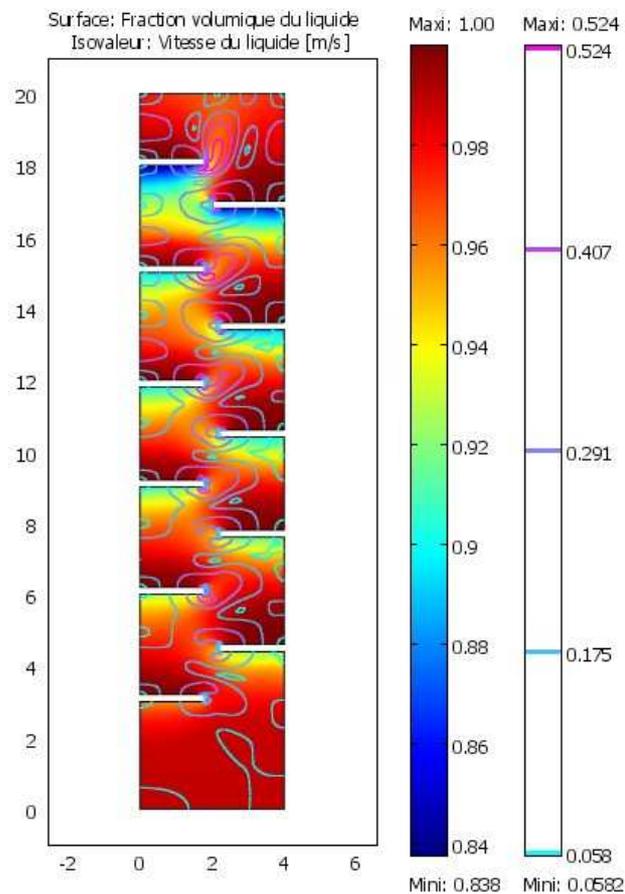


Figure 5.7. Fraction volumique de la phase aqueuse et les lignes de courants

La figure 5.7 représente la fraction volumique de la phase aqueuse et les lignes de courants (vitesse du liquide). Grâce à cette figure, nous pouvons déduire que l'eau occupe presque toute la colonne. La fraction volumique de l'eau sous les disques est insignifiante et la vitesse est faible au même endroit.

Nous remarquons aussi que dans chaque endroit entre deux disques la présence de différents boucles de vecteurs de vitesse, et ceci comme le montre la figure 5.8.

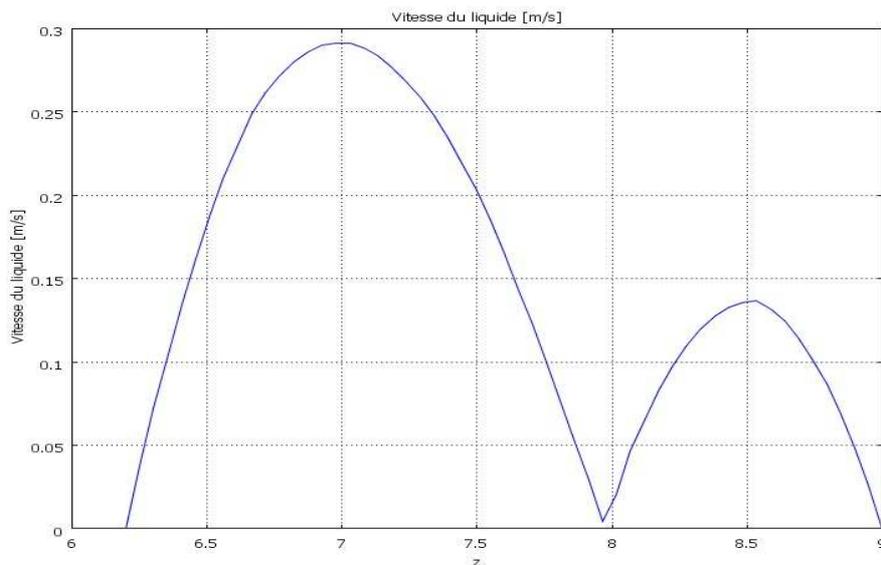


Figure 5.8. Profil de vitesse de la phase continue en fonction de la hauteur au niveau de la limite droite

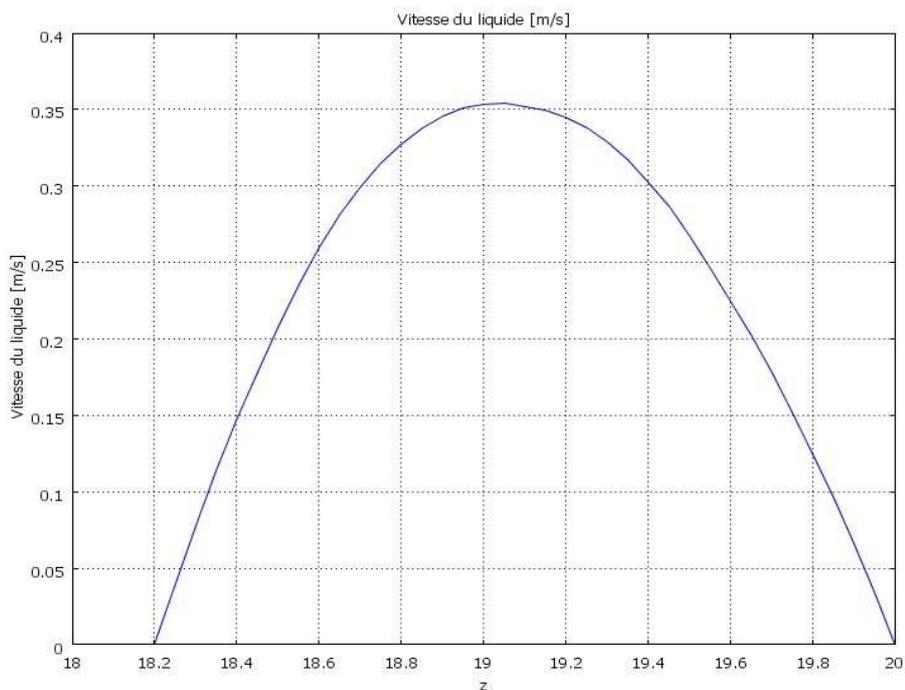


Figure 5.9. Profil de vitesse de la phase continue à la sortie de la colonne

Dans les figures 5.8 et 5.9 nous avons présenté les deux profils de vitesse l'une entre deux disques et l'autre au sommet de la colonne. La première figure montre la présence de boucles circonscrites et la deuxième figure montre le profil à la sortie de la colonne.

Ce cas où la frontière est située au sommet de la colonne, et il n'y a aucune boucle dans le même lieu, donc il y'a un seul intervalle de vitesse, comme le montre dans la figure précédente.

B. Simulation utilisant le simulateur Fluent

Dans ce cas, on utilise l'eau comme phase continue, et le toluène comme phase dispersée.

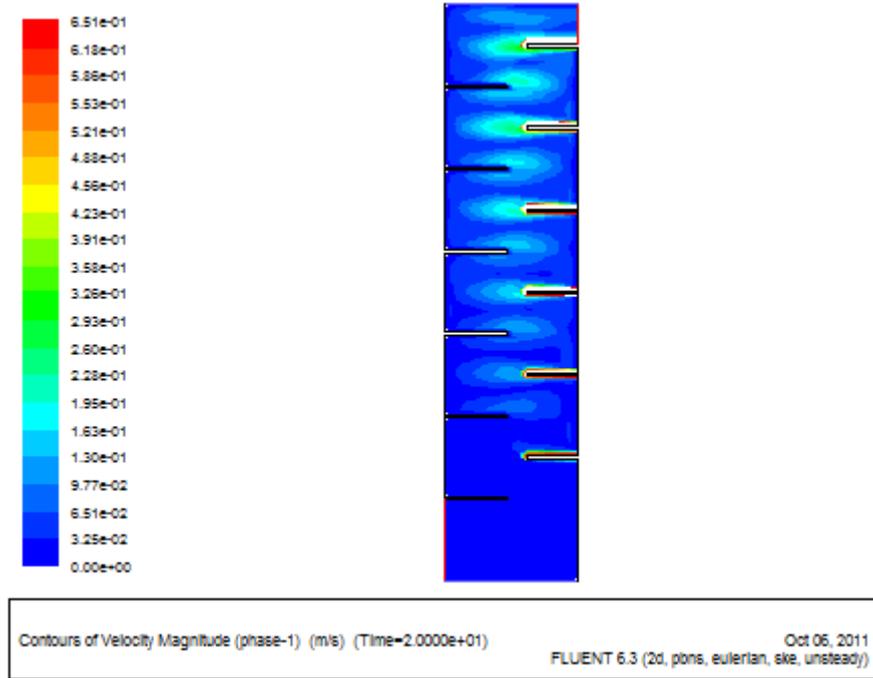


Figure 5.10. Vitesse de la phase continue dans le cas d'écoulement diphasique par Fluent

Cette figure représente le résultat de simulation de l'écoulement diphasique à l'aide de Fluent.

La vitesse de la phase continue à l'entrée de la colonne est de 200 l/h, la vitesse d'entrée de la phase dispersée est de 100 l/h.

L'intervalle de vitesse est de [0, 0.651] m/s, le modèle utilisé est le modèle Eulérien et le modèle de turbulence est le modèle k-ε.

Après une comparaison entre l'écoulement monophasique et diphasique on remarque que la vitesse est atténuée, et le champ de vitesse de la phase continue est sous forme de boucles, à l'extrémité des disques.

C. Comparaison des résultats

La comparaison entre les résultats obtenus par les deux logiciels Comsol et Fluent nous montre que les deux approches numériques de discrétisations telles-qu'éléments finis pour Comsol ou volumes finis pour Fluent donne des résultats très proches et ceci est confirmé par les différents résultats obtenus dans ce chapitre.

5.2.2. Etude du transfert de matière

Dans cette partie nous utilisons, seulement le logiciel Comsol pour faire la simulation du transfert de matière dans les deux colonnes, à savoir, la colonne à bulles et la colonne à disque rotatif (RDC).

5.2.2.1. Colonne à bulles

Cette partie illustre la simulation d'écoulement diphasique dans une colonne à bulles. Le réacteur est rempli avec de l'eau et de bulles de gaz (l'air) qui sont injectées par le bas.

En raison de la flottabilité, la montée des bulles induisant un mouvement de circulation du liquide. En outre, comme la montée des bulles dans l'eau, le gaz se dissout de la phase dispersée (bulles) dans le liquide.

Dans cet exemple, nous commençons d'abord par une simulation en fonction du temps sans turbulence et sans tenir compte de la dissolution du gaz. Ensuite nous considérons la turbulence, à fin d'obtenir le champ de vitesse moyenne temporelle et les fractions volumiques, avec et sans l'introduction de la turbulence.

Il faut noter que la solution laminaire est une estimation initiale pour le problème turbulent, il est beaucoup plus facile pour le solveur de converger dans ce cas.

Enfin nous allons faire la simulation du transfert de matière avec l'utilisation de modèle de bilan de population.

Toutes ces étapes est une validation que le logiciel Comsol peut faire la simulation de l'écoulement à bulles.

La figure 5.11 représente le maillage de la colonne à bulles.

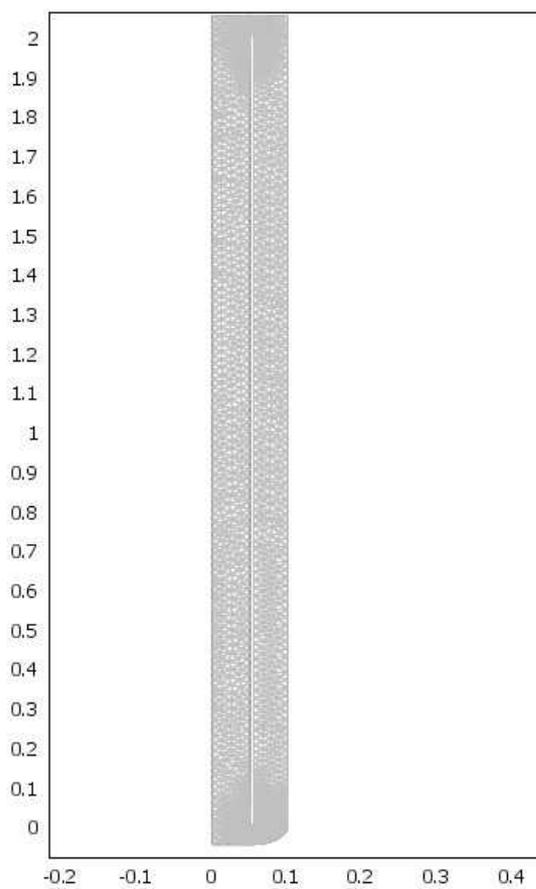


Figure 5.11. Maillage de la colonne à bulles

La figure 5.12 montre la simulation transitoire, sans transfert de masse du gaz au liquide et sans turbulence, à $t = 5s$, et $10s$.

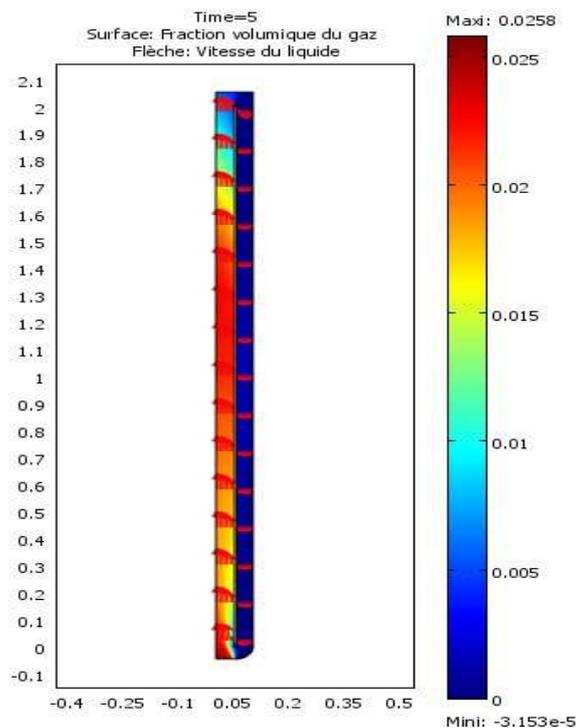


Figure 5.12. Fraction volumique du gaz à t = 5s

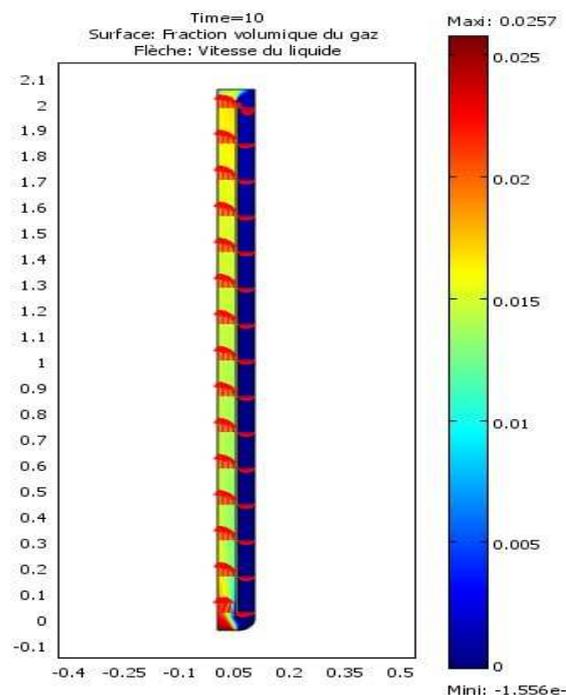


Figure 5.13. Fraction volumique du gaz à t = 10s

D'après la comparaison entre les deux figures 5.12 et 5.13, nous remarquons dans la figure 5.12 que la fraction volumique du gaz augmente en fonction du temps et qu'elle est maximale au centre de la colonne. Ceci, car lorsque au début du processus nous avons injecté le gaz du bas de la colonne, et cette quantité de gaz augmente progressivement le long de la

colonne. Pour la figure 5.13, la fraction volumique est maximale au bas de la colonne, Parce que c'est le lieu où le gaz est introduit. Et Dans le reste de la colonne, les valeurs de la fraction volumique du gaz sont très proches, Parce qu'avec le passage du temps l'écoulement sera homogène (laminaire).

En utilisant un modèle de turbulence, il est possible de calculer la moyenne temporelle de la vitesse. Le modèle de turbulence k- ϵ standard pour l'écoulement monophasique peut également être utilisé pour les écoulements multiphasiques. Dans ce cas, nous pouvons alors négliger le fait que les bulles créent la turbulence lors de leur remontée à travers le liquide. Le modèle de turbulence k- ϵ peut également être modifié de sorte qu'il compte l'effet de turbulence causée par les bulles. Les figures 5.14, 5.15, 5.16 et 5.17 montrent les résultats obtenus pour la viscosité turbulente, la fraction volumique du gaz et la vitesse du liquide, en utilisant le modèle de turbulence k- ϵ avec et sans turbulence causée par les bulles. La viscosité turbulente diffère de manière significative pour les deux modèles, mais le débit par rapport à la vitesse du liquide et la concentration de gaz est similaire pour les deux cas.

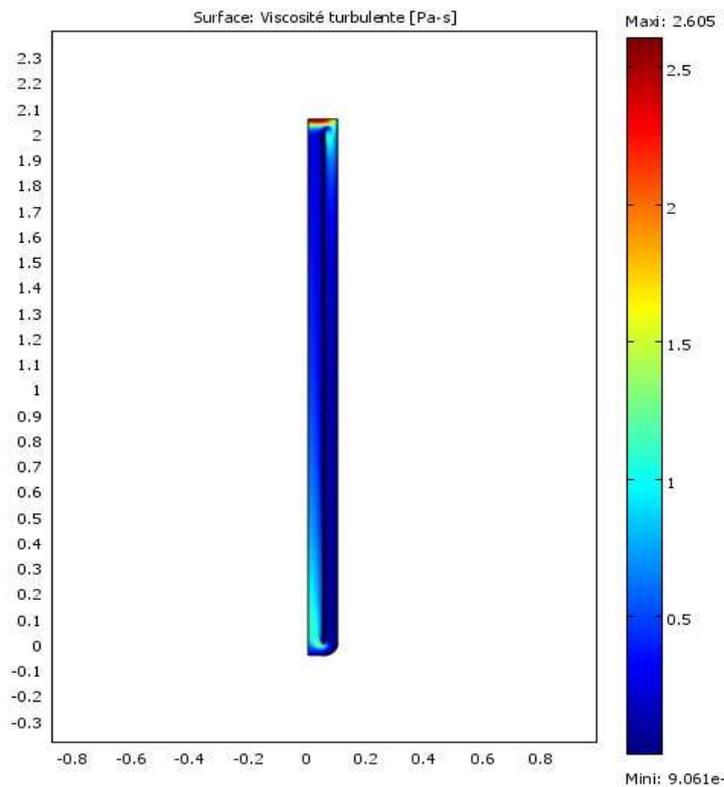


Figure 5.14. Viscosité turbulente sans l'effet de la turbulence causée par les bulles

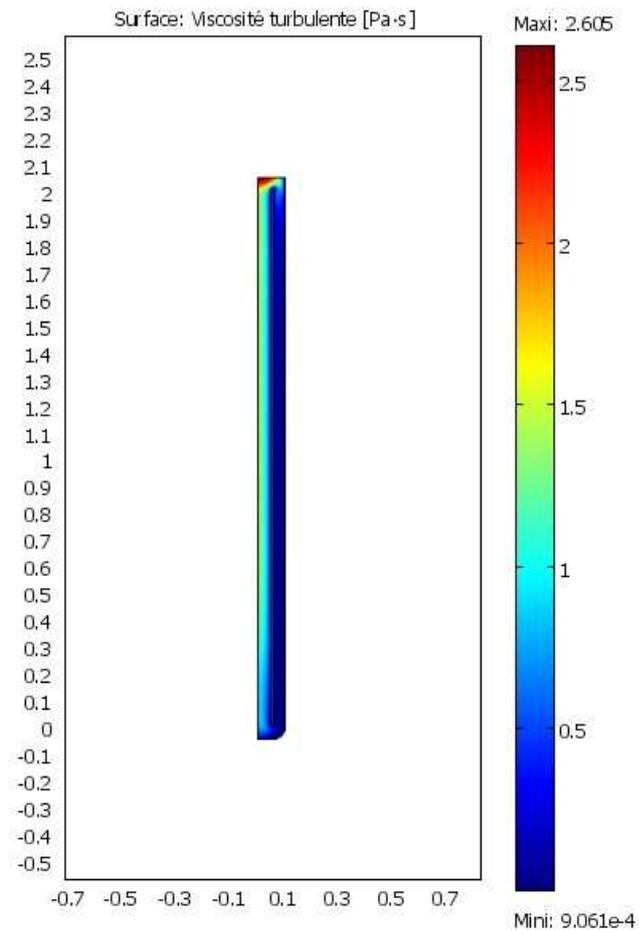


Figure 5.15. Viscosité turbulente quand la turbulence est induite par les bulles

D'après cette figure, nous remarquons que la viscosité turbulente est très faible, est logique car le gaz occupe la colonne.

Les figures 5.16 et 5.17 représentent la fraction volumique du gaz (surface de colonne) et la vitesse du liquide (flèche) dans les deux cas.

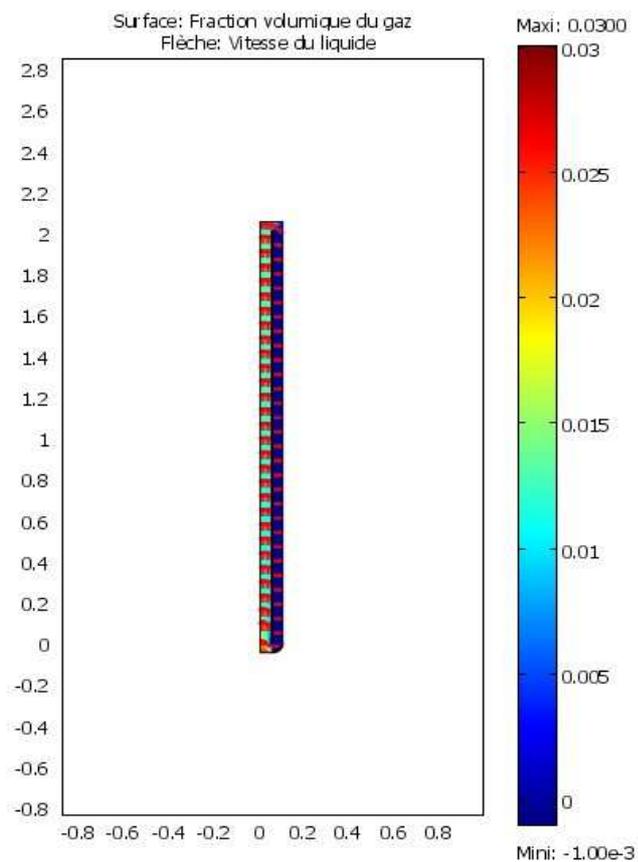


Figure 5.16. Fraction volumique du gaz et vitesse du liquide sans l'effet de la turbulence causée par les bulles

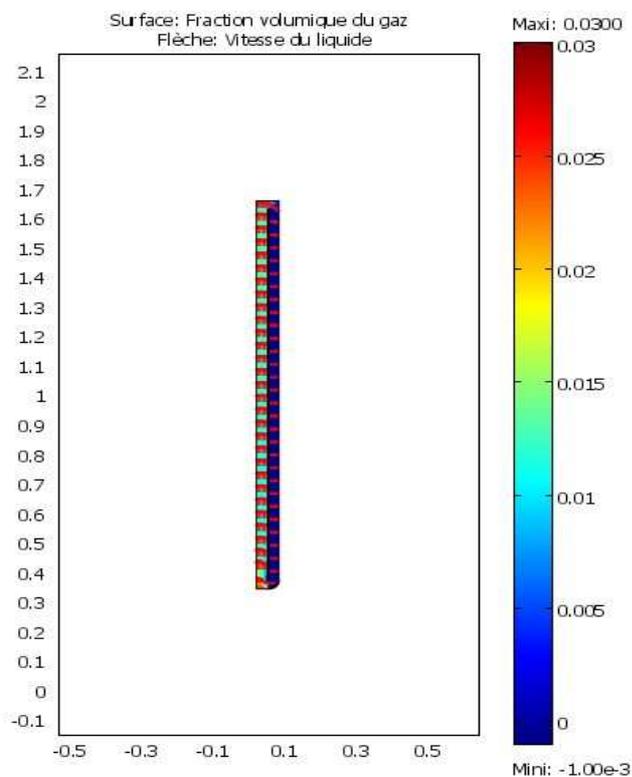


Figure 5.17. Fraction volumique du gaz et vitesse du liquide quand la turbulence est induite par les bulles

Si le gaz se dissout dans le liquide, la fraction volumique du gaz diminue, qui figures 5.18 et 5.19 montrent clairement. Enfin, les figures 5.18, 5.19 et 5.20 montrent des instantanés de la concentration de gaz dissous à l'instant, $t = 10$ s et 20 s. Parce que le liquide circule dans le réacteur, les espèces dissoutes sont distribuées rapidement dans l'ensemble du réacteur.

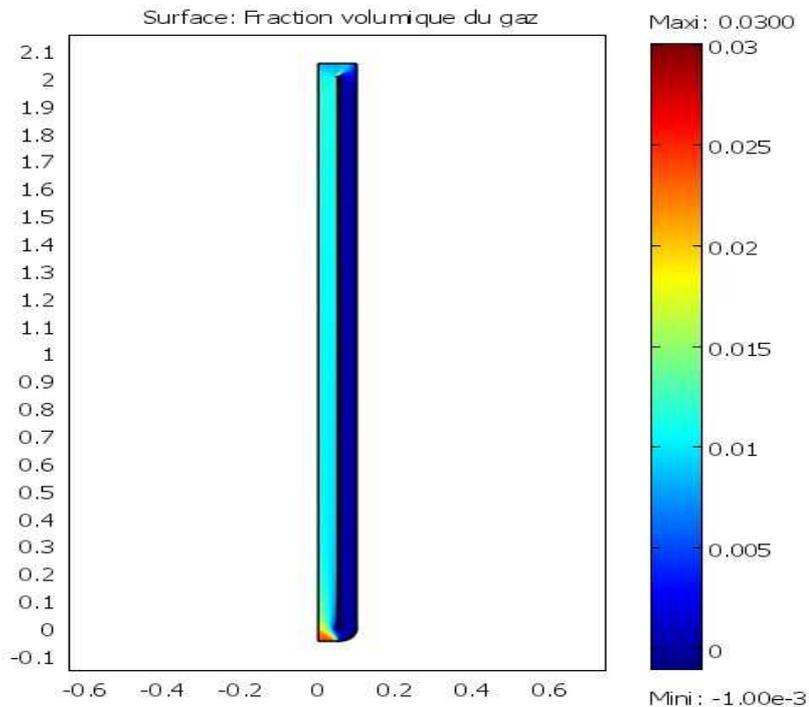


Figure 5.18. Fraction volumique du gaz à l'instant $t = 10$ s

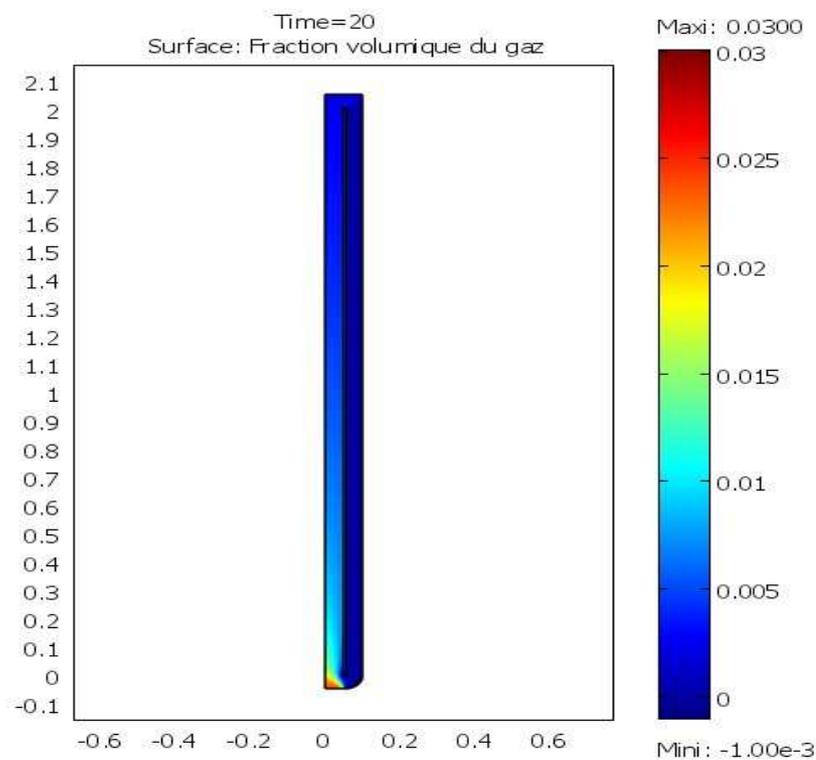


Figure 5.19. Fraction volumique du gaz à l'instant $t = 20$ s

D'après les figures 5.18 et 5.19, nous remarquons que la fraction volumique du gaz décroît et ceci peut s'expliquer par la dissolution du gaz dans le liquide.

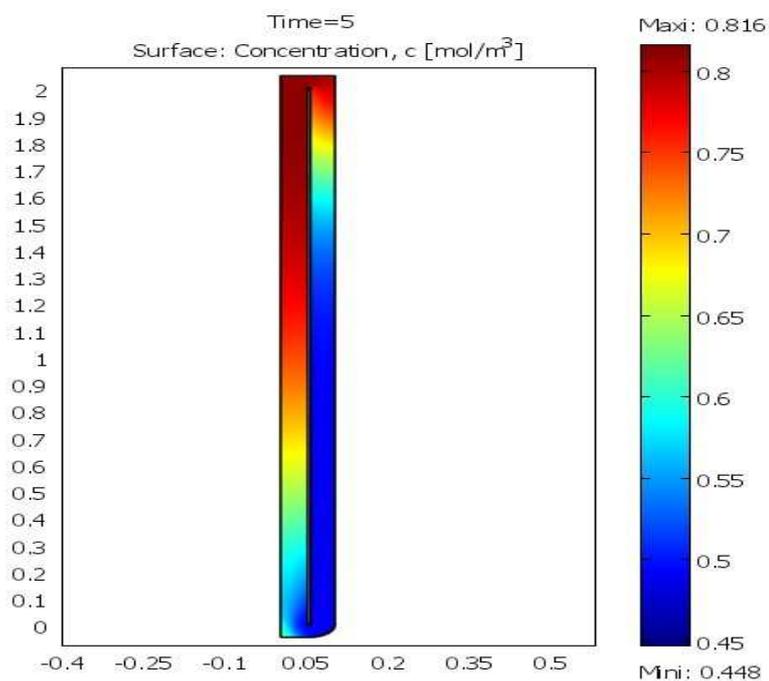


Figure 5.20. Concentration du gaz dans la colonne à bulles à l'instant $t = 5s$

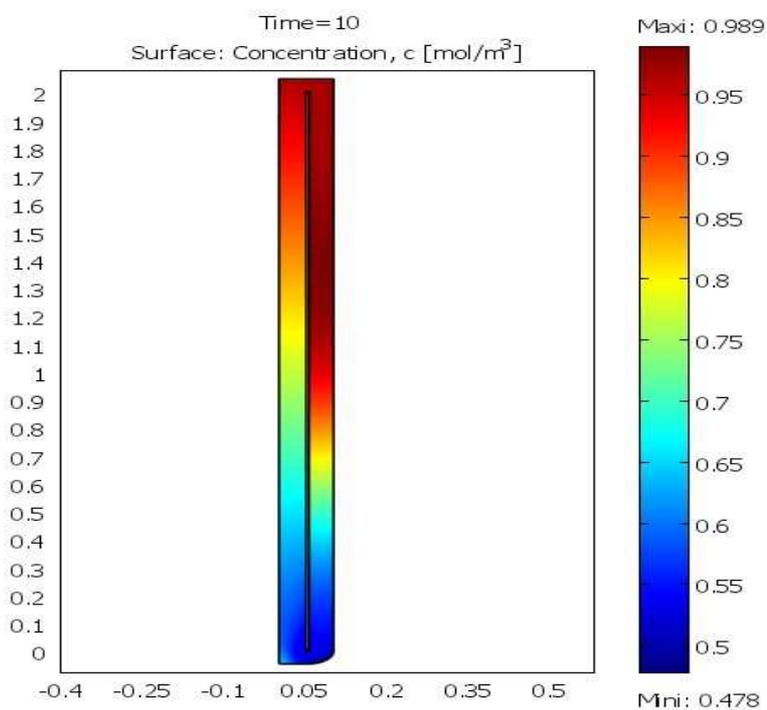


Figure 5.21. Concentration du gaz dans la colonne à bulles à l'instant $t = 10s$

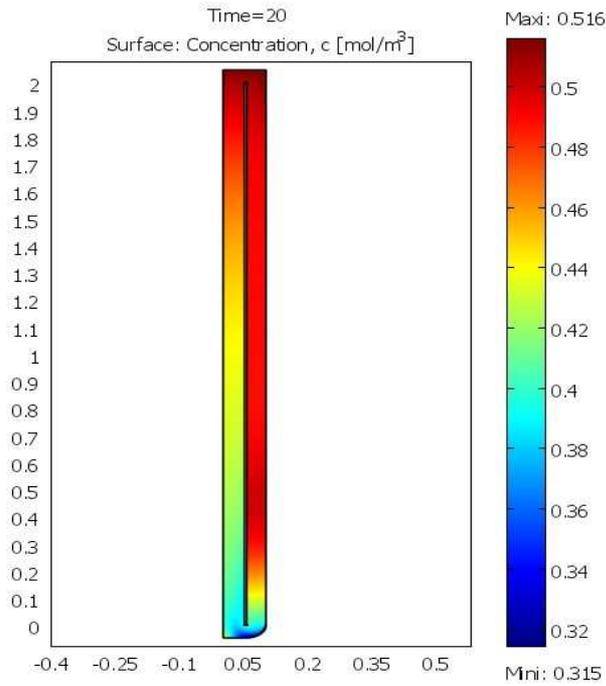


Figure 5.22. Concentration du gaz dans la colonne à bulles à l'instant $t = 20s$

Donc cette partie est une validation, d'une part, pour le modèle d'écoulement des bulles, d'autre part pour la simulation de transfert de matière. Nous utilisons la notion d'aire interfaciale, qui est définie en fonction de n (densité en nombre de bulles), et donc nous introduisons l'équation de bilan de population.

Si on utilise le modèle de bilan de population dans un réacteur à bulles, nous pouvons utiliser la théorie de double film pour expliquer la dissolution de la phase dispersée. L'application du modèle calcule le taux de transfert de masse selon:

$$m_{gl} = k \left(\frac{P + P_{ref}}{H} - c \right) \cdot M \cdot a \quad (5.1)$$

$$a = (4n\pi)^{1/3} (3\phi_g)^{2/3} \quad (5.2)$$

L'aire interraciale dépend de la fraction de volume de la phase dispersée mais également du nombre de gouttes ou bulles par volume n ($1/m^3$). Si nous choisissons le modèle du double film suggéré par Lewis et Whitman, le mode d'application résout automatiquement et également pour n . Par conséquent, nous devons introduire le modèle de bilan de population, dans le cas d'un réacteur à bulles, nous avons lié entre les modèles (PDE, écoulement avec bulles et convection et diffusion). Le résultat est présenté dans la figure 5.23.

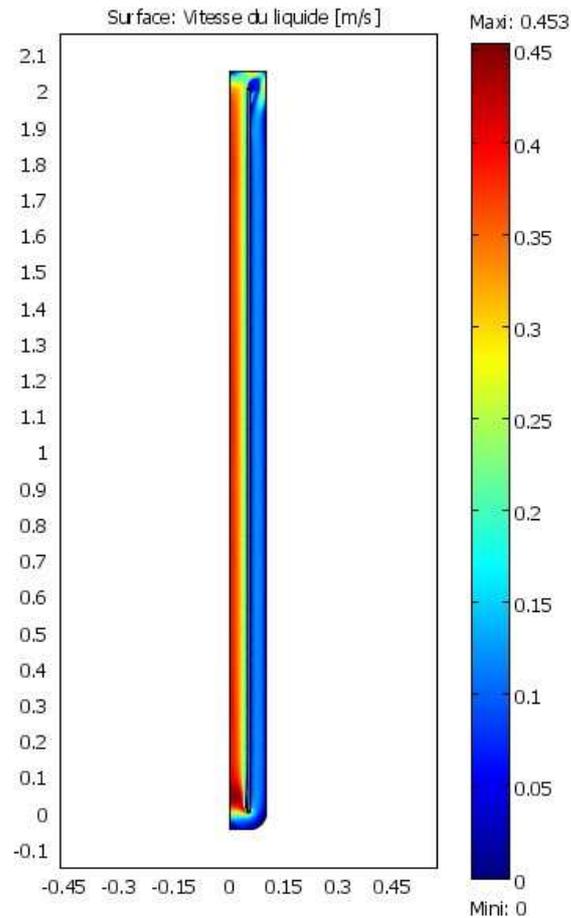


Figure 5.23. Vitesse de la phase liquide avec l'utilisation du modèle de bilan de population

D'après la figure 5.23, on constate que la vitesse de la phase continue est maximale dans le coté gauche pré du mur où on remarque la circulation de cette phase, en parallèle et entre ce dernier et l'axe de symétrie la vitesse est moyenne et dans le coté droit est faible.

5.2.2.2. Colonne RDC

Pour ce cas nous ajoutons le modèle de transfert de masse à l'écoulement diphasique à fin d'obtenir la simulation pour le transfert de matière.

La figure 5.24 présente la concentration de la vapeur qui est dissoute dans la phase continue.

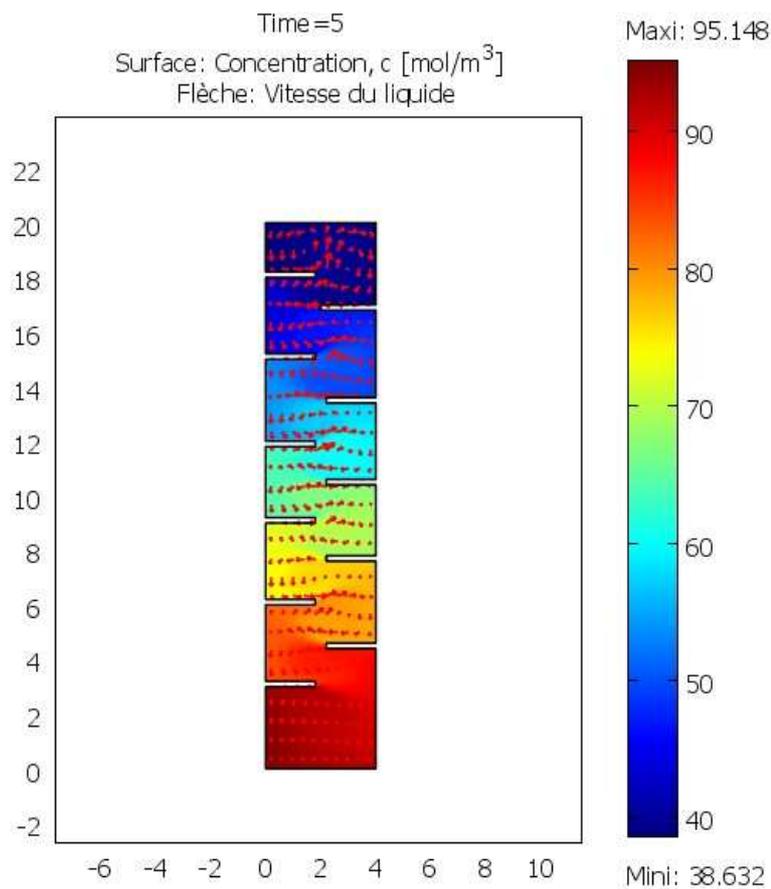


Figure 5.24. Concentration en toluène dans la phase aqueuse

D'après la figure 5.24, nous remarquons que la concentration en toluène dans la phase aqueuse est croissante du bas vers le haut.

Pour l'introduction du modèle de bilan de population des gouttes, on a fait le couplage entre les cas où l'écoulement est diphasique et l'équation de bilan de population

Dans ce travail, nous choisissons le cas d'un contacteur discontinu, avec les conditions $\beta(v, v') = 2/v'$, $\Gamma(v) = v$ et la condition initiale $n_0(v, t) = e^{-v}$.

La figure suivante représente la vitesse de la phase continue après le couplage.

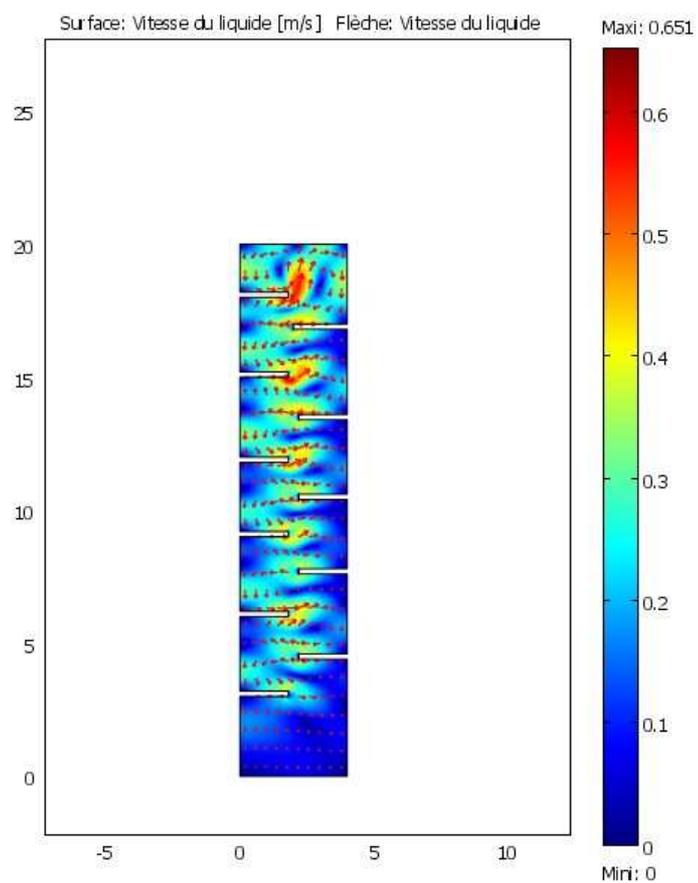
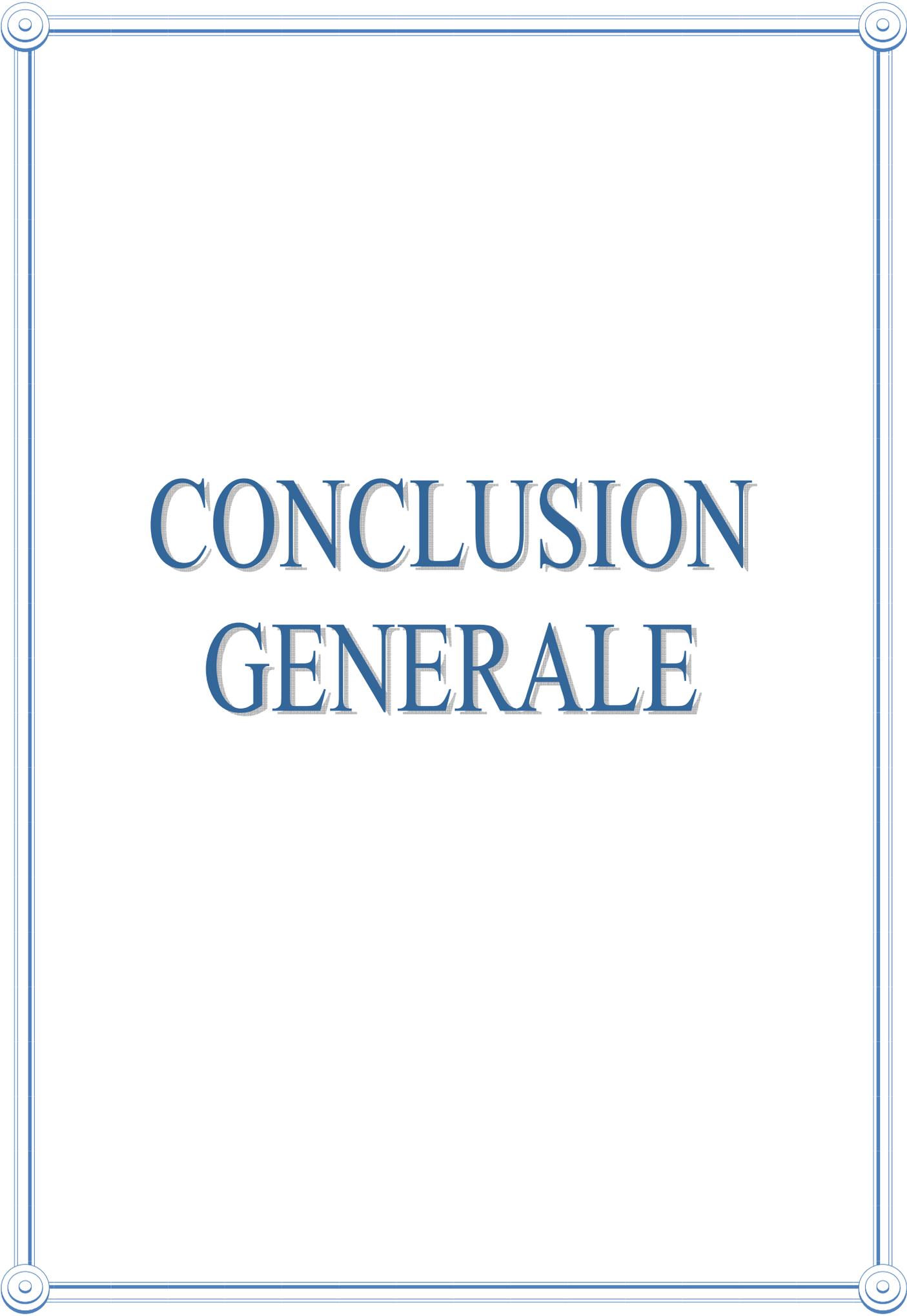


Figure 5.25. Champ de vitesse de la phase continue en présence de la phase dispersée



CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Au terme de ce travail, on peut dire que l'objectif initial, qui était de développer un nouveau code de calcul étendu au transfert de matière pour la simulation d'un contacteur diphasique a été atteint.

Sur le plan de la modélisation de l'hydrodynamique et le transfert de matière dans le contacteur diphasique RDC, l'accent a été mis sur l'écriture d'un modèle capable de prendre en compte l'ensemble des phénomènes physiques. Ainsi, le modèle intègre un bilan de population de gouttes. Cette modélisation a besoin de la connaissance de la dispersion axiale, de la vitesse de glissement des phases pour une certaine géométrie de colonne et des phénomènes d'interactions des gouttes, qui est la rupture et la coalescence.

Sur le plan numérique, cette recherche a permis d'apporter une solution numérique au problème posé par la résolution des équations intégral-différentielles correspondant au modèle. Les résultats de simulation déterminent l'influence des conditions opératoires (débits d'alimentation, intensité d'agitation) sur l'hydrodynamique et le transfert de matière.

Sur le même plan, la méthode de décomposition d'Adomian est utilisée pour résoudre l'équation de bilan de population incorporant la croissance, la rupture et la coalescence dans les réacteurs discontinu (batch) et continu.

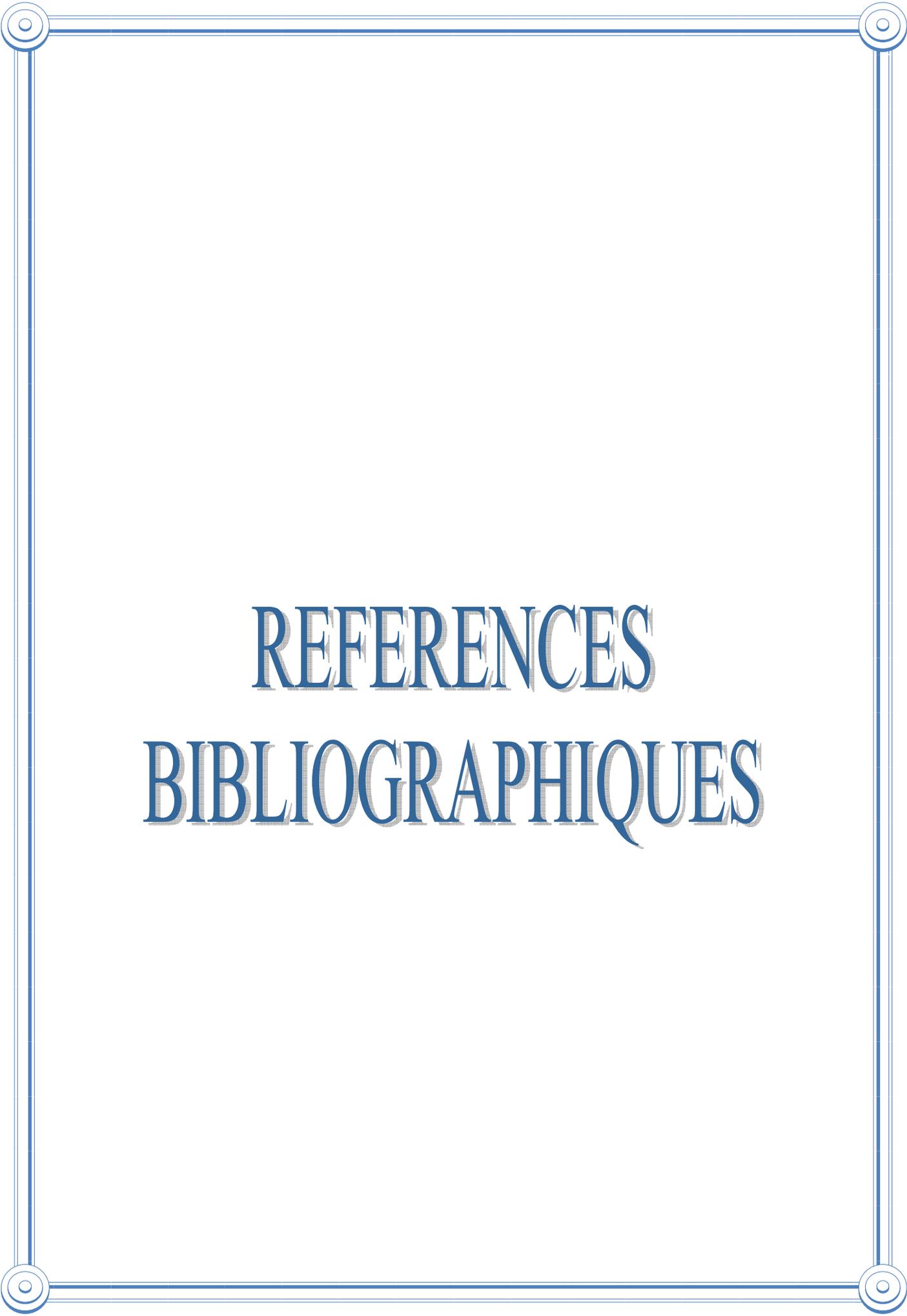
Sur le plan de l'utilisation des logiciels, deux simulateurs Comsol et Fluent sont utilisés pour faire la simulation des contacteurs diphasique tels que la colonne à disque rotatif (RDC) et la colonne à bulles.

Actuellement, ces outils pour la simulation permettent une interprétation et une compréhension des divers phénomènes implicites dans les opérations des colonnes d'extractions liquide-liquide et des colonnes à bulles essentiellement pour le calcul de dimensionnements de ces appareils.

Dans l'avenir, outre les aspects relatifs à la validation de notre modèle, on peut désormais envisager d'y apporter des améliorations:

- sur le plan de la modélisation, il est nécessaire d'inclure la possibilité de transfert de matière multi constituants et de réactions chimiques entre constituants.

- sur le plan numérique, il est indispensable de tester d'autres méthodes de résolution numérique dont le but principale sera porté sur la fiabilisation de la convergence et sur la diminution du temps calcul.



REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Hulbert, H., & Katz, S. (1964). Some problems in particle technology. A statistical mechanical formulation. *Chem. Eng. Sci.*, 19, 555-574.
- [2] Valentas, K. J., & Amundson, A. R. (1966). Breakage and coalescence in dispersed phase systems. *Ind.Eng. Chem. Fundam.*, 5, 533-542.
- [3] Motz, S., Mitrovic, A., & Gilles, E.-D. (2002). Comparison of numerical methods for the simulation of dispersed phase systems. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 4329-4344.
- [4] Puel, F., Fevotte, G., & Klein, J. P. (2003). Simulation and analysis of industrial crystallization processes through multidimensional population balance equations. Part 1: a resolution algorithm based on the method of classes. *Chem. Eng. Sci.*, 58, 3715-3727.
- [5] Campos, F. B., & Lage, P. L. C. (2003). A numerical method for solving the transient multidimensional population balance equation using Euler-Lagrange formulation. *Chem. Eng. Sci.*, 58, 2725-2744.
- [6] Modes, G., Bart, H.-J., Rodrigue-Perancho, D., & Broder, D. (1999). Simulation of the fluid dynamics of solvent extraction columns from single droplet parameters. *Chem. Eng. Tech.*, 22, 231-236.
- [7] Gerstlauer, A., (1999): Herleitung und Reduktion populationsdynamischer Modelle am Beispiel der Flüssig-Flüssig-Extraktion. *Fortschritt-Berichte VDI Reihe*, 3, 612.

- [8] Coualaloglou, C. A. , & Tavlarides, L. L. (1977). Description of interaction processes in agitated liquidliquid dispersions. *Chem. Eng. Sci.*, 32, 1289-1297.
- [9] Chatzi, E. , & Lee, J. M. (1987). Analysis of interactions for liquid-liquid dispersions in agitated vessels. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 26, 2263-2267.
- [10] Alatiqi, I., Aly, G., Mjalli, F., & Mumford, C. J. (1995). Mathematical modeling and steady-state analysis of a Scheibel extraction column. *Can. J. Chem. Eng.*, 73, 523-533.
- [11] Weinstein, O., Semiat, R., & Lewin, D. R. (1998). Modeling, simulation and control of liquid-liquid extraction columns. *Chem. Eng. Sci.*, 53, 325-339.
- [12] Al Khani, S. D., Gourdon, C., & Casamatta, G. (1988). Simulation of hydrodynamics and mass transfer of disks and rings pulsed column. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 27, 329-333.
- [13] Tsouris, C., Kirou, V. I., & Tavlarides, L. L. (1994). Drop size distribution and hold-up profiles in a multistage extraction column. *AIChE J.*, 40, 407-418.
- [14] Alopaeus, V., Koskinen, J., Keskinen, K. I., & Majander, J. (2002). Simulation of the population balances for liquid-liquid systems in a no ideal stirred tank: Part 2- parameter fitting and the use of multiblockmodel for dense dispersions. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 1815-1825.
- [15] Kentish, S. E., Stevens, G. W., & Pratt, H. R. C. (1998). Estimation of coalescence and breakage rate constants within a Kühni column. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 37, 1099-1106.
- [16] Steiner, L., Bamelli, M., & Hartland, S. (1999). Simulation of hydrodynamic performance of stirred extraction column. *AIChE J.*, 45, 257-267.
- [17] Casamatta, G., & Vogelpohl, A. (1985). Modelling of fluid dynamics and mass transfer in extraction columns. *Ger. Chem. Eng.*, 8, 96-103.

- [18] Al Khani, S. D., Gourdon, C., & Casamatta, G. (1989). Dynamic and steady-state simulation of hydrodynamics and mass transfer in liquid-liquid extraction column. *Chem. Eng. Sci.*, 44, 1295-1305.
- [19] Cabassud, M., Gourdon, C., & Casamatta, G. (1990). Single drop break-up in a Kühni column. *Chem.Engng. J.*, 44, 27-41.
- [20] Mohanty, S. (2000). Modeling of liquid-liquid extraction column: A review. *Rev. Chem. Eng.*, 16, 199-248.
- [21] Cauwenberg, V., Degreve, J., & Slater, M. J. (1997). The interaction of solute transfer, contaminants and drop break-up in rotating disc contactors: Part I. Correlation of drop breakage probabilities. *Can. J. Chem. Eng.*, 75, 1046-1055.
- [22] Colella, D., Vinci, D., Bagatin, R., & Masi, M. (1999). A study on coalescence and breakage mechanisms in three different bubble columns. *Chem. Eng. Sci.*, 54, 4767-4777.
- [23] Modes, G., (2000): Grundsatzliche Studie zur Populationsdynamik einer Extraktionskolonne auf Basis von Einzeltropfenuntersuchungen, Dissertation, Shaker Verlag.
- [24] Biggs, C. A., & Lant, P. A. (2002). Modelling activated sludge flocculation using population balances. *Powder Tech.*, 14, 201-211.
- [25] Bart, H.-J. (2003). Reactive extraction in stirred columns: A review. *Chem. Eng. Tech.*, 26, 723-731.
- [26] Desnoyer, C., Masbernat, O., & Gourdon, C. (2003). Experimental study of drop size distribution at high phase ratio in liquid-liquid dispersions. *Chem. Eng. Sci.*, 58, 1353-1363.
- [27] Mignard, D., Amin, L., & Ni, X.-D. (2003). Population balance modelling of droplets in an oscillatory baffled reactor- using direct measurements of breakage rates constants. *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 78, 364-369.

- [28] Schmidt, S., Simon, M., & Bart, H.-J. (2003). Tropfenpopulationsmodellierung-Einfluss von Stoffsystem und technischen Geometrien. *Chemie Ingenieur Technik*, 75, 62-67.
- [29] Gelbard, F. , & Seinfeld, J. H. (1978). Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems. *J. Comput. Phys.*, 28, 357-375.
- [30] Gelbard, F., Tambour, Y., & Seinfeld, J. H. (1980). Sectional representation of simulating aerosol dynamics. *J. Colloid & Interface Sci.*, 76, 541-556.
- [31] Sastry, K. V. S. , & Gaschignard, P. (1981). Discretization procedure for the coalescence equation of particulate process. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 20, 355-361.
- [32] Guimaraes, M. M., Cruz-Pinto, J. J. C., Regueiras, P. F. R., & Madureira, C. M. N. (1992). The simulation of interacting liquid-liquid dispersions- A new algorithm and its potentiality. Sekine T.(Ed.), *Solvent extraction 1990, Part B*, p. 1241-1246, Elsevier, Amsterdam .
- [33] Hounslow, M. J. (1990). A discretized population balance for continuous systems at a steady state. *AIChE J.*, 36, 106-116.
- [34] Kronberger, T., Ortner, A., Zulehner, W., & Bart, H.-J. (1994) Numerical determination of drop size distribution in extraction columns. Fasano A. (Ed.), *7th European Conference on Mathematics in Industry*, p. 247-254, B. G. Teubner Stuttgart.
- [35] Hill, P. J. , & Ng, K. M. (1995). New discretization procedure for the breakage equation. *AIChE J.*, 41, 1204-1216.
- [36] Kronberger, T., (1995): Numerische Simulation von Tropfenpopulationen in Extraktionskolonnen, Dissertation, Johannes Kepler Universitat Linz, Linz 1995.
- [37] Ribeiro, L. M., Regueiras, P. F. R., Guimaraes, M. M. L., Madureira, C. M. C., & Cruz-Pintu, J. J. C.(1995). The dynamic behavior of liquid-liquid agitated dispersions-I. The hydrodynamics. *Comput.Chem. Eng.*, 19, 333-343.

- [38] Zimmermann, A., Joulia, X., Gourdon, C., & Gorak, A. (1995). Maxwell-Stefan approach in extractor design. *Chem. Eng. J.*, 57, 229-236.
- [39] Hill, P. J., & Ng, K. M. (1996). New discretization procedure for the agglomeration equation. *AIChE J.*, 42, 727-741.
- [40] Kumar, S., & Ramkrishna, D. (1996a). On the solution of population balance equations by discretization-I. A fixed-pivot technique. *Chem. Eng. Sci.*, 51, 1311-1332.
- [41] Kumar, S., & Ramkrishna, D. (1996b). On the solution of population balance equations by discretization-II. A moving pivot technique. *Chem. Eng. Sci.*, 51, 1333-1342.
- [42] van Peborgh Gooch, J. R. , & Hounslow, M. J. (1996). Monte Carlo simulation of size-enlargement mechanics in crystallization. *AIChE J.*, 42, 1864-1874.
- [43] Zamponi, G., Stichlmair, J., Gerstlauer, A., & Gilles, E.-D. (1996). Simulation of the transient behaviour of a stirred liquid/liquid extraction column. *Comput. Chem. Eng.*, 20, S963-S968.
- [44] Kumar, S., & Ramkrishna, D. (1997). On the solution of population balance equations by discretization-III. Nucleation, growth and aggregation of particles. *Chem. Eng. Sci.*, 52, 4659-4679.
- [45] Hill, P. J. , & Ng, K. M. (1997). Simulation of solids processes accounting for particle -size distribution. *AIChE J.*, 43, 715-726.
- [46] Liou, J.-J., Sreenc, F., & Fredrickson, A. G. (1997). Solutions of population balance models based on a successive generations approach. *Chem. Eng. Sci.*, 52, 1529-1540.
- [47] Ribeiro, L. M., Regueiras, P. F. R., Guimaraes, M. M. L., Madureira, C. M. N., & Cruz-Pinto, J. J. C. (1997). The dynamic behavior of liquid-liquid agitated dispersions II. Coupled hydrodynamics and mass transfer. *Comput. Chem. Eng.*, 21, 543-558.
- [48] Song, M., Steif, A., & Weinspach, P.-M. (1997). A very effective method to solve the population balance equation with particle size growth. *Comput. Chem. Eng.*, 52, 3493-3498.

- [49] Nicmanis, M., & Hounslow, M. J. (1998). Finite-element methods for steady-state population balance equations. *AIChE J.*, 44, 2258-2272.
- [50] Toutain, J., Lann, J. M. L., Gourdon, C., & Joulia, X. (1998). Maxwell-Stefan approach coupled drop population model for the dynamic simulation of liquid-liquid extraction pulsed column. *Comput. Chem.Engng.*, 22, S379-S386.
- [51] Vanni, M. (1999). Discretization procedure for the breakage equation. *AIChE J.*, 45, 916-919.
- [52] Bennett, M. K. , & Rohani, S. (2001). Solution of population balance equations with a new combined Lax-Wendroff/ Crank-Nicholson method. *Chem. Eng. Sci.*, 56, 6623-6633.
- [53] Liu, Y., & Cameron, T. (2001). A new wavelet-based method for the solution of the population balance equation. *Chem. Eng. Sci.*, 56, 5283-5294.
- [54] Vanni, M. (2000). Approximate population balances equations for aggregation-breakage processes. *J.Coll. Int. Sci.*, 221, 143-160.
- [55] Lee, G., Yoon, E. S., Lim, Y. I., Le Lann, J. M., Meyer, X. M., & Joulia, X. (2001). Adaptive mesh method for the simulation of crystallization processes including agglomeration and breakage: the potassium sulfate system. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40, 6228-6235.
- [56] Wulkow, M., Gerstlauer, A., & Nieken, U. (2001). Modeling and simulation of crystallization process using parsival. *Chem. Eng. Sci.*, 56, 2575-2588.
- [57] Diemer, R. B. , & Olson, J. H. (2002a). A moment methodology for coagulation and breakage problems: Part 1- analytical solution of the steady-state population balance. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 2193-2209.
- [58] Diemer, R. B., & Olson, J. H. (2002b). A moment methodology for the coagulation and breakage problems: Part 2-moment models and distribution reconstruction. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 2211-2228.

- [59] Lim, Y. I., Le Lann, J. M., Meyer, X. M., Joulia, X., Lee, G., & Yoon, E. S. (2002). On the solution of population balance equations (PBE) with accurate front tracking methods in practical crystallization processes. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 3715-3732.
- [60] Mahoney, A. W., & Ramkrishna, D. (2002). Efficient solution of population balances equations with discontinuities by finite elements. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 1107-1119.
- [61] Motz, S., Mitrovic, A., & Gilles, E.-D. (2002). Comparison of numerical methods for the simulation of dispersed phase systems. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 4329-4344.
- [62] Verkoeyen, D., Pauw, G. A., Meesters, G. M. H., & Scarlett, B. (2002). Population balances for particulate processes- a volume approach. *Chem. Eng. Sci.*, 57, 2287-2303.
- [63] Attarakih, M. M., Bart, H. J., & Faqir, N. M. (2003a). Optimal moving and fixed grids for the solution of discretized population balances in batch and continuous systems: droplet breakage. *Chem. Eng. Sci.*, 58, 1251-1269.
- [64] Attarakih, M. M., Bart, H.-J., & Faqir, N. M. (2003b). Solution of the population balance equation for liquid-liquid extraction columns using a generalized fixed-pivot and central difference schemes. in *European Symposium on Computer Aided Process Engineering*. Kraslawski, A. & Turunen, I. (Eds). Elsevier, Amsterdam 2003, 13, 557.
- [65] Kraslawski, A. & Turunen, I. (Ed.), *European symposium on computer aided process engineering-13, Computer-aided chemical engineering 14* (pp. 557-562). Elsevier, Amsterdam.
- [66] Campos, F. B. , & Lage, P. L. C. (2003). A numerical method for solving the transient multidimensional population balance equation using Euler-Lagrange formulation. *Chem. Eng. Sci.*, 58, 2725-2744.
- [67] Goodson, M. , & Kraft, M., (2003): Stochastic simulation of coalescence and breakage processes: a practical study. Preprint No. 9, pp. 1-30. Cambridge center for computational chemical engineering, Cambridge.

- [68] Ribeiro, L. M., Regueiras, P. F. R., Guimaraes, M. M. L., Madureira, C. M. C., & Cruz-Pintu, J. J. C. (1995). The dynamic behavior of liquid-liquid agitated dispersions-I. The hydrodynamics. *Comput.Chem. Eng.*, 19, 333-343.
- [69] Gerstlauer, A., (1999): Herleitung und Reduktion populationsdynamischer Modelle am Beispiel der Fluessig-Fluessig-Extraktion. *Fortschritt-Berichte VDI Reihe*, 3, 612.
- [70] Randolph, A. D. , & Larson, M. A. (1988). *Theory of particulate process*. 2nd Ed. San Diego: Academic Press.
- [71] Ramkrishna, D. (2000). *Population balances: Theory and applications to particulate systems in engineering*. San Diego: Academic Press.
- [72] Ramkrishna, D. (1985). The status of population balances. *Rev. Chem. Eng.*, 5, 49-95.
- [73] Kostoglou, M. , & Karabelas, A. J. (1994). Evaluation of zero order methods for simulating particle coagulation. *J. Colloid Interface Sci.*, 163, 420-431.
- [74] Hasseine, A, (2007). modélisation des colonnes d'extraction liquide-liquide a base de la résolution du bilan de population. Incorporation des phénomènes de rupture et de coalescence des gouttes , Thèse de Docteur ès Sciences Université Mentouri Constantine, Algérie.
- [75] Miyauchi T., Vermeulen T., « Longitudinal dispersion in two-phase continuous-flow operations », *Ind.Eng.Chem.Fund.* Vol.2; pp.113, (1963).
- [76] Jinghai Li et Mooson Kwauk, Exploring complex systems in chemical engineering - the multi-scale methodology. *Chemical Engineering Science*, 58:521–535, 2003.
- [77] P. Chen, J. Sanyal et M.P. Dudukovic : Numerical simulation of bubble columns flows : effect of different break-up and coalescence closures. *Chemical Engineering Science*, 60:1085–1101, 2005.

- [78] R.D. Vas Bhat, J.A.M. Kuipers et G.F. Versteeg : Mass transfer with complex chemical reactions in gas-liquid systems : two-step reversible reactions with unit stoichiometric and kinetics orders. *Chemical Engineering Journal*, 76:127–152, 2000.
- [79] A.H.G. Cents, D.W.F. Brillman et G.F. Versteeg : CO₂ absorption in carbonate/ bicarbonate solutions : The danckwerts-criterion revisited. *Chemical Engineering Science*, 60:5830–5835, 2005.
- [80] B. Haut et T. Cartage, Mathematical modelling of gas-liquid mass transfer rate in bubble columns operated in the heterogeneous regime. *Chemical Engineering Science*, 60:5937–5944, 2005.
- [81] H. Luo et H.F. Svendsen : Theoretical model for drop and bubble breakup in turbulent dispersions. *A.I.Ch.E. Journal*, 42:1225–1233, 1996.
- [82] M. van Sint Annaland, N.G. Deen et J.A.M. Kuipers , Numerical simulation of gas-bubble behaviour using a three-dimensional volume of fluid method. *Chemical Engineering Science*, 60:2999–3011, 2005.
- [83] M. Millies et D. Mewes, Interfacial area density in bubbly flows. *Chemical Engineering and Processing*, 38:307–319, 1999.
- [84] E. León-Becerril et A. Liné : Stability analysis of a bubble column. *Chemical Engineering Science*, 56(21-22):6135–6141, 2001.
- [85] Casamatta G., Comportement de la population de gouttes dans une colonne d'extraction : Transport, rupture, coalescence et transfert de matière , Thèse de Docteur ès Sciences, INP Toulouse, (1981).
- [86] Hussain A.A., Liang T.B., Slater M.J., Characteristic velocity of drops in liquid-liquid extraction pulsed sieve-plate column , *Chem. Eng. Res. Des.*, Vol.66, n°6, pp.541, (1988).

- [87] Bardin N., Simulations et expériences Lagrangiennes d'écoulements diphasiques dans les colonnes pulsées à garnissage disques-couronnes, Thèse de Doctorat, INP Toulouse, (1998).
- [88] Gourdon C., Les colonnes d'extraction par solvant : Modèles et comportement, Thèse de Docteur ès Sciences, INP Toulouse, (1989).
- [89] J.C. Godfrey, M.J. Slater, Trans. IchemE, 1991, 69, 130.
- [90] R. Gayler, N.W. Roberts, H.R.C. Pratt, Trans. Am. Inst. Chem. Eng. 1953, 31, 57.
- [91] Miyauchi T., Vermeulen T., Longitudinal dispersion in two-phase continuous-flow operations, Ind.Eng.Chem.Fund. Vol.2; pp.113, (1963).
- [92] Haverland H., Untersuchungen zur Tropfendispergierung in flüssigkeitspulsierten Siebboden-Extraktionskolonnen , Dissertation TU Clausthal, (1988).
- [93] Eid K.M., Etude de la rupture des gouttes dans une colonne pulsée, Thèse de Doctorat, INP Toulouse, (1984).
- [94] Jares J., Prochazka J., Break-up of droplets in Karr reciprocating plate extraction columns », Chem.Eng.Science, Vol.42, n°2, pp.283, (1987).
- [95] M. Simon, S.A. Schmidt, H.-J. Bart, Chem. Eng. Tech. 2002, 74, 247.
- [96] A.K. Chesters, Trans. IchemE 1991, 69, 259.
- [97] A. Kumar, S. Hartland, Ind. End. Chem. Res. 1996, 35, 2682.

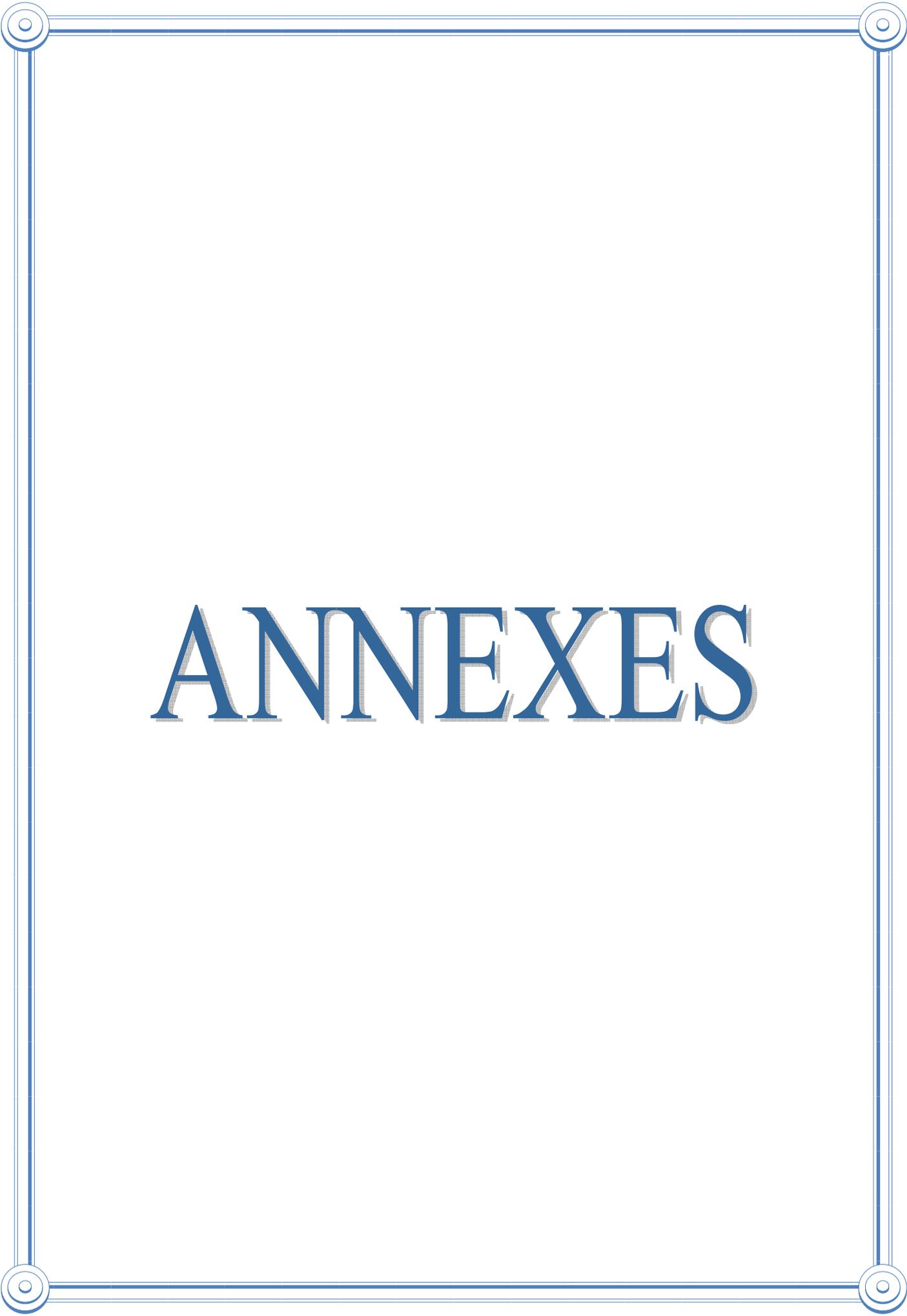
[98] M. M. Attarakiha, H.-J. Barta;*, N. M. Faqirb, Optimal moving and fixed grids for the solution of discretized population balances in batch and continuous systems: droplet breakage

[99] ABBAOUI, K., Les fondements mathématiques de la méthode décompositionnelle d'Adomian et application à la résolution de problèmes issus de la biologie et de la médecine, Thèse, Université Pierre et Marie Curie-ParisVI, 1995.

[100] ADOMIAN, G. Solving Frontier Problem of Physics : The Decomposition Method, Kluwer Academic Publishers, 1994.

[101] CHERRUAULT, Y. Optimisation : Méthodes locales et globales, Presses Universitaires de France (P.U.F) , 1999.

[102] CHERRUAULT, Y. Modèles et méthodes mathématiques pour les sciences du vivant, Presses Universitaires de France (P.U.F) , 1998.



ANNEXES

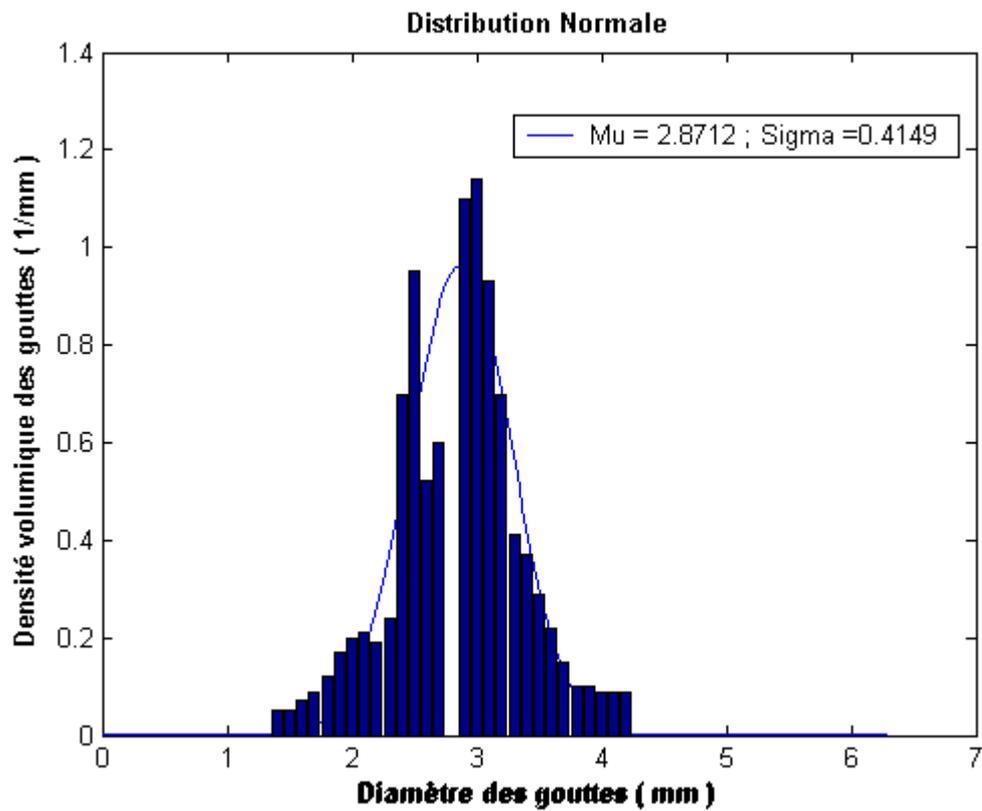


ANNEXE I

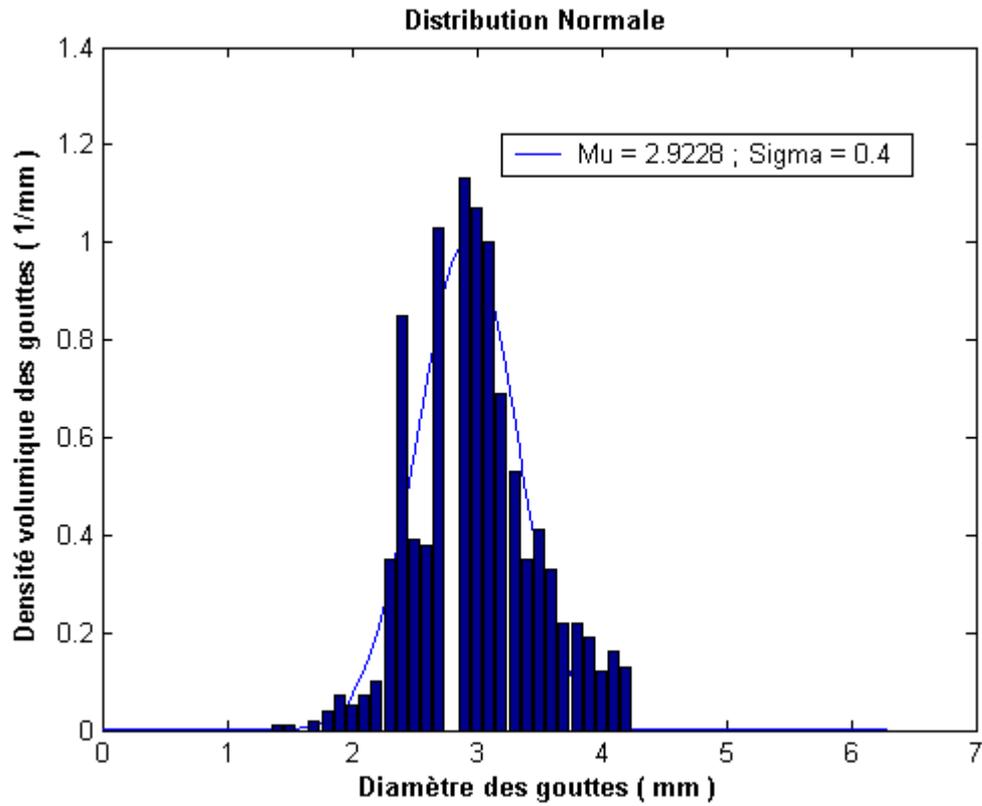
ANNEXE I

DISTRIBUTION EXPERIMENTALE ET SIMULEE DES
TAILLES DES GOUTTES

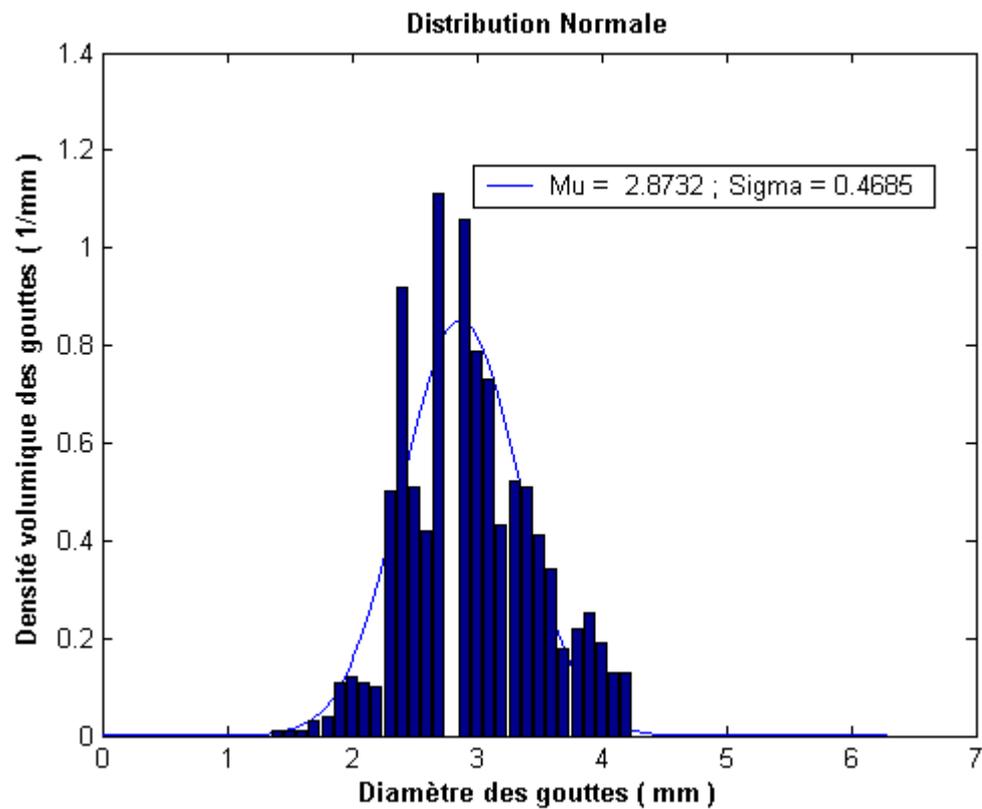
N=300



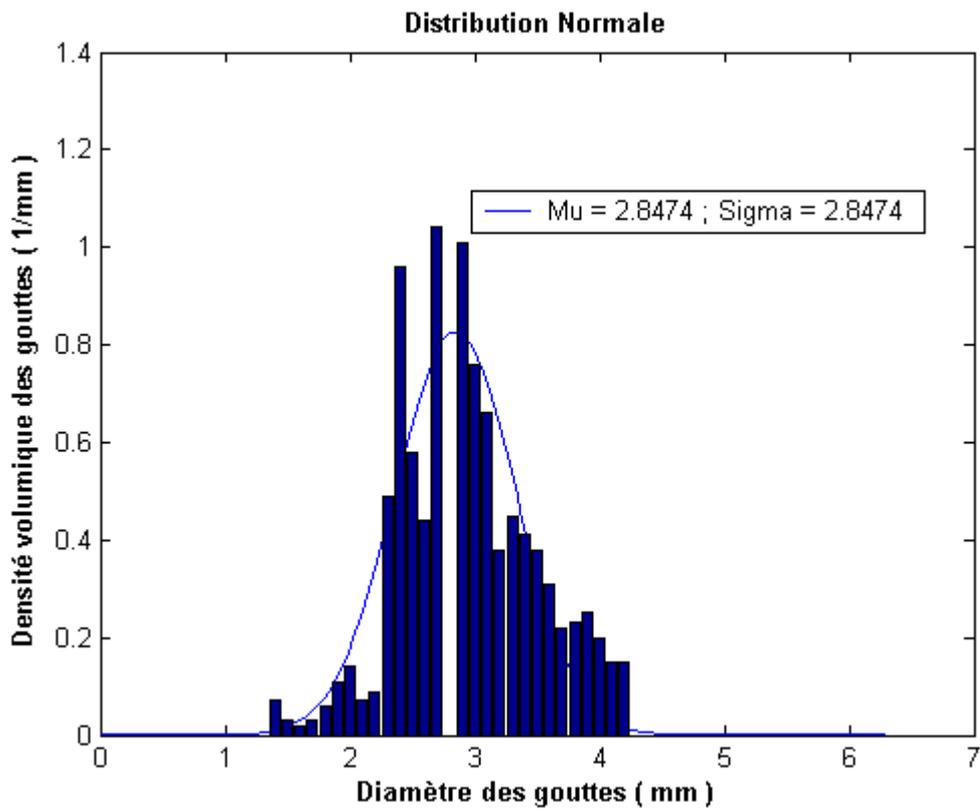
N=150



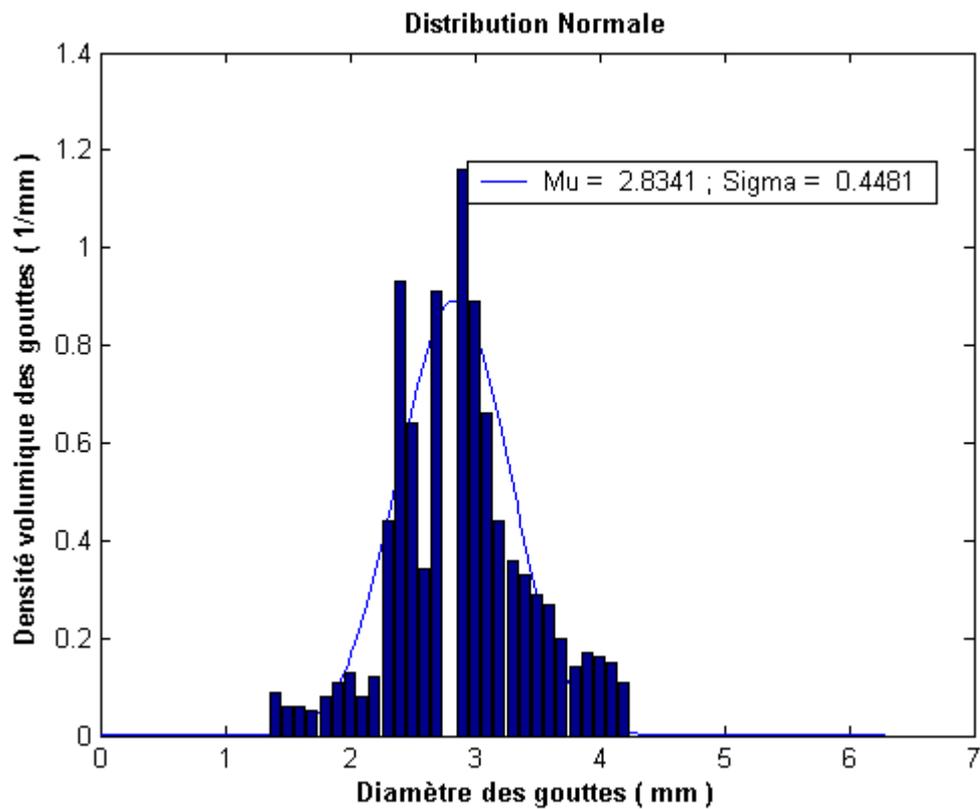
N=200



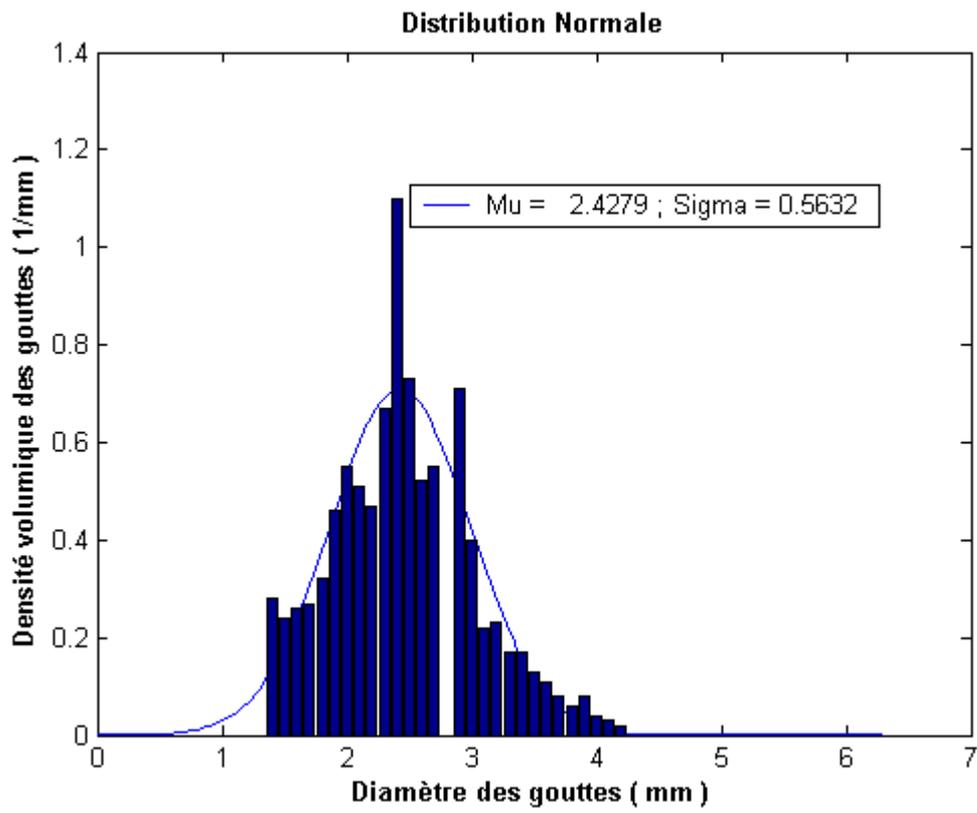
N=250

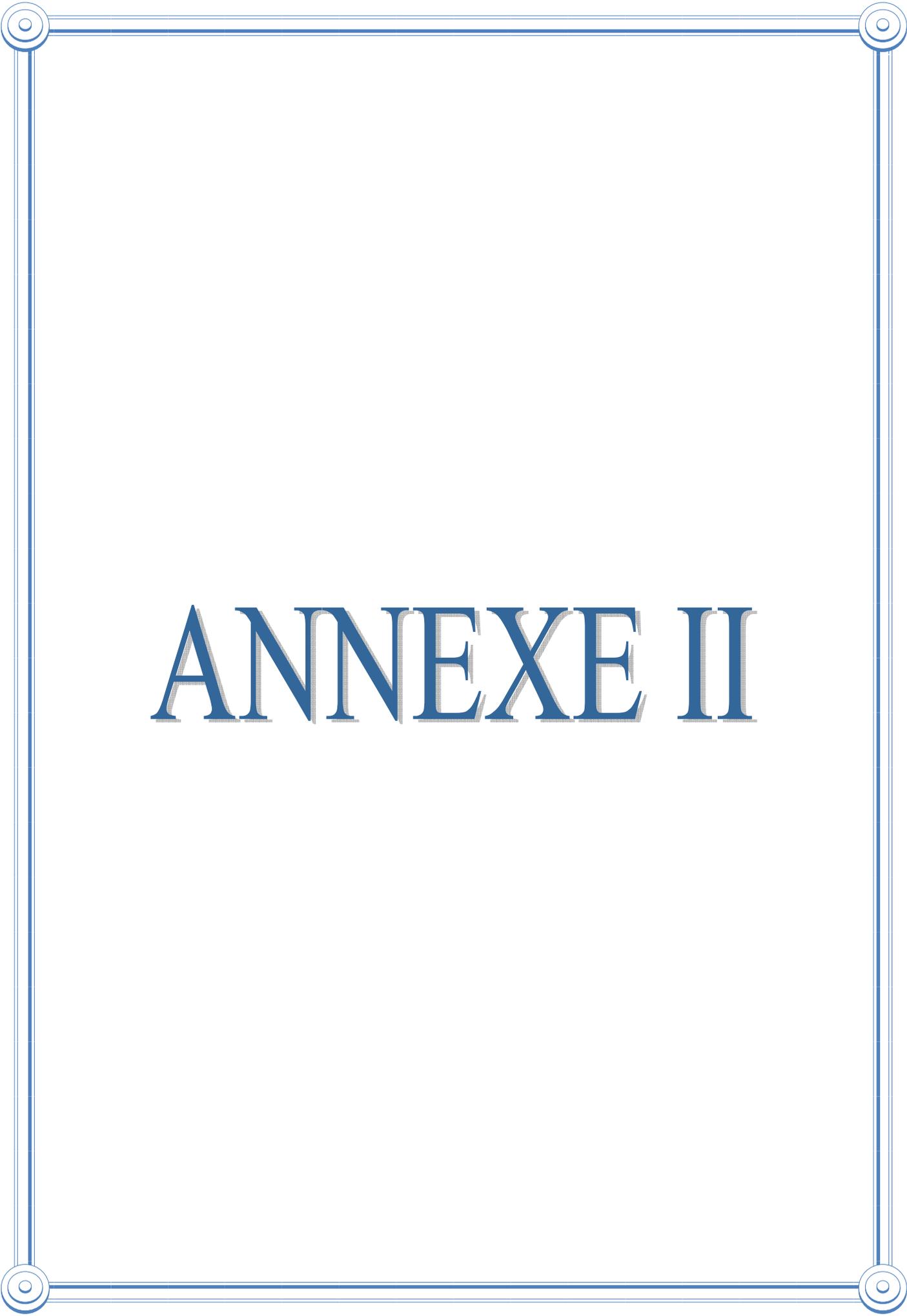


N=300



N=450





ANNEXE II

ANNEXE II

TRAITEMENT STATISTIQUE DES POPULATIONS DES GOUTTES

Nous avons utilisé, pour décrire les populations de gouttes, la variable $P(z, d)$ définie comme la densité de probabilité qu'un point au niveau z de la colonne appartienne à une goutte de diamètre d , $P^*(z, d) = \frac{P(z, d)}{\varphi(z)}$ est alors la densité de probabilité qu'un point de la phase dispersée, au niveau z de la colonne, appartienne à une goutte de diamètre d .

$P(z, d)\partial d$ est donc la fraction de volume occupée par les gouttes de diamètre d , au niveau z de la colonne.

On peut également caractériser une population de particules par une distribution en nombre, soit $n(z, d)$, la densité de probabilité en nombre des gouttes de diamètre d , au niveau z .

A partir de la variable $n(z, d)$ on peut proposer la définition des diamètres moyens suivants :

$$d_{pq} = \frac{\int_0^{d_{max}} d^p n(z, d) \partial d}{\int_0^{d_{max}} d^q n(z, d) \partial d}, \quad (1)$$

Nous retiendrons pour notre étude, le diamètre suivant d_{32} définis par :

$$d_{32} = \frac{\int_0^d d^3 n(z, d) \partial d}{\int_0^d d^2 n(z, d) \partial d} = \frac{\int_0^d d^3 \frac{P(z, d)}{V(d)} \partial d}{\int_0^d d^2 \frac{P(z, d)}{V(d)} \partial d} \quad (2)$$

d_{32} est appelé diamètre de SAUTER ; c'est le diamètre volume – surface qui apparaît dans le calcul de l'aire d'échange.

Soit :

$$P(z, d) = \sum_{k=1}^K P_k(z) b_k(d) \quad (3)$$

Avec

$$\varphi_k(z) = P_k(z) \Delta d_k \quad (4)$$

L'insertion de (3) et (4) dans 2 donne :

$$\sum_{k=1}^K P_k(z) \frac{6}{\pi} \int_0^{\infty} b_k(d) \partial d = \sum_{k=1}^K P_k(z) \frac{6}{\pi} \int_{d_{k-1}}^{d_k} b_k(d) \partial d = \frac{6}{\pi} \sum_{k=1}^K \varphi_k(z) \quad (5)$$

$$\sum_{k=1}^K P_k(z) \frac{6}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{1}{d} b_k(d) \partial d = \sum_{k=1}^K P_k(z) \frac{6}{\pi} \int_{d_{k-1}}^{d_k} \frac{1}{d} b_k(d) \partial d = \frac{6}{\pi} \sum_{k=1}^K P_k(z) \ln \left(\frac{d_k}{d_{k-1}} \right) \quad (6)$$

Et enfin :

$$d_{32} = \frac{\sum_{k=1}^K \varphi_k(z)}{\sum_{k=1}^K \frac{\varphi_k(z)}{\Delta d_k} \ln \left(\frac{d_k}{d_{k-1}} \right)}$$

Résumé

Un nouveau code de calcul étendu au transfert de matière a été développé pour la simulation d'une colonne d'extraction liquide-liquide fonctionnant à contre-courant. Ce code est caractérisé par le couplage entre une description détaillée de l'hydrodynamique et un modèle de transfert de matière.

Une nouvelle méthode de résolution de l'équation de bilan de population nommée Méthode de décomposition d'Adomian, appliquée à l'hydrodynamique est également prise en compte, notamment pour le processus de coalescence, rupture, et croissance des particules. Aussi une étude élargie aux domaines de l'hydrodynamique et le transfert de matière a été élaborée par des simulateurs commerciaux tels que Comsol et Fluent.

Mots clés : Extraction liquide-liquide, Bilan de population

Abstract

A new calculation code for the mass transfer a counter-current extraction process has been developed. This code is characterized by the combination of two main aspects in separation processes: hydrodynamics and mass transfer.

A new method of solving the population balance equation named Adomian composition method, applied to the hydrodynamics is also taken into account, especially for the process of coalescence, breakage and growth of particles. As expanded study the fields of hydrodynamics and mass transfer was developed by commercial simulators such as Comsol and Fluent.

Key words: Liquid-liquid extraction, Population balance.

ملخص

عمل جديد يشمل نقل المواد طور من أجل المحاكاة لعمود استخلاص السائل-السائل ضد التيار. هذا العمل يتميز بالربط بين الوصف المفصل للهيدروديناميكا ونموذج نقل المواد.

طريقة جديدة لحل معادلة التوازن السكاني وتدعى طريقة التحلل لـ **Adomian** ، المطبقة على الهيدروديناميكا، تأخذ بعين الاعتبار لاسيما لعمليات الالتحام، والتمزق، ونمو الجسيمات. كذلك دراسة موسعة لمجالات الهيدروديناميكا وتحويل المواد بواسطة برامج المحاكاة التجارية مثل **Fluent** و **Comsol**.

الكلمات المفتاحية : الاستخلاص السائل-السائل ، التوازن السكاني .