

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea



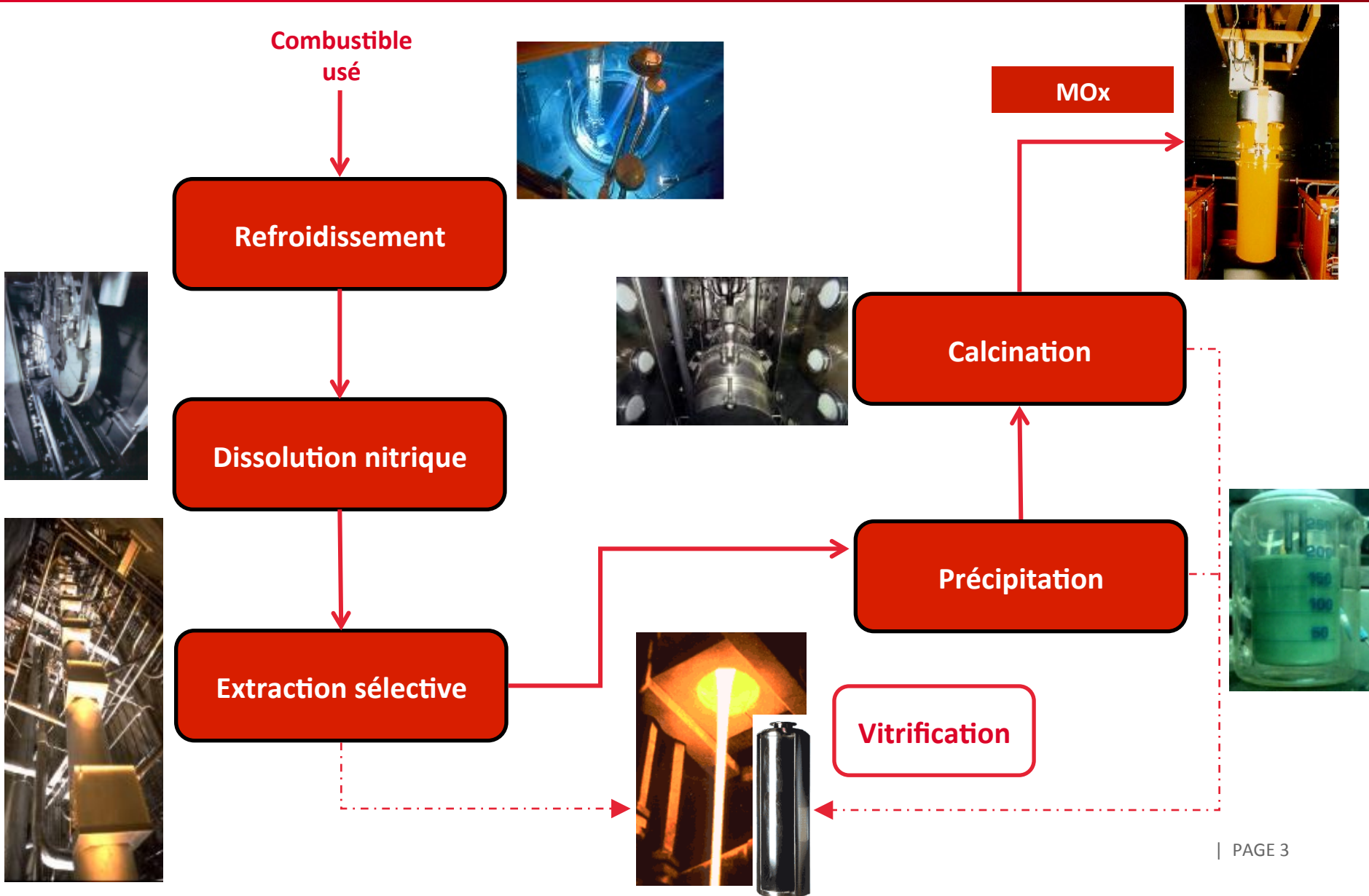
APPORT DE LA CFD
DANS LE CADRE DE LA R&D
SUR LES PROCÉDÉS D'EXTRACTION

Sophie Charton , CEA Marcoule

- Contexte

- Apport de la CFD et objectifs associés
 - 1- Répondre aux nouveaux besoins de la R&D industrielle
Rationalisation des essais, prédiction des performances
 - 2- Mieux comprendre les couplages chimie-transport
Scale-up / optimisation
 - 3- Accompagner / accélérer l'innovation technologique

- Conclusion



Développements technologiques (principalement contacteurs pour l'extraction liquide-liquide)

Génie Chimique:

- Qualification des contacteurs industriels
- Développement et tests de contacteurs miniatures
 - Manipulation de produits très radioactifs (téléopérables)
 - Aussi petits que possible (minimisation des effluents)
 - Bancs tests (pilotes en *inactif* ou en environnement *nucléaire*)

Activités historiques

Développements optiques et analytiques :

- Besoins spécifiques (en phase aqueuse et organique)
- Instrumentation in situ / en ligne

Mécanique des fluides

- CFD
- Instrumentation (PIV, LIF, etc.)

Depuis 2010

- 20 permanents (compétences complémentaires)
- 6 Doctorants (collaborations avec des labos académiques)



#1 – Répondre aux nouveaux besoins de la R&D industrielle

Ex : écoulement en colonne pulsée

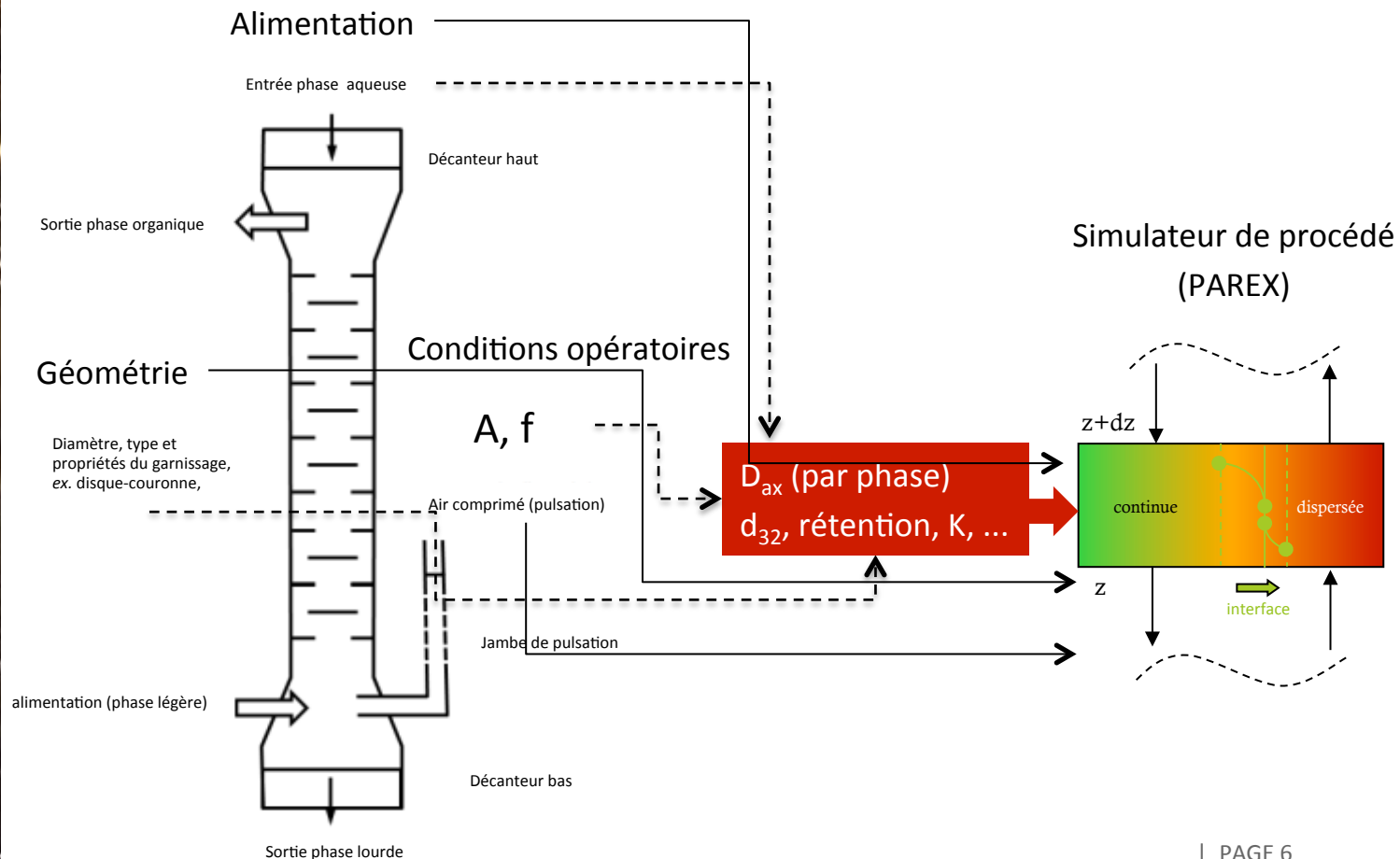
A. Amokrane (thèse 2014), F. Lamadie, H. Roussel

+ coll. LAGEP (Lyon 1)

F. PUEL, N. Sheibat-Othman

- ✓ Historiquement : détermination expérimentale indispensable

Détermination des paramètres hydrodynamiques par CFD



✓ 2 approches complémentaires

Euler-Lagrange

Trajectoires de particules fluides



Distribution de temps de séjour

Trajectoires des gouttes



Distribution de temps de séjour

 (D_{ax})

Vitesse de glissement

**Euler-Euler (+PBE)**

Distribution de taille de gouttes



Surface d'échange

Fraction de phase dispersée

***turbulence***

✓ Contraintes / exigences vis-à-vis de la simulation

Turbulence = phénomène stochastique → simulation directe (transitoire et 3D) requiert la prise en compte des plus petites structures de l'écoulement (*cf.* Daniel, 2003)

Besoin : réaliser de nombreuses simulations numériques (**études paramétriques**) en vue d'établir les « lois de comportement » appropriées pour les colonnes pulsées

- Modèle Euler Lagrange : prise en compte de plusieurs milliers de particules / gouttes

- Modèle couplé CDF-PBE : résolution du PBE (6 équations, QMOM) dans chaque maille du domaine de calcul

- 👉 Évaluation des modèles RANS – de la simplification 2D-AXI
- 👉 Étude principalement réalisée avec ANSYS-Fluent

Influence de la turbulence (illustration)

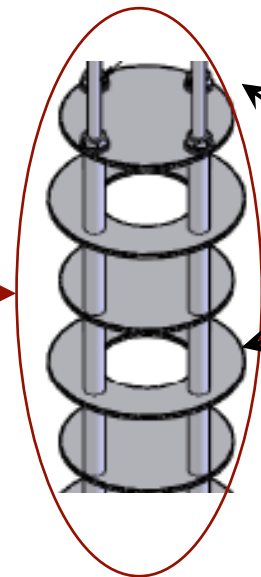
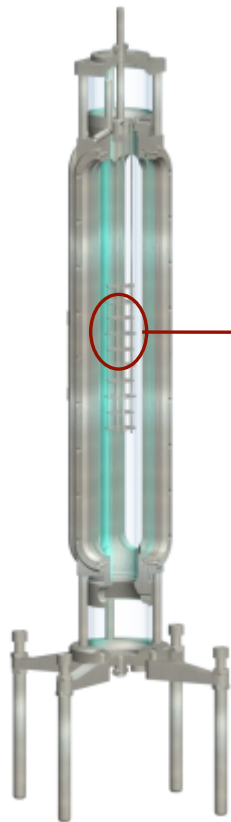
- ✓ Trajectoire de gouttelettes d'eau (pulsation 2 cm/s)



1- Etude préliminaire de l'écoulement monophasique (1/3)

Modèle expérimental

Colonne pulsée ID-50mm
Optimisée pour les mesures optiques

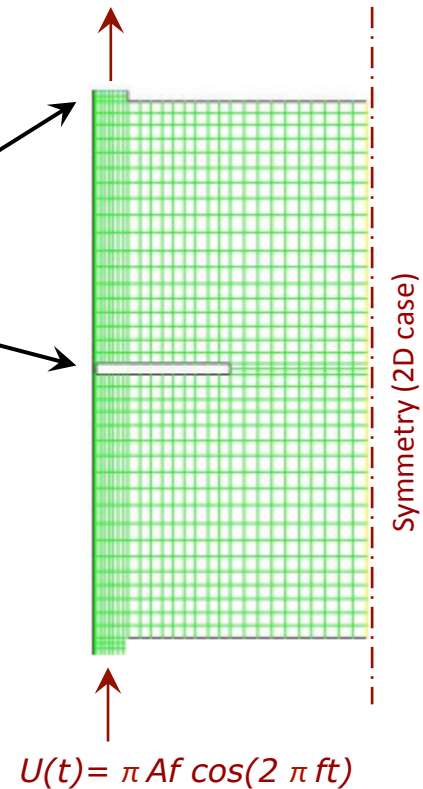


Modèle numérique (Ansys-Fluent)

Domaine périodique 2D (or 3D)
(6 compartiments)

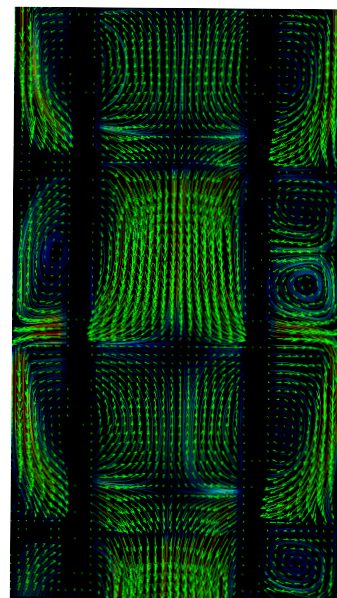
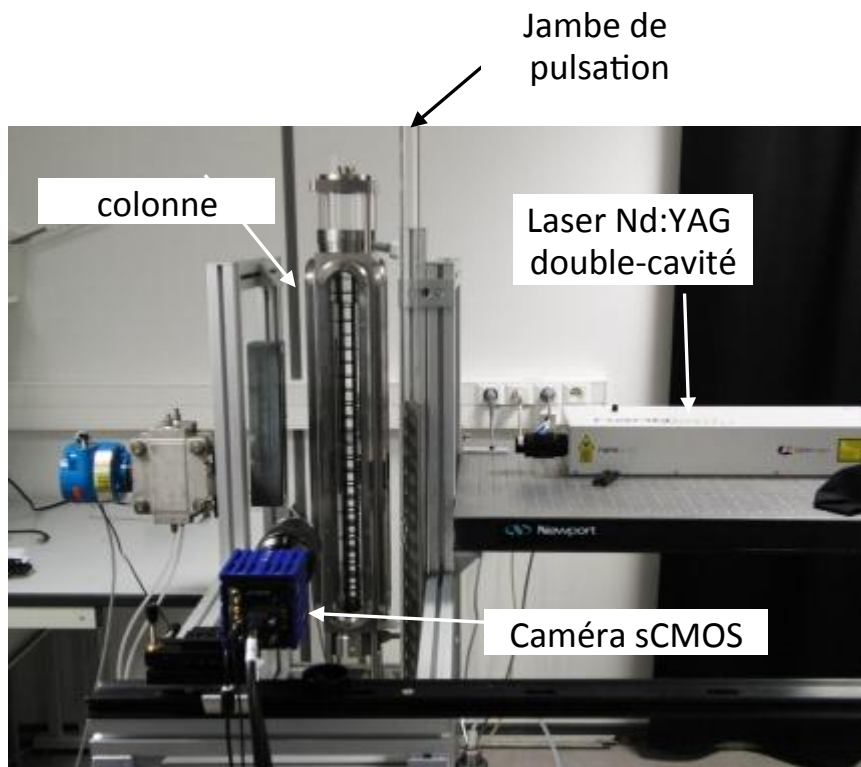
disque

couronne

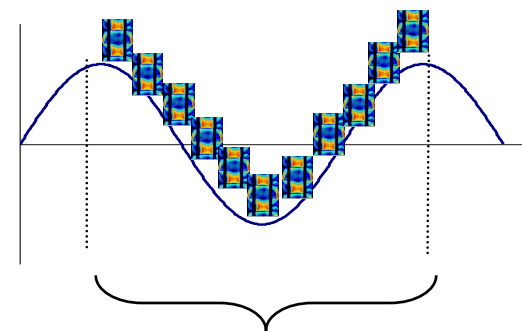


Mesure des champs de vitesse et de turbulence

→ Mesures PIV synchronisées sur le cycle de pulsation



Velocity fields (PIV)



1 période, T



Valeurs instantanées -
Moyenne de phase

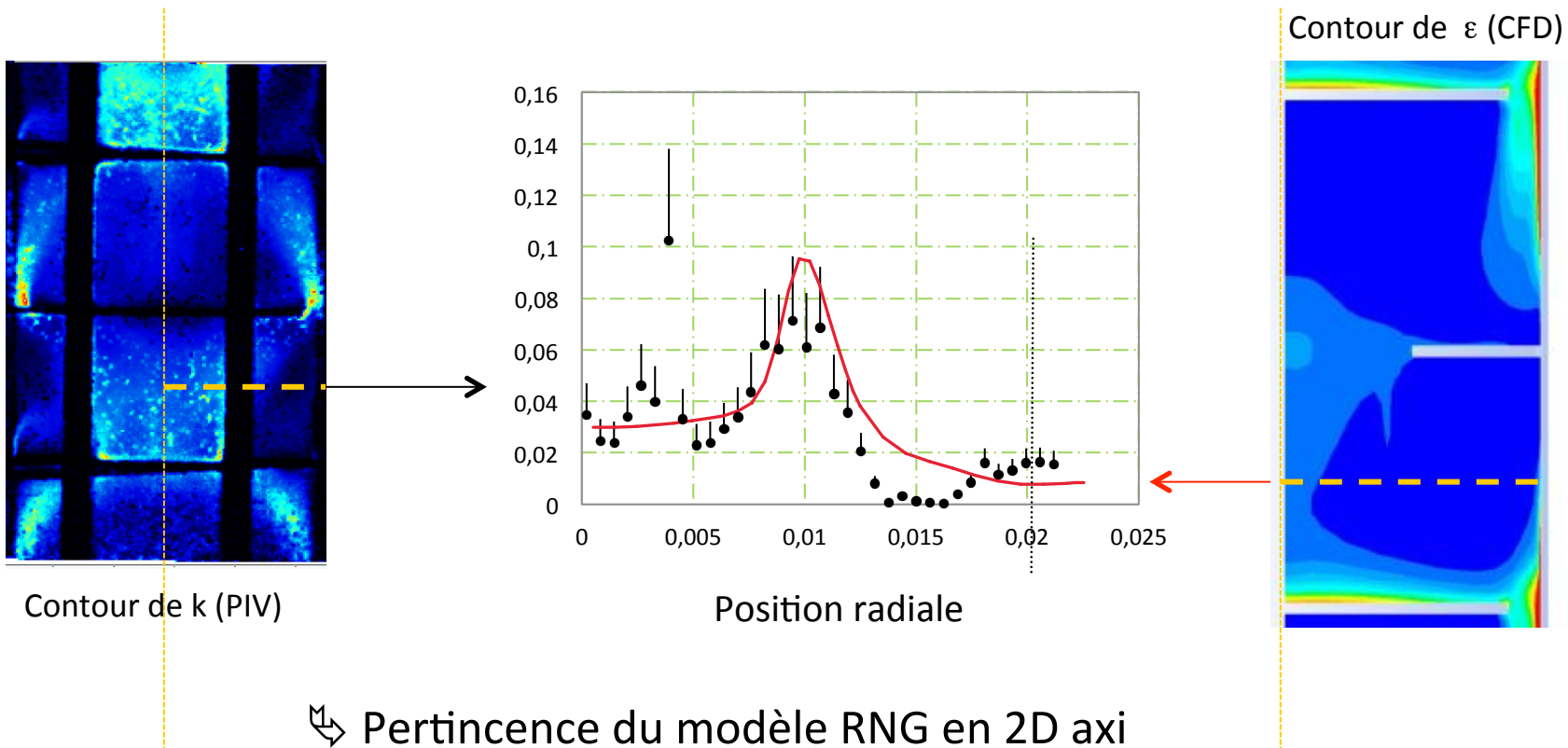


Estimation des fluctuations
turbulentes

- ✓ TPH ensémencé avec des sphères creuses en verre ($10\mu\text{m}$)
- ✓ Conditions opératoires : $0.5\text{Hz} \leq f \leq 2\text{Hz}$ $1\text{cm} \leq A \leq 4\text{cm}$

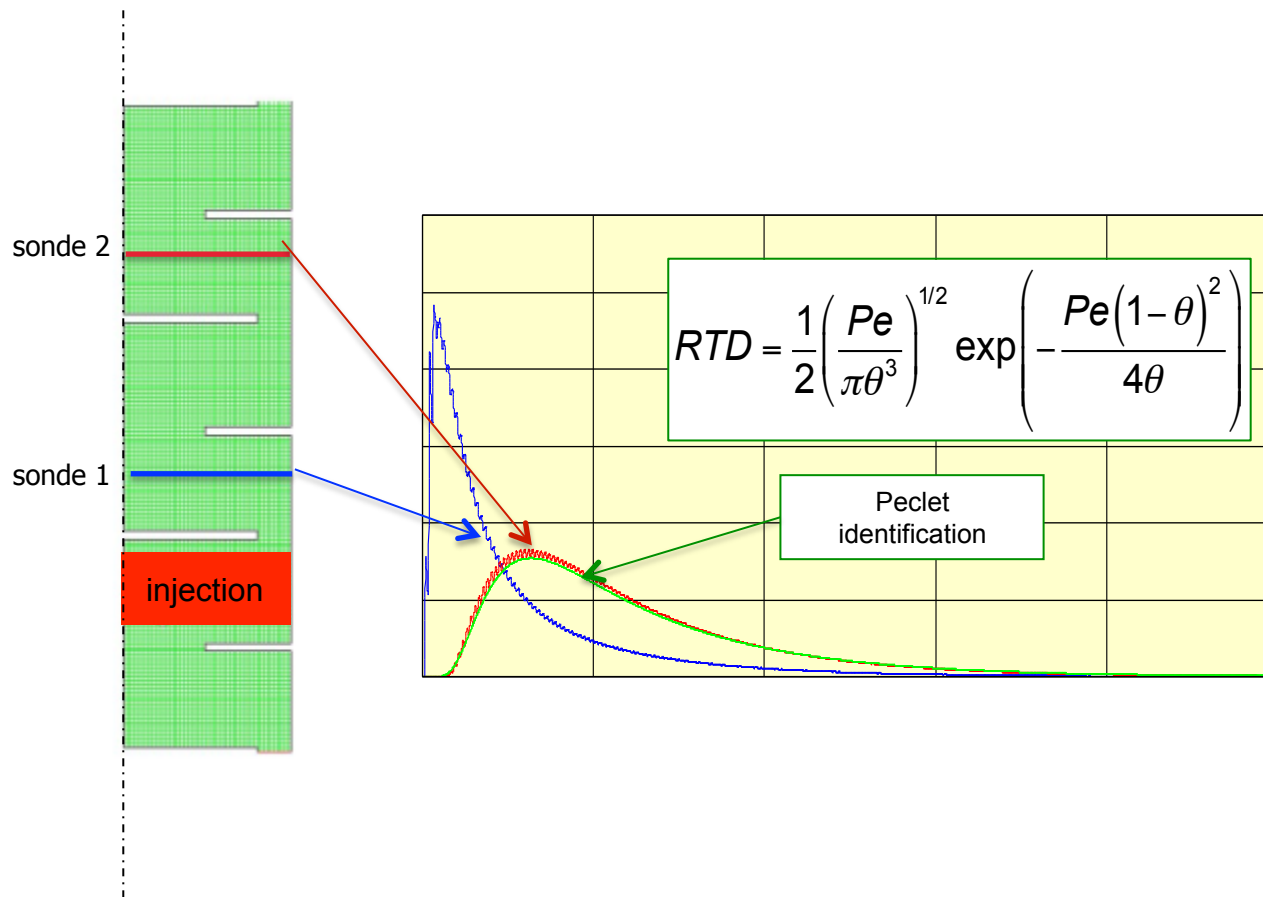
Sélection et validation du modèle de turbulence RANS

→ Dissipation turbulente ε (W/kg) : Simulation (RNG) vs. Mesure

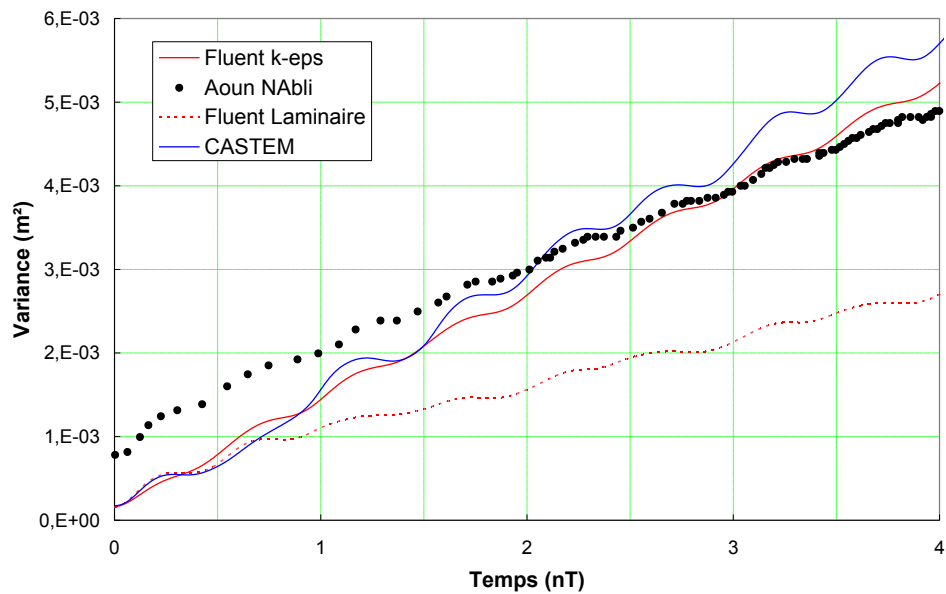
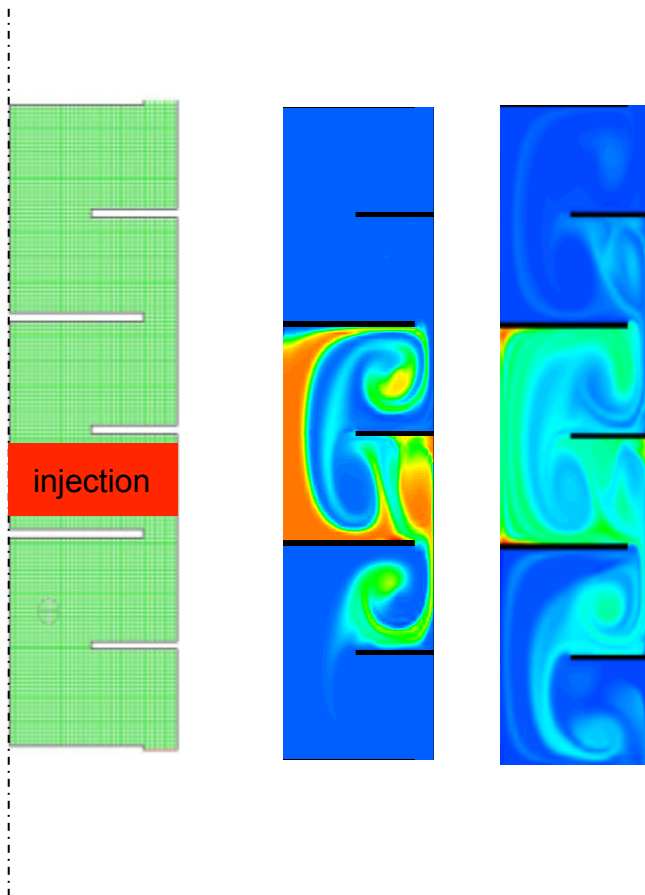


2- Phase continue : modèle de D_{ax} pour le simulateur de procédé

Simulation par CFD d'expériences de Distribution de Temps de Séjour

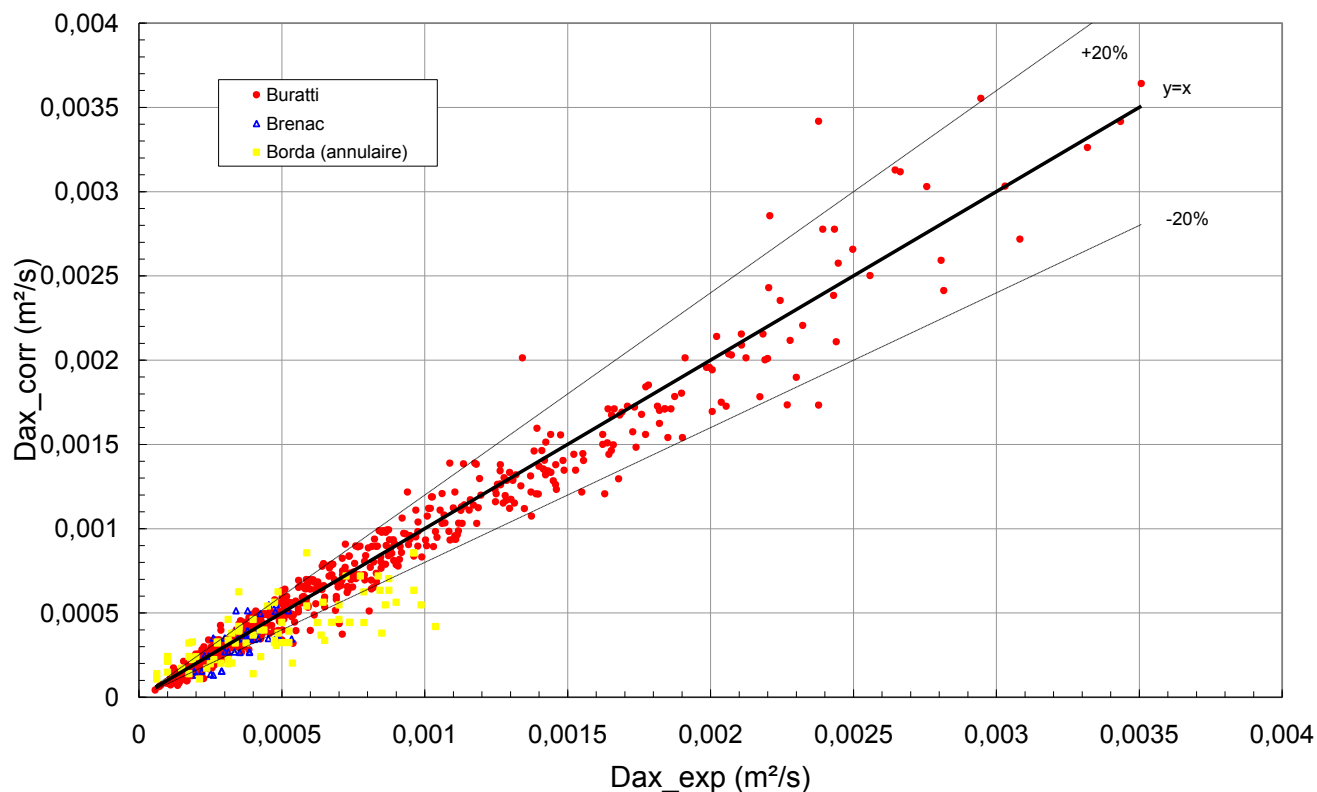


Dispersion d'un nuage de traceur



$$D_{ax} = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} \frac{dVar}{dt} \right)$$

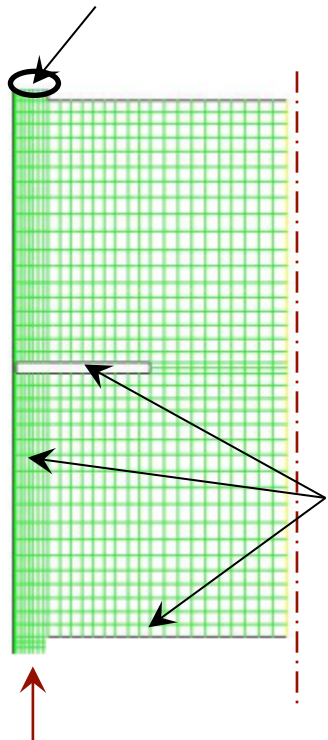
Analyse du REX & étude de sensibilité numérique (A,f, débits, géométrie, etc.)



3- Phase dispersée : approche Euler-Lagrange (1/3)

→ Utilisation du Discrete Phase Model (DPM) pour simuler les trajectoires de gouttes injectées dans l'écoulement pulsé

injection (mini 3000 gouttes / cas)

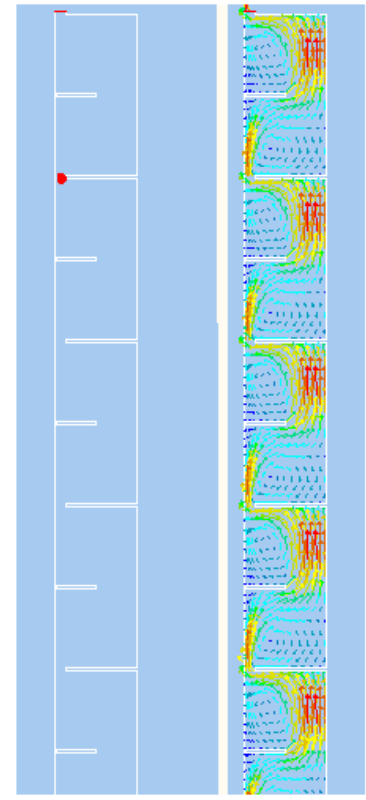


$$\frac{du_p}{dt} = \underbrace{F_D (u - u_p)}_{\text{drag force}} + \underbrace{g (\rho_p - \rho) / \rho_p}_{\text{buoyancy}} + \underbrace{F_x / \rho_p}_{\text{other forces}}$$

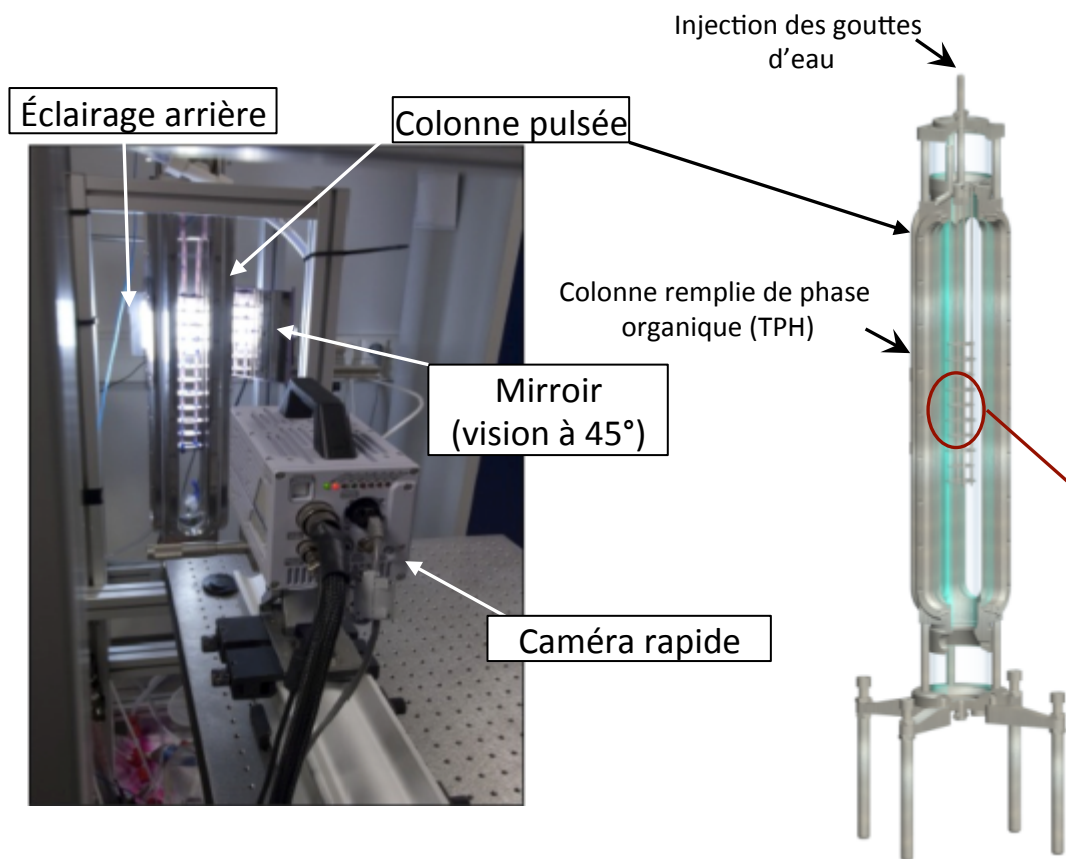
virtual masse $F_x = \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{d}{dt} (u - u_p)$

pressure gradient $F_x = \frac{\rho}{\rho_p} u_p \frac{\partial u}{\partial x}$

drag force (Schiller and Naumann) $F_D = \frac{18\mu C_D \text{Re}}{\rho_p d_p^2}$



Etude expérimentale associée → Ombroscopie + caméra rapide



Propriétés des liquides

	TPH	Eau + BM
ρ (kg/m ³)	760	998
μ (Pa.s)	$1,23 \times 10^{-3}$	10^{-3}
σ (N/m)	43×10^{-3}	



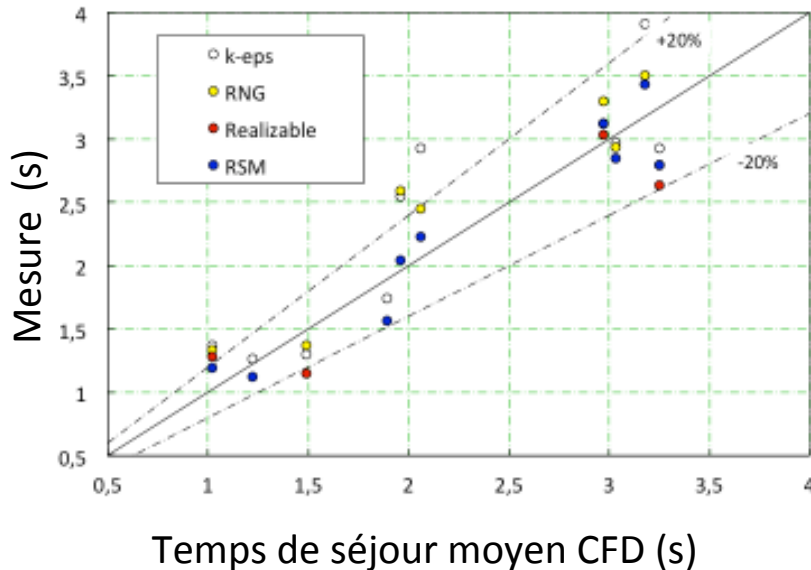
- ✓ Diamètre des gouttes : $1\text{mm} \leq d_p \leq 3\text{mm}$
- ✓ Conditions opératoires : $0.5\text{Hz} \leq f \leq 1\text{Hz}$ $1\text{cm} \leq A \leq 4\text{cm}$

Validation du modèle

&

Analyse de sensibilité

- turbulence
- Coefficient de trainée etc.



- Effect séparé de A et de f

d_p (mm)	f (Hz)	A (cm)	$A \times f$ (cm/s)	RTD (s)
3	1	1	1	1.96
		1.7	1.7	1.22
	0.5	2	1	2.06
		3	1.5	1.89
2	1	1	1	3.25
		2	2	1.02
	0.5	2	1	2.97
		4	2	1.49
1	1	1	1	3.03
	0.5	2	1	3.18

- ✓ A finaliser : établissement des modèles D_{ax} , v_{slip} (vs. A , f , d_p , ...) pour le simulateur de procédé

Principe de développement du modèle

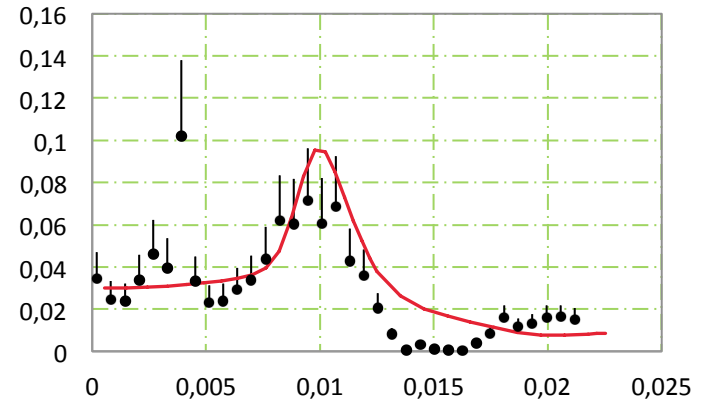
1- Etude monophasique (CFD)

Modèle CFD simplifié
(RANS, axi)

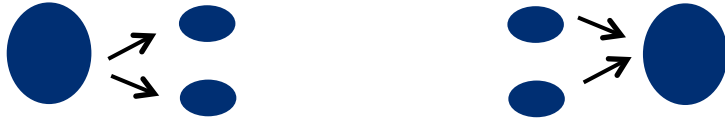


Evaluation de la turbulence dans la colonne

(Drag coef. issu de l'étape précédente)



Principe de développement du modèle



2- Bilan de population (PBE)

Choix des noyaux
(*rupture & coalescence*)



Identification des paramètres

Principe de développement du modèle

1- Etude monophasique (CFD)

Modèle CFD simplifié
(RANS, axi)



Evaluation de la turbulence dans la colonne

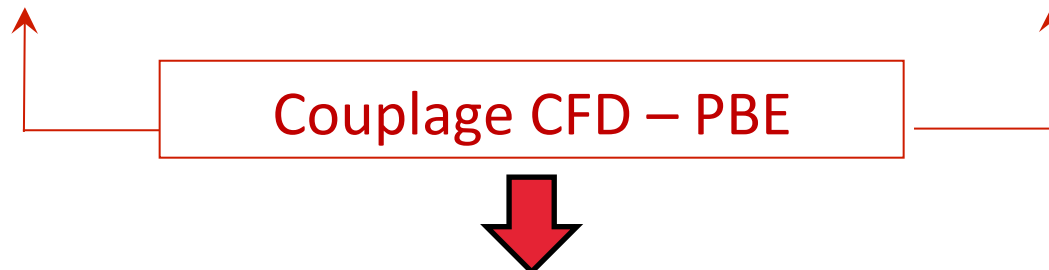
(Drag coef. issu de l'étape précédente)

2- Bilan de population (PBE)

Choix des noyaux
(*rupture & coalescence*)



Identification des paramètres



Simulation de la colonne pulsée

4- Phase dispersée : approche Euler-Euler (2/5)

- ✓ Equations de fermeture pour le bilan de population

Ex: modèle de Coulaloglou et Tavalarides (1977)

Noyau de rupture

energie transmise (par le tourbillon)

>

Énergie de surface (de la goutte)

$$b(d_i) = C_1 d_i^{-2/3} \frac{\varepsilon^{1/3}}{1 + \phi} \exp\left(-\frac{C_2 \gamma (1 + \phi)^2}{\rho_d \varepsilon^{2/3} d_i^{5/3}}\right)$$

Propriétés des fluides

4 parametres: C_1, C_2, C_3, C_4

Propriétés de l'écoulement

Noyau de coalescence

fluctuations turbulentes → fréquence de collision

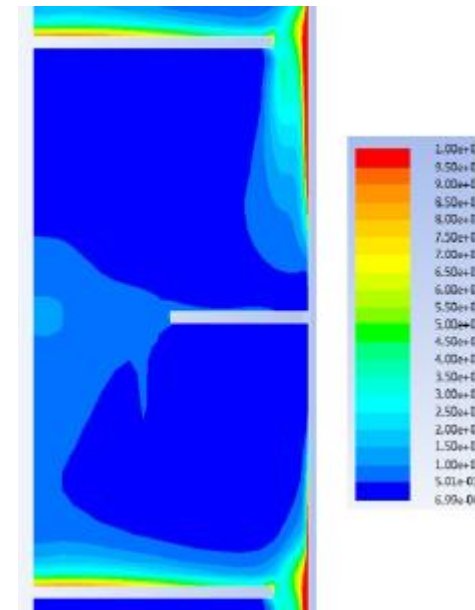
Efficacité de collision basée sur la théorie du film

$$a(d_i, d_j) = C_3 (d_i + d_j)^2 (d_i^{2/3} + d_j^{2/3})^{1/2} \varepsilon^{1/3} \exp\left[-\frac{C_4 \mu_c \rho_c \varepsilon}{\gamma^2} \left(\frac{d_i d_j}{d_i + d_j}\right)^4\right]$$

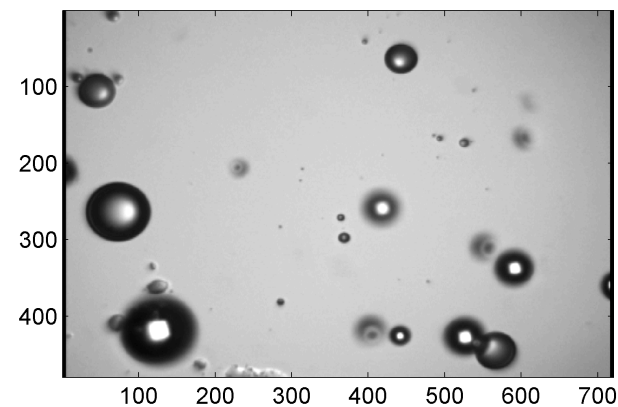
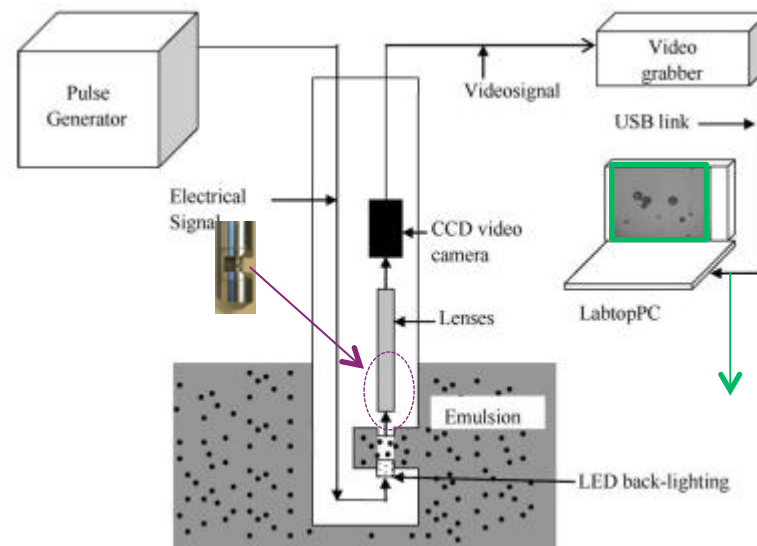
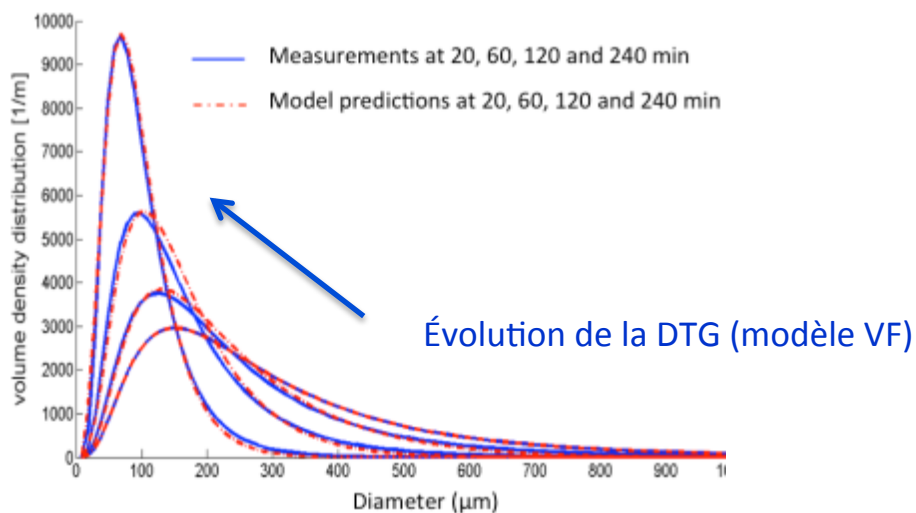
PBE: sélection du modèle et identification des paramètres (coll. LAGEP)
(conditions quasi-uniformes en réacteur agité)

- ✓ Niveaux de ε basés sur les simulations de la colonne pulsée

Vitesse (rpm)	ε (m ² /s ³)	ϕ (W/O)
350	0.16	1%
400	0.29	3%
450	0.34	5%
500	0.46	10%



PBE: sélection du modèle et identification des paramètres (coll. LAGEP)
(conditions quasi-uniformes en réacteur agité)



Simulations couplées CFD-PBE de l'écoulement en CP...

Pour les 2 phases :

Resolution des équations de Navier-Stokes (RANS, 2D axi)

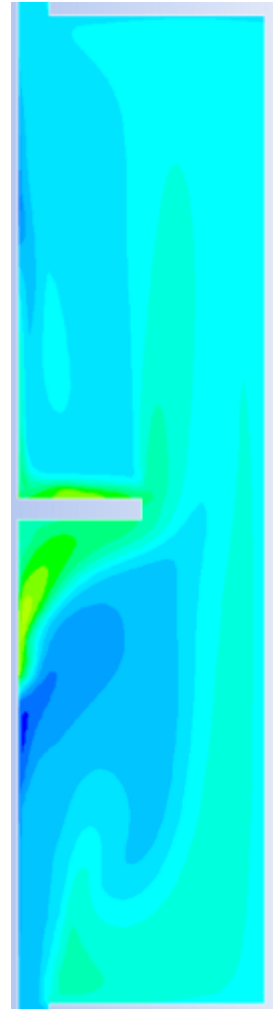
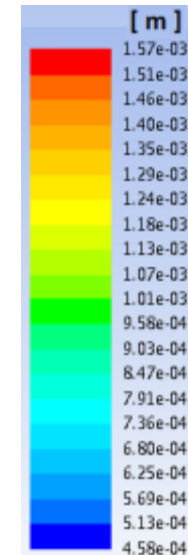
Couplage :

Couplage *via* le diamètre de Sauter d_{32}

Evolution de la population de gouttes :

PBE résolue sur chaque maille du domaine de calcul, méthode QMOM

Ex : évolution du d_{32} sur 1 période
ID 25 mm, A = 6 cm, f = 1Hz



Simulations couplées CFD-PBE de l'écoulement en CP...

Pour les 2 phases :

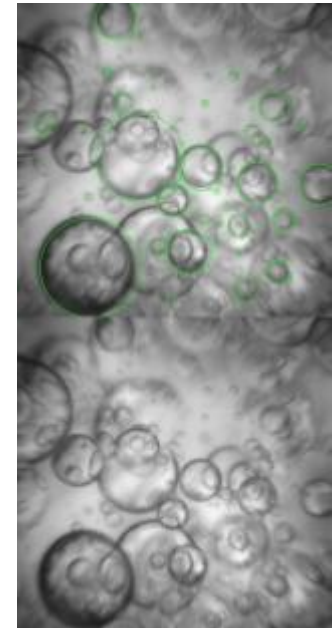
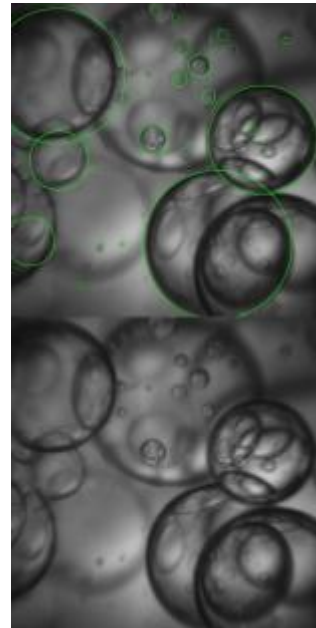
Resolution des équations de Navier-Stokes (RANS, 2D axi)

Couplage :

Couplage *via* le diamètre de Sauter d_{32}

Evolution de la population de gouttes :

PBE résolue sur chaque maille du domaine de calcul, méthode QMOM



... et suivi de la DTG in situ

#2 – Mieux comprendre les couplages chimie-transport

Apport des écoulements de Taylor-Couette

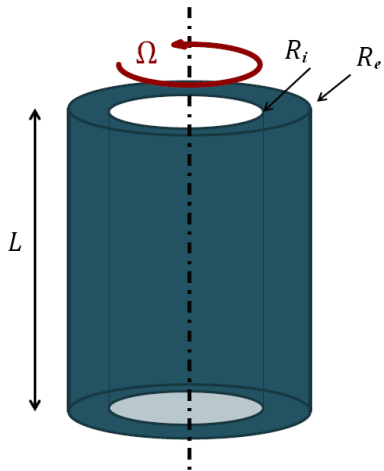
M. Nemri (thèse 2013), D. Dherbécourt (thèse en cours)

F. Lamadie

+ coll. IMFT (INPT)

E. Climent, S. Cazin, M. Marchal

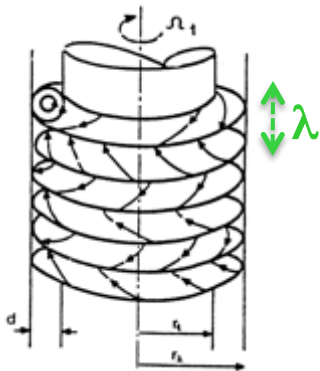
Choix des écoulements de Taylor-Couette (1/2)



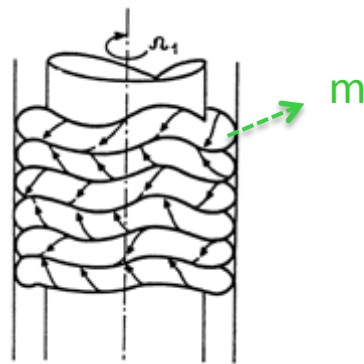
- ✓ Géométrie simple
 - ↳ Espace annulaire entre 2 cylindres concentriques
 - Interne en rotation – externe fixe

- ✓ Multiples transitions (écoulements) jusqu'à la turbulence

- ✓ Caractérisés par le nombre de Reynolds $Re_{\theta} = \frac{\Omega R_i (R_e - R_i)}{\nu}$

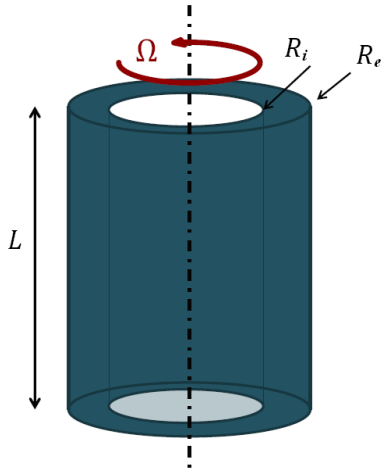


Écoulements permanents
Période axiale



Écoulements instationnaires
double-périodicité

Choix des écoulements de Taylor-Couette (1/2)



✓ Géométrie simple

↳ Espace annulaire entre 2 cylindres concentriques

Interne en rotation – externe fixe

✓ Multiples transitions (écoulements) jusqu'à la turbulence

✓ Caractérisés par le nombre de Reynolds $Re_{\theta} = \frac{\Omega R_i (R_e - R_i)}{\nu}$

Candidat idéal pour la DNS

✓ Code JADIM (IMFT)

↳ Résolution directe des équations de NS

Choix des écoulements de Taylor-Couette (2/2)

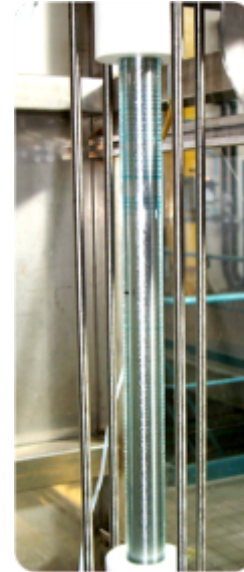
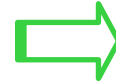
➔ Intérêt pour le laboratoire : colonne d'extraction liquide-liquide miniatures



D. 460mm – H. 8 m
1m³/h
HEPT – 30 cm



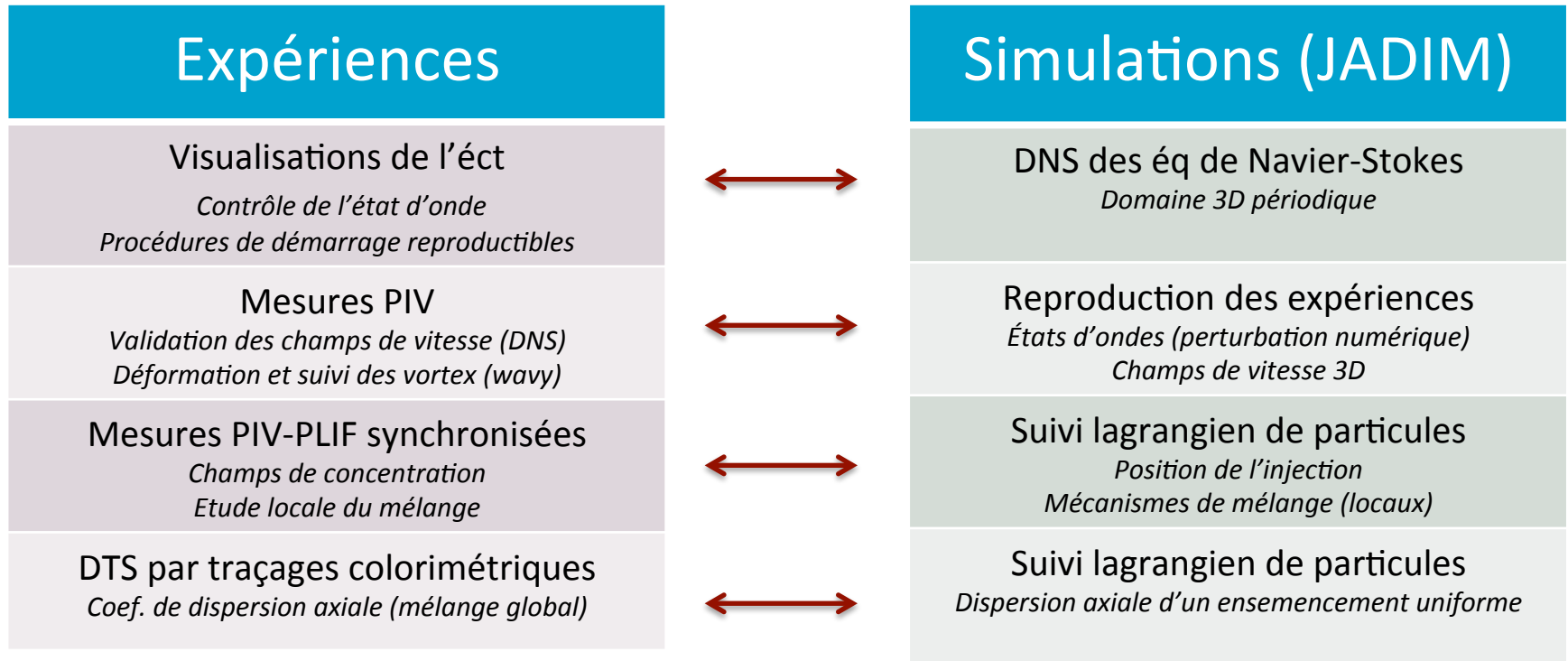
D. 15mm – H. 4-6m
1L/h
HEPT = 30 cm



D. 20mm (gap 1.5) – H. 0.7 m
100 mL/h
HEPT = 3 cm

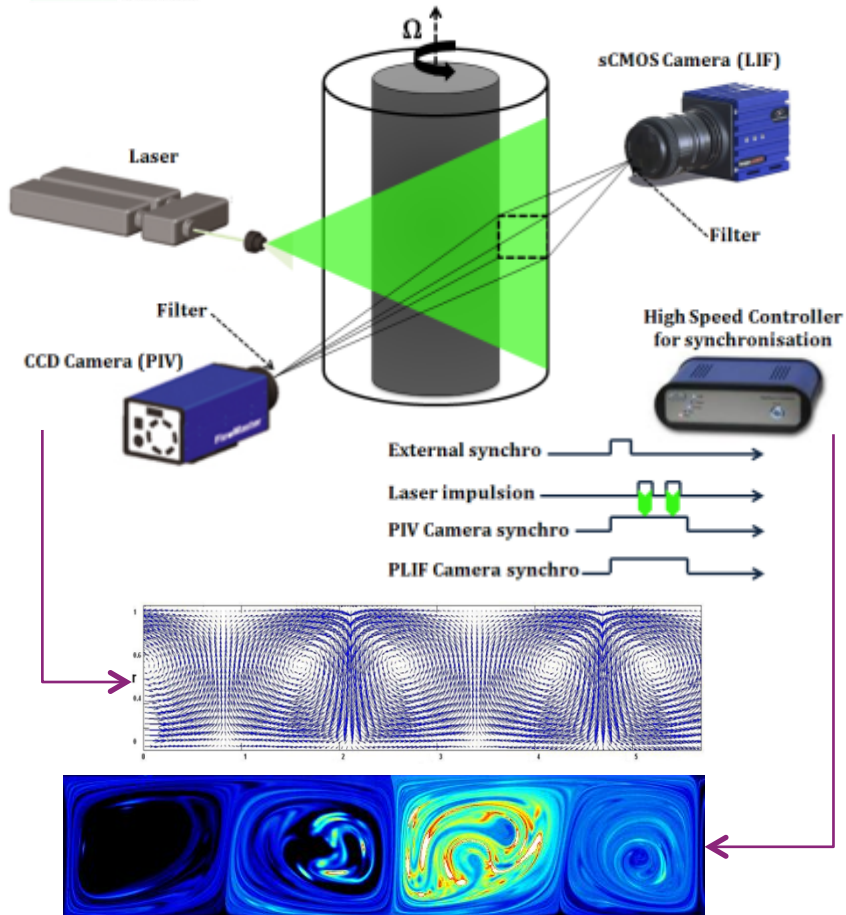
- ✓ Faible dispersion axiale
- ✓ Cisaillement (émulsification)

- ✓ complémentarité d'outils numériques et expérimentaux

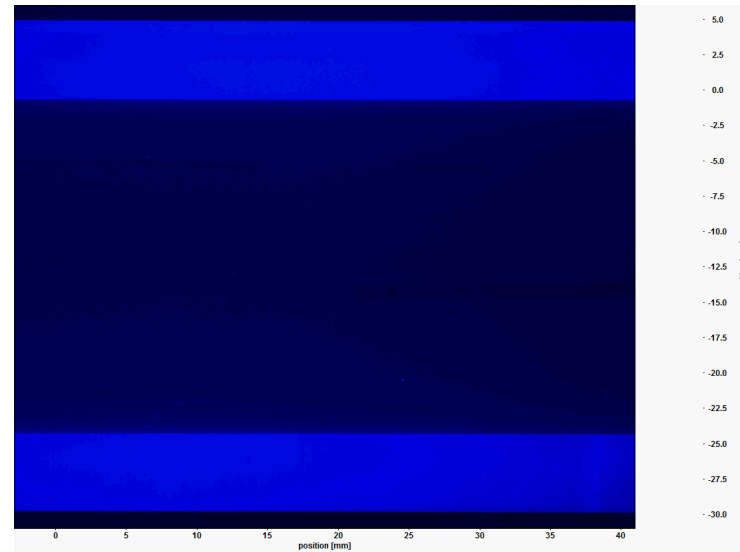


- ✓ Nemri et al. (2012) "Experimental and numerical investigation on mixing and axial dispersion in Taylor–Couette flow patterns" *CHERD*, 91:2346–2354
- ✓ Nemri et al. (2014), "Experimental investigation of mixing and axial dispersion in Taylor–Couette flow patterns" *Exp Fluids* 55:1769
- ✓ Nemri et al. *AICHE*, submitted

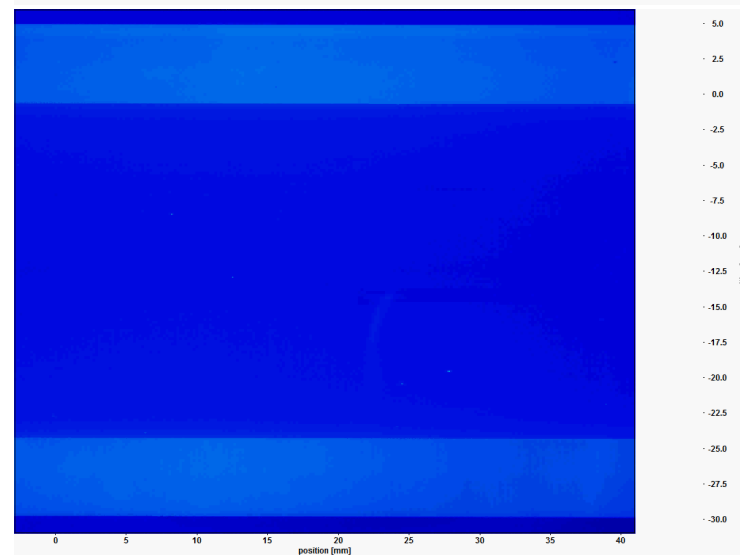
Couplage PIV-PLIF



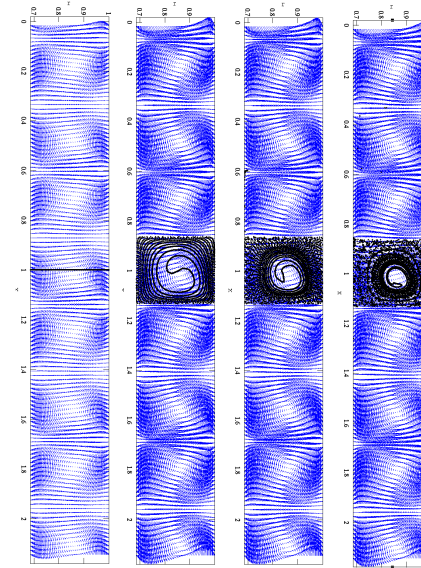
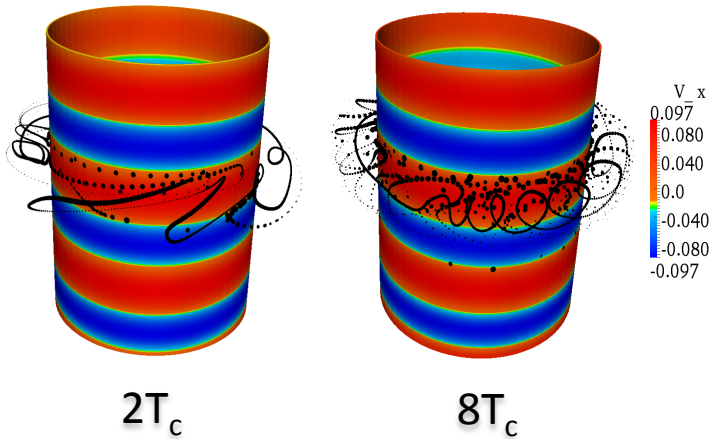
Re=140



Re=953

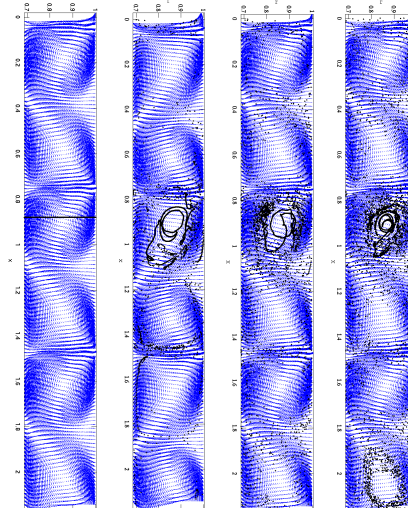
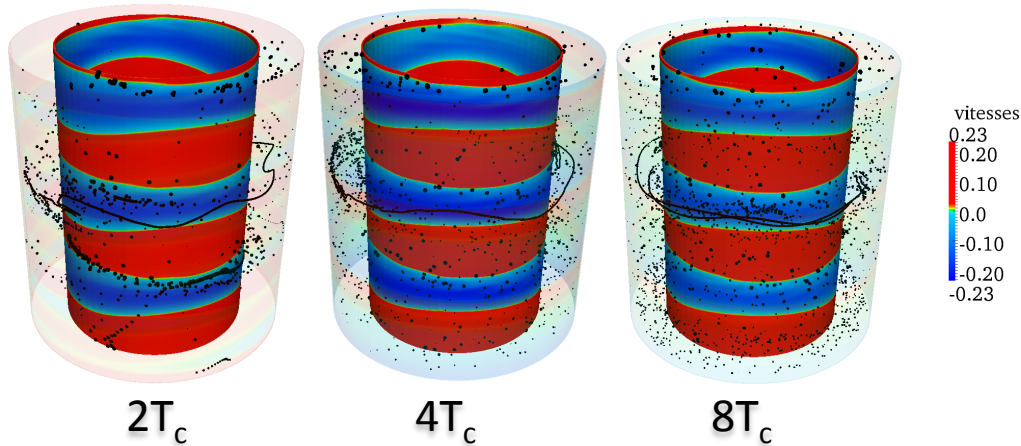


DNS – injection au coeur d'un vortex régime TVF



0 2 4 8 rotations

régime WVF



#3 – Accompagner l'innovation technologique

Procédé de précipitation en émulsion

A. Amokrane (thèse 2014), M. Jéhannin (thèse en cours)

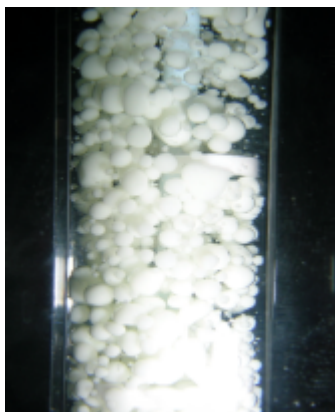
G. Borda (inventeur)

+ coll. LAGEP

F. Puel, J.-P. Klein

+ coll. LEA ICSM - Max Planck Golm

T. Zemb, H. Riegler

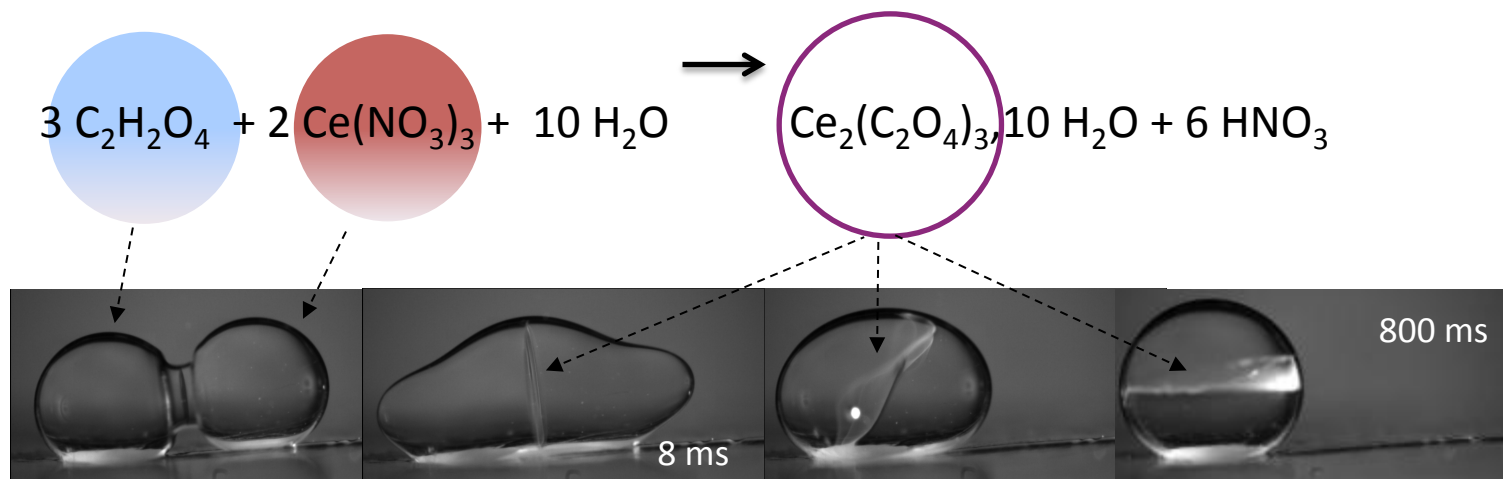


Utilisation des contacteurs liquide-liquide comme réacteurs de précipitation

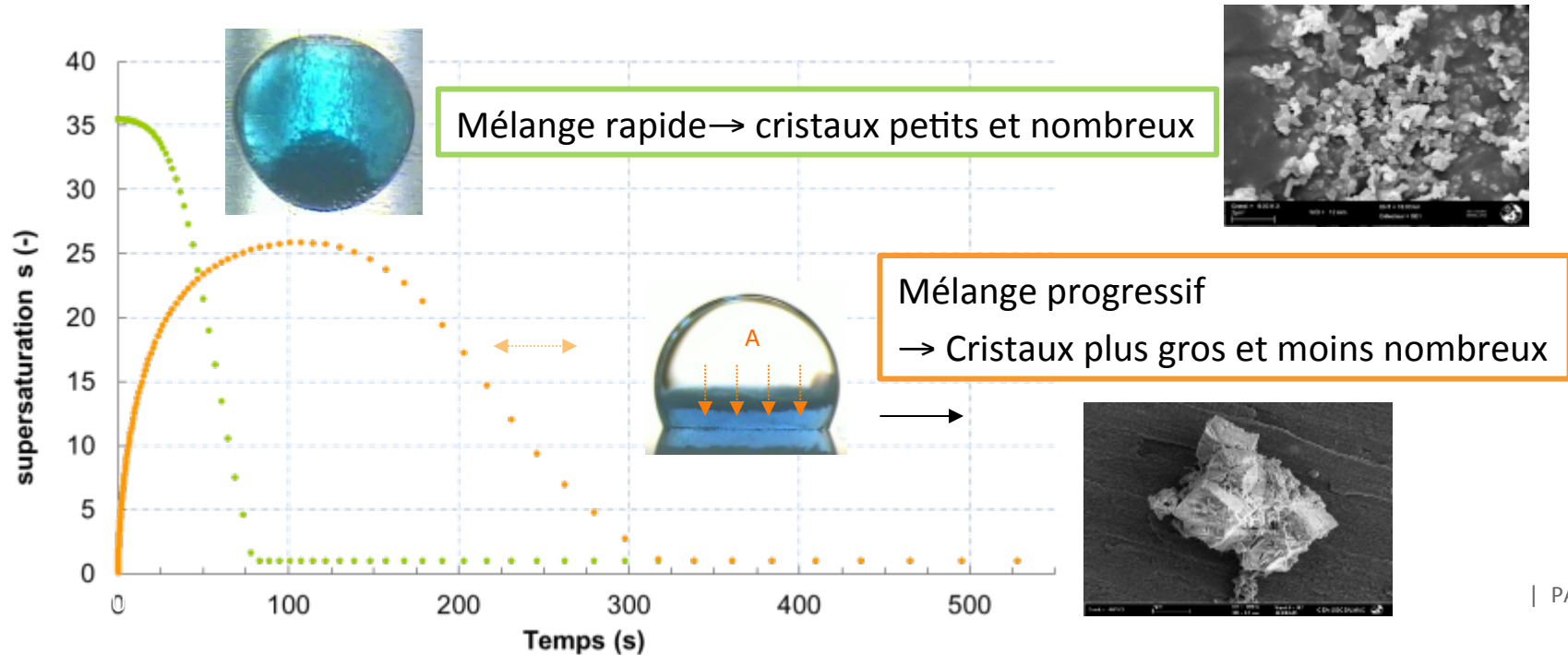
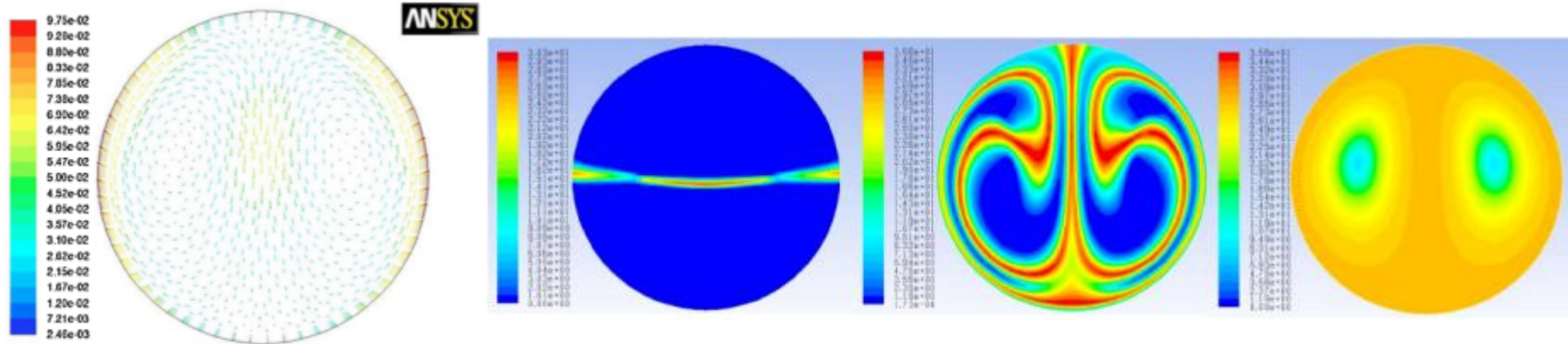
- Colonne Couette (faible capacité)
- Colonne pulsée (forte capacité)

Gouttes de réactifs (phase aqueuse) dispersées dans une phase organique inerte

Reaction initiée par la coalescence des gouttes



✓ Charton et al. (2013) "Actinide oxalate precipitation in emulsion modeling: from the drop scale to the industrial process" *CHERD*. 91:660-669



Synthèse et conclusion

- Développement et validation d'un modèle couplé CFD-PBE
 - ✓ *Mesures PIV synchronisées sur la pulsation*
 - ✓ *Mesures in-situ de la DTG*

- Comparaison et sélection des noyaux de rupture / coalescence appropriés
 - ✓ À partir des évolutions de DTG mesurées en réacteur agité

- Permettant de déterminer par simulation numérique les paramètres hydrodynamiques du simulateur de procédé (ELL):
 - ✓ Dispersion axiale (phase continue)
 - ✓ Distribution de temps de séjour des gouttes
 - ✓ Evolution de la taille de goutte et de la rétention

- ✓ Mise en place d'une nouvelle méthodologie de R&D s'appuyant sur la CFD et des collaborations académiques fructueuses

Modèles Numériques

Simulateur de procédé
(hydrodynamique simplifiée)
Appareil / performances

Lois de comportement hydro.

Computational Fluid Dynamics
Propriétés de l'écoulement
(pertinentes pour le procédé)

*Modèles de fermeture
turbulence, diphasique*

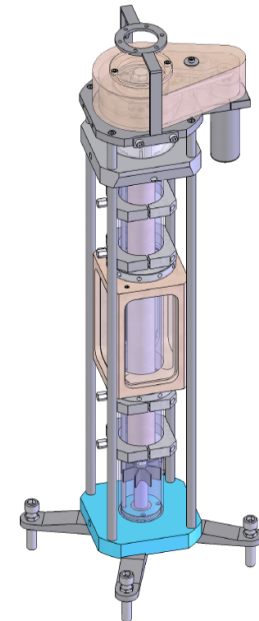
échelle « Locale » (eddy, goutte)
Simulation Numérique Directe

Etudes expérimentales

Micropilote
(validation)
Couplages chimie-transport

Maquettes hydrodynamiques
Différentes échelles

Prototypes Optiques
(PIV, PLIF, etc.)



Merci pour votre attention