

---

# MODÉLISATION PAR ANALYSE DIMENSIONNELLE ET STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE. APPLICATIONS EN GÉNIE DES PROCÉDÉS

**Karine Loubière et Laurent Prat**

[karine.loubiere@ensiacet.fr](mailto:karine.loubiere@ensiacet.fr); [laurent.prat@ensiacet.fr](mailto:laurent.prat@ensiacet.fr)

Laboratoire de Génie Chimique (LGC) - <http://www.lgc.cnrs.fr/>

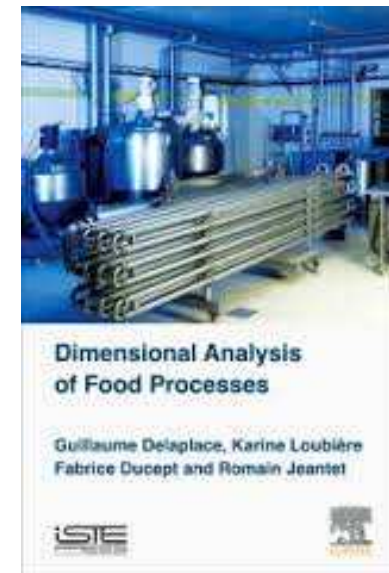
# MODÉLISATION PAR ANALYSE DIMENSIONNELLE

- *Objectif - Définition*
- *A quelles problématiques répond l'A.D. ?*
- *Intérêts*
- *Exemples*



Mai 2014  
Collection TEC&DOC  
Editeur : Lavoisier  
464 pages

G. Delaplace (INRA, UMET, Lille)  
R. Jeantet (Agrocampus Ouest, Rennes)  
F. Ducept (AgroParis Tech, Massy)  
K. Loubière (CNRS, LGC, Toulouse)



Septembre 2015  
Editions ISTE  
Imprint : Elsevier  
356 pages

**MODÉLISATION PAR ANALYSE DIMENSIONNELLE**

## *Couplage*

Thèse de L. Violet (2015)

Violet et al (2016), *Chem. Eng. Res. Des.* 114 39-51

**STRATÉGIE EXPERIMENTALE**

## MODÉLISATION PAR ANALYSE DIMENSIONNELLE

Etablir des corrélations (ou **lois d'échelle** ou **relations de procédé**) mettant en jeu des **nombres sans dimension** (nombres  $\pi_i$ ) décrivant les relations de causes à effets entre les conditions opératoires imposées (**variables d'entrée**) et les variables de sortie (**variables cibles ou d'intérêt**) du système étudié

ENTREE  
ETAT INITIAL



Systeme  
Procédé  
Boite noire



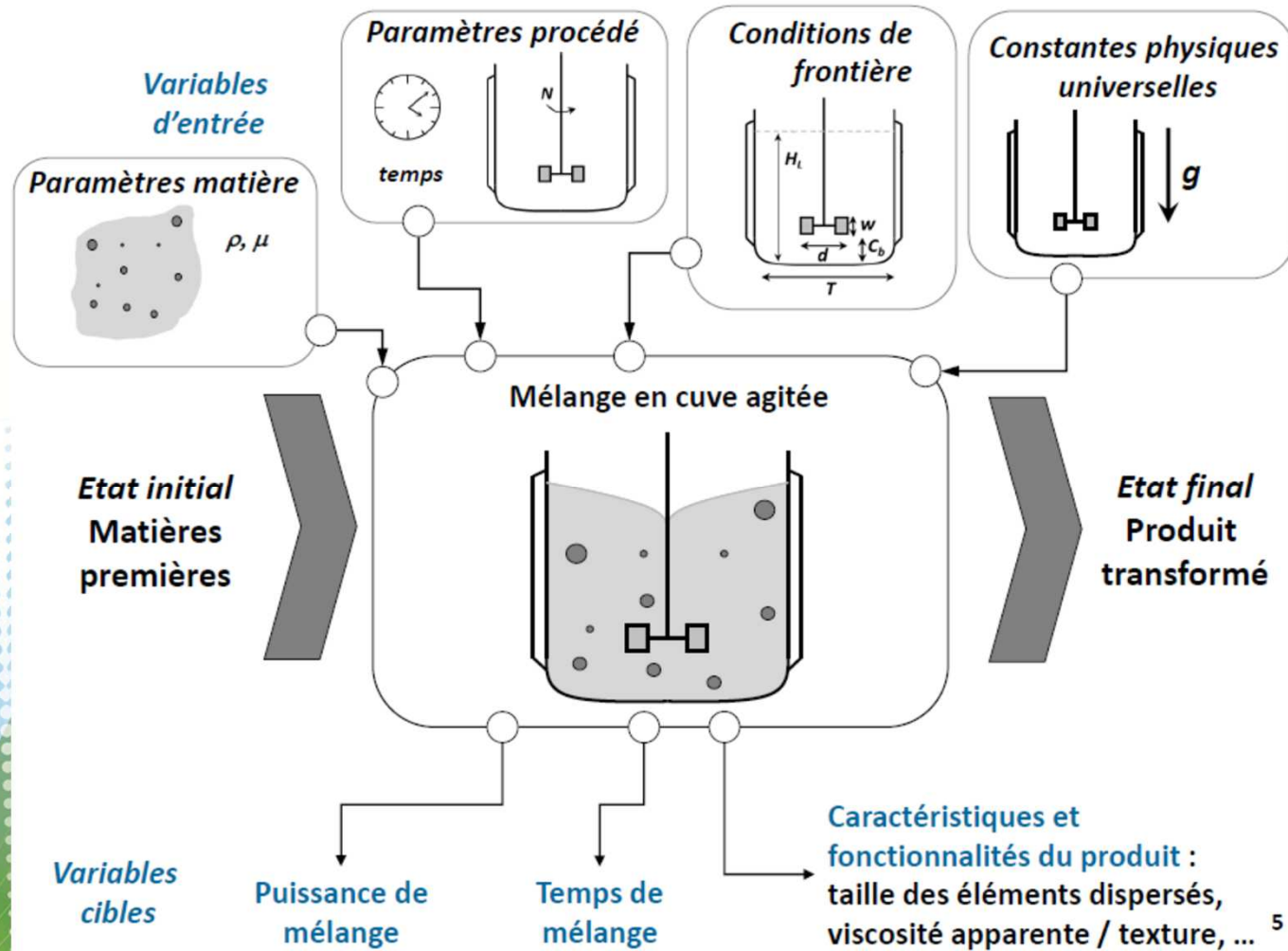
SORTIE  
ETAT FINAL

# Objectif - Définition

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE



L'Analyse Dimensionnelle, c'est une « *technique mathématique* » pour **lister et regrouper les variables dimensionnelles afin de faire apparaître des nombres sans dimension**

❖ Principe d'homogénéité

*La formulation mathématique proposée pour décrire un phénomène physique doit être dimensionnellement homogène.*

L'Analyse Dimensionnelle, c'est une « *technique mathématique* » pour **lister et regrouper les variables dimensionnelles afin de faire apparaître des nombres sans dimensions**

## ❖ Théorème de Vaschy-Buckingham

Toute grandeur physique représentant un phénomène (c'est-à-dire toute variable cible  $V_1$ ) fonction de  $m$  grandeurs physiques indépendantes,  $V_i$ , mesurées par  $n_d$  dimensions fondamentales,  $d_k$ , peut être décrit par une fonction implicite entre  **$(m-n_d)$  nombres sans dimension  $\pi_i$** .

$$V_1 = f(V_2, V_3, V_4, \dots, V_m) \quad \longrightarrow \quad \pi_1 = F(\pi_2, \pi_3, \pi_4, \dots, \pi_{m-n_d})$$

Avec 
$$\pi_i = \frac{V_i}{\prod_k V_k^{a_{ik}}}$$

Ces dimensions fondamentales doivent être issues d'un système cohérent d'unités.

Ex: Système International : [L] m, [M] kg, [T] s, [K] K, [N] mol, [I] A, [I<sub>v</sub>] cd

L'Analyse Dimensionnelle, c'est une « *technique mathématique* » pour **lister et regrouper les variables dimensionnelles afin de faire apparaître des nombres sans dimensions**

- Principe d'homogénéité
- Théorème de Vaschy-Buckingham



**A.D. ne permet pas de déterminer la forme mathématique de la relation de procédé entre les nombres sans dimension**



**Expérimentations sur maquette et/ou numériques**



1

## Maitriser les procédés à *une échelle donnée*

*Principalement*

- Contrôler les caractéristiques finales d'un produit ou d'une phase en maitrisant les conditions opératoires imposées
- Établir les performances optimales d'un équipement parmi l'ensemble des possibilités de réglages, notamment au regard des contraintes sociétales et économiques

# A quelles problématiques répond l'A.D. ?

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE

1

Maitriser les procédés à *une échelle donnée*

2

Raisonner un scale-up ou un scale-down

*Principalement*

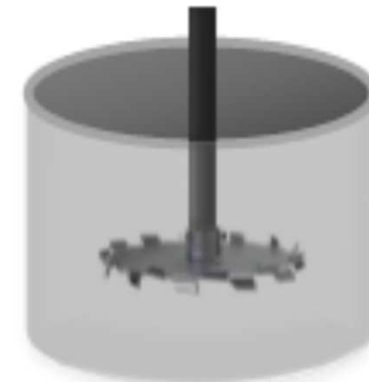
- Représenter de façon synthétique la connaissance pour déterminer et comparer les points de fonctionnement aux 2 échelles



$\times F$



**Théorie de similitude**



***Conservation du point de fonctionnement***

1

## Une technique de modélisation qui reste envisageable quand la modélisation « théorique » reste défailante / impossible

- Impossibilité de formaliser et/ou résoudre théoriquement le jeu d'équations différentielles décrivant le système
- Les modèles numériques à mettre en place pour avoir une résolution approchée sont
  - souvent incomplets
  - et/ou insuffisamment précis pour décrire la physique des phénomènes (e.g. *turbulence, transferts couplés, interactions entre phases, lois de comportement*)
  - et/ou souvent trop longs à développer et coûteux en temps de calcul

### Analyse dimensionnelle « aveugle »

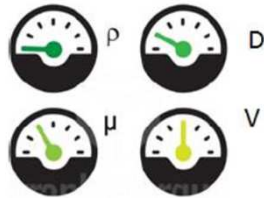
$$V_1 = f(V_2, V_3, V_4, \dots, V_m) \quad \longrightarrow \quad \pi_1 = F(\pi_2, \pi_3, \pi_4, \dots, \pi_{m-n_d})$$

**Quel que soit le niveau de connaissances physiques sur le procédé dont on dispose**

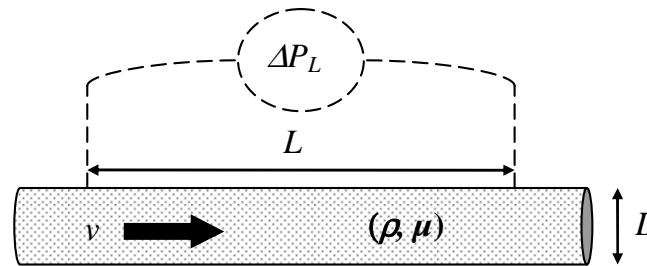
2

## Une technique de modélisation qui donne une vision synthétique des mesures du système

Exemple: perte de charge linéique  $\Delta P_L$  ( $\text{Pa}\cdot\text{m}^{-1}$ ) lors de l'écoulement d'un fluide newtonien dans un conduite cylindrique droite et lisse en régime établi



4 variables dimensionnelles



Analyse dimensionnelle



$$Re = \frac{\rho \cdot V \cdot D}{\mu}$$

1 nombre sans dimension

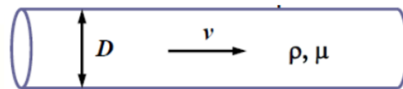
Cette transformation s'accompagne d'une **réduction du nombre de mesures responsables de l'évolution du système**

→ *vue synthétique des commandes*

3

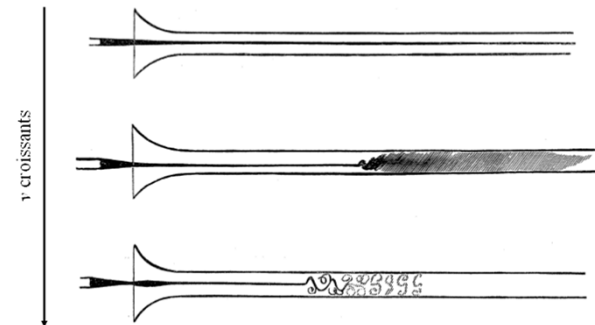
Une technique de modélisation qui fait apparaître des nombres sans dimension doté d'un sens physique : *classifier les phénomènes*

O. Reynolds (1842-1912) : Etude des écoulements de liquides dans des conduites  
*Visualisation des régimes d'écoulement via dispersion d'un colorant*



Régimes laminaire vs turbulent

$Re = 2000$



$$F_i = m \cdot a = \rho \cdot v^2 \cdot D^2$$

$$Re = \frac{F_i}{F_v} \quad \rightarrow \quad Re = \frac{\rho \cdot V \cdot D}{\mu}$$

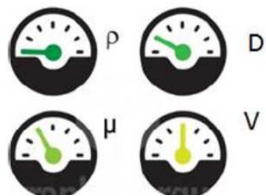
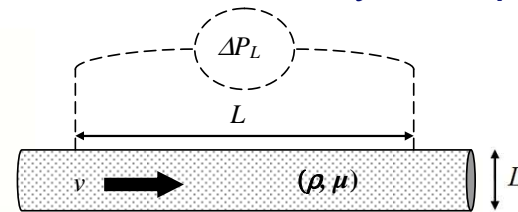
$$F_v = D^2 \cdot \mu \cdot \frac{v}{D} = \mu \cdot v \cdot D$$

le niveau de turbulence est d'autant plus élevé que la valeur de  $Re$  est grande, c'est-à-dire que les forces d'inertie (convection) l'emportent sur les forces liées aux frottements visqueux.

4

Un formalisme qui permet de réduire le nombre d'expériences pour identifier rapidement la relation entre conditions opératoires et variables cibles

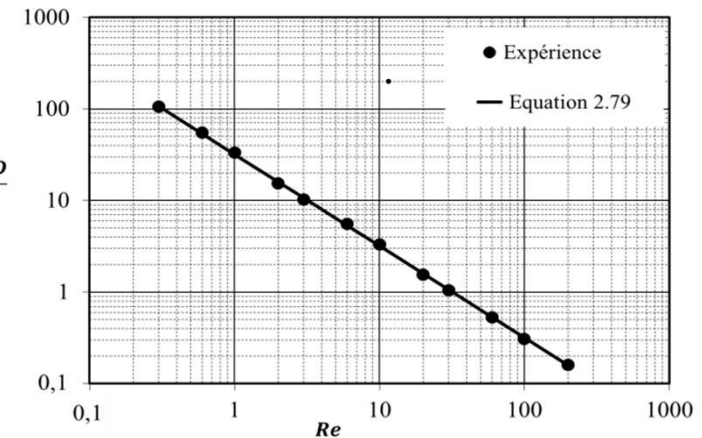
Exemple: perte de charge linéique  $\Delta P_L$  ( $\text{Pa}\cdot\text{m}^{-1}$ ) lors de l'écoulement d'un fluide newtonien dans un conduit cylindrique droite et lisse en régime établi



Analyse dimensionnelle

4 variables dimensionnelles  
6 valeurs / variables  
→  $6^4$  essais = 1296 essais

$$\frac{\Delta P_L \cdot D}{\rho \cdot v^2}$$

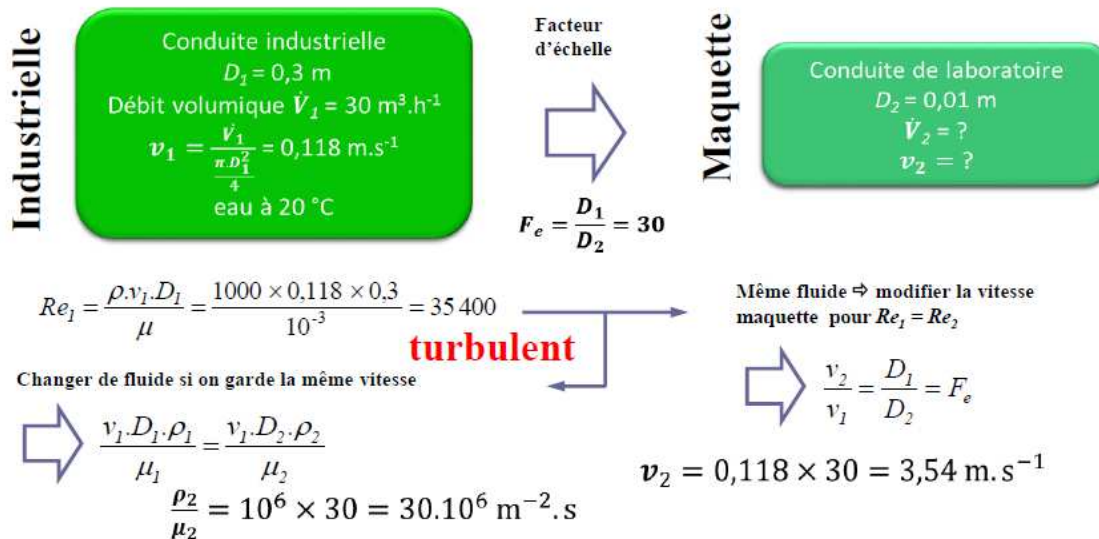


5

## Une technique permettant de bâtir des modèles génériques utilisables à d'autres échelles

Ex: Ecoulement d'un fluide newtonien dans un conduite cylindrique droite lisse

- **Re = idem** → même régime d'écoulement
- **Re ≠ idem** → rien de garanti que les phénomènes liés à l'écoulement (e.g. perte de charge) seront identiques aux 2 échelles



- Théorie de similitude *complète vs. partielle*
- Notions de *configuration du système* et de *point de fonctionnement*

# Exemples

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE



## Procédés de mélange en cuve agitée

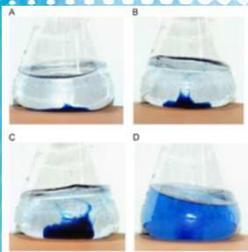
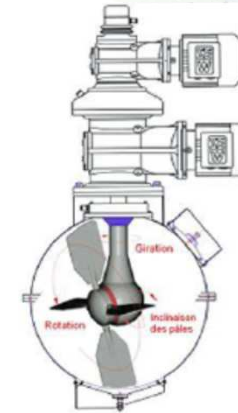
- Puissance consommée
- Temps de mélange
- Agitation planétaire

Temps de réhydratation et mélange de poudres

Foisonnement par battage

Broyage de la pâte de surimi

Encrassement d'un échangeur à plaques par une solution protéique laitière



Mise en suspension de microporteurs en réacteurs à agitation orbitale

[ Olmos et al (2015). *Chem. Eng. Sci.* 122: 545–554 ]



## Extension de la méthode en présence d'une propriété physique non constante



### Exemples

Fluides non newtoniens  
Dépendance de propriétés à la température  
Etc.

### Notion de *fonction matériau*

Puissance par un système d'agitation à rubans hélicoïdaux en présence de fluides pseudoplastiques  
Transfert de matière gaz-liquide en cuve agitée en présence de fluides non newtoniens  
Chauffage ohmique

## STRATÉGIE EXPERIMENTALE

- *Objectifs, Intérêts*
- *Couplage à l'AD*

Thèse de S. Issanchou (2002) - Solvay, Thèse de L. Violet (2015) - Sanofi

Issanchou et al (2003), *Chem. Eng. Sci.* 58 1805-1813

Issanchou et al (2005), *AIChE J.* 51 1773-1781

Violet et al (2016), *Chem. Eng. Res. Des.* 114 39-51

# Contexte

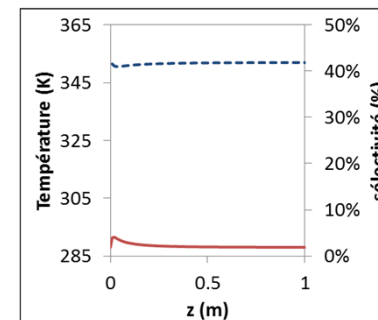
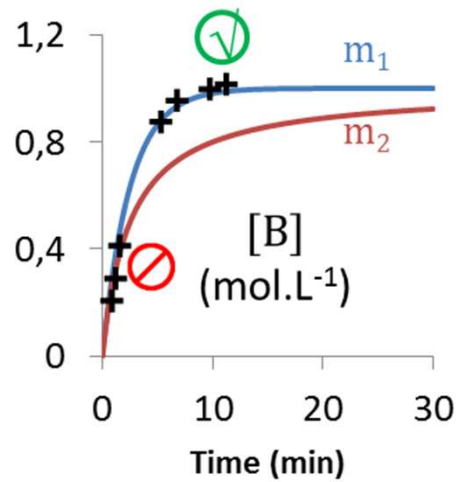
ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

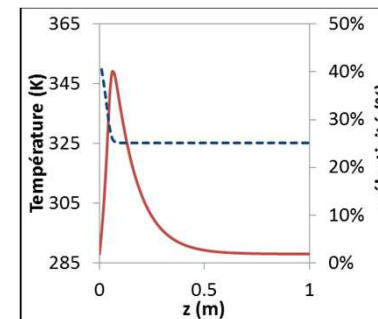
COUPLAGE

- **Concevoir les expériences permettant**
  - d'identifier au mieux les paramètres d'un modèle
  - de discriminer des modèles

- **Concevoir les expériences permettant**
  - d'identifier au mieux les paramètres d'un modèle
  - de discriminer des modèles



*ISOTHERME*



*NON-ISOTHERME*

— Température  
- - - Sélectivité

# Cas d'étude

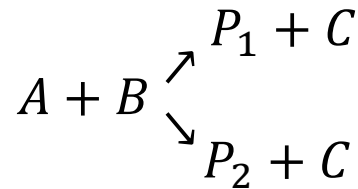
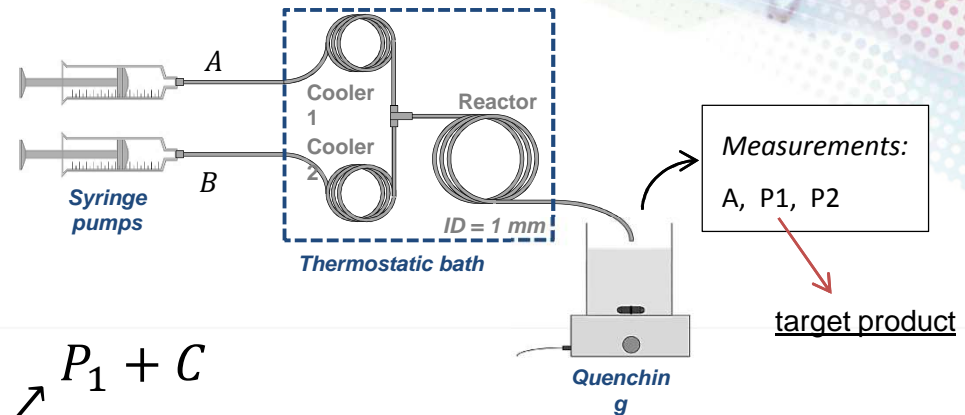
ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE

## Microréacteur

Diamètre	1 mm
Epaisseur	0,3 mm
Longueur	Variable
Matériau	PFA



$$\Delta_r H = -290 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

## • Objectifs

- Identifier les **paramètres cinétiques de 2 réactions**
- Vérifier si le **microréacteur a un comportement isotherme**

→ Discriminer le comportement thermique (isotherme ou non), en utilisant juste des mesures de concentrations  $A$ ,  $P_1$  and  $P_2$  concentrations (sans mesure de  $T$ )

# Stratégie itérative

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE

*Experimental expertise  
knowledge and know-how in  
chemistry*

Preliminary  
experiments

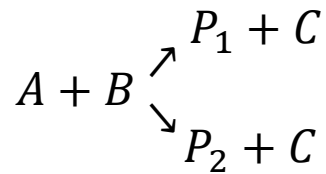
*Programming, mathematical tools*

# Expériences préliminaires

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

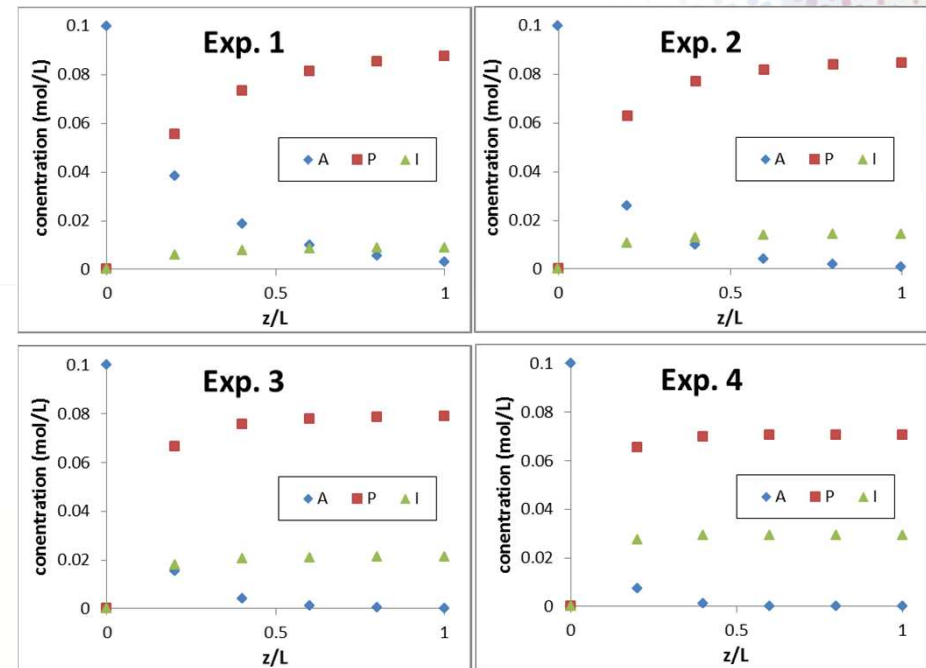
COUPLAGE



	$[A]_0$ $\text{mol.L}^{-1}$	$[B]_0$ $\text{mol.L}^{-1}$	$T_0$ (K)	$\tau_{\text{max}}$ (s)
Exp. 1	0,1	0,2	293 (20°C)	45
Exp. 2			303 (30°C)	
Exp. 3			313 (40°C)	
Exp. 4			323 (50°C)	

$T_0$  = inlet temperature

$\tau_{\text{max}}$  = maximum residence time



⇒ Seules les concentrations en A,  $P_1$ , and  $P_2$  sont mesurées, à différentes longueurs de microréacteur

# Stratégie itérative

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE

*Experimental expertise  
knowledge and know-how in  
chemistry*

Preliminary  
experiments

Model  
propositions

*Programming, mathematical tools*

*Expertise in chemistry and  
kinetics*



# Proposition de modèles

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

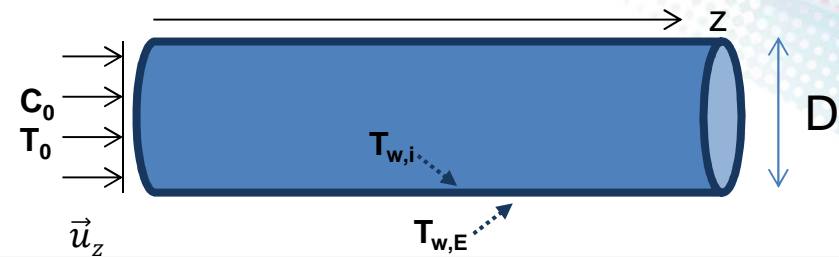
COUPLAGE

- Modèles

- Réacteur piston

- Transfert thermique :

- **H1: Isothermal**
- **H2: Isoperibolic**



Material balance

$$r_i = k^0_i \exp\left(-\frac{Ea_i}{RT}\right) [A][B]$$

$$\frac{d[A]}{dz} = \frac{d[B]}{dz} = -\frac{d[C]}{dz} = -\frac{1}{u_z} (r_1 + r_2)$$

$$\frac{d[P_i]}{dz} = \frac{1}{u_z} r_i$$

Heat

balance

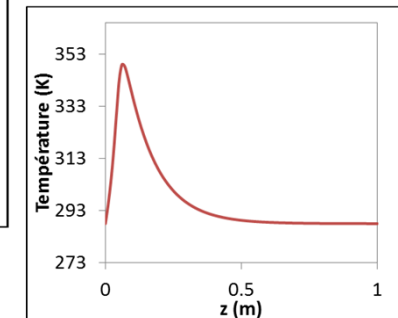
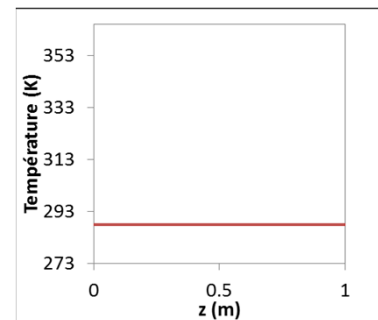
$$\frac{dT}{dz} = ?$$

isotherme

isopéribolique

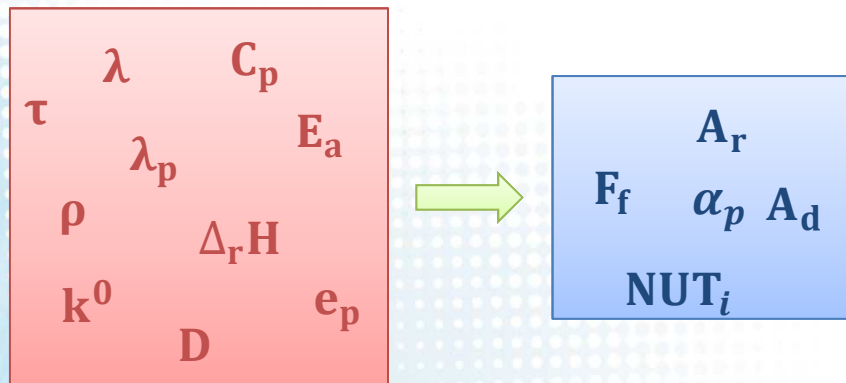
$$\frac{dT}{dz} = 0$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{1}{\rho c_p} \left[ \sum_j (\Delta_r H_j \times r_j) - h_i (T - T_{p,i}) (4/D) \right]$$



## Formalisme basé sur des nombres sans dimension

- Réduction du nombre de variables
- Extrapolation
- Sens physique



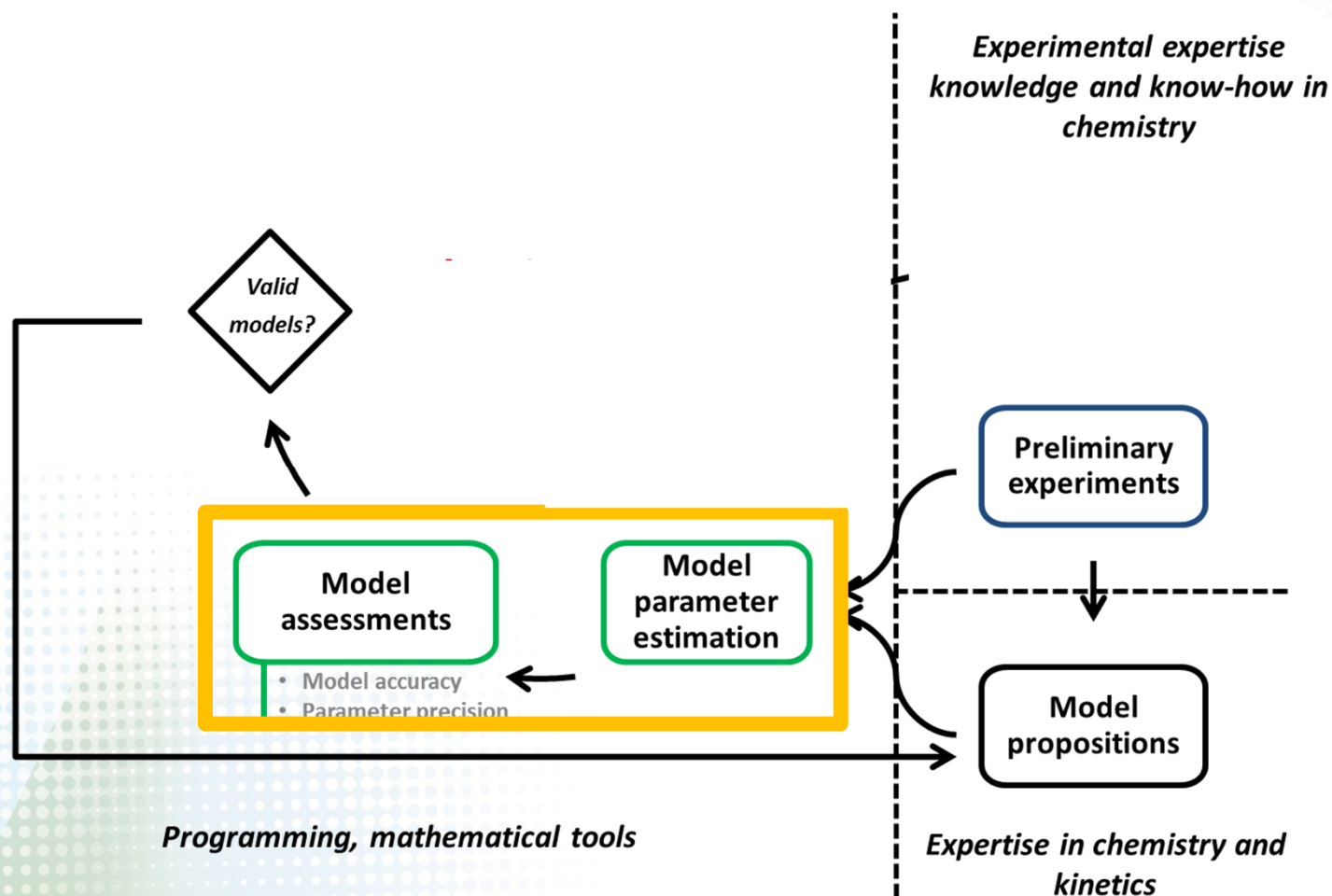
Name	Symbol	formula
Frequency factor number	$F_f$	$F_f = \tau \times k^0 C_{\text{ref}}^{n-1}$
Arrhenius number	$Ar$	$Ar = \exp\left(-\frac{E_a}{RT_{\text{ref}}}\right)$
Adiabatic number	$Ad$	$Ad = -\frac{\Delta_r H C_{\text{ref}}}{\rho C_p T_{\text{ref}}}$
Heat NTU	$NTU_i$	$N_{\text{th}} = \tau \times \frac{h_i}{\rho C_p} \times \frac{4}{D}$
Material number	$\alpha_p$	$\alpha_p = \frac{1}{1 + \frac{\lambda e_p}{\lambda_p D} Nu_i}$

# Stratégie itérative

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE



# 1<sup>ère</sup> estimation des paramètres

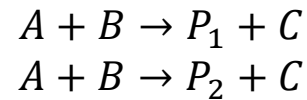
ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE

## Modèle ISOTHERME

$k_1^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	7,54.10 <sup>3</sup>
$k_2^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	3,99.10 <sup>9</sup>
$Ea_1$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	23,2
$Ea_2$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	60,8



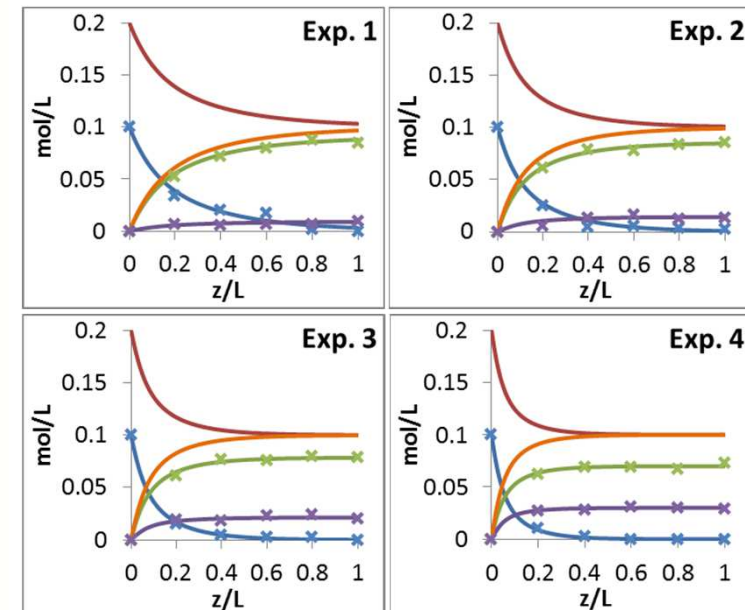
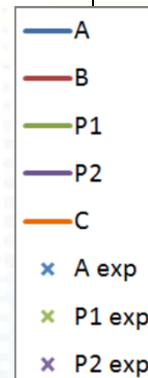
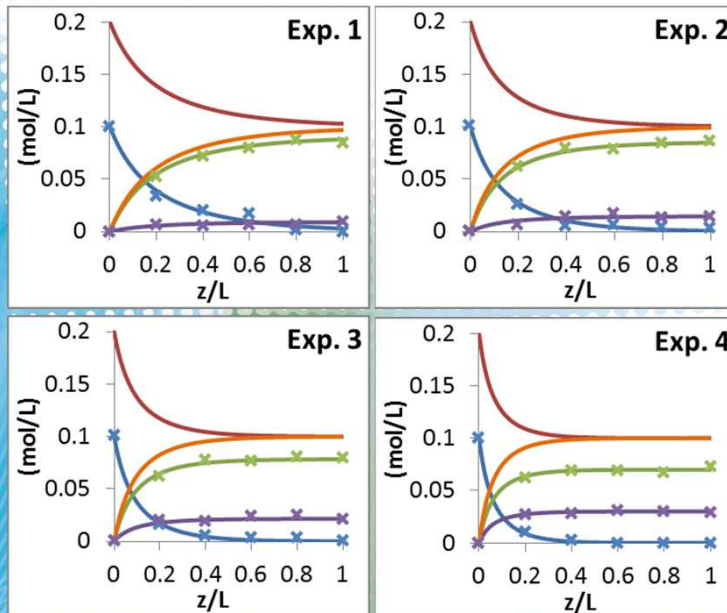
$$\chi^2_{n_m - n_p, 95\%} = 50,0$$

$$RSS = 18,6 \quad RSS = 18,2$$

## Modèle ISOPERIBOLIQUE

$k_1^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	5,36.10 <sup>3</sup>
$k_2^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	1,50.10 <sup>9</sup>
$Ea_1$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	22,5
$Ea_2$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	58,8

➔ Points expérimentaux sont décrits avec les 2 modèles

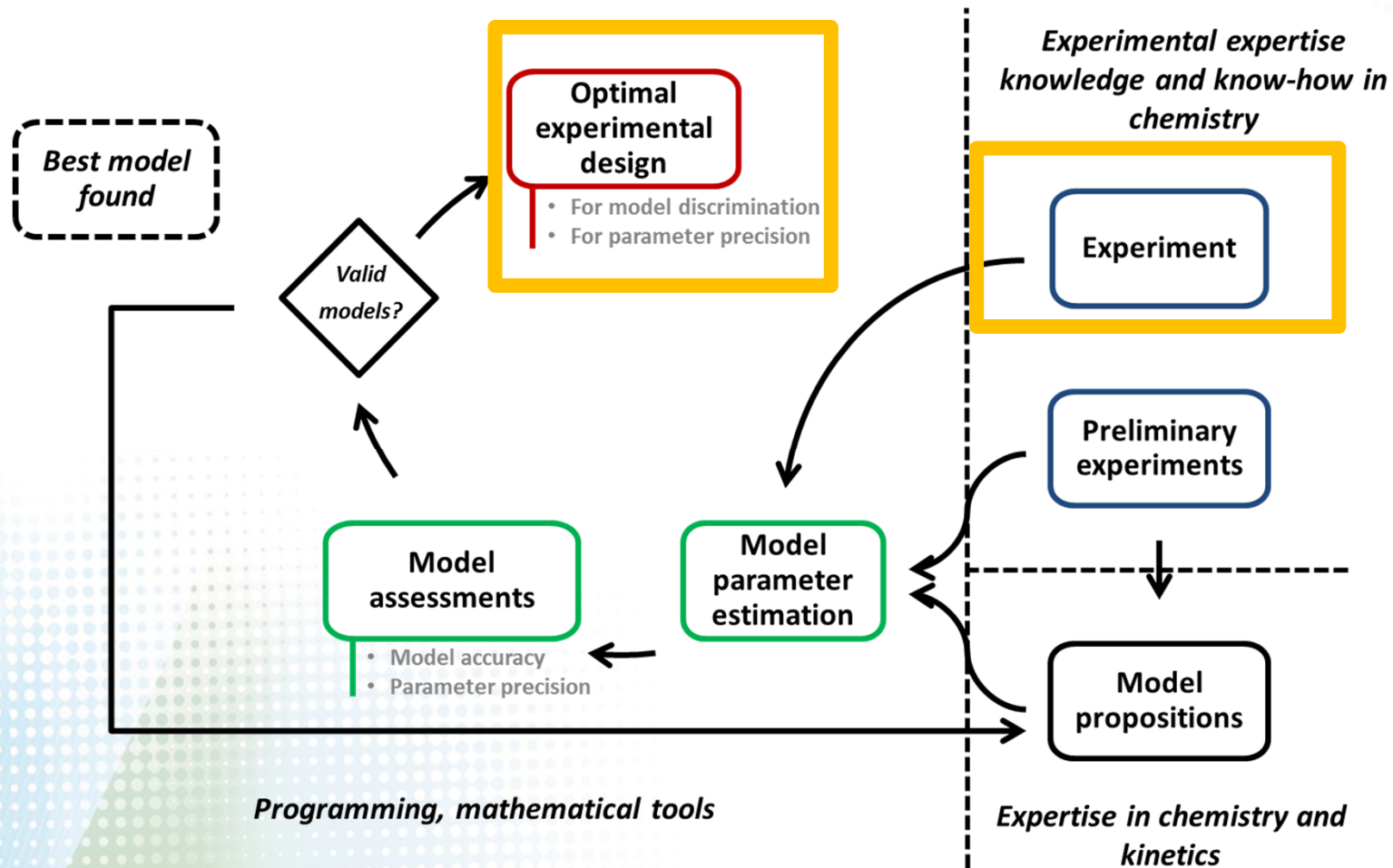


# Stratégie itérative

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

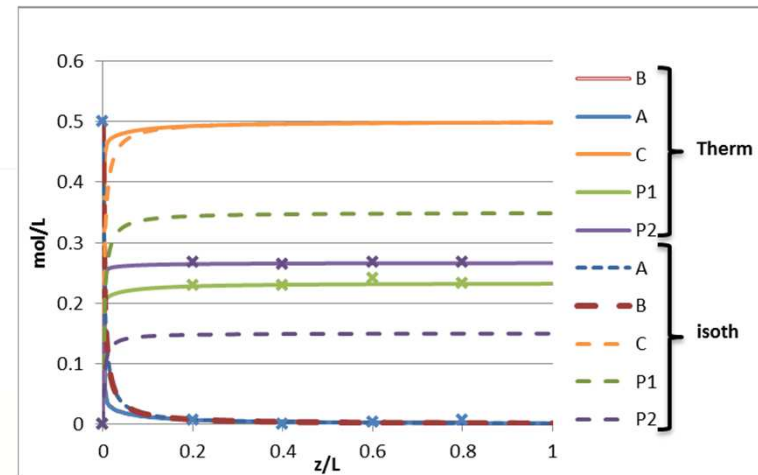
COUPLAGE



## Design

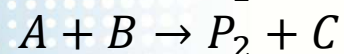
Experimental variables	Min	Max	Optimal
$[A]_0$ (mol.L <sup>-1</sup> )	0,05	0,5	0,5
$[B]_0$ (mol.L <sup>-1</sup> )	0,05	0,5	0,5
$T_0$ (°C)	20	50	50
$\tau_{max}$ (s)	20	600	600

## Données expérimentales et Prédictions des modèles



Stratégie expérimentale :

- ➔ condition pour une forte augmentation de température
- .... différentes activations de la réaction selon T

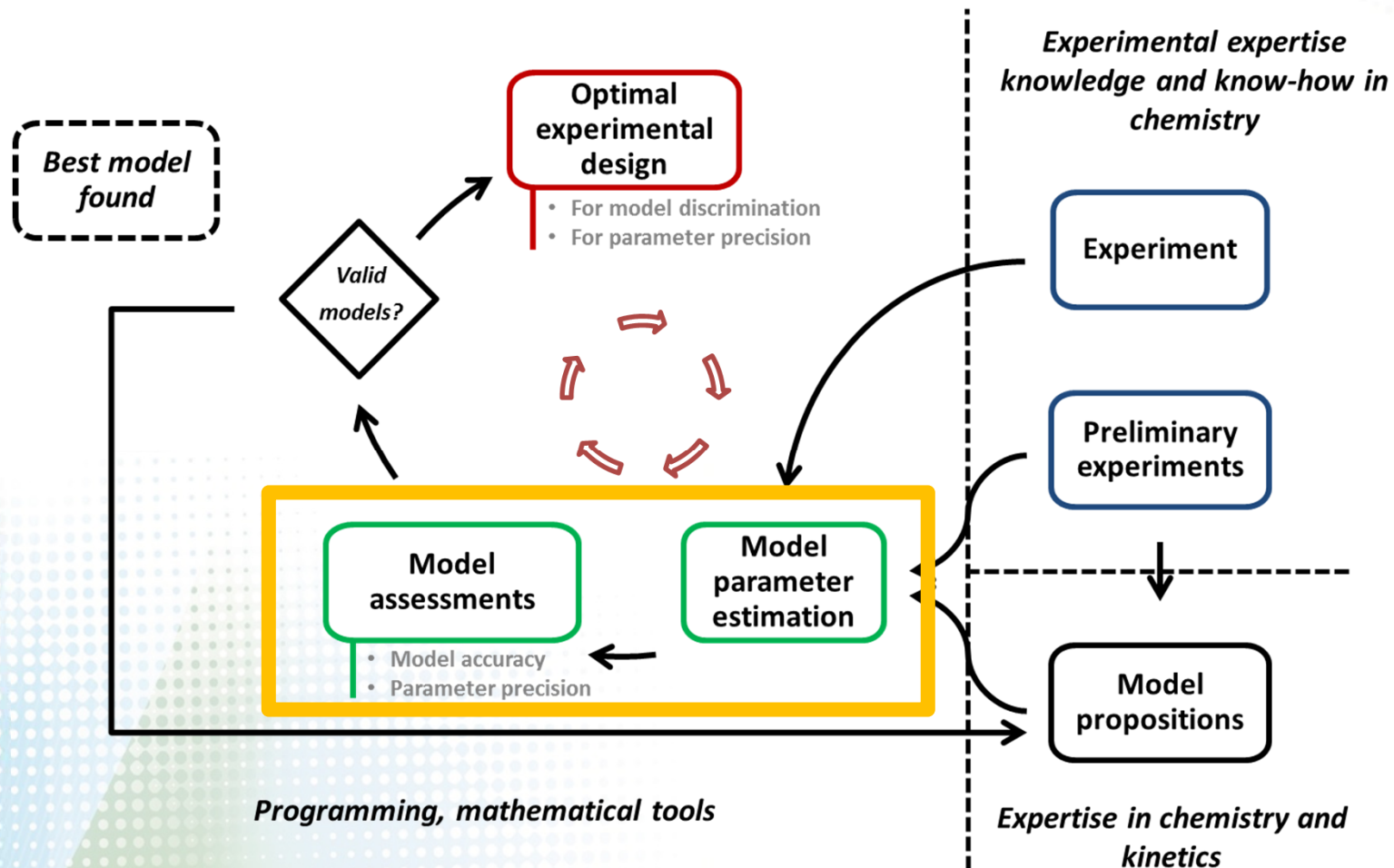


# Stratégie itérative

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE



# Estimation paramètres du modèle

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE

## Modèle ISOTHERME

After Exp. N°4

$k_1^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	7,54.10 <sup>3</sup>
$k_2^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	3,99.10 <sup>9</sup>
$Ea_1$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	23,2
$Ea_2$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	60,8

$RSS = 18,6$



After Exp. n°5

$k_1^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	5,60.10 <sup>3</sup>
$k_2^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	4,13.10 <sup>18</sup>
$Ea_1$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	22,5
$Ea_2$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	114

$RSS = 343,0$

Changement dans la valeur des paramètres

## Modèle ISOPERIBOLIQUE

After Exp. N°4

$k_1^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	5,36.10 <sup>3</sup>
$k_2^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	1,50.10 <sup>9</sup>
$Ea_1$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	22,5
$Ea_2$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	58,8

$RSS = 18,2$



After Exp. n°5

$k_1^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	6,92.10 <sup>3</sup>
$k_2^0$ (L.mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	1,67.10 <sup>9</sup>
$Ea_1$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	23,1
$Ea_2$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	59,0

$RSS = 26,5$

Paramètres sensiblement constants



# Adéquation du modèle

ANALYSE DIMENSIONNELLE

STRATÉGIE EXPÉRIMENTALE

COUPLAGE

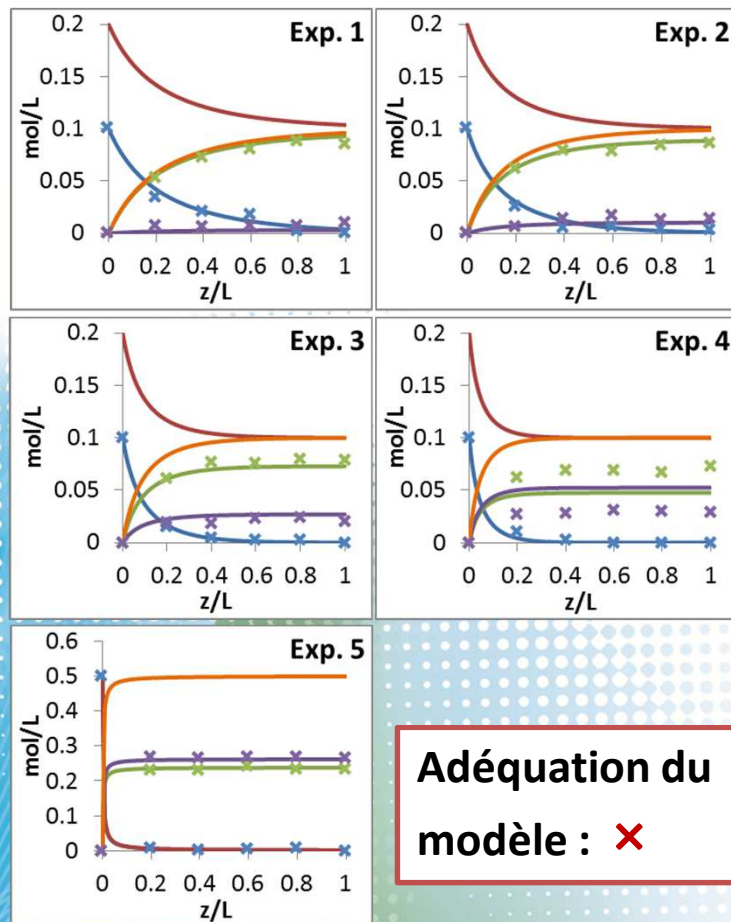
Modèle ISOTHERME

$RSS = 343,0$

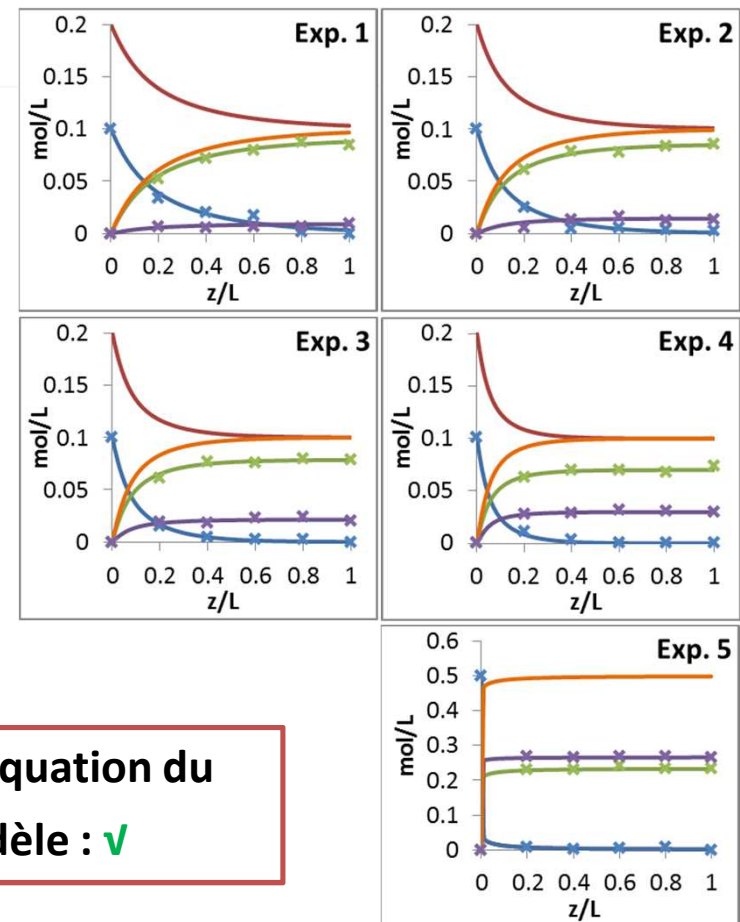
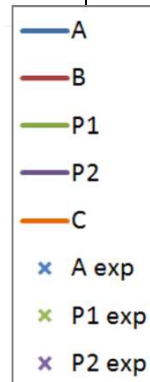
$$\chi^2_{n_m - n_p, 95\%} = 65,6$$

Modèle ISOPERIBOLIQUE

$RSS = 26,5$



Adéquation du  
modèle : ✘



Adéquation du  
modèle : ✔

# Conclusion

- **Analyse dimensionnelle**
- **Stratégie expérimentale – Conception optimale d'expériences**

Des outils de l'ingénieur au service du travail de modélisation

Des outils qui répondent à la complexité des systèmes multiphysiques.

Une manière d'intégrer et de consolider l'apport de savoir et du savoir-faire de l'expert.

Une manière de répondre à l'exigence de modèles plus précis pour concevoir des procédés plus propres, plus économes, plus sûrs.

## MERCI DE VOTRE ATTENTION

Karine Loubière et Laurent Prat

[karine.loubiere@ensiacet.fr](mailto:karine.loubiere@ensiacet.fr); [laurent.prat@ensiacet.fr](mailto:laurent.prat@ensiacet.fr)

Laboratoire de Génie Chimique (LGC) - <http://www.lgc.cnrs.fr/>