

Part. 2

Applications aux colonnes d'extraction liquide-liquide

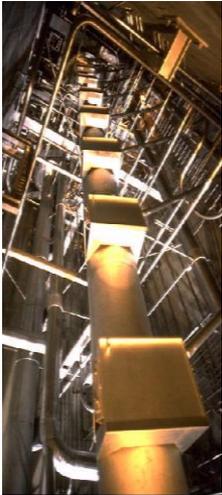
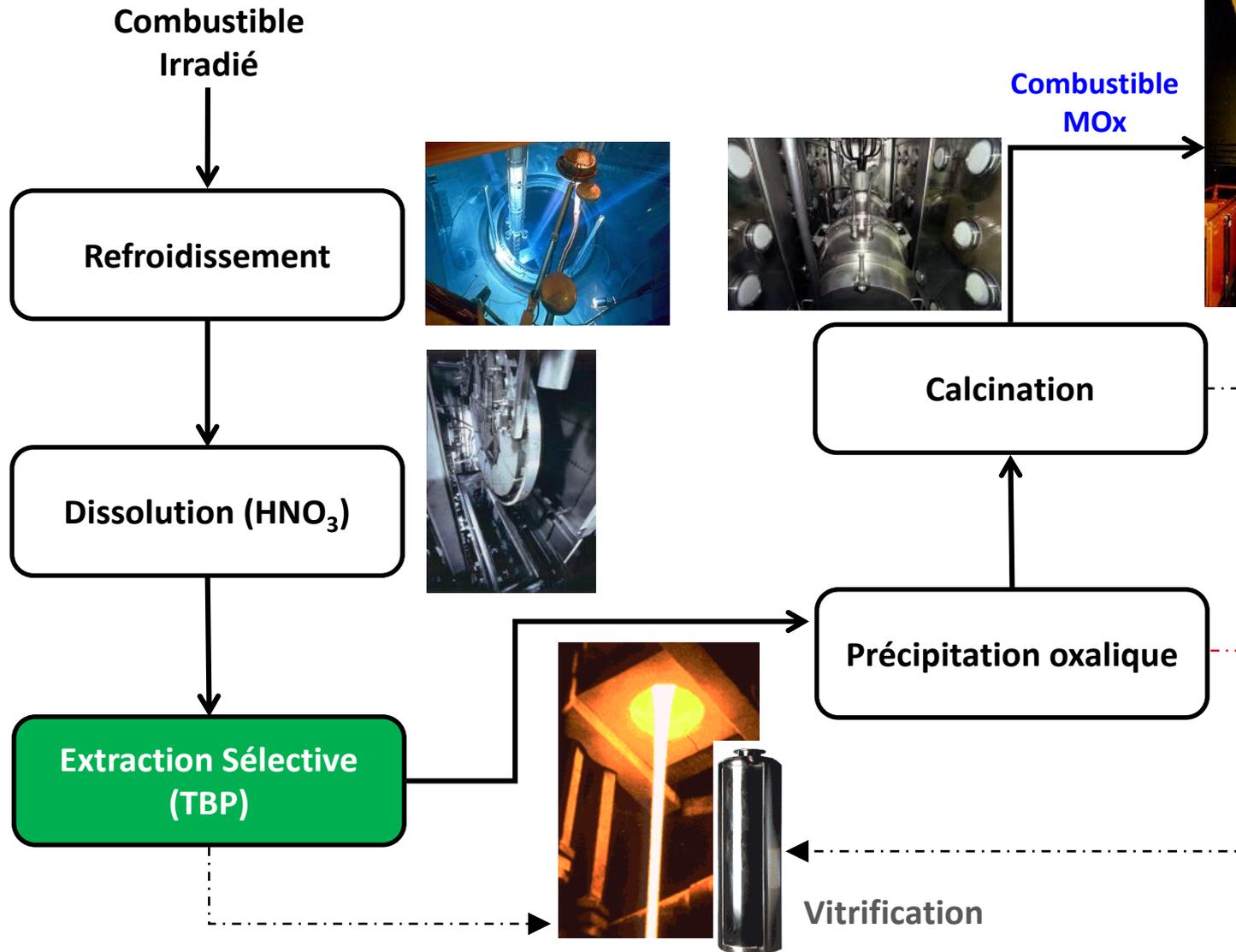
Sophie CHARTON

Département de recherche sur les procédés pour la Mine et le Recyclage du
Combustible

Service d'Analyses et d'Intégration Industrielle
CEA-MARCOULE

sophie.charton@cea.fr





- ✓ Caractéristiques recherchées :
- Surface de contact maximale entre les deux phases
 - Mélange axial minimal
 - Séparation des phases rapide dans les décanteurs

Appareils industriels de grande capacité vs. Pilotes R&D de taille minimale

Colonnes pulsées

Industrielle
(annulaire)



D 20 cm – H 8 m
1 m³/h

R&D (chaîne blindée)

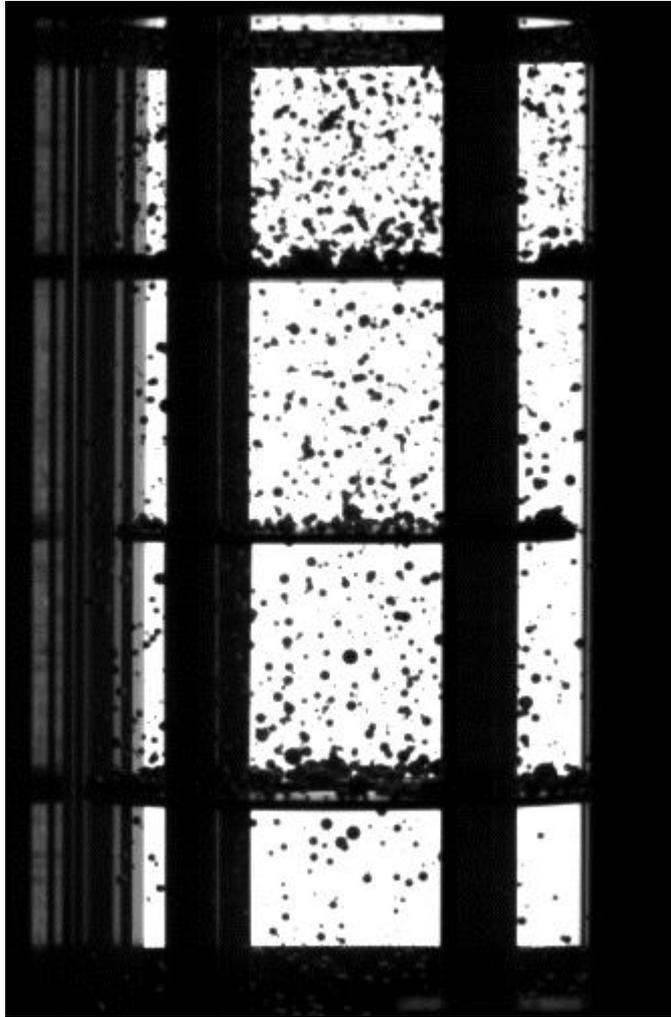


D 1,5 cm – H 4-6 m
1 L/h

Colonne Couette



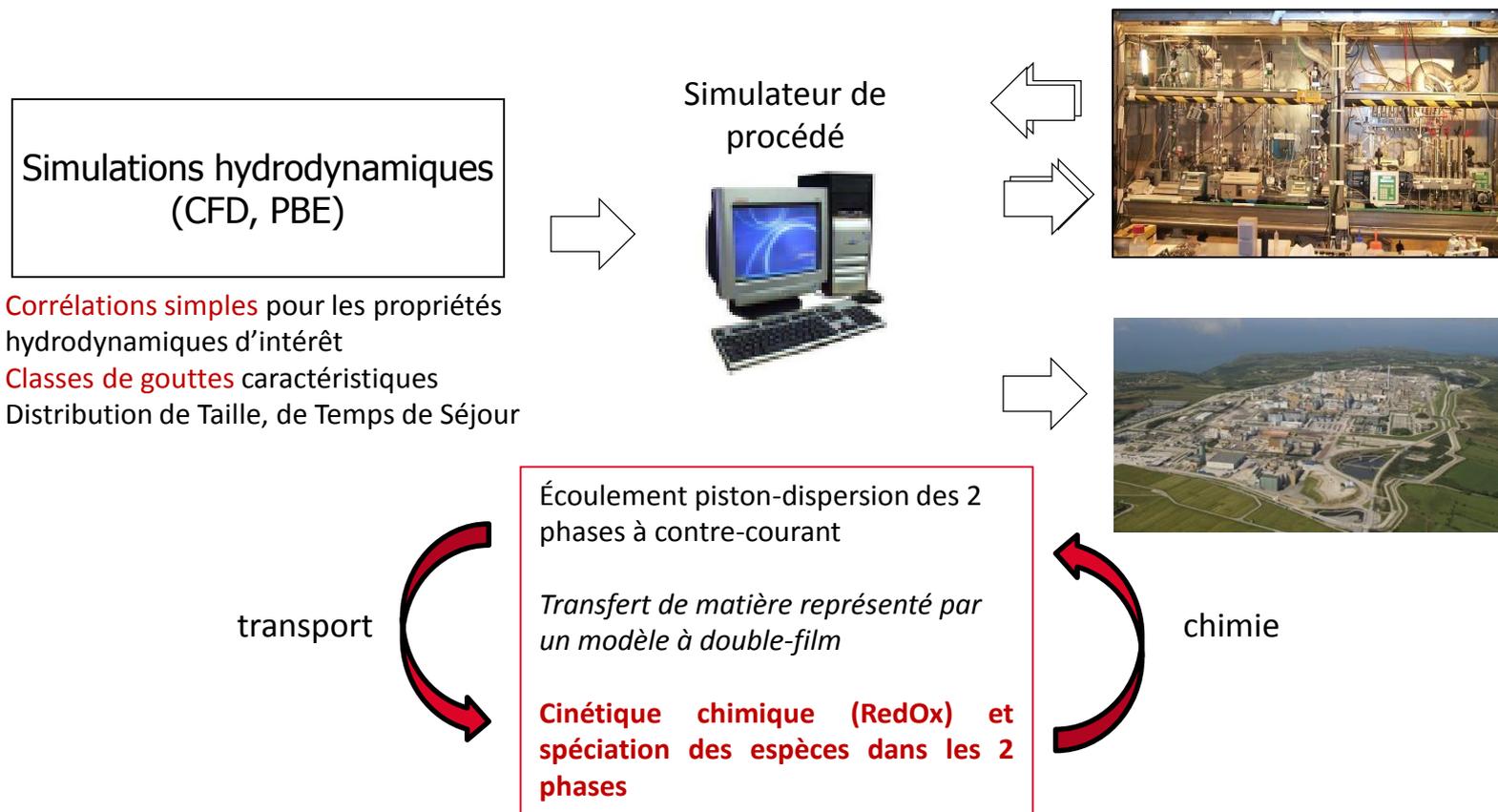
D 2 cm – H 0.7 m (jeu 1.5 mm)
100 mL/h



- ✓ Ecoulement périodique
 - Pulsation mécanique ou pneumatique
 - Dispersion d'huile dans l'eau ou d'eau dans l'huile
 - Contre-courant piloté par la gravité
- ✓ Différents types d'écoulements
 - Recirculations (collisions → *coalescence*, mélange axial)
 - Jets (cisaillement / turbulence → *rupture*)
 - Dépôt / rebonds sur le garnissage (mouillabilité)
- ✓ Distribution de tailles de goutte
 - Distribution de temps de séjour (mélange axial, engorgement)
 - Petites gouttes (rigides) et grosses gouttes (recirculations internes) → résistance au transfert de matière
 - Formes différentes (trainée, ...)

➤ *Performances fortement corrélées à l'écoulement*

- Simulateur de procédé basé sur une description hydrodynamique simplifiée
- **Nouvelle stratégie intégrant plus d'hydrodynamique** (changements d'échelle, nouveaux solvants, etc.)



1. Description plus fine de la phase dispersée (approche par PBE)

Gouttes en écoulement turbulent → modèle de Coualoglou et Tavlarides (1977)

Modèle de rupture

Énergie transmise pas le tourbillon
>
Energie de surface de la goutte

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

Propriétés des fluides

Dissipation turbulente moyenne

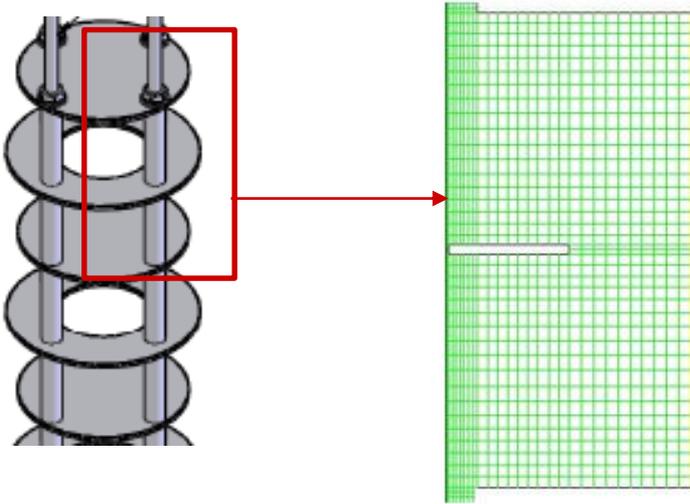
Paramètres empiriques

Modèle de coalescence

Fréquence (fluctuations turbulentes)
×
Efficacité des collisions (drainage du film)

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

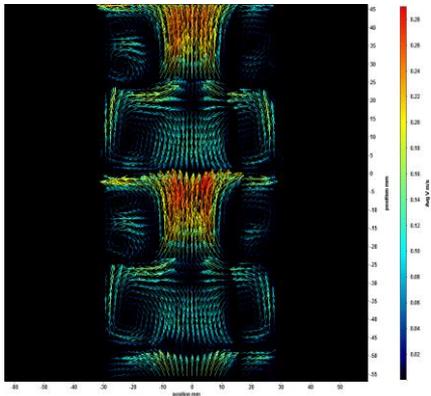
2. Simulation de l'écoulement de la phase continue



Approximation de Reynolds $\mathbf{U} = \bar{\mathbf{U}} + \mathbf{U}'$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{U}}) = 0$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla (\bar{\mathbf{U}}) \right) = \rho \mathbf{g} + \nabla_j \cdot (\bar{\sigma} - \rho \overline{\mathbf{U}' \otimes \mathbf{U}'})_{i,j}$$



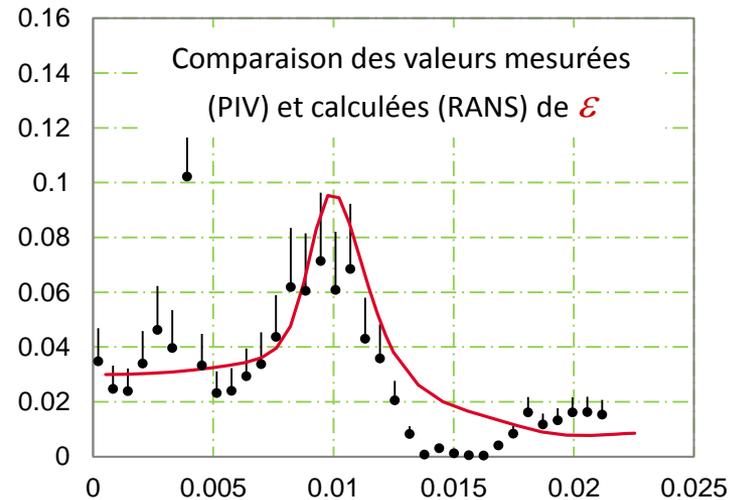
Champs de vitesse mesuré (PIV)

k énergie cinétique turbulente [m^2/s^2]

ϵ taux de dissipation turbulente [m^2/s^3]

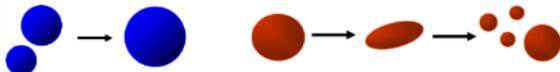
fonctions de \mathbf{U}'

Validation expérimentale de l'approche RANS



3. Identification des paramètres du modèle de coalescence-rupture

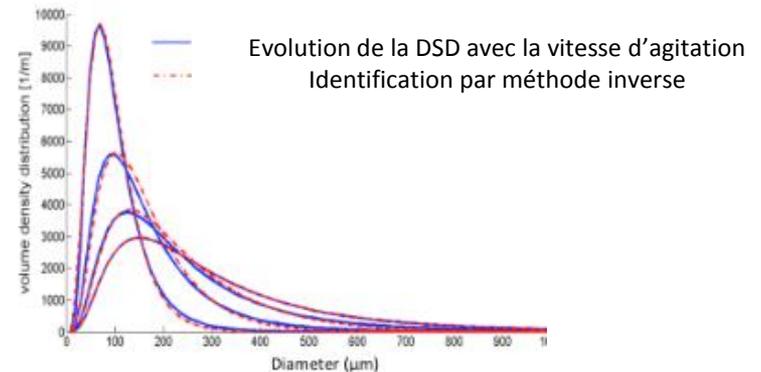
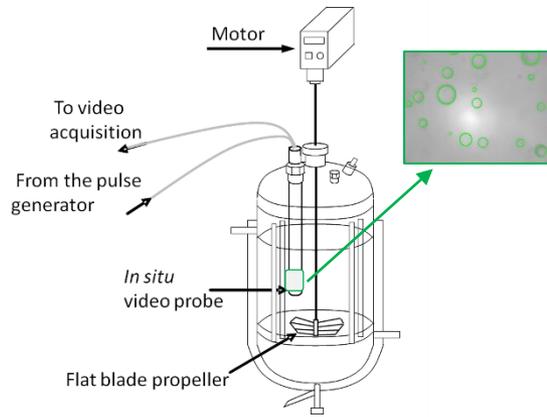
densité en nombre de gouttes de volume v au temps t

$$\frac{\partial n(t,v)}{\partial t} = S_v^{coal} + S_v^{break}$$


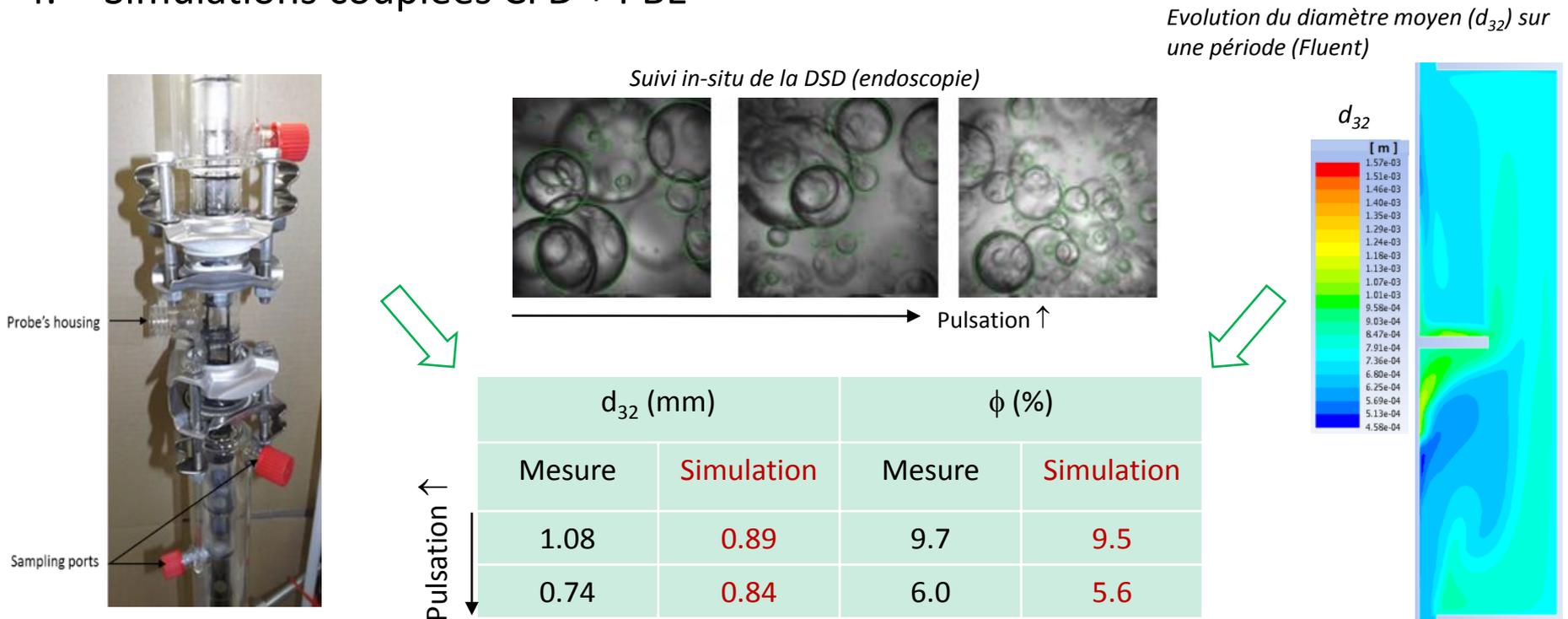
$$Q(v, v') = f'(\varepsilon, \gamma, \rho_c, \rho_d, \mu_c, \mu_d, d, d', \dots) \quad \Gamma(v) = f(\varepsilon, \gamma, \rho_c, \rho_d, \mu_c, \mu_d, d, \dots)$$

fraction de gouttes v fusionnées par unité de temps fraction de gouttes v fragmentées par unité de temps

⇒ Détermination des paramètres $C_1 - C_4$ à partir d'expériences en réacteur agité
NB : Même dissipation turbulente moyenne que dans la colonne pulsée

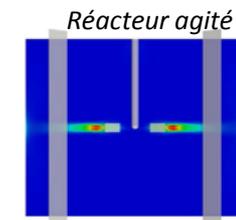
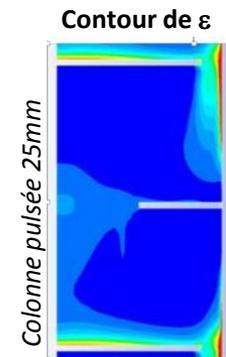


4. Simulations couplées CFD + PBE

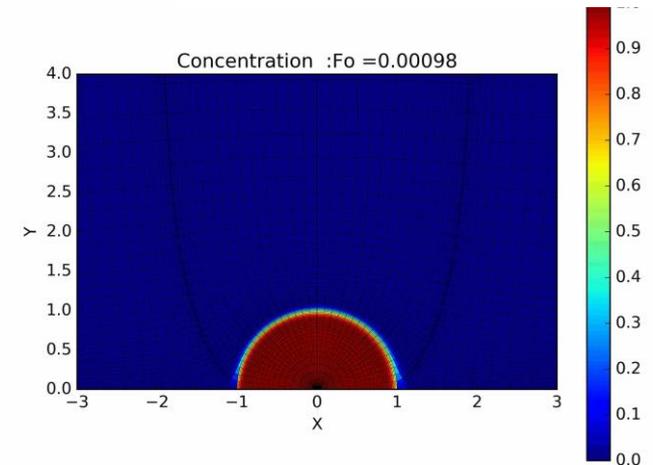
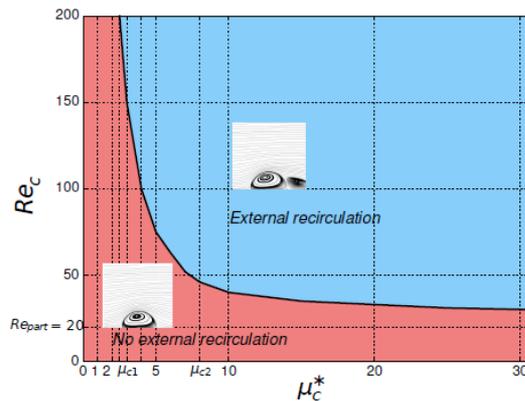
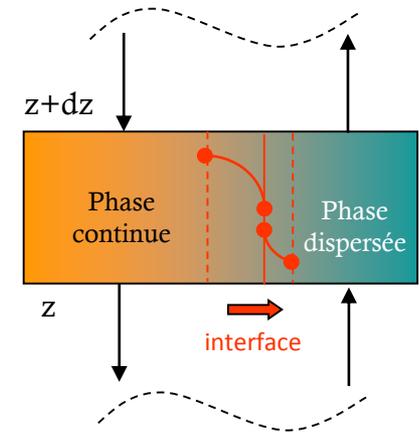


- ☑ Bonne reproduction des tendances observées expérimentalement
- ☒ Ajustement nécessaire des paramètres du modèle de C&T (réacteur agité) pour améliorer la précision
- ☒ Simulations longues et fastidieuses, inadaptées à notre besoin

- ✓ Développement de noyaux adaptés à nos besoins (changement d'échelle, de technologie, de solvant...)
 - Prenant en compte la non uniformité de la turbulence dans l'appareil (fonction de densité de probabilité), plutôt que la valeur moyenne
 - Influence de la viscosité de la phase continue (\downarrow turbulence?)
 - Gouttes caractérisées par 2 propriétés : taille et composition (application = transfert de matière)

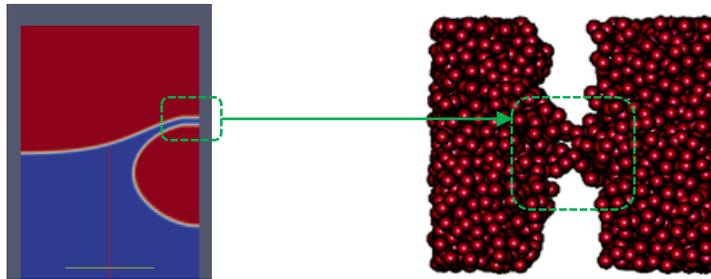


- ✓ Etude par Simulation Numérique Directe du transfert de matière entre une goutte et la phase continue en écoulement
 - Modèle du double film (dans le simulateur de procédé)
 - k_{ext} , k_{int} dépendent fortement de l'écoulement (couche limite, recirculations internes, etc.)
 - Et très difficiles à mesurer (pollution, etc.)
- Etude paramétrique par DNS
(propriétés des fluides, taille et forme de la goutte, coef. de distribution, écoulement, etc.)



✓ Approche multi-échelle de la coalescence

- Développement d'un modèle sous-maille de rupture du film basé sur la simulation moléculaire (interactions à faible distance), couplé à la DNS (approche et drainage du film)

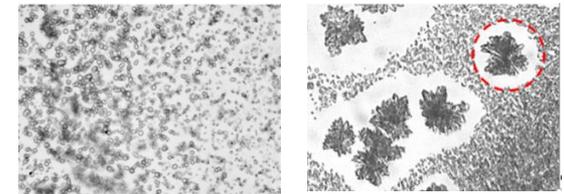


⇒ *Sujet de thèse « amont-aval » CEA/ICSM/IMFT à pourvoir !*

E. Vioque, S. Charton, E. Climent, D. Legendre, Numerical simulation of droplet coalescence: status and main issues, DEFI 2016 (poster)

✓ PBM pour le solide

- Nouveau modèle de **nucléation** dans le cadre de la théorie non classique (états amorphes intermédiaires mis en évidence lors de la précipitation d'oxalate de cérium)



⇒ *Sujet de thèse « amont-aval » en cours d'évaluation...*

I. Rodríguez- Ruiz, S. Charton, D. Radajewski, T. Bizien, S. Teychené, Ultra-fast precipitation of transient amorphous cerium oxalate in acidic high ionic strength media, ISIC 2017 (oral)

Co-auteurs CEA

Abdenour Amokane (PhD)

Simone Castellano (PhD)

Fabrice Lamadie

Hervé Roussel

Collaborations académiques:

F. Puel, N. Othman (LAGEP)

E. Climent, D. Legendre (IMFT)

A. Buffo, D. Marchisio (POLITO)

Merci pour votre attention !

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
Centre de Marcoule | 30207 Bagnols-sur-Cèze
T. +33 (0)4 66 79 62 29 (DMRC/SA2I/DIR)

Etablissement public à caractère industriel et commercial | R.C.S Paris B 775 685 019