UNIVERSITÉ DE LORRAINE

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

THÈSE

Présentée et soutenue publiquement pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université de Lorraine

Spécialité Génie des Procédés et Produits

Par

HAAG Jérémie

DÉVELOPPEMENT D'UNE MÉTHODOLOGIE DE LA « MODÉLISATION COMPARTIMENTALE » DES SYSTÈMES EN ÉCOULEMENT AVEC OU SANS RÉACTION CHIMIQUE À PARTIR D'EXPÉRIENCES DE TRAÇAGE ET DE SIMULATIONS DE MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE

Soutenue publiquement le 05 Décembre 2017

Composition du Jury :

Rapporteurs :	**M. Jack LEGRAND**, Professeur, Université de Nantes - ONIRIS, Laboratoire GEPEA UMR CNRS 6144
	M. Julien LAURENT, Maitre de conférences HDR, Université de Strasbourg - ENGEES, Laboratoire ICUBE UMR CNRS 7357
Examinateur :	**M. Christophe ANDRE**, Maitre de conférences HDR, Université de Lille - HEI, Laboratoire UMET UMR CNRS 8207
Directeur de thèse :	**M. Jean-Pierre LECLERC**, Directeur de recherche CNRS, laboratoire LRGP UMR CNRS 7274, en détachement à l'INRS. Chef du département Ingénierie des procédés INRS
Co-directrices de thèse :	**Mme Cécile LEMAITRE**, Maitre de conférences HDR, Université de Lorraine - ENSIC, Laboratoire LRGP UMR CNRS 7274
	Mme Caroline GENTRIC, Professeur, Université de Nantes IUT Saint Nazaire, Laboratoire GEPEA UMR CNRS 6144

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés UMR CNRS 7274 - 1 rue Grandville 54000 NANCY

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord mes encadrants pour la confiance qu'ils m'ont accordé en me confiant cette tâche, sans cela cette belle aventure n'aurait jamais débuté. Je remercie également les membres de mon jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ces travaux, sans cela cette longue aventure n'aurait jamais pu s'achever. Le périple de la thèse fût une épreuve plus difficile à supporter que je ne l'aurais imaginé. Je souhaite présenter mes excuses à toutes les personnes qui ont dû supporter ma mauvaise humeur liée aux aléas de la thèse. A ce sujet j'ai une pensée spéciale pour Margaux Leglaye.

A l'intention de mes encadrants. Caroline, on ne s'est presque pas côtoyé donc je n'ai pas eu la chance de véritablement te connaitre personnellement. Ton apport a été essentiellement scientifique pour me remettre dans le droit chemin lorsque je n'avais pas la bonne méthode de travail. Tu as toujours eu ce petit mot en fin de réunion pour me souhaiter bon courage et je t'en remercie. Cécile, je pense que tu es la personne la plus bienveillante que je connaisse. C'était un véritable plaisir de passer te voir après avoir eu Jean-Pierre au téléphone qui me disait qu'il était « très inquiet ». Toujours à relativiser et trouver une solution malgré les difficultés et jamais découragée par la montagne de travail devant nous, tu as été un véritable baume au cœur pour moi durant ces années et pour cela je te remercie. Jean-Pierre, tu m'as laissé travailler en toute autonomie tout en gardant un œil sur la direction dans laquelle je m'engageais en prenant le rôle de garde-fou lorsque je faisais un mauvais choix. Pour cela je te remercie car il est vrai qu'il m'est arrivé, peut-être à une ou deux reprises, de faire des choix discutables. Ce que j'ai aimé c'est que tu ne tournes pas autour du pot pour expliquer qu'il y a un problème. J'ai aimé aussi pouvoir défendre mes idées sans que tu te vexes malgré ta position hiérarchique. C'est toi qui a été le porteur de ce projet « modélisation compartimentale » et au début j'ai eu du mal à m'approprier le sujet. Je te remercie pour ta patience et les multiples exemples pédagogiques que tu as utilisé pour me faire comprendre les choses. Pêle-mêle ces exemples ressemblaient à cela : « Jérémie à une moto bleue. Jérémie à un véhicule à deux roues avec un moteur à explosion à quatre cylindres d'une puissance de 80 cv dont la couleur de la carrosserie est de couleur bleu clair azur. » ; « La fenêtre est ouverte, tu veux la fermer. Explique-moi ta méthode ! » ou encore « Voici une assiette de frites, je mets du ketchup dessus. Est-ce macroscopiquement homogène ou hétérogène ? ». Je peux vous assurer que je garde un très bon souvenir de ces anecdotes dont tu as le secret.

Je remercie tous ceux qui m'ont posé les sempiternelles questions du registre : « Mais ton sujet de thèse c'est quoi en fait ? ». Ces questions m'ont permis de poser un curseur sur mon niveau de maitrise du sujet. J'ai une pensée particulière pour Aubin Hirtz qui a été le plus curieux de mes amis « non-initiés ». Jamais satisfait de la réponse « bateau », il m'a fallu lui répondre clairement pour assouvir sa curiosité et cela a été un très bon exercice.

Une grande partie de ces travaux ont consisté à développer des algorithmes qui ont permis d'obtenir les résultats présentés. Je remercie Roda Bounaceur qui m'a donné de nombreux conseils en Fortran et Dassl et rendu de nombreux autres services également. Je me rappellerai de sa gentillesse naturelle et sa patience. Je remercie Guillerme Duvillié qui a clairement été le précurseur du développement de ces algorithmes. Je n'oublierai jamais ce moment où, lors de nos discutions où chacun expliquait à l'autre les difficultés rencontrées pendant ses travaux de thèse respectifs, il m'a dit avec sa manière bien à lui : « Espèce d'idiot ça c'est pas à toi de le faire, les ordinateurs sont beaucoup plus efficaces que toi pour réaliser cette tâche alors va me coder des algorithmes tout de suite ! ». Je remercie également Olivier Potier pour ses explications claires en ce qui concerne ses rappels théoriques de base sur le génie de la réaction chimique.

La rédaction du manuscrit peut se résumer par ce bon vieux dicton qui dit que Rome ne s'est pas faite en un jour. La qualité finale de ce document n'aurait pas été la même sans l'aide de certaines personnes. Tout d'abord je tiens à souligner le travail remarquable de lecture et relecture qui été réalisé par mes encadrants, même si avec le recul, je dois bien avouer que je suis bien heureux aujourd'hui ne plus avoir à faire relire un papier par Jean-Pierre. Il m'a renvoyé mes documents de travail presque systématiquement en me disant : « Je suis très inquiet, ça ne va pas du tout ! ». Cécile et Caroline ont quant à elles réalisé un véritable travail de fourmis en dénichant les incohérences scientifiques que j'ai eu la maladresse de parsemer. Je remercie également Lucile Forné, Anna Pastukhina, Léa Florentin, Noémie Budin, Valérie Warth, Hervé Muhr et Bertrand Cuny pour les corrections orthographiques et je garde l'entière responsabilité des dernières coquilles restantes.

Je pense qu'il y a un facteur très important qui permet de réaliser des travaux de thèse dans de bonnes conditions : le soutien moral ! Et sur ce point j'ai été le doctorant le plus chanceux de l'histoire de l'humanité (oui oui de l'humanité !). J'ai pu compter sur mes amis proches, les vieux de la vielle comme on dit. Je remercie Aubin Hirtz, Alexandre Hocquel, Vincent & Mathilde Michel (ils se sont mariés pendant la thèse) et Jérémy Meyer qui ont été là pour me rappeler que même si j'échouais dans cette épreuve difficile j'avais quand même une belle carrière de vibreur de billes qui m'attendait (délire entre vieux de la vielle que seuls les vieux de la vielle peuvent comprendre). J'ai aussi eu la chance d'avoir des camarades doctorants exceptionnels. J'ai une pensée spéciale pour François Moussoh qui fut mon voisin de bureau et avec qui je garde d'innombrables souvenirs de fous rires. Je remercie Jérémy Rodriguez, Mathilde Guilpain, Claire Hazotte et Zeinab Chour, qui sont venu me chercher au fond de ma cave souterraine, pour ces bons moments passé ensemble avec en particulier les petites soirées où « on ne rentre pas trop tard ! ». Quel n'aurait été mon parcours sans la sacro-sainte pause de 10h30 au troisième étage du CEGEP ? Edouard Plasari qui m'a fait remarquer que « même au moyen-âge l'homme ne mangeait pas d'algues ». Hervé Muhr et Roda Bounaceur qui n'ont eu de cesse d'essayer de démasquer la « véritable » nature de mes relations avec mes collègues. Anthony Biget qui fut un véritable garde-fou lorsque ma bonne humeur était un peu trop débordante. Hélène Gueniot avec qui on a fait fantasmer du monde avec nos cours de Salsa du mardi soir (et non, pas de confessions de dernières minutes désolé Hervé et Roda !). Marie Le

Page, Jade Diemunsch et Anaëlle Cloteaux qui représentent parfaitement l'adage « qui aime bien châtie bien » (enfin j'espère !). Valérie Warth qui a été une personne à l'écoute pendant les moments les plus difficiles et qui a fait preuve d'une remarquable bienveillance à mon égard. Il y a toute l'équipe Progepi également que je souhaite remercier. Je n'ose pas faire le calcul en séance de psy que cela m'aurait coûté si cette joyeuse équipe n'avait pas été là pour me soutenir.

J'ai une pensée toute spéciale pour ma Maman qui n'a pas arrêté de me bassiner depuis ma plus tendre enfance sur le fait que je devais travailler à l'école pour être sûr de pouvoir faire le métier qui me plaira. Elle a toujours été fier de montrer mes bulletins scolaires et ne s'est jamais cachée de ses ambitions à mon égard. Quelque part, c'est aussi un peu grâce à cela que je n'ai pas abandonné pendant les années difficiles à Bricomarché, Mc Donald, Auchan, Kinépolis et autres jobs étudiants exercés en parallèle de mes études.

Pour finir j'ai une pensée pour ma Mamie qui nous a quitté en 2014. Il s'agit de l'épreuve personnelle de loin la plus difficile que j'ai dû surmonter durant cette aventure de la thèse. Je souhaite faire le témoignage de toute la reconnaissance que j'ai pour la super Mamie qu'elle a été.

Je vous souhaite une bonne lecture et surtout…bon courage !

Table des matières

Table des Illustrations 9

Table des Tableaux 14

Nomenclature 16

Introduction générale 21

Contexte 21

Objectif de la thèse 23

Démarche scientifique 24

CHAPITRE I : Etat de l'art de la modélisation compartimentale allant des modèles systémiques aux simulations de mécanique des fluides numériques 27

I.1 Introduction 28

I.1.1 Problématique 29

I.2 Modélisation dite « systémique » 30

I.2.1 Introduction 30

I.2.2 Vers une structure de modèle de plus en plus détaillée 35

I.2.3 Automatisation du développement de la structure du modèle 48

I.2.4 Conclusions sur la modélisation systémique 53

I.3 Modélisations dites « topologiques » 53

I.3.1 Introduction 53

I.3.2 Divisions du volume total 56

I.3.3 Agrégation successive de mailles 75

I.3.4 Conclusions modélisation topologique 82

I.4 Conclusions générales sur l'état de l'art 85

CHAPITRE II : Proposition d'une méthodologie la plus générale possible de la modélisation compartimentale 89

II.1 Système et choix de méthodes de modélisation 91

II.1.1 Description du système et objectif de modélisation 91

II.1.2 Degré de finesse de la modélisation 93

II.2 Découpage topologique 96

II.2.1 Pré-découpage 96

II.2.2 Création d'un réseau de compartiments 99
II.2.3 Cas de l'hydrodynamique instationnaire 109
II.3 Détermination des échanges entres les compartiments 109
II.3.1 Echanges convectifs 111
II.3.2 Echanges turbulents 112
II.4 Bilans de matière 116
II.4.1 Cas général 117
II.4.2 Modélisation de l'hydrodynamique 117
II.4.3 Modélisation des réactions chimiques 120
II.4.4 Choix du solveur 123
II.5 Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange 123
II.5.1 Fonctionnement de la matrice $[\boldsymbol{ACD}]$ 124
II.5.2 Remplissage de la matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange 131
II.5.3 Calcul des concentrations 136
II.6 Organigramme de la méthode 137
II.7 Conclusions et perspectives 140
II.7.1 Trois techniques de divisions 140
II.7.2 Découpage en tranches identiques 141
II.7.3 Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange 141
II.7.4 Ecoulement instationnaire 142
CHAPITRE III : Application de la méthodologie sur un cas d'étude a priori défavorable en vue de définir les limites d'applications 145
III.1 Stratégie de choix du cas d'étude 146
III.1.1 Analyse des particularités des principales études de la littérature sur la modélisation compartimentale 146
III.1.2 Critères pour le cas d'étude choisi 149
III.2 Description du cas d'étude choisi 151
III.2.1 Choix d'une structure de type étang 151
III.2.2 Etude de la dispersion à la surface d'un étang. 151
III.2.3 « Etang » à l'échelle pilote 152
III.2.4 Banque de données et grandeurs pertinentes 154
III.2.5 Intérêt pour la méthode générale 164

III.3 Méthode de construction du réseau de compartiments 165
III.3.1 Découpage en tranches identiques 165
III.3.2 Echanges entre les compartiments 168
III.4 Description de l'hydrodynamique globale 169
III.4.1 Découpage basé sur le champ de vitesse 170
III.4.2 Etude de l'influence des zones de découpage secondaires sur l'écoulement 181
III.4.3 Conclusions 203
III.5 Modélisation de la dispersion d'un traceur 204
III.5.1 Courbes de dispersion 204
III.5.2 Conclusions 208
III.6 Influence des échanges turbulents 208
III.6.1 Rappel de la littérature : trois approches existantes 208
III.6.2 Comparaison des trois approches 210
III.6.3 Conclusions sur les échanges turbulents 217
III.7 Conclusions et perspectives 218
III.7.1 Découpage en tranches identiques 218
III.7.2 Echanges turbulents 219
III.7.3 Valorisation pour le logiciel 219
III.7.4 Applicabilité de la méthode sur les travaux de la littérature 220
CHAPITRE IV : Valorisation du travail de thèse par l'intégration de la méthode dans un logiciel commercial de simulation de traçage et de suivi de réactions chimiques 223
IV.1 Valorisation de la méthode 224
IV.2 MODULE 1 : Post-traitement de courbes expérimentales 224
IV.2.1 Troncature des données 225
IV.2.2 Translation de la courbe 226
IV.2.3 Dérive linéaire de la ligne de base 227
IV.2.4 Ré-échantillonnage 227
IV.2.5 Normation 228
IV.2.6 Extrapolation exponentielle 229
IV.2.7 Prise en compte de la décroissance radioactive (traçage) 229
IV.3 MODULE 2 : Construction d'un modèle quelconque 230
IV.3.1 Construction de la structure du modèle 231

IV.3.2 Suivi des espèces 234
IV.3.3 Paramétrage de dassl 238
IV.3.4 Algorithmes d'automatisation d'écriture et résolution du système d'équations différentielles....238
IV.4 MODULE 3 : Découpage en tranches identiques 246
IV.4.1 Construction de la structure du modèle en tranches identiques....246
IV.4.2 Algorithme de construction de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » 252
IV.5 Perspectives....255
Conclusions générales et Perspectives 259
Rappel des principaux résultats....259
Perspectives à court et long termes....263
Références 267
Annexes....275
Annexe A....276
Annexe B....285

Table des Illustrations

Figure 1 : Illustration du continuum de la modelisation compartimentale 24
Figure I-1 : Schema general d'un procede industriel (Levenspiel, 1999) 28
Figure I-2: Representation graphique d'une DTS. (Levenspiel, 1999) 32
Figure I-3: Schematisation des trois premiers reacteurs ideaux. (a) reacteur batch (RB) (b) reacteur piston (RP) (c) reacteur parfaitement agite (RPA). (Levenspiel, 1999) 33
Figure I-4 : Schema du bilan de matiere au sein d'un element de volume. (Levenspiel, 1999) 34
Figure I-5 : (gauche) Schema d'une coupe du cylindre de separation. (Droite) modele systemique decrivant la structure de l'ecoulement des deux phases. (Behin and Aghajari, 2008) 37
Figure I-6 : Schéma du flottateur (Behin and Bahrami, 2012) 38
Figure I-7 : Gauche : Schema du flottateur par air. Droite : modele systemique decrivant la structure de l'ecoulement et la recirculation. (Behin and Bahrami, 2012) 39
Figure I-8 : Bioreacteur continu a deux niveaux etudie par (Ben Gaida et al., 2012) 39
Figure I-9 : Modele systemique de la phase gazeuse et la phase liquide du reacteur schematise a la Figure I-8. (Ben Gaida et al., 2012). 41
Figure I-10 : (a) Schema d'un module. (b) photo du reacteur 41
Figure I-11: Structure du reseau de reacteurs ideaux pour representer un module. (Leon et al., 2014) 42
Figure I-12: Structure du modele correspondant a la geometrie reelle du reacteur. (Leon et al., 2014) 43
Figure I-13 : Schema des trois « surface flow treatment wetlands » etudies par (Laurent et al., 2015). Le Wahlbach n'a qu'un fosse operationnel. 44
Figure I-14 : Modeles systemiques proposes par (Laurent et al., 2015) pour les trois « surface flow treatment wetlands ». 45
Figure I-15: Interpretation de l'ecoulement de maniere qualitative a partir de la repartition de fumees colorees. (Olander et al., 1995) 47
Figure I-16 : Modele a 7 branches compose de cascades de RPA et d'un RP (Olander et al., 1995). 47
Figure I-17: Dispositif experimental du local ventile utilise par (Laquerbe et al., 2001) 48
Figure I-18: Modele obtenu par (C. Laquerbe et al., 2001) par methode stochastique. 49
Figure I-19 : "Super-structure" representant la physique d'un lit fluidise (Montastruc et al., 2004) 50
Figure I-20 : Modele du lit fluidise apres optimisation de la structure et des parametres (Montastruc et al., 2004) 50
Figure I-21: Deux structures obtenues par (Hocine et al., 2008) avec sa methode deterministe 51
Figure I-22: Schema de principe de la methode de modelisation de (Claudel et al., 2003) 52
Figure I-23 : Decoupage regulier de la cuve agitee propose par (Delafosse et al., 2014). Les fleches correspondent a une simplification qualitative de l'ecoulement dans la « methode 1 » 57
Figure I-24 : Definition des echanges avec la « methode 3 » par (Delafosse et al., 2014) : (a) entre deux mailles de MFN. (b) entre deux compartiments. 59
Figure I-25 : Schema d'un reacteur de production de polyethylene basse densite, (Wells and Ray, 2005) 61
Figure I-26 : Methode de creation des compartiments (Wells and Ray, 2005) 61
Figure I-27 : Schema du reacteur pilote utilise par (Gresch et al., 2009) 64
Figure I-28 : Representation de la methode de creation du modele de (Gresch et al., 2009) 66
Figure I-29 : coupe en 2D de la turbine a gaz modelisee par (Fichet et al., 2010) 67
Figure I-30 : schematisation de la methodologie du decoupage physique developpe par (Fichet et al., 2010) 68
Figure I-31: Modele 2D obtenu par (Rigopoulos and Jones, 2003) 70
Figure I-32: Schema du dispositif experimental (Le Moullec et al., 2010) 71
Figure I-33: Decoupage d'une tranche du reacteur en compartiments (Le Moullec et al., 2010) 72
Figure I-34: Modele obtenu par (Le Moullec et al., 2010) 73
Figure I-35 : Modele a 25 compartiments d'un etang. (Alvarado et al., 2012) 74
Figure I-36 : Schema de la boite servant d'illustration a la methode developpee par (Bezzo and Macchietto, 2004). 76
Figure I-37 : Exemple de decoupage automatique propose par la methode de (Bezzo and Macchietto, 2004). Contours du taux de dissipation de l'energie turbulente : Donnees issues de la MFN (gauche). Compartiments obtenus par l'algorithme (droite). 77

Figure I-38 : Differentes manieres d'agglomerer des mailles de MFN a partir d'une maille germe $C0$ selon (Delafosse et al., 2010). (a) Methode maille par maille (CBC). (b) et (c) Methode couche par couche (LBL)... 78
Figure I-39 : Comparaison de differentes methodes de decoupage par (Delafosse et al., 2010)..... 79
Figure I-40 : Comparaison de profils provenant de la MFN (gauche) et de l'algorithme d'agglomeration (droite) pour les trois parametres choisis comme pertinents pour decrire le procede ; A : dissipation de l'energie turbulente, B : intensite lumineuse, C : pression statique. (Nauha and Alopaeus, 2013)..... 81
Figure II-1 : Les trois etapes de la methode generale 91
Figure II-2 : Exemple de modele a compartiments avec decoupage en tranches a geometrie identique avec un reseau de compartiments de geometrie identiques ($TGICI$)..... 98
Figure II-3 : Schematisation de la methode de decoupage sur un exemple illustratif. $N = 3$ grandeurs pertinentes. (A) Toutes les grandeurs pertinentes sont echantillonnees en zones elementaires, en general ce sont des donnees issues de MFN echantillonnees par le maillage de la simulation. (B) Toutes les grandeurs pertinentes sont echantillonnees en zones homogenes. (C) Apres une etape de superposition on obtient un unique maillage de zones compartimentees.....100
Figure II-4 : Exemple d'un champ Cn representant une grandeur pertinente n en 2D. Presentation des trois techniques de decoupage.....102
Figure II-5 : Illustration de la technique de decoupage geometrique basee sur une grandeur pertinente macroscopique homogene et une autre macroscopiquement heterogene.....103
Figure II-6 : Illustration de la technique de decoupage qualitative sur une grandeur pertinente macroscopiquement tres heterogene. 103
Figure II-7 : Illustration de l'etape 1 de l'algorithme de division.....105
Figure II-8 : Illustration du passage de l'etape 2 (avec $d = 2$) a 3 de l'algorithme de division.....105
Figure II-9 : Exemple en 2D de $N = 2$ champs Cn ($C1$ et $C2$) decoupes en cn ($c1 = 2$ et $c2 = 3$) zones homogenes. 106
Figure II-10 : Illustration de la technique de superposition conduisant a un maillage ou toutes les grandeurs pertinentes sont homogenes. (a) Champs Cn echantillonne en cn zones homogenes ou chaque grandeur pertinente n est homogene. (b) Maillage C echantillonne en c zones compartimentees (ZC) ou toutes les grandeurs pertinentes sont homogenes. (c) Reseau topologique ou toutes les zones compartimentees (ZC) echangent uniquement avec leurs voisines.....107
Figure II-11 : Raffinage du modele ne prenant initialement en compte que l'hydrodynamique (voir Figure II-10) afin de prendre en compte une reaction chimique.....108
Figure II-12: schematisation des echanges entre deux compartiments. 111
Figure II-13 : Schematisation des echanges convectifs entre deux compartiments 111
Figure II-14 : Schematisation des echanges turbulents entre deux compartiments.....112
Figure II-15 : schema d'un compartiment.....117
Figure II-16 : Exemple d'un modele a trois compartiments ou on calcule la DTS d'un traceur. Les debits volumiques sont connus et marques en vert. Les concentrations sont inconnues sauf la concentration d'entree $Cin(t)$. 119
Figure II-17 : Exemple d'un modele a deux compartiments ou a lieu des reactions chimiques. 121
Figure II-18 : Schema expliquant l'utilisation de la « matrice de connectivites des compartiments et des debits d'echanges ». 124
Figure II-19: Exemple de deux compartiments en serie. $Nnd = 3$, $Nbr = 2$. En fond bleu les branches contenant un compartiment.....126
Figure II-20: Exemple de deux compartiments en parallele. $Nnd = 2$, $Nbr = 2$. En fond bleu les branches contenant un compartiment. 127
Figure II-21 : Exemple de trois compartiments. $Nnd = 3$, $Nbr = 4$. En fond bleu les branches contenant un compartiment.....128
Figure II-22 : Illustration de la prise en compte des echanges turbulents pour le cas de deux compartiments en series. En fond bleu les branches ou se trouvent un compartiment.....130
Figure II-23 : Methodologie de remplissage de « matrice de connectivites des compartiments et des debits d'echanges » pour un exemple illustratif. 133
Figure II-24 : Schema de la structure du reseau de compartiments avec une numerotation ordonnee.....134
Figure II-25 : Classement des surfaces d'echanges selon des plans dans la largeur, longueur et hauteur d'apres le modele de la Figure II-24.....135
Figure II-26 : Schema d'une branche sans compartiment dont on souhaite calculer la concentration de sortie $Cout$ a partir de la concentration d'entree Cin.....136
Figure II-27 : Schema d'une branche contenant un compartiment de volume Vj dont on souhaite calculer la concentration de sortie $Cout$ connaissant la concentration d'entree Cin.....136

Figure II-28: Schema d'un nœud i auquel arrivent $Nconv = 3$ branches ($Br1, Br2, Br3$) et duquel repartent $Ndiv = 2$ branches ($Br4, Br5$). 137
Figure II-29 : Organigramme de la methode 139
Figure III-1 : photo d'un plan d'eau avec phenomene d'eutrophisation conduisant a l'apparition d'algues indesirables. Sources : http://www.buzzle.com/articles/how-does-eutrophication-affect-the-environment.html 152
Figure III-2 : Configuration choisie pour developper le modele a compartiments. Pour l'etude de la dispersion : injection (croix noire) et detection aux points A, B, C et D. 153
Figure III-3 : traçage visuel. Injection en entree en surface. 155
Figure III-4 : traçage visuel. Injection entree au fond. 156
Figure III-5 : Champ de vitesse dans le plan horizontal XY place a la surface libre (z=47cm). Vitesse exprimee en m/s. (Moussoh, 2016) 157
Figure III-6 : Champ de vitesse dans le plan vertical XZ place au milieu de l'entree (y=12cm). Vitesse exprimee en m/s. (Moussoh, 2016) 158
Figure III-7 : Champ de vitesse dans le plan vertical XZ place au milieu de la sortie (y=58cm). Vitesse exprimee en m/s. (Moussoh, 2016) 158
Figure III-8 : Champ de vitesse dans le plan vertical YZ place a 1 cm de la sortie (x=139cm). Vitesse exprimee en m/s. (Moussoh, 2016) 159
Figure III-9 : Schematisation de l'ecoulement dans le pilote avec 2 niveaux de vitesses. 160
Figure III-10: Energie cinetique turbulente k ; a la surface libre de la cuve (gauche) et sur les plan XZ en Y=8 cm et 16 cm 161
Figure III-11 : Dissipation de l'energie cinetique turbulente ϵ ; a la surface libre de la cuve (gauche) et sur les plan XZ en Y=8 cm et 16 cm 161
Figure III-12 : DTS obtenues par MFN et experimentalement. (Moussoh, 2016) 162
Figure III-13 : Champ de vitesse a la surface de la cuve. Pour l'etude de la dispersion : injection (croix noire) et detection aux points A, B, C et D. 163
Figure III-14 : Courbe de dispersion numerique d'un traceur injecte au milieu de la surface et detecte aux points A, B, C et D. (Moussoh, 2016) 164
Figure III-15 : Schematisation d'un decoupage en tranches dans la direction axiale du pilote. A gauche un exemple avec $NL = 8$ tranches d'epaisseurs quelconques et a droite un exemple avec $NL = 10$ tranches d'epaisseurs identiques. 166
Figure III-16 : Exemple illustratif de decoupage en $NL = 5$ tranches d'egale epaisseur et un reseau de compartiments identiques dans chaque tranche. L'epaisseur de chaque tranche vaut $Lk = LNL = 1{,}405\ metre$. Le nombre de compartiments vaut 4 suivant la hauteur (note Nh) et 2 suivant la largeur (note Nl). 167
Figure III-17 : Schematisation de l'echange convectif entre deux compartiments 169
Figure III-18 : Champ de vitesse sur le plan vertical XZ place au milieu de l'entree (Y=12cm). $h1 = 6 - 12 - 18\ cm$ .171
Figure III-19 : Champs de vitesse dans le plan vertical (Oxz) place au milieu de l'entree en $y = 12\ cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : decoupage des compartiments. EN HAUT : $NL = 4$. AU MILLIEU : $NL = 7$. EN BAS : $NL = 14$ 173
Figure III-20 : Champ de vitesse dans le plan horizontal (Oxy) a la surface libre en z $= 47\ cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : decoupage des compartiments. EN HAUT : $NL = 4$. AU MILLIEU : $NL = 7$. EN BAS : $NL = 14$ 174
Figure III-21 : Courbes de DTS pour differents nombres de tranches ($NL = 4 - 7 - 14$) ; $Nl = 7$; $Nh = 2$ avec $h1 = 12\ cm$. 176
Figure III-22 : De haut en bas les champs de vitesse sur la surface libre (le plan XY en $z = 47\ cm$), dans le plan vertical au milieu de l'entree (le plan XZ en $y = 12\ cm$) et dans le plan vertical au milieu de la sortie (le plan XZ en $y = 58\ cm$). En trait rouge le decoupage en tranches identiques pour la configuration optimale : $N = 7$; $Nl = 7$ avec $l1 = l2 = l3 = l5 = l6 = l7 = 8\ cm$ et $l4 = 22\ cm$; $Nh = 2$ avec $h1 = 12\ cm$ 178
Figure III-23 : Structure generale du modele a compartiments en tranche ; $Nl = 7$; $Nh = 2$; $Lcomp = 1{,}40NL\ metre$; $h1 = 12\ cm$ 179
Figure III-24 : DTS optimale fournie par le modele ($NL = 7$; $Nh = 2$ avec $h1 = 12\ cm$; $Nl = 7$ avec $l1 = l2 = l3 = l5 = l6 = l7 = 8\ cm$ et $l4 = 22\ cm$) 180
Figure III-25 : Champ de vitesse dans le plan vertical (Oxz) au niveau de l'entree ($y = 12\ cm$). Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : decoupage des compartiments. EN HAUT : $h1 = 6\ cm$. AU MILLIEU : $h1 = 12\ cm$. EN BAS : $h1 = 18\ cm$. 182
Figure III-26 : Courbes de DTS pour differentes hauteurs de la couche de surface ($h1 = 6 - 12 - 18\ cm$) ; $Nl = 7$; $Nh = 2$; $NL = 7$ 185

FIGURE III-27 : CHAMP DE VITESSE SUR LA SURFACE LIBRE (OXY), Z = $47\ cm$. SURLIGNAGE ROUGE : FORTES VITESSES. SURLIGNAGE BLEU : FAIBLES VITESSES. TRAITS ROUGES : DECOUPAGE DES COMPARTIMENTS. EN HAUT : $Nl = 4$. AU MILLIEU : $Nl = 7$. EN BAS : $Nl = 8$. 187
FIGURE III-28 : COURBES DE DTS POUR DIFFERENTS NOMBRES DE COMPARTIMENTS DANS LA LARGEUR ($Nl = 4 - 7 - 8$) ; $NL = 7$; $Nh = 2$ AVEC $h1 = 12\ cm$. 189
FIGURE III-29 : CHAMP DE VITESSE DANS LE PLAN VERTICAL (OXZ) AU MILIEU DE L'ENTREE EN $y = 12\ cm$. SURLIGNAGE ROUGE : FORTES VITESSES. SURLIGNAGE BLEU : FAIBLES VITESSES. TRAITS ROUGES : DECOUPAGE DES COMPARTIMENTS. EN HAUT : $Nh = 3$ AVEC $h1 = h2 = 6\ cm$. AU MILLIEU : $Nh = 2$ AVEC $h1 = 12\ cm$. EN BAS : $Nh = 3$ AVEC $h1 = 12\ cm$ ET $h2 = 6\ cm$. 191
FIGURE III-30 : COURBES DE DTS POUR DIFFERENTS NOMBRES DE COUCHE DEFINISSANT DANS LA HAUTEUR DE LA CUVE ($Nh = 2 - 3$) ; $NL = 7$; $Nl = 7$. 193
FIGURE III-31 : CHAMP DE VITESSE SUR LE PLAN (OXZ) AU MILIEU DE L'ENTREE EN $y = 12\ cm$. SURLIGNAGE ROUGE : FORTES VITESSES. SURLIGNAGE BLEU : FAIBLES VITESSES. TRAITS ROUGES : DECOUPAGE DES COMPARTIMENTS. EN HAUT : $NL = 7$ (TRANCHES IDENTIQUES). EN BAS : $NL = 9$ (EPAISSEUR TRANCHES VARIABLES POUR L'ENTREE ET LA SORTIE)....195
FIGURE III-32 : CHAMP DE VITESSE A LA SURFACE LIBRE (OXY) EN Z = $47\ cm$. SURLIGNAGE ROUGE : FORTES VITESSES. SURLIGNAGE BLEU : FAIBLES VITESSES. TRAITS ROUGES : DECOUPAGE DES COMPARTIMENTS. EN HAUT : $NL = 7$ (TRANCHES IDENTIQUES). EN BAS : $NL = 9$ (EPAISSEUR TRANCHES VARIABLES POUR L'ENTREE ET LA SORTIE)....196
FIGURE III-33 : COURBE DE DTS AVEC TRANCHES IDENTIQUES ($NL = 7$) ET TRANCHES D'EPAISSEURS VARIABLES AVEC RAFFINEMENT A L'ENTREE ET LA SORTIE ($NL = 9$)....197
FIGURE III-34 : CHAMP DE VITESSE SUR LE PLAN VERTICAL (OXZ) AU MILIEU DE L'ENTREE EN $y = 12\ cm$. SURLIGNAGE ROUGE : FORTES VITESSES. SURLIGNAGE BLEU : FAIBLES VITESSES. TRAITS ROUGES : DECOUPAGE DES COMPARTIMENTS. EN HAUT : DECOUPAGE DE REFERENCE BASE SUR L'APPLICATION DE NOTRE METHODE ($NL = 7$; $Nh = 2$ AVEC $h1 = 12\ cm$; $Nl = 7$). AU MILIEU : DECOUPAGE DE TYPE GEOMETRIQUE ($\boldsymbol{NL = 7}$; $Nh = 8$ AVEC $hi = H8 = 47\ cm8 = 5{,}875\ cm$; $Nl = 8$). EN BAS : DECOUPAGE DE TYPE GEOMETRIQUE ($\boldsymbol{NL = 14}$; $Nh = 8$ AVEC $hi = H8 = 47\ cm8 = 5{,}875\ cm$; $Nl = 8$). 199
FIGURE III-35 : CHAMP DE VITESSE SUR LE PLAN (OXY) A LA SURFACE EN Z = $47\ cm$. SURLIGNAGE ROUGE : FORTES VITESSES. SURLIGNAGE BLEU : FAIBLES VITESSES. TRAITS ROUGES : DECOUPAGE DES COMPARTIMENTS. EN HAUT : DECOUPAGE DE REFERENCE BASE SUR L'APPLICATION DE NOTRE METHODE ($NL = 7$; $Nh = 2$; $Nl = 7$AVEC $l1 = l2 = l3 = l5 = l6 = l7 = 8\ cm$ ET $l4 = 22\ cm$). AU MILIEU : DECOUPAGE DE TYPE GEOMETRIQUE ($NL = 7$; $Nh = 8$; $Nl = 8$ AVEC $l1 = l2 = l3 = l6 = l7 = l8 = 8\ cm$ ET $l4 = l5 = 11\ cm$). EN BAS : DECOUPAGE DE TYPE GEOMETRIQUE ($NL = 14$; $Nh = 8$; $Nl = 8$ AVEC LES li IDENTIQUES AU CAS DU MILIEU)....200
FIGURE III-36 : COURBES DE DTS FOURNIES PAR LE MODELE A COMPARTIMENTS DE REFERENCE ($NL = 7$ TRANCHES IDENTIQUES AVEC $Nh = 2$ ET $Nl = 7$) ET PAR DEUX MODELES AVEC DECOUPAGE GEOMETRIQUE ($NL = 7$ET $NL = 14$ TRANCHES IDENTIQUES, $Nh = 8$ ET $Nl = 8$)....202
FIGURE III-37 : CONCENTRATION NORMEE AU POINT A EN FONCTION DU TEMPS D'UN TRACEUR PASSIF INJECTE EN SURFACE DE LA CUVE. 206
FIGURE III-38 : CONCENTRATION NORMEE AU POINT B EN FONCTION DU TEMPS D'UN TRACEUR PASSIF INJECTE EN SURFACE DE LA CUVE. 206
FIGURE III-39 : CONCENTRATION NORMEE AU POINT C EN FONCTION DU TEMPS D'UN TRACEUR PASSIF INJECTE EN SURFACE DE LA CUVE. 207
FIGURE III-40 : CONCENTRATION NORMEE AU POINT D EN FONCTION DU TEMPS D'UN TRACEUR PASSIF INJECTE EN SURFACE DE LA CUVE. 207
FIGURE III-41 : SCHEMATISATION DES ECHANGES TURBULENTS ENTRE DEUX COMPARTIMENTS 209
FIGURE III-42 : SCHEMA DU MODELE DE REFERENCE ($NL = 7$ TRANCHES ; $Nh = 2$ AVEC $h1 = 12\ cm$; $Nl = 7$). EN POINTILLES BLEUS LES PLANS CHOISIS POUR REPRESENTER LES VALEURS DES DEBITS TURBULENTS CALCULES AVEC LES TROIS METHODES DE LA LITTERATURE. 211
FIGURE III-43 : DEBITS TURBULENTS EXPRIMES EN POURCENTAGE DU DEBIT CONVECTIF DANS LE PLAN $l01$ SUR LES COMPARTIMENTS DE LA COUCHE DE SURFACE (HAUT) SUR CHACUNE DES TRANCHES (1 A 7)....213
FIGURE III-44 : DEBITS TURBULENTS EXPRIMES EN POURCENTAGE DU DEBIT CONVECTIF DANS LE PLAN $l05$ SUR LES COMPARTIMENTS DE LA COUCHE DE SURFACE (HAUT) SUR CHACUNE DES TRANCHES (1 A 7)....213
FIGURE III-45 : DEBITS TURBULENTS EXPRIMES EN POURCENTAGE DU DEBIT CONVECTIF DANS LE PLAN $lo01$ SUR LES COMPARTIMENTS DE LA COUCHE DE SURFACE (HAUT) SUR CHACUNE DES SUBDIVISIONS DANS LA LARGEUR (1 A 7)....214
FIGURE III-46 : DEBITS TURBULENTS EXPRIMES EN POURCENTAGE DU DEBIT CONVECTIF DANS LE PLAN $h01$ SUR TOUS LES COMPARTIMENTS (1 A 49)....214
FIGURE III-47 : COURBES DE DTS AVEC OU SANS ECHANGES TURBULENTS. MODELE : $NL = 7$ TRANCHES ; $Nh = 2$ AVEC $h1 = 12\ cm$; $Nl = 7$....215
FIGURE III-48 : COURBES DE DTS AVEC OU SANS ECHANGES TURBULENTS. DECOUPAGE ARBITRAIRE DE LA CUVE : $NL = 8$ TRANCHES ; $Nh = 2$ AVEC $h1 = 6\ cm$; $Nl = 4$....217

Figure IV-1 : Signal experimental de DTS.....225
Figure IV-2 : Illustration d'une courbe experimentale de DTS avant et apres le traitement « troncature » 226
Figure IV-3 : Illustration d'une courbe experimentale avant et apres le traitement « translation » 226
Figure IV-4 : Illustration d'une courbe experimentale avant et apres le traitement « derive linaire » 227
Figure IV-5 : Illustration d'une courbe experimentale avant et apres le traitement « re-echantillonnage ». 228
Figure IV-6 : Illustration d'une courbe experimentale avant et apres le traitement « normation ». 228
Figure IV-7 : Illustration d'une courbe experimentale avant et apres le traitement « extrapolation exponentielle ». 229
Figure IV-8 : L'utilisateur dispose les compartiments sur le plan de travail (Capture d'ecran de l'interface graphique developpee par Progepi). 231
Figure IV-9 : L'utilisateur a ajoute une entree et une sortie de fluide (Capture d'ecran de l'interface graphique developpee par Progepi).....232
Figure IV-10 : Structure du modele et definition des echanges entre compartiments (Capture d'ecran de l'interface graphique developpee par Progepi).....233
Figure IV-11 : Illustration des points d'injection (representes par des fleches oranges) des differentes especes et des points de detection (representes par des ecrans).....237
Figure IV-12 : Illustration des differentes formes de compartiments possible au fur et a mesure qu'on applique les contraintes techniques imposees dans le cadre du developpement de l'algorithme de remplissage de la « matrice de connectivites des compartiments et des debits d'echanges ».....248
Figure IV-13 : Donnees a fournir dans l'interface graphique pour construire un reseau de compartiments en tranches.....249
Figure IV-14 : Donnees a fournir au niveau de l'interface graphique pour indiquer la localisation des entree(s) et sortie(s) de fluide. 250
Figure IV-15 : Illustration des plans d'echange dans la largeur, longueur et hauteur. La numerotation correspond a l'ordre dans lequel on renseigne les debits d'echanges de chaque plan.....251
Figure IV-16 : Illustration d'un plan generique dans la largeur (de normale ey), longueur (de normale ex) et hauteur (de normale ez). La numerotation correspond a l'ordre dans lequel on renseigne les debits d'echanges.....252
Figure IV-17 : Numeros des nœuds d'entree $ndj(entrEe)$ et de sortie $ndj(sortie)$ d'un compartiment j. 254
Figure IV-18 : Convention de numerotation des compartiments j allant de 1 a J 254

Table des Tableaux

Tableau II-1 : Recapitulatif des differents modes de fonctionnement possible 92
Tableau II-2 : La modelisation compartimentale presentee comme un continuum entre les modeles systemiques et la MFN. 95
Tableau II-3 : Calcul des concentrations d'entree $uj(t)$ et des temps de passage moyen τj sur l'exemple traite pour illustrer la methodologie de calcul d'une DTS 119
Tableau II-4 : Illustration de la methodologie d'ecriture des equations differentielles dans le cas de reactions chimiques. 122
Tableau III-1 : Valeurs moyennes de Γ et valeurs de Φ calculees sur l'ensemble du plan vertical (Oxz) passant par le milieu de l'entree ($y = 12\ cm$) pour les differentes valeurs de NL testees 175
Tableau III-2 : Valeurs moyennes de Γ et valeurs de Φ calculees sur la surface libre (Oxy) pour les differentes valeurs de NL testees. 175
Tableau III-3 : Nombre de compartiments dans la longueur (nombre de tranches NL), dans la largueur (Nl) et dans la hauteur (Nh) 179
Tableau III-4 : Dimension des compartiments dans la direction axiale (l'epaisseur des tranches Li) 179
Tableau III-5 : Dimension des compartiments dans la largeur de la cuve (li) 180
Tableau III-6 : Dimension des compartiments dans la hauteur de la cuve (hi) 180
Tableau IV-1 : Parametres fournis par l'utilisateur pour effectuer une troncature des donnees 225
Tableau IV-2 : Parametres fournis par l'utilisateur pour effectuer une translation des donnees 226
Tableau IV-3 : Parametres fournis par l'utilisateur pour effectuer une rotation des donnees 227
Tableau IV-4 : Parametre fourni par l'utilisateur pour effectuer un re-echantillonnage des donnees 227
Tableau IV-5 : Parametres fournis par l'utilisateur pour effectuer une extrapolation exponentielle des donnees 229
Tableau IV-6 : Parametre fourni par l'utilisateur pour tenir compte de la desintegration radioactive d'un traceur radioactif. 230
Tableau IV-7 : Volume de chaque compartiment (fourni par l'utilisateur en double cliquant sur chaque icone correspondante : fond vert) 232
Tableau IV-8 : Debit echange au niveau de chaque liaison en fraction du debit volumique d'entree (fourni par l'utilisateur en double cliquant sur la liaison : fond vert) 234
Tableau IV-9 : Coefficients stœchiometriques (fourni par l'utilisateur : fond vert) 235
Tableau IV-10 : Ordres cinetiques partiels (fournis par l'utilisateur : fond vert) 235
Tableau IV-11 : Constantes de reactions (fournies par l'utilisateur : fond vert) 235
Tableau IV-12 : Nombre de points d'injection par espece (fournis par l'utilisateur : fond vert) 236
Tableau IV-13 : Numeros des compartiments ou sont injectees les especes (fournis par l'utilisateur : fond vert) 236
Tableau IV-14 : Concentration d'entree de chaque espece injectee (fournie par l'utilisateur : fond vert) 237
Tableau IV-15 : Numeros des compartiments ou l'utilisateur souhaite suivre la concentration des especes (fournis par l'utilisateur : fond vert) 237
Tableau IV-16 : Parametres de la simulation (fournis par l'utilisateur : fond vert) 238
Tableau IV-17 : « matrice de connectivites des compartiments et des debits d'echanges » remplie automatiquement par un algorithme developpe par Progepi et implemente dans l'interface graphique 239
Tableau IV-18 : « Matrice des parametres » remplie automatiquement par un algorithme developpe par Progepi et implemente dans l'interface graphique 240
Tableau IV-19 : Expressions des temps de passage τj dans chaque compartiment j 242
Tableau IV-20 : Expressions des signaux d'entree $up(t)$ et des termes de production chimique $rp(t)$ de chaque espece i dans le compartiment $j = 1$ 242
Tableau IV-21 : Expressions des signaux d'entree $up(t)$ et des termes de production chimique $rp(t)$ de chaque espece i dans le compartiment $j = 2$ 243
Tableau IV-22 : Expressions des signaux d'entree $up(t)$ et des termes de production chimique $rp(t)$ de chaque espece i dans le compartiment $j = 3$ 243
Tableau IV-23 : Expressions des signaux d'entree $up(t)$ et des termes de production chimique $rp(t)$ de chaque espece i dans le compartiment $j = 4$ 244
Tableau IV-24 : Les $P = 24$ equations differentielles dans le cas de l'exemple comportant $J = 4$ compartiments et $I = 6$ especes chimiques. 245

Tableau IV-25 : Donnees pour dimensionner le modele en tranches identiques dans la longueur L (fournies par l'utilisateur : fond vert) 249
Tableau IV-26 : Donnees pour dimensionner le modele en tranches identiques dans la largeur l (fournies par l'utilisateur : fond vert) 249
Tableau IV-27 : Donnees pour dimensionner le modele en tranches identiques dans la hauteur h (fournies par l'utilisateur : fond vert) 249
Tableau IV-28 : Coordonnees des compartiments d'entree/sortie de fluides et d'injection/detection d'especes (fournies par l'utilisateur : fond vert) 250
Tableau IV-29 : Numerotation des compartiments "j"dans la nomenclature "klm" 255
Tableau 1 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Behin and Aghajari, 2008) 276
Tableau 2 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Behin and Bahrami, 2012) 276
Tableau 3 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Ben Gaida et al., 2012) 277
Tableau 4 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Leon et al., 2014) 277
Tableau 5 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Laurent et al., 2015) 278
Tableau 6 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Olander et al., 1995) 278
Tableau 7 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Delafosse et al., 2014) 279
Tableau 8 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Wells and Ray, 2005) 279
Tableau 9 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Guha et al., 2006) 280
Tableau 10 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Gresch et al., 2009) 280
Tableau 11 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Fichet et al., 2010) 281
Tableau 12 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Rigopoulos and Jones, 2003) 281
Tableau 13 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Le Moullec et al., 2010) 282
Tableau 14 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Alvarado et al., 2012) 282
Tableau 15 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Bezzo and Macchietto, 2004) 283
Tableau 16 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Delafosse et al., 2010) 283
Tableau 17 : Resume des informations techniques relatives aux travaux de (Nauha and Alopaeus, 2013) 284
Tableau 18 : Valeurs de Γ pour le decoupage en $NL = 4$ tranches dans le plan vertical (plan Oxz) passant au milieu de l'entree (voir Figure III-19 en haut) 285
Tableau 19 : Valeurs de Γ pour le decoupage en $NL = 7$ tranches dans le plan vertical (plan Oxz) passant au milieu de l'entree (voir Figure III-19 au milieu). 285
Tableau 20 : Valeurs de Γ pour le decoupage en $NL = 14$ tranches dans le plan vertical (plan Oxz) passant au milieu de l'entree (voir Figure III-19 en bas) 285
Tableau 21 : Valeurs de Γ pour le decoupage en $NL = 4$ tranches dans le plan de la surface libre (plan Oxy) (voir Figure III-20 en haut). 286
Tableau 22 : Valeurs de Γ pour le decoupage en $NL = 7$ tranches dans le plan de la surface libre (plan Oxy) (voir Figure III-20 au milieu). 286
Tableau 23 : Valeurs de Γ pour le decoupage en $NL = 14$ tranches dans le plan de la surface libre (plan Oxy) (voir Figure III-20 en bas). 286

Nomenclature

Lettres Latines

A_i	Formule chimique de l'espèce i
br_i	Numéro d'une branche (i allant de 1 à N_{br})
C_i	Concentration de l'espèce i $[mol.m^{-3}]$
C_i^A	Concentration de l'espèce i $[mol.m^{-3}]$ dans le compartiment A
C_i^B	Concentration de l'espèce i $[mol.m^{-3}]$ dans le compartiment B
$C(t)$	Signal en fonction du temps
C_{in}	Concentration en entrée d'une branche $[mol.m^{-3}]$
C_{out}	Concentration en sortie d'une branche $[mol.m^{-3}]$
C_n	Champ scalaire de la grandeur pertinente n
c_n	Nombre de zone homogène composant le champ C_n
C	Maillage de compartiment
c	Nombre de zone compartimentée dans le maillage C
d	Nombre de division effectuée dans le découpage quantitatif
D	Coefficient de diffusion moléculaire $[m^2.s^{-1}]$
D_{tot}	Nombre de division effectuée
D_t	Coefficient de diffusion turbulent $[m^2.s^{-1}]$
$E(t)$	Concentration normée d'un traceur dans le cadre d'une DTS
H	Taille du réacteur dans la hauteur
h_m	Les différentes hauteurs des compartiments (m allant de 1 à N_h)
I	Nombre total d'espèce chimique
i	Numéro de l'espèce chimique
J	Nombre total de compartiments
j	Numéro du compartiment
J_{diff}	Densité de flux des molécules par diffusion de la matière $[mol.m^{-2}.s^{-1}]$
J_{app}	Nombre de RPA en série
J_{retro}	Nombre de RPA en série ave retro mélange
k	Energie cinétique turbulente $[m^2.s^{-2}]$
k_w	Constante de réaction de la réaction numéro w
L	Taille du réacteur dans la longueur
l	Taille du réacteur dans la largeur
L_t	Direction de tranchage
l_t	Epaisseur des tranches
l_l	Les différentes largeurs des compartiments (l allant de 1 à N_l)
L_k	Les différentes longueurs des compartiments (k allant de 1 à N_L)
M	Nombre de sous-volumes qui constitués lors du pré-découpage du système
m	Numéro du sous-volume
$m_{w,i}$	Ordre partiel de l'espèce chimique i dans la réaction w
N_L	Nombre de compartiment dans la longueur (tranches)

N_l	Nombre de compartiment dans la largeur
N_h	Nombre compartiments dans la hauteur
N_{pL}	Nombre de plans dans un modèle en T_{GICI} dans la longueur
N_{pl}	Nombre de plans dans un modèle en T_{GICI} dans la largeur
N_{ph}	Nombre de plans dans un modèle en T_{GICI} dans la hauteur
N_{pTT}	Nombre de plans total dans un modèle en T_{GICI}
N	Nombre de grandeurs pertinentes
n	Numéro de la grandeur pertinente (n allant de 1 à N)
N_{conv}	Nombre de branche convergente à un nœud
N_{div}	Nombre de branche divergente d'un nœud
$\vec{n}$	vecteur normal à la surface S
$nd_{j(entrée)}$	Numéro du nœud d'entrée d'un compartiment j d'un modèle en tranches identiques
$nd_{j(sortie)}$	Numéro du nœud de sortie d'un compartiment j d'un modèle en tranches identiques
N_{nd}	Nombre total de nœud de la matrice de connectivité et débits
nd_i	Numéro d'un nœud (i allant de 1 à N_{nd})
N_{br}	Nombre total de branches de la matrice de connectivité et débits
P	Nombre total d'équation à résoudre
p	Numéro l'équation
Q_v	Débit volumique $[m^3.s^{-1}]$
$Q_{v,j}$	Débit volumique dans le compartiment j $[m^3.s^{-1}]$
Q_v^{conv}	Débit volumique convectif $[m^3.s^{-1}]$
Q_v^{turb}	Débit volumique turbulent $[m^3.s^{-1}]$
Q_m	Débit matière $[mol.s^{-1}]$
$Q_{m,j}$	Débit matière dans le compartiment j $[mol.s^{-1}]$
$Q_m^{A\to B}$	Débit matière $[mol.s^{-1}]$ du compartiment A vers B
r_w	Vitesse de réaction de la réaction w $[mol.m^{-3}.s^{-1}]$
r_i	Vitesse de réaction de l'espèce i $[mol.m^{-3}.s^{-1}]$
S	Surface d'échanges entre deux compartiments
t_{react}	Temps caractéristique de la réaction chimique
t	temps
t_0	Temps initial des signaux d'entrées d'un modèle
t_f	Temps maximum des signaux d'entrées d'un modèle
t_{simu}	Temps maximum de la simulation
$u_{i,j}\ (t)$	Concentration de l'espèce i à l'entrée du compartiment j $[mol.m^{-3}]$
$u_j\ (t)$	Concentration à l'entrée du compartiment j $[mol.m^{-3}]$
V_j	Volume du compartiment j $[m^3]$
V_m	Volume du sous-volume m
W	Nombre total de réaction chimique
w	Numéro de la réaction chimique
$y_{i,j}\ (t)$	Concentration de l'espèce i à la sortie et à l'intérieur du compartiment j $[mol.m^{-3}]$
$y_j\ (t)$	Concentration à la sortie du compartiment j $[mol.m^{-3}]$

Lettres Grecques

α	Valeur d'un débit volumique convectif $[m^3.s^{-1}]$
$\alpha_{lemoullec}$	Pourcentage du débit convectif
α_{potier}	Rétro-mélange dans une cascade de J_{retro} RPA
β	Valeur d'un débit volumique turbulent $[m^3.s^{-1}]$
Γ	Fraction de surface (ou volume) contenant la catégorie de vitesse prédominante $(0{,}5 < \Gamma < 1)$
Δx	Distance entre le centre de deux compartiments voisins
Δt	Pas de temps d'intégration numérique
ϵ	Dissipation de l'énergie turbulente $[m^2.s^{-3}]$
Θ	Rapport du nombre de compartiments parfaits sur le nombre compartiments au total $(0 < \Theta < 1)$
μ_t	Viscosité dynamique turbulente $[kg.m^{-1}.s^{-1}]$
v	Vitesse convective $[m.s^{-1}]$
v^{turb}	Vitesse turbulente $[m.s^{-1}]$
$\nu_{w,i}$	Coefficient stœchiométrique de l'espèce chimique i dans la réaction w
ρ	Masse volumique $[kg.m^{-3}]$
τ_j	Temps de séjour moyen au sein d'un compartiment $[s]$

Nombre sans dimensions

Pe	Nombre de Peclet
Sc_t	Nombre de Schmidt turbulent
C_μ	Constante du modèle $k - \epsilon$

Abréviation et Acronyme

RPA	Réacteur parfaitement agité
RP	Réacteur piston
MFN	Mécanique des fluides numériques
DTS	Distribution de temps de séjour
$[\boldsymbol{A_{CD}}]$	Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange
$[\boldsymbol{A_P}]$	Matrice des paramètres
ZE	Zone élémentaire
ZH	Zone homogène
ZC	Zone compartimentée
PIV	Particle Image Velocimetry
T_{GICI}	**T**ranche à **G**éométrie **I**dentique avec un réseau de **C**ompartiments de géométrie **I**dentique

Introduction générale

Contexte

(Fauduet, 2012) propose un ouvrage académique très complet sur l'état de l'art du génie des procédés. Le terme *génie* y est défini comme « l'acte de création industrielle dans lequel l'ingénieur intervient en concevant, bâtissant ou utilisant un appareil pour y fabriquer des produits utilisables dans la société » et le terme *procédé* comme « l'ensemble des moyens et des méthodes mis en œuvre pour fabriquer et/ou séparer les composés issus de la transformation chimique ». La description du fonctionnement, l'optimisation, la commande et la régulation des réacteurs chimiques sont les tâches de l'ingénieur en génie des procédés. Pour cela il est en partie nécessaire de traduire les comportements des réacteurs chimiques lors de sollicitations extérieures en termes de modèles mathématiques et de pouvoir comparer les comportements réels observés avec les comportements simulés. Dans ces travaux de thèse, nous nous intéressons essentiellement à la modélisation des réacteurs chimiques et par extension à tout système au sein duquel s'écoule un fluide. Le champ d'applications est donc très large et concerne aussi bien des réacteurs agités, des colonnes à bulles ou à lit fixe, des installations d'épuration de type canal ou des systèmes naturels tels que des étangs ou des rivières pour ne citer que ces exemples. Cette thèse porte sur une méthode de modélisation originale et peu développée, la modélisation compartimentale, qui est un compromis entre deux autres méthodes de modélisation beaucoup plus matures et dont la méthodologie est bien établie : la modélisation systémique et la mécanique des fluides numérique.

La modélisation systémique est basée sur la création d'un réseau de réacteurs idéaux interconnectés (une dizaine maximum) représentatifs du comportement global de l'hydrodynamique du système. Les réacteurs idéaux vont du Réacteur Parfaitement Agité (RPA) au Réacteur Piston (RP) en prenant en compte d'éventuels volumes morts et/ou court-circuits (Levenspiel, 1999). Il s'agit d'une approche globale qui a été largement utilisée dans le passé et qui reste encore utilisée de nos jours (Laurent et al., 2015), (Leon et al., 2014), (Ben Gaida et al., 2012), (Behin and Bahrami, 2012). L'approche est simple à mettre en œuvre car le modèle se construit à partir de courbes de traçage expérimentales (notamment des distributions de temps de séjour pour les systèmes ouverts) et d'informations sur le procédé pour donner une réelle pertinence au modèle. Ces modèles peuvent être complétés en y ajoutant les bilans de chaleur et de matière et permettent ainsi de simuler rapidement le fonctionnement de réacteurs. Cette modélisation des réactions chimiques est possible à condition que le temps de passage moyen des molécules dans un réacteur idéal soit largement inférieur au temps caractéristique des réactions. Comme les modèles systémiques ne contiennent généralement pas plus d'une

vingtaine de réacteurs idéaux, la taille de ces derniers est relativement grande, ce qui induit un temps de passage important et qui rend impossible la modélisation de réactions chimiques trop rapides ou mettant en jeu des phénomènes de micro-mélange. De plus, de par la simplicité de la structure, les résultats obtenus peinent à rendre compte des phénomènes locaux.

La mécanique des fluides numérique (MFN) est basée sur la résolution *a minima* des équations de la conservation de la masse et de la quantité de mouvement (Navier-Stokes) au sein d'un grand nombre de mailles (typiquement plusieurs centaines de milliers). D'autres phénomènes peuvent être pris en compte comme les transferts de chaleur ou des réactions chimiques. Dans le domaine du génie des procédés, si l'écoulement est turbulent, ce sont principalement les modèles de type « RANS » qui sont utilisés, tels que le modèle $k - \epsilon$ même si l'augmentation constante des puissances de calcul permet d'envisager à long terme la simulation numérique directe. (Ranade, 2001) propose un ouvrage très complet traitant de la MFN appliquée au génie des procédés. La MFN est aujourd'hui un outil indispensable et est utilisée dans la plupart des travaux de recherche contemporains. Par exemple, pour les cuves agitées nous pouvons citer entre autres (Wadnerkar et al., 2016), (Niño-Navarro et al., 2016) ou (Ri et al., 2017) et pour les colonnes à bulles (Abdulrahman, 2016), (Bhusare et al., 2017) ou (Fletcher et al., 2017) (liste non exhaustive). Les temps de calcul encore assez longs pour des systèmes complexes, la surabondance d'informations que procure la MFN et le post-traitement des données qui en résulte restent des contraintes non négligeables.

La modélisation compartimentale est une approche intermédiaire qui décrit le réacteur chimique en un réseau de compartiments, structurels et fonctionnels (de la dizaine à quelques centaines de compartiments). Le réseau de compartiments est créé à partir d'informations provenant d'expériences de traçage, d'informations techniques sur le réacteur chimique et de simulations de l'écoulement à l'aide de la mécanique des fluides numérique. La tâche consiste à simplifier efficacement l'ensemble de ces données et en particulier celles issues de MFN qui sont très abondantes afin de déterminer un modèle suffisamment simple pour gagner en temps de calcul et suffisamment détaillé pour être représentatif des phénomènes à l'échelle locale. Les bilans de matière et les bilans thermiques permettent de simuler le fonctionnement du réacteur étudié. La littérature propose des modèles à compartiments offrant une représentation du comportement global du procédé presque aussi simple que des modèles systémiques sur des réacteurs chimiques mettant en jeu des phénomènes pourtant complexes. La précision des résultats obtenus est affectée mais reste comparable à celle obtenue par la MFN avec des temps de calcul beaucoup moins importants. Les travaux les plus remarquables sont ceux de (Rigopoulos and Jones, 2003), (Le Moullec et al., 2010), (Alvarado et al., 2012), (Delafosse et al., 2014), ou encore (Nauha and Alopaeus, 2015). La modélisation systémique et la mécanique des fluides numérique sont à l'opposé l'une de l'autre et elles ont des avantages et des inconvénients très différents. Lorsque seule l'hydrodynamique globale est nécessaire ou des simulations pour évaluer les grandes tendances de fonctionnement, un modèle systémique est souvent suffisant. A l'inverse lorsque des réactions chimiques très complexes doivent être

simulées, il est nécessaire d'utiliser la MFN réactive. La modélisation compartimentale est une approche intermédiaire qui tire le meilleur parti des deux autres méthodes en offrant un compromis entre la finesse des simulations et une représentation physique lisible avec des temps de calcul très courts. Alors que la modélisation systémique et la mécanique des fluides numérique sont des approches qui ont été très largement développées et utilisées dans la littérature avec une méthodologie mature, très peu d'articles sont dédiés à la modélisation compartimentale. Cette méthode a été appliquée de façon ciblée et prometteuse sur quelques réacteurs ou systèmes mais les méthodologies proposées ne semblent pas facilement transposables d'une application à une autre.

Objectif de la thèse

L'objectif principal de la thèse est d'apporter une contribution au développement d'une méthodologie générale de la modélisation compartimentale dans le but de la rendre transposable le plus facilement possible à des cas d'études très différents.

Notre approche consiste à considérer la modélisation compartimentale comme un continuum entre la modélisation systémique et la mécanique des fluides numérique (Figure 1). Nous souhaitons proposer une solution pour générer un modèle à compartiments quelle que soit la nature des données à disposition. La méthode devrait théoriquement être capable de prendre en compte des cas allant d'un écoulement monophasique sans réaction ni transfert de chaleur à des réacteurs polyphasiques sièges de réactions et transferts complexes.

Deux étapes clés composent la méthode : d'une part la construction du réseau de compartiments et d'autre part le calcul des échanges entre ces derniers. Nous souhaitons identifier les techniques de découpage les plus polyvalentes d'une part et identifier l'impact des cinétiques chimiques sur le découpage. Le calcul des échanges est pris en compte via des échanges convectifs et turbulents. La littérature est unanime sur la manière de calculer les échanges convectifs mais la méthode de calcul des échanges turbulents est plus hétérogène. Nous souhaitons donc identifier quelle approche est la plus adaptée en fonction de la situation.

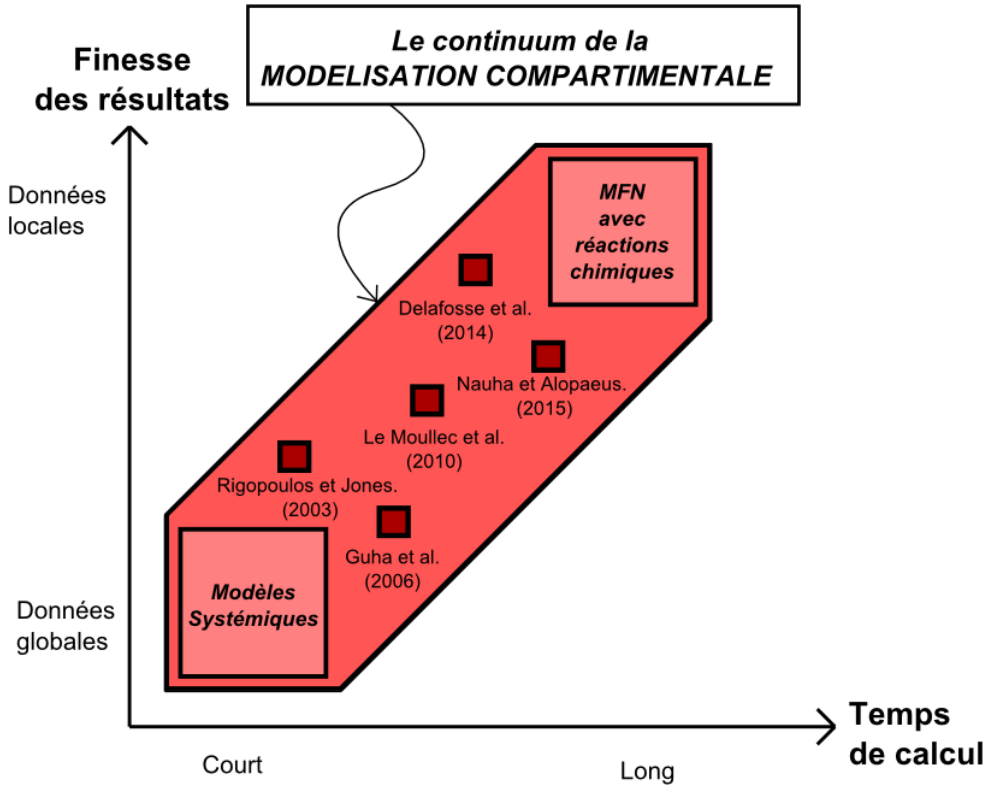


Figure 1 : Illustration du continuum de la modélisation compartimentale

Les compartiments sont des volumes dans lesquels toutes les grandeurs sont homogènes ce qui permet de simplifier l'écriture du bilan de matière au sein de ces derniers. Mais l'écriture du système d'équations différentielles peut s'avérer difficile. Là où la modélisation systémique et la mécanique des fluides numérique bénéficient de plusieurs logiciels (Par exemple DTS Pro pour les modèles systémiques ou ANSYS-Fluent pour la MFN), la modélisation compartimentale reste l'apanage d'algorithmes de calcul « maison », propres à chaque laboratoire. C'est pourquoi le second objectif de cette thèse consiste à développer un outil de génération du système d'équations différentielles à partir de la structure du modèle, qui facilitera l'application de la méthode.

Démarche scientifique

Le premier chapitre de cette thèse est consacré à l'analyse des travaux existant et permettra de définir le champ d'application de notre méthode, d'identifier certaines méthodes de découpage *a priori* plus polyvalentes que les autres (techniques de division et en particulier le découpage en tranches) et d'identifier les différentes manières de calculer les échanges turbulents (il en existe trois qui n'ont jamais été comparées).

Dans le second chapitre, nous présentons notre méthode synthétisée par un organigramme. Nous présentons en détail les différents degrés de finesse réalisables qui dépendent de la nature

des données expérimentales et numériques à disposition et de l'objectif du modèle. Différentes techniques de division d'un champ d'une grandeur scalaire sont exposées, préférables aux techniques d'agglomération de mailles car elles offrent une grande souplesse de découpage. La méthodologie de calcul des échanges est présentée en détails avec en particulier la description de trois méthodes de calcul des échanges turbulents. Les équations différentielles à résoudre sont établies, le solveur numérique choisi. Un outil de lecture et d'écriture du système d'équations différentielles est présenté, appelé « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange ». Cette matrice permet de rendre compte mathématiquement de l'agencement de n'importe quel réseau de compartiments ainsi que des échanges de matière entre ces derniers.

Dans le troisième chapitre, nous avons sélectionné un cas d'application afin de mettre à l'épreuve les points de la méthode les plus discutables et dont l'analyse bibliographique n'a pas été suffisante pour prendre position *a priori*. Deux aspects ont été testés, l'applicabilité du découpage en tranches identiques et la comparaison des méthodes de calcul des échanges turbulents. Dans ce cas d'étude, on considère un écoulement dans une cuve rectangulaire présentant des dissymétries et une large gamme de vitesses, à la surface de laquelle est dispersé un principe actif. Il s'agit d'un cas particulièrement défavorable à la méthode proposée dans le chapitre 2 qui permettra de tester la robustesse et les limites de cette approche.

Dans un dernier chapitre nous détaillons les fonctionnalités des algorithmes développés durant ces travaux de thèse. L'originalité de ces algorithmes, qui a constitué toute la difficulté de leur développement, est le caractère général de leur structure. L'objectif de ces algorithmes consiste à écrire et résoudre un système d'équations différentielles relatif à un modèle dont on ne connait pas *a priori* la structure. Le noyau central de ces algorithmes est la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange », définie dans notre méthode. L'ensemble de ces algorithmes a été incorporé dans un logiciel commercialisé par Progepi, le centre de transfert et valorisation du LRGP.

CHAPITRE I : **Etat de l'art de la modélisation compartimentale allant des modèles systémiques aux simulations de mécanique des fluides numériques**

I.1 Introduction

Un procédé industriel est destiné à produire, le plus économiquement et avec le moindre impact possible sur l'environnement, un produit avec des propriétés contrôlées à partir d'une variété de composés de départ. Cela est réalisé à travers une succession de traitements physiques et/ou chimiques comme le montre la Figure I-1 qui représente un exemple de schéma simplifié de fonctionnement d'un procédé chimique industriel. Généralement, les composés de départ subissent d'abord des traitements physiques afin de les mettre sous une forme dans laquelle ils peuvent être chimiquement transformés au sein du réacteur. Les produits de réaction peuvent ensuite subir d'autres traitements physiques avant d'atteindre leur forme finale désirée (notamment en termes de pureté).

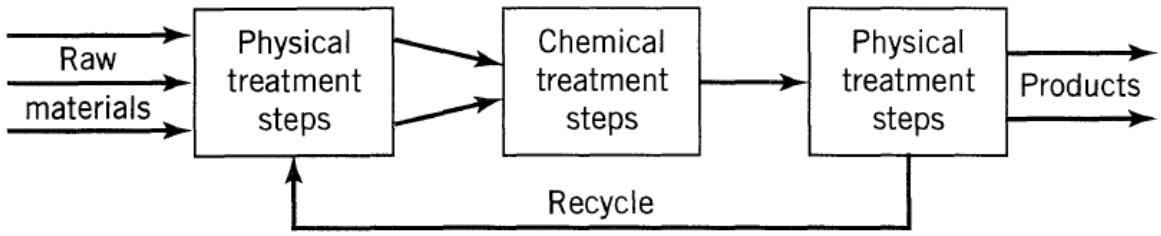


Figure I-1 : Schéma général d'un procédé industriel **(Levenspiel, 1999)**

Le cœur du procédé industriel est le réacteur chimique où ont lieu les réactions chimiques. Les traitements physiques sont encore souvent réalisés par des opérations unitaires, même si le développement des réacteurs multifonctionnels tend de plus en plus à inclure les phases de séparation au sein même du réacteur. (Fauduet, 2012) propose un ouvrage général traitant du génie des procédés où sont recensées, entre autres, les différentes opérations unitaires existantes (distillation, séchage, lyophilisation, décantation, etc.).

Le fonctionnement, l'optimisation et le contrôle des réacteurs nécessitent de disposer d'un modèle prédictif, de complexité plus ou moins importante. Les modèles peuvent être basés sur une description plus ou moins fine de la physique ou sur des approches purement mathématiques.

L'objectif principal de notre travail est de développer une méthode de modélisation du fonctionnement des **réacteurs chimiques**. Nous verrons que trois approches de complexité différente peuvent être différenciées même s'il existe finalement un continuum entre ces méthodes. Leur point commun est que l'hydrodynamique des fluides est systématiquement prise en compte d'une manière ou d'une autre dans la première étape de modélisation. De ce fait, les différentes approches peuvent présenter un intérêt pour étudier toute portion d'espace traversée par des fluides qui y séjournent pendant des durées variables : réacteurs chimiques bien évidemment mais aussi séparateurs, bassins fluviaux (étang, canal de traitement des eaux,

etc.), local ventilé, etc. D'une manière générale, les méthodes sont applicables pour étudier tous les **systèmes en écoulement réactifs ou non**. En fonction de l'objectif de la modélisation, les différents processus qui interviennent dans le système étudié sont pris en compte par l'ajout d'équations spécifiques (transfert de chaleur, transfert de matière, réactions chimiques…) permettant de simuler l'évolution des produits auxquels on s'intéresse de façon plus ou moins détaillée.

I.1.1 Problématique

Les méthodes de modélisation que nous décrivons dans ce chapitre ont le point commun de décrire l'écoulement au sein du volume total du **réacteur chimique ou du système en écoulement, réactif ou non** (*par la suite pour des raisons de simplification ou d'opportunité on emploiera indifféremment le terme incomplet* **réacteur** *ou* **système**) par un réseau de sous-volumes interconnectés dans lesquels on connaît le comportement hydrodynamique du fluide en écoulement. Le spectre d'application est théoriquement très large allant de la cuve agitée à la colonne à bulles en passant par les réacteurs de type canal, (Trambouze and Euzen, 2002). Les différences entre les méthodes portent sur le moyen de détermination de ces sous-volumes (empirique, par le calcul ou la simulation, par une analyse…), leurs caractérisations (tailles, localisation, comportement de la matière…) et la façon dont ils échangent entre eux. En fonction du type de modélisation, nous avons choisi des noms différents pour désigner ces sous-volumes.

I.1.1.1 La modélisation systémique

Depuis les années 1950, les chercheurs se sont efforcés de modéliser les *réacteurs chimiques* par des modèles constitués de réacteurs dits « idéaux ». Les **réacteurs idéaux** sont définis par (Villermaux, 1993) comme « des configurations réactionnelles particulièrement simples, où les conditions hydrodynamiques et physiques sont supposées idéalisées et bien déterminées : cuve parfaitement agitée, écoulement piston parfait, pertes de charge et phénomènes de diffusion négligeables, absence de gradients de concentrations et de température. ». Deux cas extrêmes sont bien connus, celui du Réacteur Parfaitement Agité (**RPA**) et du réacteur piston (**RP**), et ont longtemps été utilisés pour une prédiction rapide des performances des réacteurs. Entre 1960 et 1980 ont été développés des modèles plus détaillés basés sur la constitution de réseaux composés de ces réacteurs idéaux. Ils sont déterminés à partir d'informations permettant de prendre en compte la non idéalité de l'écoulement. Ces modèles, encore souvent utilisés aujourd'hui, permettent d'obtenir rapidement une première estimation des performances. Il n'existe pas toujours de lien direct entre la localisation des réacteurs idéaux dans le modèle et le sous-volume correspondant dans le réacteur. Il s'agit donc d'une approche globale basée sur des réacteurs idéaux « fonctionnels » mais pas toujours localisés spatialement. Néanmoins, le

volume résultant de la somme des volumes des réacteurs élémentaires est égal au volume total du système.

I.1.1.2 La mécanique des fluides numérique

En parallèle, la Mécanique des fluides numérique (MFN), et d'une façon générale, les modélisations basées sur les éléments ou les volumes finis, se sont développées. Ces approches découpent le système étudié de façon purement géométrique en plusieurs milliers, centaines de milliers ou millions de **mailles** de compositions homogènes et dans lesquelles on résout les équations de Navier-Stokes. Ces approches sont souvent prédictives et précises mais elles conduisent aussi à des temps de calcul élevés et à une abondance d'informations parfois délicates à utiliser. Elles donnent un descriptif précis et local du fonctionnement permettant une grande fiabilité dans l'extrapolation à d'autres conditions opératoires. (Ranade, 2001) propose un ouvrage dédié à la mécanique des fluides numériques appliquée au génie des procédés.

I.1.1.3 La modélisation compartimentale

L'approche systémique et la mécanique des fluides numérique sont des approches très opposées avec des avantages et des inconvénients qui ne répondent pas toujours aux contraintes industrielles pour lesquelles on souhaite un compromis entre précision des données modélisées et temps de calcul. Le travail présenté dans cette thèse consiste à développer une approche intermédiaire provenant de la complexification de modélisation systémique et de la simplification des résultats issus de la MFN. Plusieurs travaux ont déjà été réalisés en ce sens sur des applications bien précises et avec des approches assez différentes. Dans ces études, on parlera de **compartiments** pour nommer les sous-volumes qui subdivisent le système. Dans ces travaux, la méthodologie est souvent pilotée par l'application, et n'est pas toujours directement transposable à un autre problème.

Le but de ce chapitre est de faire un rappel sur la modélisation systémique et les outils développés pour simplifier les modèles issus de la MFN. Cet état de l'art sera la base de travail du développement de la méthode de **modélisation compartimentale** développée dans cette thèse. La littérature regorge de publications sur l'approche systémique. Nous avons choisi de sélectionner un nombre restreint de publications mettant particulièrement en évidence l'évolution des démarches dans la construction des modèles. En revanche, l'approche compartimentale a été peu étudiée, et nous avons essayé d'être le plus exhaustif possible.

I.2 Modélisation dite « systémique »

I.2.1 Introduction

Dans les systèmes ouverts en écoulement permanent, le temps passé par chaque molécule de fluide dans le volume qui lui est accessible est caractérisé par la Distribution des Temps de Séjours (DTS). La DTS est obtenue à l'aide d'expériences de traçage sous conditions particulières et elle peut être représentée par des modèles constitués d'un assemblage de réacteurs idéaux. Elle donne des informations globales sur l'hydrodynamique du système. Les modèles développés à partir de courbes de DTS permettent une description macroscopique de l'hydrodynamique. Cette section se consacre à la description des démarches permettant l'élaboration de modèles à partir de courbes de DTS. Ces modèles sont communément appelés dans la littérature **modèle systémique,** et les volumes qui les composent sont des **réacteurs idéaux**.

I.2.1.1 Rappels de base sur le traçage expérimental et les réacteurs idéaux

Avant de commenter les travaux relevant du domaine de la modélisation systémique, il est utile de rappeler les concepts de base sur les méthodes expérimentales de traçage et le concept de réacteur idéal. Ces outils sont régulièrement évoqués dans la littérature et le lecteur trouvera ici les connaissances minimales pour comprendre les analyses.

Distribution de temps de séjours

La théorie de la distribution de temps de séjours (DTS) a été introduite par (Danckwerts, 1953). Il est possible d'accéder expérimentalement à la DTS d'un système ouvert en régime permanent à l'aide d'une expérience de traçage qui consiste à injecter en entrée un traceur puis à enregistrer sa concentration $C(t)$ au cours du temps au niveau de la sortie. Plusieurs contraintes doivent être respectées. Le traceur doit être une substance inerte n'ayant pas d'influence sur l'hydrodynamique. L'injection du traceur doit être homocinétique : en pratique, on réalise l'injection sous forme d'une impulsion courte dans une canalisation de section réduite où règne une turbulence intense. Le détecteur doit être sensible au débit de traceur dans la section totale de sortie : en pratique, la détection est réalisée dans des conditions similaires à l'injection. On obtient la courbe de DTS expérimentale après différents traitements préliminaires qui consistent à corriger les imperfections expérimentales (vérification que la queue de courbe atteint bien la ligne du zéro, traitement du bruit dû à un milieu diphasique ou aux appareils de mesure, recalage de la courbe sur le zéro, prise en compte de la radioactivité du traceur, normalisation, etc.). La grandeur qui est représentée en fonction du temps est la concentration normée du traceur $E(t)$:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^\infty C(t)dt} \qquad [I.1]$$

De cette définition, il découle que $\int_0^\infty E(t)dt = 1$. La Figure I-2 est une représentation graphique d'une DTS.

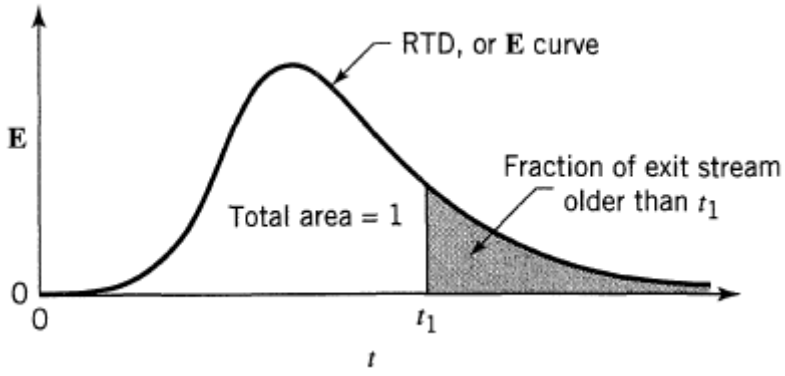


Figure I-2: Représentation graphique d'une DTS. (Levenspiel, 1999)

Une DTS peut-être caractérisée par ses moments simples μ_n et centrés ν_n :

$$\mu_n = \int_0^\infty t^n . E(t) . dt \qquad [I.2]$$

$$\nu_n = \int_0^\infty (t - \mu_1)^n . E(t) . dt \qquad [I.3]$$

Deux moments particuliers sont fréquemment utilisés, il s'agit de μ_1 et ν_2. Le moment simple d'ordre 1 représente le temps de séjour moyen :

$$\mu_1 = \int_0^\infty t . E(t) dt \qquad [I.4]$$

Le moment centré d'ordre 2 représente la variance σ^2, c'est-à-dire l'étalement de la DTS autour de la moyenne :

$$\nu_2 = \int_0^\infty (t - \mu_1) E(t) dt \qquad [I.5]$$

Pour un volume accessible au fluide $V\ [m^3]$ traversé par un débit volumique constant $Q\ [\frac{m^3}{s}]$, on peut calculer le temps de passage par la relation suivante :

$$\tau = \frac{V}{Q} \qquad [I.6]$$

En l'absence de dysfonctionnement, le temps de passage τ est égal au temps de séjour moyen μ_1. Dans la pratique, il n'est pas rare que le temps de séjour moyen soit inférieur au temps de passage. Cela est souvent dû à la présence de zones relativement stagnantes échangeant très

peu avec l'écoulement principal, voire des zones mortes lorsqu'il n'y a pas d'échange de matière. Ce diagnostic est souvent utilisé dans la littérature, par exemple par (Leon et al., 2014). (Levenspiel, 1999) et (Villermaux, 1993) proposent des ouvrages académiques résumant l'ensemble des connaissances nécessaires à la compréhension de la modélisation par réacteurs idéaux à partir de DTS. Depuis, de nombreux travaux ont permis de s'affranchir des hypothèses de base restrictives de la mesure des DTS ce qui permet d'accéder à des mesures de DTS sur des systèmes plus complexes (polyphasiques, à entrées et/ou sorties multiples, de débits et/ou volumes variables…). Des traitements préliminaires sophistiqués ont aussi permis de mesurer des DTS dans des conditions moins restrictives que celles nécessaires dans la théorie de base. On trouvera un approfondissement des méthodes de traitement préliminaire dans les ouvrages de (Thýn et al., 2000) et (Thýn and Zitný, 2002).

Les réacteurs idéaux

D'une manière générale, la modélisation de l'hydrodynamique s'effectue par un découpage en zones dans lesquelles on modélise le comportement du fluide par un comportement idéalisé et bien déterminé. Les premières modélisations consistent à faire l'hypothèse que le réacteur est constitué d'une seule zone qui possède un comportement parfait : soit parfaitement mélangé ou à l'inverse complètement ségrégé. Sur la base de ces hypothèses, deux réacteurs idéaux ont été proposés : le réacteur parfaitement agité d'une part, qui sera nommé réacteur batch (RB) pour un système fermé ou réacteur parfaitement agité (RPA) pour un système ouvert, et le réacteur piston (RP) d'autre part. La Figure I-3 représente une schématisation historique de ces trois réacteurs.

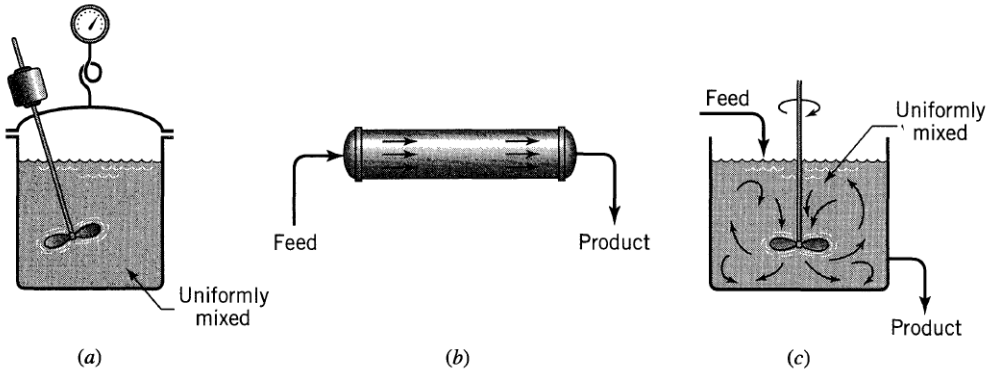


Figure I-3: Schématisation des trois premiers réacteurs idéaux. (a) réacteur batch (RB) (b) réacteur piston (RP) (c) réacteur parfaitement agité (RPA). (Levenspiel, 1999)

Dans le réacteur batch, les réactifs sont initialement chargés dans le réacteur où ils sont mélangés et sont laissés un certain temps pour qu'ils puissent réagir. Les produits sont ensuite déchargés. Il s'agit d'une opération instationnaire où la composition change au cours du temps mais reste uniforme dans l'ensemble du volume du système, si le réacteur est réellement parfaitement mélangé.

Dans le cas des régimes d'écoulements ouverts, le réacteur piston (RP) suppose que le fluide est ordonné en tranches qui ne se chevauchent pas (donc ne se mélangent pas) avec tout autre

élément en amont ou en aval. A l'inverse, le réacteur parfaitement agité (RPA) suppose que la composition du milieu réactionnel est uniforme. De plus, la composition de sortie du RPA est la même qu'en son sein.

Pour rendre compte de la non idéalité du mélange, les hypothèses de base ont progressivement été affinées. La cascade de RPA et le RP à dispersion axiale permettent de rendre compte d'une certaine inhomogénéité du mélange et de représenter des cas intermédiaires entre RPA et RP. Les concepts de zone morte, court-circuit, ou de recirculation peuvent être ajoutés aux réacteurs idéaux. Chaque réacteur idéal possède un ensemble de paramètres qui le définissent (temps de passage, volume, dispersion axiale, nombre de réacteurs en série…). Il est alors possible par la suite, d'inclure des réactions chimiques à de tels modèles par l'intermédiaire de bilans de matière spécifiques pour chaque réactif en vue de prédire les performances du réacteur.

Calcul des DTS des modèles et prise en compte de réactions chimiques

La Figure I-4 présente un élément de volume et un bilan de matière classique.

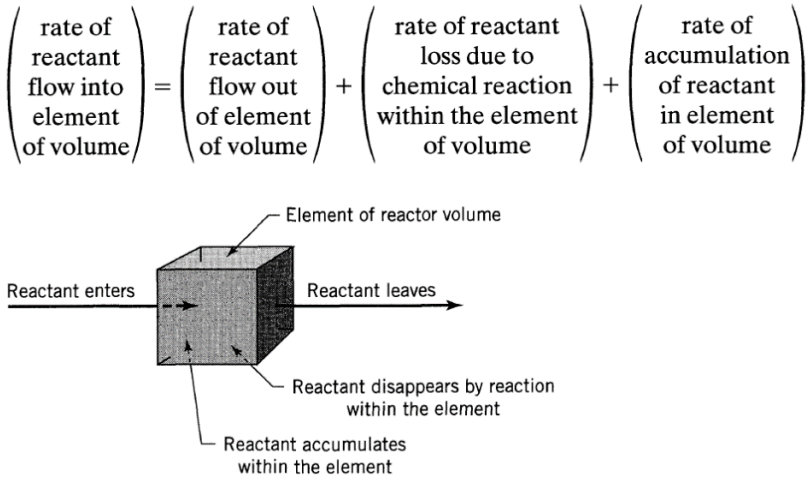


Figure I-4 : Schéma du bilan de matière au sein d'un élément de volume. (Levenspiel, 1999)

Le bilan de matière au sein d'un tel volume V_j est obtenu à partir d'un bilan potentiellement instationnaire sur des espèces chimiques mais sur une hydrodynamique stationnaire (débits volumiques Q_v constants, une hydrodynamique instationnaire n'est pas traitée dans ce manuscrit). On note $u(t)$ la concentration d'entrée et $y(t)$ celle de sortie. Plusieurs paramètres sont pris en compte :

- Le débit matière entrant : $Q_m\left[\frac{mol}{s}\right] = Q_v\left[\frac{m^3}{s}\right].u(t)\left[\frac{mol}{m^3}\right]$
- Le débit matière sortant : $Q_m\left[\frac{mol}{s}\right] = Q_v\left[\frac{m^3}{s}\right].y(t)\left[\frac{mol}{m^3}\right]$
- Le débit dû à la réaction chimique : $r_i\left[\frac{mol}{s.m^3}\right].V_j[m^3]$

- Le débit d'accumulation : $V_j[m^3].\frac{dy(t)\left[\frac{mol}{m^3}\right]}{dt[s]}$

L'équation du bilan de matière est donnée par l'équation suivante :

$$Q_v.u(t) + r_i.V_j = \ Q_v.y(t) + V_j\frac{dy(t)}{dt} \qquad [I.7]$$

La DTS théorique se calcule à partir du bilan de matière sur le traceur dans lequel le terme de réaction chimique n'intervient pas (traceur inerte) et en résolvant les équations différentielles en découlant. Pour les réacteurs idéaux simples, il est possible de calculer analytiquement les expressions des DTS. Par exemple dans le cas du RPA, le bilan de matière est le suivant dans le cas d'un débit constant : $u(t) = y(t) + \tau\frac{dout(t)}{dt}$. Dans le cas d'une injection de type Dirac, c'est-à-dire $u(t) = +\infty$ pour $t = 0$ et $u(t) = 0$ sinon, la résolution analytique de l'équation différentielle donne $E(t) = \frac{1}{\tau}\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$. Lorsque le réseau de réacteurs élémentaires est complexe, une résolution numérique s'impose. (Leclerc et al., 1995) ont mis au point un logiciel « DTSPro », qui permet de calculer facilement la DTS d'un modèle constitué d'une association de réacteurs idéaux.

I.2.1.2 Méthode de validation des modèles et limitations

En comparant une DTS expérimentale et une DTS théorique, il est possible de valider un modèle hydrodynamique composé d'un réseau de réacteurs idéaux. Pour autant, une concordance parfaite est une condition nécessaire mais non suffisante pour véritablement obtenir un modèle représentant l'hydrodynamique. En effet, un tel modèle peut fournir une DTS théorique identique à l'expérience mais qui ne donne pas une représentation physique pertinente de l'écoulement. Le paragraphe suivant relate des travaux qui ont pour but de donner un peu plus de sens physique à la structure du modèle systémique, même s'il ne s'agit toujours que de modèles relativement simplifiés.

I.2.2 Vers une structure de modèle de plus en plus détaillée

Les travaux décrits dans ce paragraphe ont le point commun de s'attacher à développer des modèles systémiques toujours plus détaillés et dont la structure des réacteurs idéaux qui le composent soit la plus cohérente possible avec les comportements hydrodynamiques macroscopiques. Dans certains cas, la prise en compte de réactions chimiques est intégrée dans ces modèles. La connaissance de singularités du système, l'analyse de la forme des courbes de DTS expérimentales ou encore la prise en compte d'informations complémentaires peuvent donner des indices très pertinents sur la manière dont doit être structuré le réseau de réacteurs élémentaires.

I.2.2.1 Utilisation de singularités du système

Le moyen le plus simple de rendre un réseau de réacteurs idéaux représentatif des grandes tendances de l'écoulement est de directement prendre en compte l'existence de particularités, lorsqu'elles existent, dans la structure du réacteur (forme de l'enveloppe, inserts, agitateurs…) ou dans l'écoulement (sens prédominant, répartitions de phases). Les travaux suivants illustrent donc des cas de figure où la prise en compte des particularités géométriques permet d'orienter la construction du modèle.

(Behin and Aghajari, 2008) étudient l'efficacité d'un séparateur par décantation huile-eau de forme cylindrique. Ils prennent en compte la grande longueur du séparateur permettant son efficacité et le fait que l'écoulement soit unidirectionnel avec les phases aqueuses et organiques qui se déplacent parallèlement. Le Tableau 1 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. La séparation liquide-liquide d'une phase organique et d'une phase aqueuse est une opération unitaire couramment utilisée dans le domaine pétrochimique. Le système étudié est composé d'un cylindre horizontal traversé par un mélange eau-huile qui se sépare par décantation. En plus des caractéristiques physico-chimiques des phases en présence, l'hydrodynamique est un des paramètres les plus sensibles pour optimiser le fonctionnement du séparateur, par exemple pour avoir la plus petite longueur possible de cylindre tout en gardant une efficacité raisonnable. Le modèle développé dans ces travaux vise donc à décrire l'hydrodynamique. **Construction du modèle.** La structure du modèle est déterminée à l'aide de la connaissance du principe de fonctionnement du séparateur. L'écoulement est divisé en deux zones, celle du bas qui est principalement composée d'eau et celle au-dessus qui est principalement composée de la phase organique. Au fur et à mesure que l'on progresse dans la longueur du cylindre, les deux phases se séparent par décantation. Pour modéliser ce phénomène, une cascade de RPA dans la longueur du cylindre est choisie pour représenter l'écoulement de chacune des deux phases. Les auteurs ont choisi un nombre de RPA identique pour les deux phases car elles traversent toutes les deux la même distance, égale à la longueur du cylindre. Les dispersions sont donc considérées implicitement comme identiques. La cascade de RPA représente la zone où les deux phases sont mélangées, il reste donc un grand volume en haut et en bas où les phases sont bien séparées. Ces volumes ne rentrent pas en compte directement dans le processus de séparation à l'interface et ils sont modélisés par des zones stagnantes échangeant avec chacun des RPA. La Figure I-5 illustre le modèle ainsi développé. Les paramètres du modèle sont le nombre de RPA et le temps de séjour moyen. Ils sont calculés par optimisation des paramètres afin de faire coïncider les DTS issues du modèle et de l'expérience pour chacune des phases. **Résultats.** Plusieurs tests ont été réalisés à différentes hauteurs d'eau, ajustables par soutirage. Les données indiquent que les volumes morts restent constants à environ 95% du volume total quelle que soit la hauteur d'eau. Ce résultat

s'explique par le fait que ces grands volumes permettent juste d'affiner l'efficacité de la décantation. L'efficacité de la séparation est également calculée en mesurant les concentrations en entrée et en sortie des sédiments. Les données indiquent que l'efficacité est maximale pour une hauteur d'eau de $0.7\,m$ (minimum : $0{,}5\,m$ et maximum $0{,}9\,m$). Par ailleurs, l'influence du nombre de RPA en série montre que le modèle est le plus prédictif lorsque le nombre total de RPA dans chacune des phases est le plus important ce qui correspond à un écoulement proche du RP. L'interprétation quantitative du nombre de RPA reste plus délicate.

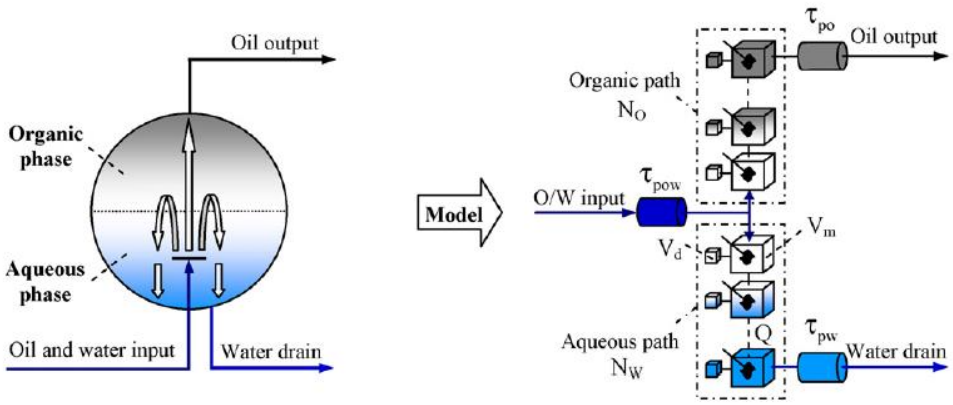


Figure I-5 : (gauche) Schéma d'une coupe du cylindre de séparation. (Droite) modèle systémique décrivant la structure de l'écoulement des deux phases. (Behin and Aghajari, 2008)

La même problématique séparation eau-huile, mais cette fois dans un séparateur par flottation, est étudiée par (Behin and Bahrami, 2012). Ils analysent dans le détail la configuration spatiale du système (localisation de l'injection de gaz, présence d'une chicane, localisation d'un tapis roulant) pour construire la structure de leur modèle. De plus, l'analyse du comportement hydrodynamique (fort mélange au niveau de l'injection de gaz, comportement piston sur le tapis roulant récupérant les boues) permet de choisir le type de modèle. Le Tableau 2 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

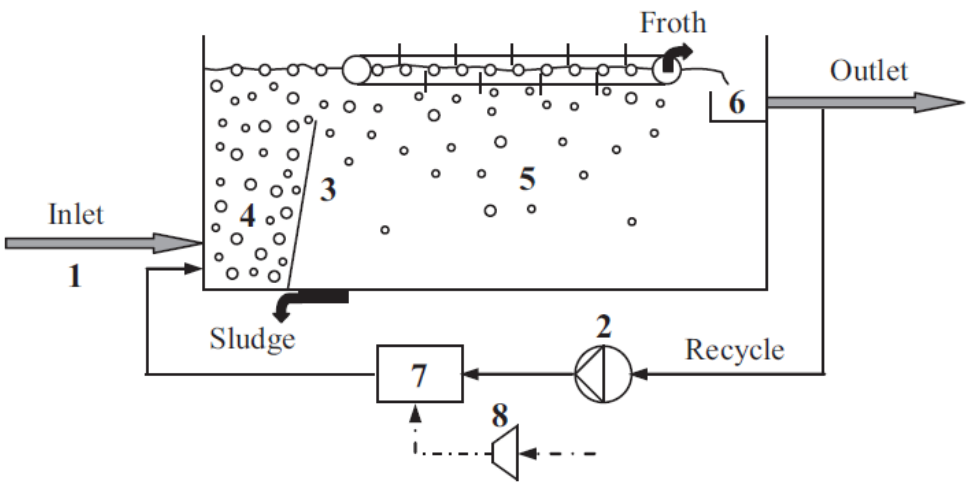


Figure I-6 : Schéma du flottateur (Behin and Bahrami, 2012)

Contexte. Le fonctionnement du flottateur, décrit sur la Figure I-6, consiste à injecter l'eau usée en entrée (1) et à récupérer de l'eau traitée en sortie (6). Une portion de l'eau traitée est recyclée par une pompe (2) et saturée en air à haute pression par un saturateur (7) alimenté par un compresseur (8). L'eau saturée en air entre en contact avec l'eau usée (4) ; des microbulles d'air se forment à cause de la baisse de pression lors de l'entrée dans le réservoir formant des agglomérats bulles-particules d'huile qui se dirigent vers la surface libre, guidés par une chicane inclinée (3). Le mélange entre ensuite dans la zone de séparation (5) où les agglomérats sont entraînés à la surface par un racleur avant d'être évacués vers la sortie (6). Les mécanismes physico-chimiques d'interaction entre les bulles d'air et les particules d'huile sont peu connus mais l'efficacité globale du flottateur dépend essentiellement de l'hydrodynamique. Le modèle développé dans ces travaux sert à décrire l'hydrodynamique sans la relier directement à l'efficacité du traitement des eaux. **Construction du modèle.** En prenant en compte les mécanismes locaux du système, les auteurs construisent un modèle relativement simple de l'écoulement de la phase liquide constitué uniquement de RPA et de RP en fonction de la zone du réacteur. La Figure I-7 illustre le parallèle entre le flottateur et la structure du modèle. La zone de contact où règne un fort mélange dû aux bulles d'air est modélisée par un RPA. La zone de séparation est modélisée par un RP car l'écoulement est horizontal avec peu d'échange et de mélange. Un volume mort échangeant avec la zone de séparation permet de prendre en compte la zone derrière la chicane où le fluide est quasi-immobile. Enfin, une recirculation depuis la sortie vers l'entrée avec un RP permet de rendre compte du temps nécessaire au liquide pour traverser les appareils de saturation en air. La détermination des volumes de chaque réacteur idéal est réalisée par optimisation en ajustant la DTS du modèle à la courbe expérimentale. Afin de donner encore plus de sens au réseau de réacteurs idéaux, les auteurs réalisent une simulation de MFN pour analyser les champs de vitesse et identifier des comportements décrits par les réacteurs idéaux (RPA et RP). Ils ont ainsi validé le choix des réacteurs idéaux utilisés dans le modèle systémique. **Résultats.** Le modèle prédit un volume mort d'environ un quart du volume total. Ce volume mort diminue lorsque le débit d'entrée augmente du fait de l'augmentation du mélange en entrée mais cela

n'affecte pas la qualité de séparation. L'hydrodynamique est représentée avec un modèle assez simple mais permettant de faire le lien entre les paramètres du modèle et les paramètres opératoires.

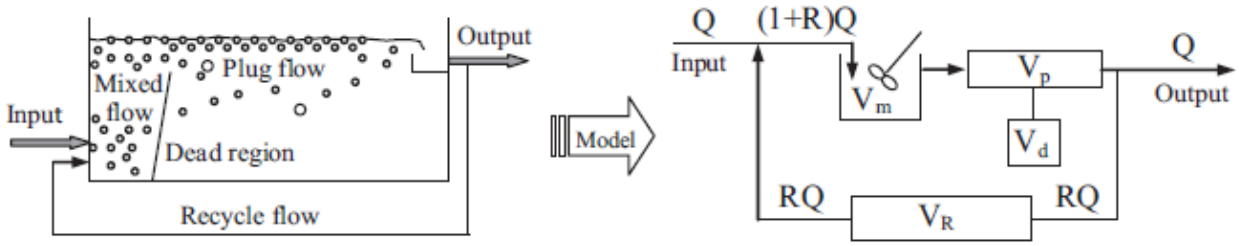


Figure I-7 : Gauche : Schéma du flottateur par air. Droite : modèle systémique décrivant la structure de l'écoulement et la recirculation. (Behin and Bahrami, 2012)

Les deux exemples précédents concernent un séparateur (système en écoulement non réactif au sens que nous l'avons défini en tête de chapitre). (Ben Gaida et al., 2012) étudient l'hydrodynamique d'un procédé constitué de deux bioréacteurs et d'une boucle de filtration destinés à produire une levure. La méthodologie prend soin de modéliser étape par étape chaque bioréacteur et les différents équipements présents pour chacune des phases mises en jeu (liquide et gaz). Le Tableau 3 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

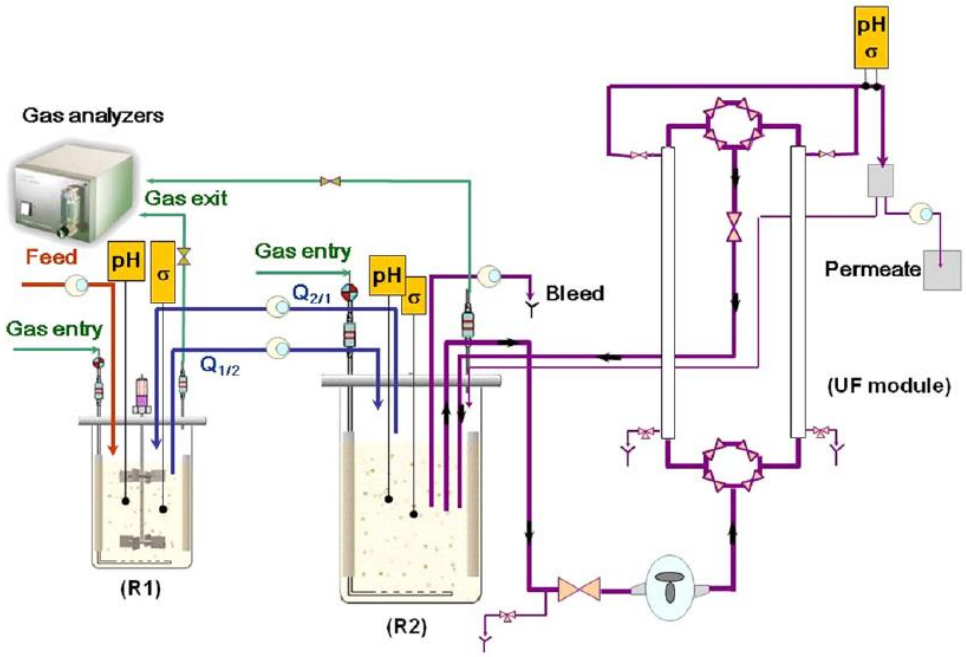


Figure I-8 : Bioréacteur continu à deux niveaux étudié par (Ben Gaida et al., 2012)

Contexte. Trois phases différentes sont présentes dans le procédé, une phase liquide, une phase gazeuse et une phase solide (biomasse). La Figure I-8 est une schématisation du procédé étudié qui est composé de quatre parties différentes. Le premier étage est un réacteur agité (R1), siège de la production de la levure d'un volume de 5L, équipé d'une turbine Rushton à 6 pales et 3 chicanes. Le second étage est constitué d'un réacteur agité par un jet plongeant (R2) d'un volume de 8L destiné à une production intensive d'éthanol. Le second étage (R2) est connecté à une boucle de filtration de 6,5L composée de deux modules parallèles permettant le passage de l'éthanol et la rétention des micro-organismes. Le perméat est partiellement recyclé et réinjecté dans le second réacteur (R2). De par la complexité du procédé, des simulations de MFN nécessiteraient des temps de calcul élevés au regard des besoins. Pour étudier l'écoulement, les auteurs utilisent des techniques de traçage afin de déterminer les temps de mélange et les distributions de temps de séjours (DTS). Des expériences de traçage ont été réalisées pour différents modes de fonctionnement (réglables par l'utilisateur) : batch pour le temps de mélange, continu sans recirculation pour déterminer la structure du modèle et optimiser les paramètres, continu avec recirculation pour tester la robustesse du modèle. De plus, quatre débits différents ont été testés. La phase solide (biomasse) n'est pas prise en compte : on suppose qu'elle est uniformément répartie dans la phase liquide. **Construction du modèle.** Les écoulements des phases liquides et de la phase gazeuse sont modélisés par deux modèles distincts. Pour donner de la pertinence à la structure du modèle, les auteurs ont pris en compte la structure du réacteur dans sa globalité et soigneusement analysé la forme et les paramètres des courbes de traçage obtenues expérimentalement. La Figure I-9 montre les modèles systémiques de chacune des phases gazeuse et liquide déterminés par l'analyse des données expérimentales et le recoupement des informations provenant des différents modes de fonctionnement. Pour la phase gazeuse, les deux parties du réacteur (R1) et (R2)+filtration sont modélisées par un RP suivi d'une cascade de RPA. Pour la phase liquide, les deux parties du réacteur (R1) et (R2)+filtration sont modélisées par une cascade de RPA et l'extraction du perméat est modélisée par un simple RP. **Résultats.** Le modèle développé a permis de représenter, a priori de façon acceptable, l'hydrodynamique globale du système grâce à l'interprétation de nombreuses mesures de DTS dans des conditions opératoires variées. Ces travaux décrivent un exemple où l'hydrodynamique d'un procédé composé de plusieurs phases et plusieurs étapes peut être correctement représentée avec quelques réacteurs idéaux à condition de disposer de données expérimentales très abondantes (différents modes de fonctionnement, différentes conditions opératoires, nombreux points de mesures). Le modèle n'en reste pas moins relativement simple et ses performances prédictives.

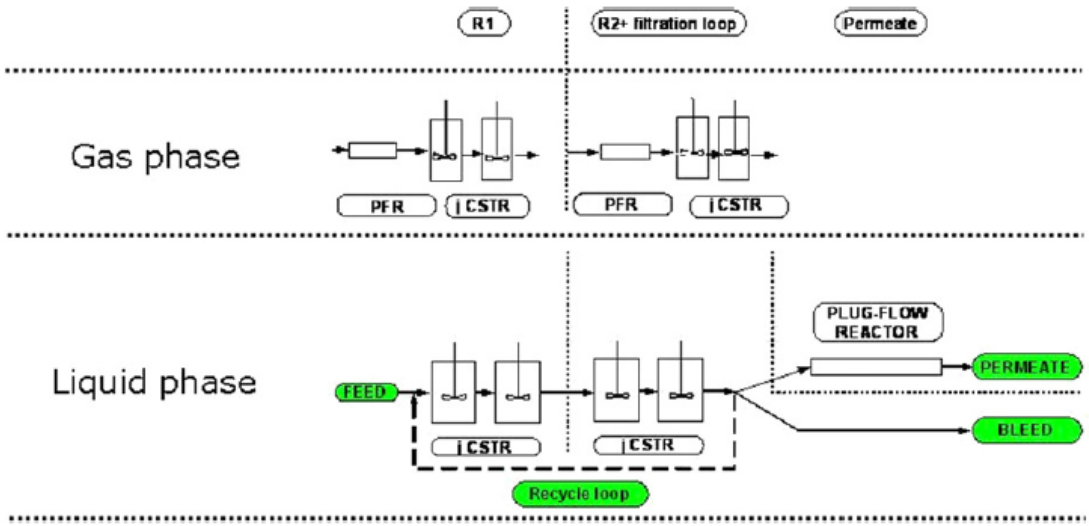


Figure I-9 : Modèle systémique de la phase gazeuse et la phase liquide du réacteur schématisé à la Figure I-8. (Ben Gaida et al., 2012).

(Leon et al., 2014) étudient un réacteur chimique tri-phasique à la géométrie interne très structurée. Le réacteur est divisé en plusieurs modules qui sont tous représentés dans le modèle proposé. Une analyse des temps de séjour moyens expérimentaux et théoriques permet d'orienter la construction du modèle pour chaque module élémentaire. Le Tableau 4 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

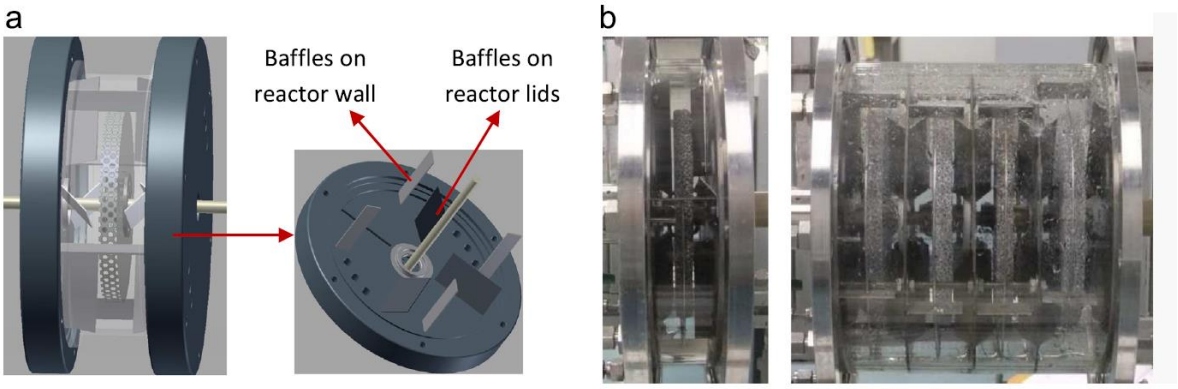


Figure I-10 : (a) Schéma d'un module. (b) photo du réacteur

Contexte. Les réactions d'hydrogénation étudiées dans ces travaux nécessitent trois phases : une phase liquide, une phase gazeuse ainsi qu'une phase solide (catalyseur). La conception du réacteur vise à augmenter la surface d'échange entre ces trois phases de manière plus efficace qu'un mélangeur agité. Pour ce faire, le réacteur est décomposé en plusieurs modules identiques (voir schéma Figure I-10 a) pouvant être raccordés entre eux (voir photo Figure I-10 b). Un

module est rempli à moitié de la phase liquide et les nombreux agitateurs mécaniques créent de l'écume. Les agitateurs sont revêtus du catalyseur. Avec cette configuration, on évite d'injecter des micro-particules solides difficiles à séparer et l'écume dispense d'utiliser un dispositif d'injection de gaz comme il est d'usage dans les mélangeurs agités. Chaque module est séparé par un disque avec une ouverture de faible section au centre. Cela permet de favoriser un comportement global de type piston où chaque module est relativement indépendant du suivant (nous verrons qu'il y a tout de même un léger retro-mélange). D'après les auteurs, une telle disposition permet d'augmenter la conversion, la sélectivité et le transfert de matière comparé au réacteur agité standard. Les expériences de traçage sont réalisées sur la phase liquide et le modèle développé se concentre sur l'hydrodynamique de cette même phase. **Construction du modèle.** La première étape consiste à déterminer la structure du modèle dans un seul module. La comparaison des valeurs théoriques du temps de passage $\tau = \frac{V}{Q}$ avec les valeurs du temps de séjour moyen obtenues expérimentalement (moment d'ordre 1 sur les courbes de DTS), à différentes valeurs de débit d'entrée, montre que le temps de passage théorique est plus important que le temps de séjour moyen expérimental, ce qui indique potentiellement des zones stagnantes. C'est pourquoi le modèle représentant chaque module est constitué de deux RPA, l'un représentant la zone fortement agitée du courant principal et l'autre la zone stagnante. L'entrée et la sortie sont disposées sur le RPA représentant le courant principal comme nous pouvons le voir sur la Figure I-11. Le débit d'échange ν_1 entre les deux RPA, et le volume V_2 du RPA à faible agitation, sont les deux paramètres optimisés pour que les courbes de DTS expérimentales et du modèle correspondent.

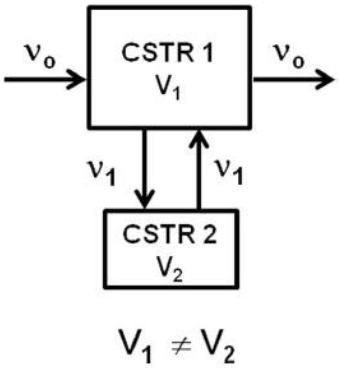


Figure I-11: Structure du réseau de réacteurs idéaux pour représenter un module. (Leon et al., 2014)

La seconde étape consiste à modéliser l'ensemble du réacteur en dupliquant la structure de la Figure I-11 autant de fois que le nombre de modules réels du réacteur. Pour une configuration à quatre modules comme sur la Figure I-10 (b), on obtient le modèle représenté sur la Figure I-12. Un rétro-mélange ν_2 est ajouté afin de prendre en compte les éventuels retours de matière entre chaque module. Il s'agit d'un nouveau paramètre à optimiser (ν_1 et V_2 étant déterminés à l'étape précédente). Des essais sur plusieurs configurations comportant un nombre différent de modules ont permis de valider cette approche. Le débit de rétro-mélange reste quasiment constant quel que soit le débit d'entrée, ce qui confirme la pertinence d'associer un seul RPA

avec échange à un module du réacteur (il a été montré que l'on peut compenser une variation d'un nombre de mélangeurs en ajustant le débit de rétro-mélange, (Potier et al., 2005)).

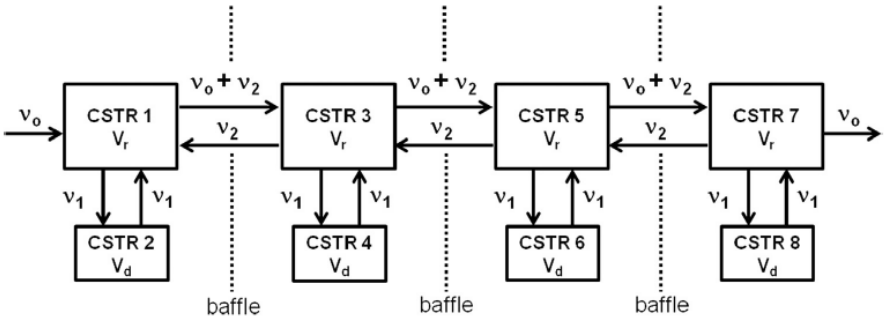


Figure I-12: Structure du modèle correspondant à la géométrie réelle du réacteur. (Leon et al., 2014)

L'incorporation de la réaction chimique dans le modèle est réalisée sans questionnement sur les temps caractéristiques de mélange et de réaction. Ce questionnement n'est pas nécessaire dans ce cas de figure car la très forte agitation dans chaque module, allant jusqu'à créer de l'écume, induit un excellent mélange et un temps de mélange plus petit que le temps de réaction. **Résultats.** Une fois que les paramètres du modèle sont optimisés pour représenter l'hydrodynamique du réacteur chimique, les auteurs incorporent une réaction d'hydrogénation du type $A \rightarrow B \rightarrow C$ de cinétique connue. L'espèce chimique A est un alcyne, l'espèce B un alcène et l'espèce C un alcane. Le modèle est capable de prédire simultanément la concentration des trois espèces mises en jeu dans la réaction d'hydrogénation pour différentes configurations (différents nombres de modules et valeurs de débits d'entrée). Cela permet de calculer la conversion, la sélectivité et le rendement de la réaction. L'influence du débit d'entrée et du nombre de modules peut être étudiée facilement afin de trouver un bon compromis entre une sélectivité améliorée (par un court temps de séjour) et une conversion améliorée (par un long temps de séjour et un comportent piston de l'écoulement obtenu avec l'augmentation du nombre de modules). Le modèle est finalement capable de déterminer quel débit d'entrée et quel nombre de modules en parallèle permet d'atteindre un rendement maximum. Ces travaux présentent le cas d'une géométrie assez complexe qui est modélisée sans l'aide de la MFN et uniquement à partir de la connaissance du fonctionnement du réacteur et des DTS.

I.2.2.2 Utilisation de particularités des courbes de DTS expérimentales

L'existence de singularités dans les courbes expérimentales de DTS peut conduire à des diagnostics de dysfonctionnement mais aussi à des informations pertinentes pour construire un modèle (pic particulier, traînée de courbe….). Nous ne reviendrons pas sur ces aspects largement détaillés dans la thèse de (Claudel, 2002). Néanmoins, excepté pour des cas simples, seuls des

experts avertis sont en mesure de déterminer un modèle sur la base de l'analyse des caractéristiques d'une DTS expérimentale.

(Laurent et al., 2015) utilisent différentes caractéristiques de courbes de DTS expérimentales afin de construire un modèle systémique le plus représentatif possible de l'écoulement réel mis en jeu. Le Tableau 5 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. Les zones de rejet végétalisées (ZRV) sont des procédés peu coûteux qui permettent de diminuer les effets néfastes des effluents. Ils peuvent retenir les particules polluantes durant les débordements des égouts, diminuer la charge polluante en surface grâce à des phénomènes d'infiltration, d'évapotranspiration et évaporation, diminuer le pic hydraulique afin de préserver la forme de la ZRV. Des mesures expérimentales de DTS ont été conduites sur trois ZRV de tailles réelles aux dimensions et formes très hétérogènes. Il y a deux fossés longitudinaux et un étang comme l'illustre la Figure I-13.

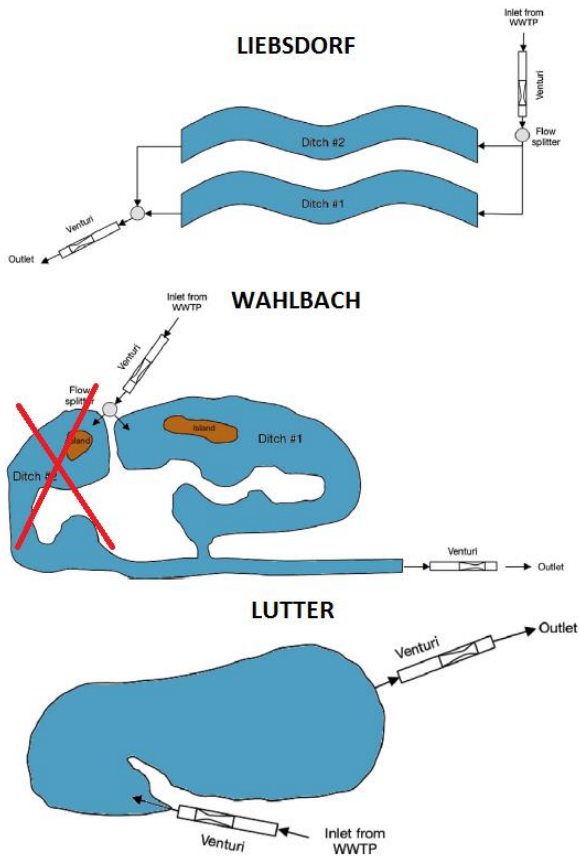


Figure I-13 : Schéma des trois « surface flow treatment wetlands » étudiés par (Laurent et al., 2015). Le Wahlbach n'a qu'un fossé opérationnel.

L'objectif de l'étude consiste à évaluer l'influence des dimensions, formes et recouvrement végétal sur l'hydrodynamique et à proposer un modèle systémique plus élaboré que la cascade

de RPA qui n'est pas adaptée à ce genre de configurations. **Construction du modèle.** Des expériences de traçage avec des traceurs fluorescents ont été conduites sur les trois SFTW et donnent accès aux courbes de DTS. L'analyse de la forme de ces courbes a permis de mettre en évidence des singularités dans l'écoulement et la prise en compte de la géométrie des SFTW ont permis aux auteurs de construire un modèle systémique représentatif des phénomènes mis en jeu. La Figure I-14 illustre les trois modèles. Pour le Liebdorf, les deux canaux sont modélisés par deux RP ouverts à la dispersion sortant soit directement vers la sortie soit sur un RPA représentant un volume mort. Le volume mort est incorporé au modèle car la DTS expérimentale présente une longue queue de courbe et il y a une forte végétation dans les canaux. Le Wahlbach est modélisé par un simple RP car la courbe de DTS et la géométrie correspondent à un tel comportement. La courbe de DTS du Lutter présente une sinusoïde périodique qui indique la présence de fortes recirculations internes. Le modèle se compose d'une cascade de RPA pour l'écoulement principal et la recirculation est modélisée par un RP idéal qui part du dernier RPA et se jette dans le premier. L'ajustement des paramètres est réalisé en décomposant étape par étape la construction du modèle à l'aide de la courbe de DTS expérimentale (modélisation du pic principal avec la cascade de RPA pour déterminer le nombre de RPA et le temps de passage moyen puis détermination graphique de la période entre deux pics successifs pour déterminer le temps de recirculation).

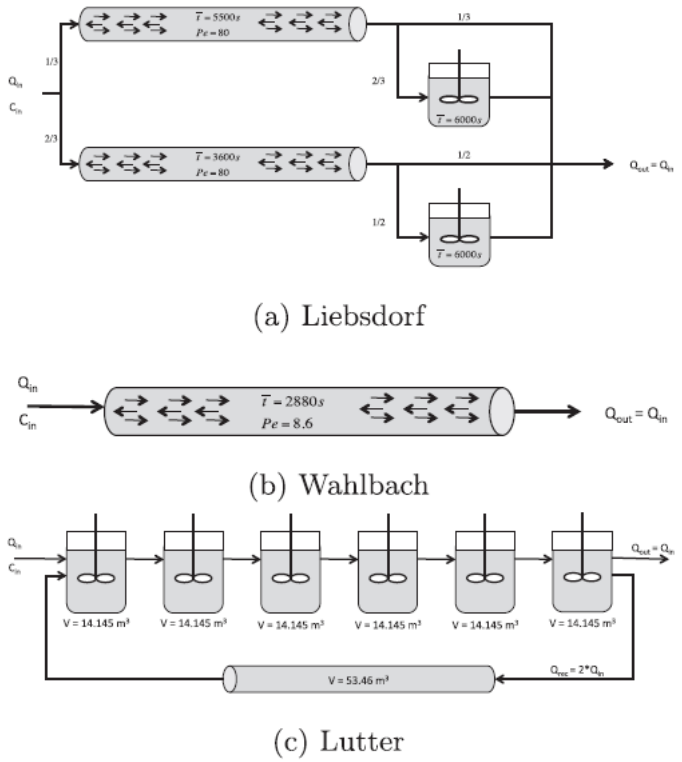


Figure I-14 : Modèles systémiques proposés par (Laurent et al., 2015) pour les trois « surface flow treatment wetlands ».

Résultats. Les modèles systémiques développés sont capables de reproduire les DTS expérimentales. L'analyse de ces courbes de DTS en parallèle de l'analyse de la structure du modèle a permis aux auteurs de diagnostiquer d'éventuelles modifications à apporter aux structures des SFTW afin d'améliorer la capacité d'atténuation des contaminants.

I.2.2.3 Utilisation de données expérimentales diverses

Parfois, la connaissance de la géométrie du système et l'analyse visuelle des courbes de DTS ne sont pas suffisantes. Dans ce cas, il est nécessaire de prendre en compte des données expérimentales supplémentaires si on souhaite donner une cohérence à la structure du modèle. Il peut s'agir de l'analyse d'expériences de traçage coloré ou l'analyse qualitative d'un champ de vitesse obtenu expérimentalement.

(Olander et al., 1995) ont travaillé sur un local ventilé de géométrie cubique où il n'existe pas suffisamment d'indices pouvant aider à la construction d'un modèle répondant aux besoins. L'analyse qualitative de la répartition de fumées colorées dans le local a aidé les auteurs à établir un modèle assez détaillé. Le Tableau 6 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. A l'époque où cet article a été publié, la ventilation était souvent caractérisée uniquement par le taux de renouvellement d'air dans la pièce. Cette information, certes nécessaire, n'était par exemple pas suffisante pour prédire l'influence du relargage accidentel d'un produit toxique dans la pièce (depuis, la MFN a largement permis de résoudre ces problèmes). Une particularité de cette étude qui reste aujourd'hui parfois complexe à traiter est qu'il y a une entrée et deux sorties (une sortie principale et une aspiration locale). L'aspiration locale est une hotte permettant le contrôle de l'évacuation de contaminant. Cette aspiration est prise en compte en effectuant des expériences de traçage (DTS) avec différentes configurations expérimentales : une entrée et deux sorties, une entrée et une sortie (la principale ou la locale).
Construction du modèle. Pour déterminer la structure du modèle, les auteurs analysent qualitativement la répartition de fumées relâchées dans le local. La Figure I-15 montre une interprétation de l'écoulement au sein de la pièce à partir de la visualisation du panache de fumée. Cela permet d'avoir une idée de la structure de l'écoulement de l'air. Il y a l'écoulement principal provenant de l'entrée (branche I). L'écoulement principal continue de se propager vers la sortie (branches II et III). Une partie de l'écoulement revient dans la salle, ce qui est pris en compte par une recirculation (branches IV et V). Les zones auxquelles l'écoulement n'a pas accès sont modélisées par des volumes morts (branche VI). On remarque que malgré le fait que les volumes soient dispersés dans le local, le modèle permet de les rassembler en un seul volume pour limiter le nombre de paramètres. L'étape suivante consiste à associer un modèle composé de réacteurs idéaux à chacune de ces branches. Au niveau de l'entrée, le sens de l'écoulement est monodirectionnel, donc la branche I est modélisée par un RP. Le reste des branches où l'air se propage est modélisé par des cascades de RPA dont le nombre dépend de la dispersion. La Figure I-16 représente le modèle ainsi construit. Le nombre de RPA dans chaque

branche et le temps de séjour moyen ont été optimisés. **Résultats.** Le modèle permet de simuler les réponses à une injection de traceur dans différentes configurations expérimentales : hotte en fonctionnement ou non et différents débits d'entrée. La structure du modèle est complexe mais le fait de disposer de trois courbes de sortie à des points différents et dans des configurations opératoires variées permet une optimisation mathématique fiable des paramètres du modèle. Les zones stagnantes réparties aux 8 coins de la pièce sont simulées par un seul et même volume. On voit ici un exemple de l'aspect fonctionnel mais non localisé dans l'espace des réacteurs idéaux utilisés dans l'approche systémique même si le volume du réacteur idéal est bien égal à la somme des 8 volumes stagnants au coin de la pièce.

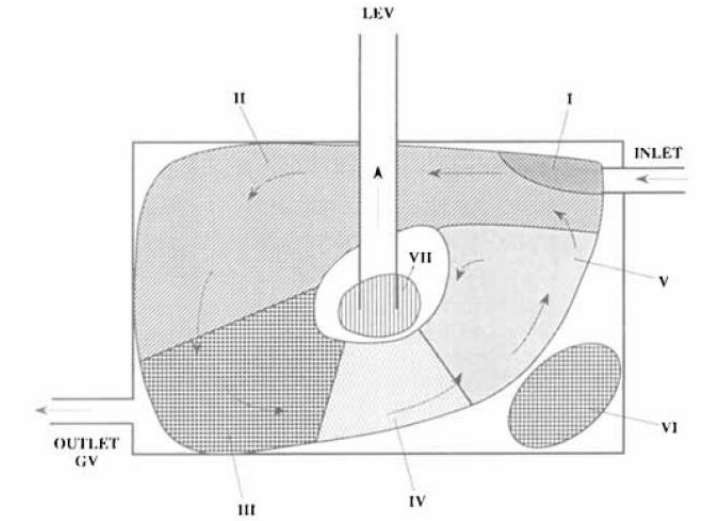


Figure I-15: Interprétation de l'écoulement de manière qualitative à partir de la répartition de fumées colorées. (Olander et al., 1995)

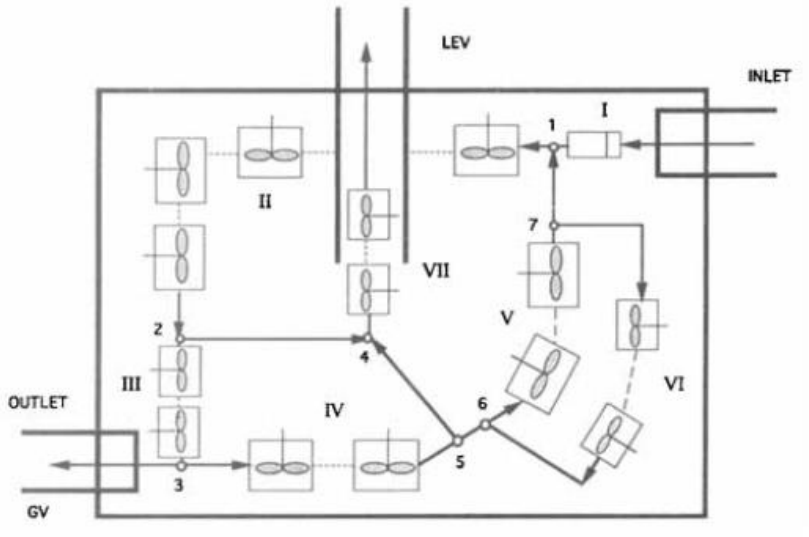


Figure I-16 : Modèle à 7 branches composé de cascades de RPA et d'un RP (Olander et al., 1995).

I.2.3 Automatisation du développement de la structure du modèle

Nous venons de décrire au paragraphe précédent des méthodes « manuelles » de construction de réseau de réacteurs idéaux. Ces méthodes procurent un réseau dont la structure est globalement en cohérence avec les mécanismes locaux de l'hydrodynamique grâce à la prise en compte d'informations complémentaires (structure du système, analyse de courbes de traçage, données expérimentales diverses, etc). Elles nécessitent souvent une analyse personnelle de l'expert. Ceci rend la méthodologie difficilement transposable d'une application à une autre. C'est pourquoi certains auteurs se sont intéressés à l'automatisation du processus de création de modèles systémiques. Ces travaux font l'objet de ce paragraphe.

I.2.3.1 Optimisation mathématique des courbes de traçage

Des méthodes stochastiques ont été développées sur la base de l'algorithme de recuit simulé (Simulated Annealing, SA) par (Laquerbe et al., 1998) et l'algorithme génétique (Genetic Algorithm, GA) par (Laquerbe et al., 2001) dans le cadre d'une étude de local ventilé. Le schéma du local est présenté sur la Figure I-17.

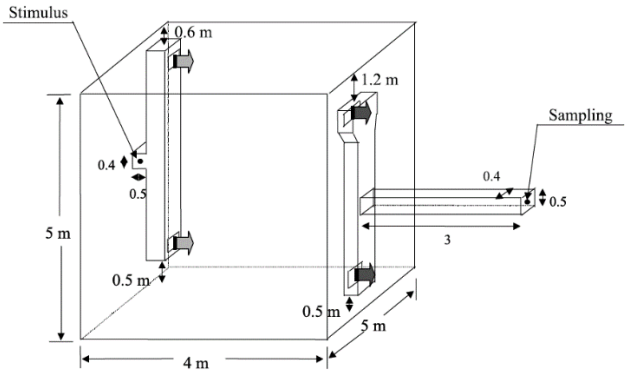


Figure I-17: Dispositif expérimental du local ventilé utilisé par (Laquerbe et al., 2001)

Ces algorithmes ont été initialement développés dans d'autres domaines scientifiques. L'algorithme (SA) consiste à imiter les phénomènes physiques ayant lieu lors du recuit d'un solide et l'algorithme (GA) consiste à imiter les mécanismes de sélection naturelle. L'objectif de ces algorithmes est de générer un réseau de réacteurs idéaux qui minimise l'écart entre la DTS expérimentale et la DTS du modèle par le critère des moindres carrés. Pour ce faire, l'algorithme utilisé se décompose en deux parties, une première vise à déterminer la structure du modèle et la seconde à optimiser les paramètres du modèle. La structure initiale est un RPA dont le volume est celui du réacteur à modéliser, puis étape par étape la structure se complexifie. A priori, ces méthodes n'incluent pas la prise en compte de liens entre les paramètres du modèle et une interprétation physique du procédé. En effet, toute la procédure s'appuie uniquement sur des critères d'optimisation mathématique et la physique du procédé

n'est pas initialement prise en compte. (Laquerbe et al., 2001) proposent de prendre en compte des informations qualitatives issues de la MFN afin de modifier le modèle obtenu par méthode stochastique pour qu'il soit plus représentatif de l'hydrodynamique réelle du système étudié. Les auteurs analysent visuellement la propagation d'Hélium obtenue numériquement dans le local ventilé. Ces observations permettent d'identifier la nécessité de branches particulières dans la structure du modèle et permettent de choisir une structure représentative de l'écoulement. Le modèle obtenu est présenté sur la Figure I-18.

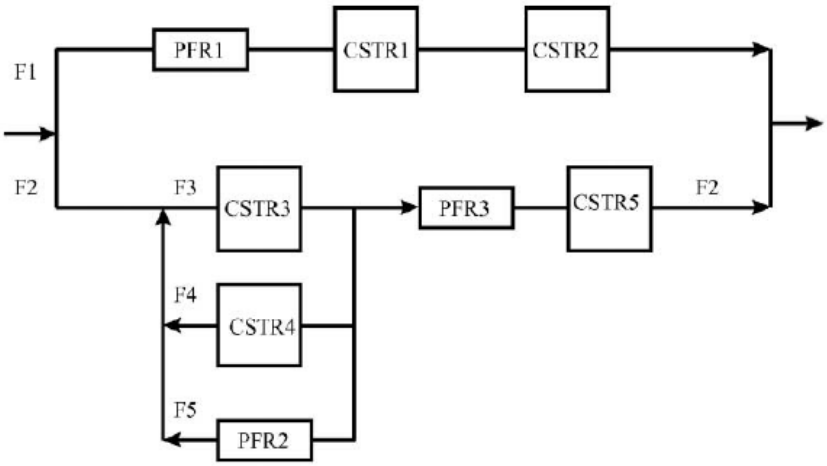


Figure I-18: Modèle obtenu par (C. Laquerbe et al., 2001) par méthode stochastique

Les auteurs apportent donc une méthode capable de donner une structure d'un modèle optimisé mathématiquement, mais la prise en compte de la physique du procédé doit encore être réalisée manuellement.

De manière similaire, (Montastruc et al., 2004) proposent une méthode de modélisation capable de fournir une structure du modèle à l'aide de la méthode stochastique Simulated Annealing (SA). L'objectif de la modélisation est de déterminer le rendement d'un lit fluidisé, siège d'une réaction de précipitation de phosphate de calcium. A la différence des travaux décrits au paragraphe précédent, les auteurs initialisent leur algorithme avec une « super-structure » plutôt qu'avec un RPA unique. Cela évite de devoir éliminer des propositions physiquement non recevables. La « super-structure » doit permettre de prendre en compte l'ensemble de toutes les configurations possibles correspondant à la physique du procédé. La qualité des solutions obtenues dépend de la formulation de la « super-structure ». En effet, si certaines solutions ne peuvent pas être déduites de la « super-structure », l'optimisation des paramètres du modèle n'aura pas de signification physique. Le procédé que les auteurs souhaitent modéliser est un lit fluidisé avec des courants de recirculation à différents niveaux du lit. A partir de cette information, les auteurs proposent la « super-structure » illustrée sur la Figure I-19. A l'aide des algorithmes mathématiques, les auteurs arrivent à calculer la structure la plus simple possible dont tous les paramètres sont optimisés, comme nous pouvons le voir sur la Figure I-20.

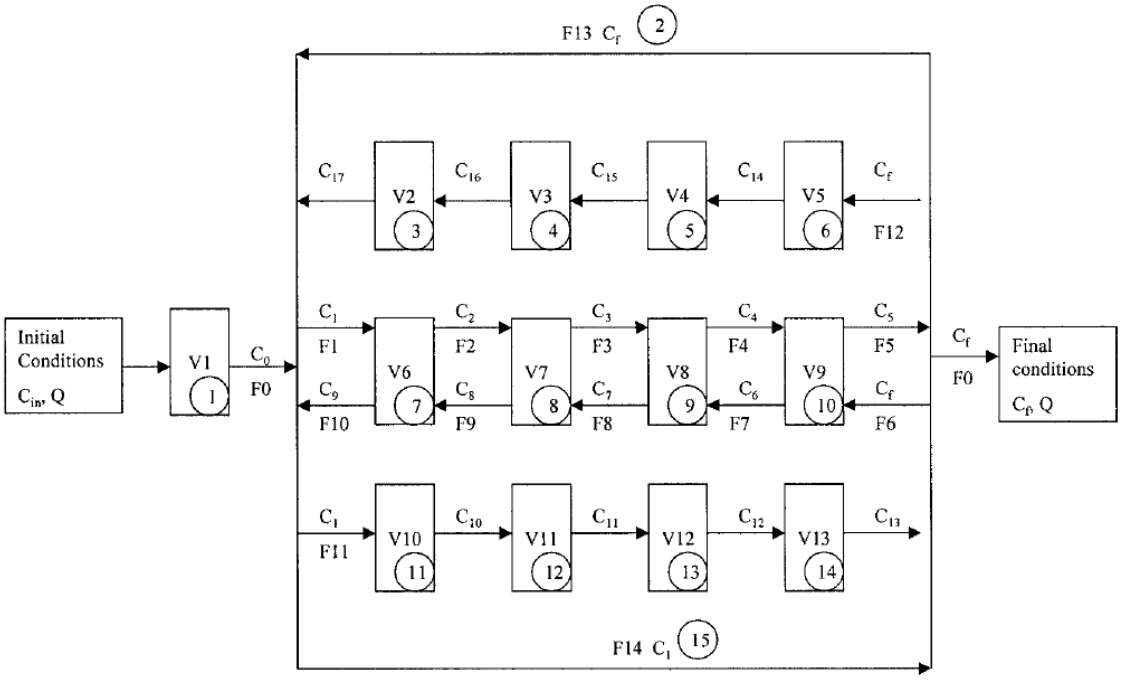


Figure I-19 : "Super-structure" représentant la physique d'un lit fluidisé (Montastruc et al., 2004)

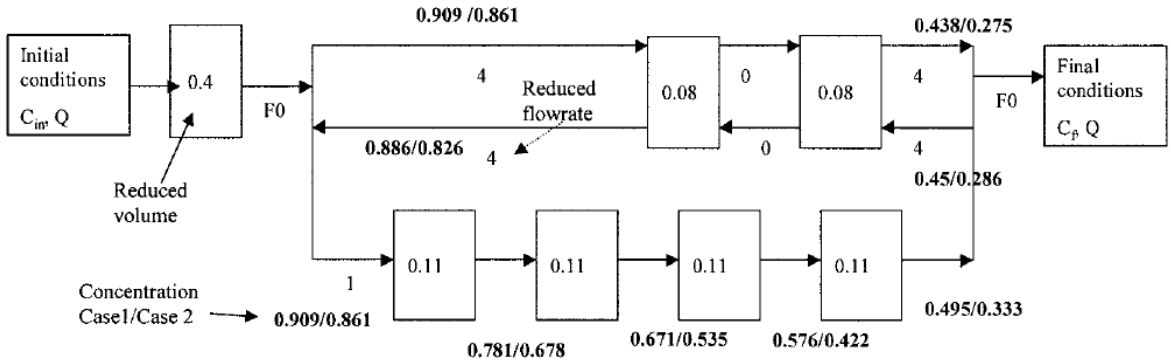


Figure I-20 : Modèle du lit fluidisé après optimisation de la structure et des paramètres (Montastruc et al., 2004)

(Hocine et al., 2008) fait suite aux travaux de (Laquerbe et al., 2001) dans le cadre de l'étude du local ventilé déjà présenté sur la Figure I-17. Les auteurs utilisent ici une méthode déterministe, à l'inverse des méthodes stochastiques, et réutilisent le concept de « super-structure » introduit par (Montastruc et al., 2004). D'après les auteurs, une méthode déterministe a l'avantage, par rapport à une méthode stochastique, de fournir la structure la plus simple possible. Cette méthode consiste toujours à utiliser un algorithme mathématique pour définir une structure du modèle puis à optimiser les paramètres pour avoir la meilleure correspondance possible avec une courbe de DTS expérimentale. Au terme de leurs calculs, les auteurs proposent deux structures donnant de très bonnes correspondances avec l'expérience. Ces structures sont présentées sur la Figure I-21.

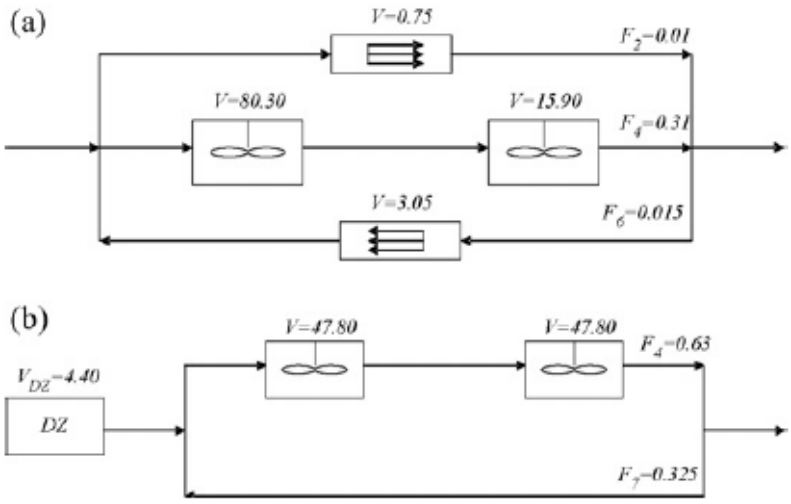


Figure I-21: Deux structures obtenues par (Hocine et al., 2008) avec sa méthode déterministe

Ces structures sont comparées à celles obtenues par (Laquerbe et al., 2001) et présentées sur la Figure I-18. On constate que la constitution des modèles est plus simple et s'obtient de manière plus rapide comme le prédit l'utilisation d'une méthode déterministe. Pour autant, aucun élément extérieur n'est pris en compte pour donner une signification physique à la structure du modèle.

(Ponsich et al., 2009) proposent de modéliser la fusion de verre dans un four par une méthode similaire à celle décrite précédemment. Le four est décomposé en deux parties, la chambre de combustion et le réservoir de verre. Chaque partie est modélisée à l'aide d'un algorithme déterministe par un réseau de RPA et/ou RP à partir d'une « super-structure ». Les auteurs ont testé plusieurs « super-structures » et comparé les résultats obtenus avec des courbes des DTS obtenues à l'aide de MFN.

I.2.3.2 Méthodes d'apprentissage

Les méthodes d'apprentissage sont basées sur la disponibilité de données sur le système puis l'utilisation de mécanismes d'inférences pour construire des règles extrapolant les tendances observées. L'inférence désigne les actions de mise en relation d'un ensemble de propositions, aboutissant à une démonstration de vérité, de fausseté ou de probabilité, sous la forme d'une proposition appelée conclusion. On distingue notamment les inférences déductives, inductives et abductives. Lorsqu'on souhaite modéliser des courbes de DTS par des réseaux de réacteurs idéaux, l'objectif est d'avoir une intelligence artificielle capable de proposer une structure de ce réseau correspondant au mieux à la physique du procédé. Plusieurs méthodes existent telles que le réseau de neurones, le système expert, la logique flou ou encore la logique possibiliste.

(Claudel et al., 2003) proposent une méthode générale fournissant la structure du modèle en utilisant des données issues de courbes de traçage et de la connaissance du procédé. Cette méthode a l'avantage de fournir un modèle avec une réelle signification physique contrairement aux méthodes uniquement basées sur l'optimisation mathématique de courbes de DTS. Les auteurs appliquent la logique possibiliste afin de proposer plusieurs structures possibles qui sont classées de la plus probable à la moins probable. Dans ce but, il est nécessaire d'établir une liste de règles à partir d'informations contenues dans les courbes de DTS et des caractéristiques du procédé. Par exemple, les liens entre les caractéristiques spécifiques des DTS (pics, traînées, pic de recirculation, épaulement…) et les modèles permettent d'établir ces règles. L'intérêt principal de ces travaux réside dans la formulation mathématique d'une méthode capable d'interpréter des données qualitatives afin de produire de manière complètement automatique un réseau de réacteurs idéaux représentatif de la physique du procédé. La Figure I-22 représente le schéma de principe de la méthode développée.

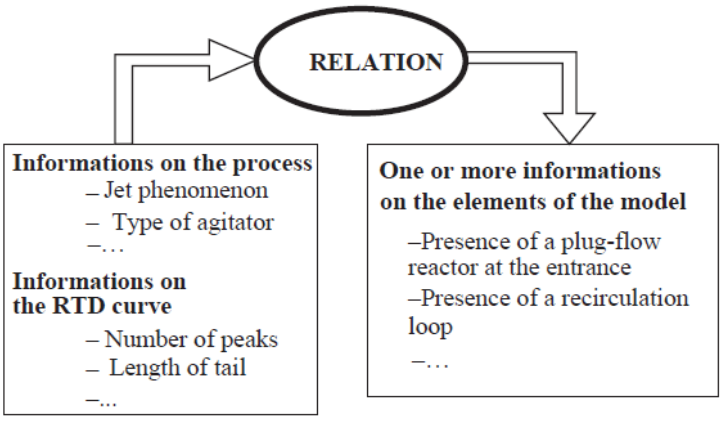


Figure I-22: Schéma de principe de la méthode de modélisation de (Claudel et al., 2003)

Il est proposé 40 modèles sélectionnés parmi la littérature comme étant capables de représenter la plupart des situations communément rencontrées. Un modèle « joker » représentant toutes les autres possibilités est proposé pour le cas où aucun des 40 modèles présélectionnés n'aurait été validé. D'une manière générale, pour modéliser un système avec la méthode des réacteurs idéaux, il y a deux étapes : la recherche de la structure du modèle et l'optimisation des paramètres. Ici, la méthode se concentre uniquement sur la détermination d'une structure. L'optimisation des paramètres a lieu dans un second temps. Cette séparation conforte la pertinence physique du modèle proposé, en évitant tous les modèles n'ayant aucune signification physique qui donneraient une « bonne » courbe de DTS par une optimisation sans garde-fou des paramètres du modèle. La méthode utilisée s'appelle la logique possibiliste et consiste à affecter un coefficient pondéré à la possible occurrence d'un évènement donné. Deux variables sont prises en compte : la « possibilité » qui réduit le doute et la « nécessité » qui consolide les certitudes. En pratique, l'utilisateur répond à un questionnaire où il sélectionne quels faits sont vrais, partiellement vrais ou faux. Plusieurs applications ont été testées et ont permis de valider la méthode. Pour résumer, ces travaux ont l'avantage de proposer une méthode générale capable de donner une structure du réseau de réacteurs idéaux représentative

de la physique du procédé. Les limites résident dans le fait que seuls 40 modèles différents sont proposés et il sera donc possible que la méthode ne parvienne pas à identifier un réseau adéquat.

I.2.4 Conclusions sur la modélisation systémique

Les méthodes visant à représenter les courbes de DTS par des modèles dits « systémiques » consistent à représenter l'hydrodynamique du système par un réseau d'une vingtaine de réacteurs idéaux. Les éventuelles réactions chimiques sont incorporées par la suite. Cela limite les cas d'application où les réactions chimiques sont relativement lentes par rapport aux temps de mélange dans les réacteurs idéaux. Notons également que les méthodes décrites ici ne sont applicables que pour les systèmes ouverts. La structure et la valeur des paramètres du modèle sont déterminées « à la main » à partir de particularités du procédé et d'analyse de courbes de traçage, (Behin and Bahrami, 2012), (Leon et al., 2014), (Laurent et al., 2015). Des algorithmes ont été développés pour assister l'utilisateur dans l'étape de construction du modèle. Les travaux de (Claudel et al., 2003) constituent l'approche la plus intéressante car elle permet de prendre en compte des informations qualitatives sur le système (telle que la présence de volume mort ou d'agitation et de singularités dans les courbes de DTS) et de proposer automatiquement une structure de modèle la plus plausible à l'aide d'un algorithme. La majorité des auteurs soulignent la même lacune, à savoir le manque de lien entre les paramètres du modèle et les phénomènes physiques mis en jeu. Il a par exemple été observé dans la littérature que pour un même problème plusieurs modèles systémiques pouvaient correctement prédire la DTS comme le montrent les travaux de (Laquerbe et al., 2001) et (Hocine et al., 2008).

D'une manière générale, l'avantage de ce type de méthode réside dans la rapidité de mise en œuvre avec un minimum de données initiales. Les résultats obtenus sont globaux mais robustes dans les conditions expérimentales et d'échelles pour lesquelles le modèle a été établi. La limite de ce type de modélisations est leur faible pouvoir d'extrapolation. Selon l'objectif de la modélisation, cela peut être suffisant. On souligne, cependant, la remarquable efficacité des modèles systémiques lorsqu'on dispose de suffisamment d'informations pour construire le modèle, et ce, sans avoir recours à la MFN. (Leon et al., 2014) ont récemment réalisé un modèle de quelques RPA sur un réacteur à géométrie complexe avec réaction chimique.

Nous allons présenter dans le paragraphe suivant d'autres approches proposant une représentation rigoureusement localisée des phénomènes mis en jeu.

I.3 Modélisations dites « topologiques »

I.3.1 Introduction

Dans ce paragraphe, il est toujours question de découper le volume total du système étudié en sous-volumes plus petits. En revanche, la localisation spatiale de ces volumes est, cette fois, rigoureusement définie. C'est pourquoi ces méthodes sont qualifiées de « topologiques ». Nous verrons qu'il existe plusieurs niveaux de finesse dans les travaux présentés. Certaines méthodes consistent uniquement à découper le système de façon purement géométrique en plusieurs milliers de volumes homogènes, ce qui mène à un maillage du même genre que ceux effectués en mécanique des fluides numérique (MFN). D'autres méthodes découpent le volume en un nombre plus restreint de **compartiments** (typiquement moins d'une centaine) sur la base de critères physiques (vitesses, concentrations, taux de gaz…). Dans ce cas, les compartiments peuvent être de tailles et de formes très variables. Dans tous les cas, la problématique consiste à simplifier des résultats de mécanique des fluides numérique. Le point commun de ces modèles dits topologiques est que le découpage conduit à un réseau de compartiments au sein desquels toutes les grandeurs sont homogènes. Cette hypothèse permet de résoudre des bilans de matière très simples (voir équation [I.7]). La difficulté de l'utilisateur réside dans la construction d'un réseau de compartiments dans lesquels ce bilan de matière a un sens.

I.3.1.1 Rappels de base sur la Mécanique des Fluides Numérique (MFN)

La mécanique des fluides numérique permet de modéliser un système en écoulement réactif ou non, par un réseau très fin de **mailles** qui découpe le volume du système modélisé. Différentes méthodes de maillage peuvent être utilisées, car les mailles peuvent être de formes et de tailles différentes. Une modélisation par MFN nécessite une étude préalable du maillage afin d'obtenir un nombre total de mailles le plus petit possible sans perte d'informations. Mais quelle que soit la méthode choisie, les mailles représentent rigoureusement l'espace géométrique du système. En ce sens, il s'agit d'une approche topologique. L'écoulement des fluides est résolu à partir des équations de Navier-Stokes à l'aide de différentes méthodes numériques. Il est possible de résoudre directement les équations avec les méthodes dites « Direct Numerical Simulation » (DNS), ou des hypothèses simplificatrices peuvent être implémentées comme dans les méthodes « Reynolds Averaged Navier-Stokes » (RANS) ou « Large Eddy Simulation » (LES) pour représenter la turbulence des écoulements. La majorité des travaux étudiés dans cet état de l'art, qui concerne uniquement le domaine du génie des procédés, utilisent les modèles « RANS » et la turbulence est modélisée avec le modèle $k-\epsilon$ (Launder and Spalding, 1974) où la turbulence est considérée comme isotrope. La grandeur k représente l'énergie cinétique turbulente (exprimée en $[m^2.s^{-2}]$) et ϵ la dissipation de l'énergie turbulente (exprimée en $[m^2.s^{-3}]$). Une des hypothèses de bases de ce genre de modèle est que la viscosité turbulente μ_t, (exprimée en $[kg.m^{-1}.s^{-1}]$), est modélisée de la manière suivante :

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \qquad [I.8]$$

Où C_μ est une constante du modèle qui a été ajustée en comparant de nombreuses expériences d'écoulement turbulents ($C_\mu = 0{,}09$) et ρ est la masse volumique du fluide. (Ranade, 2001) proposent un ouvrage très complet traitant de la MFN appliquée au génie de procédé. Il est

possible de coupler les calculs de l'hydrodynamique avec des phénomènes de transfert thermique, de transfert de matière et/ou de la réaction chimique. Ces simulations permettent d'obtenir des données abondantes et très précises sur un grand nombre de paramètres. La puissance des ordinateurs permet de simuler avec précision des phénomènes complexes à l'aide de modèles de plus en plus précis. Les réacteurs chimiques devenant de plus en plus élaborés et les besoins de prédictions locales du fonctionnement s'accentuant, la méthode de modélisation systémique, que nous avons décrite à la section précédente, atteint ses limites pour laisser place à l'avènement de la mécanique des fluides. Cette approche est aujourd'hui indispensable et fait partie de la base de la plupart des travaux de recherches contemporains. Par exemple, pour la cuve agitée il y a (Busciglio et al., 2014), (Song et al., 2015), (Wang et al., 2014) (Aghbolaghy and Karimi, 2014), (Kulkarni and Patwardhan, 2014), (Kulkarni and Patwardhan, 2014), (Wadnerkar et al., 2016), (Niño-Navarro et al., 2016) (Ri et al., 2017) et pour la colonne à bulles il y a (Li and Zhong, 2015), (McClure et al., 2015), (Abdulrahman, 2016), (Bhusare et al., 2017), (Fletcher et al., 2017). Il s'agit là d'une liste loin d'être exhaustive mais le but de ne chapitre n'est pas de décrire l'état de l'art des travaux en mécanique des fluide numérique.

La MFN permet également de calculer numériquement des DTS et d'une façon générale de simuler des traçages numériques. Deux méthodes existent, la méthode Lagrangienne et Eulérienne. Nous verrons dans les travaux décrits par la suite que certains auteurs utilisent des DTS obtenues par MFN pour valider leur modèle.

I.3.1.2 Les limites de la MFN : vers la modélisation compartimentale

La mécanique des fluides numérique est une approche séduisante car elle donne accès à une très grande quantité d'informations sur le système modélisé. Cela permet d'obtenir un descriptif précis et local de nombreux paramètres. Mais cette précision a un coût qui se manifeste par des temps de calcul très élevés. Pour les réacteurs chimiques les plus complexes, ce temps de calcul devient parfois rédhibitoire pour envisager une étude de dimensionnement ou d'optimisation. De plus, l'objectif de la simulation ne nécessite pas toujours cette abondance de résultats, parfois compliquée à utiliser ou à interpréter. C'est pourquoi, la tendance s'est inversée en cherchant à développer des modèles permettant de simplifier les simulations de MFN afin d'obtenir le bon compromis entre finesse de résultat et temps de calcul. Nous attirons le lecteur sur le fait que les travaux que nous allons présenter ne consistent pas à optimiser les techniques de maillage, comme l'ont fait par exemple (Olmiccia, 2013), mais plutôt à construire un modèle à compartiments à partir de simulations de MFN déjà effectuées.

I.3.1.3 Plan

Nous avons identifié dans la littérature deux approches différentes permettant de réaliser un découpage moins détaillé que celui de la MFN : l'une part du volume total et procède à des divisions successives, alors que l'autre part d'une maille de MFN et procède à des agrégations successives des mailles voisines. Comme le cœur de la thèse consiste à développer une méthode

générale de découpage en compartiments, nous allons donc nous intéresser particulièrement à identifier quelles approches sont les plus polyvalentes. Nous verrons comment certaines approches donnent un sens physique aux compartiments. Cela nous intéresse particulièrement car l'objectif n'est pas de fournir un maillage plus grossier que la MFN mais un réseau de compartiments possédant une localisation spatiale et des caractéristiques bien définies. Indépendamment de la manière dont est réalisé le découpage, nous verrons comment les réactions chimiques sont prises en compte et nous verrons quelles conditions doivent être respectées pour construire les compartiments. Nous souhaitons identifier quelle méthode de découpage est plus appropriée en fonction des vitesses de réactions chimiques mises en jeu. Nous verrons également comment sont calculés les bilans de matières au sein de chaque compartiment et comment ils échangent la matière via des échanges convectif et parfois turbulent.

I.3.2 Divisions du volume total

Une première approche consiste à diviser successivement le volume total. En fonction du nombre de divisions effectuées, le réseau final de compartiments sera plus ou moins détaillé. En théorie, si l'on opère un nombre suffisamment grand de divisions, on tend vers un maillage du type de celui utilisé en MFN. Nous allons voir qu'en fonction de la situation, plusieurs méthodes ont été développées pour obtenir un grand nombre de compartiments assez facilement et d'autres méthodes permettent d'obtenir un très faible nombre de compartiments.

I.3.2.1 Découpage géométrique

Les travaux décrits ici permettent d'obtenir un réseau de compartiments dont la taille est plus importante que les mailles d'une simulation de MFN et dans lesquels la répartition des grandeurs est considérée comme homogène (concentrations, température, etc). La méthode pour obtenir ce réseau est similaire à la manière dont est construit le maillage d'une simulation de MFN : on procède à un découpage purement géométrique du système. Dans le cas d'un réacteur de forme rectangulaire par exemple, les zones obtenues seront des rectangles plus petits. A notre connaissance, ce genre de méthode n'a pas été appliquée pour des géométries complexes, mais en théorie, rien n'interdit de procéder à un découpage avec des zones dont la forme n'est pas régulière.

Plusieurs auteurs ont appliqué la méthode, notamment (Zahradník et al., 2001), (Vrábel et al., 2001), (Hristov et al., 2001) et (Hristov et al., 2004), (Laakkonen et al., 2006) et (Kagoshima and Mann, 2006). Le découpage est basé sur l'hypothèse que chaque compartiment présent est suffisamment petit pour considérer que toutes les grandeurs soient macroscopiquement homogènes. Les critères de choix de ce découpage ne sont pas toujours clairement justifiés.

Nous avons choisi d'approfondir les travaux de (Delafosse et al., 2014) car les hypothèses sont bien précisées et ils présentent l'originalité d'étudier l'influence de la manière dont les échanges

entre les compartiments sont calculés. En particulier, une méthode de calcul des échanges turbulents originale est présentée. Ces travaux sont réalisés sur un réacteur fermé. Dans ce cas, on cherche à s'appuyer sur la courbe de temps de mélange (obtenue aussi par traçage) et non plus sur une DTS, qui n'a ni de sens ni d'existence en réacteur fermé. Le Tableau 7 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. La qualité du mélange des réactifs dans les mélangeurs agités est un paramètre prépondérant qui influence les performances du réacteur et les réactions biologiques complexes. Comme (Guha et al., 2006) l'ont déjà souligné, la modélisation compartimentale permet de rendre compte de l'écoulement dans les mélangeur agités de manière efficace et locale. La particularité de ces travaux consiste à étudier l'influence de la manière dont sont calculés les échanges entre chaque compartiment. **Construction du modèle.** La structure du modèle est déterminée par la géométrie du réacteur et les mécanismes macroscopiques du mélange. La géométrie cylindrique conduit à un réseau dont la structure est régulière ; w compartiments dans la direction axiale, n dans la direction radiale et m dans la direction azimutale. De plus, les deux turbines du procédé génèrent chacune, deux boucles de recirculation, une au-dessus et une en dessous de chacune d'elles. Ces boucles ont la même taille dans la direction radiale et axiale ; donc une boucle de recirculation est modélisée par un réseau de $n \times n \times m$ compartiments. Comme il y a deux turbines et deux boucles de recirculation par turbine, le nombre total de compartiments est de $2 \times 2 \times n \times n \times m$. La finesse du réseau est donc ajustée au nombre de compartiments dans la direction radiale et tangentielle. La Figure I-23 donne un schéma du réseau de compartiments ainsi développé.

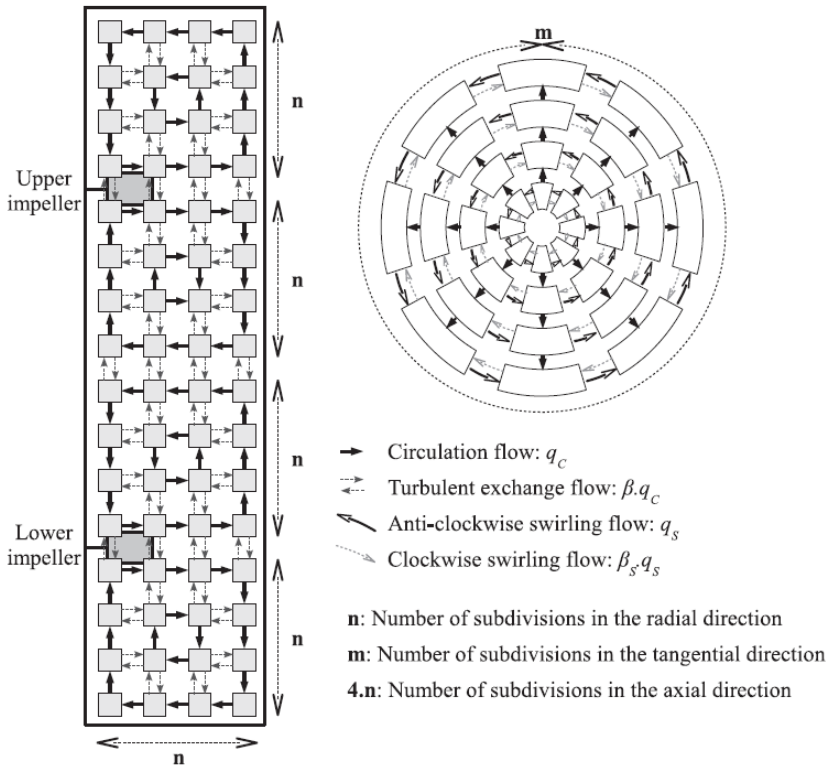


Figure I-23 : Découpage régulier de la cuve agitée proposé par (Delafosse et al., 2014). Les flèches correspondent à une simplification qualitative de l'écoulement dans la « méthode 1 ».

L'étape suivante consiste à définir les échanges entres les compartiments ; ils sont calculés par échange convectif et turbulent et trois méthodes sont comparées. La « méthode 1 » consiste à simplifier qualitativement l'écoulement. Sur un plan vertical (à gauche sur la Figure I-23), l'écoulement convectif des boucles de recirculation au niveau des turbines est représenté par les flèches noires (trait plein gras). Ce débit est constant et il est calculé à partir du champ de vitesse et du nombre de compartiments. Lorsque les compartiments ne réalisent pas d'échange convectif, un échange turbulent est calculé et est injecté dans le modèle sous la forme de deux débits turbulents opposés de même valeur (représentés par les doubles flèches pointillées). Sur un plan horizontal (à droite sur la Figure I-23), les courants dans la direction tangentielle sont purement convectifs dans le sens de l'agitation (représentés par les flèches noires remplissage vide) et purement turbulents dans le sens opposé (représenté par les flèches unidirectionnelles en pointillées). Dans cette étude, les débits convectifs tangentiels sont arbitrairement supposés égaux aux débits convectifs dus aux boucles de recirculation. Les débits turbulents sont calculés en multipliant les débits convectifs par une grandeur qui est arbitrairement supposée constante dans tout le réacteur. Dans la « méthode 2 » les échanges turbulents sont calculés par le calcul d'un coefficient de diffusion turbulent via l'énergie cinétique turbulente $\boldsymbol{k}$ et le nombre de Schmidt turbulent. La « méthode 3 » est un compromis entre les deux premières méthodes : la structure de la Figure I-23 est conservée mais les échanges sont calculés à partir des données issues de la MFN, c'est-à-dire sans simplification. La Figure I-24 est une schématisation des échanges entre deux mailles de MFN (a) et entre deux compartiments (b). Les échanges convectifs et turbulents sont calculés en sommant les contributions de chacune des mailles localisées au niveau de la surface d'échange entre deux compartiments. Les échanges convectifs sont calculés de manière classique en multipliant la surface d'échange par la vitesse moyenne dans la maille. A la différence de la « méthode 2 », les échanges turbulents sont calculés en multipliant la surface d'échange par la vitesse turbulente obtenue directement à partir de l'énergie cinétique turbulente $\boldsymbol{k}$ dans la maille :

$$< v^{turb} > \; = \sqrt{\frac{2}{3}k^2} \qquad [I.9]$$

Cela permet d'éviter de devoir choisir une valeur numérique arbitraire du nombre de Schmidt. Il s'agit d'une des trois méthodes de calcul des échanges turbulents que nous avons identifiée dans la littérature et nous présenterons la méthodologie détaillée du calcul dans le prochain chapitre.

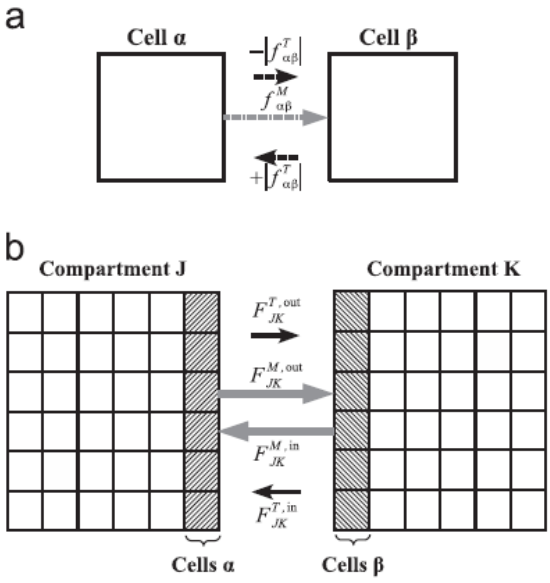


Figure I-24 : Définition des échanges avec la « méthode 3 » par (Delafosse et al., 2014) : (a) entre deux mailles de MFN. (b) entre deux compartiments.

Résultats. Pour juger de la qualité de la représentation de l'hydrodynamique, les auteurs comparent qualitativement, pour chacune des trois méthodes de calcul des échanges, les courbes expérimentales de traçage et les courbes issues du modèle. Deux points de détection, à l'intérieur du réacteur à deux hauteurs différentes, sont pris en compte pour améliorer cette comparaison. De plus, une comparaison quantitative est réalisée en comparant le temps de mélange homogène à 95 %. La « méthode 1 », avec un modèle à 9216 compartiments, ne procure pas de courbes de traçage capables de reproduire l'hydrodynamique de manière locale, mais en ajustant le coefficient des échanges turbulents les auteurs arrivent à prédire le temps de mélange à 95%. A condition d'ajuster le nombre de Schmidt, la « méthode 2 », à savoir la MFN, permet de prédire le temps de mélange et les courbes du modèle s'ajustent mieux aux courbes expérimentales. Notons que ces deux méthodes ont l'inconvénient de devoir ajuster des constantes pour améliorer la qualité des résultats ce qui n'est pas considéré comme une bonne pratique de modélisation. Pour des réseaux ayant au moins 10000 compartiments, la « méthode 3 » a l'avantage de produire des courbes de traçage très fidèles aux courbes expérimentales tout en prédisant correctement le temps de mélange à 95%. Cette étude a permis de mettre en évidence l'intérêt d'utiliser des informations provenant la MFN pour améliorer un modèle à compartiments dont les échanges étaient calculés de manière qualitative.

L'étude a également permis de comparer, pour une même structure de modèle, l'influence de la manière dont les échanges sont évalués. Une méthode tout à fait originale pour déterminer les échanges turbulents est présentée. Au lieu de calculer un coefficient de diffusion turbulente comme l'a initialement proposé (Guha et al., 2006) et de prendre en compte la distance entre les compartiments, les auteurs calculent l'échange turbulent directement à partir de la vitesse turbulente qui s'obtient à partir de l'énergie cinétique turbulente.

Dans la continuité de ces travaux, (Delafosse et al., 2015) utilisent exactement la même méthode de construction de réseau de compartiments sur un réacteur de dimension similaire avec un modèle composé de 28000 compartiments. Une originalité de ces travaux consiste à modéliser le déplacement de particules de traceur à l'aide d'un algorithme stochastique nommé « continuous-time Markov Chain » (CTMC). Le principe de l'algorithme consiste à faire varier aléatoirement la position de la particule d'un compartiment à un autre. Pour cela, les auteurs définissent un échange turbulent qui va dans une seule direction, contrairement aux travaux initiaux où ils vont dans les deux sens pour se compenser. La valeur de l'échange turbulent est affectée de manière aléatoire avec une distribution statistique normale centrée en zéro et recalculée à chaque pas de temps de calcul. La théorie de CTMC permet alors, à partir de calculs statistiques, de donner la distribution de temps de séjour moyen au sein d'un compartiment ainsi que la probabilité qu'une particule quitte le compartiment. Des zones composées de plusieurs compartiments sont définies afin de représenter au mieux les volumes où la détection expérimentale est effectuée (conductimètre pour le traçage, PIV pour les mesures de vitesse et camera pour le suivi de particules). Les auteurs sont capables de modéliser avec succès les distributions de temps de séjour et de temps de circulation (temps nécessaire à une particule pour retourner dans la zone étudiée) de chacune de ces zones. Ces travaux illustrent parfaitement l'intérêt d'un modèle à compartiments qui est capable de fournir plus rapidement que des simulations de MFN des informations locales et précises.

I.3.2.2 Découpage tenant compte des constantes de temps des réactions

De manière similaire à une étude de sensibilité au maillage en MFN, les travaux présentés au paragraphe précédent cherchent le nombre de compartiments minimal à atteindre de telle sorte que les résultats ne dépendent plus du maillage. Une amélioration de ce raisonnement consiste à prendre en compte explicitement les mécanismes hydrodynamiques, mais également chimiques lorsqu'ils existent, afin de justifier le comportement modélisé au sein de chaque compartiment. Cela permet de construire un réseau de compartiments qui ne provient pas uniquement d'un découpage ne prenant en compte que la géométrie du système.

(Wells and Ray, 2005) sont les premiers à automatiser un processus de divisions successives. Pour cela, ils implémentent des critères physiques dans la méthode de découpage. Le Tableau 8 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

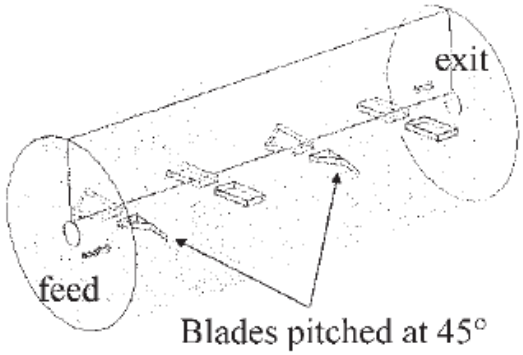


Figure I-25 : Schéma d'un réacteur de production de polyéthylène basse densité, (Wells and Ray, 2005).

Contexte. La production de polyéthylène est réalisée dans des conditions de haute pression et haute température. Beaucoup de chaleur est générée par la réaction et le temps de passage relativement rapide des réactifs ne permet pas un refroidissement efficace. A cause de la limite de température imposée pour des raisons de sécurité, le taux de conversion est faible (inférieur à 20%). L'ajout d'un agitateur permet d'améliorer le mélange, primordial pour l'efficacité du réacteur, mais il existe encore en pratique des hétérogénéités. **Construction du modèle.** La Figure I-26 représente la philosophie de la méthodologie. A partir d'une simulation de MFN, les auteurs effectuent un premier rassemblement de mailles ayant des propriétés homogènes. Le volume de chaque compartiment ainsi créé est égal à la somme des mailles de MFN, puis les échanges entre chaque compartiment sont calculés à partir des résultats de MFN.

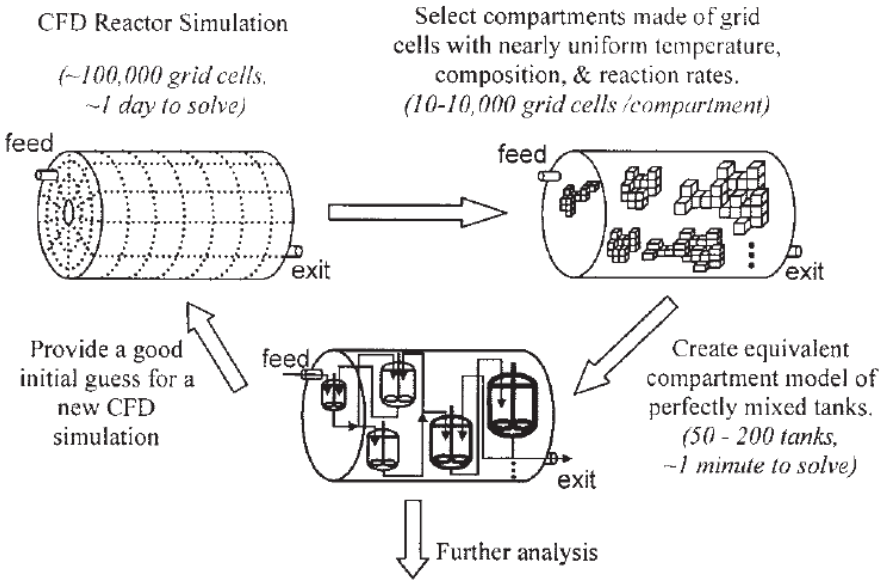


Figure I-26 : Méthode de création des compartiments (Wells and Ray, 2005)

La méthode crée des compartiments à partir de données issues de MFN avec réactions chimiques, à l'inverse de la plupart des travaux qui utilisent uniquement des données de MFN sans réaction. Deux conditions restrictives sont imposées pour pouvoir appliquer la méthode

proposée. La réaction ne doit pas affecter l'écoulement, ce qui signifie que la viscosité et la masse volumique du fluide doivent rester constantes en fonction de l'avancement de la réaction. Pour chaque compartiment, plusieurs grandeurs sont calculées : l'enthalpie et la fraction massique et/ou volumique de certaines espèces chimiques. Le choix des grandeurs pour faire le découpage est un élément clé pour produire un bon modèle à compartiments. Comme on souhaite modéliser les regroupements par des compartiments ayant un comportement de RPA, les critères devant être homogènes dans le cas du réacteur LDPE étudié ici sont la température et la concentration des espèces. La méthode est automatisée et divise successivement chaque compartiment en deux compartiments. Au départ, il y a un seul compartiment. L'utilisateur fixe arbitrairement le nombre objectif de compartiments à atteindre. Plusieurs comparaisons ont été réalisées en faisant varier le nombre de compartiments pour vérifier si ce choix ne cause pas de pertes d'informations (nombre insuffisant de compartiments) ou pourrait être davantage simplifié (en diminuant le nombre de compartiments). Pour choisir quel est le compartiment qui sera divisé, les auteurs ont instauré deux critères de division. Le premier vise à réduire la variation d'une grandeur et le second vise à réduire la variation de la vitesse de réaction. Pour chacun des critères, tous les compartiments sont testés et c'est le compartiment qui présente la plus grande variation de la grandeur testée qui sera choisi pour être découpé. **Résultats.** Le modèle est capable de prédire la concentration des espèces chimiques et la température dans le réacteur de manière locale. Une caractéristique de la méthode réside dans le fait qu'il est possible de regrouper manuellement des compartiments disjoints de mêmes caractéristiques. De ce fait, la correspondance entre la position du compartiment dans le modèle et la position du sous-volume correspondant au sein du réacteur n'est pas systématique.

L'intérêt des travaux de (Guha et al., 2006) réside dans le fait qu'ils prennent explicitement en compte les constantes de temps de réactions chimiques comparées aux constantes de temps de mélange lors de la construction des compartiments. Le Tableau 9 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. Il s'agit pour les auteurs de prédire les performances en termes de réaction en adaptant la structure du modèle à la cinétique Pour ce faire, les auteurs prennent en compte le temps caractéristique de réactions chimiques en le comparant au temps caractéristique du mélange. **Construction du modèle.** Pour pouvoir considérer un sous-volume comme un compartiment du modèle, il faut que le temps caractéristique de mélange au sein du sous-volume considéré soit significativement moins important que celui de la réaction. Si ce n'est pas le cas, il faut réduire la taille des compartiments. Cette condition assure qu'il n'y a pas de gradient de concentrations au sein d'un compartiment. Un algorithme construit automatiquement le réseau de compartiments mais lorsque les vitesses de l'écoulement sont trop faibles, la méthode conduit à un nombre élevé de compartiments. Dans certains cas, les plus petits compartiments peuvent être agglomérés à un compartiment de plus grosse taille. Concernant les échanges turbulents, ils sont calculés en calculant un coefficient de diffusion turbulente directement à partir de l'énergie cinétique turbulente k et la dissipation de l'énergie turbulente ϵ.

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = \frac{D_t\left[\frac{m^2}{s}\right] \times S[m^2]}{\Delta x\,[m]} \qquad [I.10]$$

Avec :

$$D_t\left[\frac{m^2}{s}\right] = \frac{C_\mu}{Sc_t} \times \frac{k^2}{\epsilon} \qquad [I.11]$$

Il s'agit d'une des trois méthodes de calcul des échanges turbulents que nous avons identifiée dans la littérature et nous présenterons la méthodologie détaillée du calcul dans le prochain chapitre. Plusieurs systèmes cinétiques ont été testés et, suivant les temps caractéristiques de réaction, le nombre de compartiments varie de 100 à 1600. **Résultats.** Trois réactions chimiques ont été étudiées afin de déterminer les effets du mélange sur les performances du réacteur. Pour une réaction du premier ordre (de type $A \rightarrow produits$ avec $v = k[A]^1$), les modèles à compartiments donnent les mêmes résultats de conversion quelle que soit la vitesse d'agitation. Pour une réaction du second ordre (de type $A + B \rightarrow produits$ avec $v = k[A]^1[B]^1$, le mélange devrait avoir une influence sur la conversion. Les modèles à compartiments permettent de prédire qu'à faible vitesse d'agitation (mélange moins efficace) il faut plus de temps pour atteindre une conversion désirée. Pour finir, un système de réactions compétitives est testé : $A + B \rightarrow R$ et $R + B \rightarrow S$. La localisation de l'injection à deux endroits différents (proche de la surface ou proche du fond près des turbines) est étudiée à l'aide du modèle à 1560 compartiments. Les résultats montrent bien que la conversion est plus efficace lorsque l'injection est proche des turbines. Une comparaison entre des données expérimentales et des données provenant d'un modèle composé d'un unique RPA ou du modèle à compartiments montre que le modèle à compartiments prédit plus précisément les performances du réacteur. L'originalité de ces travaux réside dans la prise en compte du temps caractéristique de réaction, calculé de manière quantitative, et comparé au temps caractéristique de mélange. Cela permet de conditionner la taille minimale des compartiments requise pour pouvoir les considérer comme des volumes homogènes malgré la présence de réaction chimique.

(Gresch et al., 2009) étudient un système de type canal où la concentration des réactifs évolue le long du canal (voir Figure I-27). Les auteurs découpent le canal en compartiments où les espèces chimiques ont une concentration constante. Nous verrons qu'une méthode originale est présentée pour prendre en compte les recirculations du fluide. Le Tableau 10 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

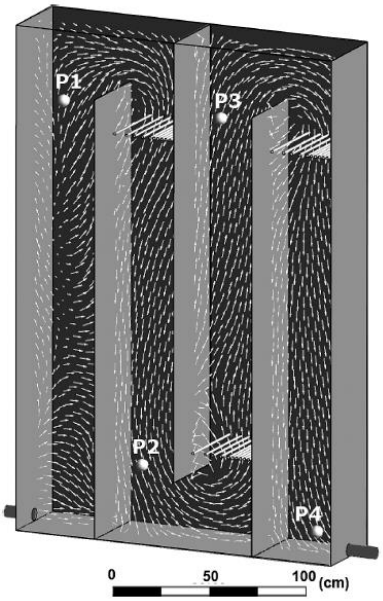


Figure I-27 : Schéma du réacteur pilote utilisé par (Gresch et al., 2009)

Contexte. L'objectif de l'étude est de développer une méthodologie capable de créer un modèle à compartiments et d'étudier la robustesse du modèle en présence de réactions chimiques du premier et du second ordres. Une large gamme de taux de conversion de réactions a été choisie afin de couvrir le plus grand panel d'applications. Le dispositif complet, dont la fonction est de traiter la surface d'un lac contre des plantes indésirables, est composé de trois parties ; une partie ozonation, une partie filtration sur charbon actif et une partie filtration par membrane. Le réacteur de type canal étudié dans cet article ne se concentre que sur la partie d'ozonation. **Construction du modèle.** La plupart des systèmes ouverts ont une direction principale d'écoulement allant de l'entrée à la sortie et c'est tout particulièrement le cas des réacteurs de type canal. Cette direction est facilement détectable lorsqu'on observe l'évolution d'une espèce qui est produite ou dégradée le long du réacteur. Indépendamment de la géométrie réelle du réacteur, le modèle développé est simplifié en ne prenant en compte que cette direction. L'inconvénient de cette simplification est qu'il est impossible de modéliser les mécanismes locaux de recirculation. Pour en rendre compte, une dimension factice est ajoutée, comme nous allons le détailler ci-après. Dans un premier temps, le champ de concentration d'une espèce réactive est utilisé pour définir les compartiments. Si la réaction est d'ordre zéro, alors la concentration des réactifs n'influence pas la vitesse de réaction et il est possible d'utiliser l'âge moyen d'un traceur passif plutôt que sa concentration. La Figure I-28 montre un exemple d'illustration avec seulement cinq niveaux de concentration pour simplifier la compréhension de la méthodologie. Les compartiments ayant une concentration identique sont rassemblés en un compartiment. Cela procure une série de compartiments dans la direction principale. Pour chacun de ces compartiments, une distinction supplémentaire est faite lorsqu'il existe des zones où la concentration augmente et d'autres où la concentration diminue (zone grisée sur la Figure I-28). Cela arrive lorsque de l'eau plus âgée se mélange avec de l'eau plus jeune, impliquant un changement de concentration, et qui est caractéristique d'une recirculation. Dans ce cas, le compartiment initial est artificiellement divisé en deux nouveaux

compartiments. Les compartiments isolés avec des concentrations similaires peuvent exister et sont regroupés afin de réduire leur nombre. Dans un second temps, l'analyse qualitative du champ de vitesse permet de conserver la structure globale de l'écoulement (flèches noires trait plein sur la Figure I-28). Ces flux sont convectifs et sont calculés à partir de la surface d'échange et de la vitesse moyenne à travers cette surface obtenue depuis la MFN. Les échanges au sein d'un même compartiment (entre deux zones, l'une à concentration croissante et l'autre décroissante) sont calculés de la même manière. Les flux turbulents sont pris en compte en ajoutant un flux bidirectionnel entre tous les compartiments. Ces derniers sont calculés de la même manière que (Guha et al., 2006) avec un coefficient de diffusion turbulente obtenu à partir de la MFN. Les auteurs ont développé un algorithme qui permet d'automatiser cette méthode de construction du réseau de compartiments. **Résultats.** La première étape de validation consiste à comparer les DTS obtenues par le modèle à celles obtenues expérimentalement et par MFN. Cette comparaison permet de valider une structure à 100 compartiments qui représente correctement l'hydrodynamique au sein du réacteur canal. L'étape suivante consiste à tester la robustesse du modèle en prenant en compte différentes réactions chimiques du premier et du second ordre. En particulier, l'influence du nombre de compartiments est étudiée sur la différence entre les résultats du modèle et les prédictions de MFN. L'analyse montre que pour de faibles taux de conversion (vitesse de réaction lente) les modèles à 50, 100 ou 200 compartiments donnent des résultats similaires entre eux et identiques à ceux de la MFN. En revanche, lorsque le taux de conversion augmente (vitesse de réaction rapide) l'écart avec les résultats de MFN devient de plus en plus important lorsque le nombre de compartiments diminue (cet écart est plus prononcé avec les réactions chimiques de premier ordre). Cet écart s'explique par le fait que le temps caractéristique de mélange devient trop grand comparé au temps caractéristique de la réaction. Aux plus grands taux de conversion, l'écart vaut dans le pire des cas 10% pour 100 compartiments, alors qu'à 200 compartiments, cet écart reste proche de 1%. **Analyses.** L'originalité de ces travaux réside dans la manière de prendre en compte des recirculations en divisant en deux un compartiment et en incluant des rétro-mélanges entre ces derniers. De plus, l'impact de la cinétique chimique est souligné. Ce phénomène déjà souligné par (Guha et al., 2006) n'est pris en compte ici qu'en augmentant le nombre de compartiments afin de diminuer leur taille. Cela confirme qu'un modèle à compartiments peut représenter correctement l'hydrodynamique mais devrait être raffiné en fonction de l'objectif de la modélisation.

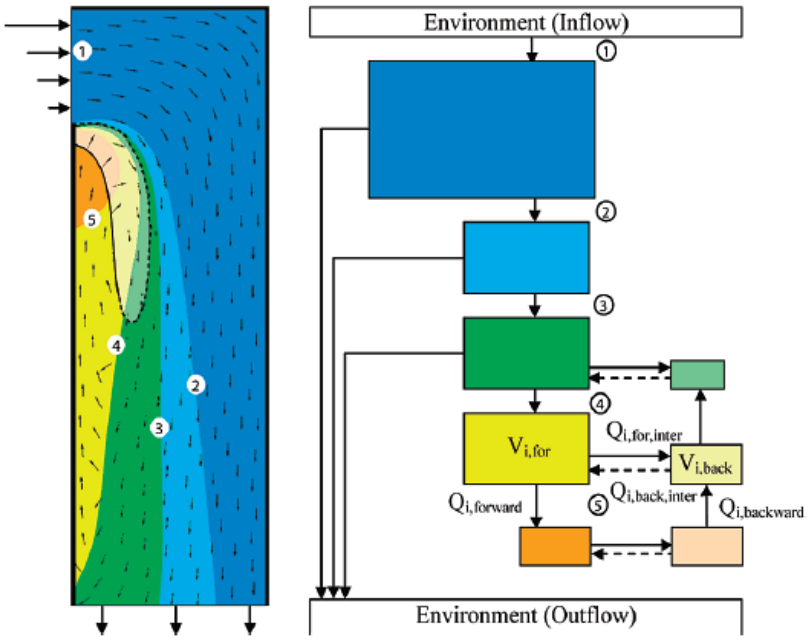


Figure I-28 : Représentation de la méthode de création du modèle de (Gresch et al., 2009)

(Fichet et al., 2010) modélisent une centrale électrique à gaz siège de combustions mettant en jeu plus de 300 réactions avec plus de 50 espèces chimiques. De par la nature complexe de l'écoulement et des réactions chimiques mises en jeu, un découpage empirique n'est pas possible. Une méthode originale de découpage est proposée en prenant en compte un découpage chimique puis physique. Le découpage physique est fait à partir de l'évolution d'un traceur le long des lignes de courants. Le Tableau 11 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. La turbine à gaz modélisée est composée de 16 tubes de 30 cm de diamètre et 70 cm de hauteur. La Figure I-29 est une coupe d'une simulation de MFN de la turbine où on observe des vitesses allant moins de $1\,m.s^{-1}$ à plus de 100 $m.s^{-1}$ avec un écoulement localement très irrégulier. La pollution des turbines à gaz est réglementée et il est nécessaire de développer des outils capables de prédire rapidement et précisément les concentrations de NO_x et CO. La mécanique des fluides numérique requiert des temps de calcul trop importants lorsque les réactions chimiques de combustion sont prises en compte. Un modèle à compartiments est développé pour réduire le temps d'obtention des concentrations des polluants.

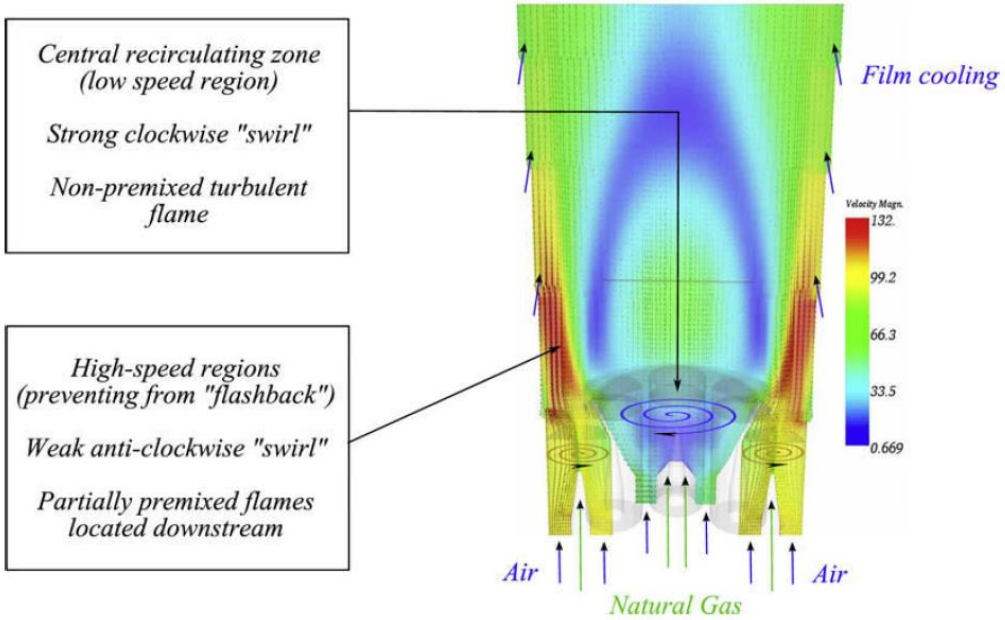


Figure I-29 : coupe en 2D de la turbine à gaz modélisée par (Fichet et al., 2010)

Construction du modèle. La construction du modèle a lieu en trois étapes. D'abord, une simulation de MFN numérique est réalisée pour simuler en détail l'écoulement turbulent réactif. Ensuite une méthode originale de division en zones homogènes est appliquée, et enfin, l'hypothèse de RPA est faite pour toutes les zones homogènes : la prédiction de NO_x est alors possible. On s'intéresse ici à la méthode de création de zones homogènes. Le découpage est réalisé en deux étapes, d'abord un découpage chimique et ensuite un découpage physique. Le découpage chimique sert à isoler les mailles de MFN qui ont la même influence du point de vue chimique sur la formation des NO_x. Il est réalisé à partir de la fraction du mélange, à savoir le mélange entre l'air et le fuel, et la fraction massique de fuel, qui représente la progression de la réaction de combustion hydrocarbure-air. Le découpage chimique n'est pas suffisant car il est possible qu'il existe des zones ayant les mêmes valeurs de fraction de mélange et/ou fraction massique en fuel alors qu'elles ont un comportement hydrodynamique différent. Un découpage physique prenant en compte la structure de l'écoulement aussi complexe soit-il, comme un écoulement tourbillonnant avec des recirculations à trois dimensions qui ont lieu dans les turbines à gaz, est alors réalisé. Dans cette configuration, les auteurs soulignent l'impossibilité de réaliser un tel découpage de manière empirique sur la base de l'expertise de l'ingénieur. C'est pourquoi, un algorithme a été développé pour créer automatiquement le découpage. La méthode utilise l'évolution d'un traceur à travers les lignes de courant de l'écoulement (noté Γ dans l'article). Deux propriétés du traceur sont utilisées. Sur la ligne de courant la concentration du traceur (noté Tr dans l'article) reste constante et son âge (noté a dans l'article) augmente progressivement au cours du temps. Les auteurs utilisent le fait que sur une ligne de courant les lignes iso-gradient de l'âge du traceur coupent celles de la concentration du traceur (voir Figure I-30). L'âge du fluide permet d'identifier les recirculations où il prend de grandes valeurs. La concentration en traceur permet d'identifier l'air et fuel grâce à des

conditions initiales différentes dans les deux phases. Cette méthode originale permet un découpage sans critère géométrique ou empirique. Une fois le découpage réalisé, les auteurs font l'hypothèse que chaque compartiment se comporte comme un RPA et ils définissent les échanges entre ces derniers de manière convective dans un sens et de manière diffusive dans les deux sens.

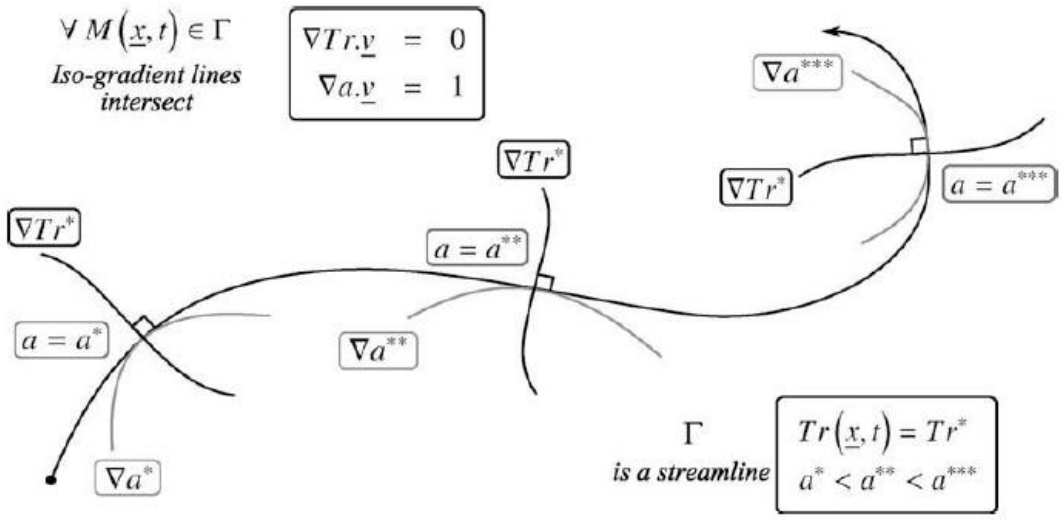


Figure I-30 : Schématisation de la méthodologie du découpage physique développé par (Fichet et al., 2010)

Résultats. Un modèle à 400 compartiments a été développé. Il donne des résultats très proches de la MFN en terme de prédiction des NO_x et bien plus rapidement que la MFN. Le modèle a été appliqué avec succès dans différentes configurations pour tester l'influence de l'humidité de l'air et la quantité totale de fuel injecté sur la concentration en NO_x.

I.3.2.3 Cas où la répartition des grandeurs est macroscopiquement hétérogène

Nous venons de voir que la prise en compte des constantes de temps des réactions chimiques permet de découper le volume total de manière plus judicieuse qu'un découpage purement géométrique. Dans les travaux que nous allons présenter dans ce paragraphe, les réactions chimiques n'ont pas d'influence sur le découpage. C'est à partir de la répartition du champ des grandeurs que le découpage est effectué. Nous verrons que lorsque les grandeurs sont très hétérogènes, un découpage manuel est réalisable et conduit à un très faible nombre de compartiments (une trentaine maximum). C'est dans ce cas de figure que la modélisation compartimentale offre le meilleur compromis entre la représentativité des mécanismes mis en jeu et les temps de calcul.

(Rigopoulos and Jones, 2003) ont modélisé une colonne à bulles où a lieu de l'absorption physique et chimique. Un modèle composé de 30 compartiments leur permet de prédire la concentration des espèces chimiques impliquées et de comparer les effets des absorptions

physique et chimique. Le Tableau 12 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. Le procédé met en œuvre des phénomènes liés à l'hydrodynamique multiphasique, au transfert de matière à l'interface gaz-liquide et à la réaction chimique. Ces phénomènes sont généralement couplés et la difficulté de la modélisation consiste à les prendre tous en compte. Dans ce cas, les réactions chimiques n'ont pas d'influence sur l'hydrodynamique car elles ne sont pas exothermiques et leurs produits ne modifient pas la rhéologie du fluide. **Construction du modèle.** Au vu de la géométrie du réacteur et de la manière dont le gaz est introduit au centre de la base du cylindre, les auteurs ont réalisé le modèle à partir du demi-plan longitudinal du cylindre ne comportant que la partie entre l'axe de symétrie et la paroi. Le mécanisme principal de macro mélange est donné par le champ de vitesse moyenne. L'analyse visuelle de ce champ permet d'observer une grande boucle de recirculation. Pour représenter cette boucle, les auteurs divisent la structure en deux dans la direction verticale. Les compartiments proches de l'injection de gaz échangent de la matière par des débits convectifs montants et ceux proche de la paroi par des débits convectifs descendants. L'analyse de la fraction volumique en gaz sur quatre hauteurs différentes du réacteur chimique montre que la concentration de gaz est importante au niveau de l'injection de gaz et diminue lorsqu'on s'approche de la paroi. Les auteurs ont divisé en deux la partie proche de l'injection afin de rendre compte d'une zone à forte et à moyenne fraction volumique de gaz. Les auteurs ont ajouté des échanges turbulents (pas d'information disponible sur la manière dont ils sont calculés) entre ces deux parties afin de modéliser les forts échanges. Ces trois subdivisions sont ensuite été divisées en dix tranches identiques dans la direction longitudinale (choix non justifié dans l'article). Le nombre total de compartiments est donc égal à trente comme l'illustre la Figure I-31 qui est un schéma du modèle. Les flèches pleines représentent des échanges convectifs et les flèches en pointillé des échanges turbulents. **Résultats.** Le modèle est capable de prédire l'évolution des espèces chimiques sur une durée de 70 minutes. Une comparaison entre l'absorption chimique et physique est faite, et permet de conclure que l'absorption d'origine physique est négligeable. Outre le fait que la méthode permet d'obtenir un modèle très représentatif du procédé. Il est intéressant de noter que les débits turbulents ne sont pas systématiquement calculés entre tous les compartiments et que les échanges convectifs sont simplifiés de telle manière que la structure globale de l'écoulement soit conservée.

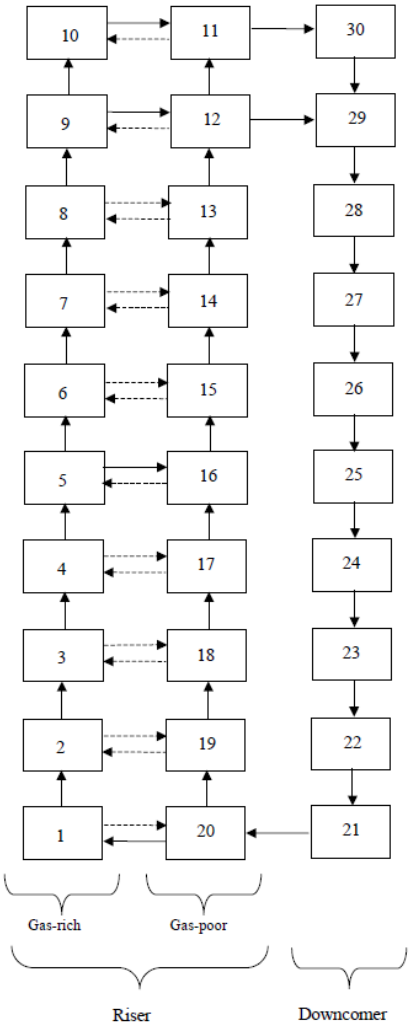


Figure I-31: Modèle 2D obtenu par (Rigopoulos and Jones, 2003)

Les travaux de (Le Moullec et al., 2010) modélisent un réacteur canal de traitement biologique des eaux (voir Figure I-32). Une sélection préalable de certains paramètres indispensables à la modélisation de l'hydrodynamique et des réactions chimiques est réalisée. Du fait de la répartition très hétérogène de ces grandeurs, les auteurs procèdent au découpage qualitatif. Une méthode de superposition de plusieurs découpages permet de construire le réseau final de compartiments qui se compose d'une vingtaine de compartiments. Une méthode originale de calcul des échanges turbulents est présentée. Le Tableau 13 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

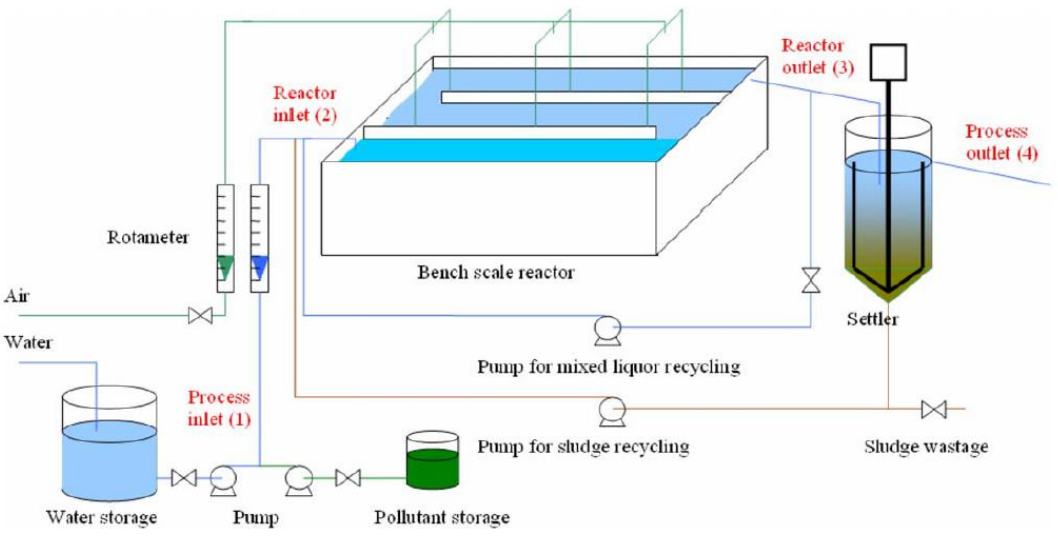


Figure I-32: Schéma du dispositif expérimental (Le Moullec et al., 2010)

Contexte. L'objectif des travaux consiste à prédire la concentration de différentes espèces chimiques tout le long du canal afin d'optimiser les conditions de fonctionnement de l'installation de traitement des eaux. Pour ce faire, et c'est là l'originalité de ces travaux, les auteurs ont comparé trois approches (appliquées sur un mode de fonctionnement témoin : 2,5 heures de rétention pour un débit d'entrée de 35 L/min) : une modélisation systémique de type cascade de RPA, une simulation de MFN et un modèle à compartiments. **Construction du modèle.** Le liquide s'écoule dans la direction du canal, mais le gaz est injecté tout le long du canal par le bas, ce qui donne un écoulement du gaz qui est perpendiculaire à l'écoulement du liquide. Grâce à l'invariance de la répartition des phases liquide et gazeuse dans la direction de l'écoulement du liquide, les auteurs découpent le réacteur en tranches d'égale épaisseur se répétant dans la direction de l'invariance. La structure des compartiments dans chaque tranche est déterminée en deux étapes. D'abord, un découpage qualitatif des grandeurs jugées importantes est réalisé. Comme le transfert d'oxygène depuis la phase gazeuse vers la phase liquide est un paramètre clé des réactions chimiques, la fraction volumique de gaz est prise en compte. Les champs de vitesse et de turbulence permettent de mettre en évidence les zones à fortes et faibles agitations. Ces grandeurs étant réparties de manière très hétérogène, les auteurs procèdent à un découpage qualitatif basé sur une analyse visuelle. Ensuite, un recoupement de ces découpages est réalisé pour obtenir des compartiments au sein desquels toutes les grandeurs sont homogènes. La Figure I-33 est une schématisation d'une tranche du réacteur découpée en quatre compartiments à partir du recoupement décrit à l'instant. Zone 1 : zone de recirculation contenant uniquement du liquide circulant à grande vitesse et grande énergie cinétique turbulente. Zone 2 : constitution similaire à la zone 1 mais avec faibles vitesses et une faible énergie cinétique turbulente. Zone 3 : volume d'aération gaz-liquide avec fortes vitesses et une grande énergie cinétique turbulente. Zone 4 : volume mort dans le coin

opposé à l'injection de gaz, présentant de très faibles vitesses et une très faible énergie cinétique turbulente.

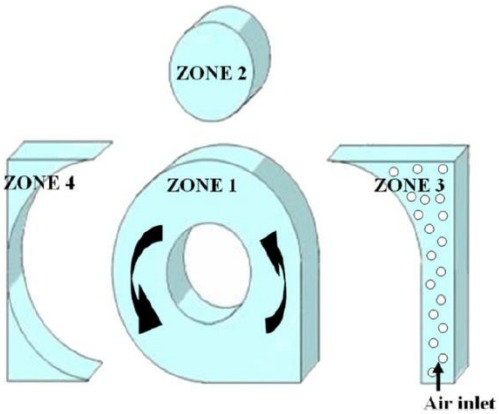


Figure I-33: Découpage d'une tranche du réacteur en compartiments (Le Moullec et al., 2010)

Les échanges entre chaque compartiment sont convectifs et turbulents. Les échanges convectifs sont calculés de manière usuelle, via les champs de vitesse et les surfaces d'échange. Concernant les échanges turbulents, une analogie très originale entre cascade de RPA et réacteur piston est utilisée.

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = \alpha \times Q_v^{conv}\left[\frac{m^3}{s}\right] \qquad [I.12]$$

Avec :

$$\begin{cases} Q_v^{turb} = \left|\frac{\sqrt{A^2+8A}}{4A} - \frac{1}{4}\right| \times Q_v^{conv} \\ A = \frac{Q_v^{conv} \times \Delta x \times Sc_t \times \epsilon}{2 \times S \times C_\mu \times k^2} \end{cases} \qquad [I.13]$$

Il s'agit d'une des trois méthodes de calcul des échanges turbulents que nous avons identifiée dans la littérature et nous présenterons la méthodologie détaillée du calcul dans le prochain chapitre. Pour déterminer le nombre total de tranches, une procédure récursive est utilisée en modifiant le nombre de tranches puis en comparant les DTS obtenues par MFN et celles obtenues par le modèle jusqu'à obtenir la meilleure correspondance. La Figure I-34 est un schéma du modèle obtenu par cette méthode. Le nombre total de tranches est inférieur à 20.

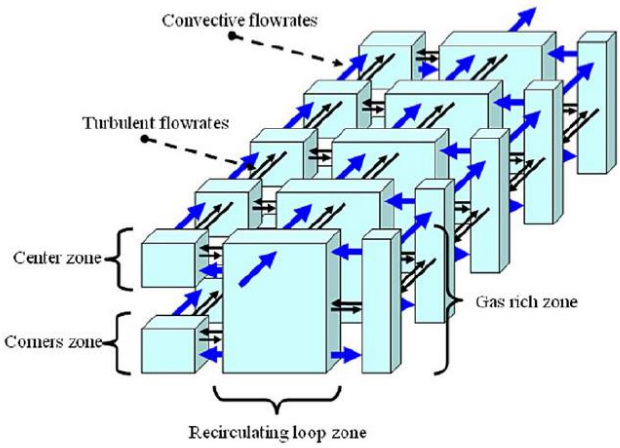


Figure I-34: Modèle obtenu par (Le Moullec et al., 2010)

Résultats. Le modèle à compartiments permet de prédire correctement les concentrations des espèces chimiques tout le long du canal. Le temps de calcul nécessaire est considérablement diminué par rapport aux simulations de MFN. L'originalité de cette méthode réside dans la manière de construire un réseau composé d'un petit nombre de compartiments très représentatifs du procédé, mais surtout validé expérimentalement sur un réacteur avec du transfert gaz-liquide et des réactions biologiques.

(Alvarado et al., 2012) modélisent l'hydrodynamique d'un étang avec une analyse qualitative de l'écoulement et des courbes de DTS. Ils identifient et rassemblent certaines zones de l'étang ayant le même comportement. Il sera montré que cette méthode de découpage est plus efficace que les modèles systémiques. Le Tableau 14 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. Les lagunes utilisées pour le traitement des eaux usées sont économiques mais leur fonctionnement est difficile à optimiser. La modélisation permet d'étudier à moindre coût le fonctionnement de ces systèmes car il y est difficile (grandes dimensions) et très contraignant (réglementation écologique stricte) de faire des mesures expérimentales. L'hydrodynamique joue un rôle prépondérant dans ce type de procédé et est couplée à des réactions biologiques nécessitant un bon apport en oxygène. Les modèles « systémiques » de type cascade de RPA ne suffisent pas pour prédire correctement les concentrations des espèces chimiques. **Construction du modèle.** Les auteurs prédécoupent manuellement l'étang en zones de comportement hydrodynamique similaire. Pour cela, ils étudient visuellement le champ de vitesses dans le plan de la surface issu de la MFN pour obtenir des informations sur la structure globale de l'écoulement. Il a été préalablement vérifié qu'il existe une invariance de l'écoulement dans la profondeur de l'étang. Trois zones (1, 2 et 3) sont distinguées comme on peut le voir sur la Figure I-35. La zone 1 représente l'écoulement principal à forte vitesse qui se dirige de l'entrée jusqu'à la sortie. La zone 2 représente un courant secondaire à faible vitesse qui part de la sortie et retourne vers l'entrée. La zone 3 représente une boucle de recirculation à très faible vitesse entre les zones 1 et 2. Le volume de chacune de ces zones est ensuite déterminé ; le volume de la zone 1 est déterminé à partir de la courbe de DTS ($\tau = V/Q$ avec τ

déterminé par le temps où apparait le pic principal de la courbe) et ceux des zones 2 et 3 sont déterminés par analyse visuelle des contours de vitesse. L'étape suivante consiste à découper chacune des trois zones en compartiments. Pour la zone 1, le nombre de compartiments est fixé à 13 sur la base d'une estimation de la dispersion axiale. La zone 2 est divisée en un grand compartiment sur la longueur de l'étang et plusieurs petits compartiments au niveau des coins (6 compartiments). La zone 3 est découpée en 2 grands compartiments pour représenter la recirculation et 4 petits de chaque côté pour faciliter le calcul des échanges avec les zones 1 et 2 (6 compartiments). Ce découpage est réalisé sur la surface puis étendu sur toute la profondeur de l'étang car l'écoulement est considéré invariant dans cette direction. Au total, le réseau du modèle est composé de 25 compartiments. Les échanges entre les compartiments sont calculés avec prise en compte d'échanges convectifs et turbulents. Les échanges convectifs (en jaune sur la Figure I-35) sont simplifiés à partir de la visualisation du profil de vitesse et sont calculés à partir de la vitesse moyenne et du débit traversant la section d'échange. Les échanges turbulents (en rouge sur la Figure I-35) sont également simplifiés (pas d'indication sur les hypothèses simplificatrices employées) et sont calculés à partir des valeurs de k et ϵ de la même manière que la méthode proposée par (Guha et al., 2006).

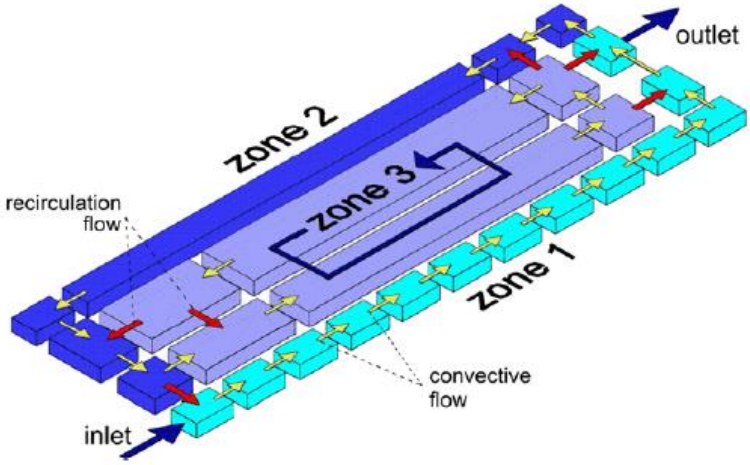


Figure I-35 : Modèle à 25 compartiments d'un étang. (Alvarado et al., 2012)

Résultats. Les auteurs ont comparé les DTS simulées par ce modèle à compartiments aux DTS que fournissent plusieurs modèles plus simples de type cascade de RPA (avec ou sans retro-mélange, avec ou sans recirculation, variation du nombre de RPA). Ils ont conclu que le modèle à compartiments proposé est nécessaire pour simuler correctement l'écoulement au sein de l'étang. La prise en compte des réactions biologiques (modèle cinétique ASM1) permet de comparer qualitativement la concentration de différentes espèces chimiques dans le temps (14 jours). Les simulations sont cohérentes avec les résultats expérimentaux obtenus sur site.

I.3.2.4 Conclusion sur les méthodes de division

Nous avons identifié plusieurs approches différentes qui consistent à diviser le volume total du système en volumes où les grandeurs qui y sont présentées peuvent être considérées comme

homogènes. Les hypothèses d'applicabilité ainsi que le nombre de compartiments obtenu diffèrent en fonction de la méthode de division.

La première méthode présentée, appelée « network-Of-Zone » dans la littérature, consiste à diviser de manière régulière le volume du système en ne prenant en compte que des critères géométriques. Le nombre de compartiments nécessaire est obtenu par une étude de sensibilité du maillage de la même manière que pour une simulation de MFN. Cette méthode a l'avantage d'être facilement applicable quelle que soit la situation mais conduit à un nombre élevé de compartiments. Elle est particulièrement adaptée au cas où les grandeurs sont très homogènes comme une cuve agitée dans les travaux de (Delafosse et al., 2014).

Afin de réaliser le découpage de manière plus judicieuse, il est possible de prendre en compte les valeurs numériques des grandeurs à découper. Cela peut être fait de manière quantitative à l'aide d'un algorithme comme dans les travaux de (Gresch et al., 2009) ou de manière qualitative à l'aide d'une analyse visuelle des champs des grandeurs comme dans les travaux de (Alvarado et al., 2012). Le découpage qualitatif est restreint aux cas où les grandeurs à découper sont très hétérogènes et conduit à un très faible nombre de compartiments. Elle est applicable sur des cas a priori complexes comme l'ont montré (Le Moullec et al., 2010) où un réacteur canal diphasique à boues activées et siège de réactions chimiques complexes a été modélisé avec une vingtaine de compartiments. Lorsque la répartition des grandeurs n'est pas suffisamment hétérogène pour permettre un découpage évident, un découpage quantitatif permet de différencier des volumes homogènes via le calcul de moyennes arithmétiques. L'algorithme consiste à diviser successivement le volume total et a été développé par (Wells and Ray, 2005). Le découpage quantitatif peut conduire à un nombre important de compartiments mais doit fournir un nombre moins important de compartiments qu'un découpage purement géométrique pour en justifier l'usage.

Lorsqu'il y a des réactions chimiques et que la cinétique de réaction est rapide, une règle permet de fixer la taille minimale des compartiments quelle que soit la méthode de découpage comme l'ont montré (Guha et al., 2006) et (Gresch et al., 2009). Il est nécessaire que le temps de passage du fluide au sein d'un compartiment soit significativement plus court que celui de la réaction chimique, afin d'éviter la création d'un gradient de concentration au sein du compartiment. Il s'agit d'une règle simple à implémenter, qui laisse peu de marge de manœuvre et fixe quasiment la structure finale du réseau de compartiments. Par exemple, dans le cas de réactions de combustion, (Fichet et al., 2010) ont modélisé une turbine à gaz avec 400 compartiments.

I.3.3 Agrégation successive de mailles

Une seconde approche consiste à agglomérer successivement les mailles de MFN. Contrairement à l'approche de division, il sera impossible de faire un découpage qualitatif puisque lon part des mailles de MFN.

I.3.3.1 Présentation des algorithmes

Les premier travaux utilisant cette approche sont à notre connaissance ceux de (Bezzo and Macchietto, 2004). La structure d'application est une boite rectangulaire (voir Figure I-36). Le Tableau 15 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

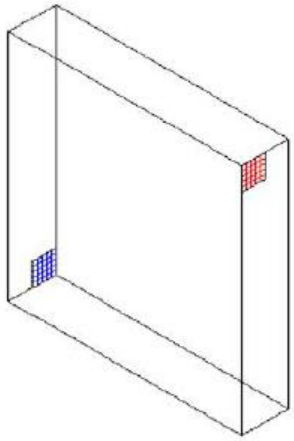


Figure I-36 : Schéma de la boîte servant d'illustration à la méthode développée par (Bezzo and Macchietto, 2004).

Contexte. L'objectif de cette étude consiste à développer un algorithme capable de créer automatiquement un réseau de compartiments par agrégation de mailles de MFN. Les auteurs appliquent la méthode sur un exemple de structure simple mais présentant des recirculations (voir Figure I-36). **Construction du modèle.** La méthode consiste à sélectionner une maille de MFN pour créer un « germe » de compartiment puis à comparer ses caractéristiques avec les mailles voisines. Sont ajoutées au compartiment les mailles ayant des caractéristiques proches des mailles déjà sélectionnées (à une tolérance près fixée par l'utilisateur). Pour cela, l'utilisateur doit choisir une seule et unique grandeur ; les auteurs ont par exemple testé l'énergie cinétique turbulente et la fraction massique d'un traceur. Le réseau final est dépendant du choix de la première maille de MFN, c'est pourquoi, une attention particulière doit être portée à la manière dont la première maille est sélectionnée. Il est proposé de choisir cette maille comme celle ayant la plus grande (ou la plus petite) valeur numérique de la grandeur à découper. La Figure I-37 montre un exemple de découpage que fournit un tel algorithme avec comme paramètre l'énergie cinétique turbulente. On constate que l'algorithme permet d'obtenir une bonne représentation des données directement issues des simulations de la MFN.

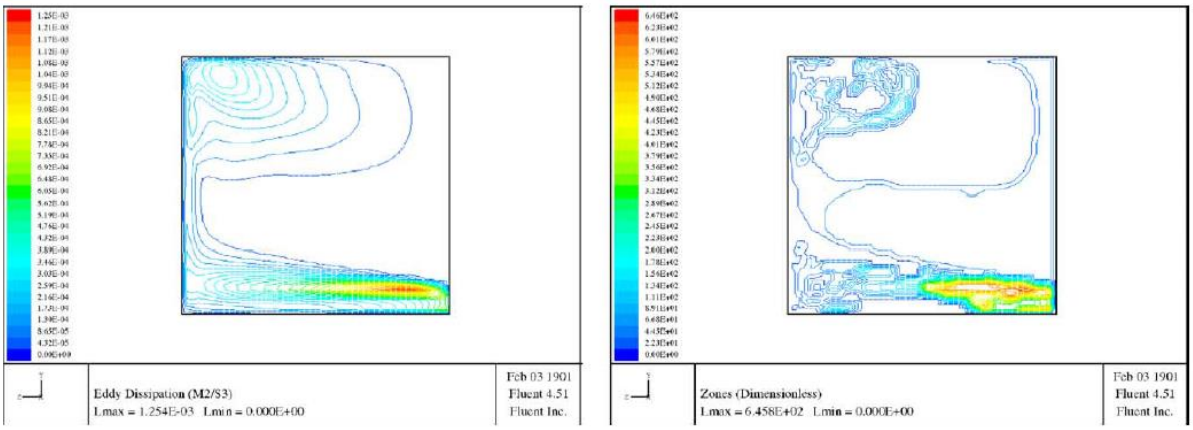


Figure I-37 : Exemple de découpage automatique proposé par la méthode de (Bezzo and Macchietto, 2004). Contours du taux de dissipation de l'énergie turbulente : Données issues de la MFN (gauche). Compartiments obtenus par l'algorithme (droite).

Un second algorithme propose une étape préliminaire à la première méthode qui incorpore une pertinence physique au découpage. Cela consiste à identifier des zones aux comportements hydrodynamiques semblables. Une fois ces zones identifiées, les auteurs appliquent le premier algorithme. Comme il existe des régions dans lesquelles règnent des gradients importants, l'algorithme produit souvent un grand nombre de compartiments de petite taille. Cette difficulté est levée par l'ajout d'un troisième algorithme qui agglomère les compartiments jugés trop petits. Les auteurs ont montré que cette troisième étape permet de diminuer le temps de calcul sans perdre la finesse des résultats. **Résultats.** Pour comparer les résultats du modèle avec ceux de la MFN, les auteurs ont appliqué l'algorithme sur trois cas différents : deux cas où la grandeur choisie est l'énergie cinétique turbulente mais avec une tolérance d'agglomération différente, et un dernier cas où la grandeur choisie est la concentration d'une espèce non réactive. La comparaison est réalisée directement sur les DTS ou sur l'écart du paramètre choisi par rapport à la MFN. Le nombre de compartiments obtenu est relativement constant (une centaine), mais en fonction de la grandeur choisie pour créer les compartiments, la forme du découpage et la précision des résultats sont différents. L'utilisateur doit choisir avec soin cette grandeur en fonction du problème étudié. A notre connaissance, ces travaux sont les premiers présentant l'approche d'agglomération des mailles de MFN. La seule limitation de la méthode est qu'il est impossible de prendre en compte plusieurs grandeurs à la fois lors de l'agrégation. On remarquera aussi que l'étape préliminaire d'identification des zones au comportement hydrodynamique semblable et l'étape finale de rassemblement de compartiments jugés trop petits laissent une grande marge de manœuvre à l'utilisateur.

Sur la base de la méthode développée par (Bezzo and Macchietto, 2004), (Delafosse et al., 2010) comparent deux façons d'agglomérer les mailles : maille par maille ou par couche de mailles. Le Tableau 16 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. La qualité du mélange des réactifs dans les cuves agitées est un paramètre prépondérant qui influence les performances du réacteur : c'est le cas pour les réactions biologiques complexes traitées ici. Ces travaux s'intéressent uniquement à la manière de créer le réseau de compartiments et plus particulièrement à une méthode automatisée basée sur l'agglomération de mailles de MFN. **Construction du modèle.** L'algorithme est divisé en quatre étapes. (i) Initialisation, toutes les mailles de MFN sont marquées comme libres (non affectées à un compartiment) (ii) Commencement d'un nouveau compartiment : une première maille libre est sélectionnée pour créer un « germe » de compartiment. (iii) Accroissement du compartiment : les mailles libres adjacentes aux mailles déjà sélectionnées sont progressivement rattachées au compartiment si elles répondent au critère fixé. S'il n'est pas possible de lui ajouter d'autres mailles, le compartiment est considéré comme achevé. (iv) Tant qu'il reste des mailles libres, l'algorithme retourne à la deuxième étape. L'étape (iii) nécessite de créer des règles de convergence. (Bezzo and Macchietto, 2004) proposent qu'une maille appartienne au compartiment tant que la différence entre la plus petite valeur numérique d'une grandeur P et la plus grande valeur reste inférieure à une valeur seuil imposée par l'utilisateur. Or, dans un réacteur agité, il existe de forts gradients de vitesse et de turbulence dus à la présence des pales d'agitation. C'est pourquoi les auteurs procèdent au test par rapport à la valeur P_0 dans la maille germe définie à l'étape (i) : $|P_0 - P| < \alpha$ avec α compris entre 0 et 1. La maille germe est choisie comme celle ayant la plus grande valeur numérique de la grandeur P parmi les mailles libre en contact avec l'ancien compartiment. La grandeur P doit être choisie avec précaution au regard du procédé étudié. Puisque le mélange dépend principalement de la vitesse, c'est ce paramètre qui a été choisi. Pour finir, une originalité de ces travaux réside dans la manière dont les mailles sont agglomérées. Plutôt que de procéder uniquement maille par maille (cell by cell, CBC), les auteurs proposent de procéder également couche par couche (layer by layer, LBL) comme le montre la Figure I-38. Deux méthodes sont présentées ; LBL1 où toutes les mailles autour du compartiment sont ajoutées (ou non) et LBL2, un peu plus raffinée, où seules les couches d'un côté du compartiment sont ajoutées (ou non).

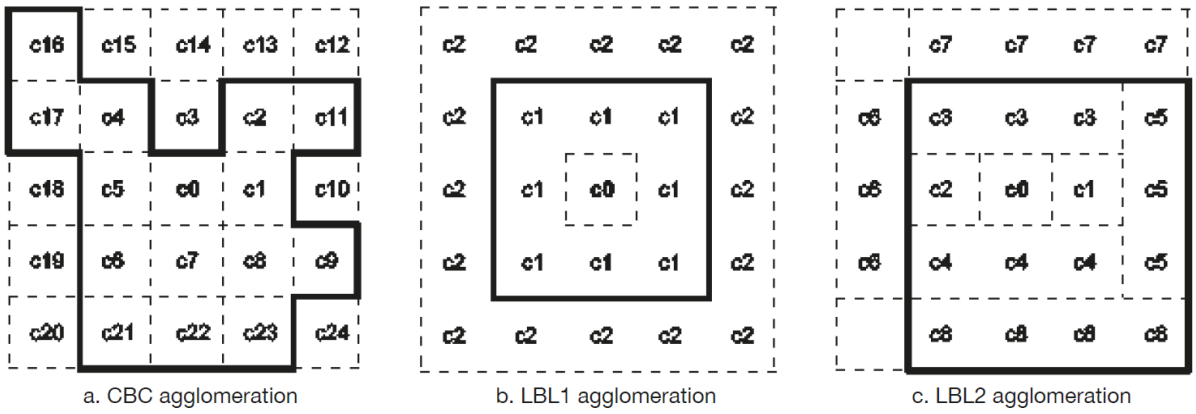


Figure I-38 : Différentes manières d'agglomérer des mailles de MFN à partir d'une maille germe C_0 selon (Delafosse et al., 2010). (a) Méthode maille par maille (CBC). (b) et (c) Méthode couche par couche (LBL).

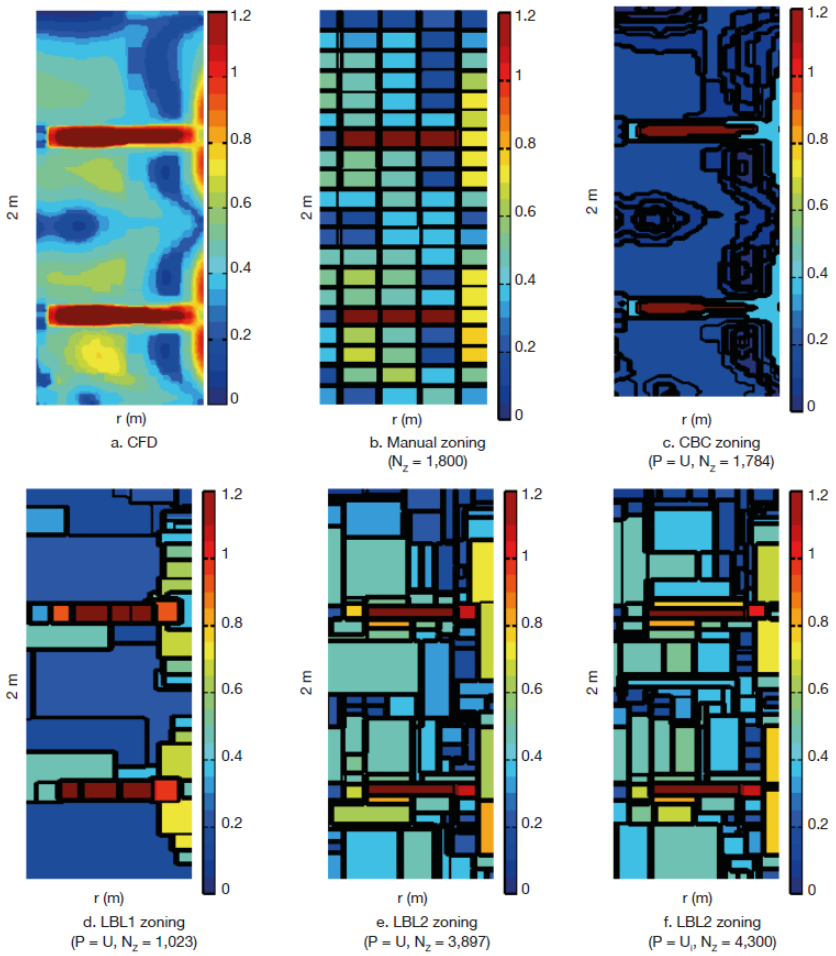


Figure I-39 : Comparaison de différentes méthodes de découpage par (Delafosse et al., 2010).

Résultats. La Figure I-39 montre plusieurs exemples de découpage 2D sur une seule coupe verticale du réacteur. Sur la première image en haut à gauche, une coupe provenant de la MFN (a) est présentée puis un découpage manuel (b), maille par maille (c) et couche par couche LBL1 (d), et LBL2 (e) et (f). Les découpages (e) et (f) se distinguent par le choix du paramètre P qui est, soit la norme vitesse en (e), soit les trois composantes de la vitesse en (f). Le nombre de compartiments varie de 1023 à 4300 en fonction de la méthode utilisée ; notons que la valeur du paramètre α est arbitrairement fixée à 0.5 pour toute l'étude. Tous les découpages représentent correctement la zone de fortes vitesses près des turbines (en rouge) mais c'est le découpage LBL2 qui est le plus raffiné. Afin d'évaluer quantitativement ces méthodes, les auteurs ont calculé les temps de mélange pour chacune d'elles et les ont comparés à celui obtenu par la MFN. Quel que soit le découpage, le temps de mélange est fortement sous-estimé du fait de la faible vitesse dans la direction tangentielle. Pour pallier ce problème, les auteurs ont préalablement découpé manuellement le réacteur en quatre dans la direction angulaire, ce qui permet d'améliorer la prédiction du temps de mélange en augmentant artificiellement le nombre de compartiments. Il s'avère que c'est le découpage totalement manuel qui se rapproche le plus de la réalité (30% d'erreur) et que le découpage avec LBL2 et les trois

composantes de vitesses est la plus efficace des méthodes algorithmiques (35% d'erreur). Cela s'explique par les forts gradients de vitesse près des turbines que la norme de la vitesse représente moins bien que les composantes de la vitesse. Les autres découpages accusent des erreurs supérieures à 50%. Bien que dans ce cas de figure, un découpage uniquement basé sur la géométrie du réacteur donne de meilleurs résultats, les travaux ont le mérite de proposer plusieurs ajustements de la méthode d'agglomération introduite par (Bezzo and Macchietto, 2004). L'utilisateur doit néanmoins choisir arbitrairement la valeur du coefficient α et procéder à un pré-découpage avant d'obtenir des résultats exploitables. Notons que dans leur travaux futurs déjà cités dans ce chapitre, à savoir (Delafosse et al., 2014), les auteurs ont abandonné leur algorithme d'agglomération de maille au profit d'un découpage géométrique.

(Nauha and Alopaeus, 2013) utilisent une méthode développée par (Seppäla, 2008). Afin d'améliorer les capacités de prédiction du modèle, les auteurs opèrent un pré-découpage du volume en zones de comportements similaires. Le Tableau 17 de l'Annexe A, résume les informations techniques de cette étude.

Contexte. Les auteurs étudient la culture d'algues (source de protéines thérapeutiques ou pour capter le CO_2, $les\ SO_x$ ou les NO_x) dans une colonne à bulles. Plusieurs paramètres affectent la croissance des algues : leur source d'énergie (lumière), de carbone (CO_2) et de nutriments (comme l'azote). L'intensité lumineuse est plus importante au niveau de la paroi de la colonne, c'est pourquoi la configuration du réacteur doit permettre un bon brassage des algues. Le gaz est injecté par le bas à une vitesse superficielle de $0.0063\ m/s$, ce qui induit le courant principal sous forme d'une recirculation. L'intensité lumineuse est calculée à l'intérieur de chaque maille dans les simulations de mécanique des fluides numérique. **Construction du modèle.** Les critères utilisés pour le découpage du réacteur sont la dissipation de l'énergie turbulente, la pression et l'intensité de la lumière. Ces paramètres sont en effet indispensables pour décrire le procédé. Comme la simulation de MFN est réalisée en régime transitoire, le modèle est construit à partir de données moyennées dans le temps. Pour procéder au découpage, les auteurs se basent sur une méthode automatique développée par (Seppäla, 2008). Il s'agit d'une méthode d'agglomération des mailles de MFN semblable à celle utilisée par (Bezzo and Macchietto, 2004) et (Delafosse et al., 2010). L'algorithme commence avec une maille de MFN qui définit un germe de compartiment et le compare aux mailles voisines. La maille qui correspond le mieux aux critères définis par l'utilisateur est ajoutée au germe. Le compartiment est considéré comme abouti lorsqu'il a atteint une taille consigne. L'algorithme choisit alors une nouvelle maille pour débuter un nouveau compartiment. Avant d'utiliser l'algorithme, un pré-découpage manuel en six zones ayant des comportements similaires est effectué : la surface de la colonne pour modéliser la surface libre, un petit cylindre au niveau de l'injection de gaz et trois cylindres concentriques supplémentaires en bas de la colonne pour prendre en compte les très faibles vitesses à cet endroit. Le reste de la colonne constitue la dernière zone. La prise en compte de l'intensité de la lumière comme critère dans l'algorithme d'agglomération conduit à des compartiments de forme annulaire ; en effet, l'intensité de la lumière diminue lorsqu'on

s'approche de l'axe de la colonne. La Figure I-40 présente une comparaison, sur une coupe verticale de la colonne, des trois grandeurs choisies par les auteurs, obtenues respectivement par la MFN et l'agglomération des mailles. Le modèle final est constitué de 82 compartiments, ce qui est relativement faible pour un algorithme d'agglomération de mailles. Les échanges entre les compartiments sont de type convectif et sont calculés à partir des débits volumiques. Afin de tenir compte des échanges entre les phases, la distribution des tailles de bulles, la rupture et la coalescence des bulles, la détermination des tailles des bulles à l'alimentation, la force de traînée et de glissement exercée sur les bulles, la forme des bulles sont pris en compte. Ces modèles influent sur le temps de calcul et la méthode donne la possibilité de ne pas les calculer à tous les pas de temps. Cela permet de simuler une centaine d'heures de fonctionnement en moins d'une dizaine de minutes. **Résultats.** Grâce au couplage entre l'hydrodynamique et l'intensité lumineuse, le modèle est capable de prédire l'instant à partir duquel l'intensité lumineuse n'est plus suffisante au milieu de la colonne pour permettre la croissance des algues mais également l'instant où les mécanismes de l'écoulement ne permettent plus un brassage suffisamment efficace pour permettre aux algues de circuler vers les zones lumineuses.

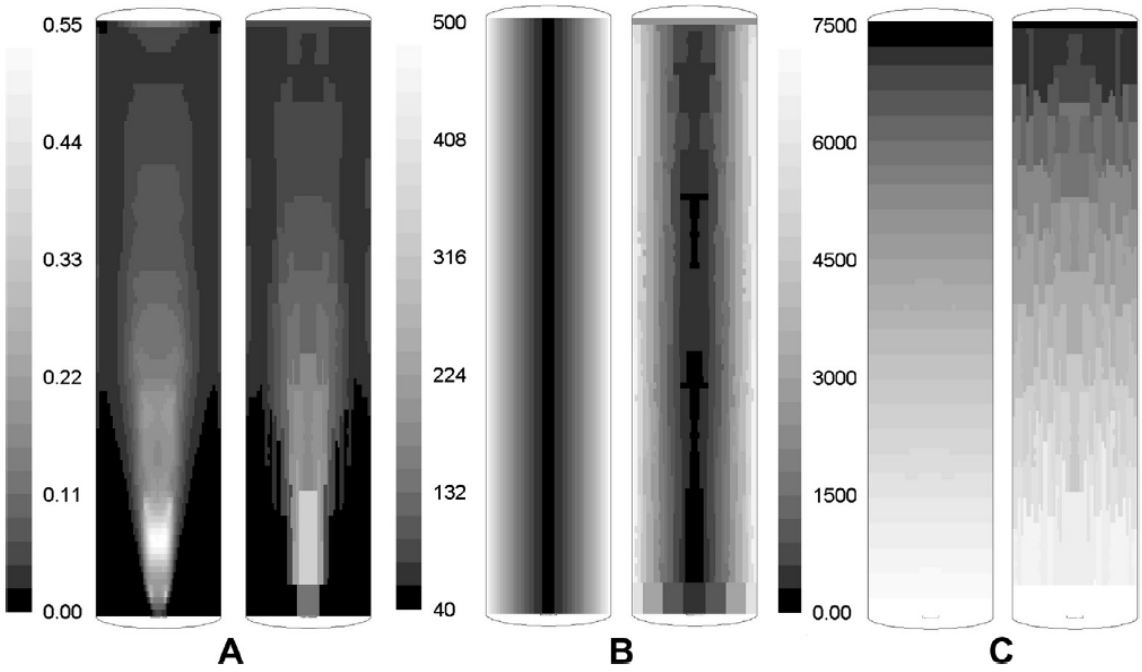


Figure I-40 : Comparaison de profils provenant de la MFN (gauche) et de l'algorithme d'agglomération (droite) pour les trois paramètres choisis comme pertinents pour décrire le procédé ; A : dissipation de l'énergie turbulente, B : intensité lumineuse, C : pression statique. (Nauha and Alopaeus, 2013)

Il est intéressant de noter qu'un algorithme perfectionné d'agglomération de mailles a été utilisé pour construire un modèle mais que les auteurs ont abandonné cette méthode dans leur travaux suivants (Nauha and Alopaeus, 2015) où ils retournent à un découpage classique uniquement basé sur la géométrie du réacteur et plus facile à mettre en œuvre.

I.3.3.2 Conclusions sur les méthodes d'agrégation

Nous venons de présenter plusieurs algorithmes d'agglomération de mailles de MFN pour former un réseau de compartiments. Nous pouvons souligner que globalement les algorithmes suivent le même schéma à savoir :

1. Choix d'une maille « germe »
2. Agglomération des mailles adjacentes sur critères numériques
3. Retour à l'étape 1 à chaque nouveau compartiment.

Les choix de la maille « germe » et le critère seuil d'agglomération sont les deux paramètres à définir par l'utilisateur. Il est nécessaire de faire preuve d'une grande prudence lorsqu'on choisit le critère seuil d'agglomération, car mal choisi, il peut conduire à un nombre inadapté de compartiments. L'inconvénient de ces algorithmes est que, puisqu'on part des mailles de MFN, procéder à l'agglomération de manière qualitative sur une analyse visuelle des champs de grandeurs, est impossible. Par ailleurs, l'algorithme ne suffit souvent pas à lui seul et un pré-découpage manuel en zones aux comportements similaires est nécessaire. A notre connaissance, les premiers à avoir développé cette méthode sont (Bezzo and Macchietto, 2004). Plusieurs auteurs ont réutilisé la même approche avec succès comme (Delafosse et al., 2010) ou (Nauha and Alopaeus, 2013). Nous avons cependant observé que ces mêmes auteurs sont revenus à une méthode de découpage par divisions, (Delafosse et al., 2014) et (Nauha and Alopaeus, 2015), lors de travaux ultérieurs. Cela est expliqué par le fait qu'à partir d'une taille suffisamment petite de compartiment, procéder à un découpage géométrique est plus simple que d'utiliser un algorithme d'agglomération. A l'inverse, si la problématique autorise de grande taille de compartiment, alors il sera plus simple de procéder à une division qualitative plutôt que d'utiliser un algorithme d'agglomération. Cela souligne le fait que l'utilisation d'algorithme pour procéder au découpage peut être très pratique et efficace à condition qu'il soit utilisé intelligemment.

I.3.4 Conclusions modélisation topologique

Nous souhaitons mettre en avant deux aspects de la modélisation compartimentale topologique. Le premier point concerne la méthode de création des compartiments où l'étude de la littérature nous a permis de faire un choix parmi les méthodes existantes. Le second point concerne le calcul des échanges turbulents entre les compartiments où il n'a pas été possible de favoriser une approche plutôt qu'une autre.

I.3.4.1 Choix entre méthode de division ou d'agrégation

Nous venons de présenter deux approches ayant pour objectif de simplifier un réseau de mailles de simulation de MFN : une approche de division du volume total et une autre d'agglomération des mailles.

Nous souhaitons souligner la souplesse de l'approche par division. Il est possible de ne prendre en compte que la géométrie du système en réalisant un découpage « à l'aveugle » vis à vis des mécanismes hydrodynamique et chimique. Cela implique un grand nombre de compartiments car le découpage doit être suffisamment fin, comme par exemple dans les travaux de (Delafosse et al., 2014) avec 10000 compartiments. Il est également possible de diviser le champ d'une grandeur de manière qualitative (analyse visuelle des champs) ou quantitative (découpage sur la base des valeurs numérique des champs). Le découpage qualitatif est difficilement généralisable mais conduit à un nombre de compartiments très faible et un réseau très représentatif des mécanismes mis en jeu : (Rigopoulos and Jones, 2003) avec 30 compartiments, (Le Moullec et al., 2010) avec une vingtaine de compartiments où encore (Alvarado et al., 2012) avec 25 compartiments. Le découpage quantitatif est réalisé à l'aide d'un algorithme et est séduisant au sens où la construction du modèle est potentiellement facilement transposable d'une application à une autre. La gamme de nombre de compartiments obtenu est très large, c'est l'utilisateur qui fixe le nombre de divisions à atteindre, comme par exemple dans les travaux de (Wells and Ray, 2005) avec 100 compartiments. Notons que l'algorithme de divisions successives et celui d'agglomération de mailles sont semblables au sens où ils peuvent conduire soit un grand nombre de compartiments (si on agglomère peu ou si on divise beaucoup) soit un faible nombre de compartiments (si on agglomère beaucoup ou si on divise peu).

Deux groupes de travaux ont attiré notre attention, ceux de (Delafosse et al., 2010) suivis de (Delafosse et al., 2014) et ceux de (Nauha and Alopaeus, 2013) suivis de (Nauha and Alopaeus, 2015). Chacun d'eux ont dans un premier temps réalisé un découpage à l'aide d'un algorithme d'agglomération puis un découpage basé sur une division géométrique du volume total en compartiments. Les auteurs ont montré que la division était plus simple à mettre en œuvre sans perte significative de précision. Dans les travaux de Delafosse, le mélange réactionnel très homogène induit une taille de compartiment très petite ; il y a donc eu peu d'agglomérations de mailles et un découpage géométrique a été tout aussi efficace. Dans les travaux de Nauha, le milieu diphasique très hétérogène permet d'identifier facilement des zones homogènes très distinctes. Il y a donc eu beaucoup d'agglomérations de mailles et un découpage par division qualitative a été tout aussi efficace.

La souplesse de l'approche par division (découpage géométrique, qualitatif ou quantitatif) et le fait que la méthode d'agglomération a été abandonnée par deux auteurs différents nous ont conduit à faire le choix de ne pas conserver la méthode d'agglomération pour notre méthode générale.

I.3.4.2 Prise en compte de la chimie

Nous avons observé que la réaction chimique est un paramètre qui a une forte influence sur le découpage final. Une règle globale est suivie par tous les auteurs, à savoir que les compartiments étant des volumes où toutes les grandeurs sont homogènes, il ne doit pas y avoir de gradient de concentration d'une espèce chimique en leur sein. Pour cela, le temps de passage des espèces réactives doit être significativement plus court que le temps caractéristique de la réaction chimique. Cette règle est respectée en ajustant la taille des compartiments pour qu'ils soient suffisamment petits. Le nombre final de compartiments dépend alors fortement de la cinétique réactionnelle et il ne reste plus beaucoup de marges de manœuvre pour procéder au découpage. Les travaux de (Gresch et al., 2009) on conduit à des modèles allant jusqu'à 200 compartiments, ceux de (Fichet et al., 2010) à 400 compartiments et ceux de (Guha et al., 2006) jusqu'à 15000 compartiments.

I.3.4.3 Calcul des échanges entre les compartiments

Les échanges entre les compartiments sont pris en compte par le biais d'échanges convectifs et turbulents. D'une manière générale, on a $Q_m\left[\frac{mol}{s}\right] = Q_v\left[\frac{m^3}{s}\right] \times C\left[\frac{mol}{m^3}\right]$ avec Q_m le débit matière, Q_v le débit volumique (d'origine convective ou turbulent) et C la concentration volumique de l'espèce.

Les débits volumiques convectifs sont systématiquement calculés car ils sont indispensables pour décrire l'écoulement principal entre les compartiments. Dans tous les travaux présentés, le débit volumique se calcule de la manière suivante : $Q_v^{conv}\left[\frac{m^3}{s}\right] = S[m^2] \times < v^{conv} > \left[\frac{m}{s}\right]$; avec S la surface d'échange et $< v^{conv} >$ la vitesse moyenne traversant cette surface. La méthode la plus rigoureuse consiste à calculer ces grandeurs à travers les surfaces réelles d'échanges définies dans la simulation de MFN comme dans les travaux de (Le Moullec et al., 2010) ou (Delafosse et al., 2014). Mais dans certains cas, la structure globale de l'écoulement est simplifiée et des échanges qualitatifs sont affectés entre les compartiments comme dans les travaux de (Rigopoulos and Jones, 2003) ou (Alvarado et al., 2012).

Concernant les échanges turbulents, la littérature n'est pas unanime. Trois méthodes différentes ont été identifiées parmi les travaux existants :

- Le débit volumique turbulent a été initialement calculé par (Guha et al., 2006) avec une analogie de diffusion moléculaire à partir du coefficient de diffusion turbulente D_t,lui-même calculé à partir de la MFN et Δx la distance entre les deux compartiments (voir équations [I.10] et [I.11]).
- (Le Moullec et al., 2010) utilisent une analogie entre le nombre de mélangeurs d'une cascade de RPA et la dispersion d'un modèle piston à dispersion axiale (voir équations [I.12] et [I.13]).
- (Delafosse et al., 2014) proposent de calculer directement la vitesse turbulente moyenne $< v^{turb} >$ dans le même ordre d'idée que lorsque qu'on calcule la vitesse convective moyenne $< v^{conv} >$ (voir équation [I.9]).

Aucun de ces auteurs n'ont véritablement justifié le choix de leur méthode de calcul des échanges turbulents. De plus, ces échanges sont parfois calculés sur l'ensemble du réseau compartiments et parfois uniquement entre certains compartiments présents dans certaines zones spécifiques. Par ailleurs, certains travaux ne calculent pas d'échanges turbulents alors qu'il serait possible de le faire. (Delafosse et al., 2015) proposent avec succès de calculer les échanges turbulents de manière aléatoire à chaque pas de temps de calcul. Aucune étude n'a comparé les trois approches identifiées sur un même cas d'application, et au vu de l'hétérogénéité dans la manière de prendre en compte les échanges turbulents, une étude approfondie est nécessaire. Une comparaison des trois approches sera menée dans ce manuscrit de thèse.

I.4 Conclusions générales sur l'état de l'art

Dans ce chapitre, nous avons présenté des approches destinées à modéliser les **réacteurs chimiques** et par extension les **systèmes en écoulement réactifs ou non**. Les points communs de ces approches sont qu'elles ont pour objectif de modéliser le volume total du système étudié en un réseau de sous-volumes au sein desquels on connaît le comportement de la matière. Dans l'idéal, ces sous-volumes doivent avoir deux caractéristiques : une localisation spatiale définie et un comportement hydrodynamique spécifié.

Dans les modèles de type systémique, les sous-volumes sont des **réacteurs idéaux** (réacteur parfaitement agité ou réacteur piston). Le nombre de réacteurs idéaux constituants ces modèles n'excède pas la trentaine. Dans ces modèles, le comportement hydrodynamique des réacteurs idéaux est bien défini mais la localisation spatiale de ces derniers ne correspond pas toujours à la réalité. Le point fort de cette approche est que, pour des systèmes simples, les modèles donnent très rapidement une très bonne information du fonctionnement hydrodynamique global. En revanche, lorsque les systèmes mettent en jeu un comportement hydrodynamique très hétérogène ou des réactions sensibles à des phénomènes locaux, les modèles peinent à rendre compte de réactions chimiques ou même à donner une représentation acceptable de l'hydrodynamique. L'évolution de la modélisation systémique consiste à développer des algorithmes procurant des modèles qui prennent en compte, de la manière la plus précise possible, les mécanismes hydrodynamiques locaux plutôt que de construire un modèle dont les paramètres sont optimisés mathématiquement sans rendre compte de la réalité des mécanismes mis en jeu.

Les modèles de type topologique ont la particularité de proposer un réseau de sous-volumes dont la localisation spatiale correspond rigoureusement à la localisation spatiale des phénomènes modélisés. En fonction de la manière dont est réalisé le découpage, le nombre de compartiments peut varier de la dizaine à plusieurs milliers de sous-volumes.

La MFN peut être vue comme une modélisation topologique car le découpage du volume en un réseau de plusieurs centaines de milliers de **mailles** respecte rigoureusement la structure du

système. Cela permet une bonne représentation locale contrairement aux modèles systémiques mais engendre des temps de calcul prohibitifs pour les systèmes les plus complexes (réacteur chimique poly-phasique, par exemple). L'essentiel des travaux présentés dans les modèles topologiques consiste à développer des méthodes de simplification de la MFN afin d'obtenir le meilleur compromis entre précision des résultats et temps de calcul. Dans ce contexte, la littérature parle de **modélisation compartimentale**. Les techniques de traçage, notamment la DTS, qui ont été initialement développées pour les modèles systémiques sont souvent utilisés pour valider les modèle à compartiments.

Les modèles à compartiments existants dans la littérature sont basés sur des approches très hétérogènes. Certains auteurs partent des mailles de MFN pour créer les compartiments par un processus d'agglomération, et d'autres réalisent plutôt un découpage progressif du volume total. Nous avons choisi d'écarter la méthode d'agglomération au profit d'une méthodologie de division du volume total qui offre une plus grande souplesse d'utilisation de par les différentes techniques de division qui ont été identifiées. Les échanges turbulents entre les compartiments sont pris en compte de différentes manières et l'étude bibliographique n'a pas permis de favoriser une méthode plutôt qu'une autre. Chaque contribution a été développée pour un cas bien spécifique et une généralisation de la méthodologie de la modélisation compartimentale n'est pas évidente.

L'objectif de cette thèse est de formaliser une méthode générale de la modélisation compartimentale. Nous proposerons de voir la modélisation compartimentale comme un continuum entre les modèles dits systémiques et la mécanique des fluides numérique. Bien qu'ils puissent paraître simplistes, nous avons vu que les modèles systémiques sont encore utilisés aujourd'hui lorsque des simulations de mécanique des fluides ne sont pas disponibles ou qu'une prédiction rapide de l'hydrodynamique est suffisante. De plus, les outils développés dans les modèles systémiques offrent des solutions de validation simples à mettre en œuvre pour les modèles à compartiments plus évolués. Pour ces raisons, nous avons choisi de présenter les travaux relatifs aux modèles systémiques afin de pouvoir les réinjecter dans notre méthode générale.

Les modèles à compartiments ont le point commun de définir les compartiments comme des volumes où toutes les grandeurs qui y sont représentées sont homogènes. L'objectif de notre travail consiste à formaliser des méthodes de découpages pouvant s'adapter au plus grand nombre de configurations possibles. Par ailleurs, une étude des différents moyens de calcul des échanges turbulents sera réalisée.

CHAPITRE II : **Proposition d'une méthodologie la plus générale possible de la modélisation compartimentale**

Ce chapitre propose une approche de modélisation dite « *modélisation compartimentale* » généralisée. Au vu de la diversité des configurations existantes, une généralisation universelle est utopique mais nous verrons qu'il est possible de traiter un large champ d'applications.

La méthode générale se décompose en trois grandes étapes comme le montre la Figure II-1 :

1. **Construction du modèle**
   Le principe de la modélisation compartimentale consiste à décrire le système sous la forme d'un réseau plus ou moins complexe de compartiments. On définit un compartiment comme un volume au sein duquel tous les paramètres du système (concentration, température, taux de gaz, etc.) sont homogènes. On commence par construire le réseau de compartiments *(paragraphe II.2 : Découpage topologique)* puis on définit les échanges de matière entre ces derniers *(paragraphe II.3 : Détermination des échanges entres les compartiments).*
2. **Remplissage de la matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange**
   Une difficulté de la méthode consiste à écrire le système d'équations différentielles provenant d'un modèle à compartiment dont la structure est à priori quelconque. Pour cela nous avons développé un outil de communication entre le réseau de compartiments et le solveur numérique, la matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange, qui facilite l'écriture et la lecture des équations différentielles *(paragraphe II.5 : Matrice de connectivités des compartiments et des débits).*
3. **Résolution des bilans de matière**
   La résolution des bilans de matière au sein de chaque compartiment permet de répondre à la problématique posée (à minima la modélisation d'expériences de traçage et notamment la DTS et la prédiction des concentrations des espèces chimiques) de manière rapide avec une précision acceptable. Les équations différentielles à résoudre sont simples grâce à la définition du compartiment qui ne contient que des grandeurs homogènes *(paragraphe II.4 : Bilans de matière).*

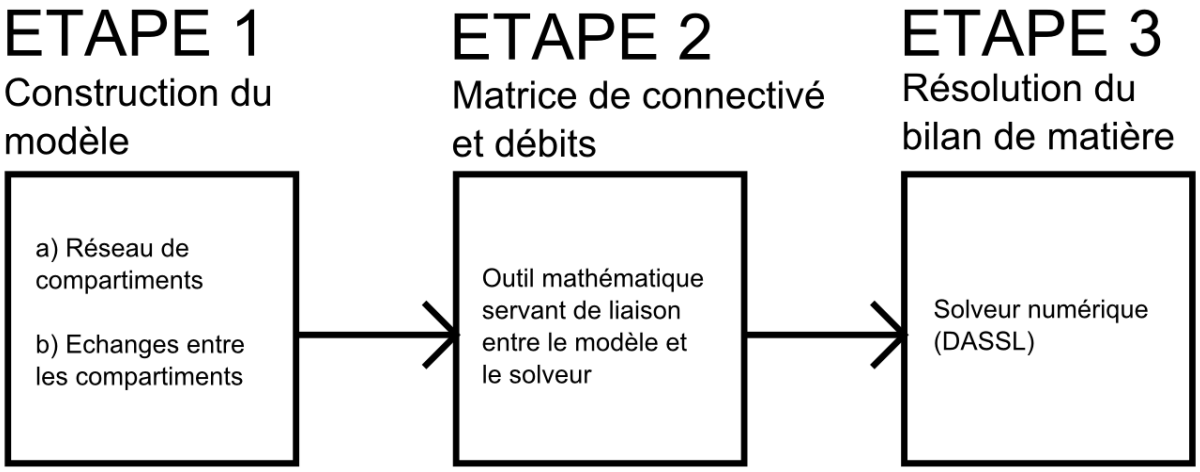


Figure II-1 : Les trois étapes de la méthode générale

II.1 Système et choix de méthodes de modélisation

La méthode est destinée à modéliser les réacteurs chimiques mais s'applique à tout type de système où règne un écoulement de fluide. Le champ d'application est donc très large. Dans le génie des procédés, on rencontre par exemple des cuves agitées ou des colonnes verticales à bulles. (Trambouze and Euzen, 2002), par exemple, présentent les principaux réacteurs chimiques. Dans le domaine du traitement des eaux on rencontre des installations de type canal ou des systèmes naturels tels que des étangs ou des rivières. La méthode est théoriquement capable de prendre en compte des cas allant d'un local ventilé sans réaction chimique jusqu'à des réacteurs chimiques polyphasiques sièges de réactions chimiques complexes.

II.1.1 Description du système et objectif de modélisation

Avant de débuter la modélisation, l'utilisateur doit convenablement décrire le plus précisément possible le système étudié et définir l'objectif de la modélisation. D'une manière générale, le système est défini par sa structure, les espèces chimiques qui y séjournent et leurs propriétés physico-chimiques, l'hydrodynamique des fluides et les réactions chimiques. Il est également important de connaître l'objectif de la modélisation. Cet objectif va influencer directement la structure du réseau de compartiments. Les informations disponibles, que l'on appelle la banque de données, peuvent être un facteur limitant vis-à-vis de la précision finale du modèle. Plusieurs degrés de finesse sont proposés afin de trouver un compromis imposé par l'objectif du modèle et la banque de données disponible.

II.1.1.1 Espèces chimiques et réactions

Dans un premier temps il est nécessaire d'établir la liste des espèces chimiques séjournant dans le système, leurs caractéristiques physico-chimiques et en particulier l'état physique sous lequel elles se trouvent (liquide, solide, gaz). Les réactions mises en jeu sont décrites à l'aide des équations cinétiques.

II.1.1.2 Géométrie du système et conditions de fonctionnement

Cette étape consiste à collecter l'ensemble des informations techniques sur le système ainsi que son mode de fonctionnement.

Informations techniques sur le système :

L'idéal est de disposer d'un plan coté. On n'hésitera pas à vérifier les dimensions car il n'est pas rare que le réacteur soit légèrement différent des plans lorsque ces derniers ont été réalisés avant la fabrication. Si un descriptif à une échelle macroscopique de la plupart des informations techniques est souvent suffisant (volume réactionnel, surface d'échange thermique, nombre de pales…) des détails plus précis peuvent être nécessaires dans certains cas particuliers (position et nombre des injecteurs en cas de réactions sensibles au micro-mélange, forme des pales).

Les données nécessaires sont les suivantes :

- Dimensions : longueur, largeur, hauteur, diamètre, volume accessible au fluide.
- Entrées et sorties : nombre, localisation, diamètres hydrauliques, débits.
- Eléments internes : systèmes d'agitation, racleur.

Modes de fonctionnement :

D'une manière générale le système peut être ouvert ou fermé avec un écoulement stationnaire ou transitoire. La méthode que nous allons présenter n'est applicable qu'aux écoulements stationnaires (Tableau II-1). En fonction du mode de fonctionnement (ouvert ou fermé) différentes expériences de traçage sont accessibles.

Tableau II-1 : Récapitulatif des différents modes de fonctionnement possible

	OUVERT	FERME
TRANSITOIRE	Méthode : **~~non applicable~~**	Méthode : **~~non applicable~~**
STATIONNAIRE	Méthode : applicable Traçage : DTS possible	Méthode : applicable Traçage : courbe de temps de mélange possible

II.1.1.3 Objectif de la modélisation et grandeurs pertinentes

Cette étape consiste à définir l'objectif de la modélisation. La description de l'hydrodynamique sera toujours requise. Nous verrons comment utiliser à bon escient des courbes de traçage et/ou des champs de vitesse (Alvarado et al., 2012 par exemple) pour mener à bien cette description. En revanche, pour les réacteurs chimiques complexes, la prédiction des concentrations de plusieurs espèces chimiques au sein du volume réactionnel est souvent attendue. On peut également souhaiter connaître l'influence de la vitesse d'agitation sur la qualité des produits, l'influence de la localisation de l'injection d'un réactif, ou encore trouver quelle configuration améliore la sélectivité ou le rendement de production d'une espèce (Leon et al., 2014). Ces objectifs, très variables d'un cas d'étude à un autre, permettent de définir les grandeurs physico-chimiques dont il est indispensable de disposer pour construire le modèle. Il peut s'agir de la température si les réactions chimiques en dépendent (Wells and Ray, 2005), de la turbulence s'il est nécessaire d'identifier des zones à fort mélange, de la fraction de gaz s'il est question de prédire une concentration en oxygène dans un système diphasique (Le Moullec et al., 2010). Nommons ces grandeurs les *grandeurs pertinentes.* Nous verrons comment le choix de ces grandeurs influence directement la structure finale du réseau de compartiments. A l'issue de cette sélection, l'utilisateur dispose de N grandeurs pertinentes. Ce choix est une étape importante qui nécessite de bien connaître les mécanismes physico-chimiques mis en jeu afin de ne pas oublier ou ajouter inutilement une grandeur. Par exemple si l'on s'intéresse à un réacteur chimique dans lequel sont réalisées des transformations complexes mais dont on sait que la qualité finale du produit est liée uniquement à l'homogénéité du volume réactionnel à une échelle macroscopique, les données sur le mélange sont suffisantes.

II.1.1.4 Banque de données disponibles

Cette étape consiste à inventorier toutes les données disponibles. Ces données peuvent provenir de mesures expérimentales, de calculs numériques (souvent de la MFN) ou de la connaissance de l'opérateur. Plus le domaine de conditions opératoires est large, plus le modèle développé sera robuste. Le niveau de précision va d'une description globale (comme des courbes de DTS par exemple) à une description locale (comme un champ d'une grandeur bien échantillonnée). Les champs des grandeurs pertinentes doivent être décrits dans la banque de données. L'utilisation et le traitement de ces données seront explicités ultérieurement.

II.1.2 Degré de finesse de la modélisation

A ce stade, le système à modéliser est bien défini et on connait l'objectif du modèle. On ne pourra pas réaliser un objectif de modélisation ambitieux sans disposer d'une banque de données expérimentales et/ou théoriques détaillée. Néanmoins, le manque de données ne doit pas être un frein à la modélisation et la méthode doit proposer une solution pour ces cas de

figure. C'est pourquoi nous avons défini plusieurs degrés de finesse dans la méthode afin de proposer une solution même pour les cas les plus minimalistes.

Comme le montre le chapitre bibliographique de ce manuscrit, les différentes approches sont très hétérogènes du point de vue de la finesse des résultats obtenus. Certains modèles donnent des résultats globaux alors que d'autres sont beaucoup plus précis. Deux approches sont opposées :

- La modélisation systémique qui consiste en un agencement de réacteurs idéaux (typiquement de 1 à 5 modules) permettant de modéliser l'hydrodynamique et les réactions chimiques de manière globale (par l'intermédiaire des DTS). Les équations résolues expriment la conservation de quantité de matière et sont formulées de manière globale. Cette méthode fournit des données globales très rapidement mais n'est applicable que pour des situations simples.
- La mécanique des fluides numérique permet de modéliser l'hydrodynamique et les réactions chimiques de manière locale. Le système étudié est divisé en un grand nombre (jusqu'à plusieurs millions) de petits volumes appelés mailles. Les équations résolues sont les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement (équations de Navier-Stokes en régime laminaire, modèles de turbulence de type RANS par exemple en régime turbulent). La conservation de l'enthalpie est prise en compte si le milieu est siège d'échanges thermiques. Les réactions chimiques sont également modélisables via les équations de conservation de la matière. Ces équations sont résolues par des méthodes numériques telles que la méthode des volumes finis, ce qui permet d'accéder à des champs de vitesse, température ou concentration. Cette méthode fournit des données abondantes et précises mais le temps de calcul peut s'avérer très long lorsque la géométrie est complexe et les équations de conservations nombreuses.

Nous proposons de présenter la modélisation compartimentale comme un continuum entre ces deux approches. Les modèles systémiques « avancés » consistent à prendre en compte de plus en plus d'informations annexes pour construire le modèle (Ben Gaida et al., 2012) et (Leon et al., 2014). (Claudel et al., 2003) ont proposé une méthode générale, remarquable dans ce domaine, basée sur l'interprétation d'informations qualitatives en informations quantitatives. Les modèles topologiques consistent à simplifier le plus efficacement possible des données issues de la MFN, (Le Moullec et al., 2010), (Delafosse et al., 2014) ou (Nauha and Alopaeus, 2015) entre autres. Le Tableau II-2 ci-dessous propose un récapitulatif des caractéristiques principales de chaque approche. Quel que soit le problème considéré, il est normalement toujours possible de se positionner dans l'une de ces catégories :

Tableau II-2 : La modélisation compartimentale présentée comme un continuum entre les modèles systémiques et la MFN.

	← ***MODELISATION COMPARTIMENTALE*** →			
type	**Systémique (cas limite)**	**Systémique « avancée »**	**Topologique**	**MFN (cas limite)**
	→ ***complexification***		***simplification*** ←	
Données nécessaires	Informations qualitatives sur le système	Informations quantitatives sur le système	Champs de vitesses, k, ϵ, modèle cinétique	Equations de conservations (Navier-Stokes, etc)
Réseau de :	Réacteurs idéaux : RPA et/ou RP	Réacteur idéaux : RPA et/ou RP	Compartiments (volume homogène)	mailles
Nombre	$< dizaine$	$< centaine$	dizaine à millier	Dizaine de milliers à plusieurs millions
Structure du modèle (localisation spatiale des compartiments)	Sans importance	La plus représentative possible de la réalité	Rigoureusement représentatif de la réalité	Rigoureusement représentatif de la réalité
Echanges	Convectifs	Convectifs	Convectifs et Turbulents	Convectifs et Turbulents
Méthode de création du réseau de compartiments	Prise en compte d'informations qualitatives	Prise en compte d'informations qualitatives et quantitatives (interprétation de courbes de traçage, connaissance opérateur, etc.)	Découpage intelligent du système en volumes homogènes	Maillage purement géométrique
Outils disponibles	Logiciels commerciaux de modélisation de DTS : (Leclerc et al., 1995)	Méthode générale basée sur la logique possibiliste : (Claudel et al., 2003).	Pas encore développé : exemples dans la littérature appliqués à des cas particuliers.	Logiciels commerciaux de MFN : Fluent, Star CCM+, openFOAM
Informations obtenues	Tendance générale de l'écoulement	Description qualitative de différentes zones d'écoulement	Données ciblées correspondant aux besoins exacts.	Importante quantité de données sur l'écoulement, la turbulence, la chimie, les températures, etc.

Le meilleur degré de finesse réalisable se détermine à partir d'un compromis entre l'objectif de la modélisation et la qualité de la banque de données à disposition. Si la banque de données n'autorise qu'un modèle de type systémique avancé, nous invitons l'utilisateur à consulter les travaux existants dans ce domaine dans le chapitre bibliographique de ce manuscrit.

Concernant la modélisation compartimentale topologique, la littérature propose plusieurs cas d'application spécifique mais pas de méthode générale. La méthode développée dans ce chapitre consiste à une généralisation de la modélisation compartimentale dite « topologique ».

II.2 Découpage topologique

Nous nous trouvons ici à l'étape 1-a de la Figure II-1 qui consiste à construire le réseau de compartiments. Dans le cadre de la modélisation compartimentale « topologique », la banque de données se présente sous forme de grandeurs, telles que des champs de vitesse ou de température, bien échantillonnées dans l'espace provenant essentiellement de simulations de MFN. Dans ce cas de figure, l'utilisateur dispose d'une banque de données abondante parfois difficile à exploiter. La problématique consiste à simplifier ces données en un modèle à compartiments. La description de l'hydrodynamique n'est pas réalisée uniquement par l'interprétation de courbes de traçage mais également par une analyse quantitative de la banque de données. La littérature propose une demi dizaine de travaux de ce type avec une méthodologie faite sur mesure pour le système modélisé (Rigopoulos and Jones, 2003), (Guha et al., 2006), (Gresch et al., 2009), (Le Moullec et al., 2010), (Delafosse et al., 2014), (Nauha and Alopaeus, 2015). Nous proposons ici une méthodologie la plus générale possible. Nous verrons comment la méthode proposée procure aux compartiments une localisation spatiale rigoureuse et un ensemble de grandeurs qui y sont contenues homogènes. Le découpage se décompose en deux étapes :

- Pré-découpage de l'ensemble du volume du système en M sous-volumes V_m
- Construction d'un réseau de compartiments dans chaque sous-volume V_m

II.2.1 Pré-découpage

Afin d'illustrer le fonctionnement global du système de manière la plus compréhensible possible, il est conseillé de procéder à un pré-découpage du volume du système total en M sous-volumes que nous nommons V_m (avec m allant de 1 à M). Voici le raisonnement à suivre :

- Si existence de symétries et invariances :
  En cas de symétrie géométrique et d'invariance dans la répartition des grandeurs pertinentes, il est possible de ne modéliser qu'une partie du système, comme (Rigopoulos and Jones, 2003) l'ont fait sur une colonne à bulles. La géométrie du système est généralement de type parallélépipédique ou cylindrique. Ce cas de figure suggère de procéder à un pré-découpage du volume total en plusieurs tranches qui se succèdent le long ou autour d'un axe de symétrie. Lorsqu'en plus, le long de cet axe, la répartition des grandeurs pertinentes est invariante, alors nous verrons que la structure du réseau de compartiments dans chacune des tranches sera identique.

- Si présence de singularités :
  A l'inverse, lorsque des phénomènes ponctuels sont mis en œuvre ou que la géométrie du système est originale, il est alors conseillé de pré-découper manuellement le volume du système en sous-volumes prenant en compte ces singularités. Cette méthode est empirique et dépend des choix de l'utilisateur. Par exemple (Nauha and Alopaeus, 2013) ont prédécoupé leur colonne à bulles en six zones aux comportements distincts.
- Pas de pré-découpage :
  Notons qu'il est théoriquement possible de travailler directement sur le volume total du système.

II.2.1.1 Découpage en tranches

On définit les tranches par plusieurs portions du volume du système qui se succèdent perpendiculairement suivant une direction de tranchage. Théoriquement, il est toujours possible de découper un volume quelconque en tranches de dimensions variables, ce qui est intéressant pour le développement de notre méthodologie qui se veut la plus générale possible. On impose que le réseau de compartiments au sein de chaque tranche soit similaire. Dans le cas contraire le découpage en tranche n'a pas sens et il s'agit en fait d'un pré-découpage quelconque. En revanche, bien que le réseau de compartiment soit similaire d'une tranche à l'autre, il est théoriquement tout à fait possible que la géométrie des compartiments ne soit pas identique d'une tranche à l'autre. Le découpage que nous proposons ajoute des restrictions supplémentaires et conduit à des **T**ranches à **G**éométrie **I**dentique avec un réseau de **C**ompartiments de géométries **I**dentiques, que nous notons T_{GICI}. Les étapes du découpage sont les suivantes :

- Définir une direction de tranchage :
  Le découpage en tranches est réalisé perpendiculairement à cette direction de tranchage. En théorie, la direction de tranchage peut être quelconque mais on préfèrera une direction où la géométrie des tranches reste inchangée. Il peut s'agir d'un axe de révolution. On préfèrera un axe qui est parallèle à la direction principale de l'écoulement des fluides. La longueur du système dans la direction de tranchage est notée L_t.
- Découper le volume du système en M tranches V_m :
  Pour obtenir des tranches de géométrie identique (volume des tranches constant), on définit l'épaisseur des tranches comme égales. On a alors la relation suivante : $L_t = M \times l_t$, avec l_t l'épaisseur des tranches. Notons qu'il est tout à fait possible de procéder à un découpage avec des tranches d'épaisseur différente.
- Détermination du réseau de compartiments dans chaque tranche :
  Cette étape est expliquée en détail au paragraphe *II.2.2 Création d'un réseau de compartiments*. Pour que la structure du réseau de compartiments soit identique dans chacune des M tranches, il est préférable qu'il existe une invariance dans la répartition des grandeurs le long de la direction de tranchage. Un avantage de la méthode par

tranchage réside dans le fait qu'on travaille sur la surface de la tranche ce qui permet de travailler en deux dimensions. Les compartiments, qui sont des volumes, sont obtenus en multipliant des surfaces par l'épaisseur de la tranche.

- <u>Détermination du nombre de tranches :</u>
  Cette méthode procure un degré de liberté, à savoir le nombre de tranche M. Il est très facile de changer le nombre de tranches lorsqu'il existe des symétries géométriques et des invariances dans la répartition des grandeurs pertinentes car on conserve la même structure des compartiments dans chaque tranche. Le nombre de tranches est un paramètre à optimiser lors de l'étape de validation du modèle.

La Figure II-2 illustre un découpage où les tranches ont :

- Une Géométrie Identique
- Un réseau de compartiments identiques avec une géométrie identique

On note ces tranches T_{GICI} (**T**ranches à **G**éométrie **I**dentique avec un réseau de **C**ompartiments de géométrie **I**dentiques). Ce cas va faire l'objet de plusieurs investigations tout au long de ce manuscrit. On s'intéressera notamment à un cas où un découpage en T_{GICI} n'est pas adapté (présence de singularités dans l'écoulement).

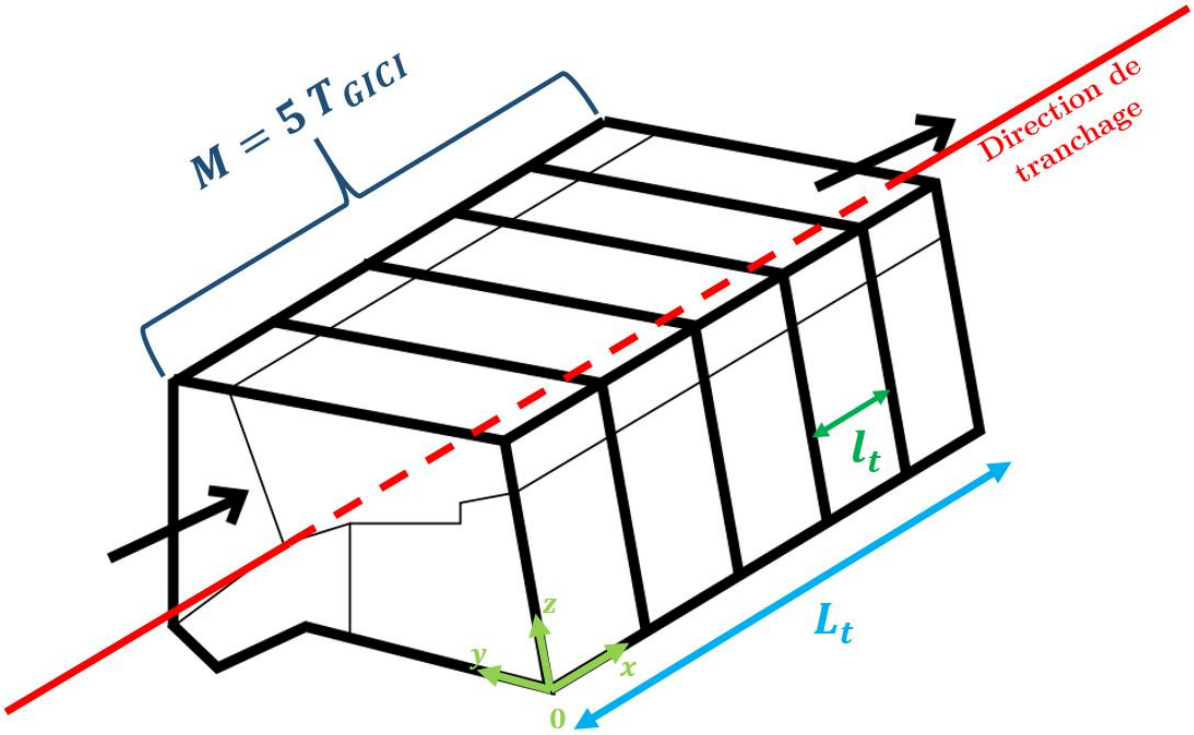


Figure II-2 : Exemple de modèle à compartiments avec découpage en tranches à géométrie identique avec un réseau de compartiments de géométrie identiques (T_{GICI})

II.2.1.2 Passage 1D, 2D ou 3D vers un réseau de compartiments

En fonction du pré-découpage effectué à l'étape précédente, l'utilisateur va effectuer le découpage sur un champ qui peut être en 1D, 2D ou 3D. Par exemple, lorsqu'on pré-découpe le volume total du réacteur en M tranches de volume V_m, le découpage des compartiments est réalisé sur la surface de la tranche. Or, un compartiment est un volume. L'utilisateur doit donc revenir à un découpage en 3D pour obtenir le réseau de compartiments. Ce point n'est qu'une contrainte technique mais ne doit pas être omis. Si le champ de travail est :

- En 3D : alors il n'y a rien à faire
- En 2D : alors il faut multiplier les surfaces découpées par une longueur l (épaisseur de la tranche par exemple)
- En 1D : alors il faut multiplier les distances découpées par l_1 et l_2 (assez rare).

II.2.2 Création d'un réseau de compartiments

A ce stade, le volume total du système a été prédécoupé en M sous-volumes V_m (sans pré-découpage $M = 1$). Dans chacun d'eux, un réseau de compartiments doit être créé. A partir de ce point, l'espace de travail est un volume V_m.

Pour construire le réseau de compartiments, la ligne directrice de la méthode est que par définition, l'ensemble des N grandeurs pertinentes doit être homogène au sein d'un même compartiment. Nous avons vu dans le chapitre bibliographique qu'il existe deux approches opposées capables de simplifier un champ scalaire d'une grandeur. L'une consiste à partir des plus petits échantillonnages (mailles de MFN par exemple) et de les agglomérer. L'autre consiste à partir du volume total et à le diviser. Un avantage de la méthode de division réside dans le fait qu'il est possible de réaliser le découpage qualitatif contrairement à la méthode d'agglomération dans laquelle on part des mailles de MFN où le critère d'agglomération est forcément quantitatif. D'autre part, il a été montré qu'à partir d'un nombre suffisamment important de compartiments, la méthode de division basée uniquement sur des critères géométriques (techniquement très simple à mettre en œuvre), donnait des résultats tout aussi précis que la méthode l'agglomération. Nous avons choisi d'écarter la méthode d'agglomération.

II.2.2.1 Cheminement du découpage

Quelques mots de vocabulaire que nous avons définis :

- **Zone élémentaire (ZE) :** Une *zone élémentaire* (ZE) est une subdivision indivisible d'un champ scalaire C_n au sein de laquelle la *grandeur pertinente* n est homogène.

- **<u>Zone homogène (ZH) :</u>** Une *zone homogène* (ZH) est une subdivision d'un champ scalaire C_n au sein de laquelle la *grandeur pertinente* n est homogène. Une *zone homogène* (ZH) est un regroupement de *zones élémentaires* (ZE). Le champ C_n est composé de c_n *zones homogènes.*
- **<u>Zone compartimentée (ZC) :</u>** Une *zone compartimentée* (ZC) est une subdivision d'un maillage C au sein de laquelle toutes les N *grandeurs pertinentes* sont homogènes. Le maillage C est composé de c *zones compartimentées.*

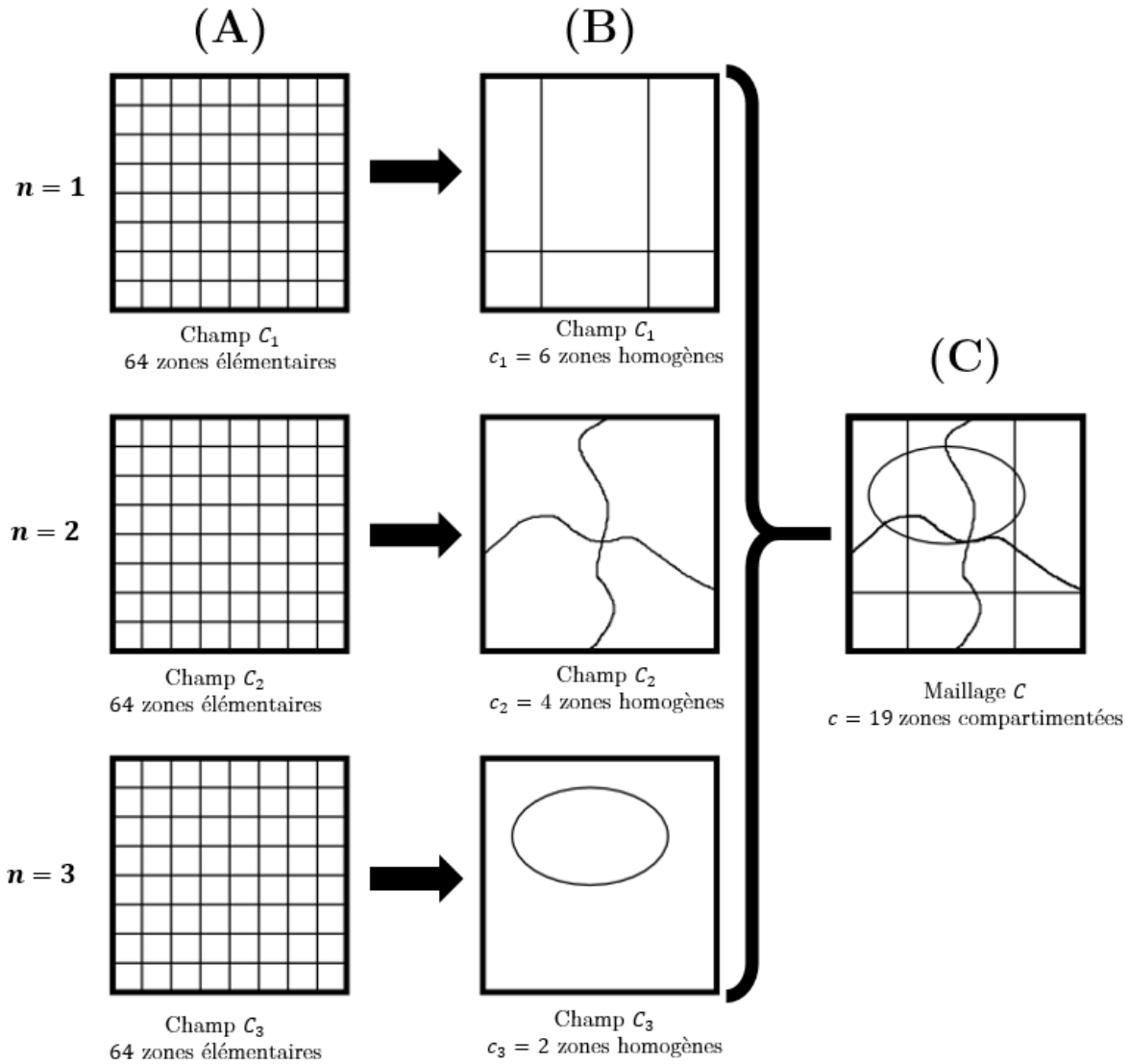


Figure II-3 : Schématisation de la méthode de découpage sur un exemple illustratif. $N = 3$ grandeurs pertinentes. (A) Toutes les grandeurs pertinentes sont échantillonnées en zones élémentaires, en général ce sont des données issues de MFN échantillonnées par le maillage de la simulation. (B) Toutes les grandeurs pertinentes sont échantillonnées en zones homogènes. (C) Après une étape de superposition on obtient un unique maillage de zones compartimentées.

La Figure II-3 représente le cheminement de la méthode de découpage sur un exemple illustratif en 2D avec $N = 3$ grandeurs pertinentes. Initialement, (Figure II-3-A), chaque grandeur pertinente n (n allant de 1 à 3) est représentée dans l'espace sous forme d'un champ C_n échantillonné par les mesures expérimentales ou les mailles de MFN ; ce sont des ***zones élémentaires*** (ZE). Par exemple C_1 un champ de température, C_2 un champ de l'énergie cinétique turbulente k et C_3 un champ de fraction volumique de gaz. Ces champs peuvent être en 1D, 2D ou 3D. Cela dépend du choix de pré-découpage effectué à l'étape précédente. Dans le cas du découpage en tranches, les champs C_n sont représentés sur la surface de la tranche donc en 2D. La première étape, (Figure II-3-B), consiste à simplifier séparément chacun de ces champs C_n en un nouvel échantillonnage constitué de c_n ***zones homogènes*** (ZH). Enfin, (Figure II-3-C), on regroupe les C_n champs en maillage noté C constitué de c ***zones compartimentées*** (ZC). Les ZC ne représentent pas les grandeurs pertinentes de manière indépendante mais des zones où l'ensemble des grandeurs pertinentes sont homogènes. Nous verrons comment ces étapes sont réalisées au paragraphe suivant.

II.2.2.2 Différentes techniques de division

Dans ce paragraphe nous allons présenter trois techniques de division qui permettent de découper un champ d'une seule grandeur pertinente C_n, c'est-à-dire le passage pour une grandeur pertinente de l'étape A vers l'étape B de la Figure II-3. Ce découpage doit être répété pour chaque grandeur. La Figure II-4, illustre de façon simplifiée les trois techniques pour créer les zones homogènes par division. La technique (i) consiste à découper le champ d'une grandeur pertinente de façon purement arbitraire en un maillage géométrique. Les techniques (ii) et (iii) consistent à découper le champ d'une grandeur pertinente sur la base des valeurs de cette grandeur. La technique (iii) est qualitative et basée sur un découpage purement visuel du champ. Le découpage dépend de l'utilisateur et de sa connaissance des données. La technique (ii) est quantitative et basée sur un calcul d'écart par rapport à une valeur moyenne. Le découpage dépend des critères numériques donnés par l'utilisateur.

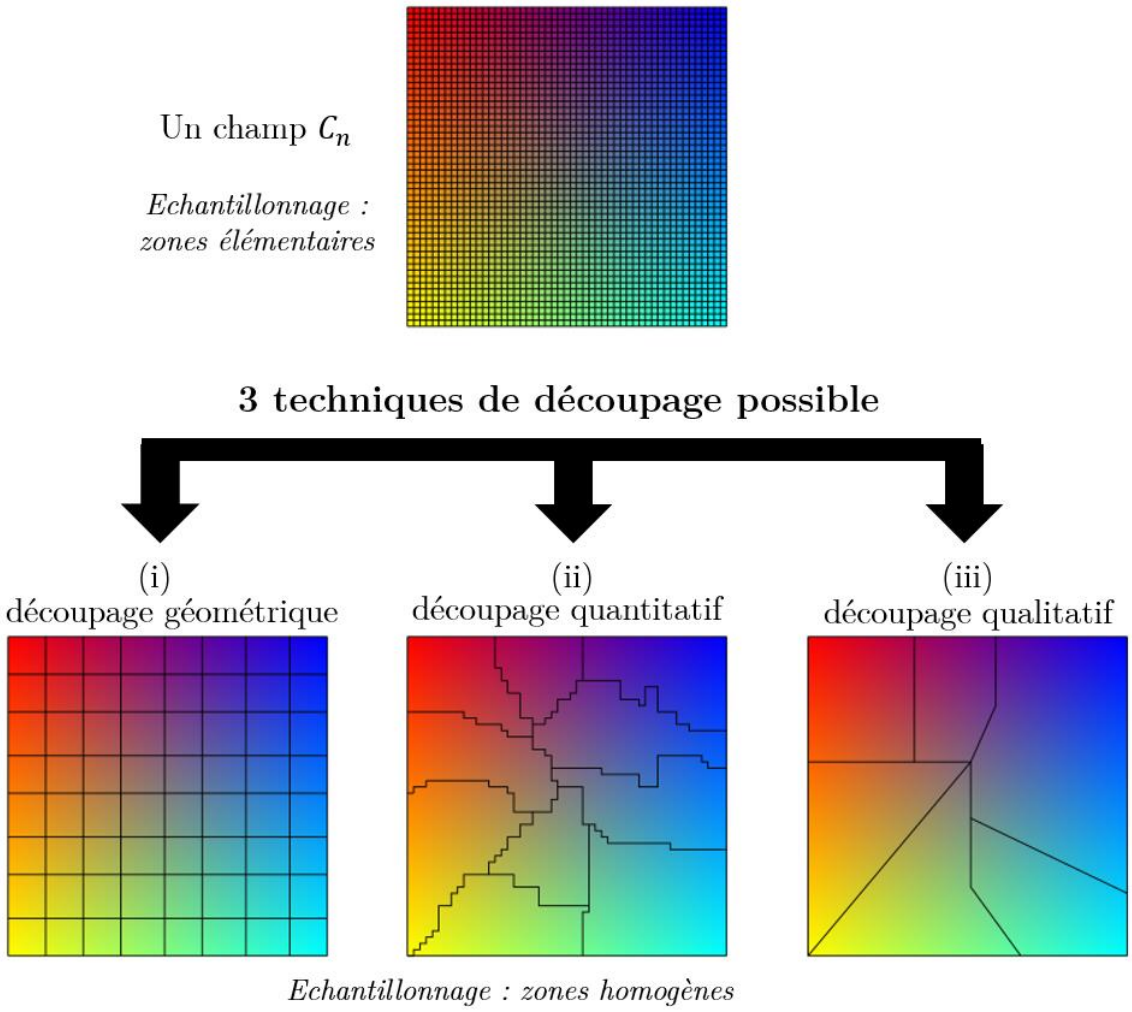


Figure II-4 : Exemple d'un champ C_n représentant une grandeur pertinente n en 2D. Présentation des trois techniques de découpage.

Découpage géométrique (i)

(Delafosse et al., 2014) et (Nauha and Alopaeus, 2015) ont chacun abandonné leurs méthodes d'agglomération de mailles de MFN, respectivement développées par (Delafosse et al., 2010) et (Nauha and Alopaeus, 2013), au profit d'une méthode de division géométrique. Les auteurs ont montré que lorsque le champ des grandeurs pertinentes est suffisamment homogène et que le nombre de compartiments choisis est suffisant, cette technique est simple à mettre en œuvre et donne des résultats similaires à l'algorithme d'agglomération des mailles de MFN. Elle peut évidemment être appliquée quel que soit le degré d'homogénéité du champ C_n comme le montre la Figure II-5. Notons que lorsque le champ C_n est hétérogène, le découpage géométrique nécessite un nombre important de zones afin de pouvoir considérer que la grandeur pertinente n est suffisamment homogène au sein de chacune d'elles.

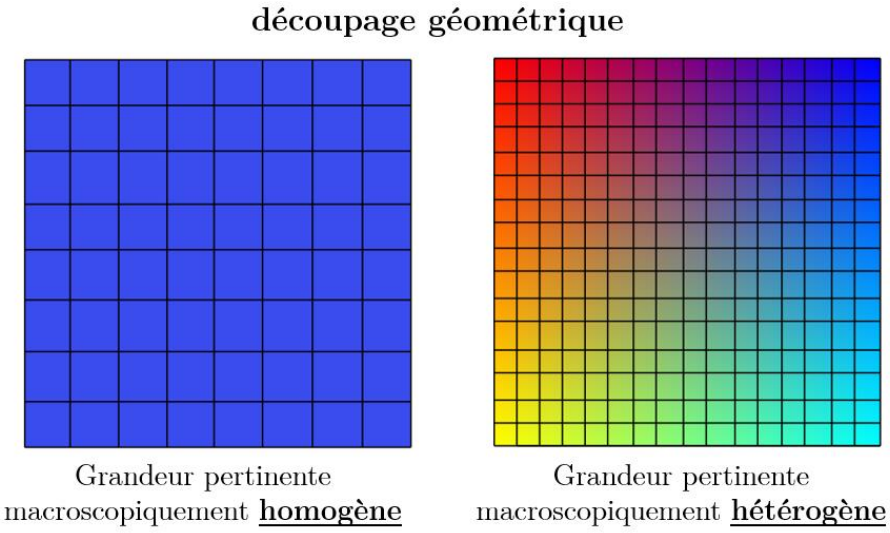


Figure II-5 : Illustration de la technique de découpage géométrique basée sur une grandeur pertinente macroscopique homogène et une autre macroscopiquement hétérogène.

Découpage qualitatif (iii)

Le découpage qualitatif est basé sur une analyse purement visuelle du champ C_n. Il dépend de l'utilisateur et de son interprétation des données. Il est donc très difficile de le formaliser de manière générale. Cette technique mène à un faible nombre de compartiments et est particulièrement adaptée aux cas où le champ C_n est très hétérogène comme dans l'exemple illustré sur la Figure II-6. (Le Moullec et al., 2010) et (Rigopoulos and Jones, 2003) proposent un tel découpage sur des réacteurs gaz-liquide dans lesquels on distingue de manière évidente les zones à haute et faible concentrations en gaz. (Alvarado et al., 2012) ont procédé au découpage d'un étang siège d'un écoulement monophasique liquide sans réaction chimique à partir de l'analyse des champs de vitesse et de turbulence.

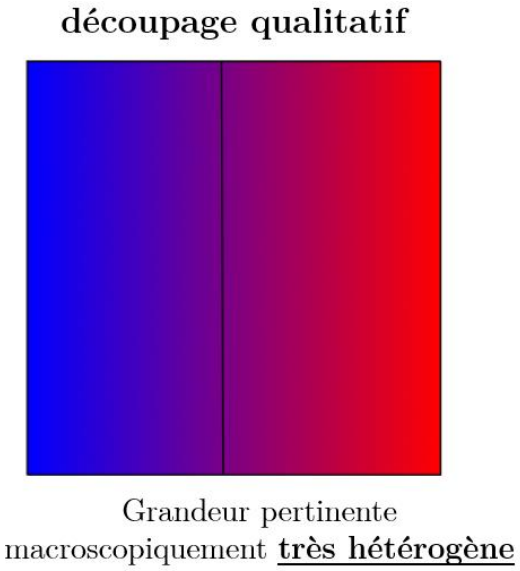


Figure II-6 : Illustration de la technique de découpage qualitative sur une grandeur pertinente macroscopiquement très hétérogène.

Découpage quantitatif (ii)

Le découpage quantitatif est basé sur un calcul d'écart par rapport à la valeur moyenne de la grandeur pertinente. Le découpage dépend des critères numériques donnés par l'utilisateur. Il s'agit du cas intermédiaire entre le découpage géométrique menant à un grand nombre de compartiments et le découpage qualitatif menant à un faible nombre de compartiments. L'algorithme de division, introduit pour la première fois par (Wells and Ray, 2005), se distingue des algorithmes d'agglomération de mailles de MFN par sa simplicité d'utilisation.

L'algorithme consiste à répéter D_{tot} fois une étape de division d'un champ scalaire. Soit d allant de 1 à D_{tot} le rang de la division. Soit Φ la valeur numérique de la grandeur pertinente dans une zone élémentaire. L'algorithme se décompose comme suit :

1. Initialisation : $d = 0$. L'ensemble des zones élémentaires du champ C_n sont regroupées en une zone homogène (voir figure Figure II-7).

2. On calcule $\Delta\Phi$, la différence entre la plus petite et la plus grande valeur numérique de la grandeur pertinente n pour <u>toutes</u> les zones homogènes. La zone homogène ayant la plus grande différence est <u>choisie</u> pour le découpage. On calcule alors la moyenne arithmétique de la grandeur pertinente n sur l'ensemble des zones élémentaires constituant la zone homogène sélectionnée.

   Division : Toutes les zones élémentaires contenant des valeurs numériques inférieures (ou supérieures) à la moyenne arithmétique calculée à l'étape 2 sont regroupées dans une nouvelle zone homogène. Le nombre total de zone homogène a augmenté de 1 : $c_n = c_n + 1$. On passe au rang suivant : $d = d + 1$.
   Le passage de l'étape 2 à 3 est illustré sur la Figure II-8 sur un exemple où $d = 2$ au niveau de l'étape 2.

3. Retour à l'étape 2 jusqu'à ce que $d = D_{tot}$.

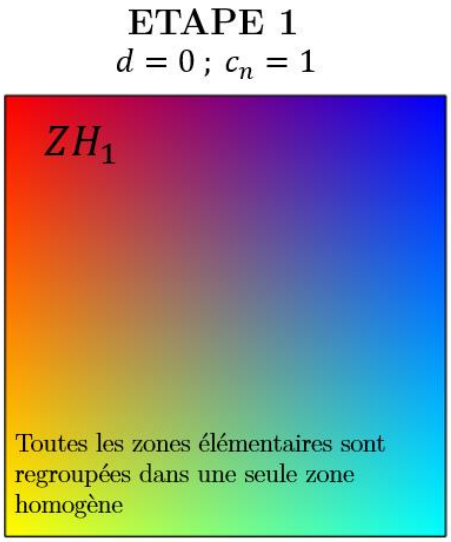


Figure II-7 : Illustration de l'étape 1 de l'algorithme de division

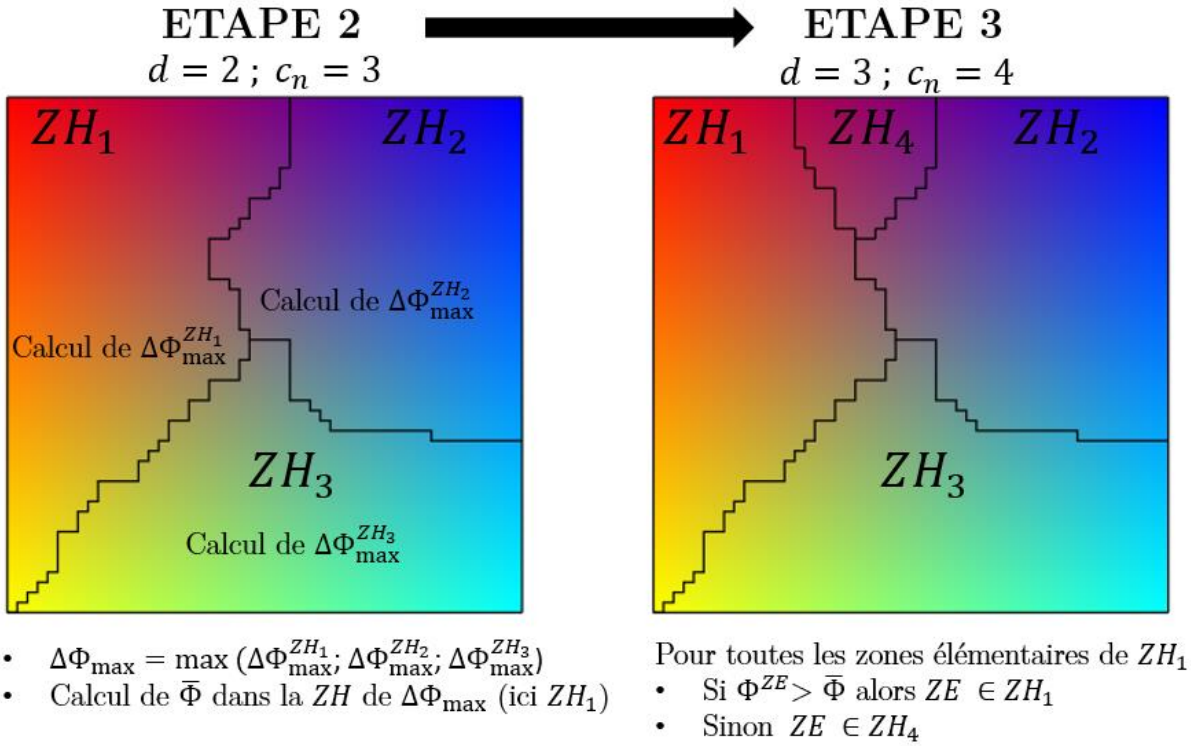


Figure II-8 : Illustration du passage de l'étape 2 (avec $d = 2$) à 3 de l'algorithme de division

Une fois que toutes les divisions ont été effectuées, le nombre total de zones homogènes vaut :

$$c_n = D_{tot} + 1 \qquad [II.1]$$

Pour un champ très hétérogène comme celui de la Figure II-6, une seule division donnera un découpage similaire à un découpage qualitatif. Pour un champ rigoureusement homogène, c'est-à-dire avec des valeurs de la grandeur pertinente constante, l'algorithme de division est inefficace. L'algorithme est particulièrement adapté pour les champs hétérogènes où le découpage qualitatif n'est pas évident ou possible. Dans ce cas il faut déterminer avec soin le nombre de divisions nécessaires. Notons que si le nombre de division devient trop grand, un découpage géométrique sera tout aussi efficace et plus simple à mettre en œuvre. Nous conseillons de ne pas dépasser la centaine de division.

II.2.2.3 Prise en compte de plusieurs grandeurs pertinentes

Nous nous intéressons à présent à l'étape permettant de passer de l'étape B à l'étape C de la Figure II-3, qui permet de prendre en compte plusieurs grandeurs pertinentes. Pour chaque grandeur pertinente n, l'utilisateur a appliqué une des trois techniques de division présentées aux paragraphes précédents. Il n'est pas obligatoire de découper toutes les grandeurs pertinentes avec la même technique. On peut par exemple découper un champ de fraction de gaz à l'aide de l'algorithme de division et un champ de température avec un découpage qualitatif. A ce stade l'utilisateur dispose de N champs notés C_n (n allant de 1 à N). Chacun de ces champs a été découpé en c_n *zones homogènes* (ZH). Un exemple d'illustration est présenté sur la Figure II-9 avec $N = 2$.

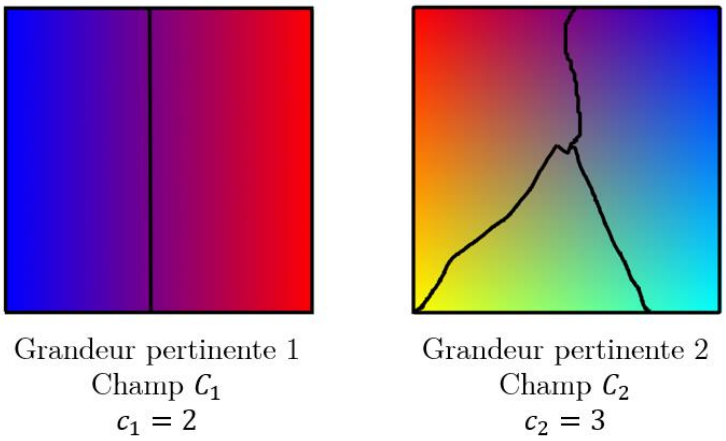


Figure II-9 : Exemple en 2D de $N = 2$ champs C_n (C_1 et C_2) découpés en c_n ($c_1 = 2$ et $c_2 = 3$) zones homogènes.

Pour que dans un compartiment toutes les grandeurs pertinentes soient homogènes, on superpose l'ensemble des N champs C_n (Figure II-10-a) afin d'obtenir un unique maillage C (Figure II-10-b). Cette méthode a été utilisée pour la première fois par (Le Moullec et al., 2010). Lors de cette superposition, les *zones homogènes* (ZH) de chacun des champs C_n se chevauchent pour créer de nouvelles zones que l'on nomme zones compartimentées (ZC) dans lesquelles toutes les grandeurs pertinentes sont homogènes. On note c le nombre de *zones compartimentées* (ZC) ainsi créées dans le maillage C. La dernière étape consiste à créer un

réseau topologique en définissant des échanges uniquement entre des zones compartimentées (ZC) voisines l'une de l'autre (Figure II-10-c). Par exemple, il est interdit de définir un échange entre la zone compartimentée numéro 3 et la numéro 1. Nous verrons au paragraphe suivant comment définir ces échanges.

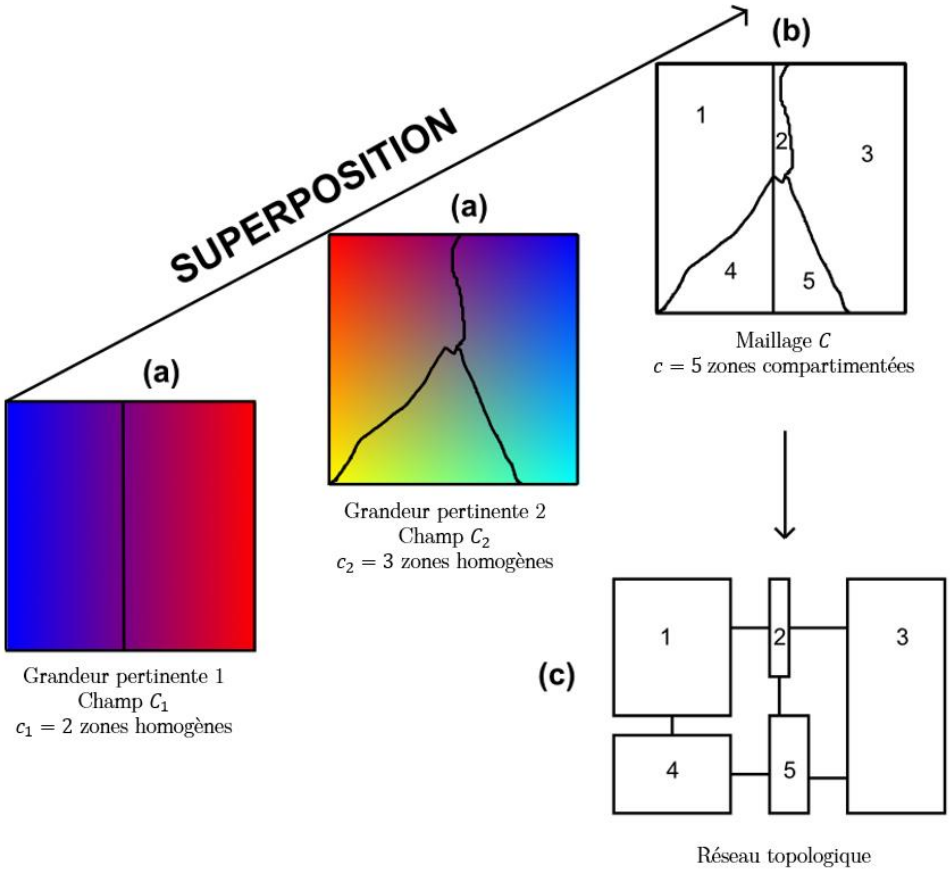


Figure II-10 : Illustration de la technique de superposition conduisant à un maillage où toutes les grandeurs pertinentes sont homogènes. (a) Champs C_n échantillonné en c_n zones homogènes où chaque grandeur pertinente n est homogène. (b) Maillage C échantillonné en c zones compartimentées (ZC) où toutes les grandeurs pertinentes sont homogènes. (c) Réseau topologique où toutes les zones compartimentées (ZC) échangent uniquement avec leurs voisines.

II.2.2.4 Influence de la chimie sur le découpage

In fine, la méthode est destinée à modéliser les réacteurs chimiques. Comme l'ont montré (Guha et al., 2006) ou (Gresch et al., 2009), l'influence de la cinétique de réaction joue un rôle important sur le dimensionnement des compartiments. Il a été montré qu'il est nécessaire qu'au sein d'un compartiment le temps caractéristique de la réaction, noté t_{react}, soit largement supérieur au temps de passage des molécules, noté τ_j :

$$t_{react} \gg \tau_j \qquad [II.2]$$

Cela assure que la concentration en espèces chimiques soit uniforme dans le compartiment. Dans le cas contraire, durant le temps nécessaire aux molécules réactives pour traverser le compartiment, la réaction chimique aura modifié la concentration des réactifs. Le temps caractéristique de la réaction est une contrainte qu'on ne peut pas modifier. En revanche le temps de passage $\tau_j = \frac{V_j}{Q_{v,j}}$, avec V_j le volume du compartiment et $Q_{v,j}$ le débit volumique qui le traverse, peut être ajusté en modifiant le volume du compartiment. Nous rappelons qu'une des hypothèses de la méthode est que l'écoulement doit être établi donc $Q_{v,j}$ constant. Le volume du compartiment est défini par les dimensions de celui-ci. C'est donc sur le découpage que l'utilisateur peut intervenir pour remplir la condition $t_{react} \gg \tau_j$. Cette contrainte peut-être directement prise en compte dès la première tentative de construction du modèle mais il est également possible que l'utilisateur ait d'abord construit un modèle représentant uniquement l'hydrodynamique du réacteur chimique. Dans ce cas de figure, il peut être nécessaire de raffiner le modèle. La Figure II-11 illustre ce propos. Les grandeurs pertinentes 1 et 2 initialement découpées en $c_1 = 2$ et $c_2 = 3$ zones homogènes (voir Figure II-10) sont redécoupées en $c_1 = 3$ et $c_2 = 6$ zones homogènes afin de réduire le volume et donc le temps de passage τ_j. Après superposition le champ C est passé de $c = 5$ à $c = 11$ zones compartimentées. Notons qu'après ce raffinage, le modèle doit toujours correctement modéliser la DTS.

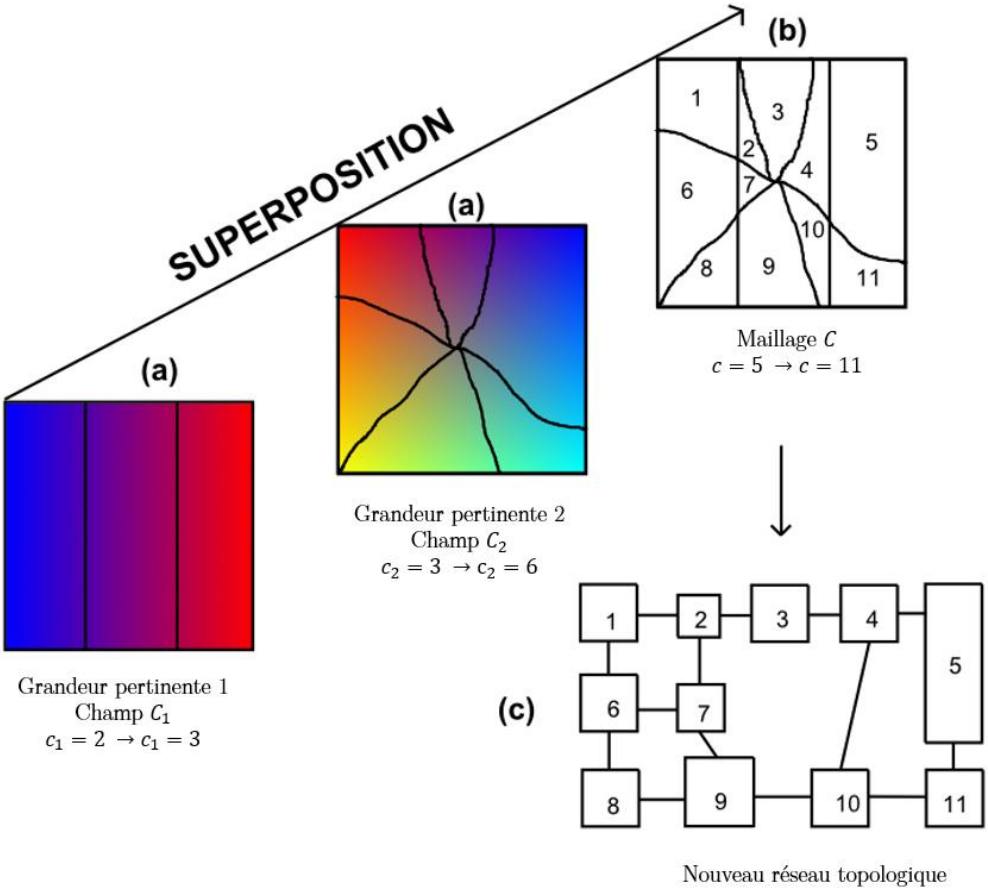


Figure II-11 : Raffinage du modèle ne prenant initialement en compte que l'hydrodynamique (voir Figure II-10) afin de prendre en compte une réaction chimique.

II.2.3 Cas de l'hydrodynamique instationnaire

La méthode s'applique aux écoulements stationnaires, cela signifie que le débit volumique d'échange entre les compartiments est constant dans le temps et que la structure du réseau de compartiments est fixe. Si l'écoulement est instationnaire, les grandeurs pertinentes peuvent évoluer au cours du temps. Pour tenir compte de cette évolution il faudrait, en toute rigueur, construire un modèle à compartiments dont la structure est dynamique. La méthode, dans son état actuelle, ne propose pas de solution concrète. Des solutions sont présentées en perspectives dans la conclusion de ce chapitre.

II.3 Détermination des échanges entres les compartiments

Nous sommes à l'étape 1-b de la Figure II-1 qui consiste à déterminer les échanges entre les compartiments. A ce stade, l'utilisateur dispose d'un réseau de compartiments (étape 1-a). D'une manière générale, pour une espèce chimique i, le flux de matière Q_m est égal au débit volumique Q_v multiplié par la concentration C_i :

$$Q_m\left[\frac{mol}{s}\right] = Q_v\left[\frac{m^3}{s}\right] \times C_i\left[\frac{mol}{m^3}\right] \qquad \text{[II.3]}$$

Les sommes des flux de matière Q_m entrant et sortant de chaque compartiment doivent être identiques. La concentration C_i est l'inconnue qui doit être calculée au sein de chaque compartiment (concentration d'une espèce chimique ou d'un traceur par exemple). On rappelle que C_i est constante dans l'ensemble du compartiment. Le bilan de matière au sein d'un compartiment (voir Eq. [I.7]), qui prend en compte les termes d'accumulation et les réactions chimiques aboutit à un système d'équation différentielle qui sera résolu numériquement et permettra d'obtenir les concentrations au cours du temps. Pour le moment, l'objectif de l'utilisateur consiste à attribuer une valeur de débit volumique Q_v entre chaque couple de compartiments adjacents à partir des données issues de la MFN. On note que Q_v doit être constant à l'instant où il est calculé. Dans le cas d'un écoulement stationnaire Q_v ne dépend pas du temps et est donc toujours constant. Dans le cas d'un écoulement transitoire on calcule Q_v à un temps donné ou on choisit un pas de temps Δt suffisamment petit pour considérer le débit volumique constant durant cette période. Deux types de débits volumiques peuvent être pris en compte, les débits convectifs Q_v^{conv} et les débits turbulents Q_v^{turb}.

Les échanges convectifs Q_v^{conv} décrivent l'écoulement moyen du fluide à travers le système. Ils représentent le sens de l'écoulement et sont donc unidirectionnels. Dans tous les cas il est nécessaire de les renseigner.

Les échanges turbulents rendent compte de la diffusion de la matière due à la turbulence de l'écoulement. Ils sont modélisés par des échanges bi-directionnels. Ils ne sont pas systématiquement pris en compte. La littérature scientifique propose plusieurs approches pour calculer les échanges turbulents. A notre connaissance, la comparaison de ces approches n'a pas encore été réalisée et fera l'objet d'une étude approfondie dans la suite de ce manuscrit. Nous avons identifié trois approches pour modéliser les échanges turbulents :

- Analogie avec la diffusion de la matière :
  La première approche consiste à faire une analogie entre dispersion turbulente et diffusion de la matière. A notre connaissance, elle a été introduite par (Guha et al., 2006) et a été réutilisée par (Gresch et al., 2009) et (Alvarado et al., 2012). La diffusion de la matière désigne la tendance naturelle d'un système à rendre homogènes les concentrations des espèces chimiques en son sein sous l'effet du mouvement brownien. C'est un phénomène de transport irréversible qui se traduit par la migration d'espèces chimiques dans un milieu. On observe un déplacement des constituants des zones de forte concentration vers celles de faible concentration. Ce phénomène est régi par la loi de Fick.
- Calcul d'une vitesse turbulente :
  La deuxième approche consiste à décrire les échanges turbulents entre les compartiments à l'aide d'une vitesse turbulente moyenne qui traverse la surface d'échange entre deux compartiments. A notre connaissance, elle a été introduite par (Delafosse et al., 2014) et personne ne l'a réutilisée depuis.
- Analogie entre cascade de RPA et RP dispersif :
  La dernière approche consiste à rendre compte de la dispersion turbulente en faisant une analogie entre les modèles réacteur piston à dispersion axiale et cascade de réacteurs parfaitement agités. A notre connaissance, elle a été introduite par (Le Moullec et al., 2010) et personne ne l'a réutilisée depuis.

La Figure II-12 illustre les échanges de matière entre deux compartiments. Dans tous les cas, la somme des débits volumiques Q_v entrant et sortant d'un compartiment, qu'ils soient convectifs et/ou turbulents, doivent être égaux. Nous verrons que, par construction, les débits turbulents se compensent entre eux mais l'utilisateur doit prendre soin de vérifier le bilan pour les débits convectifs.

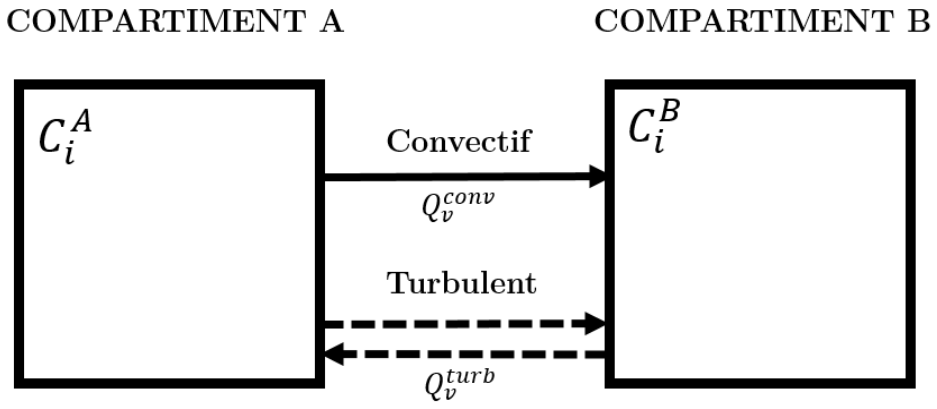


Figure II-12: schématisation des échanges entre deux compartiments.

II.3.1 Echanges convectifs

Soit deux compartiments A et B échangeant de la matière à travers une surface commune S. L'échange convectif est représenté par un débit traversant la surface S dans un sens, comme le montre la Figure II-13. On s'intéresse ici à comment calculer Q_v^{conv}.

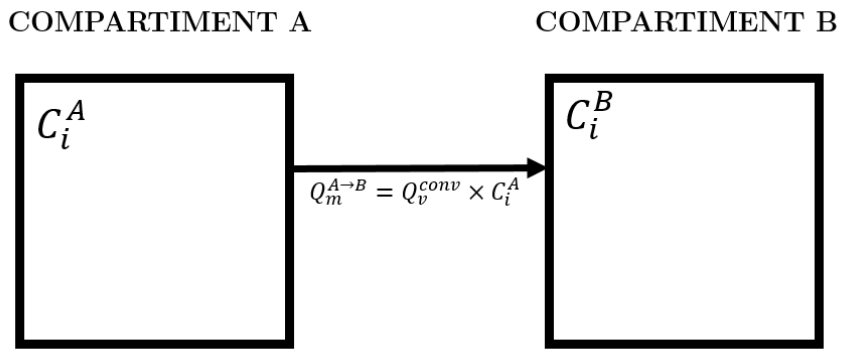


Figure II-13 : Schématisation des échanges convectifs entre deux compartiments

Soit $< v^{conv} >$ la vitesse moyenne du fluide à travers la surface S d'échange entre les deux compartiments. Il est possible de calculer le débit volumique de la manière suivante :

$$Q_v^{conv}\left[\frac{m^3}{s}\right] = S[m^2] \times < v^{conv} > \left[\frac{m}{s}\right] \qquad \text{[II.4]}$$

A condition de disposer d'un champ de vecteur vitesse à travers cette surface, la vitesse moyenne se calcule de la manière suivante :

$$< v^{conv} > = \vec{v}.\vec{n} \qquad \text{[II.5]}$$

avec $\vec{n}$ le vecteur normal à la surface S et $\vec{v}$ le vecteur vitesse moyen. La MFN fournit facilement ce genre d'informations mais il est possible d'obtenir un champ de vitesse à travers des données expérimentales telles que des mesures de PIV (Particle Image Velocimetry : méthode expérimentale optique non intrusive permettant d'obtenir des champs de vitesse instantanés dans un plan de l'écoulement). Le sens du débit, à savoir s'il va du compartiment A vers B ou l'inverse (voir Figure II-12), est indiqué par le signe de $< v^{conv} >$.

Il est possible d'affecter manuellement les valeurs des débits volumiques convectifs sans passer par le calcul d'une vitesse. Cela est fait à partir d'une analyse qualitative de l'écoulement en supposant quelle proportion du fluide passe à travers les compartiments. L'interprétation de courbes de traçage, la visualisation d'expériences de traçage coloré ou encore la connaissance de l'opérateur sur le fonctionnement du procédé peut permettre de faire ce choix. Cette méthode avec des débits simplifiés est un bon moyen d'obtenir rapidement une première tendance du comportement du modèle. En l'absence de champs de vitesse pour calculer rigoureusement les débits d'échanges, l'utilisateur est contraint de procéder de cette manière (solution de derniers recours).

II.3.2 Echanges turbulents

Soit deux compartiments A et B dont les centres sont distants de Δx et échangeant de la matière à travers une surface commune S. L'échange turbulent est représenté par deux débits de sens opposés traversant la surface S comme le montre la Figure II-14. Les trois approches identifiées se distinguent dans la manière de calculer le débit volumique turbulent Q_v^{turb}. Indépendamment de la méthode choisie, les débits volumiques turbulents dans les deux sens sont par construction égaux. On s'intéresse ici à comment calculer Q_v^{turb} dans chacune des trois approches identifiées.

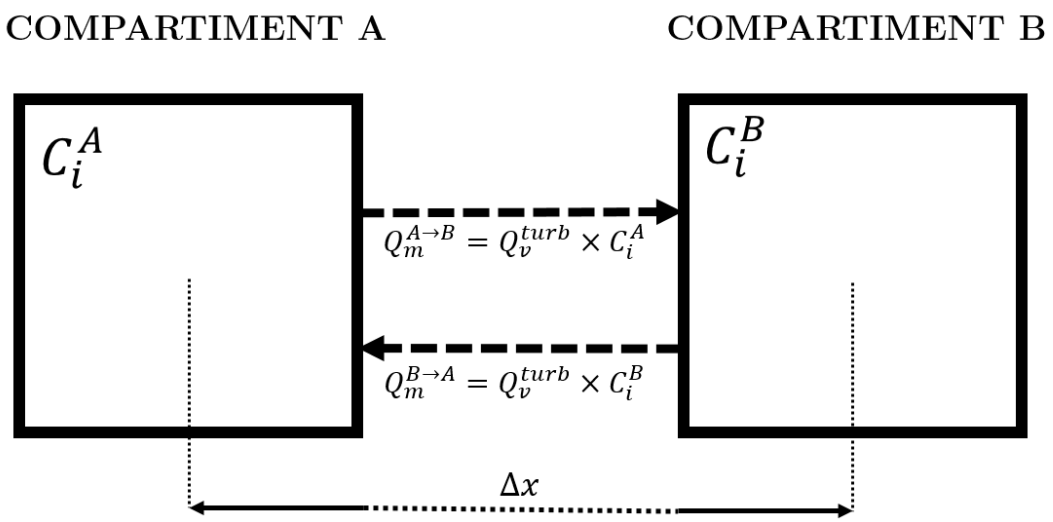


Figure II-14 : Schématisation des échanges turbulents entre deux compartiments

II.3.2.1 Analogie avec la diffusion de matière

Mathématiquement, la loi de Fick s'exprime de la manière suivante ; soit un milieu dans lequel se trouve une espèce chimique i de concentration C_i non uniforme dans l'espace. On appelle J_{diff} la densité de flux des molécules de i liée au phénomène de diffusion de la matière. J_{diff} est proportionnelle au gradient de concentration de l'espèce i. Cela signifie que, plus la différence de concentration est importante plus la diffusion est importante, mais que plus la distance entre les deux zones de concentrations différentes est grande, plus l'effet de diffusion s'atténue. Le coefficient de proportionnalité est le coefficient de diffusion D. En une dimension, la loi de Fick s'écrit ainsi :

$$J_{diff}\left[\frac{mol}{m^2.s}\right] = -D\left[\frac{m^2}{s}\right].\ \frac{\Delta C_i\left[\frac{mol}{m^3}\right]}{\Delta x\ [m]} \qquad \text{[II.6]}$$

Le signe négatif sert à orienter la direction de la densité de flux dans le sens des fortes concentrations vers les faibles concentrations. Le coefficient de diffusion est calculé à partir de l'énergie cinétique turbulente k, du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ϵ et de la constante C_μ intervenant dans le modèle $k-\epsilon$ (Launder and Spalding, 1974) et du nombre de Schmidt turbulent Sc_t :

$$D_t\left[\frac{m^2}{s}\right] = \frac{C_\mu}{Sc_t} \times \frac{k^2}{\epsilon} \qquad \text{[II.7]}$$

En multipliant J_{diff} par la surface d'échange S entre les deux compartiments, on obtient le flux de matière :

$$Q_m\left[\frac{mol}{s}\right] = -D_t\left[\frac{m^2}{s}\right] \times S[m^2] \times \frac{\Delta C_i\left[\frac{mol}{m^3}\right]}{\Delta x\ [m]} \qquad \text{[II.8]}$$

Une analyse dimensionnelle permet d'identifier le débit volumique :

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = \frac{D_t\left[\frac{m^2}{s}\right] \times S[m^2]}{\Delta x\ [m]} \qquad \text{[II.9]}$$

Mathématiquement l'équation [II.8] représente du flux de matière en sens unique mais en modifiant la forme de l'expression on se rend compte que cela revient au même qu'un double échange :

$$\begin{aligned} Q_m &= -Q_v^{turb} \times \Delta C_i \\ &= -Q_v^{turb} \times (\mathrm{C_i^B} - C_i^A) \\ &= Q_v^{turb} \times C_i^A - Q_v^{turb} \times C_i^B \end{aligned} \qquad \text{[II.10]}$$

Pour que les débits volumiques dans les deux sens soient identiques, il est nécessaire de calculer D_t sur la surface d'échange qui est commune aux deux compartiments. Evaluer D_t dans le volume de chaque compartiment A et B violerait la conservation de la masse.

II.3.2.2 Vitesse turbulente

Cette approche est semblable à la manière dont est calculé le débit volumique convectif (voir équation [II.4]) :

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = S[m^2] \times < v^{turb} > \left[\frac{m}{s}\right] \qquad \text{[II.11]}$$

La vitesse turbulente est calculée à partir de l'énergie cinétique turbulente k :

$$< v^{turb} > \; = \sqrt{\frac{2}{3}k^2} \qquad \text{[II.12]}$$

Pour que le débit volumique allant d'un compartiment à l'autre soit identique, il est nécessaire de calculer $< v^{turb} >$ sur la surface d'échange qui est commune aux deux compartiments. Evaluer $< v^{turb} >$ dans le volume de chaque compartiment A et B entraînerait la non conservation du débit volumique.

II.3.2.3 Analogie cascade RPA et RP dispersif

Le débit volumique turbulent est supposé être une fraction du débit convectif :

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = \alpha_{lemoullec} \times Q_v^{conv}\left[\frac{m^3}{s}\right] \qquad \text{[II.13]}$$

La méthode consiste à déterminer le coefficient $\alpha_{lemoullec}$.

L'analogie entre un modèle de réacteur piston à dispersion axiale et une cascade de réacteurs parfaitement agités s'écrit (Levenspiel, 1999) :

$$2(J_{app} - 1) = Pe \qquad \text{[II.14]}$$

où J_{app} est le nombre de RPA en série et Pe est le nombre de Peclet qui compare les transferts convectifs au transferts diffusifs. Cette relation est d'autant plus vraie que le nombre de RPA en séries J_{app} est grand. Ici on cherche à déterminer un échange turbulent entre deux compartiments. Dans une première hypothèse, on considère que les compartiments ont un comportement hydrodynamique semblable à des RPA (*hyp. 1*). Dans une seconde hypothèse, on considère la relation [II.14] juste bien que J_{app} soit petit (*hyp. 2*), à savoir $J_{app} = 2$.

Le nombre de Peclet peut être écrit de la manière suivante :

$$Pe = \frac{< v^{turb} > \left[\frac{m}{s}\right] \times \Delta x\ [m]}{D_t \left[\frac{m^2}{s}\right]} \qquad [II.15]$$

avec D_t le coefficient de diffusion turbulente calculé selon l'équation [II.7] et $< v^{turb} >$ la vitesse moyenne turbulente à travers la surface d'échange S. Cette vitesse peut s'exprimer de la manière suivante (Remarque : on pourrait théoriquement calculer $< v^{turb} >$ à partir de l'équation [I.9] mais cela n'a pas été fait par les auteurs) :

$$< v^{turb} > \left[\frac{m}{s}\right] = \frac{Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right]}{S[m^2]} = \frac{\alpha_{lemoullec} \times Q_v^{conv}}{S} \qquad [II.16]$$

On obtient finalement :

$$Pe = \frac{\alpha_{lemoullec} \times Q_v^{conv} \times \Delta x \times Sc_t \times \epsilon}{S \times C_\mu \times k^2} \qquad [II.17]$$

Il est alors possible d'obtenir l'expression de J_{app} à partir des équations [II.14] et [II.17] :

$$J_{app} = \frac{\alpha_{lemoullec} \times Q_v^{conv} \times \Delta x \times Sc_t \times \epsilon}{2 \times S \times C_\mu \times k^2} + 1 \qquad [II.18]$$

Par ailleurs, (Potier et al., 2005) ont montré qu'il existe une équivalence entre une cascade de J_{app} RPA et une cascade de J_{retro} RPA avec un rétro-mélange α_{potier} :

$$J_{app} = \frac{J_{retro}}{1 + 2\alpha_{potier} - \frac{2\alpha_{potier}(1+\alpha_{potier})}{J_{retro}} + \frac{2\alpha^{1+J_{retro}}(1+\alpha_{potier})^{1-J_{retro}}}{J_{retro}}} \qquad [II.19]$$

Dans notre cas il y a deux compartiments donc $J_{retro} = 2$ et l'équation [II.19] devient :

$$J_{app} = \frac{2(1+\alpha_{potier})}{1+2\alpha_{potier}} \qquad [II.20]$$

Une hypothèse de la méthodologie de (Le Moullec et al., 2010) consiste à dire que la fraction du débit volumique $\alpha_{lemoullec}$ est équivalente au rétro-mélange α_{potier} :

$$\alpha_{lemoullec} = \alpha_{potier} \qquad [II.21]$$

A partir des équations [II.18] et [II.20] et [II.21] on peut isoler l'expression de $\alpha_{lemoullec}$:

$$\alpha_{lemoullec} = \frac{\pm\sqrt{A^2 + 8A}}{4A} - \frac{1}{4} \qquad \text{[II.22]}$$

Avec :

$$A = \frac{Q_v^{conv} \times \Delta x \times Sc_t \times \epsilon}{2 \times S \times C_\mu \times k^2} \qquad \text{[II.23]}$$

Notons que l'expression de α décrite à l'équation [II.22] représente deux racines provenant d'un polynôme du second degré. La racine négative est écartée (choix non justifié par les auteurs) mais notons que la deuxième peut-être positive ou négative. Comme au final l'échange turbulent est défini comme bi-directionnel, il suffit de prendre la valeur absolue de α et on obtient finalement :

$$\begin{cases} Q_v^{turb} = \left|\frac{\sqrt{A^2 + 8A}}{4A} - \frac{1}{4}\right| \times Q_v^{conv} \\ A = \frac{Q_v^{conv} \times \Delta x \times Sc_t \times \epsilon}{2 \times S \times C_\mu \times k^2} \end{cases} \qquad \text{[II.24]}$$

De cette manière, les échanges turbulents sont décrits entre deux situations théoriques extrêmes. Sans mélange turbulent, deux compartiments adjacents représentent une série de deux RPA avec un échange uniquement convectif. Au contraire, dans le cas où la turbulence est importante, les deux compartiments peuvent être assimilés à un unique RPA.

II.4 Bilans de matière

Nous sommes à l'étape 3 de la Figure II-1 qui consiste à résoudre les bilans de matière pour chaque espèce chimique au sein de chaque compartiment. A l'inverse de la mécanique des fluides numérique, qui résout des équations de conservation locales, s'appliquant sur des volumes infiniment petits, la modélisation compartimentale utilise des équations globales, s'appliquant sur des volumes finis : les compartiments.

- Soit J le nombre total de compartiment. Chaque compartiment est numéroté avec l'indice j allant de 1 à J.
- Soit W le nombre total de réactions chimiques. Chaque réaction est numérotée avec l'indice w allant de 1 à W.
- Soit I le nombre total d'espèces. Chaque espèce est numérotée avec l'indice i allant de 1 à I.
- Soit P le nombre total d'équations à résoudre. $P = J \times I$. Chaque équation est numérotée avec l'indice p allant de 1 à P.

II.4.1 Cas général

On rappelle que par construction, un compartiment est un volume au sein duquel les grandeurs qui y séjournent sont homogènes (Figure II-15). On note $u_j(t)$ la concentration d'entrée et $y_j(t)$ celle de sortie. Le volume du compartiment j est V_j et le débit volumique qui le traverse est constant et vaut $Q_{v,j}$ (écoulements supposés stationnaires).

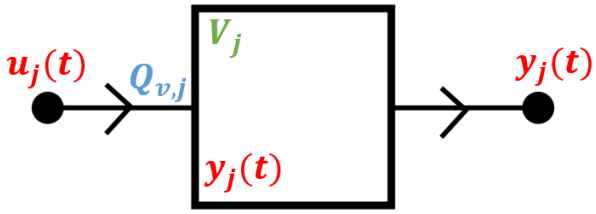


Figure II-15 : schéma d'un compartiment

Le bilan de matière au sein d'un compartiment est potentiellement instationnaire, avec une hydrodynamique stationnaire (débits volumiques Q_v constants). Plusieurs paramètres sont pris en compte :

- Le débit matière entrant : $Q_{m,j}\left[\frac{mol}{s}\right] = Q_{v,j}\left[\frac{m^3}{s}\right].u_j(t)\left[\frac{mol}{m^3}\right]$
- Le débit matière sortant : $Q_{m,j}\left[\frac{mol}{s}\right] = Q_{v,j}\left[\frac{m^3}{s}\right].y_j(t)\left[\frac{mol}{m^3}\right]$
- Le débit dû à la réaction chimique : $r_i\left[\frac{mol}{s.m^3}\right].V_j[m^3]$
- Le débit d'accumulation : $V_j[m^3].\frac{dy_j(t)\left[\frac{mol}{m^3}\right]}{dt[s]}$

Le bilan de matière pour <u>un</u> compartiment j s'écrit **:**

$$Q_{v,j}.u_j(t) + r_i.V_j = \ Q_{v,j}.y_j(t) + V_j\frac{dy_j(t)}{dt} \qquad \text{[II.25]}$$

Si la structure du réseau de compartiment est inchangée au cours du temps, il est possible de traiter les cas où l'hydrodynamique est instationnaire. Dans ce cas, il est nécessaire de prendre un pas de temps Δt d'intégration suffisamment court pour pouvoir faire l'hypothèse que le débit volumique est constant pendant cette durée. A chaque pas de temps, il faut mettre à jour le débit volumique dans les équations de bilan de matière.

II.4.2 Modélisation de l'hydrodynamique

Dans ce paragraphe, on ne considère qu'une seule espèce ($I = 1$) qui est un traceur. A minima, le modèle à compartiments doit correctement modéliser l'hydrodynamique du système. Les expériences de traçage traduisent le comportement hydrodynamique. En fonction du mode de fonctionnement du système, il est possible d'avoir accès à des courbes de DTS ou des temps de

mélange à partir de l'équation [I.7]. Pour cela on ne prend pas en compte le terme de réaction de chimique :

$$Q_{v,j}.u_j(t) = Q_{v,j}.y_j(t) + V_j \frac{dy_j(t)}{dt} \qquad [II.26]$$

Pour obtenir la concentration en sortie d'un compartiment $y_j(t)$, il est nécessaire de connaître le volume V_j du compartiment, le débit volumique $Q_{v,j}$ qui le traverse ainsi que la concentration en entrée $u_j(t)$. On définit le temps de passage τ_j de la manière suivante :

$$\tau_j = \frac{V_j}{Q_{v,j}} \qquad [II.27]$$

Le bilan de matière dans un compartiment s'écrit de la manière suivante :

$$u_j(t) = y_j(t) + \tau_j \frac{dy_j(t)}{dt} \qquad [II.28]$$

Cette équation doit être résolue pour chaque compartiment j. Une solution analytique est calculable pour des cas très simples mais la résolution numérique du système d'équations différentielles est presque toujours indispensable.

Exemple illustratif

La Figure II-16 est un exemple illustratif qui permet de comprendre comment est calculée une DTS à partir d'un modèle à trois compartiments. Par construction, on connait le volume de chaque compartiment (voir paragraphe II.2) ainsi que les débits volumiques qu'ils échangent entre eux (voir paragraphe II.3). A partir d'un signal d'entrée $C_{in}(t)$, qui représente la concentration d'injection en traceur en fonction du temps, on peut calculer la concentration en traceur en fonction du temps en sortie de chaque compartiment.

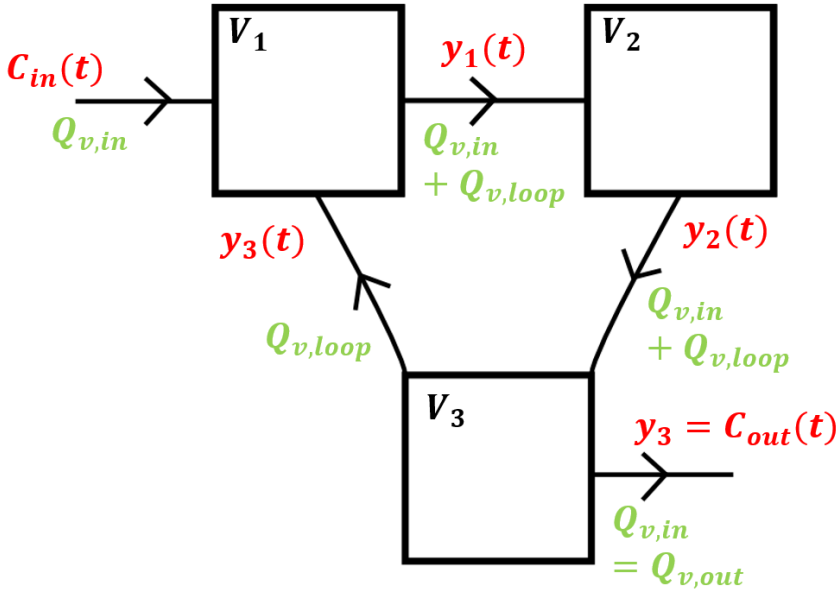


Figure II-16 : Exemple d'un modèle à trois compartiments où on calcule la DTS d'un traceur. Les débits volumiques sont connus et marqués en vert. Les concentrations sont inconnues sauf la concentration d'entrée $C_{in}(t)$.

Pour chaque compartiment j il convient de calculer la concentration entrante $u_j(t)$ et sortante $y_j(t)$ ainsi que le temps de passage moyen τ_j. Comme il n'y a qu'une espèce, le traceur, le nombre total d'équations à résoudre vaut $Y = J \times I = 3 \times 1 = 3$. Le Tableau II-3 ci-dessous détaille ces calculs pour chaque compartiment :

Tableau II-3 : Calcul des concentrations d'entrée $u_j(t)$ et des temps de passage moyen τ_j sur l'exemple traité pour illustrer la méthodologie de calcul d'une DTS

	$u_j(t)$	$y_j(t)$	τ_j
V_1	$u_1(t) = \frac{Q_{v,in}.C_{in}(t) + Q_{v,loop}.y_3(t)}{Q_{v,in} + Q_{v,loop}}$	$y_1(t)$	$\tau_1 = \frac{V_1}{Q_{v,in} + Q_{v,loop}}$
V_2	$u_2(t) = y_1(t)$	$y_2(t)$	$\tau_2 = \frac{V_2}{Q_{v,in} + Q_{v,loop}}$
V_3	$u_3(t) = y_2(t)$	$y_3(t) = C_{out}(t)$	$\tau_3 = \frac{V_3}{Q_{v,in} + Q_{v,loop}}$

L'équation [II.28] est alors appliquée pour chaque compartiment :

$$\begin{cases} u_1(t) = y_1(t) + \tau_1 \frac{dy_1(t)}{dt} \\ u_2(t) = y_2(t) + \tau_2 \frac{dy_2(t)}{dt} \\ u_3(t) = y_3(t) + \tau_3 \frac{dy_3(t)}{dt} \end{cases} \quad \text{[II.29]}$$

Dans notre exemple la DTS est donné par $y_3(t)$. Nous souhaitons insister sur le fait que nous ne nous sommes pas limités au calcul des DTS qui est un cas très particulier des expériences de traçage. Sur ce même système, qui est ouvert en régime hydrodynamique stationnaire, il est par exemple tout à fait possible d'injecter le traceur à l'entrée du compartiment 2 et de détecter sa concentration à la sortie du compartiment 1. Il est également tout à fait possible d'avoir un système fermé (par exemple une cuve agitée) où l'hydrodynamique est stationnaire et de calculer des courbes de traçage avec une injection et détection au niveau de n'importe quel compartiment. L'avantage de la courbe de DTS est qu'elle fournit une représentation hydrodynamique globale de l'ensemble du volume réactionnel ce qui sera mis à profit pour la validation finale du modèle à compartiments comme nous le verrons plus tard.

II.4.3 Modélisation des réactions chimiques

Dans ce paragraphe, on ne considère qu'un seul compartiment ($J = 1$). Soit W le nombre total de réactions chimiques et w le numéro de la réaction (w allant de 1 à W). On note une réaction chimique w de la manière suivante :

$$\sum \nu_{w,i}.A_i = 0 \qquad \text{[II.30]}$$

Avec $\nu_{w,i}$ le coefficient stœchiométrique (sans dimension) de l'espèce chimique i dans la réaction w et A_i sa formule chimique (exemple CO_2 pour le dioxyde de carbone). Par convention $\nu_{w,i} < 0$ pour les réactifs et $\nu_{w,i} > 0$ pour les produits. On note C_i la concentration de l'espèce A_i.

Le terme r_w (unité $\frac{mol}{m^3.s}$) représente la vitesse de réaction de la réaction chimique w et est calculé à partir de l'équation cinétique qui est sous la forme d'un monôme des réactifs :

$$r_w = k_w \prod C_i^{m_{w,i}} \qquad \text{[II.31]}$$

Pour chaque espèce chimique A_i on souhaite déterminer r_i, la production chimique par unité de volume due à la réaction, défini par :

$$r_i = \sum_{w=1}^{W} \nu_{w,i}.r_w \qquad \text{[II.32]}$$

Avec $m_{w,i}$ l'ordre partiel de l'espèce i concernant l'équation w et k_w la constante de réaction calculable par la loi d'Arrhenius (unité à déterminer en fonction de l'ordre global de la réaction). L'ordre global de la réaction w est donné par la somme des ordres partiels $m_{w,i}$ des réactifs. Notons qu'à température fixe, seule la concentration des réactifs a une influence sur la vitesse de réaction. Les valeurs de k_w et $m_{w,i}$ sont supposées connues. En prenant en compte le terme de production chimique l'équation [II.28] (valable pour $J = 1$) devient :

$$u_{j=1}(t) + r_i\tau_{j=1} = y_{j=1}(t) + \tau_{j=1}\frac{dy_{j=1}(t)}{dt} \qquad \text{[II.33]}$$

Notons que pour un seul compartiment, il est nécessaire de résoudre l'équation [II.33] autant de fois qu'il existe d'espèces chimiques car le terme r_i est propre à chaque espèce. En d'autres termes, le nombre total d'équations à résoudre vaut $P = J \times I$.

Exemple illustratif ($J > 1$)

Afin d'illustrer la manière dont sont calculées les concentrations des espèces chimiques, nous allons écrire le système d'équations différentielles à partir d'un modèle à deux compartiments ($J = 2$).

Les équations chimiques (équation [II.30]) sont les suivantes ($W = 2\,; I = 3$) :

$$\begin{cases} A \rightarrow 2B \\ B + 2A \rightarrow C \end{cases} \qquad \text{[II.34]}$$

Les vitesses de réactions (équation [II.31]) sont les suivantes :

$$\begin{cases} r_1 = 0{,}05 \times [A]^{0.8} \\ r_2 = 0{,}24 \times [B]^{1.2}[A]^{0.3} \end{cases} \qquad \text{[II.35]}$$

Les termes de productions chimiques (équation [II.32]) sont les suivants :

$$\begin{cases} r_A = -1 \times 0{,}05 \times [A]^{0.8} - 2 \times 0{,}24 \times [B]^{1.2}[A]^{0.3} \\ r_B = 2 \times 0{,}05 \times [A]^{0.8} - 1 \times 0{,}24 \times [B]^{1.2}[A]^{0.3} \\ r_C = 1 \times 0{,}24 \times [B]^{1.2}[A]^{0.3} \end{cases} \qquad \text{[II.36]}$$

Il y a deux compartiments et trois espèces donc $P = J \times I = 2 \times 3 = 6$ équations à résoudre. Dans chaque compartiment on écrit le système d'équations différentielles pour les réactions chimiques mises en jeu comme illustré sur la Figure II-17.

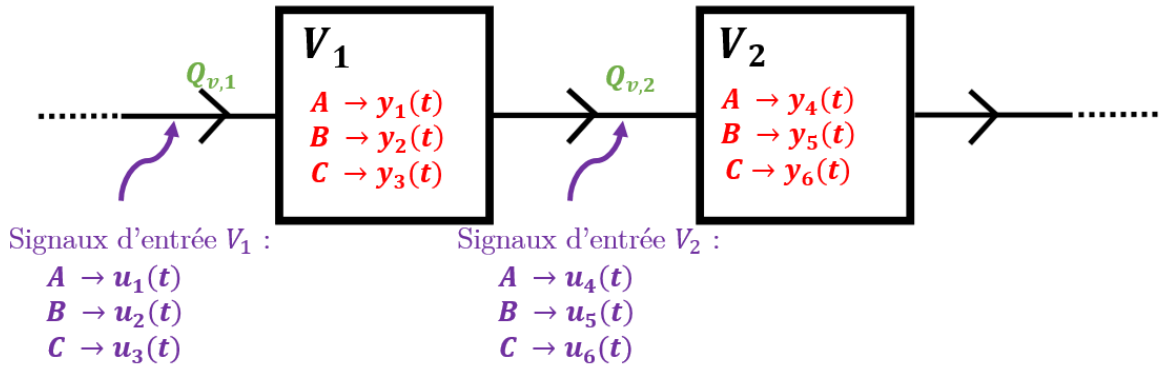


Figure II-17 : Exemple d'un modèle à deux compartiments où a lieu des réactions chimiques.

Pour chaque espèce i (i *allant de* 1 à I) dans chaque compartiment j (j *allant de* 1 à J) on écrit l'équation numéro p (p *allant de* 1 à $P = J \times I$). A partir de l'équation [II.33] (qui est valable pour un seul compartiment) on obtient :

$$u_p(t) + r_p(t)\tau_j = y_p(t) + \tau_j \frac{dy_p(t)}{dt} \qquad \text{[II.37]}$$

L'application de l'équation [II.37] sur notre exemple illustratif est présentée dans le Tableau II-4 ci-dessous :

Tableau II-4 : Illustration de la méthodologie d'écriture des équations différentielles dans le cas de réactions chimiques.

Numéro Compartiment	Numéro Espèce	Numéro Equation
V_1 $\rightarrow j = 1$ $\tau_1 = \frac{V_1}{Q_{v,1}}$	$A \rightarrow i = 1$	$p = 1$ $r_1 = -1 \times 0{,}05 \times y_1(t)^{0,8} - 2 \times 0{,}24 \times y_2(t)^{1,2} y_1(t)^{0,3}$ $u_1(t) + r_1\tau_1 = y_1(t) + \tau_1 y_1'(t)$
	$B \rightarrow i = 2$	$p = 2$ $r_2 = 2 \times 0{,}05 \times y_1(t)^{0,8} - 1 \times 0{,}24 \times y_2(t)^{1,2} y_1(t)^{0,3}$ $u_2(t) + r_2\tau_1 = y_2(t) + \tau_1 y_2'(t)$
	$C \rightarrow i = 3$	$p = 3$ $r_3 = 1 \times 0{,}24 \times y_2(t)^{1,2} y_1(t)^{0,3}$ $u_3(t) + r_3\tau_1 = y_3(t) + \tau_1 y_3'(t)$
V_2 $\rightarrow j = 2$ $\tau_2 = \frac{V_2}{Q_{v,2}}$	$A \rightarrow i = 1$	$p = 4$ $r_4 = -1 \times 0{,}05 \times y_4(t)^{0,8} - 2 \times 0{,}24 \times y_5(t)^{1,2} y_4(t)^{0,3}$ $u_4(t) + r_4\tau_2 = y_4(t) + \tau_2 y_4'(t)$
	$B \rightarrow i = 2$	$p = 5$ $r_5 = 2 \times 0{,}05 \times y_4(t)^{0,8} - 1 \times 0{,}24 \times y_5(t)^{1,2} y_4(t)^{0,3}$ $u_5(t) + r_5\tau_2 = y_5(t) + \tau_2 y_5'(t)$
	$C \rightarrow i = 3$	$p = 6$ $r_6 = 1 \times 0{,}24 \times y_5(t)^{1,2} y_4(t)^{0,3}$ $u_6(t) + r_6\tau_2 = y_6(t) + \tau_2 y_6'(t)$

La méthodologie de calcul des concentrations d'entrée $u_p(t)$ et des temps de passage τ_j ne diffère pas du cas où on a uniquement un traceur (voir Tableau II-3 ci-dessus). L'exemple traité ici ne concerne que deux compartiments avec trois espèces chimiques et l'écriture du système d'équations différentielles correspondant est réalisable à la main. Pour les cas plus complexes, cette tâche va s'avérer fastidieuse. C'est pourquoi nous avons développé des algorithmes capables de réaliser automatiquement cette tâche (voir 0paragraphe IV.3.4.2).

II.4.4 Choix du solveur

Nous avons choisi le programme Dassl, développé par (Petzold, 1982), pour résoudre les systèmes d'équations différentielles issues des bilans de matière dans les compartiments. Dassl est un algorithme de résolution d'équations algébro-différentielles de la forme $F(t, y, y') = 0$ avec des conditions initiales de type $y(t_0) = y_0$ et $y'(t_0) = y'_0$. L'algorithme approche les dérivées par des différences arrières (backward difference formula : BDF) puis calcule la solution au temps t_{n+1} en utilisant la méthode de Newton. Sa robustesse a été démontrée pour de nombreux cas d'application. Le lecteur trouvera des rappels de base sur les équations algébro-différentielles et sur le fonctionnement de Dassl, notamment sur les problèmes de convergence les plus fréquents, dans l'ouvrage de (Brenan et al., 1996).

Dassl nécessite que les équations soient présentées de la manière suivante :

$$F(t, y, y') = 0 \qquad \text{[II.38]}$$

Dans notre cas, nous souhaitons résoudre l'équation [II.37] que nous écrivons sous la forme [II.38] :

$$\tau_j y'_p(t) + y_p(t) - u_p(t) - r_p(t)\tau_j = 0 \qquad \text{[II.39]}$$

Dassl résout l'ensemble du système d'équations différentielles à un temps t avec un pas de temps Δt. Il est nécessaire de renseigner le pas de temps et la durée totale de la simulation ainsi que les signaux d'entrée. Nous verrons cela plus en détail dans 0au paragraphe IV.3.3.

II.5 Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange

Nous sommes à l'étape 2 de la Figure II-1, qui consiste à utiliser un outil de communication entre le modèle à compartiments et le solveur numérique. A l'étape 1 de la Figure II-1 nous avons créé un réseau de compartiments. La méthode étant générale, la structure du modèle est à priori quelconque. Or la généralisation de l'écriture du système d'équations différentielles provenant d'un modèle dont la structure n'est pas connue n'est pas évidente. Or il est nécessaire de formaliser ces équations pour l'étape 3 de la Figure II-1 où le solveur calcule les solutions numériques. Pour ce faire, nous avons créé un outil mathématique que nous nommons la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange », et qui est notée $[\boldsymbol{A_{CD}}]$, qui permet de communiquer au solveur la valeur des débits d'échanges entre chaque compartiment. La Figure II-18 illustre en deux étapes comment est utilisée la matrice. A partir du réseau de compartiments dont on connaît les volumes et les débits volumiques d'échanges,

on peut remplir la matrice. Puis, à partir de la matrice, le solveur calcule les solutions à la sortie de chaque compartiment.

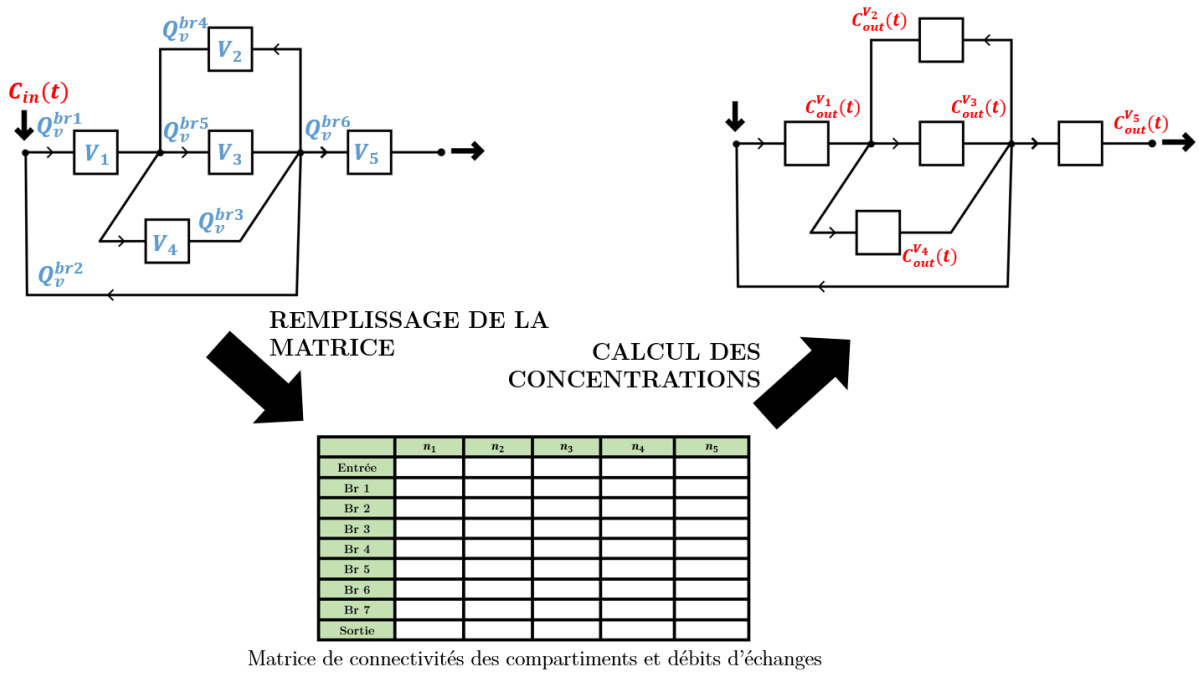


Figure II-18 : Schéma expliquant l'utilisation de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange ».

II.5.1 Fonctionnement de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$

Dans ce paragraphe, nous expliquons comment la matrice fonctionne. Nous verrons au cours du paragraphe II.5.2 comment la remplir et dans le paragraphe II.5.3 comment elle est utilisée dans le solveur pour calculer les solutions.

II.5.1.1 Structure générale

La matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange, $[\boldsymbol{A_{CD}}]$, est organisée en branches et nœuds qui reflètent l'agencement du réseau et contiennent les valeurs numériques des débits volumiques (exprimés en pourcentage compris entre 0 et 1 du débit convectif d'entrée). La taille de $[\boldsymbol{A_{CD}}]$, est déterminée à partir du nombre de nœuds $\boldsymbol{N_{nd}}$ et du nombre de branches $\boldsymbol{N_{br}}$ constituant le réseau de compartiments. Chaque ligne, notée br_i ($\boldsymbol{i}$ **allant de 1** à $\boldsymbol{N_{br}}$), correspond à une branche et chaque colonne nd_i ($\boldsymbol{i}$ **allant de 1** à $\boldsymbol{N_{nd}}$) à un nœud. Une branche est définie par deux nœuds, celui d'entrée et celui de sortie. Un nœud est un point de convergence d'une ou plusieurs branches entrante(s) ou sortante(s). A chaque nœud, la somme des débits de matière entrant $C_i\left[\frac{mol}{m^3}\right] \times Q_v\left[\frac{m^3}{s}\right]$ est égale à la somme des débits de matière sortant. Dans chaque branche le débit volumique $Q_v\left[\frac{m^3}{s}\right]$ est constant. Dans un premier temps, la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ est initialisée à la valeur zéro. Le pourcentage du débit convectif d'entrée traversant une branche est indiqué pour les deux nœuds définissant la

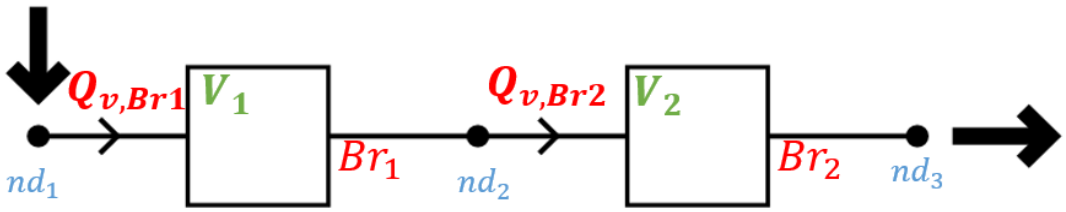
branche. Ainsi, chaque ligne ne contient que deux cases remplies, celle pour le nœud d'entrée et celle pour le nœud de sortie. Afin d'indiquer le sens de l'écoulement dans une branche, nous avons choisi de consigner (1) de manière positive un débit qui arrive à un nœud et (2) de manière négative un débit qui repart d'un nœud. Une branche peut représenter deux éléments du réseau de compartiments : soit il s'agit d'un compartiment donc la concentration C_i au nœud de sortie sera différente de celle au nœud d'entrée, soit il s'agit d'une connexion entre deux compartiments, et donc la concentration C_i sera inchangée entre l'entrée et la sortie. On définit par ailleurs deux branches supplémentaires, virtuelles, indiquant le(s) nœud(s) d'entrée(s) et le(s) nœud(s) de sortie(s) du système global. Avec cette méthode de remplissage, il est très simple de vérifier si les débits volumiques entrant et sortant d'un nœud sont égaux : il suffit d'additionner l'ensemble des valeurs contenues dans chaque colonne et de vérifier si la somme est nulle. Avec un histogramme représentant la somme de chaque colonne, on peut vérifier visuellement à quel nœud le bilan dépasse une valeur témoin. Le remplissage de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ fait l'objet du paragraphe II.5.2 ci-dessous.

Une fois la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ il faut définir la « matrice des paramètres » (volumes des compartiments, températures, fraction de gaz, etc) que nous notons $[\boldsymbol{A_P}]$. Cette matrice contient autant de lignes que de branches, c'est-à-dire N_{br} lignes. Chaque colonne correspond à un paramètre de modélisation caractérisant la branche. Le volume est un paramètre obligatoire. Pour le calcul d'une DTS, si on connait le débit dans chaque branche, seul le volume est utile. Pour chaque branche contenant un compartiment dans la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$, la première colonne de la matrice des paramètres $[\boldsymbol{A_P}]$ contient le volume du compartiment.

II.5.1.2 Exemples illustratifs

Afin d'illustrer le fonctionnement de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$, trois exemples illustratifs avec échanges uniquement convectifs sont présentés ci-dessous :

- Figure II-19 représente deux compartiments en série avec l'entrée du fluide au nœud 1 et la sortie au nœud 3
- Figure II-20 représente deux compartiments en parallèle avec l'entrée du fluide au nœud 1 et la sortie au nœud 2.
- La Figure II-21 représente trois compartiments et une recirculation avec l'entrée du fluide au nœud 1 et la sortie au nœud 3.



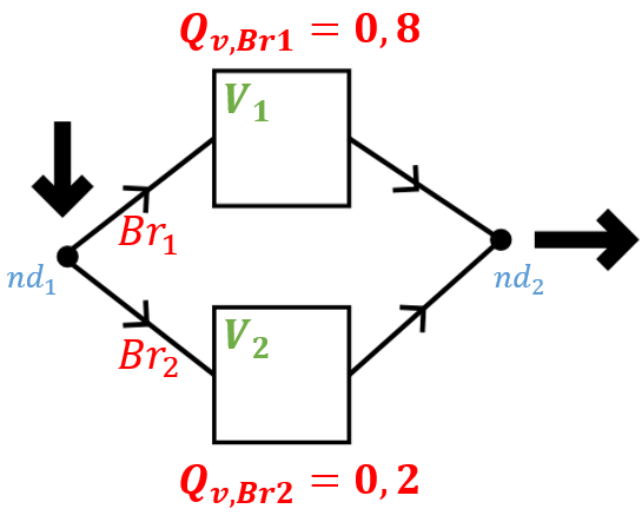
$[\boldsymbol{A_{CD}}]$: Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange

	nd_1	nd_2	nd_3
Entrée	1		
Br_1	-1	1	
Br_2		-1	1
Sortie			-1
Σ	0	0	0

$[\boldsymbol{A_P}]$: Matrice de paramètres

	Volumes
Entrée	0
Br_1	$\boldsymbol{V_1}$
Br_2	$\boldsymbol{V_2}$
Sortie	0

Figure II-19: Exemple de deux compartiments en série. $N_{nd} = 3$, $N_{br} = 2$. En fond bleu les branches contenant un compartiment.



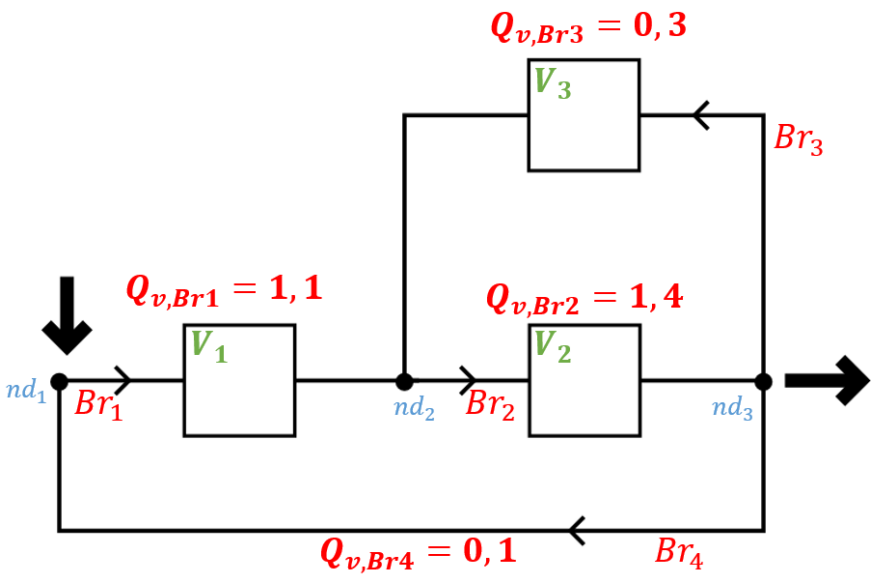
$[\boldsymbol{A_{CD}}]$: Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange

	nd_1	nd_2
Entrée	1	
Br_1	-0.8	0.8
Br_2	-0.2	0.2
Sortie		-1
Σ	0	0

$[\boldsymbol{A_P}]$: Matrice de paramètres

	Volumes
Entrée	0
Br_1	$\boldsymbol{V_1}$
Br_2	$\boldsymbol{V_2}$
Sortie	0

Figure II-20: Exemple de deux compartiments en parallèle. $N_{nd} = 2$, $N_{br} = 2$. En fond bleu les branches contenant un compartiment.



$[\boldsymbol{A_{CD}}]$: Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange

	nd_1	nd_2	nd_3
Entrée	1		
Br_1	-1,1	1,1	
Br_2		-1,4	1,4
Br_3		0,3	-0,3
Br_4	0,1		-0,1
Sortie			-1
Σ	0	0	0

$[\boldsymbol{A_P}]$: Matrice de paramètres

	Volumes
Entrée	0
Br_1	$\boldsymbol{V_1}$
Br_2	$\boldsymbol{V_2}$
Br_3	$\boldsymbol{V_3}$
Br_4	0
Sortie	0

Figure II-21 : Exemple de trois compartiments. $N_{nd} = 3$, $N_{br} = 4$. En fond bleu les branches contenant un compartiment.

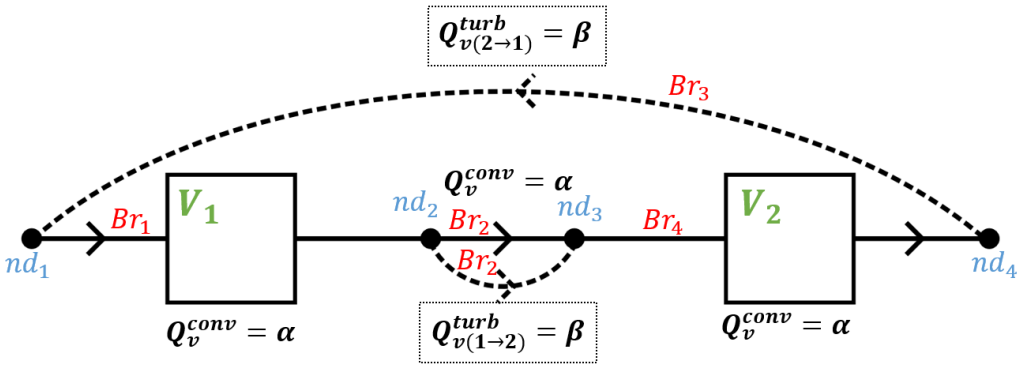
II.5.1.3 Prise en compte de la turbulence

On rappelle que la turbulence est modélisée par deux flux bidirectionnels opposés qui ont la même valeur comme le montre la Figure II-14. Il existe plusieurs méthodes pour calculer la valeur numérique de ces flux mais dans tous les cas, Q_v^{turb} s'exprime en $\left[\frac{m^3}{s}\right]$. Nous allons expliquer dans ce paragraphe comment sont pris en compte ces flux bidirectionnels dans la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ et nous allons voir que cela implique quelques changements. La Figure II-22 représente deux compartiments en série traversés par un débit volumique convectif $Q_v^{conv} = \alpha$ (traits pleins). Pour prendre en compte les flux turbulents bidirectionnels (traits pointillés), il faut (1) une branche partant de la sortie du premier compartiment et allant vers l'entrée du second, siège du débit $Q_{v(1\to2)}^{turb} = \beta$ et (2) une autre branche de sens opposé, partant de la sortie du second compartiment et allant vers l'entrée du premier, siège du débit $Q_{v(2\to1)}^{turb} = \beta$. Comme il existe déjà une branche pour l'échange convectif qui va dans un sens ou dans l'autre, il suffit d'ajouter une branche pour chaque surface d'échange entre les compartiments pour le sens opposé à l'écoulement convectif.

On découpe le problème en deux étapes : (1) on a une matrice où ne sont renseignés que les débits convectifs et (2) une autre matrice où ne sont renseignés que les débits turbulents. Après avoir vérifié que, pour chaque nœud, la somme des débits entrants est égale à la somme des débits sortants, on obtient la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ en sommant les matrices de convection et turbulence :

$$Q_v = Q_v^{conv} + Q_v^{turb} \qquad \text{[II.40]}$$

On n'oubliera pas d'exprimer les débits dans $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ comme des fractions (donc compris entre 0 et 1) du débit d'entrée.



Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange (convectifs)

Q_v^{conv}	nd_1	nd_2	nd_3	nd_4
Entrée	α			
Br_1	$-\alpha$	α		
Br_2		$-\alpha$	α	
Br_3	------	------	------	------
Br_4			$-\alpha$	α
Sortie				$-\alpha$

Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange (turbulents)

Q_v^{turb}	nd_1	nd_2	nd_3	nd_4
entrée				
Br_1	$-\beta$	β		
Br_2		$-\beta$	β	
Br_3	β			$-\beta$
Br_4			$-\beta$	β
sortie				

Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange (convectifs + turbulents)

Q_v	nd_1	nd_2	nd_3	nd_4
entrée	α			
Br_1	$-\alpha-\beta$	$\alpha+\beta$		
Br_2		$-\alpha-\beta$	$\alpha+\beta$	
Br_3	β			$-\beta$
Br_4			$-\alpha-\beta$	$\alpha+\beta$
sortie				$-\alpha$

Figure II-22 : Illustration de la prise en compte des échanges turbulents pour le cas de deux compartiments en séries. En fond bleu les branches où se trouvent un compartiment.

II.5.2 Remplissage de la matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange

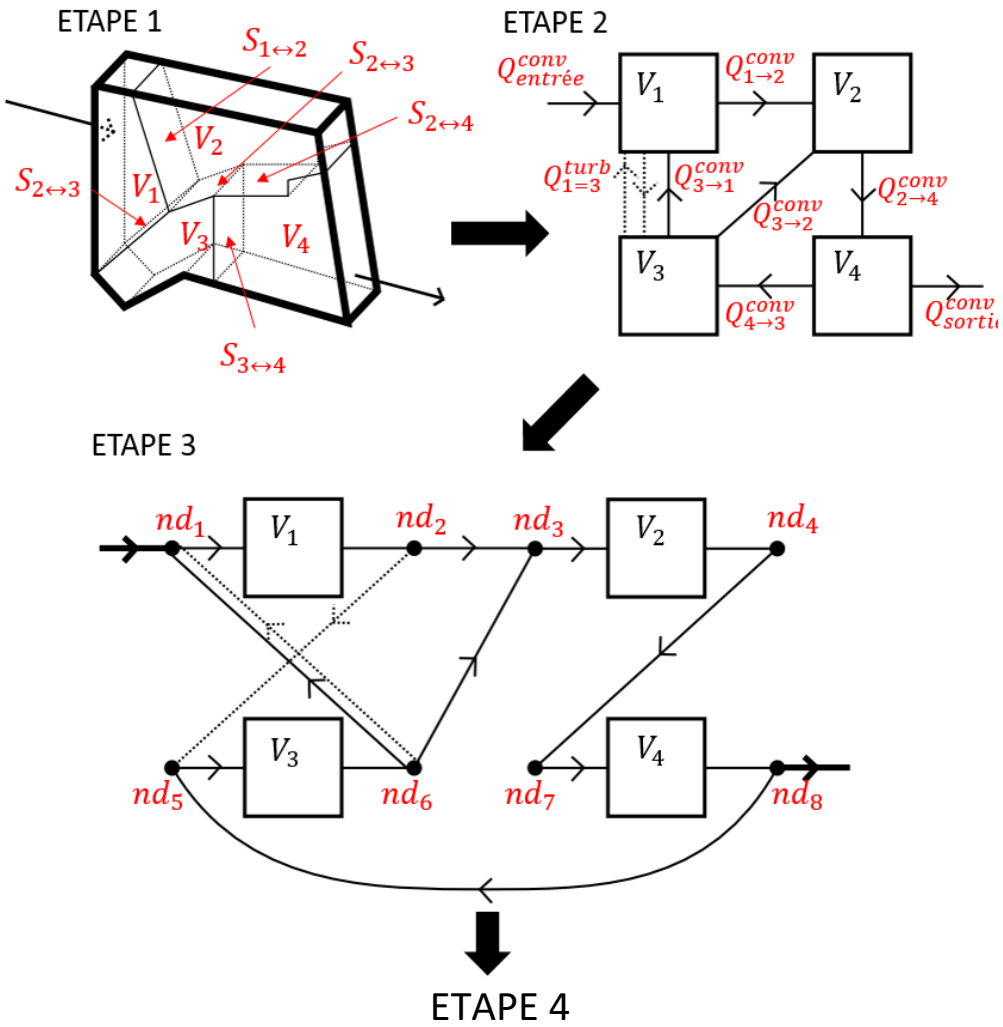
Le remplissage de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ (voir Figure II-18) consiste à renseigner sur la bonne ligne et la bonne colonne les débits volumiques, convectifs et turbulents, qui s'échangent entre compartiments et qui les traversent. Jusqu'à une vingtaine de compartiments, comme sur les exemples illustrés sur les Figure II-19, Figure II-20, Figure II-21, un remplissage manuel est facile à mettre en œuvre. Mais cette étape s'avère très laborieuse lorsque le nombre de compartiments est important. Comme la méthode est destinée à modéliser des réacteurs complexes, il est probable que le nombre de compartiments avoisine plutôt la centaine. C'est pourquoi nous avons développé un algorithme capable de remplir automatiquement la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$.

II.5.2.1 Méthodologie de remplissage manuel

Le remplissage manuel à l'avantage d'être réalisable quel que soit le modèle à compartiments. Il est particulièrement adapté aux modèles qui sont composés d'une vingtaine de compartiments au plus. Bien que la méthode ne soit pas destinée à ce genre de modèles, elle doit être capable de résoudre des problèmes simples. Nous allons expliquer comment remplir la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ sur un exemple illustratif à quatre compartiments. Dans tous les cas, la compréhension de la méthodologie de remplissage est indispensable pour l'étape suivante qui consiste à automatiser le remplissage. La Figure II-23 illustre les quatre étapes de remplissage de la matrice :

1. L'étape 1 consiste à construire le réseau. Il faut pour cela se référer au paragraphe II.2 page 96. On dispose alors de tous les volumes de chaque compartiment, de toutes les surfaces d'échange et on connaît le compartiment dans lequel sont injectés les réactifs (ou le traceur) et ceux dans lesquels on souhaite connaitre la concentration. Les débits volumiques convectifs et turbulents sont disponibles, voir paragraphe II.3 page 109, ce qui permet d'orienter le sens de l'échange. On dispose à minima des échanges convectifs.
2. On peut alors passer à l'étape 2, qui est une étape intermédiaire, qui consiste à schématiser le réseau de compartiments. Cette étape offre une représentation très claire de l'écoulement et de la structure du modèle. Elle permet donc d'interpréter facilement les résultats obtenus. Les compartiments y sont représentés par des carrés et l'écoulement par des flèches (en traits pleins pour les échanges convectifs et en pointillés pour les échanges turbulents).
3. L'étape 3 consiste à créer les nœuds et les branches. On définit une branche par compartiment et une branche par surface d'échange entre deux compartiments. On ajoute une branche supplémentaire pour toutes les surfaces où sont calculés des échanges turbulents. On numérote les nœuds (de haut en bas et de gauche à droite par exemple). La numérotation des branches viendra plus tard.

4. L'étape 4, qui est la dernière, consiste à remplir la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$. On remplit la matrice branche par branche. Il est conseillé de commencer par le nœud d'entrée et d'essayer de suivre le sens de d'écoulement principal pour finir par le nœud de sortie. Cela permet au solveur de résoudre les équations différentielles plus rapidement. D'une manière générale, lorsqu'on est sur un nœud qui définit l'entrée d'une branche, il est préférable d'avoir préalablement rempli toutes les branches en amont de ce nœud. Par exemple, pour nd_1 on renseigne d'abord le débit convectif d'entrée $Q_{entrée}^{conv}$ puis les débits convectifs $Q_{3\to1}^{conv}$ et turbulent $Q_{1\leftrightarrow3}^{turb}$ provenant de nd_6. Ensuite, on additionne tous les débits entrants dans le nœud, par exemple pour nd_1 on a $W = Q_{entrée}^{conv} + Q_{3\to1}^{conv} + Q_{1\leftrightarrow3}^{turb}$ et pour nd_3 $X = Q_{1\to2}^{conv} + Q_{3\to2}^{conv}$, et on vérifie que cette somme est nulle. Il est aisé de faire cette vérification lorsqu'on utilise la méthodologie présentée ci-dessus, il suffit d'additionner les débits contenus dans chaque colonne et de vérifier que le résultat est nul.



ETAPE 4

	nd_1	nd_2	nd_3	nd_4	nd_5	nd_6	nd_7	nd_8
entrée	$Q^{conv}_{entrée}$							
br_1	$Q^{conv}_{3\to1} + Q^{turb}_{1\leftrightarrow3}$					$-(Q^{conv}_{3\to1} + Q^{turb}_{1\leftrightarrow3})$		
br_2	$-W$	W						
br_3		$-Q^{turb}_{1\leftrightarrow3}$			$Q^{turb}_{1\leftrightarrow3}$			
br_4		$-Q^{conv}_{1\to2}$	$Q^{conv}_{1\to2}$					
br_5			$Q^{conv}_{2\to3}$			$-Q^{conv}_{2\to3}$		
br_6			$-X$	X				
br_7				$-Q^{turb}_{2\leftrightarrow4}$			$Q^{turb}_{2\leftrightarrow4}$	
br_8							$-Y$	Y
br_9					$Q^{turb}_{4\leftrightarrow3}$			$-Q^{turb}_{4\leftrightarrow3}$
br_{10}					$-Z$	Z		
sortie								$-Q^{conv}_{sortie}$

Figure II-23 : Méthodologie de remplissage de « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » pour un exemple illustratif.

On comprend à présent que le remplissage manuel de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ n'est pas réalisable lorsque le nombre de compartiments devient trop important. Ainsi, dans l'exemple de la Figure II-23 comportant seulement quatre compartiments il faut définir huit nœuds et dix branches. L'idéal serait d'automatiser le remplissage de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ à l'aide d'un algorithme et c'est ce que nous allons présenter dans le prochain paragraphe.

II.5.2.2 Remplissage automatisé

L'étape suivante consiste à automatiser le remplissage de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ afin de pouvoir modéliser des modèles contenant jusqu'à plusieurs milliers de compartiments. L'automatisation n'est pas possible pour n'importe quel réseau de compartiments. Il est nécessaire de fixer des contraintes de régularité dans la structure du modèle. Le découpage en tranches, présenté au paragraphe II.2.1.1 page 97, fonctionne théoriquement dans une grande majorité de situations (au détriment d'une perte acceptable de précision). C'est pourquoi nous nous intéressons aux modèles basés sur l'hypothèse des Tranches à **G**éométrie **I**dentique avec un réseau de **C**ompartiments de géométrie **I**dentique : T_{GICI}. La Figure II-2 page 98 représente un exemple de système ouvert découpé en $M = 5$ T_{GICI}. Dans cet exemple il y a $c = 4$ compartiments par tranche soit un nombre total de $J = 20$ compartiments. Il est important de définir un point d'origine et une orientation des axes. Cette étape est indispensable pour la numérotation, dans un ordre bien déterminé (voir Figure II-24), des compartiments qui intervient à l'étape suivante. Dans cet exemple on a choisi arbitrairement le premier compartiment en haut à gauche de la première tranche et le dernier compartiment en bas à droite de la dernière tranche.

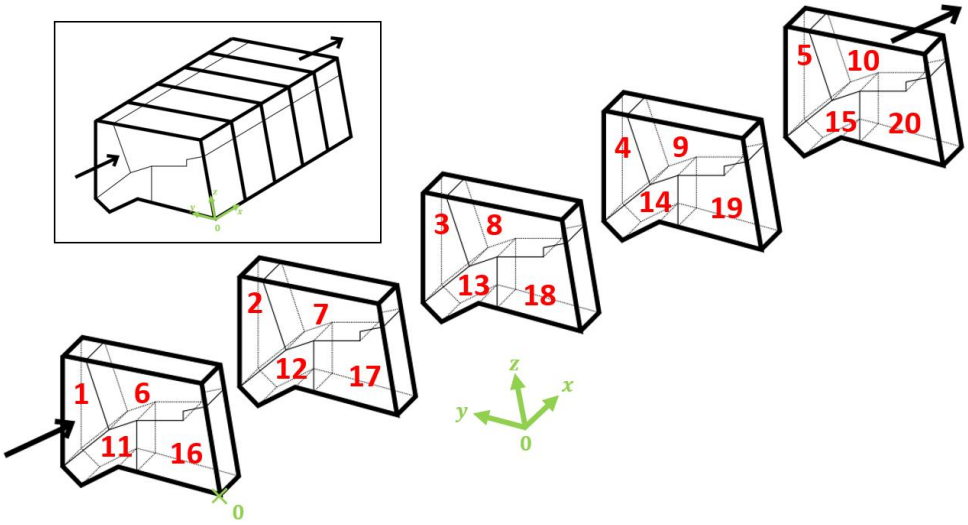


Figure II-24 : Schéma de la structure du réseau de compartiments avec une numérotation ordonnée.

L'étape suivante consiste à répertorier les surfaces d'échange entre les compartiments de manière ordonnée afin de permettre une lecture automatisée des débits d'échanges puis le remplissage de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$. Grâce au schéma réalisé sur la Figure II-24, il est possible de représenter les surfaces d'échanges dans des plans qui se répètent dans la largeur, la longueur et la hauteur comme le montre la Figure II-25. Dans notre exemple, on dénombre :

- 2 plans dans la largeur correspondant aux surfaces d'échanges entre les compartiments dans la direction $\boldsymbol{y}$
- 4 plans dans la longueur correspondants aux surfaces d'échanges entre les compartiments dans la direction $\boldsymbol{x}$
- 1 plan dans la hauteur correspondant aux échanges entre les compartiments dans la direction $\boldsymbol{z}$.

Chaque surface est nommée à partir des numéros des compartiments qui la définissent. La valeur numérique des débits convectif et/ou turbulent correspondant à chaque surface est calculé comme indiqué dans le paragraphe II.3 ci-dessus. De cette manière, il est possible de développer un algorithme qui lie l'ensemble des plans et affecte à chaque couple de compartiments les débits d'échange associés. A partir de là, il est aisé de remplir la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$. Le nombre de tranches n'est alors qu'un simple paramètre et il devient tout aussi aisé de traiter le même problème avec le nombre de tranches que l'on souhaite, ce qui offre une grande souplesse d'utilisation à cette méthode.

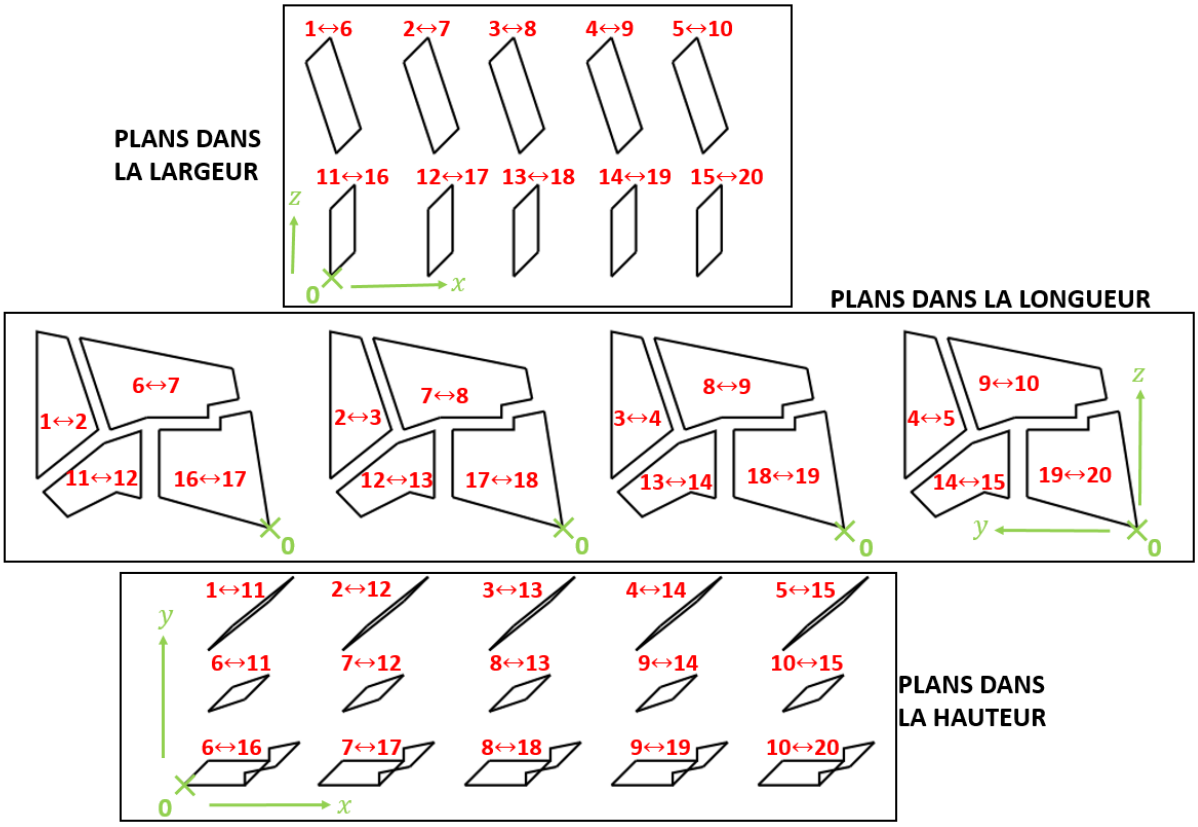


Figure II-25 : Classement des surfaces d'échanges selon des plans dans la largeur, longueur et hauteur d'après le modèle de la Figure II-24.

II.5.3 Calcul des concentrations

Le calcul des concentrations (voir Figure II-18) consiste à lire la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ et à construire un système d'équations différentielles qui sera résolu numériquement par le solveur. On note C_{in} la concentration au nœud d'entrée de la branche et C_{out} celle au nœud de sortie. On distingue les calculs de concentration en sortie et en entrée d'une branche.

II.5.3.1 Calcul d'une concentration en sortie de branche C_{out}

La concentration C_{out} en sortie de branche est calculée à partir de la concentration C_{in} de l'entrée de la branche. Il y a deux cas possibles :

- La Figure II-26 décrit le cas d'une branche sans compartiment, c'est-à-dire une branche représentant une surface d'échange entre deux compartiments. Dans ce cas la concentration est inchangée $C_{in} = C_{out}$:

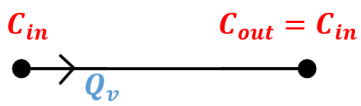


Figure II-26 : Schéma d'une branche sans compartiment dont on souhaite calculer la concentration de sortie C_{out} à partir de la concentration d'entrée C_{in}

- La Figure II-27 décrit le cas où il y a un compartiment dans la branche. Dans ce cas la nouvelle solution est calculée numériquement (équation [II.28] pour un traceur passif et équation [II.33] pour une espèce chimique).

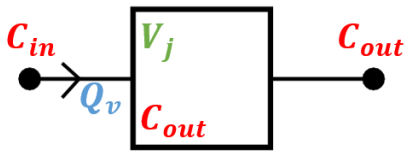


Figure II-27 : Schéma d'une branche contenant un compartiment de volume V_j dont on souhaite calculer la concentration de sortie C_{out} connaissant la concentration d'entrée C_{in}

II.5.3.2 Calcul d'une concentration en entrée de branche C_{in}

La Figure II-28 montre un nœud c vers lequel convergent $N_{conv} = 3$ branches et duquel divergent $N_{div} = 2$ branches. L'objectif est de calculer la concentration C_{in} à l'entrée de chacune des branches divergentes du nœud nd.

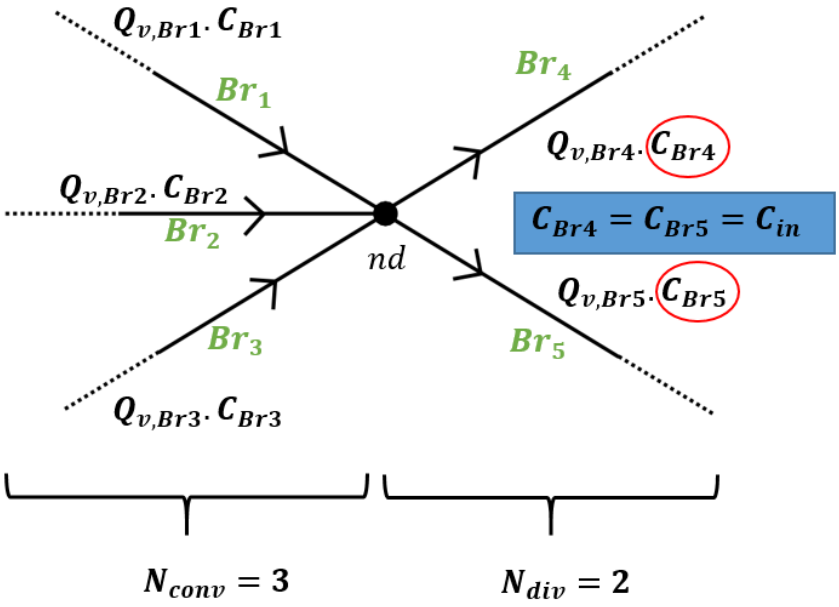


Figure II-28: Schéma d'un nœud i auquel arrivent $N_{conv} = 3$ branches (Br_1, Br_2, Br_3) et duquel repartent $N_{div} = 2$ branches (Br_4, Br_5).

Pour calculer C_{in}, on écrit la conservation de la matière Q_m :

$$\sum_{i=1}^{N_{conv}} Q_{v,Bri}.C_{Bri} = \sum_{j=1}^{N-div} Q_{v,Brj}.C_{Brj} \qquad [II.41]$$

Comme C_{in} est identique dans chacune des branches divergentes ont obtient :

$$C_{in} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{conv}} Q_{v,Bri}.C_{Bri}}{\sum_{j=1}^{N_{div}} Q_{v,Brj}} \qquad [II.42]$$

Pour l'exemple de la Figure II-28, l'équation [II.42] s'écrit :

$$C_{in} = \frac{Q_{v,Br1}.C_{Br1} + Q_{v,Br2}.C_{Br2} + Q_{v,Br3}.C_{Br3}}{Q_{v,Br4} + Q_{v,Br5}} \qquad [II.43]$$

II.6 Organigramme de la méthode

A ce niveau de la méthode on dispose de tous les éléments nécessaires au développement d'un modèle à compartiments. Dans la pratique, il est rare que la construction du modèle ait lieu dès le premier essai. Nous exposons ici un organigramme de la méthode (voir Figure II-29).

1. Dans un premier temps, on décrit le système étudié, ainsi que les données dont on dispose pour construire le modèle (voir paragraphe II.1.1). A partir de l'objectif du modèle et de la nature de la banque de données, on peut définir le degré de finesse du modèle (voir paragraphe II.1.2). En cas de modèle de type systémique avancé, la méthode est bien décrite dans la littérature et nous renvoyons le lecteur vers le chapitre bibliographique de cette thèse. La méthode est développée ici pour les modèles topologiques (voir paragraphe II.2).
2. Avant de construire le réseau de compartiments, il est fortement conseillé de prédécouper le volume total du système (voir paragraphe II.2.1). Une méthode de découpage en tranches identiques a été présentée (voir paragraphe II.2.1.1).
3. L'étape suivante consiste à construire le réseau de compartiments (voir paragraphe II.2.2). Trois techniques de division sont proposées (voir paragraphe II.2.2.2) pour découper indépendamment le champ d'une grandeur pertinente. Une technique de superposition (voir paragraphe II.2.2.3) permet de prendre en compte plusieurs grandeurs pertinentes. L'objectif du modèle doit être pris en compte lors de la construction du réseau de compartiments.
4. Une fois que le réseau de compartiments est construit, on définit la manière dont ces derniers échangent la matière (voir paragraphe II.3). Il faut renseigner obligatoirement les échanges convectifs (voir paragraphe II.3.1). Les échanges turbulents permettent de modéliser la dispersion de la matière due à la turbulence (voir paragraphe II.3.2).
5. Il faut alors valider le modèle du point de vue hydrodynamique. L'agencement des compartiments et la manière dont ils échangent la matière doivent correctement représenter l'écoulement. Un bilan de matière sans réaction chimique (voir paragraphe II.4.2) permet de simuler des expériences de traçage qui doivent être fidèles à la réalité. Dans le cas contraire, il est possible de modifier la structure du réseau de compartiments (étape 4), la manière de calculer les échanges (étape 5) ou le prédécoupage du système (étape 3).
6. La dernière étape consiste à prendre en compte la réaction chimique (voir paragraphe II.4.3). Cela peut conduire à raffiner le modèle pour prendre en compte les contraintes de temps de réaction. Il est possible d'anticiper cette étape et de prendre en compte la chimie en même temps que l'hydrodynamique.

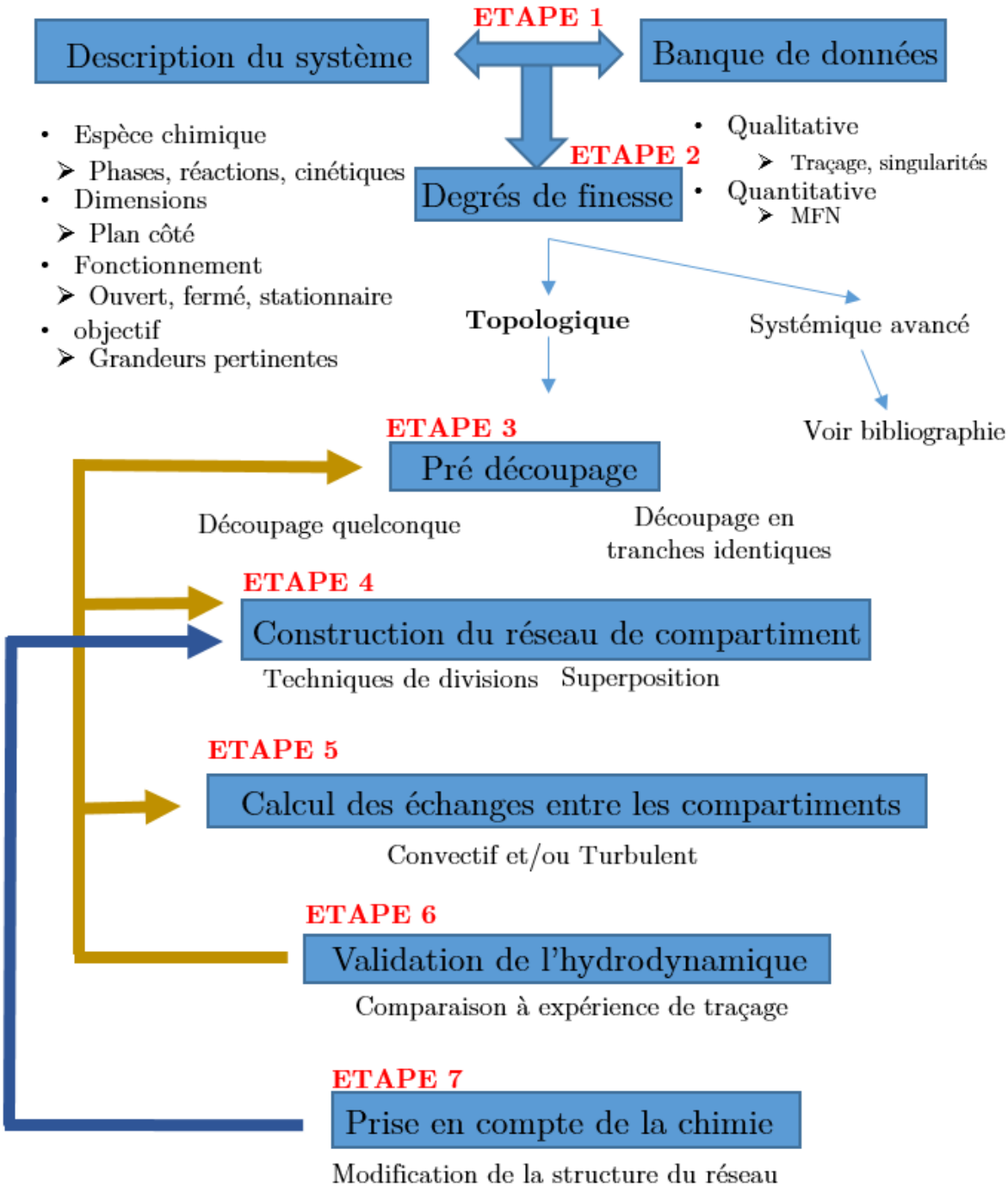


Figure II-29 : Organigramme de la méthode

II.7 Conclusions et perspectives

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthodologie générale de modélisation compartimentale. Elle est destinée à modéliser les réacteurs chimiques mais elle s'applique par extension à tout type de système siège d'un écoulement de fluide. Les modèles de type systémique n'ont pas été abordés dans ce chapitre car leur méthodologie est bien développée dans la littérature. Ils restent d'excellentes solutions pour modéliser simplement et globalement l'hydrodynamique d'un système, en particulier si les données à disposition ne sont pas assez précises. Nous nous sommes intéressés ici aux modèles compartimentaux dits « topologiques ». Ces modèles présentent un agencement de compartiments fidèle à la géométrie du réacteur et aux mécanismes mis en jeu. La méthode consiste à découper le volume total en compartiments au sein desquels tous les paramètres sont homogènes. L'hypothèse d'homogénéité permet d'utiliser des bilans de matière simples à résoudre dans chaque compartiment ce qui permet des temps de calcul réduits.

II.7.1 Trois techniques de divisions

La littérature propose deux stratégies de découpage, la division du volume total ou l'agglomération des mailles de MFN. Dans notre méthode, nous avons choisi les techniques de division car elles permettent une plus grande marge de manœuvre. Trois techniques de divisions ont été présentées. Le découpage qualitatif est très représentatif des mécanismes mis en jeu et mène à un petit nombre de compartiments. L'inconvénient de cette approche est qu'elle n'est applicable qu'aux situations pour lesquelles les grandeurs à découper sont macroscopiquement très hétérogènes (fort gradient de température, de vitesse, *etc.*). Comme son nom l'indique, l'approche géométrique consiste à découper le système en se basant uniquement sur sa géométrie. Cette technique fonctionnera toujours si le découpage est suffisamment fin, ce qui la rend particulièrement adaptée aux cas où le mélange est très homogène (comme une cuve agitée ou un milieu monophasique non réactif) et où il n'existe pas de critère évident de découpage. Une technique intermédiaire consiste à calculer la moyenne arithmétique de la grandeur à découper puis d'affecter d'un côté ou de l'autre toutes les mailles de MFN dont la valeur numérique de la grandeur est inférieure et supérieure à cette moyenne. La difficulté réside dans le choix du nombre optimal de divisions à effectuer. Si le nombre de division est trop faible un découpage qualitatif peut suffire et si le nombre de division est trop important alors un découpage géométrique sera tout aussi efficace. L'algorithme de division a été présenté depuis la littérature mais n'a pas été élaboré dans ces travaux de thèse. Il serait intéressant de tester cette technique de division qui offrirait un bon outil de découpage automatique.

En présence de réaction chimique, il est nécessaire que le temps caractéristique de la réaction chimique soit significativement plus grand que le temps de passage moyen des espèces dans un

compartiment. Ainsi, les espèces chimiques n'ont pas le temps de réagir dans un compartiment ce qui créerait un gradient de concentration. Pour les réactions suffisamment lentes, l'utilisateur reste libre de choisir la technique de division qu'il souhaite. En revanche, pour les réactions très rapides, la taille des compartiments doit être réduite afin de respecter la contrainte citée ci-dessus. Dans ce cas l'utilisation de découpage qualitatif est impossible et le découpage géométrique ou quantitatif sont les seules options car ils permettent de facilement créer un réseau de compartiment de petites tailles (ce qui conduit à un grand nombre de compartiments).

II.7.2 Découpage en tranches identiques

Nous souhaitons attirer l'attention du lecteur sur le découpage en tranches identiques qui a été présentée. Il s'agit d'une méthode très simple à mettre en œuvre qui est techniquement toujours réalisable et qui a le mérite de proposer une base de travail. Cependant, l'hypothèse des tranches identiques implique une perte de précision dans les résultats plus ou moins importante en fonction de la configuration étudiée. Lorsque la géométrie est régulière suivant un axe et qu'il existe une invariance dans la répartition des grandeurs pertinentes le long de cet axe, le découpage en tranches est particulièrement adapté. C'est dans le cas contraire que l'on observe les plus grandes pertes de précision. Cela étant dit, du fait de sa souplesse d'utilisation cette approche est intéressante pour le cadre de notre méthode de la modélisation compartimentale que nous souhaitons être la plus générale possible. Dans le chapitre suivant, le découpage en tranches identiques sera appliqué à un exemple non favorable.

II.7.3 Matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange

Une fois que le réseau de compartiments est construit, un solveur mathématique (dassl) permet de résoudre le système d'équations différentielles. L'écriture de ce système n'est pas aisée puisque la structure du modèle à compartiments n'est *a priori* pas connue. Nous avons donc développé un outil de communication entre le réseau de compartiments et le solveur mathématique : la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$. Le contenu de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ est représentatif de la structure du réseau de compartiments, et elle contient le volume de chaque compartiment, les connexions existantes entre les différents compartiments, et les débits d'échanges entre compartiments. Comme l'hydrodynamique est stationnaire, les débits d'échanges entre compartiments sont constants. la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ est lue par un programme qui construit automatiquement le système d'équations différentielles correspondant au modèle. La difficulté consiste à convenablement remplir la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$. Pour des modèles simples (faible nombre de compartiments et/ou structure régulière), le remplissage peut être réalisé à la main mais cela devient impossible pour les modèles complexes (grands nombres de compartiments et réseaux irréguliers). Un algorithme a été développé pour remplir automatiquement la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ à partir d'un modèle prédécoupé en tranches identiques. La souplesse du découpage en tranches

identiques alliée au remplissage automatique de la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ confère à la méthode une marge de manœuvre permettant de traiter un très large champ d'applications.

II.7.4 Ecoulement instationnaire

La méthode s'applique aux écoulements stationnaires, cela signifie que le débit volumique d'échange entre les compartiments est constant dans le temps et que la structure du réseau de compartiments est fixe. Si l'écoulement est instationnaire, la méthode dans son état actuelle ne propose pas de solution concrète. Mais sous réserve de prendre d'extrêmes précautions il est théoriquement possible de modéliser un écoulement instationnaire. Dans ce cas de figure les grandeurs pertinentes peuvent évoluer au cours du temps. Pour tenir compte de cette évolution, il faudrait en toute rigueur construire un modèle à compartiments dont la structure est dynamique mais cela n'est absolument pas pris en compte dans notre méthode. Nous avons observé dans la littérature qu'il est possible de moyenner les données dans le temps afin d'avoir une structure de compartiment fixe, (Nauha and Alopaeus, 2015). Il est possible que cela engendre des pertes de précision, c'est pourquoi nous invitons le lecteur à faire preuve d'une grande prudence. Si la structure du réseau de compartiments peut être figée dans le temps malgré l'écoulement instationnaire, la variation des débits d'échanges peut théoriquement être prise en compte par notre méthode en prenant un des pas de temps d'intégration $\boldsymbol{\Delta t}$ suffisamment court pour pouvoir considérer les débits d'échanges constants pendant cet intervalle. Il conviendra alors de mettre à jour la matrice $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ à chaque intégration du calcul. Dans un même ordre d'idée (Delafosse et al., 2015) proposent de définir de manière aléatoire des échanges turbulent qui varient dans le temps afin de rendre compte de l'écoulement turbulent instationnaire. Aucun test n'a été effectué en régime d'écoulement instationnaire et ces remarques sont à considérer uniquement en guise de perspectives.

CHAPITRE III : **Application de la méthodologie sur un cas d'étude a priori défavorable en vue de définir les limites d'applications**

III.1 Stratégie de choix du cas d'étude

L'objectif de ce chapitre est d'appliquer la méthode générale proposée au chapitre précédent sur un cas réel. On dénombre dans la littérature un peu moins d'une dizaine de travaux de type modélisation compartimentale topologique. Si on regarde attentivement, chacun de ces travaux présente des particularités, portant souvent sur l'écoulement, qui ont été exploitées directement par les chercheurs afin de définir la structure du modèle. Le cas d'étude que nous souhaitons traiter doit être choisi avec attention afin de trouver une configuration ne présentant pas de symétrie ni de particularité hydrodynamique conduisant à orienter a priori le découpage par tranche.

III.1.1 Analyse des particularités des principales études de la littérature sur la modélisation compartimentale

III.1.1.1 Rigopoulos and Jones (2003)

(Rigopoulos and Jones, 2003) modélisent une colonne à bulles pour l'absorption de CO_2 par des processus chimique et physique. L'écoulement principal est induit par un distributeur de gaz placé au centre de la colonne et un cylindre séparateur disposé au milieu de la colonne. Ce dispositif produit un courant ascendant au niveau de l'injection de gaz (cylindre central) et un courant descendant proche des parois (zone annulaire). La structure globale de l'écoulement est donc une boucle de recirculation de type airlift. La répartition des phases est homogène sur toute la hauteur de la colonne à savoir, une partie à forte teneur en gaz au centre de la colonne et une autre à faible teneur en gaz à la périphérie. Ceci permet de réaliser un découpage en tranches identiques dans le sens de la hauteur de la colonne, puis un découpage au sein des tranches. La partie ascendante de l'écoulement est divisée en deux compartiments pour représenter une zone à forte teneur en gaz et une autre à faible teneur en gaz. La partie descendante de l'écoulement à la périphérie ne contient qu'un seul compartiment. C'est sur une analyse visuelle de la teneur en CO_2 que le découpage est réalisé. Ce choix est justifié par le fait que l'on s'intéresse à l'absorption du CO_2. La température étant a priori homogène, l'absorption dépend de la teneur en CO_2 gaz dans la zone d'injection du gaz.

Les échanges convectifs sont définis qualitativement de façon à représenter la boucle de circulation de l'écoulement principal. Des échanges turbulents sont définis dans la direction radiale entre les compartiments de la partie ascendante. Dix tranches sont nécessaires pour modéliser la colonne, qui compte au total trente compartiments.

III.1.1.2 Le Moullec et al., (2010)

(Le Moullec et al., 2010) modélisent un réacteur de traitement des eaux usées de type canal, siège de réactions biologiques. L'écoulement principal emmène l'eau polluée de l'entrée vers la sortie dans une trajectoire globalement rectiligne. Une injection de gaz est réalisée au fond du canal, sur un côté, et ce sur toute la longueur ce qui conduit à la formation d'une boucle de recirculation perpendiculaire à l'écoulement principal. La répartition des phases est régulière sur toute la longueur du canal, avec une partie à forte teneur en gaz au niveau des distributeurs et une partie liquide sur le reste du réacteur. Ceci a incité les auteurs à réaliser un découpage en tranches d'égale épaisseur dans la longueur du canal. Un découpage de chaque tranche est ensuite réalisé à partir de profils de vitesses mesurés par vélocimétrie laser Doppler. De par la structure de l'écoulement et de par le confinement du gaz sur une zone limitée et bien déterminée, un découpage qualitatif en tranches identiques a été réalisé. La tranche est divisée en une zone à forte fraction en gaz au niveau des barboteurs et une autre zone contenant uniquement du liquide. La partie liquide est également divisée en une zone à fortes vitesses, une zone de recirculation à faible vitesse et deux zones de volumes stagnants. Le nombre de tranches est optimisé en réduisant l'écart entre la DTS mesurée expérimentalement et celle simulée avec le modèle. L'optimum calculé est de cinq tranches soit un total de vingt compartiments. Après avoir inclus les cinétiques du modèle ASM1 dans le modèle compartimental, les auteurs ont pu simuler, avec une bonne précision, et beaucoup plus rapidement que des simulations de MFN, les profils discrets (une valeur par tranche soit 5 points) de concentration sur la longueur du canal des différentes espèces chimiques mises en jeux.

III.1.1.3 Guha et al. (2006)

(Guha et al. 2006) modélisent une cuve cylindrique agitée et fermée et s'intéressent plus particulièrement à l'effet de la vitesse de réaction sur la structure finale du modèle à compartiments. La configuration de cuve agitée conduit à un milieu réactionnel très homogène et il n'existe pas de singularité prédisposant à un découpage particulier. Les auteurs se sont donc orientés vers un découpage de type géométrique. Le modèle est défini par un nombre de compartiments dans les directions axiale, radiale et longitudinale et l'ajustement du nombre de divisions dans chacune de ces directions permet de modifier le nombre total de compartiments. Le découpage est réalisé avec des compartiments de tailles identiques. Pour choisir un nombre optimum de divisions, autrement dit la taille des compartiments, le critère utilisé est la vitesse de réaction. En effet, pour que toutes les grandeurs présentes dans un compartiment soient homogènes, il est imposé que le temps de mélange soit significativement plus court que le temps de réaction. Plus qu'une approche compartimentale physique, il s'agit d'un maillage du système dont la taille caractéristique des mailles dépend de la cinétique. Il n'y a donc pas d'indice permettant de réaliser un découpage qualitatif ni quantitatif basé le champ d'une grandeur en particulier. Par contre le lien entre la taille d'une maille et la constante de temps des cinétiques est intéressant et reste valable quelle que soit la méthodologie.

III.1.1.4 Gresch et al. (2009)

(Gresch et al., 2009) modélisent un réacteur de type canal semblable à la configuration étudiée par (Le Moullec et al., 2010). Le réacteur est alimenté par une phase liquide et l'écoulement suit une direction principale de l'entrée vers la sortie. Il n'y a en revanche pas d'injection de gaz. La concentration des réactifs évolue le long du canal en fonction de l'avancement des réactions. Les compartiments sont créés en découpant des volumes où les concentrations des composés peuvent être considérées constantes durant le temps de passage du fluide dans le compartiment. Pour rendre compte des recirculations internes, les auteurs proposent une méthode très originale. Au sein d'un compartiment, les auteurs sont attentifs aux zones où la concentration d'un composé augmente ou diminue. Cela est caractéristique des petites recirculations car les compartiments sont construits comme des volumes où la concentration d'un composé est chimiquement constante. Un découpage fictif est alors réalisé au sein d'un compartiment afin de représenter ces recirculations. La méthode est testée plusieurs fois sur la même structure mais avec différentes cinétiques plus ou moins rapides ; les compartiments sont d'autant plus petits que la cinétique est rapide puisque les concentrations varient plus rapidement d'un point à un autre. Ce résultat est en parfait accord avec les travaux de (Guha et al. 2006) où le temps de passage des espèces dans un compartiment doit être plus court que le temps de réaction ce qui est vérifié en réduisant la taille des compartiments.

III.1.1.5 Alvarado et al. (2012)

(Alvarado et al., 2012) modélisent l'hydrodynamique d'un étang de taille réelle (Ucubamba – Equateur) où se déroulent des réactions biochimiques relatives au traitement des eaux. La configuration étudiée présente une forte dissymétrie de l'écoulement car la sortie de l'étang n'est pas située en face de l'alimentation, créant ainsi une recirculation. Par contre les profils de vitesses sont sensiblement les mêmes à différentes hauteurs en raison de la faible profondeur, permettant ainsi de travailler en deux dimensions. Un pré-découpage est réalisé à partir d'une analyse qualitative du champ de vitesse permettant aux auteurs d'identifier des zones ayant un comportement particulier. Il y a une zone à forte vitesse allant de l'entrée vers la sortie, une autre représentant un courant inverse de la sortie vers l'entrée et enfin une zone centrale représentant une grande boucle de recirculation. Ensuite, le réseau de compartiments est créé indépendamment dans chacune des zones identifiées. Le volume de la zone allant de l'entrée à la sortie, est déterminé à partir du débit d'entrée et du temps de séjour supposé égal au temps auquel apparait le pic principal de la mesure expérimentale de la DTS. Pour le reste de l'étang, la structure du réseau est déterminée à partir d'une inspection visuelle des profils de vitesses. Le modèle final, composé d'environ 25 compartiments, permet de simuler assez bien l'hydrodynamique de l'étang mais échoue dans la prédiction des transferts d'espèces chimiques lorsque les réactions sont prises en compte. La raison principale est que seuls les champs de vitesses ont été retenus comme paramètres pertinents alors que l'objectif final de la modélisation était la simulation des réactions.

III.1.1.6 Delafosse et al. (2014)

(Delafosse et al. 2014) modélisent une cuve agitée fermée, siège de réactions biologiques fortement couplées à l'hydrodynamique. Il s'agit d'une configuration semblable à celle étudié par (Guha et al. 2006) dans laquelle la forte homogénéité du mélange nécessite de procéder à un découpage géométrique. Dans cet article, les auteurs s'intéressent uniquement aux temps de mélange mesurés expérimentalement par une mesure locale de concentration d'un traceur passif au cours du temps. Comme il s'agit d'un système fermé, la concentration du traceur tend vers une constante aux temps longs. La forme de la courbe durant la phase instationnaire permet de décrire le comportement hydrodynamique. Un minimum de 10000 compartiments est nécessaire, ce qui est élevé pour un modèle compartimental. Une originalité des travaux réside dans la manière de calculer les échanges turbulents entre les compartiments.

III.1.1.7 Nauha and Alopaeus, (2015)

(Nauha and Alopaeus, 2015) modélisent la production de microalgues dans une colonne à bulles. Il s'agit d'un procédé semblable à celui étudié par (Rigopoulos and Jones, 2003) où du gaz est injecté par le bas de la colonne. D'abord, trois compartiments sont formés : un compartiment en forme de croix pour modéliser l'injection de gaz, un compartiment en dessous de l'injecteur qui représente le volume réactionnel et un autre en haut de la colonne qui représente la sortie en gaz. Le reste de la colonne est divisé en demi-cylindres concentriques ; cinq divisions dans la direction radiale et cinq dans la hauteur puis deux divisions pour couper la colonne en deux afin de différencier les compartiments provenant de l'est et de l'ouest (important par rapport au rayon du soleil), soit 53 compartiments. Dans chaque compartiment, toutes les grandeurs (pression, turbulence, concentration, etc) sont moyennées sur plusieurs pas de temps de simulation afin de construire un modèle à compartiments stationnaire dont la structure n'évolue pas au cours du temps. Un point remarquable de l'étude est le nombre conséquent de sous-modèles pris en compte dans chaque compartiment servant à représenter la teneur en oxygène et l'exposition à la lumière, qui sont des paramètres permettant de modéliser la croissance des algues. La disponibilité en lumière dépend de la durée du jour, l'angle du zénith, l'épaisseur de l'atmosphère, la diffusion (elle dépend de la clarté du ciel et du brouillard) et l'angle d'incidence. De l'intensité de la lumière dépendra la croissance des algues, l'absence de lumière causant leur perte par phénomène de respiration. La modélisation des transferts de matière entre la phase gaz et liquide est aussi réalisée. Elle tient compte de la distribution des tailles de bulles, de la rupture et la coalescence des bulles, de la taille des bulles à l'alimentation, de la force de trainée et du glissement exercé sur les bulles et leurs formes. Le modèle à compartiment représente correctement l'hydrodynamique, les transferts d'espèce gaz-liquide et la croissance des algues.

III.1.2 Critères pour le cas d'étude choisi

La technique de découpage en tranches est suffisamment souple pour être applicable à une grande variété de configurations. En effet, même si les critères de découpage initiaux ne visent pas spécifiquement à définir des tranches, bon nombre de cas débouchent sur ce choix. Ainsi, (Rigopoulos and Jones, 2003) et (Nauha and Alopaeus, 2015) étudient une colonne à bulle avec une direction principale de l'écoulement vertical où le découpage peut être représenté par des tranches qui se succèdent dans cette direction. (Guha et al., 2006) et (Delafosse et al., 2014) étudient une cuve agitée où l'homogénéité du mélange impose un découpage géométrique qui peut aisément être représenté par des tranches identiques se répétant dans la direction de l'axe de symétrie de la cuve. Enfin (Le Moullec et al., 2010) et (Gresch et al., 2009) étudient un réacteur canal avec une direction principale de l'écoulement allant de l'entrée vers la sortie pour lequel un motif d'écoulement se répète.

Seul les travaux de (Alvarado et al., 2012) ne mettent pas en œuvre un découpage en tranches fixé par la géométrie ou des critères de symétrie. Notre objectif est de choisir un cas d'étude *a priori* défavorable au découpage en tranches. Pour cela nous souhaitons éviter plusieurs situations particulières :

- La présence d'invariance : en effet, si la répartition des grandeurs est invariante dans une direction, un modèle en tranches identiques est généralement facilement réalisable.
- Un milieu trop homogène : dans le cas des cuves agitées où l'agitation est intense, un découpage basé sur une analyse physique directe n'est pas possible. Dans ce cas de figure, un découpage géométrique est la seule option et une sensibilité du maillage à la prédiction de valeurs physiques mesurées permet de valider le modèle. La méthode par tranches que l'on propose est donc directement applicable en utilisant les constantes de temps des cinétiques pour définir la taille des compartiments.
- La présence de réactions chimiques trop rapides : comme l'ont montré (Guha et al., 2006) et (Gresch et al., 2009), la vitesse des réactions chimiques joue un rôle prépondérant sur la taille des compartiments et est un paramètre très restrictif enlevant tout degré de liberté vis-à-vis de la structure finale du modèle. Bien que cela ne soit pas contre-indiqué pour valider la méthode, nous souhaitons garder une marge de manœuvre lors de l'étape de découpage afin de tester l'influence des différents paramètres de découpage.
- Un objectif uniquement hydrodynamique : les modèles de type systémique ont prouvé leur efficacité lorsqu'il s'agit de modéliser uniquement l'hydrodynamique. Les modèles à compartiments ont pour objectif de répondre à des problématiques plus complexes que reproduire des DTS par exemple.

A ce titre, l'étang de (Alvarado et al., 2012) semble bien adapté mais il conviendrait d'avoir aussi une dissymétrie dans la direction verticale.

III.2 Description du cas d'étude choisi

Dans ce paragraphe nous allons présenter le cas d'étude choisi, ses caractéristiques, son fonctionnement et son instrumentation. Ensuite, nous présenterons des données expérimentales et numériques détaillées (la banque de données) qui nous serviront à construire le modèle.

III.2.1 Choix d'une structure de type étang

Comme expliqué précédemment, le cas traité par (Alvarado et al., 2012) est particulièrement intéressant en raison de la dissymétrie importante de l'écoulement. Cependant la configuration étudiée présente une faible profondeur réduisant le système à deux dimensions. En travaillant sur le même type d'étang avec une alimentation et une sortie décalée mais une grande profondeur on obtiendrait alors un cas d'étude intéressant. Cependant il faut associer à ce premier critère l'étude d'un phénomène physique ou chimique autre pour ne pas valider l'essai uniquement sur un critère de DTS. Le prochain paragraphe expose une problématique réelle rencontrée dans le domaine du traitement des eaux.

III.2.2 Etude de la dispersion à la surface d'un étang.

Les étangs d'aquaculture sont des structures artificielles ou naturelles utilisées pour l'élevage piscicole. La présence de nitrates et phosphates couplée à une forte température peut causer des phénomènes d'eutrophisation (voir Figure III-1), qui conduisent au développement de plantes et algues aquatiques indésirables. Ce phénomène réduit la quantité de lumière et d'oxygène disponible pour les organismes vivant sous l'eau. Une méthode de traitement de ces algues et plantes indésirables est basée sur l'injection localisée d'une substance active (permettant de traiter les algues). Une étude de la dispersion de la substance est nécessaire pour optimiser le lieu du point d'injection et la concentration nécessaire de substance active. Des simulations de mécanique des fluides numérique et des expériences de traçage sont des outils capables de fournir de telles prédictions, mais ces méthodes sont parfois difficiles à mettre en œuvre à cause du temps de calcul ou des contraintes liées aux normes environnementales vis-à-vis de l'utilisation de traceurs dans un milieu naturel. Un modèle à compartiments est une alternative très intéressante pour prédire la dispersion de la matière.

Figure III-1 : photo d'un plan d'eau avec phénomène d'eutrophisation conduisant à l'apparition d'algues indésirables. Sources : http://www.buzzle.com/articles/how-does-eutrophication-affect-the-environment.html

Au sein de notre laboratoire, (Moussoh, 2016) a étudié cette problématique. Il a réalisé une étude numérique et une étude expérimentale sur une maquette pour étudier la dispersion du principe actif en surface et nous proposons de nous appuyer sur ces travaux pour tester notre méthodologie.

III.2.3 « Etang » à l'échelle pilote

Nous présentons ici le dispositif expérimental, avec un schéma coté illustrant les différentes configurations de fonctionnement du pilote, l'instrumentation utilisée et les simulations de mécanique des fluides numérique réalisées au cours de l'étude de (Moussoh, 2016) mais aussi des études complémentaires réalisées durant de notre travail.

III.2.3.1 Dispositif expérimental

Dans le cadre de la thèse de (Moussoh, 2016), un étang à l'échelle pilote a été développé au sein du laboratoire afin d'étudier, entre autres, la dispersion d'un traceur passif en surface de l'étang. De l'eau du robinet alimente une cuve de réserve dans laquelle deux pompes immergées permettent d'alimenter le pilote. Deux débitmètres à flotteur permettent d'ajuster précisément le débit d'entrée. L'eau passe d'abord dans une zone d'alimentation afin d'homogénéiser les profils de vitesses puis entre dans la zone d'étude via les entrées. L'eau quitte la zone d'étude via les sorties. Une vidange est installée au fond de la cuve. Les dimensions de la zone d'étude sont les suivantes : longueur $L = 1{,}40\,m$, largeur $l = 0{,}7\,m$ et hauteur : $H = 0{,}47\,m$. Ces dimensions respectent des facteurs de similitude entre le dispositif expérimental à l'échelle pilote et une configuration réelle d'étang. Des matériaux légers inoxydables sont disposés juste avant l'entrée afin d'homogénéiser l'écoulement. Une hauteur de sécurité est conservée entre le haut de la structure et le niveau le plus haut des entrées d'eau. Plusieurs orifices d'entrée et de

sorties (forme rectangulaire) sont disposés de part et d'autre de la cuve afin de tester plusieurs configurations.

Conditions opératoires choisies pour le développement du modèle à compartiments

Afin d'éviter les symétries qui favoriseraient un découpage en tranches identiques, la configuration choisie présente une entrée et une sortie décalées. La Figure III-2 est un schéma de la configuration choisie. L'extrémité supérieure des orifices d'entrée et sortie est à 51 cm du fond de la cuve et le bord des orifices à 8 cm des faces latérales de la cuve. Le débit d'entrée est constant et fixé (ce qui permet un écoulement stationnaire) à $Q = 1\,m^3/h$ (soit $2{,}78 \times 10^{-4}\,m^3/s$). Dans ce cas, la hauteur de l'eau au niveau de l'orifice d'entrée et de sortie vaut $2\,cm$ (mesure expérimentale). On en déduit le volume accessible au fluide qui vaut $V_{acc} = 1{,}40 \times 0{,}7 \times 0{,}47 = 0{,}4606\,m^3$. Les expériences de traçage sont réalisées avec des sondes disposées en plusieurs points à la surface de l'eau ainsi qu'en entrée et sortie. Pour les DTS, l'injection a lieu au niveau de l'entrée et la détection à la sortie et pour la dispersion, l'injection à lieu au milieu de la surface (croix noire) et la détection aux points A, B, C et D.

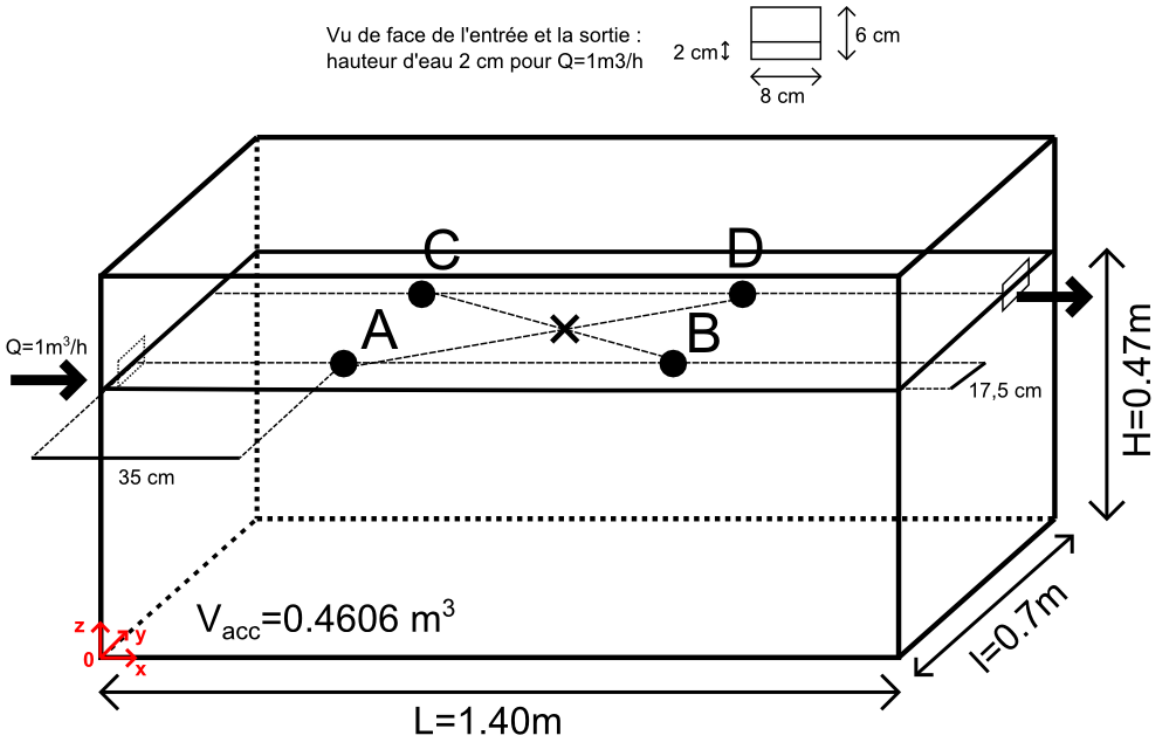


Figure III-2 : Configuration choisie pour développer le modèle à compartiments. Pour l'étude de la dispersion : injection (croix noire) et détection aux points A, B, C et D

III.2.3.2 Instrumentation

Les mesures consistent essentiellement en des expériences de traçage. Deux types de traceurs sont utilisés : une solution de chlorure de sodium et une solution de rhodamine. Des sondes conductimétriques (pour le chlorure de sodium) et spectrofluorimétriques (pour la rhodamine) sont reliées à un ordinateur permettant d'enregistrer l'évolution de la concentration du traceur au cours du temps. La rhodamine permet en outre de réaliser des traçages visuels grâce à la forte couleur rose de la solution. Les sondes conductimétriques sont disposées à l'intérieur de la zone d'écoulement ce qui permet des mesures simultanées en plusieurs points. Des expériences de traçage donnent accès aux courbes de DTS et de dispersion d'un traceur injecté en surface.

III.2.3.3 Mécanique des fluides numérique

Des simulations de mécanique des fluides numérique ont été réalisées par (Moussoh, 2016) à l'aide du logiciel commercial ANSYS Fluent 14.5. Un maillage régulier de 278000 mailles est nécessaire pour correctement modéliser l'hydrodynamique. Plusieurs modèles de turbulence de type RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations) ont été testés par (Moussoh, 2016). C'est le modèle $RNG\ k-\epsilon$ qui a été retenu (voir rappel théorique au paragraphe I.3.1.1). La MFN donne accès aux champs de vitesse, de k, de ϵ et aux courbes de DTS et dispersion.

III.2.4 Banque de données et grandeurs pertinentes

Dans ce paragraphe nous allons présenter des données expérimentales et numériques ciblées provenant de la configuration qui a été spécifiquement choisie pour appliquer notre méthode. Ces résultats constitueront la banque de données (voir paragraphe II.1.1.4 dans le chapitre 0pour construire le modèle à compartiments.

III.2.4.1 Traçage visuel

Une expérience de traçage visuel donne facilement et rapidement une description qualitative de l'écoulement.

La Figure III-3 est une compilation de photos du pilote prises lors d'une injection de rhodamine réalisée à la surface au niveau de l'entrée (le contenu d'un bêcher est versé rapidement). On observe un effet de jet important du fait que le traceur est rapidement transporté vers la face opposée à l'entrée de la cuve tout en restant très confiné (sens entrée vers sortie). Au bout d'une trentaine de secondes, le traceur bute alors contre la face où se situe la sortie et s'enfonce lentement dans la cuve. Au bout d'une quarantaine de secondes, le traceur commence à revenir

vers l'entrée avec une forte dispersion sur toute la section de la cuve. Au bout d'une centaine de seconde, le traceur a atteint la moitié de la cuve ce qui contraste fortement avec la vitesse de déplacement élevée observée au niveau de l'entrée.

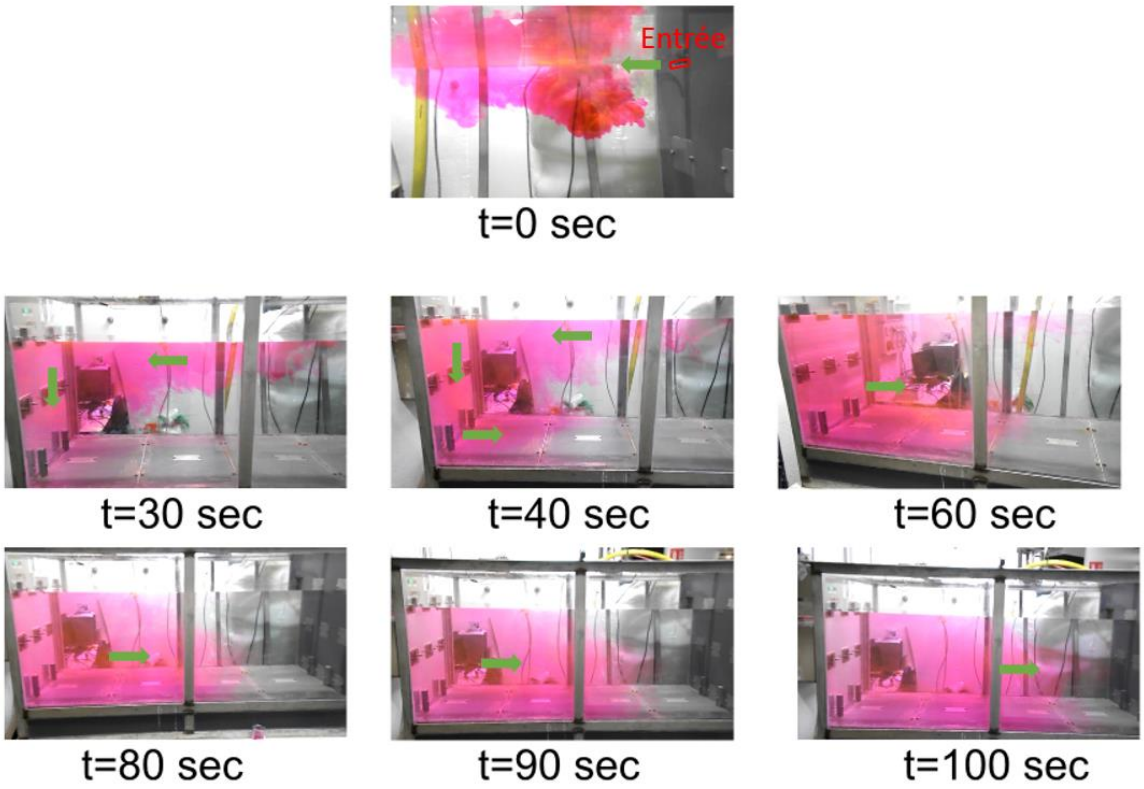


Figure III-3 : traçage visuel. Injection en entrée en surface.

La Figure III-4 est une compilation de photos prises lors d'une expérience de traçage avec de la rhodamine et une injection du traceur dans le fond de la cuve au niveau de la face de l'entrée (seringue avec injection rapide). On observe une rapide propagation du traceur les vingt premières secondes due à l'effet de jet lors de l'injection rapide avec la seringue. A partir de trente secondes, on observe que le traceur se propage très lentement et reste dans la zone d'injection. Cela atteste des faibles vitesses au fond de la cuve. Pour rappel, le traceur injecté en surface met une trentaine de secondes pour traverser la longueur de la cuve alors qu'il n'a presque pas bougé après la même durée lorsqu'il est injecté au fond de la cuve.

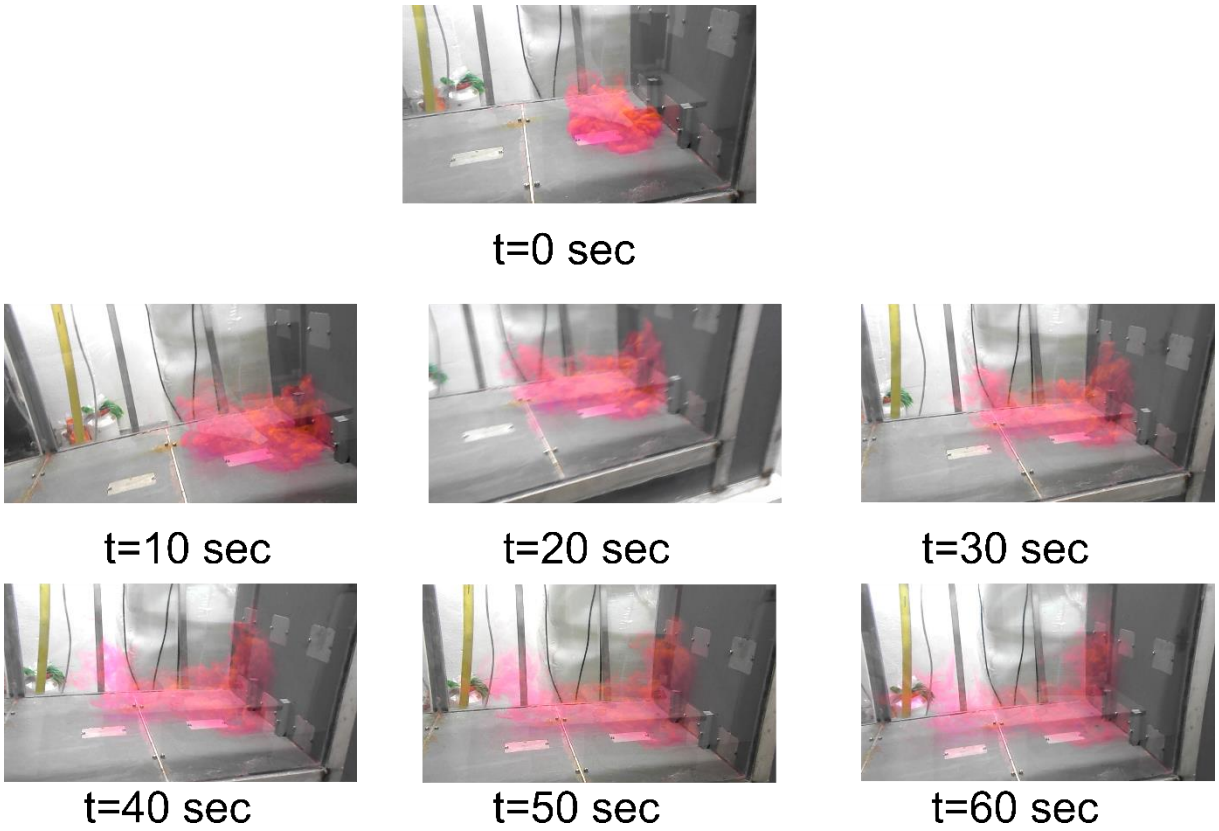


Figure III-4 : traçage visuel. Injection entrée au fond.

Les observations lors de traçages visuels ont permis de mettre en évidence plusieurs points essentiels. Premièrement il existe deux catégories de vitesses, très fortes au niveau de l'entrée (de l'entrée vers la sortie) et très faibles dans le fond de la cuve de la sortie vers l'entrée). Deuxièmement, les vitesses fortes semblent être très confinées dans le jet à l'entrée alors que les faibles vitesses semblent être dans le fond de la cuve.

III.2.4.2 Description détaillée de l'écoulement par MFN via le champ de vitesse

Le champ de vitesse est l'une des grandeurs pertinentes dont nous disposons pour faire le découpage. Nous avons choisi de présenter les champs de vitesse dans certains plans qui illustrent le mieux l'écoulement. Ces plans sont la surface libre de la cuve (plan XY), qui permettra de renseigner la dispersion potentielle du traceur, les deux plans verticaux passant par le milieu de l'entrée et le milieu de la sortie (plans XZ) et un plan vertical parallèle au plan de sortie (plan YZ) qui donneront des informations sur les courants principaux.

Plan XY horizontal au niveau de la surface libre de l'étang

La Figure III-5 représente le champ de vitesse sur le plan au niveau de la surface en $z = 47\ cm$ (plan Oxy). On observe que la petite section d'entrée induit un écoulement en jet, caractérisé par des fortes vitesses (entre $0{,}2$ et $0{,}05\ m.s^{-1}$) par rapport à celles observées sur le reste de la

surface (inférieures à $0{,}01\ m.s^{-1}$). Une fois que le jet, qui s'élargit progressivement, a atteint le bout de la cuve ($y = 140\ cm$), il se dirige vers la sortie dans la direction (Oy) en longeant la paroi sur une largeur relativement étroite (une dizaine de centimètres). Après avoir heurté la surface verticale contenant la sortie, ce courant provoque une boucle de recirculation impliquant de très faibles vitesses dans le coin près de la sortie.

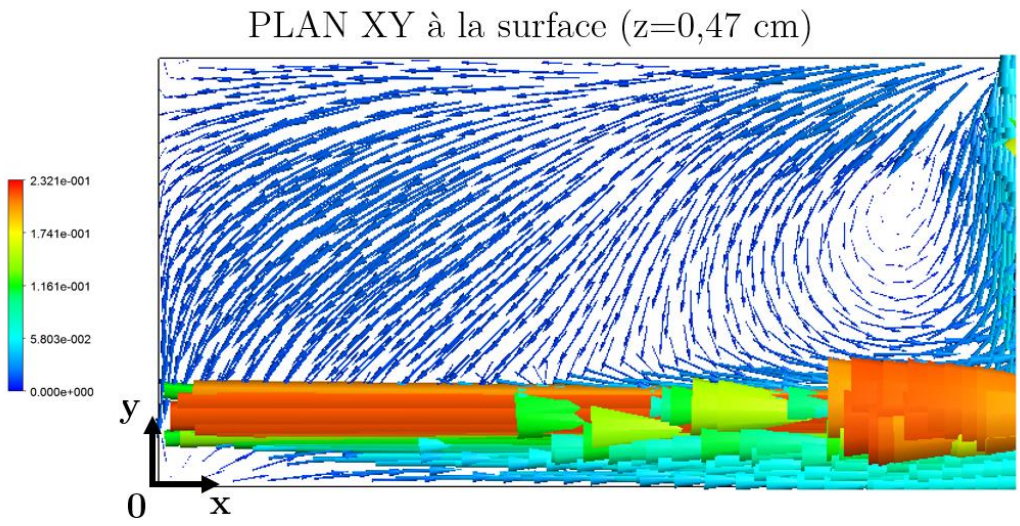


Figure III-5 : Champ de vitesse dans le plan horizontal XY placé à la surface libre (z=47cm). Vitesse exprimée en m/s. (Moussoh, 2016)

Plan XZ vertical traversant l'entrée en son milieu

La Figure III-6 représente le champ de vitesse sur plan de profil au milieu de l'entrée en $y = 12\ cm$ (plan Oxz). On observe le comportement du jet dans la profondeur. Une fois que le jet a atteint le bout de la cuve ($y = 140\ cm$), il dévie vers le fond de la cuve en longeant la paroi sur une largeur assez étroite (une dizaine de centimètres). Ce courant descendant provoque une boucle de recirculation avec des vitesses très faibles dans le fond de la cuve. On observe également qu'au niveau de l'entrée, le jet a une très petite hauteur (la hauteur de la section d'entrée à savoir 2 cm). La hauteur du jet croît progressivement au fur et à mesure que l'on progresse dans la longueur de la cuve. A partir d'environ un tiers de la longueur, le jet atteint une hauteur stable (environ 12 cm).

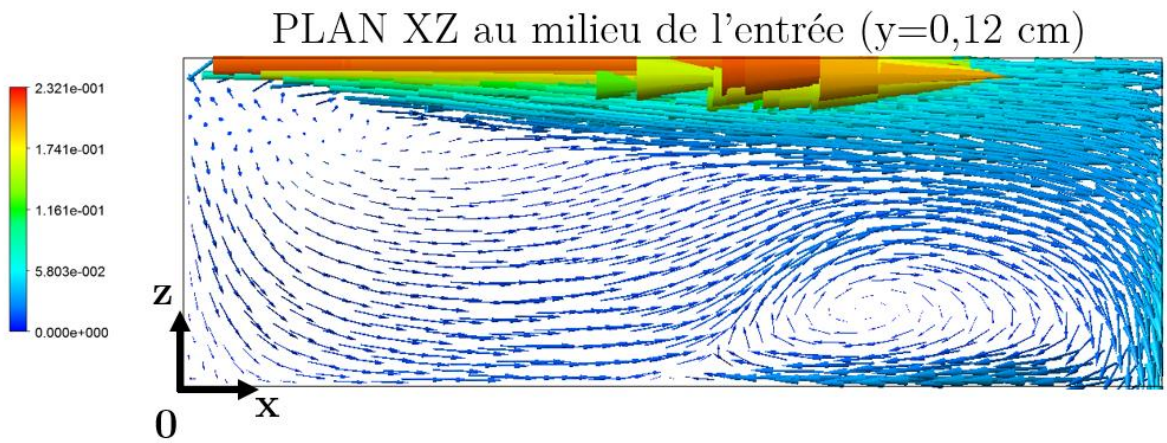


Figure III-6 : Champ de vitesse dans le plan vertical XZ placé au milieu de l'entrée (y=12cm). Vitesse exprimée en m/s. (Moussoh, 2016)

Plan XZ vertical traversant la sortie en son milieu

La Figure III-7 représente le champ de vitesse sur un plan vertical (plan Oxz) passant par le milieu de la sortie en $y = 56\,cm$. On observe que les normes des vitesses sont très homogènes sur tout le plan (inférieures à $0{,}01\,m.s^{-1}$) et que l'écoulement se dirige globalement de la sortie vers l'entrée (sens opposé au jet principal). La boucle de recirculation observée au niveau de l'entrée en $y = 12cm$ (voir Figure III-6) est également visible mais elle est de moins grande intensité.

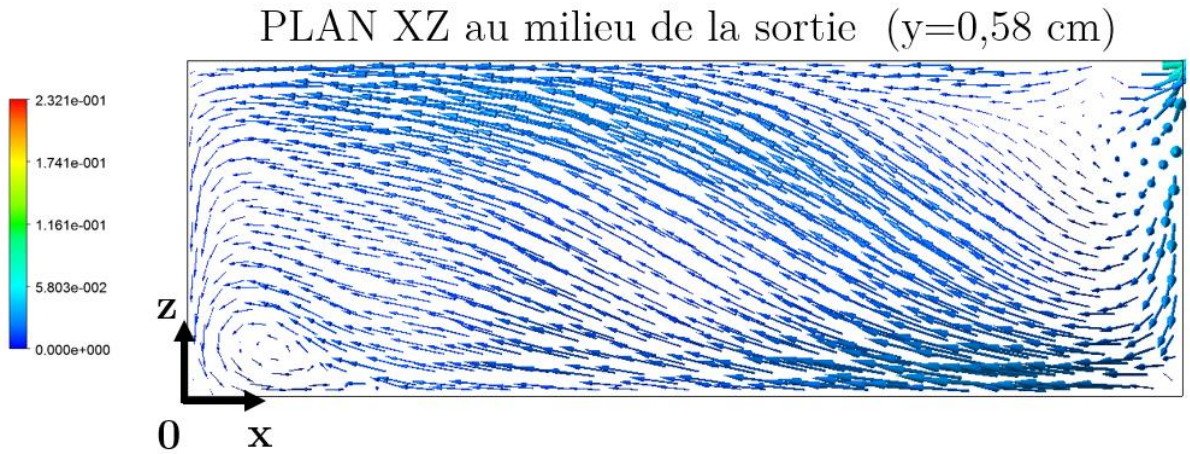


Figure III-7 : Champ de vitesse dans le plan vertical XZ placé au milieu de la sortie (y=58cm). Vitesse exprimée en m/s. (Moussoh, 2016)

Plan YZ vertical placé à 1 cm de la sortie

La Figure III-8 représente le champ de vitesse sur un plan vertical (plan Oyz) parallèle à la face de sortie et distant d'$1cm$ de celui-ci ($x = 139\,cm$). On observe que les normes des vitesses

sont très homogènes sur tout le plan (proches de $0{,}05\, m.s^{-1}$) et que l'écoulement se dirige globalement vers le fond et vers la sortie. On observe une petite zone dans le coin inférieur gauche où règnent des vitesses très faibles (inférieures à $0{,}01\, m.s^{-1}$) avec une boucle de recirculation.

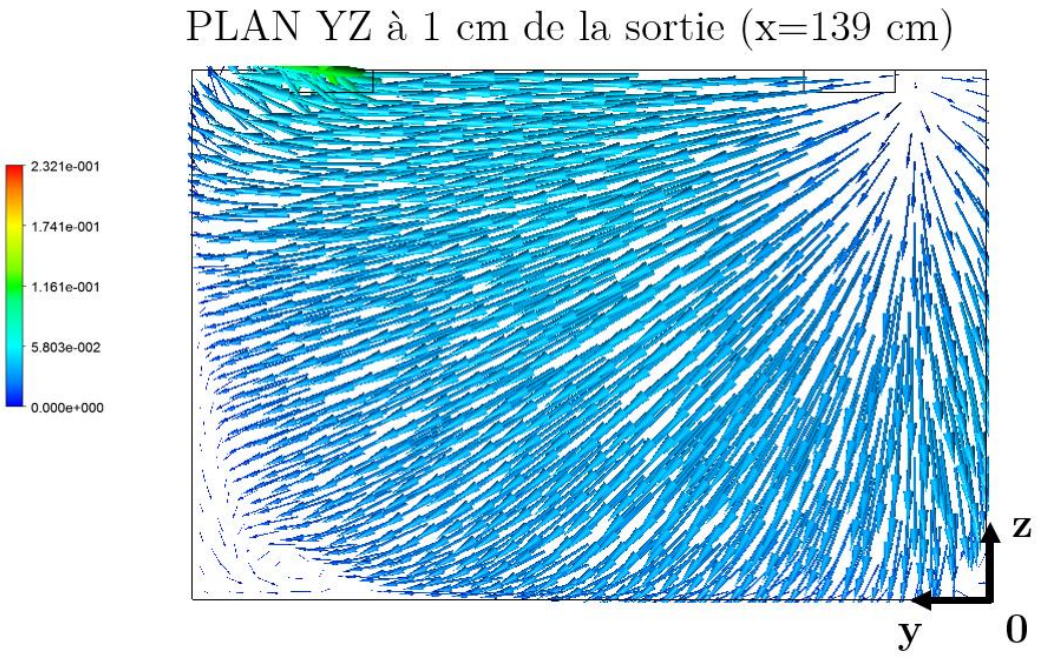


Figure III-8 : Champ de vitesse dans le plan vertical YZ placé à 1 cm de la sortie (x=139cm). Vitesse exprimée en m/s. (Moussoh, 2016)

Schématisation de l'écoulement global

Des très fortes vitesses existent dans le jet d'entrée (entre $0{,}2\ et\ 0{,}01\, m.s^{-1}$), des vitesses intermédiaires composent l'écoulement principal induit par le jet d'entrée ($0{,}05\, m.s^{-1}$) et le reste de l'étang et caractérisé par de très faibles vitesses (inférieures à $0{,}01\, m.s^{-1}$). La figure I-9 schématise les grandes tendances de l'écoulement observées aussi lors des traçages colorés (les vitesses fortes sont indiquées avec des flèches rouges et les vitesses faibles avec des flèches bleues).

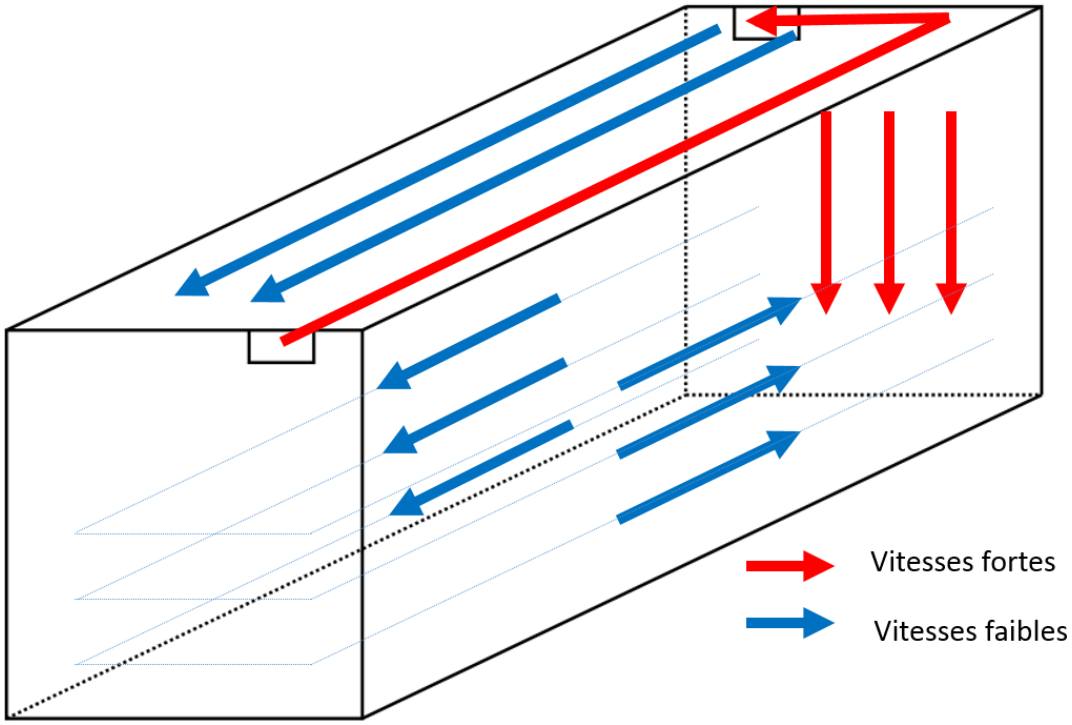


Figure III-9 : Schématisation de l'écoulement dans le pilote avec 2 niveaux de vitesses.

III.2.4.3 Description de la turbulence via les champs de k et ϵ

Les deux paramètres qui caractérisent la turbulence sont l'énergie cinétique turbulente k et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente ϵ. La Figure III-10 représente la répartition l'énergie cinétique turbulente k à la surface libre du pilote (gauche) et sur des plans verticaux XZ (droite) en Y=8 cm et Y=16 cm au niveau de l'entrée où l'effet de jet est le plus important. De la même manière, la Figure III-11 représente sur ces plans la répartition de la dissipation d'énergie cinétique turbulente ϵ. On constate qu'il existe une forte turbulence due à l'effet de jet au niveau de l'entrée mais que dans le reste de l'étang les valeurs sont en comparaison très faibles. Dans la mesure où la turbulence est présente de manière ponctuelle, les champs k et ϵ ne sont pas considérés comme des grandeurs pertinentes qui vont influencer le découpage. Il s'agit d'une hypothèse qui permet de simplifier l'application de la méthode que nous ne manquerons pas de critiquer au terme de cette étude. Ces données sur la turbulence seront utiles pour le calcul des échanges turbulents dont nous étudierons l'influence plus loin dans ce chapitre.

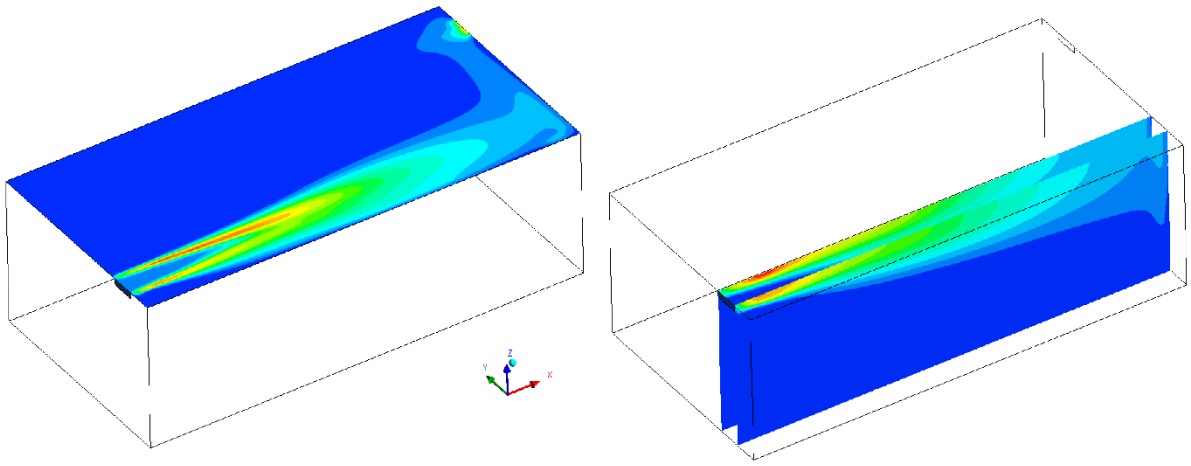


Figure III-10: Energie cinétique turbulente k ; à la surface libre de la cuve (gauche) et sur les plan XZ en Y=8 cm et 16 cm

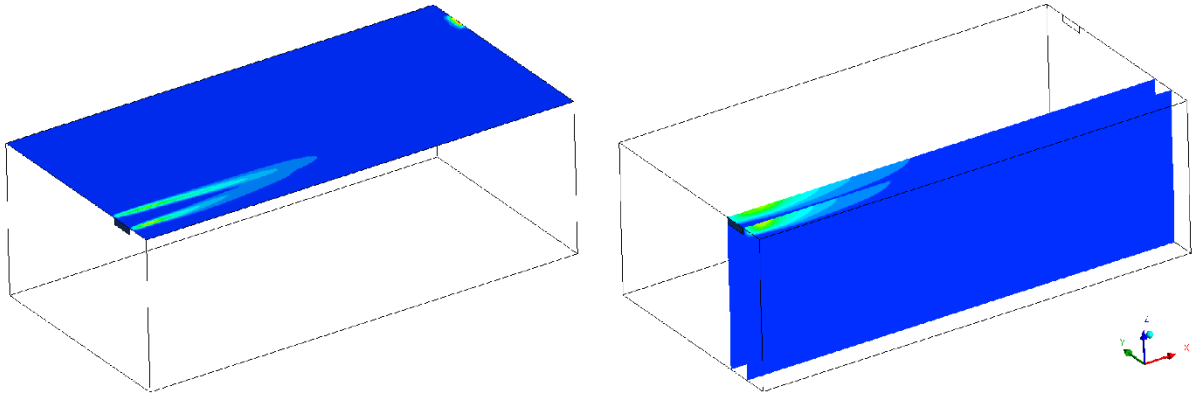


Figure III-11 : Dissipation de l'énergie cinétique turbulente ϵ ; à la surface libre de la cuve (gauche) et sur les plan XZ en Y=8 cm et 16 cm

III.2.4.4 Distribution de temps de séjour

La distribution de temps de séjour (DTS) est accessible expérimentalement et numériquement. Pour la DTS expérimentale le traceur choisi est de la rhodamine et le signal d'injection est une fonction de Dirac obtenue en larguant instantanément au niveau de l'entrée une vingtaine de millilitres de traceur depuis un bécher. Le temps de passage est de $\tau = \frac{V}{Q} = \frac{0{,}4606}{2{,}78\times10^{-4}} = 1657\ sec$ soit un peu moins d'une demi-heure. Le spectrofluorimètre est installé au niveau de la sortie. Pour la DTS numérique, l'écoulement est d'abord calculé à l'aide du modèle $RNG\ k-\epsilon$ puis une injection instantanée est réalisée au niveau de l'entrée. Pour modéliser le transport de traceur, le modèle « species transport » (méthode eulérienne) d'ANSYS Fluent a été utilisé. La Figure III-12 représente les courbes de DTS obtenues expérimentalement et numériquement. On constate un bon accord entre les deux méthodes.

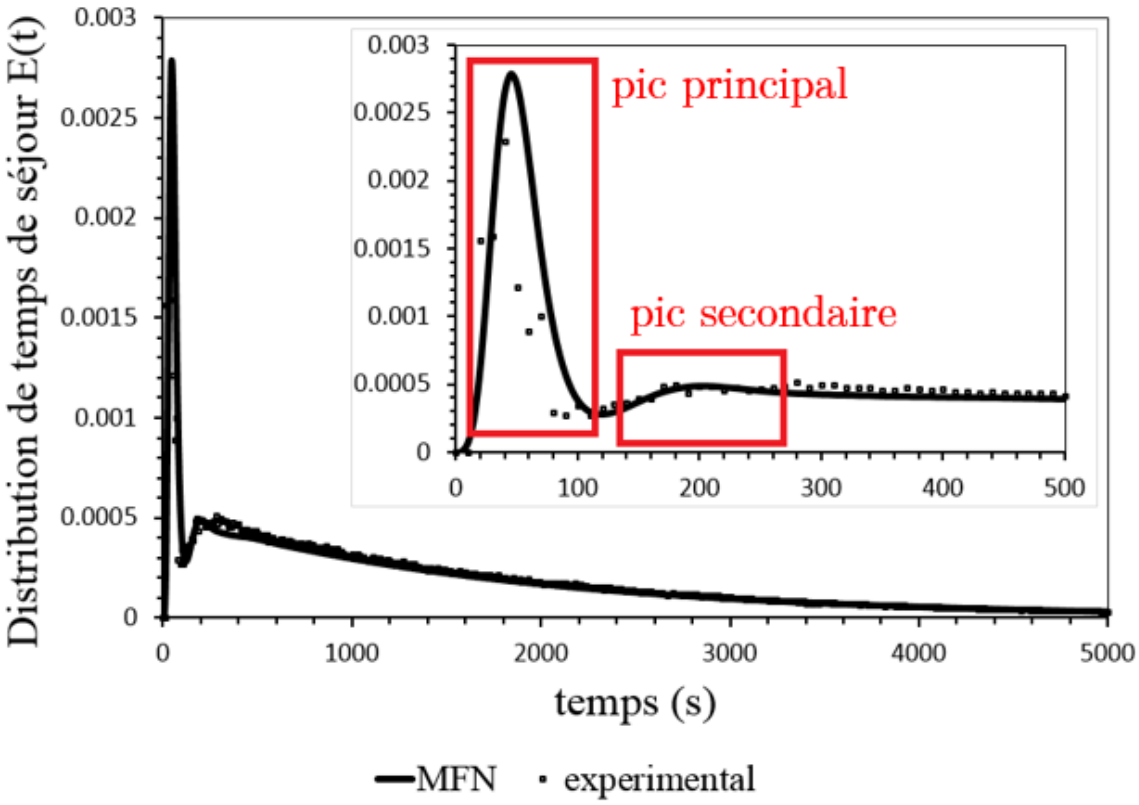


Figure III-12 : DTS obtenues par MFN et expérimentalement. (Moussoh, 2016)

Le temps auquel apparaît le pic principal correspond au temps de passage du fluide entre l'entrée et la sortie via le premier passage dans le jet d'alimentation. Seule une partie du fluide sort de la cuve directement tandis que l'autre partie recircule dans la zone où les vitesses sont plus faibles jusqu'à être de nouveau entraîné par le jet d'alimentation. Le temps auquel apparaît le second pic correspond au temps de passage du fluide entre l'entrée et la sortie avec un premier passage dans le jet d'alimentation, un temps de recirculation et un second temps de passage dans le jet d'alimentation. Le temps entre les deux pics correspond donc au temps de recirculation moyen du fluide au sein de la cuve. L'intensité du pic secondaire est plus faible que celle du pic principal puisque seule une partie du traceur recircule. L'étalement du pic secondaire représente la dispersion globale de la cuve, c'est pourquoi on observe une longue traînée dans la courbe de DTS.

III.2.4.5 Courbes de dispersion

L'étude de la dispersion est réalisée via l'injection d'un traceur au milieu de la surface (croix noire) et la détection aux points A, B, C et D (voir Figure III-13). Les courbes de dispersion du principe actif représentent l'évolution de la concentration du traceur au cours du temps. Les courbes de dispersion sont accessibles expérimentalement et numériquement. La Figure III-14 représente les courbes de dispersion numériques aux points A, B, C et D. Chacune des courbes

présente un pic principal, un pic secondaire suivi d'un creux, puis une longue traînée en fin de courbe. Les pics principaux mesurés aux points A et B apparaissent plus tôt que ceux des points C et D, car ils se trouvent plus en amont. Les trainées des points A et B présentent une aire sous la courbe plus faible que celles des points C et D. En effet, pour les deux courbes de dispersion aux points C et D, le traceur traverse une zone à faible vitesse favorable à la dispersion du traceur. Le point D est situé au niveau d'une boucle de recirculation c'est pourquoi la queue de courbe semble se prolonger à des niveaux de concentration assez élevés sous forme de « vagues » caractéristiques de recirculation à forte dispersion.

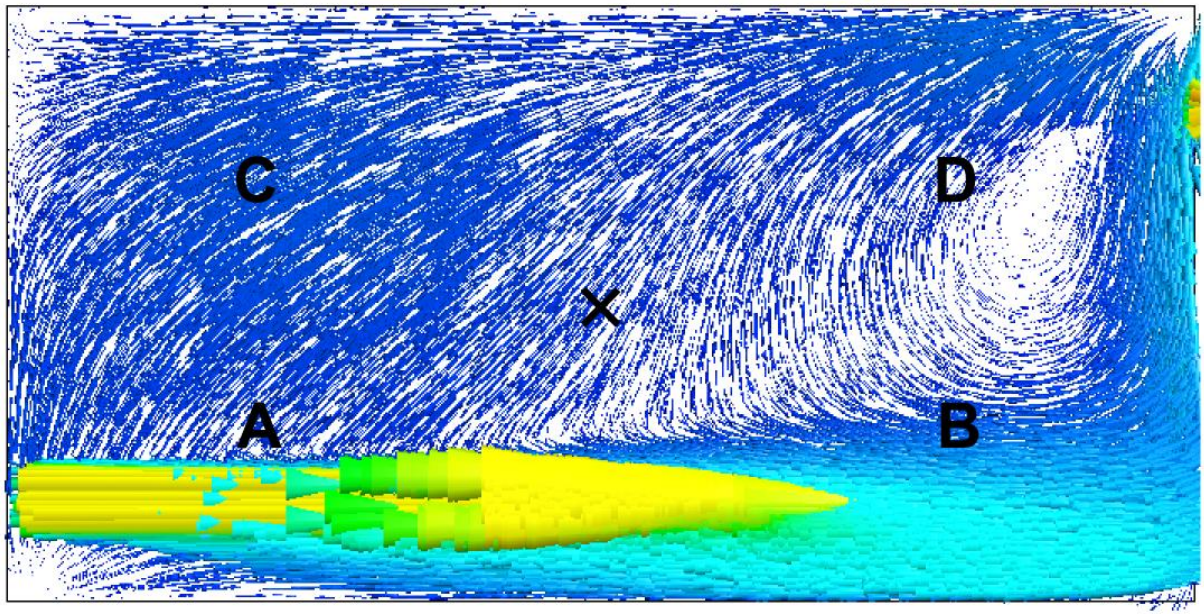


Figure III-13 : Champ de vitesse à la surface de la cuve. Pour l'étude de la dispersion : injection (croix noire) et détection aux points A, B, C et D

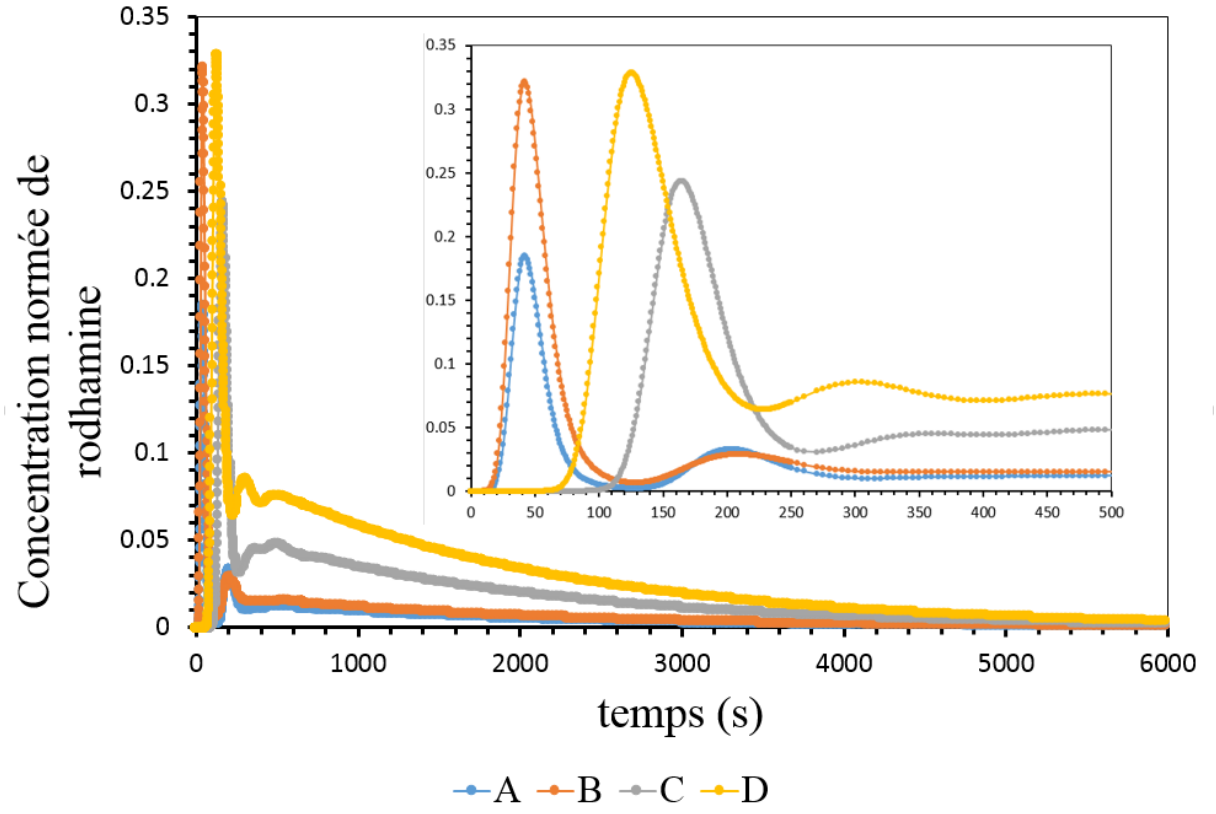


Figure III-14 : Courbe de dispersion numérique d'un traceur injecté au milieu de la surface et détecté aux points A, B, C et D. (Moussoh, 2016)

III.2.5 Intérêt pour la méthode générale

En nous appuyant sur les particularités d'écoulement illustrées dans les travaux de (Alvarado et al., 2012), nous avons choisi de sélectionner un étang à l'échelle pilote utilisé pour étudier la dispersion d'un principe actif de traitement des algues. L'écoulement est asymétrique dans les 3 dimensions avec de fortes variations de vitesses d'une zone à une autre comme le rappelle la Figure III-9. Un découpage en tranches identiques ne sera donc *a priori* pas aussi logique que dans les travaux de (Rigopoulos and Jones, 2003) et (Le Moullec et al., 2010). Nous avons vu par l'intermédiaire des travaux de (Guha et al. 2006) et (Gresch et al., 2009) que la vitesse de réaction chimique joue un rôle prépondérant sur le dimensionnement des compartiments lorsque les cinétiques sont rapides. Les cinétiques lentes de traitement des algues doivent être vues comme un degré de liberté qui ne fige pas le problème sur des critères de temps caractéristiques et va nous permettre de tester plusieurs découpages en tranches. Pour finir, l'objectif de l'étude ne consiste pas uniquement à modéliser le comportement hydrodynamique global et la DTS mais aussi à rendre compte de la dispersion du principe actif.

III.3 Méthode de construction du réseau de compartiments

Dans ce paragraphe, nous allons présenter la stratégie construction du réseau de compartiments (tranches identiques) ainsi que la manière dont sont calculés les échanges entre ces derniers (uniquement convectifs). L'objectif de ce travail n'est pas de trouver un modèle qui représente bien la DTS et les courbes de dispersion (même si c'est nécessaire) mais surtout de comprendre l'influence des données expérimentales disponibles sur le découpage et réciproquement l'influence du découpage sur les résultats de simulations obtenus afin d'asseoir la méthodologie et de comprendre ses limites.

III.3.1 Découpage en tranches identiques

L'intérêt d'un découpage en tranches identiques est son caractère systématique et généralisable à tout type de système. En outre, le calcul des différents paramètres est plus facilement généralisable.

Le cas d'application est un étang à l'échelle pilote dans lequel l'écoulement présente plusieurs dissymétries, (comme le montre la Figure III-9, la structure n'est pas régulière et on distingue deux niveaux de vitesses). Il s'agit d'un cas *a priori* non favorable à un découpage en tranches qui sera approprié pour tester le découpage le plus restrictif, à savoir un découpage en tranche à géométrie identique avec un réseau de compartiments de géométrie identique.

III.3.1.1 Tranche à Géométrie Identique avec un réseau de compartiments de géométrie identique : T_{GICI}

Comme le préconise la méthode (voir paragraphe II.2.1.1), on choisit la direction principale de l'écoulement pour la direction de tranchage, Figure III-15. On peut envisager des tranches d'épaisseur quelconque (sous-figure de gauche) ou des tranches d'égale épaisseur (sous-figure de droite). Comme nous souhaitons appliquer la méthode de découpage en tranches dans le cadre le plus restrictif possible (T_{GICI}), nous écartons les tranches d'épaisseur variable. Cette option sera testée plus tard dans ce chapitre. Dans ce chapitre nous notons $\boldsymbol{N_L}$ le nombre de compartiments (tranches) suivant la longueur de la cuve. Si on se réfère à la méthode développé au chapitre précédent, N_L est équivalent à $\boldsymbol{M}$, le nombre de sous-volume créés lors de l'étape de pré-découpage (voir paragraphe II.2.1). L'étape suivante consiste à créer un réseau identique de compartiments à l'intérieur de chaque tranche.

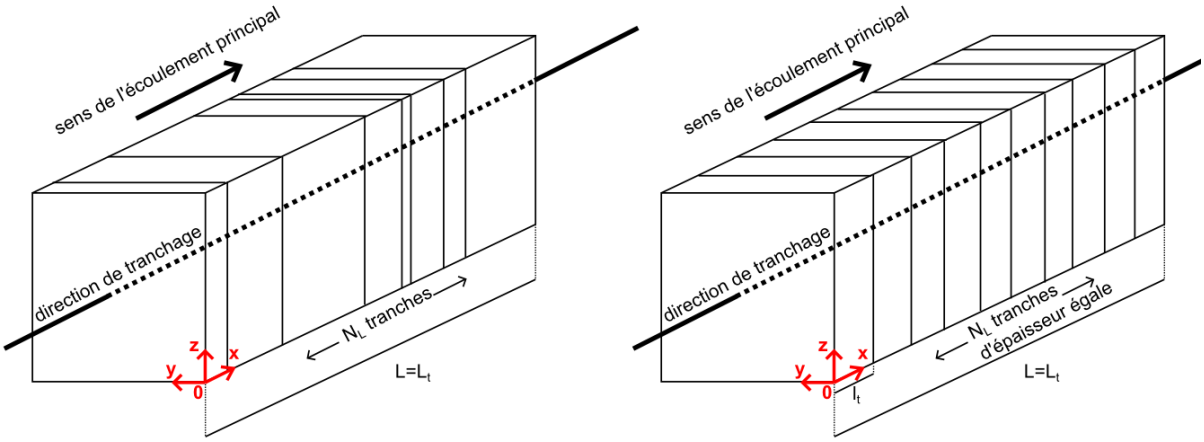


Figure III-15 : Schématisation d'un découpage en tranches dans la direction axiale du pilote. A gauche un exemple avec $N_L = 8$ tranches d'épaisseurs quelconques et à droite un exemple avec $N_L = 10$ tranches d'épaisseurs identiques.

III.3.1.2 Réseau de compartiments de géométrie identique dans chaque tranche

Application de la technique de division préconisée

Trois techniques de division ont été présentées dans la méthode (voir paragraphe II.2.2.2). Une technique basée sur un découpage purement géométrique et deux autres basées sur un découpage physique. Le modèle doit *a minima* correctement décrire la courbe de DTS mais aussi les courbes de dispersion d'un traceur injecté en surface. Au vu de la configuration (voir Figure III-2) et des faibles vitesses régnant dans le fond de la cuve, seule la surface doit être suffisamment raffinée. Un découpage géométrique est tout à fait possible comme nous l'avons signalé dans la méthode au paragraphe II.2.2.2, mais son application conduira à un maillage inutilement précis du volume de la cuve. Par ailleurs, nous avons souligné la forte hétérogénéité du champ de vitesses (Figure III-9) ce qui implique qu'un découpage quantitatif devrait être possible comme l'explique la méthode au même paragraphe.

Structure globale du modèle

Pour cette étude nous souhaitons ajouter une contrainte supplémentaire, concernant la géométrie des compartiments, qui permet de tester un modèle en T_{GICI} dans le cadre le plus défavorable possible. Cela permet de tester le plus sévèrement possible la robustesse de l'approche. On fixe la géométrie des compartiments comme rectangulaire. Par ailleurs, cela permet de s'affranchir de plusieurs contraintes techniques lors de la construction du modèle qui rendront possible le développement des algorithmes, qui est rappelons-le un objectif secondaire de ces travaux de thèse. Notons que, comme le montre la Figure III-9, la direction des courants à forte vitesse est parallèle aux parois latérales de la cuve. Par ailleurs on rappelle qu'un compartiment est par définition un volume où toutes les grandeurs pertinentes sont homogènes, donc l'un des critères du découpage sera de distinguer les zones à fortes et faibles vitesses. Ces

deux informations prises en compte permettent de supposer que la perte de précision liée aux compartiments rectangulaires sera acceptable. La Figure III-16 illustre le découpage que nous venons de décrire. Au sein d'une tranche on note :

- $\boldsymbol{N_h}$ le nombre de compartiments suivant la hauteur de la cuve et $\boldsymbol{h_m}$, avec m allant de 1 à N_h, les différentes hauteurs avec h_1 la hauteur de la couche représentant la surface
- $\boldsymbol{N_l}$ le nombre de compartiments suivant la largeur et $\boldsymbol{l_l}$, avec l allant de 1 à N_l, les différentes largeurs avec l_1 la largeur la plus à gauche
- $\boldsymbol{N_L}$ le nombre de compartiments suivant la longueur et $\boldsymbol{L_k}$, avec k allant de 1 à N_L, les différentes épaisseurs des tranches avec L_1 l'épaisseur de la première tranche. Remarque : Si on se réfère à la méthode développé au chapitre précédent, L_k est équivalent à l_t l'épaisseur (voir paragraphe II.2.1.1) des tranches.

Les tranches étant d'épaisseur identique on a :

$$L_k = \frac{L}{N_L} \qquad \text{[III.1]}$$

Les longueurs des compartiments dans la hauteur (h_m) et la largeur (l_l) ne sont *a priori* pas égales.

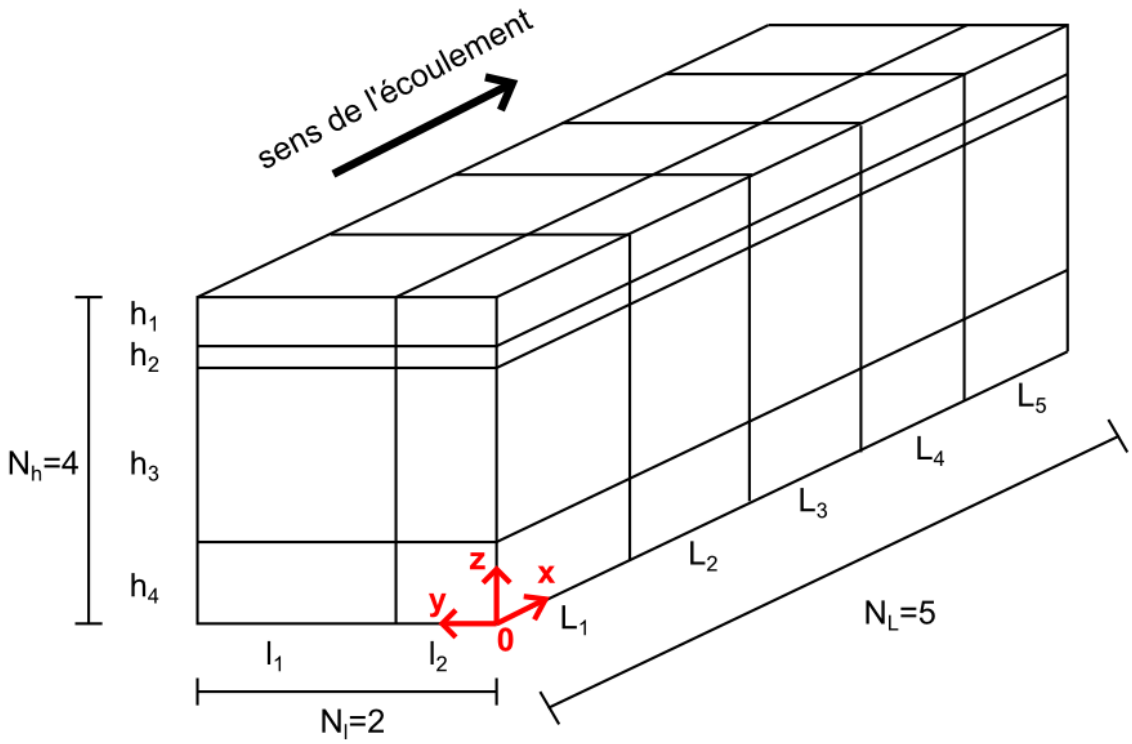


Figure III-16 : Exemple illustratif de découpage en $N_L = 5$ tranches d'égale épaisseur et un réseau de compartiments identiques dans chaque tranche. L'épaisseur de chaque tranche vaut $L_k = \frac{L}{N_L} = \frac{1{,}40}{5}$ mètre. Le nombre de compartiments vaut 4 suivant la hauteur (noté N_h) et 2 suivant la largeur (noté N_l).

A partir de cette structure, la problématique consiste à déterminer les paramètres N_L, N_h, N_l ainsi que les hauteurs h_m et largeur l_l de telle manière que le modèle rende compte d'une part de l'hydrodynamique globale caractérisée par la DTS et d'autre part de la dispersion du principe actif en surface caractérisée par les courbes locales de traçage.

III.3.1.3 Critères qualitatifs pour décrire la qualité du découpage

Le découpage doit produire des compartiments où toutes les grandeurs sont homogènes. Dans notre cas, nous avons fait le choix de distinguer deux niveaux de vitesses (voir Figure III-9). Le découpage est donc idéal lorsqu'il distingue au mieux les fortes et faibles vitesses. Nous avons observé que l'écoulement est très dissymétrique et un découpage en tranches identiques induit forcément l'apparition de compartiments hybrides où les fortes et faibles vitesses coexistent. Afin de donner un critère quantitatif pour juger de la qualité du découpage, nous définissons deux paramètres :

- Γ qui correspond à la fraction de surface (ou volume si on travaille en 3D) contenant la catégorie de vitesse prédominante (on a donc $0{,}5 < \Gamma < 1$). Le cas $\Gamma = 1$ correspond au cas où il n'y a que des vitesses fortes ou que des vitesses faibles, il s'agit du découpage idéal.
- Θ qui correspond au rapport du nombre de compartiments parfaits sur le nombre compartiments au total (on a donc $0 < \Theta < 1$) dans une zone donnée. Le cas $\Theta = 0$ correspond au cas où il n'y a que des compartiments hybrides et $\Theta = 1$ où il n'y a que des compartiments parfaits.

Nous faisons l'hypothèse (*hyp. 1*) que le découpage est optimal lorsque Γ et Θ dans une zone donnée tendent vers 1. Nous discuterons de la validité de cette hypothèse dans la suite de ce chapitre.

III.3.2 Echanges entre les compartiments

On rappelle que dans cette étude le débit convectif est constant car le débit d'entrée est fixe et qu'on ne s'intéresse pas à la partie transitoire de l'écoulement. D'une manière générale pour une espèce chimique i, le débit de matière Q_m entre deux compartiments ayant une surface d'échange commune est égal au débit volumique Q_v multiplié par la concentration C_i :

$$Q_m\left[\frac{mol}{s}\right] = Q_v\left[\frac{m^3}{s}\right] \times C_i\left[\frac{mol}{m^3}\right] \qquad \text{[III.2]}$$

Dans notre cas il n'y a qu'une espèce, le traceur. La conservation de la matière impose que la somme des débits de matière entrant dans chaque compartiment soit égale à la somme des débits sortants. La concentration du traceur C_i est l'inconnue qui est calculée numériquement

dans chaque compartiment grâce à dassl (le solveur numérique). Notre tâche préliminaire consiste à attribuer une valeur de débit volumique Q_v entre chaque couple de compartiments. Deux types de débit volumique peuvent être pris en compte, les débits convectifs Q_v^{conv} et les débits turbulents Q_v^{turb}. Les échanges convectifs Q_v^{conv} décrivent l'écoulement du fluide à travers le système. Ils sont orientés dans le sens de l'écoulement et sont donc unidirectionnels. Les échanges turbulents sont un moyen de rendre compte de la dispersion de la matière due à la turbulence de l'écoulement. Ils sont modélisés par des échanges bi-directionnels. Dans un premier temps, seuls les débits convectifs sont pris en compte car la majorité de la cuve ne présente pas de turbulence. Néanmoins, un paragraphe sera consacré à l'influence de la prise en compte de la turbulence.

Soient deux compartiments A et B échangeant de la matière à travers une surface commune S. L'échange convectif s'interprète comme un débit d'échange traversant la surface S dans un sens, comme le montre la Figure II-13. On détermine le débit convectif Q_v^{conv} de la manière suivante :

$$Q_v^{conv}\left[\frac{m^3}{s}\right] = S[m^2] \times < v^{conv} > \left[\frac{m}{s}\right] \qquad \text{[III.3]}$$

où S est l'aire de la surface d'échange, et $< v^{conv} >$ la vitesse moyenne du fluide traversant la surface. Les surfaces d'échanges sont toutes définies dans le logiciel ANSYS Fluent et il est possible d'y calculer la vitesse moyenne qui les traverse. En multipliant la vitesse moyenne par la surface on obtient le débit volumique convectif entre deux compartiments ayant une face commune. De cette manière, l'écoulement est quantitativement pris en compte.

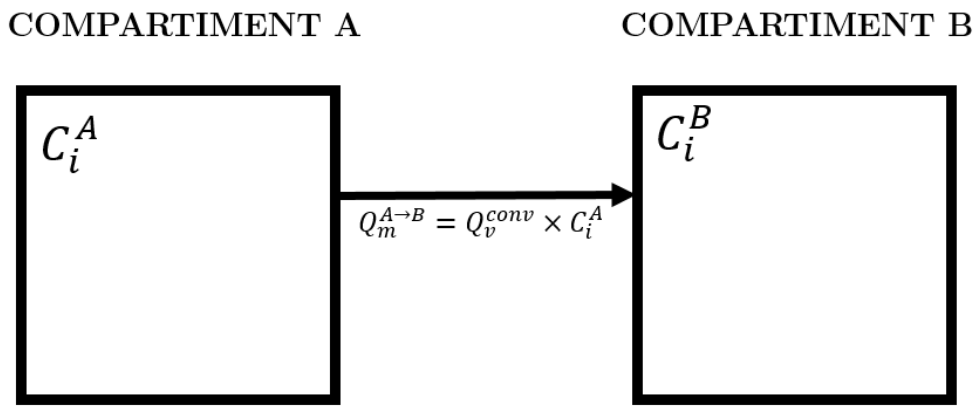


Figure III-17 : Schématisation de l'échange convectif entre deux compartiments

III.4 Description de l'hydrodynamique globale

Dans une première étape, le modèle doit *a minima* être représentatif de l'hydrodynamique globale caractérisée par la DTS (voir Figure III-12). Nous devons donc comprendre comment le choix du découpage influe sur l'écoulement global et pour cela analyser localement les grandes tendances de l'écoulement.

III.4.1 Découpage basé sur le champ de vitesse

III.4.1.1 Méthodologie de découpage

Nous allons découper le volume de la cuve en un réseau de compartiments organisés en T_{GICI}. Pour cela nous prendrons en compte le champ de vitesse et l'objectif du modèle. N'oublions pas que l'objectif d'un modèle à compartiment consiste à réduire autant que possible se peut le nombre total de compartiment. Le raisonnement de découpage suit plusieurs étapes :

1. On anticipe la problématique de la modélisation de la dispersion d'un traceur en surface. La position des points de détection et de l'injection expérimentaux (A, B, C et D et la croix sur la Figure III-2) impose quelques contraintes techniques. Afin qu'un compartiment englobe le plus petit volume possible autour de ces points le nombre de compartiments dans la longueur et la largeur doit être impair (cette contrainte existe car on souhaite avoir le nombre de compartiment le plus petit possible). D'autre part la description du fond de la cuve n'a pas besoin d'être autant raffiné qu'en surface.
2. La hauteur de la cuve est découpée en deux épaisseurs : $N_h = 2$. La hauteur de la première couche, notée h_1, sert à décrire la surface de le la cuve et est définie de manière à séparer au mieux les fortes et les faibles vitesses sur toute la longueur de la cuve.
3. Aucun phénomène de micro-mélange n'ayant lieu on peut fixer une taille minimale des compartiments comme on le souhaite. Cette taille est définie par rapport aux dimensions de l'entrée et la sortie, c'est-à-dire $l_l \geq 8\ cm$ et $h_1 \geq 2\ cm$.
4. Comme la largeur de la cuve vaut $l = 0{,}7\ m$, on découpe la largeur en $N_l = 7$ compartiments avec $l_1 = l_2 = l_3 = l_5 = l_6 = l_7 = 8\ cm$ et $l_4 = 22\ cm$. Cela permet d'avoir les points de détection A, B, C et D dans le plus petit volume possible tout en gardant une bonne description du jet d'entrée (un découpage en trois compartiments aurait décrit le jet d'entrée de manière trop grossière).
5. La dernière étape consiste à déterminer le nombre de tranches N_L.

III.4.1.2 Détermination de la hauteur de la couche de surface h_1

Pour fixer la hauteur de la couche englobant la surface libre, c'est-à-dire le paramètre h_1, nous analysons le profil de vitesse sur le plan XZ en Y=12 cm (milieu de l'entrée). L'objectif est de trouver la hauteur qui sépare la zone de fortes vitesses en surface et celle des faibles vitesses

dans la partie inférieure de la cuve. La Figure III-18 représente ce plan avec trois lignes rouges correspondant aux trois hauteurs h_1 qui semblent physiquement pertinentes :

- $\boldsymbol{h_1 = 6\ cm}$ est la hauteur qui n'intègre que de fortes vitesses et le jet d'entrée. Toutes les fortes vitesses ne sont pas incluses dans cette zone.
- $\boldsymbol{h_1 = 12\ cm}$; cette hauteur inclut la plus grande partie des fortes vitesses mais on y retrouve des vitesses faibles situées sous l'entrée.
- $\boldsymbol{h_1 = 18\ cm}$; on intègre la totalité des fortes vitesses jusqu'au bout de la cuve mais le rapport fortes/faibles vitesses est proche de 50%.

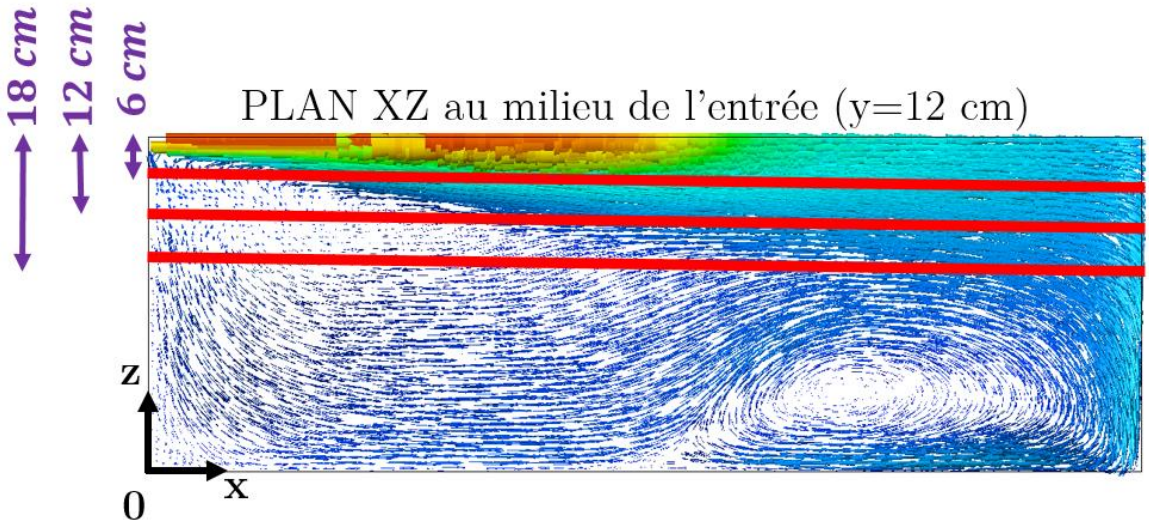


Figure III-18 : Champ de vitesse sur le plan vertical XZ placé au milieu de l'entrée (Y=12cm). $h_1 = 6 - 12 - 18\ cm$

Il n'est pas possible d'avoir une surface horizontale qui sépare rigoureusement les fortes et les faibles vitesses. Il s'agit d'une contrainte liée aux tranches identiques qui n'est pas étonnante puisque le cas traité a été spécialement choisi pour être défavorable au découpage en tranches identiques. Un des objectifs de cette étude est de comprendre quel est le meilleur compromis. A ce stade, nous n'avons pas d'autre possibilité que de faire un choix selon l'intuition. La configuration la plus adaptée nous semble être $h_1 = 12\ cm$.

III.4.1.3 Optimisation du nombre de tranches N_L

Nous venons de procéder à un découpage basé sur l'analyse des champs de vitesses et des expériences de dispersion. La méthodologie de découpage en tranches identiques laisse un degré de liberté, le nombre total de tranche N_L qui doit être déterminé. La solution qui fonctionnera toujours est de réaliser une optimisation mathématique du nombre de tranches N_L. Dans notre cas particulier, il est possible de choisir des valeurs de N_L qui nous semblent les plus pertinentes grâce à la forte hétérogénéité du champ de vitesses. De plus, comme l'un des objectifs de cette

étude consiste à analyser l'influence du découpage sur la qualité des résultats, nous ne souhaitons pas réaliser une optimisation mathématique qui nous fournirait uniquement le nombre de tranches optimal sans possibilité de discussion. Sauf si cela s'avère nécessaire de par une répartition des grandeurs pertinentes très particulière, il est aberrant d'avoir une des dimensions des compartiments qui est démesurée par rapport aux autres. Dans notre cas, on souhaite garder une forme de compartiment dont la longueur (l'épaisseur des tranches L_k) est du même ordre de grandeur que la hauteur (h_m) et la largeur (l_l). On rappelle que pour des raisons pratiques liées à la localisation de l'injection et des capteurs, on souhaite avoir un nombre impair de tranches (cette contrainte disparaît si le nombre de tranches est suffisamment important mais nous n'étudierons pas ce cas). Les valeurs plausibles sont donc $N_L = 3;\ 5\,;7\,;9\,;11$. En gardant à l'esprit que l'on souhaite trouver un optimum entre temps de calcul et finesse de résultats, nous ne souhaitons pas avoir un nombre trop grand de tranches qui augmenterait inutilement le temps de calcul ou un nombre trop petit de tranches qui amputerait la précision des données modélisées. Pour cette raison nous écartons les bornes extrêmes ($N_L = 3$ et $N_L = 11$) pour lesquelles on peut supposer que le modèle ne sera pas efficace. Nous choisissons d'initier le nombre de tranches à $N_L = 7$ car c'est la valeur centrale des possibilités restantes.

La Figure III-19 représente le champ de vitesse dans le plan vertical (plan Oxz) situé au milieu de l'entrée (description de l'écoulement dans ce plan sur Figure III-6). De la même manière la Figure III-20 représente le champ de vitesse sur le plan horizontal (plan Oxy) coïncidant avec la surface libre (description de l'écoulement dans ce plan sur la Figure III-5). Les traits rouges correspondent aux découpages que nous avons choisi de tester. Remarque : nous étudions ici l'influence du découpage sur la qualité des résultats hydrodynamique (via la DTS) et il n'est donc pas nécessaire de prendre en compte les contraintes techniques liées à la dispersion. Les cas $N_L = 4$ et $N_L = 14$ sont des simulations que nous avons réalisé en amont et c'est pour cela que nous les présentons ici.

- $\boldsymbol{N_L = 4}$ (Épaisseurs des tranches identiques) : valeur inférieure à $N_L = 7$ pour tester l'influence d'une diminution du nombre de tranches. On a $L_k = \frac{L}{4} = \frac{140}{4} = 35\ cm$.
- $\boldsymbol{N_L = 7}$ (Épaisseurs des tranches identiques) : valeur candidate la plus plausible parmi les valeurs possibles lorsqu'on prend en compte la problématique de la dispersion ($N_L = 3;\ 5\,;7\,;9\,;11$). On a $L_k = \frac{L}{7} = \frac{140}{7} = 20\ cm$.
- $\boldsymbol{N_L = 14}$ (Épaisseurs des tranches identiques) : valeur supérieure à $N_L = 7$ pour tester l'influence d'une augmentation du nombre de tranches. On a $L_k = \frac{L}{14} = \frac{140}{14} = 10\ cm$.

Les zones de fortes et faibles vitesses que nous avons définies (voir Figure III-9) sont surlignées en rouge et en bleu respectivement. Cela permet de définir Γ sur chaque surface du découpage du plan :

- Voir Annexe B page 285 pour le plan vertical (Figure III-19): Tableau 18 pour $N_L = 4$, Tableau 19 pour $N_L = 7$, Tableau 20 pour $N_L = 14$).

- voir Annexe B page 286 pour le plan horizontal (Figure III-20) : Tableau 21 pour $N_L = 4$, Tableau 22 pour $N_L = 7$, Tableau 23 pour $N_L = 14$).

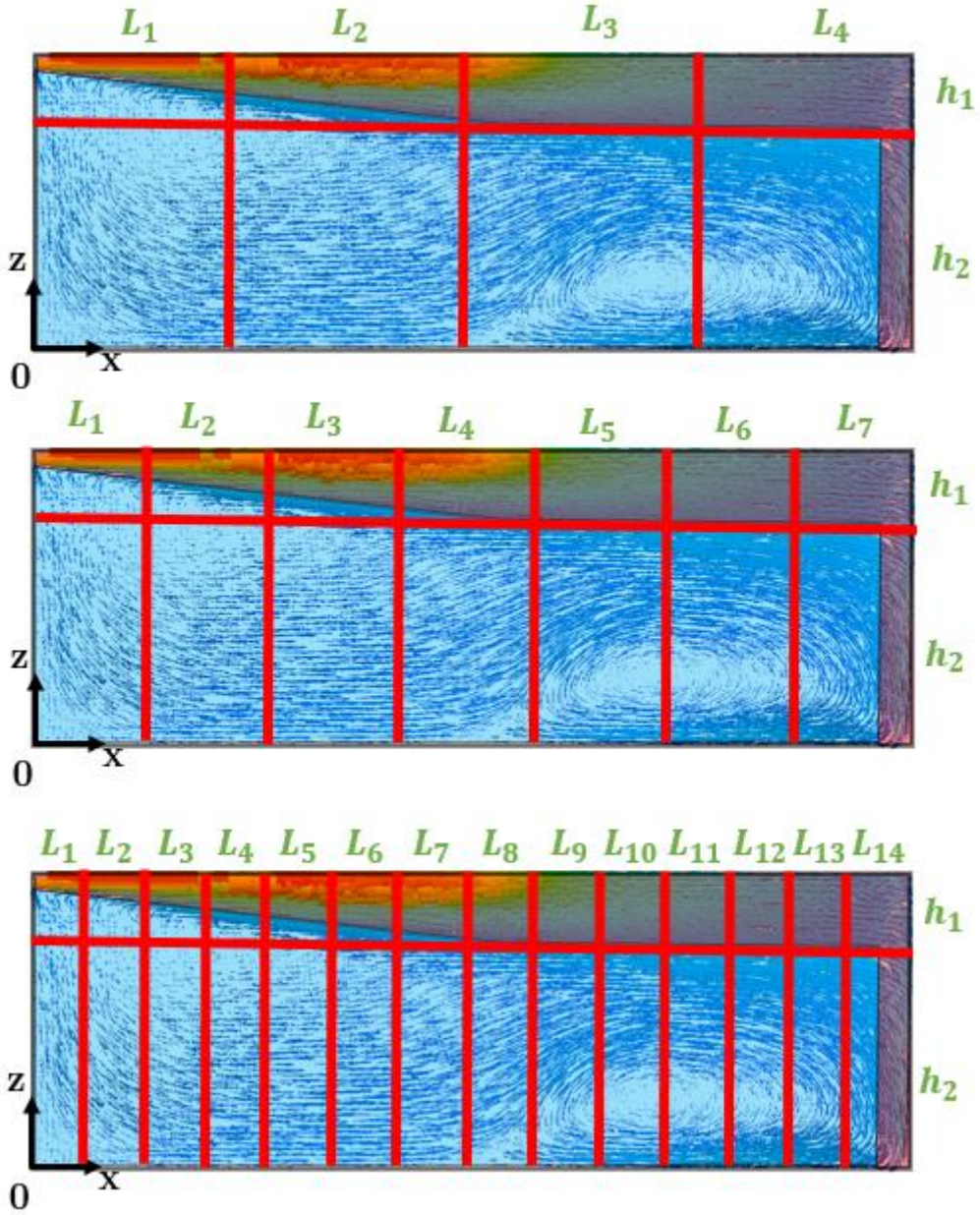


Figure III-19 : Champs de vitesse dans le plan vertical (Oxz) placé au milieu de l'entrée en $y = 12\ cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : $N_L = 4$. AU MILLIEU : $N_L = 7$. EN BAS : $N_L = 14$.

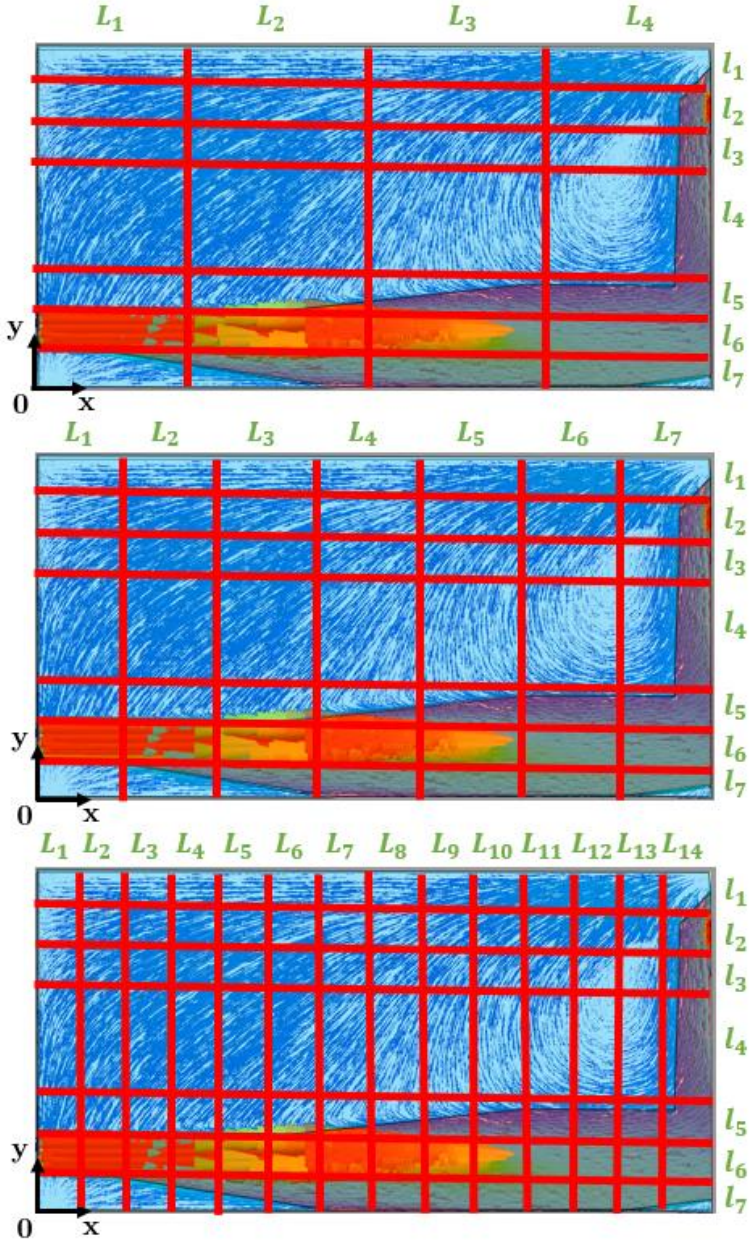


Figure III-20 : Champ de vitesse dans le plan horizontal (Oxy) à la surface libre en $z = 47\,cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : $N_L = 4$. AU MILLIEU : $N_L = 7$. EN BAS : $N_L = 14$.

Analyse quantitative des paramètres Γ et Θ

Nous avons calculé la moyenne arithmétique de Γ (noté $<\Gamma>$) et la valeur de Θ sur toute la surface pour les différentes valeurs de N_L testées (voir Tableau III-1 correspondant à la Figure III-19 et Tableau III-2 correspondant à la Figure III-20). On constate que $<\Gamma>$ est toujours supérieur à 90% mais que plus on raffine le découpage, plus $<\Gamma>$ augmente, en particulier sur la surface libre (Tableau III-2) où on atteint une valeur de 97% pour $N_L = 14$ tranches. La fraction de compartiments parfaits Θ est aussi notablement améliorée lorsqu'on raffine le découpage. D'après l'hypothèse (*hyp. 1)* réalisée au paragraphe III.3.1.3 page 168, le découpage est optimal lorsque $<\Gamma>$ et Φ tendent vers 1. Cela signifie que la qualité du découpage est d'autant meilleure que le nombre de compartiments est important. Nous vérifierons cela ultérieurement.

Tableau III-1 : Valeurs moyennes de Γ et valeurs de Φ calculées sur l'ensemble du plan vertical (Oxz) passant par le milieu de l'entrée ($y = 12\ cm$) pour les différentes valeurs de N_L testées.

	$N_L = 4$	$N_L = 7$	$N_L = 14$
$<\Gamma>$	0,91	0,90	0,92
Θ	0,63	0,64	0,74

Tableau III-2 : Valeurs moyennes de Γ et valeurs de Φ calculées sur la surface libre (Oxy) pour les différentes valeurs de N_L testées.

	$N_L = 4$	$N_L = 7$	$N_L = 14$
$<\Gamma>$	0,94	0,94	0,97
Θ	0,64	0,76	0,82

Analyse des courbes de DTS

La Figure III-21 représente les courbes de DTS pour les différentes valeurs de N_L testées ainsi que la DTS numérique provenant de la MFN. Aucune des courbes issues de la modélisation compartimentale ne s'ajuste parfaitement à la courbe de MFN. On observe que les courbes avec $N_L = 14$ tranches et $N_L = 9$ tranches (résultat non présenté) sont presque identiques (les commentaires faits pour $N_L = 14$ seront donc valables pour $N_L = 9$ tranches).

Concernant :

- <u>La « montée » vers le pic principal :</u> quelle que soit la valeur de N_L la montée est en retard par rapport à la MFN.
- <u>L'intensité et la dispersion du pic principal :</u> On observe des différences notables avec la MFN. Lorsque N_L augmente, on observe que la hauteur du pic principal augmente et sa dispersion diminue. Cela s'explique par le fait que lorsqu'on augmente le nombre tranches, la dispersion numérique résultante diminue et on s'approche d'un comportement de type piston. Pour $N_L = 4$ la dispersion est très importante et le pic principal apparaît au bout de 80 secondes au lieu de 45 secondes soit un retard de 35

secondes. Pour $N_L = 14$ le pic principal n'est pas retardé et la dispersion correspond à celle de la MFN. Pour $N_L = 7$ il y a un léger retard de 5 secondes et la dispersion est légèrement plus importante que pour la MFN.

- La « descente » du pic principal et le « creux » de courbe : Pour $N_L = 14$ il y a une très bonne correspondance avec la MFN. Pour $N_L = 7$ la « descente » est retardée et le modèle sous-estime le « creux ». Pour $N_L = 4$ le modèle ne représente ni la « descente » ni le « creux » de la courbe.
- Pic secondaire : Le pic secondaire correspond relativement bien à celui de la MFN pour $N_L = 4$ mais pour les trois autres courbes il est surestimé.
- La « traînée » de la courbe aux temps longs : elle est bien représentée à partir de 300 secondes quel que soit le nombre de tranches. Cela peut s'expliquer par le fait que dans le fond de la cuve les compartiments sont homogènes en vitesses ($\Gamma = 1$) et donc que le volume de recirculation à faible vitesse est bien représenté.

Pour résumer, trop diminuer N_L a pour effet de retarder fortement l'apparition du pic principal et augmenter sa dispersion et trop augmenter N_L a pour effet de légèrement surestimer l'effet piston du jet principal mais améliore la description des effets liés à la recirculation.

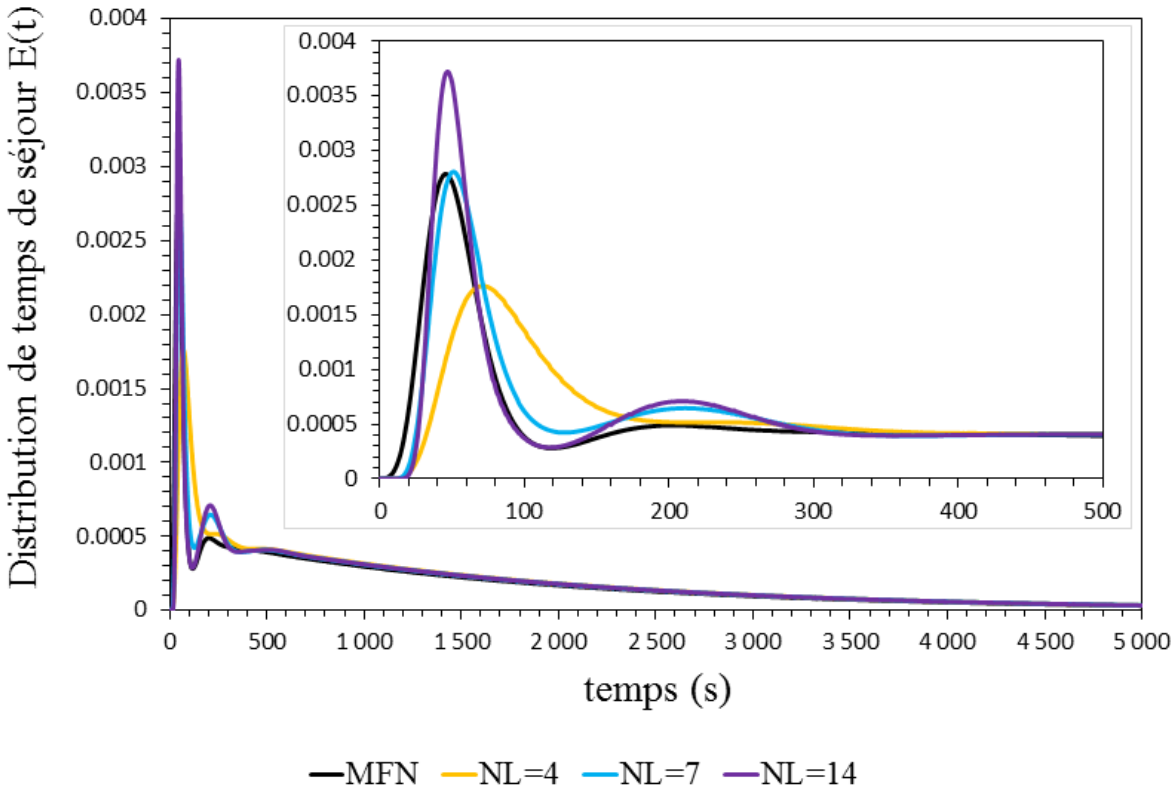


Figure III-21 : Courbes de DTS pour différents nombres de tranches ($N_L = 4 - 7 - 14$) ; $N_l = 7$; $N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$.

Conclusions

Nous avons observé qu'augmenter le nombre de tranches (et donc le nombre de compartiments) faisait tendre $<\Gamma>$ et Φ vers 1. L'hypothèse réalisée au paragraphe III.3.1.3 page 168 (*hyp. 1*) suppose que le découpage est optimal lorsque $<\Gamma>$ et Φ tendent vers 1 n'est donc pas invalidée. En revanche, nous avons également observé sur les courbes de DTS qu'augmenter le nombre de tranches n'améliorait pas la qualité de la DTS, au contraire. Nous n'avons donc pas pu donner des critères quantitatifs concernant les grandeurs Γ et Φ permettant de juger de la qualité du découpage et l'hypothèse (*hyp. 1)* réalisée au paragraphe III.3.1.3 page 168 ne semble pas pouvoir être validée. C'est pourquoi nous n'utiliserons plus les paramètres $<\Gamma>$ et Φ pour étudier la qualité du découpage. Pour conclure le cas $N_L = 7$ tranches donne la meilleure DTS.

III.4.1.4 Modèle fourni par application directe de la méthode générale avec un découpage en tranches identiques

La méthodologie de découpage en tranches identiques a été appliquée avec succès sur notre cas a priori défavorable et nous avons réussi à construire un modèle à compartiments qui permet d'illustrer de manière acceptable les tendances globales de l'écoulement. La Figure III-22 représente les trois plans que nous avons sélectionnés pour décrire l'écoulement dans la banque de données (Figure III-5, Figure III-6, Figure III-7). Le découpage optimal est présenté en trait rouge (voir

Tableau III-3) à savoir $N_L = 7$ tranches dans la direction axiale (voir taille des L_i Tableau III-4), $N_l = 7$ compartiments dans la largeur de la cuve (voir taille des l_i Tableau III-5) et $N_h = 2$ compartiments dans la hauteur (voir tailles des h_i Tableau III-6). On constate sur la Figure III-22 au niveau de la surface libre que le découpage prend bien en compte la localisation du point d'injection et des points de détection expérimentaux pour pouvoir modéliser les courbes de dispersion. La Figure III-23 est un schéma du modèle que nous venons de décrire. La Figure III-24 représente les courbes de DTS provenant de la MFN et du modèle en tranches identiques (courbes identiques à celles de la Figure III-21). L'étape suivante consiste à étudier l'influence du découpage des zones jugées secondaires sur la description de l'écoulement (les courbes de DTS).

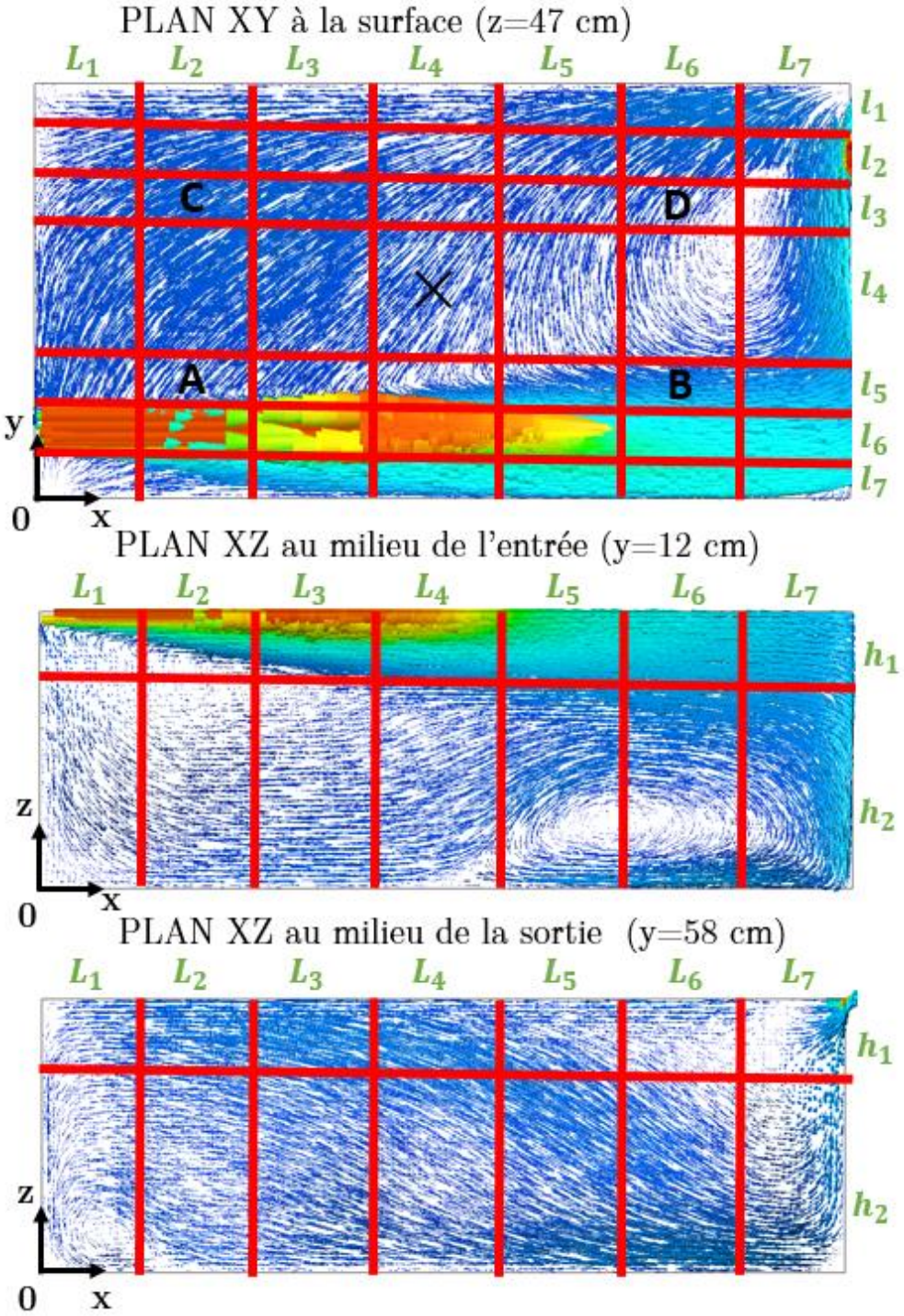


Figure III-22 : De haut en bas les champs de vitesse sur la surface libre (le plan XY en $z = 47\ cm$), dans le plan vertical au milieu de l'entrée (le plan XZ en $y = 12\ cm$) et dans le plan vertical au milieu de la sortie (le plan XZ en $y = 58\ cm$). En trait rouge le découpage en tranches identiques pour la configuration optimale : $N = 7$; $N_l = 7$ avec $l_1 = l_2 = l_3 = l_5 = l_6 = l_7 = 8\ cm$ et $l_4 = 22\ cm$; $N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$.

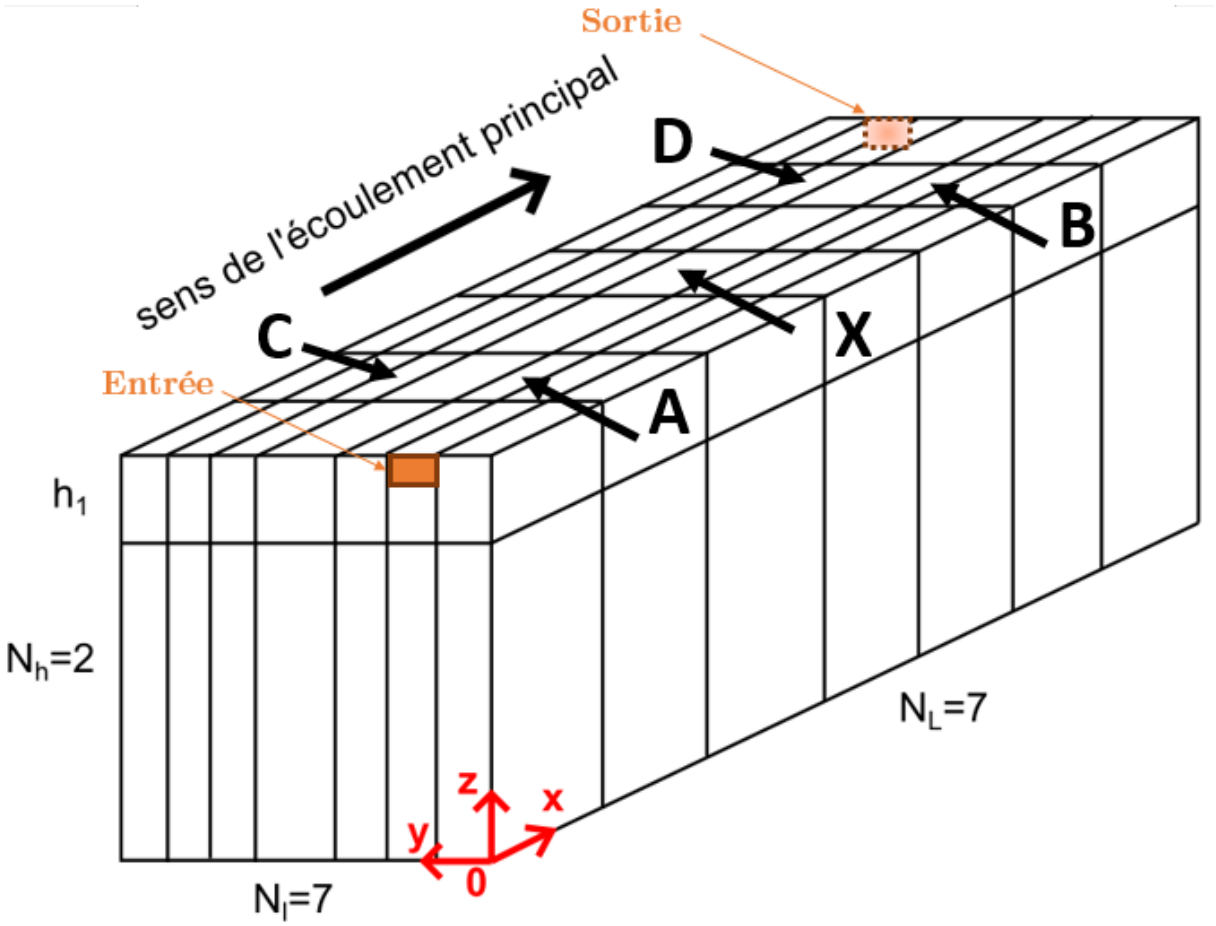


Figure III-23 : Structure générale du modèle à compartiments en tranche ; $N_l = 7$ *;* $N_h = 2$ *;* $L_{comp} = \frac{1,40}{N_L}$ *mètre ;* $h_1 = 12\ cm$

Tableau III-3 : Nombre de compartiments dans la longueur (nombre de tranches N_L*), dans la largeur (*N_l*) et dans la hauteur (*N_h*)*

	N_L	N_l	N_h
Nombre	7	7	2

Tableau III-4 : Dimension des compartiments dans la direction axiale (l'épaisseur des tranches L_i*)*

	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_7
Taille (cm)	$\frac{L}{N_L} = 20$	$\frac{L}{N_L} = 20$	$\frac{L}{N_L} = 20$	$\frac{L}{N_L} = 20$	$\frac{L}{N_L} = 20$	$\frac{L}{N_L} = 20$	$\frac{L}{N_L} = 20$

Tableau III-5 : Dimension des compartiments dans la largeur de la cuve (l_i)

	l_1	l_2	l_3	l_4	l_5	l_6	l_7
Taille (cm)	8	8	8	22	8	8	8

Tableau III-6 : Dimension des compartiments dans la hauteur de la cuve (h_i)

	h_1	h_2
Taille (cm)	12	$H - h_1 = 35$

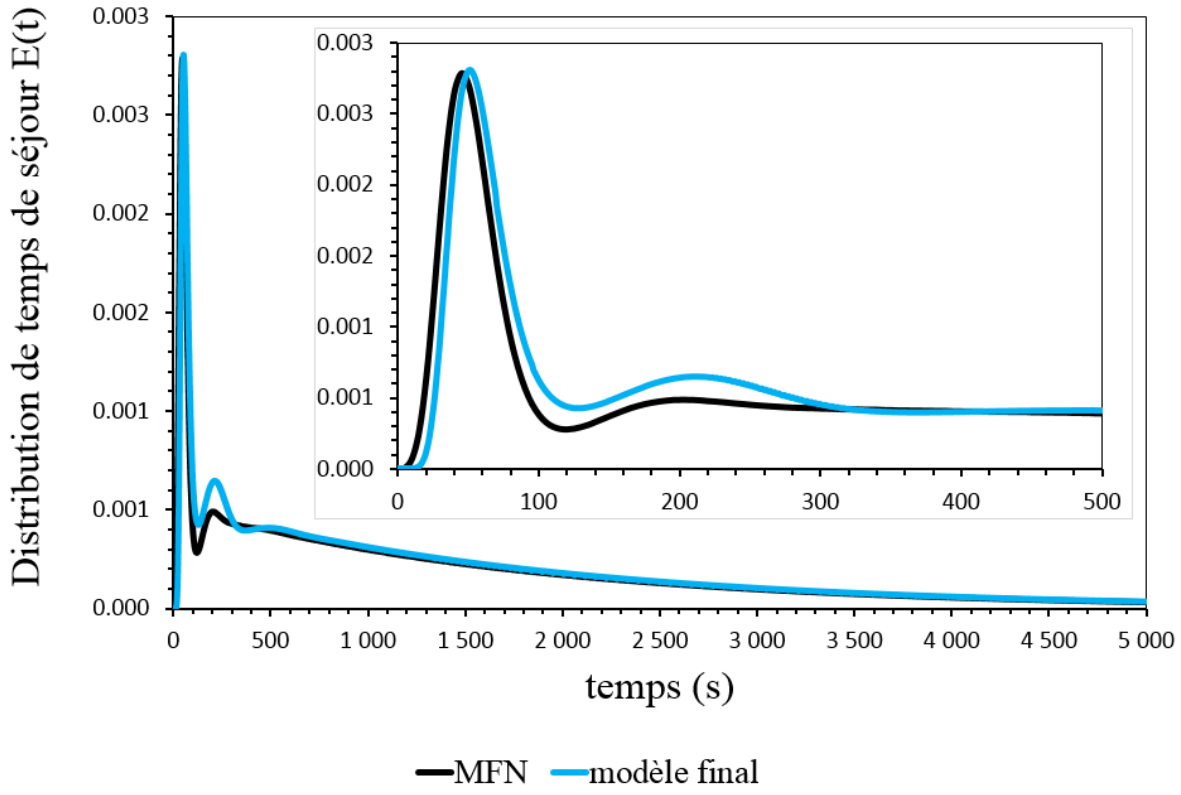


Figure III-24 : DTS optimale fournie par le modèle ($N_L = 7$; $N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$; $N_l = 7$ avec $l_1 = l_2 = l_3 = l_5 = l_6 = l_7 = 8\ cm$ et $l_4 = 22\ cm$).

III.4.2 Etude de l'influence des zones de découpage secondaires sur l'écoulement

Nous venons de construire un modèle simplifié qui représente de façon acceptable la DTS en s'appuyant sur les zones les plus influentes de l'écoulement. Nous approfondissons maintenant l'étude en nous intéressant aux caractéristiques a priori moins importantes du modèle, à savoir le nombre de compartiments dans la largeur N_l et l'épaisseur de la couche supérieure h_1. On étudiera également l'utilité d'ajouter une couche intermédiaire dans la hauteur, c'est-à-dire $N_h = 3$. Afin de tester l'hypothèse réalisée au paragraphe III.3.1.3 page 168 (hyp. 1 : le découpage est optimal lorsque $< \Gamma >$ et Φ tendent vers 1) nous allons procéder à différents découpages de type géométrique conduisant à un grand nombre de compartiments. Nous allons également étudier l'utilité de construire des tranches d'épaisseur variable au niveau des parois d'entrée et de sortie du fluide. Cette étude permettra de comprendre comment le découpage influe sur la qualité des résultats. Dans tout ce paragraphe l'étude d'un paramètre en particulier nécessite de garder constant les autres paramètres du modèle qui sont fixés à leurs valeurs de référence (voir

Tableau III-3, Tableau III-4, Tableau III-5, Tableau III-6).

III.4.2.1 Influence de la hauteur de couche supérieure h_1

Nous souhaitons étudier l'influence de l'épaisseur de la couche de surface h_1. Le reste du découpage est fixé à $N_l = 7$; $N_h = 2$; $N_L = 7$. C'est un paramètre important puisque c'est dans cette zone que l'on va étudier la dispersion du principe actif.

La Figure III-25 représente le champ de vitesse dans le plan vertical (plan Oxz) au milieu de l'entrée (description de l'écoulement dans ce plan sur Figure III-6) avec trois découpages différents ($h_1 = 6 - 12 - 18\ cm$: voir paragraphe III.4.1.2 page 170 pour la justification de ces valeurs). Les zones fortes et faibles vitesses sont surlignées en rouge et en bleu respectivement.

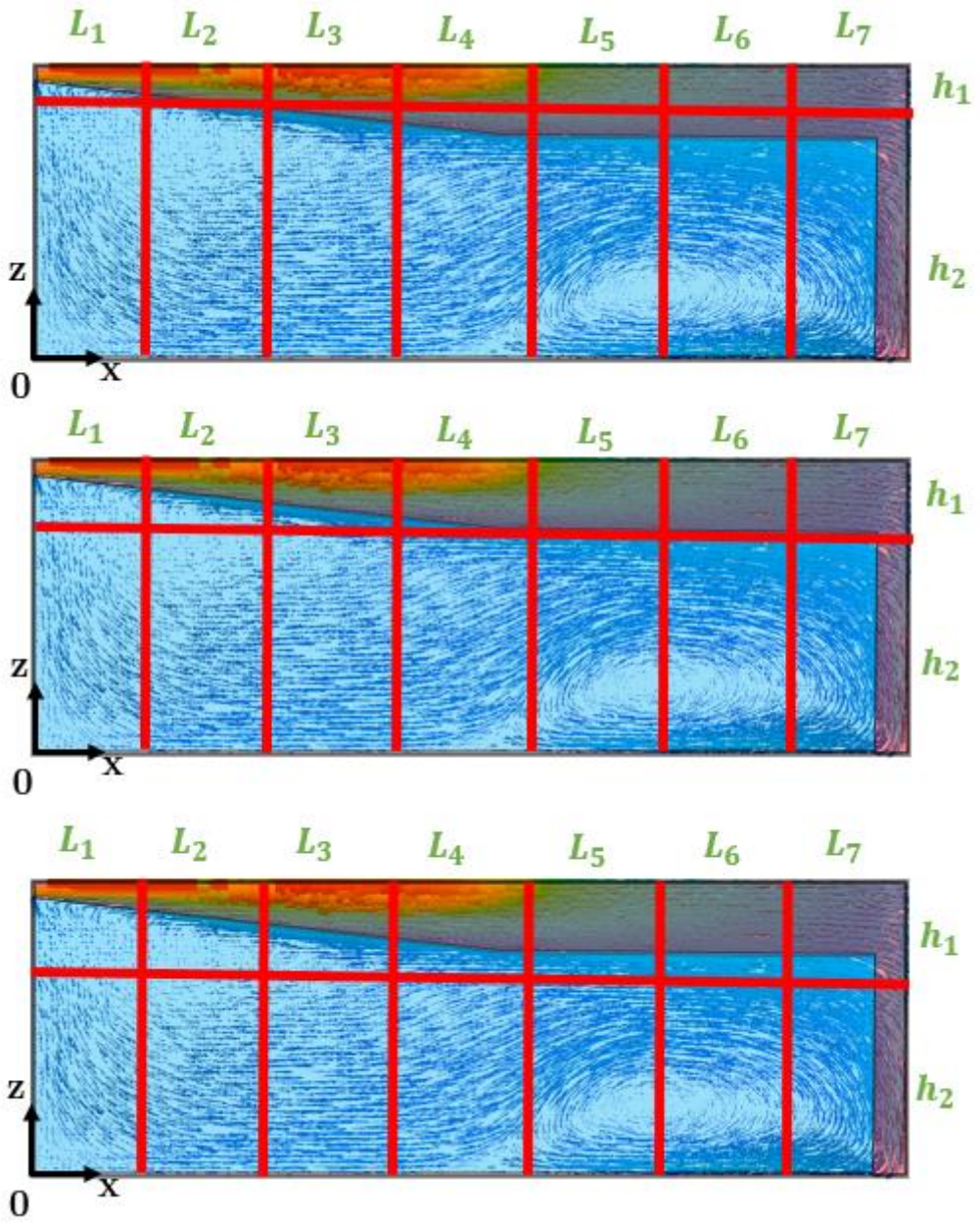


Figure III-25 : Champ de vitesse dans le plan vertical (Oxz) au niveau de l'entrée ($y = 12\ cm$). Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : $h_1 = 6\ cm$. AU MILLIEU : $h_1 = 12\ cm$. EN BAS : $h_1 = 18\ cm$.

Analyse des courbes de DTS

La Figure III-26 représente les courbes de DTS pour les différentes valeurs de h_1 testées ainsi que la DTS numérique provenant de la MFN. Aucune des courbes ne s'ajuste parfaitement à la courbe de MFN.

Concernant :

- La « montée » du pic principal : Plus h_1 augmente plus la montée est retardée. Cela s'explique par le fait que plus h_1 augmente, plus le volume de la couche de surface augmente et plus le temps de séjour est élevé dans la zone d'écoulement principal.
- L'intensité et la dispersion du pic principal : On observe des différences notables avec la MFN. Lorsque h_1 augmente, on observe que la hauteur du pic principal diminue et sa dispersion augmente. Pour $h_1 = 6\ cm$ le pic principal apparaît au même instant que celui de la MFN, à savoir à 45 secondes. Pour $h_1 = 12\ cm$ le retard est d'environ 5 secondes et pour $h_1 = 18\ cm$ le retard est d'environ 10 secondes.
- La « descente » du pic principal et le « creux » : Pour $h_1 = 6\ cm$ le modèle ne représente ni la « descente » ni le « creux » de la courbe. Pour $h_1 = 12\ cm$ et $h_1 = 18\ cm$ il y a une bonne correspondance dans la descente de la courbe mais les creux sont surestimés.
- Pic secondaire : Pour $h_1 = 6\ cm$ le pic secondaire est bien représenté mais il est difficile de faire la différence entre le pic secondaire et la trainée de la courbe à cause de l'absence du « creux ». Pour $h_1 = 12\ cm$ et $h_1 = 18\ cm$ le pic secondaire est surestimé mais apparait au même instant que celui de la MFN.
- La « traînée » de la courbe aux temps longs : elle est bien représentée à partir de 200 secondes pour $h_1 = 6\ cm$, 300 secondes pour $h_1 = 12cm$ et 1700 secondes pour $h_1 = 18\ cm$. En fonction du choix de la hauteur h_1, la qualité du découpage est fortement altérée comme nous l'avons vu sur la Figure III-25. C'est pour $h_1 = 6\ cm$ que la traînée de la MFN est atteinte le plus rapidement.

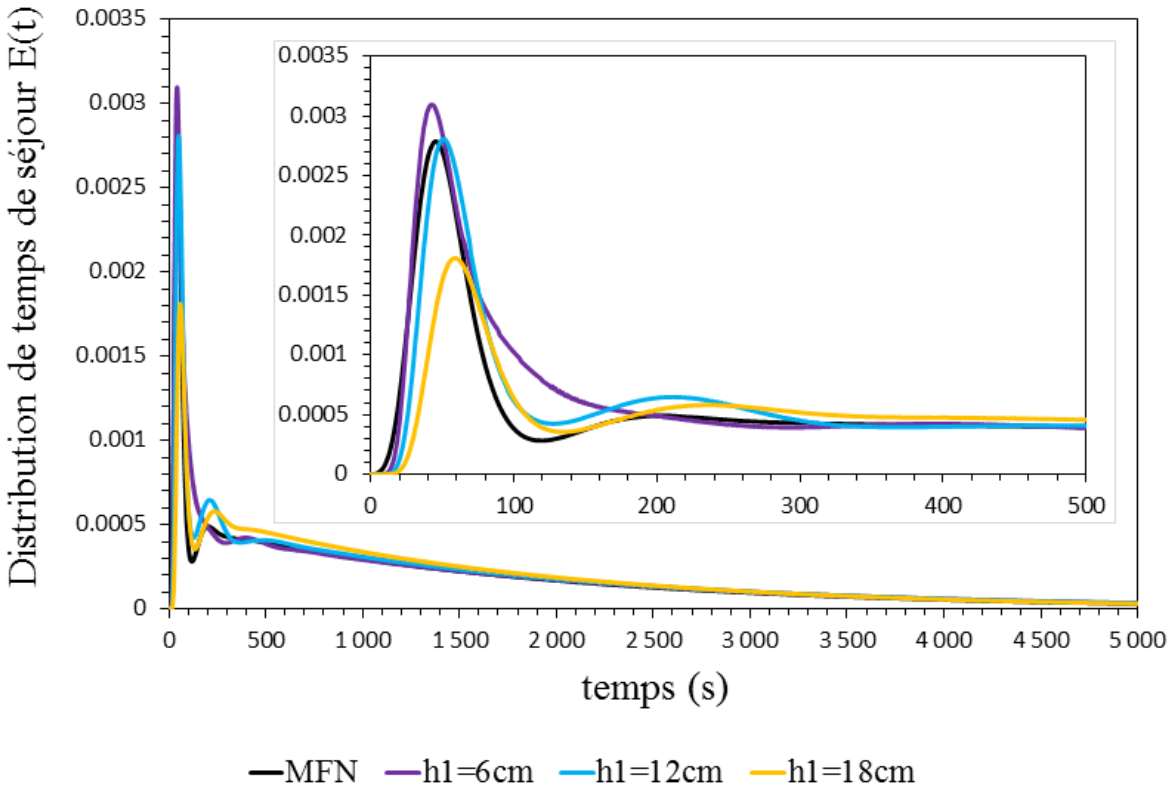


Figure III-26 : Courbes de DTS pour différentes hauteurs de la couche de surface ($h_1 = 6 - 12 - 18\ cm$) ; $N_l = 7$; $N_h = 2$; $N_L = 7$

Conclusions

Cette étude nous a permis de nous rendre compte que l'épaisseur de la couche de surface h_1 a une très grande influence sur la forme de la DTS. La traînée de la courbe, le pic secondaire et la dispersion du pic principal sont impactées. L'idéal serait un découpage où les fortes vitesses et faibles vitesses sont bien séparées mais cela n'est pas possible avec des tranches identiques. Diminuer h_1 a pour effet de surestimer la quantité de traceur présente dans le jet principal et également la dispersion globale du fond de la cuve. A l'inverse lorsqu'on augmente trop h_1 la séparation fortes/faibles vitesses est de mauvaise qualité et cela se ressent sur la courbe de DTS. Cette étude de sensibilité ne nous donne aucune raison de changer la valeur de h_1 initialement choisie lors de l'application de la méthode (à savoir $h_1 = 12\ cm$) qui était le meilleur compromis de séparation des fortes et faibles vitesses.

III.4.2.2 Influence du nombre de subdivisions dans la largeur N_l

Nous souhaitons maintenant étudier l'influence du nombre de tranches dans la largeur de la cuve, N_l. Le reste du découpage est fixé à $N_L = 7$; $N_h = 2$; $h_1 = 12\ cm$.

La Figure III-27 représente le champ de vitesse sur la surface libre (plan Oxy) (description de l'écoulement dans ce plan sur la Figure III-5) avec trois découpages différents ($N_l = 4 - 7 - 8$).

Les zones de fortes vitesses et faibles vitesses sont respectivement surlignées en rouge et en bleu. Les traits rouges correspondent aux découpages que nous avons choisi de tester :

- $\boldsymbol{N_l = 4}$: en gardant en tête l'objectif de modélisation de la dispersion en surface qui suppose un quadrillage de la surface, il s'agit du découpage minimal qui permet de séparer les fortes et faibles vitesses. On a $h_i = \frac{l}{4} = \frac{70}{4} = 17{,}5\ cm$.
- $\boldsymbol{N_l = 7}$: valeur prenant en compte les singularités de l'écoulement et les contraintes techniques liées à l'objectif de modélisation de la dispersion en surface. On a $l_1 = l_2 = l_3 = l_5 = l_6 = l_7 = 8\ cm$ et $l_4 = 22\ cm$.
- $\boldsymbol{N_l = 8}$: on ajoute une division supplémentaire sur le compartiment du milieu qui n'est *a priori* pas nécessaire du point du vue de la qualité de séparation des fortes et faibles vitesses. Cela va permettre de vérifier le découpage en $N_l = 7$ compartiments dans la largeur (imposé par la contrainte technique de modélisation de la dispersion en surface) est acceptable. On a $l_1 = l_2 = l_3 = l_6 = l_7 = l_8 = 8\ cm$ et $l_4 = l_5 = 11\ cm$.

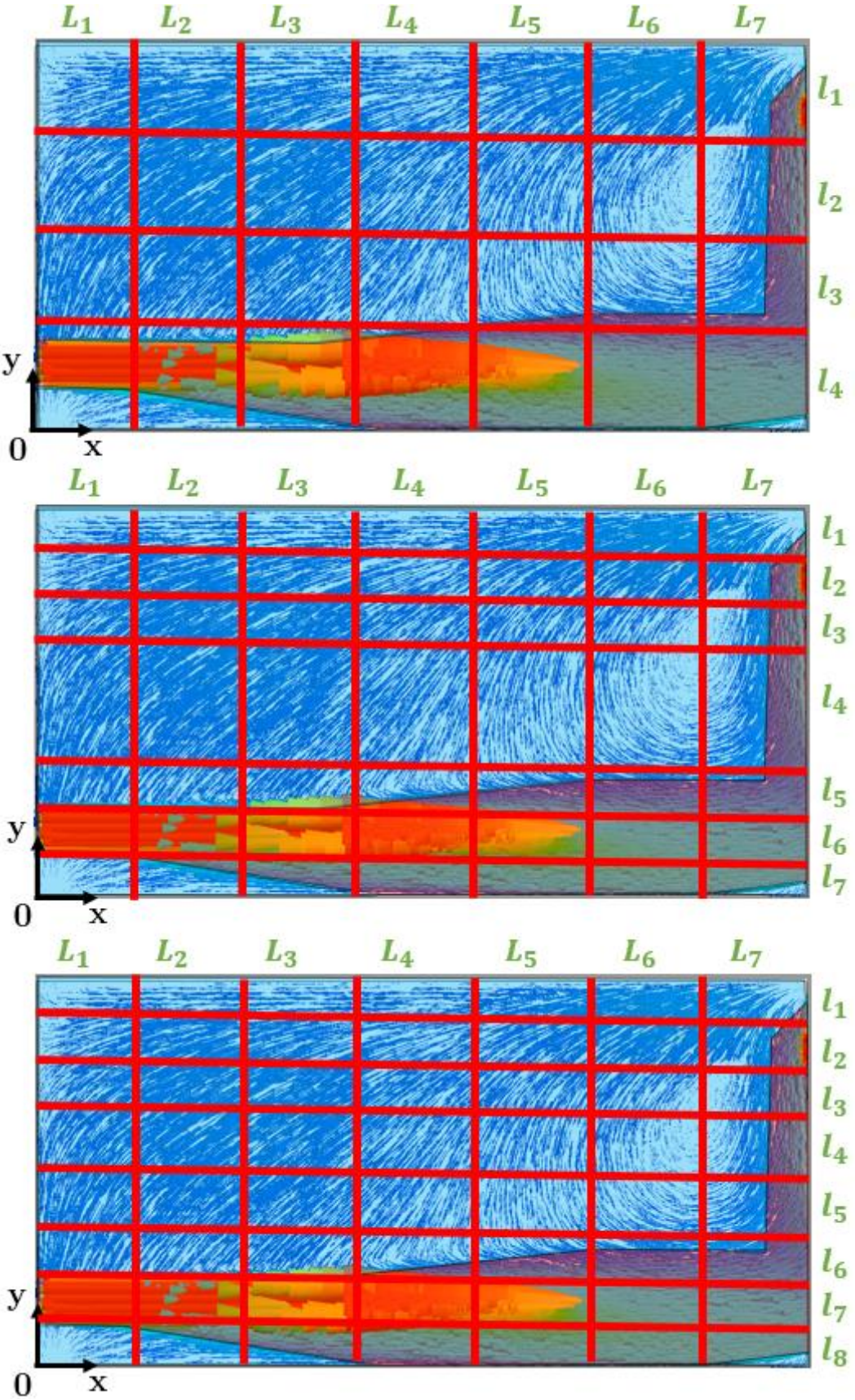


Figure III-27 : Champ de vitesse sur la surface libre (Oxy), $z = 47\ cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : $N_l = 4$. AU MILLIEU : $N_l = 7$. EN BAS : $N_l = 8$.

Analyse des courbes de DTS

La Figure III-28 représente les courbes de DTS pour les différentes valeurs de N_l testées ainsi que la DTS numérique provenant de la MFN. Aucune des courbes ne s'ajuste parfaitement à la courbe de MFN. On remarque que les courbes pour $N_l = 7$ et $N_l = 8$ sont presque identiques.

Concernant :

- La « montée » du pic principal : Plus N_l augmente, plus la « montée » est retardée. Le pic principal est toujours retardé quelle que soit la valeur de N_h. Pour $N_l = 7$ et $N_l = 8$ on observe un retard de ce pic d'environ 10 secondes et pour $N_l = 4$ le retard est d'environ 25 secondes.
- L'intensité et la dispersion du pic principal : L'intensité du pic principal (et sa dispersion) est bien décrite pour $N_l = 7$ et $N_l = 8$ et elle est sous-estimée pour $N_l = 4$.
- La « descente » du pic principal et le « creux » de courbe : Pour $N_l = 4$ le modèle ne représente ni la « descente » ni le « creux » de courbe. Pour $N_l = 7$ et $N_l = 8$ il y a une bonne correspondance dans la descente de la courbe mais les creux sont surestimés.
- Pic secondaire : Pour $N_l = 4$ le pic secondaire est légèrement surestimé mais il s'agit du cas qui le décrit le mieux. Pour $N_l = 7$ et $N_l = 8$ le pic secondaire est surestimé mais apparaît au même instant que celui de la MFN.
- La « traînée » de la courbe aux temps longs : elle est bien représentée, quelle que soit la valeur de N_l, à partir de 300 secondes. Cela peut s'expliquer par le fait que la qualité des compartiments (basée sur le critère de séparation entre fortes et faibles vitesses) dans le fond de la cuve n'est pas affectée par les découpages testés.

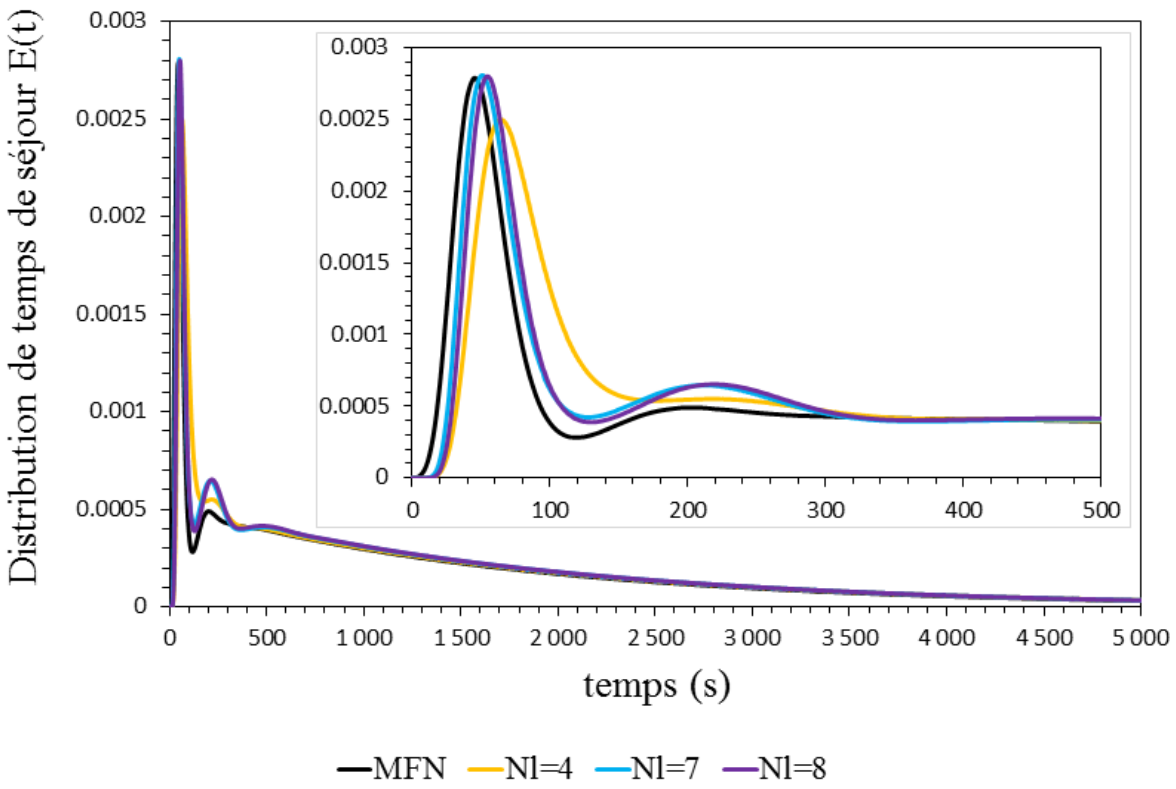


Figure III-28 : Courbes de DTS pour différents nombres de compartiments dans la largeur ($N_l = 4 - 7 - 8$) ; $N_L = 7$; $N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$.

Conclusions

Cette étude nous a permis de comprendre que le nombre de compartiments dans la largeur N_l joue un rôle sur la forme de la DTS. Diminuer N_l a pour effet d'augmenter la dispersion du pic principal. Augmenter N_l n'a plus d'effet sur la DTS au-delà d'une certaine valeur ($N_l = 7$). Il s'agit d'un résultat intéressant qui souligne qu'il est inutile d'augmenter indéfiniment le nombre de compartiments pour espérer améliorer les résultats. Cela est en accord avec l'observation faite lors de l'optimisation du nombre de tranches axiales qui a montré que les courbes de DTS ne s'amélioraient pas lorsqu'on augmentait N_L. Pour la deuxième fois, l'hypothèse (*hyp. 1)* réalisée au paragraphe III.3.1.3 page 168 ne semble pas pouvoir être validée. L'étude d'un découpage de type géométrique nous semble indispensable et sera réalisée ultérieurement (voir paragraphe III.4.2.4 page 193). Cette étude de sensibilité ne nous donne aucune raison de changer la valeur de N_l initialement choisie, $N_l = 7$.

III.4.2.3 Influence du nombre de subdivisions dans la hauteur N_h

Comme nous l'avons signalé lorsque nous avons déterminé la hauteur de la couche de surface h_1 (voir paragraphe III.4.1.2 page 170), il n'est pas possible d'avoir un découpage en tranches identiques qui sépare correctement les fortes et faibles vitesses à cause de la forte dissymétrie de l'écoulement. Il pourrait être possible d'améliorer le découpage en ajoutant une couche intermédiaire entre la couche de surface et le fond de la cuve. C'est pourquoi nous souhaitons étudier l'influence de plusieurs configurations avec $N_h = 3$. Le reste du découpage est fixé avec $N_l = 7$ et $N_L = 7$.

La Figure III-29 représente le champ de vitesse sur le plan vertical (plan Oxz) situé au milieu de l'entrée (description de l'écoulement dans ce plan sur Figure III-6) avec trois découpages différents (deux avec $N_h = 3$ et le découpage obtenu par l'application de la méthode avec $N_h = 2$). Les zones de fortes et faibles vitesses sont respectivement surlignées en rouge et en bleu. Les traits rouges correspondent aux découpages que nous avons choisi de tester :

- $\boldsymbol{N_h = 3}$ **avec** $\boldsymbol{h_1 = h_2 = 6\ cm}$: On découpe la couche de surface de référence ($h_1 = 12\ cm$) en deux couches d'épaisseurs égales. Cela permet de mieux découper le jet principal dans lequel règnent les fortes vitesses.
- $\boldsymbol{N_h = 2}$ **avec** $\boldsymbol{h_1 = 12\ cm}$: Découpage obtenu après application de la méthode avec seulement deux couches nécessaires pour répondre à la problématique de dispersion à la surface de la cuve. L'épaisseur h_1 a été déterminée en cherchant le meilleur compromis pour séparer les fortes et faibles vitesses.
- $\boldsymbol{N_h = 3}$ **avec** $\boldsymbol{h_1 = 12\ cm}$ **et** $\boldsymbol{h_2 = 6\ cm}$: On ajoute une couche en dessous de la couche de surface de référence ($h_1 = 12\ cm$). Cela n'améliore pas le raffinement au niveau du jet principal mais permet de créer une couche intermédiaire entre la surface et le fond de la cuve.

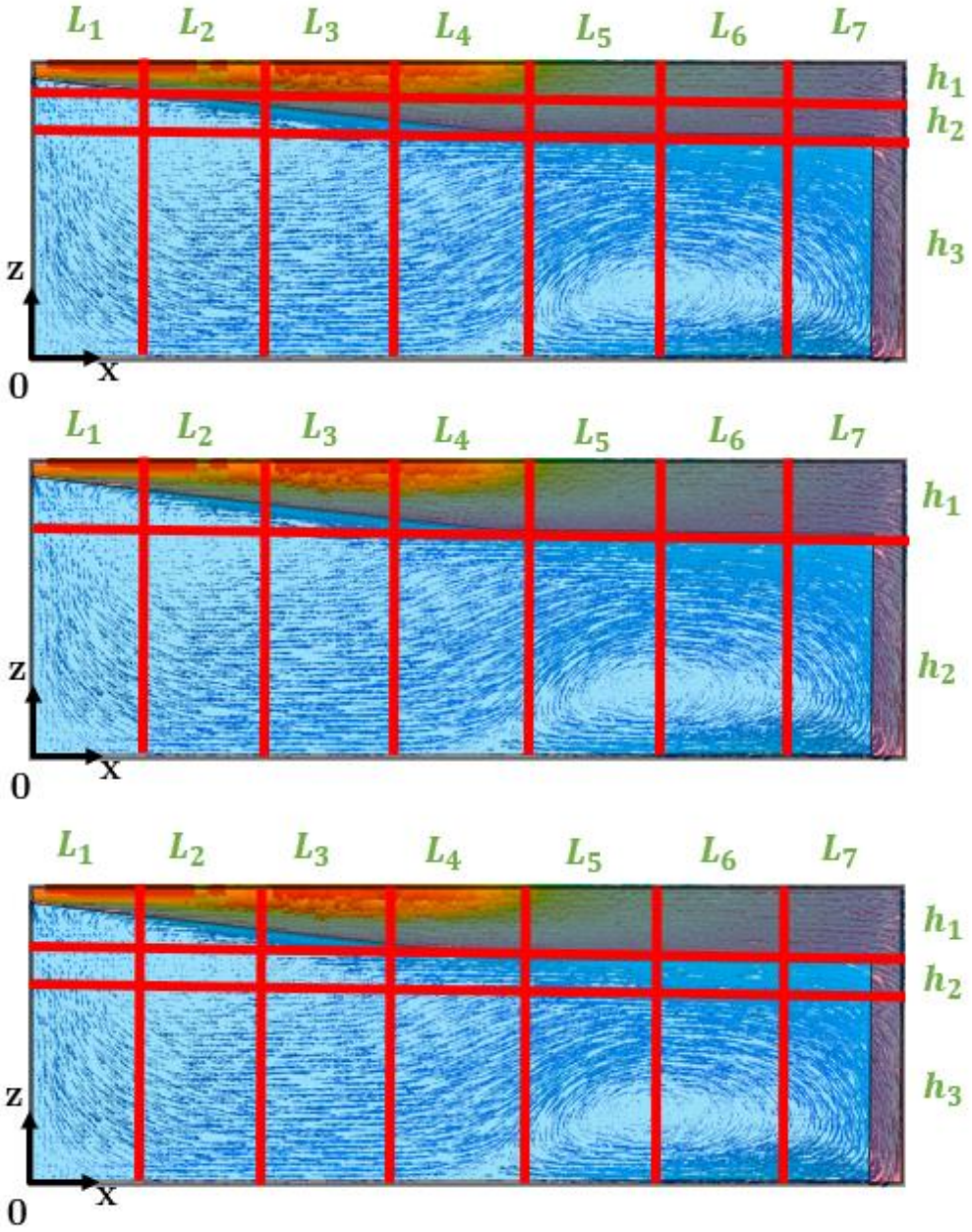


Figure III-29 : Champ de vitesse dans le plan vertical (Oxz) au milieu de l'entrée en $y = 12\ cm$. *Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT :* $N_h = 3$ *avec* $h_1 = h_2 = 6\ cm$. *AU MILLIEU :* $N_h = 2$ *avec* $h_1 = 12\ cm$. *EN BAS :* $N_h = 3$ *avec* $h_1 = 12\ cm$ *et* $h_2 = 6\ cm$.

Analyse des courbes de DTS

La Figure III-30 représente les courbes de DTS pour les différentes configurations testées ainsi que la DTS numérique provenant de la MFN. Aucune des courbes n'est en parfait accord avec la courbe de MFN. On observe que les courbes pour le modèle de référence ($N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$) et celui où on ajoute une couche intermédiaire ($N_h = 3$ avec $h_1 = 12\ cm$ et $h_2 = 6\ cm$) sont presque identiques. Cela s'explique par le fait que la couche intermédiaire n'affecte pas la qualité des compartiments puisqu'elle se situe dans la partie du fond de la cuve (voir Figure III-29 en bas). Ce résultat ne nous étonne pas car nous avons déjà observé au paragraphe III.4.2.2 page 185 que lorsqu'on découpe une zone où les vitesses sont homogènes la forme de la DTS n'était pas affectée (courbe $N_l = 7$ similaire à $N_l = 8$). En revanche, lorsqu'on ajoute la couche intermédiaire dans la zone du jet, on observe que la courbe de DTS est modifiée par rapport au cas où il n'y a que deux couches. Cela s'explique par le fait que dans ce cas le découpage est réalisé dans la zone où cohabitent les fortes et faibles vitesses (voir Figure III-29 en haut) donc que la manière de découper a une forte influence sur les résultats obtenus. Concernant :

- <u>La « montée » du pic principal :</u> le moment où le pic principal débute n'est pas affecté par les changements de configurations que nous avons testés.
- <u>L'intensité et la dispersion du pic principal :</u> on observe que le pic principal arrive au même instant que celui de la MFN pour le cas $h_1 = h_2 = 6\ cm$ alors qu'il est légèrement retardé sur les deux autres courbes. On n'observe pas de différence notoire concernant la dispersion du pic principal.
- <u>La « descente » du pic principal et « creux » de courbe :</u> Pour le cas $h_1 = h_2 = 6\ cm$ on observe que le « creux » est presque effacé dans la partie de la courbe de DTS qui se situe entre la « descente » du pic principal et le « montée » du pic secondaire.
- <u>Pic secondaire :</u> Pour le cas $h_1 = h_2 = 6\ cm$ le pic secondaire est toujours surestimé par rapport à la MFN mais on n'observe pas de différence notoire par rapport aux deux autres courbes.
- <u>La « traînée » de la courbe aux temps longs :</u> elle est bien représentée à partir de 300 secondes quelle que soit la configuration testée. Cela peut s'expliquer par le fait que la qualité du découpage dans le fond de la cuve n'est pas affectée par les découpages testés.

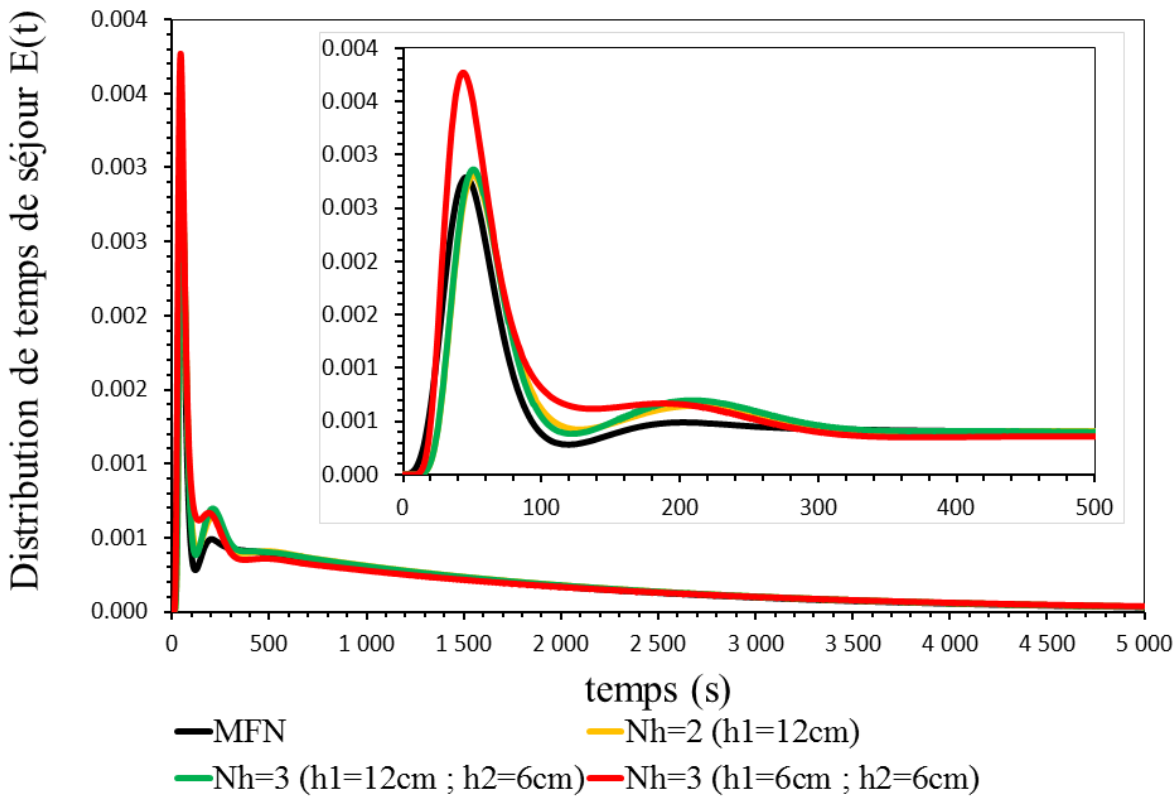


Figure III-30 : Courbes de DTS pour différents nombres de couche définissant dans la hauteur de la cuve ($N_h = 2 - 3$) ; $N_L = 7$; $N_l = 7$.

Conclusions

Nous avons observé pour la deuxième fois que raffiner le découpage dans une zone où les vitesses sont homogènes n'a pas d'influence notable sur la courbe de DTS. Cela est intéressant car on pourrait penser que plus le nombre de compartiments est élevé, meilleur sera le modèle. L'étude du découpage de type géométrique nous donnera des informations complémentaires. En revanche, lorsqu'on affine le découpage dans la zone où les vitesses sont hétérogènes (proche de la surface), on observe une modification importante de la DTS. L'interprétation de ces modifications est difficile car la séparation fortes/faibles vitesses est irrégulière (forme en L, Figure III-9. En conclusion, ajouter une couche intermédiaire n'a pas permis d'améliorer la DTS et nous garderons le découpage en deux couches. Remarque : afin de vérifier l'influence sur la dispersion, nous testerons le découpage avec une couche intermédiaire en dessous de la couche de surface ($N_h = 3$ avec $h_1 = 12\ cm$ et $h_2 = 6\ cm$) lors de la modélisation de la dispersion au paragraphe III.5 page 204.

III.4.2.4 Particularisation des tranches à proximité de l'entrée et de la sortie

La répartition des grandeurs pertinentes est en général particulière au niveau des parois où se situent l'entrée et la sortie du fluide. La méthode générale préconise de particulariser, si possible, les tranches à proximité de l'entrée et la sortie en fonction du cas d'étude traité. Ce cas de figure est justement présent ici avec les profils de vitesses qui se comportent

singulièrement à proximité de l'entrée (avec un effet jet qui s'étale progressivement dans la profondeur et la largeur) et à proximité de la sortie (avec les fortes vitesses qui pointent vers le fond de la cuve sur une faible épaisseur). Nous souhaitons étudier l'utilité de construire des tranches particulières au niveau de l'entrée et la sortie. Le découpage est donc fixé avec $N_l = 7$; $N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$.

La Figure III-31 représente le champ de vitesse sur le plan vertical (plan Oxz) passant par le milieu de l'entrée (description de l'écoulement dans ce plan sur Figure III-6). De la même manière, la Figure III-32 représente le champ de vitesse sur la surface libre (plan Oxy) (description de l'écoulement dans ce plan sur la Figure III-5). Les traits rouges correspondent aux découpages que nous avons choisi de tester :

- $N_L = 7$ (Épaisseurs des tranches identiques) : valeur obtenue par la méthode de découpage en tranches identiques
- $N_L = 9$ (Épaisseurs des tranches variables) : La première et la dernière tranche du découpage sont divisées chacune en 2 tranches d'égales épaisseurs pour obtenir un modèle à N_L =9 tranches. Cela améliore le découpage au niveau de l'entrée et de la sortie.

Analyse des courbes de DTS

La Figure III-33 représente les courbes de DTS pour les différentes configurations testées ainsi que la DTS numérique provenant de la MFN. Aucune des courbes ne s'ajuste parfaitement à la courbe de MFN. On observe des changements non négligeables entre les deux modèles testés (avant 300 secondes). Pour lacs à $N_L = 9$ tranches le pic principal est légèrement surestimé mais on observe une nette amélioration de la description du creux de courbe (entre le pic principal et secondaire). Remarque : les courbes avec $N_L = 14$ tranches (voir Figure III-21 page 176) et $N_L = 9$ tranches non identiques (voir Figure III-33 ci-dessous) sont presque identiques. La courbe $N_L = 14$ tranches n'est pas illustrée sur la Figure III-33 afin de ne pas alourdir inutilement le propos tenu. Les commentaires faits pour $N_L = 14$ au paragraphe III.4.1.3 page 171 sont donc valables pour le modèle à $N_L = 9$ tranches non identiques présenté ici.

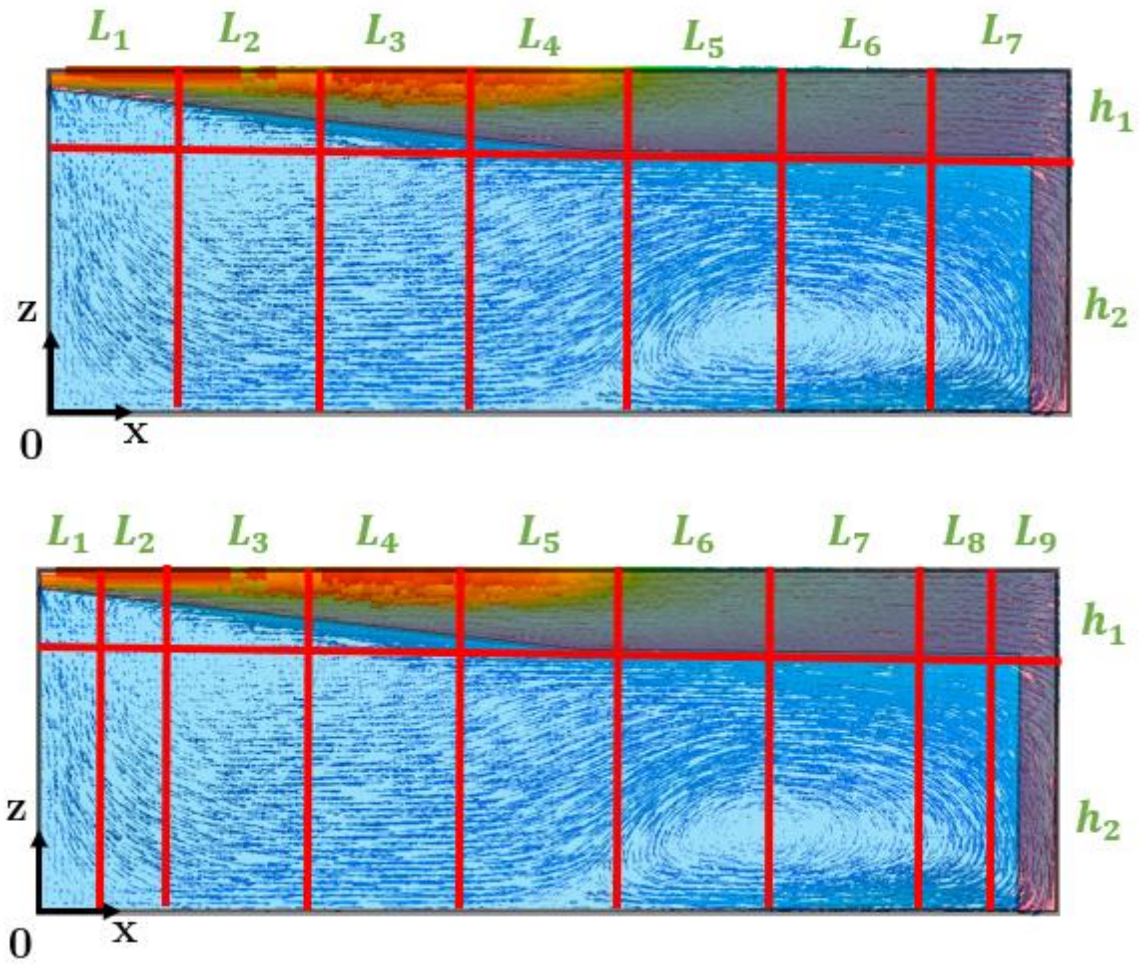


Figure III-31 : Champ de vitesse sur le plan (Oxz) au milieu de l'entrée en $y = 12\ cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : $N_L = 7$ (tranches identiques). EN BAS : $N_L = 9$ (épaisseur tranches variables pour l'entrée et la sortie).

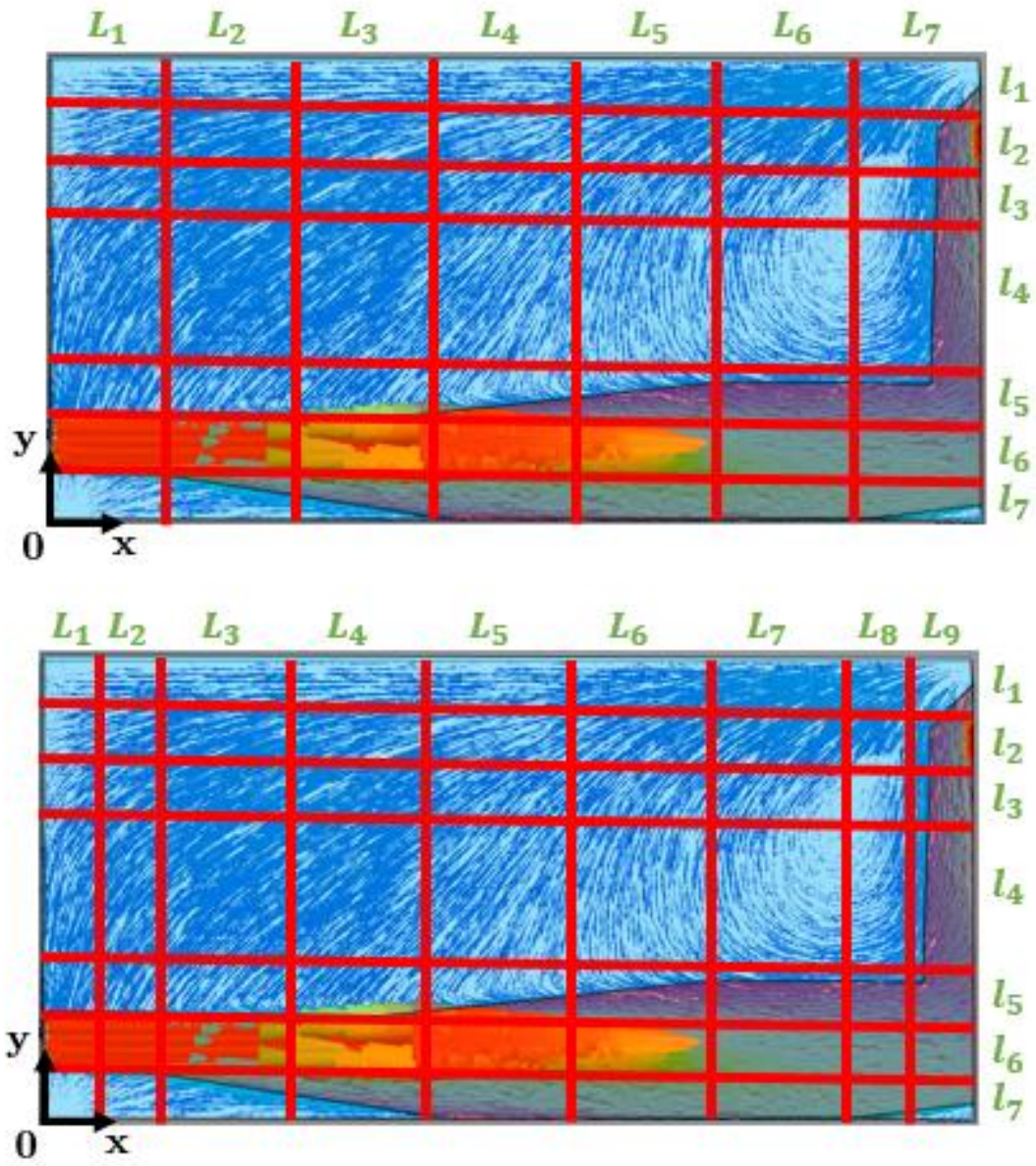


Figure III-32 : Champ de vitesse à la surface libre (Oxy) en $z = 47\ cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : $N_L = 7$ (tranches identiques). EN BAS : $N_L = 9$ (épaisseur tranches variables pour l'entrée et la sortie).

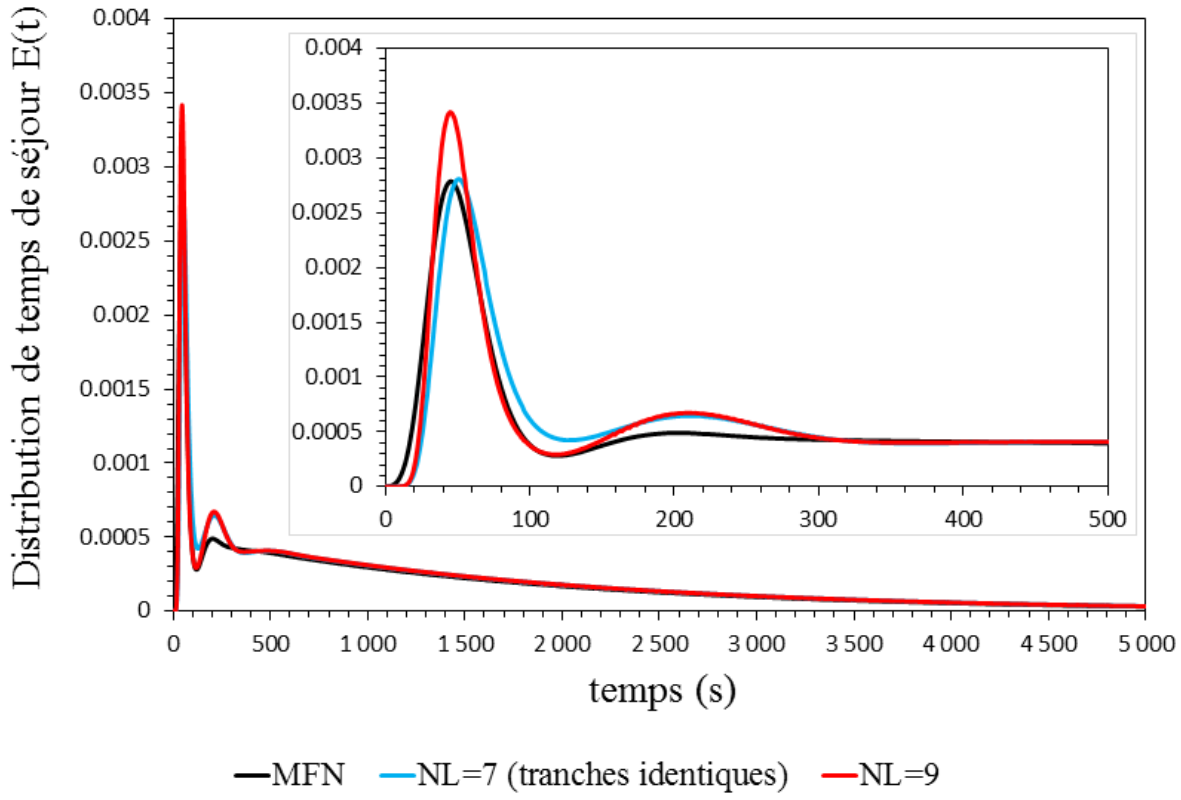


Figure III-33 : Courbe de DTS avec tranches identiques ($N_L = 7$) et tranches d'épaisseurs variables avec raffinement à l'entrée et la sortie ($N_L = 9$)

Conclusions

Les différences observées entre la courbe de DTS du modèle à $N_L = 7$ tranches identiques et le modèle à $N_L = 9$ tranches non identiques permettent de conclure que le raffinement des tranches au niveau des parois d'entrée et sortie est une méthode qui pourrait conduire à une amélioration du modèle. Le modèle à $N_L = 9$ tranches et $N_L = 7$ tranches ont tous les deux leur avantages et inconvénients sur la description de la courbe de DTS qui sont qualitativement du même ordre de grandeur. Cette étude n'a pas permis de définir des règles précises sur la manière de procéder au raffinage des tranches d'entrée et sortie et ce travail mériterait d'être approfondi. Dans l'état nous conservons le découpage en $N_L = 7$ tranches identiques car l'un des objectifs de ce chapitre consiste tester la robustesse du découpage en tranches identiques. Le fait qu'un découpage en $N_L = 9$ tranches non identiques avec un raffinement au niveau de l'entrée et la sortie donne des résultats similaires à un découpage en $N_L = 14$ tranches identiques soulève plusieurs questions intéressantes. Quelle configuration est la plus adaptée et en fonction de quels critères ? Une investigation plus approfondie est nécessaire pour répondre à ces questions. Afin de tester l'influence sur la dispersion, nous allons tester la configuration en $N_L = 9$ tranches non identiques lors de la modélisation de la dispersion au paragraphe III.5 page 204.

III.4.2.5 Discussion sur un modèle de type géométrique

Afin d'estimer la qualité du découpage nous avons défini deux paramètres, Γ (fraction de surface ou volume contenant la catégorie de vitesse prédominante) et Θ (ratio du nombre de compartiments parfaits sur le nombre compartiments au total). Nous avons également fait une hypothèse (*hyp. 1*) qui suppose que le découpage est optimal lorsque $< \Gamma >$ et Θ, dans une zone donnée, tendent vers 1 (voir paragraphe III.3.1.3 page 168). Cette hypothèse n'a pu être vérifiée sur différentes études réalisées (optimisation du nombre de tranches N_L, influence du nombre de subdivision dans la largeur N_l et dans la hauteur N_h). C'est pourquoi nous souhaitons étudier ici l'effet d'un découpage purement géométrique conduisant à un nombre élevé de compartiments.

La Figure III-34 représente le champ de vitesse sur le plan vertical (plan Oxz) traversant le milieu de l'entrée (description de l'écoulement dans ce plan sur Figure III-6) avec trois découpages différents (un découpage basé sur le champ de vitesse et deux découpages géométriques). De la même manière la Figure III-35 représente le champ de vitesse sur le plan horizontal (plan Oxy) au niveau de la surface libre (description de l'écoulement dans ce plan sur la Figure III-5). Les traits rouges correspondent aux découpages que nous avons choisi de tester :

- **Modèle de référence** (98 compartiments) : modèle obtenu par application de la méthode en tranches identiques avec un découpage basé sur l'analyse du champ de vitesse.

Les largeurs l_i des modèles géométriques testés sont définies de la manière suivante $l_1 = l_2 = l_3 = l_6 = l_7 = l_8 = 8\ cm$ et $l_4 = l_5 = 11\ cm$ plutôt qu'en huit largeurs égales ($l_i = \frac{l}{8}$). Cela est justifié uniquement pour des raisons technique car pour $l_i = \frac{l}{8}$ la localisation des entrées et sorties déborde sur plusieurs compartiments et il est techniquement plus simple que l'intégralité des surfaces soient contenues dans un seul compartiment. Cette contrainte technique n'étant pas présente dans la direction de la hauteur, les hauteurs h_i des modèles géométriques testés sont définies en huit hauteurs égales $h_i = \frac{H}{8}$. De la même manière les épaisseurs des tranches sont constantes $L_i = \frac{L}{N_L}$.

- **Modèle géométrique $N_L = 7$** (448 compartiments) : Cette configuration va permettre de comparer le modèle de référence - avec un découpage basé sur l'analyse des champs de vitesse (où $N_L = 7$) - à un modèle géométrique.
- **Modèle géométrique $N_L = 14$** (896 compartiments) : Cette configuration est celle qui comporte le plus grand nombre de compartiments parmi toutes les configurations testées. Elle va donner des informations intéressantes sur le comportement de la DTS lorsqu'on augmente beaucoup le nombre de compartiments (donc lorsque $< \Gamma >$ et Φ sont très proches de 1).

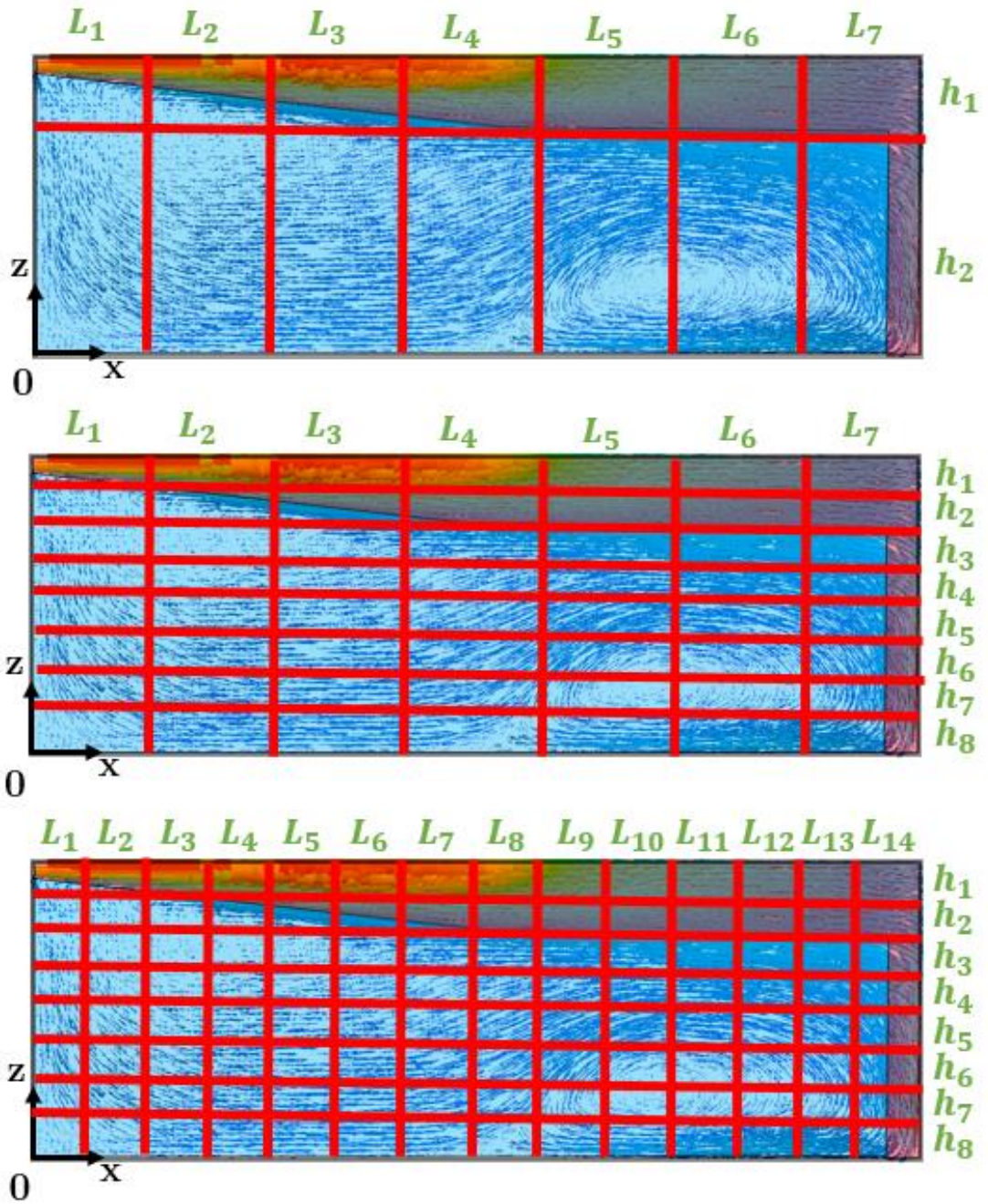


Figure III-34 : Champ de vitesse sur le plan vertical (Oxz) au milieu de l'entrée en $y = 12\ cm$. *Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : Découpage de référence basé sur l'application de notre méthode* ($N_L = 7$; $N_h = 2$ *avec* $h_1 = 12\ cm$; $N_l = 7$). *AU MILIEU : découpage de type géométrique* ($\underline{\boldsymbol{N_L = 7}}$; $N_h = 8$ *avec* $h_i = \frac{H}{8} = \frac{47\ cm}{8} = 5{,}875\ cm$; $N_l = 8$). *EN BAS : découpage de type géométrique* ($\underline{\boldsymbol{N_L = 14}}$; $N_h = 8$ *avec* $h_i = \frac{H}{8} = \frac{47\ cm}{8} = 5{,}875\ cm$; $N_l = 8$).

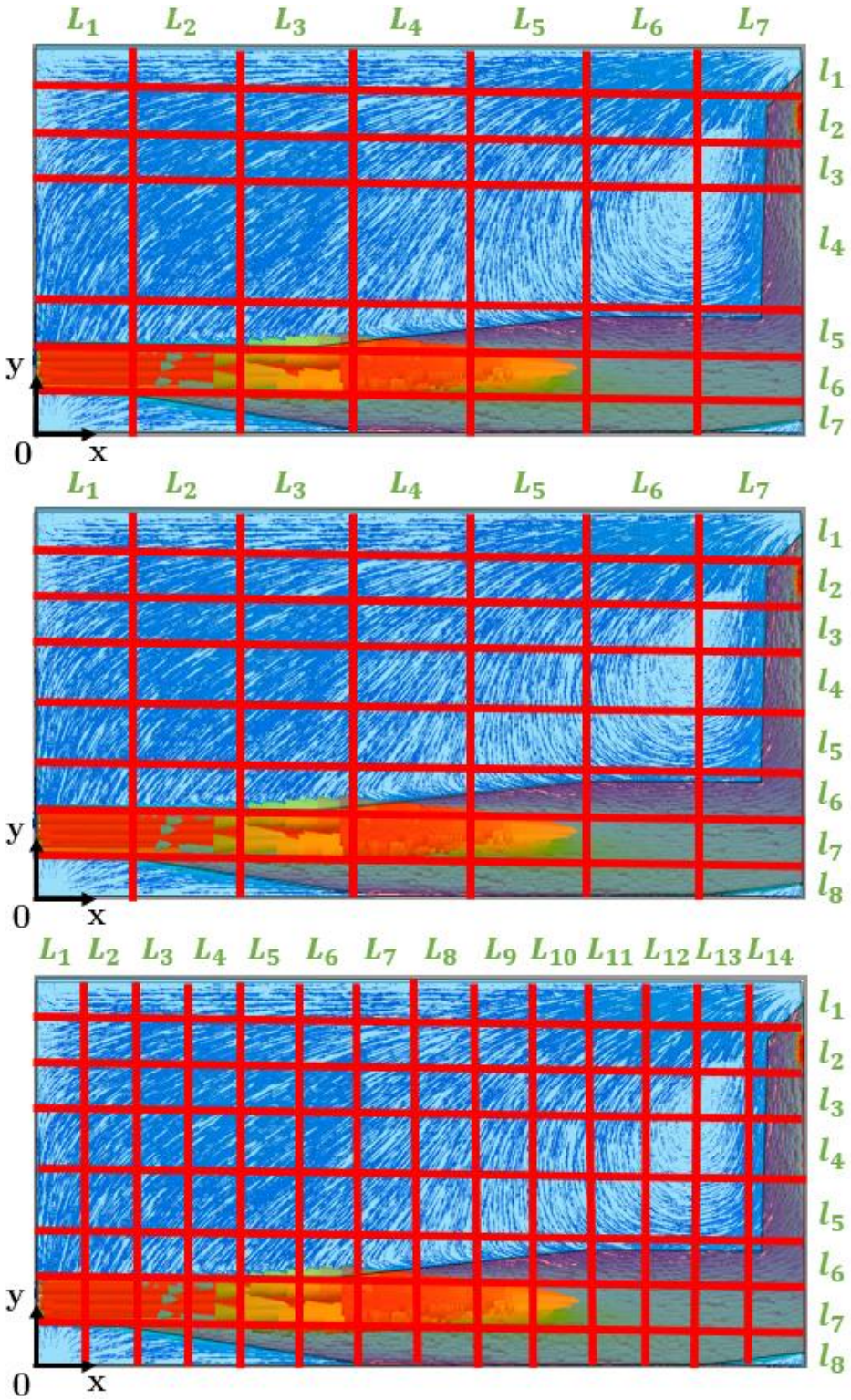


Figure III-35 : Champ de vitesse sur le plan (Oxy) à la surface en $z = 47\ cm$. Surlignage rouge : fortes vitesses. Surlignage bleu : faibles vitesses. Traits rouges : découpage des compartiments. EN HAUT : Découpage de référence basé sur l'application de notre méthode ($N_L = 7$; $N_h = 2$; $N_l = 7$ avec $l_1 = l_2 = l_3 = l_5 = l_6 = l_7 = 8\ cm$ et $l_4 = 22\ cm$). AU MILIEU : découpage de type géométrique ($N_L = 7$; $N_h = 8$; $N_l = 8$ avec $l_1 = l_2 = l_3 = l_6 = l_7 = l_8 = 8\ cm$ et $l_4 = l_5 = 11\ cm$). EN BAS : découpage de type géométrique ($N_L = 14$; $N_h = 8$; $N_l = 8$ avec les l_i identiques au cas du milieu).

Analyse des courbes de DTS

La Figure III-36 représente les courbes de DTS pour les différentes configurations testées ainsi que la DTS numérique provenant de la MFN. Aucune des courbes ne s'ajuste parfaitement à la courbe de MFN. On observe que les courbes des modèles géométriques ne sont pas en meilleur accord avec la MFN comparées à la DTS du modèle de référence.

Concernant :

- La « montée » du pic principal : quelle que soit la configuration testée, la montée est légèrement retardée par rapport à la MFN.
- L'intensité et la dispersion du pic principal : L'intensité du pic principal est plus importante avec les modèles géométriques sans pour autant que la dispersion du pic ne soit trop diminuée. Pour $N_L = 14$, le pic principal est plus important que pour les autres modèles et la dispersion y est donc moins importante.
- La « descente » du pic principal et le « creux » de courbe : Le creux de courbe est identique pour le modèle te référence et le modèle géométrique avec $N_L = 7$. En revanche pour le modèle géométrique avec $N_L = 14$, le creux est surestimé.
- Pic secondaire : Le pic secondaire est plus surestimé avec le modèle géométrique à $N_L = 14$.
- La « traînée » de la courbe aux temps longs : elle est bien représentée à partir d'environ 300 secondes quelle que soit la configuration testée. Cela peut s'expliquer par le fait que la qualité des compartiments (Γ est toujours égal à 1) dans le fond de la cuve n'est pas affectée par les découpages testés.

L'interprétation de ces observations est très difficile, voire impossible, car beaucoup de paramètres sont affectés par le changement de découpage de par la forte dissymétrie de l'écoulement.

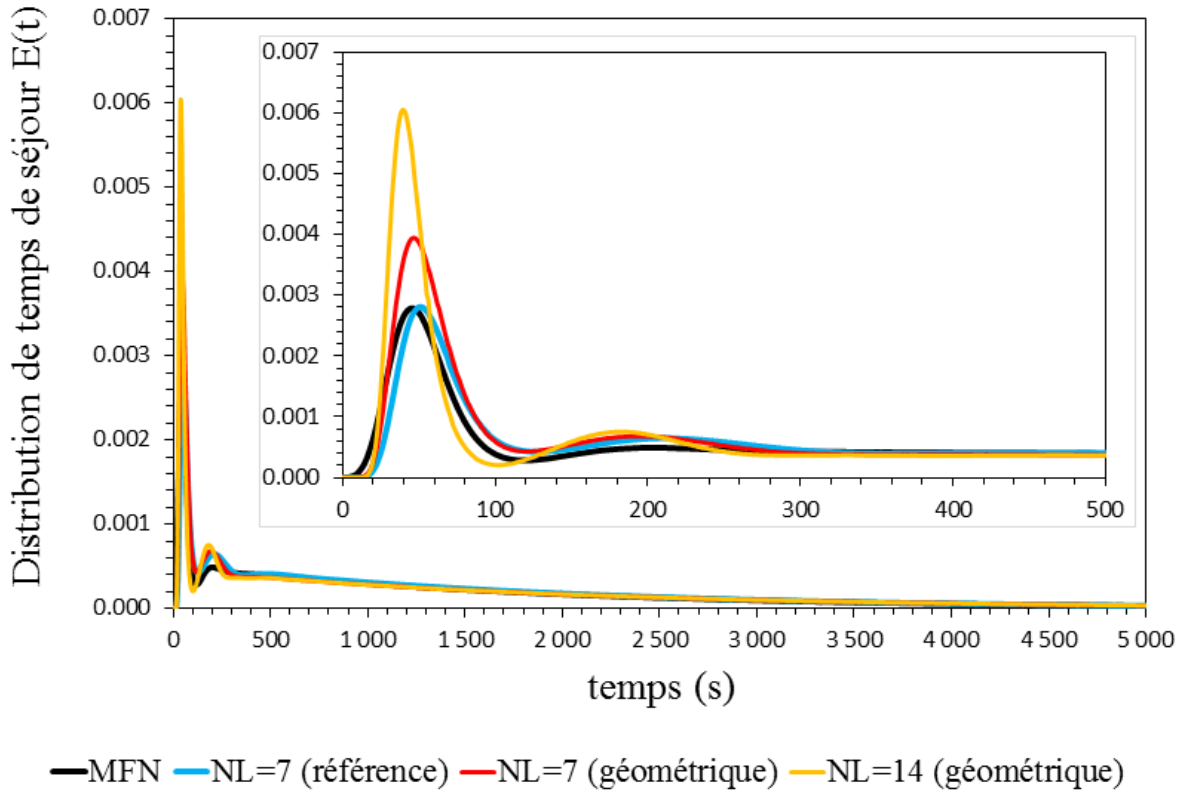


Figure III-36 : Courbes de DTS fournies par le modèle à compartiments de référence ($N_L = 7$ tranches identiques avec $N_h = 2$ et $N_l = 7$) et par deux modèles avec découpage géométrique ($N_L = 7$et $N_L = 14$ tranches identiques, $N_h = 8$ et $N_l = 8$).

Conclusions

Cette étude nous a permis de montrer que procéder à un découpage géométrique n'améliore pas systématiquement la description de la DTS. D'après l'hypothèse (*hyp. 1*) qui suppose que le découpage est optimal lorsque $< \Gamma >$ et Φ tendent vers 1, on s'attendait au contraire puisque les découpages géométriques ont augmenté le nombre de compartiments de telle manière que $< \Gamma >$ et Φ soient très proches de 1. L'hypothèse réalisée n'est donc définitivement pas validée et une étude plus approfondie est nécessaire. Nous venons de constater qu'un découpage basé sur une analyse des champs de vitesse à environ 100 compartiments donnait un meilleur résultat qu'un découpage à l'aveugle à environ 1000 compartiments. Dans cette gamme de valeurs de nombre de compartiments (inférieur à 1000), il est donc important d'optimiser le découpage afin de minimiser efficacement le nombre de compartiments. Il pourrait être intéressant de continuer à raffiner le découpage géométrique (augmenter le nombre de compartiments) afin connaitre le nombre de compartiments minimum nécessaire pour correctement représenter la DTS. Il s'agirait d'une étude de sensibilité au maillage similaire à celles effectuées avant toute simulation de MFN.

Cette dernière étude du découpage nous permet de conclure que le modèle en tranches identiques que nous avons définie lors du découpage basé sur le champ de vitesse ($N_L = 7\,; N_l = 7\,; N_h = 2\ avec\ h_1 = 12\ cm$) est le découpage optimal.

III.4.3 Conclusions

III.4.3.1 Discussion sur la méthodologie de découpage

Dans cette section, nous avons appliqué un découpage en tranches identiques dans le cadre le plus restrictif qui soit possible, à savoir des tranches à géométrie identique avec un réseau de compartiments de géométrie identique : T_{GICI}. L'objectif une bonne description de l'hydrodynamique (confrontation de la DTS du modèle avec celle de la MFN) tout en prenant en compte des contraintes techniques liées à la problématique (prédiction de la dispersion du traceur injecté en surface de la cuve). Dans cette étude, les échanges entre les compartiments sont uniquement de nature convective. Le seul critère de découpage étant le champ de vitesse et au vu de la forte hétérogénéité des valeurs des vitesses, nous avons fait le choix de classer les vitesses en deux niveaux, les fortes vitesses au niveau du jet principal et les faibles vitesses dans le fond de la cuve. Il n'a pas été possible de reproduire précisément la courbe de DTS à cause de la contrainte des T_{GICI} que nous nous étions fixée, qui implique une perte de précision sur ce cas présentant un écoulement aussi dissymétrique. Il s'agit d'un résultat attendu puisqu'on rappelle que l'un des objectifs de ce chapitre était de tester la robustesse de la technique de découpage en tranches identiques sur un cas défavorable. Au vu des résultats on peut conclure que le découpage en T_{GICI} est un bon compromis entre finesse de résultat et simplicité d'utilisation. Une perspective sur le court terme consiste à classer les vitesses en trois catégories (forte au niveau du jet, moyenne au niveau de la paroi de sortie où le fluide redescend, voir Figure III-8, et faible vitesse sur le reste de la cuve) plutôt que deux catégories de vitesse. On peut envisager également d'assouplir progressivement les contraintes liées aux T_{GICI} (géométrie quelconques des compartiments, tranche de géométrie variable, *etc.*).

Une étude de l'influence des zones de découpages secondaires a été conduite. Le nombre de tranches N_L, le nombre de compartiments dans la largeur N_l, l'épaisseur de la couche de surface h_1, le nombre de compartiments dans la hauteur N_h, un découpage en tranches non identiques et un découpage géométrique ont été testés. Plusieurs résultats intéressants ont été tirés de cette étude et le plus important est que le découpage initialement proposé par l'analyse des champs de vitesse était le découpage optimum. Nous avons vu que procéder à un découpage en tranches d'épaisseurs non identiques, permettant un raffinage particulier du réseau de compartiments au niveau de l'entrée et de la sortie, offrait une souplesse intéressante pour faire un découpage physique et pas uniquement une optimisation mathématique du nombre de tranches. Nous avons également observé à plusieurs reprises qu'augmenter le nombre de

compartiments avec un découpage géométrique n'était pas l'approche la plus efficace pour améliorer les résultats. En effet le modèle à environ 100 compartiments, avec un découpage basé sur une analyse du champ de vitesse donne de meilleurs résultats que le modèle à environ 900 compartiments avec un découpage géométrique. Il serait intéressant de vérifier à partir de quel nombre de compartiments (taille minimale requise) il est possible de représenter avec exactitude les données expérimentales.

III.4.3.2 Nécessité de critères quantitatifs pour le découpage

Nous avons défini deux paramètres Γ et Θ qui permettent de décrire quantitativement le découpage et nous avons émis une hypothèse de prédiction de qualité du découpage en fonction de la valeur que prennent ces deux paramètres. Cette hypothèse n'a pas pu être validée. De plus les paramètres Γ et Φ ne permettent pas à eux seul de choisir laquelle de ces deux situations est préférable :

i. Cas où $\Theta \to 1$ où la plupart des compartiments sont parfaits (c'est-à-dire $\Gamma = 1$) mais les quelques compartiments hybrides (c'est-à-dire $\Gamma < 1$) sont de mauvaise qualité ($0{,}5 \leq \Gamma < 0{,}6$).
ii. Cas où $\Theta \to 0$ où la plupart des compartiments sont hybrides mais de bonne qualité ($0{,}9 \leq \Gamma < 1$)

Une véritable plus-value à la méthode serait de disposer de règles quantitatives pour effectuer le découpage optimal. Il serait très intéressant d'approfondir l'étude de l'influence de paramètres tels que Γ et Φ voir de créer d'autres critères.

III.5 Modélisation de la dispersion d'un traceur

La première étape visait à représenter les grandes tendances de l'écoulement. Nous nous intéressons ici à la prédiction de la dispersion d'un traceur injecté à la surface de la cuve. Les courbes de la Figure III-14 page 164 (réalisées dans le cadre des conditions opératoires décrites sur la Figure III-2 page 153) illustrent cette dispersion.

III.5.1 Courbes de dispersion

Pour obtenir les courbes de dispersion à l'aide du modèle à compartiments, on injecte un traceur passif dans le compartiment où se situe la croix et on enregistre les concentrations en sortie des compartiments où sont situés les points A, B, C et D (voir Figure III-22 et Figure III-23). Le signal d'entrée est le même que pour les courbes de DTS. Toutes les courbes de dispersion représentent la concentration normée en traceur :

- Au point A pour la Figure III-37
- Au point B pour la Figure III-38
- Au point C pour la Figure III-39
- Au point D pour la Figure III-40

Bien qu'un modèle optimal ait été défini, nous avons souhaité tester deux autres configurations qui ont attiré notre attention (voir paragraphe III.4.2) pour connaître l'influence du découpage sur la prédiction de la dispersion du traceur :

- Le modèle à trois couches $N_h = 3$ avec $h_1 = 12\ cm$ et $h_2 = 6\ cm$ car il produit la même forme de DTS que le modèle de référence.
- Le modèle à $N_L = 9$ tranches d'épaisseur variable car il produit une DTS de meilleure qualité sur certain aspect (au détriment d'une perte de qualité sur d'autres aspects)

Sur chaque figure sont représentées la courbe de référence provenant de la MFN et les courbes provenant du modèle à compartiments. On constate que les courbes de dispersion ne sont presque pas affectées par le découpage. Globalement les courbes du modèle à compartiments reflètent le comportement global du traceur, à savoir que le pic principal apparaît au bon instant et les queues de courbe s'ajustent parfaitement. En revanche, la forme « creux-pic » entre le pic principal et la queue de courbe n'est pas correctement représentée et la dispersion du pic principal non plus. Pour les point A et B, qui sont proches de l'écoulement rapide dû à l'effet de jet en entrée, la forme « creux-pic » est visible et bien positionnée dans le temps. En revanche pour les point C et D, situés au niveau des faibles vitesses, la forme « creux-pic » n'est pas du tout visible sur les courbes des modèles à compartiments. On peut conclure que le modèle à compartiments en tranches identiques donne des résultats moins précis que la MFN car les courbes de dispersion ne reflètent) pas exactement le comportement du traceur de manière locale, mais il prédit en revanche avec exactitude à quel instant la concentration en traceur est la plus importante ce qui est suffisant pour la problématique du traitement des algues présentée en début de chapitre.

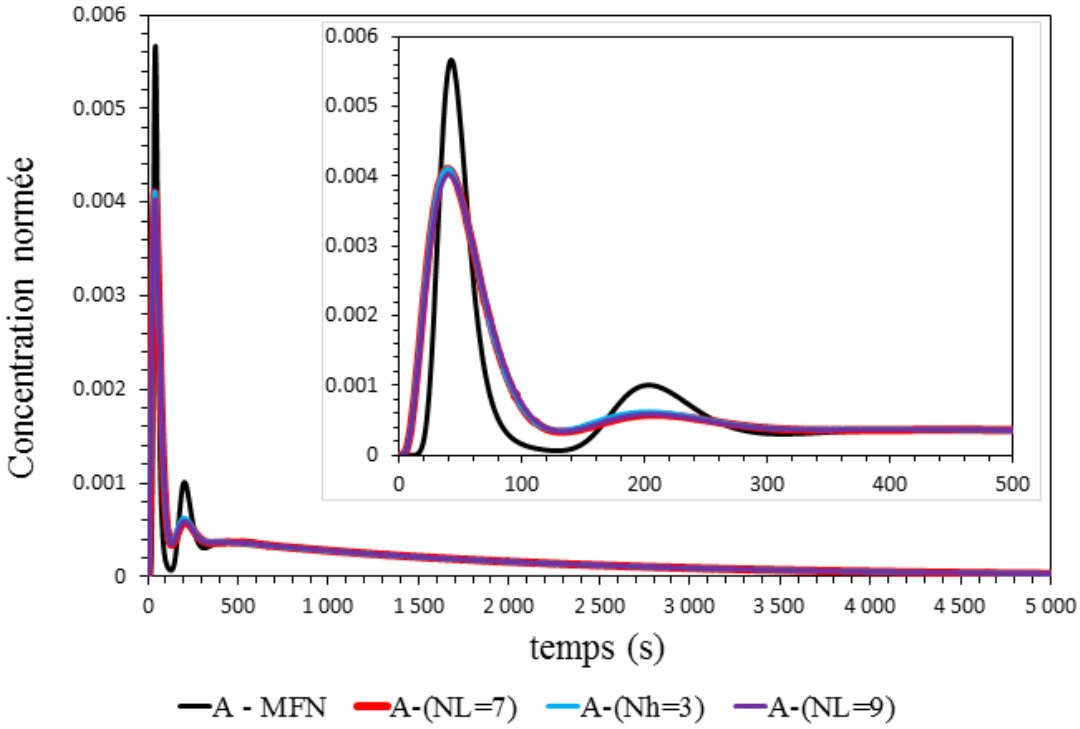


Figure III-37 : Concentration normée au point A en fonction du temps d'un traceur passif injecté en surface de la cuve.

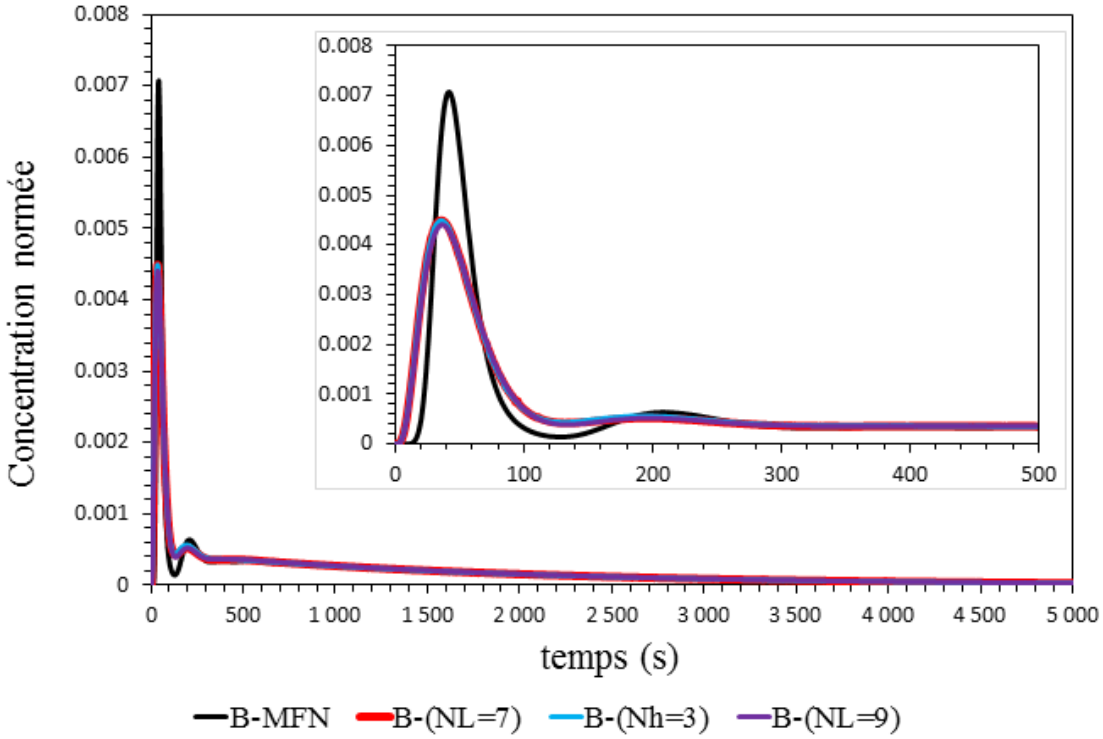


Figure III-38 : Concentration normée au point B en fonction du temps d'un traceur passif injecté en surface de la cuve.

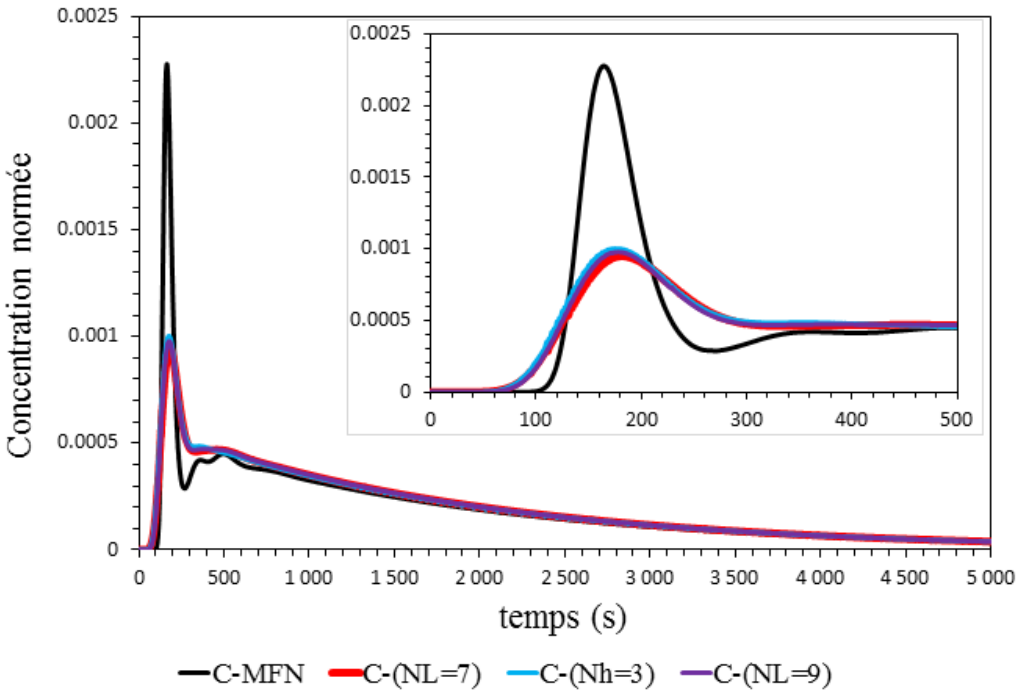


Figure III-39 : Concentration normée au point C en fonction du temps d'un traceur passif injecté en surface de la cuve.

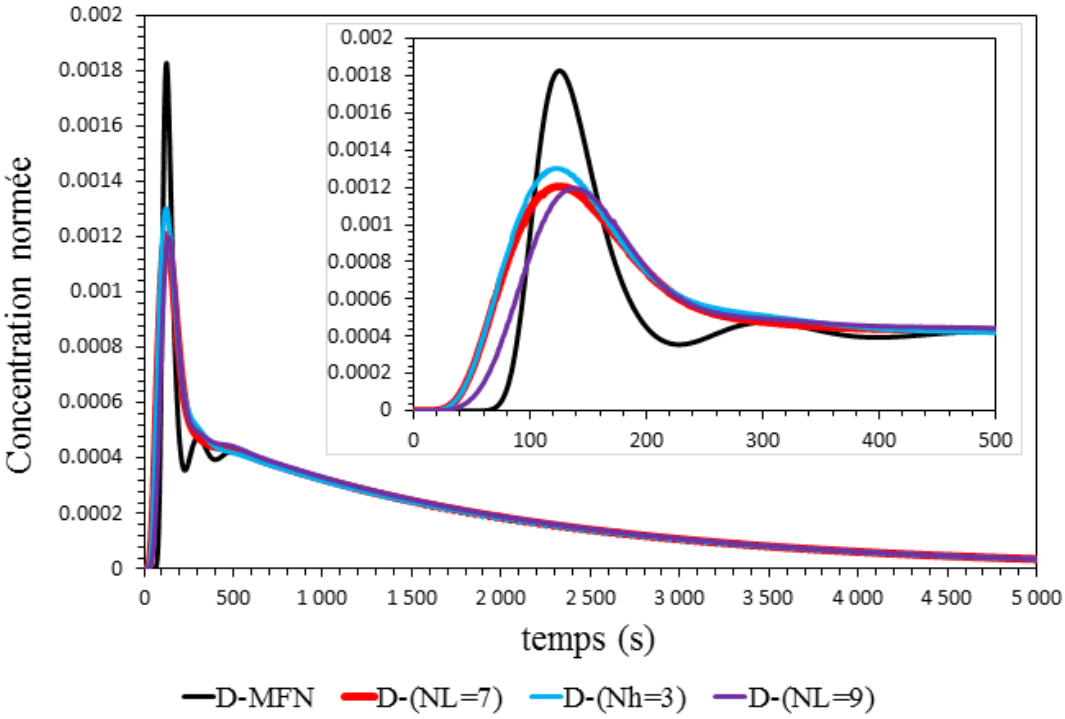


Figure III-40 : Concentration normée au point D en fonction du temps d'un traceur passif injecté en surface de la cuve.

III.5.2 Conclusions

Il est intéressant de constater que le découpage n'influe presque pas sur les courbes de dispersion. Ajouter une couche intermédiaire ou découper l'épaisseur des tranches sur la base de critères physiques (avec des épaisseurs variables) n'apporte pas des résultats de meilleures qualité. Le découpage en tranches identiques, avec le nombre minimal de compartiments, est finalement un modèle qui représente bien les tendances générales des courbes de dispersion (apparition du pic principal et queue de courbes).

III.6 Influence des échanges turbulents

Comme nous l'avons vu au paragraphe II.3.2, la littérature propose trois manières de prendre en compte la turbulence dans les échanges entre les compartiments. A notre connaissance aucune comparaison de ces trois méthodes n'a été réalisée dans la littérature. Nous proposons ici une étude comparative de ces trois méthodes sur le même cas d'application qui a été choisi pour tester la méthodologie de découpage en tranches identiques.

III.6.1 Rappel de la littérature : trois approches existantes

Pour une espèce chimique i, le débit de matière Q_m entre deux compartiments ayant une surface d'échange commune est égal au débit volumique Q_v multiplié par la concentration C_i (voir équation [III.2]). On souhaite déterminer Q_v^{turb} qui est le débit volumique turbulent. Soient deux compartiments A et B dont les centres sont distants de Δx qui échangent de la matière à travers une surface commune S. L'échange turbulent s'interprète comme un double débit traversant la surface S dans les deux sens comme le montre la Figure II-14. Les trois approches identifiées se distinguent par la manière de calculer le débit volumique turbulent Q_v^{turb}. Indépendamment de la méthode choisie, ce débit volumique turbulent est par construction égal dans un sens comme dans l'autre afin conserver le bilan de masse.

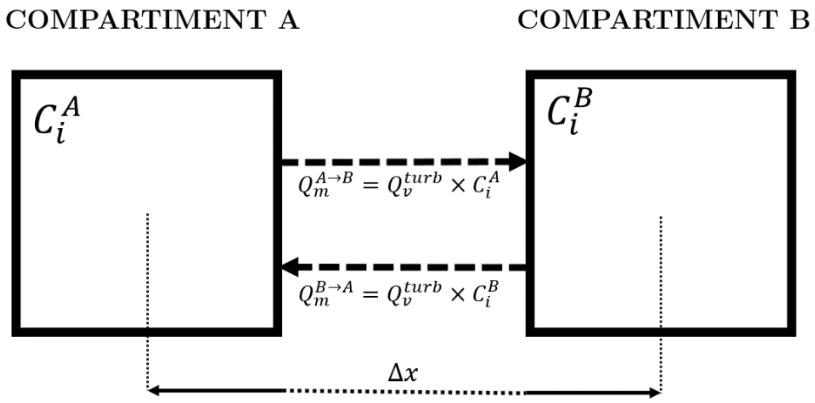


Figure III-41 : Schématisation des échanges turbulents entre deux compartiments

On distingue trois méthodes dont voici un rappel des formules qui sont utilisées (pour plus de détail voir paragraphe II.3.2) :

- Méthode 1 : (Guha et al., 2006) ; Loi de Fick :

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = \frac{D_t\left[\frac{m^2}{s}\right] \times S[m^2]}{\Delta x\,[m]} \qquad \text{[III.4]}$$

avec :

$$D_t\left[\frac{m^2}{s}\right] = \frac{C_\mu}{Sc_t} \times \frac{k^2}{\epsilon} \qquad \text{[III.5]}$$

- Méthode 2 : (Delafosse et al., 2014) ; vitesse turbulente :

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = S[m^2] \times \ < v^{turb} > \left[\frac{m}{s}\right] \qquad \text{[III.6]}$$

avec :

$$< v^{turb} > \ = \sqrt{\frac{2}{3}k^2} \qquad \text{[III.7]}$$

- Méthode 3 : (Le Moullec et al., 2010) : analogie RPA en série et RP dispersif :

$$Q_v^{turb}\left[\frac{m^3}{s}\right] = |\alpha| \times Q_v^{conv}\left[\frac{m^3}{s}\right] \qquad \text{[III.8]}$$

avec :

$$\begin{cases} Q_v^{turb} = \left|\dfrac{\sqrt{A^2+8A}}{4A} - \dfrac{1}{4}\right| \times Q_v^{conv} \\ A = \dfrac{Q_v^{conv} \times \Delta x \times Sc_t \times \epsilon}{2 \times S \times C_\mu \times k^2} \end{cases} \qquad \text{[III.9]}$$

Dans chacun des cas, le débit volumique turbulent est calculé à partir de l'énergie cinétique turbulente k, la dissipation d'énergie cinétique turbulente ϵ, le nombre de Schmidt turbulent Sc_t, et la constante C_μ.

III.6.2 Comparaison des trois approches

Comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, les deux grandeurs nécessaires pour calculer les débits turbulents sont k et ϵ ainsi que les constantes C_μ et Sc_t. De la même manière que sont collectées les valeurs des vitesses moyennes au sein des surfaces d'échanges, nous collectons les valeurs surfaciques moyennes de k et ϵ dans le logiciel de simulation de MFN. La Figure III-10 et la Figure III-11 présentées au paragraphe III.2.4.3 page 160 donnent les champs de ces deux grandeurs. Les valeurs des constantes C_μ et Sc_t sont fixées à $C_\mu = 0.09$ et $Sc_t = 0.8$ comme dans la simulation de MFN réalisée dans le cadre des travaux de (Moussoh, 2016).

III.6.2.1 Comparaison quantitative des débits turbulents

Dans notre cas particulier, les fortes valeurs de k et ϵ sont localisées au niveau du jet à l'entrée. Les échanges turbulents étant calculés à partir des champs k et ϵ au sein des surfaces d'échanges, il est certain que la manière dont le découpage est effectué a un effet non négligeable. Mais dans le présent paragraphe, qui a pour objectif la comparaison des trois approches, nous garderons le modèle présenté au paragraphe III.4.1.4 page 177. Il n'y a pas de raison pour que ce découpage soit particulièrement adapté lorsqu'on prend en compte la turbulence car il a été réalisé sans prendre en compte les grandeurs k et ϵ (seuls les champs de vitesses ont servi au découpage). On peut cependant remarquer que le découpage a lieu sur deux plans (Oxz) en $Y = 8\,cm$ et $16\,cm$ là où la turbulence est la plus importante comme on peut le voir sur les Figure III-10 et Figure III-11.

Nous avons calculé la valeur des débits turbulents avec chacune des trois méthodes et au niveau de toutes les surfaces d'échanges entre compartiments. Nous allons comparer ces débits à l'aide d'histogrammes sur certains plans particuliers indiqués en pointillés bleus sur la Figure III-42 :

- Le plan nommé $l01$ est intéressant car la turbulence y est très faible. La Figure III-43 représente les débits turbulents exprimés en pourcentage du débit convectif sur le plan $l01$ (uniquement sur la partie représentant la couche de surface uniquement, noté « haut », et sur toutes les tranches, de 1 à 7.
- A l'inverse sur le plan nommé le plan $l05$ la turbulence est très forte dû à l'effet de jet en entrée. La Figure III-44 représente les débits turbulents exprimés en pourcentage du débit convectif sur le plan $l05$ (uniquement sur la partie représentant la couche de surface uniquement, noté « haut », et sur toutes les tranches, de 1 à 7.
- Le plan $lo01$ permet de visualiser ce qui se produit perpendiculairement au jet à proximité de l'entrée. La Figure III-45 représente les débits turbulents exprimés en

pourcentage du débit convectif sur le plan $lo01$ (uniquement sur la partie représentant la couche de surface uniquement, noté « haut », et sur toutes les tranches, de 1 à 7.

- Le plan $h01$ donne accès aux échanges entre la couche de surface et le fond de la cuve. La Figure III-46 représente les débits turbulents exprimés en pourcentage du débit convectif sur le plan $h01$ (entre tous les compartiments de chaque tranche de 1 à 7 et chaque division dans la largeur de 1 à 7, soit un nombre total de 49 plans).

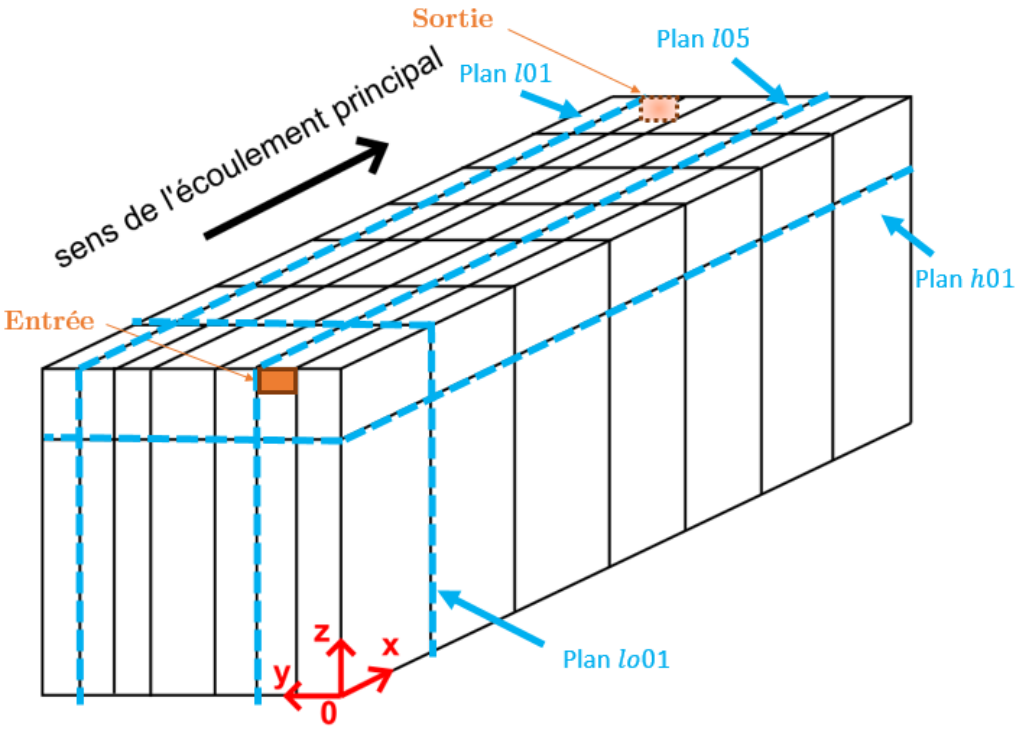


Figure III-42 : Schéma du modèle de référence ($N_L = 7$ tranches ; $N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$; $N_l = 7$). En pointillés bleus les plans choisis pour représenter les valeurs des débits turbulents calculés avec les trois méthodes de la littérature.

Deux observations sont intéressantes à souligner :

- D'une manière générale on constate que les débits provenant de la méthode (Delafosse et al., 2014) sont toujours plus élevés que ceux de la méthode (Guha et al., 2006).
- On constate également que les débits de la méthode (Le Moullec et al., 2010) sont très faibles par rapport aux deux autres méthodes sur la plupart des plans mais ponctuellement très élevés (jusqu'à 1000000% du débit convectif).

Sur les plans $l01$ et $h01$ les débits turbulents sont moins importants (en dessous de 1) mais du même ordre de grandeur que les débits convectifs. Sur le plan $l05$, qui se trouve au niveau du jet d'entrée, les débits turbulents sont globalement plus importants que les débits convectifs. Les débits calculés par la méthode de (Le Moullec et al., 2010) sont inférieurs à 5% du débit convectif dans les plans de $l01$ et $l05$ sauf sur le plan "$l05 - haut - 1$" où le débit turbulent vaut 1000% du débit convectif. Ce comportement est également observé sur $l06$ (non présenté

dans ce manuscrit). Pour le plan perpendiculaire au jet principal (lo01) le débit turbulent calculé par la méthode (Le Moullec et al., 2010) atteint la valeur exceptionnelle de 1000000% du débit convectif sur le plan "$lo01 - haut - 6$" empêchant toute comparaison avec les deux autres méthodes. Enfin sur le plan $h01$ on observe que les débits turbulents sont globalement plus faibles que les débits convectifs sauf pour la méthode (Le Moullec et al., 2010) qui propose des valeurs ponctuellement très fortes.

Cette première analyse permet de conclure que les trois méthodes de calcul des échanges turbulents ne donnent pas les mêmes résultats. Les échanges sont globalement plus importants avec le méthode (Delafosse et al., 2014) qu'avec la méthode (Guha et al., 2006) et la méthode (Le Moullec et al., 2010) donne des débits turbulents soit très importants soit très faibles. On souhaite à présent connaître l'effet de ces différences sur la courbe de DTS.

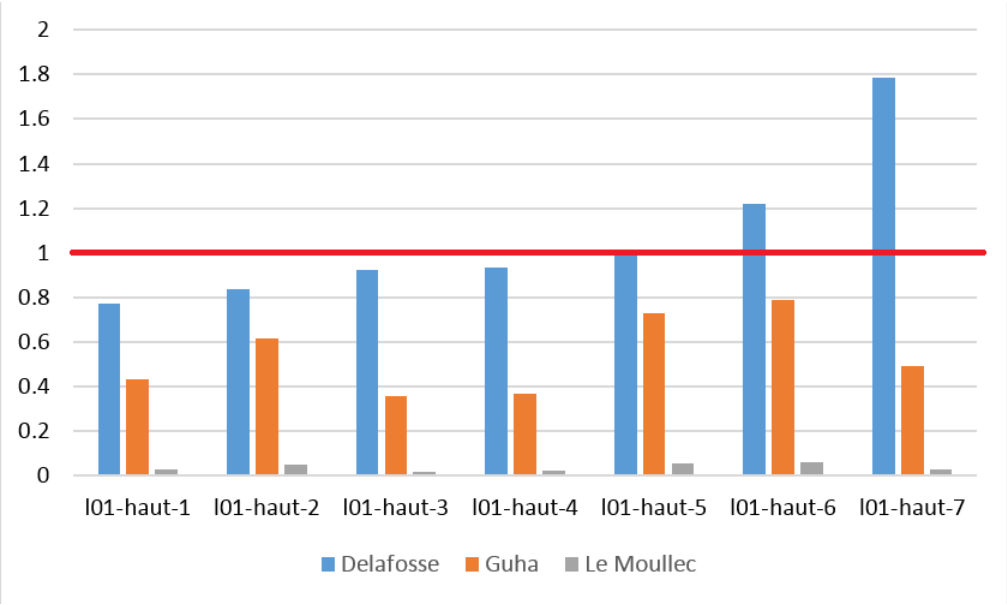


Figure III-43 : Débits turbulents exprimés en pourcentage du débit convectif dans le plan l01 *sur les compartiments de la couche de surface (haut) sur chacune des tranches (1 à 7).*

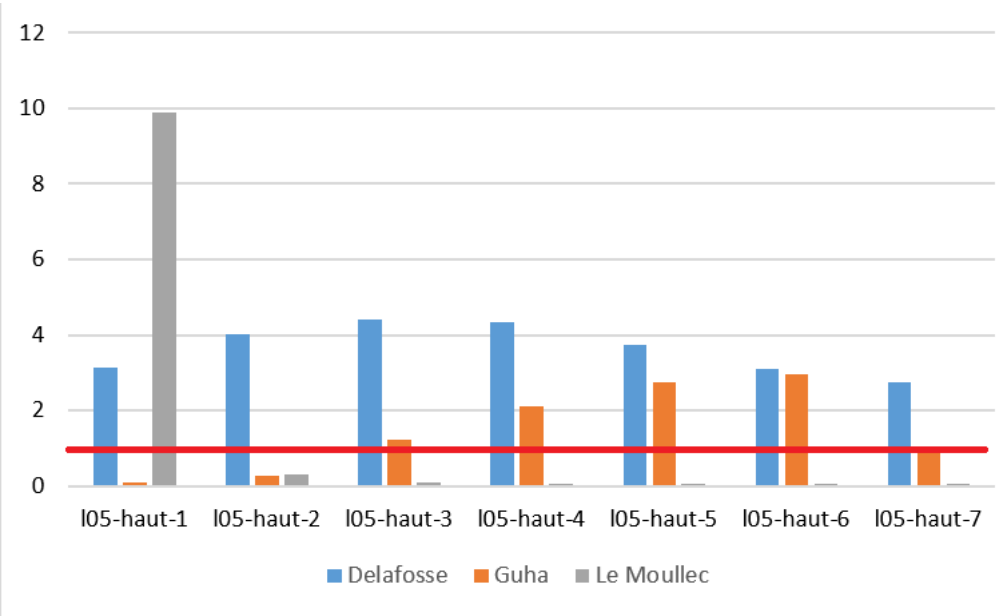


Figure III-44 : Débits turbulents exprimés en pourcentage du débit convectif dans le plan l05 *sur les compartiments de la couche de surface (haut) sur chacune des tranches (1 à 7).*

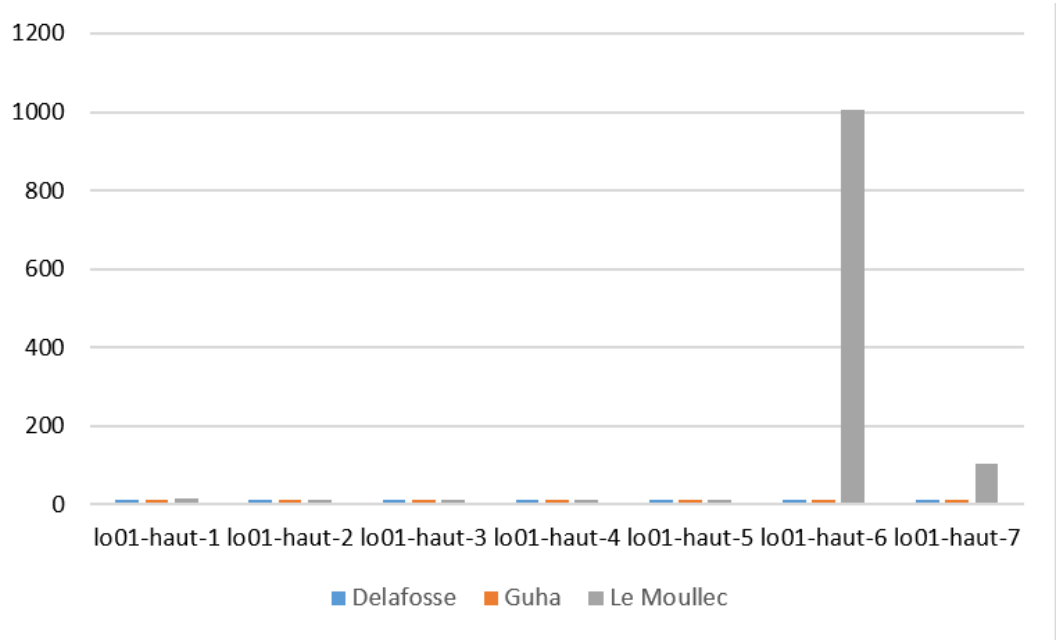


Figure III-45 : Débits turbulents exprimés en pourcentage du débit convectif dans le plan $lo01$ *sur les compartiments de la couche de surface (haut) sur chacune des subdivisions dans la largeur (1 à 7).*

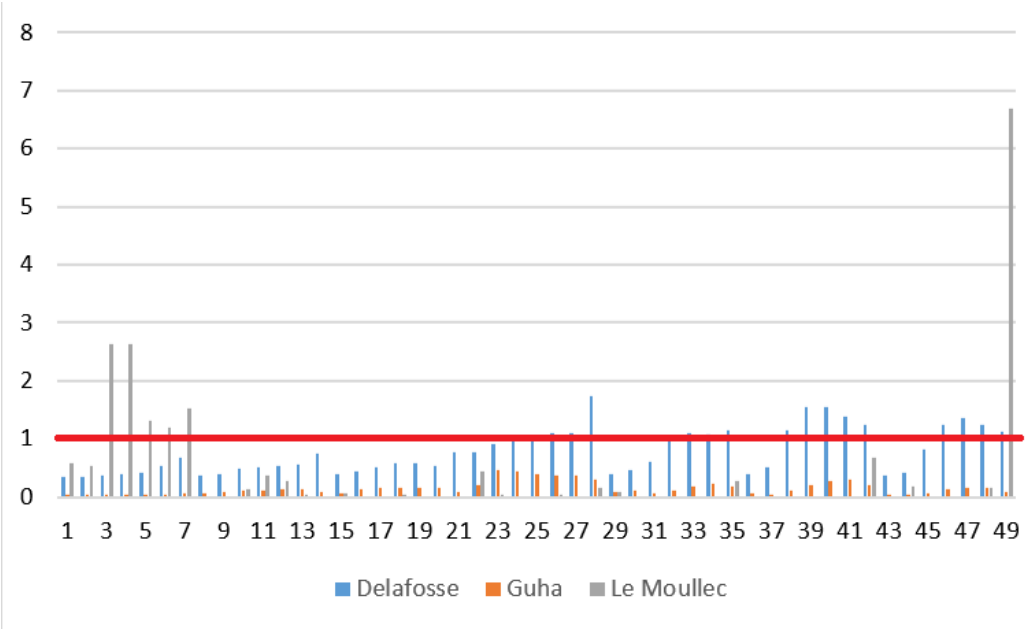


Figure III-46 : Débits turbulents exprimés en pourcentage du débit convectif dans le plan $h01$ *sur tous les compartiments (1 à 49).*

III.6.2.2 Effet sur la DTS

Maintenant que nous avons comparé les débits turbulents calculés par les trois méthodes, nous allons les utiliser pour calculer les DTS du modèle. La Figure III-47 représente les DTS avec et sans échanges turbulents. On observe pour les trois méthodes une diminution de la hauteur du pic principal et un accroissement de sa dispersion. On observe également l'absence de la forme « creux-pic ». Pour la méthode (Delafosse et al., 2014), ces observations sont plus prononcées que pour les méthodes (Guha et al., 2006) et (Le Moullec et al., 2010). Cela s'explique par le fait que les débits turbulents sont globalement plus importants avec la méthode (Delafosse et al., 2014) comme nous l'avons vu au paragraphe précédent.

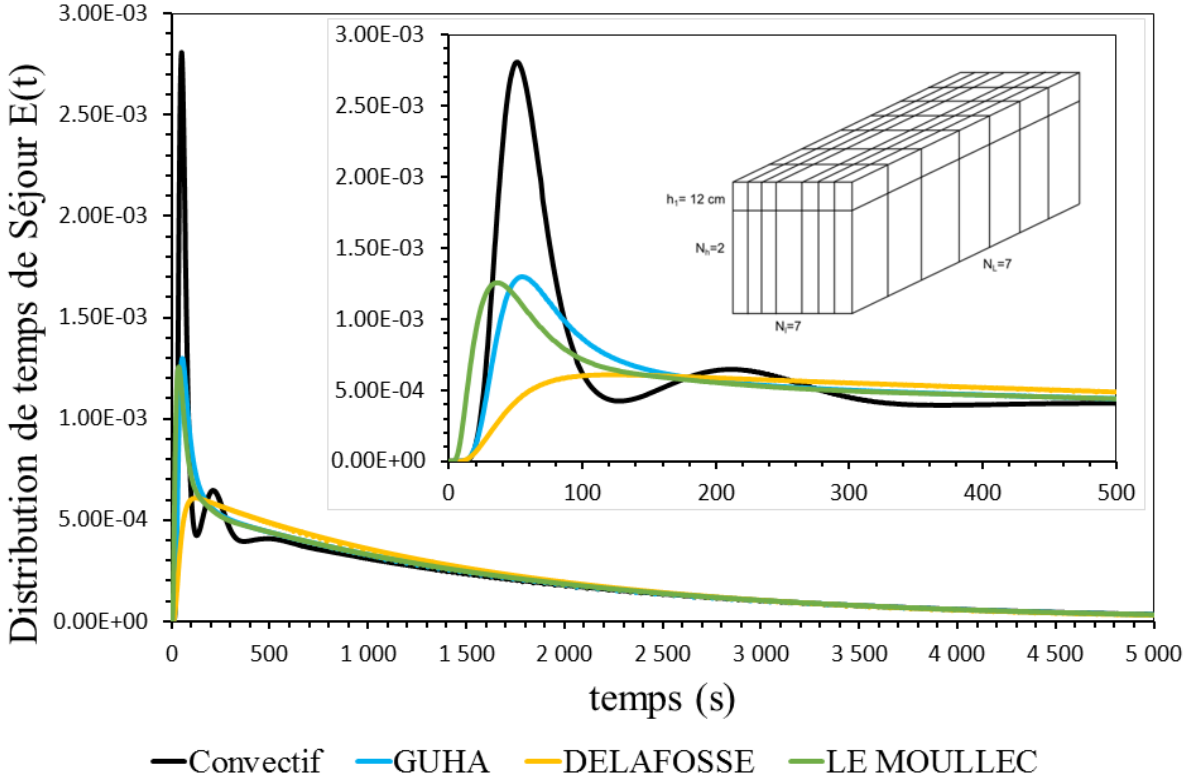


Figure III-47 : Courbes de DTS avec ou sans échanges turbulents. Modèle : $N_L = 7$ tranches ; $N_h = 2$ avec $h_1 = 12\ cm$; $N_l = 7$.

Nous pouvons conclure que le choix de la méthode de calcul des échanges turbulents a des conséquences importantes sur la forme de la DTS. D'une part, les méthodes donnent des résultats différents, d'autre part le découpage réalisé avec des échanges purement convectifs ne convient plus lorsqu'on prend en compte les échanges turbulents. Cela soulève des questions fondamentales sur la nécessité de prendre en compte ou non la turbulence. Quelle méthode de calcul des échanges turbulents est la plus adaptée ? Une étude plus approfondie sur un cas d'application plus adapté serait nécessaire pour extraire des critères de choix d'un modèle plutôt qu'un autre. Ensuite, il faudrait recommencer la démarche du découpage en prenant en compte les échanges turbulents, ce qui aurait comme conséquence de modifier la structure du

modèle. Cela permettrait de vérifier s'il est possible d'obtenir de meilleurs résultats que lorsqu'on ne prend en compte que les échanges convectifs. Est-il possible de modéliser parfaitement la DTS lorsqu'on prend en compte les échanges turbulents ? Ces investigations n'ont pas été traitées dans le cadre de cette thèse par manque de temps. Nous proposons néanmoins une première étude embryonnaire concernant l'effet du découpage sur les courbes de DTS.

Influence du découpage

Les échanges turbulents étant calculés à partir des champs k et ϵ au sein des surfaces d'échanges et ces données étant très localisées dans notre exemple d'application, nous pensons que la manière dont le découpage est effectué a des effets non négligeables. C'est pourquoi, nous souhaitons appliquer les trois méthodes de calcul des échanges turbulents sur un autre modèle que celui déterminé au paragraphe III.4. Nous avons choisi un découpage arbitraire de la cuve dont les surfaces d'échanges entre les compartiments ne coïncident pas avec les maxima observés des grandeurs k et ϵ. Ce modèle est le suivant : $N_L = 8$ tranches identiques ; $N_h = 2$ avec $h_1 = 6\ cm$; $N_l = 4$ compartiments identiques dans la largeur. La Figure III-48 représente les distributions de temps de séjour avec et sans échanges turbulents pour ce modèle. De prime abord, on observe des effets similaires que pour le découpage initialement utilisé pour comparer les trois approches. On constate une atténuation de l'amplitude du pic principal et une augmentation de la dispersion avec un effet plus important avec la méthode (Delafosse et al., 2014) qu'avec la méthode (Guha et al., 2006). Si on regarde plus en détail, la courbe de DTS provenant de la méthode (Guha et al., 2006) est intéressante car elle conserve la forme générale de la DTS convective, à savoir que le pic principal n'est ni retardé ni avancé, il est juste diminué, et la forme « creux-pic » est légèrement plus accentuée. Concernant la méthode (Le Moullec et al., 2010), la courbe de DTS se comporte de manière inattendue en comparaison avec les deux autres méthodes et la courbe est fortement altérée par rapport au cas sans échanges turbulents.

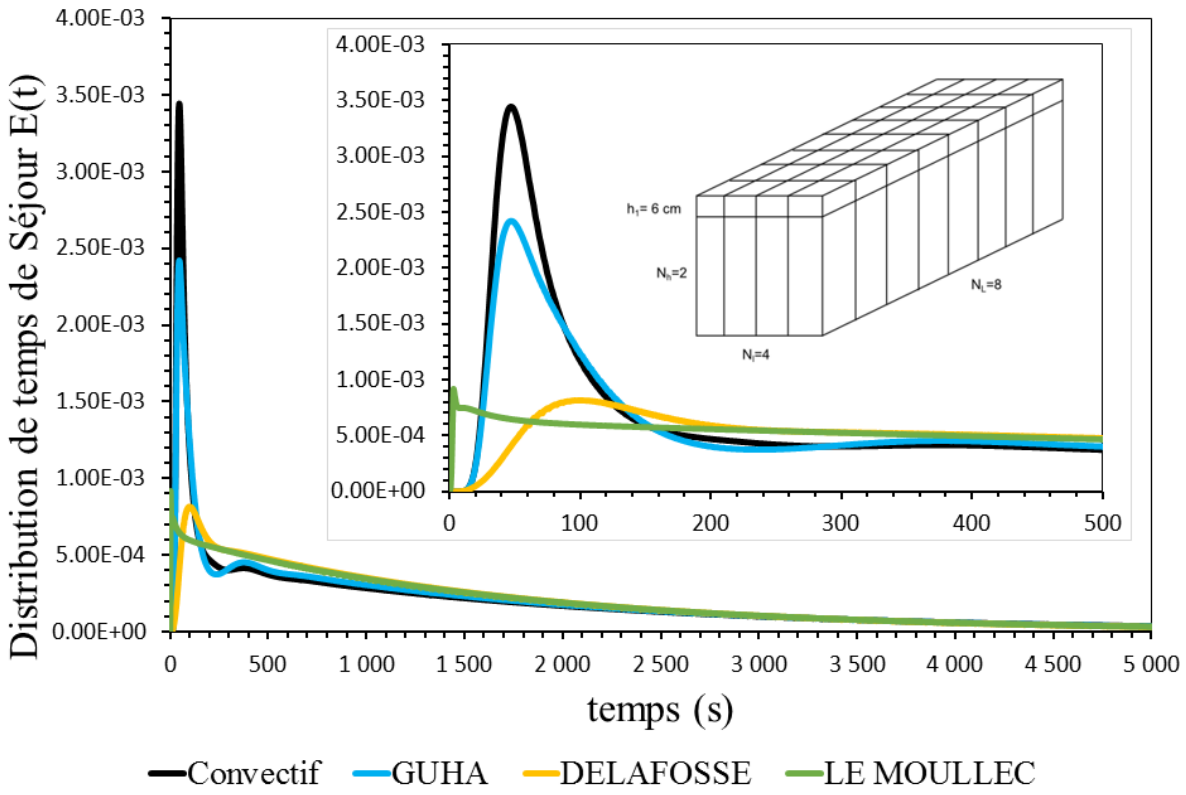


Figure III-48 : Courbes de DTS avec ou sans échanges turbulents. Découpage arbitraire de la cuve : $N_L = 8$ tranches ; $N_h = 2$ avec $h_1 = 6\ cm$; $N_l = 4$.

Le test effectué sur une autre structure de modèle a mis en évidence des effets sur les courbes de DTS difficile à interpréter. La démarche de découpage lorsque les échanges turbulents sont pris en compte pourrait ainsi s'avérer plus compliquée que lorsque que l'on prend en compte uniquement des échanges convectifs.

III.6.3 Conclusions sur les échanges turbulents

Dans ce paragraphe, nous avons calculé pour notre cas d'application les échanges turbulents avec les trois approches proposées dans la littérature et nous avons observé que les trois approches donnaient des résultats différents. Les débits turbulents sont globalement plus importants avec la méthode de (Delafosse et al., 2014) qu'avec la méthode de (Guha et al., 2006) et la méthode de (Le Moullec et al., 2010) donne des débits turbulents globalement très faibles mais ponctuellement très élevés. Ce résultat soulève la question de savoir quelle approche est plus adaptée en fonction du problème traité.

L'impact sur la DTS n'est pas négligeable et peut se résumer pour les trois approches à une diminution du pic principal et une augmentation de sa dispersion. Ces effets sont plus important avec la méthode de (Delafosse et al., 2014) du fait de débits turbulents plus importants que dans la méthode de (Guha et al., 2006) et (Le Moullec et al., 2010). Il est de

plus nécessaire de redéfinir la structure du réseau de compartiments lorsqu'on prend en compte les échanges turbulents. Nous n'avons pas réalisé ce travail par manque de temps mais des résultats préliminaires ont montré qu'une modification du découpage conduit à une modification des courbes de DTS. Nous ignorons donc s'il est possible de trouver un modèle optimal avec échanges turbulents et nous ignorons s'il est de meilleure qualité que celui établi sans les échanges turbulents. Une étude plus approfondie est nécessaire pour répondre à ces questions. Il faut noter que l'optimisation de la structure du réseau de compartiment sans échanges turbulent permet de prendre en compte de manière implicite les échanges turbulents à travers la dispersion numérique inhérente à cette approche.

III.7 Conclusions et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons appliqué notre méthode de modélisation compartimentale à un cas d'application spécifiquement choisi pour tester le découpage en tranches identiques. Dans un premier temps, nous n'avons pris en compte que des échanges de type convectif. Dans un second temps nous avons testé l'influence de la prise en compte des échanges turbulents.

III.7.1 Découpage en tranches identiques

Nous avons souligné que la plupart des travaux de modélisation compartimentale qui ont été réalisés par le passé consistent en un découpage en tranches identiques même si les auteurs ne le présentent pas comme tel. Souhaitant développer la méthode la plus générale possible, nous avons voulu tester l'applicabilité du découpage en tranches identiques sur un exemple *a priori* défavorable. En effet, les cas traités dans la littérature présentent tous au moins une caractéristique particulière qui permet de simplifier le découpage. Le cas d'étude choisi est une cuve ouverte remplie d'eau dont les dimensions ont été calculées pour représenter le comportement réel d'un étang mais à l'échelle pilote. Les conditions opératoires choisies pour construire le modèle à compartiments induisent de fortes dissymétries dans l'écoulement ce qui n'est pas favorable à un découpage en tranches identiques. A l'aide d'un découpage basé sur l'analyse des champs de vitesses, il a été possible de développer un modèle à 98 compartiments qui représente convenablement la DTS. Comme on pouvait s'y attendre, la contrainte des tranches identiques limite la qualité de la courbe de DTS qui n'est pas parfaitement identique à la courbe de référence. Plusieurs pistes pourraient être explorées pour améliorer la prédiction de la DTS comme faire des tranches dont l'épaisseur n'est pas forcément identique en particulier au niveau de l'entrée et de la sortie de la cuve.

Nous avons montré sur plusieurs exemples que l'augmentation du nombre de compartiments n'était pas une bonne méthode pour améliorer la DTS. En effet, un découpage géométrique n'a pas permis d'améliorer la DTS malgré un nombre neuf fois plus grand de compartiments, une couche intermédiaire entre la surface et le fond de la cuve a au mieux conservé la même qualité de description et un découpage en 14 tranches identiques donne les mêmes résultats qu'un

découpage en 9 tranches dont les épaisseurs sont adaptées aux singularités de l'écoulement aux niveaux de l'entrée et de la sortie. Le modèle permet de simuler les courbes de dispersion en surface de l'étang avec la même précision que les trois autres configurations que nous venons de citer. Cela souligne la nécessité de réaliser des découpages intelligents.

Nous avons défini deux grandeurs qui permettent de décrire quantitativement le degré de perfection du découpage. Malheureusement les fortes dissymétries de l'écoulement n'ont pas permis de faire une analyse rigoureuse de l'influence de ces paramètres et une étude approfondie sur un cas plus adapté serait nécessaire pour extraire des tendances.

Au final on peut conclure que la méthode en tranches identiques présente un « bon rapport qualité/prix » entre précision des résultats obtenus et facilité d'utilisation et cela malgré un cas d'application particulièrement défavorable.

III.7.2 Echanges turbulents

Dans une seconde partie nous avons testé l'influence des échanges turbulents. Cette étude n'est qu'embryonnaire mais a permis de mettre en évidence deux points intéressants. D'une part, comme on pouvait s'y attendre, la prise en compte des échanges turbulents affecte fortement la forme des courbes de DTS. D'autre part les différentes méthodes de calcul des échanges turbulents donnent des résultats différents. Cela souligne la nécessité d'approfondir les hypothèses réalisées dans chaque méthode afin de déterminer dans quelle situation quelle méthode serait la plus adaptée.

III.7.3 Valorisation pour le logiciel

Grâce au découpage en tranches identiques, la structure globale du modèle est régulière ce qui nous a permis de tester l'algorithme de remplissage automatique de la matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange développés dans la méthode générale. L'algorithme remplit automatiquement la matrice (voir 0paragraphes IV.3.4.1 et IV.4) à partir des débits provenant de la mécanique des fluides numérique puis le solveur dassl résout le système d'équations différentielles (voir 0paragraphe IV.3.4). Les nombreuses configurations testées ont permis de mettre à l'épreuve l'algorithme. Le chapitre suivant traite en détail de la manière dont est écrit le système d'équations différentielles (d'une manière générale et avec réactions chimiques) et comment les algorithmes développés dans ces travaux de thèse ont été implémentés dans un logiciel avec une interface graphique qui sera commercialisée.

Nous avons réalisé dans notre étude un découpage qualitatif réalisé « à la main » et géométrique. Dans ces approches les frontières des compartiments sont directement déterminés par l'utilisateur. L'algorithme de découpage par division successives, présenté dans la méthode (voir paragraphe II.2.2.2), n'a pas été utilisé dans ces travaux et ni développé par manque de

temps. Cette méthode de division, qui est intermédiaire encore le découpage qualitatif et le découpage géométrique mériterait d'être implémenté car la tâche n'est théoriquement pas insurmontable. Un tel outil de découpage permettrait d'obtenir immédiatement le modèle optimal ce qui ouvre une porte intéressante dans le sens de l'automatisation et la généralisation de la modélisation compartimentale. Un tel outil devrait cependant être utilisé avec beaucoup de précaution afin de ne pas réaliser des optimisations sans réel sens physique.

III.7.4 Applicabilité de la méthode sur les travaux de la littérature

Comme nous l'avons signalé en début de chapitre, les travaux de la littérature peuvent être considérés comme un découpage en tranches qui se succèdent dans une direction. Sauf cas vraiment particulier, les tranches sont en plus identiques. Sous réserve de réussir à récupérer auprès des auteurs leur données, il serait intéressant d'appliquer notre méthode de découpage en tranches sur les travaux cités.

(Rigopoulos and Jones, 2003)

Il est évident que la méthode pourrait reproduire un modèle à compartiments similaire. Le découpage en tranches identiques est parfaitement adapté à cette configuration très symétrique. Il pourrait être intéressant de calculer les échanges convectifs à partir des simulations de MFN et de calculer des échanges turbulents entre tous les compartiments, et pas seulement entre ceux de la partie ascendante de l'écoulement, afin de comparer la précision des résultats obtenus.

(Le Moullec et al., 2010)

L'application modélisée dans ces travaux pourrait également être modélisée par la méthode générale. A vrai dire la méthodologie de découpage en tranches présentée dans le chapitre est inspirée de ces travaux. Plusieurs paramètres pourraient être testés comme un découpage différent dans les tranches (uniquement liquide et gaz par exemple) et une autre manière de calculer les échanges turbulents. Les méthodes de calcul d'échanges turbulents développées par (Guha et al. 2006) ou (Delafosse et al., 2014) sont parfaitement applicables ici.

(Guha et al. 2006)

Un découpage en tranches avec un réseau de compartiments régulier dans chaque tranche est théoriquement possible mais risque fortement de donner les mêmes résultats qu'un découpage géométrique. Il serait en revanche intéressant de tester une autre manière de calculer les échanges turbulents. Si on regarde attentivement, on remarque qu'il s'agit d'une situation avec très peu de marge de manœuvre ; l'homogénéité du mélange impose un découpage géométrique et la vitesse de réaction une taille minimale de compartiment.

(Gresch et al., 2009)

Un découpage en tranches identiques est parfaitement adapté à ce cas de figure. Notons qu'en fait cela revient au même de faire un découpage en tranches identiques en ajustant le nombre de tranches ou de directement découper en zones où la concentration est homogène. La méthode de (Gresch et al., 2009) impliquant une dimension fictive pour prendre en compte les recirculations sera cette fois directement pris en compte par notre méthode de calcul des échanges.

(Alvarado et al., 2012)

Il serait intéressant de procéder à un découpage en tranches identiques. Notons que la forte dissymétrie de l'écoulement pourrait occasionner des pertes de précisions. Il serait peut-être envisageable de construire des tranches non identiques. Par ailleurs, cet exemple illustre bien la nécessité de raffiner un modèle hydrodynamique lorsque la chimie doit être modélisée. La méthode générale propose de procéder en deux étapes, il serait intéressant de construire un modèle hydrodynamique puis de prendre en compte la chimie afin de vérifier si les résultats sont améliorés.

(Delafosse et al. 2014)

Du point de vue de la méthodologie il semble peu probable qu'un découpage en tranches identiques améliore les résultats. Cette situation est la même que celle de (Guha et al. 2006). De par la nécessité de prendre en compte les réactions biologiques, le maillage final doit être très raffiné mais il serait intéressant d'essayer de représenter uniquement l'hydrodynamique avec un modèle plus simple. Il serait également très intéressant de vérifier si la méthode de calcul des échanges turbulents améliorerait les résultats.

(Nauha and Alopaeus, 2015)

Les nombreux sous-modèles utilisés pour décrire le milieu diphasique gaz-liquide sous forme de bulles de gaz injectées dans un milieu liquide ne sont pas explicitement décrits dans la méthode générale. Ces sous modèles semblent efficaces au vu des résultats précis et prédictifs obtenus par les auteurs. Dans le mesure où le système de barboteur gaz-liquide est souvent rencontré, voir (Rigopoulos and Jones, 2003) et (Le Moullec et al., 2010) par exemple, il serait très intéressant de généraliser l'utilisation de ces sous modèles dans la méthode générale. Néanmoins, il devrait être possible de procéder à un découpage en tranches identiques avec un découpage empirique avec une zone à forte teneur en gaz au milieu de la colonne et une autre à faible teneur en gaz proche des parois. Il serait alors intéressant de quantifier la perte de précision dans les données simulées avec un tel modèle.

CHAPITRE IV : **Valorisation du travail de thèse par l'intégration de la méthode dans un logiciel commercial de simulation de traçage et de suivi de réactions chimiques**

IV.1 Valorisation de la méthode

Nous avons développé lors de cette thèse une méthode la plus générale possible de modélisation compartimentale. La méthode proposée est théorique mais son application par des non spécialistes nécessite de franchir plusieurs obstacles techniques tels que le découpage du système, le calcul des échanges entre les compartiments, le remplissage d'une « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » ainsi que sa lecture afin d'en déduire le système d'équations différentielles à résoudre. Le second objectif de cette thèse consiste à fournir des outils facilitant la mise en œuvre de la méthode théorique, c'est pourquoi nous avons valorisé nos travaux de recherche par la création d'un logiciel. Ce travail a été réalisé en étroite collaboration avec Progepi (http://www.progepi.fr/), organisme de transfert et valorisation du Laboratoire Réactions et Génie des Procédés, qui s'est attaché à développer une interface graphique facile et intuitive à utiliser. Progepi est déjà propriétaire d'un logiciel capable de simuler des DTS (distribution de temps de séjour) à partir de modèles systémiques (DTSPro). Ce logiciel ne traite que des simulations de traçage, et en particulier les DTS, pour des systèmes ouverts en régime stationnaire. En partant des fonctionnalités déjà existantes de ce logiciel nous avons ajouté d'autres fonctionnalités pour permettre, entre autres, de simuler des réactions chimiques, de réaliser des injections des plusieurs espèces (réactives et/ou traceur) en différents lieux, de simuler des systèmes fermés ou ouverts avec plusieurs entrées/sorties, etc.

Nous allons présenter les fonctionnalités pratiques du logiciel en insistant sur les interactions logiciel-utilisateur. Cela nous permettra de décrire les algorithmes développés durant la thèse et leurs fonctions. Le logiciel se décompose en trois modules :

- MODULE 1 : Concerne le post-traitement des courbes de traçage ou de suivi d'espèce.
- MODULE 2 : Vise à faciliter la construction d'un modèle à compartiments en écoulement stationnaire, à moins d'une demi-centaine de compartiments, dont la structure du réseau de compartiments est quelconque. Cela est réalisé de manière intuitive via l'interface graphique.
- MODULE 3 : Propose le paramétrage d'un découpage en tranches identiques sans limitation du nombre de compartiments.

IV.2 MODULE 1 : Post-traitement de courbes expérimentales

Les courbes expérimentales de suivi d'espèces (espèces réactives ou traceurs chimiquement inactifs) nécessitent un post traitement avant de pouvoir être comparées aux signaux simulés

par un modèle. La plupart des fonctionnalités présentées ici sont déjà implémentées dans l'ancien logiciel (DTSPro). Elles ont été initialement prévues pour traiter des courbes d'injection de traceur destinées à réaliser une DTS, c'est-à-dire le suivi en sortie du réacteur de la concentration d'un composé injecté de manière impulsionnelle en entrée. En abscisse est représenté le temps t et en ordonnée le signal de concentration $C(t)$ comme le montre la Figure IV-1.

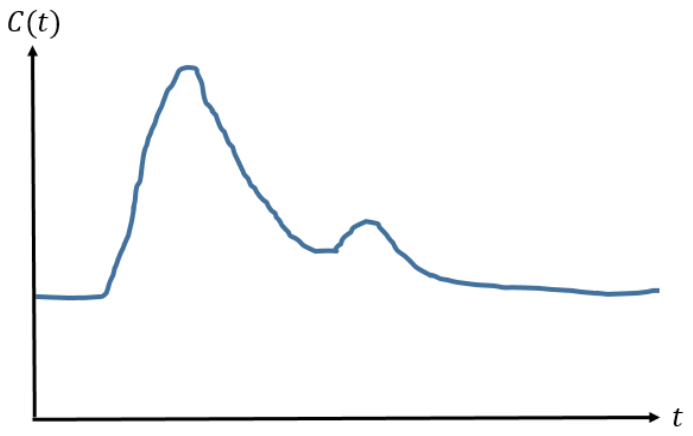


Figure IV-1 : Signal expérimental de DTS

IV.2.1 Troncature des données

L'enregistrement des données expérimentales doit généralement être réalisé sur une durée de temps suffisamment importante pour s'assurer d'obtenir l'ensemble du signal. Par exemple lorsqu'on réalise une DTS il est impératif que la concentration de sortie revienne à une valeur nulle, signe que tout le traceur est bien sorti du réacteur. Une fonction permet, lorsque cela est nécessaire, de supprimer les points non utilisables placés avant ou après le signal recherché. L'utilisateur entre les valeurs de t_{min} et t_{max} (voir Tableau IV-1) et le logiciel ne garde que les données comprises entre ces deux valeurs (voir Figure IV-2).

Tableau IV-1 : Paramètres fournis par l'utilisateur pour effectuer une troncature des données

t_{min}	t_{max}

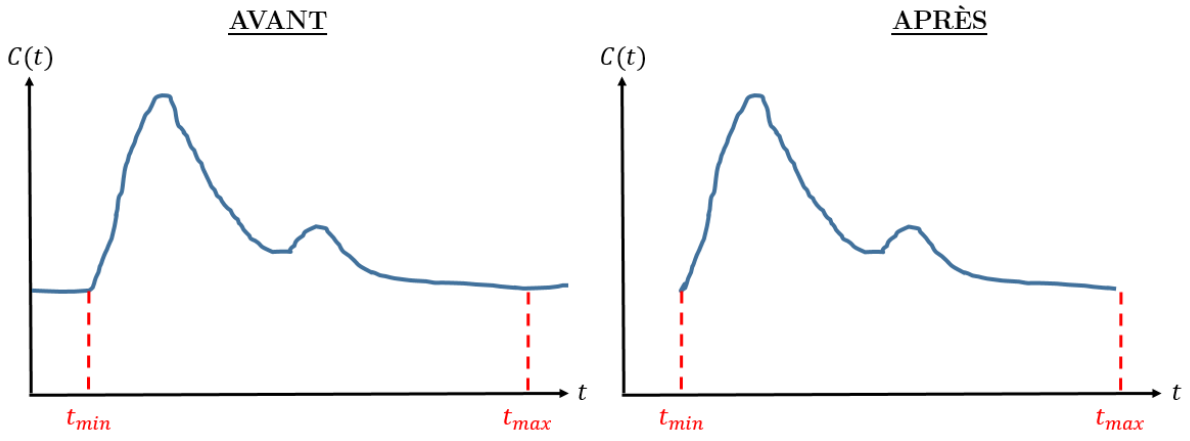


Figure IV-2 : Illustration d'une courbe expérimentale de DTS avant et après le traitement « troncature »

IV.2.2 Translation de la courbe

Lorsque les valeurs enregistrées présentent un décalage non physique, comme par exemple un décalage de l'échelle des temps (temps de début d'expérience différent de 0) ou de l'échelle des concentrations (concentration résiduelle constante dans le milieu étudié), il est possible de translater les courbes afin de les positionner comme désiré sur les axes. L'utilisateur entre des valeurs de X et Y (voir Tableau IV-2) afin de translater le signal en abscisse $(t - X)$ et en ordonnée $(C(t) - Y)$ (voir Figure IV-3).

Tableau IV-2 : Paramètres fournis par l'utilisateur pour effectuer une translation des données

X	Y

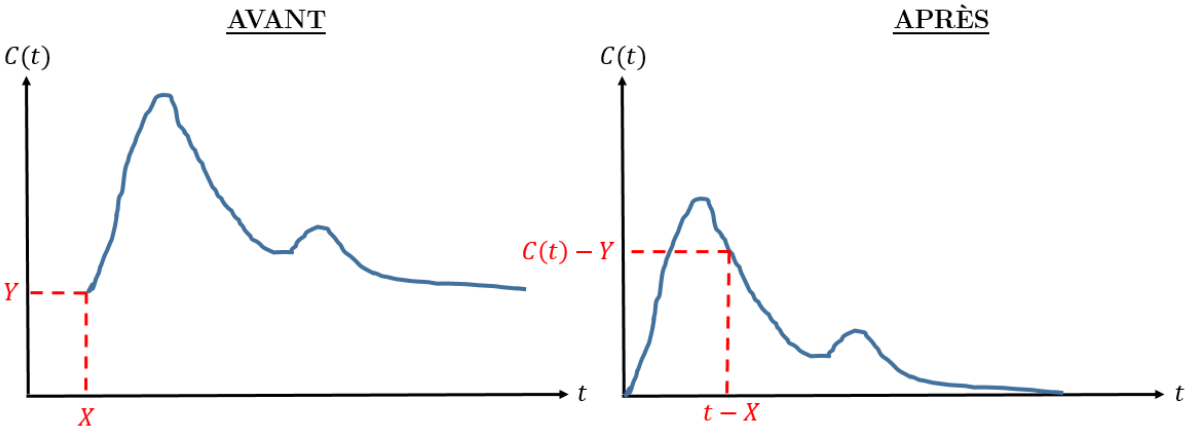


Figure IV-3 : Illustration d'une courbe expérimentale avant et après le traitement « translation »

IV.2.3 Dérive linéaire de la ligne de base

Lorsqu'une dérive linéaire est observée, la ligne de base de la courbe peut être corrigée à l'aide d'une régression linéaire des points situés avant la valeur X_1 et après la valeur X_2 fournies par l'utilisateur (voir Tableau IV-3), puis une rotation du signal.

Tableau IV-3 : Paramètres fournis par l'utilisateur pour effectuer une rotation des données

X_1	X_2

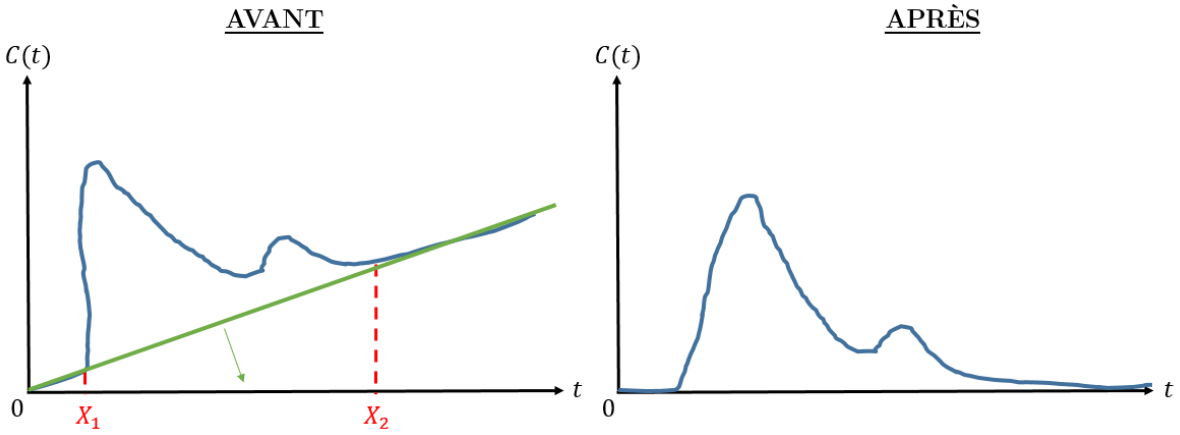


Figure IV-4 : Illustration d'une courbe expérimentale avant et après le traitement « dérive linaire »

IV.2.4 Ré-échantillonnage

Il est possible que les données expérimentales soient enregistrées avec un pas de temps variable. Ce traitement permet de ré-échantillonner la courbe à un pas de temps fixe dt fourni par l'utilisateur (voir Tableau IV-4) en faisant une régression linéaire entre deux points existant pour créer le nouveau point et en supprimant les valeurs n'apparaissant pas aux bons instants (Figure IV-5). Ce traitement est nécessaire car dans le logiciel, tous les signaux d'entrées doivent être discrétisés de la même manière.

Tableau IV-4 : Paramètre fourni par l'utilisateur pour effectuer un ré-échantillonnage des données

dt

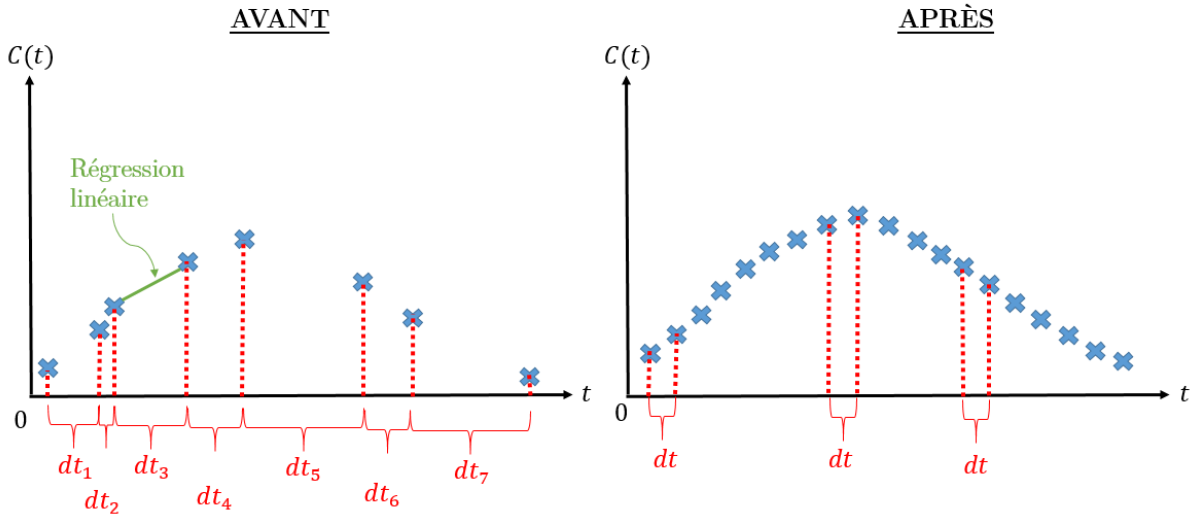


Figure IV-5 : Illustration d'une courbe expérimentale avant et après le traitement « ré-échantillonnage ».

IV.2.5 Normation

Cette fonction simple permet de calculer l'intégrale sous la courbe par la méthode des trapèzes et de normer la courbe, c'est-à-dire de diviser la concentration par l'aire sous la courbe. La courbe normée résultante présente alors une aire sous la courbe égale à 1. Ce traitement peut s'avérer pratique pour comparer plusieurs données mais il est surtout indispensable pour réaliser une DTS. On veillera dans ce cas à vérifier qu'il ne reste pas de signaux parasites qui fausseraient le calcul. Le bruit du signal étant généralement blanc, l'erreur la plus souvent rencontrée consiste à supprimer les valeurs négatives du bruit. Elles doivent impérativement être conservées afin que l'intégrale du bruit soit bien égale à zéro. Concernant les courbes de DTS, le logiciel propose de calculer les différents moments (voir 0paragraphe I.2.1.1).

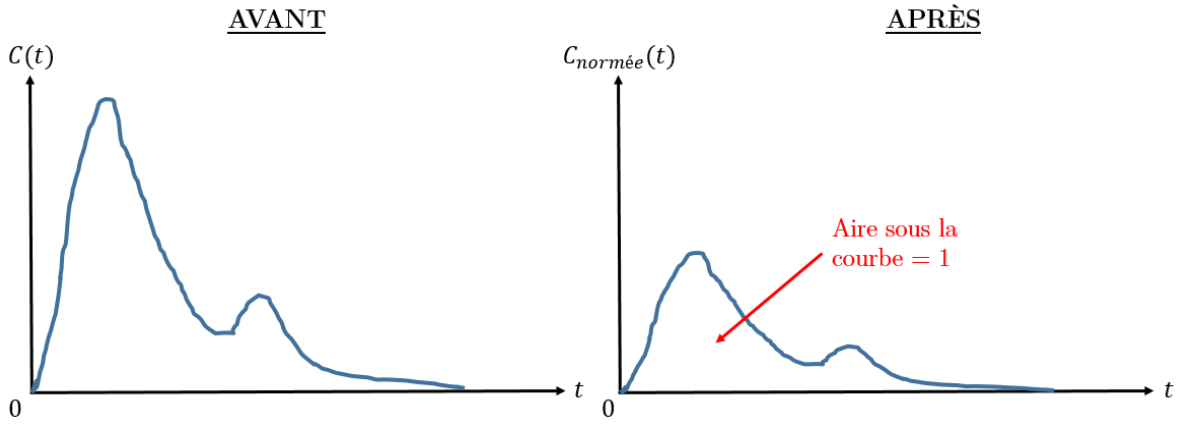


Figure IV-6 : Illustration d'une courbe expérimentale avant et après le traitement « normation ».

IV.2.6 Extrapolation exponentielle

Les mesures expérimentales de terrain ne permettent pas toujours d'enregistrer la totalité du signal en particulier lors de durées très longues dues à la présence de zone stagnante. Bien que cette situation doive être évitée, une correction consiste à réaliser une extrapolation exponentielle de la queue de courbe. L'utilisateur doit fournir les paramètres cités dans le Tableau IV-5 et notamment les deux instants $t = X_{e1}$ et $t = X_{e2}$ en fin d'enregistrement. Les points situés entre ces deux instants seront utilisés pour réaliser la régression exponentielle de la queue de courbe (voir Figure IV-7). Ces points doivent être choisis avec soin pour l'extrapolation. Précisons ici que, comme la dernière valeur de l'extrapolation ne peut mathématiquement pas être nulle, elle est fixée à une valeur la plus proche possible de zéro : $tol \times Y_{max}$ où tol est un pourcentage compris entre 0 et 1 et Y_{max} la valeur maximale de la courbe. Les données sont extrapolées avec un pas de temps égal à dt.

Tableau IV-5 : Paramètres fournis par l'utilisateur pour effectuer une extrapolation exponentielle des données

X_{e1}	X_{e2}	tol	dt

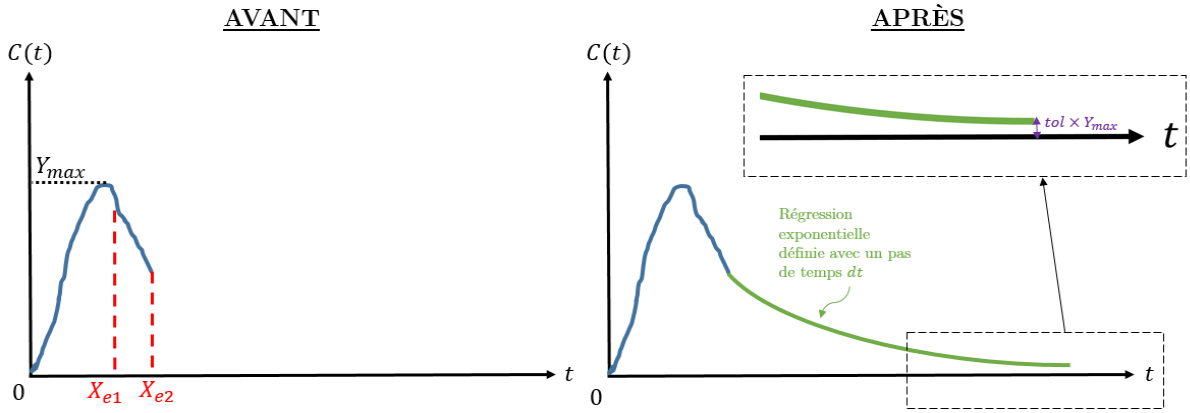


Figure IV-7 : Illustration d'une courbe expérimentale avant et après le traitement « extrapolation exponentielle ».

IV.2.7 Prise en compte de la décroissance radioactive (traçage)

Pour les expériences de traçage avec un traceur radioactif, la décroissance radioactive ne peut être négligée car le temps de demi-vie du traceur radioactif est du même ordre de grandeur ou plus petit que le temps de séjour moyen. Ce scénario n'est pas rare car les radio-isotopes avec grande demi-vie sont rarement autorisés pour des raisons de sécurité. La loi de Rutherford et Soddy (équation [IV.1]) permet de calculer la concentration du radio-isotope à un instant

donné $N(t)$, connaissant la concentration à l'instant initial N_0 et la constante radioactive du radio-isotope λ (s^{-1}). Ces deux paramètres sont fournis par l'utilisateur (voir Tableau IV-6).

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} \qquad \text{[IV.1]}$$

Tableau IV-6 : Paramètre fourni par l'utilisateur pour tenir compte de la désintégration radioactive d'un traceur radioactif.

λ	N_0

La concentration du traceur est corrigée de la manière suivante :

$$C_{corrigée}(t) = \frac{C_{mesurée}(t)}{N_0 e^{-\lambda t}} \qquad \text{[IV.2]}$$

IV.3 MODULE 2 : Construction d'un modèle quelconque

Ce module permet de construire et paramétrer « à la main » un modèle quelconque d'une demi-centaine de compartiments maximum via une nouvelle interface graphique. Ce module contient les mêmes fonctionnalités que l'ancienne version du logiciel DTSPro à savoir la modélisation de systèmes ouverts avec des modèles de type systémique en régime permanent, simulant des expériences de traçage et notamment des DTS. Il est possible de construire des modèles avec (1) une association de réacteurs parfaitement agités (RPA), de cascade de RPA avec ou sans retro-mélange et avec ou sans échange avec des volumes morts, (2) une association de réacteurs pistons (RP), ouverts ou fermés à la dispersion. De nouvelles fonctionnalités ont été incorporées en rapport avec les besoins de la méthode. Il est ainsi possible de :

- Simuler des réactions chimiques en calculant simultanément la concentration de chaque espèce.
- Réaliser des injections d'une ou plusieurs espèces (réactives et/ou traceurs) en un ou plusieurs lieux.
- Simuler des systèmes fermés, c'est-à-dire sans entrée ni sortie de fluide (mouvement du fluide par système d'agitation mécanique par exemple).
- Simuler des systèmes ouverts avec plusieurs entrées et sorties de fluides.

Du point de vue de l'utilisateur, la construction du modèle est réalisée en trois étapes, que nous allons détailler :

1. D'abord on construit le réseau de compartiments, puis on renseigne la position des entrées et sorties de fluides si elles existent et enfin on définit les débits d'échanges entre les compartiments.

2. Ensuite on renseigne les informations relatives au suivi d'espèces (réactives ou traceur). C'est ici qu'on indique les cinétiques chimiques ainsi que les points d'injection et détection des espèces.
3. Enfin on renseigne les paramètres relatifs aux résolutions des équations différentielles (pas de temps et durée de la simulation).

Ces étapes sont réalisées via l'interface graphique. Plusieurs algorithmes entrent alors en jeu pour remplir et lire automatiquement la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » afin de construire le système d'équations différentielles. Après résolution des équations, le logiciel fournit les signaux de toutes les espèces aux points de détection souhaités. Les algorithmes développés pendant la thèse ne seront pas détaillés mais nous allons décrire à quel niveau ils interviennent et quelles fonctions ils remplissent.

IV.3.1 Construction de la structure du modèle

IV.3.1.1 Réseau de compartiments

Le réseau de compartiments est construit en positionnant des compartiments sur le plan de travail du logiciel (voir un exemple illustratif avec 4 compartiments sur la capture d'écran du logiciel sur Figure IV-8). Nous ne détaillons pas ici la méthode d'obtention de ce découpage qui dépend de chaque réacteur chimique à modéliser (se référer paragraphe II.2).

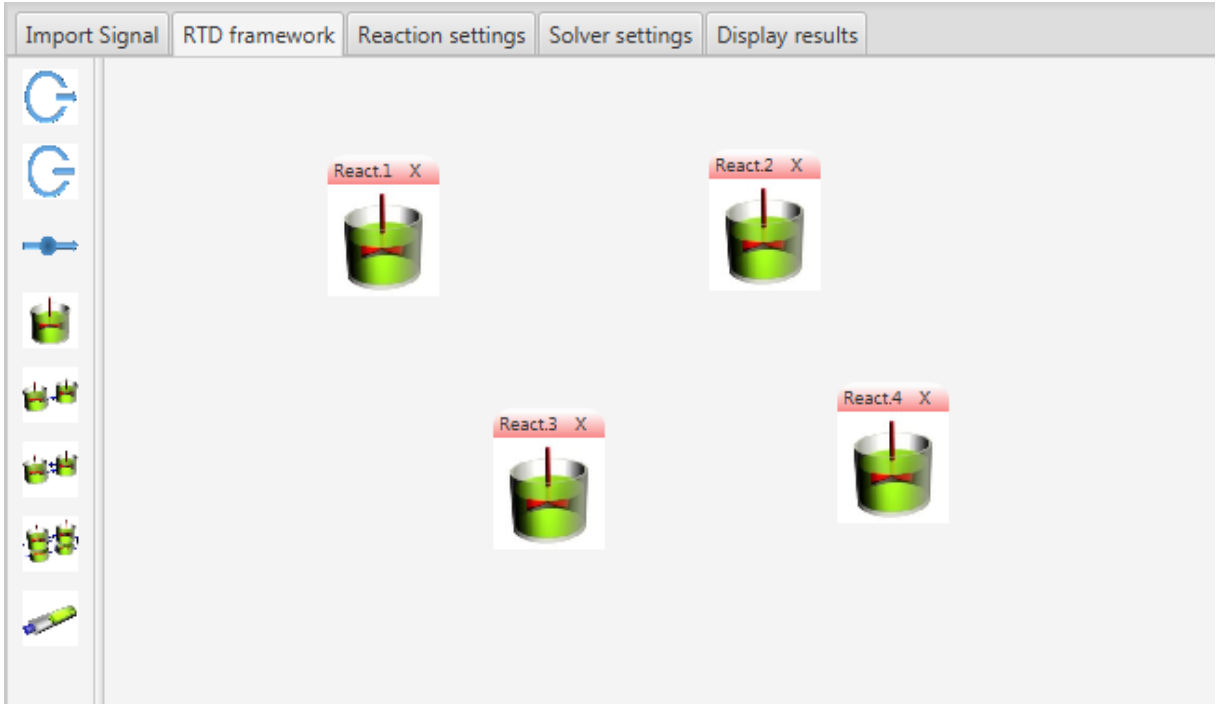


Figure IV-8 : L'utilisateur dispose les compartiments sur le plan de travail (Capture d'écran de l'interface graphique développée par Progepi).

On renseigne ensuite les paramètres de chaque compartiment. Il est nécessaire de fournir au moins le volume (voir Tableau IV-7) :

Tableau IV-7 : Volume de chaque compartiment (fourni par l'utilisateur en double cliquant sur chaque icône correspondante : fond vert)

Compartiment	1	2	3	4
Volume (L)	$V_1 = 0{,}4$	$V_2 = 1{,}2$	$V_3 = 0{,}5$	$V_4 = 1{,}9$

Remarque : la contrainte de la « demi-centaine » de compartiments est purement technique car on imagine pas, en pratique, construire de cette manière un réseau d'un grand nombre de compartiments (bien que ce soit théoriquement possible).

IV.3.1.2 Entrée(s)/sortie(s) fluides

Une fois que le réseau de compartiments est construit, il est nécessaire d'indiquer la localisation des entrée(s) et sortie(s) de fluide si elles existent. Il est tout à fait possible de modéliser un système fermé sans entrée ni sortie de fluide, comme une cuve agitée fermée par exemple. Dans les cas des systèmes ouverts, il est possible d'avoir plusieurs entrées et plusieurs sorties.

Dans notre exemple illustratif, on compte une entrée et une sortie de fluide (voir Figure IV-9) :

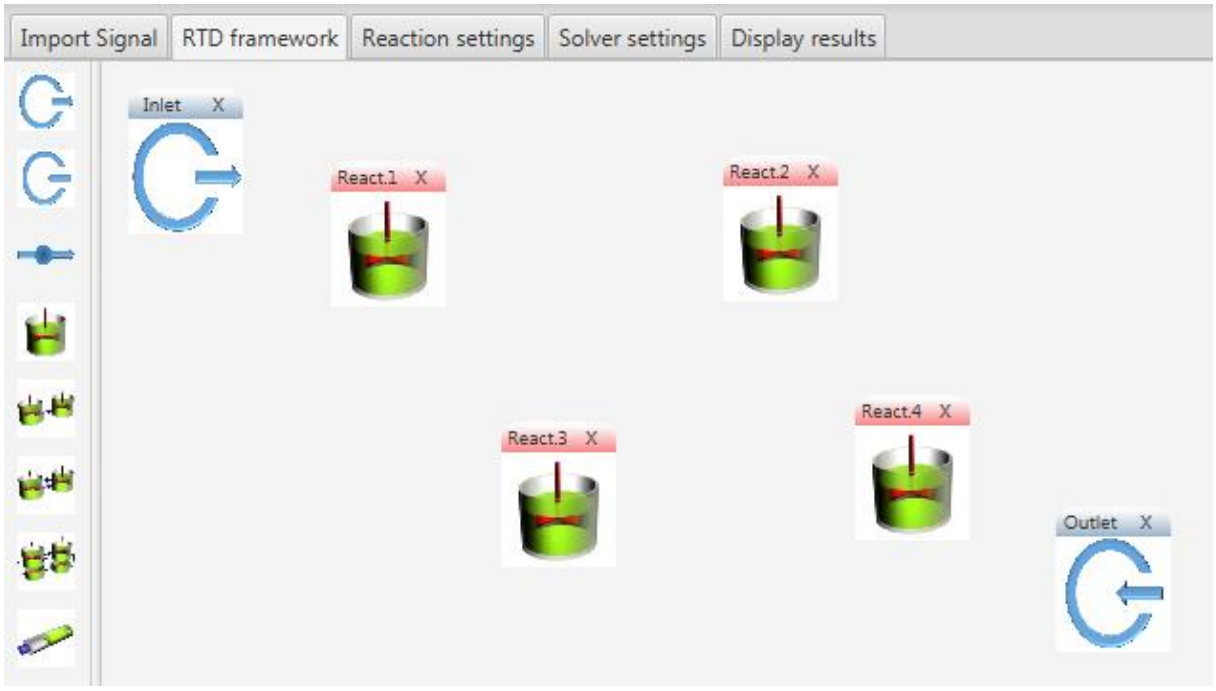


Figure IV-9 : L'utilisateur a ajouté une entrée et une sortie de fluide (Capture d'écran de l'interface graphique développée par Progepi).

IV.3.1.3 Débits d'échanges fournis manuellement

L'étape suivante consiste à renseigner la valeur des débits volumiques Q_v d'échange entre les compartiments (voir paragraphe II.3 pour le calcul des échanges). Le choix a été fait de renseigner ces débits comme une fraction du débit total entrant $Q_v^{entrée}$, ce qui permet d'alléger l'écriture en n'utilisant que des valeurs comprises entre 0 et 1. Pour chaque compartiment, la somme des débits volumiques d'entrée doit être égale à la somme des débits volumiques sortant. Dans le cas contraire, l'utilisateur est informé par un message d'erreur. L'écoulement est permanent, ce qui signifie que les débits d'échange sont constants tout le long de la simulation. Il n'est pas possible de considérer un écoulement instationnaire pour le moment.

Dans notre exemple illustratif, seuls des échanges convectifs sont pris en compte. L'utilisateur crée un lien entre deux compartiments simplement en cliquant sur les compartiments d'origine et de destination (voir Figure IV-10).

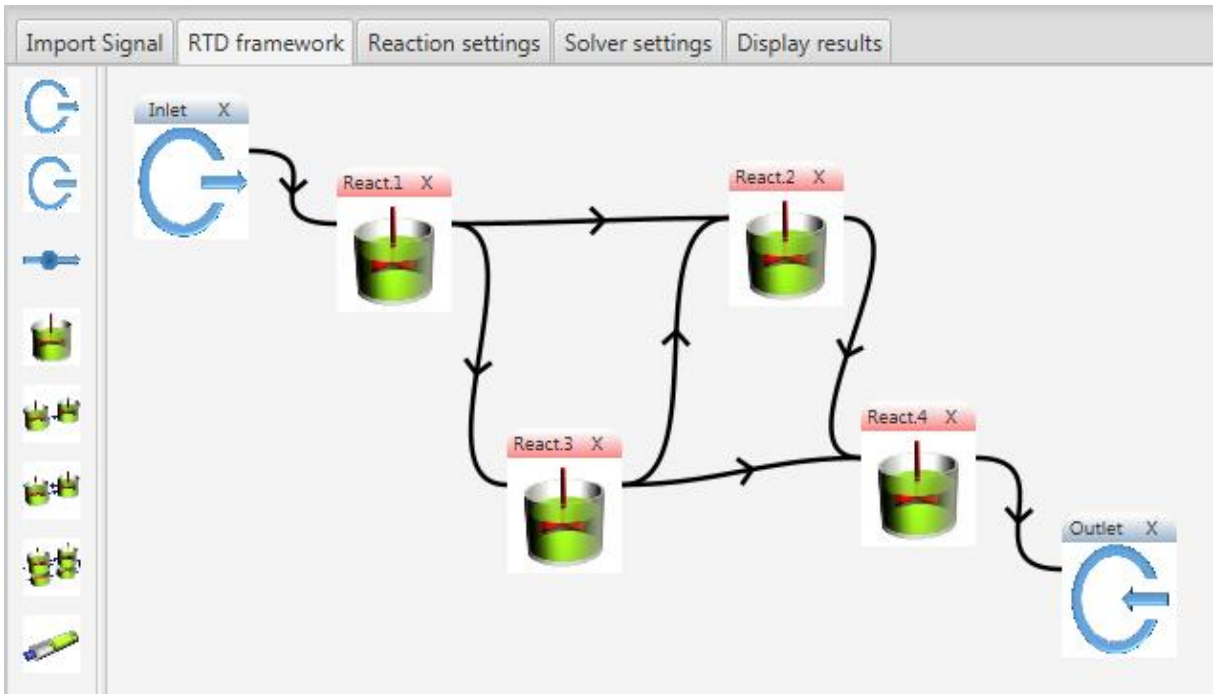


Figure IV-10 : Structure du modèle et définition des échanges entre compartiments (Capture d'écran de l'interface graphique développée par Progepi)

L'étape suivante consiste à remplir les valeurs numériques des débits d'échanges (voir Tableau IV-8) comme des fractions du débit volumique d'entrée. Cela est réalisé en cliquant sur une liaison et une fenêtre s'affiche à l'écran dans laquelle on indique la valeur calculée par la méthode.

Tableau IV-8 : Débit échangé au niveau de chaque liaison en fraction du débit volumique d'entrée (fourni par l'utilisateur en double cliquant sur la liaison : fond vert)

Liaisons	$Entrée \rightarrow 1$	$1 \rightarrow 2$	$1 \rightarrow 3$	$3 \rightarrow 2$	$3 \rightarrow 4$	$2 \rightarrow 4$	$4 \rightarrow sortie$
Fraction débit d'entrée	1	0,6	0,4	0,1	0,3	0,7	1

IV.3.2 Suivi des espèces

Dans cette partie, on renseigne les données relatives au suivi des espèces que l'on souhaite modéliser. On renseigne les données relatives aux réactions chimiques et au traçage. On précise les points d'injection de chaque espèce ainsi que les signaux d'entrée correspondants et les points où on souhaite suivre les concentrations de l'ensemble des espèces.

IV.3.2.1 Expérience de traçage

Dans cette partie du logiciel, on indique la présence de traceur. Du point de vue des équations à résoudre, un traceur est une espèce chimique non réactive, ce qui correspond à un terme de production chimique nul dans l'équation de conservation du traceur. La variation de sa concentration au cours du temps sera donc uniquement due à l'écoulement. Contrairement à l'ancienne version du programme, il est maintenant possible de calculer la dispersion de plusieurs traceurs simultanément.

Une expérience de traçage particulière consiste à injecter le traceur à l'unique entrée d'un système ouvert en régime d'écoulement stationnaire et de mesurer l'évolution de la concentration en traceur au cours du temps au niveau de l'unique sortie. Sous réserve que plusieurs conditions opératoires soient respectées (débit homocinétique en entrée et sortie, injection de type impulsion, normation de la courbe, etc.) ce type d'expériences donne accès à des courbes de DTS.

Si l'utilisateur souhaite suivre la dispersion d'un ou plusieurs traceurs, il n'y a pas de réaction chimique associée et donc pas de nécessité de renseigner les coefficients stœchiométriques ni les ordres partiels.

IV.3.2.2 Réactions chimiques

Dans cette partie du logiciel, on renseigne les coefficients stœchiométriques de chaque réaction chimique ainsi que les cinétiques (voir paragraphe II.4.3 pour la forme des équations requises). Pour résoudre un problème avec des réactions chimiques, il est indispensable de résoudre les équations différentielles de chaque espèce simultanément car la cinétique de production et consommation d'une espèce dépend des autres espèces.

Supposons que l'utilisateur souhaite modéliser les réactions chimiques suivantes (équation [II.30]) :

$$\begin{cases} 2A + 3B \rightarrow 4C \\ B + 2C \rightarrow 5D \end{cases} \qquad \text{[IV.3]}$$

Dans ce cas, l'utilisateur doit renseigner les coefficients stœchiométriques $\nu_{w,i}$, définis dans le Tableau IV-9, où l'indice w désigne le numéro de la réaction et l'indice i le composé chimique considéré.

Tableau IV-9 : Coefficients stœchiométriques (fourni par l'utilisateur : fond vert)

Numéro équation	Espèce A	Espèce B	Espèce C	Espèce D
1	$\nu_{1,A} = -2$	$\nu_{1,B} = -3$	$\nu_{1,C} = 4$	$\nu_{1,D} = 0$
2	$\nu_{2,A} = 0$	$\nu_{2,B} = -1$	$\nu_{2,C} = -2$	$\nu_{2,D} = 5$

Supposons que les cinétiques réactionnelles s'écrivent de la manière suivante (voir équation [II.31]) :

$$\begin{cases} r_1 = 0{,}05[A]^{0.8}[B]^{0.7} \\ r_2 = 0{,}24[B]^{1.2}[C]^{0.3} \end{cases} \qquad \text{[IV.4]}$$

Dans ce cas, l'utilisateur doit renseigner les ordres cinétiques partiels $m_{w,i}$ des réactifs (pour les produits ils sont nuls) de chaque réaction (voir Tableau IV-10) et les constantes de réactions k_w (voir Tableau IV-11) :

Tableau IV-10 : Ordres cinétiques partiels (fournis par l'utilisateur : fond vert)

Numéro équation	Ordre partiel A	Ordre partiel B	Ordre partiel C	Ordre partiel D
1	$m_{1,A} = 0{,}8$	$m_{1,B} = 0{,}7$	$m_{1,C} = 0$	$m_{1,D} = 0$
2	$m_{2,A} = 0$	$m_{2,B} = 1{,}2$	$m_{2,C} = 0{,}3$	$m_{2,D} = 0$

Tableau IV-11 : Constantes de réactions (fournies par l'utilisateur : fond vert)

Numéro équation	Constante de la réaction
1	$k_1 = 0{,}05$
2	$k_2 = 0{,}24$

IV.3.2.3 Injections et détections des espèces

Pour chaque espèce injectée dans le système, qu'il s'agisse d'une espèce chimique ou d'un traceur, il faut renseigner le compartiment dans lequel l'injection aura lieu et la forme du signal

injecté. Une même espèce chimique ou un même traceur peut être injecté en deux endroits différents avec deux signaux différents.

Reprenons notre exemple. Dans un premier temps l'utilisateur renseigne le nombre de points d'injection par espèce (voir Tableau IV-12) :

Tableau IV-12 : Nombre de points d'injection par espèce (fournis par l'utilisateur : fond vert)

Espèce	Tr1	Tr2	A	B	C	D
Nombre d'injections	1	1	2	1	0	0

Notons que dans ce cas l'espèce A est injectée en deux points différents et que les espèces C et D, qui sont des produits des réactions chimiques présentées dans l'équation [II.34], ne comportent pas de point d'injection (même si cela serait possible). L'étape suivante consiste à renseigner dans quel compartiment est injectée chaque espèce (voir Tableau IV-13) :

Tableau IV-13 : Numéros des compartiments où sont injectées les espèces (fournis par l'utilisateur : fond vert)

Espèce	Compartiment d'injection	
Tr1	1	--
Tr2	2	--
A	2	3
B	4	--
C	--	--
D	--	--

L'utilisateur doit alors indiquer pour chaque point d'injection la forme du signal d'entrée. Notons que nous avons imposé que tous les signaux doivent être échantillonnés de la même manière. Si ce n'est pas le cas, l'utilisateur est invité à utiliser le traitement de ré-échantillonnage disponible dans la partie post-traitement des courbes de suivi d'espèce (voir paragraphe IV.2.4 page 227). Il s'agit d'une contrainte technique que nous avons volontairement gardée pour deux raisons. La première est qu'elle simplifie fortement les calculs des algorithmes de résolution du système d'équations différentielles et la seconde est que cela permet d'éviter de simuler simultanément des données trop hétérogènes. Le cas échéant, l'utilisateur peut réaliser une simulation par espèce. Les données d'entrée des traceurs et espèces chimiques doivent être fournies au logiciel avec le format indiqué dans le Tableau IV-14. Ce format peut être obtenu par n'importe quel tableur informatique :

Tableau IV-14 : Concentration d'entrée de chaque espèce injectée (fournie par l'utilisateur : fond vert)

T	Tr1	Tr2	A (injection 1)	A (injection 2)	B
t_0	$C_{Tr1}(t_0)$	$C_{Tr2}(t_0)$	$C_{A1}(t_0)$	$C_{A2}(t_0)$	$C_B(t_0)$
. . .	. . .	. . .	. . .	. . .	. . .
t_f	$C_{Tr1}(t_f)$	$C_{Tr2}(t_f)$	$C_{A1}(t_f)$	$C_{A2}(t_f)$	$C_B(t_f)$

La dernière étape consiste à préciser dans quel compartiment l'utilisateur souhaite suivre l'évolution des espèces chimiques injectées (inertes ou réactives), Tableau IV-15. Notons qu'on ne propose pas à l'utilisateur de ne suivre qu'une seule espèce : toutes les espèces seront affichées.

Tableau IV-15 : Numéros des compartiments où l'utilisateur souhaite suivre la concentration des espèces (fournis par l'utilisateur : fond vert)

Compartiments de suivi d'espèce	2	4

La Figure IV-11 montre le modèle numérique avec les localisations des points d'injection des différentes espèces et les points de détection. Cette figure illustre la souplesse qu'offre le logiciel.

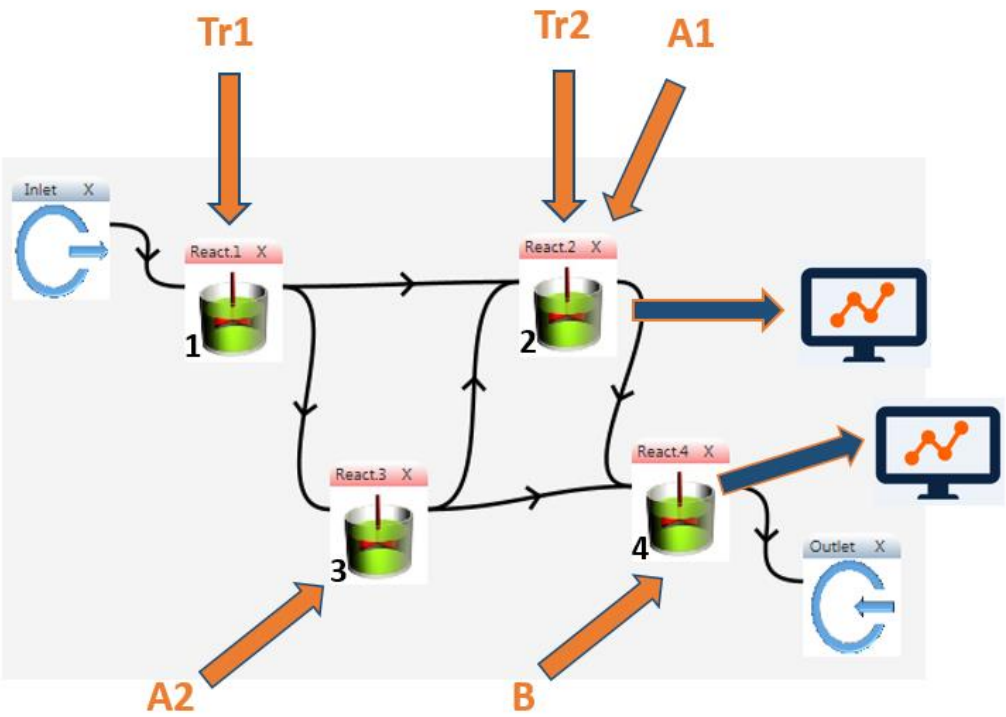


Figure IV-11 : Illustration des points d'injection (représentés par des flèches oranges) des différentes espèces et des points de détection (représentés par des écrans).

IV.3.3 Paramétrage de dassl

L'étape suivante consiste à déterminer les paramètres du solveur numérique dassl (voir présentation théorique au paragraphe II.4.4). Au niveau de l'interface graphique, deux options doivent être renseignées pour chaque nouvelle simulation (voir Tableau IV-16) :

- Durée de la simulation t_{simu} : correspond au temps physique total de la simulation. Remarque : la durée de simulation doit être inférieure ou égale au temps maximum des signaux d'entrée t_f :

$$t_{simu} \leq t_f \qquad [IV.5]$$

- Pas de temps d'enregistrement Δt : correspond au pas de temps auquel l'utilisateur souhaite enregistrer les données. Ce pas de temps étant constant, il doit être suffisamment petit pour pouvoir capturer des singularités dans les courbes de sortie.

Tableau IV-16 : Paramètres de la simulation (fournis par l'utilisateur : fond vert)

Temps de simulation	$t_{simu} = 2000\ sec$
Pas de temps d'enregistrement (constant)	$\Delta t = 1\ sec$

Plusieurs paramètres doivent être réglés au sein même de l'algorithme de dassl. Nous avons fixé les valeurs de ces paramètres selon notre expertise de tel sorte qu'ils conviennent à la plupart des cas de simulation susceptibles d'être rencontré. Ces paramètres n'apparaissent pas dans l'interface graphique afin de proposer un logiciel le plus épuré possible. Toutefois il pourrait être envisagé de les modifier manuellement en cas de problème.

IV.3.4 Algorithmes d'automatisation d'écriture et résolution du système d'équations différentielles

A ce stade, la structure du modèle (agencement des compartiments, localisation des entrées et sorties du fluide et échanges entre les compartiments), les réactions chimiques mises en jeu (équations stœchiométriques et cinétiques chimiques), le paramétrage du suivi des espèces (localisation des compartiments où les espèces sont injectées et détectées, importation des signaux d'entrée) ainsi que le paramétrage de la simulation (temps de simulation et pas de temps) ont été définis par l'utilisateur via l'interface graphique.

A partir de ces informations, différents algorithmes réalisent l'écriture du système d'équations différentielles qui sera résolu par le solveur numérique. Les tâches réalisées par l'algorithme sont les suivantes :

1. Construction de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange »
2. Calcul des solutions d'entrée de chaque compartiment
3. Calcul des termes de production chimique de chaque espèce
4. Ecriture du système d'équations différentielles

IV.3.4.1 Algorithme de construction de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » (Progepi)

Un algorithme construit automatiquement la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » suivant les règles décrites au paragraphe II.5. Cet algorithme a été développé par Progepi et incorporé dans le logiciel sans que l'utilisateur ai besoin d'intervenir. Le Tableau IV-17 représente la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » $[\boldsymbol{A_{CD}}]$ et le Tableau IV-18 la matrice des paramètres $[\boldsymbol{A_P}]$ (seul le volume y est paramétré, mais on peut facilement ajouter d'autres paramètres si nécessaire).

Tableau IV-17 : « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » remplie automatiquement par un algorithme développé par Progepi et implémenté dans l'interface graphique

	nd_1	nd_2	nd_3	nd_4	nd_5	nd_6	nd_7	nd_8
entrée	1							
br_1	-1	1						
br_2		-0,6	0,6					
br_3		-0,4			0,4			
br_4					-0,4	0,4		
br_5			0,1			-0,1		
br_6						-0,3	0,3	
br_7			-0,7	0,7				
br_8				-0,7			0,7	
br_9							-1	1
sortie								-1

Tableau IV-18 : « Matrice des paramètres » remplie automatiquement par un algorithme développé par Progepi et implémenté dans l'interface graphique

Branches	Volumes
entrée	0
br_1	$V_1 = 0{,}4\ L$
br_2	0
br_3	0
br_4	$V_2 = 1{,}2\ L$
br_5	0
br_6	0
br_7	$V_3 = 0{,}5\ L$
br_8	0
br_9	$V_5 = 0.1\ L$
sortie	0

IV.3.4.2 Algorithme de construction du système d'équations différentielles

A partir des informations fournies par l'interface graphique et la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange », des algorithmes développés durant la thèse établissent automatiquement système d'équations différentielles qui sera résolu par le solveur numérique. Nous allons présenter le processus de construction du système d'équations différentielles sans entrer dans les détails des algorithmes.

Nous invitons le lecteur à prendre connaissance du paragraphe II.4 afin de prendre connaissance des équations théoriques qui seront utilisées. Nous gardons les mêmes notations que dans ce chapitre à savoir :

- J le nombre total de compartiments. Chaque compartiment est numéroté avec l'indice j allant de 1 à J.
- W le nombre total de réactions chimiques. Chaque réaction est numérotée avec l'indice w allant de 1 à W.
- I le nombre total d'espèces. Chaque espèce est numérotée avec l'indice i allant de 1 à I.
- P le nombre total d'équations à résoudre. $P = J \times I$. Chaque équation est numérotée avec l'indice p allant de 1 à P.

Dans notre exemple nous avons $J = 4$ compartiments et $I = 6$ espèces (2 traceurs Tr1 et Tr2 et 4 espèces réactives A, B, C et D). Le bilan de matière doit être résolu pour chaque espèce et dans chaque compartiment. Cela signifie qu'il y a $P = 4 \times 6 = 24$ équations à résoudre. Dans Dassl, les équations se présentent sous la forme (voir équation [II.39]).

$$\tau_j y_p'(t) + y_p(t) - u_p(t) - r_p(t)\tau_j = 0 \qquad \text{[IV.6]}$$

Pour chaque équation, il est nécessaire de définir

- τ_j (voir équation [II.27]) le temps de passage du fluide dans le compartiment j
- $r_p(t)$ (voir l'équation [II.32] avec l'expression de r_w qui est donnée par l'équation [II.31]) le terme de production chimique de l'espèce i dans le compartiment j
- $u_p(t)$ (voir l'équation [II.42]) le signal d'entrée de l'espèce i dans le compartiment j.

Afin de bien comprendre comment chacun de ces termes doit être renseignés, nous avons appliqué les équations citées ci-dessus sur l'exemple que nous traitons :

- τ_j sont présentées dans le Tableau IV-19
- $r_p(t)$ et $u_p(t)$ sont présentées dans :
    - le Tableau IV-20 pour $j = 1$
    - le Tableau IV-21 pour $j = 2$
    - le Tableau IV-22 pour $j = 3$
    - le Tableau IV-23 pour $j = 4$.

  Les signaux d'entrée de chaque espèce injectée sont renseignés (en bleu) dans les expressions de $u_p(t)$.

- Les 24 équations différentielles résultantes sont écrites dans le Tableau IV-24.

Tableau IV-19 : Expressions des temps de passage τ_j dans chaque compartiment j

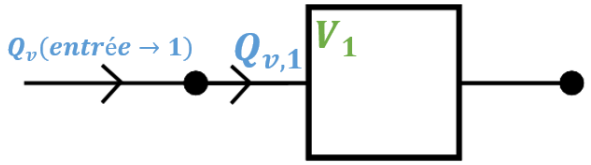
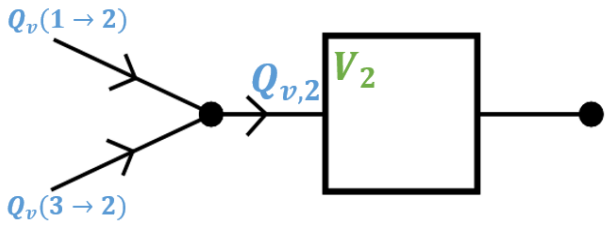
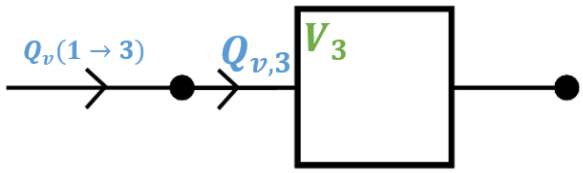
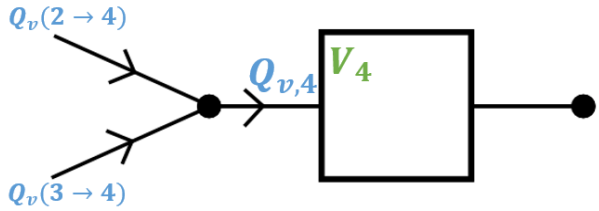
Compartiment j	$\tau_j = \dfrac{V_j}{Q_{v,j}}$
	$Q_{v,1} = Q_v(entrée \rightarrow 1) = 1 \times Q_v^{entrée}$ $\boldsymbol{\tau_1 = \dfrac{V_1}{Q_{v,1}}}$
	$Q_{v,2} = Q_v(1 \rightarrow 2) + Q_v(3 \rightarrow 2)$ $= (0{,}6 + 0{,}1) \times Q_v^{entrée}$ $= 0{,}7 \times Q_v^{entrée}$ $\boldsymbol{\tau_2 = \dfrac{V_2}{Q_{v,2}}}$
	$Q_{v,3} = Q_v(1 \rightarrow 3) = 0{,}4 \times Q_v^{entrée}$ $\boldsymbol{\tau_3 = \dfrac{V_3}{Q_{v,3}}}$
	$Q_{v,4} = Q_v(2 \rightarrow 4) + Q_v(3 \rightarrow 4)$ $= (0{,}7 + 0{,}3) \times Q_v^{entrée}$ $= 1 \times Q_v^{entrée}$ $\boldsymbol{\tau_4 = \dfrac{V_4}{Q_{v,4}}}$

Tableau IV-20 : Expressions des signaux d'entrée $u_p(t)$ et des termes de production chimique $r_p(t)$ de chaque espèce i dans le compartiment $j = 1$

$j = 1$	
$Tr1$	$u_1(t) = C_{Tr1}(t)$
$\rightarrow i = 1$	$r_1 = 0$
$Tr2$	$u_2(t) = 0$
$\rightarrow i = 2$	$r_2 = 0$
A	$u_3(t) = 0$
$\rightarrow i = 3$	$r_3 = -2 \times 0{,}05.y_3(t)^{0{,}8}.y_4(t)^{0{,}7}$
B	$u_4(t) = 0$
$\rightarrow i = 4$	$r_4 = -3 \times 0{,}05.y_3(t)^{0{,}8}.y_4(t)^{0{,}7} - 1 \times 0{,}24.y_4(t)^{1{,}2}.y_5(t)^{0{,}3}$
C	$u_5(t) = 0$
$\rightarrow i = 5$	$r_5 = 4 \times 0{,}05.y_3(t)^{0{,}8}.y_4(t)^{0{,}7} - 2 \times 0{,}24.y_4(t)^{1{,}2}.y_5(t)^{0{,}3}$
D	$u_6(t) = 0$
$\rightarrow i = 6$	$r_6 = 5 \times 0{,}24.y_4(t)^{1{,}2}.y_5(t)^{0{,}3}$

Tableau IV-21 : Expressions des signaux d'entrée $u_p(t)$ et des termes de production chimique $r_p(t)$ de chaque espèce i dans le compartiment $j = 2$

$j = 2$	
$Tr1$ $\rightarrow i = 1$	$u_7(t) = \dfrac{y_1(t) \times Q_v(1 \rightarrow 2) + y_{13}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 2)}{Q_v(1 \rightarrow 2) + Q_v(3 \rightarrow 2)}$
	$r_7 = 0$
$Tr2$ $\rightarrow i = 2$	$u_8(t) = \dfrac{y_2(t) \times Q_v(1 \rightarrow 2) + y_{14}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 2)}{Q_v(1 \rightarrow 2) + Q_v(3 \rightarrow 2)} + C_{Tr2}(t)$
	$r_8 = 0$
A $\rightarrow i = 3$	$u_9(t) = \dfrac{y_3(t) \times Q_v(1 \rightarrow 2) + y_{15}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 2)}{Q_v(1 \rightarrow 2) + Q_v(3 \rightarrow 2)} + C_{A1}(t)$
	$r_9 = -2 \times 0{,}05.\, y_9(t)^{0{,}8}.\, y_{10}(t)^{0{,}7}$
B $\rightarrow i = 4$	$u_{10}(t) = \dfrac{y_4(t) \times Q_v(1 \rightarrow 2) + y_{16}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 2)}{Q_v(1 \rightarrow 2) + Q_v(3 \rightarrow 2)}$
	$r_{10} = -3 \times 0{,}05.\, y_9(t)^{0{,}8}.\, y_{10}(t)^{0{,}7} - 1 \times 0{,}24.\, y_{10}(t)^{1{,}2}.\, y_{11}(t)^{0{,}3}$
C $\rightarrow i = 5$	$u_{11}(t) = \dfrac{y_5(t) \times Q_v(1 \rightarrow 2) + y_{17}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 2)}{Q_v(1 \rightarrow 2) + Q_v(3 \rightarrow 2)}$
	$r_{11} = 4 \times 0{,}05.\, y_9(t)^{0{,}8}.\, y_{10}(t)^{0{,}7} - 2 \times 0{,}24.\, y_{10}(t)^{1{,}2}.\, y_{11}(t)^{0{,}3}$
D $\rightarrow i = 6$	$u_{12}(t) = \dfrac{y_6(t) \times Q_v(1 \rightarrow 2) + y_{18}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 2)}{Q_v(1 \rightarrow 2) + Q_v(3 \rightarrow 2)}$
	$r_{12} = 5 \times 0{,}24.\, y_{10}(t)^{1{,}2}.\, y_{11}(t)^{0{,}3}$

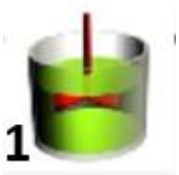
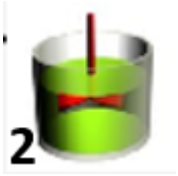
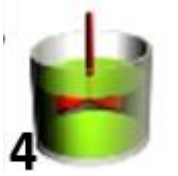
Tableau IV-22 : Expressions des signaux d'entrée $u_p(t)$ et des termes de production chimique $r_p(t)$ de chaque espèce i dans le compartiment $j = 3$

$j = 3$	
$Tr1$ $\rightarrow i = 1$	$u_{13}(t) = y_1(t) \times Q_v(1 \rightarrow 3)$
	$r_{13} = 0$
$Tr2$ $\rightarrow i = 2$	$u_{14}(t) = y_2(t) \times Q_v(1 \rightarrow 3)$
	$r_{14} = 0$
A $\rightarrow i = 3$	$u_{15}(t) = y_3(t) \times Q_v(1 \rightarrow 3) + C_{A2}(t)$
	$r_{15} = -2 \times 0{,}05.\, y_{15}(t)^{0{,}8}.\, y_{16}(t)^{0{,}7}$
B $\rightarrow i = 4$	$u_{16}(t) = y_4(t) \times Q_v(1 \rightarrow 3)$
	$r_{16} = -3 \times 0{,}05.\, y_{15}(t)^{0{,}8}.\, y_{16}(t)^{0{,}7} - 1 \times 0{,}24.\, y_{16}(t)^{1{,}2}.\, y_{17}(t)^{0{,}3}$
C $\rightarrow i = 5$	$u_{17}(t) = y_5(t) \times Q_v(1 \rightarrow 3)$
	$r_{17} = 4 \times 0{,}05.\, y_{15}(t)^{0{,}8}.\, y_{16}(t)^{0{,}7} - 2 \times 0{,}24.\, y_{16}(t)^{1{,}2}.\, y_{17}(t)^{0{,}3}$
D $\rightarrow i = 6$	$u_{18}(t) = y_6(t) \times Q_v(1 \rightarrow 3)$
	$r_{18} = 5 \times 0{,}24.\, y_{16}(t)^{1{,}2}.\, y_{17}(t)^{0{,}3}$

Tableau IV-23 : Expressions des signaux d'entrée $u_p(t)$ et des termes de production chimique $r_p(t)$ de chaque espèce i dans le compartiment $j = 4$

$j = 4$	
$Tr1$ $\rightarrow i = 1$	$u_{19}(t) = \dfrac{y_7(t) \times Q_v(2 \rightarrow 4) + y_{13}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 4)}{Q_v(2 \rightarrow 4) + Q_v(3 \rightarrow 4)}$
	$r_{19} = 0$
$Tr2$ $\rightarrow i = 2$	$u_{20}(t) = \dfrac{y_8(t) \times Q_v(2 \rightarrow 4) + y_{14}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 4)}{Q_v(2 \rightarrow 4) + Q_v(3 \rightarrow 4)}$
	$r_{20} = 0$
A $\rightarrow i = 3$	$u_{21}(t) = \dfrac{y_9(t) \times Q_v(2 \rightarrow 4) + y_{15}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 4)}{Q_v(2 \rightarrow 4) + Q_v(3 \rightarrow 4)}$
	$r_{21} = -2 \times 0{,}05.\, y_{21}(t)^{0{,}8}.\, y_{22}(t)^{0{,}7}$
B $\rightarrow i = 4$	$u_{22}(t) = \dfrac{y_{10}(t) \times Q_v(2 \rightarrow 4) + y_{16}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 4)}{Q_v(2 \rightarrow 4) + Q_v(3 \rightarrow 4)} + C_B(t)$
	$r_{22} = -3 \times 0{,}05.\, y_{21}(t)^{0{,}8}.\, y_{22}(t)^{0{,}7} - 1 \times 0{,}24.\, y_{22}(t)^{1{,}2}.\, y_{23}(t)^{0{,}3}$
C $\rightarrow i = 5$	$u_{23}(t) = \dfrac{y_{11}(t) \times Q_v(2 \rightarrow 4) + y_{17}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 4)}{Q_v(2 \rightarrow 4) + Q_v(3 \rightarrow 4)}$
	$r_{23} = 4 \times 0{,}05.\, y_{21}(t)^{0{,}8}.\, y_{22}(t)^{0{,}7} - 2 \times 0{,}24.\, y_{22}(t)^{1{,}2}.\, y_{23}(t)^{0{,}3}$
D $\rightarrow i = 6$	$u_{24}(t) = \dfrac{y_{12}(t) \times Q_v(2 \rightarrow 4) + y_{18}(t) \times Q_v(3 \rightarrow 4)}{Q_v(2 \rightarrow 4) + Q_v(3 \rightarrow 4)}$
	$r_{24} = 5 \times 0{,}24.\, y_{22}(t)^{1{,}2}.\, y_{23}(t)^{0{,}3}$

Tableau IV-24 : Les $P = 24$ équations différentielles dans le cas de l'exemple comportant $J = 4$ compartiments et $I = 6$ espèces chimiques.

Compartiment	Espèce	Equation
$j = 1$ 	$Tr1$ $\rightarrow i = 1$	$p = 1$ $\tau_1 y_1{}'(t) + y_1(t) - u_1(t) - r_1\tau_1 = 0$
	$Tr2$ $\rightarrow i = 2$	$p = 2$ $\tau_1 y_2{}'(t) + y_2(t) - u_2(t) - r_2\tau_1 = 0$
	A $\rightarrow i = 3$	$p = 3$ $\tau_1 y_3{}'(t) + y_3(t) - u_3(t) - r_3\tau_1 = 0$
	B $\rightarrow i = 4$	$p = 4$ $\tau_1 y_4{}'(t) + y_4(t) - u_4(t) - r_4\tau_1 = 0$
	C $\rightarrow i = 5$	$p = 5$ $\tau_1 y_5{}'(t) + y_5(t) - u_5(t) - r_5\tau_1 = 0$
	D $\rightarrow i = 6$	$p = 6$ $\tau_1 y_6{}'(t) + y_6(t) - u_6(t) - r_6\tau_1 = 0$
$j = 2$ 	$Tr1$ $\rightarrow i = 1$	$p = 7$ $\tau_2 y_7{}'(t) + y_7(t) - u_7(t) - r_7\tau_2 = 0$
	$Tr2$ $\rightarrow i = 2$	$p = 8$ $\tau_2 y_8{}'(t) + y_8(t) - u_8(t) - r_8\tau_2 = 0$
	A $\rightarrow i = 3$	$p = 9$ $\tau_2 y_9{}'(t) + y_9(t) - u_9(t) - r_9\tau_2 = 0$
	B $\rightarrow i = 4$	$p = 10$ $\tau_2 y_{10}{}'(t) + y_{10}(t) - u_{10}(t) - r_{10}\tau_2 = 0$
	C $\rightarrow i = 5$	$p = 11$ $\tau_2 y_{11}{}'(t) + y_{11}(t) - u_{11}(t) - r_{11}\tau_2 = 0$
	D $\rightarrow i = 6$	$p = 12$ $\tau_2 y_{12}{}'(t) + y_{12}(t) - u_{12}(t) - r_{12}\tau_2 = 0$
$j = 3$	$Tr1$ $\rightarrow i = 1$	$p = 13$ $\tau_3 y_{13}{}'(t) + y_{13}(t) - u_{13}(t) - r_{13}\tau_3 = 0$
	$Tr2$ $\rightarrow i = 2$	$p = 14$ $\tau_3 y_{14}{}'(t) + y_{14}(t) - u_{14}(t) - r_{14}\tau_3 = 0$
	A $\rightarrow i = 3$	$p = 15$ $\tau_3 y_{15}{}'(t) + y_{15}(t) - u_{15}(t) - r_{15}\tau_3 = 0$
	B $\rightarrow i = 4$	$p = 16$ $\tau_3 y_{16}{}'(t) + y_{16}(t) - u_{16}(t) - r_{16}\tau_3 = 0$
	C $\rightarrow i = 5$	$p = 17$ $\tau_3 y_{17}{}'(t) + y_{17}(t) - u_{17}(t) - r_{17}\tau_3 = 0$
	D $\rightarrow i = 6$	$p = 18$ $\tau_3 y_{18}{}'(t) + y_{18}(t) - u_{18}(t) - r_{18}\tau_3 = 0$
$j = 4$ 	$Tr1$ $\rightarrow i = 1$	$p = 19$ $\tau_4 y_{19}{}'(t) + y_{19}(t) - u_{19}(t) - r_{19}\tau_4 = 0$
	$Tr2$ $\rightarrow i = 2$	$p = 20$ $\tau_4 y_{20}{}'(t) + y_{20}(t) - u_{20}(t) - r_{20}\tau_4 = 0$
	A $\rightarrow i = 3$	$p = 21$ $\tau_4 y_{21}{}'(t) + y_{21}(t) - u_{21}(t) - r_{21}\tau_4 = 0$
	B $\rightarrow i = 4$	$p = 22$ $\tau_4 y_{22}{}'(t) + y_{22}(t) - u_{22}(t) - r_{22}\tau_4 = 0$
	C $\rightarrow i = 5$	$p = 23$ $\tau_4 y_{23}{}'(t) + y_{23}(t) - u_{23}(t) - r_{23}\tau_4 = 0$
	D $\rightarrow i = 6$	$p = 24$ $\tau_4 y_{24}{}'(t) + y_{24}(t) - u_{24}(t) - r_{24}\tau_4 = 0$

On peut souligner que l'écriture à la main des équations et des expressions de $r_p(t)$ et $u_p(t)$ serait fastidieuse malgré la simplicité du modèle à compartiments (seulement 4 compartiments et 6 espèces chimiques). Par exemple pour l'espèce A ($i = 3$) dans le second compartiment ($j = 2$) le numéro d'équation est $p = 9$ et le signal d'entrée $u_9(t)$ nécessite la solution de l'espèce A sortant du premier compartiment (c'est-à-dire $y_3(t)$) et du troisième compartiment (c'est-à-dire $y_{15}(t)$).

IV.4 MODULE 3 : Découpage en tranches identiques

Un point clé de la méthode développée dans ces travaux de thèse consiste à proposer un découpage en tranches identiques. Comme nous l'avons vu au paragraphe II.2.1.1 cette méthode est très générale et peut s'appliquer à quasiment toutes les situations possibles. Cette polyvalence a un coût qui se traduit par une perte de précision dans les cas les moins favorables au découpage en tranches identiques. Cependant, nous avons vu au paragraphe III.4, qui traite d'une situation particulièrement défavorable à ce type de découpage, que cette perte de précision reste acceptable et n'invalide pas l'approche. C'est pourquoi nous avons implémenté un module qui consiste à faciliter la construction d'un modèle à compartiments en tranches identiques. L'interface graphique proposée dans le précédent module ne permet pas construire des modèles de plus d'une demi-centaine de compartiments (pour des raisons techniques lorsqu'on construit le réseau dans l'interface graphique). Le « module 3 » est destiné à être incorporé dans le « module 2 » au niveau de l'étape 1 qui est traitée dans le paragraphe IV.3.1.

IV.4.1 Construction de la structure du modèle en tranches identiques

Avec un modèle en tranches identiques il suffit de décrire la structure de compartiments dans une tranche et de répéter cette structure dans toutes les tranches, ce qui permet de construire des modèles avec un nombre illimité de compartiments.

IV.4.1.1 Restrictions techniques

Nous invitons le lecteur à prendre connaissance des règles de constructions d'un modèle en tranches identiques qui ont été détaillées au paragraphe II.2.1.1. La méthode présentée

concerne uniquement les **T**ranches à **G**éométrie **I**dentique avec un réseau de **C**ompartiments de géométries **I**dentiques, notées T_{GICI} que nous avons défini dans la méthode (voir un exemple sur la Figure II-2).

La Figure IV-12-A représente un compartiment de forme quelconque, il possède huit faces dont une qui échange avec trois compartiments (la face de droite - flèches en mauve). Remarque : on peut tout à fait réaliser un découpage en T_{GICI} avec ce genre de compartiment mais il n'est pas aisé d'avoir accès à l'ensemble des surfaces et volumes. Notre objectif est de proposer un modèle simple et rapide à mettre en œuvre afin de donner une première base de travail tout en connaissant les pertes de précision plausible. C'est pourquoi nous allons imposer plusieurs contraintes techniques permettant de simplifier la structure des tranches, simplifiant par la même occasion l'écriture des algorithmes. A partir du compartiment quelconque, les premières contraintes que nous avons fixées (« restrictions techniques 1 » sur la Figure IV-12) consistent à :

1. Ne prendre en compte que des tranches de géométrie identique. Cela signifie que la structure du réacteur est régulière dans la direction de tranchage L_t (par exemple un cylindre où la direction de tranchage serait l'axe de révolution ou le modèle décrit dans le chapitre de la méthode sur la Figure II-2).
2. Fixer le nombre de faces d'un compartiment, à savoir six, et restreindre le nombre de compartiments d'échange par face, à savoir un seul compartiment d'échange pour chaque face. La Figure IV-12-B représente un tel compartiment.

Une deuxième contrainte que nous avons fixée (« restriction technique 2 » sur la Figure IV-12) consiste à :

3. Imposer un angle droit (90°) pour chacune des six faces des compartiments ce qui implique que le compartiment a une forme de parallélépipède rectangle. La Figure IV-12-C représente un tel compartiment.

L'avantage de cette configuration est qu'il est très aisé de calculer les surfaces et les volumes de chaque compartiment. Les seules informations nécessaires sont la valeur des débits d'échanges traversant chaque surface ainsi que leurs dimensions (largeurs et hauteurs des compartiments et épaisseur des tranches). Ce cadre très restrictif, qui a été imposé par rapport à notre volonté de tester le découpage en T_{GICI} dans un cas le plus défavorable possible, pourra facilement faire l'objet d'assouplissements lors de travaux futurs. En effet, les étapes 1, 2 et 3 ne sont pas techniquement insurmontables, dans la mesure où on prend soin de conserver un agencement du réseau de compartiments similaire d'une tranche à l'autre. Nous mettons plus de réserve sur le cas où les tranches ont un réseau de compartiment variable d'une tranche à l'autre. On peut se poser la question si un découpage en tranches a encore raison d'avoir lieu dans ce cas et si procéder à un pré-découpage manuel (voir paragraphe II.2.1) ne serait pas tout aussi simple.

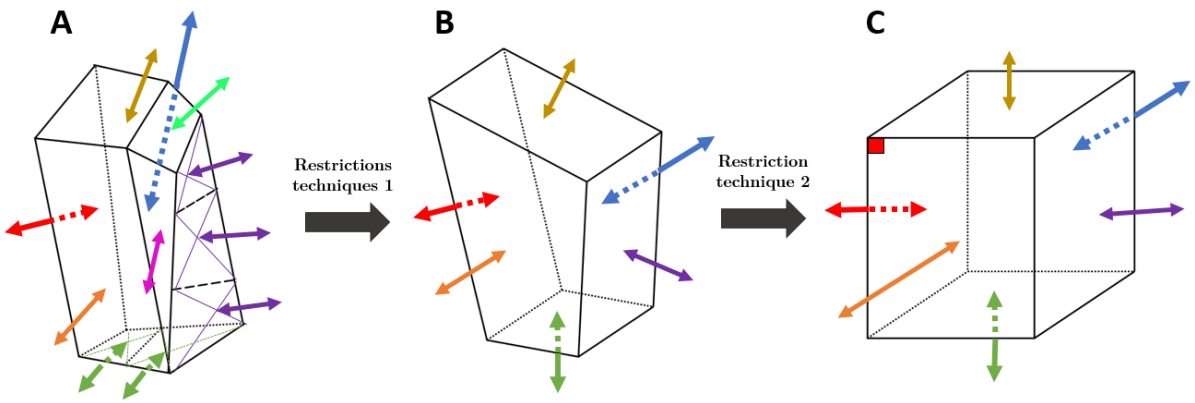


Figure IV-12 : Illustration des différentes formes de compartiments possible au fur et à mesure qu'on applique les contraintes techniques imposées dans le cadre du développement de l'algorithme de remplissage de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange ».

IV.4.1.2 Réseau de compartiments en tranches identiques

La Figure IV-13 illustre le découpage en tranches identiques que l'algorithme prend en compte. Pour le développement de l'algorithme de remplissage, nous avons arbitrairement choisi une origine $\mathbf{0}$ et une direction des trois axes x, y et z (en rouge). L'utilisateur doit renseigner les paramètres suivants :

- L : la longueur du système
  - N_L : Nombre de compartiments dans la longueur (nombre de tranches)
    - L_k, avec k allant de 1 à N_L, les épaisseurs des tranches (voir Tableau IV-25).
- l : la largeur du système
  - N_L : Nombre de compartiments dans la largeur
    - l_l, avec l allant de 1 à N_l, les largeurs des différents compartiments (voir le Tableau IV-26)
- H : la hauteur du système
  - N_h : Nombre de compartiments dans la hauteur
    - h_m, avec m allant de 1 à N_h, les hauteurs des différents compartiments (voir Tableau IV-27)

Tableau IV-25 : Données pour dimensionner le modèle en tranches identiques dans la longueur **L** *(fournies par l'utilisateur : fond vert)*

	$L - N_L$					
L_k	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6

Tableau IV-26 : Données pour dimensionner le modèle en tranches identiques dans la largeur **l** *(fournies par l'utilisateur : fond vert)*

	$l - N_l$		
l_l	l_1	l_2	l_3

Tableau IV-27 : Données pour dimensionner le modèle en tranches identiques dans la hauteur **h** *(fournies par l'utilisateur : fond vert)*

	$H - N_h$			
h_m	h_1	h_2	h_3	h_4

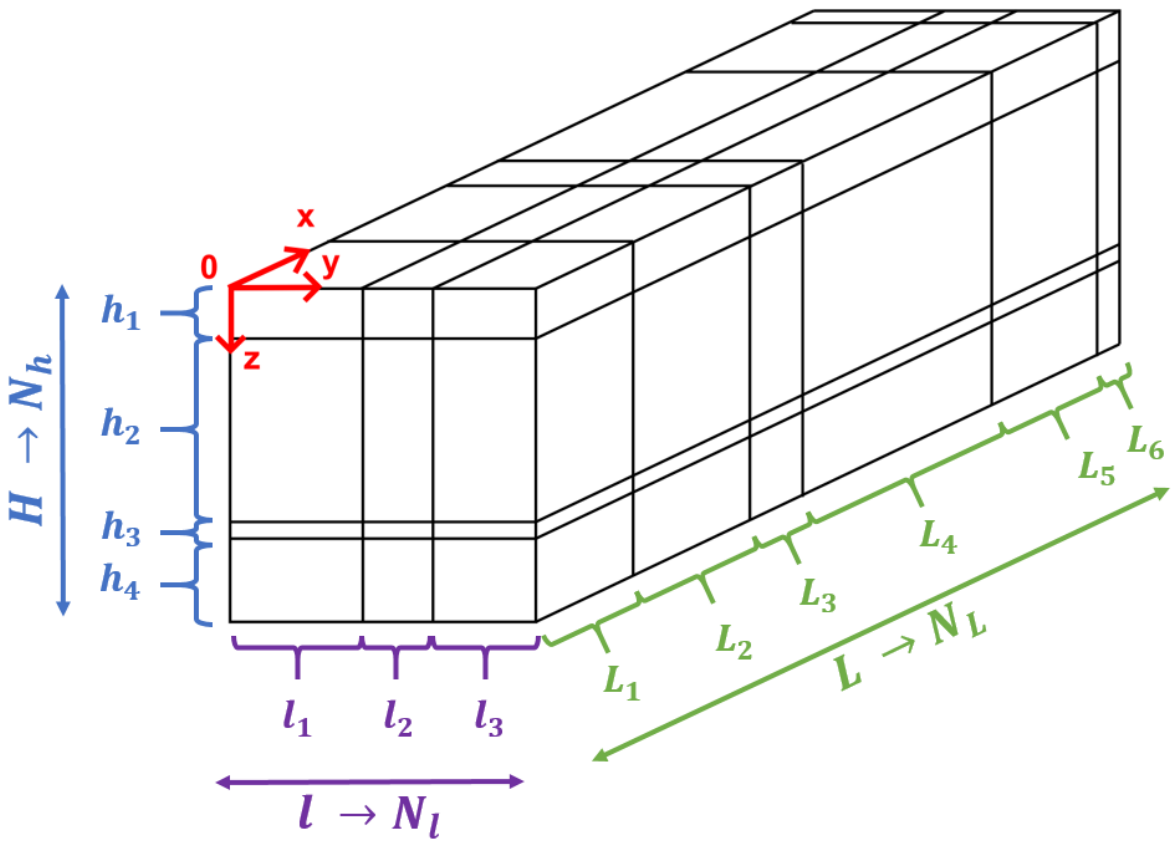


Figure IV-13 : Données à fournir dans l'interface graphique pour construire un réseau de compartiments en tranches.

IV.4.1.3 Entrée(s)/sortie(s) fluides

Ensuite l'utilisateur doit indiquer les entrées et les sorties de fluide. Pour cela, il donne les coordonnées des compartiments à l'aide des longueurs L_k (avec k correspondant à la position du compartiment suivant la longueur du réacteur), des largeurs l_l (avec l correspondant à la position du compartiment suivant la largeur du réacteur) et des hauteurs h_m (avec m correspondant à la position du compartiment suivant la hauteur du réacteur). Un compartiment j est numéroté de la manière suivante :

$$j \rightarrow klm \qquad \text{[IV.7]}$$

Dans l'exemple illustré sur la Figure IV-14, il y a une entrée et une sortie de fluide. Au niveau de l'interface graphique, l'utilisateur renseigne les informations comme indiqué dans le Tableau IV-28. Par la suite, l'utilisateur sera amené à préciser les compartiments sièges d'injection et de détection d'espèces. Cette étape sera réalisée dans le « module 2 » comme décrit dans le paragraphe IV.3.2.

Tableau IV-28 : Coordonnées des compartiments d'entrée/sortie de fluides et d'injection/détection d'espèces (fournies par l'utilisateur : fond vert)

Compartiment d'entrée de fluide		
$k = 1$	$l = 2$	$m = 1$
Compartiment de sortie de fluide		
$k = 5$	$l = 1$	$m = 1$

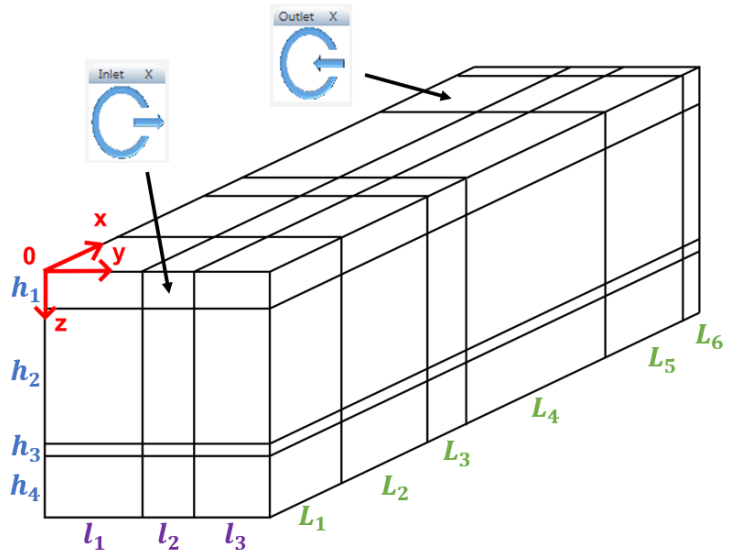


Figure IV-14 : Données à fournir au niveau de l'interface graphique pour indiquer la localisation des entrée(s) et sortie(s) de fluide.

IV.4.1.4 Débits échangés aux interfaces entres compartiments

Les échanges entre les compartiments ne sont pas indiqués manuellement comme dans le « module 2 » au paragraphe IV.3.1.3. Ici il est nécessaire de donner les débits d'échange plan par plan dans un ordre bien défini que nous avons fixé. La Figure IV-15 illustre les différents plans existants, et l'ordre dans lequel ils doivent être lus. On commence par les plans dans la largeur c'est-à-dire les plans de normale e_y, dans le sens croissant de l'axe y (1 et 2 en vert) puis dans la longueur (les plans de normale e_x), dans le sens croissant de l'axe x (3 à 7 en jaune) et pour finir dans la hauteur (les plans de normale e_z) dans le sens croissant de l'axe z (8 à 10 en bleu). Pour chaque plan on renseigne les débits convectifs et turbulents (facultatif). Pour les plans :

- de normale e_y (en vert), on traite les surfaces de coordonnée x croissante, puis de coordonnées z croissante (voir Figure IV-16 en haut).
- de normale e_x (en jaune), on traite les surfaces de coordonnée y croissante, puis de coordonnées z croissante (voir Figure IV-16 au milieu).
- de normale e_z (en bleu), on traite les surfaces de coordonnée x croissante, puis de coordonnées y croissante (voir Figure IV-16 en bas).

En pratique l'utilisateur doit fournir les débits volumiques (exprimés en pourcentage du débit total d'entrée) sous forme de deux colonnes. Dans la première colonne sont indiqués, dans l'ordre explicité, les débits volumiques convectifs Q_v^{conv} et dans la seconde colonne les débits volumiques turbulents Q_v^{turb}.

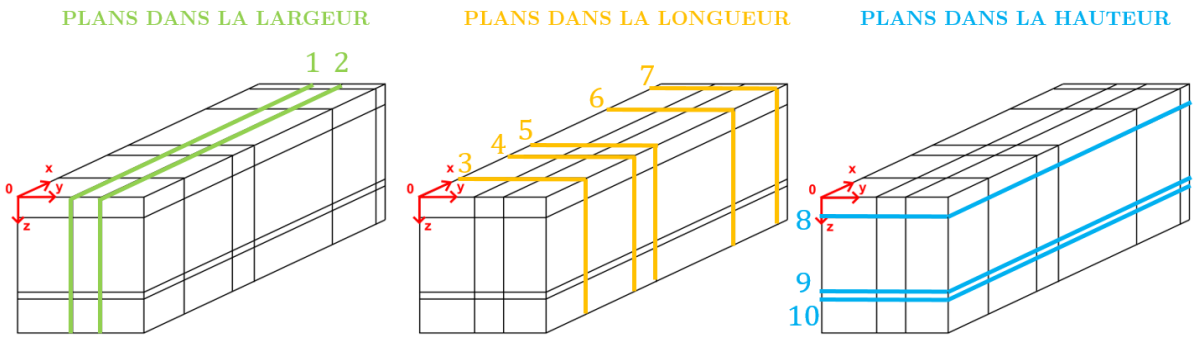


Figure IV-15 : Illustration des plans d'échange dans la largeur, longueur et hauteur. La numérotation correspond à l'ordre dans lequel on renseigne les débits d'échanges de chaque plan.

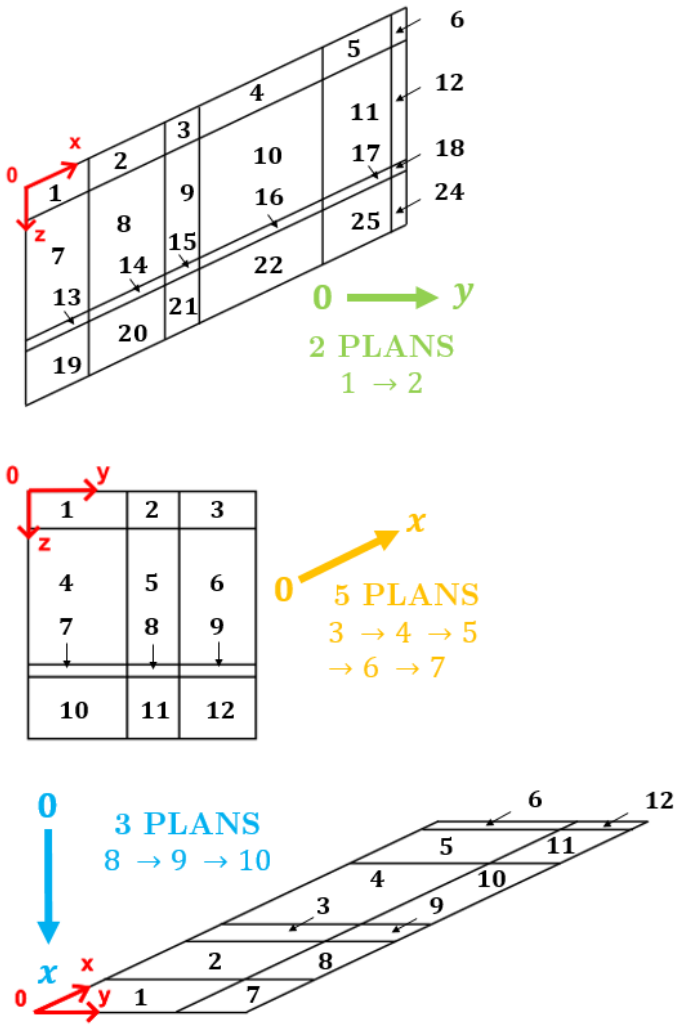


Figure IV-16 : Illustration d'un plan générique dans la largeur (de normale e_y), longueur (de normale e_x) et hauteur (de normale e_z). La numérotation correspond à l'ordre dans lequel on renseigne les débits d'échanges.

IV.4.2 Algorithme de construction de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange »

Les algorithmes développés dans ce troisième module ont été intégrés dans le « module 2 » au niveau de l'étape 1 : Construction de la . Les étapes 2, 3 et 4 restent inchangées. Le but des algorithmes développés consiste donc à construire automatiquement la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » à partir des informations données par l'utilisateur dans l'interface graphique au paragraphe précédent.

IV.4.2.1 Dimensionnement

A partir du nombre de compartiments dans la longueur, la largeur et la hauteur, l'algorithme calcule le nombre total de compartiments :

$$J = N_L \times N_l \times N_h \qquad \text{[IV.8]}$$

On a également accès au nombre de plans de normale e_x :

$$N_{pL} = (N_L - 1) \times N_l \times N_h \qquad \text{[IV.9]}$$

Au nombre de plans de normale e_y :

$$N_{pl} = N_L \times (N_l - 1) \times N_h \qquad \text{[IV.10]}$$

Au nombre de plans de normale e_z :

$$N_{ph} = N_L \times N_l \times (N_h - 1) \qquad \text{[IV.11]}$$

Le nombre de plans total vaut :

$$N_{pTT} = N_{pL} + N_{pl} + N_{ph} \qquad \text{[IV.12]}$$

A partir du nombre total de plans et du nombre total de compartiments, on a accès au nombre de branches et nœuds de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange ». Le nombre de nœuds est égal à deux fois le nombre de compartiments :

$$N_{nd} = 2 \times J \qquad \text{[IV.13]}$$

Chaque compartiment est traversé par une branche. Il y a également deux branches pour chaque plan d'échanges (une pour l'échange convectif monodirectionnel et l'aller de l'échange turbulent et un autre pour le retour du de l'échange turbulent (qui est bidirectionnel). Enfin, il faut une branche pour indiquer les entrées de fluide et une autre pour les sorties. Finalement le nombre de branches se calcule de la manière suivante :

$$N_{br} = J + 2 \times N_{pTT} + 2 \qquad \text{[IV.14]}$$

Pour un compartiment j, on numérote les nœuds d'entrée $nd_{j(entrée)}$ et sortie $nd_{j(sortie)}$ de la manière suivante (voir illustration sur la Figure IV-17) :

$$nd_{j(entrée)} = 2 \times j - 1 \qquad \text{[IV.15]}$$

$$nd_{j(sortie)} = 2 \times j \qquad \text{[IV.16]}$$

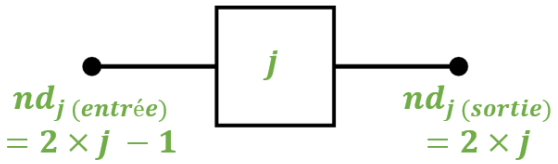


Figure IV-17 : Numéros des nœuds d'entrée $nd_{j(entrée)}$ et de sortie $nd_{j(sortie)}$ d'un compartiment j.

IV.4.2.2 Nomenclature de numérotation des compartiments

Il est nécessaire de faire une nomenclature pour la numérotation des compartiments. On rappelle que dans l'équation [**IV.7**] un compartiment j est numéroté klm avec k sa position dans la longueur du réacteur, l sa position dans la largeur et m sa position dans la hauteur. Les positions k, l, m sont déterminée à partir de l'origine du repère $(0, x, y, z)$, Figure IV-18. Les compartiments sont numérotés de 1 à J en commençant à l'origine du repère et en allant dans la direction de l'axe x croissant puis y croissant puis z croissant. A titre illustratif nous avons référencé les 18 compartiments de l'exemple de la Figure IV-18 dans la nomenclature klm dans le Tableau IV-29 ci-dessous.

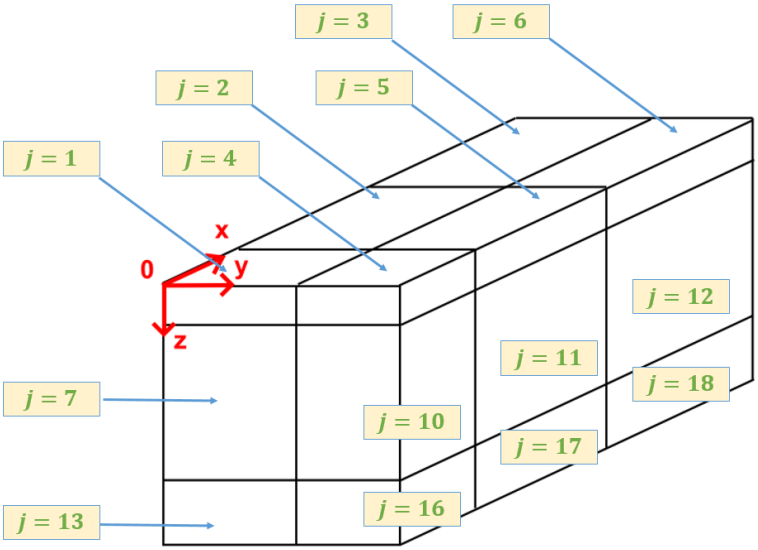


Figure IV-18 : Convention de numérotation des compartiments j allant de 1 à J

Tableau IV-29 : Numérotation des compartiments "j" dans la nomenclature "klm"

j	k	l	m		j	k	l	m		j	k	l	m
1	1	1	1		7	1	1	2		13	1	1	3
2	2	1	1		8	2	1	2		14	2	1	3
3	3	1	1		9	3	1	2		15	3	1	3
4	1	2	1		10	1	2	2		16	1	2	3
5	2	2	1		11	2	2	2		17	2	2	3
6	3	2	1		12	3	2	2		18	3	2	3

Une fois que l'on a défini cette nomenclature on peut calculer le volume de chacun de compartiment :

$$V_j = L_k \times l_l \times h_m \qquad \text{[IV.17]}$$

On dispose alors de toutes les données nécessaires pour que l'algorithme construise automatiquement la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange ».

IV.5 Perspectives

Plusieurs fonctionnalités pourraient être ajoutées par la suite au logiciel. A court terme, on pourra implémenter une fonction d'optimisation des paramètres des modèles afin d'obtenir les meilleures courbes possibles (notamment les courbes de DTS pour les modèles systémiques). L'optimisation peut s'avérer très pratique lorsqu'il n'y a pas d'autres solutions cependant nous mettons en garde sur le fait qu'obtenir une valeur d'un paramètre mathématiquement optimisé ne procure pas forcément de signification physique au modèle. Le traitement de courbes de traçage diphasiques n'est pas prévu dans le logiciel et pourrait faire l'objet d'un post-traitement dans le « module 1 ». Il serait possible d'incorporer certains modèles de cinétique tels que le modèle ASM1 dans la partie suivie des espèces du « module 2 ». Ce modèle est largement utilisé dans la littérature pour les applications de traitement des eaux.

Concernant la prise en compte d'écoulements instationnaires, la prudence est requise. Du point de vue théorique, un écoulement instationnaire peut être pris en compte par le logiciel sous certaines conditions. S'il n'est pas nécessaire de modifier le réseau de compartiments, il faut mettre à jour la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » à chaque pas de temps de calcul. Le pas de temps d'intégration doit être suffisamment court. Cela n'a pas été réalisé dans ces travaux de thèse mais ne présente pas de grande difficulté.

Dans le cas d'une modification radicale de l'écoulement au cours du temps, le réseau de compartiments doit être modifié au cours du temps. Ce scénario n'est absolument pas pris en compte dans le logiciel actuel et fait l'objet de perspectives sur le long terme.

Conclusions générales et Perspectives

La description du fonctionnement, l'optimisation, la commande et la régulation des réacteurs chimiques sont les tâches de l'ingénieur en génie des procédés. La modélisation informatique est un outil très efficace pour prédire le fonctionnement d'un réacteur chimique. Cette thèse portait sur la modélisation compartimentale, dont la méthodologie a été approfondie et développée en vue de proposer une approche la plus générale possible.

Rappel des principaux résultats

Le continuum de la modélisation compartimentale

Les modèles systémiques ont été développés dans le but de modéliser et de simuler l'hydrodynamique globale des réacteurs chimiques et par extension des systèmes traversés par un fluide en écoulement, à l'aide d'une association de réacteurs ou d'écoulement idéaux (RPA, RP, volumes morts, recirculations, etc.). Les paramètres du modèle sont généralement calculés à partir de courbes de traçage (principalement des DTS) en minimisant l'écart entre la courbe théorique du modèle proposé et la courbe expérimentale. Le modèle est généralement proposé par l'expert sur la base d'informations technologiques sur le procédé, de son observation et de ses compétences. L'ajout des bilans de matière et de chaleur à ce modèle permet de simuler le comportement et les performances globales du réacteur. Par la suite, le développement de la mécanique des fluides numérique a offert une alternative séduisante car cette approche offre une description très détaillée de tous les phénomènes. L'avènement de la mécanique des fluides numérique a dans un premier temps conduit à délaisser les modèles systémiques. Malgré la puissance grandissante des ordinateurs de calcul, la résolution des équations théoriques est très gourmande en temps de calcul et la surabondance d'informations n'est pas toujours adaptée aux problématiques du génie des procédés. C'est dans ce contexte qu'est apparue au début des années 2000 la modélisation compartimentale qui propose un compromis parfait entre la finesse de description de la MFN et la facilité d'utilisation des modèles systémiques. La modélisation compartimentale est une approche intermédiaire entre la modélisation systémique et la mécanique des fluides numérique. Plusieurs degrés de finesse sont possibles dans cette approche, entre les deux extrêmes que constituent la modélisation systémique et la MFN. C'est ainsi que nous classons dans la même philosophie d'approches tous les modèles systémiques qui tendent à offrir une structure cohérente vis-à-vis de la localisation spatiale des phénomènes modélisés et les approches qui simplifient des données issues de la MFN. Ainsi la modélisation compartimentale offre une très grande souplesse de mise en œuvre quels que soit le système à modéliser et les données expérimentales à disposition.

S'il est envisageable de développer une méthode relativement générale, sa mise en œuvre pratique nécessite des techniques différentes suivant le degré de finesse des données disponibles, l'objectif souhaité en terme de modélisation des phénomènes et la localisation des phénomènes que l'on souhaite modéliser. On pourrait résumer en disant que l'approche compartimentale consiste en un découpage du système étudié par un réseau interconnecté de volumes échangeant de la matière. Un tel modèle doit permettre de simuler a minima (i) l'hydrodynamique globale du système par l'intermédiaire de la DTS et, (ii) les grandeurs étudiées (concentrations, température, fraction gazeuse, etc.) aux points de mesures disponibles. Ce qui revient à dire que le découpage doit être détaillé dans les zones d'intérêt et peut-être grossier dans les zones de moindre intérêt, sous réserve que cela n'affecte pas les résultats attendus. Remarquons que les courbes de DTS correspondent à des conditions particulières (systèmes ouverts) et qu'il est théoriquement possible, bien que nous n'ayons pas réalisé de tels tests dans le cadre de cette thèse, d'utiliser des courbes de mélange dans le cas des systèmes fermés.

Points clés des travaux de thèse

La modélisation compartimentale consiste à découper le volume total en sous-volumes (les compartiments) au sein desquels toutes les grandeurs peuvent être considérées comme homogènes au regard de la finesse fixée par l'utilisateur. Cette hypothèse permet d'écrire des bilans de matière simplifiés et aisés à résoudre numériquement. La disposition spatiale des compartiments reflète rigoureusement la position spatiale des phénomènes modélisés (à l'inverse de l'approche systémique classique qui souvent ne permet pas de localiser les phénomènes dans l'espace). Ces deux aspects permettent de décrire le réacteur de manière fonctionnelle et structurelle.

Une étude approfondie de l'état de l'art a été réalisée dans un premier chapitre et nous a permis d'identifier (i) les approches de découpage les plus polyvalentes dont la technique de division successive du volume, qui a été préférée à l'agglomération successive de mailles, et (ii) les différentes méthodes de calcul des échanges de matière entre les compartiments.

Dans un second chapitre, nous avons formalisé la méthodologie de la modélisation compartimentale en proposant un organigramme étape par étape. Les points clés en sont les suivants :

- La première étape consiste à définir au sein du continuum le degré de finesse souhaité en fonction de l'objectif de modélisation et des données disponibles.
- Afin de définir une méthode générale, une analyse des travaux antérieurs et des structures des réacteurs et systèmes les plus courants nous ont amené à proposer un découpage en tranches identiques.
- Trois techniques de découpage sont présentées, le découpage qualitatif (communément appelé découpage « à la main » voir par exemple (Alvarado et al., 2012)) et quantitatif (algorithme de divisions successives basé sur le calcul de la moyenne arithmétique de la grandeur à découper, voir par exemple (Wells and Ray, 2005)) et le découpage

géométrique (découpage ne prenant en compte que la géométrie du volume à découper, voir par exemple (Delafosse et al., 2014)).

- L'écoulement principal est pris en compte via des échanges convectifs. La dispersion, due à la turbulence de l'écoulement, peut être prise en compte via des échanges turbulents. La méthodologie de calcul des échanges convectifs fait l'unanimité, mais trois méthodes de calcul différentes sont possibles concernant les échanges turbulents, (Guha et al., 2006), (Le Moullec et al., 2010) et (Delafosse et al., 2014).
- Nous avons développé un outil mathématique générant une interface, la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange », qui permet de traduire mathématiquement l'agencement d'un réseau quelconque de compartiments. Une méthodologie de remplissage de cette matrice a été définie et pour certaines configurations particulières un algorithme d'écriture permet de la remplir automatiquement. Un algorithme de lecture de cette matrice a été développé et permet d'écrire puis résoudre automatiquement les équations différentielles de n'importe quelle configuration.

Nous avons appliqué notre méthode dans un troisième chapitre sur un cas a priori défavorable à un découpage en tranches identiques et nous avons comparé les trois méthodes de calcul des échanges turbulents. Le modèle à compartiments en tranches identiques est capable de représenter convenablement la DTS et des courbes de traçage (dispersion d'une substance active en surface de l'étang dans le but de traiter des algues indésirables) de la cuve. En revanche les résultats obtenus n'ont pas permis de donner des indications précises sur le choix d'une méthode de calcul les échanges turbulents plutôt qu'une autre. Nous n'avons pas eu le temps de tester la robustesse de la méthode en l'appliquant sur les différents cas d'application de la littérature. Les cas assez facilement transposable sont ceux de (Rigopoulos and Jones, 2003), (Le Moullec et al., 2010), (Guha et al. 2006), (Gresch et al., 2009), (Alvarado et al., 2012), (Delafosse et al. 2014) et (Nauha and Alopaeus, 2015). Ce travail est certainement la première chose qu'il reste à faire.

Enfin dans un dernier chapitre nous avons présenté la valorisation des algorithmes développés durant ces travaux de thèse dans un logiciel qui sera commercialisé prochainement. Les fonctionnalités précises et détaillées du logiciel sont présentées. Le développement des algorithmes de remplissage et de lecture de la « matrice de connectivité des compartiments et des débits d'échange », dans le but de résoudre les équations différentielles, a été intégralement réalisé durant ces travaux de thèse. Afin de vérifier leur robustesse, de nombreux tests sur différents cas d'école ont été réalisés.

Le découpage en tranches identiques

Une étape essentielle dans la construction d'un modèle à compartiments consiste à découper le volume total du réacteur chimique. Il est possible de travailler directement sur le volume total du réacteur chimique mais la méthode suggère de faire un pré-découpage permettant de bien

séparer les zones aux comportements semblables, (Nauha and Alopaeus, 2015). Nous avons identifié dans la littérature une méthode qui consiste à découper le réacteur en tranches identiques le long d'un axe, (Le Moullec et al., 2010). Cette méthode est particulièrement adaptée lorsqu'il existe une invariance dans la direction de l'axe où sont réalisées les tranches. Nous avons observé que plusieurs travaux n'utilisaient pas cette technique alors qu'elle nous semblait envisageable (Rigopoulos and Jones, 2003) ou (Delafosse et al., 2014). L'intérêt du découpage en tranches est qu'il offre une première structure au modèle facilitant la généralisation de la méthode. Néanmoins même si cette technique semble toujours applicable, elle est réalisée au détriment d'une perte de précision pour les cas les plus défavorables (pas de symétrie du réacteur et pas d'invariance) qu'il nous a fallu évaluer. Le remplissage manuel de la « matrice de connectivité des compartiments et des débits d'échange » est une tâche très laborieuse lorsque le nombre de compartiments devient important (typiquement à partir d'une vingtaine). La régularité dans la structure du modèle, que procure le découpage en tranches identiques, a permis le développement d'un algorithme de remplissage automatique de la matrice qui constitue un point fort pour la méthode générale. Cet algorithme a été développé dans un cadre assez strict à savoir des tranches de même épaisseur, avec un réseau de compartiments de forme parallélépipédique (facilement applicable à un système de géométrie cylindrique).

Réactions chimiques et transferts

L'étude bibliographique a mis en évidence que les temps caractéristiques des phénomènes à modéliser (réactions chimiques, dispersion de chaleur ou de matière) jouent un rôle très restrictif vis-à-vis de la structure finale du modèle. Comme l'ont montré (Guha et al., 2006) ou (Gresch et al., 2009), la cinétique chimique des réactions joue un rôle important sur le dimensionnement des compartiments. Il est nécessaire qu'au sein d'un compartiment le temps caractéristique du phénomène étudié soit largement supérieur au temps de passage des molécules. Ceci assure que la concentration en espèces chimiques est uniforme dans le compartiment. Cette contrainte signifie par exemple, que la structure du modèle est presque figée lorsque les vitesses de réaction sont très rapides par rapport à l'écoulement et qu'un découpage très fin sera nécessaire. Dans ce cas un découpage de type géométrique proposé par la méthode s'avère très pratique à mettre en œuvre. Les réactions très rapides de type combustion, comme dans les travaux de (Fichet et al., 2010), n'offrent donc pas beaucoup de marge de manœuvre vis-à-vis du découpage. Notons que même dans ce cas, le découpage par tranches est quand même directement applicable.

Dans l'exemple traité au chapitre 3, la localisation des compartiments a été définie en utilisant des mesures expérimentales et avec une précision donnée pour mesurer la dispersion du traceur en plusieurs points. La même étude avec plus de points de mesure aurait peut-être nécessité un découpage plus fin.

Les échanges turbulents

Une autre étape essentielle dans la construction d'un modèle à compartiments consiste à définir les échanges entre ces derniers. Nous avons vu que les échanges sont pris en compte de deux manières via des échanges convectifs et turbulents. Les échanges convectifs représentent l'écoulement principal et la méthode pour les calculer est bien définie. Les échanges turbulents rendent compte de la dispersion turbulente au sein de l'écoulement et la littérature propose trois méthodes très différentes pour les calculer :

- (Guha et al., 2006) utilisent une analogie avec la diffusion moléculaire à partir du coefficient de diffusion turbulente D_t, calculé à partir de la MFN et Δx la distance entre les deux compartiments.
- (Le Moullec et al., 2010) utilisent une analogie entre le nombre de mélangeurs d'une cascade de RPA et la dispersion d'un modèle piston à dispersion axiale.
- (Delafosse et al., 2014) proposent de calculer directement la vitesse turbulente moyenne $< v^{turb} >$ de manière similaire au calcul de la vitesse convective moyenne $< v^{conv} >$.

Aucune comparaison de ces trois méthodes n'a été conduite c'est pourquoi nous les avons testées sur notre cas d'application. Nous avons constaté que les méthodes donnent des résultats très différents. Si nous pouvions nous attendre à des différences, l'ampleur de ces écarts nous a surpris. Une étude approfondie des hypothèses mises en jeu avec des tests sur des d'applications spécialement adaptées est indispensable pour éventuellement invalider une approche et surtout donner des critères précis pour guider l'utilisateur dans le choix de la méthode de calcul plutôt qu'une autre. C'est pourquoi, dans l'état actuel nous n'avons pas intégré de façon préférentielle l'une ou l'autre des méthodes. Il est impératif d'approfondir ce point avant d'aller plus loin et d'inclure ou exclure définitivement une méthode de calcul plutôt qu'une autre.

Perspectives à court et long termes

Validation approfondie de la méthode sur le fond scientifique

L'automatisation de la collecte des données issues de la MFN, le remplissage et la lecture automatique de la « matrice de connectivités des compartiments et des débits d'échange » nous a demandé beaucoup de temps et de travail. De plus, les différences entre les méthodes de calcul des échanges turbulents, que nous n'avions pas envisagées, et sur lesquelles nous avons longtemps buté, ont aussi été très consommatrices en temps. Une critique objective du résultat final se traduit par l'absence : (1) de critères quantitatifs permettant d'obtenir automatiquement un découpage optimal et (2) d'aide au choix d'une méthode de calcul des échanges turbulents (mais soulève une vraie question de fond totalement occultée dans la littérature). De ce fait nous reconnaissons qu'il faudrait poursuivre la validation de notre méthode qui, comme nous l'avons soulevé ci-avant, débuterait par une validation sur les exemples de la littérature déjà traités (même si cela n'est pas si évident au vu parfois du manque de données dans les publications).

Développement d'outils d'automatisation supplémentaires

Pour démocratiser l'utilisation de la méthode, de nouveaux outils numériques sont nécessaires. Il ne s'agit pas d'avancées sur le fond scientifique mais sur la forme.

A court terme, il est possible de généraliser le découpage en tranches identiques pour prendre en compte des situations de moins en moins restrictives. Actuellement les algorithmes développés prennent en compte des tranches de géométrie identique avec un réseau de compartiments de forme parallélépipédique échangeant avec un nombre limité de compartiments voisins. Progressivement, il faudrait prendre en compte des géométries quelconques des compartiments, puis autoriser un échange avec un nombre quelconque de compartiments et enfin une forme quelconque des tranches.

L'étape de découpage est réalisée par notre méthode via des techniques de division du volume total du réacteur chimique. Nous avons présenté trois techniques de découpage : le découpage qualitatif (communément appelé découpage « à la main »), le découpage quantitatif (algorithme de divisions successives basé sur le calcul de la moyenne arithmétique de la grandeur à découper) et le découpage géométrique (découpage ne prenant en compte que la géométrie du volume à découper). Ces trois techniques sont similaires sur le fond scientifique, c'est-à-dire qu'elles consistent à diviser un volume en plusieurs sous-volumes. Elles ne diffèrent en réalité que sur la forme, c'est-à-dire qu'elles sont adaptées en fonction des données disponibles. Le découpage quantitatif, c'est-à-dire la méthode de divisions successives, a été présenté pour la première fois par (Wells and Ray, 2005) et consiste à calculer la moyenne arithmétique de la grandeur à découper puis d'affecter d'un côté ou de l'autre toutes les mailles de MFN dont la valeur numérique de la grandeur est inférieure ou supérieure à cette moyenne. Cette approche propose une automatisation du découpage sur la base d'un critère quantitatif et est une véritable plus-value du point de vue de l'automatisation du découpage, sous réserve qu'elle soit utilisée intelligemment. En effet, si le nombre de divisions est trop faible, alors un découpage qualitatif peut suffire, et si le nombre de divisions est trop important, alors un découpage géométrique sera tout aussi efficace. Cette approche, qui n'a pas été testée dans ce manuscrit, nous semble indispensable car en fonction du nombre de divisions réalisées, elle englobe sur le fond scientifique les deux autres techniques de découpage. Cependant, la validation scientifique et la pertinence du découpage obtenu, devra faire l'objet d'investigations approfondies sur des cas d'études spécifiquement appropriés.

Ecoulement instationnaire

La méthode a été développée pour des régimes stationnaires ce qui est le cas de la plupart des situations rencontrées. Cela signifie que le débit volumique d'échange entre les compartiments est constant au cours du temps et que la structure du réseau de compartiments est inchangée. Si l'écoulement n'est pas stationnaire et que les débits varient fortement, la méthode n'est pas applicable. C'est notamment le cas pour les stations d'épuration.

Certains auteurs ont tenté de proposer quelques éléments pour étudier ces situations. Par exemple (Nauha and Alopaeus, 2015) proposent de moyenner les données sur la durée de la simulation souhaitée afin d'avoir des grandeurs qui n'évoluent pas dans le temps. Cette solution permet de s'affranchir de fluctuations minimes autour d'une valeur moyenne, ce qui a été possible dans leur cas car le débit d'entrée du gaz était constant.

Si les débits varient fortement, la méthode actuelle pourrait être adaptée. Par exemple, serait-il possible de recalculer la « matrice de connectivité des compartiments et des débits d'échanges » à chaque pas de temps de calcul en supposant que la structure du modèle reste fixe au cours du temps ? Dans ce cadre (Delafosse et al., 2015) proposent de définir des échanges turbulents qui varient dans le temps de manière aléatoire afin de rendre compte de l'écoulement turbulent instationnaire.

L'étape ultime serait de pouvoir construire un modèle à compartiments dont la structure est dynamique, c'est-à-dire potentiellement modifiée à chaque pas de temps. Cela reste compliqué d'un point de vue technique, dans la mesure où le processus de construction des compartiments et de calcul des échanges devrait être entièrement automatisé. De plus, une investigation scientifique approfondie serait nécessaire afin de valider cette approche.

Références

Abdulrahman, M.W., 2016. CFD simulations of direct contact volumetric heat transfer coefficient in a slurry bubble column at a high gas temperature of a helium–water–alumina system. Appl. Therm. Eng. 99, 224–234. doi:10.1016/j.applthermaleng.2016.01.043

Aghbolaghy, M., Karimi, A., 2014. Simulation and optimization of enzymatic hydrogen peroxide production in a continuous stirred tank reactor using CFD–RSM combined method. J. Taiwan Inst. Chem. Eng. 45, 101–107. doi:10.1016/j.jtice.2013.05.009

Alvarado, A., Vedantam, S., Goethals, P., Nopens, I., 2012. A compartmental model to describe hydraulics in a full-scale waste stabilization pond. Water Res. 46, 521–530. doi:10.1016/j.watres.2011.11.038

Behin, J., Aghajari, M., 2008. Influence of water level on oil–water separation by residence time distribution curves investigations. Sep. Purif. Technol. 64, 48–55. doi:10.1016/j.seppur.2008.08.009

Behin, J., Bahrami, S., 2012. Modeling an industrial dissolved air flotation tank used for separating oil from wastewater. Chem. Eng. Process. Process Intensif. 59, 1–8. doi:10.1016/j.cep.2012.05.004

Ben Gaida, L., Andre, C., Bideaux, C., Alfenore, S., Cameleyre, X., Molina-Jouve, C., Fillaudeau, L., 2012. Modelling of hydrodynamic behaviour of a two-stage bioreactor with cell recycling dedicated to intensive microbial production. Chem. Eng. J. 183, 222–230. doi:10.1016/j.cej.2011.12.065

Bezzo, F., Macchietto, S., 2004. A general methodology for hybrid multizonal/CFD models: Part II. Automatic zoning. Comput. Chem. Eng. 28, 513–525. doi:10.1016/j.compchemeng.2003.08.010

Bhusare, V.H., Dhiman, M.K., Kalaga, D.V., Roy, S., Joshi, J.B., 2017. CFD simulations of a bubble column with and without internals by using OpenFOAM. Chem. Eng. J. 317, 157–174. doi:10.1016/j.cej.2017.01.128

Brenan, K.E., Campbell, S.L., Petzold, L.R., 1996. Numerical Solution of Initial-value Problems in Differential-algebraic Equations. SIAM.

Busciglio, A., Grisafi, F., Scargiali, F., Brucato, A., 2014. Mixing dynamics in uncovered unbaffled stirred tanks. Chem. Eng. J. 254, 210–219. doi:10.1016/j.cej.2014.05.084

Claudel, S., 2002. Mise au point d'un algorithme d'aide à la génération automatique de modèles d'écoulement à compartiments à partir de traçages expérimentaux dans des réacteurs industriels. Vandoeuvre-les-Nancy, INPL.

Claudel, S., Fonteix, C., Leclerc, J.-P., Lintz, H.-G., 2003. Application of the possibility theory to the compartment modelling of flow pattern in industrial processes. Chem. Eng. Sci. 58, 4005–4016. doi:10.1016/S0009-2509(03)00269-0

Danckwerts, P.V., 1953. Continuous flow systems: Distribution of residence times. Chem. Eng. Sci. 2, 1–13. doi:10.1016/0009-2509(53)80001-1

Delafosse, A., Calvo, S., Collignon, M.-L., Delvigne, F., Crine, M., Toye, D., 2015. Euler–Lagrange approach to model heterogeneities in stirred tank bioreactors – Comparison to experimental flow characterization and particle tracking. Chem. Eng. Sci. 134, 457–466. doi:10.1016/j.ces.2015.05.045

Delafosse, A., Collignon, M.-L., Calvo, S., Delvigne, F., Crine, M., Thonart, P., Toye, D., 2014. CFD-based compartment model for description of mixing in bioreactors. Chem. Eng. Sci. 106, 76–85. doi:10.1016/j.ces.2013.11.033

Delafosse, A., Delvigne, F., Collignon, M.L., Crine, M., Thonart, P., Toye, D., 2010. Development of a compartment model based on CFD simulations for description of mixing in bioreactors. Biotechnol. Agron. Société Environ. 14, 517–522.

Fauduet, H., 2012. Principes fondamentaux du génie des procédés et de la technologie chimique (2e éd.). Lavoisier.

Fichet, V., Kanniche, M., Plion, P., Gicquel, O., 2010. A reactor network model for predicting NOx emissions in gas turbines. Fuel 89, 2202–2210. doi:10.1016/j.fuel.2010.02.010

Fletcher, D.F., McClure, D.D., Kavanagh, J.M., Barton, G.W., 2017. CFD simulation of industrial bubble columns: Numerical challenges and model validation successes. Appl. Math. Model. 44, 25–42. doi:10.1016/j.apm.2016.08.033

Gresch, M., Brügger, R., Meyer, A., Gujer, W., 2009. Compartmental Models for Continuous Flow Reactors Derived from CFD Simulations. Environ. Sci. Technol. 43, 2381–2387. doi:10.1021/es801651j

Guha, D., Dudukovic, M.P., Ramachandran, P.A., Mehta, S., Alvare, J., 2006. CFD-based compartmental modeling of single phase stirred-tank reactors. AIChE J. 52, 1836–1846. doi:10.1002/aic.10772

Hocine, S., Pibouleau, L., Azzaro-Pantel, C., Domenech, S., 2008. Modelling systems defined by RTD curves. Comput. Chem. Eng. 32, 3112–3120. doi:10.1016/j.compchemeng.2008.05.002

Hristov, H., Mann, R., Lossev, V., Vlaev, S.D., Seichter, P., 2001. A 3-D Analysis of Gas-Liquid Mixing, Mass Transfer and Bioreaction in a Stirred Bio-Reactor. Food Bioprod. Process. 79, 232–241. doi:10.1205/096030801753252306

Hristov, H.V., Mann, R., Lossev, V., Vlaev, S.D., 2004. A Simplified CFD for Three-dimensional Analysis of Fluid Mixing, Mass Transfer and Bioreaction in a Fermenter Equipped with Triple Novel Geometry Impellers. Food Bioprod. Process., Mixing, Heat and Mass Transfer 82, 21–34. doi:10.1205/096030804322985281

Kagoshima, M., Mann, R., 2006. Development of a networks-of-zones fluid mixing model for an unbaffled stirred vessel used for precipitation. Chem. Eng. Sci., Fluid Mixing VIII International Conference Fluid Mixing VIII International Conference 61, 2852–2863. doi:10.1016/j.ces.2005.11.054

Kulkarni, A.L., Patwardhan, A.W., 2014. CFD modeling of gas entrainment in stirred tank systems. Chem. Eng. Res. Des. 92, 1227–1248. doi:10.1016/j.cherd.2013.10.025

Laakkonen, M., Moilanen, P., Alopaeus, V., Aittamaa, J., 2006. Dynamic modeling of local reaction conditions in an agitated aerobic fermenter. AIChE J. 52, 1673–1689. doi:10.1002/aic.10782

Laquerbe, C., Laborde, J.C., Floquet, P., Pibouleau, L., Domenech, S., 1998. Identification of parametric models based on RTD theory: Application to safety studies in ventilated nuclear enclosures. Comput. Chem. Eng., European Symposium on Computer Aided Process Engineering-8 22, Supplement 1, S347–S353. doi:10.1016/S0098-1354(98)00074-X

Laquerbe, C., Laborde, J.C., Soares, S., Floquet, P., Pibouleau, L., Domenech, S., 2001. Synthesis of RTD models VIA stochastic procedures: simulated annealing and genetic algorithm. Comput. Chem. Eng. 25, 1169–1183. doi:10.1016/S0098-1354(01)00687-1

Laquerbe, C, Laborde, J.C., Soares, S., Ricciardi, L., Floquet, P., Pibouleau, L., Domenech, S., 2001. Computer aided synthesis of RTD models to simulate the air flow distribution in ventilated rooms. Chem. Eng. Sci. 56, 5727–5738. doi:10.1016/S0009-2509(01)00292-5

Launder, B.E., Spalding, D.B., 1974. The numerical computation of turbulent flows. Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 3, 269–289. doi:10.1016/0045-7825(74)90029-2

Laurent, J., Bois, P., Nuel, M., Wanko, A., 2015. Systemic models of full-scale Surface Flow Treatment Wetlands: Determination by application of fluorescent tracers. Chem. Eng. J. 264, 389–398. doi:10.1016/j.cej.2014.11.073

Le Moullec, Y., Gentric, C., Potier, O., Leclerc, J.P., 2010. Comparison of systemic, compartmental and CFD modelling approaches: Application to the simulation of a biological reactor of wastewater treatment. Chem. Eng. Sci., 20th International Symposium in Chemical Reaction Engineering—Green Chemical Reaction Engineering for a Sustainable Future 65, 343–350. doi:10.1016/j.ces.2009.06.035

Leclerc, J., Detrez, C., Bernard, A., Schweich, D., 1995. DTS: A software package for flow simulation in reactors. Rev. Inst. Francais Pet. 50, 641–656.

Leon, M.A., Nijhuis, T.A., van der Schaaf, J., Schouten, J.C., 2014. Residence time distribution and reaction rate in the horizontal rotating foam stirrer reactor. Chem. Eng. Sci. 117, 8–17. doi:10.1016/j.ces.2014.06.016

Levenspiel, O., 1999. Chemical Reaction Engineering, third. ed. John. Wiley & Sons Inc.

Li, W., Zhong, W., 2015. CFD simulation of hydrodynamics of gas–liquid–solid three-phase bubble column. Powder Technol. 286, 766–788. doi:10.1016/j.powtec.2015.09.028

McClure, D.D., Kavanagh, J.M., Fletcher, D.F., Barton, G.W., 2015. Oxygen transfer in bubble columns at industrially relevant superficial velocities: Experimental work and CFD modelling. Chem. Eng. J. 280, 138–146. doi:10.1016/j.cej.2015.06.003

Montastruc, L., Azzaro-Pantel, C., Pibouleau, L., Domenech, S., 2004. A systemic approach for pellet reactor modeling: Application to water treatment. AIChE J. 50, 2514–2525. doi:10.1002/aic.10254

Moussoh, A.F., 2016. Simulation de l'écoulement par des approches de Mécanique des Fluides Numérique et évaluation de la dispersion de principes actifs utilisés pour traiter les plans d'eau eutrophisés. Université de Lorraine.

Nauha, E.K., Alopaeus, V., 2015. Modeling outdoors algal cultivation with compartmental approach. Chem. Eng. J. 259, 945–960. doi:10.1016/j.cej.2014.08.073

Nauha, E.K., Alopaeus, V., 2013. Modeling method for combining fluid dynamics and algal growth in a bubble column photobioreactor. Chem. Eng. J. 229, 559–568. doi:10.1016/j.cej.2013.06.065

Niño-Navarro, C., Chairez, I., Torres-Bustillos, L., Ramírez-Muñoz, J., Salgado-Manjarrez, E., Garcia-Peña, E.I., 2016. Effects of fluid dynamics on enhanced biohydrogen production in a pilot stirred tank reactor: CFD simulation and experimental studies. Int. J. Hydrog. Energy 41, 14630–14640. doi:10.1016/j.ijhydene.2016.06.236

Olander, L., Dessagne, J.M., Bonthoux, F., Leclerc, J.P., 1995. A study of general ventilation and local exhaust ventilation in industrial premises using residence time distribution theory. Environ. Prog. 14, 159–163. doi:10.1002/ep.670140314

Olmiccia, J., 2013. Développement d'outils d'évaluation de la distribution des temps de séjour et de génération de maillages pour la modélisation de l'écoulement de fluides dans des mélangeurs continus (masters). École Polytechnique de Montréal.

Petzold, L.R., 1982. Description of Dassl: A Differential/Algebraic System Solver (No. SAND-82-8637; CONF-820810-21). Sandia National Labs., Livermore, CA (USA).

Ponsich, A., Azzaro-Pantel, C., Domenech, S., Pibouleau, L., Pigeonneau, F., 2009. A systemic approach for glass manufacturing process modeling. Chem. Eng. Process. Process Intensif. 48, 1310–1320. doi:10.1016/j.cep.2009.06.001

Potier, O., Leclerc, J.-P., Pons, M.-N., 2005. Influence of geometrical and operational parameters on the axial dispersion in an aerated channel reactor. Water Res. 39, 4454–4462. doi:10.1016/j.watres.2005.08.024

Ranade, V., 2001. Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering. Academic Press.

Ri, P.-C., Ren, N.-Q., Ding, J., Kim, J.-S., Guo, W.-Q., 2017. CFD optimization of horizontal continuous stirred-tank (HCSTR) reactor for bio-hydrogen production. Int. J. Hydrog. Energy 42, 9630–9640. doi:10.1016/j.ijhydene.2017.02.035

Rigopoulos, S., Jones, A., 2003. A hybrid CFD—reaction engineering framework for multiphase reactor modelling: basic concept and application to bubble column reactors. Chem. Eng. Sci. 58, 3077–3089. doi:10.1016/S0009-2509(03)00179-9

Seppäla, M., 2008. Automatic zoning for combined cfd and multiblock modelling. HELSINKI UNIVERSITY OF TECHNOLOGY.

Song, T., Jiang, K., Zhou, J., Wang, D., Xu, N., Feng, Y., 2015. CFD modelling of gas–liquid flow in an industrial scale gas-stirred leaching tank. Int. J. Miner. Process., Mineral processing in Australia and China 142, 63–72. doi:10.1016/j.minpro.2015.01.005

Thýn, J., Zitný, R., 2002. Analysis and diagnostics of industrial processes by radiotracers and radioisotope sealed sources II. Vydavatelství CVUT.

Thýn, J., Zitný, R., Kluson, J., Cechák, T., 2000. Analysis and diagnostics of industrial processes by radiotracers and radioisotope sealed sources. Vydavatelství CVUT.

Trambouze, P., Euzen, J.-P., 2002. Réacteurs chimiques (Les). Editions OPHRYS.

Villermaux, J., 1993. Génie de la réaction chimique, second. ed. Lavoisier.

Vrábel, P., van der Lans, R.G.J.M., van der Schot, F.N., Luyben, K.C.A.M., Xu, B., Enfors, S.-O., 2001. CMA: integration of fluid dynamics and microbial kinetics in modelling of large-scale fermentations. Chem. Eng. J. 84, 463–474. doi:10.1016/S1385-8947(00)00271-0

Wadnerkar, D., Tade, M.O., Pareek, V.K., Utikar, R.P., 2016. CFD simulation of solid–liquid stirred tanks for low to dense solid loading systems. Particuology 29, 16–33. doi:10.1016/j.partic.2016.01.012

Wang, H., Jia, X., Wang, X., Zhou, Z., Wen, J., Zhang, J., 2014. CFD modeling of hydrodynamic characteristics of a gas–liquid two-phase stirred tank. Appl. Math. Model. 38, 63–92. doi:10.1016/j.apm.2013.05.032

Wells, G.J., Ray, W.H., 2005. Methodology for modeling detailed imperfect mixing effects in complex reactors. AIChE J. 51, 1508–1520. doi:10.1002/aic.10407

Zahradník, J., Mann, R., Fialová, M., Vlaev, D., Vlaev, S.D., Lossev, V., Seichter, P., 2001. A networks-of-zones analysis of mixing and mass transfer in three industrial bioreactors. Chem. Eng. Sci., 16th International Conference on Chemical Reactor Engineering 56, 485–492. doi:10.1016/S0009-2509(00)00252-9

Annexes

Annexe A

Tableau 1 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Behin and Aghajari, 2008)

Auteurs	(Behin and Aghajari, 2008)	
Titre	Influence of water level on oil–water separation by residence time distribution curves investigations.	
Système	Structure	Cylindre horizontal
	Dimensions	Longueur : 5,2 m ; Diamètre : 1,2 m
	Phases	Liquide (organique) – Liquide (aqueux)
	Mode	Ouvert – Stationnaire
Procédé	Séparateur huile-eau par décantation	
Objectif	Etude de l'influence du niveau d'eau sur l'efficacité de séparation	
Réactions chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	Radioactif : ^{131}I sous forme de iodure de sodium pour la phase aqueuse et sous forme de iodure de benzène pour la phase organique (DTS)
	MFN	--
	Autres	--
Modèle	L'écoulement de chacune des phases est représenté par une cascade d'une vingtaine de RPA en série échangeant avec des zones stagnantes	

Tableau 2 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Behin and Bahrami, 2012)

Auteurs	(Behin and Bahrami, 2012)	
Titre	Modeling an industrial dissolved air flotation tank used for separating oil from wastewater.	
Système	Structure	Bassin de flottation par air (voir Figure I-6)
	Dimensions	Longueur : 6 m ; Largeur : 2,5 m ; Hauteur : 2m
	Phases	Liquide (eau usée) – gaz (air)
	Mode	Ouvert – Stationnaire
Procédé	Séparateur huile-eau par flottation	
Objectif	Modélisation de l'hydrodynamique et estimation du volume mort	
Réactions chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	Traceur fluorescent (DTS)
	MFN	Fluent 6.3 ; turbulence : modèle $k-\epsilon$; 608032 mailles
	Autres	--
Modèle	Structure composée de 4 réacteurs idéaux (RPA et RP) représentant les grandes tendances du flottateur.	

Tableau 3 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Ben Gaida et al., 2012)

Auteurs	(Ben Gaida et al., 2012)	
Titre	Modelling of hydrodynamic behaviour of a two-stage bioreactor with cell recycling dedicated to intensive microbial production.	
Système	Structure	Bioréacteur continu à deux étages avec recyclage (voir Figure I-8)
	Dimensions	(R1) : 5L ; (R2) : 8L ; filtration : 6,5 L
	Phases	Liquide – Solide (biomasse) – Gaz
	Mode	Hybride : Ouvert et/ou fermé
Procédé	Culture de levure (Saccharomyces cerevisiae) pour la production d'éthanol.	
Objectif	Modéliser l'hydrodynamique des phases liquide et gazeuse	
Réactions Chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	Gaz : oxygène/azote ; Liquide : NaCl/NaOH.
	MFN	--
	Autres	--
Modèle	Modèle simple constitué de RP et RPA dont la structure a été déduite à l'aide de nombreux résultats expérimentaux.	

Tableau 4 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Leon et al., 2014)

Auteurs	(Leon et al., 2014)	
Titre	Residence time distribution and reaction rate in the horizontal rotating foam stirrer reactor.	
Système	Structure	Réacteur horizontal à mousse agité (voir Figure I-10) séparé en plusieurs modules
	Dimensions	Pour un module : Diamètre 20 cm ; Largeur ; 4,5 cm
	Phases	Solide-Liquide-Gaz
	Mode	Ouvert
Procédé	Réacteur d'hydrogénation triphasique (hydrogénation d'alcyne en alcène)	
Objectif	Influence du nombre de modules sur la conversion, la sélectivité et le rendement de la réaction chimique.	
Réactions chimiques	Réaction d'hydrogénation : $A \rightarrow B \rightarrow C$	
Données expérimentales	Traçage	Traceur : encre de stylo « pelican royal blue fountain » ; Détection : spectroscopie (DTS)
	MFN	--
	Autres	Prise en compte de la configuration réelle du réacteur (nombre de modules)
Modèle	2 RPA : un à forte agitation et un à faible agitation	

Tableau 5 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Laurent et al., 2015)

Auteurs	(Laurent et al., 2015)	
Titre	Systemic models of full-scale Surface Flow Treatment Wetlands: Determination by application of fluorescent tracers	
Système	Structure	Trois « surface flow treatment wetlands »
	Dimensions	Tailles réelles
	Phases	Liquide
	Mode	Ouvert – Stationnaire
Procédé	Traitement des eaux usées	
Objectif	Diminuer les effets polluants des effluents	
Réactions chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	Fluoresent (uranime et sulforhodamine)
	MFN	--
	Autres	Utilisation de singularité géométrique des SFTW
Modèle	Maximum 7 réacteurs idéaux	

Tableau 6 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Olander et al., 1995)

Auteurs	(Olander et al., 1995)	
Titre	A study of general ventilation and local exhaust ventilation in industrial premises using residence time distribution theory.	
Système	Structure	Local ventilé
	Dimensions	Longueur : 3,9 m ; Largeur : 2,9 m ; Hauteur : 2,7 m : Volume : 30 m^3
	Phases	Gaz
	Mode	Ouvert
Procédé	Ventilation globale et locale (hotte) d'une pièce	
Objectif	Modéliser l'hydrodynamique de l'air circulant dans le local.	
Réactions chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	Traceur : hélium ; détecteur : spectromètre (DTS)
	MFN	--
	Autres	Visualisation qualitative de la dispersion de fumées
Modèle	Structure représentant les principaux courants de la pièce et permettant de prendre en compte les diverses aspirations, la dispersion et les zones stagnantes	

Tableau 7 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Delafosse et al., 2014)

Auteurs	(Delafosse et al., 2014)	
Titre	CFD-based compartment model for description of mixing in bioreactors.	
Système	Structure	Cuve agitée (chicanes + turbines)
	Dimensions	Diamètre : 0,22 m ; Hauteur : 0,44 m ; Volume : 16,5 L.
	Phases	Liquide
	Mode	Fermé
Procédé	Amélioration de la performance de mélange du réacteur	
Objectif	Etude de l'influence de la manière dont sont calculés les échanges entre compartiments.	
Réactions Chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	Courbes de temps de mélange ; traceur : NaCl ; injection en surface ; détection à l'intérieur du mélange (deux hauteurs différentes).
	MFN	Fluent 6.3 ; turbulence : $k-\epsilon$; $\cong 10^6$ mailles
	Autres	PIV (champs de vitesses)
Modèle	10000 compartiments	

Tableau 8 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Wells and Ray, 2005)

Auteurs	(Wells and Ray, 2005)	
Titre	Methodology for modeling detailed imperfect mixing effects in complex reactors.	
Système	Structure	Réacteurs à polyéthylène à basse densité (voir Figure I-25)
	Dimensions	Volume : 500 L ; ratio longueur/diamètre : 2,5
	Phases	Liquide
	Mode	Ouvert
Procédé	Production de polyéthylène	
Objectif	Développer un modèle capable de prédire la concentration des différentes espèces chimiques de manière locale.	
Réactions chimiques	6 réactions (cinétiques connues)	
Données expérimentales	Traçage	--
	MFN	Fluent 6.0 – 100000 mailles – turbulence : $k-\epsilon$
	Autres	--
Modèle	*100 compartiments (RPA)*	

Tableau 9 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Guha et al., 2006)

Auteurs	(Guha et al., 2006)	
Titre	CFD-based compartmental modeling of single phase stirred-tank reactors.	
Système	Structure	Mélangeur agité (chicanes + turbines)
	Dimensions	Diamètre : 0,2 m ; Hauteur : 0,35 m
	Phases	Liquide
	Mode	Fermé
Procédé	Amélioration de la performance du réacteur par mélange.	
Objectif	Prendre en compte quantitativement le temps caractéristique de réaction pour le dimensionnement des compartiments.	
Réactions chimiques	Premier ordre, second ordre et réactions multiples	
Données expérimentales	Traçage	--
	MFN	Fluent 6.0 ; turbulence : modèle $k-\epsilon$;
	Autres	--
Modèle	350 à 1560 compartiments (RPA) en fonction de la cinétique des réactions.	

Tableau 10 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Gresch et al., 2009)

Auteurs	(Gresch et al., 2009)	
Titre	Compartmental Models for Continuous Flow Reactors Derived from CFD Simulations.	
Système	Structure	Canal
	Dimensions	Volume : 2,2 m^3 ; Débit entrant : 6,0 m^3/h ; temps de séjour moyen : 22 min. (voir Figure I-27)
	Phases	Liquide
	Mode	Ouvert
Procédé	Traitement des eaux usées par réactions biologiques dans un réacteur de type canal (ozonation et oxydation).	
Objectif	Influence de différents ordres de réactions sur la précision du modèle	
Réactions Chimiques	Réactions du premier et second ordres (pas d'information supplémentaire).	
Données expérimentales	Traçage	Traceur fluorescent : uranin (DTS)
	MFN	CFX 11.0 ; turbulence : SST-k-ω ; 600000 mailles
	Autres	--
Modèle	100 compartiments (RPA) pour DTS et jusqu'à 200 compartiments pour la prédiction de concentrations de réactions rapides.	

Tableau 11 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Fichet et al., 2010)

Auteurs	(Fichet et al., 2010)	
Titre	A reactor network model for predicting NOx emissions in gas turbines	
Système	Structure	Turbine à gaz
	Dimensions	16 tubes de 30 cm de diamètre et 70 cm de hauteur
	Phases	gaz
	Mode	stationnaire
Procédé	Centrale électrique au gaz naturel	
Objectif	Influence de l'humidité de l'air et l'entrée en gaz sur les émissions de No_x	
Réactions chimiques	53 espèces et 325 réactions	
Données expérimentales	Traçage	Numérique
	MFN	Code Saturne (235000 mailles) Ecoulement + réaction chimiques
	Autres	--
Modèle	400 compartiments (RPA)	

Tableau 12 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Rigopoulos and Jones, 2003)

Auteurs	(Rigopoulos and Jones, 2003)	
Titre	A hybrid CFD—reaction engineering framework for multiphase reactor modelling: basic concept and application to bubble column reactors.	
Système	Structure	Colonne à bulles
	Dimensions	Diamètre : 0,12 m ; Hauteur : 2,2 m
	Phases	gaz-liquide
	Mode	Ouvert
Procédé	Absorption de CO_2 dans une solution alcaline	
Objectif	Prédiction de la concentration des espèces chimiques et comparaison de l'absorption d'origine chimique et physique.	
Réactions chimiques	Modèle cinétique ; 4 espèces chimiques et 2 réactions.	
Données expérimentales	Traçage	Traçage par MFN
	MFN	CFX 4.3 ; Turbulence : modèle $k-\epsilon$
	Autres	--
Modèle	30 compartiments	

Tableau 13 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Le Moullec et al., 2010)

Auteurs	(Le Moullec et al., 2010)	
Titre	Comparison of systemic, compartmental and CFD modelling approaches: Application to the simulation of a biological reactor of wastewater treatment.	
Système	Structure	Canal
	Dimensions	Longueur : $3{,}6$ mètres ; avec une section rectangulaire de dimensions $0{,}18 \times 0{,}2$ mètres (voir Figure I-32)
	Phases	Liquide (eau + biomasse) – gaz (air)
	Mode	Ouvert
Procédé	Traitement des eaux usagées par réactions biologiques dans un réacteur de type canal artificiellement alimenté en oxygène.	
Objectif	Prédiction de la concentration de différentes espèces chimiques tout le long du canal.	
Réactions chimiques	Modèle cinétique biologique ASM1 ; 12 espèces chimiques et 8 réactions.	
Données expérimentales	Traçage	DTS (pas de détails dans la publication)
	MFN	Fluent ; turbulence : modèle $k - \epsilon$
	Autres	--
Modèle	Structure d'un motif modélisant une tranche de réacteur et se répétant le long du réacteur	

Tableau 14 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Alvarado et al., 2012)

Auteurs	(Alvarado et al., 2012)	
Titre	A compartmental model to describe hydraulics in a full-scale waste stabilization pond.	
Système	Structure	Etang
	Dimensions	Surface : 7 ha ; Profondeur : $1{,}7\ m$; Longueur : $10\ m$; Une entrée et une sortie : diamètre $0{,}9\ m$
	Phases	Liquide (eau)
	Mode	Ouvert
Procédé	Traitement des eaux usées par réactions biologiques dans un étang.	
Objectif	Modélisation de l'hydrodynamique de l'étang	
Réactions chimiques	Modèle cinétique biologique ASM1 (non pris en compte pour la construction du modèle)	
Données expérimentales	Traçage	Traceur coloré (rhodamine) détecté par fluorescence (DTS)
	MFN	Fluent 6.3 ; turbulence : modèle $k - \epsilon$; 75000 mailles
	Autres	--
Modèle	Réseau de 25 compartiments (RPA) construit par une analyse qualitative de l'écoulement.	

Tableau 15 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Bezzo and Macchietto, 2004)

Auteurs	(Bezzo and Macchietto, 2004)	
Titre	A general methodology for hybrid multizonal/CFD models: Part II. Automatic zoning.	
Système	Structure	Boite rectangulaire (voir Figure I-36)
	Dimensions	Longueur : 10 m ; Largeur : 2 m ; hauteur : 10 m
	Phases	Liquide (eau)
	Mode	Ouvert
Procédé	Mélange	
Objectif	Application de la méthode développée sur un exemple simple.	
Réactions chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	DTS numérique
	MFN	Fluent 4.5 ; 25000 mailles
	Autres	--
Modèle	Environ 100 compartiments (RPA)	

Tableau 16 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Delafosse et al., 2010)

Auteurs	(Delafosse et al., 2010)	
Titre	Development of a compartment model based on CFD simulations for description of mixing in bioreactors.	
Système	Structure	Mélangeur agité (chicanes + turbines)
	Dimensions	Diamètre : 0,22 m ; Hauteur : 0,44 m ; Volume : 16,5 L.
	Phases	Liquide (eau)
	Mode	Fermé
Procédé	Amélioration de la performance de mélange du réacteur	
Objectif	Etude de l'influence de différentes méthodes d'agglomération sur le temps de mélange.	
Réactions chimiques	--	
Données expérimentales	Traçage	--
	MFN	Fluent 6.3 ; turbulence : $k-\epsilon$; 800000 mailles
	Autres	--
Modèle	4300 compartiments	

Tableau 17 : Résumé des informations techniques relatives aux travaux de (Nauha and Alopaeus, 2013)

Auteurs	(Nauha and Alopaeus, 2013)	
Titre	Modeling method for combining fluid dynamics and algal growth in a bubble column photobioreactor.	
Système	Structure	Colonne à bulles
	Dimensions	Diamètre : 0.08 m ; Hauteur liquide : 0.378 m ; Volume : 1,9 L
	Phases	Gaz-liquide
	Mode	Ouvert
Procédé	Culture d'algues	
Objectif	Influence de la disponibilité en lumière sur la croissance des algues	
Réactions chimiques	Cinétique de croissance des algues	
Données expérimentales	Traçage	--
	MFN	Fluent 12.1 ; Turbulence : modèle $k-\epsilon$; 190000 mailles ; régime transitoire
	Autres	--
Modèle	Inférieur à 100 compartiments	

Annexe B

Tableau 18 : Valeurs de Γ pour le découpage en $N_L = 4$ tranches dans le plan vertical (plan Oxz) passant au milieu de l'entrée (voir Figure III-19 en haut).

Γ	N_1	N_2	N_3	N_4
h_1	0,6	0,8	1	1
h_2	1	1	1	0,9

Tableau 19 : Valeurs de Γ pour le découpage en $N_L = 7$ tranches dans le plan vertical (plan Oxz) passant au milieu de l'entrée (voir Figure III-19 au milieu).

Γ	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7
h_1	0,6	0,5	0,8	0,95	1	1	1
h_2	1	1	1	1	1	1	0,7

Tableau 20 : Valeurs de Γ pour le découpage en $N_L = 14$ tranches dans le plan vertical (plan Oxz) passant au milieu de l'entrée (voir Figure III-19 en bas).

Γ	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7
h_1	0,8	0,7	0,5	0,7	0,8	0,9	0,95
h_2	1	1	1	1	1	1	1

Γ	N_8	N_9	N_{10}	N_{11}	N_{12}	N_{13}	N_{14}
h_1	1	1	1	1	1	1	1
h_2	1	1	1	1	1	1	0,5

Tableau 21 : Valeurs de Γ pour le découpage en $N_L = 4$ tranches dans le plan de la surface libre (plan Oxy) (voir Figure III-20 en haut).

Γ	N_1	N_2	N_3	N_4
l_1	1	1	1	0,95
l_2	1	1	1	0,8
l_3	1	1	1	0,8
l_4	1	1	1	0,8
l_5	1	0,95	0,6	0,95
l_6	1	1	1	1
l_7	0,9	0,7	1	0,9

Tableau 22 : Valeurs de Γ pour le découpage en $N_L = 7$ tranches dans le plan de la surface libre (plan Oxy) (voir Figure III-20 au milieu).

Γ	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7
l_1	1	1	1	1	1	1	0,9
l_2	1	1	1	1	1	1	0,65
l_3	1	1	1	1	1	1	0,6
l_4	1	1	1	1	1	1	0,6
l_5	1	1	1	0,6	0,8	0,9	0,95
l_6	1	1	1	1	1	1	1
l_7	1	0,8	0,6	1	1	1	0,7

Tableau 23 : Valeurs de Γ pour le découpage en $N_L = 14$ tranches dans le plan de la surface libre (plan Oxy) (voir Figure III-20 en bas).

Γ	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7
l_1	1	1	1	1	1	1	1
l_2	1	1	1	1	1	1	1
l_3	1	1	1	1	1	1	1
l_4	1	1	1	1	1	1	1
l_5	1	1	1	1	1	1	0,9
l_6	1	1	1	1	1	1	1
l_7	1	1	0,95	0,8	0,5	0,8	1

Γ	N_8	N_9	N_{10}	N_{11}	N_{12}	N_{13}	N_{14}
l_1	1	1	1	1	1	1	0,9
l_2	1	1	1	1	1	1	0,8
l_3	1	1	1	1	1	1	0,9
l_4	1	1	1	1	1	1	0,9
l_5	0,7	0,6	0,8	0,9	0,9	0,9	0,95
l_6	1	1	1	1	1	1	1
l_7	1	1	1	1	1	0,95	0,8

Développement d'une méthodologie de la « modélisation compartimentale » des systèmes en écoulement avec ou sans réaction chimique à partir d'expériences de traçage et de simulations de mécanique des fluides numérique

Résumé :

Cette thèse traite de la modélisation des réacteurs chimiques par la « modélisation compartimentale », qui consiste à diviser le système en un réseau d'une dizaine à quelques centaines de volumes interconnectés, appelés compartiments. La structure du réseau est déduite à partir d'informations provenant d'expériences de traçage, d'informations techniques sur le réacteur chimique, de simulations de mécanique des fluides numérique et des objectifs de la modélisation. Cette méthode procure un bon compromis entre temps de calcul et finesse des résultats. Quand ils sont correctement menés, les modèles à compartiments donnent des prédictions similaires, en termes de réactions chimiques, à ceux issus des simulations de mécanique des fluides numérique réactive avec un temps de calcul plus court et une représentation physique plus concrète du comportement du réacteur. Chaque étude issue de la littérature est consacrée à un réacteur spécifique avec une approche particulière qui ne peut pas être directement transposée sur un autre réacteur. L'objectif de cette thèse est d'apporter une contribution au développement d'une méthodologie la plus générale possible et de développer un outil de génération automatique et de résolution du système d'équations différentielles qui doit être résolu. Dans le premier chapitre, un état de l'art est réalisé, définissant le champ d'application de notre méthode, dans le but d'identifier les méthodes de découpage les plus pertinentes et les différentes méthodes pour calculer les échanges entre les compartiments. Dans un second chapitre, une méthode générale pour de la modélisation compartimentale est développée. Une approche polyvalente est proposée, consistant à découper le réacteur en tranches identiques. Le calcul des échanges entre compartiments, dus à la convection et la turbulence, est présenté en détail, avec la description des trois méthodes de calcul des échanges turbulents. Une interface a été développée permettant de construire n'importe quel réseau de compartiments. A partir de cette interface, les équations sont écrites et automatiquement résolues. La méthode est appliquée dans un troisième chapitre sur un cas défavorable au découpage en tranches. Cela a permis de tester les limites de cette approche. En particulier, deux points ont été étudiés : (1) l'applicabilité du découpage en tranches identiques et (2) la comparaison entre les méthodes de calcul des échanges turbulents. Le premier test a prouvé la robustesse de l'approche par division mais le second test n'a pas permis d'établir si une méthode de calcul est meilleure qu'une autre. Finalement, la méthode a été valorisée et transférée en implémentant les algorithmes développés dans un logiciel commercial. Ce logiciel permet de simuler la dispersion d'espèces réactives et non réactives (traceurs), dans un modèle contenant plusieurs centaines de compartiments organisés en tranches identiques.

Mots clés : modélisation compartimentale, expérience de traçage, mécanique des fluides numérique, système en écoulement

Development of "compartmental modelling" methodology of flowing systems with or without chemical reaction using tracing experiments and computational fluids dynamics simulations.

Abstract:

This PhD deals with modelling of chemical reactors with the "compartmental modelling" approach, which consists in dividing the system into a network from a dozen to several hundreds of interconnected volumes, called compartments. The structure of the network is deduced from tracer experiments, technical information about the chemical reactor and computational fluid dynamics flow simulations. This method provides a good compromise between computation time and results accuracy. When they are properly set-up, compartmental models give similar predictions, in terms of chemical reactions, as those of CFD simulations with a shorter calculation time and a more concrete representation of the reactor behavior. Every study from the literature is devoted to a specific reactor with a particular approach that cannot be straightforwardly transposed to other reactors. The aim of this PhD is to provide a contribution to the development of the most general possible methodology and to develop an automatic tool of generation and resolution of the differential equations system which must be solved. In the first chapter, a state of the art is proposed, defining the field of application of our method, in order to identify the most relevant division methods and the different methods to calculate the exchange between compartments. In the second chapter, a general methodology for compartmental modelling is developed. A versatile approach is proposed, consisting in dividing the reactor in identical slices. The calculation of exchange between compartments, both due to convection and turbulence, is presented in detail, with the description of three calculation methods for turbulent exchange. An interface has been developed, allowing to build any network of compartments. From this interface, the equations are written and solved automatically. The methodology is applied in the third chapter to an unfavorable case for slice cutting. This has allowed to test the limit of this approach. In particular, two points have been studied: (1) the applicability of division into identical slices and (2) the comparison between the turbulent exchange calculation methods. The first test has proved the robustness of the division approach but the second test has not allowed to establish whether one calculation method is better than another. Finally, the methodology has been promoted and transferred by implementing the developed algorithms within a commercial software. This software allows to simulate the dispersion of reactive and non-reactive (tracers) species, in model containing hundreds of compartments organized in identical slices

Key words: compartmental modelling, tracing experiment, computational fluids dynamics, flowing systems