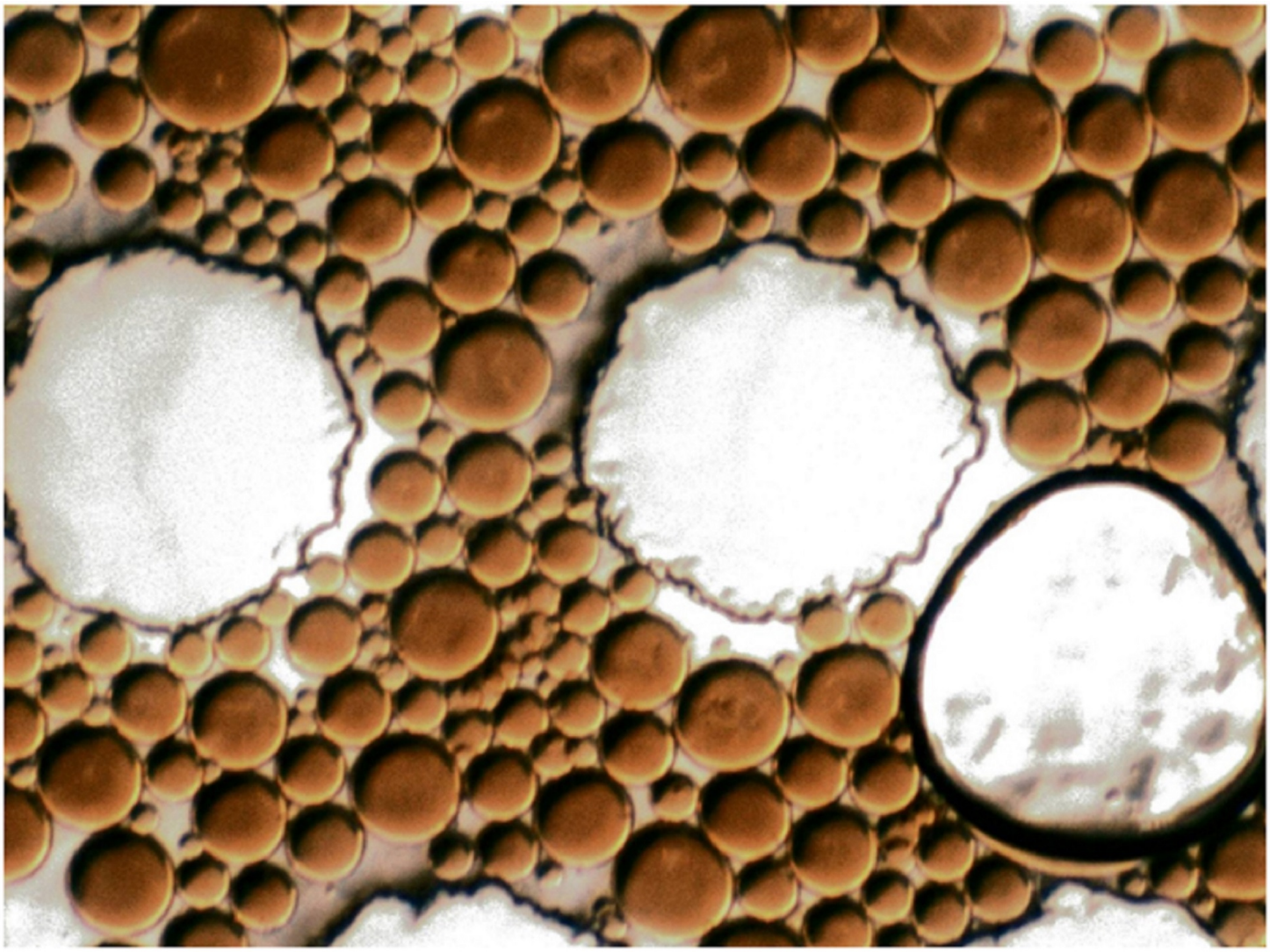


Rédigé le 12 octobre 2023

10 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Géologie - Sédimentologie

Géostatistique - Modélisation géologique

Pétrophysique et transferts en milieux poreux

Génie chimique et génie des procédés

Les milieux poreux interviennent dans de nombreux **domaines technologiques et industriels à fort enjeu d'avenir** : stockage de l'énergie, anti-pollution, traitement de l'eau, énergies renouvelables, biocarburants, agroalimentaire et santé.

Pour étudier ces milieux, de nombreuses disciplines scientifiques doivent être mises à contribution, parmi lesquelles **la mécanique des fluides numérique**, **les géosciences** ou encore **le génie des procédés**.

A l'occasion des **16e journées d'études des milieux poreux** (JEMP 2023), qui se déroulent du 17 au 19 octobre 2023 à IFPEN, quatre actualités scientifiques montrent, à travers des exemples significatifs, la variété des domaines d'application des milieux poreux et la diversité des approches qui sont déployées par nos chercheurs pour les étudier.

LES BRÈVES

La modélisation des réservoirs souterrains est incontournable pour beaucoup d'applications : gestion des aquifères, stockage de composés ou d'énergie dans le sous-sol, récupération de ressources minérales ou énergétiques comme en géothermie. La modélisation permet de mettre en place une gestion optimale de la ressource tout en minimisant les risques sociétaux et environnementaux. Pour être efficace, cette modélisation doit néanmoins être multi-échelle, aussi les recherches des équipes d'IFPEN sont-elles guidées par cette contrainte.

Modélisation multi-échelle en géosciences

Il est aisé de comprendre la structure multi-échelle des systèmes considérés, par exemple par l'observation d'un affleurement du sous-sol, puis d'extrapoler par la pensée la structure souterraine sous-jacente. L'observation ainsi que des forages et l'analyse géologique/géophysique détaillée confirment l'existence de **structures emboîtées dont les échelles varient de l'échelle du pore, typiquement du µm, aux échelles plurikilométriques**. Les géologues, géophysiciens et les pétrophysiciens sont capables de fournir des outils de description pertinents à chacune des échelles considérées, mais ceux-ci restent non exhaustifs.

Les spécialistes en géosciences d'IFPEN doivent ainsi idéalement construire des modèles capables de reproduire cette complexité, incorporant les données observées aux différentes échelles, tout en prenant en compte le caractère incomplet des données.

Par ailleurs, ces chercheurs sont vite confrontés avec des modèles qui comptent des dizaines de paramètres d'entrée[1]. Or il est impossible d'explorer de façon détaillée un espace de grande dimension avec les outils de calcul actuels ou futurs qui sont très rapidement confrontés au **« mur de la dimension »**. C'est ce « mur » qui justifie les approches de type « plans expérience/réduction de modèles » ou le recours à l'intelligence artificielle, lesquels permettent une réduction drastique du coût de calcul, mais reposent finalement sur une base d'apprentissage fort réduite : au mieux quelques milliers de simulations de référence pour explorer **un espace possédant des milliers de dimensions**.

Un compromis est donc à trouver entre ces approches de réduction de modèle, et la nécessité de garder une bonne cohérence physique.

[1] positions des limites, épaisseurs de couches, porosités, position et trajectoires des puits, débits d'injection ou de production de fluides etc…

Méthodologie du changement d'échelle

Historiquement, l'idée du **changement d'échelle** précède les approches déjà évoquées tout en les complétant. Il s'agit de réduire à la fois la valeur du coût unitaire et du nombre de degrés de libertés décrivant la dimension cumulée des paramètres[2]. Pour ce faire, la description du modèle géologique est agrégée en regroupant les paramètres afin de construire un modèle réduit suffisant pour explorer de façon fiable les configurations d'intérêt. Cette démarche se justifie par l'idée que l'intérêt porte essentiellement sur des valeurs moyennes (volumes de fluides, teneurs en minerais, etc.) évaluées

sur le volume de la formation considérée. Ceci permet d'obtenir **un effet de moyenne** analogue à une loi des grands nombres lissant les détails des cas considérés.

[2] paramètres qualifiés de contrôlables car raisonnablement connus, voire choisis (position de puits, débits de soutirage) ou dits «incontrôlables » car imposés par la nature, et donc connus avec une certaine incertitude.

Travaux réalisés

L'approche adoptée a consisté à traiter un problème d'écoulement modèle en milieu poreux en combinant **une mise à l'échelle déterministe** avec **une approche stochastique**. Ceci a consisté à analyser des résultats de simulations en tirant au hasard plusieurs réalisations possibles d'une «réalité géologique» représentée sous forme d'**une carte de perméabilité aléatoire** à l'aide de structures générées artificiellement.

Ce travail a été rapporté dans les articles cités en référence, dont voici quelques éléments principaux :

La figure 1 illustre la géométrie typique de la simulation d'un problème d'écoulement en milieu poreux. La géométrie réelle est « maillée » par une grille fine incorporant les détails de la forme des frontières et des discontinuités du domaine, et chaque maille est décrite par un jeu de paramètres issus de données géologiques (porosité, perméabilité…). Une échelle intermédiaire de calcul est ensuite utilisée pour obtenir des résultats fiables, c'est-à-dire sans dégradation importante de la qualité de la représentation des discontinuités ni de celle des données géologiques. La détermination de ce **compromis optimal qualité-coût de calcul** peut se faire en déterminant des échelles spatiales caractéristiques des solutions du problème simplifié.

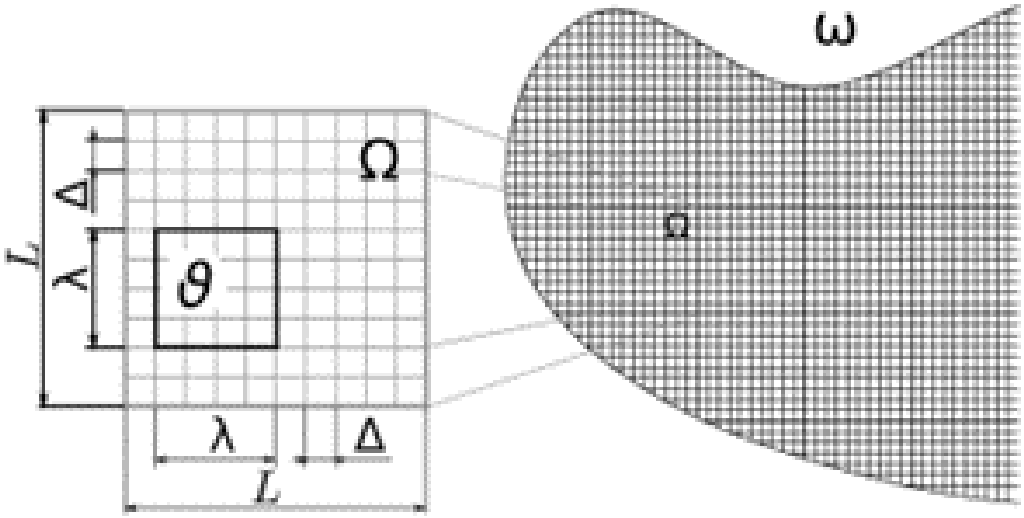


Figure 1 : le modèle fin est simplifié en agrégeant les mailles fines de taille D en mailles de taille lambda>D . Pour garder le contrôle, la simulation est réalisée sur des sous volumes W et en faisant varier lambda l'évolution de la distribution des conductivités peut être quantifiée en fonction de l'échelle de prise de moyenne. Cela permet d'identifier des comportements à grande échelle : percolant, non percolant, homogénéisable ou non etc...

La figure 2 illustre les résultats de post-traitements obtenus par une résolution rapide de l'écoulement sur un milieu aléatoire. Les histogrammes des distributions de perméabilité obtenues par post traitement de la solution à différentes échelles sont fournis sur la figure de droite. La convergence des distributions vers la gaussienne illustre le rôle de la taille du volume élémentaire représentatif. On peut noter que la convergence vers une distribution limite est plus lente lorsqu'on prend en compte une distribution de perméabilité bimodale. Au seuil de connectivité (percolation) le caractère bimodal subsiste à grande échelle et la convergence vers « l'homogène équivalent » devient très lente, car le milieu n'est quasiment plus homogénéisable.

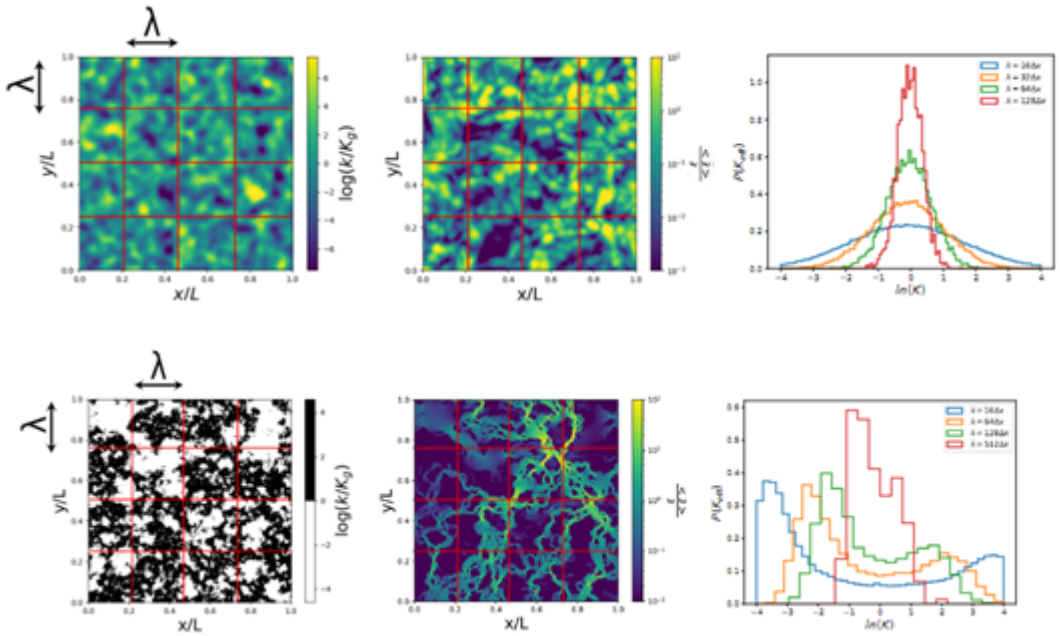


Figure 2 : Selon la valeur de l'échelle lambda, on observe pour une distribution continue (figure du haut) ou discrète (figure du bas) les cartes de dissipation locales qui, convenablement traitées, peuvent donner accès aux distributions des conductivités hydrauliques en un seul calcul. Le phénomène de localisation de l'écoulement est bien visible et peut expliquer parfois les limitations des approches de type plan d'expérience qui négligent ce phénomène.

La figure 3 présente l'évolution de la variance de la perméabilité (en Log) en fonction de la distance au seuil de percolation, pour diverses techniques de génération d'images discrètes (bas de la figure 2). Le regroupement des courbes peut permettre d'anticiper rapidement sur un cas précis le régime d'écoulement macroscopique dans lequel se trouve le cas étudié, et les échelles pertinentes d'un problème.

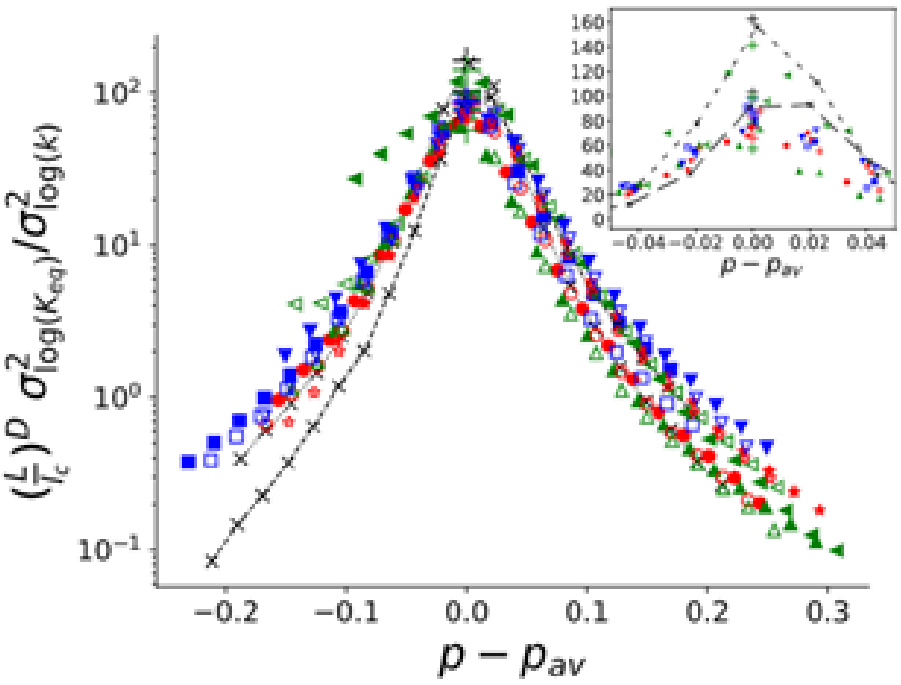


Figure 3 : Variance renormalisée par le nombre de volumes corrélés et normalisée par la variance petite échelle, en fonction de la distance au seuil de percolation. L'émergence d'une courbe « universelle » peut être observée (les couleurs représentent des milieux hétérogènes « fabriqués » de manière différente). Cette courbe peut être utilisée pour anticiper avec un minimum de calcul le comportement grande échelle du cas considéré, et aider à mettre en place une stratégie de plan d'expérience basée sur la physique.

Les résultats de ce travail permettent de mieux comprendre **le processus de mise à l'échelle à l'aide** d'une **utilisation parcimonieuse** (post traitement) **des résultats de simulation**. En utilisant cette méthode, il devient possible de trouver en cours de calcul les échelles pertinentes et les agrégats de paramètres contrôlant les résultats finaux d'intérêt pour les applications. Des approches de ce type seront tout particulièrement mises à profit dans le projet ERC Karst.

Références:

[1] Colecchio, I., Boschan, A., Otero, A. D., & Noetinger, B. (2020). On the multiscale characterization of effective hydraulic conductivity in random heterogeneous media: a historical survey and some new perspectives. Advances in Water Resources, 140, 103594, https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2020.103594.
[2] Noetinger, B. (2020). Statistical physics and applied geosciences: some results and perspectives. Comptes Rendus. Physique, 21(6), 539-560, DOI:10.5802/crphys.40.
[3] Colecchio, I., Otero, A. D., Noetinger, B., & Boschan, A. (2021). Equivalent hydraulic conductivity, connectivity and percolation in 2D and 3D random binary media. Advances in Water Resources, 158, 104040, https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2021.104040.

Contact scientifique : B. Noetinger

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale

Actualités octobre 2022

Projet de recherche KARST : IFPEN lauréat d'une bourse ERC Synergy Grant

Communiqués de presse

Gestion durable de l'eau



Recherche fondamentale

Actualités mai 2023

Aquifères karstiques : coup d’envoi à IFPEN d’un projet de recherche en hydrogéologie

Gestion durable de l'eau

Géosciences | Géologie - Sédimentologie | Analyse structurale et imagerie



Recherche fondamentale

Actualités octobre 2019

Prix Adrien Constantin de Magny décerné à Benoît Noetinger

Géosciences

Transfert dans les milieux poreux du sous-sol : pour une modélisation multi-échelle

Le transport de polluants dans les sols est directement tributaire de l'hétérogénéité du milieu présent (topologie, structure, etc.), lequel est par ailleurs fortement impacté par certaines activités humaines comme l'agriculture, l'activité industrielle ou encore les mines. La description précise de ce phénomène, à toutes les échelles de temps, peut ainsi paraître complexe. Cependant elle est importante pour répondre à des enjeux majeurs, comme le traitement efficace des eaux usées, ou l'accès du plus grand nombre à de l'eau potable de bonne qualité. Dans ce contexte, les chercheurs IFPEN ont travaillé sur des méthodes pour mieux comprendre comment les polluants sont transportés dans le sous-sol.

Un transport de polluants impacté par l'hétérogénéité du milieu

Les régimes de transport de polluants (transitoire et asymptotique), ainsi que le temps mis pour atteindre un endroit critique (par exemple un aquifère ou un puits) dépendent fortement de **l'hétérogénéité sous-jacente du champ de perméabilité**. De plus, dans le cas de la rétention de polluants, le transport est également caractérisé par une cinétique d'échange qui dépend des propriétés locales du sol. C'est pourquoi les temps de rétention sont eux aussi spatialement hétérogènes.

Deux approches pour la modélisation du transport de solutés

Dans ce travail, les chercheurs IFPEN se sont intéressés à l'influence d'une perméabilité et de temps de rétention hétérogènes sur les régimes transitoire et asymptotique de transport d'espèces. En effet, le transport en régime transitoire ne peut pas être décrit par une équation de transport classique (Equation Advection-Diffusion). Cette équation devient valable seulement dans le régime asymptotique.

Dans une première partie, les chercheurs ont simulé ce transport dans **un milieu poreux hétérogène bidimensionnel**. Un modèle Mobile-Immobile[1] a été utilisé pour décrire l'impact sur le transfert global des solutés du transfert de masse entre les parties mobiles et immobiles du milieu. Ce problème a été résolu en utilisant une méthode de Lattice Boltzmann sur réseau[2] [1].

[1] Ce modèle se distingue du modèle de transport classique par le fait qu'il sépare dans la même maille de simulation la région fluide en régions **mobile** (écoulement et diffusion) et **immobile** (stagnante) avec un transfert entre la partie mobile et la partie immobile. Ce transfert suit une équation cinétique d'ordre 1.
[2] Méthode numérique permettant de résoudre l'équation de Navier-Stokes et l'équation d'advection-diffusion à l'aide d'un schéma de collision-propagation.

Dans une seconde partie, **un nouveau modèle de marche aléatoire unidimensionnel** (continuous time random walk, CTRW) a été mis en œuvre par les chercheurs pour déterminer ces comportements de transport à grande échelle. Le modèle est basé sur **un modèle de Markov spatial [3] pour les vitesses des particules**, lequel couple le transport advectif-dispersif et le transfert de masse hétérogène par un processus de Poisson[4]. Ce modèle, qui se situe à une échelle spatiale et temporelle supérieure, peut être entièrement paramétré par les statistiques de perméabilité et d'écoulement (sans paramètre d'ajustement) et permet de réaliser des simulations numériques plus longues pour atteindre les régimes asymptotiques.

[3] Processus stochastique décrivant le passage d'un état à un autre.
[4] Processus stochastique qui permet de décrire des événements aléatoires avec une certaine probabilité dans le temps.

Sous l'hypothèse d'une relation non-linéaire entre la perméabilité locale K et le temps d'échange local ?, les chercheurs ont étudié l'impact du nombre de Damköhler (Da, rapport des échelles de temps d'advection et de rétention) sur l'évolution spatiale du champ de concentration en solutés.

La Fig. 1 montre des champs de concentration pour différentes valeurs de Da [2]. Les deux champs de concentration mobile sont très similaires, alors que des différences importantes peuvent être observées dans les champs de concentration immobile. Dans le cas d'un Da faible, il y a un plus grand nombre de régions appauvries (bleu foncé) au niveau du front. Par ailleurs, d'autres régions de concentration plus élevée peuvent encore être observées loin derrière le front. Ces deux effets résultent de l'hétérogénéité dans le temps de rétention et ces régions correspondent en effet à des grandes valeurs de ce paramètre.

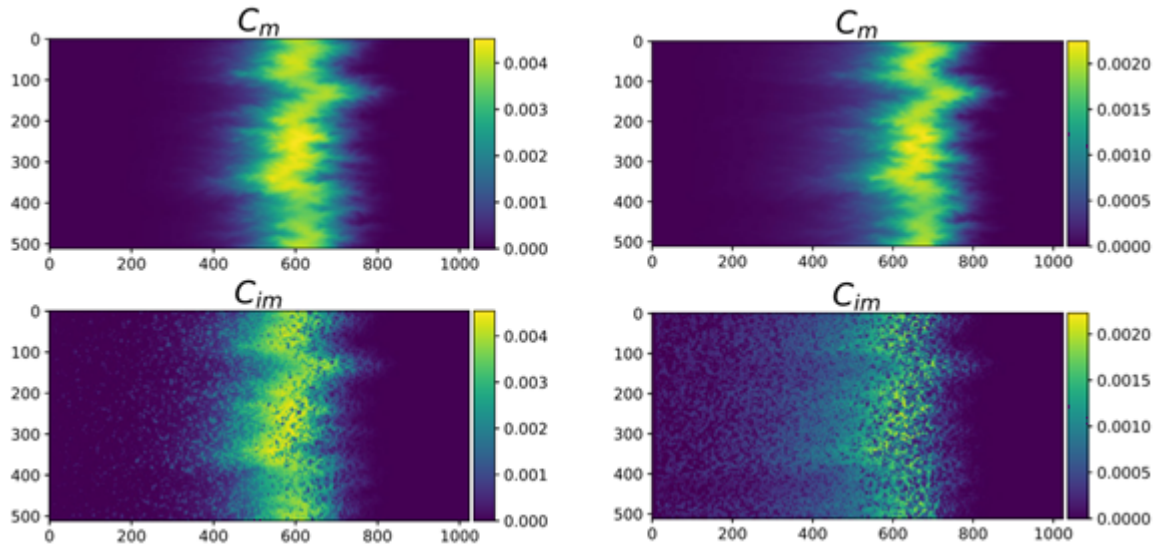


Figure 1: champs de concentration pour Da=1/8 (gauche) et Da=1/40 (droite). Cm représente la concentration dans la zone mobile et Ci la concentration dans la zone immobile

Grâce aux simulations numériques CTRW, les chercheurs ont également montré que le temps nécessaire pour atteindre les régimes asymptotiques dans les milieux hétérogènes est en moyenne deux ordres de grandeur plus élevé que pour le cas d'un milieu poreux homogène.

Une forte variabilité du temps de rétention des polluants

En conclusion, les chercheurs ont montré, à partir de simulations numériques, que **des concentrations de polluants peuvent parfois rester sur des temps très longs dans le sol**. Ceci s'explique par l'existence des zones stagnantes (régions bleues, Fig .1) dotées d'une haute valeur de temps de rétention. Ces zones stockent et libèrent des polluants sur des durées très longues.

De plus, les simulations CTRW ont montré que **les régimes de transport transitoire peuvent être importants,** mais leur description correcte nécessite des modèles plus élaborés. Finalement, les résultats permettent d'expliquer potentiellement les comportements spécifiques observés expérimentalement et qui ne peuvent pas être modélisés par une équation de transport classique.

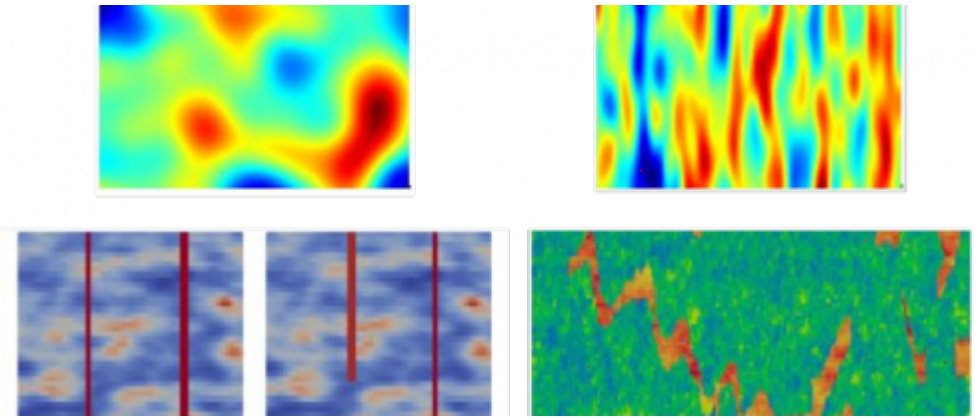
Pour une prise en compte de milieux plus complexes

Pour faire suite à cette étude, une tâche difficile et ambitieuse reste à entreprendre : simuler le transport des polluants dans des structures plus complexes, notamment anisotropes ou stratifiées, afin de rendre compte de la grande hétérogénéité des milieux géologiques.

[1] Talon L., Martin J., Rakotomalala N., Salin D. and Yortsos Y., 2003, Lattice BGK simulations of macrodispersion in heterogeneous porous media, Water Resources Research. https://doi.org/10.1029/2002WR001392
[2] Talon, L., Ollivier-Triquet, E., Dentz, M., Bauer, D., 2023. Transient dispersion regimes in heterogeneous porous media: On the impact of spatial heterogeneity in permeability and exchange kinetics in mobile–immobile transport. Advances in Water Ressources. https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2023.104425

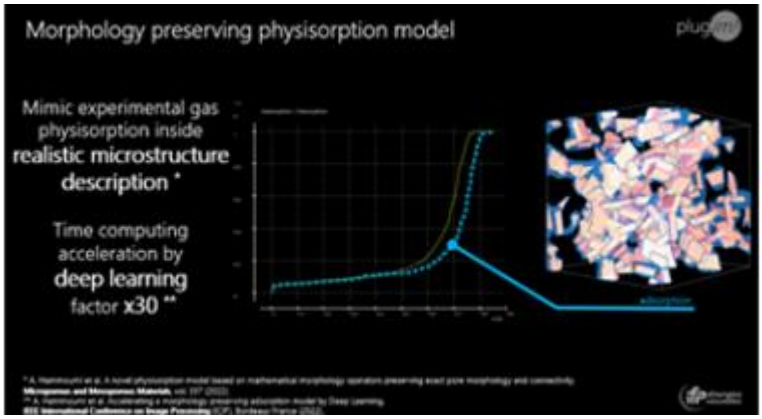
Contact scientifique : daniela.bauer@ifpen.fr

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Modèle adaptatif pour la simulation d'écoulements en milieux poreux hétérogènes

Le calcul des écoulements d’eau et de gaz dans les milieux rocheux complexes et hétérogènes est au cœur des solutions technologiques en lien avec les enjeux climatiques et énergétiques actuels, ...



VS4 - Nouvelle voie numérique pour la caractérisation de matériaux poreux virtuels

A l'intérieur des matériaux poreux, les phénomènes physico-chimiques tels que le transport de matière, les réactions catalytiques et les effets capillaires sont fortement influencés par la géométrie des réseaux de pores, c’est-à-dire le degré de porosité, la distribution de taille des pores et leur connectivité. (....) IFPEN et Saint Gobain Research Provence ont choisi d’appréhender ce problème de manière différente, en explorant une nouvelle voie numérique...

Techniques de séparation et adsorption | **Méthodes numériques et optimisation** | **Traitement du signal / Science des données**



Recherche fondamentale

Actualités janvier 2023

Modèle à double porosité et double fracture pour la simulation de réservoirs géothermiques fracturés

Géothermie

Pétrophysique et transferts en milieux poreux | Physique du transfert et du transport | Méthodes numériques et optimisation

Mieux comprendre le transport des polluants dans les sous-sols

Les réacteurs d'expérimentation à haut débit (EHD) sont de plus en plus utilisés en génie chimique pour le criblage des catalyseurs. La réduction de la taille de ces réacteurs catalytiques à lit fixe présente de nombreux avantages, avec moins de catalyseur et de réactifs utilisés, un meilleur contrôle de la température, des risques de sécurité minimisés et une quantité de déchets réduite. En outre, ces réacteurs peuvent facilement être mis en œuvre en parallèle (généralement 16 réacteurs, voire plus). Malgré ces nombreux avantages, le comportement de ces réacteurs varie beaucoup en fonction de certains paramètres (comme le rapport entre le diamètre des réacteurs et celui des particules) et il est important de bien comprendre ce type de dépendances pour garantir un fonctionnement optimal des procédés catalytiques. Un travail de thèse a permis de définir une chaîne de calcul capable de rendre compte du comportement de ces catalyseurs.

Une hydrodynamique régie par des chemins préférentiels

Le **très petit rapport ? entre le diamètre des réacteurs EHD et celui des particules** rend **problématique l'extrapolation des résultats à des échelles plus grandes**. Dans les lits catalytiques de ces réacteurs millimétriques, la disposition des particules s'effectue de manière non aléatoire, ce qui conduit à **des distributions radiales non uniformes** et à **des fractions de vide plus élevées**. Les chemins préférentiels sont prépondérants et régissent l'hydrodynamique. Le comportement axial de l'écoulement dans le réacteur est modélisé par une équation convection-dispersion 1D. Pour celle-ci, le coefficient de dispersion par rapport à un écoulement de type piston peut être introduit comme un nombre de Peclet[1] axial.

[1] Nombre comparant les forces convectives aux forces diffusives

Une approche basée sur la modélisation

Dans le cadre d'un travail de thèse [1], **une approche totalement numérique** a été déployée pour étudier le cas d'**écoulements monophasés dans des lits fixes de particules sphériques** ayant de faibles rapports de diamètre réacteur-sphère (? < 4). L'empilement des particules a été calculé au moyen de l'outil interne DEM Grains3D et la bibliothèque OpenFOAM a été utilisée[2] pour calculer les écoulements et déduire un nombre de Peclet local à partir des moments des âges[3].

[2] En utilisant le solveur stationnaire simpleFoam, augmenté par la résolution des équations du moment des âges jusqu'au deuxième ordre (Voir Liu et Tilton, AIChE J. 56, 2010)
[3] C'est-à-dire à partir des temps de séjour des particules fluides (premier moment), et de leur variance (second moment)

De possibles impacts sur les performances du procédé

La figure 1 illustre un résultat important de ce travail, à savoir **une diminution du nombre de Peclet pour certaines valeurs de la gamme des faibles rapports ?**, avec **de possibles conséquences sur le taux de conversion du procédé catalytique** [3]. Ceci s'explique par la formation d'arrangements ordonnés des particules, conduisant à des passages préférentiels pour le fluide et donc à un moindre temps de contact entre le fluide et le catalyseur.

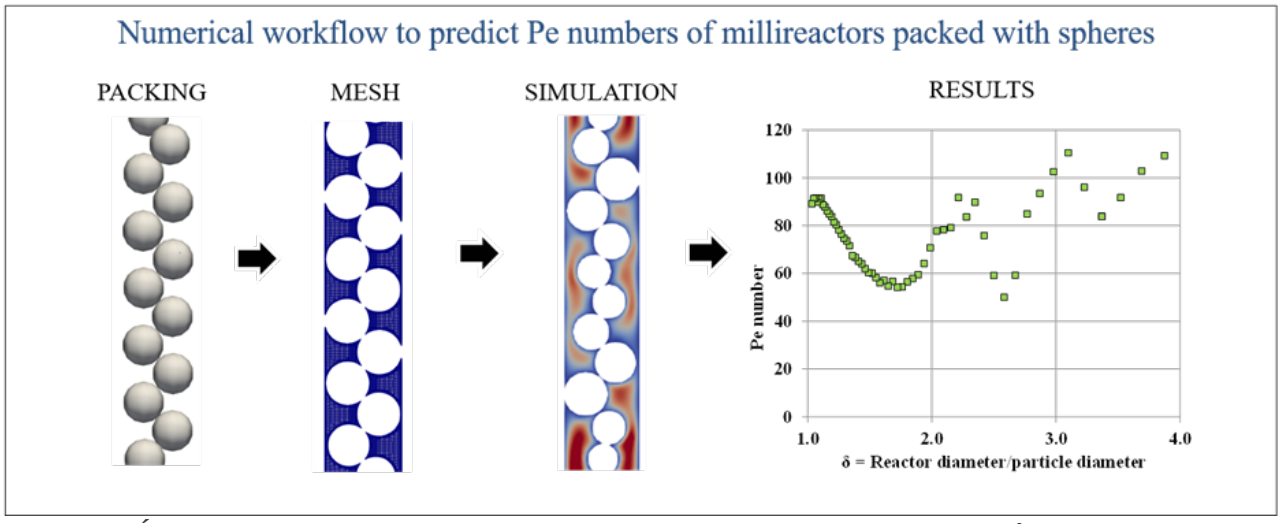


Figure 1: Évolution du nombre de Peclet en fonction du rapport de diamètre entre le réacteur et les particules.

Des résultats de simulation fidèles à la réalité

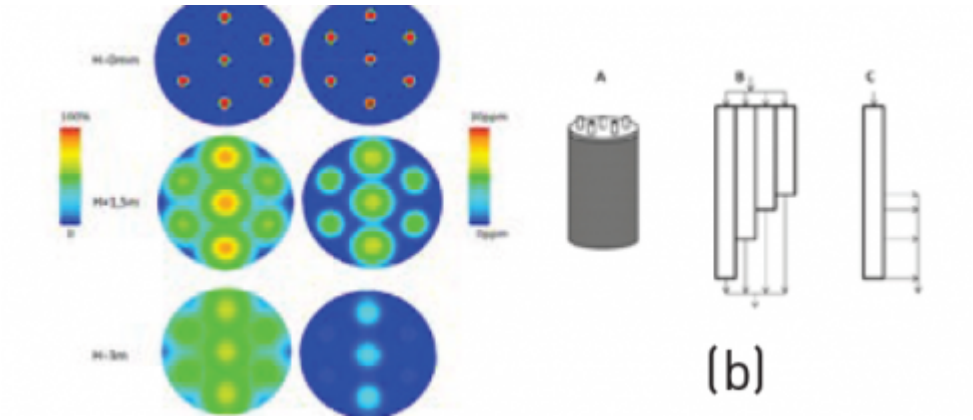
De plus, les résultats obtenus grâce à la chaîne de calcul mise en place se comparent de manière très satisfaisante aux bases de données expérimentales [2], en particulier lorsque la diffusion moléculaire ou la vitesse superficielle varient. La même chaîne de calcul pourrait être employée facilement pour d'autres formes de catalyseurs.

Références:

[1] V. Petrazzuoli, Impact of packing and porosity filter use in G/S and G/L/S packed bed millireactors:experimental and numerical studies, Thèse de doctorat de l'université de Lyon, soutenue le 02/12/2020.
[2] V. Petrazzuoli, M. Rolland, V.Sassanis, V. Ngu, Y. Schuurman, L. Gamet, Numerical prediction of Péclet number in small-sized fixed bed reactors of spheres, Chemical Eng.ineering Science, 240, 2021.
[3] V. Petrazzuoli, M. Rolland, A. Mekki-Berrada, O Said-Aizpuru, Y. Schuurman, Choosing the right packing in millipacked bed reactors under single phase gas flow, Chemical Eng.ineering Science, 231, 2021.

Contact scientifique : lionel.gamet@ifpen.fr

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Pour simuler les réacteurs, l’hydrodynamique ça compte !

L’amélioration des procédés chimiques passe régulièrement par l’introduction de nouvelles géométries d’internes dans les réacteurs.

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Sciences de l'ingénieur | Mécanique des fluides | Génie chimique et génie des procédés | Modélisation et simulation des systèmes



L’EHD en milli lit fixe « booste » le développement des catalyseurs slurry

THÈSE DE CHARLES BONNIN

Hydrocarbures responsables | Carburants | Pétrochimie

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Analyse et caractérisation | Expérimentation Haut Débit (EHD) | Sciences de l'ingénieur | Génie chimique et génie des procédés



Microfluidique et Chémoinformatique : une forte complémentarité pour étudier la compatibilité matériaux/fluides

Pour de nombreuses applications industrielles, comme le recyclage chimique des plastiques, ou encore pour assurer la compatibilité entre polymères et nouveaux carburants, il est essentiel d'anticiper les interactions entre matériaux et fluides...

Analyse chimique | **Microfluidique** | **Expérimentation Haut Débit (EHD)** | **Traitement du signal / Science des données**

Des milli-réacteurs catalytiques plus performants : apport de l'hydrodynamique

De nombreux procédés catalytiques utilisent les réacteurs à lits fixes arrosés car ils présentent de nombreux avantages. Simples d'utilisation, ils ont de bonnes performances en termes de mise en contact des gaz, liquides et solides. Néanmoins des phénomènes complexes y sont à l'œuvre et pour les comprendre il est nécessaire de recourir à la mécanique des fluides numérique. Un travail de thèse a permis d'obtenir des résultats en accord avec les observations.

Une conception d'apparence simple qui cache une grande complexité

En raison de **leur conception relativement pratique et de leur facilité d'exploitation**, les réacteurs à lits fixes arrosés sont considérés comme **la meilleure technologie de contact entre gaz, liquide et solide** dans un large éventail de procédés catalytiques. Bien que faciles à utiliser, ces réacteurs combinent plusieurs phénomènes complexes.
Dans le but de mieux comprendre ces phénomènes, plusieurs études de la littérature se sont intéressées à la caractérisation de ce type de réacteurs, mais peu d'entre elles ont abordé le transfert de matière aux interfaces. De plus, **de fortes disparités sont observées dans l'estimation des paramètres d'intérêt** : perte de charge, la saturation liquide, le taux de mouillage ainsi que les transferts de matière gaz-liquide et liquide-solide.

Estimation réaliste des paramètres d'intérêt

Dans le but de mieux comprendre les phénomènes locaux, un travail de thèse [1] utilisant la mécanique des fluides numérique (CFD) a étudié **le couplage complexe entre l'hydrodynamique et le transfert de matière** dans des conditions de fonctionnement industrielles réalistes. Pour ce faire, des simulations prédictives de transfert gaz-liquide-solide ont été réalisées. Les prédictions hydrodynamiques en matière de perte de charge et de saturation liquide ont été validées par rapport à des modèles fiables de la littérature (loi d'Ergun, [2]). Il en va de même pour le taux de mouillage des grains qui a été comparé à une corrélation précédemment établie [3], en y rajoutant la prise en compte des effets du débit de gaz et de la forme des grains.

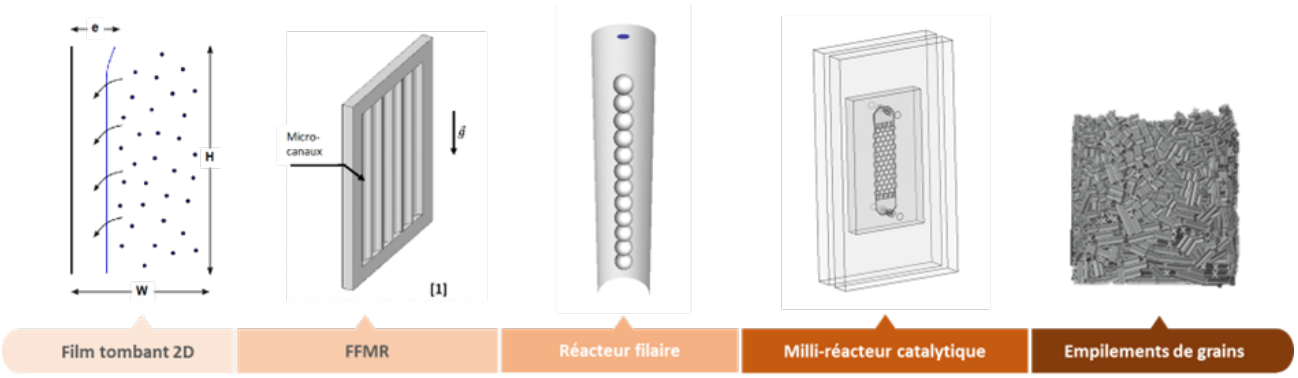


Figure 1: Stratégie de recherche suivie pour répondre aux objectifs de la thèse

Un large éventail de cas d'étude, de géométries de catalyseurs et de formes de grains

Pour la modélisation CFD, une stratégie de complexification progressive des cas d'étude a été adoptée (Figure 1), depuis le cas d'un film tombant bidimensionnel semi-infini jusqu'à celui d'un milieu réactif triphasique, avec un très bon accord sur l'hydrodynamique et les flux de transfert de matière.

Le modèle CFD a été évalué pour étudier l'effet de la géométrie du catalyseur solide dans trois configurations : (i) **un réacteur filaire**, (ii) **un milli-réacteur structuré** (iii) t**rois empilements de lits fixes arrosés** comprenant des sphères, trilobes et quadrilobes. Dans ces cas d'étude, une accélération des transferts externes a été relevée et quantifiée pour les écoulements tortueux, en raison de l'apport convectif du soluté limitant la réaction. L'étude du transfert dans les réacteurs à lits fixes arrosés, pour différentes formes de grains, a montré **une amélioration des coefficients de transfert pour les particules à haut ratio surface/volume**.
Enfin, les effets de débit gaz et de forme de grains sur le mouillage partiel des surfaces solides ont été simulés dans des conditions de procédé réelles, permettant d'élargir le domaine d'applicabilité de la corrélation évoquée ci-dessous [3].

Une meilleure compréhension des phénomènes locaux

Grâce à la mécanique des fluides numérique, ce travail a permis d'étudier **l'hydrodynamique et le transfert de matière gaz-liquide-solide à l'échelle locale**, et d'améliorer à la fois la compréhension et la détermination des paramètres d'intêret. Ainsi, des corrélations sont proposées pour (i) estimer le taux de mouillage dans les empilements de grain et (ii) corriger le modèle des résistances en série, communément utilisé dans l'industrie pour estimer le coefficient de transfert global.

Références:

[1] Bouras, Hanane (2021) Etude expérimentale et numérique des transferts de matière externes dans différents réacteurs catalytiques triphasiques en régime ruisselant. En ligne : www.theses.fr/2021LYSE1021
[2] Boyer, C.; Volpi, C.; Ferschneider, G. (2007) Hydrodynamics of trickle bed reactors at high pressure: Two-phase flow model for pressure drop and liquid holdup, formulation and experimental validation. In : Chemical Engineering Science, vol. 62, n° 24, p. 7026–7032. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.08.036.
[3] Julcour-Lebigue, Carine; Augier, Frédéric; Maffre, Harold; Wilhelm, Anne-Marie; Delmas, Henri (2009) Measurements and Modeling of Wetting Efficiency in Trickle-Bed Reactors: Liquid Viscosity and Bed Packing Effects. In : Industrial & Engineering Chemistry Research, vol. 48, n° 14, p. 6811–6819. DOI: https://doi.org/10.1021/ie9002443.

Contact scientifique : hanane.bouras@ifpen.fr

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



L’EHD en milli lit fixe « booste » le développement des catalyseurs slurry

THÈSE DE CHARLES BONNIN

Hydrocarbures responsables | Carburants | Pétrochimie

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Analyse et caractérisation | Expérimentation Haut Débit (EHD) | Sciences de l'ingénieur | Génie chimique et génie des procédés



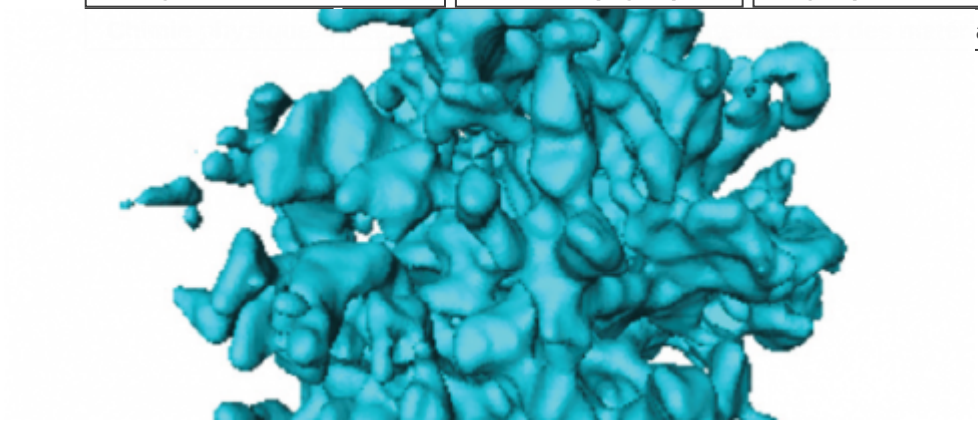
Recherche fondamentale

Actualités janvier 2018

Mieux comprendre les phénomènes de diffusion au cœur des catalyseurs

Hydrocarbures responsables | Carburants | Pétrochimie

Analyse et caractérisation | Sciences physiques | Physique du transfert et du transport aux



Caractériser les catalyseurs pour le Fischer-Tropsch : une affaire de SWING

La synthèse Fischer-Tropsch est un procédé catalytique de production d'hydrocarbures à partir d'un gaz de synthèse, pouvant provenir de la biomasse.

Hydrocarbures responsables | Carburants

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Analyse et caractérisation | Analyse chimique | Analyse structurale et imagerie

Le transfert de matière gaz-liquide-solide dans les réacteurs à lits fixes arrosés

Les milieux poreux interpellent les scientifiques
12 octobre 2023

Lien vers la page web :