



HAL
open science

Modélisation par une approche à deux fluides des écoulements gaz liquide à contre-courant dans les colonnes à garnissages

Manel Fourati

► **To cite this version:**

Manel Fourati. Modélisation par une approche à deux fluides des écoulements gaz liquide à contre-courant dans les colonnes à garnissages. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2012. Français. NNT : 2012INPT0125 . tel-04283088

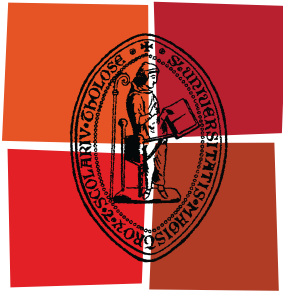
HAL Id: tel-04283088

<https://theses.hal.science/tel-04283088>

Submitted on 13 Nov 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :
Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par :

Manel FOURATI

le : vendredi 16 novembre 2012

Titre :

Modélisation par une approche à deux fluides des écoulements gaz liquide à contre-courant dans les colonnes à garnissages

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil et Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

Directeur(s) de Thèse :

Véronique ROIG

Ludovic RAYNAL

Rapporteurs :

Façal LARACHI

Dominique TOYE

Membre(s) du jury :

Jean-Claude CHARPENTIER, Président

Ville ALOPAEUS, Membre

Guillaume MOUGIN, Membre

Marc PRAT, Membre

ABSTRACT

This work is done within the framework of collaboration between IFPEN and l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT). It takes place in the general context of optimization of industrial gas-liquid packed columns dedicated to CO₂ capture using multi-scale simulation approach of hydrodynamics and transfer. The main objective of this study is to develop predictive model for liquid dispersion in two-phase flows in packed beds operating in the counter-current mode. This model will help simulate the flow at the macro-scale of a packed column.

Packed columns are widely used for gas/liquid absorption processes since they generate subsequent exchange surface between phases with limited pressure drop. In the particular case of amine process, the two-phase flow in the packing consists in thin trickling liquid films sheared by counter-current gas flow that circulates in communicating tortuous channels. It is widely recognized that homogeneous flow ensures good separation performances. This is far from being the case at industrial scale since maldistributions, especially for liquid phase, do occur even with optimized liquid and gas distributors in the column inlets. Liquid distribution results from "dispersion" phenomenon which modelling is not fully handled in literature. Prediction of liquid dispersion has been the main objective of this Ph.D. research. This study is based upon two main approaches: an experimental study carried out using a 40 cm in diameter column operating in IFPEN (Lyon) and a numerical study carried out in Interface team in IMFT.

The first part of this research focused on measuring spatial distribution of liquid hold-up over different sections of the packed bed using a gamma ray tomography system. In order to focus into liquid dispersion phenomenon, a point source liquid feeding configuration was considered. Hold-up maps obtained from photonic flux attenuation measurements were then used to characterize liquid dispersion from a source point for both packings (Mellapak 250.X and IMTP-40) using a relatively simple advection-diffusion model. This model enables calculating a key hydrodynamic parameter that quantifies spreading of liquid in the packed bed denoted "spread factor". In the particular case of Mellapak 250.X packing, we found that spread factor does not vary significantly with gas flow-rate neither with liquid one. This reveals that liquid dispersion is only governed by packing geometry. However, in the case of IMTP-40 random packing, more complex mechanisms appear to drive liquid dispersion since liquid flows as films, rivulets and drops. This results in spread factors that are sensitive to gas and liquid flow rates.

The second part of this work consisted in describing the two-phase flow in the packed bed using a Euler-Euler approach coupled with a porous medium description. This approach allows simulate the complex flow in the packing in a simple equivalent geometry using specific closure laws. Focus in the theoretical development of the Eulerian Navier-Stokes equations system gives rise to volumetric terms that must be modeled. They are related to porous resistances, drag force at the phases interface and dispersion forces that control phases spreading. An analysis of the literature was carried out in order to identify and discuss closure laws for these terms. Using these closure laws, a 2D axisymmetric simulation is carried out considering Mellapak 250.X structured packing. Results show good agreement with experimental data both in terms of pressure drop and liquid local hold-up orders of magnitude. Discrepancies with experimental data as regards liquid spreading allowed us discuss the relevance of the considered dispersion model and suggest further improvements. Finally, a discussion of porous resistances and drag models based on work of Iliuta *et al.* (2004) is proposed and a suggestion of their extension to significant gas-liquid interaction regimes is given.

RÉSUMÉ

Ce travail de thèse rentre dans le cadre du développement de modèles multi-échelles de simulation de colonne d'absorption gaz-liquide pour des applications de captage de CO₂ en vue d'optimiser leur design. Il est le fruit d'une collaboration entre IFP Énergies nouvelles et l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse.

Les colonnes à garnissages représentent une technologie essentielle aux applications d'absorption gaz-liquide. Dans les procédés de captage de CO₂ aux amines, le solvant liquide s'écoule sur les parois du garnissage, idéalement sous forme de film ruisselant mouillant toute la surface disponible, le gaz, en régime turbulent, venant le cisailer à contre-courant de manière à promouvoir un transfert de CO₂ de la phase gaz vers la phase liquide. Un écoulement le plus homogène possible permet d'avoir les meilleures performances de transfert. Toutefois, l'expérience montre que des maldistributions, notamment de la phase liquide, peuvent apparaître même en cas de bonnes distributions en entrée de colonne. La distribution du liquide est régie par un phénomène de « dispersion » dont l'étude et la modélisation représentent le principal objet de cette thèse. Pour ce faire, ce travail de thèse s'appuie sur des travaux expérimentaux, réalisés sur une installation d'IFPEN à Lyon, et sur des travaux numériques réalisés dans l'équipe Interface de l'IMFT.

Le premier axe de l'étude abordé a ainsi consisté en l'acquisition de données originales de distribution de liquide en partant d'une configuration d'alimentation sous forme d'un jet central en tête de colonne et ce pour deux types de garnissages métalliques : un garnissage structuré, le Mellapak 250.X et un garnissage vrac, l'IMTP-40. La méthode de tomographie gamma a été mise en œuvre afin de mesurer l'atténuation d'un flux photonique par le liquide en mouvement ce qui permet d'établir des cartes de rétention locale de liquide sur une section de colonne. Les profils de rétention résultants ont été ensuite exploités afin de caractériser la dispersion de liquide dans le système pour des régimes d'écoulement allant des plus faibles aux plus fortes interactions gaz-liquide. Ces résultats ont permis de développer un modèle simple d'advection-diffusion faisant appel à un paramètre hydrodynamique clé qui est le « coefficient de dispersion », qui reproduit bien l'étalement du jet de liquide. Dans le cas du garnissage Mellapak 250.X nous avons pu mettre en évidence une dispersion qui est régie essentiellement par la géométrie du milieu. Le cas du garnissage IMTP-40 montre, lui, que la dispersion s'opère par des mécanismes plus complexes dus à la coexistence de plusieurs modes d'écoulement incluant des filets de liquide et des gouttes avec une forte sensibilité aux débits de liquide et de gaz.

Le deuxième axe de l'étude a consisté à proposer et valider un modèle de simulation numérique de l'écoulement gaz-liquide à contre-courant permettant de retrouver ces phénomènes de dispersion. Un modèle Euler-Euler offrant la possibilité de modéliser le système à une macro-échelle associé à une description du garnissage par un milieu poreux équivalent a été retenu. Les bases théoriques du modèle en question ont été investiguées et discutées et les différents termes à modéliser mis en évidence. Nous avons par la suite, en s'appuyant également sur des travaux antérieurs, identifié et discuté les principales propositions de modèles de fermeture du système d'équation de Navier-stokes dans chacune des phases. Des simulations ont été effectuées sur la base de ce modèle en utilisant le code Fluent pour le cas particulier du garnissage structuré. Des résultats en bon accord avec l'expérience sont obtenus tant en termes de perte de charge que de rétentions locales. Les écarts en termes d'étalement du jet de liquide nous ont permis, pour leur part, de discuter le modèle de dispersion adopté, d'en dégager les limites et de proposer des améliorations à mettre en œuvre pour les travaux postérieurs. Enfin, et de manière indépendante, nous avons proposé une extension du modèle de frottement interfacial proposé par Iliuta *et al.* (2004) pour des régimes de fortes interactions entre phases permettant de mieux représenter l'écoulement et notamment de reproduire les courbes de perte de charge au-delà du point de charge.

à mes parents

CONTENU

Nomenclature

1. Introduction générale	14
1.1 Contexte général	14
1.1.1 La nécessité de capter le CO ₂	14
1.1.2 Voies de captage de CO ₂ en post-combustion	16
1.1.3 Procédé de captage de CO ₂ à la MEA	18
1.1.4 Coûts associés au procédé de captage de CO ₂ aux amines	19
1.1.5 Contexte général de la thèse: projet R&D	20
1.2 Les colonnes à garnissages	21
1.3 Phénoménologie des écoulements gaz-liquide dans les colonnes à garnissages	23
1.3.1 Régimes d'écoulement	24
1.3.2 Principaux paramètres hydrodynamiques et de transfert	26
1.3.3 Nombres adimensionnels	30
1.4 Modèles unidimensionnels de description de l'hydrodynamique dans les colonnes à garnissages	32
1.5 Étude de la distribution de liquide dans les garnissages: état de l'art expérimental	36
1.6 Approches numériques de modélisation des écoulements gaz-liquide dans des garnissages	37
1.7 Conclusion	43
2. Modèle Eulérien à deux fluides pour les colonnes à garnissages.	46
2.1 Introduction au modèle eulérien à deux fluides	46
2.2 Système d'équations à l'échelle du pore	47
2.3 Système d'équations à l'échelle macroscopique	49
2.3.1 Vue générale sur le processus d'homogénéisation	49
2.3.2 Système d'équations retenu	51
2.3.3 Problème de fermeture : vue d'ensemble	52
2.3.4 Lois de fermeture	54
A/ Résistances poreuses : Frottement sur la surface du solide	54

B/ Loi de trainée interfaciale	57
C/ Loi de mouillage	58
D/ Force de dispersion	58
2.4 Conclusion	63
3. Etude expérimentale de la dispersion dans une colonne gaz/liquide à garnissages fonctionnant à contre-courant.	65
3.1 Dispositif expérimental	65
3.1.1 Installation	65
3.1.2 Garnissages	68
3.1.3 Fluides utilisés	70
3.2 Méthode de mesure par tomographie gamma	70
3.3 Présentation des essais	77
3.4 Écoulement en garnissage structuré avec alimentation centrale	80
3.4.1 Publication	80
3.4.2 Résultats complémentaires	96
3.4.3 Conclusion	99
3.5 Écoulement en garnissage vrac avec alimentation centrale	100
3.5.1 Coupes tomographiques : rétention locale sur une section	100
3.5.2 Profils de rétention globale de liquide	106
3.5.3 Perte de charge globale	110
3.5.4 Distribution de liquide	115
3.5.5 Validité du modèle d'advection-diffusion	118
3.5.6 Coefficient de dispersion ou Spread factor	120
3.5.7 Conclusion	124
4. Discussion des lois de fermeture du modèle eulérien à deux fluides	
4. Discussion des lois de fermeture du modèle eulérien à deux fluides	127
4.1 Analyse des lois d'échange de quantité de mouvement aux parois et aux interfaces	127
4.1.1 Quel sens physique ?	127
4.1.2 Extension des lois d'échange de quantité de mouvement aux régimes d'interaction significative entre phases : proposition d'un modèle à seuil	132

4.1.3 Résultats	139
4.1.4 Poids des différents termes du bilan de quantité de mouvement	143
4.2 Discussion des lois de fermeture propres à la dispersion	144
4.3 Conclusion	146
5. Mise en œuvre du modèle numérique : simulation avec le code Fluent	148
5.1 Définition du cas de calcul	148
5.1.1 Géométrie retenue	148
5.1.2 Solveurs utilisés	150
5.1.3 Lois de fermeture: Implémentation d'UDFs (User Defined Function)	151
5.2 Cas test préliminaires	155
5.3 Simulation de la dispersion de liquide dans un lit de garnissage à partir d'une entrée ponctuelle	158
5.3.1 Résumé des cas simulés avec le maillage 1	158
5.3.2 Résultats obtenus pour les cas de référence	161
5.3.3 Sensibilité à la valeur du « coefficient de dispersion »	171
5.3.4 Effet de la force de dispersion dans la phase gaz	177
5.3.5 Effet du taux de mouillage	177
5.3.6 Sensibilité au « clipping »	179
5.3.7 Sensibilité au maillage	179
5.3 Conclusion	181
Conclusion et perspectives	183
Références	189
Annexes	196

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier Pr. Dominique Toyé et Pr. Faïçal Larachi pour le temps qu'ils ont consacré à la lecture de mon manuscrit. Merci également à Pr. Ville Alopaeus, Dr. Marc Pratt et Dr. Guillaume Mougín d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse et à Pr. Jean-Claude Charpentier de l'avoir présidé.

Je tiens à manifester mes sincères remerciements à ma directrice de thèse Véronique Roig pour son apport scientifique irréprochable ainsi que pour avoir su m'orienter et m'avoir mise sur la bonne voie à tous les stades de ce travail de thèse. Je la remercie aussi pour avoir toujours été à l'écoute et m'avoir soutenue généreusement au risque d'être, des fois, accusée de favoritisme. Je lui sais le meilleur gré également pour son soutien moral continu et ses petites attentions (restos et autres) qui ont su me rendre le sourire aux moments d'incertitude les moins évidents. Je la remercie enfin infiniment pour avoir cru en moi, m'avoir « coachée » sans réserve et pour s'être intéressée au mouvement politico-social tunisien avec beaucoup d'ouverture d'esprit. Véronique, Merci.

Je remercie au même titre Ludovic Raynal, mon directeur de thèse IFPEN, pour son encadrement exemplaire et son implication constante dans mes travaux de thèse. Outre son apport scientifique et technique accompli, il a su me sensibiliser à nombre d'aspects relatifs aux applications industrielles de mes travaux de thèse. Je le remercie également pour son immuable bonne humeur, son ouverture d'esprit et sa patience face à mes lacunes organisationnelles notamment sur le plan administratif. Son exigence professionnelle, toujours avec bienveillance, m'a beaucoup appris et me sera très utile à l'avenir. Ludovic, Merci.

Du côté d'IFPEN, je remercie également Cécile Barrère-Tricca, Pascal Alix, Christophe Boyer, Yacine Haroun et Luc Nougier pour leur extrême amabilité et soutien lors de mon séjour de 6 mois à Lyon. Un grand merci aussi à Raphael Gonnot et Pablo Lerey dont la compétence technique et l'efficacité m'ont été d'une grande aide. Je tiens aussi à remercier tous les permanents du groupe Interface de l'IMFT pour leur bonne humeur, leur hospitalité et les discussions intéressantes que nous avons partagées autour de la table du troisième étage du bâtiment Escande. Je remercie tout particulièrement la charmante Patricia Ern pour son extrême gentillesse et pour m'avoir tenu compagnie à l'étage à des heures assez tardives. Je remercie aussi Catherine Colin, Greg Ehses, et Marie-Hélène Manzato toujours souriants et disponibles.

Je remercie l'ensemble des thésards du groupe Interface de l'IMFT, les « anciens » et les plus récents, pour leur amabilité inégalée et les bons moments que nous avons pu partager (soirées, tournoi de pétanque, tournoi de ping-pong...). Je pense à Thomas et Benjamin toujours de bonne humeur et sensibles à mes blagues, même les moins drôles. Je pense également à Lucia, qui a lancé ma potentielle carrière de portraitiste, Marie, René, Elise, Audrey, Auriane, Nicolas, Mickael, Damien, Olivier, Marine, Yuri, Brian...Un grand merci aussi à Mélanie Leroux qui m'a tenu compagnie durant les durs mois de l'été 2012 et à Agathe Chouippe qui m'a toujours écoutée même quand il s'agissait de coiffure ou de shopping...Agathe tu es la meilleure...Je remercie aussi Cyprien Soulaïne pour les discussions scientifiques et professionnelles qu'il a partagées avec moi avec beaucoup d'amabilité à chaque fois que je passais dans le bâtiment Nougaro ainsi que les thésards d'IFPEN qui m'ont accueillie très gentiment à Lyon pendant 6 mois. Merci Rim, Maria, Lilia, Alberto...

Enfin je remercie tout particulièrement Cédric Besnaci pour m'avoir épaulée généreusement, avec une délicatesse qui lui est naturelle, et pour s'être occupé de moi comme le ferait un frère durant ces quelques années. Je lui souhaite d'ailleurs beaucoup de bonheur et de réussite...Cédric, tu es « au-dessus ».

Je tiens en outre à remercier infiniment Mohamed Yaïche de m'avoir soutenue délicatement au cours de cette thèse et d'avoir été toujours de bon conseil...Merci également à Meriam Khemakhem (Beya aussi) et Amal Khabou, mes copines d'enfance et mes muses avérées.

Enfin j'adresse ma profonde reconnaissance à mes parents Rakia Mhiri et Adel Fourati sans qui je n'aurais jamais pu faire de longues études ni mener à bout ce travail de thèse. Leur soutien inconditionnel et leur confiance m'ont donné la possibilité et l'envie d'avancer et ont toujours été ma source d'inspiration. Papa, Maman, merci et que Allah vous garde ! Un grand merci également à ma sœur Imen, qui a sacrifié son titre de championne de France en Volley-ball pour venir à ma soutenance, ma sœur Nour, mon frère Lassaad, mes tantes et oncles... en particulier mon oncle Sami Mhiri qui m'a encouragée de tout son crédit.

Nomenclature

a_g : Aire géométrique spécifique du garnissage (m^2/m^3)

a_e : Aire effective d'échange entre phases (m^2/m^3)

C_k ($k=L, G$) : facteur de capacité (m/s)

C_V : facteur de maldistribution (%)

d_h : diamètre hydraulique équivalent (m)

D : diamètre de colonne (m)

$D_{r1}, D_{r2}, D_{rmoy}, D_r$: coefficients de dispersion (m)

dP (ou dP/dZ) : perte de pression (Pa/m)

dP/dZ_0 : perte de pression prédite par le modèle de Iliuta *et al.* (2004) (Pa/m)

e : épaisseur de film de Nusselt (m)

E_1, E_2 : constantes d'Ergun

F_S : facteur cinétique de gaz ($Pa^{0.5}$)

F_C : facteur cinétique de gaz à l'engorgement ($Pa^{0.5}$)

f_e : taux de mouillage

$\vec{F}_{disp,k}$: force de dispersion dans la phase k (N/m^3)

$\vec{\overline{F}}$: tenseur de résistances inertielles (m^{-1})

g : accélération de la gravité (m/s^2)

H : rayon de courbure de l'interface gaz-liquide (m^{-1})

h_L : rétention de liquide

h_k ($k=1,2$) : hauteur occupée par la phase k dans un canal incliné (m)

h : épaisseur d'un canal incliné (m)

I_0 : Nombre de photons incidents

I : Nombre de photons reçus par les capteurs

k_i ($i=L,G$) : coefficient de transfert de masse (m/s)

$\vec{\overline{K}}$: tenseur de perméabilité (m^2)

K_{kS} ($k=L,G$): coefficient de frottement entre la phase k et le solide (kg/s)

$\overline{\overline{K}}_{dL}$: tenseur de dispersion associé au frottement avec le solide, Liu et Long (2000) (m^2/s)

$\overline{\overline{K}}_{dIG}$: tenseur de dispersion associé au frottement interfacial, Liu et Long (2000) (m^2/s)

K_{IG} : coefficient de frottement interfacial (kg/s)

P_c : pression capillaire (Pa)

\tilde{p}_k : fluctuation spatiale de la pression dans la phase k dans un pore (Pa)

P_k : pression dans la phase k (Pa)

q_L : charge liquide ou taux d'arrosage (vitesse débitante de liquide) (m^3/m^2h)

Q_G : débit volumique de gaz (m^3/s)

Q_L : débit volumique de liquide (m^3/s)

Q_{LO} : débit volumique Total de liquide introduit en tête de colonne (m^3/s)

(r,z) : système de coordonnées radiale et axiale (m)

\vec{R}_{Ik} : force de trainée dans la phase k (N/m^3)

S : spread factor (m)

$\vec{S}_{porous,k}$: résistance poreuse dans la phase k (N/m^3)

\tilde{u}_k : fluctuation spatiale de la vitesse de la phase k dans un pore (m/s)

U_k ($k=L,G$) : vitesse intrinsèque de la phase k (au sens de la moyenne volumique) (m/s)

U_{GS} : vitesse superficielle de gaz (m/s)

U_{LS} : vitesse superficielle de liquide (m/s)

$U_{GScritique}$: vitesse superficielle critique correspondant au « point de charge » (m/s)

u_k : vitesse locale de la phase k dans un pore (m/s)

U_{kp} : vitesse locale de la phase k dans un canal incliné (m/s)

U_{Ip} : vitesse à l'interface dans un canal incliné (m/s)

$U_{D,k}$ ($k=L,G$) : vitesse de dérive de la phase k (m/s)

V : volume de contrôle (m^3)

V_k : volume de la phase k inclus dans le volume V (m^3)

Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 : longueurs axiales (m)

Z : hauteur de lit de garnissage (m)

Nombres adimensionnels

Re_L : nombre de Reynolds du liquide

Re_G : nombre de Reynolds du gaz

Fr_L : nombre de Froude du liquide

We_L : nombre de Weber du liquide

Lettres grecques

ε : porosité du lit de garnissage

θ : angle de corrugation par rapport à la verticale (°)

θ' : angle de corrugation par rapport à l'horizontale (°)

θ_k : fraction volumique de la phase k

α_k : saturation de la phase k

μ_k : viscosité dynamique de la phase k (Pa.s)

μ^* : atténuation du milieu traversé par les photons (cm^{-1})

μ_f : atténuation physique du fluide (cm^{-1})

ρ_k : masse volumique de la phase k (kg/m^3)

σ : tension superficielle (N/m)

δ_k : épaisseur du film diffusionnel dans la phase k (m)

$\underline{\underline{\tau_k}}$: tenseur des contraintes visqueuses (N/m^2)

τ_k (k=L,G) : tortuosité

τ_{wk} (k=1,2) : taux de cisaillement à la paroi d'un canal incliné (Pa)

τ_{ik} (k=1,2) : taux de cisaillement à l'interface entre une phase 1 et une phase 2 dans un canal incliné (Pa)

Indices

L : liquide

G : gaz

r : coordonnée radiale

z : coordonnée axiale

CONTENU

1. Introduction générale	14
1.1 Contexte général	14
1.1.1 La nécessité de capter le CO ₂	14
1.1.2 Voies de captage de CO ₂ en post-combustion	16
1.1.3 Procédé de captage de CO ₂ à la MEA	18
1.1.4 Coûts associés au procédé de captage de CO ₂ aux amines.....	19
1.1.5 Contexte général de la thèse: projet R&D.....	20
1.2 Les colonnes à garnissages	21
1.3 Phénoménologie des écoulements gaz-liquide dans les colonnes à garnissages.....	23
1.3.1 Régimes d'écoulement.....	24
1.3.2 Principaux paramètres hydrodynamiques et de transfert.....	26
1.3.3 Nombres adimensionnels.....	30
1.4 Modèles unidimensionnels de description de l'hydrodynamique dans les colonnes à garnissages.....	32
1.5 Étude de la distribution de liquide dans les garnissages: état de l'art expérimental	36
1.6 approches numériques de modélisation des écoulements gaz-liquide dans des garnissages	37
1.7 Conclusion	43

1. INTRODUCTION GÉNÉRALE

1.1 CONTEXTE GÉNÉRAL

1.1.1 LA NÉCESSITÉ DE CAPTER LE CO₂

L'ADEME dans sa feuille de route stratégique (2011) s'est intéressée au contexte mondial dans lequel s'inscrit la nécessité de capter le CO₂. Dans ce paragraphe les idées fortes présentées par l'ADEME sont reportées¹.

« La signature du protocole de Kyoto, en 2005, est un acte fondateur dans la prise en compte des émissions de gaz à effet de serre (GES). Ces gaz absorbent le rayonnement infrarouge émis par la surface terrestre et sont considérés responsables de la perturbation du système climatique. Le dioxyde de carbone (CO₂) est, en quantité, le principal gaz à effet de serre produit par l'activité humaine.

En raison de l'utilisation massive de combustibles fossiles (pétrole, gaz naturel et charbon), les concentrations en GES augmentent depuis le XIX^{ème} siècle, en particulier celles en CO₂, dont les émissions ont progressé de 80 % environ entre 1970 et 2004. En 2004, celles-ci étaient évaluées à 26 milliards de tonnes. La concentration atmosphérique en CO₂ est évaluée à 379 ppm. Sa croissance annuelle est proche de 2 ppm et ne s'atténuera que progressivement, même si toutes les émissions étaient supprimées, les GES ayant des durées de séjour dans l'atmosphère plus ou moins longues.

Le Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC) des Nations unies considère qu'il faut, à l'horizon 2050, diminuer les émissions mondiales de CO₂ de 50 à 85 %, par rapport aux niveaux de 2000, pour limiter l'augmentation des températures moyennes mondiales à long terme à un niveau compris entre 2 °C et 2,4 °C par rapport à l'ère préindustrielle, seuil considéré comme critique. Cela suppose de ne pas dépasser une concentration atmosphérique de 450 ppm de CO₂.

Selon l'Agence internationale de l'énergie (AIE), pour diviser par deux les émissions mondiales de CO₂ liées à l'énergie à l'horizon 2050 par rapport aux niveaux de 2005 (scénario dit Blue Map), il faut avoir ramené les émissions annuelles mondiales à 14,6 milliards de tonnes (Gt) en 2050 soit, pour une population actuelle de 6,5 milliards d'habitants, 2,2 tonnes de CO₂ par habitant et par an.

La France, avec 65 millions d'habitants, "aurait droit", pour une répartition proportionnelle au nombre d'habitants, à 143 millions de tonnes (Mt), soit un peu plus d'un quart de ses émissions actuelles. Cet ordre de grandeur, qualifié de « facteur 4 » a été intégré dans la vie politique par le Premier ministre Jean-Pierre Raffarin lors de l'ouverture de la 20^{ème} session plénière du GIEC, le 19 février 2003 à Paris, lorsqu'il a déclaré : « Il faut diviser par deux les émissions de GES

¹ Le texte cite à de nombreuses reprises le rapport de l'ADEME même si pour la commodité de la synthèse certaines phrases sont adaptées. Nous avons signifié cela en mettant ce texte entre des guillemets gras et soulignés (« ... »)

avant 2050 à l'échelle de la planète » ; pour la France, pays industrialisé, « cela signifie une division par quatre ou par cinq ». Cet objectif, division par quatre des émissions de GES à l'horizon 2050 par rapport à 1990, a été repris dans l'article 2 de la loi de programme fixant les orientations de la politique énergétique du 13 juillet 2005.

Or, la croissance de la population et de la richesse mondiale conduisent à une demande d'énergie qui, sans mesures ambitieuses, passeraient d'environ 11 à 25 milliards de tonne équivalent pétrole d'ici à 2050, dont une grande proportion en énergies fossiles. Afin de limiter les conséquences de cette croissance des besoins énergétiques sur le climat, il est nécessaire de mettre en œuvre un ensemble de solutions pour diversifier les ressources énergétiques et réduire de façon massive les émissions anthropiques de gaz à effet de serre. Parmi elles, une solution consiste à capter le CO₂ émis en grande quantité lors de processus industriels tels que la production d'électricité, d'acier ou de ciment, pour le stocker dans le sous-sol profond afin d'éviter de le rejeter dans l'atmosphère. Cette solution, qui concerne les sources fixes émettant de grandes quantités de CO₂, est désignée sous le sigle de CSC pour Captage et Stockage géologique de CO₂ (CCS en Anglais). La Figure 1.1 montre les parts respectives de chacune des voies de réduction d'émission de GES selon le scénario Blue Map de l'Agence Internationale de l'Énergie. Dans ce scénario, le CSC représente 19% de la réduction d'émission de GES d'ici 2050 au même titre que le développement des énergies renouvelables (part relative estimée à 17%). Ainsi, le CSC représente une voie qui est de plus en plus considérée. En effet, de plus en plus d'incertitudes émergent quant au recourt à l'énergie nucléaire notamment au regard des problèmes de sécurité que pose cette voie énergétique. D'autre part, le recourt grandissant à des combustibles fossiles tels que le charbon en Chine présente des perspectives de marchés potentiels importants pour le CSC. Enfin, les analyses récentes montrent que le coût de production de l'électricité par des solutions alternatives, plus propres en termes d'émissions de CO₂, serait significativement plus élevé que les coûts actuels de production par des centrales à charbon et proche de celui des centrales équipées de solutions CCS. Ainsi de nombreuses études sur les différentes voies technologiques de CSC sont en cours et plusieurs pays sont concernés. »

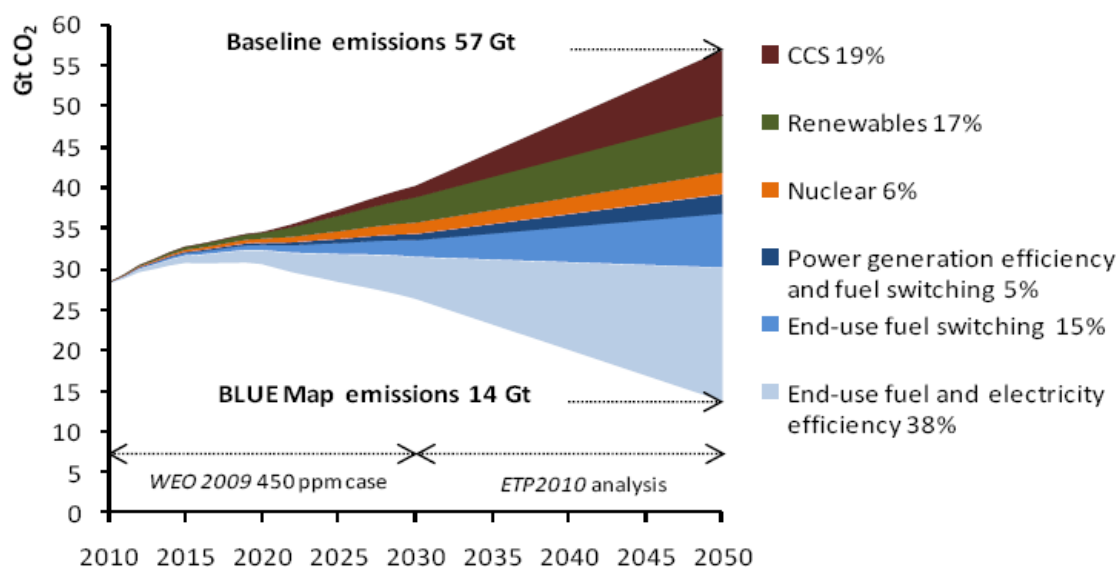


Figure 1.1 : voies de réduction d'émission de CO₂, scénario Blue Map, IEA^[2]

² IEA: International Energy Agency (<http://www.iea.org/>)

1.1.2 VOIES DE CAPTAGE DE CO₂ EN POST-COMBUSTION

Plusieurs procédés et voies de captage de CO₂ sont possibles et ont été testés et déployés à diverses échelles. Les efforts de recherche en vue d'une maîtrise de ces technologies sont toujours en cours par divers acteurs publics et privés. Trois voies potentielles de captage de CO₂ sont aujourd'hui identifiées: l'oxy-combustion, la pré-combustion et la post-combustion; elles présentent des degrés de maturité différents en termes de maîtrise de la technologie.

La post-combustion consiste à séparer le CO₂ des autres gaz contenus dans les fumées de combustion produites par les centrales électriques, les raffineries ou encore les procédés industriels de type cimenterie, sidérurgie, ou pétrochimie. Les fumées traitées ont des compositions variables suivant le procédé d'origine et ont des concentrations en CO₂ qui varient typiquement de 3 à 30% en volume

Des technologies relatives à ce type de captage sont aujourd'hui disponibles sur le marché (Procédés Econamine de Fluor, KS-2 de Kansai-Mitsubishi, HiCapt de Prosernat...). Elles mettent en œuvre des procédés d'absorption par voie chimique.

Ces procédés d'absorption mettant en contact un gaz chargé en CO₂ et un solvant liquide font appel à deux étapes principales:

- Une étape d'absorption où le gaz et le solvant sont mis en contact dans un contacteur muni d'internes favorisant le contact entre phases (garnissages, plateaux) et fonctionnant à contre-courant à pression et température ambiantes.
- Une étape de régénération de solvant durant laquelle le CO₂ capté est extrait du solvant dans une colonne de régénération (ou stripper) par modification de la pression et de la température de la solution (haute température ~ 120°C). Le solvant régénéré est ensuite renvoyé dans la colonne d'absorption.

Un schéma simplifié d'un procédé de captage de CO₂ est donné par la Figure 1.2.

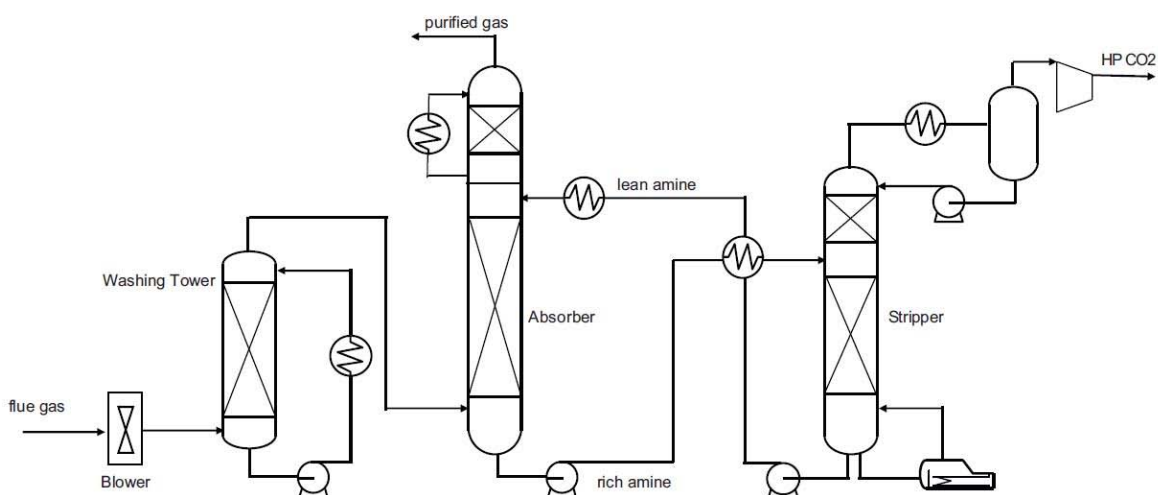


Figure 1.2: Diagramme simplifié d'un procédé de captage de CO₂ aux amines, Raynal *et al.* (2011)

Il existe également des procédés d'absorption par voie physique, qui consistent à absorber le CO₂ contenu dans les fumées de combustion dans un solvant via une simple dissolution du gaz dans le liquide. Les solvants physiques qui sont souvent des liquides organiques tel que des solutions de méthanol présentent l'avantage d'être peu sensibles à la dégradation thermique et la corrosion (par des composés acides présents dans les fumées tel que les NO_x et les SO_x) et facilement régénérés par une simple baisse de la pression. Cependant, ces solvants ne sont pas attractifs pour des procédés de captage de CO₂ en post-combustion car se prêtent mal aux conditions opératoires de ces opérations à savoir une faible pression dans les fumées, une concentration souvent faible des fumées en CO₂ et des températures de fumées de l'ordre de 50°C. Ainsi un procédé de captage de CO₂ au méthanol peut nécessiter des débits de solvant qui sont 10 fois plus grands que ceux nécessaires pour un procédé d'absorption par voie chimique, ce qui paraît peu réaliste.

L'absorption chimique consiste à absorber le CO₂ contenu dans les fumées dans un solvant caractérisé par une réaction chimique rapide et réversible. Les solvants chimiques les plus connus sont les solvants aqueux contenant une alcanolamine (plus couramment appelée amine). Ces composés possèdent une fonction amine qui leur confère un caractère basique leur permettant de réagir avec le CO₂, qui lui est acide. Ce type de solvant est très largement utilisé dans l'industrie notamment pour la décarbonatation du gaz naturel, le traitement des gaz de synthèse etc...

Parmi les amines, les amines primaires (MEA avec une concentration de 30% en masse en général) sont les plus utilisées pour les procédés de captage de CO₂ mis sur le marché de par leur grande réactivité avec le CO₂, qualité requise pour traiter des fumées à faible pression partielle de CO₂. Certaines amines primaires, comme la MEA, sont en outre caractérisées par une relativement bonne capacité d'absorption qui se traduit pour une fraction molaire importante de soluté (CO₂ absorbé) pour une pression partielle de celui-ci et une température constantes. Cette propriété thermodynamique est directement liée au débit de solvant requis pour traiter un débit donné de fumée. Une capacité élevée de ce solvant est synonyme d'un débit de solvant réduit. Par ailleurs ces amines sont très réactives ce qui se traduit par une hauteur de colonne d'absorption réduite. Du point de vue économique, le prix relativement bas des amines primaires (environ 1500 euros/tonne) les rend également attractives.

La MEA 30 wt.% est considérée comme le solvant de référence pour ses propriétés thermodynamiques et cinétiques avantageuses pour l'absorption de CO₂ mais aussi car le design du procédé s'y rapportant est bien maîtrisé (Abu-Zahra *et al.*, 2007). Elle a également fait l'objet d'études de démonstration sur pilote industriel (Knudsen *et al.*, 2009). Les amines primaires présentent, cependant, des inconvénients notamment vis-à-vis de leur coût énergétique de régénération. De par leur forte réactivité, une importante énergie de régénération est requise (la réaction de désorption de CO₂ de la MEA est endothermique et se fait à des températures relativement élevées, proche de 120°C) ce qui présente un inconvénient majeur pour l'économie du procédé. En effet, une énergie de régénération de solvant élevée est synonyme d'une consommation énergétique importante au niveau du rebouilleur de la colonne de régénération (ou stripper sur la Figure 1.2). Les amines primaires présentent un deuxième inconvénient étant donné qu'elles réagissent également avec les impuretés présentes dans les fumées tel que les NO_x, SO_x et le O₂ ce qui accélère leur dégradation chimique. Elles sont en outre corrosives, et sensibles à la dégradation thermique comparées aux autres types d'aminés.

En effet, dans les procédés existants de lavage aux amines, différents types d'aminés peuvent être utilisés. On distingue les aminés primaires des aminés secondaires et tertiaires par le degré de substitution de l'atome d'azote dans la chaîne carbonée tel que montre la Figure 1.3. Les aminés secondaires et tertiaires sont peu sensibles à la dégradation comparées aux aminés primaires et nécessitent moins d'énergie de régénération. Si elles sont largement utilisées dans des opérations de traitement de gaz acides, leur faible réactivité les rend moins favorables aux opérations de captage de CO₂ présent en faibles concentrations dans les fumées de combustion.

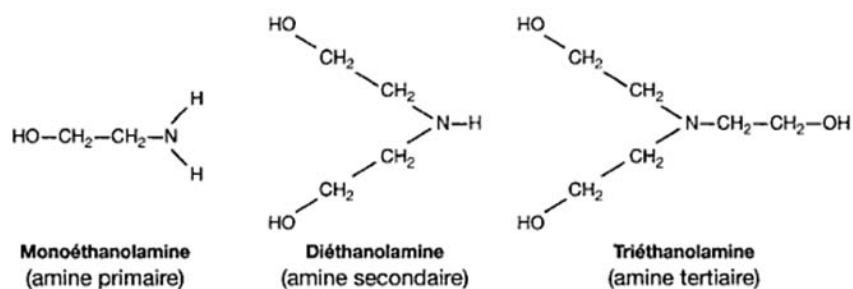


Figure 1.3: Formules chimiques des différentes amines utilisées dans les procédés d'absorption par voie chimique, Lecomte *et al.* (2010)

De nombreux autres procédés de captage de CO₂ mettant en œuvre des solvants a priori moins énergivores, sont en phase de développement (Rhudy *et al.*, 2007, Raynal *et al.*, 2011) mais nécessitent de passer par des phases de validation sur pilote industriel avant d'être considérés comme procédés commerciaux.

1.1.3 PROCÉDÉ DE CAPTAGE DE CO₂ À LA MEA

Les amines primaires et secondaires réagissent directement avec le CO₂ pour former un carbamate. La molécule de CO₂ va réagir avec la fonction amine pour former un groupe COO⁻ et libérer un proton. La théorie la plus connue est celle de la formation d'un zwitterion, espèce chimique possédant simultanément des charges positives et négatives, suivie d'une déprotonation de ce zwitterion par une base pour former un carbamate (Lemoine, 1995). Pour la MEA qui est une amine primaire de formule chimique RNH₂, la réaction de formation d'un zwitterion entre l'amine et le CO₂ s'écrit : CO₂+RNH₂ ↔ RNH₂⁺COO⁻ où R représente la chaîne carbonée de l'amine primaire. Cette première étape est une réaction rapide, mais de vitesse finie. La deuxième étape, correspondant à un transfert de proton, est généralement considérée comme instantanée et la réaction qui lui est associée s'écrit : RNH₂⁺COO⁻ + B ↔ RNHCOO⁻ + BH⁺ où B représente une base.

Les fumées de combustion contiennent, outre le CO₂ à retirer, des oxydes de soufre (SO_x) et des oxydes d'azotes (NO_x) qui peuvent dégrader la MEA. Celles-ci sont donc envoyées dans un premier temps dans des unités d'élimination de SO_x et NO_x. A la sortie de ces unités de prétraitement les fumées sont à la pression atmosphérique et à une température d'environ 50°C. Une soufflante permet d'alimenter la colonne d'absorption en gaz introduit en bas de celle-ci et mis en contact avec le solvant introduit en tête de colonne et s'écoulant sous l'effet de la gravité. La colonne d'absorption de CO₂ est équipée de garnissages permettant de maximiser l'aire de surface d'échange entre le solvant et le gaz. En quittant la colonne d'absorption en tête de celle-ci, le gaz est épuré de 90% du CO₂ qu'il contenait initialement et traverse une section de lavage à l'eau. Cette dernière permet de récupérer le solvant entraîné dans la phase gaz par évaporation ou par simple entraînement mécanique. Le gaz purifié ainsi obtenu est rejeté dans l'atmosphère avec une très faible concentration en MEA (<= 1ppm). Le solvant riche en CO₂ récupéré en pied de colonne est, lui, acheminé vers une colonne de régénération afin de le séparer du CO₂. Au préalable, le solvant est réchauffé au contact avec le solvant épuré quittant le régénérateur via un échangeur de chaleur; sa température est augmentée de 60°C à 100°C au cours de ce processus. Il est introduit ensuite en tête de colonne de régénération fonctionnant à une pression comprise entre 1 et 3 bars et munie d'un rebouilleur permettant de fournir l'énergie de régénération de solvant. Le solvant purifié récupéré en pied de colonne de régénération est à une température de 120°C. Avant d'être renvoyé vers l'absorbeur, il est refroidi au contact du solvant riche en CO₂ ce qui permet de descendre sa température à moins de 70°C. Un dernier refroidissement du solvant à 50°C par un deuxième échangeur de chaleur est effectué avant que

celui-ci ne soit introduit de nouveau en tête de colonne d'absorption. Enfin, l'effluent gazeux récupéré en tête de colonne de régénération de solvant est refroidi pour condenser la vapeur d'eau avant d'être envoyé, vers l'unité de compression, sa concentration en CO₂ est alors proche de 99% (molaire).

1.1.4 COÛTS ASSOCIÉS AU PROCÉDÉ DE CAPTAGE DE CO₂ AUX AMINES

Nous nous référons dans cette section à une étude conduite conjointement par IFPEN et Alstom Power en 2007 sur une centrale thermique de capacité 1400 MW th produisant 420 t/h de CO₂ avec une concentration de 13.5 % en volume afin de dimensionner un procédé de captage de CO₂ aux amines (MEA avec une concentration de 30% en masse ou encore MEA 30 wt.%). L'étude de cas a permis de dimensionner deux trains de traitement de fumées fonctionnant en parallèle et contenant en total 4 absorbeurs de 9m de diamètre, 35 m de haut et équipé chacun de 1000m³ de garnissages structurés ainsi que 2 générateurs de 9.3 m de diamètre et 40 m de haut équipé chacun de 1600 m³ de garnissages structurés. Ces dimensions montrent à quel point les tailles des équipements à mettre en œuvre afin de traiter les fumées d'une unité industrielle sont importantes. A ces tailles importantes, sont associés des coûts opératoires et d'investissement tout aussi importants. Le Tableau 1.1 montre une estimation des couts en question faite dans le cadre de l'étude citée ci-dessus.

Tableau 1.1: coûts associés à une centrale thermique de capacité 1400 MWth intégrant un procédé de captage de CO₂ aux amines (MEA), IFPEN & Alstom Power (2007)

Investment cost (M€)	
Power plant	710
Post-combustion capture	190
operating costs (M€/year)	
Coal	66
Power plant utilities	4
Capture utilities	10
Total	80

Le Tableau 1.2 montre une estimation de la perte de rendement électrique de la centrale thermique étudiée dans le cas d'implémentation d'un procédé de captage de CO₂ des fumées émises.

Tableau 1.2: Impact du procédé de captage de CO₂ aux amines (MEA) sur le rendement électrique d'une centrale thermique de 1400 MWth, IFPEN & Alstom Power (2007)

Investment cost (M euros)	Net electricity efficiency (%)	Net electricity production (MWe)
Power plant without CO ₂ capture	45	630
Power plant with CO ₂ capture	38	530

Les coûts conséquents (OPEX + CAPEX) des unités de captage de CO₂ expliquent en partie la difficulté de déploiement d'une telle technologie à l'échelle industrielle. Des efforts de R&D doivent ainsi aller de plus en plus dans le sens d'étude et d'amélioration de la viabilité économique du procédé. Étant donné que les coûts opératoires (OPEX) du procédé de captage de CO₂ aux amines sont identifiés comme les plus pénalisants, de nombreux efforts de recherches se focalisent sur leur réduction. Une estimation de la proportion que prennent ces coûts du coût total de CO₂ éliminé est faite par Raynal *et al.* (2011); elle est de 70% dans le cas d'un procédé de captage à la MEA non intégré. Dans ce contexte, l'énergie de régénération du solvant a été identifiée comme un paramètre crucial dans la réduction des coûts opératoires d'un procédé de captage et les efforts de R&D dans ce sens se focalisent pour la plupart sur l'identification de

nouveaux solvants peu énergivores (Ma'Mum *et al.*, 2007, Knudsen *et al.*, 2009 comme discuté dans Raynal *et al.*, 2011). Raynal *et al.* (2011) proposent une étude de la répartition des coûts associés au procédé de référence de captage de CO₂ à la MEA et soulignent l'importance des coûts d'investissement dans la comparaison des procédés de captage. Ceux-ci sont estimés à 30% dans le cas du procédé à la MEA non intégré, mais comme les études vont dans le sens d'une réduction de la consommation énergétique via l'utilisation de solvants à plus faible liaison chimique et donc souvent moins réactifs, le poids relatif des Capex ne peut qu'augmenter. Ainsi, les efforts d'optimisation des procédés de captage de CO₂ dans le but d'améliorer leur viabilité économique doivent porter tout autant sur la réduction de la consommation énergétique que sur l'optimisation du design des colonnes d'absorption.

1.1.5 CONTEXTE GÉNÉRAL DE LA THÈSE: PROJET R&D

La thèse s'inscrit dans le cadre d'un projet financé et conduit par IFPEN et visant à développer des technologies innovantes de captage et de stockage géologique de CO₂. Dans le cas des procédés de captage par voie chimique, les travaux menés par des équipes d'IFPEN ont montré, tel que mentionné dans le paragraphe précédent, la nécessité de développer des solvants performants et peu énergivores ainsi que d'optimiser le design des colonnes d'absorption. Raynal *et al.* (2012) définissent une stratégie d'optimisation des procédés de captage qui se base sur une approche multi-échelles. Une telle stratégie inclue une analyse technico-économique basée sur la simulation du procédé à l'échelle globale en utilisant des logiciels de simulation de procédés. Cette modélisation permet de simuler les performances du procédé à une échelle globale et permet d'identifier la répartition des coûts d'investissement (CAPEX) et d'opération (OPEX) entre les différentes composantes du procédé afin d'en identifier celles nécessitant un effort d'optimisation. Une analyse de sensibilité ciblée sur la colonne d'absorption peut également être conduite afin d'identifier les paramètres cruciaux dans l'optimisation des performances de séparation et des coûts de cette unité. Raynal *et al.* (2012) montrent, en se basant sur des simulations avec le logiciel Aspen à l'échelle intermédiaire de la colonne d'absorption, que l'aire d'échange entre les phases gaz et liquide est le paramètre régissant le transfert de matière et le dimensionnement de l'absorbeur, les coefficients de transfert de matière coté liquide et gaz n'ayant que très peu d'influence. Ces informations données par les simulations à des échelles globales ne permettent pas à elles seules l'optimisation du design des colonnes. Elles doivent être couplées à des analyses de l'écoulement et du transfert de masse à des échelles plus locales dans une logique multi-échelles. Les informations fournies par les simulations à des échelles locales de la colonne d'absorption, une fois intégrées dans des simulations plus globales du procédé complet permettent à terme d'aller loin dans l'optimisation poussée du dimensionnement des unités de captage de CO₂. Des efforts de recherche dans ce sens sont d'ores et déjà initiés à IFPEN et ont de plus en plus recouru à la CFD. C'est dans ce contexte que se sont inscrits à titre d'exemple les travaux de Raynal et Royon-Lebeaud (2007) qui ont effectué des simulations de l'écoulement et du transfert à des échelles mésoscopique de la colonne ainsi que la thèse de Haroun (2008) où l'écoulement et le transfert ont été étudiés à petite échelle, celle d'un film de liquide ruisselant sur une paroi solide. La Figure 1.4 montre trois différentes échelles possibles de simulation du procédé de captage de CO₂ aux amines ; l'échelle du procédé, l'échelle de la colonne d'absorption et l'échelle d'un film de liquide. Le travail de cette thèse rentre pleinement dans cette stratégie multi-échelles de caractérisation des colonnes d'absorption par voie chimique et plus globalement celle du procédé de captage de CO₂ en post combustion en vue de son optimisation. Ce travail se positionne à une échelle macroscopique qui est celle d'une colonne d'absorption.

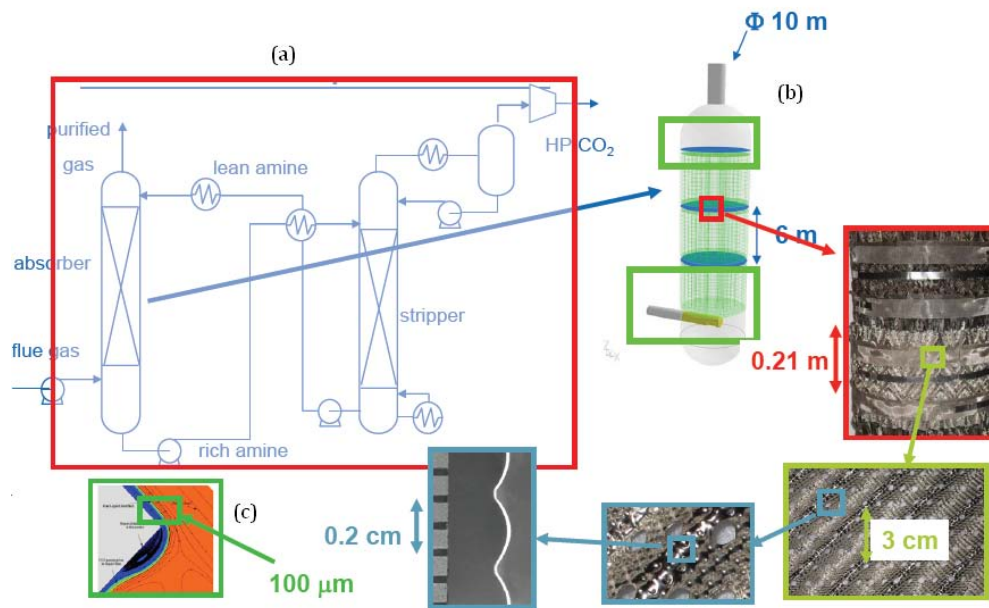


Figure 1.4 : simulations à différentes échelles d'un procédé de captage de CO₂ aux amines

(a) : échelle du procédé, (b) : échelle macroscopique de la colonne, (c) : échelle d'un film de liquide qui ruissèle sur la paroi du garnissage

*Image tiré de la présentation "CO₂ Capture Cost Reduction : Use of a Multiscale Simulations Strategy for a Multiscale Issue " de L. Raynal, A. Gomez, B. Caillat, M. Fourati and Y. Haroun, Multiscale Approaches for Process Innovation – MAPI, 25-27 January 2012 – Lyon (France)

1.2 LES COLONNES À GARNISSAGES

Dans les cas de procédés avec absorption puis réaction chimique en phase liquide, plusieurs configurations en termes de compétition entre ces deux mécanismes physiques peuvent exister. Soit la réaction est lente, et celle-ci se produit dans tout le volume liquide; le principal paramètre à déterminer est alors la rétention liquide fixant le temps de séjour du liquide dans la colonne et les paramètres de transfert de masse sont peu importants. Soit au contraire la réaction est rapide, la réaction chimique se fait dans un volume très réduit à proximité de l'interface et le transfert de masse global est fonction non seulement de la cinétique chimique mais aussi des paramètres de transfert de masse en phase gaz et en phase liquide et de l'aire interfaciale. Pour une description plus approfondie de ces phénomènes, le lecteur est renvoyé à la lecture de Laurent et Charpentier (1974) et Danckwerts (1970).

Dans les opérations d'absorption de gaz acides par des amines, comme celle du CO₂ par la MEA, la performance de séparation est limitée par le transfert de masse de la phase gaz vers la phase liquide. C'est ainsi que les contacteurs les plus performants sont ceux qui développent la plus grande aire interfaciale entre les deux fluides tout en restant dans des domaines de perte de pression acceptables et permettant de travailler à forts débits.

Pour améliorer le transfert il faut disperser une phase dans l'autre de façon à générer une importante aire effective d'échange (a_e) tout en créant de la turbulence pour améliorer le transfert. Pour ce faire, il existe plusieurs moyens. Les colonnes à plateaux perforés, colonnes à gouttes ou à bulles et les colonnes à garnissage utilisant la force de gravité ; les réacteurs agités fonctionnent par apport d'énergie mécanique ; les centrifugeuses et les cyclones utilisent la force centrifuge ; enfin les jets venturis fonctionnent par détente (Charpentier, 1975 ; Roustan, 2003).

Les colonnes à garnissage sont parmi les contacteurs qui développent la plus grande aire d'échange entre phases. Elles possèdent une palette de surface de contact variant de 100 jusqu'à 750 m²/m³ (garnissage structuré) avec un taux de vide d'environ 90% ce qui a pour conséquence de faibles pertes de charge. L'efficacité d'un tel procédé comme le captage de CO₂ est donc directement liée à tous ces avantages.

Une colonne à garnissage peut fonctionner à co-courant comme à contre-courant. Dans les installations industrielles, le fonctionnement à contre-courant est le plus souvent utilisé car il permet d'atteindre des puretés de gaz plus importantes en tête de colonne grâce à un contact en plusieurs étages théoriques de transfert (Olujic *et al.*, 2000). Un contact à contre-courant permet en effet de garder en contact une phase liquide de moins en moins riche en polluant (en l'occurrence le CO₂) avec une phase gaz de plus en plus pauvre ce qui permet de garder une force motrice de transfert de matière d'une phase dans l'autre importante tout au long de la colonne. Cependant ce mode de mise en contact limite les débits traités par des problèmes d'engorgement à l'inverse des appareils à co-courant.

Les paramètres importants pour caractériser un garnissage sont l'aire géométrique spécifique de celui-ci définie comme la surface de solide par unité de volume (dénnotée a_g (m²/m³) et la porosité qui représente le volume de vide par unité de volume de garnissage (dénnotée ϵ). Nous distinguons deux types de garnissages:

- Les garnissages vrac

Les garnissages vrac sont utilisés depuis les années 50. Les deux formes de base (cylindre et selles) ont considérablement évolué, en particulier avec le remplacement de plus en plus généralisé des matériaux céramiques par des matériaux métalliques. Les garnissages vrac ont l'avantage d'être faciles à mettre en œuvre et d'être peu coûteux (en particulier dans le cas de garnissages céramiques en comparaison des garnissages structurés, encore très souvent utilisés en milieu corrosif). Ils sont communément classés en trois catégories ou générations :

- Une première génération représentée par les anneaux de Raschig ou de Lessing et les selles de Berl. Ils ont longtemps été utilisés, jusque dans les années 50, en particulier en raison de leur faible coût, mais ne se trouvent presque plus.

- Une deuxième génération (fin années 50 / années 90), constituée par des variantes plus sophistiquées des précédents, avec comme objectif l'augmentation de la surface spécifique de chaque élément. On trouve ainsi les selles Intalox de Norton ou Torus de Rashig, les anneaux Pali et Hy-Pak. Ces garnissages sont encore très utilisés. Ils sont caractérisés par des taux de vide de 50 à 80 % et des surfaces géométriques de 100 à environ 250 m²/ m³.

- Une troisième génération (apparition fin des années 70 / déploiement début des années 90) constituée d'une très grande variété de garnissages, le plus souvent en métal ou en plastique. Ces garnissages ont été développés en particulier pour répondre à la concurrence des garnissages ordonnés plus efficaces et surtout plus capacitifs que les garnissages vrac seconde génération. Ils sont ainsi caractérisés par une plus grande porosité qui varie de 80 à près de 98 %, pour des surfaces géométriques de 100 à 300 m²/m³. Il s'agit entre autres des Cascade Miniring (C M R) , des anneaux Nutter ou des IMTP ainsi que du Fleximax de Koch-Glitsch.

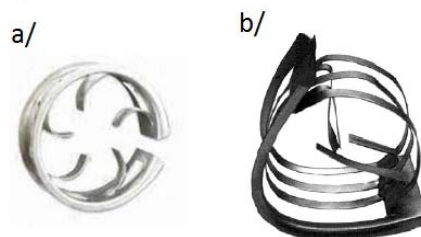


Figure 1.5: a/ garnissage Cascade Mini Rings (Koch-Glitsch), b/ garnissage IMTP (Koch-Glitsch)

- Les garnissages structurés

Les garnissages structurés ont été développés dans les années 70 et ont du attendre les années 80 pour être réellement utilisés dans l'industrie. Initialement limités aux colonnes de distillation sous vide, ils ont, dans les années 90, été de plus en plus utilisés dans tout type de procédés, distillation, distillation réactive, lavage de gaz, absorption réactive. Les garnissages structurés, ou ordonnés, sont basés sur une géométrie de triangle. Des plaques, sous forme de tôle ondulée sont assemblées les unes contre les autres avec un angle 2θ entre elles. L'angle θ entre la direction principale de la structure triangulaire et l'horizontale vaut soit 45° (cas standard, éventuellement référencé par la lettre Y), soit 60° (cas référencé par la lettre X, ou l'appellation haute capacité, HC).

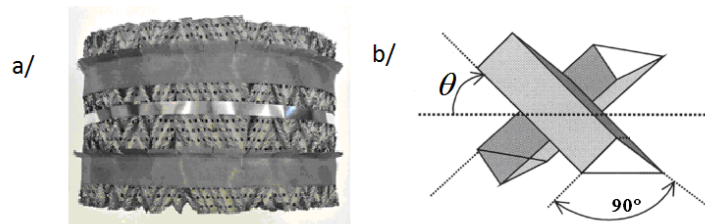


Figure 1.6: a/ garnissage structuré M250.X (Sulzer) b/ structure élémentaire d'un garnissage structuré

La Figure 1.6 représente une photographie d'un garnissage structuré ainsi que la géométrie élémentaire de celui-ci. La tôle des garnissages peut être lisse, perforée, gaufrée, ondulée... au gré de l'inventivité des ingénieurs de développement, des performances observées en pilote, de la possibilité de brevets. Les premiers garnissages structurés ont été réalisés en toile métallique (appellation "gauze packing"). Du fait de leur coût très élevé, ceux-ci sont peu utilisés. Néanmoins, comme ils offrent une très grande efficacité dès les faibles valeurs de taux d'arrosage, leur utilisation devient intéressante pour des colonnes caractérisées par des faibles débits de liquide, ou pour des équipements de laboratoire. Le gaufrage et autres rugosités sur les garnissages en tôles sont réalisés afin de retrouver les bonnes performances de mouillage des garnissages en toile. Une galette de garnissage structuré est obtenue en plaçant des superpositions de plaques dans un cylindre ou dans des blocs que l'on assemble pour paver l'espace intérieur des colonnes industrielles. Pour former un lit de garnissages, on empile une succession de galettes orientées d'un angle de 90° les unes par rapport aux autres. Les garnissages structurés sont caractérisés par des taux de vide, ou porosité, très importants, entre 90 et 95 % et des surfaces spécifiques bien supérieures à celles des garnissages vrac (entre 125 et 750 m^2/m^3).

1.3 PHÉNOMÉNOLOGIE DES ÉCOULEMENTS GAZ-LIQUIDE DANS LES COLONNES À GARNISSAGES

Dans ce paragraphe nous nous proposons de décrire la phénoménologie des écoulements gaz-liquide dans les garnissages en introduisant les paramètres hydrodynamiques communément utilisés pour ce type de colonnes. Nous appelons pour la suite U_{LS} et U_{GS} respectivement les vitesses superficielles du liquide et du gaz en fût vide. Nous définissons le facteur cinétique de gaz $F_S = U_{GS}(\rho_G^{0.5})$ où ρ_G désigne la densité du gaz ainsi que la charge liquide (ou taux d'arrosage) q_L qui correspond à la vitesse superficielle de liquide exprimée en $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$, deux paramètres très couramment utilisés dans le monde de la distillation et de l'absorption (Billet, 1995).

1.3.1 RÉGIMES D'ÉCOULEMENT

Lorsque deux phases gaz et liquide s'écoulent conjointement à travers un lit poreux, il existe de nombreuses configurations d'interface entre les deux appelés régimes d'écoulement. Ces régimes dépendent à la fois de la géométrie du lit poreux dans lequel évolue le système, des propriétés physiques des phases en contact ainsi que des conditions de vitesse de phases et de pression. Chaque régime d'écoulement présente des caractéristiques propres de stabilité, de surface de contact entre phases, d'interactions entre phases ainsi que d'interaction entre les fluides et le solide formant le milieu poreux. Les régimes d'écoulement impactent donc fortement les mécanismes de transfert de masse et de chaleur lors des réactions qui se produisent au sein du lit. Afin de pouvoir optimiser un procédé, il est donc nécessaire de caractériser les propriétés de ces régimes et de donner leurs limites.

Les régimes d'écoulement ont été largement étudiés et quantifiés dans des configurations d'écoulement en lit fixe en « co-courant » descendant (Charpentier *et al.*, 1969 ; Charpentier et Favier, 1975 ; Specchia et Baldi, 1977 ; Saroha et Nigam, 1996 cités dans Attou et Boyer, 1999). Nous décrivons ainsi les divers régimes d'écoulement en lit fixe à co-courant descendant ainsi que les mécanismes de changement de régime qui leur sont associés. Pour un tel écoulement qui évolue à la pression atmosphérique, nous distinguons ainsi les quatre régimes suivants (Attou et Boyer, 1999) : Un régime ruisselant, un régime pulsé, un régime à brouillard et un régime à bulles (Figure 1.7).

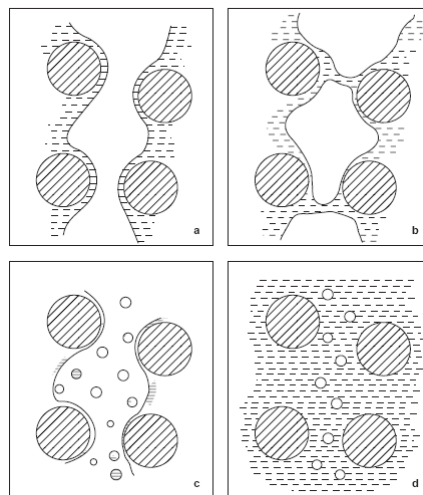


Figure 1.7 : Représentation schématique des régimes hydrodynamiques dans un réacteur catalytique gaz-liquide-solide à lit fixe arrosé, a/régime ruisselant, b/régime pulsé, d/régime à bulles, Reinecke et Mewes (1997) dans Attou et Boyer (1999)

Aux faibles débits de liquide et de gaz, le liquide s'écoule sur la surface des particules sous la forme de films et de filets alors que le gaz s'écoule dans l'espace vide du milieu granulaire. Ce régime dit ruisselant peut être divisé en deux régions (Ng et Chu, 1987 dans Attou et Boyer, 1999). Aux très faibles débits, l'écoulement de liquide est laminaire et l'énergie cinétique spécifique du liquide n'est pas suffisante pour vaincre les forces de tension superficielle localisées aux interfaces liquide-solide. Dans ces conditions, une certaine fraction de la surface des particules reste non mouillée : c'est le régime ruisselant à mouillage partiel. Lorsque le débit de liquide augmente suffisamment, la surface du solide devient complètement couverte de film liquide et le régime à mouillage partiel fait place au régime ruisselant à mouillage complet (Attou et Boyer, 1999). Quand les débits de gaz et/ou de liquide deviennent relativement élevés, un régime pulsé apparaît. Ce dernier est caractérisé par la succession de poches riches en gaz et de bouchons riches en liquide. Certains chercheurs attribuent l'apparition de ce régime comme

étant due à l'obstruction des canaux de passage à l'échelle du pore par un bouchon de liquide (Sicardi et Hofmann, 1980 ; Ng, 1986 dans Attou et Boyer, 1999). D'autres auteurs considèrent ce régime comme étant occasionnée par l'instabilité du film de liquide à l'échelle macroscopique (Grosser *et al.*, 1988 ; Holub *et al.*, 1993). Le bouchon de liquide contient des petites bulles de gaz et la poche gazeuse renferme des films de liquide à la surface des particules solides. Lorsque le bouchon traverse le réacteur vers le bas, il perd à sa partie aval du liquide qui décélère et vient alimenter le film recouvrant le solide (Attou et boyer, 1999). La vitesse moyenne du liquide dans le bouchon est donc supérieure à celle dans la poche gazeuse. La vitesse du bouchon est déterminée par la vitesse interstitielle du gaz tandis que la fréquence de passage des bouchons dépend de la vitesse superficielle du liquide en excès par rapport à la valeur critique caractérisant la transition (Blok et Drinkenburg, 1982 ; Christensen *et al.*, 1986 dans Attou et Boyer, 1999). Quand le débit de gaz devient très élevé et pour des débits de liquide relativement faibles, la force de cisaillement exercée par le gaz sur le liquide s'intensifie à un point tel que des gouttelettes sont arrachées de l'interface instable. Ainsi, une partie du liquide s'écoule sur la surface du garnissage sous forme de filets et de films et l'autre partie est entraînée par le gaz sous forme de gouttelettes : c'est le régime à brouillard. Au contraire, quand le débit de liquide est très élevé et pour des débits de gaz relativement faibles, l'énergie turbulente dans la phase continue liquide devient suffisante pour disperser le gaz sous forme de bulles légèrement allongées. Si le débit de gaz est légèrement augmenté, la forme des bulles devient fortement irrégulière (Attou et Boyer, 1999).

Diverses techniques ont été utilisées par les auteurs pour identifier et analyser les régimes d'écoulement et leurs transitions : les observations visuelles ou optiques, la méthode électroconductimétrique, la méthode thermoconductimétrique, les mesures de fluctuations de la perte de pression et de la moyenne de cette grandeur, la variation du coefficient de transfert de masse et les techniques tomographiques. Une description plus détaillée de ces méthodes est disponible dans la revue d'Attou et Boyer (1999). Plusieurs cartes permettent de déterminer les frontières des régimes d'écoulement dans une configuration « co-courant descendant ». Sahara et Nigam (1996) en font un résumé.

Ces frontières entre régimes peuvent être considérées dans le cas de procédés de lavage de gaz fonctionnant à co-courant qui restent très peu utilisés.

Pour le cas des procédés de lavage aux amines, où une configuration d'écoulement à contre-courant est privilégiée, nous ne pouvons utiliser ces cartes de régimes. La caractérisation des régimes d'écoulement dans ce cas se fait en considérant les courbes de perte de charge et celle de rétention. Ces paramètres feront l'objet du paragraphe suivant.

1.3.2 PRINCIPAUX PARAMÈTRES HYDRODYNAMIQUES ET DE TRANSFERT

1.3.2.1 La perte de charge :

Le gaz ayant à traverser le milieu très sinueux que constitue le garnissage, il subit une perte de pression proportionnelle à la hauteur de la colonne garnie. Pour un débit de liquide donné et à un faible débit gaz, la variation des pertes de pression est typiquement proportionnelle au carré de la vitesse du gaz. Si on augmente encore le débit de gaz, on observe un changement d'allure de la courbe donnant la perte de pression en fonction du débit de gaz. Cette discontinuité correspond à ce qu'on appelle le point de charge de la colonne (point A ou « loading point » sur la Figure 1.8). Quand on continue à augmenter le débit de gaz, la perte de pression augmente plus rapidement jusqu'à un deuxième point de discontinuité appelé point d'engorgement ou « flooding » en anglais (point C sur la Figure 1.8). Pour des valeurs de débit gazeux encore plus élevées, le liquide ne peut plus s'écouler normalement à travers le garnissage et la courbe prend une allure quasi-verticale ce qui correspond à l'engorgement de la colonne. Ce phénomène correspond à un régime à bulles où le liquide ne s'écoule plus ce qui engendre une augmentation drastique de la perte de charge ainsi que du taux de liquide piégé dans la colonne. L'excès de liquide qui en résulte peut donc entraîner le garnissage et engendrer la rupture des organes internes à la colonne par excès de poids.

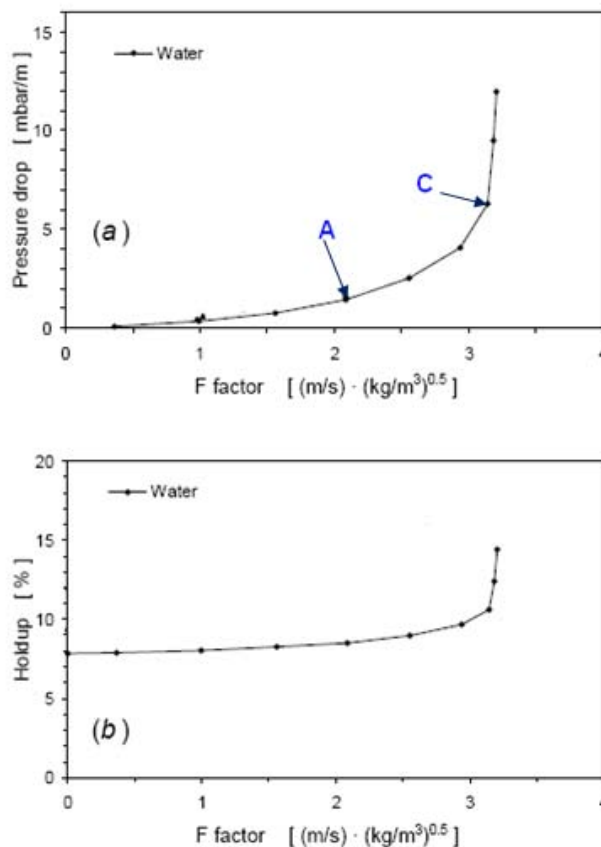


Figure 1.8 : courbes de perte de charge et de rétention à charge liquide constante : $32 m^3/m^2h$, garnissage : MellapakPlus, Brunazzi *et al.* (2002)

1.3.2.2 La rétention liquide :

La rétention liquide, h_L , est le volume de liquide contenu dans le garnissage par unité de volume de lit garni. La rétention liquide permet de remonter au temps de séjour, paramètre important à considérer dans des procédés associés à des cinétiques relativement lentes. Dans le cas du captage du CO_2 aux amines primaires caractérisé par une cinétique rapide, la rétention liquide intervient dans les modèles de perte de charge qui est critique pour le procédé et dans certains modèles de transfert de masse. La détermination de la masse de liquide retenue dans la colonne est aussi importante pour le dimensionnement de divers organes internes au procédé.

La rétention de liquide peut être exprimée de deux manières ; (i) la teneur totale en liquide définie comme le rapport entre le volume de liquide et le volume du lit de garnissages et (ii) la saturation de liquide définie comme le rapport entre le volume de liquide et le volume de l'espace vide accessible dans le garnissage. Cette dernière est la plus communément utilisée pour caractériser la teneur du lit de garnissage en liquide. On distingue deux types de rétentions liquides : la rétention statique et la rétention dynamique. La première est constituée de la part de liquide qui stagne dans le lit de garnissage par des effets de capillarité dans les espaces interstitiels les plus petits. Il s'agit d'endroits où des « ponts » de liquide peuvent se former, à savoir les contacts entre éléments de garnissage ou entre éléments de garnissage et paroi du réacteur. La rétention dynamique est constituée, quant à elle, par la part de liquide en mouvement dans le réacteur.

L'évolution de la rétention pour un débit de liquide donné est présentée sur la Figure 1.8 ; en dessous du point de charge, la rétention de liquide ne dépend pas du débit de gaz. Le point A marque le passage à la zone de charge où la rétention augmente avec le débit de gaz ; ceci est encore une fois dû à l'augmentation des interactions entre les deux phases dues aux forces de friction, d'autant plus importantes que le débit de gaz est élevé. Enfin l'engorgement correspond à une augmentation rapide de la perte de charge, tel que mentionné plus haut, accompagnée d'une augmentation de la rétention de liquide dans la colonne comme le montre la Figure 1.8.

1.3.2.3 Capacité d'une colonne :

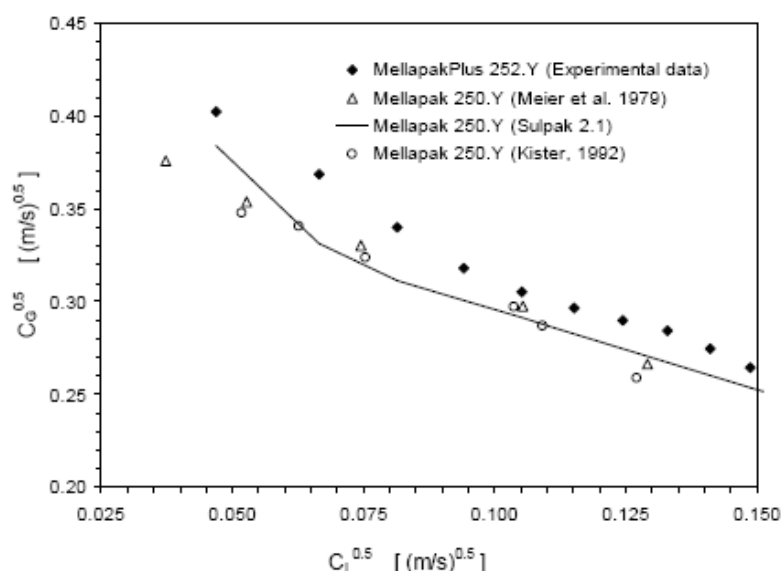


Figure 1.9 : diagramme de Wallis pour différents garnissages et études, Brunazzi *et al.* (2002)

Comme expliqué plus haut, la capacité d'une colonne est définie par rapport au point d'engorgement dans le lit de garnissage. A charge liquide constante, le point d'engorgement peut être déterminé de différentes manières (Brunazzi *et al.*, 2002) : (i) débit de gaz à partir duquel la pente de la courbe de charge tend vers l'infini (ii) débit de gaz à partir duquel l'efficacité tends vers zéro (iii) débit de gaz à partir duquel la rétention de liquide augmente d'un facteur 2 ou 3 (iv) débit de gaz à partir duquel l'engorgement est observé visuellement dans la colonne (v) débit de gaz à partir duquel la perte de charge atteint une valeur seuil (12 mbar/m chez Sulzer pour un garnissage structuré, par exemple). Une représentation courante de la capacité dans une colonne à garnissages consiste à tracer un diagramme de Wallis (Spiegel et Meier, 1994). Il est basé sur les facteurs de capacité gaz et liquide dont il relie les racines carrées via deux constantes empiriques, m et C comme suit : $\sqrt{C_G} + m\sqrt{C_L} = C$ où :

$$C_G = U_{GS} \times \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G}}$$

et

$$C_L = U_{LS} \times \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_L - \rho_G}}$$

Un exemple de diagramme de capacité est donné sur la Figure 1.9. Pour un garnissage donné et pour des conditions opératoires fixées (débit de fumées à traiter, débit de solvant), le facteur de capacité de gaz est un paramètre qui permet le calcul du diamètre de colonne. En règle générale, le diamètre de la colonne est déterminé de manière à se placer entre 50 et 80% du facteur de capacité de gaz à engorgement.

1.3.2.4 Aire effective d'échange

Le transfert de masse est directement proportionnel à l'aire effective d'échange (ou surface interfaciale) entre le gaz et le liquide qu'on dénote a_e (m^2/m^3). Dans les colonnes à garnissages, il s'agit de la surface développée par le liquide qui ruisselle le long du garnissage structuré et qui entre en contact avec le gaz. Cette surface est donc liée à la géométrie et à la nature du garnissage, mais aussi aux propriétés physiques des fluides. Quand le garnissage est arrosé, même s'il est uniformément distribué en amont (ce qui ne peut être le cas à l'échelle industrielle pour laquelle les distributeurs ne comptent en général qu'une centaine de points d'injection /m²), le liquide ne mouille pas toute la surface offerte par le garnissage. La surface volumique mouillée reste généralement inférieure à l'aire spécifique géométrique du garnissage a_g (m^2/m^3) dans le cas des garnissages structurés, mais elle peut dépasser l'aire géométrique dans le cas d'un garnissage vrac. La surface volumique effectivement utilisée pour le transfert de matière est donc la surface mouillée par le film liquide : on parle d'un régime à mouillage partiel obtenu pour des débits de liquide et de gaz modérés. Plusieurs études ont pu mettre en exergue des aspects qualitatifs et quantitatifs du mouillage dans différents types de garnissages. Le taux de mouillage qu'on dénote f_e est défini comme le rapport entre la surface effective d'échange a_e et la surface spécifique géométrique a_g . Les mesures de taux de mouillage (appelé aussi « efficacité de mouillage ») disponibles dans la littérature sont pour la plupart basées sur des méthodes de traçage de la phase liquide ou des méthodes chimique. Une synthèse des différentes méthodes expérimentales de mesure de taux de mouillage est disponible dans les travaux de thèse de Baussaron (2005) pour ce qui relève des lits fixes à particules solides. Olujic *et al.* (1999) suggèrent que, pour des garnissages structurés, une augmentation du débit de liquide et une diminution de la tension de surface de ce dernier favorise une meilleure efficacité de mouillage. Baussaron (2005) suggère également une augmentation linéaire du taux de mouillage (avec une légère pente) avec le débit de liquide, ce pour un lit de sphères de différents matériaux et différents liquides. Weimer et Schaber (1997) (dans Olujic *et al.*, 1999) mesurent des taux de

mouillages proches de 1 à des débits de liquide relativement faibles (15 à 30m³/m²h) pour des garnissages structurés de type Mellapak 250.Y. Un résultat similaire est reporté dans les travaux de Tsai *et al.* (2011) pour des garnissages de type Mellapak 250.X et Mellapak 250.Y.

Des divergences dans les résultats propres à l'effet du débit de gaz sur le taux de mouillage dans des garnissages ou des lits fixes de sphères sont relevées dans la littérature. Pour des lits fixes Lappalainen *et al.*(2008) en font un résumé. L'affinité entre le liquide et le solide (qui s'exprime via un angle de contact liquide-solide) formant le solide apparaît également comme un facteur clé de l'efficacité de mouillage et a été exploré dans les travaux de Baussaron (2005) pour des lits fixes. Pour des faibles débits de liquide cette affinité semble contrôler le mouillage contrairement aux forts débits.

1.3.2.5 Les coefficients de transfert de matière

Le transfert de matière est un paramètre très important dans le dimensionnement des contacteurs à garnissages. Il subit l'influence de nombreux effets comme l'hydrodynamique des phases, l'équilibre thermodynamique des espèces chimiques à l'interface, la cinétique des réactions chimiques et aussi la géométrie du garnissage. Pour modéliser le transfert de matière, des coefficients locaux de transfert de matière k_L en phase liquide et k_G en phase gazeuse sont généralement définis. Ces deux coefficients représentent le rapport entre le flux de transfert de matière et une force motrice caractéristique qui peut être, un gradient de concentration ou de pression. Plusieurs modèles dans la littérature permettent de calculer les coefficients de transfert de masse en se basant sur différentes théories. Le modèle le plus utilisé est celui du "double film" (Lewis et Whitman, 1924). Il consiste à supposer que la résistance au transfert est localisée dans deux films d'épaisseurs δ_G et δ_L placés en série de part et d'autre de l'interface où l'on postule l'équilibre thermodynamique. Dans chacun de ces films, on suppose que l'écoulement est laminaire et que le transfert de matière est gouverné par la diffusion moléculaire unidirectionnelle stationnaire. Ainsi les coefficients de transfert sont donnés directement par le rapport entre la diffusivité moléculaire de l'espèce transférée et l'épaisseur des films de transfert respectivement coté gaz et coté liquide. D'autres modèles sont également utilisés pour prédire les coefficients de transfert cotés gaz et liquide. Les plus connus sont le "modèle de pénétration" (Higbie, 1935) et le "modèle de renouvellement de l'interface" (Danckwerts, 1970). Si on note D_{mol} la diffusivité moléculaire de l'espèce transférée, les deux derniers modèles prédisent une dépendance des coefficients de transfert en $D_{mol}^{0.5}$. On peut trouver dans la littérature d'autres notions pour caractériser le transfert dans les contacteurs à garnissage structuré. On parle alors de Hauteur et Nombre d'Unités de Transfert (HUT (ou HETP en anglais) et NUT) rapportée à une phase (Billet, 1995). La colonne est en fait assimilée à un empilement d'étages unitaires de hauteur HUT où une unité de transfert correspond à une opération fictive considérée comme unitaire et caractérise un appareil donné. La hauteur de l'unité de transfert est d'autant plus grande que le transfert est faible, c'est-à-dire que les coefficients de transfert et l'aire interfaciale sont plus petits. Pour une description complète du transfert de masse réactif appliqué aux colonnes garnies, le lecteur est renvoyé aux ouvrages de référence Danckwerts (1970) ou Billet (1995).

Pour un débit de gaz à traiter et une pureté souhaitée en tête de colonne, les paramètres de transfert de masse réactif permettent de définir le débit de solvant nécessaire pour l'opération ainsi que la hauteur minimale de la colonne.

1.3.2.6 Choix d'un garnissage

Le choix d'un garnissage se fait en règle générale sur la base d'un compromis capacité/efficacité. L'objectif est de réduire le coût de la colonne installée; ainsi selon que le cas d'application est à forte pression ou au contraire à pression atmosphérique, on privilégiera le diamètre ou la

hauteur. La caractérisation de la capacité et de l'efficacité d'un garnissage passe par la détermination des paramètres hydrodynamiques et de transfert présentés plus haut dans ce chapitre. La capacité est donnée essentiellement par l'étude de la perte de charge dans le lit de garnissage : un garnissage plus « capacitif » est un garnissage qui génère moins de perte de charge et permet de ce fait de traiter des débits plus importants. L'efficacité est couramment exprimée en termes de HETP ou « hauteur d'étage théorique de transfert » (Olujic *et al.*, 1999), grandeur dépendant à la fois de l'aire effective d'échange entre phases et des coefficients de transfert de matière dans les phases liquide et gaz tel que décrit dans le paragraphe précédent. Pour le procédé particulier de captage de CO₂ aux amines, Raynal *et al.* (2012) montrent que l'impact des coefficients de transfert cotés gaz et liquide sur l'efficacité de séparation est moindre par rapport à celui de l'aire effective d'échange entre phases. L'efficacité de séparation est d'autant plus grande que l'aire effective d'échange entre phases est importante. Ainsi, pour un solvant donné et donc une cinétique donnée, le choix d'un garnissage pour une application de captage de CO₂ aux amines se fait dans un premier temps en considérant essentiellement, la capacité de celui-ci et l'aire effective d'échange qui lui est inhérente dans les conditions de fonctionnement requises. L'aire spécifique géométrique du garnissage est souvent donnée par le constructeur. Cependant, il n'est pas approprié de comparer les efficacités de deux garnissages différents en considérant seulement l'aire géométrique en particulier si l'on compare des garnissages vrac et structurés entre eux. Le choix d'un garnissage passe effectivement par la prise en compte de tous les paramètres hydrodynamiques et de transfert : perte de charge, aire d'échange effective, et coefficients de transfert ainsi que des contraintes relatives au coût du garnissage.

Dans le cadre de ce travail, nous portons notre attention sur deux garnissages de troisième génération identifiés lors de travaux antérieurs à IFPEN comme potentiellement intéressants pour les opérations de captage de CO₂ aux amines car permettent un bon compromis efficacité/capacité ; le garnissage structuré M250.X commercialisé par Sulzer et le garnissage vrac IMTP-40 commercialisé par Koch-Glitsch (leurs caractéristiques seront données dans le chapitre 3).

1.3.3 NOMBRES ADIMENSIONNELS

La caractérisation de l'écoulement fait intervenir des paramètres physiques indépendants relatifs aux dimensions de la colonne, aux caractéristiques du garnissage utilisé et aux propriétés et débits des phases en jeu. Les paramètres physiques en question sont, en l'occurrence, au nombre de 12 ; les masses volumiques des fluides ρ_L et ρ_G , les viscosités dynamiques μ_L et μ_G , la tension de surface entre le liquide et le gaz σ , l'accélération de la gravité g , le diamètre D de la colonne, la hauteur Z du lit de garnissages, la porosité ε du lit, la surface géométrique spécifique a_g du garnissage, les vitesses superficielles des phases gaz et liquide U_{LS} et U_{GS} ainsi que les rétentions de gaz et de liquide h_G et h_L . En considérant les trois dimensions du problème (longueur, temps et masse), on propose les neuf nombres adimensionnels indépendants suivants :

- Nombres de Reynolds du liquide : $Re_L = \frac{4 \times U_{LS}}{a_g \times \nu_L}$ avec $\nu_L = \frac{\mu_L}{\rho_L}$
- Nombres de Reynolds du gaz: $Re_G = \frac{d_h \times U_{GS}}{\nu_G \times h_G}$ avec $\nu_G = \frac{\mu_G}{\rho_G}$ et $d_h = 4 \varepsilon / a_g$ (Stichlmair *et al.*, 1989).

- Nombre de Froude du liquide : $Fr_L = \frac{U_L^2}{g \times e}$ avec $U_L = \frac{U_{LS}}{h_L}$
- Nombre de Weber du liquide : $We_L = \frac{\rho_L \times U_L^2 \times d_h}{\sigma}$.
- $\frac{\rho_L}{\rho_G}$ et $\frac{\mu_L}{\mu_G}$
- $\frac{D}{Z}$ et $\frac{D}{d_h}$
- La porosité: ε

Le nombre de Reynolds du liquide retenu dans le cadre de cette étude est celui proposé par Alix et Raynal (2008); il est basé sur un diamètre hydraulique du liquide égal à l'épaisseur d'un film ruisselant et complètement mouillant de la surface du garnissage, ce qui permet de retrouver la théorie du film de Nusselt. En effet dans cette configuration, valable tel que expliqué plus haut dans des conditions de débits modérés de gaz et de liquide, la rétention de liquide s'écrit : $h_L = e a_g$ où e représente l'épaisseur du film et a_g la surface géométrique spécifique du garnissage. Etant donné que la vitesse superficielle U_{LS} du liquide est donnée par la vitesse du liquide dans le film par : $U_{LS} = h_L U_L$, le nombre de Reynolds proposé correspond à un nombre de Reynolds de film liquide. L'épaisseur d'un film liquide laminaire ruisselant sur un plan vertical peut être donnée de manière analytique et s'exprime en fonction des de la vitesse superficielle de liquide, des propriétés physiques du liquide et des caractéristique géométriques du garnissage de la manière

$$\text{suivante : } e = \left(\frac{3 \times U_{LS} \times \nu_L}{g \times a_g} \right)^{\frac{1}{3}} \text{ (Nusselt, 1916).}$$

Le nombre de Reynolds de gaz est calculé, quant à lui, en considérant la vitesse superficielle de gaz et un diamètre hydraulique qui correspond à la taille d'un pore si on assimile le garnissage à un milieu poreux. Dans le cas d'un lit de sphères, une expression de ce diamètre hydraulique est la suivante : $d_h = 4 \varepsilon / a_g$ (Stichlmair *et al.*, 1989). Nous utilisons cette estimation du diamètre hydraulique par extension aux garnissages vrac et structurés. A titre d'exemple, nous calculons dans le cas du garnissage structuré Mellapak 250.X, dénommé M250.X dans la suite, un diamètre d_h de 1.6 cm ce qui est du même ordre de grandeur que la taille d'un canal formé par deux plaques de garnissage adjacentes.

Nous définissons également, tel que présenté ci-dessus, un nombre de Froude de liquide calculé dans le film de liquide; il permet de comparer l'effet de la gravité aux effets inertiels dans le film. Le nombre de Weber est quant à lui calculé en considérant la taille d'un pore, échelle à laquelle les effets capillaires se manifestent.

Le problème d'un écoulement gaz-liquide dans un garnissage est également décrit en introduisant les deux rapports de forme D/Z (diamètre du lit de garnissage/hauteur du lit de garnissage) et D/d_h (diamètre du lit de garnissage/taille d'un pore). Le dernier nombre adimensionnel considéré est la porosité du garnissage. Ce paramètre est maintenu constant dans le cadre de notre étude car on s'intéresse à des garnissages vrac (IMTP-40) et structuré (M250.X) ayant la même porosité.

1.4 MODÈLES UNIDIMENSIONNELS DE DESCRIPTION DE L'HYDRODYNAMIQUE DANS LES COLONNES À GARNISSAGES

Dans ce paragraphe nous présentons une revue d'un ensemble de travaux de référence donnant lieu à des modèles monodimensionnels de perte de charge et de rétention de liquide dans des lits de garnissages. Les modèles proposés sont de natures empiriques, semi-empiriques (faisant intervenir des paramètres calés empiriquement) ou phénoménologiques. Le point commun entre ces travaux est l'approche homogène adoptée qui consiste à considérer un écoulement homogène dans les garnissages à l'échelle d'une section. Nous nous réfèrerons à certains de ces travaux tout au long de ce manuscrit afin d'une part de comparer nos résultats expérimentaux (rétention et perte de charge) et d'autre part de modéliser les différents phénomènes physiques intervenant à des échelles locales en vue de simulation de l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage. Le Tableau 1.3 présente un résumé non exhaustif de différents travaux de caractérisation des écoulements dans des garnissages (ou lit fixes de sphères) dans lesquels des corrélations ou des modèles de perte de charge ou/et de rétention sont proposés. Dans le cas d'acquisition de mesures, les méthodes expérimentales de mesure sont présentées ainsi que les gammes de débits opératoires, les fluides et les garnissages considérés. Nous décrivons dans la dernière colonne du tableau les différentes approches retenues pour modéliser la perte de charge et la rétention.

Tableau 1.3 : Résumé non exhaustif des différentes approches de modélisation 1D des écoulements dans des garnissages

Référence	type d'approche	grandeurs mesurées/modélisées	Méthode de mesure	Remarques
Stichlmair <i>et al.</i> (1988)	phénoménologique (perte de charge) Empirique (rétention)	Perte de pression + Rétention de liquide en dessous du « loading point », entre le « loading point » et le « flooding » + estimation de la perte de charge au point d'engorgement	Données recueillies de la littérature	<ul style="list-style-type: none"> - La perte de charge dans le lit sec est obtenue en assimilant le lit de garnissages à un lit fixe de particules de dimension d_p. - Un modèle phénoménologique de perte de charge est établi sur la base d'un bilan des forces s'exerçant sur une particule de garnissage. - Le facteur de friction dans le lit de garnissages est déterminé sur la base du modèle de Richardson et Zaki (1954) pour un lit fluidisé sec. La même méthode est utilisée pour calculer le facteur de friction dans le lit irrigué en tenant compte de la rétention. - Des modèles empiriques de rétention sont proposés sur la base de données expérimentales de la littérature pour différents types de garnissages et différents régimes d'écoulement. - Les modèles proposés sont valables pour des garnissages structurés et « vrac ». - Mesures sur colonne de 0.15 m de diamètre, lit de longueur 1.5 m.
Suess et Spiegel (1991)	empirique	Rétention de liquide en dessous du « loading point »	Absorptiométrie par rayons Gamma	<ul style="list-style-type: none"> - Essais réalisés sur une colonne de diamètre 1 m et un lit de garnissages de hauteur 3.5 m fonctionnant à contre-courant. - Système air/liquide avec des viscosités de liquide variant de 6 à 30 cp. - Corrélation valable en dessous du « point de charge ». - Garnissages structurés (Mellapak 250X, 250Y et 500 Y).

Spiegel et Meier (1992)	empirique	Perte de charge		<ul style="list-style-type: none"> - Garnissages structurés (Mellapak 125X, 250X, 250Y et 500 Y). - Système air/eau à une température $T = 30 \text{ °C}$ à la pression atmosphérique. - Corrélations développées pour trois régimes : en dessus et au-dessus du « point de charge ». - Le modèle est précis ($\pm 20\%$) pour des débits de liquides inférieurs ou égaux à $100 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$.
Billet et Schultes (1991)	Semi-empirique (perte de charge) expérimentale (rétention)	Perte de charge + Rétention de liquide en dessous du « loading point »		<ul style="list-style-type: none"> - La perte de charge dans le lit sec est obtenue en exprimant l'équilibre entre les forces de pression et les forces de cisaillement dans le gaz. - La même approche pour déterminer un modèle de perte de charge dans le lit irrigué en considérant un facteur de mouillabilité (les gradients de pression dans le gaz et dans le liquide sont supposés égaux). - Des modèles empiriques de rétention sont proposés. - Les mesures expérimentales sont faites sur des colonnes de diamètre compris entre 0.15 et 0.8 m munis de lits de garnissages de hauteur comprise entre 0.76 et 3.95 m. - Garnissages en vrac. - Fonctionnement à contre-courant.
Alix et Raynal (2008) + Sidi-Boumedine et Raynal (2005)	empirique	Rétention de liquide en monophasique (en dessous du « loading point »)	Tomographie Gamma	<ul style="list-style-type: none"> - Deux modèles empiriques de rétention sont proposés pour un lit de garnissages structuré et un lit de garnissages « en vrac ». - Des mesures de rétention par tomographie en monophasique sont effectuées pour deux liquides de viscosités 1 et 2 cp sur une colonne de 0.4 m de diamètre. - Le débit de liquide varié entre 4 et $160 \text{ m}^3\text{m}^{-2}\text{h}^{-1}$ dans écoulement de gaz. - Les deux modèles sont comparés à d'autres modèles de la littérature ainsi qu'au modèle monodimensionnel de film laminaire tombant.

<p>Saez et Carbonell (1985)</p> <p>Approches similaires :</p> <p>Lakota <i>et al.</i> (2002)</p> <p>Atta <i>et al.</i> (2007)</p>	<p>Semi-empirique (perte de charge)</p> <p>Empirique (perméabilité relative)</p>	<p>Perte de charge</p>	<p>Données recueillies de la littérature</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Le modèle se base sur une loi de Darcy modifiée qui introduit une perméabilité relative. - Le modèle relie la perméabilité relative à la saturation de chaque phase selon une loi puissance. - Le modèle assimile le lit à un milieu poreux isotrope ayant une porosité uniforme et est valable dans un régime de faibles interactions gaz liquide.
<p>Iliuta <i>et al.</i> (2004)</p> <p>Approches similaires :</p> <p>Holub <i>et al.</i> (1992)</p> <p>Attou <i>et al.</i> (1999)</p> <p>Iliuta et Larachi (2001)</p>	<p>Phénoménologique</p>	<p>Perte de charge</p> <p>+</p> <p>rétention</p>	<p>Données recueillies de la littérature</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Un modèle phénoménologique de perte de charge dans un lit de garnissages structurés en diphasique à contre-courant est proposé. Le modèle est valable en régime de faible interaction gaz-liquide. - Une géométrie élémentaire représentative du garnissage est considérée afin de tenir compte du mouillage partiel : deux fentes parallèles, une sèche et une mouillée. - Des lois de changement d'échelle permettent de passer à l'échelle du lit de garnissage. - Une loi d'Ergun modifiée est proposée pour le calcul des frottements gaz-solide et liquide-solide. - L'interaction entre gaz et liquide est prise en compte.

1.5 ÉTUDE DE LA DISTRIBUTION DE LIQUIDE DANS LES GARNISSAGES: ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL

Un grand nombre de travaux de référence que l'on peut trouver dans la littérature se sont penchés sur la caractérisation des écoulements dans des garnissages de diverses générations par des approches homogènes, c'est à dire où les phases sont supposées réparties de manière homogène dans une section du lit garni. D'un point de vue hydrodynamique, la perte de charge et la rétention liquide sont les grandeurs à déterminer en vue de développement de règles de design et d'extrapolation à l'échelle industrielle. A cette dernière échelle, les écoulements ne sont pas parfaitement homogènes et peuvent donner lieu à des maldistributions même en partant de distributions aussi homogènes que possible en tête de colonne. L'effet limitant des maldistributions de phase sur les performances de la colonne en termes de séparation (réduction de l'aire d'échange entre phases) et de perte de charge (augmentation de celle-ci) a été souligné dans plusieurs travaux dont ceux de Hoek *et al.* (1987) et Olujic *et al.* (2006). Cet effet pénalisant des maldistributions en termes de performance est plus important dans la phase liquide que dans la phase gaz, celle-ci ayant tendance à se redistribuer de manière homogène dans le lit de garnissage même en cas de maldistributions initiales sévères et reste peu assujettie à la géométrie du garnissage (Mohamed Ali *et al.*, 2003); en effet le gaz doit assurer une homogénéité de la perte de charge dans la colonne. Du point de vue industriel, une alternative souvent retenue afin de limiter l'apparition de maldistributions est de limiter la hauteur des lits garnis de liquide et de munir la colonne de collecteurs et redistributeurs afin de redistribuer le liquide à différents niveaux de la colonne. Des règles empiriques existent par ailleurs pour déterminer les intervalles de disposition des collecteurs et redistributeurs. Hoek *et al.* (1986) suggèrent une distance entre collecteurs et redistributeurs qui équivaut à 10~20 étages théoriques de transfert. Cependant, force est de constater que ces règles de design restent essentiellement empiriques et limitées à un distributeur de liquide et un garnissage donnés ce qui nécessite une étude approfondie et quantitative de la distribution de la phase liquide en vue de sa modélisation.

Plusieurs études expérimentales se sont intéressées à la distribution de la phase liquide dans les garnissages et plusieurs d'entre elles ont cherché à caractériser la dispersion de liquide en partant d'une alimentation sous forme de jet central en tête de lit. La méthode consiste à disposer de collecteurs concentriques de liquide en bas du lit de garnissage et à mesurer ainsi le débit de liquide recueilli par chaque collecteur. Une telle méthode permet ainsi de remonter à un profil radial de débit de liquide sur une section donnée de la colonne garnie. Cette méthode a été essentiellement appliquée à des lits fixes de sphères ainsi qu'à des garnissages vrac de première génération. Lespinasse, en 1962 a été le premier à s'intéresser à des mesures hydrodynamiques locales dans une colonne à garnissage en utilisant la technique citée ci-dessus. Il a ainsi pu montrer que la distribution du liquide à l'intérieur d'un lit fixe n'était pas uniforme et a suggéré l'existence de chemins préférentiels notamment pour le liquide.

Porter et Jones (1963) ainsi que Onda *et al.* (1972) ont ensuite conduit des mesures de distribution de liquide en partant d'une injection centrale sur des garnissages de type selles de Berl et anneaux de Raschig. Les derniers ont pu tester différents débits de liquide, tailles d'éléments de garnissages et tensions de surface du liquide. Bemer et Zuiderweg (1978) ont adopté une approche expérimentale similaire afin de caractériser la dispersion ainsi que la distribution de liquide sur des garnissages de types anneaux de Raschig en verre ou revêtus de téflon. Hoek *et al.* (1986) ont également effectué des mesures de dispersion/distribution de liquide sur des garnissages vrac de type anneaux de Pall, anneaux de Raschig et selles de Berl. Les études citées ci-dessus ont été restreintes, cependant, à des écoulements avec faible débit de gaz voire sans débit de gaz. Des mesures de distributions de liquide dans des garnissages

structurés ont été également initiées assez tôt. Hoek *et al.* (1986) ont étudié la dispersion/distribution de liquide en partant d'une alimentation sous forme de jet de liquide, également en l'absence d'écoulement de gaz, dans des garnissages Plastic BX ainsi que dans des garnissages de type Mellapak 500-Y. Les études citées ci-dessus ont été parmi les premières à analyser la dispersion de liquide dans des garnissages ainsi qu'à proposer des descriptions de ce phénomène via des modèles sur lesquels on s'attardera plus loin. Des recherches beaucoup plus récentes se sont également penchées sur l'étude de la distribution de liquide dans des garnissages vrac et structurés modernes grâce à des méthodes non intrusives telle que la tomographie à rayons X ou gamma. La tomographie à rayons X a été très tôt utilisée afin de mesurer des taux de vides et des fractions volumiques de liquide dans des écoulements gaz liquide, ou de caractériser les écoulements gaz solides dans des lits fluidisés etc (Toye, 1996). Pour des mesures de distribution de phases dans des lits fixes, Lutran *et al.* (1991) ont utilisé un scanner à rayons X médical permettant de travailler sur des colonnes de faibles tailles (quelques dizaines de centimètres). Toye (1996) a pu mettre en œuvre au cours de ses travaux de thèse à l'Université de Liège une technique de tomographie à rayon X afin de caractériser l'écoulement de liquide au cœur d'un lit de garnissage vrac de types Etapak 210 (Mass Transfer International, U.K.) et Cascade Mini-Ring 1A (Glitsch, Benelux). L'auteur a pu établir des cartes de rétention locale de liquide à plusieurs profondeurs de la colonne et a pu mettre en évidence via la superposition de ces cartes avec les cartes de distribution de solide, une corrélation très étroite entre la distribution des éléments d'empilage et la distribution du liquide. Yin *et al.* (2001) ont, quant à eux, utilisé la tomographie Gamma et ont reporté la distribution locale de rétention de liquide dans un lit de garnissages vrac de type Pall rings. Ils sont arrivés également à la conclusion que la distribution de liquide n'est pas homogène sur une section de lit et dépend fortement de la géométrie du distributeur en tête de colonne. Peu de travaux, en revanche, proposent des études locales de distribution de liquide dans des garnissages structurés de dernière génération. Olujic *et al.* (2006) ont effectué des mesures de distribution de liquide en utilisant des collecteurs en bas de lit pour des garnissages structurés de type Montz Pack B1-250M et Montz Pack B1-250 et ce pour des régimes d'écoulement à contre-courant en dessous et au-dessus du point de charge ainsi que dans des conditions proches de l'engorgement. Toye *et al.* (2005) ont pour leur part montré la faisabilité de la caractérisation de la distribution locale de liquide dans un garnissage structuré de type KATAPACK-SP 12 en utilisant la tomographie à rayons X. Enfin, Sidi-Boumedine et Raynal (2005) puis Alix et Raynal (2008) ont utilisé la méthode de tomographie Gamma afin de mesurer la distribution de la phase liquide dans des garnissages structurés de type Mellapak et ont mis en évidence des hétérogénéités locales même pour les distributions de liquide les plus homogènes.

Les méthodes de caractérisation de distribution de liquide dont plusieurs exemples sont cités dans les travaux ci-dessus offrent la possibilité, pour un garnissage donné, d'explorer la distribution de liquide à des échelles locales. Ces outils fournissent des données quantitatives qui peuvent être exploitées afin de déterminer des modèles prédictifs de la dispersion de liquide qui, une fois pris en compte dans le dimensionnement des colonnes, peuvent optimiser les tailles de celles-ci. C'est dans cette démarche que s'inscrivent les travaux de cette thèse où l'on s'intéresse tout particulièrement à la distribution de la phase liquide d'un écoulement gaz-liquide dans des garnissages.

1.6 APPROCHES NUMÉRIQUES DE MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS GAZ-LIQUIDE DANS DES GARNISSAGES

La modélisation numérique à l'échelle locale des réacteurs est devenue de plus en plus courante dans le génie chimique de par son potentiel grandissant à prédire la structure des écoulements à des échelles difficilement accessibles par les méthodes expérimentales souvent aussi très coûteuses. Dans le cas des colonnes à garnissages, ce recourt à des modélisations à des échelles

locales se justifie par la grande complexité de la géométrie inhérente à ce type de réacteurs, laquelle géométrie fait intervenir un grand nombre d'échelles caractéristiques. La modélisation numérique des écoulements dans les garnissages fait intervenir des phénomènes physiques pouvant avoir lieu à des échelles diverses et fortement couplées; échelle microscopique, échelle mésoscopique et échelle macroscopique. A ce titre, les approches numériques multi-échelles sont de plus en plus utilisées.

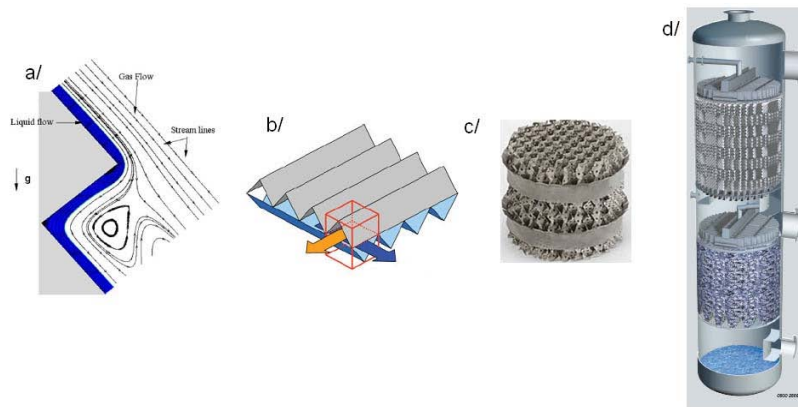


Figure 1.10 : Différentes échelles de simulation

a/ film de liquide cisailé par un gaz (thèse de Haroun, 2008), b/ échelle de la cellule élémentaire représentative d'un garnissage structuré (Mahr et Mewes, 2008), c/ échelle d'un bloc de garnissage, d/ échelle d'une colonne (Sulzer Chemtech)

L'intérêt concret de ces approches ³ consiste d'une part à observer l'écoulement gaz-liquide aux différentes échelles évoquées plus haut et d'autre part, dans un contexte industriel, à modéliser des colonnes d'absorption gaz-liquide à garnissage tout en tenant compte de la physique qui régit localement l'écoulement. Le but ultime est donc de parvenir à simuler une colonne à l'échelle industrielle afin de pouvoir en optimiser le design.

Si on considère le cas de garnissages structurés ou vrac, les échelles rentrant en jeu dans la modélisation des colonnes industrielles peuvent aller de quelques dizaines de mètres (hauteur de colonne) à quelques centimètres (taille caractéristique d'un canal formé par la juxtaposition de deux plaques de garnissage dans le cas d'un garnissage structuré par exemple) voire à quelques dixièmes de millimètres (épaisseur de film ruisselant). Raynal et Royon-Lebeaud (2007) proposent une stratégie de modélisation multi-échelles où la connaissance de l'écoulement aux petites échelles permet d'alimenter un modèle de l'écoulement à l'échelle d'une colonne. Cette démarche est illustrée sur la Figure 1.11 où les auteurs mettent en évidence les informations échangées entre chaque type de simulations. Dans la suite de ce paragraphe nous nous attardons sur les différentes échelles de simulation ainsi que sur les informations que l'on tire de chacune.

³ Sulzer Chemtech : <http://www.sulzer.com/>

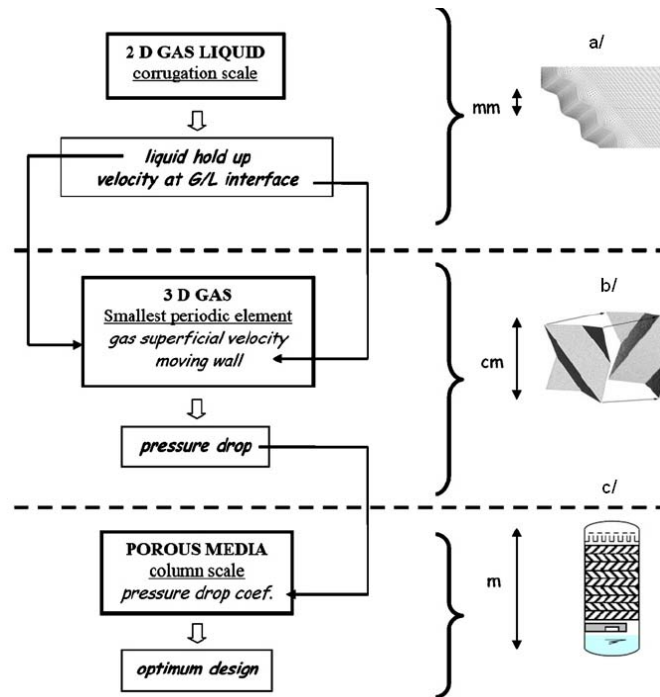


Figure 1.11 : stratégie de simulation multi-échelles de l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage structuré : a/ simulation d'un film liquide sur une paroi corruguée par la méthode VOF, b/ simulation de l'écoulement gaz-liquide dans un élément périodique du garnissage, c/ simulation de l'écoulement de gaz dans une colonne à garnissage en assimilant ce dernier à un milieu poreux, Raynal et Royon-Lebeaud (2007)

- Echelle microscopique

La Figure 1.10 montre trois échelles couramment utilisées afin de modéliser les écoulements dans les garnissages : l'échelle microscopique (a), l'échelle mésoscopique (b) et l'échelle macroscopique (d).

En effet, si l'on assimile un garnissage à un milieu poreux où les phases peuvent évoluer dans l'espace interstitiel du garnissage, la première échelle que l'on peut considérer est d'ordre microscopique. Une modélisation numérique à cette échelle consiste à simuler l'écoulement (et éventuellement les transferts de masse) dans un nombre très limité de pores formés par l'empilement aléatoire d'éléments de garnissage dans le cas d'un garnissage vrac où par la juxtaposition de deux plaques de garnissage dans le cas d'un structuré. La Figure 1.10-a montre ainsi un exemple de simulation numérique à cette échelle où un film liquide ruisselant sur la paroi d'un garnissage structuré ondulé et cisailé par un gaz à co-courant est modélisé (thèse de Haroun, 2008, Haroun *et al.*, 2010). Plusieurs approches numériques peuvent être utilisées afin de simuler l'écoulement à cette échelle. Étant donné que l'espace de calcul est très restreint, une discrétisation explicite de l'espace vide inter-granulaire est possible et les méthodes de simulation directe de suivi de l'interface s'avèrent adaptées. La méthode la plus couramment utilisée dans les simulations directes dans des garnissages est la méthode de type Eulérienne « Volume-Of-Fluid ». Elle consiste à résoudre un unique système d'équations de Navier-Stokes dont les propriétés des fluides (densité et viscosité) sont calculées en fonction des fractions volumiques de chaque phase présente dans une cellule. Le champ de vitesse qui en résulte est ensuite utilisé afin de transporter un scalaire qui représente le taux de présence d'une des deux phases ce qui permet d'en calculer la fraction volumique. La position de l'interface entre phases peut ainsi être déterminée. Pour plus de détails sur la méthode VOF ainsi que ses variantes (avec

ou sans reconstruction d'interface), nous renvoyons le lecteur aux thèses de Haroun (2008) et celle de Horgue (2012) ainsi qu'aux articles de référence de Hirt et Nichols (1981) et Bonometti et Magnaudet (2007).

Plusieurs études font référence à la simulation directe de suivi d'interface à l'échelle microscopique de garnissages. Raynal et al. (2004) puis Raynal et Royon-Lebeaud (2007) ont effectué des simulations bi-dimensionnelles d'un écoulement gaz-liquide le long d'un plan corrugué similaire à la surface d'un garnissage structuré en utilisant la méthode VOF, sans puis avec prise en compte des corrugations au niveau de la paroi. Haroun *et al.* (2010) ont utilisé la même méthode afin de simuler en plus de l'écoulement, le transfert de masse réactif entre un film ruisselant sur la surface d'un garnissage corrugué et un gaz qui le cisaille à co-courant. Via des calculs tri-dimensionnels, Ataki et Bart (2006) se sont intéressés au mouillage dans un élément de garnissage structuré et ont obtenu une surface mouillée simulée qui était en bon accord avec les mesures expérimentales. Si on s'intéresse à l'hydrodynamique de l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage à l'échelle microscopique, les simulations décrites plus haut permettent de déterminer l'épaisseur de film liquide et donc la rétention de liquide ainsi que la vitesse de cisaillement gaz-liquide. Ces informations, et en particulier la rétention de liquide, sont essentielles pour le design des colonnes industrielles mais ne peuvent être représentative de l'hydrodynamique à grande échelle notamment en termes de perte de charge.

- Echelle mésoscopique

En milieux poreux, on parle d'échelle mésoscopique afin de décrire l'échelle d'une cellule élémentaire représentative. Dans un lit fixe de particules, cette échelle peut s'étendre à un nombre qui reste dénombrable de particules. Dans un garnissage vrac, une représentation possible de celle-ci consiste à considérer un nombre fini d'éléments de garnissage. En garnissage structuré, la Figure 1.10-b montre un exemple de Volume Élémentaire Représentatif au sens de la géométrie du milieu (V.E.R, ou REU Representative Elementary Unit) obtenu en considérant le plus petit élément périodique formant le garnissage. Plusieurs approches numériques permettent de simuler l'écoulement dans un V.E.R. La simulation directe, dont les applications restent réservées à des configurations d'écoulement relativement simples, est difficilement applicable à ce jour à la simulation d'écoulements diphasiques à cette méso-échelle. Des approches de type RANS sont donc le plus souvent utilisées pour simuler des écoulements monophasiques pouvant être turbulents dans des géométries élémentaires de ce type. Le choix d'un volume élémentaire qui soit représentatif du garnissage au sens de la géométrie a été discuté dans plusieurs travaux de la littérature. Petre *et al.* (2003) distinguent 5 V.E.R correspondant à différentes zones d'un garnissage structuré: (i) une zone d'entrée, (ii) une zone de sortie, (iii) une zone de croisement entre canaux (criss-crossing element), (iv) une zone adjacente à la paroi de la colonne, (v) zone de jonction entre deux blocs de garnissages. Les auteurs utilisent le modèle RNG afin de simuler l'écoulement turbulent de gaz dans ces différents volumes élémentaires. Ils calculent ainsi une perte de charge qui résulte de la somme des dissipations d'énergie dans chacune des zones décrites plus haut. Ils arrivent à la conclusion que l'essentiel de la perte de charge se fait au niveau du croisement entre les plaques de garnissages. L'élément représentatif de cette zone considéré par les auteurs est formé de deux canaux de section triangulaire inclinés d'un certain angle (angle de corrugation) par rapport à l'horizontale et disposé l'un contre l'autre avec un angle de 90°. Ce V.E.R est repris par Raynal *et al.* (2004) afin de déterminer la perte de charge en gaz seul dans un garnissage structuré. Les auteurs montrent que la perte de charge dans ce type de géométrie subit fortement l'influence des conditions limites en entrée et sortie du domaine. Une surestimation de 100% de la perte de charge résultant de l'intersection entre deux plaques de garnissage est ainsi obtenue et les auteurs mettent l'accent sur l'importance de considérer un V.E.R qui soit périodique de manière à s'affranchir des effets d'entrée-sortie. Cette approche est ensuite mise en œuvre dans les travaux de Raynal et Royon-Lebeaud (2007) où l'écoulement de gaz dans une cellule périodique

d'un garnissage structuré de type Mellapak 250.Y a été simulé. Tel que décrit par la Figure 1.11, les auteurs utilisent les informations tirés de la simulation à la micro-échelle afin de renseigner le modèle à l'échelle mésoscopique. Concrètement les auteurs tiennent compte de la présence de la phase liquide de la manière suivante : ils calculent une vitesse superficielle de gaz en tenant compte de la rétention de liquide calculée à micro-échelle et considèrent comme condition limite de vitesse de gaz sur les parois de la cellule élémentaire périodique, la vitesse de glissement gaz-liquide calculée à la micro-échelle. En effectuant une simulation de l'écoulement de gaz dans l'élément périodique de garnissage, les auteurs obtiennent des valeurs de perte de charge en gaz seul qui sont en accord avec les données expérimentales pourvu qu'un modèle d'écoulement laminaire est considéré. Les pertes de charge en présence de liquide sont également en accord avec les valeurs expérimentales pour des débits de gaz modérés.

La simulation d'écoulements multiphasiques dans des milieux poreux est également possible à des échelles mésoscopiques via des approches de type « modèle de réseau de pores ». Cette approche a été mise en œuvre dans les travaux de thèse de Horgue (2012) afin de simuler un écoulement diphasique dans un lit fixe de sphères. Dans ce type de modèles, l'espace interstitiel est représenté comme un réseau de pores connectés par des liens correspondant aux constriction entre pores et l'hydrodynamique locale de l'écoulement est reproduite via des lois de comportement spécifiques. Dans le cas simple où l'écoulement gaz-liquide dans les pores est assimilé à un écoulement en film liquide dans un canal, une relation analytique entre les débits de phases et le gradient de pression dans ces dernières est utilisée. La connaissance de la géométrie interne du garnissage reste toutefois cruciale pour ce type d'approche et nécessite des méthodes de détermination de la structure microscopique du garnissage tel que la microtomographie (Horgue, 2012). Des approches équivalentes sont également appliquées à des garnissages structurés où un réseau de points de contact entre plaques de garnissages adjacentes est considéré. Aroonwilas *et al.* (2003) considèrent un réseau de nœuds où 4 directions peuvent être empruntés par les liquide : (i) celles des canaux formés par les deux plaques de garnissage en contact, (ii) celles correspondant aux angles de plus grande pente liés à l'effet de la gravité. Les débits de liquide dans chacune des directions sont déterminés via des lois de probabilité.

Enfin il est intéressant de noter que le concept de micro, méso ou macro-échelle est lié directement aux puissances de calcul. On parlerait plutôt de micro-échelle dans le cas d'une cellule périodique de garnissage structuré par exemple si on dispose d'une puissance de calcul suffisante pour simuler l'écoulement avec une approche de type DNS.

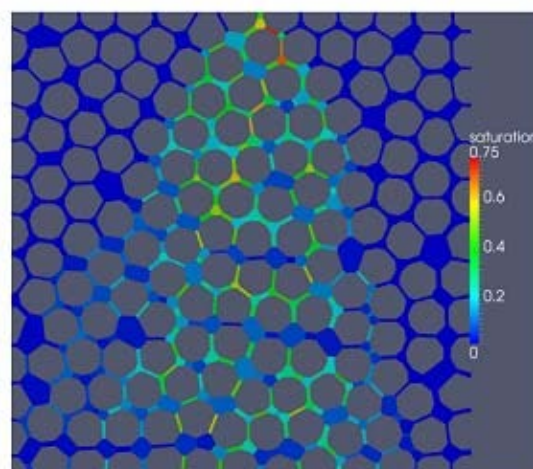


Figure 1.12 : simulation de l'étalement d'un jet de liquide dans un lit fixe par un modèle de « réseau de pores », P. Horgue (2012)

- Echelle macroscopique

Dans le cadre de cette thèse, on dénomme échelle macroscopique l'échelle d'un lit de garnissage et qui par extension peut être celui d'une colonne complète. Dans cette approche, à chaque point du lit de garnissage est associé un volume élémentaire comprenant un nombre suffisant de pores. Le volume élémentaire –ou volume de contrôle- en question a donc une dimension plus grande que celle caractéristique d'un pore de façon à permettre une représentation homogénéisée de l'écoulement i.e., une représentation moyenne. Comme le sous-entend la définition du volume élémentaire, le lit de garnissage est assimilé dans cette approche à un milieu poreux. La géométrie exacte du solide n'est plus discrétisée de manière explicite mais est tenue en compte via des modèles (ou lois de fermeture) spécifiques.

La méthode de modélisation macroscopique la plus utilisée dans le domaine des écoulements gaz-liquide dans des garnissages est l'approche Euler-Euler multiphasique (Attou et Ferschneider, 1999 ; Grosser *et al.*, 1988 ; Jiang *et al.*, 2002). De manière simplifiée, dans cette approche, l'impact de la surface solide sur l'écoulement des phases est modélisé via des résistances à l'écoulement (visqueuses et inertielles) qui font l'objet de lois de fermetures. La description Euler-Euler prend en compte les interactions entre les phases fluides via des lois de trainée reproduisant le cisaillement interfacial. Ainsi, il devient possible de simuler un écoulement multiphasique dans un lit de garnissage de géométrie complexe tout en restant à des temps calculs raisonnables. La difficulté que pose cette approche consiste à choisir de lois de fermetures (résistances dues au solide, trainée équivalente etc ...) qui soient les plus adaptées à l'écoulement et au garnissage considérés.

La méthode Euler-Euler associée à une description de type milieu poreux a d'abord été utilisée pour prédire des écoulements gaz-liquide à une dimension dans des lits fixes (Attou et Ferschneider, 1999 ; Grosser *et al.*, 1988) puis dans des configurations axisymétriques homogènes où la porosité peut varier dans la direction radiale (Gunjal *et al.*, 2003 ; Jiang *et al.*, 2002). Raynal et Royon-Lebeaud (2007) ont également simulé l'écoulement gaz-liquide dans une colonne tridimensionnelle remplie de garnissages de type Mellapak 250.Y et ayant un diamètre et une longueur respectivement de 1 et 4 m. Ils adoptent pour cela une approche de type « milieu poreux ». Tel que montré par la Figure 1.11, les auteurs se servent des calculs à la méso-échelle afin de déterminer la perte de charge et donc les perméabilités du milieu poreux équivalent au garnissage dans les trois directions de l'espace. Ces perméabilités permettent de relier la perte de charge dans une direction donnée à la vitesse superficielle du gaz. Les auteurs mettent ainsi en évidence l'importance de la simulation de la colonne d'absorption en tenant compte aussi bien du garnissage que des distributeurs de phases étant donné qu'ils calculent une perte de charge non négligeable au niveau du distributeur de gaz en bas de colonne. La distribution de liquide est quant à elle considérée comme homogène.

L'écoulement gaz-liquide a été également simulé dans des configurations hétérogènes en termes de distribution de liquide (Gunjal *et al.*, 2003 ; Yin *et al.*, 2000 ; Boyer *et al.*, 2005 ; Lappalainen *et al.*, 2009 ; Atta *et al.*, 2007) grâce à des modèles permettant de prédire la dispersion de l'écoulement dans la direction radiale. Ces approches nous intéressent tout particulièrement dans le cadre de cette thèse et seront reprises plus en détail plus loin dans ce manuscrit. Pour des garnissages structurés, Mahr et Mewes (2008) mettent également en œuvre une méthode de description Euler-Euler en considérant une approche originale où deux écoulements liquides sont considérés. Ces deux écoulements se font dans les deux directions préférentielles correspondant à deux plaques adjacentes de garnissage et échangent de la matière au niveau des points de contact des plaques.

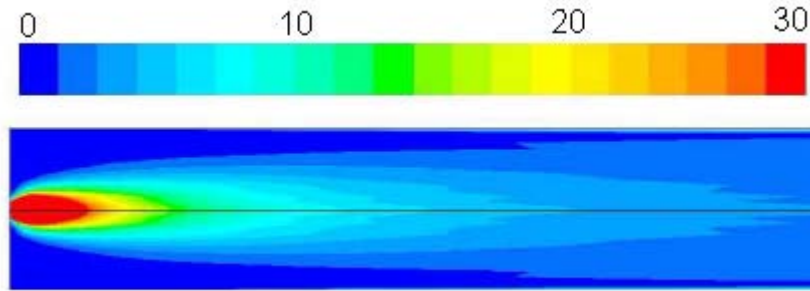


Figure 1.13 : Flux de masse de liquide ($\text{kg/m}^2\text{s}$) le long d'un lit fixe de sphères de diamètre 9.53 mm, Lappalainen (2009)

Une illustration de la méthode Euler-Euler en 2D en lit fixe est donnée par la Figure 1.13 tirée des travaux de Lappalainen *et al.* (2009). La figure montre les contours de flux massique de liquide dans un écoulement gaz-liquide dans un lit fixe de sphères de diamètre 9.5 mm où le liquide est alimenté via un point source en tête de colonne. Les auteurs confrontent la répartition radiale de liquide avec succès avec des données expérimentales.

Dans le cadre de ce travail, nous adoptons l'approche de modélisation à l'échelle macroscopique afin de simuler l'écoulement gaz-liquide à contre-courant dans une colonne à garnissages. Tel que expliqué plus haut, une simulation à cette échelle permet de se rapprocher le plus possible des configurations industrielles notamment via la prise en compte de l'effet de la distribution des phases en tête et fond de colonne sur l'hydrodynamique de l'écoulement. Des éléments intéressants de modélisation à cette échelle sont disponibles dans la littérature tel que décrit plus haut mais peu de simulations sont entreprises dans le cas de garnissages structurés et vrac en diphasique avec la prise en compte des interactions entre phases ainsi que de la dispersion. Si ces modèles sont aujourd'hui peu développés c'est en partie à cause de la rareté de données expérimentales permettant leur validation. Pour pallier à ce manque, il est nécessaire de réaliser des mesures originales ce qui a été la motivation des mesures de distribution de liquide que nous avons entreprises dans ce travail de thèse.

Le but ultime de ce travail de modélisation est de fournir un outil de simulation robuste de l'écoulement gaz-liquide dans une colonne d'absorption à garnissage qui puisse prédire tout particulièrement la distribution des phases dans le système. Ce travail passe par le développement de lois de fermeture spécifiques sur la base des données expérimentales acquises ainsi que des précédentes études disponibles dans la littérature.

1.7 CONCLUSION

Nous avons présenté dans ce chapitre les contextes scientifiques et techniques dans lesquels s'inscrit le travail de cette thèse. Nous avons dans un deuxième temps passé en revue les différents paramètres physiques et géométriques qui sont importants dans la caractérisation de l'hydrodynamique et du transfert dans les colonnes à garnissages gaz-liquide utilisées pour le captage de CO_2 en post-combustion. La phénoménologie des écoulements gaz-liquide dans ces garnissages a été décrite et l'état de l'art en la matière présenté. Si les régimes d'écoulement sont largement caractérisés dans la littérature pour le cas d'écoulement à co-courant descendants dans des lits fixes, peu de données quantitatives sont disponibles pour les écoulements à contre-courant. Nous avons ensuite, via une revue bibliographique, présenté des modèles de référence utilisés pour décrire la perte de charge et la rétention dans des lits fixes et des garnissages dans des configurations d'écoulement homogène avant de montrer la nécessité de développer des

modèles qui tiennent compte de la non-homogénéité de l'écoulement. Dans ce cadre, nous avons décrit plusieurs travaux de la littérature où la distribution de liquide dans des garnissages a été étudiée. Le lien entre ces travaux et le travail de cette thèse a ensuite été mis en exergue et la démarche de caractérisation de l'hydrodynamique dans une colonne à garnissage explicitée. Enfin, nous avons présenté les différentes approches de simulation numérique des écoulements gaz-liquide dans des garnissages et étayé l'approche que nous avons retenue pour ces travaux de thèse à savoir celle de la simulation de l'écoulement à l'échelle macroscopique.

Les choix de modélisation retenus dans cette thèse nous permettront de développer un outil de simulation de l'écoulement dans des garnissages qui permettra à terme de réaliser des calculs à l'échelle d'une colonne d'absorption complète pour pouvoir définir, en fonction des conditions opératoires et des garnissages retenus, le meilleur design à retenir en termes de nombre et de hauteur de lits, de type de distributeurs etc...

CONTENU

2. Modèle Eulérien à deux fluides pour les colonnes à garnissages.	46
2.1 Introduction au modèle eulérien à deux fluides	46
2.2 Système d'équations à l'échelle du pore	47
2.3 Système d'équations à l'échelle macroscopique	49
2.3.1 Vue générale sur le processus d'homogénéisation	49
2.3.2 Système d'équations retenu	51
2.3.3 Problème de fermeture : vue d'ensemble	52
2.3.4 Lois de fermeture	54
A/ Résistances poreuses : Frottement sur la surface du solide	54
B/ Loi de trainée interfaciale	57
C/ Loi de mouillage	58
D/ Force de dispersion	58
2.4 Conclusion	63

2. MODÈLE EULÉRIEN À DEUX FLUIDES POUR LES COLONNES À GARNISSAGES.

2.1 INTRODUCTION AU MODÈLE EULÉRIEN À DEUX FLUIDES

Le principe des approches eulériennes multiphasiques est de considérer les phases traitées comme des phases continues s'interpénétrant, l'une étant a priori dispersée dans l'autre ou les phases étant séparées. On résout donc des équations de type milieu continu pour chaque phase (équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement) avec en plus une prise en compte de termes d'interaction entre phases. Ces équations sont des équations moyennées soit en moyenne statistique, temporelle ou encore volumique. Elles font donc disparaître la nécessité d'écrire explicitement des conditions aux limites entre les phases et, de fait, intègrent l'impact de ces conditions aux limites sur la physique via l'apparition de termes d'échange aux interfaces dans le système d'équations à résoudre. Lorsque l'on traite d'écoulements dispersés on interprète souvent la prise de moyenne comme une prise de moyenne statistique ou temporelle. Dans les écoulements dans des garnissages, en raison de la présence d'un support solide de géométrie complexe c'est la moyenne volumique qui est adoptée pour représenter l'écoulement comme celui à travers un milieu poreux.

L'idée principale sur laquelle repose l'approche eulérienne en milieu poreux consiste à écrire les équations de conservation et bilans en grandeurs moyennes dans l'espace. Ces grandeurs moyennes primaires sont pour une description hydrodynamique la pression, la vitesse et la fraction volumique de chaque phase. Les moyennes sont prises sur des volumes élémentaires dont la taille est assez grande par rapport à l'échelle caractéristique d'un pore et petite en comparaison avec le domaine macroscopique de calcul. Le volume élémentaire de prise de moyenne défini ci-dessus est différent du volume élémentaire représentatif d'un garnissage (ou V.E.R) présenté dans le chapitre 1 de ce manuscrit. Le dernier peut être présenté par le plus petit élément périodique d'une géométrie structurée ou par un élément d'empilement vrac. Dans une approche macroscopique, la définition du volume élémentaire de prise de moyenne volumique implique une taille de ce volume qui soit supérieure à celle d'un V.E.R, généralement considéré pour des simulations à l'échelle mésoscopique. Dans la suite, nous appellerons le volume élémentaire de prise de moyenne : volume de contrôle.

Pour un système diphasique, les moyennes spatiales des différentes grandeurs physiques rentrant en jeu sont écrites dans chacune des phases ; on parle dans ce cas de moyennes phasiques et les grandeurs physiques qui en résultent sont donc des grandeurs moyennes intrinsèques à la phase k . La prise de moyenne se fait dans le volume accessible à la phase k d'intérêt dans le volume de contrôle et vaut ainsi zéro lorsque la phase k n'est pas présente. Les deux volumes caractéristiques mis en jeu dans le processus de prise de moyenne sont de ce fait : V le volume de contrôle et V_k , le volume de la phase k qui y est inclus. Le volume de contrôle contient donc les volumes des phases en présence et le volume de solide V_S . On a donc la relation :
$$V = \sum_k V_k + V_S .$$

On définit la fraction volumique moyenne de la phase k dans un volume de contrôle : $\alpha_k = \frac{V_k}{V}$ et la saturation de la phase k définie par rapport au volume de vide disponible dans le volume de contrôle: $\theta_k = \frac{\alpha_k}{\varepsilon}$, ε étant la porosité du lit de garnissage définie comme le rapport entre le volume de vide et le volume du de contrôle : $\varepsilon = \frac{\sum_k V_k}{V}$.

En notant \vec{u}_k et p_k respectivement la vitesse (parfois également appelée vitesse interstitielle) et la pression dans la phase k à l'échelle d'un pore, on peut définir pour une phase k les moyennes volumiques suivantes :

- Vitesse moyenne intrinsèque dans la phase k : $\vec{U}_k = \langle \vec{u}_k \rangle^k = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} \vec{u}_k dV$
- Vitesse superficielle moyenne de la phase k : $\vec{U}_{ks} = \langle \vec{u}_k \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_k} \vec{u}_k dV$
- Pression moyenne intrinsèque dans la phase k : $P_k = \langle p_k \rangle^k = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} p_k dV$

Les moyennes superficielles et intrinsèques d'une grandeur g_k pouvant être un scalaire ou un vecteur sont reliées par la relation :

$$\langle g_k \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_k} g_k dV = \frac{V_k}{V} \frac{1}{V_k} \int_{V_k} g_k dV = \alpha_k \langle g_k \rangle^k$$

2.2 SYSTÈME D'ÉQUATIONS À L'ÉCHELLE DU PORE

A l'échelle d'un pore (ou à l'échelle microscopique), dans une logique Eulérienne, on peut écrire le système d'équations de Navier-Stokes dans chacune des phases en utilisant les grandeurs physiques locales \vec{u}_k et p_k dans le cas de fluides newtoniens et d'un écoulement incompressible. La Figure 2.1 montre une représentation d'un volume de contrôle contenant deux phases fluides β et γ ainsi que la phase solide σ qui constitue le garnissage. Nous notons $A_{\beta\sigma}$, $A_{\gamma\sigma}$ et $A_{\beta\gamma}$ respectivement la surface de contact entre la phase β et le solide, la surface de contact entre la phase γ et le solide et la surface de contact entre les phases β et γ .

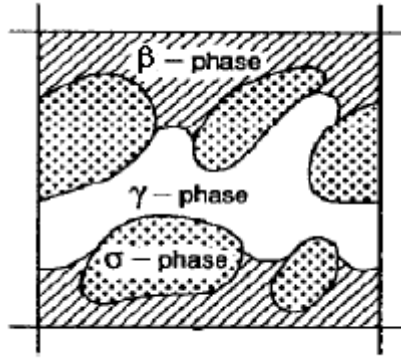


Figure 2.1 : Représentation d'un volume de contrôle, Whitaker (1993)

Dans chaque pore on peut écrire :

- Equation de continuité en l'absence d'échange de masse entre phases :

$$\nabla \cdot \vec{u}_k = 0 \quad (2.1)$$

- Equation de bilan de la quantité de mouvement dans la phase k

$$\rho_k \frac{\partial \vec{u}_k}{\partial t} + \rho_k \vec{\nabla} \cdot (\vec{u}_k \vec{u}_k) = -\vec{\nabla} p_k + \rho_k \vec{g} + \mu_k \vec{\nabla}^2 \vec{u}_k \quad (2.2)$$

Pour résoudre ces équations il faut prendre en compte les conditions aux limites suivantes :

- Non glissement des phases fluides sur la paroi de solide

$$\vec{u}_k = \vec{0} \text{ sur } A_{k\sigma} \text{ où } k=\gamma,\beta \quad (C.L 1)$$

- Continuité des vitesses de part et d'autre de l'interface entre fluides

$$\vec{u}_\beta = \vec{u}_\gamma \text{ sur } A_{\beta\sigma} \quad (C.L 2)$$

- Continuité des contraintes à l'interface entre fluides

$$\vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\vec{\nabla} p_\beta + \mu_\beta \left(\vec{\nabla} \vec{u}_\beta + \vec{\nabla}^t \vec{u}_\beta \right) \right) = \vec{n}_{\beta\gamma} \cdot \left(-\vec{\nabla} p_\gamma + \mu_\gamma \left(\vec{\nabla} \vec{u}_\gamma + \vec{\nabla}^t \vec{u}_\gamma \right) \right) + 2\sigma H_{\beta\gamma} \vec{n}_{\beta\gamma} \text{ sur } A_{\beta\gamma} \quad (C.L 3)$$

Dans la dernière condition limite, σ représente la tension superficielle et $H_{\beta\gamma}$ la courbure de l'interface entre phases. Le terme $2\sigma H_{\beta\gamma} \vec{n}_{\beta\gamma}$ constitue ce que l'on appelle un terme de « pression capillaire » qui traduit la différence de pression dans les deux phases fluides due à une interface courbe, conformément à la loi de Young-Laplace.

Le passage de la forme microscopique des équations (équations 2.1 et 2.2) à leur équivalent moyenné se fait en appliquant l'opérateur de *moyenne phasique* décrit dans le paragraphe 2.1 à l'ensemble des termes des équations de conservation. Plusieurs études se sont penchées sur ce processus de prise de moyenne dans des milieux poreux. Les travaux de Whitaker (1973), Whitaker (1986) et Withaker (1999) peuvent être considérés comme les références en la

matière qui nous ont permis d'éclairer le sens des différents termes des bilans. Dans le domaine des écoulements en garnissages, plusieurs autres travaux proposent des discussions de ce processus de moyenne. Liu (1999) propose notamment de rediscuter les processus de moyenne pour des milieux poreux de très grande porosité où la tortuosité peut être importante et est prise en compte dans le processus de moyenne lui-même. D'autres études se sont intéressées à ce processus de prise de moyenne pour des configurations spécifiques : Mewes *et al.* (1999) dans le cas de lit de monolithes, Mahr et Mewes (2008) dans le cas de garnissages structurés ou Attou *et al.* (1999) dans le cas de lit fixes avec mouillage partiel. Iliuta et Larachi (2005) reprennent également le formalisme de Whitaker (1986) afin de définir un système d'équations de conservation macroscopique qu'ils appliquent par la suite à des garnissages structurés. Ces différents travaux montrent combien il est important de revenir au sens de la prise de moyenne, et de prendre en compte la géométrie élémentaire des pores pour éclairer les propositions de lois de fermeture des équations.

Dans le cadre de ce travail, nous avons adopté le formalisme de prise de moyenne développé sur la base des travaux de Whitaker.

2.3 SYSTÈME D'ÉQUATIONS À L'ÉCHELLE MACROSCOPIQUE

2.3.1 VUE GÉNÉRALE SUR LE PROCESSUS D'HOMOGENÉISATION

Tel que décrit dans la section précédente, le passage à l'échelle macroscopique se fait via un processus de prise de moyenne sur un volume de contrôle ou « processus d'homogénéisation ». Pour un système multiphasique, le système d'équations 2.1 et 2.2 donne donc en adoptant les notations présentées dans l'introduction de ce chapitre :

$$\langle \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_k \rangle = 0 \quad (2.3)$$

$$\rho_k \left\langle \frac{\partial \vec{u}_k}{\partial t} \right\rangle + \rho_k \langle \vec{\nabla} \cdot (\vec{u}_k \vec{u}_k) \rangle = -\langle \vec{\nabla} p_k \rangle + \langle \rho_k \vec{g} \rangle + \mu_k \langle \nabla^2 \vec{u}_k \rangle \quad (2.4)$$

Afin d'exprimer le système d'équations macroscopiques en fonction de grandeurs physiques primaires moyennes (vitesses, pressions et fractions volumiques) les théorèmes de prise de moyenne décrits ci-dessous sont utilisés (Howes et Whitaker, 1985).

- Moyenne volumique d'une dérivée temporelle

$$\left\langle \frac{\partial \Phi_k}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Phi_k \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{k\beta}} \vec{n}_{k\beta} \cdot \vec{u}_{k\beta} \cdot \Phi_k dA \quad (\text{où } \vec{u}_{k\beta} \text{ est la vitesse de l'interface entre phases}) \quad (2.5)$$

- Moyenne volumique d'un gradient ou d'une divergence spatiales

$$\langle \nabla \Phi_k \rangle = \nabla \langle \Phi_k \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{k\beta}} \vec{n}_{k\beta} \Phi_k dA + \frac{1}{V} \int_{A_{k\sigma}} \vec{n}_{k\sigma} \Phi_k dA \quad (2.6)$$

Dans cette expression synthétique Φ_k représente une grandeur physique quelconque pouvant être un scalaire ou un vecteur (l'opérateur gradient est alors remplacé par celui de divergence, et les intégrales de surface font alors intervenir les produits scalaires avec les normales), $A_{k\beta}$ l'aire de la surface de contact entre la phase k et la deuxième phase fluide dénotée β ,

$A_{k\sigma}$ l'aire de la surface de contact entre la phase k et la surface de la phase solide dénotée σ , et $\vec{n}_{k\beta}$ et $\vec{n}_{k\sigma}$ leurs normales sortantes respectives.

Afin de développer le système d'équations, nous optons pour une décomposition de la vitesse (ou de la pression) locale en somme d'une valeur moyenne et d'une fluctuation spatiale dont la moyenne sur le volume de contrôle est nulle (Gray (1975)). Cette fluctuation spatiale est aussi appelée déviation spatiale. Cette décomposition permet d'écrire pour la vitesse et la pression de la phase fluide k : $p_k = \langle p_k \rangle^k + \tilde{p}_k$ et $\vec{u}_k = \langle \vec{u}_k \rangle^k + \tilde{u}_k$ où \tilde{p}_k et \tilde{u}_k représentent les déviations de pression et de vitesse dont la moyenne est nulle ($\langle \tilde{p}_k \rangle = \langle \tilde{u}_k \rangle = 0$).

Le théorème et les décompositions présentées ci-dessus permettent d'écrire le système décrit par les équations 2.3 et 2.4 sous une nouvelle forme (pour plus de détails sur les calculs et simplifications intermédiaires nous renvoyons le lecteur au papier de Whitaker, 1996). Le bilan de masse dans la phase k s'écrit :

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \langle \vec{u}_k \rangle^k = 0 \quad (2.7)$$

Le bilan de quantité de mouvement dans la phase k s'écrit de même :

$$\begin{aligned} \rho_k \frac{\partial \alpha_k \langle \vec{u}_k \rangle^k}{\partial t} + \rho_k \bar{\nabla} \alpha_k \langle \vec{u}_k \rangle^k \langle \vec{u}_k \rangle^k + \rho_k \bar{\nabla} \alpha_k \langle \tilde{u}_k \tilde{u}_k \rangle^k = \\ - \bar{\nabla} \alpha_k \langle p_k \rangle^k + \rho_k \alpha_k \bar{g} + \mu_k \nabla^2 (\alpha_k \langle \vec{u}_k \rangle^k) + \frac{1}{V} \int_{A_{k\beta} + A_{k\sigma}} \vec{n}_{k\beta} \cdot (-\bar{I} p_k + \mu_k \bar{\nabla} \vec{u}_k + \bar{\nabla}^t \vec{u}_k) dA \end{aligned} \quad (2.8)$$

Les derniers termes qui apparaissent respectivement sur les membres de droite et de gauche de l'équation bilan de quantité de mouvement ci-dessus représentent ce que l'on appelle des filtres (filtre volumique pour le premier terme et surfacique pour le second, Whitaker (1996)). Cette appellation est due au fait que certaines informations à l'échelle microscopique sont filtrées au cours du processus d'homogénéisation. Ces termes nécessitent d'ailleurs d'être modélisés afin de fermer le système d'équations de Navier-Stokes. On parle ainsi de « problème de fermeture ».

Le terme $\rho_k \bar{\nabla} \alpha_k \langle \tilde{u}_k \tilde{u}_k \rangle^k$ introduit les effets de dispersion. Il existe lorsqu'émerge une corrélation des déviations de vitesse, en présence ou non d'un gradient de fraction volumique des phases. C'est un terme qui n'est, à notre connaissance, pas retenu dans l'étude des milieux poreux puisque les régimes étudiés la plupart du temps ne sont pas inertiels. Dans notre étude, c'est par contre, un terme important qu'il faudra modéliser.

Le terme $\frac{1}{V} \int_{A_{k\beta} + A_{k\sigma}} \vec{n}_{k\beta} \cdot (-\bar{I} p_k + \mu_k (\bar{\nabla} \vec{u}_k + \bar{\nabla}^t \vec{u}_k)) dA$ rend compte des échanges de quantité de mouvements aux interfaces fluides et aux parois des pores.

En combinant le 1^{er} terme du membre de droite et le dernier terme de (2.8), en utilisant en outre la propriété selon laquelle $\bar{\nabla} \alpha_k = -\frac{1}{V} \int_{A_{k\beta} + A_{k\sigma}} \vec{n}_{kj} dA$ on peut réécrire l'équation (2.8) sous la forme :

$$\begin{aligned}
\rho_k \frac{\partial \alpha_k \langle \bar{u}_k \rangle^k}{\partial t} + \rho_k \bar{\nabla} \alpha_k \langle \bar{u}_k \rangle^k \langle \bar{u}_k \rangle^k + \rho_k \bar{\nabla} \alpha_k \langle \tilde{u}_k \tilde{u}_k \rangle^k = \\
- \alpha_k \bar{\nabla} \langle p_k \rangle^k + \rho_k \alpha_k \bar{g} + \mu_k \nabla^2 (\alpha_k \langle \bar{u}_k \rangle^k) + \frac{1}{V} \int_{A_{k\beta} + A_{k\sigma}} \bar{n}_{kj} \cdot (-\bar{I} \tilde{p}_k + \mu_k (\bar{\nabla} \bar{u}_k + \bar{\nabla}^t \bar{u}_k)) dA
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Le terme d'échange aux interfaces et parois ne fait alors intervenir que les déviations de la pression.

Si en l'absence de transfert de masse aux interfaces il n'est pas utile d'écrire le bilan de masse aux interfaces qui ne fait que traduire l'égalité de deux flux nuls, il est en revanche important d'écrire le bilan de quantité de mouvement aux interfaces. En l'absence d'effet de tension superficielle ce bilan qui traduit la continuité des contraintes aux interfaces fluides s'écrit simplement :

$$\sum_{\beta=1,2} \frac{1}{V} \int_{A_{k\beta}} \bar{n}_{k\beta} \cdot (-\bar{I} \tilde{p}_k + \mu_k (\bar{\nabla} \bar{u}_k + \bar{\nabla}^t \bar{u}_k)) dA = \bar{0}$$

2.3.2 SYSTÈME D'ÉQUATIONS RETENU

Nous avons examiné dans le cadre de cette thèse plusieurs propositions de description d'écoulements gaz-liquide dans des garnissages via des approches eulériennes. Si le processus d'établissement des équations qui régissent le système à l'échelle macroscopique reste relativement le même dans la plupart des travaux proposés dans la littérature, les modèles finaux présentent quelques différences. Ces différences se rapportent notamment à la prise en compte de la capillarité via le maintien d'une unique pression ou de deux pressions différentes dans les deux phases (Iliuta et Larachi (2005), Attou et al. (1999), Lappalainen *et al.* (2009)), et à celle de la dispersion dans les phases (Liu (1999), Lappalainen *et al.* (2009)). Le système d'équations eulériennes décrivant l'hydrodynamique de l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage que nous avons retenu s'écrit de la manière suivante qui reprend dans des notations plus synthétiques les équations (2.7) à (2.9) auxquelles doit être rajoutée la relation entre les saturations des phases θ_k .

- Propriétés des saturations:

$$\theta_G + \theta_L = 1 \tag{2.10}$$

- Equation de conservation de la masse

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \theta_k \rho_k) + \bar{\nabla} \cdot (\varepsilon \theta_k \rho_k \bar{U}_k) = 0 \tag{2.11}$$

- Equation bilan de quantité de mouvement

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \theta_k \rho_k \bar{U}_k) + \bar{\nabla} \cdot (\varepsilon \theta_k \rho_k \bar{U}_k \bar{U}_k) = \\
- \varepsilon \theta_k \bar{\nabla} P + \bar{\nabla} \cdot (\varepsilon \bar{\tau}_k) + \varepsilon \theta_k \rho_k \bar{g} + \varepsilon \bar{R}_{Ik} + \theta_k \bar{S}_{porous,k} + \bar{F}_{disp,k}
\end{aligned} \tag{2.12}$$

- Equation bilan de quantité de mouvement aux interfaces gaz-liquide

$$\vec{R}_{IG} + \vec{R}_{IL} = \vec{0} \quad (2.13)$$

Dans le système décrit par les équations 2.10 à 2.13, k est l'indice de la phase considérée (phase gaz ou phase liquide). Nous faisons à ce stade l'hypothèse d'effets capillaires négligeables ce qui permet de considérer une pression moyenne unique dans le système formé par les deux phases dénotée P dans l'équation 2.12. Nous revenons sur cette hypothèse plus tard dans ce chapitre. Le terme $\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon \vec{\tau}_k)$ est associé au tenseur moyen des contraintes visqueuses. Ce terme peut être souvent négligé car il fait intervenir des gradients de vitesse moyenne largement inférieurs à ceux à l'échelle microscopique d'un pore (Whitaker, 1993).

L'équation 2.12 fait également apparaître deux termes d'interaction :

$$\theta_k \vec{S}_{porous,k} = \frac{1}{V} \int_{A_{k\sigma}} \vec{n}_{k\sigma} \cdot (-I \vec{p}_k + \mu_k (\vec{\nabla} \vec{u}_k + \vec{\nabla}^t \vec{u}_k)) dA$$

représente un terme de transfert de quantité de mouvement aux parois solides du garnissage pour la phase k , et

$$\varepsilon \vec{R}_{Ik} = \frac{1}{V} \int_{A_{k\beta}} \vec{n}_{k\beta} \cdot (-I \vec{p}_k + \mu_k (\vec{\nabla} \vec{u}_k + \vec{\nabla}^t \vec{u}_k)) dA$$

représente le transfert interfacial de quantité de mouvement pour la phase k . C'est une force d'interaction entre phases fluides (comprise le plus souvent comme une force de trainée).

Une dernière force dénotée $\vec{F}_{disp,k} = -\rho_k \vec{\nabla} \alpha_k \langle \tilde{u}_k \tilde{u}_k \rangle^k$ (Whitaker, 1973) est introduite dans l'équation bilan de quantité de mouvement (équation 2.12). Cette force correspond à une force dispersive de la phase k et sera dénommée « force de dispersion » mécanique.

Enfin, la porosité ε n'est pas une grandeur transportée. L'écriture du système d'équations permet simplement que sa distribution spatiale puisse être prise en compte dans le cas où celle-ci varie. Pour la suite de ce travail, nous la considérons indépendante de l'espace.

2.3.3 PROBLÈME DE FERMETURE : VUE D'ENSEMBLE

- Configuration monophasique

Dans le cas d'un écoulement monophasique, plusieurs développements de lois de fermeture du système défini par les équations 2.10 à 2.13 en vue de la fermeture de ce dernier sont proposés dans la littérature. La différence entre ces études réside dans la prise en compte ou pas des effets inertiels à des vitesses du fluide relativement importantes. Dans le cas d'un écoulement purement visqueux, ce qui à l'échelle microscopique correspond à un écoulement de Stokes, la loi de Darcy (ainsi que des variantes de cette loi) est souvent proposée (Whitaker, 1986 ; Valdes-Parada, 2009) en faisant intervenir un tenseur de résistances visqueuses pour modéliser les interactions entre le fluide et la surface du milieu poreux, soit en l'occurrence le garnissage. En revanche, quand les effets inertiels deviennent significatifs, une correction via un tenseur dit de « Forchheimer » est introduite (Whitaker, 1996)).

Whitaker (1996) écrit le bilan de quantité de mouvement suivant:

$$\langle \bar{u}_k \rangle = -\frac{\bar{K}}{\mu_k} \cdot \left(\bar{\nabla} \langle p_k \rangle^k - \rho_k \bar{g} - \mu_k \nabla^2 \langle \bar{u}_k \rangle^k \right) - \bar{F} \cdot \langle \bar{u}_k \rangle \quad (2.14)$$

Dans l'équation bilan de quantité de mouvement ci-dessus \bar{K} représente un tenseur de perméabilités (inverse d'un tenseur de résistances visqueuses) et \bar{F} un tenseur de résistances inertielles. Plusieurs propositions de fermeture du système eulérien de description de l'écoulement dans un milieu poreux existent dans la littérature pour des systèmes mono et diphasiques. Sur la base d'arguments de lois d'échelle, Kozeny-Carman (1927, 1938) (dans Valdes-Parada *et al.* (2009)) proposent une expression semi-empirique de la perméabilité dans le cas d'un milieu poreux isotrope en prenant en compte la géométrie aléatoire du milieu ; ils proposent $\bar{K} = K\bar{I}$ où \bar{I} est le tenseur identité et $K=1/5 l^2 \varepsilon^3$ où l représente une longueur caractéristique des pores. Des comparaisons avec diverses expériences ont montré que cette proposition est valable dans des réseaux aléatoires ou périodiques de sphères et dans des structures fractales. Valdes-Parada *et al.* (2009) montrent que pour des porosités identiques les tenseurs de perméabilité dépendent fortement du caractère multi-échelle de la matrice poreuse. La loi de Kozeny-Carman n'est donc pas appropriée pour des matrices poreuses multi-échelles. Afin de tenir compte des effets inertiels dans la résistance du milieu poreux (contenus dans le tenseur de Forchheimer dans l'équation 2.14), Ergun (1952) propose un tenseur de résistance qui combine linéairement des effets visqueux et inertiels. Il propose, sur une base empirique, la corrélation suivante dans le cas d'un écoulement monophasique (le premier terme du membre de gauche sera dénoté « terme visqueux » et le second « terme inertiel »).

$$\langle \bar{u}_k \rangle^k = -\frac{d_p^2 \varepsilon^3}{180 \mu_k (1-\varepsilon)^2} \frac{\partial \langle p_k \rangle^k}{\partial z} - \frac{\rho_k d_p}{100 \mu_k (1-\varepsilon)} \langle \bar{u}_k \rangle^k \langle \bar{u}_k \rangle^k \quad (2.15)$$

Dans l'équation 2.15 ci-dessus d_p représente le diamètre de particules du milieu poreux. Dans le cas d'un lit de sphères d_p est obtenu à partir des caractéristiques géométriques du lit poreux comme suit : $d_p=6(1-\varepsilon)/a_g$ (Stichlmair *et al.*, 1989). La proposition d'Ergun a été revisitée dans plusieurs études postérieures. Macdonald *et al.* (1979) ont mis en évidence les limites de la corrélation d'Ergun pour des éléments de garnissage non sphériques et exploré de manière empirique la dépendance en ε du terme visqueux de l'équation 2.15. Il en ressort qu'une variation de ce terme en $\varepsilon^{3.6}$ donne une meilleure représentation des données expérimentales. Du Plessis (1994) a discuté, pour sa part, l'origine de la correction inertielle. Etant donné que la déviation à la loi visqueuse devient importante pour des nombres de Reynolds de pore largement inférieurs à 100, ces effets ne sont donc pas liés à la transition laminaire-turbulent de l'écoulement dans les pores. L'auteur propose à ce titre un modèle physique qui prend en compte les recirculations présentes dans les interstices du milieu poreux et les effets de traînée de forme qu'elles induisent. Le modèle que propose l'auteur est toutefois en accord avec la corrélation d'Ergun (1952) avec une correction supplémentaire sur les constantes multiplicatives apparaissant dans les termes visqueux et inertiel de l'équation 2.15. Cette correction se traduit par une dépendance en ε .

Enfin, plusieurs autres corrélations empiriques permettent d'exprimer les termes visqueux et inertiel des tenseurs de résistance intervenant dans l'équation 2.15. Pour des lits de garnissages vrac et structurés, on cite celles de Stichlmair *et al.* (1988), Saez et Carbonell (1985) et Spiegel et Meier (1992). Le lecteur pourra se référer au chapitre 1 de ce manuscrit où un résumé de ces différentes corrélations est proposé.

- Configuration diphasique

La procédure d'homogénéisation décrite plus haut s'applique également aux écoulements diphasiques gaz-liquide et aboutit à un système d'équations macroscopiques qui fait intervenir outre les termes de résistances poreuses, des termes d'interaction entre phases fluides ou encore « termes de trainée » dans le cas d'écoulements homogènes. Pour l'établissement du système d'équation macroscopique pour des écoulements diphasiques, nous renvoyons le lecteur aux travaux de référence de Whitaker (1986), Attou *et al.* (1999), Liu (1999), Mahr et Mewes (2008) etc. Nous discutons dans la suite de ce chapitre les différents termes inhérents aux équations eulériennes dans des garnissages fonctionnant en gaz liquide ainsi que les propositions de fermeture de celles-ci et ce pour des écoulements homogènes ou non.

2.3.4 LOIS DE FERMETURE

A/ Résistances poreuses : Frottement sur la surface du solide

Les résistances poreuses correspondent au terme dénoté $\bar{S}_{porous,k}$ dans les bilans de quantité de mouvement (équation 2.12). Cette appellation vient du fait que le frottement des phases fluides sur la surface du garnissage peut être modélisé via un tenseur dit de résistance (inverse du tenseur de perméabilité) introduit dans la section 2.3.3. En se basant sur la proposition d'Ergun (1952) le tenseur de résistance peut prendre la forme suivante :

$$\bar{S}_{porous,k} = -\left(\mu_k \bar{D}_k \cdot \vec{U}_k + \frac{1}{2} \rho_k \|\vec{U}_k\| \bar{C}_k \cdot \vec{U}_k \right)$$

où \bar{D}_k et \bar{C}_k représentent respectivement les tenseurs de résistance visqueuse et inertielles. Dans le cas d'un milieu poreux isotrope, le tenseur de résistance est isotrope, et la force de résistance poreuse s'écrit simplement de la manière suivante :

$$\bar{S}_{porous,k} = -\left(\frac{\mu_k}{A_k} \vec{U}_k + \frac{1}{2} \rho_k C_k \|\vec{U}_k\| \vec{U}_k \right) \text{ où } A_k \text{ (en m}^2\text{) représente la perméabilité du milieu poreux et}$$

C_k (en m⁻¹) un coefficient de résistance inertielle.

Nous avons abordé dans la section 2.3.3 de ce chapitre le problème de fermeture des termes relatifs à la résistance du milieu poreux pour des configurations monophasiques. Le même formalisme proposé par Ergun (1952) et révisé par de nombreux autres auteurs peut également être étendu aux configurations diphasiques. Dans ce cas la perméabilité ainsi que le coefficient de résistance inertielle sont adaptés en faisant intervenir le diamètre hydraulique d'une phase donnée à la micro-échelle. Un tel diamètre hydraulique dépend à la fois de la porosité du milieu, de la surface géométrique spécifique sur laquelle évolue une phase donnée ainsi que de la saturation de la phase θ_k (Holub *et al.*(1993), Attou *et al.* (1999), Saez et Carbonell (1985), Lakota *et al.* (2002), Iliuta *et al.* (2004)). Saez et Carbonell (1985) introduisent le concept de perméabilité relative afin de tenir compte de la présence d'une deuxième phase fluide dans le frottement de la première sur le solide. La perméabilité relative qu'ils introduisent s'écrit comme le rapport entre la force de frottement sur le solide en écoulement monophasique et celle en écoulement diphasique. Ces auteurs suggèrent que celle-là ne dépend que de la saturation de la phase considérée. L'écriture de la perméabilité relative en fonction de la saturation a été entreprise de manière empirique sur un grand nombre de données notamment pour des lits de sphères. Le modèle a été repris dans plusieurs études ultérieures, comme celle de Lakota *et al.* (2002) où une corrélation générique de la perméabilité relative en fonction de la saturation est proposée pour un grand nombre de particules sphériques (poreuses et non poreuses), particules cylindriques, particules extrudées et anneaux de Raschig. Ces approches

empiriques ont eu le mérite de lier perméabilités relatives et saturations des phases, mais des modèles plus phénoménologiques ont vu le jour.

Holub *et al.* (1992-1993) ont proposé un modèle phénoménologique afin de modéliser les frottements fluide-solide et fluide-fluide en partant du formalisme d'Ergun (1952). Le modèle qu'ils proposent (appelé slit model en anglais) repose sur l'idée qu'un pore peut être assimilé à une fente où le liquide ruisselle sur la surface du solide tout en étant cisailé par du gaz. Le passage des équations de quantité de mouvement à l'échelle des pores à celles à l'échelle du lit fixe se fait via une extrapolation directe en reliant l'épaisseur du film liquide à la rétention et aux propriétés géométriques du lit. Ils testent leur modèle sur un ensemble de particules sphériques, cylindriques et extrudées et relèvent une erreur relative de $\sim 40\%$ sur les valeurs de perte de charge et $\sim 10\%$ sur les valeurs de rétention. Iliuta *et al.* (2000) étendent le modèle de Holub *et al.* (1992-1993) au cas d'un lit fixe à mouillage partiel. Le modèle phénoménologique qu'ils établissent consiste à décrire la géométrie d'un pore via un système de deux fentes (double-slit model) ; une fente sèche tenant compte de la partie d'un pore où le liquide ne mouille pas la surface du solide et une fente mouillée où le liquide ruisselle sous forme de film sur toute la surface solide. Dans ce modèle, ces deux canaux fonctionnent en parallèle et sont donc soumis au même gradient de pression. Une représentation conceptuelle du système de deux fentes sur lequel repose le modèle est donnée sur la Figure 2.2. Le taux de mouillage f_w intervient pour donner une contribution relative des fentes sèches et mouillées. Le modèle proposé a été testé sur un grand nombre de données expérimentales relatives à des particules sphériques, cylindriques et extrudées ainsi que pour des garnissages de type anneaux de Raschig, selles de Berl et anneaux de Pall. Le modèle proposé prédit la perte de charge et la rétention liquide avec des erreurs relatives respectives de 32 % et 24 %.

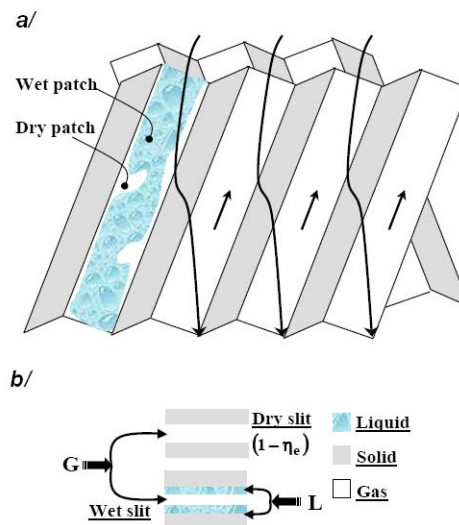


Figure 2.2 : a/Géométrie simplifiée d'un garnissage structuré, b/Schéma conceptuel du modèle d'Iliuta et al. (2004), tiré de Iliuta et al. (2004)

Iliuta et Larachi (2001) puis Iliuta *et al.* (2004) reprennent le modèle de « double-slit » afin de prédire l'hydrodynamique dans des garnissages structurés. Dans le premier travail, les auteurs reprennent les corrélations empiriques proposées dans les travaux de Bravo et Fair (1986) et ceux de Brunazzi *et al.* (1996) afin de modéliser les frottements solide-fluides et fluide-fluide. Ils prédisent ainsi la perte de charge, la rétention liquide et le taux de mouillage avec des erreurs relatives respectives de 26, 14 et 15% sur un ensemble de garnissages structurés (de types Mellapak, Flexipak, Gempac et Montz-Pak). Iliuta *et al.* (2004) adoptent la même approche que

ci-dessus afin de modéliser l'hydrodynamique dans des garnissages structurés en proposant des modèles de frottements fluide-solide et fluide-fluide basés sur un formalisme de type Ergun. Les constantes intervenant dans ces modèles ainsi que leur dépendance vis-à-vis de l'angle de corrugation (angle que fait une plaque de garnissage structuré avec la verticale) du garnissage sont déterminés via des simulations de l'écoulement à la méso-échelle (voir chapitre 1) dans des éléments représentatifs du garnissage. Les calculs en question sont présentés dans les travaux de Petre *et al.* (2003). Testé sur un grand nombre de données expérimentales relatives à des garnissages de type Mellapak, Flexipak, Gempac et Montz-Pak, le modèle décrit ci-dessus permet de prédire la perte de charge, la rétention liquide et le taux de mouillage de la surface de solide avec des erreurs relatives moyennes de 18, 16 et 10 % respectivement. Ceci est valable toutefois pour des conditions de vitesse de gaz qui correspondent à un régime d'écoulement en dessous du point de charge. Pour des vitesses de gaz plus importantes, le modèle sous-estime largement la perte de charge.

Le modèle d'Iliuta et al. (2004) permet de prédire avec une précision acceptable la perte de charge, la rétention de liquide ainsi que le taux de mouillage dans des garnissages structurés dont Mellapak 250.X. Ce modèle phénoménologique est bâti sur un concept qui se prête bien aux géométries structurées à savoir le modèle « double-slit » et propose des lois de frottement fluides-solides et fluide-fluide à l'échelle macroscopique qui font appel à des calculs à la méso-échelle. Ce modèle s'inscrit donc la démarche multi-échelle qui a motivé ces travaux de thèse. Ainsi notre choix s'est porté sur le modèle d'Iliuta *et al.* (2004) afin de modéliser les résistances poreuses, soit les termes de frottement fluides-solides. Les lois de frottement entre fluides seront abordées en détail plus loin dans cette section. Nous discuterons par la suite la consistance de cette proposition pour le cas des écoulements contre-courant à forte vitesse du gaz dans le chapitre 4 de ce manuscrit.

Iliuta et al. (2004) écrivent, en adoptant les notations définies dans le présent manuscrit :

$$\bar{S}_{porous,L} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2 f_e}{\varepsilon \theta_L^2} \mu_L + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\theta_L} \rho_L \|\bar{U}_L\| \right) \bar{U}_L = -K_{LS} \bar{U}_L \quad (2.16)$$

$$\bar{S}_{porous,G} = -(1-f_e) \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon} \mu_G + \frac{E_2}{6} a_g \rho_G \theta_G \|\bar{U}_G\| \right) \bar{U}_G = -K_{GS} \bar{U}_G \quad (2.17)$$

Le lecteur pourra noter que ces expressions introduisent deux diamètres hydrauliques différents pour le liquide et le gaz : $6 a_g^{-1}$ pour le gaz et θ_L/a_g pour le liquide. Cette dernière expression correspond à une épaisseur caractéristique du film de liquide si on suppose un mouillage total.

Le modèle proposé par Iliuta *et al.* (2004) étant basé sur une prise en compte du mouillage à l'échelle d'un pore, les forces de frottement $\bar{S}_{porous,L}$ et $\bar{S}_{porous,G}$ sont pondérés par le taux de mouillage f_e . Enfin, le modèle proposé fait intervenir deux constantes spécifiques appelées constantes d'Ergun : E_1 et E_2 . Les valeurs classiques retenues pour les constantes visqueuse et inertielle d'Ergun sont celles validées sur un large nombre de sphères et garnissages vrac par McDonald *et al.* (1979) et valant respectivement 180 et 1.8 (Saez et Carbonell, 1985, Grosser *et al.*, 1988, Levec et Carbonell, 2002). Les constantes d'Ergun sont couramment déterminées de manière empirique en écoulement monophasique. Petre *et al.* (2003) (Dans Iliuta *et al.* 2004)) proposent une estimation de ces constantes sur la base des simulations de l'écoulement décrites plus haut. Les auteurs explorent l'effet de l'angle de corrugation afin de tenir compte de l'effet de la tortuosité sur la perte de charge ; ceci se traduit par une dépendance des constantes d'Ergun vis-à-vis de θ l'angle de corrugation. La tortuosité représente le ratio entre la longueur effectivement parcourue par les fluides dans le lit de garnissage et la longueur verticale du lit de

garnissage et est définie comme l'inverse du cosinus de l'angle de corrugation (Holub *et al.*, 1990). Iliuta *et al.* (2003) présentent l'approche de calcul leur permettant de déterminer la dépendance des constantes d'Ergun en θ dans le cas d'un élément de garnissage de type Montz B1.250. Cet effet de l'angle de corrugation a été initialement étudié dans les travaux de Olujic *et al.* (1997). Iliuta *et al.* (2003) effectuent des simulations à la méso-échelle de l'écoulement du gaz dans ce garnissage et ce pour quatre angles de corrugation différents : 30°, 45°, 60° et 75°.

Sur la base de simulations similaires, Iliuta *et al.* (2004) proposent des constantes d'Ergun qui s'expriment de la manière suivante en fonction de deux constantes C_1 et C_2 et de l'angle de corrugation par rapport à la verticale :

$$E_1 = \frac{9}{8} \frac{C_1}{\cos \theta} \quad \text{et} \quad E_2 = \frac{6}{8} \frac{C_2}{\cos^2 \theta}$$

Pour un garnissage de type Mellapak 250.X dont l'angle de corrugation est de 30° par rapport à la verticale, Iliuta *et al.* (2004) calculent des constantes C_1 et C_2 qui valent respectivement 128 et 0.16. Nous retenons ces valeurs pour l'ensemble des simulations que nous entreprenons dans ce travail.

B/ Loi de traînée interfaciale

Dans le cas où l'interaction entre le liquide et le gaz devient significative (pour des vitesses de liquide et/ou de gaz non négligeables), la prise en compte de l'échange de quantité de mouvement aux interfaces fluides devient cruciale notamment afin de prédire la perte de charge dans le lit de garnissages (Al Dahhan *et al.*, 1998 ; Iliuta et Larachi, 2005). Le terme d'échange de quantité de mouvement aux interfaces est modélisé comme une force de traînée liée au cisaillement à l'interface ou aux effets de pression donnant lieu à une traînée de forme. Il traduit donc des échanges de quantité de mouvement pour des films ruisselants stationnaires sans arrachage de gouttelettes notamment. Cette prise en compte de la force de traînée est d'autant plus importante que le système fonctionne à forte pression (Attou *et al.*, 1999).

Attou *et al.* (1999) proposent une expression de la force de traînée en adoptant le même formalisme qu'Ergun utilisé pour modéliser les forces de frottements sur la surface de solide. Les auteurs proposent une force de traînée qui s'écrit en fonction de la vitesse relative des phases (gaz et liquide) et, suivant la même démarche que celle décrite dans le paragraphe précédent, proposent que le diamètre hydraulique du gaz soit défini de manière à prendre en compte la présence d'un film de liquide, dans une configuration de mouillage total. Lappalainen *et al.* (2009) reprennent la proposition d'Attou *et al.* (1999) en définissant une vitesse relative de phases fluides où la vitesse du gaz est modifiée (multipliée par un facteur $1/\alpha_G$). Cependant, cette correction ne semble pas avoir de fondement physique. Ce même formalisme d'Ergun est repris par Iliuta *et al.* (2004) en utilisant le concept de doubles fentes (« double-slit model ») exposé dans le paragraphe précédent où un mouillage partiel est pris en compte. Les auteurs écrivent la loi de traînée suivante :

$$\bar{R}_{IG} = -f_e \times \alpha_G \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{(\varepsilon - \frac{\alpha_L}{f_e})^2 \alpha_G} \mu_G + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{(\varepsilon - \frac{\alpha_L}{f_e})^2 \alpha_G} \rho_G \left\| \bar{U}_{SG} - \frac{\varepsilon - \frac{\alpha_L}{f_e}}{\alpha_L} \bar{U}_{SL} \right\| \left(\bar{U}_{SG} - \frac{\varepsilon - \frac{\alpha_L}{f_e}}{\alpha_L} \bar{U}_{SL} \right) \right) \quad (2.18)$$

Dans le formalisme proposé par Iliuta *et al.* (2004), les vitesses superficielles \bar{U}_{SG} et \bar{U}_{SL} des phases gaz et liquide respectivement s'écrivent en fonction des vitesses moyennes intrinsèques (ou interstitielles) \bar{U}_G et \bar{U}_L de la manière suivante : $\bar{U}_{SG} = \bar{U}_G \times (\varepsilon - \frac{\alpha_L}{f_e})$ et $\bar{U}_{SL} = \bar{U}_L \times \alpha_L$.

Pour des taux de mouillage proches de l'unité l'écriture de la vitesse superficielle du gaz peut

être écrite de manière similaire à celle du liquide en fonction de la saturation de gaz comme suit : $\vec{U}_{SG} = \vec{U}_G \times \alpha_G$.

En adoptant cette approximation, nous écrivons la loi de trainée suivante qu'on retiendra pour l'ensemble des simulations qu'on entreprend dans cette étude :

$$\vec{R}_{IG} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon \theta_G} \mu_G + \frac{E_2 a_g}{6} \rho_G \|\vec{U}_G - \vec{U}_L\| \right) (\vec{U}_G - \vec{U}_L) = -K_{IG} (\vec{U}_G - \vec{U}_L) \quad (2.19)$$

C/ Loi de mouillage

Nous nous sommes intéressés à la phénoménologie des écoulements gaz-liquide dans les garnissages dans le chapitre 1 de ce manuscrit. Le mouillage y apparaît comme un facteur dépendant à la fois des débits de fluides et des propriétés physiques du liquide, voire du solide. Plusieurs études ont pu mettre en exergue des aspects qualitatifs et quantitatifs du mouillage dans différents types de garnissages.

D'un point de vue quantitatif, plusieurs modèles et corrélations sont proposés dans la littérature afin de prédire le taux de mouillage pour des systèmes de garnissages ou lits de sphères différents, la plupart étant établis sur des bases empiriques. Une revue des différents modèles et corrélations est proposée par Lappalainen *et al.* (2008) et Shojaee *et al.* (2011). Pour des garnissages structurés, le taux de mouillage est souvent déduit de mesures d'efficacité de transfert, via des mesures d'absorption réactive ou via des mesures d'efficacité en distillation. Des corrélations empiriques reliant le taux de mouillage au débit de liquide, aux propriétés physiques de la phase liquide ainsi qu'aux caractéristiques géométriques du garnissage sont proposées par Henriques De Brito *et al.* (1994), Billet et Shultes (1993), Spiegel et Meier (1987), Olujic *et al.* (1997), etc. Pour des garnissages vrac, les modèles empiriques d'Onda *et al.* (1986) et Billet et Schultes (1993), à titre non exhaustif, peuvent être considérés. Dans le cadre de ce travail, et plus particulièrement pour le cas des garnissages structurés, nous avons porté notre choix sur le modèle théorique proposé par Brunazzi et Paglianti (1997) qui est cohérent avec une configuration d'écoulement en film laminaire sur des garnissages structurés. Le modèle permet de déduire le taux de mouillage en reliant la saturation de liquide à l'épaisseur du film liquide obtenue. L'épaisseur du film liquide est exprimée en fonction de la saturation, de la vitesse superficielle du liquide et de l'angle de corrugation θ' par rapport à l'horizontale de la manière suivante : $e = \left(\frac{3 \times \mu_L \times U_{LS}}{\alpha_L \sin^2(\theta') \rho_L g} \right)^{0.5}$. Le taux de mouillage est ainsi obtenu en considérant la

relation suivante entre la saturation, l'épaisseur du film liquide et la surface mouillée a_e du garnissage : $\alpha_L = e \times a_e$.

Les auteurs écrivent ainsi le modèle suivant pour le calcul du taux de mouillage :

$$f_e = \frac{a_e}{a_g} = \frac{\sin(\theta')}{a_g} \times \alpha_L^{1.5} \times \left(\frac{\rho_L \times g}{3 \times \mu_L \times U_{LS}} \right)^{0.5} \quad (2.20)$$

Dans l'équation 2.20, θ' désigne l'angle de corrugation du garnissage et U_{LS} la vitesse superficielle de liquide définie de la manière suivante : $U_{LS} = \alpha_L \times \sin(\theta') \times \|\vec{U}_L\|$.

D/ Force de dispersion

Plusieurs propositions ont été effectuées pour modéliser les effets de dispersion dans des lits fixes de sphères ou des lits de garnissages. Plusieurs mécanismes de dispersion ont été mis en exergue et afin d'en comprendre l'origine, il faut réexaminer la phénoménologie des écoulements gaz-liquide dans les garnissages.

- Dispersion mécanique

La dispersion mécanique d'une phase fluide est un mécanisme de transport macroscopique de cette phase sous l'action de processus aléatoires auxquels sont soumises les particules fluides durant leur progression dans le milieu poreux. Il ne faut pas confondre cette dispersion mécanique des phases avec celle d'un scalaire passif. Les perturbations aléatoires de vitesse induites dans les fluides donnent lieu à une dispersion des phases gouvernée par la convection à petite échelle et qui est indépendante de la diffusion moléculaire. Ces perturbations de vitesse sont primitivement générées par le positionnement aléatoire du support solide, mais également et par ricochet, si on peut dire, par la sensibilité de l'hydrodynamique diphasique non linéaire à cette géométrie aléatoire. Cette sensibilité pourra être modulée selon les régimes d'écoulements diphasiques et les types de support solide en fonction des propriétés de mouillage.

Dans le cas d'un garnissage parcouru par un débit modéré de liquide cisailé par un gaz, le gaz occupe l'essentiel du volume de vide et le liquide ruisselle sur la paroi de solide. Si des perturbations aléatoires génèrent un transport aléatoire des phases, c'est essentiellement en raison des mouvements ou positions aléatoires du film liquide, le gaz, de par sa mobilité, occupant pour sa part tout l'espace restant. Ce phénomène correspond à ce qu'on appelle dans la littérature « dispersion mécanique » (Lappalainen *et al.*, 2009, Lappalainen *et al.*, 2011). Afin de créer de la dispersion de traceur ou de fluide deux ingrédients doivent être réunis; un gradient de concentration (dans le cas d'un traceur) ou de fraction volumique (dans le cas d'un fluide) ainsi qu'un mouvement aléatoire. Les mécanismes qui donnent lieu à une dispersion de traceur ou de fluide sont de ce fait semblables à ceux d'une diffusion, toutefois la diffusion est souvent associée à des échelles moléculaires (Liu et Masliyah, 2005). En revanche, la dispersion est liée à l'écoulement; elle peut être générée par des fluctuations de vitesse à des échelles locales ou par un processus de formation de passages préférentiels de l'écoulement (« stream splitting » dans Liu et Masliyah, 2005). Ce dernier mécanisme est étroitement lié à la géométrie du milieu dans lequel évolue l'écoulement. Ce lien avec la géométrie a été, par ailleurs, souligné dans plusieurs travaux expérimentaux où l'étalement d'un jet de liquide introduit en tête d'un lit de garnissage a été étudié (Hoek *et al.*, 1986, Bemer et Zuideweg, 1978, Onda *et al.*, 1972). En conclusion la dispersion mécanique dépend à la fois d'inhomogénéités à l'échelle des films de liquide (épaisseur et vitesse) ainsi que de la géométrie souvent aléatoire des garnissages. L'origine de la dispersion mécanique peut être également appréhendée en observant le bilan de quantité de mouvement macroscopique décrit par l'équation 2.7. La prise de moyennes volumiques spatiales en vue de passage de l'échelle du pore à l'échelle macroscopique fait apparaître le gradient d'un tenseur de corrélations de fluctuations spatiales de vitesse à l'échelle d'un pore : $\vec{\nabla} \cdot \langle \tilde{u}_k \tilde{u}_k \rangle$. Une analogie entre le tenseur en question et le tenseur de Reynolds en écoulements turbulents peut être ainsi faite (Grosser *et al.* 1988); on peut donc lier les fluctuations spatiales de vitesse à l'échelle microscopique à un phénomène de dispersion à l'échelle macroscopique.

Un nombre limité de propositions de modèles macroscopiques permettant de prendre en compte la dispersion mécanique de la quantité de mouvement dans des milieux poreux en général est disponible dans la littérature et force est de noter que la plupart des propositions manquent de fondement théorique. En effet, si la mise en évidence de termes dispersifs est assez aisée en passant du système d'équations de Navier-Stokes à l'échelle microscopique à un système eulérien à la macro-échelle, la fermeture de ces termes est, à ce jour, peu maîtrisée.

Mewes et al. (1999) proposent la prise en compte de la force de dispersion mécanique via un tenseur d'étalement présent uniquement dans la phase liquide. Ils font ainsi apparaître dans l'équation de bilan de quantité de mouvement du liquide un terme de la forme : $\bar{\xi} \cdot (\bar{S} \cdot \bar{\nabla} \parallel \alpha_L \bar{U}_L \parallel)$

où $\bar{\xi}$ est le tenseur de résistance décrivant le frottement entre le liquide et le solide ($\bar{\xi} = -\frac{K_{LS}}{\varepsilon} \bar{I}_d$ dans le cas d'un milieu poreux isotrope) et \bar{S} un tenseur de dispersion de liquide dont ils ne développent pas une expression définitive. Cette proposition est intéressante de point de vue conceptuel car elle se généralise à des milieux poreux anisotropes.

Liu (1999) propose une mise en équation originale des écoulements diphasiques en milieux poreux isotropes. Grâce à une prise de moyenne volumique qui traite en détails les contributions des intégrales de surface aux frontières du volume élémentaire représentatif et qui prend en compte de manière spécifique la tortuosité, l'auteur fait apparaître des termes dispersifs à la fois dans les équations de conservation de la masse et dans les bilans de quantité de mouvement pour les deux phases. Liu et Long (2000) donnent l'expression des termes de dispersion pour un écoulement gaz-liquide à contre-courant avec mouillage total en partant du modèle mentionné ci-dessus. Dans l'équation bilan de quantité de mouvement du liquide deux tenseurs sont ainsi définis : un tenseur de dispersion associé au frottement contre le solide et un tenseur de dispersion associé à l'interaction avec le gaz. La force de dispersion introduite s'écrit de la manière suivante pour la contribution du frottement contre le solide :

$$\bar{F}_{disp,L,1} = \bar{\nabla} \cdot \left(\varepsilon \rho_L \bar{K}_{dL} \cdot \bar{\nabla} \left(\frac{\theta_L \bar{U}_L}{\tau_L} \right) \right).$$

La contribution du frottement interfacial donne elle aussi lieu à une force dispersive de la forme : $\bar{F}_{disp,IL} = -\bar{\nabla} \cdot \left(\varepsilon \rho_G \bar{K}_{dIG} \cdot \bar{\nabla} \left(\frac{\bar{U}_G}{\tau_G} - \frac{\theta_L \bar{U}_L}{\tau_L} \right) \right)$. Dans ces

expressions, τ_k (k=G, L), \bar{K}_{dL} et \bar{K}_{dIG} représentent respectivement la tortuosité, le tenseur de dispersion associé au frottement avec le solide et le tenseur de dispersion associé au frottement interfacial. Dans l'équation bilan de quantité de mouvement du gaz, seul un tenseur associé à l'interaction entre phases fluides est utilisé ($\bar{F}_{disp,IG} = -\bar{F}_{disp,IL}$). Cette proposition semble intéressante car elle permet de mettre en évidence des effets dispersifs dus aux deux types d'interactions dans le lit de garnissage. Cependant, la proposition de fermeture qui y est associée, à savoir l'expression des composantes des tenseurs \bar{K}_{dL} et \bar{K}_{dIG} devrait être considérée avec un regard critique, car elle est obtenue par analogie avec la dispersion d'un traceur.

Toujours dans le cadre de la modélisation des forces de dispersion, Lappalainen et al. (2009) se sont intéressés à la dispersion de liquide dans un lit fixe de sphères. Les auteurs soulignent deux mécanismes de dispersion importants : la dispersion mécanique et la dispersion capillaire. Nous examinerons la dispersion capillaire plus loin dans ce chapitre. Les auteurs introduisent donc une force associée à la dispersion mécanique notée $\bar{F}_{disp,k}$ (voir équation 2.12) dans les équations bilans de quantité de mouvement des deux phases ; le liquide et le gaz. Les auteurs écrivent pour un milieu poreux isotrope :

- Dans le liquide :

$$\bar{F}_{disp,L} = \theta_L K_{LS} \bar{U}_{D,L} - \varepsilon K_{IG} (\bar{U}_{D,G} - \bar{U}_{D,L}) \quad (2.21)$$

- Dans le gaz :

$$\vec{F}_{disp,G} = \theta_G K_{GS} \vec{U}_{D,G} + \varepsilon K_{IG} (\vec{U}_{D,G} - \vec{U}_{D,L}) \quad (2.22)$$

Dans les expressions décrites par les équations 2.21 et 2.22, K_{LS} , K_{GS} , K_{IG} correspondent aux coefficients de frottement définis dans les équations 2.16, 2.17 et 2.19. La force de dispersion mécanique est donc définie en multipliant ces coefficients de frottement par des vitesses spécifiques : des vitesses de dérive. La définition des forces de dispersion dans le liquide et dans le gaz fait intervenir deux vitesses de dérive : celle du liquide notée $\vec{U}_{D,L}$ et celle du gaz notée $\vec{U}_{D,G}$, la vitesse de dérive relative ($\vec{U}_{D,G} - \vec{U}_{D,L}$) étant définie comme la différence entre les deux. Lappalainen et al. (2009) proposent en outre les écritures suivantes pour les vitesses de dérive :

- Pour le liquide :

$$\vec{U}_{D,L} = -\frac{S \|\vec{U}_L\|}{\alpha_L} \vec{\nabla} \alpha_L \quad (2.23)$$

- Pour le gaz :

$$\vec{U}_{D,G} = -\frac{S \|\vec{U}'_G\|}{\alpha_G} \vec{\nabla} \alpha_G \quad (2.24)$$

La proposition de Lappalainen et al. (2009) rejoint celle de Liu (1999) et Liu et Long (2000) dans la prise en compte de deux termes de dispersion : un dans lequel intervient le frottement sur le solide et un dans lequel intervient le mouvement relatif des deux phases fluides. Les vitesses de dérive proposées par Lappalainen et al. (2009) font intervenir un coefficient de dispersion homogène à une distance : S (en m). Ce paramètre empirique est présenté par les auteurs comme un coefficient de dispersion classique intervenant dans une description du transport du débit de liquide par un modèle d'advection-diffusion de Fick (eq. 3 du chapitre 3 de ce manuscrit). Nous discuterons la validité de cette assertion dans le chapitre 4 de ce manuscrit. Le modèle de dispersion mécanique considère que la dispersion mécanique se fait dans le liquide ainsi que dans le gaz. Par définition, la résultante des forces de dispersion dues à l'interaction entre le liquide et le gaz est nulle ce qui suggère que la dispersion dans la phase gaz est conditionnée par celle dans la phase liquide et vice versa. La proposition de Lappalainen *et al.* (2009) est établie sur une analogie avec la diffusion d'un scalaire passif dans un écoulement, elle est donc purement phénoménologique. L'introduction d'un unique coefficient de dispersion S commun aux deux phases mériterait ainsi d'être analysée précisément. Cependant, cette proposition a l'avantage d'être à notre connaissance la seule proposition de loi de fermeture faisant intervenir un paramètre dont des mesures sont accessibles dans la littérature : le coefficient de dispersion S . Nous nous proposons ainsi de mettre en œuvre cette proposition afin de simuler l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage et nous commenterons et critiquerons cette proposition. Nous ne tiendrons pas compte toutefois de la correction introduite sur la vitesse de gaz \vec{U}'_g qui ne tient pas à une base théorique claire. Dans le cas des écoulements à forte fraction volumique de gaz auxquels nous nous intéressons, nous pouvons faire abstraction de cette correction sans changer la tendance générale du modèle.

- Dispersion capillaire

La prise en compte de la dispersion capillaire passe par la prise en compte de deux pressions différentes dans le liquide et dans le gaz dans les équations microscopiques qui régissent l'écoulement à l'échelle du pore (Whitaker (1986)). Cependant les modèles macroscopiques de type Euler-Euler couramment utilisés considèrent une pression unique dans tout le système,

égale à celle dans le gaz, et introduisent un terme source qui, lui, fait intervenir une pression capillaire supplémentaire. Dans cette configuration, l'équation bilan de quantité de mouvement du liquide à l'échelle macroscopique fait apparaître un terme source de la forme $\vec{F}_{disp,L,c} = \varepsilon P_c \vec{\nabla} \theta_L$; il s'agit de la force de dispersion capillaire. Cette force fait intervenir le gradient de fraction volumique du liquide, d'où son caractère dispersif, ainsi que la pression capillaire définie comme suit : $P_c = P_G - P_L$ (Attou and Ferschneider (2000), Boyer *et al.* (2005) or Jiang *et al.* (2002)). Pour des milieux poreux, les lois de fermeture permettant de donner l'expression de la pression capillaire P_c en fonction de θ_L sont obtenues soit de manière empirique soit à partir de considérations géométriques permettant de déterminer le rayon de courbure de l'interface gaz-liquide à l'échelle d'un pore (Attou and Ferschneider (2000), Jiang *et al.* (2002), Lappalainen *et al.* (2009-b)).

Dans le cas de notre étude, nous estimons que la force de dispersion capillaire est négligeable. Cette approximation est plausible car la taille des pores dans le cas des garnissages que nous considérons est relativement grande par rapport aux longueurs capillaires des liquides que nous considérons. Nous étayerons cette proposition dans le chapitre 3 de ce manuscrit.

Force est de noter que *stricto sensu* les pressions moyennes (au sens volumique) des deux phases ne sont pas simplement liées à la courbure moyenne H de l'interface. Whitaker (1986) rappelle en effet que le bilan de quantité de mouvement normal aux interfaces fait intervenir des forces visqueuses normales à l'interface. La relation entre les ordres de grandeurs de la force capillaire et de la force visqueuse s'écrit :

$$P_G - P_L = 2\sigma H + O\left(\max_k \left(\frac{\mu_k \|\vec{U}_k\|}{l_k}\right)\right) \quad (2.25)$$

l_k représente une échelle de longueur caractéristique d'un pore. La pression capillaire étant dans le cas du modèle eulérien qu'on considère propre à l'écoulement de liquide, nous donnons une estimation de l_k par celle de l'épaisseur e du film liquide, dans des conditions de ruissellement en film laminaire. D'autre part, nous approximons le rayon de courbure H par l'inverse du diamètre hydraulique d'un pore dont une estimation peut être donnée par $\frac{4\varepsilon}{a_g}$ (Stichlmair et al., 1989).

Ces hypothèses permettent de calculer les termes à gauche de l'égalité décrite par l'équation 2.25. Nous calculons ainsi 6 Pa pour le terme de Laplace faisant intervenir la tension superficielle et le rayon de courbure de l'interface et 0.5 Pa pour le terme visqueux. En considérant une saturation liquide maximale de 0.1 (ordre de grandeur des rétentions liquide qu'on calcule dans le cadre de ce travail) et un gradient de pression maximal de 12 mbar/m (perte de charge qui correspond à des conditions d'engorgement selon Spiegel et Meier, 1992), les ordres de grandeur des forces de dispersion capillaire et de pression dans (2.12) sont obtenus comme suit :

$$\|\vec{F}_{disp,L,c}\| = O\left(\frac{\varepsilon \times P_c \times \max(\theta_L)}{D}\right) \approx 1.5 Pa / m$$

$$\|\varepsilon \theta_L \vec{\nabla} P\| = O(\varepsilon \times \max(\theta_L) \times \max(\nabla P)) \approx 100 Pa / m$$

Les ordres de grandeurs obtenus montrent que la force de dispersion capillaire est négligeable devant les forces de pression. Dans cette étude, nous confondons ainsi la force $\vec{F}_{disp,k}$ intervenant dans les bilans de quantité de mouvement des phases avec la force de dispersion mécanique décrite plus haut.

2.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'approche retenue pour la simulation de l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage à l'échelle macroscopique. Un modèle de type Euler-Euler appliqué à un milieu poreux est retenu et le formalisme permettant de développer le système d'équations qui le régissent est exposé. Les équations de continuité et de bilan de quantité de mouvement des deux phases liquide et gaz dans un milieu poreux sont obtenues via un processus de prise de moyenne volumique de l'ensemble des grandeurs physiques intervenant à l'échelle microscopique d'un pore. Ce processus de prise de moyenne ou « processus d'homogénéisation » fait apparaître dans les bilans de quantité de mouvement de chacune des phases gaz et liquide des forces de frottement avec le solide formant la matrice poreuse, des forces de frottement entre phases ainsi que des forces de dispersion. Dans le but de fermer le système d'équations formant le modèle, nous nous sommes attardés sur les propositions de lois de fermeture de chacun des termes disponibles dans la littérature. Nous avons discuté ces propositions et étayé les raisons qui ont motivé notre choix de lois de fermeture. C'est dans ce cadre que les propositions d'Iliuta *et al.* (2004) de lois de fermetures des forces de frottement avec le solide et celle de la trainée entre fluides a été retenue. Pour la force de dispersion, très peu de propositions de fermeture sont proposées dans la littérature. Nous les avons discuté et retenu celle de Lappalainen *et al.* (2008) dont les bases théoriques sont les plus mises en évidence. Le taux de mouillage intervenant dans les différentes lois de fermeture ci-dessus est sera prédit par la corrélation de Brunazzi et Paglianti (1997).

CONTENU

3. Etude expérimentale de la dispersion dans une colonne gaz/liquide à garnissages fonctionnant à contre-courant.....	65
3.1 Dispositif expérimental	65
3.1.1 Installation.....	65
3.1.2 Garnissages.....	68
3.1.3 Fluides utilisés	70
3.2 Méthode de mesure par tomographie gamma	70
3.3 Présentation des essais	77
3.4 Écoulement en garnissage structuré avec alimentation centrale.....	80
3.4.1 Publication.....	80
3.4.2 Résultats complémentaires.....	96
3.4.3 Conclusion	99
3.5 Écoulement en garnissage vrac avec alimentation centrale.....	100
3.5.1 Coupes tomographiques : rétention locale sur une section	100
3.5.2 Profils de rétention globale de liquide	106
3.5.3 perte de charge globale.....	110
3.5.4 Distribution de liquide.....	115
3.5.5 validité du modèle d'advection-diffusion	118
3.5.6 Coefficient de dispersion ou Spread factor	120
3.5.7 Conclusion	124

3. ETUDE EXPÉRIMENTALE DE LA DISPERSION DANS UNE COLONNE GAZ/LIQUIDE À GARNISSAGES FONCTIONNANT À CONTRE-COURANT.

Dans ce chapitre nous présentons une synthèse des différentes expériences réalisées en laboratoire sur une maquette froide remplie de garnissages fonctionnant en gaz-liquide à contre-courant et équipée d'un système de mesure par tomographie Gamma. Ces expériences dédiées à l'étude de la dispersion du liquide ont consisté à créer une maldistribution en tête de colonne via une injection de liquide sous forme de jet central et à étudier le développement de la distribution de liquide dans la colonne. Afin d'évaluer le rôle du garnissage dans la dispersion du liquide, nous avons réalisé des essais dans un lit de garnissages structurés de type Mellapak 250.X (ou M250.X) puis dans un lit de garnissage vrac de type IMTP-40. Pour caractériser l'écoulement nous avons réalisé des mesures de fraction volumique locale de liquide sur différentes sections circulaires de la colonne par tomographie Gamma ainsi que des mesures de perte de charge globale le long du lit de garnissage.

Dans ce chapitre, une description détaillée de la colonne ainsi que de l'instrumentation qui s'y rapporte est d'abord proposée. Les mesures réalisées sur la colonne ont été effectuées lors d'un séjour de quelques mois sur le site de Lyon d'IFPEN. Une synthèse de l'ensemble des différents essais en termes de conditions opératoires, de fluides utilisés ainsi que de nombres adimensionnels caractéristiques est donc ensuite présentée. Nous nous attachons ensuite à préciser la méthode de Tomographie Gamma mise en œuvre lors des campagnes d'essais et décrivons le système de tomographie utilisé. Cela permet, en effet, de comprendre le sens précis de la mesure de fraction volumique de liquide. Enfin les résultats tirés de ces essais sont présentés et comparés à des résultats de la littérature.

3.1 DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL

3.1.1 INSTALLATION

- Détails de la colonne

Les essais ont été réalisés sur une maquette froide en fonctionnement sur le site de Lyon d'IFPEN : l'unité U717. Il s'agit d'une colonne en plexiglas de 400 mm de diamètre et dont la hauteur totale utile est de 2 m. La hauteur de colonne équipée de garnissages est de 1.35 m. La colonne U717 permet deux types de fonctionnement : à co-courant descendant et à contre-courant. Elle permet une alimentation en liquides de différentes viscosités/densités et peut être équipée de divers types de distributeurs de liquide. Elle peut, enfin, admettre des pressions qui ne dépassent pas 3.2 bar en relatif, des débits de liquide et de gaz inférieurs ou égaux respectivement à 30 m³/h et 1500 Nm³/h.

L'alimentation de la colonne en liquide se fait via une pompe centrifuge permettant un débit maximum de 30 m³/h et une pression maximale de refoulement de 3.9 bar. La régulation de pression de colonne est assurée par deux vannes équipées d'un by-pass de manière à pouvoir couvrir une gamme de débits de sortie importante. Les effluents liquides sont, eux, collectés via

un circuit de collecte en fond de colonne. L'alimentation en gaz est assurée par un compresseur. Deux vannes spécifiques permettent la régulation du débit de gaz en entrée de colonne. Les acquisitions de la pression et des débits des deux phases se font sur le PC situé en salle de contrôle via une application développée avec le logiciel "test point". Les données enregistrées sont les suivantes : le débit d'entrée d'eau dans la colonne (débitmètres nommés FT1 et FT2), le débit d'entrée d'air dans la colonne (débitmètres nommés FT3 dans la gamme 0 à 450 Nm³/h et FT6 dans la gamme 450 à 3 000 Nm³/h), le différentiel de pression sur l'ensemble du lit de garnissages (capteur différentiel nommé PDT4 pour la gamme 0-300 mbar et capteur différentiel nommé PDT5 pour celle de 0-7 mbar), et enfin la pression absolue en tête de colonne (capteur dénommé PT1).

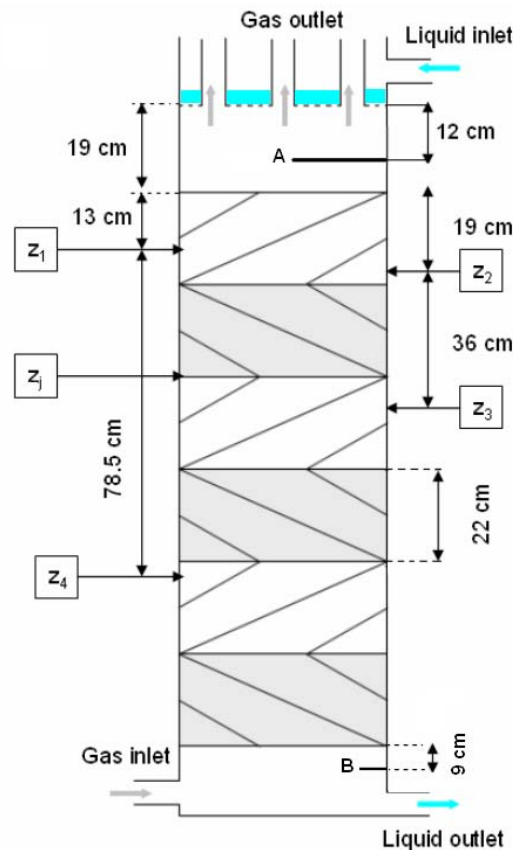


Figure 3.1: Schéma de la colonne U717

(les zones hachurées correspondent à l'alternance de galettes de hauteur 22 cm)

La Figure 3.1 donne une représentation schématique de la colonne U717 lorsque celle-ci est équipée de garnissages structurés et fonctionne en écoulement contre-courant. Les différentes cotes axiales indiquées sur la figure par Z₁, Z₂, Z₃, Z₄ et Z_i correspondent aux positions auxquelles des mesures par Tomographie Gamma ont été réalisées. Le choix de ces positions résulte d'un compromis entre les possibilités d'accès pour le tomographe et la nécessité de décrire l'évolution axiale sur la hauteur la plus grande possible. Par ailleurs, en garnissage structuré nous avons choisi les différentes cotes pour parcourir plusieurs galettes de remplissage et scruter la distribution de liquide à la jonction entre deux galettes (cote Z_i). Les points A et B correspondent aux positions entre lesquelles la perte de charge dans le lit de garnissage est mesurée.

- Distributeurs

Un distributeur de liquide est un organe essentiel pour l'injection de liquide dans une colonne à garnissage. Il est usuellement caractérisé par la densité de "points d'arrosage" (ou "drip point": d_p) relativement à la surface du plateau. Ces points d'arrosage sont les zones de taille restreinte qui assurent le passage du liquide à l'entrée de la colonne. Une densité importante de points d'arrosage, permettant un arrosage plus homogène du garnissage, assure *a priori* une bonne performance de séparation. Sulzer Chemtech Ltd¹ préconise, pour le cas de garnissages structurés, une densité minimum de 80 à 100 d_p/m^2 afin de tirer le meilleur parti du garnissage. Pour du garnissage vrac, type IMTP, Koch-Glitsch² considère qu'au-delà de 60-80 points d'injections par unité de surface, il n'y a plus d'influence du distributeur sur la performance du garnissage alors qu'en deçà on observe une baisse significative de cette dernière. Pour les distributeurs utilisés dans la recherche, certains auteurs préconisent en général des densités de points d'injection supérieures à 100 d_p/m^2 (117 d_p/m^2 pour des garnissages dont l'aire géométrique spécifique est de l'ordre 125 m^2/m^3 selon Henriques De Brito *et al.* (1994), 130 d_p/m^2 pour MellapakPlus 252.Y selon Fair et Bravo, 1990).

Afin de pouvoir fonctionner à contre-courant, un distributeur dit "à phases séparées" est ici utilisé pour alimenter la tête de lit en liquide. Ce distributeur, représenté de façon schématique sur la Figure 3.2, est muni de 7 cheminées où la phase gaz, ascendante, peut passer. La phase liquide, elle, est introduite latéralement dans une chambre d'alimentation et pénètre dans la colonne via des orifices présents sur la plaque inférieure du plateau en haut de colonne.

Le plateau N3 représenté sur la Figure 3.2 et dont les caractéristiques sont résumées dans le tableau 2 a été utilisé afin de créer une maldistribution de liquide en tête de colonne. A partir de ce plateau, certains orifices ont été bouchés afin de promouvoir une alimentation sous forme de jet central du liquide. Les plateaux N4 et N6 ainsi obtenus à partir du plateau original N3 et dont les vues de dessus sont données sur la Figure 3.2 permettent tous les deux une alimentation en jet central du liquide. Le plateau N6 permet d'injecter des débits de liquide plus importants car il contient plus d'orifices accessibles au liquide. Sur ces figures seuls les orifices marqués en noir ont été maintenus ouverts. Les caractéristiques géométriques des distributeurs de liquide sont résumées dans le Tableau 3.1.

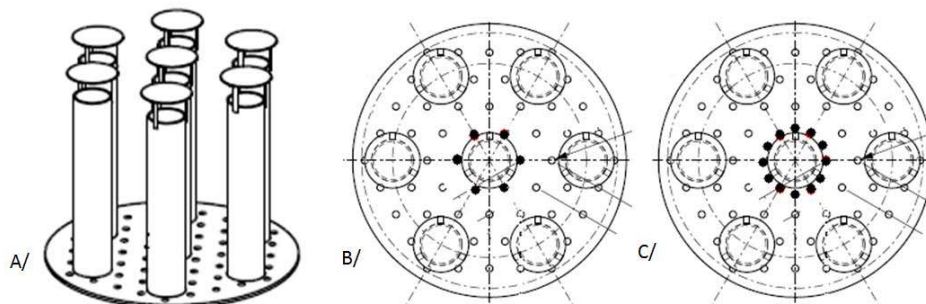
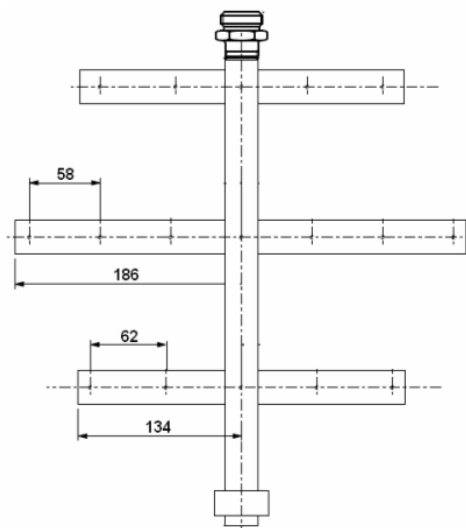


Figure 3.2: A/ schéma du distributeur N3 de liquide avec les cheminées de passage du gaz, B/ Vue de dessus du distributeur N4 ($16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h} < q_L < 36 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$), C/ Vue de dessus du distributeur N6 ($q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$), les points noirs correspondent aux trous ouverts au passage de liquide.

Tableau 3.1: Caractéristiques des distributeurs utilisés pour l'alimentation en liquide

N° plateau	nombre de cheminées	Diamètre des cheminées	nombre d'orifices	Diamètre des orifices	Hauteur des cheminées	d_p/m^2
N3	7	50 mm	54	10 mm	299 mm	430
N4	7	50 mm	6	10 mm	299 mm	47
N6	7	50 mm	12	10 mm	299 mm	95

Le gaz est, quant à lui, introduit via un distributeur de type Sparger ou peigne (schématisé sur la Figure 3.3) disposé en fond de colonne. Des travaux antérieurs à IFPEN ont montré que la distribution spatiale de gaz est peu sensible au type de distributeur utilisé en fond de colonne et qu'une densité de points d'injection de $100 d_p/m^2$ permet d'obtenir une bonne qualité de distribution dès l'entrée dans le lit de garnissage. Le sparger que nous avons utilisé comporte 17 trous d'injection dont les positions sont représentées par les croix sur la Figure 3.3.

**Figure 3.3 : Vue de dessus du distributeur de type Sparger du gaz (dimensions en mm)**

3.1.2 GARNISSAGES

Des essais ont été réalisés en utilisant deux types d'internes de colonne : un garnissage structuré de type Mellapak 250.X (dénommé M250.X dans la suite) puis un garnissage vrac de type IMTP-40. Les deux garnissages en question sont représentés sur la Figure 3.4 et leurs caractéristiques géométriques sont résumées dans le

Tableau 3.2. Les raisons qui ont motivé ce choix de garnissages ont été discutées dans le chapitre 1 de ce manuscrit.

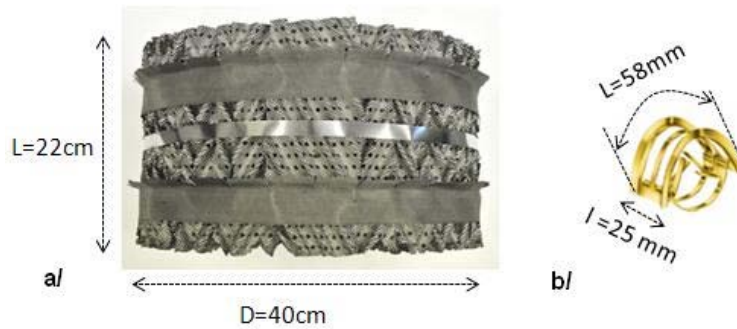


Figure 3.4 : Garnissages utilisés, a/ galette assemblée de M250.X, b/ Elément de type IMTP-40

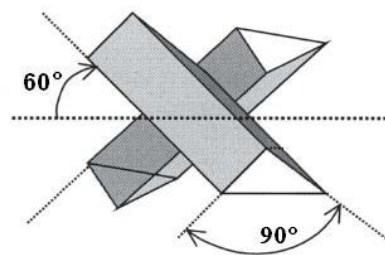


Figure 3.5 : Géométrie élémentaire d'un garnissage de type M 250.X

Tableau 3.2 : Caractéristiques géométriques des garnissages utilisés

Type de garnissage	Fraction de vide	Aire géométrique spécifique	Fabriquant
M 250.X	0.98	250 m ² /m ³	Sulzer Chemtech
IMTP-40	0.98	153 m ² /m ³	Koch Glitsch

Dans le cas des essais conduits sur le garnissage structuré M250.X, 6 galettes de garnissage de 22 cm de haut ont pu être disposées dans la colonne. Une galette correspond à un bloc de feuilles de garnissage solidaires (voir Figure 3.4). Les feuilles de garnissage sont des tôles pliées avec une longueur d'onde de cette corrugation égale à 3 cm et une amplitude de 1 cm. Elles sont par ailleurs poinçonnées et présentent donc des perforations de 5 mm de diamètre espacées de 8 à 12 mm. Enfin des aspérités ont été créées de manière périodique sur ces tôles (d'amplitude millimétrique tout au plus et espacées de 1 mm). Les galettes ont un diamètre égal à celui de la colonne soit 400 mm. Les feuilles plissées sont disposées dans une galette de la façon suivante.

¹ Sulzer Chemtech: <http://www.sulzer.com/>

²Koch-Glitsch : <http://www.koch-glitsch.com/>

Le plan de chaque feuille est vertical, mais la ligne de pli est inclinée de $\pm 60^\circ$ par rapport à la direction horizontale. Les feuilles sont disposées l'une contre l'autre avec des plis orientés alternativement de $+60^\circ$ et -60° . La géométrie élémentaire qui en résulte est représentée sur la Figure 3.5 qui montre deux plis élémentaires de feuilles métalliques ondulées de garnissage disposés l'un contre l'autre avec un angle de 60° par rapport à la direction horizontale. La disposition des galettes de garnissage est par ailleurs présentée de manière schématique sur la Figure 3.1 où on voit le changement dans l'orientation de deux galettes successives de couleurs grise et blanche. En effet, pour les essais réalisés, les galettes de garnissages ont été disposées en tournant chacune d'entre elles de 90° par rapport à celle qui la précède autour d'un axe vertical. Cette disposition est recommandée pour favoriser la redistribution des fluides dans la colonne et correspond à ce qui est pratiqué à l'échelle industrielle.

Enfin, dans le cas des essais réalisés sur le garnissage IMTP-40, les éléments de garnissages ont été empilés de manière aléatoire sur une longueur utile de lit égale à 132 cm. Le poids d'un élément de garnissage de type IMTP-40 est de 2.95 g et la densité d'empilement du lit rempli d'IMTP-40 vaut 146 kg/m^3 .

3.1.3 FLUIDES UTILISÉS

Dans les conditions de température et de pression de l'étude, les propriétés physiques des phases liquides considérées sont résumées dans le Tableau 3.3. Le choix de la MEA 30 wt.% a été fait, entre autres, dans le but d'étudier l'effet de la viscosité dynamique (~ 2.5 fois supérieure à celle de l'eau dans le cas de la MEA 30 wt.%) sur la perte de charge ainsi que sur la dispersion de liquide dans la colonne. La masse volumique et la tension superficielle dans le cas de ce solvant varient, cependant, peu par rapport au cas de l'eau. Ce choix a été également dicté par les applications industrielles de la MEA 30 wt.% qui est un solvant largement utilisé pour le lavage de gaz chargés en CO_2 (cf Chapitre 1). L'essentiel des essais a cependant été effectué sur le système Air/Eau.

Tableau 3.3 : Propriétés physiques des phases liquides utilisées (20°C, 1 bar)

Phase liquide	$\mu_L (\text{Pa} \cdot \text{s})$	$\rho_L (\text{kg} / \text{m}^3)$	$\sigma (\text{mN} / \text{m})$
Eau	1.00 E-03	998	73
MEA 30 wt.% (20°C)	2.48 E-03	1010	60

3.2 MÉTHODE DE MESURE PAR TOMOGRAPHIE GAMMA

- Système de Tomographie Gamma

Le système de tomographie gamma utilisé et représenté par la Figure 3.6 a été acquis par IFPEN en juillet 1999. Développé en collaboration avec le CEA/Damri, ce système a été mis en œuvre sur différentes configurations de lits fixes ou de colonnes à garnissage (Boyer et Fanget, 2002; Boyer et al., 2005; Alix et Raynal, 2008) ce qui confère à IFPEN une expertise de longue date sur la mesure par tomographie dans ces écoulements.

Dans ce travail, nous n'avons pas effectué de développement de cette méthode de mesure. Nous avons profité du savoir-faire de l'IFPEN, et, après avoir pris en main la méthode, et effectué des tests de validation sur la base de mesures antérieures, nous avons réalisé des campagnes de mesure qui nécessitent un fort investissement organisationnel en raison du taux d'occupation du système tomographique et des contraintes de sécurité associées.

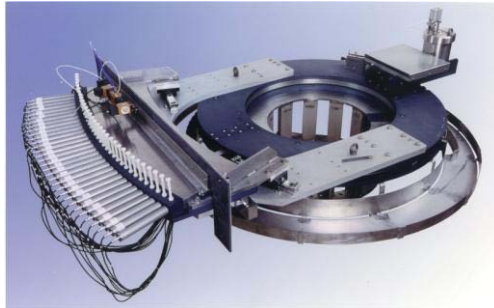


Figure 3.6 : Vue d'ensemble du système de tomographie Gamma, Boyer et Fanget (2002)

(à droite la source, à gauche les 32 détecteurs, au centre les rails de déplacement)

Le principe de la mesure tomographique est le suivant. Un système matériel de composition hétérogène est soumis à un rayonnement directionnel. Ce rayonnement est absorbé le long de son parcours de façon différentielle par les différents milieux qu'il traverse. Un détecteur sensible au flux photonique enregistre l'intensité du rayonnement après la traversée du système. Cette information qui résulte de l'absorption globale est combinée avec des mesures prélevées suivant d'autres directions de rayonnement pour reconstruire la distribution spatiale des milieux présents dans le système. Après étalonnage et reconstruction, pour des systèmes où les phases présentes ont des densités contrastées, on accède à la distribution des fractions volumiques des phases présentes. Compte tenu de l'absorption souvent très importante des internes et équipements des colonnes (catalyseurs, garnissages...) et des épaisseurs traversées (de l'ordre de 50 cm), le choix effectué par IFPEN s'est porté vers une source radioactive d'émission de forte énergie : le césium 137 d'énergie 662 keV. Pour diminuer le temps de mesure au maximum une géométrie de rayonnement en éventail a été choisie. Cette dernière permet de balayer tout le diamètre de la colonne simultanément pour un angle de tir donné (Figure 3.7). Pour diminuer le nombre de détecteurs, le choix s'est porté vers 32 détecteurs et le balayage pour un angle de rotation donné s'effectue en deux temps. En effet, les détecteurs sont espacés entre eux d'une longueur égale à deux fois leur largeur de mesure (13 mm) ; ainsi en déplaçant latéralement l'ensemble des détecteurs de 13 mm et en effectuant un tir tomographique, on simule une mesure effectuée avec 64 détecteurs. Les détecteurs sont des photoscintillateurs de BgO (Oxyde de Béryllium dopé au Germanium).

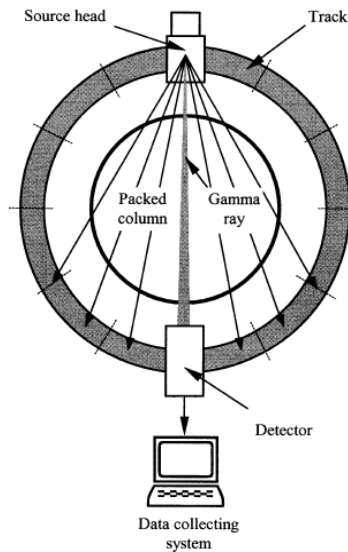


Figure 3.7 : Configuration des mesures tomographiques, Yin et al. (2002)

Comme le montre la Figure 3.6, l'ensemble de la source, du collimateur et des 32 détecteurs est fixé de façon solidaire sur une couronne circulaire qui se déplace en rotation par rapport à une deuxième couronne circulaire fixe. La couronne mobile se déplace sur des rails circulaires et l'entraînement de la rotation se fait par l'intermédiaire d'une roue crantée entraînée par un moteur pas à pas. La position du rail de détecteur et la course de la rotation (début et fin) sont contrôlées par des détecteurs de position. L'ensemble des signaux électriques issus des 32 détecteurs et des détecteurs de position ainsi que la commande des électrovannes des différents vérins transitent vers un PC situé dans une armoire électrique à proximité du tomographe. Le dialogue entre le PC de commande en salle de contrôle et le PC situé à proximité du dispositif expérimental s'effectue à l'aide de deux fibres optiques. L'acquisition d'une « coupe tomographique » complète est donc entièrement commandée depuis la salle de contrôle grâce à un logiciel de commande et d'acquisition.

Le logiciel d'acquisition a été initialement développé par le CEA sous windows 95 en visual basic. Dans sa version la plus récente, il permet l'acquisition de 4 coupes d'étalonnage qui servent de référence pour les coupes tomographiques mesurées en écoulements diphasiques. Plusieurs configurations d'étalonnage sont par ailleurs possibles :

- Colonne vide : sans garnissages ni liquide
- Colonne remplie de garnissage sec
- Colonne remplie de garnissage noyé en liquide
- Colonne remplie de garnissage drainé en liquide : ce cas correspond à un lit de garnissage rempli de liquide puis drainé.

Dans notre étude de garnissages M250.X et IMTP-40, il a été convenu d'effectuer des étalonnages à sec, la rétention statique étant négligeable. Pour des applications en lit fixe, où la rétention statique peut s'avérer importante, des étalonnages avec un catalyseur drainé en liquide sont plutôt utilisés.

- Mode opératoire et logiciel de commande/acquisition

Pour chaque étalonnage et chaque mesure deux paramètres importants sont à spécifier au niveau du logiciel de commande : le temps de mesure par tir tomographique (un tir correspond à la soumission du lit de garnissage à un flux photonique par la source radioactive) et le nombre

de positions angulaires du tomographe pour décrire un tour complet soit pour décrire un angle de 360 °. Dans le présent travail nous avons fixé le nombre de positions angulaires (ou nombre de tirs) à 64 et la durée d'un tir à 10 secondes. Ce temps est nécessaire pour obtenir un rapport signal sur bruit satisfaisant à la sortie des détecteurs. La résolution spatiale des images qu'on obtient est de 64 x 64 pixels. Une interpolation linéaire, au moment du traitement des images brutes, permet de passer à une pseudo-résolution de 128 x 128 qui augmente la qualité graphique des images obtenues. La résolution en pixels considérée fournit une résolution spatiale de 3.1 mm. La durée d'un étalonnage est de deux heures, celle d'une mesure est de 25 minutes. Il est donc clair que seul le champ moyenné en temps de la fraction volumique des phases est accessible à cette mesure.

Pour chaque pas de rotation la valeur du flux photonique I mesuré (I est un nombre de photons) pour chaque détecteur est enregistrée. Ces valeurs sont reportées sur une carte avec en ordonnée le nombre de pas de rotation et en abscisse le numéro du détecteur. Le graphe qui en résulte est appelé « sinogramme de comptage ». Ce sinogramme doit être interprété dans l'étape suivante de reconstruction pour donner accès à la distribution spatiale des phases. Lorsque un étalonnage est disponible, le sinogramme restitue plus précisément les valeurs de $\ln(I/I_0)$ où I correspond au flux photonique de la mesure et I_0 à celui émis par la source radioactive.

- Programme de reconstruction

Le programme de reconstruction a été initialement développé par l'équipe du CEA/Damri puis repris par une équipe du département de mathématiques appliquées d'IFPEN où plusieurs applications ont été rajoutées. Il fait appel à un algorithme de reconstruction d'image d'atténuation photonique qui est un algorithme de rétroprojection filtrée. Pour comprendre le contenu de l'opération de reconstruction, il faut rappeler le sens de la mesure tomographique. Si on considère un objet homogène illuminé par une source de rayons γ et traversé par un rayon mono énergétique de faible largeur, alors l'intensité du rayon mesurée en sortie de l'objet vérifie la loi de Beer-Lambert : $I = I_0 e^{-\mu' L}$ avec I_0 l'intensité du rayon à l'entrée (nombre de photons reçus par l'objet), L la distance parcourue dans l'objet et μ' (cm^{-1}) la constante d'atténuation linéique de l'objet. Si on considère maintenant une coupe transversale d'un objet non homogène dans le plan (x,y) traversée par un flux photonique (Figure 3.8) et si on appelle $f(x,y) = \mu'(x,y)$ la fonction continue qui représente la distribution de son atténuation,

l'équation reliant I à I_0 devient alors : $I = I_0 e^{-\int_L \mu'(x,y) dl}$ ou encore : $\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\int_L f(x,y) dl$. La

reconstruction tomographique revient donc à déterminer en chaque point (x,y) la valeur de $f(x,y)$ à partir de la mesure des intégrales $\int_L f(x,y) dl$ le long des droites concurrentes en x et y .

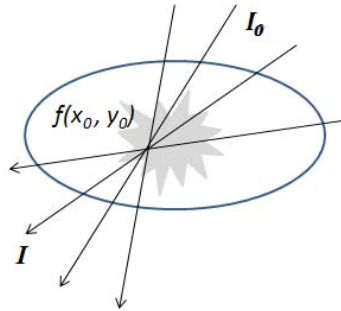


Figure 3.8 : Objet non homogène traversé par un flux photonique I

Différentes méthodes de reconstruction peuvent être utilisées afin de reconstruire l'image d'une section à partir de données de projection. Une des plus utilisées en tomographie est la méthode analytique de rétroprojection filtrée (Brooks et Di Chiro, 1976). Il s'agit de celle mise en œuvre dans le logiciel de reconstruction développé à IFPEN.

- Validation du système de tomographie

Le tomographe ainsi que le logiciel de reconstruction ont été validés en septembre 2000 par une équipe d'IFPEN en effectuant des mesures de référence en régime statique (sans écoulement) et dynamique en écoulement gaz-liquide.

Le temps d'exposition à un tir tomographique (durée d'un tir tomographie) a été fixé de manière à maximiser le rapport signal/bruit (nombre de photons $\sim 10^4$) et minimiser l'erreur de mesure. L'optimisation du temps d'exposition, évalué à 10 secondes pour la maquette sur laquelle les essais ont été réalisés, résulte d'un compromis entre différents types d'erreurs :

- ✓ L'erreur statistique qui est due au phénomène aléatoire de l'émission des photons gamma. Pour minimiser cette erreur, il faut compter un grand nombre de photons et donc augmenter le temps de mesure.
- ✓ L'erreur dynamique qui est due aux fluctuations de fractions volumiques de phases qui peuvent exister pendant le temps de comptage et donc fausser le calcul a posteriori des fractions volumiques de phases.

Les mesures en statique avec interposition de fantômes physiques (objets de densités connues répartis dans un lit de catalyseur) ont mis en évidence une erreur absolue sur les valeurs de rétention de liquide qui reste inférieure à 3%. Ces mesures ont montré également une augmentation de l'erreur absolue (qui reste néanmoins inférieure à 5%) sur les contours d'objets avec un très fort gradient en densité. C'est le cas par exemple à la périphérie de la colonne où l'image est imprécise sur des épaisseurs d'environ 10 mm. Une augmentation de l'erreur peut également avoir lieu au niveau du centre d'une section de colonne étant donné que l'atténuation dans cette zone est mesurée par un seul capteur diamétralement opposé à la source radioactive.

L'erreur dynamique due à une éventuelle variation des fractions volumiques des phases présentes dans la colonne au cours d'un temps de mesure a également été évaluée statistiquement. Des mesures de fraction volumique de gaz dans un écoulement gaz-liquide en lit fixe ont révélé une erreur dynamique faible qui ne dépasse pas 2%. Enfin, l'erreur statistique supposée répartie de manière aléatoire sur l'ensemble des capteurs et associée à une loi de Poisson ne dépasse pas 2% en absolu.

La validation du système de tomographie Gamma ainsi que du programme de reconstruction ont fait l'objet d'une publication de Boyer et Fanget (2002). Le système a depuis été largement

utilisé, tant sur des systèmes catalytiques que sur des lits de garnissages (voir par exemple Harter et al. 2001 et Sidi-Boumedine et Raynal 2005 respectivement).

- Protocole de mesure de la rétention de liquide
 - Mesure par différence lit sec-lit irrigué :

Afin de mesurer l'atténuation du liquide dans la colonne, un étalonnage qui permet de tenir compte de l'atténuation du garnissage ainsi que des parois de la colonne est nécessaire. L'atténuation du liquide est ainsi obtenue par différence des deux atténuations : celle de la colonne où le liquide s'écoule et celle de l'étalonnage. Dans le cas de nos mesures, un étalonnage correspond à des conditions d'une colonne sèche. Une étude de qualification du tomographe précédemment élaborée par une équipe d'IFPEN a montré la nécessité d'effectuer des étalonnages de manière régulière afin de garantir la reproductibilité des mesures. Dans le cas de notre étude, pour une position donnée du tomographe, un étalonnage journalier a été fait. L'atténuation du liquide en écoulement est ainsi obtenue par différence d'atténuations de la colonne en écoulement et celle de la colonne sèche. Les pixels des images reconstruites à partir des données de projections soustraites représentent donc exclusivement la distribution de la phase liquide dans les sections analysées.

Le diagramme présenté par la Figure 3.9 montre la méthodologie permettant de remonter aux valeurs de rétention de liquide via une mesure tomographique. Le calcul de la rétention de liquide nécessite outre la connaissance de la valeur d'atténuation obtenue par reconstruction tomographique, celle de deux autres paramètres : le coefficient de proportionnalité K et l'atténuation physique du fluide considéré μ_f .

- Mesure du coefficient de proportionnalité K

Les valeurs d'atténuations $\mu'(i,j)$ obtenues en chaque pixel par reconstruction tomographique sont proportionnelles à l'atténuation physique $\mu^*(i,j)$ du matériau traversé par le flux photonique : $\mu^*(i,j) = K \mu'(i,j)$. Ceci est dû au fait qu'un rayon Gamma qui traverse la colonne n'est pas entièrement linéaire et présente un angle solide non nul. Le paramètre empirique K a été déterminé lors d'une étude antérieure par une équipe d'IFPEN en disposant dans le lit de garnissage trois cylindres massifs (en plexiglas, polypropylène et polystyrène) puis en les disposant directement entre la source radioactive et les capteurs et en effectuant une mesure dans chaque cas. Pour la colonne que nous considérons dans le cadre de ce travail, un coefficient de proportionnalité K de 3.54 a été déterminé. A titre indicatif, ce coefficient vaut 2.16 pour une colonne de diamètre 600mm. Les mesures citées ci-dessus font l'objet d'un rapport confidentiel d'IFPEN.

- Mesure de l'atténuation des fluides

La mesure de l'atténuation physique μ_f des fluides utilisés a été également effectuée lors d'études antérieures en disposant des échantillons de liquides entre la source radioactive et les détecteurs. Cette atténuation vaut 0.08 cm^{-1} dans le cas de l'eau et 0.076 cm^{-1} dans le cas de la MEA 30 wt.%.

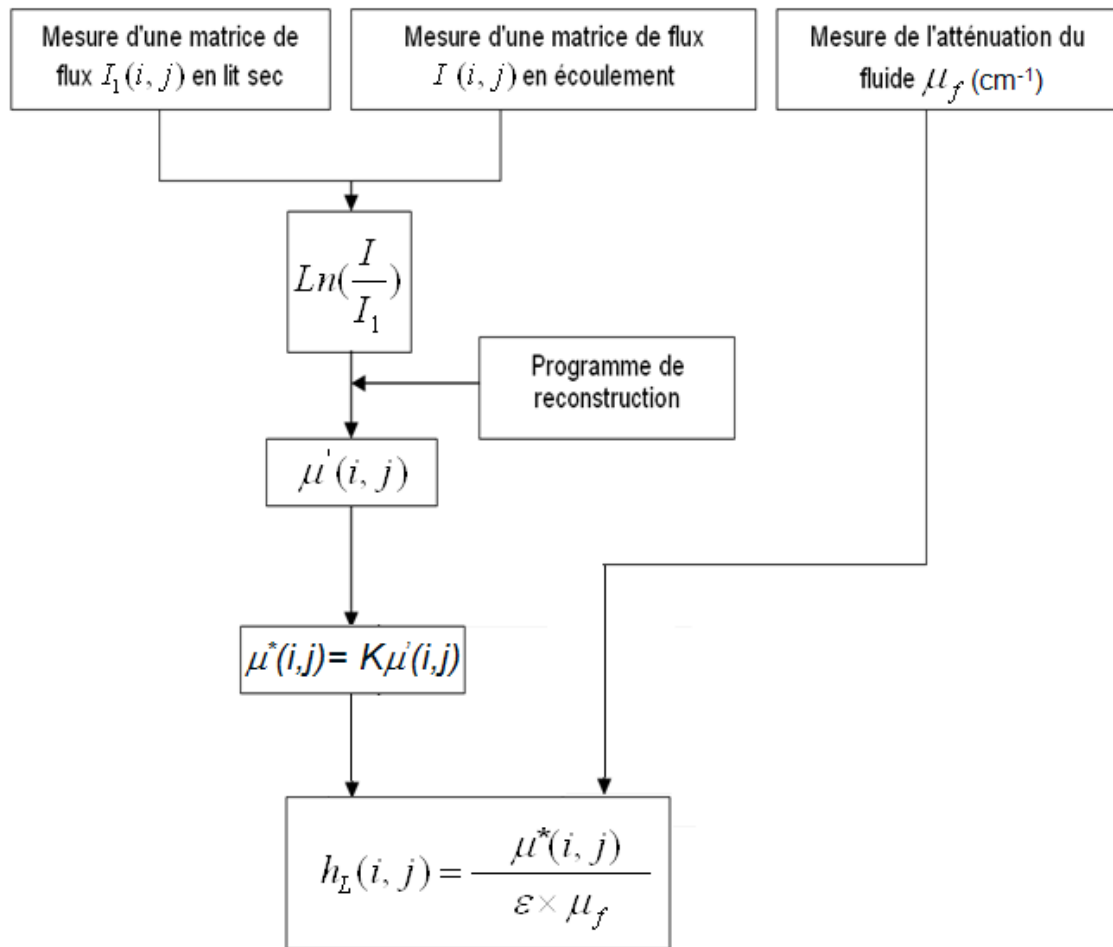


Figure 3.9 : Étapes de calcul des valeurs de rétention

3.3 PRÉSENTATION DES ESSAIS

Le but de nos essais est d'étudier la dispersion d'un jet de liquide introduit en tête de colonne. Des mesures de fraction volumique locale de liquide sur une section circulaire de la colonne à différentes cotes axiales du lit de garnissages ont été réalisées pour deux types de garnissages (M250.X et IMTP-40), pour différents débits de gaz et de liquide et deux systèmes gaz/liquide différents : le système Air/Eau et le système Air/ MEA 30 wt.%. Les essais ont été conduits à une température moyenne de 20°C et à pression atmosphérique.

Les différentes conditions opératoires en termes de charge de liquide q_L et de facteur cinétique de gaz F_S sont résumées dans les Tableaux 3.4 et 3.5 dans le cas du garnissage M250.X et les Tableaux 3.6 et 3.7 dans le cas d'IMTP-40. Pour le système Air/Eau, quatre débits de liquide correspondant à quatre taux d'arrosage ont été appliqués ; 2, 3.5, 4.5, 7 m³/h soit 16, 28, 36 et 56 m³/m²h. Cette dernière valeur correspond au débit maximum admissible par le plateau de distribution N6 présenté sur la Figure 3.2. Un dépassement de ce débit entrainerait le liquide dans les cheminées de gaz et fausserait de ce fait les conditions d'entrée de liquide, cruciales dans le cas de cette étude. On estime à 30m³/m²h le débit de solvant nécessaire à capter 90% du CO₂ présent dans les fumées émises par une centrale à charbon de capacité 1400 MW th dans le cas d'un procédé à la MEA 30 wt.% (Lecomte et Broutin). Cette valeur, indépendante du diamètre de la colonne d'absorption considérée dépend de la capacité du solvant (équilibre thermodynamique liquide-vapeur) et de celle du garnissage (débit de fumées admissible). Pour un débit de fumées à traiter fixé, elle peut être revue à la baisse dans le cas de l'utilisation d'un solvant plus capacitif. En revanche, le traitement d'un plus grand débit de gaz nécessite systématiquement un plus grand débit de solvant. Ceci nous a amené à considérer des débits de liquide inférieurs à 30 m³/m²h et d'autres qui lui sont supérieurs.

Concernant le débit de gaz, quatre débits ont été testés pour chaque débit de liquide appliqué de manière à se placer à des taux bien définis du point d'engorgement soit à 20% , 40%, 60% et 80% du débit de gaz entraînant l'engorgement de la colonne. La définition des points d'engorgement se fait au préalable de chaque campagne d'essais à débit de liquide donné. Nous précisons plus loin dans ce manuscrit la méthode de détermination des points d'engorgement que nous avons adoptée.

Les essais effectués avec le système Air/MEA 30 wt.% ont été réalisés à deux débits de liquide pour chaque garnissage testé ; 16 et 28 m³/m²h. Au-delà de ces débits, le liquide forme une émulsion et une tendance au moussage est observée ce qui rend les essais irréalisables en l'absence d'une injection continue d'un produit anti-moussant. Un résumé des essais en question est présenté dans les Tableaux 3.5 et 3.7. Nous avons également reporté dans ces tableaux une synthèse des valeurs des nombres adimensionnels calculés pour chaque cas à savoir les nombres de Reynolds liquide et gaz ainsi que les nombres de Froude et de Weber pour les deux fluides. Ces nombres ont été définis dans le chapitre 1 de ce manuscrit.

Tableau 3.4 : Conditions opératoires, M 250.X, système : Air/Eau

$q_L (m^3 / m^2 h)$	$F_S (Pa^{0.5})$	$\frac{F_S}{F_C} (%)$	Re_L	Re_G	We_L	Fr_L
16	0.74	20		921		
	1.47	40	71	1829	1.2	2.3
	2.21	60		2749		
	2.95	80		6669		
28	0.61	20		778		
	1.23	40	124	1568	1.9	2.7
	1.84	60		2346		
36	0.56	20		724		
	1.12	40	160	1446	2.4	3.0
	1.69	60		2182		
	2.25	80		2904		
56	0.48	20		646		
	0.95	40	248	1279	3.0	2.6
	1.43	60		1931		
	1.91	80		2579		

Tableau 3.5 : Conditions opératoires, M 250.X, système : Air/MEA 30wt. %

$q_L (m^3 / m^2 h)$	$F_S (Pa^{0.5})$	$\frac{F_S}{F_C} (%)$	Re_L	Re_G	We_L	Fr_L
16	0.71	20		893		
	2.75	80	29	3464	1.0	1.4
28	0.64	20		833		
	2.45	80	51	3164	1.7	1.6

Tableau 3.6 : Conditions opératoires, IMTP-40, système : Air/Eau

$q_L (m^3 / m^2 h)$	$F_S (Pa^{0.5})$	$\frac{F_S}{F_C} (\%)$	Re_L	Re_G	We_L	Fr_L
16	0.74	20		1592		
	1.47	40	124	3202	2.0	1.1
	2.21	60		4840		
	2.95	80		6506		
28	0.6	20		1316		
	1.2	40	217	2645	4.6	2.5
	1.81	60		4001		
	2.41	80		5389		
56	0.52	20		1162		
	1.03	40	434	2360	8.4	3.0
	1.55	60		3554		
	2.06	80		4764		

Tableau 3.7 : Conditions opératoires, IMTP-40, système : Air/ MEA.30%

$q_L (m^3 / m^2 h)$	$F_S (Pa^{0.5})$	$\frac{F_S}{F_C} (\%)$	Re_L	Re_G	We_L	Fr_L
16	0.64	20	51	1370	2.9	1.6
	2.57	80		5628		
28	0.56	20	89	1219	5.4	2.3
	2.26	80		5044		

Les nombres de Reynolds de liquide restent globalement faibles dans tous les cas traités et compatibles avec un écoulement en film où des nombres de Reynolds de film sont de l'ordre de 10 à quelque centaines (Ishigai et al, 1972). Des effets d'inertie peuvent toutefois avoir lieu dans l'écoulement de liquide comme expliqué dans le chapitre 1 de ce manuscrit. A titre d'exemple, dans le cas d'un garnissage structuré, Y. Haroun (2008) a réussi à mettre en évidence l'apparition de recirculations de liquide dans les creux des feuilles de garnissage indiquant ainsi le passage d'un régime d'écoulement en film laminaire à un régime inertiel et ce pour des nombres de Reynolds en apparence faibles (de l'ordre de 50). L'effet inertiel semble également légèrement prépondérant par rapport à l'effet de la gravité et de la tension de surface pour la plupart des essais réalisés. Ceci correspond, en effet, à des nombres de Froude et de Weber supérieurs à l'unité. Les valeurs du nombre de Reynolds dans le gaz, indiquent, elles des régimes fortement inertiels et ce même pour les plus faibles débits de gaz. Nous vérifierons *a posteriori* la

présence d'effets inertiels importants notamment en observant les courbes de perte de charge dans chacun des garnissages utilisés.

3.4 ÉCOULEMENT EN GARNISSAGE STRUCTURÉ AVEC ALIMENTATION CENTRALE

Dans cette partie de ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude de l'écoulement gaz-liquide dans le garnissage structuré M250.X. Nous présentons les principaux résultats hydrodynamiques et portons une attention particulière à la caractérisation du phénomène de dispersion de liquide dans le dispositif. Ces résultats ayant fait l'objet d'un article publié dans la revue *Chemical Engineering Science* (Fourati *et al.*, 2012), nous nous proposons de les présenter dans leur version publiée en langue anglaise. L'article qui constitue le cœur de cette partie est organisé en 5 sections principales. Dans la première nous introduisons le contexte général du travail mené, décrivons la phénoménologie de l'écoulement dans les garnissages structurés et proposons une revue bibliographique des principales études s'y rapportant dans la littérature. Dans la deuxième section, nous décrivons le modèle d'advection-diffusion ayant servi à décrire la dispersion de liquide dans les garnissages. Il faut, par ailleurs noter que ce modèle sera repris dans la section 3.5 de ce chapitre pour décrire la dispersion de liquide dans un garnissage vrac. Ce modèle ayant été introduit dans la littérature sur des bases empiriques, nous discuterons d'ailleurs plus loin dans le texte sa cohérence avec les principes fondamentaux de la mécanique des fluides. Nous proposons, ensuite dans la section 3 de l'article une description synthétique du dispositif expérimental et de la méthode de tomographie gamma ainsi qu'une synthèse de l'ensemble des essais réalisés sur le garnissage M250.X. Ces aspects expérimentaux ont déjà fait l'objet des sections précédentes de ce chapitre de manière plus étayée. En outre, nous présentons dans la section 4 de l'article une synthèse des principaux résultats expérimentaux relatifs au garnissage M250.X, les commentons et les confrontons à ceux de la littérature. Une conclusion regroupant les principaux résultats ainsi que les idées essentielles qui ressortent de ce travail est également proposée à la section 5. Les sections 2 et 4 de cet article présentent donc le cadre d'interprétation des résultats expérimentaux, ces résultats et leur discussion. Le lecteur devra donc *a minima* lire ces deux sections. Mais, s'il le souhaite, il pourra lire l'article dans son ensemble pour avoir une idée synthétique de cette étude expérimentale.

Afin de justifier l'hypothèse de rétention statique négligeable adoptée dans le cadre des résultats présentés dans la publication, nous proposons à la suite de l'article, une partie renfermant des résultats complémentaires relatifs à la rétention statique dans le cas des deux systèmes de fluides utilisés dans ce travail.

Enfin, nous présentons en annexes 1, 2 et 3 du chapitre 3 des résultats complémentaires afin de compléter ceux présentés synthétiquement dans la publication. Ces résultats englobent des cartes de rétention locale pour les deux systèmes de fluides utilisés, des profils radiaux de rétention moyennes pour différentes conditions de débits de liquide et de gaz ainsi qu'une confrontation des données expérimentales de rétention avec le modèle d'advection-diffusion pour les deux systèmes de fluides utilisés.

3.4.1 PUBLICATION



Experimental study of liquid spreading in structured packings

M. Fourati^{a,b}, V. Roig^b, L. Raynal^{a,*}

^a IFP Energies nouvelles, Rond Point de l'échangeur de Solaize, BP 3, 69360 Solaize, France

^b Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Université de Toulouse (INPT, UPS) and CNRS, Allée Camille Soula, 31400 Toulouse, France

RESEARCH HIGHLIGHTS

- ▶ Original measurements of liquid dispersion in a counter-current packed bed equipped with a modern high efficiency packing.
- ▶ Use of a high resolution gamma ray system.
- ▶ In a column of large size diameter with different fluids over a large range of operating conditions.
- ▶ A comparison of the experiments with a 2D model using a spread factor.
- ▶ Data are of high interest for further CFD modeling since they allow for the determination of closure laws of gas–liquid flow in packed beds.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 3 February 2012

Received in revised form

16 May 2012

Accepted 20 May 2012

Available online 8 June 2012

Keywords:

CO₂ capture

Structured packing

Two-phase flow

Distillation

Absorption

Tomography

ABSTRACT

Optimization of industrial gas–liquid columns dedicated to CO₂ capture requires prediction of liquid distribution within packed beds. In this context, liquid hold-up as well as liquid spreading from a source point have been investigated for Mellapak 250.X structured packing. Local liquid hold-up measurements have been achieved in a 400 mm diameter column by means of gamma-ray tomography with operation in the counter-current mode at different positions downstream the source point injection. Liquid hold-up and retention map measurements have been performed for two fluid systems: Air/Water and Air/MEA 30 wt%. A correlation that relates global liquid hold-up and liquid load taking into account liquid viscosity is proposed. This correlation has been further used to determine spread factors using a simple dispersion model for all investigated operational conditions. Liquid dispersion model is found to well reproduce experimental data in the range of operational conditions that were tested which enables to determine spread factors for various operating conditions. The spread factor is observed not to vary with the liquid load, the gas capacity factor in the range of 20–80% of flooding or the liquid viscosity. This led us to stipulate that liquid dispersion is controlled by packing geometry only. Nevertheless, the effect of surface tension on liquid hold-up and dispersion is discussed since its effect is not fully understood and calls for further experiments if one wants to apply those results for hydrocarbons.

© 2012 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Packed columns are widely used for gas/liquid absorption processes since they generate subsequent exchange surface between phases with limited pressure drop in comparison with other technologies such as tray columns. Such packed columns are considered for CO₂ capture technologies, either for CO₂ post-combustion with amines absorption unit or for CO₂ oxy-combustion with air separation unit. It is considered by IEA that CO₂ capture technologies could handle up to 19% of CO₂ emissions. However, the deployment of this technology requires process optimization with associated cost

reduction, both in terms of operational expenditures (Opex) and capital expenditures (Capex). As underlined in Raynal et al. (2011), many studies concerning post-combustion processes development deals with solvent selection and less work is dedicated to column design optimization. Such an optimization is required in order to decrease the cost of investment of capture processes. It can be achieved either by developing new high performance packings and/or by achieving the most adequate design of packed columns. Such an optimum design is linked to the choice of packing, the number of packed beds and their height, the interaction between gas and liquid distributors with the gas/liquid flow within the packed bed. All this is strongly linked to liquid dispersion and gas/liquid interaction in the packed bed.

The two-phase flow in a packing consists of thin trickling liquid films sheared by co- or counter-current gas flow that

* Corresponding author. Tel.: +33 4 37 70 25 27; fax: +33 4 37 70 20 09.
E-mail address: ludovic.raynal@ifpen.fr (L. Raynal).

circulates in communicating tortuous channels. The resulting flow in a packed column is complex since it induces interactions between various scales going typically from liquid films (100 μm) to column scale (10 m). Packings include structured and random packings that have different capacities and separation performances permanently improved by manufacturers (Olujic et al., 2006). Unfortunately, little work is done in terms of extrapolation that ensures that performances obtained at laboratory scale (column diameter usually less than 400 mm for bed height about 1 m) would be obtained at large scale (bed height up to 10 m). In order to design packed columns, experimental studies have been performed to determine global pressure drop through packed bed as well as liquid hold-up necessary for prediction of mass transfer performances. A lot of these studies focused on packings hydrodynamic and mass transfer characterization, all considering homogeneous flow configuration (Iliuta and Larachi, 2001; Alix and Raynal, 2008; Sidi-Boumedine and Raynal, 2005). Pressure drop, hold-up and transfer coefficients models coming from experimental knowledge are therefore built upon the assumption of homogeneous flow distribution in the packed bed. This assumption is far from being relevant at industrial scale since maldistributions do occur even with optimized liquid and gas distributors in the column inlets. The limiting effect of maldistribution on efficiency has been recognized in many studies since it impacts pressure drop and may reduce the effective exchange area between phases (Olujic et al., 2006). The maldistribution of liquid flow is the most detrimental in terms of separation efficiency. However, gas flow tends to maintain a relatively homogeneous distribution in the packed bed and does not affect packing efficiency even in case of severe gas initial maldistribution as reported in the work of Mohamed Ali et al. (2003). In order to limit the detrimental effect on separation performances, liquid collectors and redistributors of liquid are generally inserted at different axial positions of the column. In order to homogenize the flow, length intervals between the redistribution devices need to be optimized. Traditionally, such bed lengths are taken equivalent of ten to twenty theoretical trays according to Hoek et al. (1986). These industrial design rules are still empirical and often limited to given distributor and packing. In order to improve design rules or numerical modeling of packed beds, a better knowledge of the mechanisms involved in the liquid dispersion phenomenon is required. This has been the motivation for this study.

Dispersion of the liquid across the packed bed results from several mechanisms: (i) the liquid films' flow on walls of complex geometry more or less random with corrugations, abrupt slope changes, anisotropic orientations etc. that modulate local liquid volume fraction; (ii) the liquid films are sheared by turbulent gas flow that may also generate liquid volume fraction fluctuations; (iii) finally any heterogeneity of solid surface physical properties may generate differential surface wetting. All these random mechanisms induce a global transport of both phases named dispersion which acts in all directions. The modeling of the liquid dispersion is still quite limited. Numerical simulation of two-phase flow using two-fluid models have recently been used to predict local distributions of phases and occurrence of maldistributions in catalytic packed beds (Lappalainen et al., 2009; Mewes et al., 2009), the latter being characterized by small voidage (less than 50%) and by small characteristic length, the diameter of the particles being one order of magnitude less than the characteristic length in standard structured packings. Local distribution of phases is partially governed by dispersion in these models. Lappalainen et al. (2009) identified two dispersion mechanisms; mechanical dispersion that is induced by the random local geometry of the packing and capillary dispersion due to capillary pressure gradients. The authors adopted phenomenological closure

laws for dispersion terms that reproduce experimental liquid spreading. Taking correctly into account the dispersion in generic flow configurations requires, however, specific development of closure laws. First a better physical analysis of the mechanisms governing dispersion of liquid in packed beds is required and second adequate dispersive terms should then be added to fundamental balances of the liquid.

Many previous experimental studies have focused on liquid dispersion. Such measurements, considering dispersion from a point source, have been performed in catalytic beds and packed beds equipped with random packings and corresponding spread factors have been determined. The spread factor is linked to liquid dispersion model in a local liquid transport model (see Hoek et al., 1986 for precise definition of spread factor). In the case of random packings, experiments with liquid dispersion from a point source have been carried out and radial dispersion was reported to be a driving mechanism in liquid transport. Onda et al. (1972) carried out dispersion experiments on 4 mm Berl saddles and Raschig rings packing types for liquid loads varying from 3 to 30 $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and with no gas flow. Authors varied ring sizes as well as liquid surface tension and noticed that spread factor does not depend on liquid load but only on ring size and surface tension. Same behavior, regarding the effect of ring size on spread factor, was observed by Bemer and Zuiderweg (1978). These authors did dispersion experiments from a point source with no gas on glass and Teflon coated Raschig rings. Neither the effect of solid wettability nor the surface tension on dispersion was reported for the range of rings sizes considered (1 to 3 cm). Both cited studies used collectors on bottom of the packed bed to access liquid flow rate radial profile; calculated liquid spread factors were found to be in the range of 1–4 mm for the considered random packings.

Modern metallic random and structured packings known for their high performance (high void fraction, low pressure drop, high effective exchange area) have been widely studied as well. However, no spread factors were previously calculated on structured packing even if liquid distribution in such packings has been explored. Olujic et al. (2006) carried out liquid distribution measurements on Montz Pak B1-250M and Montz Pak B1-250 packings using liquid collectors at different bed heights. These authors varied liquid loads up to 60 $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$ using a narrow trough distributor that has a drip point density of 100 m^{-2} . They applied counter-current gas flow at pre-loading, loading and flooding conditions and characterized liquid distribution quality by calculating a global maldistribution indicator (see Hoek et al., 1986 for definition of maldistribution indicator). This indicator characterizes the heterogeneity of liquid distribution whatever its origin and is therefore not simply linked to dispersion mechanisms. Toye et al. (2005) have also studied liquid distribution in a 10 cm diameter column packed with KATAPAK-SP.12 structured packing. Authors measured liquid local as well as section-averaged hold-ups for liquid rates ranging from 13 to 38 $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$ without gas flow restricting, thus, their results to low-interaction gas/liquid regimes.

In the present work, a quantitative characterization of liquid distribution in a counter-current gas/liquid packed column filled with Mellapak 250.X structured packing has been carried out using gamma ray tomography. We focused on Mellapak 250.X structured packing which is very close to the Mellapak 250.Y, a standard in the distillation and absorption industry, but allows for higher capacities which is a key point for CO_2 capture.

The use of tomography system allows to have an insight into the packed bed at different axial positions while the column is operating and allows following axial flow evolution which cannot be done with liquid collectors used in previous studies. Liquid was injected at top of the column through orifices situated at the

center of a chimneys' tray and counter-current gas flow is applied using a diffuser at the bottom of the column. Liquid hold-up measurements were carried out over a large range of experimental conditions including different liquid loads and gas kinetic factors varying from 20% to 80% with respect to flooding conditions. Liquid spread factors have been, therefore, determined in order to characterize liquid dispersion.

In this paper, a simple liquid spreading model is first proposed considering the spreading of a point source within an infinite packed bed in Section 2. Second, the experimental set-up and the gamma ray measuring system are described in Section 3. Finally raw liquid hold-up maps obtained from tomography as well as spread factors derived from averaged liquid hold-up are presented and accuracy of radial dispersion model is discussed (Section 4).

2. Liquid spreading model: global advection–diffusion model

Liquid spreading in packed beds has been explored in several studies, mainly in the case of random packings. Liquid distribution measurements have been carried out on packed beds since long ago using collectors that give access to liquid flow rate distribution at column bottom. Based on these measurements, a model using advection–diffusion transport equation for local superficial liquid velocity q_L averaged at a meso-scale has been demonstrated to give good representation of experimental data when liquid is fed from a source point on top of packed bed (Cihla and Schmidt, 1958; Hoek et al., 1986; Bemer and Zuiderweg, 1978; Edwards et al., 1999). Such model predicts average liquid flow-rate over annular sectors of radius R . Spreading can be, thus, characterized using a specific length that is referred to by “spread factor” D_r and which could be compared to the particle size or hydraulic diameter through a Peclet number. The proposed advection–diffusion model for liquid spreading is given by Eq. (1) where z and r indicate, respectively, the axial and the radial positions in a cylindrical coordinates system (\vec{e}_z , \vec{e}_r , \vec{e}_θ) while $q_L(r,z)$ accounts for the superficial liquid velocity. The possibility of applying such a model for structured packings has been discussed by Edwards et al. (1999) who stipulated that the slow liquid spreading in structured packings ($D_r \ll D$) implies that liquid spreading takes place over many packing layers. The global dispersion can be, thus, considered as isotropic in the cross section and the model given by Eq. (1) can be applied:

$$\frac{\partial q_L(r,z)}{\partial z} = D_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial q_L(r,z)}{\partial r} + \frac{\partial^2 q_L(r,z)}{\partial r^2} \right) \quad (1)$$

Onda et al. (1972) suggested a wide variety of boundary conditions to solve Eq. (1); in order to simplify resolution of the model, which holds for axial symmetry of the flow field, the assumption of an infinite medium is considered in this work which means that no wall effect on liquid spreading is taken into account as expressed in the boundary conditions given by

$$\left. \begin{aligned} q_L(0,0) &= \frac{Q_{L0}}{S} \\ q_L(r,0) &= 0 \\ q_L(\infty,z) &= 0 \\ \left. \frac{\partial q_L(r,z)}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0 \end{aligned} \right\} = 0 \quad (2)$$

The analytical solution of the system formed by Eqs. (1) and (2) can be obtained easily and is given by Eq. (3) where Q_0 (m^3/s) denotes the total liquid flow rate at the top of the column. From Eq. (3) it is easy to deduce Eq. (5) using definitions given by Eq. (4) that introduces cumulated liquid flow rate Q_L . As can be seen from Eq. (5), the spread factor, D_r , can thus be determined from a plot

of r^2/z against $\ln(1-x)$ where x accounts for the fraction of liquid flowing through an annular area of radius r .

A general analytical solution of Eq. (1) for finite media where liquid reaches the column walls can be found in literature (Porter and Jones, 1963; Cihla and Schmidt, 1958). This solution gives access to spread factor before liquid reaches column walls and allows further determination of wall liquid flow rate. Spread factor can be thus determined independently from wall liquid flow rate using infinite medium assumption.

In this study, as will be mentioned further, we focus on the infinite medium solution to determine spread factor:

$$q_L(r,z) = \frac{Q_{L0}}{4\pi D_r z} \exp\left(-\frac{r^2}{4D_r z}\right) \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} Q_L &= \int_0^r \int_0^{2\pi} q_L(r',z) r' dr' d\theta \\ x &= \frac{Q_L}{Q_{L0}} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$\frac{r^2}{z} = -4D_r \ln(1-x) \quad (5)$$

This model will be used in combination with the measurements of the liquid hold-up in order to deduce, from the experimental data, the values of the spread factor, D_r , for the operating conditions considered.

3. Experimental study

3.1. Set-up and methodology

The experiments were performed in a transparent axisymmetric Plexiglas column, 40 cm in diameter and 1.5 m in height. As can be seen in Fig. 1, the column was filled with six layers of structured packings Mellapak 250.X manufactured by Sulzer Chemtech. The packing geometry is characterized by a geometric area per unit volume of the column $a_g=250 \text{ m}^2/\text{m}^3$, a large porosity $\varepsilon=0.98$ and an inclination angle of the flow channels with horizontal direction of $\theta=60^\circ$. The packing elements, made of stainless steel, are 22 cm high and were alternatively rotated around the axis of the column by 90° relative to each other in order to improve liquid distribution as usually recommended for industrial columns.

The column was operated in the counter-current flow mode. Liquid was fed at the top of the column using a separate-phases tray, and gas was fed at bottom using a gas distributor. Fig. 2 shows upper views of the two liquid distributors. Usually liquid is fed from orifices uniformly distributed on the tray surface and gas passes through 7 chimneys represented by the large circles in Fig. 2. The orifices used for liquid feeding have a diameter of 10 mm and chimneys are 50 mm in diameter. The height of the chimneys is equal to 22.9 cm. Two distributors, denoted A and B, were used to cover the liquid loads ranging from 16 to $56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. For the experiments on liquid dispersion presented in this paper, liquid was fed from 6 or 11 orifices (see the colored dots in Fig. 2); the other orifices were blocked. This results in having a central jet that can be assimilated to a point source feeding configuration. Finally, Fig. 3 gives upper view of gas diffuser located at bottom of the column. It shows the locations of the 17 orifices used for gas injection. Each one has a diameter of 3 mm.

Liquid hold-up distributions were measured via a tomographic method at various longitudinal positions Z_i ($i=1$ to 4) given in Fig. 1 ($Z_1=13$ cm, $Z_2=19$ cm, $Z_3=44$ cm, $Z_4=55$ cm and $Z_4=91.5$ cm in a reference frame where $Z=0$ at the top of the packing). The locations of the measurements were chosen in order to examine the dispersion of liquid along the column height, but also inside the top element of packing. Measurements

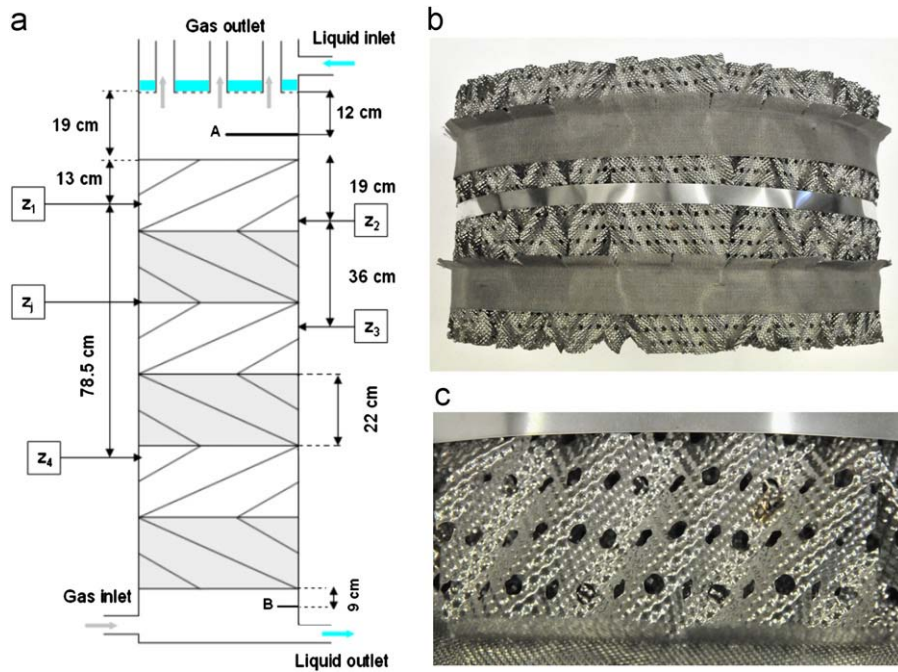


Fig. 1. (a) Sketch of the experimental apparatus; (b) picture of a 400 mm diameter block of Mellapak 250.X; (c) close-up picture.

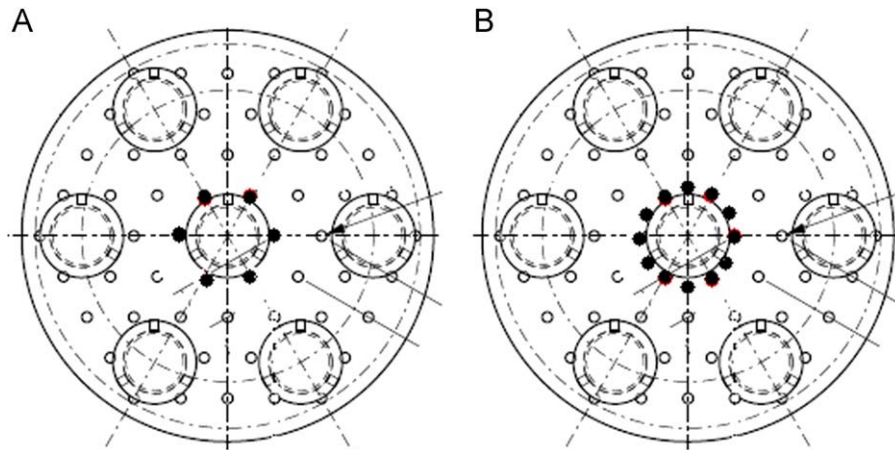


Fig. 2. Liquid distributors, left: A (for $16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h} < q_L < 36 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$), right: B (for $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$), dark dots correspond to the locations of orifices open for liquid injection.

were also performed at $Z=Z_j$ located at the junction between two elements in order to discuss the specific effect of the discontinuity of the geometry of the packings at this position. Pressure loss has also been investigated with measurements at points A and B as shown in Fig. 1 and located, respectively, at the center of the column cross-section and at 7 cm from the column wall.

3.2. Measurement system: tomographic system

A gamma-ray tomographic system has been used to measure spatial distributions of the liquid hold-up h_L inside the column. The tomography methodology used in the present study has been fully characterized by Boyer and Fanget (2002) who studied the intrinsic performances of the apparatus as well as reconstruction algorithm accuracy. Gamma ray tomography has also been used previously by Sidi-Boumedine and Raynal (2005) as well as by Alix and Raynal (2008) in order to measure global liquid hold-up in packed beds equipped, respectively, with structured and random packings for homogeneous flows. The tomographic system, which is shown in Fig. 4, is composed of a gamma ray source

that is Cesium¹³⁷ of 300 mCi in activity, a collimator and 32 detectors. The whole system has two degrees of freedom since it can slide around the column height and can rotate around the column axis. The 32 BGO photo-scintillators transducers (crystal of BeGeO) are separated by spaces of 13 mm. As far as the present work is concerned, the whole system was rotated to scan all the column section. The number of scans for a complete rotation was set at 64. The spatial resolution of the measurement depends only on the number of angular positions of the rotating system which can be adjusted by the operator. We have chosen an operating mode leading to a description of the cross section of the column of 40 cm in diameter with 128×128 pixels. This gives a spatial resolution equal to 3.1 mm. The measuring time that corresponds to the time for which the column is submitted to the photon flux was set at 10 s for each angular position in order to have a good signal to noise ratio.

To determine the liquid hold-up, a calibration procedure is necessary because both liquid and solid absorb gamma rays. The calibration consists in measuring gamma ray attenuation with no liquid nor gas flows in the column (dry experiments). Measurements

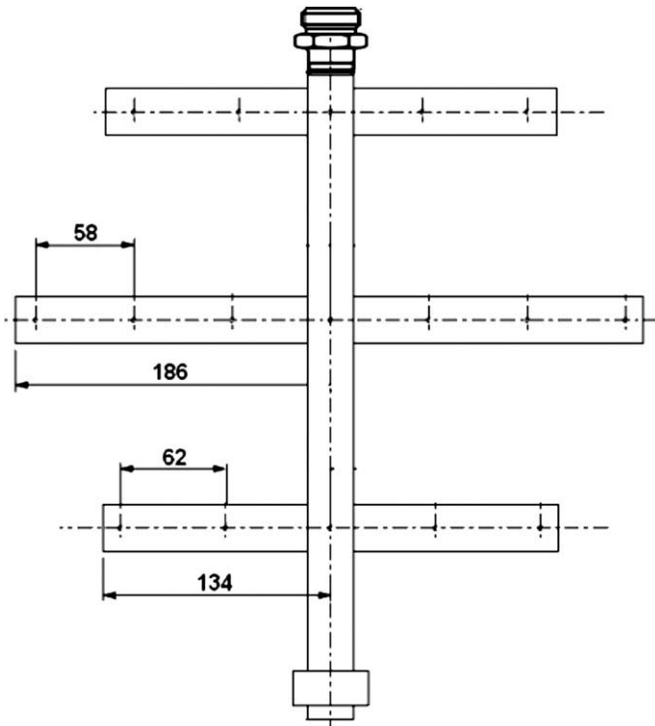


Fig. 3. Sketch of the upper view of gas diffuser (dimensions in mm), in dark the locations of orifices allowing gas injection.

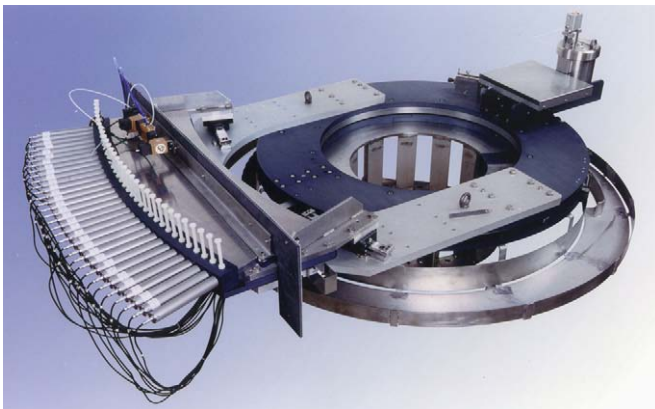


Fig. 4. IFPEN tomographic system, from Boyer and Fanget (2002), on the right: gamma ray source, on the left: 32 transducers for detection.

performed in operating conditions are combined with the calibration so that both experiments allow reconstructing the liquid spatial distribution. Once raw data corresponding to the attenuation in the column are collected from the tomographic system control software, a data processing algorithm developed at IFP Energies nouvelles (IFPEN) is used in order to get liquid hold-up maps at a given column axial position. The reconstruction code uses a classical filtered back-projection algorithm that allows calculating the liquid hold-up at a given point of the attenuation matrix as described in the work of Boyer and Fanget (2002). From this study, the absolute error on phase fraction is considered lower than 3%. As far as the reconstruction algorithm is concerned, these authors pointed out higher errors in zones with abrupt density variations but which are still inferior to 5%. These zones include wall zone (over 13 mm width). In present experiments we have tested the repeatability of the measurements. From data scattering we also conclude that the relative error on liquid

hold-up is globally less than 3% and remains inferior to 5% even when experiments are reproduced one week after.

3.3. Operating conditions and phases physical parameters

Experiments were carried out using either water or monoethanolamine with 30% mass fraction in water (MEA 30 wt%). Air was used for gas phase at column pressure of 1 bar. The physical properties of liquid phases are given in Table 1 for the mean operating temperature. Gamma ray tomography measurements were carried out for operating conditions reported in Tables 2 and 3. We explored various liquid loads ranging from 16 to 56 m³/m²h which is the maximum liquid load allowed by the liquid distributor. For each liquid load, experiments were done at different gas flow rates that correspond to kinetic factors of 20%, 40%, 60% and 80% with respect to flooding conditions.

In Tables 2 and 3, $q_L = Q_{L0}/S$ is the liquid load and $F_C = Q_{G0}/S \times \rho_G^{0.5}$ is the gas kinetic factor as commonly used in characterization of gas liquid contactors and F_V is the gas kinetic factor at which flooding occurs for a given q_L (in this work F_V corresponds to flooding at the bottom of the packed bed and is the maximum value of F_C in pressure drop curves).

For a given liquid load, typical regimes maps that are generally based on pressure drop through packed bed as well as liquid hold-up as function of gas kinetic factor predict three possible flow regimes (Suess and Spiegel, 1992; Spiegel and Meier, 1992). For relatively low gas velocities, one expects a trickling flow where

Table 1
Liquid phases physical properties (Chih-Hao and Meng-Hui, 1997).

Liquid phase	μ (Pa/s)	ρ (kg/m ³)	σ (mN/m)
Water (20 °C)	1.00 E–03	998	73
MEA 30 wt% (20 °C)	2.48 E–03	1010	60

Table 2
Operating conditions for Air/Water system.

q_L (m ³ /m ² h)	F_C (Pa ^{0.5})	$\frac{F_C}{F_V}$ (%)	Re_L	Re_C	We_L	Fr_L
16	0.74	20	71	921	1.2	2.3
	1.47	40		1829		
	2.21	60		2749		
	2.95	80		6669		
28	0.61	20	124	778	1.9	2.7
	1.23	40		1568		
	1.84	60		2346		
36	0.56	20	160	724	3.0	3.0
	1.12	40		1446		
	1.69	60		2182		
	2.25	80		2904		
56	0.48	20	248	646	2.6	2.6
	0.95	40		1279		
	1.43	60		1931		
	1.91	80		2579		

Table 3
Operating conditions for Air/MEA 30 wt% system.

q_L (m ³ /m ² h)	F_C (Pa ^{0.5})	$\frac{F_C}{F_V}$ (%)	Re_L	Re_C	We_L	Fr_L
16	0.71	20	29	893	1.0	1.4
	2.75	80		3464		
28	0.64	20	51	833	1.7	1.6
	2.45	80		3164		

interactions between gas and liquid are moderate. For higher gas kinetic factors wet pressure drop increases more rapidly with gas kinetic factor indicating subsequent interaction between gas and liquid. According to [Suess and Spiegel \(1992\)](#), this occurs for a ratio F_C/F_V that is about 45%. In this work, a large range of gas loads was considered in order to cover these two regimes. The third possible regime, which was not investigated in this work, is flooding regime where pressure drop increases infinitely with increasing gas load.

Gas Reynolds number is defined using equivalent hydraulic diameter of the packing as length scale:

$d_h = 4\epsilon/a_g = 1.6$ cm. This length scale is consistent with packing channels size (channel formed by two adjacent packing sheets) that is about 2 cm. Effective gas velocity $U_G = U_{SG}/(\epsilon(1-h_L))$ is considered to calculate gas Reynolds number where the superficial velocity is $U_{SG} = Q_{G0}/S$.

We define the gas Reynolds number as follows:

$$Re_G = \frac{d_h \times U_G}{\nu_G} = \frac{d_h}{\nu_G} \times \frac{U_{SG}}{\epsilon \times (1-h_L)}$$

As for liquid, Reynolds number is defined as follows ([Alix and Raynal, 2008](#)): $Re_L = (4\Gamma_L/\mu_L)$ where $\Gamma_L = (\rho_L \times U_{SL}/a_g)$ is the linear liquid flow rate per unit perimeter. This definition is consistent with fully wetting liquid film configuration in which film thickness e is given by $h_L = ea_g$ ([Raynal and Royon-Lebeaud, 2007](#)) and effective liquid velocity by $U_L = U_{SL}/(\epsilon h_L)$. As discussed in [Section 4.2.2](#), liquid is most likely to flow as films and rivulets. This has been the motivation for calculation of liquid Reynolds number based on film thickness. However, inertia still can be considered in liquid films for highest Reynolds number as shown in simulations of [Haroun et al. \(2012\)](#). Actually, authors showed that recirculation zones may appear in packing cavities as liquid Reynolds number increases.

Liquid flow through packing may also be characterized by Weber and Froude numbers given in [Tables 2 and 3](#) and defined, respectively, as follows:

$We_L = (\rho_L \times U_L^2 \times d_h/\sigma)$ and $Fr_L = (U_L^2/g \times e) = (U_L^2 \times a_g/g \times h_L)$ where h_L denotes the measured liquid hold-up.

We_L and Fr_L do not vary significantly with operating conditions and their order of magnitude shows that inertia is important compared to gravity and surface tension effects.

4. Results and discussion

4.1. Global pressure drop

[Fig. 5](#) shows pressure drop curves for different liquid loads including Air/Water and Air/MEA 30 wt% systems in the case of a point source-type liquid feed. The dry pressure drop curve matches with the one measured by [Spiegel and Meier \(1992\)](#) for similar conditions. In wet conditions, we observe two main regimes depending upon gas capacity factor. For low values of F_C , pressure drop is not too sensitive to liquid load in the considered range of operating conditions. In this regime, the slope of the curve of dP versus F_C is similar to that obtained in dry conditions. For higher values of F_C , as usually observed, pressure drop increases with liquid load with a higher slope of DP versus F_C that is close to 2 indicating inertial regime. Results in wet conditions are in agreement with pressure drop behavior observed by [Spiegel and Meier \(1992\)](#) for similar liquid loads but are globally higher than them ([Fig. 5](#)). For the same liquid loads, loading as well as flooding in the case of Air/MEA 30 wt% system is observed to occur at capacity factors inferior to those of Air/Water system. This is expected since pressure drop increases

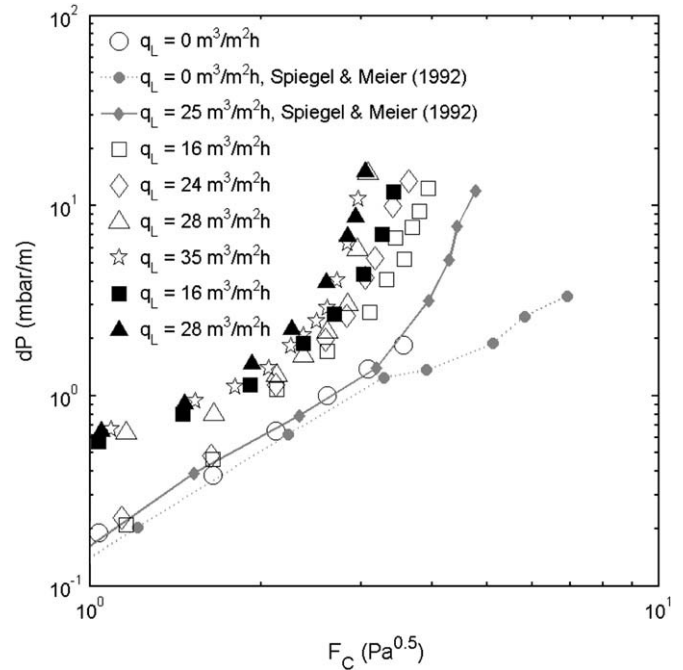


Fig. 5. Global pressure drop curves, open symbols: Air/Water system, closed symbols: Air/MEA 30% system.

with liquid hold-up ([Iliuta and Larachi, 2001](#)) that increases with liquid viscosity as will be discussed in [Section 4.2.2](#).

4.2. Liquid hold-up distribution

4.2.1. Tomographic cross sectional maps

[Figs. 6 and 7](#) present liquid hold-up distributions over the column cross section for four axial positions and several gas and liquid flow rates. The maximum hold-up value in hold-up maps is set to 30% for all cases in order to have a good contrast on pictures and to compare them easily. Therefore, the points on the picture that have red (in color) or black (in grey scales) account for a liquid hold-up that is superior or equal to this limit value.

As previously mentioned in [Section 3.2](#) the spatial resolution is 3 mm. This means that one could have an insight into the scale of a packing channel (the channel formed by two adjacent metal sheets) in which width is approximately given by the equivalent hydraulic diameter of the packing: d_h , equal to 16 mm in the case of Mellapak 250.X. However, the obtained maps cannot describe the liquid distribution at the scale of the trickling liquid films. In fact, such films have been observed visually for the considered flow-rates and the order of magnitude of their thickness can be estimated, at the lowest liquid loads, by the following equation assuming a laminar fully developed flow over a smooth packing surface: $e = (3 \times U_{LS} \times \nu_L/g \times a_g)^{1/3}$ ([Raynal and Royon-Lebeaud, 2007](#)). The order of magnitude of the film thickness is thus around 0.2–0.4 mm for the considered flow-rates of gas and liquid. It is far less than the spatial resolution given by the measuring method.

From [Fig. 6](#) one observes that whatever the flow conditions, the images at position Z_1 – which is the highest position in the packed bed that could be mechanically reached by the tomographic system – show clearly a liquid spot at the center of the cross section. This region of liquid accumulation is obviously due to the liquid feeding configuration consisting of a source of characteristic extension around 50 mm at the top of the bed. At this position Z_1 , for all liquid loads and kinetic factors considered, the observed liquid spot already overspreads the

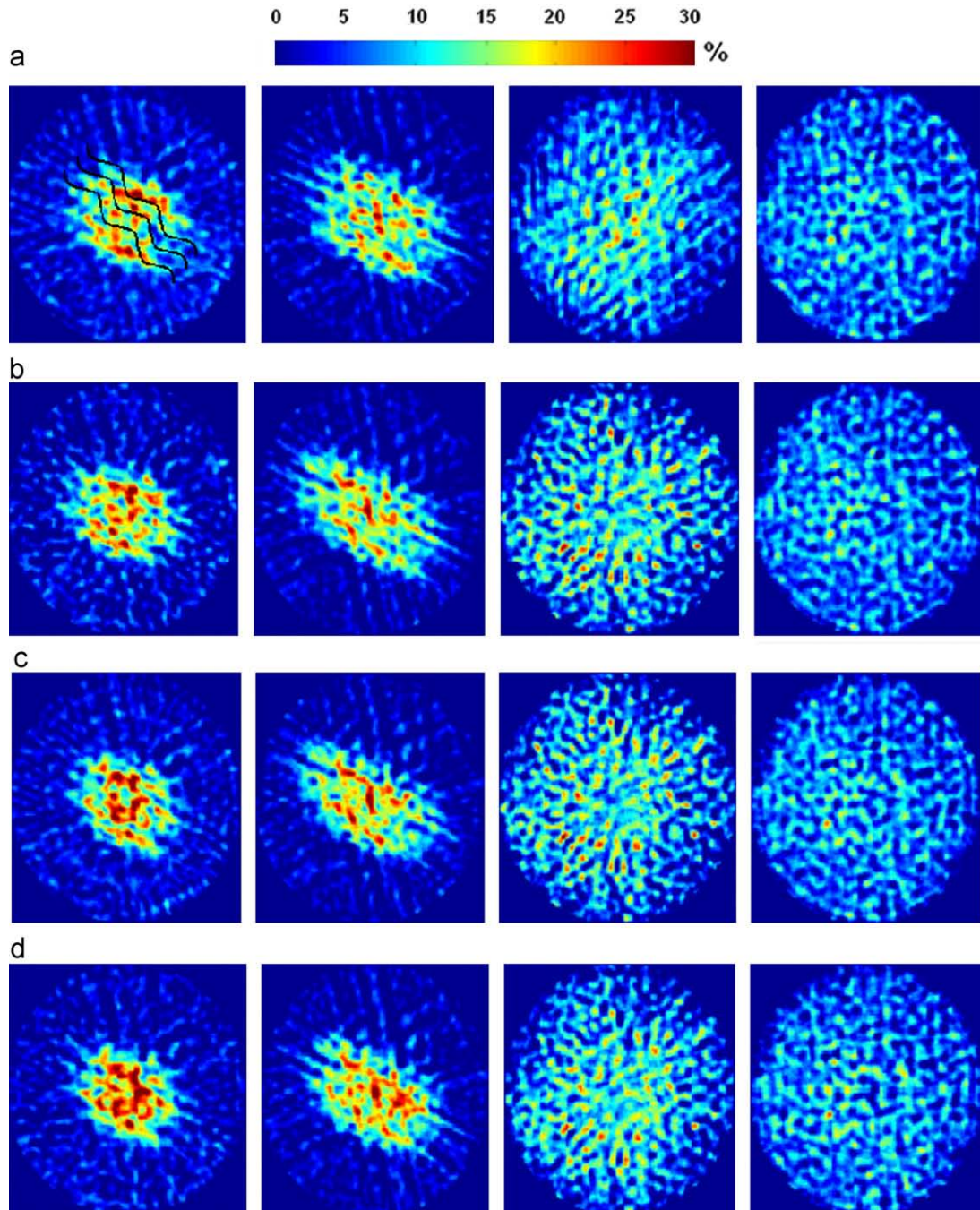


Fig. 6. Hold-up map for Air/Water system, $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$: (a) $F_V=0.74 \text{ Pa}^{0.5}$, (20% F_C), (b) $F_C=1.47 \text{ Pa}^{0.5}$, (40% F_V), (c) $F_C=2.21 \text{ Pa}^{0.5}$, (60% F_V), (d) $F_C=2.95 \text{ Pa}^{0.5}$, (80% F_V). Positions from left to right are: Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 .

source extension. It is also important to notice that liquid can be present, even at moderate volume fractions (up to 5%), around this central spot, over all the section of the column. This results from the impact of the liquid jet on the first packing element and from the propagation of the liquid through the structured packing in this element. In this region, liquid hold-up is associated to flowing liquid. In fact, each run starts from dry packed bed and measured average static liquid hold-ups are less than 1% (0.45% and 0.95% at position Z_3 were indeed measured for Air/Water and Air/MEA 30 wt% systems respectively). Actually, maps corresponding to position Z_2 in Figs. 6 and 7 show a relatively important spreading of the liquid in one specific direction. By making a tomographic measurement with a metallic mark put in the packed bed, liquid main spreading direction was proved to be

consistent with the orientation of packing sheets for the considered packing layer as shown in the first cross section map in Fig. 6. For all considered liquid and gas flow-rates, the measurements performed at farther downstream locations clearly show, however, that liquid spreads significantly along the three first packing layers (positions Z_1 to Z_3) and that the spatial distribution of liquid loses any preferential orientation. When crossing different packing elements of alternative orientation, the dispersion mechanism becomes more and more isotropic (at least in the horizontal plane). Hold-up maps at position Z_4 show a spatial distribution of the liquid which is nearly homogeneous at a macroscopic scale but with still important liquid hold-up variations at local scales. This phenomenon is referred to by “channeling phenomenon” or “small scale maldistributions” (Hoek et al., 1986).

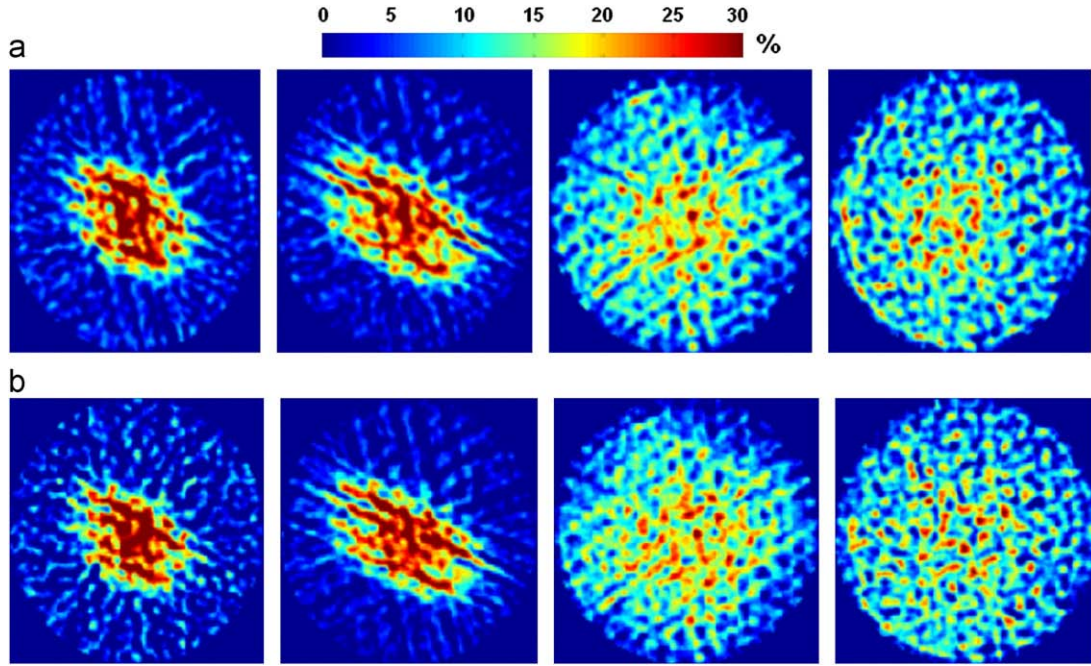


Fig. 7. Hold-up map for Air/Water system, $q_L=36 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$: (a): $F_c=0.56 \text{ Pa}^{0.5}$, (20% F_V), $q_L=36 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$; (b): $F_c=2.25 \text{ Pa}^{0.5}$, (80% F_V), positions from left to right: Z_1 , Z_2 , Z_3 and Z_4 .

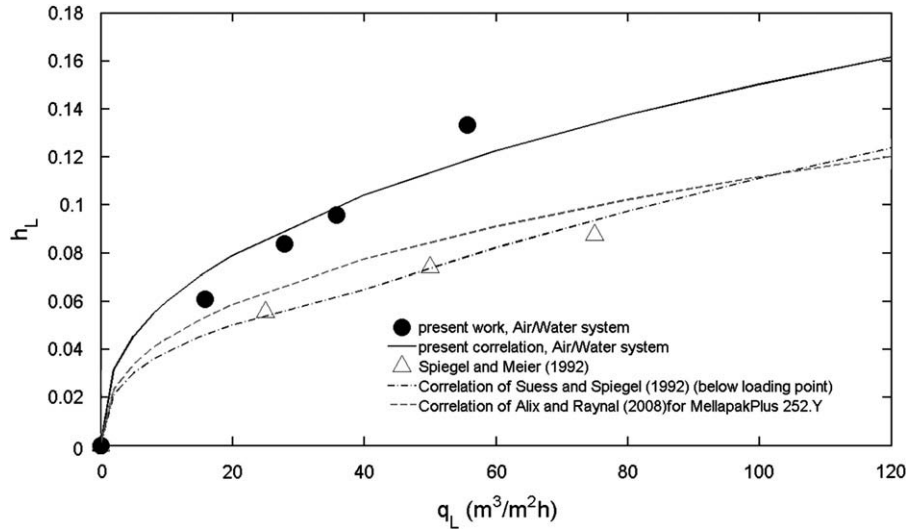


Fig. 8. Global cross-section averaged liquid hold-up for Air/Water system.

4.2.2. Overall liquid hold-up

Usually, the equation relating h_L and the flow rates in homogeneous conditions is used to predict the liquid hold-up which is an important hydrodynamic parameter since it allows for calculating pressure drop as well as liquid effective velocity and further liquid-side mass transfer coefficient in a given packed bed (Alix and Raynal, 2008). In this study, we have calculated the cross section averaged liquid hold-up at the lower section of the column (position Z_4 in Fig. 1) since the most homogeneous liquid distribution is obtained at this position (Fig. 7). It is at first interesting to examine if, in this lower section, measurements made in homogeneous flows can be recovered. Then, it is also important to determine precisely the relation between our measurements of h_L and the values of the liquid load q_L in order to use it at local scale in heterogeneous flows by extrapolation. This will allow us to estimate the dispersion of the liquid using a model of the local liquid flow rate dispersion (Eqs. 3–5).

Figs. 8 and 9 show the evolution of the averaged liquid hold-up with the liquid load obtained in this study as well as in some previous works for Air/Water and Air/MEA 30 wt% systems. The results are described by the following relation:

$$h_L = k \times \left(\frac{\mu_L}{\mu_W} \right)^{1/3} \times q_L^{0.4} \quad (6)$$

in Eq. (6), $k=0.0209$ (with unit $(\text{h}/\text{m})^{0.4}$) when q_L is given in $\text{m}^3/\text{m}^2/\text{h}$ and h_L is in the range [0 1].

The dependence of this relation upon viscosity and liquid load was inspired from work of Alix and Raynal (2008). Viscous term scaling is in agreement with laminar film theory and was shown to be robust for large range of liquid viscosities in co-current conditions by Sidi-Boumedine and Raynal (2005).

Several studies of the liquid hold-up under gas/liquid counter-current flow conditions can be found in literature (Stichmair et al.,

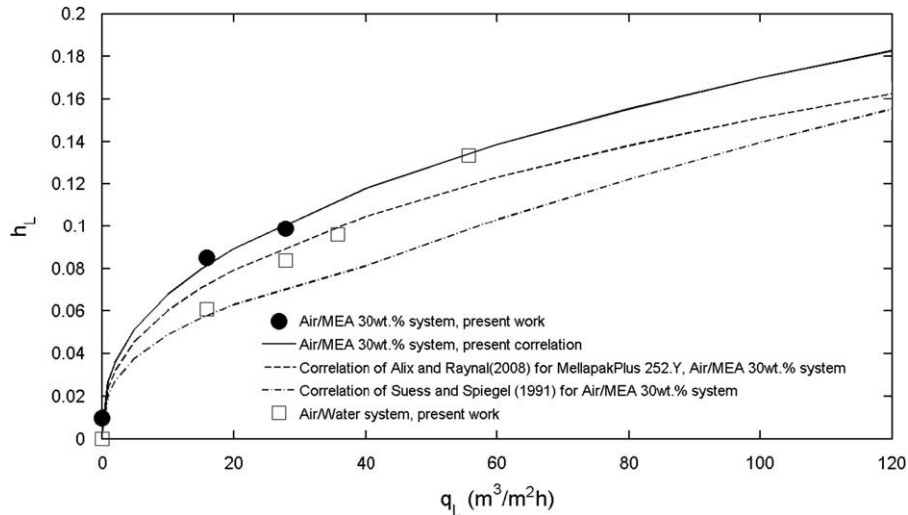


Fig. 9. Global cross-section averaged liquid hold-up for Air/MEA 30 wt% and Air/Water systems.

1989; Billet and Schultes, 1991; Suess and Spiegel, 1992). In the present study, averaged hold-ups for Air/Water system are almost two times superior to those measured by Spiegel and Meier (1992) for the same packing as seen in Fig. 8. Likewise, Fig. 8 shows that correlation proposed by Suess and Spiegel (1992) under-estimates liquid hold-ups measured in this study. This is also the case for correlation suggested by Alix and Raynal (2008) for another structured packing that is MellapakPlus 252.Y which has same geometric surface and porosity than M250.X. Discrepancy between this model and experimental present data is; however, lower than that reported by Suess and Spiegel (1992) model. It is not that easy to explain that discrepancy but higher values of h_L are consistent with higher values of pressure drop presented in Section 4.1.

Nevertheless, the exponent of q_L in Eq. (6), equal to 0.4, is similar to that chosen by Alix and Raynal (2008). Suess and Spiegel (1992) suggested rather exponents equal to 0.37 for $q_L \leq 40 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and 0.59 for $q_L > 40 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Charpentier et al. (1968) measured liquid hold-up for Rashig rings for different liquid loads with no gas flow. Based on their experiments, they calculated different exponents of q_L depending on the flow regimes; they suggested an exponent equal to 0.33 for laminar films and 0.5 for laminar rivulets. Based on these results, if we assume that scaling laws evolve similarly for Rashig rings and Mellapak packings, the 0.4 exponent determined in the present study might indicate that liquid is more likely to flow as films and rivulets in laminar regime. However, Mellapak.250X geometry is different from that of Rashig rings and complex regimes of non-uniform films could also appear and explain for a part the change in hold-up laws. This has been observed in the numerical simulations of Haroun et al. (2012) who show probable recirculation zones in the packing cavities as liquid Reynolds number increases.

In Eq. (6) the gas flow rate does not appear. In fact, liquid hold-up at a given liquid load was calculated by averaging liquid hold-ups obtained for all considered gas flow rates. This was consistent since liquid hold-up did not vary significantly with gas flow rates in the explored ranges for both Air/Water and Air/MEA 30 wt% systems. Such a result is expected for low gas flow rates that correspond to below-loading conditions. Liquid hold-up increases with gas flow for gas flow conditions that are above the loading point (flooding rate of 60% and 80%) which is reported in the work of Suess and Spiegel (1992). Lower values of h_L associated to higher values of We_L could explain that liquid films could be more deformable and sensitive towards gas flow rate in that work.

Also, static liquid hold-up does not appear in the correlation given by Eq. (6) since measurements with no liquid flow revealed

negligible static hold-up for Air/Water and Air/MEA 30 wt% systems.

Liquid hold-up measurements for the case of the Air/MEA 30 wt% system are shown in Fig. 9. Eq. (6) was, likewise, used to correlate liquid hold-up to liquid load for this system. The correlation is satisfactory as shown in Fig. 9 and gives results that are close to those predicted by Alix and Raynal (2008). As for Air/Water system, higher hold-up values than in the work of Suess and Spiegel (1992) are observed. For tested liquid loads, measured values of h_L are higher for Air/MEA 30 wt% than for Air/Water system. This is well reproduced by Eq. (6).

We will use that equation to transform the local measurements of h_L in local values of liquid flow rates q_L .

4.2.3. Radial distribution of averaged liquid hold-up

Liquid hold-up maps give a visual estimation of the liquid spreading across the packed bed. At a meso scale, liquid distribution can be considered as relatively homogeneous at bed outlet (position Z_4) for all the considered gas and liquid flow rates but with still maldistributions at small scales. In order to have more quantitative characterization of liquid spreading from a source point across the packed bed, averaged hold-up over concentric rings of width Δr was considered. This allows investigating the precise influence of liquid load and gas kinetic factor on liquid spreading which cannot be directly seen through liquid hold-up maps.

Using the local hold-up from the reconstructed hold-up matrix, averaged hold-up over a ring of radius r is obtained using the following equation:

$$h_L(r) = \frac{1}{2\pi \times r \times \Delta r} \int_0^{2\pi} \int_{r-\frac{\Delta r}{2}}^{r+\frac{\Delta r}{2}} h_L(r', \theta) \times r' \times dr' \times d\theta \quad (7)$$

Radial liquid hold-up profiles are shown in Fig. 10 for a run corresponding to moderate liquid and gas flow rates. The averaged liquid hold-up profiles show the spreading of the liquid injected in the central region, with a noticeable radial expansion between section located at Z_2 and sections at Z_3 , and then at Z_4 . The changes between sections located at Z_1 and Z_2 are less important because both sections are just 6 cm apart. In Fig. 11, we have also reported, for several runs, the radial profiles of the liquid hold-up in self-similar coordinates. The hold-up $h_L(r, z)$ is normalized by its maximum value $h_{L, \max}$, and the radial position r is replaced by the self-similar coordinate $r/z^{1/2}$ deduced from Eq. (5). The various runs gather on a single curve, even

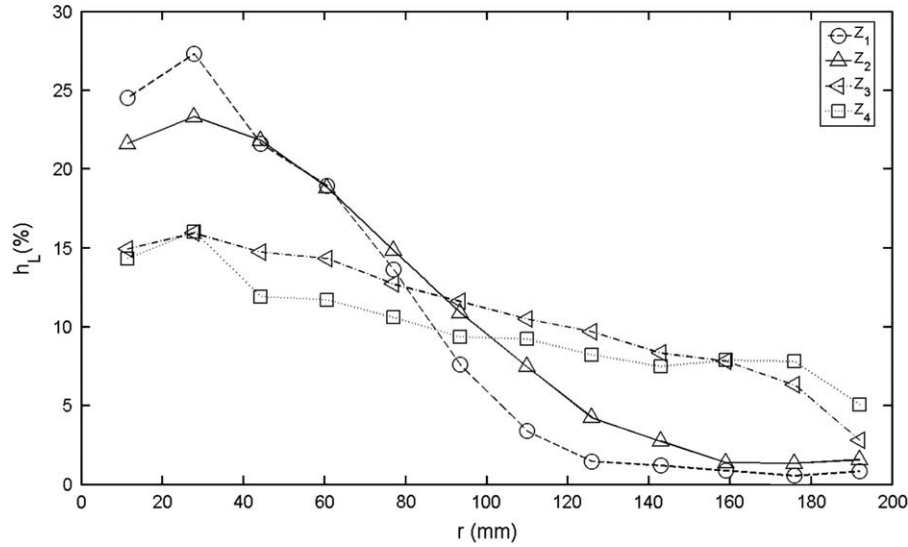


Fig. 10. Radial profiles of averaged liquid hold-up for Air/Water system, $q_L=28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c=20\%$ $F_V=0.61 \text{ Pa}^{0.5}$.

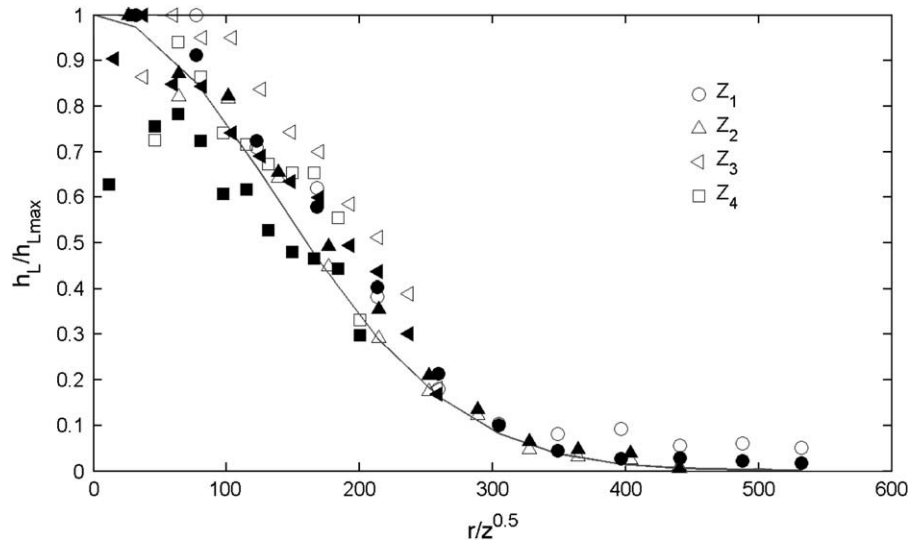


Fig. 11. Normalized liquid hold-up for Air/Water system. (Open symbols: $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c=60\%$ $F_V=2.21 \text{ Pa}^{0.5}$, closed symbols: $q_L=36 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c=60\%$ $F_V=1.69 \text{ Pa}^{0.5}$, continuous curve: theoretical curve from Eq. (8)).

if some data scattering is still present. This is a strong indication that, whatever the inlet conditions, in the explored ranges, the average liquid hold-up can be represented by a master curve with a scaling indicating that dispersion controls the transverse motion of the liquid through the structured packed bed. The longitudinal evolutions of $h_{L0}(z) = h_L(r=0, z)$ are shown in Fig. 12.

Actually, by combining Eqs. (3) and (6) assumed to be valid at a meso-scale, a self-similar spatial distribution of the liquid hold-up can be obtained as follows:

$$\left. \begin{aligned} h_L(r, z) &= k' \times q_L(r, z)^{0.4} \\ &= k' \times \left(\frac{Q_{L0}}{4\pi D_r z} \right)^{0.4} \times \exp\left(-0.4 \frac{r^2}{4D_r z}\right) \\ &= h_{L0} \times \exp\left(-0.4 \frac{r^2}{4D_r z}\right) \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

with

$$h_{L0}(z) = k' \times \left(\frac{Q_{L0}}{4\pi D_r z} \right)^{0.4} \quad (9)$$

$$\text{and } k' = k \times (\mu_L/\mu_W)^{1/3}.$$

Figs. 11 and 12 show that Eqs. (8) and (9) reproduce quite well the experimental data. Deviations to this simple theoretical solution are observed for positions near the column axis as can be seen in Fig. 11. This is due to the lack of accuracy of tomographic hold-up measurements at these particular locations. Deviation from theoretical model in Fig. 12 is also observed for large q_L at the bottom of the bed which is, in all likelihood, due to interactions with the column wall. As discussed in Section 2, a general solution for radial evolution of liquid flow rate and thus liquid hold-up taking into account wall effects may be found in the works of Porter and Jones (1963) and Cihla and Schmidt (1958). Nevertheless, as explained in the works above, spread factors still need to be determined using infinite medium assumption which has been the focus of this work. Moreover it will be explained in Section 4.3 that spread factors were determined based on data relative to axial positions where liquid does not reach column walls.

Finally, the ability of the spreading model described in Section 2 to predict the radial distribution of h_L and its longitudinal evolution is clearly observed for all the considered range of

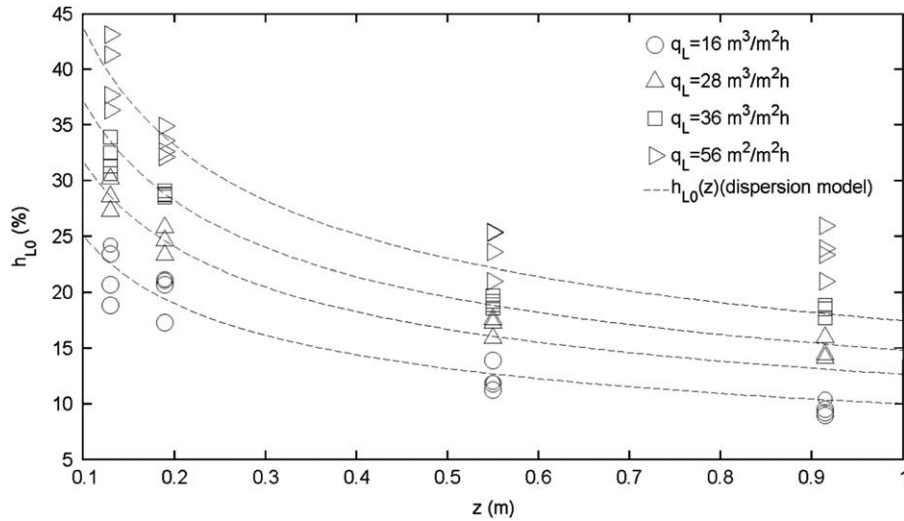


Fig. 12. Liquid hold-up on the axis h_{L0} as function of axial coordinate z (m) for Air/Water system. (Discrete points: hold-up from gamma tomography, ---: Adjusted radial dispersion model). Values of h_{L0} were obtained by extrapolation of measurements near column axis.

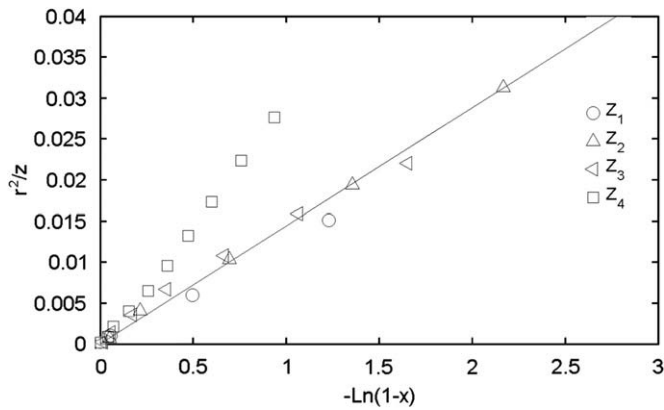


Fig. 13. Determination of radial spread factor for Air/Water system, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 80\%$ $F_V = 2.95 \text{ Pa}^{0.5}$.

experimental conditions. This implies that dispersion may be characterized by a spread factor D_r .

4.3. Spread factor

As explained previously in Section 2, liquid spreading from a single liquid source point can be characterized by a spread factor, D_r , which was proved to be pertinent to reproduce h_L experimental distribution. Eq. (4) was, therefore, used in order to determine spread factors for each experimental condition in terms of liquid load and gas kinetic factor. Correlation given by Eq. (4) assumes a constant spread factor value for all axial positions in the bed; D_r can be thus calculated so that the best linear fit of r^2/z against $\text{Ln}(1-x)$ is obtained using ideally data of all axial positions. Fig. 13 shows linear fit of r^2/z against $\text{Ln}(1-x)$ for the four considered axial positions. It shows also that data inherent to positions Z_1, Z_2 and Z_3 do gather on a single straight line of slope $4xD_r$. However, data corresponding to position Z_4 gather over a greater slope. This is again explained by important wall effect at this particular position where liquid spreads enough to reach column walls while model described by Eq. (4) assumes liquid flows in an infinite medium. Therefore, spread factor for given liquid and gas flow rates is calculated using data relative to Z_1, Z_2 and Z_3 .

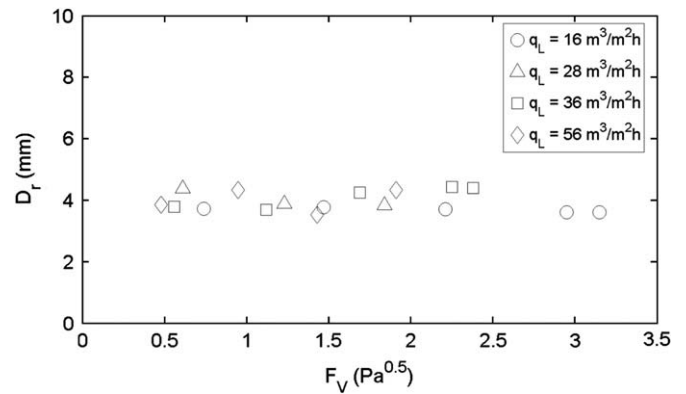


Fig. 14. Spread factor for Air/Water system as a function of F_c for different q_L .

Table 4

Spread factors; comparison of Air/MEA 30 wt% and Air/Water systems.

q_L ($\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$)	Air/MEA 30 wt%		Air/Water	
	% F_V	D_r (mm)	% F_V	D_r (mm)
16	20	3.9	20	3.7
	80	3.4	80	3.6
28	20	4.1	20	4.4
	80	3.5	80	3.8

Fig. 14 presents the values of the spread factors determined for different gas and liquid flow rates. For the present operating conditions the spread factor associated to Mellapak 250.X packing does not vary with the gas kinetic factor for a given liquid load. Liquid load does not have any influence on the spread factor. Likewise, Table 4 shows that for the same liquid loads and kinetic factors, spread factor does not vary significantly when switching from Air/Water to Air/MEA wt 30% system. This indicates that the dispersive mechanisms are dominated by geometrical effects and do not depend on viscosity or on gas and liquid flow rates. This result is consistent with observations of Hoek et al. (1986) who made experiments with no gas flow in random Raschig and

Pall rings and stipulated that spread factor depends only on packing geometry. These authors determined a spread factor whose value was given by a correlation including d_p which is the size of an equivalent particle of packing. This allows authors to calculate spread factors ranging from 1 up to 4 mm for the range of particle sizes they considered. Such correlation cannot be used in the case of structured packings since particle size does not have any sense for such packings with very high void fraction. Onda et al. (1972) also calculated spread factors ranging from 1 to 6 mm for ceramic Raschig rings and observed no dependence of spread factor on liquid flow rate or on dynamic viscosity in the range of 10^{-3} to 2.5×10^{-3} Pa s.

Spread factors shown in Fig. 14 range from 3.6 up to 4.4 mm; the mean value of D_r being 3.9 mm. The value of D_r is similar to the size of the holes in the metal sheets and to the wave length of the texture on the metal packing sheets. Similarly it is not so different from the capillary length $l_c = (\sigma/(\rho_l g))^{1/2}$ equal to 2.8 mm for Air/water system and 2.4 mm for Air/MEA 30 wt% system. It is thus difficult to conclude if small heterogeneities in the geometry control the dispersion or if rather surface tension controls the dispersion of liquid since it imposes the capillary length scale for random spreading of liquid.

In the case capillary length would control dispersion, and since l_c does not vary significantly when using amines (usually used for carbon capture) one could expect same dispersion factors for these solvents and for water. This would not be probably the case for hydrocarbons in distillation processes since they have lower surface tension than water and amines.

In order to discuss the ability of D_r to predict liquid dispersion in all investigated cases, experimental and predicted values of cumulated liquid flow rate Q_L are confronted.

Fig. 15 shows normalized cumulated liquid flow rate against normalized radial coordinate. Experimental estimation of Q_L is obtained from measurements of h_L distribution using Eq. (6) for conversion into local liquid flow rate and Eq. (4). One should keep in mind that experimental cumulated liquid flow rates which correspond to discrete points in Fig. 15 was normalized by the effective liquid flow rate Q_0 that passes through the column cross section. Such flow rate is calculated for each axial position separately. Use of liquid hold-up correlation to predict liquid flow rate at local scales does not produce large variations of Q_0 as compared to Q_{L0} . Fig. 15 shows good correspondence between

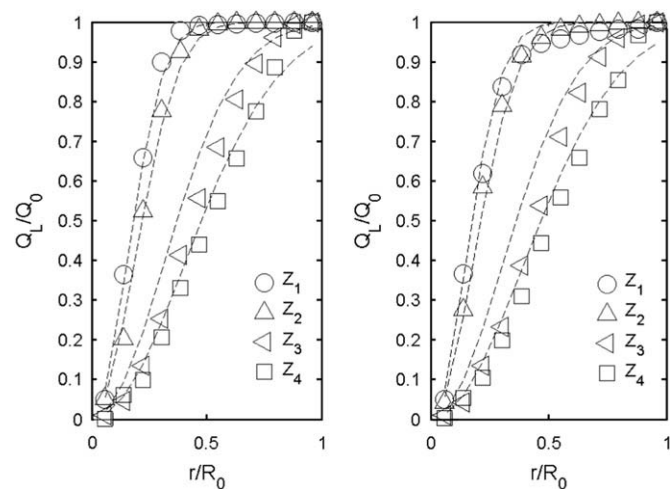


Fig. 15. Variation of normalized radial cumulated liquid flow-rate. Left: Air/Water system ($q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 80\%$ $F_v = 2.95 \text{ Pa}^{0.5}$), right: Air/MEA 30% ($q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 80\%$ $F_v = 2.75 \text{ Pa}^{0.5}$). Discrete points: cumulated flow rate calculated from experimental measurements, continuous curves: flow rate calculated from radial dispersion model (Eqs. (3) and (4) with experimental value of D_r).

liquid flow rates calculated from global hold-up model and radial dispersion model for Air/Water as well as Air/MEA 30 wt% systems.

Fig. 16a and b show parity diagrams of experimental cumulated liquid flow rates versus dispersion model. For all inlet conditions, the parity diagrams show a good consistency between measurements and predictions of the radial dispersion model. The most important deviations are observed at position Z_4 as previously discussed in this section due to important wall effect that is not taken into account by the model.

Nevertheless, the dispersion model remains globally robust for most liquid and gas flow rates.

4.4. Liquid hold-up at packing elements junctions

Tomographic measurements were carried out in order to have an insight into liquid hold-up at the contact surface between two packing units and determine its impact on liquid distribution.

In fact, accumulation of liquid in this zone was previously reported by Alix and Raynal (2008) as well as Suess and Spiegel (1992) who suggested that flooding occurs initially at junctions between packing units. Toye et al. (2005) who carried out X-ray tomography on Mellapak 250.Y reported the same observation with a global hold-up at junctions that was twice as high as in the interior of the packing unit. Our experiments confirm that liquid accumulates at packing junction that corresponds to position Z_j (Fig. 1). This accumulation is clearly detected when one compares liquid hold-up distribution at position Z_j with those at positions Z_2 and Z_3 (Fig. 17). But it is important to notice that the global increase of the liquid hold-up does not participate in redistribution of the liquid flow rate across the section. Liquid accumulation at junction does not improve liquid spreading from the source point in the packed bed. The hold-up distribution at position Z_3 is, in fact, still affected by injection conditions. At the junction between packing elements the local liquid velocities may be slowed down while the local liquid flow rate may be maintained, consistent with the increase of the liquid hold-up and the absence of homogenization. This accumulation is expected to result from capillary effects that generate a liquid film attached to the extremities of the packing metal sheets. This may create additional resistance to liquid and gas flow and then increase pressure drop.

Moreover, we have performed a specific experiment to test this proposal. As explained in Fig. 18, the end of the metal sheets of a packing element located just upstream of Z_j has been cut with a triangular saw-like shape all along the portion of area of the cross section in order to avoid smooth contact between packing sheets. One single strip at the center of the contact surface has been left unmodified as shown in Fig. 18. For this geometry, liquid hold-up measurements have been performed with a homogeneous injection of liquid and of gas. Fig. 19 shows that with the saw-like shape there is much less liquid accumulation in that zone. This could be explained by breaking the capillary liquid film since contact between packing sheets is subsequently reduced. In Fig. 19, one can easily notice accumulation in the uncut zone of the junction (zone defined by black lines) which confirms that smooth contact between two packing units is responsible for liquid accumulation at that zone especially for high liquid loads. This, combined with redirection of the gas flow at packing layers junctions inducing higher gas local velocities, explains why packings with bent ends such as MellapakPlus, Flexipac HC, Montz type M packings can provide an increase in capacity compared to standard packings. Such a change in the geometry avoids gas acceleration; however it certainly does not change liquid accumulation, since the available wetted perimeter is kept constant. In the present case, there is probably no, or little

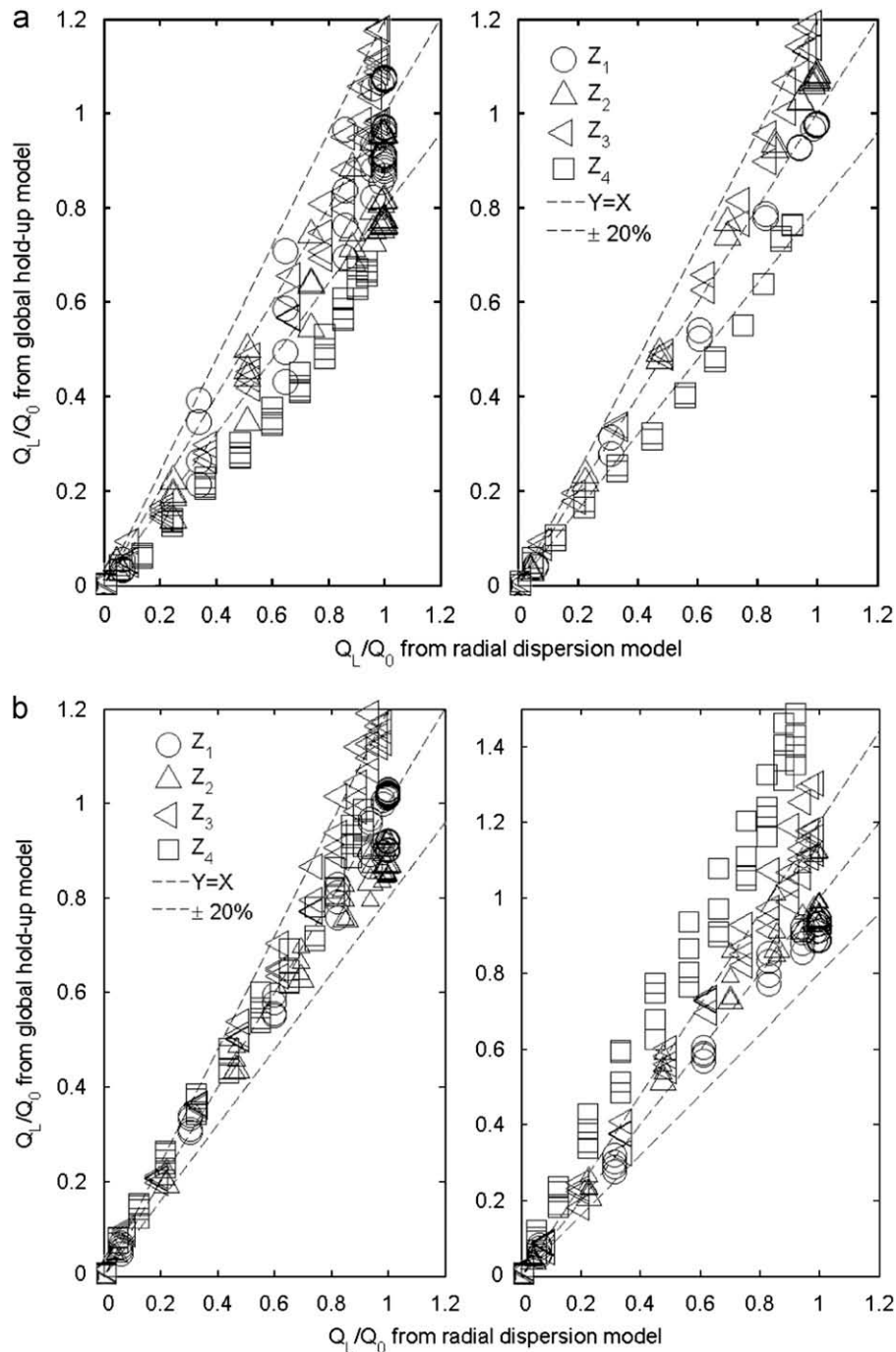


Fig. 16. Parity diagram of cumulated liquid flow rate. Global hold-up model versus radial dispersion model for all tested gas velocities (a) $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ (left), $q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ (right) (Air/Water system); (b) $q_L = 36 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ (left), $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ (right) (Air/Water system).

changes, in local gas velocities; however the liquid accumulation is significantly reduced as previously discussed. This is thus two different ways to solve the same issue of local important gas/liquid interaction.

5. Conclusion

In this work, gamma ray tomography was used to investigate liquid distribution at different positions in a counter-current gas-liquid column equipped with Mellapak 250.X structured packing for a large range of operating conditions. Liquid was fed from a source point at top of column and its spreading through the

packed bed has been studied. Air was used as gas phase; water and MEA 30 wt% were used as liquid phases. This allowed us to investigate the effect of liquid viscosity on liquid spreading since MEA 30 wt%, used as a reference solvent for CO_2 capture, has a viscosity that is more than twice of that of water.

From the present original measurements and a simple dispersion model, liquid spread factors have been determined for four liquid flow rates and gas kinetic factors that were varied from 20% to 80% from flooding conditions. Liquid spread factor was found not to vary significantly with liquid and gas flow rates. Likewise, liquid viscosity is found to increase liquid hold-up but does not impact the spread factor. This has led us to stipulate that liquid dispersion depends only on packing geometry which is consistent

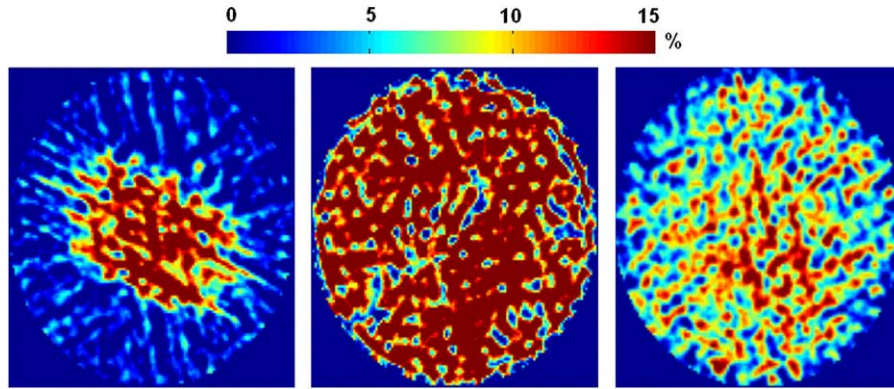


Fig. 17. Liquid hold-up maps, from left to right: positions Z_2 , Z_j and Z_3 , $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, $F_C = 0.74 \text{ Pa}^{0.5}$, ($20\% F_V$).

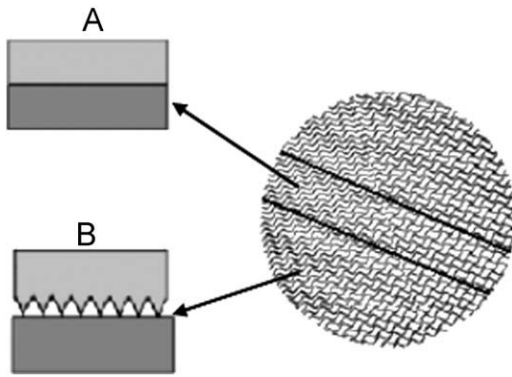


Fig. 18. Modification of contact surface at junction between two packing layers: region A: usual flat contact is maintained, region B: the end of the metal sheets has been cut.

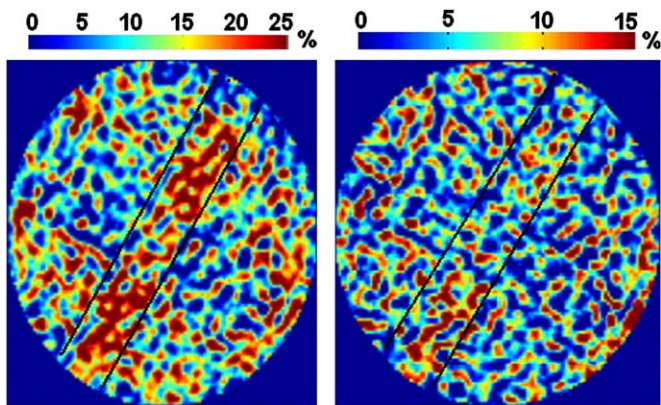


Fig. 19. Liquid hold-up maps at position Z_j when contact surface is cut as shown in Fig. 18, from left to right: $Q_L = 80 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $Q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, $F_V = 0 \text{ Pa}^{0.5}$.

with the results found in literature for random packings, data inherent to structured packings being so far lacking.

The considered diffusion/advection model used to describe liquid dispersion was proved to be consistent with the experimental data in terms of radial hold-up and flow rate profiles. This model with associated spread factor values is thus proposed to predict spreading in structured packings. Such model could indeed inspire closure laws for two-fluid eulerian models for simulations of gas/liquid flows in packed column. Such approach seems very attractive for simulations of two-phase flow in packed beds since it allows to take into account the interactions between phases, interactions between fluids and packing solid surface as well as dispersive mechanisms. As shown by Raynal and

Royon-Lebeaud (2007) or Stemich and Spiegel (2001), CFD tools can be of high interest to study the interaction between distributing devices and the flow in the packed bed and accordingly define some design rules. However, such simulations performed for studying flow distribution at large scale issue are limited because they do not simulate the two phases, the liquid not being considered for the lack of closure laws representing liquid dispersion. Present measurements and associated dispersion model could be used in that purpose.

Nomenclature

Latin letters

a_g	packing external surface area per unit volume of packed bed, m^2/m^3
D_r	liquid spread factor, m
D	column diameter, m
d_h	hydraulic diameter, m
dP	pressure drop, mbar m^{-1}
e	liquid film thickness, m
F_C	gas capacity factor, $\text{Pa}^{0.5}$
F_V	gas capacity factor at flooding conditions, $\text{Pa}^{0.5}$
Fr_L	liquid Froude number
g	gravity acceleration, ms^{-2}
h_L	liquid hold-up or volume fraction
Q_{G0}	gas flow rate, $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$
Q_{L0}	liquid flow rate, $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$
Q_L	cumulated liquid flow rate, $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$
Q_0	effective liquid flow rate, $\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$
q_L	liquid load, $\text{m}^3 \text{ m}^{-2} \text{ h}^{-1}$
q_{L0}	total liquid load, $\text{m}^3 \text{ m}^{-2} \text{ h}^{-1}$
r	radial component in a cylindrical coordinate system
Re_L	liquid film Reynolds number
Re_G	gas Reynolds numbers
S	packed bed cross-section, m^2
U_{SG}	gas superficial velocity, ms^{-1}
U_{SL}	liquid superficial velocity, ms^{-1}
U_G	effective gas velocity, ms^{-1}
U_L	effective gas velocity, ms^{-1}
We_L	liquid Weber number
z	axial component in a cylindrical coordinate system

Greek letters

Γ_L	linear liquid flow rate per unit perimeter, $\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$
ε	packing void fraction, dimensionless
θ	angular component in a cylindrical coordinate system

μ	dynamic viscosity, Pa s ⁻¹
$\nu (= \mu / \rho)$	kinematic viscosity, m ² s ⁻¹
ρ	density, kg m ⁻³
σ	surface tension, mN m ⁻¹

Subscripts

<i>L</i>	liquid phase
<i>G</i>	gas phase
<i>w</i>	water

References

- Alix, P., Raynal, L., 2008. Liquid distribution and liquid hold-up in modern high capacity packings. *Chem. Eng. Res. Des.* 86, 585–591.
- Bemer, G.G., Zuiderweg, F.J., 1978. Radial liquid spread and maldistribution in packed columns under different wetting conditions. *Chem. Eng. Sci.* 33, 1637–1643.
- Billet, R., Schultes, M., 1991. Modelling of pressure drop in packed columns. *Chem. Eng. Technol.* 14, 89–95.
- Boyer, C., Fanget, B., 2002. Measurement of liquid flow distribution in trickle bed reactor of large diameter with a new gamma-ray tomographic system. *Chem. Eng. Sci.* 57, 1079–1089.
- Charpentier, J.C., Prost, C., Le Goff, P., 1968. Ecoulement ruisselant de liquide dans une colonne à garnissage. Détermination des vitesses et des débits relatifs des films, des filets et des gouttes. *Chim. Ind., Génie Chim.* 100, 653–665.
- Chih-Hao, H., Meng-Hui, L., 1997. Densities of aqueous blended amines. *J. Chem. Eng.* 42, 502–507.
- Cihla, Z., Schmidt, O., 1958. Studies of the behaviour of liquids when freely trickling over the packing of cylindrical tower. *Collect. Czech. Chem. Commun.* 23, 569–577.
- Edwards, D.P., Krishnamurthy, K.R., Potthof, R.W., 1999. Development of improved method to quantify maldistribution and its effect on structured packing column performance. *ICHEME 77 (Part A)*, 656–662.
- Hoek, P.J., Wesselingh, J.A., Zuiderweg, F.J., 1986. Small scale and large scale liquid maldistribution in packed columns. *Chem. Eng. Res. Des.* 64, 431–449.
- Haroun, Y., Raynal, L., Legendre, D., 2012. Mass transfer and liquid hold-up determination in structured packing by CFD. *Chem. Eng. Sci.* 75, 342–348.
- International Energy Agency, 2009. Technology Roadmap—CCS, IEA Ed. Available from: <http://www.iea.org/papers/2009/CCS_Roadmap.pdf>.
- Iliuta, I., Larachi, F., 2001. Mechanistic model for structured-packing-containing columns: irrigated pressure drop, liquid holdup, and packing fractional wetted area. *Ind. Eng. Chem. Res.* 40, 5140–5146.
- Lappalainen, K., Manninen, M., Alopaeus, V., 2009. CFD modeling of radial spreading of flow in trickle-bed reactors due to mechanical and capillary dispersion. *Chem. Eng. Sci.* 64, 207–218.
- Mewes, D., Loser, T., Millies, M., 2009. Modelling of two-phase flow in packings and monoliths. *Chem. Eng. Sci.* 54, 4729–4747.
- Mohamed Ali, A., Janses, P., Olujic, Z., 2003. Experimental characterisation and CFD simulation of gas distribution performance of liquid redistributors and collectors in packed columns. *Chem. Eng. Res. Des.* 81, 108–115.
- Olujic, Z., Van Baak, R., Haaring, J., 2006. Liquid distribution behaviour of conventional and high capacity structured packings. *ICHEME (Symposium Series NO. 152)*.
- Onda, K., Takeuchi, H., Maeda, Y., Takeuchi, N., 1972. Liquid distribution in packed column. *Chem. Eng. Sci.* 28, 1677–1683.
- Porter, K.E., Jones, M.C., 1963. A theoretical prediction of liquid distribution in a packed column with wall effects. *Trans. Inst. Chem. Eng.* 41, 240–247.
- Raynal, L., Bouillon, P.A., Gomez, A., Broutin, P., 2011. From MEA to demixing solvents and future steps, a roadmap for lowering the cost of post-combustion carbon capture. *Chem. Eng. J.* 171, 742–752.
- Raynal, L., Royon-Lebeaud, A., 2007. A multi-scale approach for CFD calculations of gas–liquid flow within large size column equipped with structured packing. *Chem. Eng. Sci.* 62, 7196–7204.
- Sidi-Boumedine, R., Raynal, L., 2005. Influence of the viscosity on the liquid hold-up in trickle-bed reactors with structured packings. *Catal. Today* 105, 673–679.
- Spiegel, L., Meier, W., 1992. A generalized pressure drop model for structured packings. *ICHEME*, 85–94 (Symposium Series NO. 128).
- Stemich, C., Spiegel, L., 2001. Characterization and quantification of the quality of gas flow distributions. *Chem. Eng. Res. Des.* 89 (8), 1392–1396.
- Stichlmair, J., Bravo, J.L., Fair, J.R., 1989. General model for prediction of pressure drop and capacity of counter-current gas/liquid packed columns. *Gas Sep. Purif.*, 19–28.
- Suess, P., Spiegel, L., 1992. Hold-up of Mellapak structured packings. *Chem. Eng. Process.* 31, 119–124.
- Toye, D., Crine, M., Marchot, P., 2005. Imaging of liquid distribution in reactive distillation packings with a new high-energy x-ray tomography. *Meas. Sci. Technol.* 16, 2213–2220.

3.4.2 RÉSULTATS COMPLÉMENTAIRES

- Rétention statique

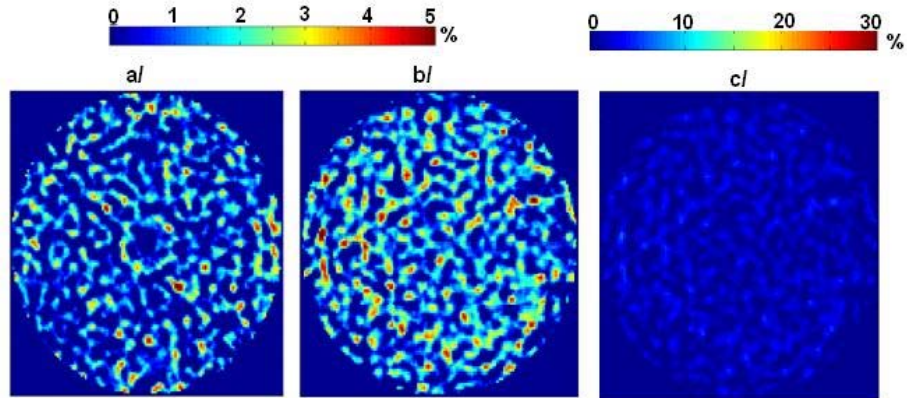


Figure 3.10: Carte de rétention statique en position Z_4 , M250.X,

a/ système Air/Eau, b/ système Air/MEA 30.wt %, c/ système Air/MEA 30.wt % avec une échelle de couleurs différente.

La Figure 3.10 montre deux cartes de rétention statique observées en position basse du lit de garnissage (position Z_4 dans la Figure 3.1) et ce pour les deux systèmes de fluides utilisés. Ces cartes correspondent à des essais où le lit de garnissage est pré-mouillé en absence de débit de gaz de manière homogène (trous non obturés dans le distributeur présenté par la Figure 3.2). Le débit de liquide servant au mouillage du garnissage est arrêté et une mesure par tomographie gamma est effectuée 5 minutes après. Ces deux tests ont permis de mettre en évidence un piégeage de liquide dans les interstices du garnissage en absence d'écoulement de liquide. Les valeurs de rétention statique, quoique faibles, atteignent localement des valeurs de l'ordre de 5% tel que montre la Figure 3.10. Un examen comparatif des deux cartes relatives aux deux systèmes de fluides utilisés, montre plus de zone riches en liquide dans le cas du MEA 30 wt.%. Il est difficile de ramener cet écart aux propriétés physiques des deux liquides car on ne peut affirmer qu'une distribution asymptotique de liquide est obtenue 5 minutes après l'arrêt de l'écoulement de liquide dans les deux cas. Un tel écart est ainsi dû soit à une différence des valeurs de rétention locale atteintes à l'équilibre dans chaque cas ou à une différence des temps caractéristiques de dé mouillage de la surface solide relatifs à chaque liquide. Dans l'ensemble des résultats présentés dans la publication qui constitue la section 3.4.1 de ce chapitre, la rétention statique a été néanmoins négligée. En effet, les essais menés en appliquant une injection de liquide sous forme de jet central ont été effectués sans pré-mouillage préalable du lit de garnissage. Ainsi le liquide détecté par la méthode de tomographie gamma s'associe plutôt à du liquide en écoulement. D'autre part, une prise de moyenne des valeurs de rétention statique sur la section entière de la colonne (en position basse Z_4) donne lieu à des valeurs négligeables de rétention. Nous calculons, en effet, des rétentions statiques moyennes de 0.45 % et 0.95% dans le cas de l'eau et de la MEA 30 wt.% respectivement. Ainsi nous confortons le choix fait dans la publication présentée ci-dessus qui est de ne pas considérer la rétention statique dans l'ensemble des calculs de rétention et de dispersion effectués.

- Observations visuelles

Lors des essais sur la maquette U717, nous avons pu faire certaines observations importantes. En effet, nous avons pu observer pour l'ensemble des conditions opératoires explorées un régime d'écoulement qui correspond essentiellement à un film liquide ruisselant plus ou moins stationnaire. Des filets de liquide ont également pu être observés pour l'ensemble des conditions opératoires. Pour ce qui concerne l'engorgement, un régime de fort bullage a été observé en bas du lit de garnissage. Ce régime d'écoulement se propage ensuite rapidement dans le sens ascendant de la colonne. Pour un débit de liquide donné, le point d'engorgement que nous avons défini dans la publication correspond au débit de gaz où l'on commence à observer ce régime en bas de colonne.

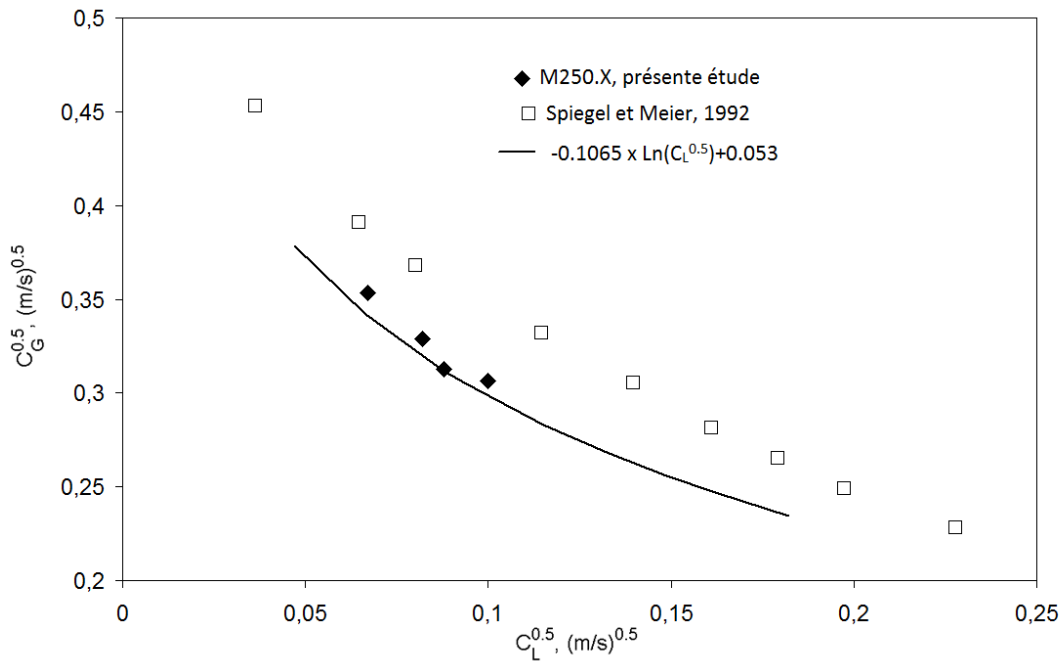


Figure 3.11: Diagramme de Wallis, Système : Air/Eau

La Figure 3.11 montre un diagramme de Wallis (voir chapitre 1) où les facteurs de capacité du gaz correspondant à cette étude et à celle de Spiegel et Meier (1992) sont reportés. Spiegel et Meier (1992) déterminent des facteurs de capacité supérieurs à ceux calculés dans le cadre de cette étude pour le même garnissage M250.X. Ce résultat est attendu étant donné que les auteurs reportent une perte de charge qui reste globalement supérieure à celle mesurée dans le cadre de notre étude tel que reporté dans la Figure 5 de la publication. Cette différence peut être imputable d'une part à la taille de la colonne : 40 cm ici et 1 m dans le cas de Spiegel et Meier (1992). On sait que plus le diamètre de colonne est faible, plus les pertes de charges sont importantes et surtout plus le point d'engorgement apparait tôt. Cette différence peut être due d'autre part au système de distribution du gaz. Des différences ont été en effet observées sur le point d'engorgement selon le type de distributeur utilisé dans des travaux précédents à IFPEN. Cependant, comme l'essentiel de nos essais correspondent à des points dont les valeurs d'engorgement sont au plus de 80%, on considère que ces effets de diamètre et de distributeur sont négligeables.

- Applicabilité de la corrélation $h_L=f(q_L)$ à la méso-échelle

La détermination des profils radiaux de rétention locale présentés dans la section 3.4.1 se fait en considérant les moyennes de rétention locale (obtenue en chaque pixel par reconstruction tomographique) sur des anneaux d'épaisseur ΔR c.-à-d. à une méso-échelle ΔR . Dans le cadre de cette étude, nous avons opté pour une valeur de ΔR égale à 16.6 mm qui est de même ordre de grandeur que la taille caractéristique d'un garnissage structuré de type M250.X ($\sim 4/a_g$).

Le modèle de transport de débit (basé sur une équation d'advection-diffusion) présenté dans la section 3.4.1 pour décrire la dispersion dans le garnissage nécessite la détermination du débit local cumulé sur une section droite de rayon R . Le passage des valeurs de rétention à la méso-échelle à celles du débit local de liquide à cette même échelle s'est fait en appliquant la corrélation $h_L=f(q_L)$ présentée dans la section 3.4.1. Cette entreprise consiste à appliquer une corrélation établie à grande échelle (celle d'une section de colonne) à une échelle plus petite qui est la méso-échelle (approche Top-Down). Afin de prouver la validité de cette approche, nous présentons en annexe n°9, les profils radiaux de débit de liquide cumulé dans le cas du garnissage M250.X pour deux charges liquides différentes. Nous montrons ainsi que le débit de liquide total introduit en tête de colonne est conservé à +/- 15% sur chacune des sections considérées. Ceci montre la pertinence du calcul du débit local de liquide à la méso-échelle en utilisant la corrélation $h_L=f(q_L)$.

- Points sur les résultats reportés en annexes

Nous avons choisi de reporter en annexe n°1 de ce chapitre les coupes tomographiques correspondant à une charge liquide $q_L=56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ dans le cas du système Air/Eau ainsi que deux charges liquides $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $q_L=28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ dans le cas du système Air/MEA 30 wt.30%. Ces coupes tomographiques permettent de confirmer certaines observations faites dans la publication présentée plus haut. En effet, l'étalement du jet de liquide est observable pour l'ensemble des débits de liquide et de gaz considérés avec un étalement anisotrope dans le cas des positions Z_1 et Z_2 puis un étalement isotrope dans le cas des positions Z_3 et Z_4 . Dans le cas des deux premières positions, l'écoulement du liquide suit une direction préférentielle qui correspond à celle des canaux formés par deux feuilles de garnissages adjacentes. Cette anisotropie est ensuite perdue étant donné que les galettes de garnissages sont tournées les unes par rapport aux autres de 90° de manière à changer l'orientation des canaux. Ainsi, des distributions relativement homogènes sont obtenues en bas du lit de garnissages (position Z_4) mais des disparités à petites échelles perdurent. L'effet du gaz sur la distribution de liquide est très peu visible ce qui rejoint les observations faites pour les autres charges liquides présentées dans la publication.

Dans l'annexe n°2, nous présentons des profils radiaux de rétention de liquide pour une charge liquide $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et pour quatre facteurs cinétiques de gaz. L'allure de ces courbes varie très peu avec le débit de gaz ce qui confirme les observations faites sur les coupes tomographiques. Quatre profils de rétentions sont également présentés pour les quatre positions $Z_1, Z_2, Z_3,$ et Z_4 pour une charge liquide $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et un facteur cinétique de gaz $F_s = 40\%F_c$ et ce pour les deux systèmes de fluides : Air/Eau et Air/MEA 30 wt.%. Les profils de rétention gardent la même allure dans les deux cas pour les quatre positions considérées et ne varient qu'en amplitude. Ceci est dû à la plus forte rétention obtenue dans le cas du système renfermant l'amine MEA 30 wt.% plus visqueuse que l'eau.

Nous remontrons dans l'annexe n°3 la validité du modèle d'advection-diffusion décrit dans la publication sur la base d'un ensemble de profils radiaux normalisés de rétention pour différents débits de liquide et de gaz.

Enfin nous présentons en annexes n°10 et 11 des résultats complémentaires relatifs aux profils locaux de rétention dans le cas d'une injection de liquide sur une moitié de disque (en obturant la moitié des trous du distributeur N3) et à la perte de charge dans cette même configuration. Nous n'avons pas poussé loin l'analyse de ces résultats qui présentent une très bonne base de validation de futures simulations de l'écoulement en configuration tridimensionnelle.

3.4.3 CONCLUSION

Dans cette partie nous nous sommes intéressés à l'étude de la distribution de liquide dans une colonne munie d'un garnissage structuré de type Mellapak 250.X. Pour cela, un liquide a été injecté en tête de colonne depuis un point source en utilisant un distributeur adapté. Nous avons pu mettre en œuvre une méthode de mesure de rétention liquide par tomographie gamma afin de générer des cartes de rétention liquide locale sur des sections de colonne située à différentes hauteurs du lit de garnissage. Ces cartes de rétention établies pour différents débits opératoires de liquide et de gaz nous ont permis de mettre en évidence certains comportements qualitatifs du liquide en termes de dispersion ; en effet l'étalement du liquide a été observé de manière claire et l'effet de la direction privilégiée par la disposition des feuilles de garnissage sur la dispersion de liquide a été mis en évidence. Cet effet se traduit par une anisotropie dans l'étalement du jet de liquide dans la première galette de garnissage en partant du haut de la colonne. Concernant la capacité du garnissage à distribuer le liquide nous avons pu remarquer des distributions de liquide relativement homogènes en bas du lit de garnissage et ce pour l'ensemble des débits opératoires considérés. Des disparités persistent cependant à des échelles locales et ce même pour les distributions de liquide les plus homogènes. Nous avons proposé une discussion de ces observations en nous basant sur des travaux de la littérature. Dans un deuxième temps, un modèle d'advection-diffusion a été proposé afin de décrire la dispersion de liquide à partir d'un point source. Ce modèle permet de prédire la variation du débit local de liquide dans la direction radiale et par conséquent celui de la rétention liquide. Nous avons testé ce modèle sur l'ensemble des données expérimentales que nous avons acquises et montré sa validité sur une large gamme de débits de liquide et ce pour deux systèmes de fluides : le système Air/Eau et le système Air/MEA 30 wt.%. Le modèle d'advection diffusion nous a permis de calculer un paramètre hydrodynamique caractéristique de la dispersion de liquide dans le garnissage M250.X qui est le coefficient de dispersion D_r (« spread factor » en anglais) homogène à une longueur. Les valeurs obtenues pour ce paramètre ont été confrontées à celles de la littérature pour d'autres systèmes de garnissages. Un ordre de grandeur cohérent avec les études antérieures a pu être constaté. Un résultat fort de cette étude a pu enfin être mis en évidence qualitativement et quantitativement. En effet, la dispersion de liquide dans le garnissage structuré M250.X n'est sensible ni aux variations de débits de gaz ni celles de débits de liquide. Ceci se traduit par des coefficients de dispersion quasiment constants sur l'ensemble des conditions de débits opératoires de phases considérés dans le cas de cette étude. Ces coefficients de dispersion ne dépendent pas non plus du système de fluides considéré. Ceci nous a mené à mettre en évidence l'origine géométrique de la dispersion dans ce type de garnissages.

3.5 ÉCOULEMENT EN GARNISSAGE VRAC AVEC ALIMENTATION CENTRALE

Dans cette section nous présentons les principaux résultats relatifs à la dispersion de liquide et à la perte de pression dans les garnissages vrac de type IMTP-40. Nous comparons les résultats obtenus à ceux du garnissage structuré et aux données de la littérature.

3.5.1 COUPES TOMOGRAPHIQUES : RÉTENTION LOCALE SUR UNE SECTION

Tout comme dans le cas des garnissages structurés, les cartes de rétention locale de liquide ont été mesurées à 4 côtes axiales de la colonne reportées sur la Figure 3.1. L'observation de ces cartes permet de caractériser de manière qualitative l'étalement du jet de liquide et de comparer ce dernier au cas du garnissage M250.X aux mêmes débits de liquide et de gaz.

Il est déjà intéressant de regarder ce qui ressort de ces cartes de rétention dans le cas d'un lit pré-mouillé mais en absence de débit liquide. Pour les essais avec l'eau la carte de rétention statique est présentée sur la Figure 3.12 où la valeur de la rétention peut atteindre jusqu'à 5% localement mais en des positions aléatoires. La même observation a été faite dans le cas du garnissage M250.X mais avec des concentrations locales en liquide moins étendues (zones rouges, correspondant aux zones concentrées en liquide, moins larges sur la Figure 3.10). Ainsi, le liquide s'accumule *a priori* plus au contact du solide dans le cas du garnissage IMTP-40 que dans celui du garnissage M250.X alors que la surface géométrique développée est plus faible. Ceci est relié vraisemblablement à la disposition aléatoire du garnissage vrac qui favorise les contacts entre les éléments métalliques. Ces contacts qui sont d'une part aléatoires et d'autre part plus nombreux que dans le cas du garnissage structuré M250.X permettent certainement de former de nombreux "ponts liquides" capillaires entre éléments et représentent des zones favorables à l'accumulation du liquide relativement au cas du garnissage M250.X. Une moyenne sur la section utile de la colonne permet de calculer une rétention statique moyenne de 1%. Cette valeur, dépasse celle obtenue dans le cas du garnissage M250.X (0.5%) mais reste néanmoins faible au vu de la précision du tomographe et du programme de reconstruction tomographique. Ainsi, la rétention statique dans le cas du garnissage IMTP-40 sera négligée pour le reste des traitements de données relatives à ce garnissage tout comme dans le cas du M250.X.

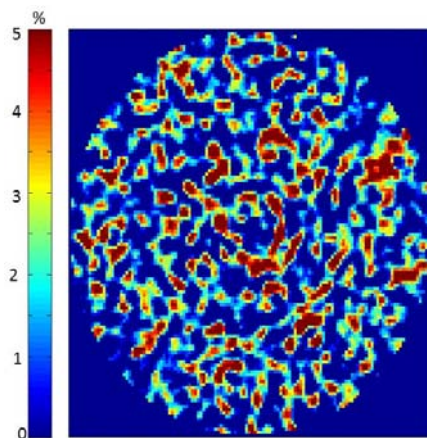


Figure 3.12: carte de rétention statique, système: Air/Eau, IMTP40

Les Figures Figure 3.13 et Figure 3.14 montrent des cartes de rétention locale en liquide, ici de l'eau, et ce pour deux charges liquides: 16 et 56 m³/m²h. Il s'agit du plus faible et du plus fort débit de liquide testés, les cartes relatives aux débits intermédiaires étant présentées en annexe n° 4. A charge liquide fixe, l'effet du facteur cinétique de gaz a été exploré en se plaçant à des taux de gaz allant de 20 % à 80 % du taux d'engorgement.

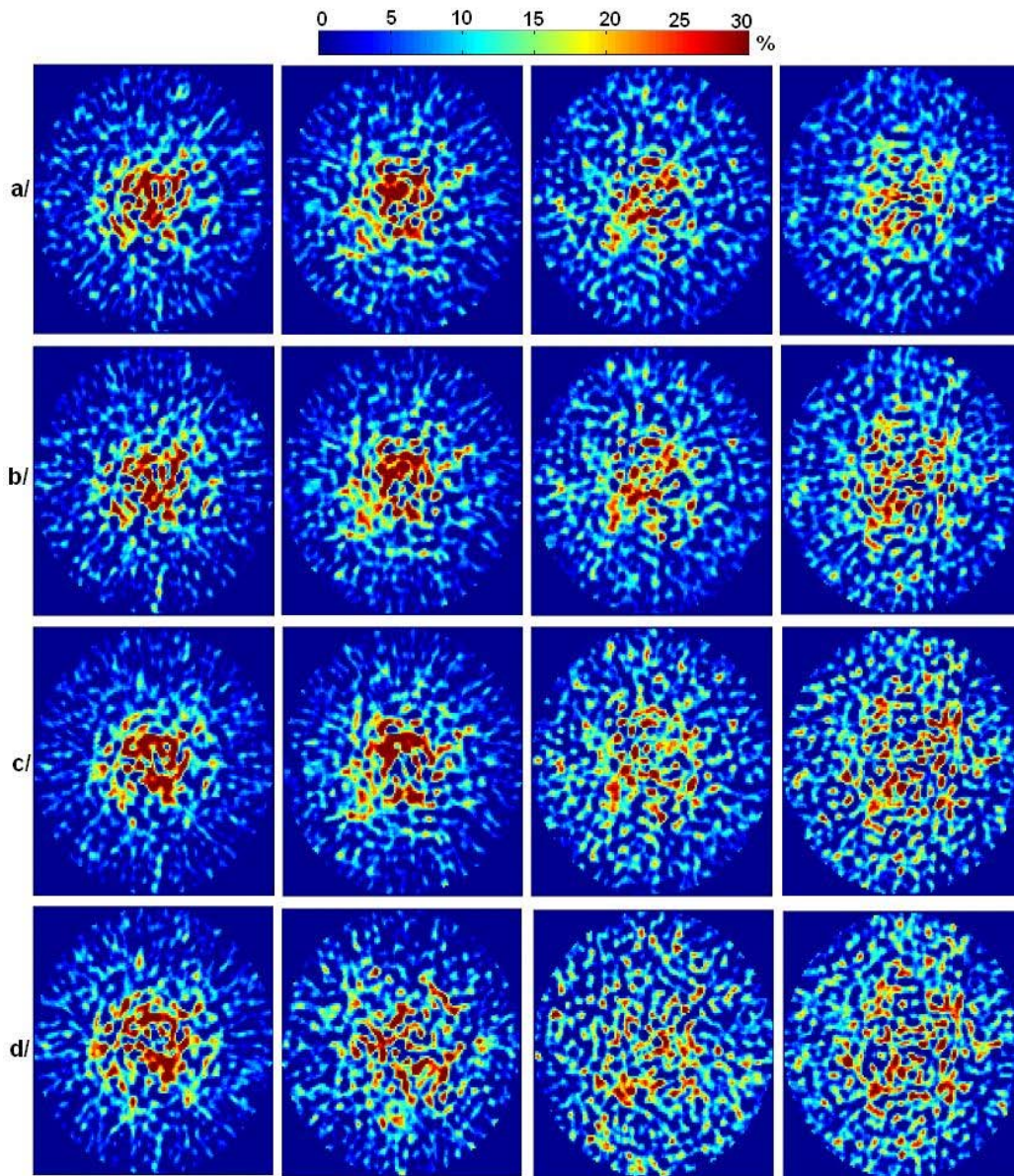


Figure 3.13 : Cartes de rétention de liquide pour IMTP-40, Système Air/Eau, $q_L = 16$ m³/m²h: a/ $F_S = 0.74 \text{ Pa}^{0.5}$, (20% F_C), b/ $F_S = 1.47 \text{ Pa}^{0.5}$, (40% F_C), c/ $F_S = 2.21 \text{ Pa}^{0.5}$, (60% F_C), d/ $F_S = 2.95 \text{ Pa}^{0.5}$, (80% F_C). De gauche à droite, positions : Z₁, Z₂, Z₃, Z₄.

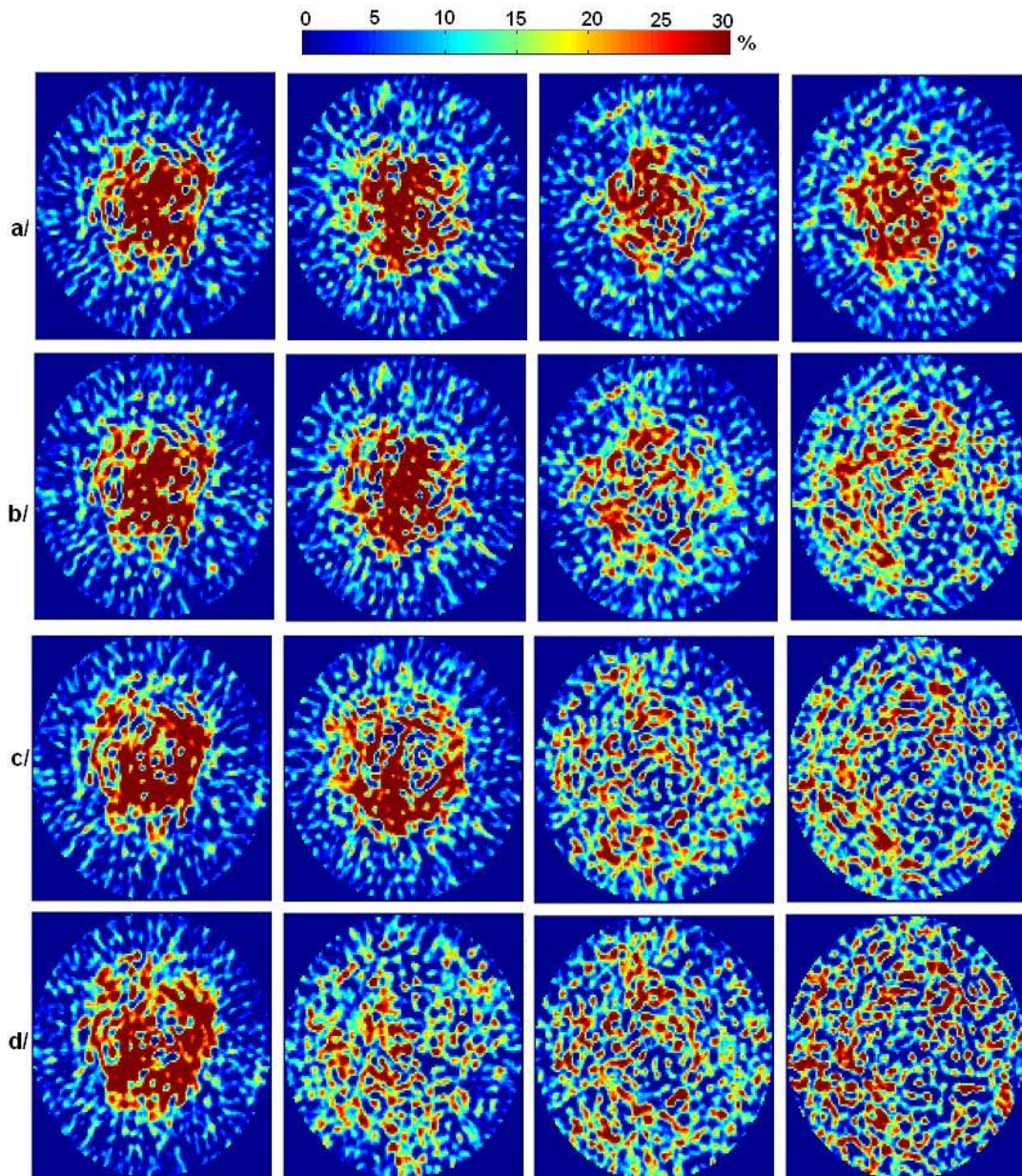


Figure 3.14 : Cartes de rétention de liquide pour IMTP-40, Système Air/Eau, $q_L = 56$ m^3/m^2h : a/ $F_S = 0.52 Pa^{0.5}$, (20% F_C), b/ $F_S = 1.03 Pa^{0.5}$, (40% F_C), c/ $F_S = 1.55 Pa^{0.5}$, (60% F_C), d/ $F_S = 2.06 Pa^{0.5}$, (80% F_C). De gauche à droite, positions : Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 .

L'examen de ces cartes de rétention permet, tout comme dans le cas du garnissage M250.X de faire quelques observations qualitatives essentielles sur l'étalement d'un jet de liquide dans ce genre de lit de garnissage. On peut en effet, visuellement, observer les écarts entre les deux garnissages dans les distributions spatiales de liquide en termes d'homogénéité à petite ou à grande échelle, en termes d'isotropie et en termes d'étalement de la surconcentration en liquide dans la direction radiale.

Les coupes tomographiques présentées montrent une grande disparité en termes concentration de liquide à l'échelle locale. La formation de passages préférentiels de taille centimétrique est fortement visible dans ce type de garnissages: ceci correspond aux zones rouges sur les figures

Figure 3.13 et Figure 3.14 où du liquide s'écoule avec un taux local pouvant dépasser 40% dans le cas de $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et 60% dans le cas de $q_L=56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$.

La mémoire de l'injection sous forme de jet central du liquide est visible sur l'ensemble des coupes tomographiques relatives aux positions Z_1 et Z_2 , en haut du lit de garnissage. On observe, en effet, à ces positions une zone centrale concentrée en liquide qui s'étale en descendant dans le lit de garnissage (positions Z_3 et Z_4). Nous commenterons cet étalement plus loin. Mais d'ores et déjà on note qu'aux positions les plus basses (Z_3 et Z_4) des hétérogénéités à grande échelle apparaissent qui montrent qu'*in fine* dans ces régions la distribution transverse de liquide n'est pas simplement assurée par une dispersion graduelle à facteur d'étalement constant (cf. par exemple Figure 3.14 en position Z_4 pour les cas b, c et d).

Par rapport à la dispersion de liquide observée dans le cas du garnissage M250.X, la dispersion dans le garnissage vrac, tout du moins dans les sections hautes (Z_1 et Z_2), diffère du point de vue de l'isotropie. En effet, les zones concentrées en liquide (essentiellement aux positions Z_1 et Z_2) ne montrent pas d'orientation particulière de l'étalement. L'anisotropie notée dans le cas du garnissage M250.X et qui est due à la disposition des plaques de garnissage n'est plus observée ici. La mémoire spatiale de l'injection circulaire se traduit pour le garnissage vrac par des zones axisymétriques concentrées en liquide en particulier pour les positions Z_1 et Z_2 .

Toujours dans l'objectif de comparer les garnissages M250.X et IMTP-40, une confrontation des cartes de rétention des figures 6 (section 3.4.2) et Figure 3.13 permet de constater que pour un débit de liquide de $16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, le garnissage IMTP-40 donne lieu à un étalement du jet de liquide qui est moindre. Ceci est d'autant plus vrai pour les faibles facteurs cinétiques de gaz (à 20% et 40% du taux d'engorgement) pour lesquels la distribution de liquide en bas de colonne est loin d'être homogène : une grande concentration en liquide dans la zone centrale de la section de colonne pour ces deux débits est encore visible pour les positions les plus basses de la colonne. Il en va de même pour un débit de liquide de $28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ dont les cartes de rétention correspondantes sont fournies en annexe n° 4. Ceci n'est pas le cas du garnissage M250.X où on atteint pour la plupart des cas des distributions de liquide relativement homogènes en bas de colonne. Pour les plus forts taux de charge de liquide, il est difficile de comparer qualitativement les étalements des jets dans les deux garnissages car la présence d'hétérogénéités de grande taille aux cotes Z_3 et Z_4 en garnissage vrac ne permet pas d'estimer visuellement l'extension globale de la tache de liquide (Figure 3.14). Mais nous reviendrons sur ce point dans un paragraphe ultérieur et étayerons les observations faites ci-dessus de manière quantitative.

Afin de mieux appréhender la persistance de l'inhomogénéité due à l'injection sous forme de jet en bas de colonne dans le cas d'IMTP-40 mais aussi la possibilité d'apparition d'inhomogénéités à grande échelle, un « facteur de maldistribution » qu'on note C_v est introduit. Ce nombre est couramment utilisé dans la littérature afin de quantifier l'inhomogénéité de l'écoulement de liquide (ou de gaz) dans un garnissage (Olujic *et al.*, 2006, Edwards *et al.*, 1999). Il est défini comme suit, en introduisant une variance qui permet de caractériser la dispersion des valeurs de rétention locale par rapport à leur moyenne sur une section de colonne :

$$C_v = \sqrt{\frac{1}{\pi R^2} \times \int_0^{2\pi} \int_0^R \left(\frac{\tilde{h}_L(r, \theta) - h_L}{h_L} \right)^2 \times r \times dr \times d\theta}$$

Dans l'expression précédente $\tilde{h}_L(r, \theta)$ représente la valeur de la rétention locale en un point de coordonnées (r, θ) et h_L la valeur moyenne de la rétention de liquide sur une section. Elle est calculée comme suit :

$$h_L = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^{2\pi} \int_0^R \tilde{h}_L(r, \theta) \times r \times dr \times d\theta \quad (3.1)$$

La définition du facteur de maldistribution est telle que plus la valeur de C_v est faible, plus la répartition de liquide sur une section donnée est homogène. Le facteur de maldistribution a été calculé dans la section la plus basse de la colonne (position Z_4), c'est-à-dire là où le liquide est censé être distribué de manière la plus homogène. Les valeurs calculées sont reportées dans le Tableau 3.8 et la Figure 3.15 pour les deux garnissages étudiés : M250.X et IMTP-40 pour un système Air/Eau. Les observations faites plus haut quant à la distribution de liquide en bas de colonne pour les deux garnissages étudiés peuvent être confirmées en se basant sur les valeurs de C_v qui quantifient de manière globale l'inhomogénéité de la distribution de liquide en bas du lit de garnissage. On relève notamment des valeurs de C_v pour le garnissage IMTP-40 qui sont dans la quasi-totalité des cas supérieures à celles calculées dans le cas de M250.X (1.5 voire 2 fois supérieures dans certaines conditions opératoires) ce qui permet d'étayer les observations visuelles faites plus haut d'un étalement moindre en IMTP-40 à faible débit de gaz notamment. En outre, on constate que le facteur de maldistribution est presque constant pour le garnissage structuré, quels que soient les débits de gaz ou de liquide; ce qui n'est pas le cas pour le garnissage vrac. En effet, on observe un effet bénéfique du débit de gaz sur la qualité de l'homogénéisation dans le cas de l'IMTP-40. Plus le débit gaz est important, plus le facteur de maldistribution diminue pour atteindre des valeurs proches de celles du M250.X.

Tableau 3.8 : Valeurs des « facteurs de maldistribution » C_v (%)

$q_L (m^3 / m^2 h)$	$\frac{F_s}{F_c} (\%)$	$C_v (\%), M250.X$	$C_v (\%), IMTP-40$
16	20	2.2	5.1
	40	2.2	4.5
	60	2.5	4.1
	80	2.7	3.7
28	20	2.6	5.0
	40	2.4	4.4
	60	2.1	1.7
56	20	2.8	6.2
	40	3	3.1
	60	-	2.1
	80	-	1.8

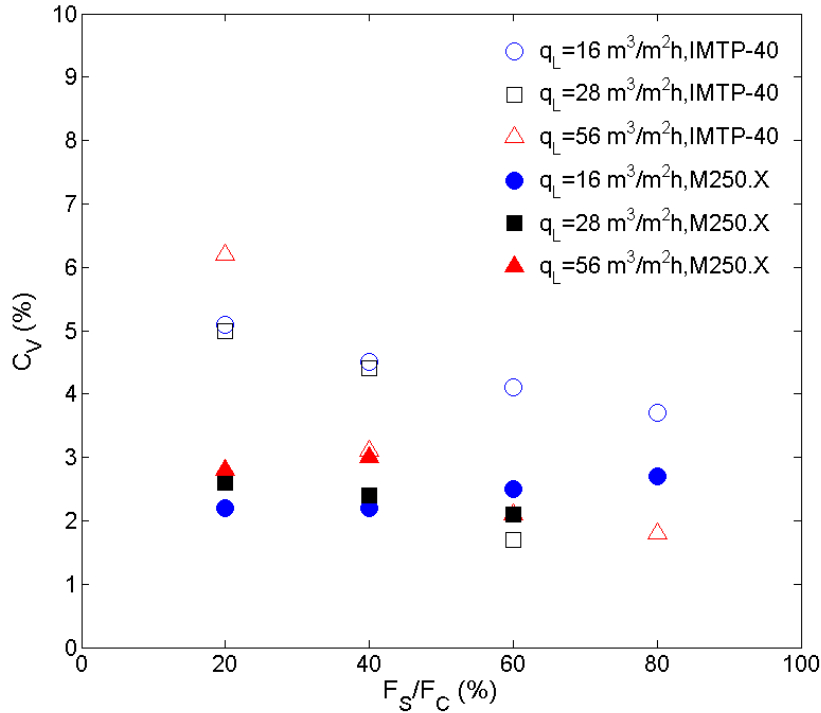


Figure 3.15 : Evolution du coefficient de maldistribution

Une dernière observation importante peut être faite à partir de la Figure 3.14 qui montre une carte de rétention de liquide pour une charge liquide de $56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. On assiste dans le cas de ce débit à la formation de maldistributions – ou inhomogénéités - à des échelles bien plus grandes que celles d'un élément de garnissage. Ceci peut être noté clairement sur la carte de rétention relative à la position Z_4 (la plus basse dans le lit de garnissage) pour un facteur cinétique correspondant à 40% du taux d'engorgement. On voit sur cette carte une migration préférentielle du liquide vers une partie de la section (moitié gauche sur la carte de rétention) et une sous-concentration en liquide de la partie restante. Des zones relativement évidées de liquide peuvent être également remarquées sur les cartes de rétention correspondant aux positions Z_3 et Z_4 pour l'ensemble des débits de gaz traités et toujours pour une charge liquide de $56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Toye (1996) s'est intéressée longuement à ces maldistributions ainsi qu'à leurs éventuelles origines dans ses travaux de thèse. La méthode de tomographie à rayons X qu'elle a utilisée, étant capable de fournir des résolutions meilleures que celles de la tomographie Gamma (1.7 mm dans le cas des travaux de Toye, 1996), la phase solide a pu être détectée. Ceci a permis à l'auteur d'établir la corrélation entre les différentes maldistributions et la distribution de solide dans la colonne. Dans le cas des garnissages vrac utilisés par Toye (1996) à savoir l'Etapak 210 ($\varepsilon=95\%$, $a_g=220 \text{ m}^2/\text{m}^3$) et le Cascade Mini-Ring 1A ($\varepsilon=92\%$, $a_g=185 \text{ m}^2/\text{m}^3$), l'auteur suggère que le liquide s'écoule exclusivement le long des parois des garnissages. Ainsi dans les zones où la phase solide fait défaut, le liquide ne s'écoule pas, ce qui donne la possibilité de détecter les origines des maldistributions en se basant sur les images d'empilage de solide obtenues par tomographie dans un lit sec. L'auteur propose ainsi deux origines possibles des maldistributions : celles inhérentes à la maldistribution en tête de colonne et celles dues à une mauvaise répartition des éléments d'empilage au sein du lit de garnissages. L'auteur a également pu remarquer que les maldistributions interviennent à des échelles bien supérieures à celles des éléments de garnissage. De ce fait on peut s'appuyer sur ces travaux pour expliquer de manière identique la provenance et l'échelle de longueur importante à laquelle apparaissent les hétérogénéités de rétention liquide observées dans le cadre de nos explorations sur le garnissage IMTP-40. L'auteur évoque par ailleurs d'autres phénomènes pouvant donner lieu à des maldistributions à petites échelles tel que la disposition de certains éléments de garnissage

qui empêcherait le mouillage des éléments situés en dessous (effet dénoté « parapluie » dans les travaux de Toye, 1996). Nous n'avons pas suffisamment analysé les hétérogénéités à petite échelle pour pouvoir discuter ce point.

Enfin, le facteur cinétique F_S de gaz semble, dans le cas du garnissage IMTP-40, impacter l'étalement de liquide. Une augmentation de ce facteur F_S a pour conséquence d'améliorer la distribution de liquide pour les positions basses dans le lit. Ceci peut être remarqué aisément en observant les coupes tomographiques représentées par les Figures Figure 3.13 et Figure 3.14. Une claire amélioration de la distribution de liquide en bas de colonne (position Z_4) est d'ailleurs relevée pour une charge liquide de $56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ (Position Z_4 sur la Figure 3.14). Le garnissage vrac IMTP-40 se démarque ainsi du garnissage structuré M250.X par cet effet visible du gaz sur l'étalement et donc la distribution de liquide. Cette observation sera reprise plus loin dans ce manuscrit afin de commenter les résultats quantitatifs relatifs à la dispersion de liquide et la dépendance de cette dernière vis à vis des débits de liquide et de gaz.

3.5.2 PROFILS DE RÉTENTION GLOBALE DE LIQUIDE

Dans cette section on se propose de calculer la rétention globale de liquide pour les différentes conditions opératoires explorées en garnissage IMTP-40. Nous proposons ensuite une corrélation afin de relier cette grandeur globale aux débits de liquide et de gaz. Il est important de noter à ce stade que, contrairement au cas du garnissage M250.X, les coupes tomographiques montrent une distribution inhomogène en liquide même pour les positions les plus basses du lit. Ceci se traduit dans la plupart des cas par un défaut d'irrigation des zones proches de la paroi en liquide. Nous calculons néanmoins une moyenne de la rétention pondérée par la surface totale d'une section en utilisant l'équation 3.1 du paragraphe précédent afin de garder la cohérence par rapport au cas du garnissage M250.X.

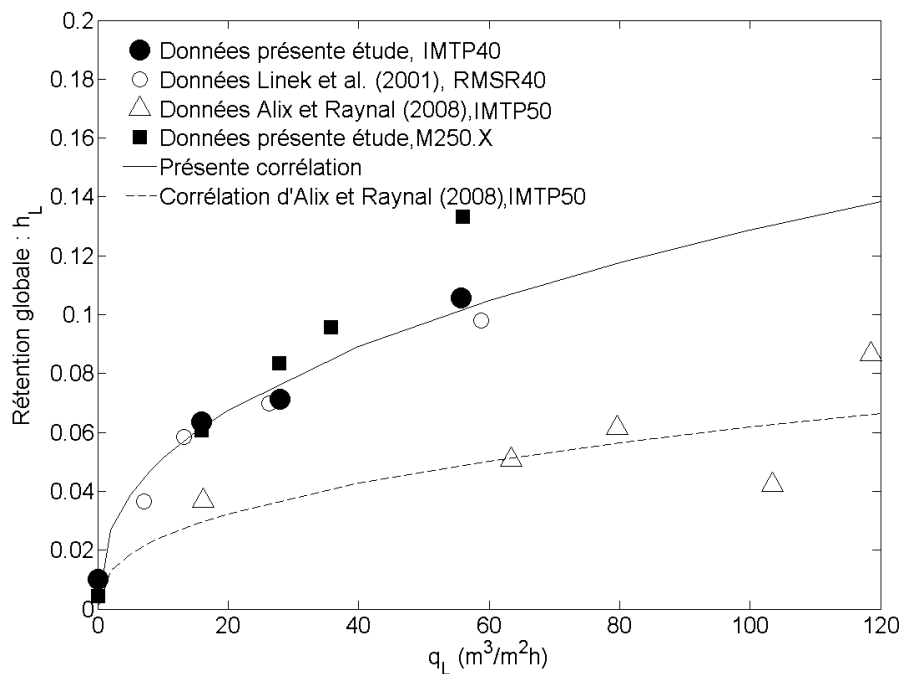


Figure 3.16 : Effet de la charge liquide sur la rétention globale, système : Air/Eau

Les valeurs de rétention globale sur la section la plus basse du lit de garnissage sont reportées sur la Figure 3.16 pour le système Air/Eau en fonction de la charge liquide. Étant donné que nous n'avons pas identifié dans la littérature des données quantitatives relatives à la rétention de liquide dans le garnissage IMTP-40, nous avons été amenés à considérer les données de référence tirées des travaux de Linek et al (2001) relatives à un autre garnissage ayant des caractéristiques ($\varepsilon=98\%$ et $a_g=143 \text{ m}^2/\text{m}^3$) très proches de celles de l'IMTP-40: il s'agit du garnissage RMSR-40. Les auteurs cités ci-dessus considèrent un mélange Air/CO₂ comme phase gaz et une solution d'hydroxyde de sodium (NaOH) de concentration $1 \text{ kmol}/\text{m}^3$ et mesurent des rétentions moyennes de même ordre de grandeur que celles obtenues pour IMTP-40. Les données de rétention globale reportées dans les travaux d'Alix et Raynal (2008) propres au garnissage IMTP-50 sont également reportées. Le garnissage en question, possède une aire géométrique spécifique inférieure à celle d'IMTP-40 ($a_g=110 \text{ m}^2/\text{m}^3$ à comparer à $a_g=153 \text{ m}^2/\text{m}^3$) mais est caractérisé par une porosité comparable. La Figure 3.16 montre que la rétention mesurée dans le cas de ce garnissage est largement inférieure à celle mesurée sur un garnissage IMTP-40 (au moins deux fois inférieure). Cela peut être expliqué justement par l'aire géométrique moindre de ce garnissage. En effet, si l'on raisonne à partir du cas de films laminaires ruisselants complètement mouillants, la rétention peut s'écrire en fonction de l'aire géométrique spécifique comme suit : $h_L=ea_g=(3U_{LS}^*v_La_g^2/g)^{1/3}$ (Brunazzi et al., 1997). Elle est donc proportionnelle à $a_g^{2/3}$; ce qui donne une augmentation de la rétention de 25%; or on observe ici une augmentation de h_L de près du double entre IMTP-40 et IMTP-50; cela est aussi probablement dû à l'augmentation de points de contacts permettant, en plus de la surface disponible, d'accrocher les filets de liquide.

Afin de comparer les rétentions de liquide dans le cas des deux garnissages de type IMTP cités ci-dessus tout en s'affranchissant de la différence de surfaces géométriques spécifiques, la rétention normalisée : h_L/ea_g est introduite. L'évolution de cette rétention normalisée avec q_L est reportée sur la Figure 3.17. Cette figure montre que lorsqu'on normalise h_L par $e.a_g$ la rétention normalisée ne dépend plus que faiblement de q_L .

Afin de prédire la rétention globale dans le garnissage IMTP-40 à partir d'une corrélation globale, une corrélation semblable à celle d'Alix et Raynal (2008) établie pour un garnissage de type IMTP-50 a été ajustée dans le cadre de ce travail. L'équation 3.2 qui donne cette corrélation montre que la même dépendance en q_L (soit une loi puissance avec un exposant de 0.4) a été gardée tout comme la dépendance en μ_L , soit une loi puissance avec un exposant de 0.17. En adaptant simplement le préfacteur multiplicatif, on propose ainsi pour IMTP-40 :

$$h_L = k \times q_L^{0.4} \times \left(\frac{\mu_L}{\mu_w} \right)^{0.17} \quad (3.2)$$

Dans l'équation 3.2, $k=0.0204$ s'exprime en $(\text{h}/\text{m})^{0.4}$ quand q_L est en $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et h_L varie entre 0 et 1. Cette corrélation représente bien les données expérimentales de rétention globale dans le garnissage IMTP-40 obtenues dans notre étude (Figure 3.16). Contrairement au cas du garnissage M250.X, cette corrélation n'est plus en accord avec la théorie du film vu qu'elle fait

intervenir la dépendance en $\left(\frac{\mu_L}{\mu_w} \right)^{0.17}$. Si pour le garnissage M250.X l'écoulement préférentiel

du liquide sous forme de films pouvait expliquer la dépendance en $\left(\frac{\mu_L}{\mu_w} \right)^{1/3}$ dans la relation (6)

du paragraphe 3.4.1 qui est donnée par la théorie du film laminaire, la dépendance en viscosité qui fait ici intervenir un exposant de 0.17 et non de 1/3, est sélectionnée à partir des arguments développés par Alix et Raynal (2008). L'écoulement de liquide se fait, dans ce type de garnissages, sous forme de films mais aussi de gouttes, la taille de ces gouttes étant contrôlée par

la tension de surface et non par la viscosité. La provenance de l'exposant avec lequel apparaît le taux d'arrosage dans l'équation 3.2 a été expliquée dans la section 3.4 consacrée au garnissage M250.X. Charpentier et al. (1968) proposent une discussion intéressante des différentes textures de l'écoulement liquide dans des garnissages vrac ou des empilements de sphères. Ils suggèrent que l'écoulement du liquide s'y effectue sous formes de films laminaires ou tourbillonnaires, de filets et de gouttes et ont réalisé des mesures expérimentales des proportions du débit de liquide s'écoulant sous chacune de ces formes via des mesures de vitesse de liquide dans des garnissages vrac de type anneaux de Raschig. Les auteurs rappellent les exposants théoriques avec lesquels apparaît le taux d'arrosage (ou la vitesse superficielle) du liquide dans les corrélations liant ce dernier à la rétention. Un exposant de 0.33 correspond à un écoulement qui se fait exclusivement sous forme de films laminaires (théorie de Nusselt) et un exposant de 0.5 correspond à un écoulement sous forme de filets de liquide. Dans un cas réel, la complexité de l'écoulement liquide qui se traduit par la coexistence de plusieurs formes d'écoulement explique l'obtention de valeurs des exposants intervenant dans les corrélations citées ci-dessus qui soient intermédiaires entre 0.33 et 0.5. C'est le cas de l'exposant égal à 0.4 déterminé plus haut.

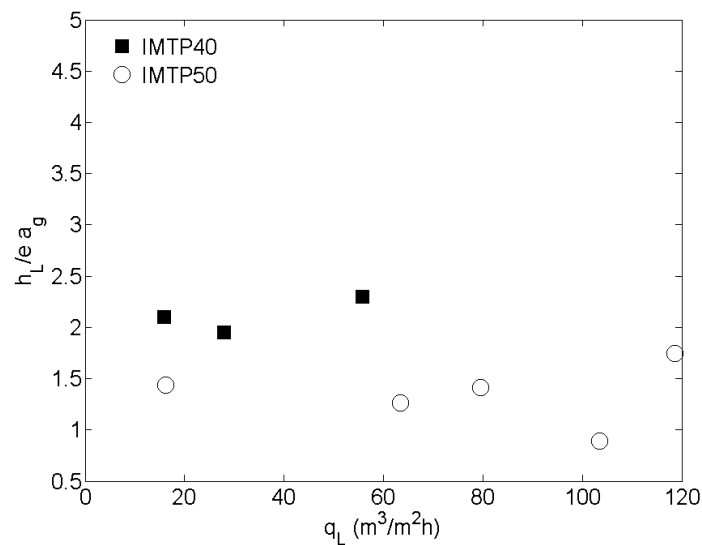


Figure 3.17 : h_L/ea_g en fonction de q_L pour les deux types de garnissage IMTP-40 et IMTP-50

Enfin, la Figure 3.16 permet d'observer des rétentions de liquide pour le garnissage M250.X qui sont supérieures à celles mesurées pour IMTP-40. Si l'écart augmente pour les débits croissants de liquide, cet écart reste globalement faible comparé à celui entre IMTP-40 et IMTP-50. Il est donc remarquable que les rétentions de liquide soient proches pour M250.X et IMTP-40 malgré une telle différence d'aires géométriques spécifiques des deux garnissages ($a_g=250 \text{ m}^2/\text{m}^3$ dans le cas du M250.X, $a_g= 153 \text{ m}^2/\text{m}^3$ pour l'IMTP-40 et $a_g= 110 \text{ m}^2/\text{m}^3$ pour l'IMTP-50). On ne peut donc pas raisonner comme précédemment sur la base de l'aire géométrique spécifique et d'une épaisseur de film $e \sim U_{LS}^{1/3}$ pour normaliser la rétention du liquide et obtenir une loi d'échelle valable dans ces deux garnissages M250.X et IMTP-40. Une telle normalisation qui suppose que le liquide s'écoule sous forme de film n'est donc pas valable pour les deux garnissages. Le mode de ruissellement et de propagation du liquide change de nature entre ces garnissages structurés et vrac. Si le liquide s'écoule principalement sous forme de films dans le cas du premier garnissage, celui dans le second est plus complexe et fait apparaître des structures telles que des gouttes comme mentionné plus haut. L'écart faible sur les valeurs de rétention entre les deux garnissages malgré la grande différence en termes d'aire géométrique spécifique $a_g \text{ (m}^2/\text{m}^3\text{)}$ est donc le résultat de modes d'écoulements différents à l'échelle des corrugations.

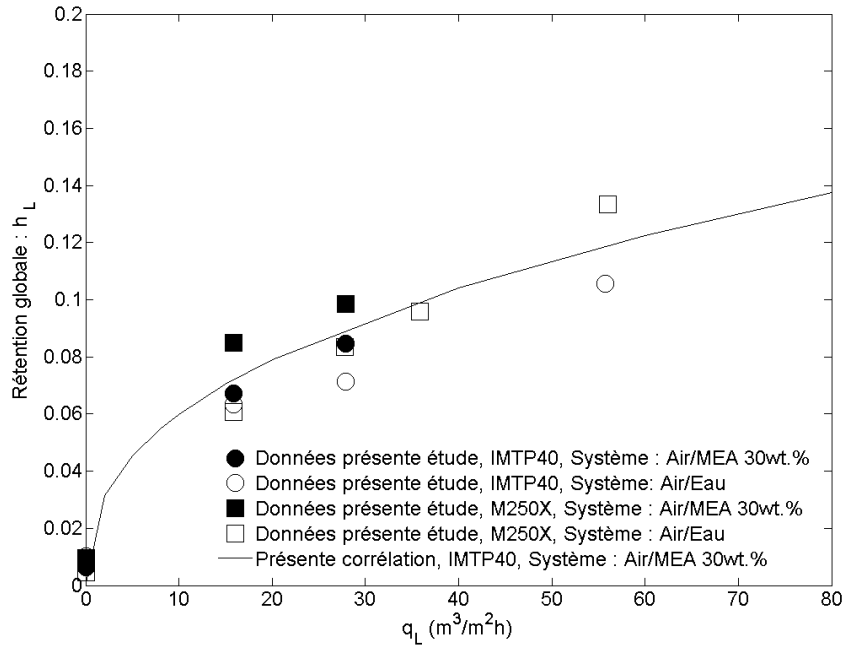


Figure 3.18 : Rétention globale, système : Air/MEA 30 wt.%

Les courbes de rétention globale de liquide obtenues pour le système Air/MEA 30 wt.% sont reportées sur la Figure 3.18. Celles obtenues dans le cas de M250.X pour le même système de fluides y sont également reportées. Un écart entre les rétentions de liquide pour ces deux garnissages est observé en Air/MEA 30wt.% et peut être relié aux mêmes causes présentées plus haut pour le cas du système Air/Eau. La corrélation décrite par l'équation 3.2 et reportée sur la Figure 3.18 prédit assez bien la rétention pour le système Air/MEA 30 wt.% validant ainsi la pertinence de l'exposant 0.17 défini dans les travaux de Suess et Spiegel (1992) et repris dans ceux d'Alix et Raynal (2008) pour la viscosité dynamique de la phase liquide dans la corrélation. Cette dépendance de la rétention de liquide en $(\mu_L/\mu_{eau})^{0.17}$ peut être, d'ailleurs, vérifiée à partir de la Figure 3.19 où l'on reporte le rapport $h_L/q_L^{0.4}$ en fonction de $(\mu_L/\mu_{eau})^{0.17}$ pour les deux débits de liquide auxquels des expériences ont été conduites avec le système Air/MEA 30 wt.%. En effet le rapport $h_L/q_L^{0.4}$ est constant quand $(\mu_L/\mu_{eau})^{0.17}$ varie et correspond à la constante multiplicative qui apparaît dans la corrélation décrite par l'équation 3.2.

Pour terminer notre propos, nous avons également noté pour IMTP-40 une dépendance marquée de la rétention de liquide au facteur cinétique de gaz. Ceci est illustré sur la Figure 3.20 où l'on voit que h_L croît du simple au double entre les essais à 20 et 80% de F_c . Une telle dépendance n'a pas été observée pour le garnissage structuré M250.X.

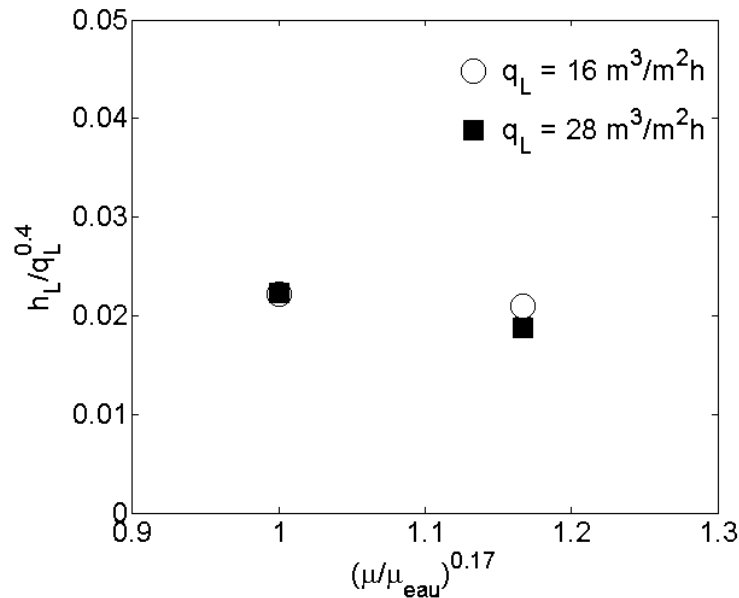


Figure 3.19 : effet de la viscosité de liquide sur le taux de rétention

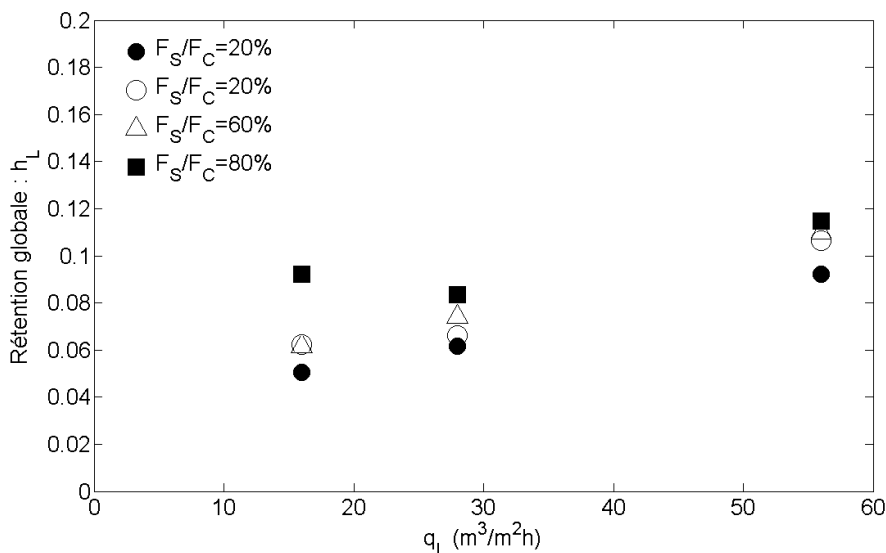


Figure 3.20 : Effet du facteur cinétique de gaz sur la rétention dans IMTP-40, système : Air/Eau

3.5.3 PERTE DE CHARGE GLOBALE

La perte de pression est reportée pour le garnissage IMTP-40 en lit sec ainsi qu'avec un écoulement de liquide et ce pour différentes valeurs de F_s . Ces mesures sont confrontées avec celles publiées par le fabricant, Koch Glitsch pour un système Air/Eau. Les figures Figure 3.21 et Figure 3.22 montrent un bon accord entre nos mesures et celles fournies par le constructeur, effectuées dans un écoulement homogène tant en lit sec (Figure 3.21) qu'en lit irrigué (Figure 3.22). Il est important de noter que pour ce garnissage vrac on observe une très faible influence d'une injection ponctuelle de liquide sur la perte de charge par rapport à la configuration de lit irrigué homogène.

Afin de se situer par rapport au garnissage M250.X, une comparaison des valeurs de perte de charge mesurées dans le cas des deux garnissages en question est proposée. La Figure 3.21 montre clairement que la perte de charge mesurée en lit sec pour le garnissage IMTP-40 est au moins deux fois supérieure à celle en lit de M250.X pour la plupart des facteurs cinétiques considérés. La perte de charge en lit sec augmente proportionnellement à F_S^2 dans les deux cas ce qui indique un régime inertiel. Pour faciliter la discussion, les pertes de charge en lit irrigué sont reportées dans des diagrammes linéaires et logarithmiques en fonction de F_S sur les figures Figure 3.23 et Figure 3.24. Comme on peut le voir sur la Figure 3.24, en présence d'écoulement de liquide et pour des facteurs cinétiques de gaz modérés, la perte de charge augmente de manière similaire à la perte de charge en gaz seul soit, sur une échelle logarithmique, avec une pente proche de 2 (se référer chapitre 1 pour les différents modèles OD de perte de charge). On assiste au-delà du point de charge à une augmentation assez importante de la pente jusqu'à atteindre l'engorgement. Ceci peut être observé sur les figures Figure 3.22, Figure 3.23 et Figure 3.24 où l'évolution de la perte de charge en fonction du facteur cinétique de gaz est reportée. On peut noter que les conditions d'engorgement sont atteintes au niveau du dernier point sur chaque courbe de perte de charge à q_L donné soit au plus grand facteur cinétique pour un débit de liquide fixé sur la Figure 3.23. L'engorgement de la colonne n'est cependant que partiel. Il correspond à un fort régime de bullage initié près de la grille de maintien du garnissage en bas de la colonne et se propage ensuite vers le haut de la colonne. Nous n'avons pas poussé les expériences au-delà de ce point car cela engendrerait un entrainement du garnissage dans le distributeur et nécessiterait de ce fait des manipulations lourdes à effectuer.

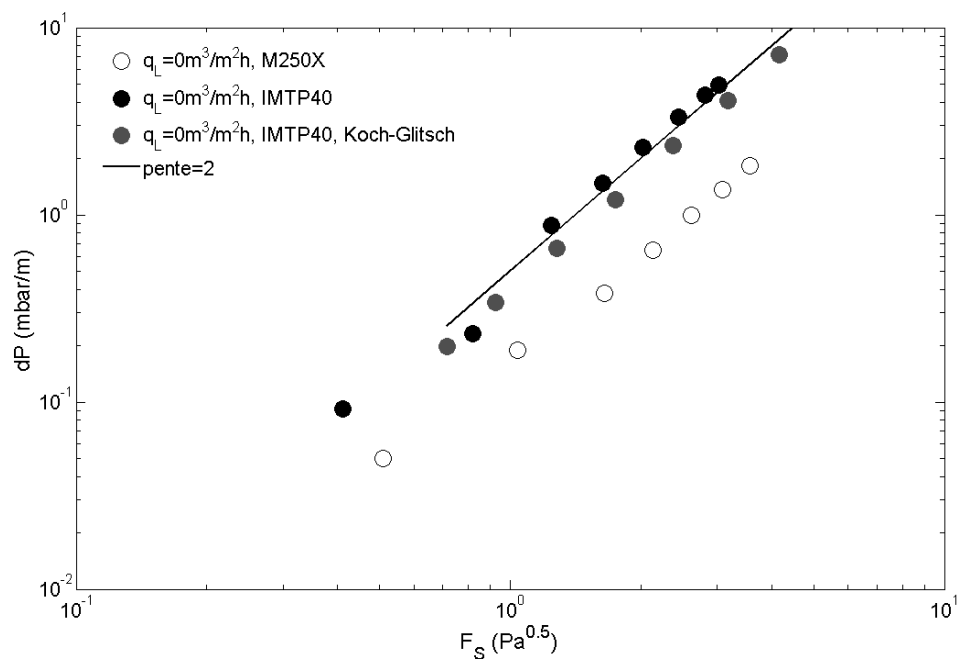


Figure 3.21 : Courbe de perte de charge en gaz seul, IMTP-40 et M250.X

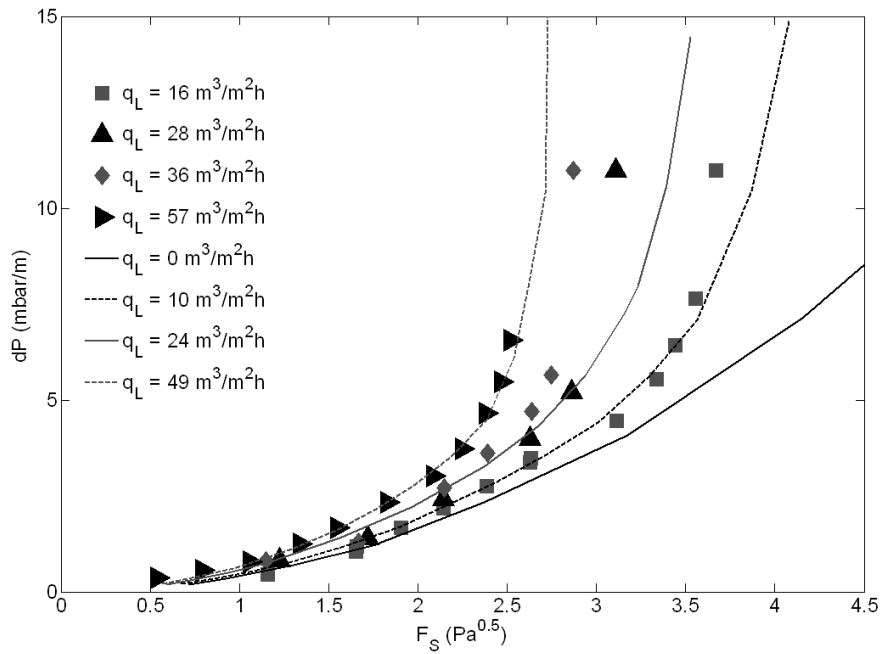


Figure 3.22 : Courbes de perte de charge dans IMTP-40, système : Air/Eau, symboles pleins : présente étude, courbes continues : Documentation Koch-Glitsch.

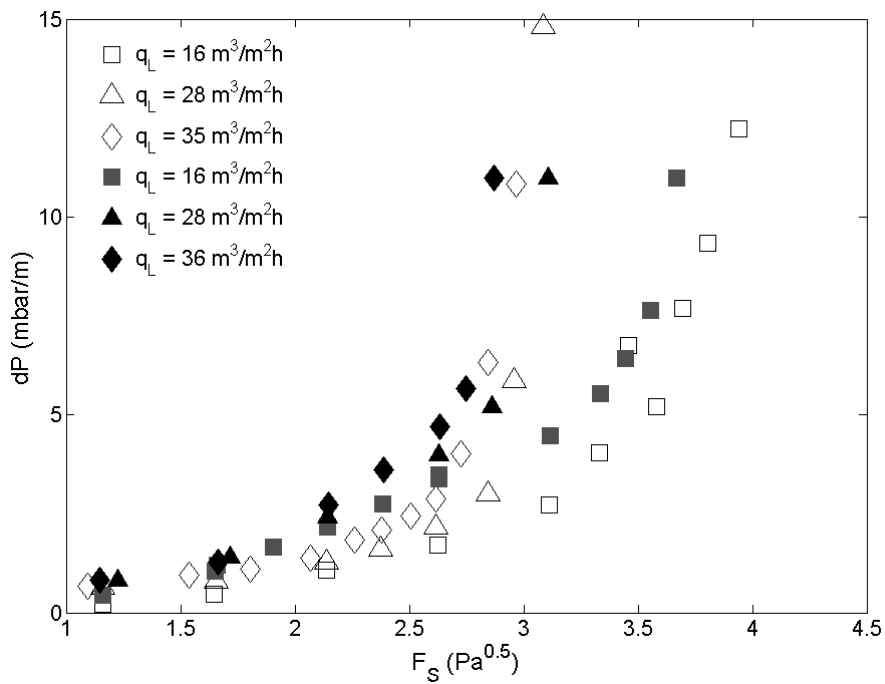


Figure 3.23 : Courbes de perte de charge, système : Air/Eau, symboles pleins : IMTP-40, symboles vides : M250.X.

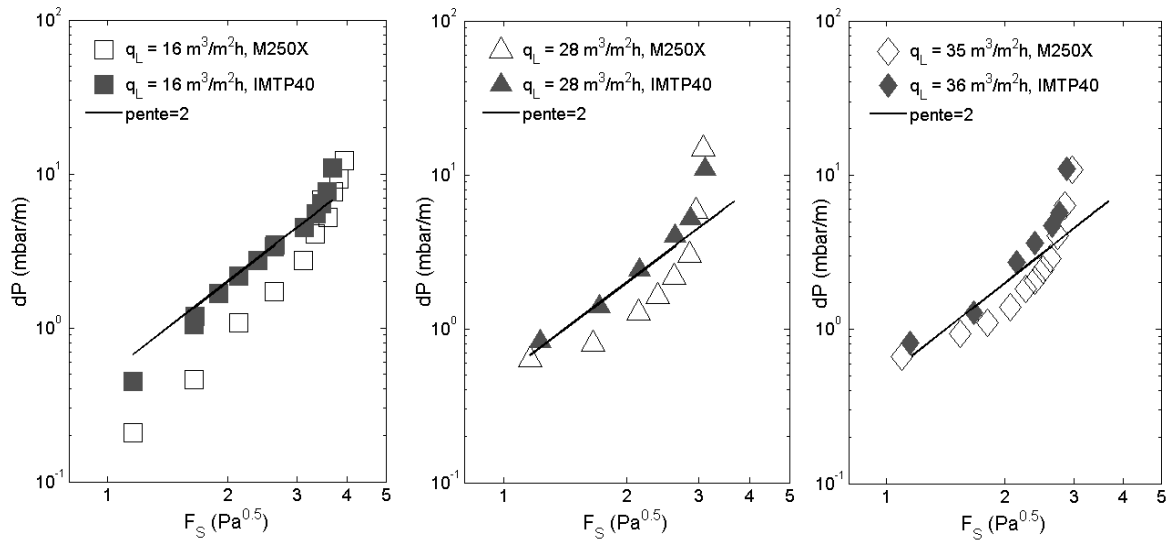


Figure 3.24 : Courbes de perte de charge, système : Air/Eau, symboles pleins : IMTP-40, symboles vides : M250.X.

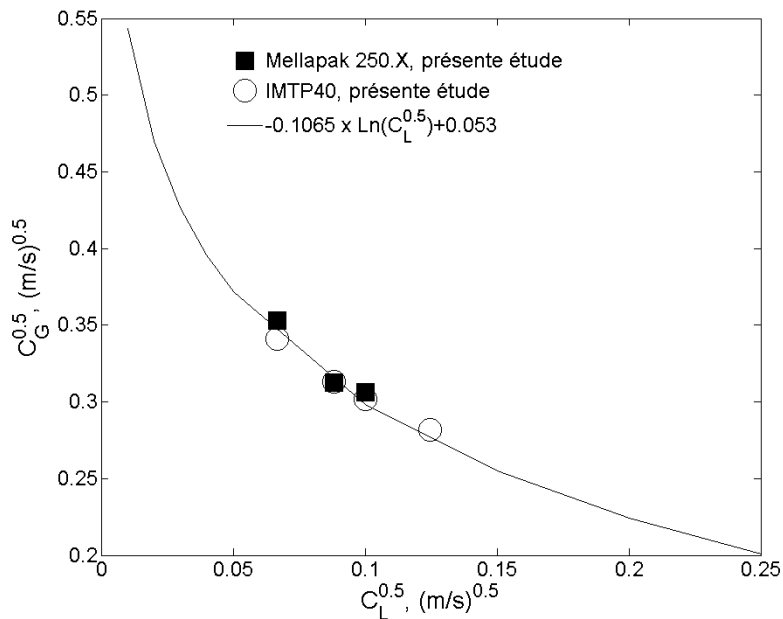


Figure 3.25 : Diagramme de Wallis, Système : Air/Eau

Pour ce qui concerne la comparaison avec M250.X, les Figures Figure 3.23 (échelle linéaire) et Figure 3.24 (échelle logarithmique) permettent de souligner que, dans le cas d'IMTP-40, la perte de charge en présence d'un écoulement de liquide est également supérieure à celle mesurée dans le cas de M250.X et ce pour les trois débits de liquide testés. Cet écart est d'autant plus grand qu'on se place à des facteurs cinétiques de gaz relativement faibles ce qui correspond sur la Figure 3.24 aux points alignés avec la droite de pente 2, situés en dessous du point de charge. La résolution de la Figure 3.24 en termes de nombre de points ne permet pas de dire si la zone de charge est atteinte plus tôt dans le cas d'IMTP-40 ou de celui de M250.X. Toutefois les facteurs cinétiques de gaz auxquels apparaît l'engorgement sont très rapprochés dans les deux cas. Ce résultat est mis en évidence sur la Figure 3.25 où nous avons tracé un diagramme de

Wallis (défini dans le chapitre 1 de ce manuscrit) unique permettant de représenter les capacités respectives des garnissages étudiés. Ce résultat est inattendu étant donné que le garnissage M250.X est plus capacitif –engorge moins vite- qu’IMTP-40 dans des configurations homogènes. Cependant, nous avons vu dans la section 3.4.2 que nous sous-estimons le facteur de capacité du gaz dans le cas du garnissage M250.X par rapport aux données du constructeur pour des raisons de diamètre de colonne et de distribution de gaz en fond de celle-ci. Aussi, nous effectuons nos mesures de perte de charge dans des configurations de distribution de liquide qui ne sont pas homogènes. Ces deux arguments peuvent ainsi expliquer le fait qu’on mesure des facteurs de capacité de gaz identiques dans le cas des deux garnissages.

Les courbes de perte de charge du système Air/MEA 30 wt.% sont également reportées sur la Figure 3.26 pour deux charges liquides différentes. La perte de charge mesurée suit la même évolution que celle relevée dans le système Air/Eau. Si les points de charge relatifs aux deux systèmes ne sont pas très éloignés l’un de l’autre, l’engorgement, lui, est atteint plus tôt dans le cas de la MEA 30 wt.% (les points d’engorgement correspondent aux plus grands facteurs cinétiques de gaz reportés sur la Figure 3.26). En outre, la perte de charge dans le cas du système Air/MEA 30 wt.% reste globalement supérieure à celle du système Air/Eau et ce pour l’ensemble de la gamme de facteurs cinétiques décrite. Ce résultat confirme les observations faites dans la section 3.4.2 sur le garnissage M250.X. Le surplus de perte de charge du système Air/MEA 30 wt.% est encore une fois cohérent avec les modèles de description de perte de charge présentés dans le chapitre 2 où un terme visqueux proportionnel à μ_L (Pa.s) apparaît et où la perte de charge augmente avec la rétention de liquide, qui, elle, est plus importante dans le cas du système de fluides Air/MEA wt.30% en question (Figure 3.18). En effet, la MEA 30 wt.% étant plus visqueuse que l’eau et donc les films plus épais, un espace plus restreint dans le lit de garnissages est alors disponible au gaz ce qui engendre une augmentation de la vitesse de celui-ci et donc une augmentation de la perte de charge par rapport au cas de l’eau. La tension de surface de la MEA 30 wt.% est, elle, plus petite que celle de l’eau ($\sigma=60$ mN/m pour la MEA 30 wt.% et pour l’eau $\sigma=73$ mN/m) ce qui rend plus facile la formation de petites gouttes de liquide. Ces gouttes peuvent être entraînées plus facilement par le gaz et accélérer l’apparition de l’engorgement quand la vitesse de gaz augmente.

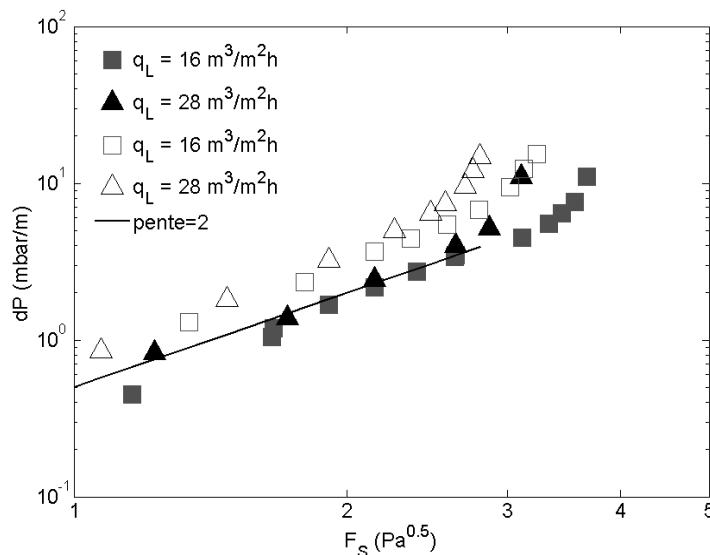


Figure 3.26 : Courbes de perte de charge, symboles pleins : système : Air/eau, symboles vides : système : Air/MEA 30 wt.%

3.5.4 DISTRIBUTION DE LIQUIDE

Si les cartes de rétention de liquide présentées dans la section 3.5.1 (ainsi que les facteurs de maldistribution définis dans la même section) permettent de rendre compte de l'étalement du liquide dans le lit de garnissage de manière assez qualitative, une description quantitative de cet étalement s'impose pour permettre une comparaison plus fine entre les deux garnissages testés dans ce travail.

Pour ce faire, des profils radiaux de rétention moyenne sont reportés sur les Figures Figure 3.27 à Figure 3.31 pour le système Air/Eau. La rétention moyenne est calculée, tout comme dans le cas du garnissage M250.X, en moyennant les valeurs de rétention locale tirées des cartes de tomographie Gamma sur des couronnes d'épaisseur $\Delta r=16.7\text{mm}$ comme suit :

$$h_L(r) = \frac{1}{2\pi \times r \times \Delta r} \int_0^{2\pi} \int_{r-\frac{\Delta r}{2}}^{r+\frac{\Delta r}{2}} h_L(r', \theta) \times r' \times dr' \times d\theta.$$

Les Figures Figure 3.27 à Figure 3.30 montrent des profils radiaux de $h_L(r)$ pour deux charges liquides égales à $16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et ce pour deux facteurs cinétiques de gaz (20% de F_C et 80% de F_C). L'étalement du jet de liquide est facilement observable sur ces profils. Par rapport à M250.X, pour cette charge de liquide modérée ($16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$) on note clairement une dépendance forte de la distribution de liquide par rapport au débit de gaz. Pour un rapport F_S/F_C égal à 20%, une forte rétention moyenne dans la zone centrale de la colonne se maintient pour toutes les positions axiales considérées (Figure 3.27). Ce surplus de liquide au centre d'une section est également observé pour des rapports F_S/F_C de 40 et 60% (profils radiaux de rétention correspondants fournis en annexe n° 5 de ce chapitre) pour toutes les cotes axiales considérées et reste perceptible en position z_1 (la plus haute dans le lit de garnissage) pour un rapport F_S/F_C de 80% (Figure 3.28). La persistance de la forte concentration de liquide au centre de la colonne est également observée à $F_S/F_C=20\%$ pour $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ (Figure 3.29). Ce résultat confirme celui déjà pressenti à partir des cartes de rétention, à savoir l'étalement moindre du jet de liquide dans le cas de l'IMTP-40 pour les facteurs cinétiques modérés de gaz.

Dans le cas de la charge liquide de $16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et pour un rapport F_S/F_C de 80%, les profils radiaux de rétention relatifs aux deux garnissages pour les positions Z_1 , Z_2 et Z_3 sont assez proches (Figure 3.28). Pour ce même rapport F_S/F_C de 80% et pour une charge liquide de $56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, les profils radiaux de rétention de liquide pour les positions Z_1 , Z_2 et Z_3 sont au contraire plus étalés dans la direction radiale que dans le cas du M250.X (Figure 3.30). Les profils pour différentes charges liquides sont reportés en annexes n° 5 pour les quatre facteurs cinétiques de gaz testés afin de donner une description complète de nos essais. Mais nous allons voir ci-dessous que la synthèse de ces essais est délicate.

L'effet du facteur cinétique de gaz sur l'étalement des profils radiaux de rétention moyenne dans la direction radiale est souligné sur la Figure 3.31 pour une charge liquide q_L de $56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Les profils radiaux en question ont tendance à être plus étalés quand le facteur cinétique de gaz augmente. Ceci confirme, toujours de manière très qualitative, les observations faites dans la section 3.5.1 à partir des cartes de rétention locale. Les évolutions des profils radiaux de rétention moyenne en fonction du facteur cinétique pour les deux autres débits de liquide testés ($q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $q_L=28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$) fournis en annexes n° 5 de ce chapitre ne permettent pas une visualisation claire de l'effet du débit de gaz sur l'étalement de liquide.

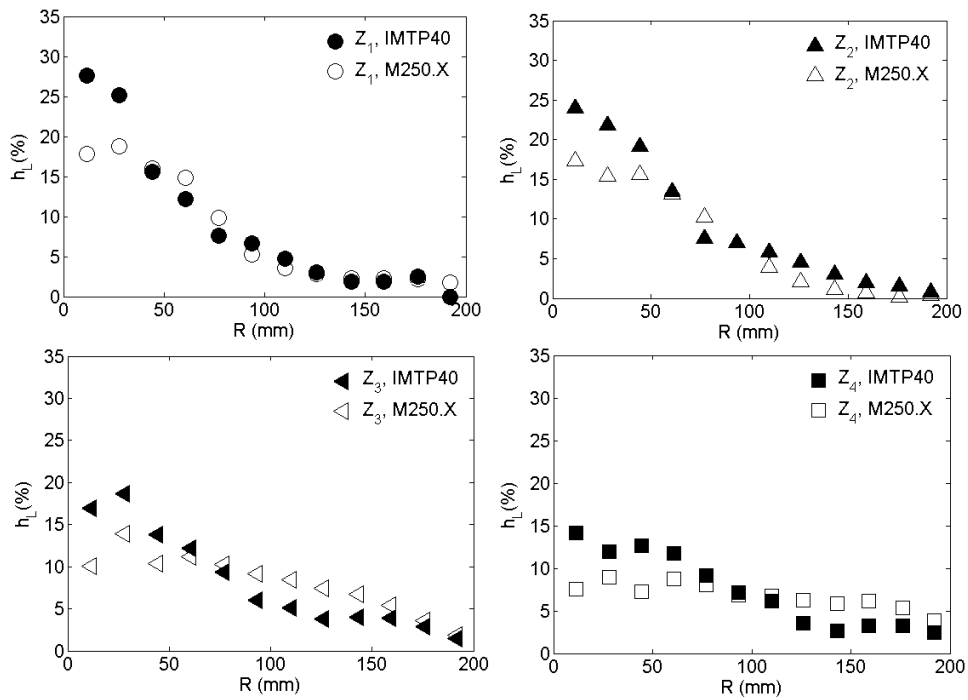


Figure 3.27 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP-40, symboles vides : M250.X, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 20\%F_v$, Système : Air/Eau

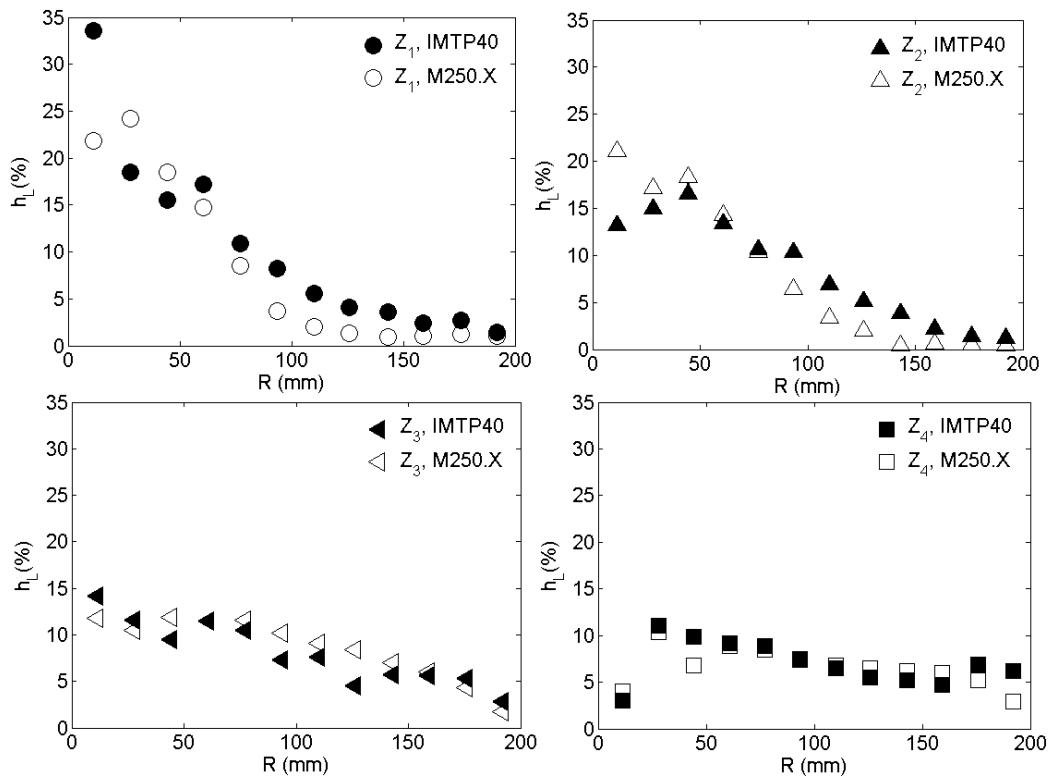


Figure 3.28 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP-40, symboles vides : M250.X, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 80\%F_v$, Système : Air/Eau

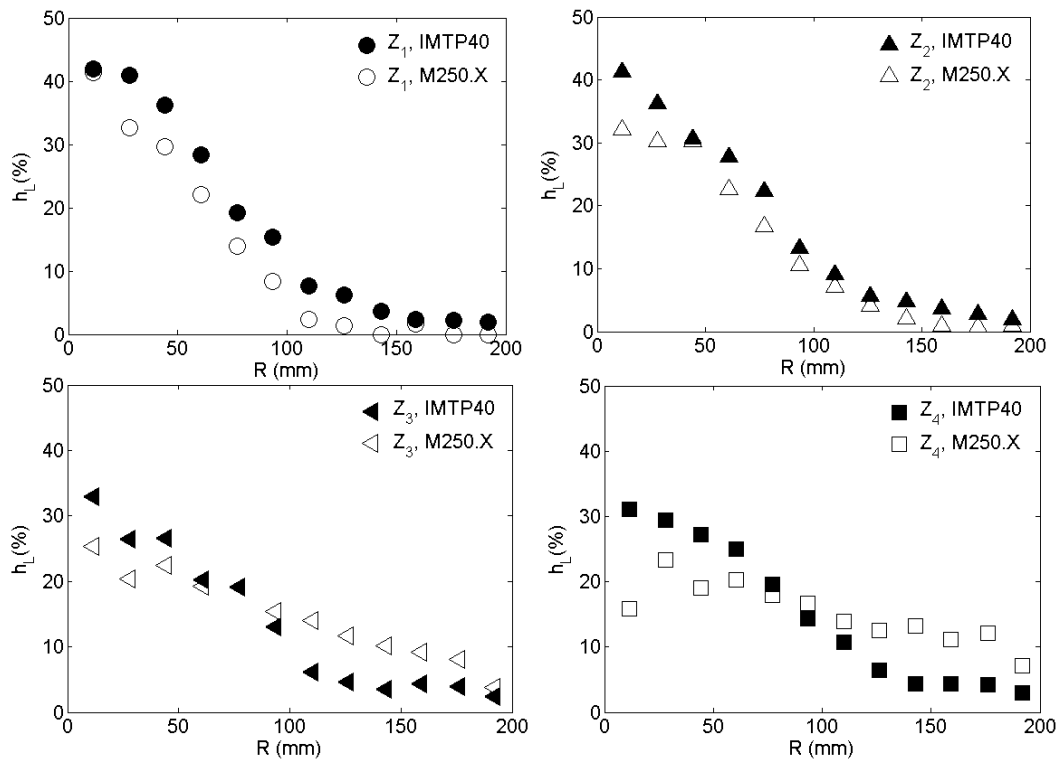


Figure 3.29 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP-40, symboles vides : M250.X, $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 20\%F_v$, Système : Air/Eau

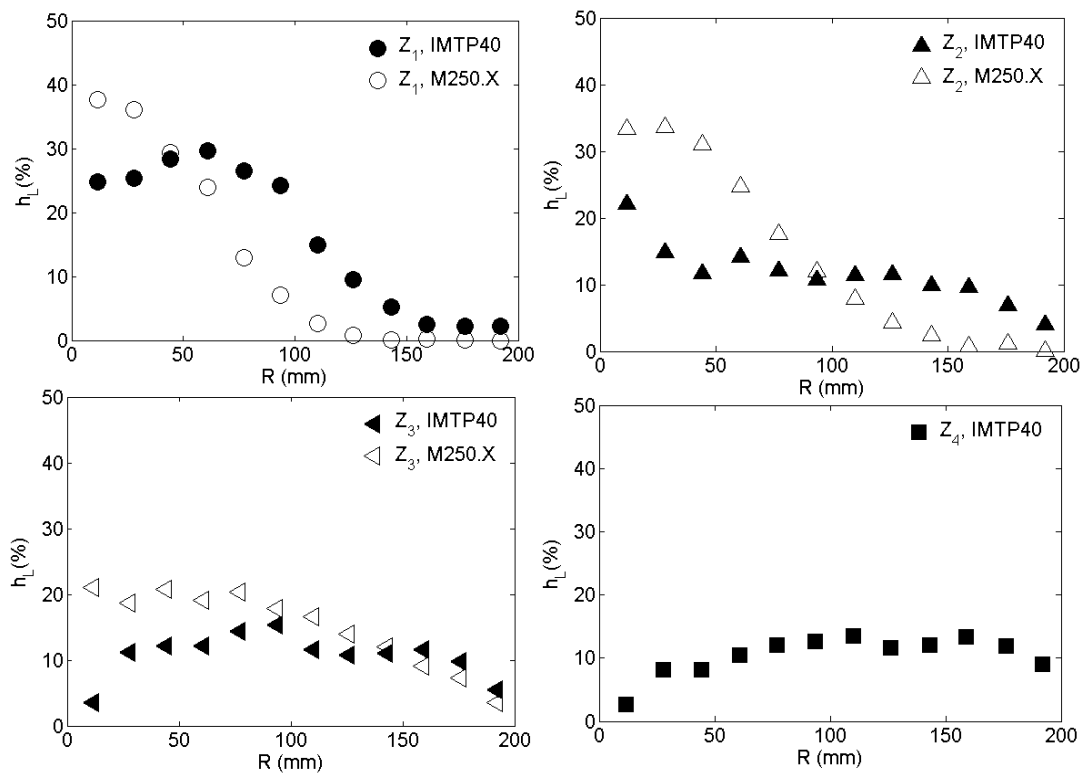


Figure 3.30 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP-40, symboles vides : M250.X, $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 80\%F_v$, Système : Air/Eau

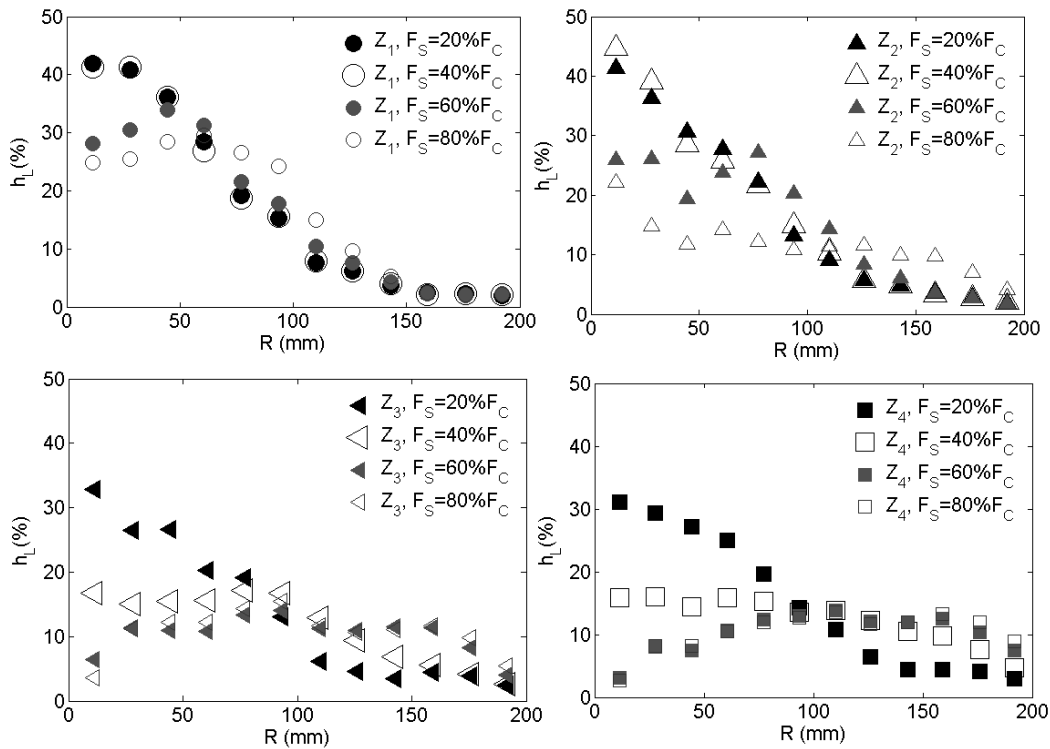


Figure 3.31 : Profils radiaux de rétention moyenne pour l'IMTP-40, $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et F_S variable, Système : Air/Eau

La comparaison des distributions radiales de rétention liquide pour les garnissages M250.X et IMTP-40 sur la gamme complète des essais révèle que la dispersion transverse de liquide peut être plus importante, similaire ou moindre que dans le cas du garnissage structuré, selon les essais et les zones hautes ou basses de la colonne examinées. Si une tendance claire de l'évolution de la dispersion en garnissage vrac avec les débits des deux phases n'apparaît pas à ce stade de l'analyse, cela tient certainement à deux causes possibles. Tout d'abord, le comportement hydrodynamique de l'écoulement de liquide sur les deux types de support solide différents, structuré et vrac, est vraisemblablement à l'origine de modes de dispersion du liquide fortement contrastés. Mais en même temps, la complexité des profils radiaux de rétention liquide parfois obtenus pour IMTP-40 (Figure 3.30 par exemple) rend difficile l'expression d'une tendance générale.

Afin de décrire de manière quantitative l'étalement de liquide dans le garnissage IMTP-40, il est nécessaire de modéliser, comme dans le cas de M250.X, l'étalement du jet de liquide en se référant au modèle d'advection-diffusion de débit décrit dans la section 3.4.2 de ce chapitre. Pour qu'elle ait du sens, cette entreprise requiert toutefois des profils radiaux de rétention, et donc des profils radiaux de débits de liquide, qui soient les plus proches possibles de profils gaussiens. Ceci n'est clairement pas le cas pour certains essais notamment ceux à fort facteur cinétique de gaz (rapport F_S/F_C de 80%) et ceux à $28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ dont les profils sont fournis en annexe n° 5 de ce chapitre. On peut donc s'attendre à ce que le modèle d'advection-diffusion ne soit pas toujours satisfaisant pour quantifier la dispersivité du liquide.

3.5.5 VALIDITÉ DU MODÈLE D'ADVECTION-DIFFUSION

Afin de tester la validité du modèle d'advection diffusion décrit par les équations 1 à 5 de la section 3.4.2, nous reportons sur les figures Figure 3.32 et Figure 3.33 les profils expérimentaux

de rétention moyenne normalisée par sa valeur maximale, h_L/h_{Lmax} , en fonction de $r/z^{0.5}$. Dans le cas où me modèle d'advection-diffusion est consistant, les points expérimentaux devraient se regrouper sur une courbe gaussienne d'équation:

$$\frac{h_L(r, z)}{h_{Lmax}(z)} = \exp\left(-0.4 \times \frac{r^2}{4D_r z}\right).$$

Les figures Figure 3.32 et Figure 3.33 montrent que si les points expérimentaux relatifs aux différentes positions axiales peuvent présenter une tendance gaussienne pour les faibles débits de liquide et de gaz (Figure 3.32), il n'en est pas de même pour les forts débits de liquide et de gaz (Figure 3.33). En effet, pour un débit de liquide de $56 \text{ m}^3/\text{m}^2$ et des ratios de facteurs cinétiques de gaz F_s/F_c de 60 et 80% les répartitions radiales des rétentions n'ont plus du tout une forme gaussienne et deviennent très bruitées. Le tracé des courbes de h_L/h_{Lmax} en fonction de $r/z^{0.5}$ pour l'ensemble des essais réalisés permet de faire une deuxième constatation : les points relatifs aux positions les plus hautes dans le lit (positions Z_1 et Z_2) et celles les plus basses ((positions Z_3 et Z_4) se regroupent deux à deux sur une courbe unique, avec une tendance gaussienne pour les débits modérés de gaz (Figure 3.34 et courbes fournies en annexe n° 6 de ce chapitre).

A la lumière de cette constatation, et vu l'écart à la tendance gaussienne de l'ensemble des points, il nous parait plus judicieux de calculer deux coefficients de dispersion différents en se basant sur ces deux groupes de positions axiales (Z_1 et Z_2 pris ensembles et Z_3 et Z_4 pris ensembles) et ce pour tous les essais réalisés : les coefficients de dispersion obtenus seront appelés respectivement D_{r1} et D_{r2} . La prise d'une moyenne des deux donne lieu au coefficient de dispersion moyen D_{rmoy} . Notons enfin que, même si un lissage par une gaussienne de tous ces essais a été entrepris, il est préférable de garder une certaine réserve au moment de l'interprétation des résultats.

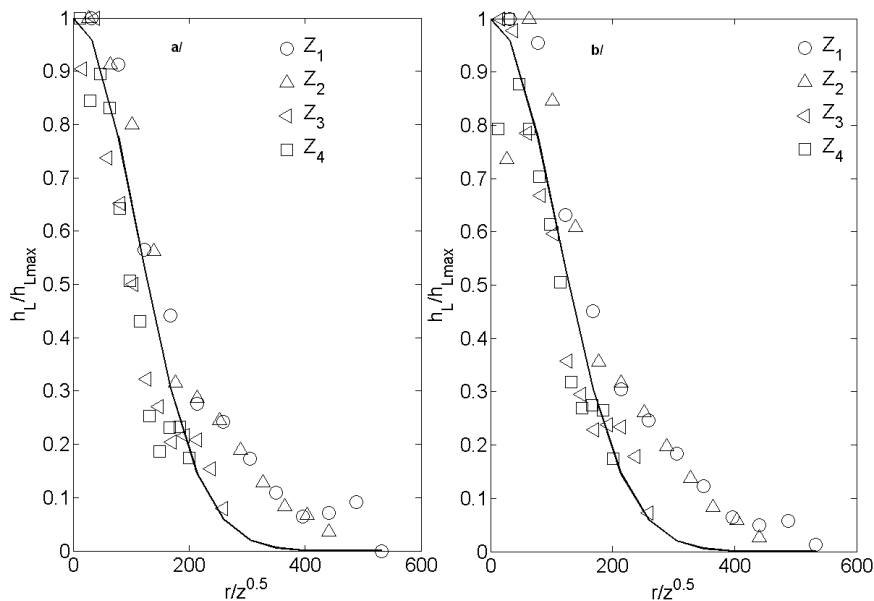


Figure 3.32 : $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, a: $F_s = 20\%F_c$, b: $F_s = 40\%F_c$, symboles: points expérimentaux, IMTP-40, courbe continue : courbe gaussienne, Système : Air/Eau

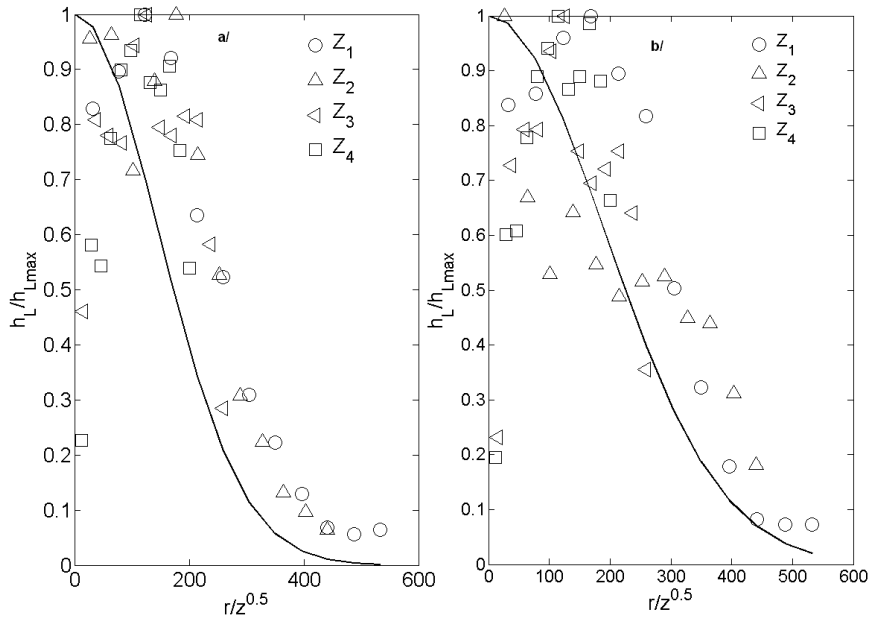


Figure 3.33 : $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, a: $F_s = 60\%F_c$, b: $F_s = 80\%F_c$, symboles: points expérimentaux, IMTP-40, courbe continue : courbe gaussienne, Système : Air/Eau

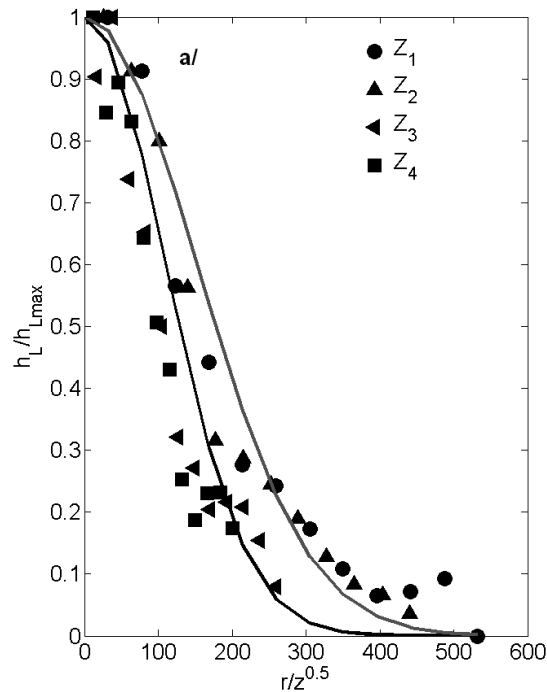


Figure 3.34 : Deux courbes gaussiennes décrivant les profils radiaux de rétention, $16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_s = 20\%F_c$ (points discrets : points expérimentaux, courbes continues : gaussiennes)

3.5.6 COEFFICIENT DE DISPERSION OU SPREAD FACTOR

Le calcul des coefficients de dispersion D_{r1} , D_{r2} et $D_{r\text{moy}}$ définis dans la section 3.5.5 est effectué en se basant sur le modèle d'advection-diffusion détaillé dans la section 3.4.2. On calcule pour le

système Air/Eau des coefficients D_{r1} compris entre ~ 4 et ~ 8 mm, des coefficients D_{r2} compris entre ~ 1 et ~ 5 mm et, par déduction, des coefficients D_{rmoy} compris entre ~ 3 et ~ 6 mm. Les valeurs de ces coefficients de dispersion semblent en bon accord avec ceux de la littérature si l'on adopte pour critère de comparaison les longueurs caractéristiques des éléments constituant le garnissage vrac (25 à 58 mm pour IMTP-40 comme reporté sur la Figure 3.4). Pour de l'eau et à très faibles débits de gaz, Onda et al. (1972), Porter et al. (1963) ou Hoek et al. (1986) reportent en effet des coefficients de dispersion compris entre 1 et 6 mm pour des éléments de garnissages vrac de tailles comprises entre 1 et 35 mm. Toujours pour de l'eau et en absence de gaz, Marchot et al. (1999) calculent, quant à eux, des coefficients de dispersion compris entre 1.3 et 2 mm pour un garnissage vrac de taille caractéristique 44 mm.

L'évolution des trois coefficients de dispersion D_{r1} , D_{r2} et D_{rmoy} en fonction du facteur cinétique de gaz est présentée sur les figures Figure 3.35 et Figure 3.36 pour le couple Air/Eau. On constate tout d'abord sur la Figure 3.35 que les coefficients de dispersion D_{r1} (calculés sur la base des profils radiaux de rétention mesurés en Z_1 et Z_2 et présentés en symboles noirs pleins) sont globalement supérieurs aux coefficients de dispersion D_{r2} (calculés sur la base des profils radiaux de rétention mesurés en Z_3 et Z_4 et présentés en symboles bleus pleins). La différence entre ces deux valeurs va du simple au double et les écarts de ces deux mesures à la valeur moyenne D_{rmoy} , reportée sur la Figure 3.36, sont importants. Définir un unique coefficient de dispersion pour toute la colonne de garnissage vrac est donc délicat. Ces écarts, parce qu'ils sont systématiques, suggèrent également, que pour des raisons associées au développement hydrodynamique de l'écoulement, la dispersion de liquide est plus rapide dans les positions hautes du lit et qu'elle est ensuite ralentie en descendant dans ce dernier.

La Figure 3.35 montre, par ailleurs, que le garnissage IMTP-40 a tendance à plus disperser le liquide dans la direction radiale en haut de lit que le garnissage M250.X puisque les valeurs de D_{r1} sont supérieures aux valeurs de D_r pour M250.X. Cependant, le garnissage structuré permet ensuite une dispersion radiale plus importante aux positions basses du lit puisque les valeurs de D_r pour M250.X sont supérieures à celles de D_{r2} pour IMTP-40. Cette constatation est en accord avec des distributions de liquide plus homogénéisées en bas de colonne dans le cas de M250.X (Figure 3.27 et Figure 3.29 par exemple).

La Figure 3.35 montre en outre, conformément aux observations faites sur la base des coupes tomographiques présentées par les figures Figure 3.13 et Figure 3.14, une augmentation des coefficients D_{r1} et D_{r2} avec le débit de gaz, les valeurs de D_{r2} à $F_s/F_c=20\%$ étant quasiment indépendantes de q_L . Pour la quasi-totalité des débits de liquide testés, cette augmentation avec F_s s'amplifie aux plus grands facteurs cinétiques de gaz soit pour des rapports F_s/F_c de 80%. Ce résultat original ne peut être confronté à des travaux antérieurs car, à notre connaissance, la plupart des études reportées dans la littérature restent restreintes à des faibles facteurs cinétiques de gaz c'est à dire à des régimes où le gaz a peu d'influence sur la distribution de liquide (Hoek et al., 1986, Marchot et al., 1999). Ce résultat montre également que le garnissage vrac IMTP-40 se démarque du garnissage structuré M250.X, dans lequel la dispersion de liquide est peu sensible au débit de gaz (Figure 3.35 et Figure 3.36). Par ailleurs, à une valeur de F_s fixée, chacun des coefficients de dispersion augmente en moyenne avec le débit de liquide q_L . La dispersion en garnissage vrac est donc fortement sensible à l'hydrodynamique ce qui suggère de rechercher des lois d'échelle portant sur des Peclets de dispersion.

La Figure 3.36 montre, quant à elle, que les coefficients de dispersion calculés en prenant une moyenne de D_{r1} et D_{r2} ont le même ordre de grandeur que ceux de calculés pour M250.X et leur deviennent supérieurs pour les plus grands débits de gaz. La Figure 3.37 permet enfin une confrontation des mesures au modèle d'advection-diffusion lorsqu'on l'applique en faisant évoluer le coefficient de dispersion entre les deux valeurs D_{r1} et D_{r2} . La Figure 3.37-a permet de constater le regroupement respectif des points de mesure de rétention relatifs aux positions Z_1 et Z_2 ainsi qu'aux positions Z_3 et Z_4 sur les deux courbes gaussiennes associées à D_{r2} et D_{r1} . Pour

les débits considérés sur cet exemple ($q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, et $F_S/F_C=20\%$) les courbes du modèle d'advection diffusion pour M250.X et IMTP-40 se regroupent indiquant des coefficients de dispersion D_r (dans le cas de M250.X) et $D_{r\text{moy}}$ (dans le cas de l'IMTP-40) qui sont très proches comme le montre la Figure 3.37-b.

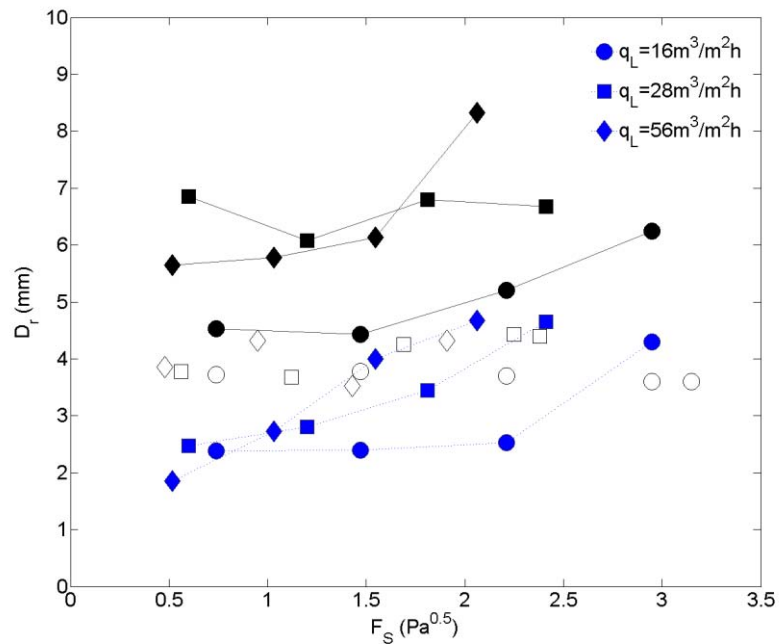


Figure 3.35 : Coefficient de dispersion, système Air/Eau

symboles pleins noirs : D_{r1} (IMTP-40) déterminé sur la base des mesures aux positions Z_1 et Z_2 , symboles pleins gris : D_{r2} (IMTP-40) déterminé sur la base des mesures en Z_3 et Z_4 , symboles vides : D_r (M250.X) déterminé sur la base des mesures en Z_1 , Z_2 et Z_3 .

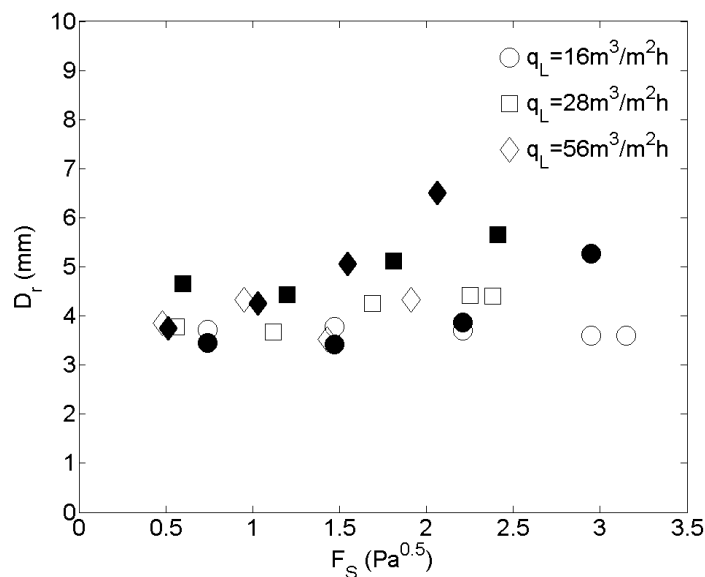


Figure 3.36 : Coefficient de dispersion, système Air/Eau

symboles pleins noirs : $D_{r\text{moy}}$ (IMTP-40) = $(D_{r1} + D_{r2})/2$, symboles vides : D_r (M250.X) déterminé sur la base de Z_1 , Z_2 et Z_3 .

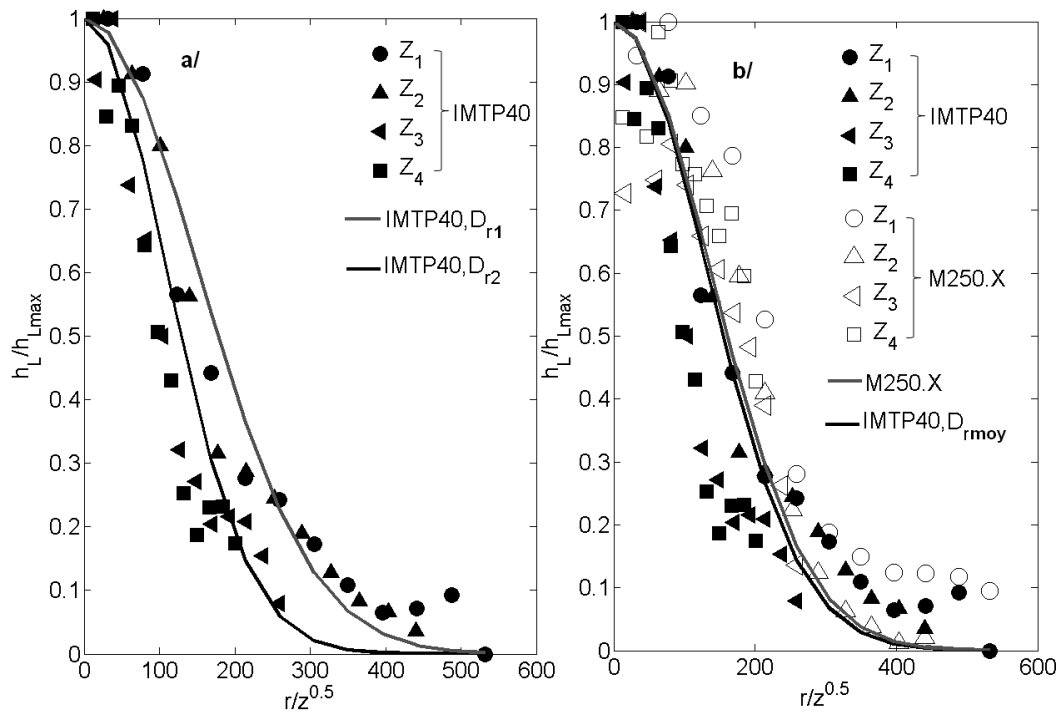


Figure 3.37 : $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_S = 20\%F_C$, symboles pleins: points expérimentaux relatifs à IMTP-40, symboles vides : points expérimentaux relatifs à M250.X, courbes : modèle d'advection-diffusion basé sur différents D_r .

Enfin le Tableau 3.9 montre les valeurs des coefficients de dispersion $D_{r\text{moy}}$ relatifs à IMTP-40 pour deux systèmes de fluides différents : Air/Eau et Air/MEA 30 wt.%. Les valeurs obtenues sont très rapprochées et indiquent, comme dans le cas de M250.X, une invariance du coefficient de dispersion avec la viscosité du liquide.

Tableau 3.9 : Facteurs d'étalement pour IMTP-40, système : Air/Eau vs système : Air/ MEA 30wt.%

q_L ($\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$)	Air / MEA 30wt.%		Air / Water	
	$\%F_S$	$D_{r\text{moy}}$ (mm)	$\%F_V$	$D_{r\text{moy}}$ (mm)
16	20	2.4	20	2.4
	80	2.6	80	2.4
28	20	2.2	20	2.5
	80	4.9	80	4.7

En conclusion sur la dispersion de liquide dans le garnissage vrac IMTP-40 les résultats suivants ont pu être mis en évidence.

La dispersion de liquide, lorsqu'elle est clairement dominante, comme c'est le cas en haut de colonne, a un comportement isotrope dans le plan horizontal. Les cartes tomographiques ont montré que la distribution spatiale de liquide en bas de colonne peut présenter des hétérogénéités de grande extension. Ces hétérogénéités résultent vraisemblablement de défauts dans l'empilement des éléments du garnissage vrac.

La dispersion de liquide dans le garnissage IMTP-40 procède également de mécanismes plus complexes que dans des garnissages structurés de type M250.X. En effet, elle n'est pas simplement gouvernée par la géométrie. La définition d'un coefficient d'étalement requiert d'ailleurs des précautions et une étude attentive montre qu'il est préférable de définir un coefficient d'étalement qui évolue avec la cote longitudinale de l'écoulement de liquide. C'est parce que le mode de dispersion hydrodynamique évolue dans la colonne que ce coefficient doit évoluer avec la cote z . Par ailleurs, que l'on considère un coefficient local (D_{r1} dans la zone haute ou D_{r2} dans la zone basse) ou un coefficient moyen sur toute la colonne ($D_{r\text{moy}}$), on constate dans tous les cas que ce coefficient augmente avec le facteur cinétique de gaz ou le débit de liquide. Cela traduit sans nul doute le rôle important du transport de liquide par des fluctuations de nappes ou de filets fluides engendrées par l'écoulement gazeux, voire le transport de liquide sous forme de gouttelettes d'autant plus arrachées aux zones de ruissellement que le cisaillement aux interfaces augmente. A faible débit de gaz (à $F_s/F_c=20\%$) le coefficient D_{r2} (respectivement $D_{r\text{moy}}$) semble peu sensible au débit de liquide, mais le coefficient de dispersion en haut de colonne (D_{r1}) augmente avec q_L . Cela traduit certainement un régime peu influencé par l'écoulement de gaz où des instationnarités de ruissellement apparaissent pour les forts débits de liquide tant que le débit à l'échelle d'un élément est important. Si D_{r1} est sensible à q_L et D_{r2} beaucoup moins c'est certainement en raison de la plus grande vitesse du liquide dans les sections hautes que dans les sections basses du lit de garnissage puisque le même débit de liquide passe dans des sections différentes. Il serait intéressant dans un travail futur de rechercher des relations entre les coefficients de dispersion et les débits des phases gaz et liquide.

3.5.7 CONCLUSION

On constate que les résultats expérimentaux concernant les distributions de liquide dans le garnissage IMTP-40 sont plus délicats à analyser que ceux obtenus dans le garnissage structuré M250.X. Il n'en reste pas moins vrai que des comportements clairs peuvent être mis en avant à l'issue de cette analyse.

Dans ces garnissages de type vrac, et par comparaison avec le garnissage structuré que nous avons étudié, la dispersion de liquide depuis une injection centrale en haut de colonne, s'effectue de façon plus isotrope en raison de l'absence de direction préférentielle dans la géométrie du support de garnissage. Mais la distribution de liquide n'est pas toujours très homogénéisée en bas de colonne, soit que la dispersion progressive n'ait pas été très efficace, soit que soient apparues de fortes inhomogénéités à grande échelle créées vraisemblablement par des hétérogénéités d'empilage. La dispersion de liquide peut ainsi apparaître selon les débits ou les zones observés plus ou moins importante que dans le cas du garnissage structuré. Lorsqu'on évalue la fraction volumique du liquide en bas de colonne moyennée sur toute la section, on obtient ainsi des valeurs qui restent sensibles aux débits de gaz, contrairement à ce que l'on observe en garnissage structuré. Cependant, si l'on examine la corrélation globale entre cette mesure de la fraction volumique moyenne h_L et le taux de charge de liquide q_L , - corrélation qui est utile au dimensionnement des colonnes - on met en évidence une corrélation unique valable pour les essais en eau ou en MEA 30wt.%. Cette corrélation présente la même loi d'échelle que

celle obtenue en garnissage M250.X pour ce qui concerne la dépendance au débit de liquide. La loi d'échelle concernant la viscosité est par contre modifiée, et en bon accord avec la proposition d'Alix et Raynal (2008) pour le garnissage vrac de type IMTP-50.

Les mesures de pertes de charge permettent de montrer que la distribution de liquide n'a que peu d'influence sur la perte de charge dans ces colonnes à garnissage vrac dans les régimes que nous avons explorés. En effet, on retrouve des mesures déjà observées en écoulement homogène, et notamment le fait que la perte de charge est plus forte pour ces garnissages vrac que pour les garnissages de type M250.X. L'utilisation de la MEA, fluide plus visqueux que l'eau, engendre une augmentation de perte de charge qui était attendue.

C'est par contre sur les propriétés caractéristiques de la dispersion que le comportement en garnissage vrac est le plus original. Ce travail souligne la faible représentativité d'un unique et global coefficient de dispersion pour représenter la dispersion du liquide dans ce type de garnissage. Ceci nous semble dû à un changement de régime de dispersion entre le haut et le bas de la colonne. Nous avons donc défini deux coefficients d'étalement, D_{r1} et D_{r2} , associés respectivement aux positions hautes et basses. Ces deux coefficients permettent de représenter correctement la plupart des distributions radiales de fraction volumique du liquide. La dispersion de liquide est plus importante en tête de colonne qu'en bas de colonne, et D_{r1} est donc supérieur à D_{r2} dans tous les cas étudiés. Mais ce qui est remarquable, c'est que, qu'il s'agisse de coefficient local ou moyenné sur la colonne, le coefficient est sensible au facteur cinétique de gaz. En effet, le coefficient d'étalement augmente avec le débit de gaz. On est donc dans un cas radicalement différent de ce que nous avons observé dans le garnissage structuré M 250.X. La dispersion n'est plus simplement contrôlée par la géométrie du garnissage. Si les valeurs moyennes de D_r observées aux plus faibles débits de gaz sont proches des valeurs en garnissage structuré, dès que le débit de gaz augmente, la dispersion en garnissage vrac met en jeu du transport par le gaz. En outre, les coefficients de dispersion augmentent globalement avec le débit de liquide. Les plus fortes vitesses de liquide attendues en haut du lit de garnissage vu la section restreinte de passage du liquide, pourraient également expliquer le régime de plus forte dispersion dans cette zone. A la lumière de ces résultats, il serait opportun de déterminer des lois d'échelle permettant de relier la dispersion aux débits des phases liquide et gaz.

En perspective de ce travail, une autre alternative pour caractériser l'étalement de liquide à partir de profils radiaux de rétention quelconques pourrait également être envisagée. Elle consisterait, sur la base de la théorie de Taylor, à considérer tout profil de rétention du liquide comme une distribution de probabilité de présence du liquide, à calculer sa variance et à estimer la pente de sa variation longitudinale (Besnaci, 2012). Il faudrait ainsi calculer les moments jusqu'à l'ordre deux des profils de rétention liquide

$$m_i(z) = 2\pi \int_0^R r^{i+1} h_L(r) dr, \text{ puis la variance : } \sigma_{h_L}^2(z) = \frac{m_2(z)}{m_0(z)}, \text{ afin d'en déduire le coefficient}$$

$$\text{d'étalement } D_r = \frac{1}{2} \frac{d}{dz} \left(\sigma_{h_L}^2(z) \right).$$

CONTENU

4. Discussion des lois de fermeture du modèle eulérien à deux fluides	127
4.1 Analyse des lois d'échange de quantité de mouvement aux parois et aux interfaces.....	127
4.1.1 Quel sens physique ?	127
4.1.2 Extension des lois d'échange de quantité de mouvement aux régimes d'interaction significative entre phases : proposition d'un modèle à seuil	132
4.1.3 Résultats	139
4.1.4 Poids des différents termes du bilan de quantité de mouvement.....	143
4.2 Discussion des lois de fermeture propres à la dispersion.....	144
4.3 Conclusion.....	146

4. DISCUSSION DES LOIS DE FERMETURE DU MODÈLE EULÉRIEN À DEUX FLUIDES

Ce chapitre est consacré à la discussion des modèles et corrélations disponibles dans la littérature pour la description des échanges de quantité de mouvement aux interfaces gaz-solide, liquide-solide et gaz-liquide ainsi qu'à la discussion du modèle adopté pour la dispersion. Nous avons distingué cette discussion de l'exposé bibliographique des modèles disponibles dans la littérature (chapitre 2) parce que la présente analyse critique et les propositions d'extension des modèles existants nécessitent d'avoir pris connaissance de nos résultats expérimentaux. Nous examinons plus particulièrement la cohérence des lois de fermeture retenues dans le cadre de cette étude et présentées dans le chapitre 2 de ce manuscrit. Ensuite nous proposons dans le cas des lois d'échange aux interfaces une extension du modèle retenu aux régimes où l'interaction entre le gaz et le liquide devient significative.

4.1 ANALYSE DES LOIS D'ÉCHANGE DE QUANTITÉ DE MOUVEMENT AUX PAROIS ET AUX INTERFACES

4.1.1 QUEL SENS PHYSIQUE ?

Nous discutons dans cette section le contenu physique des lois de fermeture adoptées dans les modèles eulériens à deux fluides pour les écoulements diphasiques dans des garnissages (ou des milieux poreux) afin de décrire les échanges de quantité de mouvement à la paroi du solide et aux interfaces. Nous souhaitons éclairer le sens des lois de fermeture, la pertinence des échelles de vitesse utilisées, et la forme des perméabilités en écoulements diphasiques à phases séparées. Nous souhaitons également mesurer en quoi les fermetures adoptées en écoulement gaz-liquide sont des cas particuliers de fermetures possibles, plus génériques, en écoulement fluide-fluide. Pour cela nous examinons, dans un souci de simplification, la solution analytique d'un écoulement diphasique à phases séparées – également nommé bicouche – en régime laminaire, stationnaire et cinématiquement établi en canal plan. Les fluides considérés sont incompressibles et de viscosités et masses volumiques a priori quelconques. Ce modèle permet d'examiner l'écoulement diphasique simplifié à l'échelle d'un pore en régime purement visqueux. Nous appliquons ensuite une méthode d'homogénéisation relativement empirique pour assurer un transfert d'information depuis les équations à l'échelle locale d'un pore vers les équations macroscopiques ce qui rend possible l'examen du sens des fermetures macroscopiques adoptées dans la littérature concernant la partie visqueuse des résistances poreuses et des interactions gaz-liquide.

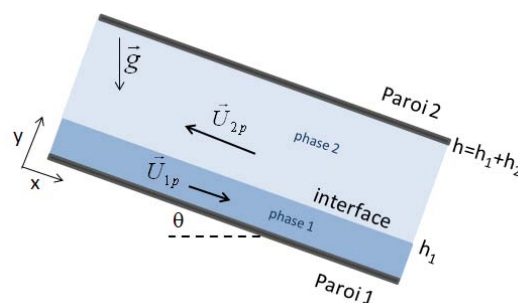


Figure 4.1 : schéma d'un écoulement bicouche laminaire entre deux plaques planes inclinées

La Figure 4.1 montre un schéma de l'écoulement plan (plan (x,y)) simplifié auquel on s'intéresse. Il s'agit d'un écoulement à phases séparées où deux phases s'écoulent à contre-courant entre deux plans inclinés, ce qui représente de manière simplifiée un écoulement gaz-liquide avec un taux de mouillage égal à $\frac{1}{2}$. Les phases en contact ont respectivement des viscosités dynamiques μ_1 et μ_2 et des densités ρ_1 et ρ_2 . L'écoulement est supposé sans instabilité (laminaire), stationnaire et cinématiquement établi (c'est-à-dire sans effets d'accélération ou d'effets de bord). On cherche donc des vitesses qui sont simplement des fonctions de y et des champs de pression qui varient en x. Dans cette solution d'écoulement parallèle les gradients de pression dans les deux phases sont identiques¹. Nous notons dans ce qui suit U les vitesses dans la direction x et nous savons que l'examen de la solution indiquerait que les vitesses V dans la direction y sont nulles.

Les vitesses longitudinales dans les deux phases ainsi qu'à l'interface, notées respectivement : $U_{1p}(y)$ (pour la phase 1), $U_{2p}(y)$ (pour la phase 2) et U_{Ip} (pour l'interface), peuvent être obtenues de manière analytique en résolvant les équations de Navier-Stokes à l'échelle d'un canal (l'indice p indique l'échelle du pore). Les détails du calcul en question sont par ailleurs fournis en annexe n° 1 de ce chapitre. Les distributions de vitesses permettent donc de calculer les taux de cisaillements (relations 4.1, 4.2 et 4.3 ci-après) au niveau de la paroi pour chacune des phases ainsi que le taux de cisaillement à l'interface entre phases. Ces cisaillements sont donnés en valeurs algébriques.

- Taux de cisaillement à l'interface phase1/phase2

$$\tau_{I2} = 6 \frac{(U_{1p} - U_{2p})}{\frac{h_1}{\mu_1} + \frac{h_2}{\mu_2}} \quad (4.1)$$

- Taux de cisaillement phase1/paroi

$$\tau_{w1} = -3 \frac{\mu_1}{h_1} U_{1p} - 3 \frac{(U_{1p} - U_{2p})}{\frac{h_1}{\mu_1} + \frac{h_2}{\mu_2}} \quad (4.2)$$

- Taux de cisaillement phase 2/paroi

$$\tau_{w2} = -3 \frac{\mu_2}{h_2} U_{2p} + 3 \frac{(U_{1p} - U_{2p})}{\frac{h_1}{\mu_1} + \frac{h_2}{\mu_2}} \quad (4.3)$$

Les forces volumiques de frottement s'écrivent par définition en fonction du taux de cisaillement

de la manière suivante : $F_{Ik} = \frac{\tau_{Ik}}{h}$, $F_{w1} = \frac{\tau_{w1}}{h}$ et $F_{w2} = \frac{\tau_{w2}}{h}$.

¹ L'équilibre global du bicouche requiert l'égalité des gradients de pression dans les deux phases. Cette relation d'égalité des gradients de pression peut servir à déterminer la position de l'interface c'est-à-dire h_1 en fonction des autres données du problème ($h, g, \theta, \bar{U}_1, \bar{U}_2$ et les propriétés physiques du problème). Ici nous ne résolvons pas cette partie du problème car nous souhaitons écrire les transferts de quantité de mouvement interfaciaux et aux parois en fonction de h_1 .

La relation 4.1 montre que le cisaillement à l'interface est proportionnel à $(U_{1p} - U_{2p})$ et fait intervenir dans le cas général de façon symétrique les propriétés physiques des deux phases. Les lois de fermeture proposées dans la littérature pour des couples de fluides gaz-liquide tout comme celle retenue dans le cadre de ce travail perdent cette symétrie (Holub *et al.*, 1992, Iliuta *et al.*, 2004, Eq. 2.17 du chapitre 2 de ce manuscrit). Nous rappelons la loi de fermeture retenue dans ce travail et décrite par l'équation 2.17 du chapitre 2 ci-dessous :

$$\bar{R}_{IG} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon^2 \theta_G} \mu_G + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\varepsilon} \rho_G \|\bar{U}_G - \bar{U}_L\| \right) (\bar{U}_G - \bar{U}_L) = -K_{IG} (\bar{U}_G - \bar{U}_L)$$

la partie visqueuse qui peut être discutée s'écrit :

$$\bar{R}_{IGV} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon^2 \theta_G} \mu_G \right) (\bar{U}_G - \bar{U}_L) = -K_{IGV} (\bar{U}_G - \bar{U}_L)$$

La dépendance linéaire par rapport à l'écart des vitesses moyennes des deux phases est cohérente avec la solution dans le bicouche laminaire. Par contre, seules les propriétés physiques du gaz apparaissent dans cette loi de fermeture de l'échange aux interfaces. Cette simplification n'est en accord avec la solution du bicouche qu'à la condition que $\frac{h_1}{\mu_1} \ll \frac{h_2}{\mu_2}$. Cette

condition est vérifiée aisément pour des films minces ruisselants cisailés par un gaz. On retient donc que les modèles proposés pour le transfert interfacial de quantité de mouvement en écoulement gaz-liquide en présence de films minces sont en cohérence avec la solution du bicouche. Cette solution éclaire cependant la nécessité de prendre en compte les propriétés physiques des deux phases en présence pour des applications où la condition $\frac{h_1}{\mu_1} \ll \frac{h_2}{\mu_2}$ ne serait pas vérifiée.

Les résistances poreuses que l'on va pouvoir calculer à partir des relations 4.2 et 4.3 se démarquent également de celles proposées dans la littérature et retenues dans le cadre de ce travail (relations 2.14 et 2.15 du chapitre 2). Les résistances poreuses retenues dans le cadre de ce travail et données au chapitre 2 sont rappelées ci-dessous :

$$\bar{S}_{porous,L} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2 f_e}{\varepsilon \theta_L^2} \mu_L + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\theta_L} \rho_L \|\bar{U}_L\| \right) \bar{U}_L$$

$$\bar{S}_{porous,G} = -(1 - f_e) \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon} \mu_G + \frac{E_2}{6} a_g \rho_G \theta_G \|\bar{U}_G\| \right) \bar{U}_G$$

Les contributions visqueuses de ces termes que l'on peut comparer à la solution du bicouche sont :

$$\bar{S}_{porous,LV} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2 f_e}{\varepsilon \theta_L^2} \mu_L \right) \bar{U}_L$$

$$\bar{S}_{porous,GV} = -(1 - f_e) \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon} \mu_G \right) \bar{U}_G$$

Même si les relations (4.2) et (4.3) rendent compte des cisaillements à l'échelle d'un pore, on peut déjà comparer les expressions de $\bar{S}_{porous,LV}$ et $\bar{S}_{porous,GV}$ ci-dessus aux relations (4.2) et (4.3).

On constate alors une différence importante : en effet, les relations (4.2) et (4.3) indiquent que les résistances du modèle bicouche ne dépendront pas que de la vitesse de la phase considérée mais feront également intervenir la vitesse relative des phases à l'échelle d'un pore. Toutefois, sur ce point il est possible de ramener la solution du bicouche à une forme analogue moyennant certaines conditions. Le cas particulier d'un écoulement gaz-liquide vérifie en général $\frac{h_1}{\mu_1} \ll \frac{h_2}{\mu_2}$ où 1 représente l'indice du liquide et 2 celui du gaz. Cette inégalité permet d'écrire le taux de cisaillement à l'interface dans une forme plus couramment utilisée dans la littérature (Holub *et al.*, 1992, Iliuta *et al.*, 2004) : $\tau_{12} \approx 6 \frac{\mu_2}{h_2} (U_{1p} - U_{2p})$. Si, en outre, les vitesses du gaz et du liquide sont du même ordre de grandeur les taux de cisaillements à la surface du solide s'écrivent alors $\tau_{w1} = -3 \frac{\mu_1}{h_1} U_{1p} - 3 \frac{\mu_2}{h_2} (U_{1p} - U_{2p}) \approx -3 \frac{\mu_1}{h_1} U_{1p}$ pour le liquide et $\tau_{w2} = -3 \frac{\mu_2}{h_2} U_{2p}$ pour le gaz. Si la vitesse du gaz est plus importante que celle du liquide et si la condition $\frac{h_1}{\mu_1 U_1} \ll \frac{h_2}{\mu_2 U_2}$ est vérifiée on a plutôt $\tau_{w2} = -6 \frac{\mu_2}{h_2} U_{2p}$ pour le gaz. La simple dépendance linéaire par rapport aux vitesses des phases est donc retrouvée.

La résolution de l'écoulement à phases séparées décrit ci-dessus à l'échelle d'un canal, donc d'un pore, amène des éclaircissements quant à la forme des forces de frottement et à la pertinence des lois de fermeture retenues à l'échelle macroscopique. Un passage de l'échelle d'un canal à l'échelle macroscopique via une procédure d'homogénéisation (comparable à celle décrite dans la section 2.3.1 du chapitre 2) est intéressant à écrire afin de proposer une discussion des échelles de longueur caractéristiques intervenant dans les lois de fermeture des résistances proposées dans la littérature. La procédure d'homogénéisation que nous allons appliquer est rudimentaire mais notre propos vise simplement à éclairer le sens des lois de fermeture. Pour ce faire, nous supposons que le milieu poreux (ou lit de garnissages) est formé par une succession de canaux plans parallèles de dimension infinie dans la direction x . Les variables décrivant l'écoulement à l'échelle microscopique d'un canal (vitesses, h_1 , h_2) sont liées aux variables décrivant l'écoulement et la géométrie à l'échelle macroscopique par les relations suivantes où l'indice p est relatif à l'échelle d'un pore et où U_k et α_k sont respectivement la vitesse et la fraction volumique de la phase k au sens de la moyenne volumique: $U_{kp} = U_k$, $\alpha_{kp} = \frac{h_k}{h} = \alpha_k$

et $\left. \frac{dP}{dx} \right)_p = \frac{dP}{dx}$. Ceci permet l'écriture des bilans de quantité de mouvement à l'échelle macroscopique donnés par la relation 4.4. On obtient (pour k valant 1 ou 2) :

$$\underbrace{\varepsilon R_{Ikx} + \theta_k S_{porous,kx}}_{(i)} = \pm \varepsilon K_{IG} (U_{2x} - U_{1x}) - \theta_k K_{porous,k} U_{kx} =$$

$$+ \varepsilon F_{Ik} + \varepsilon F_{wk} = \underbrace{\frac{6\varepsilon}{h^2} (-1)^k \frac{(U_1 - U_2)}{\frac{\alpha_1}{\mu_1} + \frac{\alpha_2}{\mu_2}} - 3\varepsilon \frac{\mu_k}{h^2 \alpha_k} U_k + \frac{3\varepsilon}{h^2} (-1)^k \frac{(U_1 - U_2)}{\frac{\alpha_1}{\mu_1} + \frac{\alpha_2}{\mu_2}}}_{(ii)} \quad (4.4)$$

Dans cette relation nous mettons en évidence le lien entre (i) les forces de frottement aux interfaces et les résistances poreuses intervenant dans le système d'équations macroscopiques (relation 2.12 où $\vec{S}_{porous,k} = -K_{ks} \vec{U}_k$ et $\vec{R}_{IG} \approx K_{IG} (\vec{U}_G - \vec{U}_L)$) et (ii) les forces volumiques de frottement définies dans la configuration simplifiée de l'écoulement de bicouche F_{Ik} et F_{wk} . Le premier terme du dernier membre de cette équation est lié au frottement à l'interface, et les

deux autres termes sont ceux liés au frottement à la paroi. Comme nous l'avons précisé ci-dessus, en écoulement gaz-liquide, on peut admettre de regrouper ces deux termes du frottement à la paroi sous une forme approximative linéaire en vitesse de la phase k.

Sans faire cette simplification, en regroupant directement dans (4.4) les termes linéaires en vitesse d'une phase k d'une part et les termes linéaires en vitesse relative $(U_1 - U_2)$ d'autre part, par identification et en considérant les saturations $\theta_k = \alpha_k / \varepsilon$, il est possible d'écrire à partir de (4.4) les résistances :

$$K_{lk} = \frac{9}{\varepsilon h^2} (-1)^k \frac{1}{\frac{\theta_1}{\mu_1} + \frac{\theta_2}{\mu_2}} \quad (4.5)$$

et

$$K_{ks} = 3 \frac{\mu_k}{h^2 \theta_k^2} \quad (4.6)$$

Comparons maintenant ces expressions des résistances poreuses et des frottements aux interfaces aux termes visqueux des relations (2.14, 2.15 et 2.17) adoptées pour lois de fermeture. En considérant que dans le cas d'un réseau de canaux parallèles la relation $a_g = \frac{2\varepsilon}{h}$ s'applique, les relations 2.14, 2.15 et 2.17 permettent d'écrire les contributions visqueuses suivantes dans le cas d'un taux de mouillage de $\frac{1}{2}$ (propre à la configuration simplifiée d'un réseau de canaux plans parallèles), d'une porosité et d'une fraction volumique de gaz proches de 1 :

$$K_{Ls} \approx 4.4 \frac{\mu_L}{h^2 \theta_L^2} \quad (4.7)$$

$$K_{Gs} \approx 8.8 \frac{\mu_G}{h^2 \theta_G^2} \quad (4.8)$$

$$K_{IG} = 4f_e \frac{E_1}{36} \frac{1}{h^2 \theta_G} \mu_G = 4f_e \frac{E_1}{36} \varepsilon \frac{1}{\varepsilon h^2 \frac{\theta_G}{\mu_G}} \approx \frac{8.8}{\varepsilon h^2} \frac{\theta_G}{\mu_G} \quad (4.9)$$

Les relations formelles et les ordres de grandeurs des facteurs multiplicatifs des contributions visqueuses dans les lois de résistance et de frottement aux interfaces sont similaires dans le cas du modèle obtenu par passage de l'échelle d'un canal à l'échelle macro (relations 4.5 et 4.6) et celui retenu dans ce travail et décrit par les relations 2.14, 2.15 et 2.17 (transcrites en 4.7 à 4.9). Cette similarité nécessite toutefois la réunion de plusieurs conditions qui sont notamment une porosité et une fraction volumique de gaz proches de 1, un système gaz liquide et des vitesses du gaz et du liquide de même ordre de grandeur (ou une vitesse du gaz plus importante que celle du liquide et la condition $\frac{h_1}{\mu_1 U_1} \ll \frac{h_2}{\mu_2 U_2}$).

En conclusion de ce paragraphe, l'analyse de l'écoulement à l'échelle microscopique (celle d'un pore) dans une configuration simplifiée permet de mettre en évidence une forme analytique des lois de fermeture tenant compte des frottements à la surface du solide et de ceux aux interfaces entre phases fluides. Elle nous a permis notamment de porter un regard critique sur les lois de fermeture semi-empiriques souvent proposées dans la littérature et qu'on a retenues dans le

cadre de ce travail. Si la forme du système macroscopique global est conforme à la physique de l'écoulement, les lois de fermeture retenues ne peuvent être généralisées à n'importe quelle configuration d'écoulement et de géométrie de garnissage : en écoulement liquide-liquide par exemple des écarts pourraient apparaître. Nous avons également montré que la combinaison de deux lois de fermeture (l'une pour \bar{R}_{jk} et l'autre pour $\bar{S}_{porous,k}$ qui sont respectivement linéaires en $(\bar{U}_1 - \bar{U}_2)$ et en \bar{U}_k) est en accord avec la combinaison des deux forces issues du modèle de bicouche exprimant ces deux effets, et ce, même si les forces issues de ce modèle ne se scindent pas immédiatement en termes respectivement linéaires en $(\bar{U}_1 - \bar{U}_2)$ et en \bar{U}_k .

4.1.2 EXTENSION DES LOIS D'ÉCHANGE DE QUANTITÉ DE MOUVEMENT AUX RÉGIMES D'INTERACTION SIGNIFICATIVE ENTRE PHASES : PROPOSITION D'UN MODÈLE À SEUIL

La plupart des modèles et corrélations monodimensionnels proposés dans la littérature pour prédire la perte de charge et la rétention pour des écoulements gaz-liquide dans des garnissages sont restreints à des régimes de faible interaction entre phases. Ces modèles et corrélations présentés au chapitre 2 permettent d'alimenter les lois de fermeture utilisées pour des simulations de l'écoulement à l'échelle locale. Il est donc primordial de discuter leur représentativité dans des régimes où l'interaction entre le gaz et le liquide devient significative.

Dans cette partie nous rappelons tout d'abord quelques travaux de la littérature qui s'intéressent à la prédiction des pertes de charge au-delà du point de charge. Nous examinons ensuite le comportement du modèle présenté par Iliuta *et al.* (2004) en l'appliquant à un écoulement homogène et cinématiquement établi. Pour cela nous avons résolu numériquement (sous Matlab) le système d'équations qui se ramène alors à un système algébrique non linéaire. Cette résolution nous a permis d'examiner le poids des différents termes dans les bilans de quantité de mouvement pour diverses conditions de facteurs cinétiques et de débits de liquide. Cette analyse permet de montrer que ce modèle est prédictif en deçà du point de charge et qu'il est nécessaire d'améliorer en priorité la modélisation des transferts de quantité de mouvement aux interfaces au voisinage ou au-delà du point de charge pour pouvoir prédire la perte de charge. Enfin, en examinant comment les pertes de charge que nous avons obtenues dans nos expériences dévient des prédictions données par le modèle de Iliuta *et al.* (2004) nous proposons un modèle semi-empirique qui permet de prendre en compte l'intensification des échanges de quantité de mouvement entre le gaz et le liquide dans des régimes de facteurs cinétiques de gaz importants.

Dans ce travail, le choix a été fait, parmi les différents modèles de la littérature proposés voire testés pour les régimes au-delà du point de charge, de bâtir notre discussion à partir du modèle d'Iliuta *et al.* (2004). Les raisons de ce choix sont les suivantes.

Brunazzi et Paglianti (1997) proposent un modèle basé sur l'hypothèse d'un écoulement en film laminaire ruisselant. L'épaisseur du film est reliée à la perte de charge et intervient dans les corrélations de calcul du facteur de frottement aux interfaces. Le modèle implicite obtenu prédit bien les valeurs expérimentales de perte de charge pour des régimes situés au-delà du point de charge et ce pour des garnissages structurés de type Mellapak. Cependant son caractère implicite est difficilement intégrable dans un modèle Eulérien à deux fluides.

Spiegel et Meier (1992) proposent également une corrélation permettant de décrire la perte de charge pour des régimes d'écoulement situés au-delà du point de charge. Ils proposent, dans le cas de garnissages structurés de type Mellapak un lissage des valeurs de perte de charge en fonction de la vitesse de gaz par un polynôme de degré 3. Nous avons souhaité mettre en place une approche qui introduise des fermetures spécifiques aux différents mécanismes qui

contrôlent les pertes de charge et non une corrélation globale. Nous n'utiliserons donc pas ce résultat sous cette forme. Nous testerons par contre la cohérence de notre proposition avec les données expérimentales de référence de ces auteurs.

Dans le cadre d'extension des modèles monodimensionnels de perte de charge à des régimes d'importante interaction entre phases, nous trouvons également le modèle semi-empirique proposé par Stichlmair *et al.* (1989) où une corrélation reliant la rétention à la perte de charge dans les garnissages pour des régimes situés au-delà du point de charge est proposée. Le modèle implicite ainsi obtenu permet de calculer une perte de charge qui concorde assez bien avec les données expérimentales relatives à différents garnissages vrac et structurés. Là encore, le caractère implicite du modèle rend délicate son intégration dans un modèle eulérien à deux fluides général.

Le modèle phénoménologique proposé par Iliuta *et al.* (2004) a été retenu dans ce travail comme cadre des lois de fermeture du modèle Eulérien à deux fluides. Il s'applique essentiellement à des régimes de faibles interactions gaz-liquide. Dans la discussion de leur modèle, les auteurs indiquent des erreurs relatives de 18% et 16% respectivement dans la prédiction de la perte de charge et de la rétention pour ces régimes. Ils se basent pour cela sur une comparaison entre la perte de charge ou la rétention prédites par le modèle et celles obtenues expérimentalement dans le cas de plusieurs garnissages structurés : Flexipac, Gempak, Mellapak, Montz-Pak (Iliuta et Larachi, 2005). Cependant, au-delà du point de charge qui correspond à une interaction significative entre phases, le modèle sous-estime de manière significative la perte de charge. La Figure 4.2 illustre bien ce propos en comparant les prédictions de ce modèle et les données expérimentales obtenues dans le présent travail pour le garnissage M250.X. On peut donc constater à la fois que le modèle est satisfaisant en deçà du point de charge et insuffisant au-delà. L'idée qui émerge d'un tel constat est donc d'essayer d'identifier dans les diverses lois de fermeture proposées par Iliuta *et al.* (2004) celles qui sont robustes et ne doivent pas être modifiées quand le facteur cinétique de gaz augmente et celles qui doivent être adaptées sans dégrader le caractère prédictif du modèle en deçà du point de charge.

Nous nous proposons ainsi de partir du modèle eulérien à deux fluides présenté dans le chapitre 2 de ce manuscrit et dont les lois d'échange de quantité de mouvement sont inspirées du modèle proposé par Iliuta *et al.* (2004) afin de discuter la possibilité de l'étendre à des régimes d'écoulement situés au-delà du point de charge, soit à des régimes d'écoulement où l'interaction entre phases devient importante.

- Proposition d'un « modèle à seuil »

Les équations de quantité de mouvement du modèle Eulérien à deux fluides retenues pour la modélisation de l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage (équation 2.12 du chapitre 2) sont rappelées ci-dessous :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\theta_k\rho_k\vec{U}_k) + \vec{\nabla}\cdot(\varepsilon\theta_k\rho_k\vec{U}_k\vec{U}_k) = & \\ -\varepsilon\theta_k\vec{\nabla}P + \vec{\nabla}\cdot(\varepsilon\vec{\tau}_k) + \varepsilon\theta_k\rho_k\vec{g} + \varepsilon\vec{R}_{Ik} + \theta_k\vec{S}_{porous,k} + \vec{F}_{disp,k} & \quad k=1, 2 \end{aligned}$$

Si nous faisons l'hypothèse d'un écoulement homogène stationnaire et cinématiquement établi, ces bilans de quantité de mouvement projetés dans la direction de l'écoulement (direction z) s'écrivent :

- Dans le gaz : $-\varepsilon\theta_G \frac{dP}{dz} + \varepsilon\theta_G \rho_G g + \varepsilon R_{GL,z} + \theta_G S_{porous,G,z} = 0$ (4.10)

- Dans le liquide : $-\varepsilon\theta_L \frac{dP}{dz} + \varepsilon\theta_L \rho_L g - \varepsilon R_{GL,z} + \theta_L S_{porous,L,z} = 0$ (4.11)

La manière dont les poids relatifs des différents termes qui participent à ces bilans de quantité de mouvement (équations 4.10 et 4.11) évoluent en fonction du débit de gaz est discutée ci-dessous. Pour cela les termes de pression, de gravité et de frottements aux parois du solide et aux interfaces sont calculés pour une charge liquide q_L de 35 m³/m²h pour le garnissage M250.X (porosité $\varepsilon=0.98$ et surface géométrique spécifique $a_g=250$ m²/m³) et pour un système Air/Eau. Les expressions des forces de frottement aux parois du solide formant le garnissage et aux interfaces (équations 2.16, 2.17 et 2.19) sont d'abord rappelées ci-dessous :

- Force de frottement liquide-solide (ou résistance poreuse dans le liquide)

$$\bar{S}_{porous,L} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2 f_e}{\varepsilon \theta_L^2} \mu_L + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\theta_L} \rho_L \|\bar{U}_L\| \right) \bar{U}_L$$

- Force de frottement gaz-solide (ou résistance poreuse dans le gaz)

$$\bar{S}_{porous,G} = -(1-f_e) \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon} \mu_G + \frac{E_2}{6} a_g \rho_G \theta_G \|\bar{U}_G\| \right) \bar{U}_{GG}$$

- Force de frottement aux interfaces gaz-liquide

$$\bar{R}_{GL} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon^2 \theta_G} \mu_G + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\varepsilon} \rho_G \|\bar{U}_G - \bar{U}_L\| \right) (\bar{U}_G - \bar{U}_L)$$

Le taux de mouillage f_e est donné par la corrélation de Brunazzi et Paglianti (1997) (Equation 2.20).

La Figure 4.3 montre que l'équilibre du liquide est assuré essentiellement par la force de gravité et la force de frottement sur le support solide, et ce pour l'ensemble des vitesses superficielles de gaz considérées. La force de frottement gaz-liquide devient également significative relativement aux deux forces citées ci-dessus pour les vitesses croissantes de gaz car la vitesse relative des phases intervenant dans l'expression de cette force voit sa valeur augmenter avec celle du gaz. En revanche, la Figure 4.4 montre que l'équilibre dans le gaz est assuré essentiellement par le gradient de pression et la force de frottement aux interfaces gaz-liquide. Cet équilibre particulier peut paraître surprenant si l'on se rappelle que pour les faibles facteurs cinétiques de gaz les pertes de charge ne sont pas notablement modifiées par rapport à celles observées en écoulement monophasique gazeux. En effet on peut donc penser que l'équilibre devrait être assuré par le gradient de pression et les frottements aux parois. Mais en présence d'un taux de mouillage proche de 1, c'est bien un frottement aux interfaces, lui-même peu modifié par rapport au frottement pariétal en écoulement monophasique qui assure l'équilibre du gradient de pression.

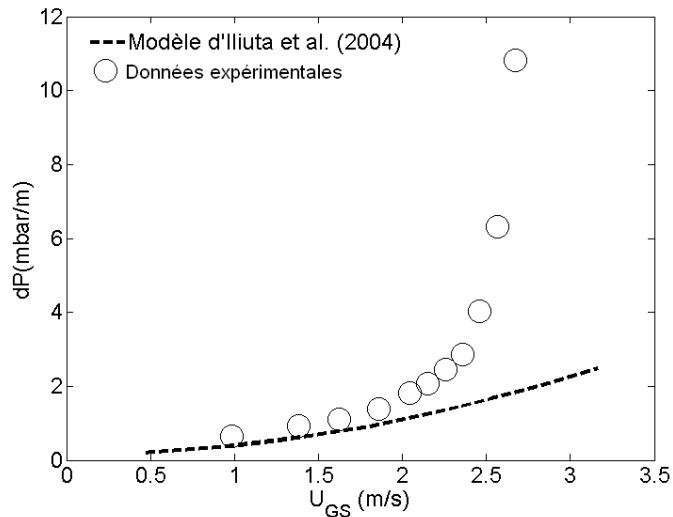


Figure 4.2 : Courbe de perte de charge pour $q_L=35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, garnissage : M250.X.

Au-dessus du point de charge ($U_{GS} \sim 2 \text{ m/s}$), le modèle décrit ci-dessus sous-estime la perte de charge (Figure 4.2). Le constat fait sur la base de la Figure 4.4 du rôle essentiel du frottement aux interfaces pour équilibrer le gradient de pression – et donc déterminer la perte de charge – nous amène à reconsidérer la modélisation de ce transfert interfacial de quantité de mouvement afin d'étendre le modèle proposé par Iliuta *et al.* (2004) au-delà du point de charge. C'est bien l'augmentation des interactions entre le gaz et le liquide qui est identifiée depuis longtemps comme étant à l'origine de l'augmentation de la perte de charge au-delà du point de charge (Spiegel et Meier, 1992 ; Stichlmair *et al.*, 1989 ; Iliuta et Larachi, 2005), ce qui nous conforte dans notre démarche.

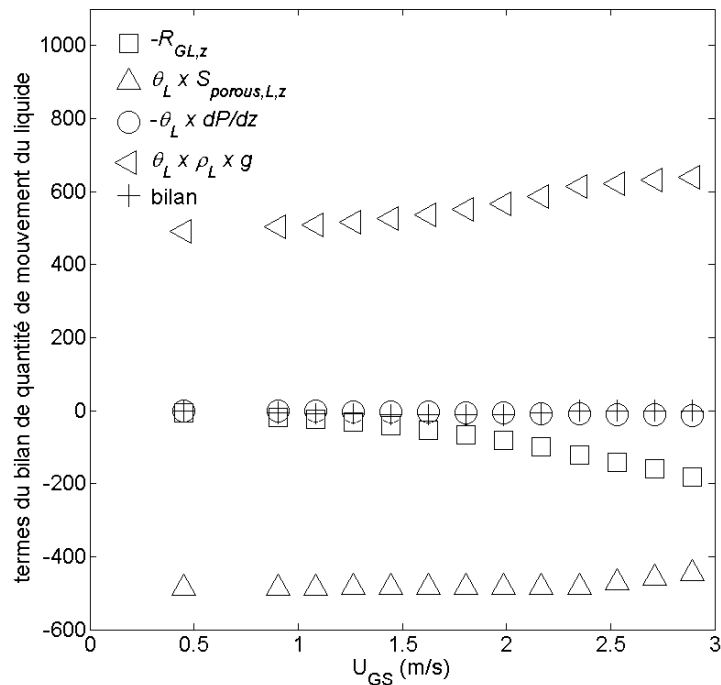


Figure 4.3 : Evolution des différents termes du bilan de quantité de mouvement du liquide donnés par le modèle d'Iliuta et al. (2004) en fonction des débits de gaz, $q_L=35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, M250.X (donnés en N/m^3)

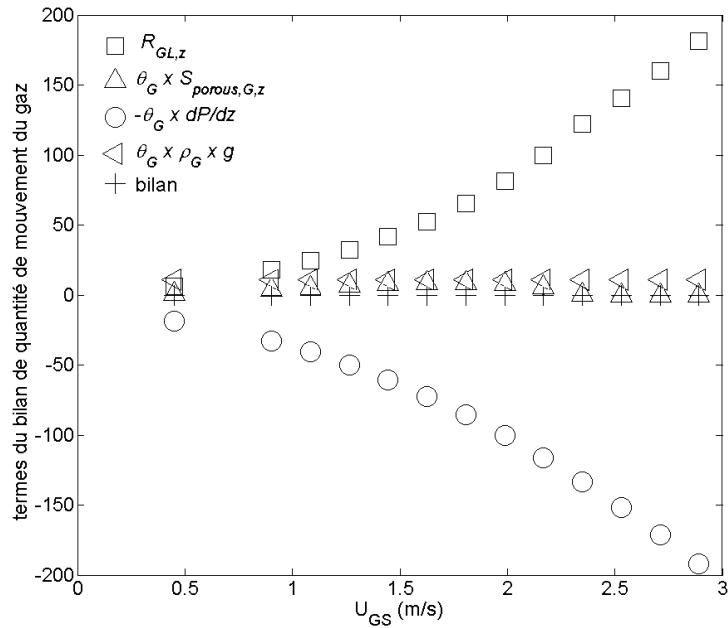


Figure 4.4 : Evolution des différents termes du bilan de quantité de mouvement du gaz donnés par le modèle d'Iliuta et al. (2004) en fonction du débit de gaz. $q_L=35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, M250.X (donnés en N/m^3)

L'augmentation de la perte de charge que nous avons observée à partir d'un certain seuil de vitesse de gaz qui est le point de charge à charge liquide fixée, nous amène à proposer une correction du modèle de Iliuta *et al.* (2004) à partir de valeurs seuils de vitesse superficielle du gaz. Ces vitesses qui changent avec les charges liquides sont appelées dans ce qui suit vitesses critiques $U_{GS\text{critique}}$. Pour construire cette correction du modèle, les courbes de perte de charge obtenues dans le cas du garnissage M250.X pour un système Air/Eau (Figure 5 de la section 3.4.1) sont utilisées. Elles permettent de déterminer tout d'abord les vitesses critiques de gaz pour différentes charges liquides et ensuite la loi de correction de la perte de charge. Le point de charge correspond au point de rupture de pente de la courbe de perte de charge. Au-delà de ce point, la perte de charge augmente avec une pente plus importante lorsque la vitesse superficielle de gaz U_{GS} augmente. C'est donc l'examen des courbes de l'écart ($dP/dz - dP/dz_0$) en fonction de U_{GS} qui devrait permettre de déterminer les valeurs de $U_{GS\text{critique}}$ (où dP/dz représente la perte de charge expérimentales et dP/dz_0 celle issue du modèle de Iliuta et al (2004)). Comme le modèle de Iliuta *et al.* (2004) représente bien l'ensemble des données aux faibles vitesses de gaz mais reste cependant moins précis pour chaque charge liquide qu'un lissage direct des données expérimentales restreintes à cette zone de fonctionnement, nous avons préféré définir les vitesses critiques à partir de l'examen des courbes de ($dP/dz - dP/dz_{\text{faible}U_{GS}}$) en fonction de U_{GS} (où $dP/dz_{\text{faible}U_{GS}}(U_{GS})$ est la loi obtenue par lissage des données aux faibles vitesses de gaz). Pour chaque charge liquide on obtient alors une courbe spécifique de tendance parabolique aux grandes vitesses pour ($dP/dz - dP/dz_{\text{faible}U_{GS}}$) en fonction de U_{GS} (Figure 4.5). La détermination des valeurs relatives des vitesses critiques les unes par rapport aux autres a été fixée par le choix de regrouper l'ensemble de ces courbes sur celle observée pour $q_L=16\text{m}^3\text{m}^{-2}\text{h}^{-1}$. On obtient alors les valeurs des vitesses critiques reportées sur la Figure 4.6. On constate que, comme on pouvait s'y attendre, ces vitesses diminuent le débit de liquide.

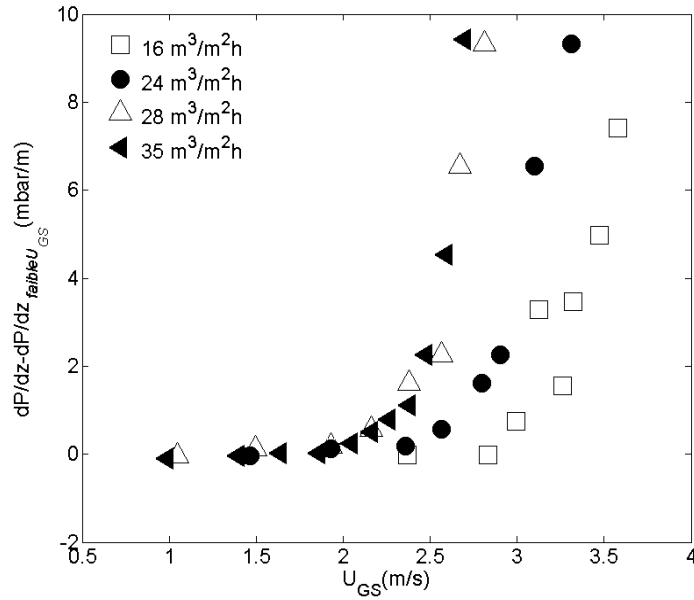


Figure 4.5 : Evolution de la différence entre dP/dz et dP/dZ à faible U_{GS} en fonction de U_{GS} pour différents débits de liquide

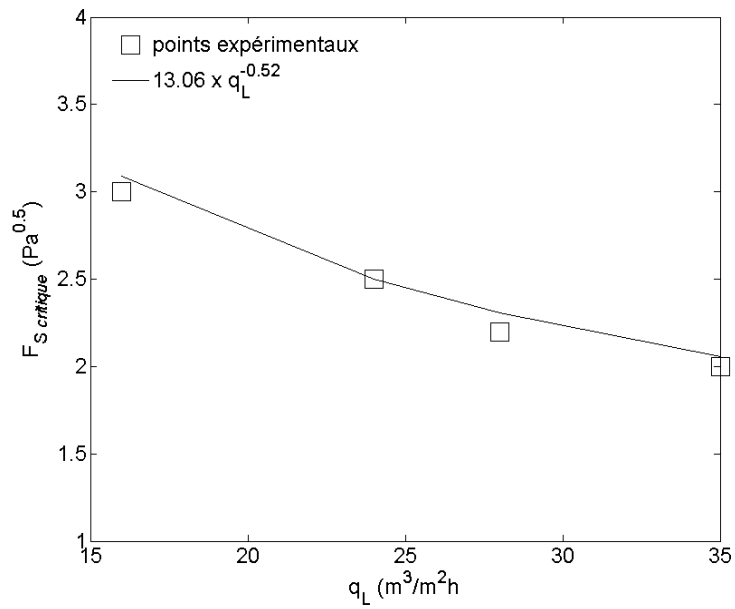


Figure 4.6 : Evolution des valeurs critiques du facteur cinétique de gaz en fonction du débit de liquide

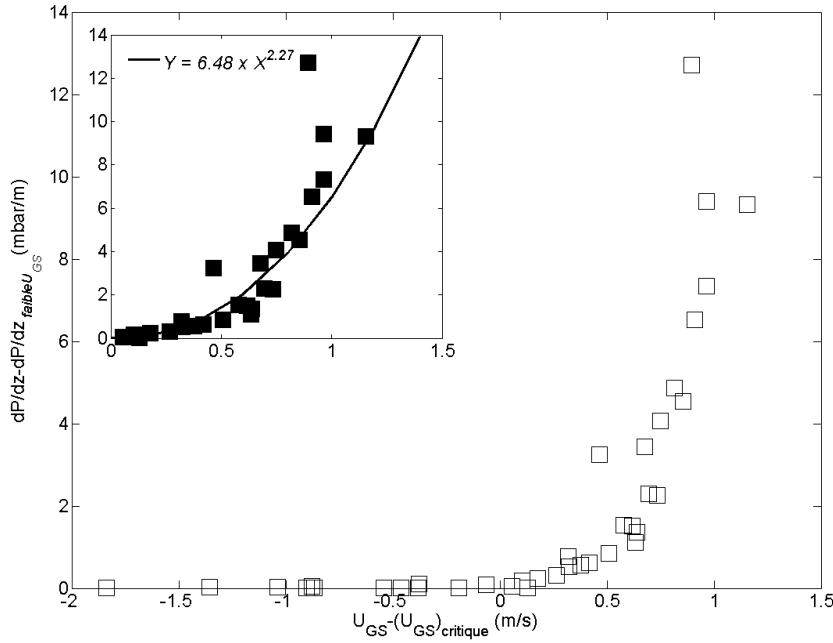


Figure 4.7 : Evolution de la différence entre la perte de charge obtenue expérimentalement et celle obtenue par lissage aux faibles valeurs de U_{GS} en fonction de $U_{GS} - U_{GScritique}$ pour $q_L=16, 24, 28$ et $35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, garnissage : M250.X

En tenant compte du fait que les lois donnant $(dP/dz)_{faibleU_{GS}}$ en fonction de U_{GS} sont bien représentées par celle proposée par Iliuta *et al.* (2004) nous pouvons remplacer $dP/dz_{faibleU_{GS}}$ par dP/dz_0 et ainsi écrire :

$$\frac{dP}{dz} - \frac{dP}{dz_0} = K_{int} (U_{GS} - U_{GScritique})^{2.27} \quad (4.12)$$

où $K_{int} = 648$ en unités SI.

Afin d'interpréter le surplus de perte de charge au-delà du point de charge $(dP/dz - dP/dz_0)$ comme un effet de frottement à l'interface gaz-liquide, l'équation 4.12 peut être réécrite en introduisant la vitesse relative des phases comme suit sous l'hypothèse d'une saturation de gaz proche de l'unité (hypothèse qui permet d'identifier la vitesse U_G dans la phase gaz à la vitesse superficielle U_{GS}) :

$$\frac{dP}{dz} - \frac{dP}{dz_0} = 648 \times ((U_G - U_L) - (U_{Gcritique} - U_L))^{2.27} \quad (4.13)$$

Dans l'équation 4.13, U_G et U_L représentent les vitesses dans le gaz et dans le liquide respectivement.

En identifiant le surplus de perte de charge au terme de transfert interfacial de quantité de mouvement, et disposant de l'équation 4.13, nous pouvons écrire, le modèle monodimensionnel de perte de charge inspiré de celui d'Iliuta *et al.* (2004) :

- Dans le gaz : $-\varepsilon\theta_G \frac{dP}{dz} + \varepsilon\theta_G \rho_G g + \varepsilon R_{GL,z} + \theta_G S_{porous,G,z} = 0$

- Dans le liquide : $-\varepsilon\theta_L \frac{dP}{dz} + \varepsilon\theta_L \rho_L g - \varepsilon R_{GL,z} + \theta_L S_{porous,L,z} = 0$

Avec les lois inchangées de frottements aux parois

$$- S_{porous,G,z} = -(1-f_e) \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon} \mu_G + \frac{E_2}{6} a_g \rho_G \theta_G |U_G| \right) U_G$$

$$- S_{porous,L,z} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2 f_e}{\varepsilon \theta_L^2} \mu_L + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\theta_L} \rho_L |U_L| \right) U_L$$

et l'adaptation de la loi de frottement interfacial aux deux régimes particuliers

- Pour $U_{GS} < U_{Gcritique}$

$$R_{GL,z} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon^2 \theta_G} \mu_G + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\varepsilon} \rho_G |U_G - U_L| \right) (U_G - U_L)$$

- Pour $U_{GS} > U_{Gcritique}$

$$R_{GL,z} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon^2 \theta_G} \mu_G + \frac{E_2}{6} \frac{a_g}{\varepsilon} \rho_G |U_G - U_L| \right) (U_G - U_L) + \theta_G \times 648 (U_G - U_L)^{2.27} \quad (4.14)$$

4.1.3 RÉSULTATS

Sur la Figure 4.8 nous superposons les valeurs de perte de charge prédites par le modèle décrit dans le paragraphe précédent qu'on dénomme « modèle à seuil », celles prédites par le modèle d'Iliuta *et al.* (2004) ainsi que celles déterminées expérimentalement pour une charge liquide $q_L=35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Les points prédits par le modèle à seuil sont confondus avec ceux prédits par le modèle d'Iliuta *et al.* (2004) pour les vitesses de gaz inférieures à la vitesse au point de charge. Dans le cas d'une charge liquide de $35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, pour des vitesses de gaz qui lui sont supérieures, le modèle à seuil proposé permet de décrire relativement bien les données expérimentales pour des vitesses de gaz qui restent modérées avec une erreur relative de inférieure à 30%. Pour des vitesses superficielles de gaz relativement grandes, l'écart du modèle aux données expérimentales augmente. La Figure 4.9 montre une bonne représentativité du modèle à seuil pour les données expérimentales de perte de charge sur une gamme de vitesses superficielles de gaz allant jusqu'à l'engorgement avec une augmentation de l'erreur relative pour les plus fortes vitesses de gaz. Cette observation est faite pour les trois charges liquides représentées (16, 24 et $35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$). Le modèle à seuil est également confronté aux données expérimentales de perte de charge dans un garnissage de type M250.X publiées par Spiegel et Meier (1992) tel que le montre la Figure 4.10. Un bon accord avec les données expérimentales est observé notamment pour une charge liquide de $25 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. L'erreur relative de prédiction dépasse le seuil de 40% dans le cas des fortes vitesses de gaz à une charge liquide de $50 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. La correction du modèle au-delà du point de charge, étant déterminée en se basant sur les données expérimentales obtenues dans le cadre de ce travail, la représentativité du modèle à seuil peut

s'avérer moindre quand elle est appliquée à d'autres données de la littérature. Il serait donc judicieux de considérer un grand nombre de données expérimentales de la littérature afin d'optimiser les paramètres intervenant dans la correction du modèle (exposant et constante multiplicative intervenant dans l'équation 4.14 et surtout vitesse critique du gaz). Toutefois, le modèle à seuil défini ici permet de prédire la rupture de pente de la courbe de perte de charge au-delà du point de charge et ce pour toutes les données expérimentales considérées (celles de la présente étude et celles de Spiegel et Meier, 1992).

Nous nous intéressons également aux valeurs de rétention de liquide prédites par le modèle à seuil en considérant l'égalité des pressions dans la phase liquide et gaz et en assurant ainsi la compatibilité des équations de quantité de mouvement des deux phases. Cette condition fournit l'équation algébrique donnant la rétention de liquide. La Figure 4.11 montre l'évolution de la rétention prédite par le modèle à seuil, le modèle d'Iliuta et al. (2004) ainsi que celle déterminée expérimentalement dans le cas d'une charge liquide de $35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Nous avons reporté dans le chapitre 3 de ce manuscrit des valeurs de rétention quasi-constantes visibles sur la Figure 4.11. Le modèle d'Iliuta et al. (2004) sous-estime largement les valeurs de la rétention de liquide déterminées expérimentalement et ce même pour des faibles vitesses de gaz. Ainsi le modèle à seuil établi sur la base du modèle cité ci-dessus sous-estime à son tour les valeurs de rétention en dessous du point de charge. Au-delà du point de charge, la rétention de liquide prédite par le modèle à seuil augmente avec la vitesse du gaz avec une pente modérée pour des vitesses superficielles de gaz comprises entre $U_{GS} = 2 \text{ m/s}$ (point de charge) et $U_{GS} \sim 3 \text{ m/s}$. Au-delà d'une vitesse superficielle de gaz de 3 m/s , ce qui correspond au point d'engorgement déterminé à partir des mesures de perte de charge à $q_L = 35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{s}$, la pente avec laquelle varie la rétention en fonction de la vitesse de gaz augmente. Le comportement du modèle à seuil dans la zone de charge ($2 \text{ m/s} < U_{GS} < \sim 3 \text{ m/s}$) et la zone d'engorgement ($U_{GS} > 3 \text{ m/s}$) est cohérent avec les résultats qu'on peut trouver dans la littérature (Spiegel et Meier, 1992 ; Stichlmair *et al.*, 1989).

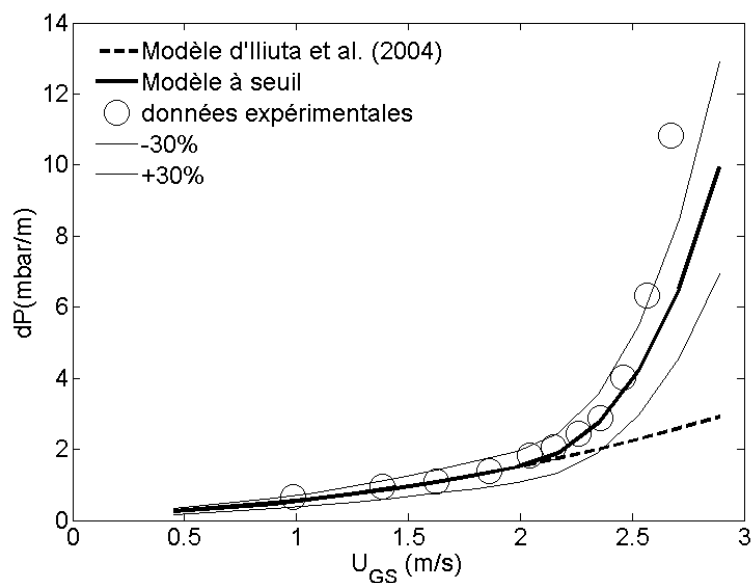


Figure 4.8 : Courbes de perte de charge pour $q_L = 35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, garnissage : M250.X

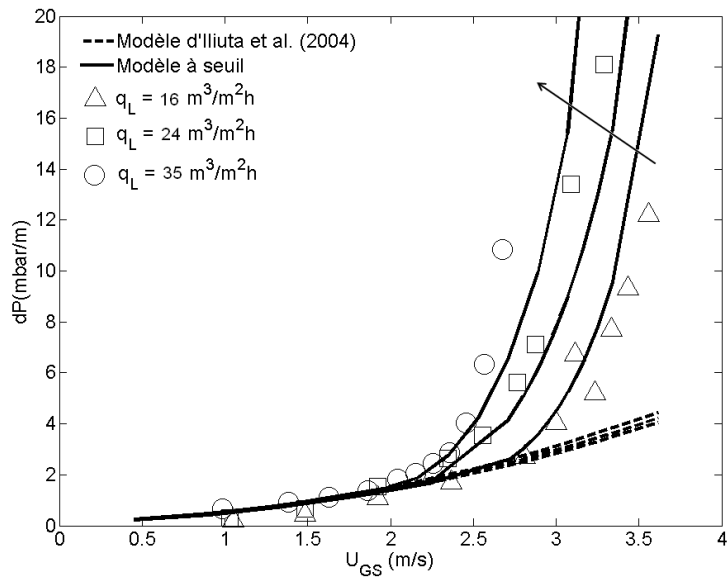


Figure 4.9 : courbes de perte de charge à différentes charges liquide, la flèche indique le sens des q_L croissants, garnissage : M250.X

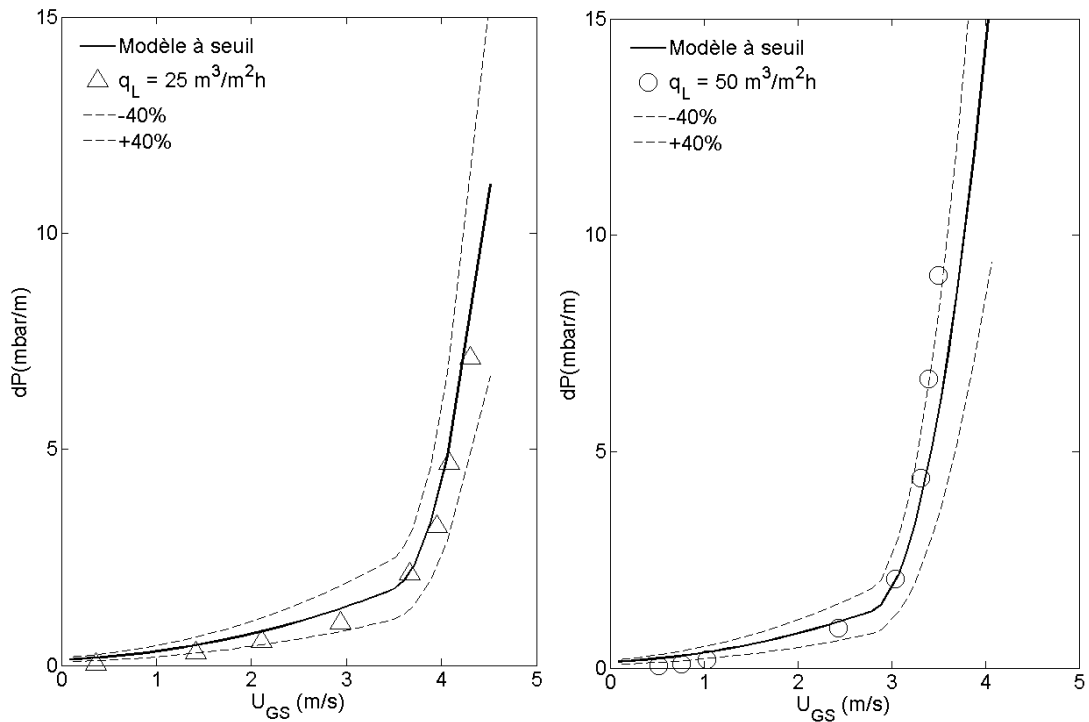


Figure 4.10 : courbes de perte de charge à différentes charges liquide, la flèche indique le sens des q_L croissants, garnissage : M250.X, Spiegel et Meier (1992)

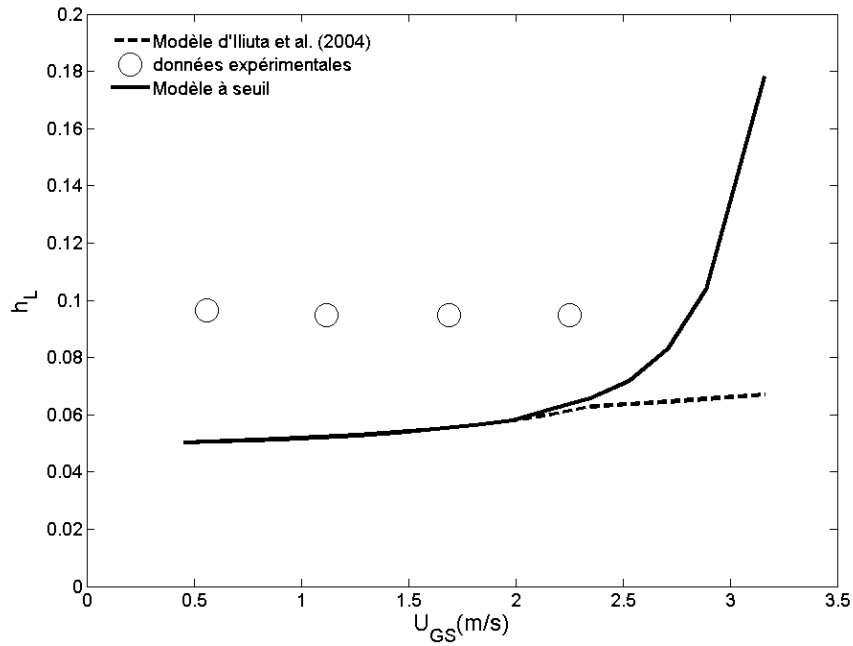


Figure 4.11 : Valeurs de rétention globale de liquide, $q_L=35\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$, garnissage : M250.X

Enfin, l'évolution du taux de mouillage f_e est reportée sur la Figure 4.12 en se basant sur la corrélation de Brunazzi et Paglianti (1997) décrite dans le chapitre 2 (équation 2.20). Une augmentation du taux de mouillage avec le débit de liquide est obtenue comme prévu à partir de cette corrélation. Pour une charge liquide q_L de $16\text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ un mouillage total est obtenu.

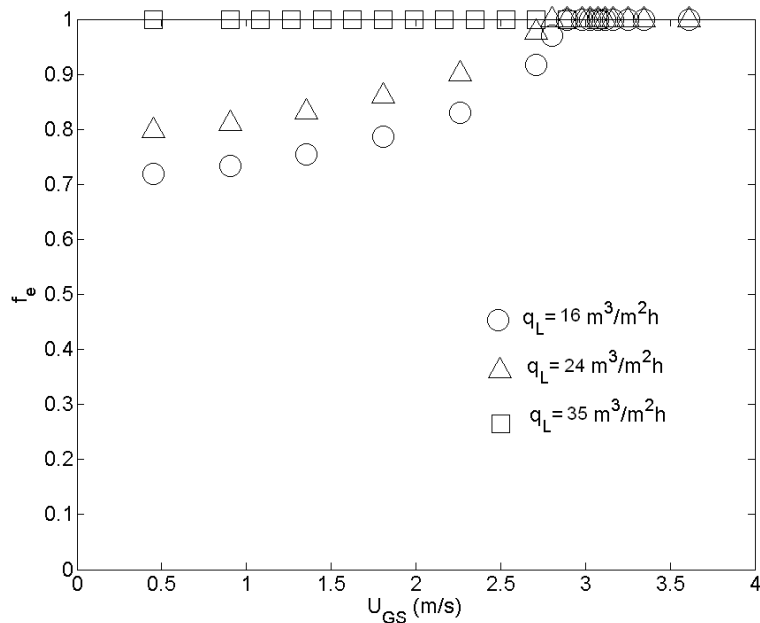


Figure 4.12 : Taux de mouillage prédit par la corrélation de Brunazzi et Paglianti (1997), garnissage : M250.X

4.1.4 POIDS DES DIFFÉRENTS TERMES DU BILAN DE QUANTITÉ DE MOUVEMENT

Le terme d'échange de quantité de mouvement aux interfaces (ou trainée) ayant été modifié en se basant sur le modèle à seuil défini précédemment, les poids des différentes forces volumiques intervenant dans les équations bilan de quantité de mouvement de la phase liquide et de la phase gaz décrites dans la section 4.1.2 sont reportés sur les figures Figure 4.13 et Figure 4.14.

Dans le cas de la phase liquide, l'équilibre du bilan se fait essentiellement entre la force de gravité et la force de frottement sur la surface du solide en dessous du point de charge ce qui a déjà été relevé dans la section 4.1.2 de ce chapitre. Au-delà du point de charge, l'introduction d'un terme correctif de la force de trainée interfaciale donne lieu à un équilibre plus complexe : ce dernier se fait désormais entre la force de gravité, la force de frottement avec le solide et la trainée interfaciale comme le montre la Figure 4.13. Cette représentation des poids des différents termes du bilan de quantité de mouvement, bien que prévisible de par la construction du modèle à seuil à partir de l'hypothèse d'une interaction significative entre le liquide et le gaz, permet de voir clairement l'entrée en jeu de l'interaction en question à partir du point de charge.

Dans le cas de la phase gaz, l'équilibre se fait toujours entre la force de trainée et les forces de pression en dessous du point de charge (Figure 4.14). Au-dessus de ce point de charge, l'équilibre du bilan de quantité de mouvement se fait toujours entre ces deux forces. Cependant une augmentation significative de la force de trainée est observée ce qui est dû à la correction introduite par le modèle à seuil. Un rapport de 4 entre la force de trainée obtenue en dessous du point de charge et celle au-dessus de ce dernier est observé. Ceci se traduit, comme le montre la Figure 4.14, par une augmentation considérable des forces de pression et donc de la perte de charge.

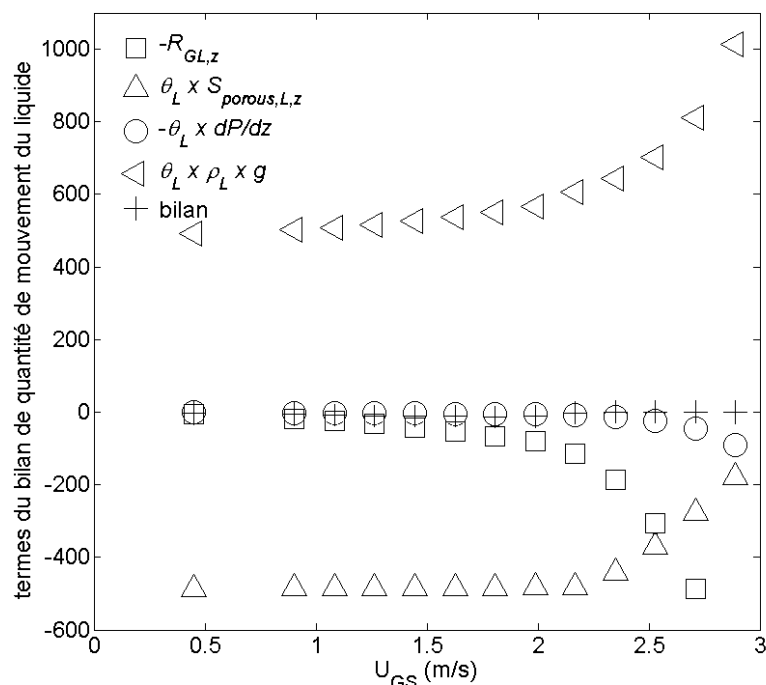


Figure 4.13 : poids relatifs des différents termes du bilan de quantité de mouvement du liquide donnés par le modèle présent, $q_L=35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, M250.X

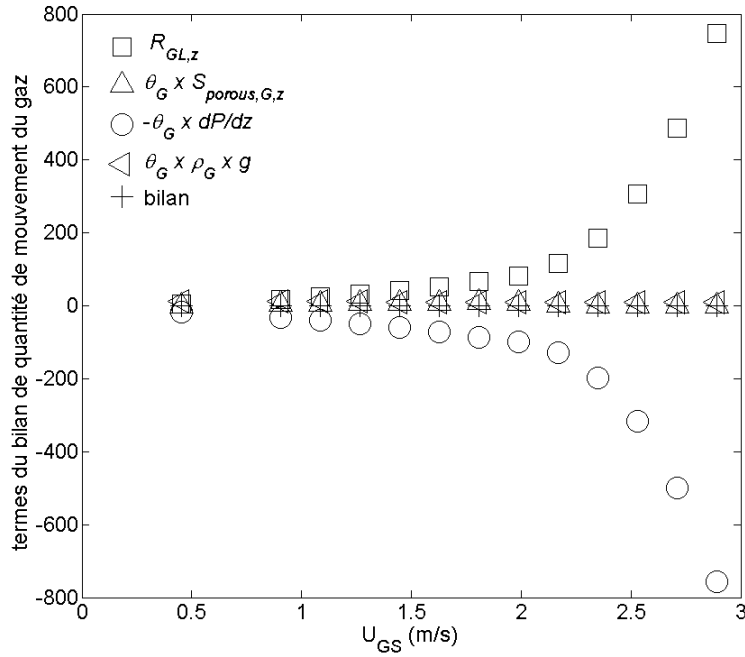


Figure 4.14 : poids relatifs des différents termes du bilan de quantité de mouvement du gaz donnés par le modèle présent, $q_L=35 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, M250.X

4.2 DISCUSSION DES LOIS DE FERMETURE PROPRES À LA DISPERSION

Dans ce paragraphe, nous nous proposons de discuter, au vu des résultats expérimentaux, les lois de fermetures propres à la dispersion mécanique des phases présentées dans le chapitre 2 consacré à la modélisation de l'écoulement.

Nous avons choisi de modéliser la dispersion dans l'écoulement en utilisant la proposition de Lappalainen et al. (2008) qui introduit une force de dispersion dans l'équation bilan de quantité de mouvement pour chacune des phases. Dans le liquide, cette force s'écrit : $\vec{F}_{disp,L} = \theta_L K_{LS} \vec{U}_{D,L} - \varepsilon K_{IG} (\vec{U}_{D,G} - \vec{U}_{D,L})$ et dans le gaz : $\vec{F}_{disp,G} = \theta_G K_{GS} \vec{U}_{D,G} + \varepsilon K_{IG} (\vec{U}_{D,G} - \vec{U}_{D,L})$. Ces forces font intervenir les coefficients de frottement K_{LS} , K_{GS} et K_{IG} intervenant dans les lois d'échange de quantité de mouvement aux parois du solide formant le garnissage ainsi qu'aux interfaces. Leurs expressions sont données par les équations 2.16, 2.17 et 2.19 en dessous du point de charge. Les vitesses de dérive qui apparaissent dans ces lois de fermeture sont données

$$\text{sous la forme : } \vec{U}_{D,L} = -\frac{S \|\vec{U}_L\|}{\alpha_L} \vec{\nabla} \alpha_L \text{ et } \vec{U}_{D,G} = -\frac{S \|\vec{U}'_G\|}{\alpha_G} \vec{\nabla} \alpha_G.$$

D'un autre côté nous avons utilisé dans l'interprétation des mesures expérimentales sur la dispersion une équation modèle de transport du débit de liquide qui permet d'introduire le coefficient d'étalement D_r . Cette équation d'advection-diffusion s'écrit :

$$\frac{\partial q_L}{\partial z} = D_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial q_L}{\partial r} \right) \text{ avec } q_L = \theta_L U_{Lz}.$$

A ce stade de notre analyse, il est donc important de montrer sous quelles conditions la loi de fermeture retenue pour $\vec{F}_{disp,k}$ et l'équation modèle de transport du débit sont compatibles, mais aussi de comprendre comment cette dernière équation peut être dérivée des principes de la physique. Nous verrons par là même si l'on peut, sous des hypothèses raisonnables, identifier les coefficients S et D_r .

En régime permanent, pour un écoulement axisymétrique, l'équation de conservation de la masse du liquide s'écrit :

$$\frac{\partial \theta_L U_{L,z}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \theta_L U_{L,r}) = 0.$$

Cette équation se ramène à celle d'advection-diffusion du débit si l'on vérifie :

$$U_{L,r} = -\frac{D_r}{\theta_L} \frac{\partial}{\partial r} (\theta_L U_{L,z}) \quad \text{avec } D_r \text{ constant} \quad (4.15)$$

Or dans un écoulement permanent, vertical et quasi-parallèle le bilan radial de quantité de mouvement du liquide se simplifie sous la forme :

$$0 = \varepsilon R_{IL,r} + \theta_L S_{porous,L,r} + F_{disp,L,r}$$

qui s'écrit encore :

$$0 = \varepsilon K_{IG} (U_{G,r} - U_{L,r}) - \theta_L K_{LS} U_{L,r} + F_{disp,L,r}$$

c'est à dire :

$$0 = \varepsilon K_{IG} (U_{G,r} - U_{L,r}) - \theta_L K_{LS} U_{L,r} + \theta_L K_{LS} U_{D,L,r} - \varepsilon K_{IG} (U_{D,G,r} - U_{D,L,r}).$$

Cette équation, tout comme celle dans le gaz, est vérifiée dès lors que $U_{L,r} = U_{D,L,r}$ et que $U_{G,r} = U_{D,G,r}$.

C'est donc ce bilan de quantité de mouvement spécifique, dans lequel une force dispersive est introduite, qui assure que :

$$U_{L,r} = U_{D,L,r} = -\frac{S \|\vec{U}_L\|}{\alpha_L} \frac{\partial \alpha_L}{\partial r} \quad (4.16)$$

Et cette relation peut être ramenée à la relation 4.15 pour un écoulement pour lequel la vitesse radiale est négligeable devant la vitesse axiale (de sorte que l'on puisse confondre la norme de la vitesse et la projection selon l'axe z) et pour lequel $U_{L,z}$ ne varie pas de manière notable avec r.

On a, en effet dans ce cas : $U_{L,r} = -\frac{S \|\vec{U}_L\|}{\alpha_L} \frac{\partial \alpha_L}{\partial r} \approx -\frac{S U_{L,z}}{\alpha_L} \frac{\partial \alpha_L}{\partial r} \approx -\frac{S}{\theta_L} \frac{\partial (\theta_L U_{L,z})}{\partial r}$. On constate alors que

l'on peut retrouver l'équation d'advection-diffusion du débit de liquide à partir des bilans de masse et de quantité de mouvement, en introduisant la loi de fermeture de la force de dispersion donnée par Lappalainen et al. (2008), et qu'on peut identifier les coefficients S et D_r . C'est donc sur la base des mesures de D_r que nous avons effectuées que nous fixerons le coefficient S. Cette proposition sera ensuite testée et discutée via les simulations numériques.

4.3 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons essayé de développer une analyse critique des lois de fermeture du modèle Eulérien à deux fluides que nous avons adoptées en les confrontant notamment aux résultats expérimentaux que nous avons obtenus.

L'analyse de l'écoulement laminaire dans un bicouche de fluides auquel nous avons appliqué une procédure élémentaire d'homogénéisation pour examiner la forme des résistances poreuses et des transferts interfaciaux de quantité de mouvement dans un lit de garnissage, nous a permis d'approfondir notre compréhension des lois de fermeture proposées dans la littérature. Nous avons également pu mettre en évidence la limitation des formes usuelles des lois de fermeture aux écoulements gaz-liquide.

L'examen des courbes de perte de charge en fonction du facteur cinétique de gaz, et leur confrontation aux prédictions du modèle développé par Iliuta *et al.* (2004) réputé s'appliquer en dessous du point de charge, a permis de proposer une adaptation du modèle de transfert interfacial de quantité de mouvement qui, en introduisant un effet de seuil, restitue correctement la forte augmentation de la perte de charge au-delà du point de charge.

Enfin, en approfondissant la discussion de la compatibilité de deux approches distinctes pour rendre compte de la dispersion du liquide (l'équation modèle d'advection-diffusion du débit d'une part et la proposition d'introduire un modèle de force de dispersion dans les bilans de quantité de mouvement du modèle Eulérien à deux fluides d'autre part), nous avons pu montrer que les expériences menées dans ce travail doivent permettre d'alimenter la loi de fermeture de cette force dispersive, puisque le coefficient à modéliser S peut être relié au coefficient mesuré expérimentalement D_r à condition que (i) l'équilibre dynamique du liquide dans la direction radiale se réduise à l'équation 4.16 et que (ii) U_{Lz} ne varie pas de manière notable avec r .

CONTENU

5. Mise en œuvre du modèle numérique : simulation avec le code Fluent	148
5.1 Définition du cas de calcul.....	148
5.1.1 Géométrie retenue.....	148
5.1.2 Solveurs utilisés	150
5.1.3 lois de fermeture: implémentation d'UDFs (User Defined Function)	151
5.2 Cas test préliminaires	155
5.3 Simulation de la dispersion de liquide dans un lit de garnissage à partir d'une entrée ponctuelle.....	158
5.3.1 Résumé des cas simulés avec le maillage 1.....	158
5.3.2 Résultats obtenus pour les cas de référence	161
5.3.3 Sensibilité à la valeur du « coefficient de dispersion »	171
5.3.4 Effet de la force de dispersion dans la phase gaz.....	177
5.3.5 Effet du taux de mouillage	177
5.3.6 sensibilité au « clipping »	179
5.3.7 Sensibilité au maillage.....	179
5.4 Conclusion	181

5. MISE EN ŒUVRE DU MODÈLE NUMÉRIQUE : SIMULATION AVEC LE CODE FLUENT.

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats de simulations à l'échelle macroscopique obtenus par la mise en œuvre du modèle Euler-Euler associé à une description de type milieu poreux présentée dans le chapitre 2 de ce manuscrit. Nous avons choisi de simuler un lit de garnissage structuré équipé de garnissage Mellapak 250.X pour lequel des lois de fermeture spécifiques ont été discutées dans le chapitre 2. Nous présentons en premier lieu la configuration géométrique adoptée pour décrire la colonne à garnissages présentée dans le chapitre 3 et sur laquelle des mesures de rétention de liquide et de perte de charge ont été réalisées. Nous décrivons ensuite le modèle Euler-Euler implémenté en partie sous forme de User Defined Functions UDF dans le code de simulation Fluent (version Fluent 13.0.0) et présentons les différents traitements numériques nécessaires pour implémenter les lois de fermeture retenues dans le cadre de ce travail dans la version standard du code. Enfin, nous présentons les résultats des simulations effectuées et en dégageons les principales conclusions et perspectives.

5.1 DÉFINITION DU CAS DE CALCUL

5.1.1 GÉOMÉTRIE RETENUE

Afin de simuler l'écoulement gaz-liquide dans le garnissage M250.X, nous avons opté pour une géométrie bidimensionnelle axisymétrique où l'axe de révolution du domaine de calcul est aligné avec l'axe de la colonne qui constitue la direction longitudinale. Dans le but de limiter le temps de calcul, la dimension longitudinale du domaine de calcul a été limitée à celle de trois galettes de garnissages, faisant chacune 22 cm de long (pour plus de détails sur la géométrie 2D du garnissage structuré M250.X, se référer au chapitre 1). Une représentation du maillage utilisé est donnée par la Figure 5.1. Le maillage renferme 15224 cellules avec, dans la direction radiale, un espacement moyen entre mailles de 0.5 mm dans la zone d'entrée du jet de liquide (c'est-à-dire pour $0 \leq R \leq 0.01\text{m}$) et de 3 mm dans la zone définie par $R \geq 0.0122\text{m}$. Le maillage a été raffiné à proximité du plan d'équation $R=0.0122\text{m}$ (zone de contact entre le jet de liquide et le gaz) ainsi qu'au niveau de la surface d'équation $R=0.2\text{m}$ délimitant le domaine. Dans la direction axiale, un espacement entre mailles de 5 mm est fixé. Le domaine bidimensionnel ainsi défini renferme trois zones distinctes (délimitées par les traits en pointillé sur la Figure 5.1) : (i) une zone non poreuse de longueur 10 cm portant le numéro (1), (ii) une zone poreuse de longueur 66 cm portant le numéro (2), (iii) une dernière zone non poreuse portant le numéro (3).

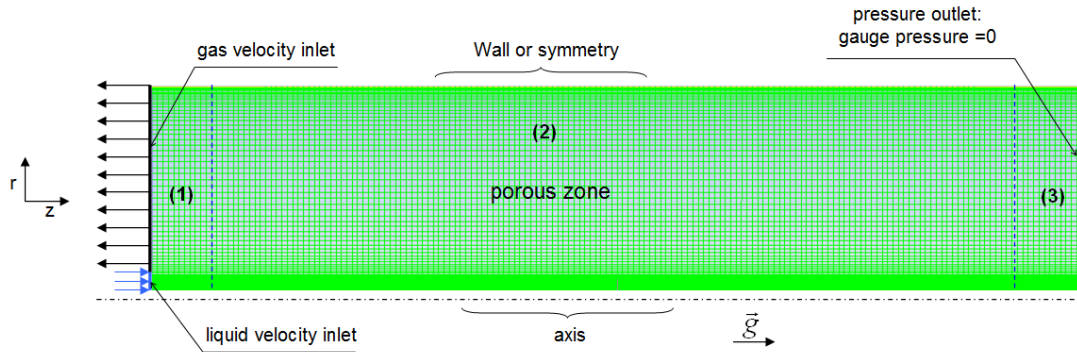


Figure 5.1 : Maillage 1 et conditions aux limites

Le choix de conditions aux limites représentatives d'un écoulement diphasique à contre-courant est un problème complexe et la détermination de conditions aux limites adéquates dans le jeu de conditions aux limites disponibles dans le code de calcul Fluent a été une phase délicate. La condition associée à l'injection de liquide est de type « velocity inlet ». Ce choix impose une valeur de la fraction volumique du liquide égale à l'unité sur la surface associée. Si l'on tente d'imposer une fraction volumique différente, il faut alors accepter que les deux fluides constituant le mélange diphasique se mettent en équilibre en adoptant une même vitesse. Ceci est incompatible dans notre cas avec la représentation d'un écoulement à contre-courant. Le liquide (fraction volumique de liquide fixée à 1) est donc introduit dans le domaine de calcul sur une section de rayon 12.2 mm au centre de la colonne. Ce rayon correspond à celui d'un disque dont l'aire est égale à la somme de celles des points d'injection de liquide dans la configuration expérimentale. Le distributeur utilisé pour alimenter la colonne en liquide a été présenté dans le chapitre 3 de ce manuscrit : il s'agit du distributeur N4 où le liquide est introduit via 6 trous ayant chacun un diamètre de 10 mm. Tel que montré sur la Figure 5.1, le gaz sort du domaine de calcul par la section restante via une condition limite de type « velocity inlet » où une vitesse négative est spécifiée. La fraction volumique de gaz sur cette surface est là encore fixée à 1 ce qui revient à considérer que seul le gaz sort par cette section. La vitesse de sortie spécifiée est fixée pour assurer le bilan de masse du gaz. On peut noter qu'il n'a pas été nécessaire d'intercaler une région solide entre les deux régions de type « velocity inlet ».

Les vitesses de phases au niveau des régions de type « velocity inlet » sont calculées de manière à retrouver les débits de gaz et de liquide pour lesquels des mesures de perte de charge ont été réalisées. Nous avons simulé ainsi deux cas correspondant tous les deux à un débit de liquide $Q_L=2 \text{ m}^3/\text{h}$. Deux débits de gaz correspondant à deux facteurs cinétiques F_S et deux taux d'engorgement sont considérés : $F_S=31.5\%$ $F_C=1.16 \text{ Pa}^{0.5}$ (soit un débit $Q_G=0.13 \text{ m}^3/\text{s}$) et $F_S=60\%$ $F_C=2.21 \text{ Pa}^{0.5}$ (soit un débit $Q_G=0.25 \text{ m}^3/\text{s}$).

La condition limite en bas de colonne, avec ici l'accélération de la gravité dirigée dans le sens des z croissants, est une condition de pression statique nulle (gauge pressure = 0) de type « pressure outlet » avec une condition d'entrée de gaz seul dans le cas de recirculation. Elle permet des entrées et sorties libres des deux fluides. Cette combinaison de conditions d'entrée-sortie des phases dans le domaine est le résultat de plusieurs tests préliminaires où d'autres jeux de conditions limites ont été considérés. Le jeu de conditions aux limites retenu est celui qui nous a permis de simuler un écoulement à contre-courant sans trop de perturbations dans les champs de vitesse des phases en zones proches de l'entrée et de la sortie.

Beaucoup d'autres configurations de conditions aux limites ne sont simplement pas possibles et entraînent la divergence du calcul : c'est notamment le cas de la configuration où le gaz est

introduit en bas de colonne avec une vitesse positive et où le liquide sort par la même section. Enfin, nous retenons que de manière générale il n'est pas possible dans le code Fluent de spécifier une surface qui est à la fois une surface d'entrée contrôlée pour une phase et une surface de sortie pour une deuxième phase. Si des calculs en géométrie tridimensionnelle sont entrepris à l'issue de cette thèse, il faudra donc, dans un souci de représentation du système d'injection de gaz, reprendre le travail de définition des conditions aux limites en bas de colonne. Des tests préliminaires montrent qu'il est délicat de faire entrer du gaz à la base d'une colonne où du liquide ruisselant a tendance à s'immiscer à contre-courant dans le flux gazeux. Une solution peut consister à mettre des bâches solides au-dessus des injecteurs de gaz. Mais la définition d'une section de sortie spécifique au liquide seul est là encore délicate. Plutôt que d'évacuer le liquide, en prenant le risque d'évacuer le gaz près de sa zone d'injection, il pourra être préférable d'accumuler le liquide dans une zone de stockage en bas de colonne sous l'injecteur de gaz.

Au niveau de la surface délimitant la colonne dans la direction transversale (surface d'équation $r = 0.2 \text{ m}$), nous avons opté pour une condition limite de type « symétrie ». Nous avons fait ce choix, et non celui d'une condition de type « paroi », afin de s'affranchir de l'effet de la paroi sur l'écoulement de liquide notamment. A ce titre, la condition de « symétrie » est souvent utilisée pour simuler une paroi associée à un cisaillement nul. Cette condition implique une annulation des composantes radiales des vitesses des phases et une annulation de tous les gradients des grandeurs physiques relatives aux phases (vitesses, pression et saturations).

Enfin le système gaz-liquide considéré est le système Air-Eau dont la viscosité et la densité sont prises dans les conditions normales de pression et de température.

5.1.2 SOLVEURS UTILISÉS

Les équations sont écrites en variables vitesse-pression et l'utilisation d'une méthode de type volumes finis implique de calculer des flux à travers les faces des cellules qui constituent le domaine. Les nœuds de pression sont situés aux centres des mailles de calcul des grandeurs scalaires (pression, fractions volumiques etc...) et les composantes des champs de vitesse aux centres des facettes des mailles. La discrétisation spatiale est faite selon un schéma décentré du second ordre : « second order upwind ». Les grandeurs scalaires étant calculées aux centres des cellules, leurs valeurs au niveau des faces, nécessaires pour le calcul des termes advectifs du bilan de quantité de mouvement, se font par interpolation. Cette interpolation au niveau des faces se fait en utilisant la valeur du scalaire dans la cellule situé « en amont » relativement à la direction de la vitesse normale à la face caractéristique d'un schéma « upwind ». La Figure 5.2 montre une représentation des nœuds de calculs de vitesse, pression et fractions volumiques de phases pour un maillage 2D dans le cas d'un schéma décalé de type « upwind ».

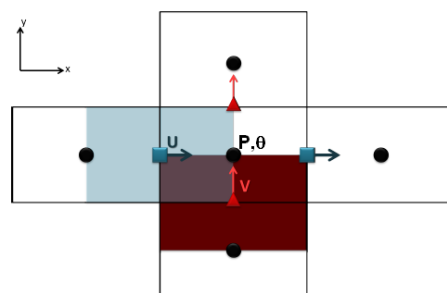


Figure 5.2 : position des nœuds de pression, de vitesse et de taux de présence de phase sur le maillage décalé, Chouippe (2012)

Le solveur « pressure-based » de Fluent où une équation sur la pression est écrite à partir des équations de continuité et de bilan quantité de mouvement est considéré. Enfin, nous avons effectué dans cette étude des calculs instationnaires en utilisant un schéma de discrétisation temporelle implicite qui a l'avantage d'être stable quel que soit le pas de temps considéré.

Pour l'ensemble des cas simulés nous avons considéré un pas de temps fixe Δt de 10^{-4} s, valeur au-delà de laquelle le calcul diverge. Enfin, nous avons effectué des simulations sur ~ 9 secondes physiques pour l'ensemble des cas en initialisant le calcul par les valeurs des vitesses des phases en entrée et une saturation liquide égale à 0.05.

5.1.3 LOIS DE FERMETURE: IMPLÉMENTATION D'UDFs (USER DEFINED FUNCTION)

Nous avons présenté dans le chapitre 2 de ce manuscrit, le système d'équations du modèle Eulérien à deux fluides associé à une approche de type « milieu poreux » retenu pour simuler l'écoulement gaz-liquide à contre-courant dans un garnissage. Les équations de ce modèle sont rappelées ci-dessous:

- Propriétés des saturations:

$$\theta_G + \theta_L = 1 \quad (5.1)$$

- Equation de conservation de la masse

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\theta_k\rho_k) + \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon\theta_k\rho_k\vec{U}_k) = 0 \quad (5.2)$$

- Equation bilan de quantité de mouvement

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\theta_k\rho_k\vec{U}_k) + \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon\theta_k\rho_k\vec{U}_k\vec{U}_k) = \\ -\varepsilon\theta_k\vec{\nabla}P + \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon\vec{\tau}_k) + \varepsilon\theta_k\rho_k\vec{g} + \varepsilon\vec{R}_{lk} + \theta_k\vec{S}_{porous,k} + \vec{F}_{disp,k} \end{aligned} \quad (5.3)$$

- Equation bilan de quantité de mouvement aux interfaces gaz-liquide

$$\vec{R}_{IG} + \vec{R}_{IL} = \vec{0} \quad (5.4)$$

Le modèle Euler-Euler adopté dans cette étude fait appel à des termes nécessitant une fermeture. Ces termes sont constitués premièrement par les frottements gaz-solide et liquide-solide $\vec{S}_{porous,k}$ modélisés par des lois de résistances poreuses. Le deuxième terme nécessitant une fermeture est celui relatif au frottement gaz-liquide \vec{R}_{lk} modélisé par une loi de type « trainée ». Le dernier terme est celui de la « dispersion mécanique » $\vec{F}_{disp,k}$. Les lois de fermeture retenues pour ces termes intervenant dans les bilans de quantité de mouvement des phases gaz et liquide font l'objet du chapitre 2 de ce manuscrit.

Dans ce travail, nous avons cherché à implémenter ces termes qui ne sont pas programmés par défaut dans le code Fluent via le codage d'UDF : « User Defined Functions ». Ces termes sont codés en utilisant le langage de programmation C en faisant appel à des macros prédéfinies dans les codes source de Fluent. Afin de pouvoir compiler et interpréter les fichiers d'extension .C correspondant aux UDFs codées, nous devons disposer d'un fichier générique dénommé

« udf.h » contenant les définitions des différents macros utilisés par le code Fluent. Ce fichier doit figurer dans le répertoire src\ figurant dans le dossier d'installation du code Fluent.

- Implémentation des forces des résistances poreuses

Le modèle Euler-Euler programmé dans le code Fluent offre la possibilité de définir une zone constituée par un « milieu poreux » où une porosité (constante ou variable) ainsi que des résistances poreuses peuvent être spécifiés. Le formalisme proposé par le modèle Euler-Euler de Fluent est celui permettant de décrire les résistances poreuses via un tenseur de résistance pouvant être anisotrope. Dans ce contexte la force de frottement $\vec{S}_{porous,k}$ pour une phase k s'écrit comme suit : $\vec{S}_{porous,k} = -\left(\mu_k \overline{\overline{D}}_k \vec{U}_k + \frac{1}{2} \rho_k \|\vec{U}_k\| \overline{\overline{C}}_k \vec{U}_k\right)$ où $\overline{\overline{D}}_k$ et $\overline{\overline{C}}_k$ sont les tenseurs de résistance visqueuse et inertielle. En adoptant les lois de fermeture retenues dans le chapitre 2 de ce manuscrit, ces tenseurs s'expriment de la façon suivante :

-Dans le liquide :

$$\overline{\overline{D}}_L = -f_e \begin{pmatrix} \frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2 f_e}{\varepsilon \theta_L^2} & 0 \\ 0 & \frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2 f_e}{\varepsilon \theta_L^2} \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

$$\overline{\overline{C}}_L = -f_e \begin{pmatrix} \frac{E_2}{3} \frac{a_g}{\theta_L} & 0 \\ 0 & \frac{E_2}{3} \frac{a_g}{\theta_L} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

-Dans le gaz :

$$\overline{\overline{D}}_G = -(1-f_e) \begin{pmatrix} \frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & \frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon} \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

$$\overline{\overline{C}}_G = -(1-f_e) \begin{pmatrix} \frac{E_2}{6} a_g \times \theta_G & 0 \\ 0 & \frac{E_2}{6} a_g \times \theta_G \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

La forme diagonale des tenseurs est liée à l'hypothèse d'un frottement fluide-solide isotrope dans le cas de la géométrie axisymétrique retenue. Cette hypothèse pourra être levée pour une simulation 3D de la colonne auquel cas la résistance dans la direction perpendiculaire aux plaques de garnissages devra être prise suffisamment importante pour bloquer le débit dans cette direction. Cette prise en compte de l'anisotropie est nécessaire si on s'intéresse à l'écoulement dans une seule galette de garnissage. Si on considère l'ensemble du lit garni où la disposition des galettes de garnissage fait en sorte que l'écoulement n'ait pas de direction privilégiée (en tournant chaque galette de garnissage de 90° par rapport à l'autre), nous pouvons conserver l'hypothèse d'isotropie.

En partant des expressions des tenseurs de résistance visqueuse et inertielle, quatre UDFs ont pu être développées. Pour ce faire, la macro DEFINE_PROFILE de Fluent a été utilisée. Ces UDFs sont reportées en annexe n°1. On peut noter que, dans les régions où du gaz seul s'écoule dans le garnissage, la condition d'un mouillage total ($f_e=1$), sans précautions particulières, donnerait $\vec{S}_{porous,G} = \vec{0}$. Pour prévenir cela, en présence d'un mouillage total, une condition a été ajoutée qui assure que lorsque la fraction volumique de gaz dépasse une valeur seuil (de l'ordre de 0,99) le transfert de quantité de mouvement aux parois est bien pris en compte dans le gaz.

- Implémentation de la force de frottement gaz-liquide

Le modèle Euler-Euler préprogrammé dans Fluent permet de prendre en compte la force de frottement entre les phases gaz et liquide sous forme d'une loi de traînée. La loi de fermeture retenue dans le chapitre 2 de ce manuscrit, permet d'écrire cette force comme suit :

$$\vec{R}_{IG} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon \theta_G} \mu_G + \frac{E_2 a_g}{6} \rho_G \|\vec{U}_G - \vec{U}_L\| \right) (\vec{U}_G - \vec{U}_L) = -K_{IG} (\vec{U}_G - \vec{U}_L)$$

en faisant appel à un coefficient d'échange de quantité de mouvement aux interfaces

$$K_{IG} = -f_e \left(\frac{E_1}{36} \times \frac{a_g^2}{\varepsilon \theta_G} \mu_G + \frac{E_2 a_g}{6} \rho_G \|\vec{U}_G - \vec{U}_L\| \right) \text{ et une vitesse relative de phases } (\vec{U}_G - \vec{U}_L).$$

Afin de coder la loi de traînée présentée ci-dessus, nous avons fait appel à la macro DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY de Fluent. L'UDF associée est également donnée en annexe n° 1. Dans le cadre de ce travail il n'a pas été possible, parce que cela pose des problèmes techniques spécifiques, de coder un transfert interfacial de quantité de mouvement distinct selon que l'écoulement s'effectue sous forme dispersée dans le ciel non poreux de la colonne ou sous forme de films ruisselants dans le garnissage poreux. Dans la région non poreuse, il n'a été possible que de faire en sorte que les deux phases n'échangent pas de quantité de mouvement aux interfaces. Cela peut donner lieu à des conditions d'entrée dans le milieu poreux qui ne sont pas complètement réalistes, mais n'a pas donné lieu à des résultats numériques aberrants. Ce point demanderait à être amélioré pour une simulation complète de colonnes à garnissage qui présentent des changements entre les régimes d'écoulements diphasiques dispersés et les régimes d'écoulements diphasiques inertiels en milieu poreux.

- Implémentation de la force de dispersion mécanique

Une loi de fermeture a été proposée pour modéliser la force de dispersion mécanique dans le chapitre 2 sur la base des travaux de Lappalainen et al. (2008). Ainsi, nous avons pu écrire pour les phases gaz et liquide respectivement :

$$\vec{F}_{disp,L} = \theta_L K_{LS} \vec{U}_{D,L} - \varepsilon K_{IG} (\vec{U}_{D,G} - \vec{U}_{D,L})$$

$$\vec{F}_{disp,G} = \theta_G K_{GS} \vec{U}_{D,G} + \varepsilon K_{IG} (\vec{U}_{D,G} - \vec{U}_{D,L})$$

Les deux forces de dispersion définies ci-dessus font intervenir des vitesses de dérive définies

pour chacune des phases comme suit : $\vec{U}_{D,G} = -\frac{S \|\vec{U}_G\|}{\alpha_G} \vec{\nabla} \alpha_G = -\frac{S \|\vec{U}_G\|}{\theta_G} \vec{\nabla} \theta_G$ et

$$\vec{U}_{D,L} = -\frac{S \|\vec{U}_L\|}{\alpha_L} \vec{\nabla} \alpha_L = -\frac{S \|\vec{U}_L\|}{\theta_L} \vec{\nabla} \theta_L.$$

L'échelle de longueur S intervenant dans l'expression des vitesses de dérive a été introduite dans le chapitre 2 de ce manuscrit. Dans le chapitre 4, nous avons proposé une discussion du sens physique de cette échelle et avons établi un lien possible entre elle et le coefficient de dispersion D_r obtenu expérimentalement. Nous avons ainsi montré, que cette échelle de longueur peut être approximée par D_r sous des hypothèses présentées dans la section 4.2 du chapitre 4.

Afin de modéliser les forces de dispersion, le codage des vitesses de dérive nécessite l'accès aux gradients de fractions volumiques de gaz et de liquide à chaque pas de temps. Cette procédure n'est pas faite de manière systématique lors d'un calcul instationnaire dans Fluent. Ainsi, une variable mémoire (dénotée UDM= « User Defined Memory » dans Fluent) a dû être allouée afin de stocker les valeurs du gradient de fraction volumique de gaz $\vec{\nabla}\alpha_G$ dans le domaine de calcul à chaque pas de temps en utilisant la macro DEFINE_ADJUST de Fluent. Le gradient de fraction volumique de liquide est déduit de celui de gaz par la simple relation : $\vec{\nabla}\alpha_L = -\vec{\nabla}\alpha_G$. L'accès aux gradients de fractions volumiques permet donc le codage des forces de dispersion via un terme source volumique en utilisant la macro DEFINE_SOURCE de Fluent. Pour l'ensemble des simulations décrites dans ce chapitre, la force de dispersion a été ramenée à un terme s'exerçant uniquement dans la direction radiale. Les programmations spécifiques développées pour la prise en compte de ce terme de dispersion sont données en annexe n° 1 de ce chapitre.

- Implémentation des lois de fermeture : accès aux variables

La gestion des accès aux variables utiles dans les UDF demande d'utiliser des fonctions macro spécifiques qui sont rappelées en annexe n°2 de ce chapitre.

- Implémentation des lois de fermeture : Notion de « Clipping »

Afin de prévenir la divergence (division par zéro) des termes non linéaires (en fraction volumique) intervenant dans les lois de fermeture du système d'équations à résoudre, nous avons fixé une valeur seuil de la fraction volumique que ce soit pour le gaz ou le liquide. En deçà de cette valeur notée θ_{seuil} la fraction volumique utilisée dans le calcul des termes de fermetures est fixée à θ_{seuil} . L'instruction séquentielle qui illustre ce traitement appelé « clipping » en anglais est la suivante :

If $\theta < \theta_{\text{seuil}}$ **then** $\theta = \theta_{\text{seuil}}$

Nous avons utilisé des valeurs de θ_{seuil} égales à 10^{-4} en général.

5.2 CAS TEST PRÉLIMINAIRES

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus pour deux cas test préliminaires permettant d'une part de valider l'approche « milieu poreux » pour un écoulement en gaz seul et d'autre part de souligner la nécessité de prendre en compte des termes sources propres à la dispersion. Les deux cas en question sont décrits dans le Tableau 5.1 : description des cas test .

Tableau 5.1 : description des cas test

Cas	Maillage	Description et conditions aux limites
<p>Cas test 1</p> <p>Objectif : valider l'approche milieu poreux en retrouvant les pertes de charge attendues</p>	<ul style="list-style-type: none"> •Maillage 2D axisymétrique d'extension longitudinale $L=1.52$ m et d'extension radiale $R=0.2$ cm. •Deux zones fluides sont définies : Le gaz rentre initialement dans une zone non poreuse de longueur 0.1m puis dans une zone poreuse (lit de garnissage) de longueur égale à 1.32 m puis de nouveau dans une zone non poreuse de longueur 0.1 m 	<ul style="list-style-type: none"> •Un écoulement monophasique d'air pénètre dans le domaine sur toute la section d'équation $Z=0$ via une condition de type « velocity inlet ». Il en sort par la section d'équation $Z=1.52$ m via une condition de type « pressure outlet : gauge pressure =0 ». •Des résistances poreuses sont spécifiées sur la base des équations 5.7 et 5.8 en considérant une fraction volumique de gaz $\theta_G=1$.
<p>Cas test 2</p> <p>Objectif : valider la modélisation en milieu poreux avec présence de deux phases gaz/liquide s'écoulant à contre-courant sans terme de dispersion.</p>	<ul style="list-style-type: none"> •Maillage et conditions limites décrites par la Figure 5.1. 	<ul style="list-style-type: none"> •Les conditions aux limites décrites sur la Figure 5.1 sont considérées pour simuler un écoulement Air-Eau. •La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) •La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge}=-1.052$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=1.16$ Pa^{0.5}). •Les résistances poreuses pour le gaz et le liquide décrites par les équations 5.5 à 5.8 sont spécifiées via des UDFs. •Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide ne sont pas prises en compte.

- Cas test 1

Le but du premier cas test est de valider le formalisme du modèle de milieu poreux codé dans Fluent. Pour cela, nous avons effectué des simulations à différents débits de gaz qui correspondent à ceux où des mesures expérimentales de perte de charge dans la colonne sèche ont été entreprises. La Figure 5.3 montre les contours de pression statique dans le domaine de simulation pour le cas particulier d'une vitesse superficielle de gaz de 0.94 m/s. Si la pression est homogène dans la direction radiale de la colonne, l'évolution dans la direction axiale est visible notamment dans la zone poreuse. Sur la Figure 5.4, nous avons reporté pour l'ensemble des vitesses superficielles de gaz considérées, l'évolution de la perte de charge longitudinale dans la zone poreuse obtenue par simulation numérique. A ces résultats nous avons superposé la perte de charge prédite par le modèle décrit par l'équation 5.3 dégénérée en 1D dans le cas d'un écoulement monophasique, homogène et stationnaire, ce qui revient à considérer l'équilibre

suyvant dans la direction axiale z :
$$-\varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} + \varepsilon \rho_G g + S_{porous,G,z} = 0.$$
 Comme observé sur la Figure

5.4, les valeurs de perte de charge prédites par les simulations en configuration 2D et celles prédites par le modèle en 1D résolu avec le logiciel Matlab sont en parfaite adéquation ce qui nous a permis de valider le codage du milieu poreux dans le code Fluent. Un faible écart avec les données expérimentales de perte de charge dans la colonne sèche est également noté sur la Figure 5.4. Ce faible écart a déjà été souligné dans le chapitre 4 où un écart entre le modèle de perte de charge proposé par Iliuta et al. (2004) et les données expérimentales a été relevé notamment pour les fortes vitesses de gaz. Etant donné que nous modélisons le frottement gaz-solide en partant du modèle d'Iliuta et al. (2004), il est normal de retrouver cet écart dans les résultats des simulations.

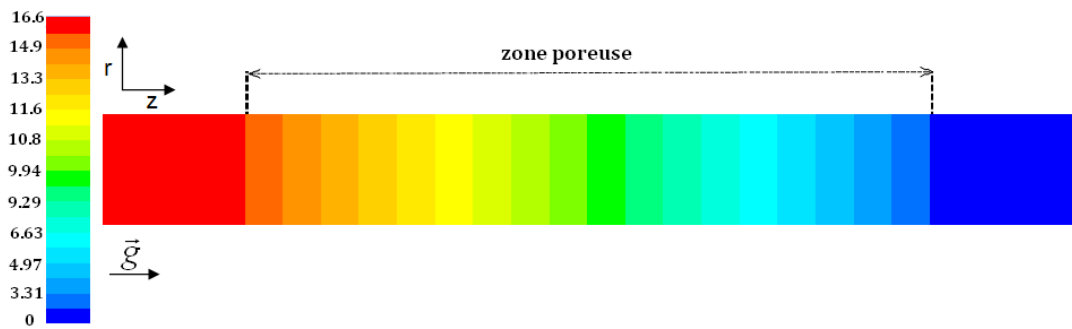


Figure 5.3 : Contours de pression statique dans le gaz en Pascal, $U_{GS}=0.94$ m/s

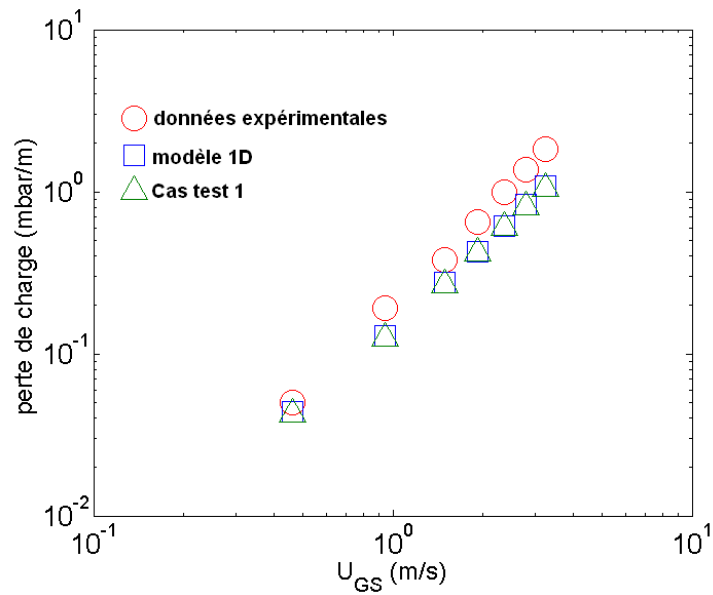


Figure 5.4 : Perte de charge en gaz seul

•Cas test 2

Dans le cas test 2, nous avons simulé l'écoulement gaz liquide en considérant la géométrie et les conditions limites décrites par la Figure 5.1. Les résultats obtenus sont présentés sur les figures Figure 5.5 et Figure 5.6 ci-dessous. La Figure 5.5 montre les contours de saturation de liquide dans le domaine. Dans la partie non poreuse, le liquide se mélange très peu au gaz ce qui est dû à l'absence de cisaillement entre les deux phases dans cette zone. L'examen des contours de vitesse du liquide montrerait également que celui-ci accélère puisqu'il n'est pas freiné par le frottement aux interfaces. L'entrée dans la zone poreuse est accompagnée d'un faible étalement du jet de liquide avec une saturation moyenne de 0.31 dans cette zone.

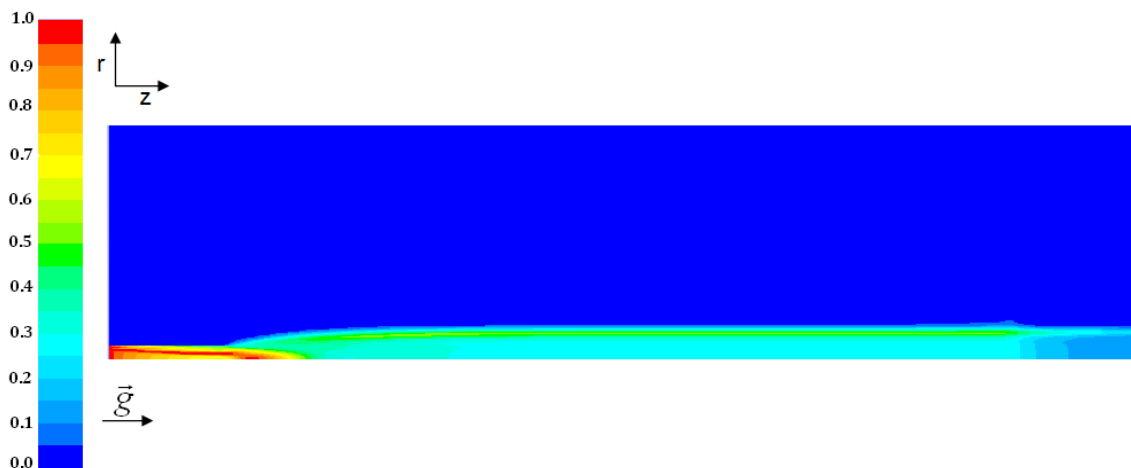


Figure 5.5 : Contours de saturation de liquide

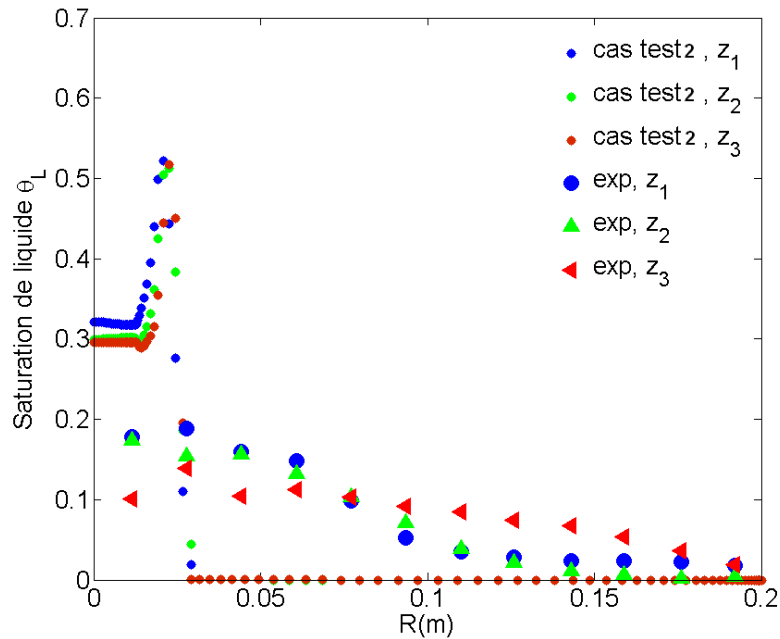


Figure 5.6 : Profils radiaux de saturation de liquide

La Figure 5.6 montre les profils radiaux de saturation de liquide aux trois cotes axiales Z_1, Z_2 et Z_3 du domaine de calcul. Les profils de saturation de liquide obtenus par simulation montrent un étalement très faible comparé à celui observé sur les données de tomographie. Ce résultat montre la nécessité de la prise en compte de la force de dispersion dans l'équation bilan de quantité de mouvement.

5.3 SIMULATION DE LA DISPERSION DE LIQUIDE DANS UN LIT DE GARNISSAGE À PARTIR D'UNE ENTRÉE PONCTUELLE

Dans cette partie, nous présentons les résultats de simulations de l'écoulement Air-Eau à contre-courant dans un lit de garnissage avec prise en compte de la dispersion et les comparons aux données obtenues expérimentalement. Nous nous attardons dans un premier temps sur deux cas de référence correspondant à deux débits de gaz différents. Nous explorons ensuite la sensibilité des simulations à divers paramètres numériques liés aux modèles codés dans Fluent. La sensibilité au maillage sera enfin abordée.

5.3.1 RÉSUMÉ DES CAS SIMULÉS AVEC LE MAILLAGE 1

Le Tableau 5.2 regroupe l'ensemble de cas de calcul obtenus avec le maillage 1.

Tableau 5.2 : Description des cas simulés avec le maillage 1

Cas	Conditions aux limites	description
Cas 1 (premier cas de référence)	<ul style="list-style-type: none"> • Les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) • La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge} = -1.052$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=1.16$ Pa^{0.5} soit 31.5% de l'engorgement) 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses sont codées en considérant un taux de mouillage f_e fixé à 1 (mouillage total) • Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide sont codées en considérant une valeur de S égale à celle du coefficient de dispersion D_r calculé sur la base des données expérimentales du chapitre 3 : $S=D_r=3.7mm$. • La valeur de seuillage θ_{seuil} est fixée à 10^{-4}.
Cas 2 (deuxième cas de référence)	<ul style="list-style-type: none"> • Les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) • La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge} = -2$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=2.21$ Pa^{0.5} soit 60% de l'engorgement). 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses sont codées en considérant un taux de mouillage f_e fixé à 1 (mouillage total) • Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide sont codées en considérant $S=D_r=3.7mm$. • La valeur de seuillage θ_{seuil} est fixée à 10^{-4}.
Cas 3 (cas d'étude de sensibilité au coefficient de dispersion D_r)	<ul style="list-style-type: none"> • Les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) • La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge} = -1.052$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=1.16$ Pa^{0.5} soit 31.5% de l'engorgement) 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses sont codées en considérant un taux de mouillage f_e fixé à 1 (mouillage total) • Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide sont codées en considérant une valeur de S égale à 4 fois celle du coefficient de dispersion D_r calculé sur la base des données expérimentales du chapitre 3 : $S=4D_r=14.8mm$. • La valeur de seuillage θ_{seuil} est fixée à 10^{-4}.

Cas	Conditions aux limites	description
Cas 4 (cas d'étude de sensibilité au coefficient de dispersion D_r)	<ul style="list-style-type: none"> • Les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge} = -1.052$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=1.16$ Pa^{0.5} soit 31.5% de l'engorgement) 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses et la force de dispersion sont codées en considérant un taux de mouillage f_e fixé à 1 (mouillage total) • Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide sont codées en considérant une valeur de S égale à 2 fois celle du coefficient de dispersion D_r calculé sur la base des données expérimentales du chapitre 3 : $S=2D_r=7.4mm$. • La valeur de seuillage θ_{seuil} est fixée à 10^{-4}.
Cas 5 (cas d'étude de sensibilité au modèle de mouillage)	<ul style="list-style-type: none"> • Les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge} = -1.052$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=1.16$ Pa^{0.5} soit 31.5% de l'engorgement) 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses et la force de dispersion sont codées en considérant un taux de mouillage f_e variable selon le modèle de mouillage défini par l'équation 2.20 du chapitre 2. • Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide sont codées en considérant $S=D_r=3.7mm$. • La valeur de seuillage θ_{seuil} est fixée à 10^{-4}.
Cas 6 (cas d'étude de sensibilité à la valeur de θ_{Lseuil})	<ul style="list-style-type: none"> • Les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) • La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge} = -2$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=2.21$ Pa^{0.5} soit 60% de l'engorgement). 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses et la force de dispersion sont codées en considérant un taux de mouillage f_e variable selon le modèle de mouillage défini par l'équation 2.20 du chapitre 2. • Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide sont codées en considérant $S=D_r=3.7mm$. • La valeur de seuillage θ_{seuil} est fixée à 10^{-6}.

Cas	Conditions aux limites	description
Cas 7 (cas d'étude de sensibilité à la force de dispersion dans le gaz)	<ul style="list-style-type: none"> • Les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) • La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge}=-2$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=2.21$ Pa^{0.5} soit 60% de l'engorgement). 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses sont codées en considérant un taux de mouillage f_e fixé à 1. • Seule la force de dispersion dans le liquide est considérée : $S=D_r=3.7$mm. Seul le terme de cette force lié au frottement liquide-solide est implémenté. • La valeur de seuillage θ_{Lseuil} est fixée à 10^{-4}.

5.3.2 RÉSULTATS OBTENUS POUR LES CAS DE RÉFÉRENCE

Dans cette section, nous présentons les résultats de simulation relatifs aux cas de référence 1 et 2 décrits dans le tableau précédent. Dans ces deux cas, la vitesse de l'eau en entrée du domaine est calculée de manière à se placer à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h. Les deux cas correspondent en revanche à deux facteurs cinétiques de gaz différents, l'un étant à 35% du facteur cinétique de l'engorgement F_C et l'autre à 60% de F_C . La force de dispersion est prise en compte dans chacun des deux cas via une l'UDF spécifique présentée dans la section 5.1 de ce chapitre. Le coefficient de dispersion nécessaire pour le calcul des termes dispersifs sur le gaz et le liquide correspond à celui obtenu expérimentalement dans le chapitre 3 de ce manuscrit pour ces conditions de débits de gaz et de liquide. Il vaut $S = D_r = 3.7$ mm. Enfin, un mouillage total correspondant à $f_e=1$ est considéré dans les lois de fermeture.

A/Saturation de liquide

La Figure 5.7 montre les contours de saturation de liquide obtenus par simulation numérique dans le cas 1 et ceux obtenus dans le cas test préliminaire numéro 2. Les deux cas ont été simulés en considérant les mêmes conditions de vitesse de liquide et de gaz. Cependant, dans le cas 1, les forces de dispersion dans le gaz et le liquide ont été prises en compte contrairement au cas test 2. La Figure 5.7 montre clairement l'étalement du liquide dans la direction radiale dès l'entrée dans la zone poreuse dans le cas où les forces de dispersion sont prises en compte. Il y a donc un intérêt réel à ajouter des forces de dispersion dans les équations de quantité de mouvement pour assurer la dispersion du liquide.

Afin de quantifier l'étalement du jet de liquide, les profils radiaux de saturation obtenus en chaque cellule du maillage sont reportés dans les figures Figure 5.8 et Figure 5.9. Les profils obtenus numériquement y sont superposés aux profils de rétention obtenus expérimentalement aux trois côtes axiales : Z_1 , Z_2 et Z_3 . Le cas 1 n'a pas d'équivalent exploré expérimentalement du point de vue de la dispersion. Une mesure de perte de charge a été cependant faite pour les débits de liquide et de gaz propres à ce cas. Comme les profils expérimentaux de rétention locale ne sont pas très sensibles au débit de gaz au-delà de $F_S=40\%F_C$ (figure fournie en annexe n°2 du chapitre 3), on a comparé les résultats numériques du cas 1 (pour lequel $q_L=16$ m³/m²h et $F_S=31\%F_C$) aux résultats du cas expérimental (pour lequel $q_L=16$ m³/m²h et $F_S=40\%F_C$). Pour le

cas 2, par contre on dispose des résultats expérimentaux pour effectuer une comparaison. Pour les deux vitesses de gaz considérées, le bon ordre de grandeur de la saturation liquide est obtenu (Figure 5.8 et Figure 5.9), même si les profils des saturations calculées ne sont pas exactement les mêmes que ceux relevés dans les expériences. Les valeurs de la saturation moyenne (ou rétention) sur la section d'équation $Z= Z_3$ obtenues dans les deux cas de simulation collent parfaitement avec celles obtenues expérimentalement. On calcule pour les cas 1 et 2, une valeur numérique de la saturation moyenne de 8.3% et des valeurs expérimentales respectives de celle-ci de 8.2% et 8.4%.

Toutefois, les profils radiaux de saturation liquide obtenus numériquement sont clairement moins étalés dans la direction radiale que ceux obtenus expérimentalement et ce pour l'ensemble des positions axiales Z_1 , Z_2 et Z_3 . La force de dispersion, telle qu'elle est codée dans le modèle de simulation, sous-estime certainement la dispersion du liquide dans le système. Des effets liés aux conditions d'entrée dans le milieu poreux et donc au démarrage de la dispersion du liquide dans le garnissage pourraient également intervenir. Par ailleurs, la prise en compte d'une force de dispersion longitudinale pourrait également atténuer de manière plus marquée les valeurs numériques des saturations du liquide aux positions observées.

Dans le cas 2 qui correspond à un rapport F_s/F_c de 60%, les valeurs maximales de la saturation liquide au niveau de l'axe de la colonne (au centre d'une section de colonne dans une configuration 3D) sont un peu mieux prédites que dans le cas d'un rapport F_s/F_c de 31.5%. Ce résultat est dû au fait que les profils en positions Z_1 et Z_2 donnés par les simulations dans le cas 2 sont un peu plus étalés dans la direction radiale que ceux dans le cas 1 tel que montre la Figure 5.10. Ceci dit, les profils radiaux des saturations ne diffèrent pas de manière notable entre ces deux calculs (Figure 5.10). Et cela est plutôt en accord avec les résultats expérimentaux qui montraient une faible sensibilité de la distribution de liquide au débit de gaz.

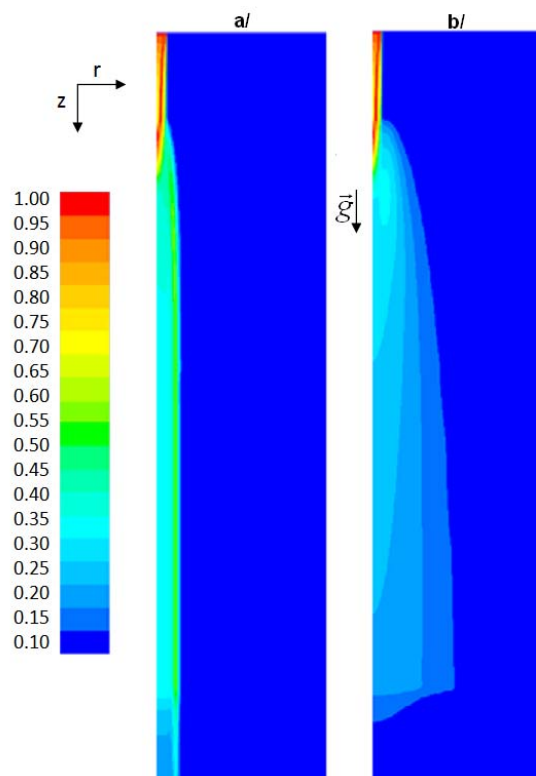


Figure 5.7 : Contours de saturation de liquide dans le plan (r,z) , a/cas test 2, b/cas1

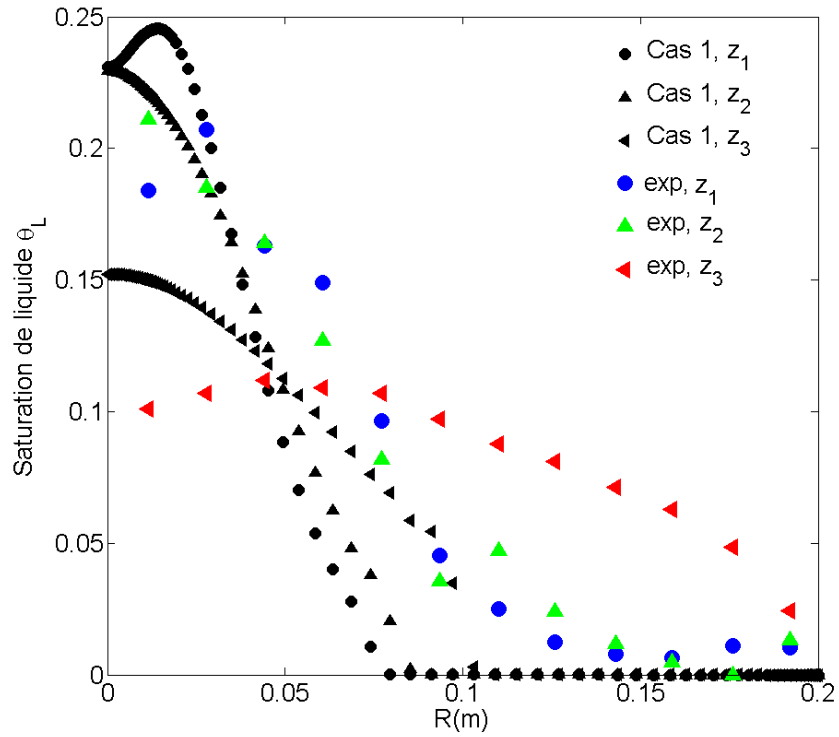


Figure 5.8 : Profils radiaux de saturation liquide, cas 1 numérique vs cas expérimental à $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_S=40\%F_C$

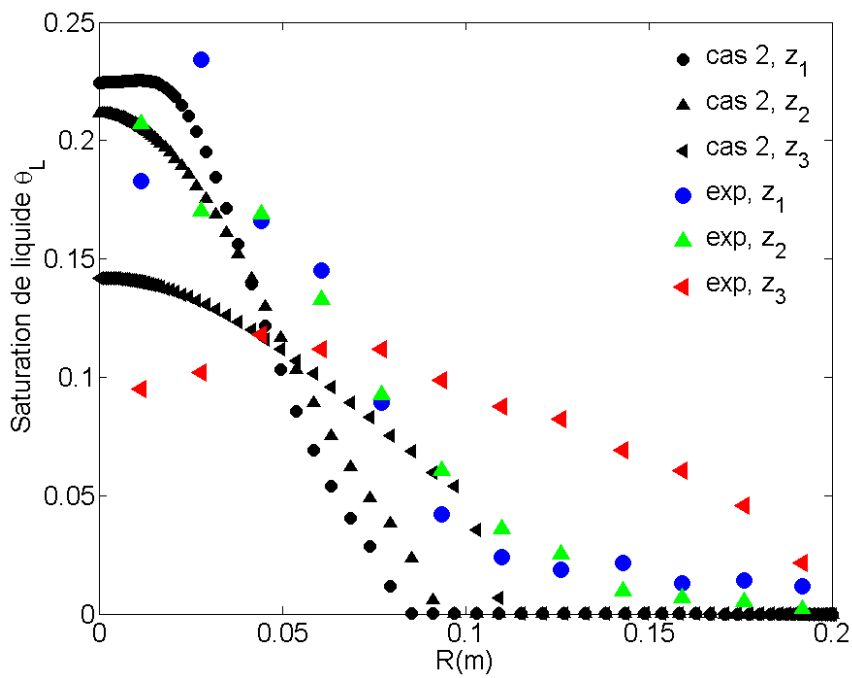


Figure 5.9 : Profils radiaux de saturation liquide, Profils radiaux de saturation liquide, cas 2 numérique vs cas expérimental à $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_S=60\%F_C$

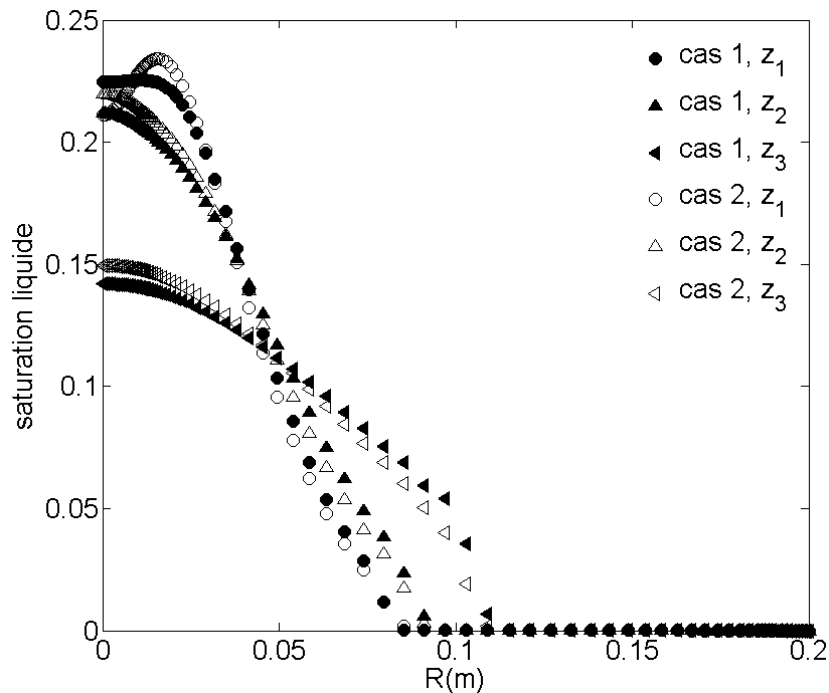


Figure 5.10 : Profils radiaux de saturation liquide, cas 1 vs cas 2

Enfin, si l'on applique le modèle d'advection-diffusion du débit de liquide présenté dans le chapitre 3 aux profils radiaux de débit obtenus à partir de la simulation dans le cas 1 de référence on peut calculer un coefficient d'étalement basé sur les simulations. Ce coefficient d'étalement du débit liquide issu de la simulation vaut 1 mm. S'il reste du même ordre de grandeur, il diffère tout de même de $D_r = 3,7$ mm. Ainsi, l'hypothèse qui consiste à identifier le coefficient D_r au coefficient S intervenant dans la définition des forces de dispersion n'est pas vérifiée. Nous analyserons ce point plus en avant dans la suite du manuscrit.

B/Profils des vitesses des phases

Nous nous intéressons dans cette partie aux profils de vitesses des phases dans le cas 1 de la simulation. Les contours de la norme de la vitesse du liquide et de la valeur de la vitesse longitudinale du gaz sont reportés sur les figures Figure 5.11 et Figure 5.12 respectivement. Comme les vitesses radiales restent faibles devant les vitesses longitudinales ces contours donnent un bon aperçu global des régions d'accélération ou de décélération. Dans le cas du liquide, au sein du domaine poreux, la dispersion dans la direction radiale donne lieu à un évasement des vitesses semblable à celui de la saturation (comparer les figures Figure 5.7 et Figure 5.11). Le débit de liquide se disperse donc bien progressivement. Dans les espaces non occupés par le milieu poreux, l'eau accélère sous l'action de son poids qui n'est pas équilibré parce que les échanges interfaciaux de quantité de mouvement sont inactifs dans ces régions. Une survitesse est relevée dans la zone placée juste à l'entrée du lit poreux comme le montre la Figure 5.11. Cette survitesse est due à l'absence de force de trainée dans les zones non poreuses du domaine, le liquide n'est donc soumis qu'à l'effet de la gravité et est donc en chute libre dans cette zone. Une fois dans la zone poreuse, si l'on s'intéresse à l'évolution de la vitesse du liquide sur l'axe, on constate bien qu'elle décroît sous l'effet de la résistance poreuse et du cisaillement avec le gaz à contre-courant essentiellement, le gradient de pression ne devant pas jouer un rôle dominant.

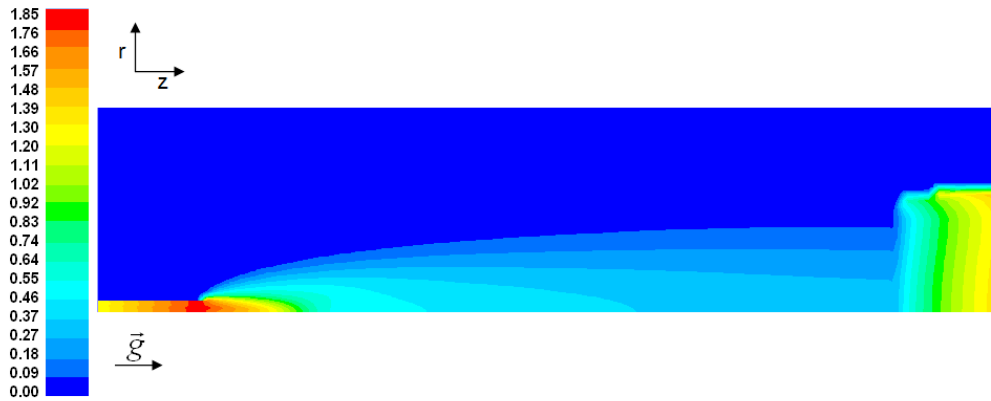


Figure 5.11 : Contours de la norme de la vitesse du liquide dans le plan (r,z) , cas 1

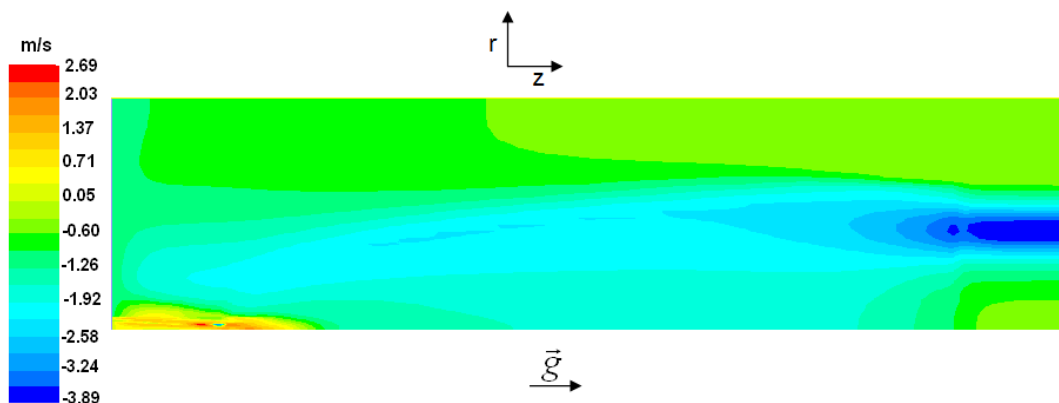


Figure 5.12 : Contours de la vitesse axiale du gaz dans le plan (r,z) , cas 1

Dans le cas du gaz, les contours de la vitesse axiale simulés s'avèrent plus complexes. Une zone avec une importante survitesse est obtenue en bas de colonne (voir Figure 5.12). Cette perturbation de la vitesse de gaz à cet endroit est certainement due à la condition limite à cette surface. En effet, le profil de vitesse du gaz en entrée du domaine est calculé de manière à conserver le débit. Etant donné que du gaz est entraîné par le liquide à certaines zones, la conservation du débit implique des survitesses de gaz en entrée. Ceci ne correspond clairement pas à un cas réel étant donné que dans la colonne, un distributeur assure une distribution homogène de gaz en entrée du lit. Heureusement, cette forte hétérogénéité est radicalement atténuée dès que le gaz entre dans le lit poreux. Aussi, si le gaz s'écoule majoritairement dans le sens ascendant, des recirculations peuvent avoir lieu comme le montre la Figure 5.12. Ces recirculations ont lieu en haut du domaine dans la zone d'entrée de liquide où du gaz, à très faible taux de présence, est entraîné par le jet de liquide.

Les profils radiaux de vitesses axiales et radiales des phases sont également reportés sur la Figure 5.13. La Figure 5.13 montre que, quelle que soit la phase, l'écoulement s'effectue essentiellement dans la direction axiale puisque les vitesses axiales sont nettement supérieures aux vitesses radiales. Dans le cas du liquide, nous obtenons des profils de vitesse axiale qui sont qualitativement semblables à ceux de la saturation liquide (Figure 5.7) étant donné que la force de dispersion codée est associée à une dispersion radiale de la quantité de mouvement.

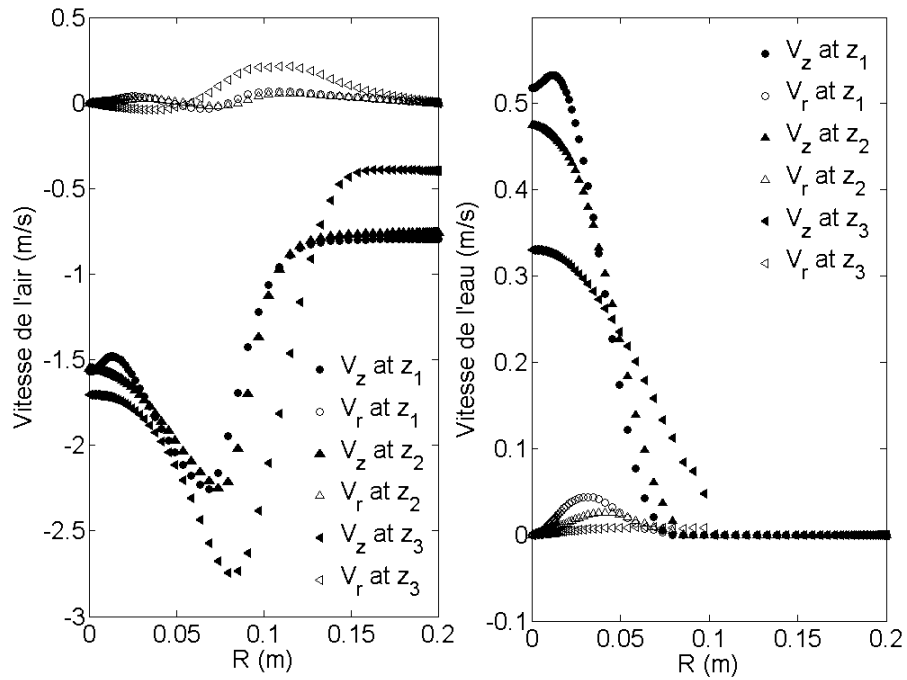


Figure 5.13 : Profils radiaux de vitesses axiale et radiale des phases, cas 1

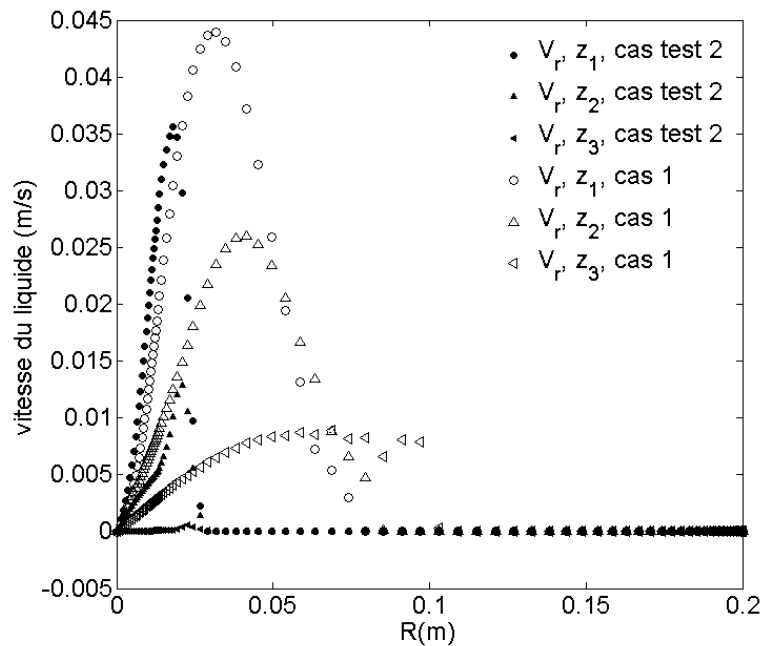


Figure 5.14 : Profils radiaux de vitesse radiale de liquide, cas 1 vs cas test 2

La Figure 5.14 montre les profils radiaux de vitesse radiale du liquide dans les deux cas de simulations : le cas 1 où les forces de dispersion dans les phases sont prises en compte et le cas test 2 où ces forces ne sont pas considérées. La vitesse radiale du liquide est nettement plus importante dans le cas 1 et prend des valeurs non négligeables sur une distance plus étalée en partant de l'axe de la colonne par rapport au cas test 2. Cette augmentation de la vitesse radiale ainsi que l'extension de son domaine d'existence sont liées à la prise en compte des forces dispersives qui introduisent une vitesse de dérive proportionnelle au gradient de fraction volumique des phases.

C/Perte de charge linéique

La Figure 5.15 montre les contours de pression statique dans le cas de simulation dénoté cas 1. Elle révèle un champ de pression globalement homogène sur une section de la colonne (dans la direction radiale) et une évolution de la pression qui se fait essentiellement dans la direction axiale (excepté dans la région basse de la colonne perturbée par de fortes accélérations du gaz). Dans le cas 1 correspondant à une charge liquide $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et un facteur cinétique $F_S=1.16 \text{ Pa}^{0.5}$, la perte de charge prédite numériquement dans le lit poreux est évaluée à 46.5 Pa/m . Dans le cas 2 correspondant à une charge liquide $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et un facteur cinétique $F_S=2.21 \text{ Pa}^{0.5}$, la perte de charge prédite dans le lit poreux est évaluée à 87.5 Pa/m . Les pertes de charge mesurées expérimentalement sont pour les mêmes facteurs cinétiques de gaz respectivement 45 Pa/m et 107 Pa/m . Les écarts relatifs entre les valeurs données par la simulation et l'expérience dans les deux cas sont donc respectivement de 3 % et 20 %. Ces écarts sont relativement faibles. Ils confirment la pertinence du choix de conserver le modèle d'Iliuta *et al.* (2004) considéré pour modéliser les résistances poreuses sans modifications de quelque constante que ce soit. Ce modèle étant valable pour des régimes de faible interaction gaz-liquide, il est normal que la perte de charge soit sous-estimée pour les vitesses croissantes de gaz.



Figure 5.15 : Contours de pression statique (Pa) pour le cas 1

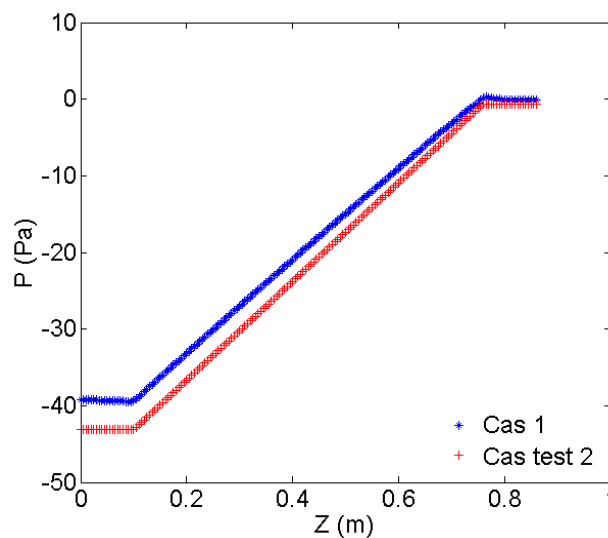


Figure 5.16 : Evolution axiale de la pression dans le plan d'équation $r=0.1\text{m}$

Sur la Figure 5.16, nous avons reporté l'évolution axiale de la pression statique le long de la droite d'équation $r=0.1$ m dans le cas 1, où les forces de dispersion dans les phases sont prises en compte et le cas test 2 où celles-ci ne sont pas considérées. Un faible écart entre les profils axiaux de pression statique est relevé entre les deux cas. Mais il apparaît notamment dans la zone proche de l'entrée du liquide dans le milieu poreux. La perte de charge reste donc globalement inchangée entre un cas où le liquide ne se disperse pas et un cas où celui-ci se disperse avec un coefficient de dispersion D_r égal à 3.7 mm.

B/Poids des termes du bilan de quantité de mouvement radiale

Dans cette section nous examinons l'évolution radiale de différents termes intervenant dans le bilan radial de quantité de mouvement du liquide : à savoir la trainée radiale dénotée R_{GL} , la résistance poreuse radiale dénotée $S_{porous,L}$ et la force de dispersion radiale dénotée $F_{disp,L}$. Le but est de déterminer les poids relatifs de ces termes et d'examiner par là même si le bilan de quantité de mouvement se ramène à un équilibre permettant d'identifier la vitesse moyenne radiale avec la vitesse de dérive. Se pose en effet la question d'identifier l'origine de l'écart entre le facteur d'étalement D_r du modèle d'advection-diffusion du débit issu de la simulation ($D_r=1\text{mm}$) avec le coefficient S de la loi de fermeture proposée par Lappalainen et al (2008) qui a été pris égal à la mesure expérimentale de D_r ($S=3,7\text{mm}$).

Les figures Figure 5.17 et Figure 5.18 montrent un bilan de quantité de mouvement dans la direction radiale qui s'équilibre, en dehors de la région près de l'axe en Z_1 , essentiellement entre la résistance poreuse et la force de dispersion. Dans les figures Figure 5.17 et Figure 5.18, les points en rouge correspondent à la somme des composantes radiales des trois forces représentées dans ces figures. Dans le cas de la position axiale Z_1 , cette somme ne vaut pas zéro notamment dans la zone proche de l'axe de la colonne ($0 \leq r \leq \sim 0.06\text{m}$). Ceci est dû au fait que des termes d'accélération ($\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon \theta_L \rho_L \vec{U}_L \vec{U}_L)$ projeté selon r) ou de pression sont nécessaires pour boucler le bilan de quantité de mouvement alors qu'ils ne sont pas reportés. Les effets d'accélération sont en effet non négligeables à la position Z_1 qui est la plus proche de l'entrée du jet de liquide dans la zone poreuse, et deviennent vite négligeables plus en aval (cf. Figure 5.18). Dans tous les cas, le terme de trainée interfaciale apparaît clairement comme négligeable dans la direction radiale. En effet, ce terme fait appel à la composante radiale de la vitesse relative des phases, qui est négligeable étant donné que l'écart entre les vitesses radiales des phases est faible (voir Figure 5.13). L'équilibre dominant entre la résistance poreuse et la force de dispersion dans la direction radiale (en fait avec la partie dominante de ce terme qui se réduit au terme $\vec{F}_{disp,L,por} \cdot \vec{e}_r = -K_{LS} \theta_L U_{D,L,r}$) indique que la vitesse moyenne radiale du liquide peut être identifiée à la vitesse radiale de dérive.

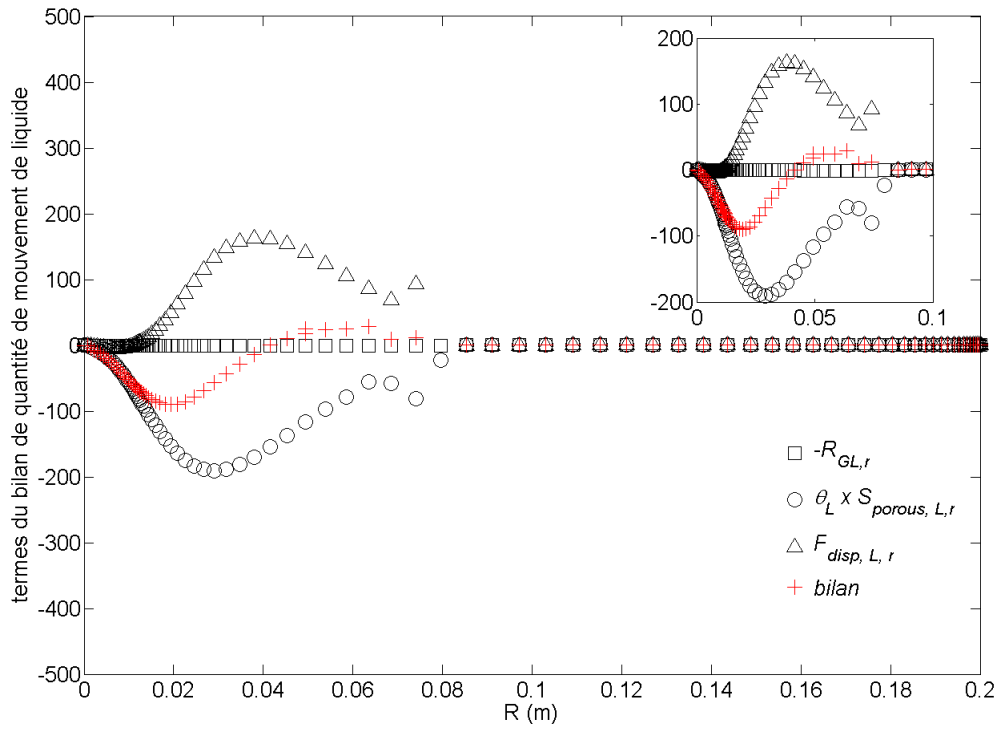


Figure 5.17 : Evolution radiale des forces volumique radiales du bilan de quantité de mouvement du liquide en position Z_1 , cas 1.

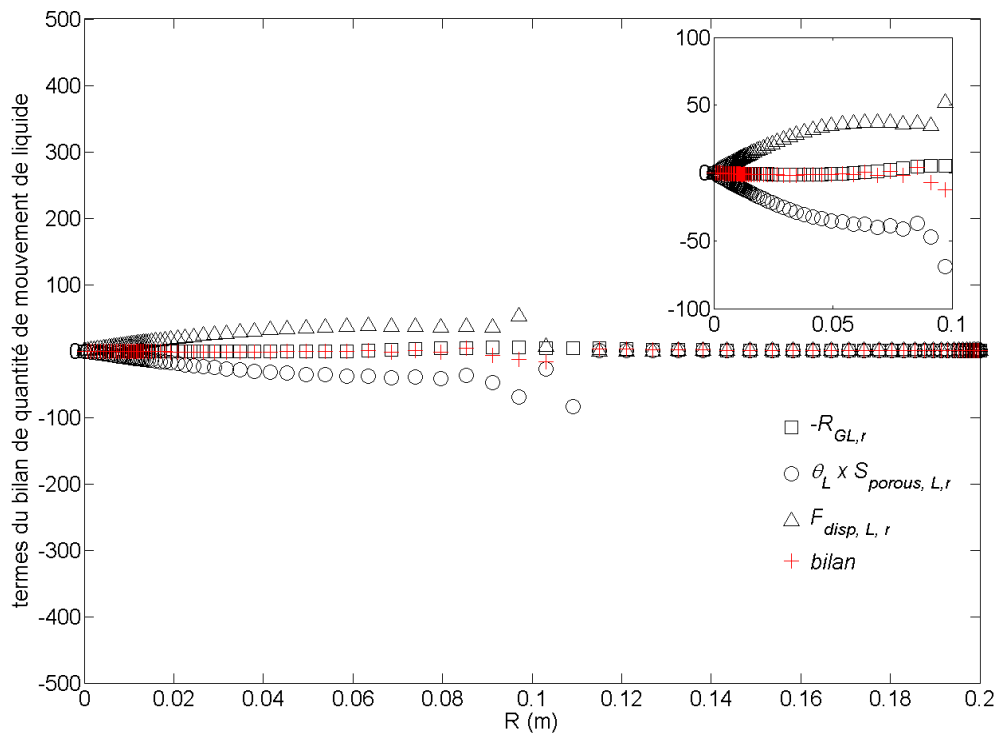


Figure 5.18 : Evolution radiale des forces volumique du bilan de quantité de mouvement du liquide en position Z_3 , cas 1.

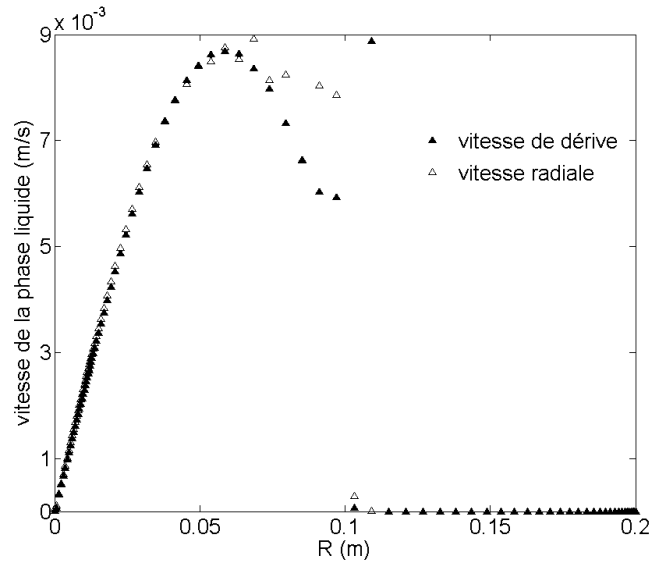


Figure 5.19 : profils radiaux des vitesses radiale et « de dérive » en position Z₃, cas 1

La Figure 5.19 montre les évolutions radiales de la vitesse moyenne radiale du liquide et de la

vitesse radiale de dérive définie par $U_{D,L,r} = -\frac{S\|\vec{U}_L\|}{\alpha_L} \frac{\partial \alpha_L}{\partial r}$. La vitesse de dérive coïncide

globalement avec la vitesse radiale du liquide. La force de dispersion associée à cette vitesse de dérive crée donc bien un mécanisme d'écoulement du liquide dans la direction radiale. L'égalité des deux vitesses semble indiquer que l'identification des coefficients d'étalement issus des expériences et du coefficient de la loi de fermeture des vitesses de dérive est possible. Il n'en reste pas moins vrai que lorsqu'on représente le transport de débit du liquide par l'équation modèle d'advection-diffusion on a un écart entre les mesures numérique et expérimentale de D_r . Ceci provient donc vraisemblablement de la dernière hypothèse nécessaire à cette identification qui n'est pas vérifiée : dans cet écoulement $U_{L,z}$ varie selon la direction radiale et cela introduit un terme important dans le bilan de masse du liquide, modifiant ainsi la distribution de liquide par rapport à l'approche simplifiée de transport par advection et diffusion du débit de liquide.

Dit autrement, le bilan de quantité de mouvement du liquide, avec le modèle de force dispersive

permet de vérifier : $U_{L,r} = U_{D,L,r} = -\frac{S\|\vec{U}_L\|}{\alpha_L} \frac{\partial \alpha_L}{\partial r}$. Mais, parce que $U_{L,z}$ dépend fortement de r , on

ne vérifie pas la condition $U_{L,r} \approx -\frac{S}{\theta_L} \frac{\partial(\theta_L U_{L,z})}{\partial r}$. Il n'y a donc pas équivalence stricte de

l'équation de conservation de la masse du liquide avec l'équation d'advection-diffusion du débit q_L (voir chapitre 4). Les coefficients S et D_r sont du même ordre de grandeur mais ne sont pas égaux.

5.3.3 SENSIBILITÉ À LA VALEUR DU « COEFFICIENT DE DISPERSION »

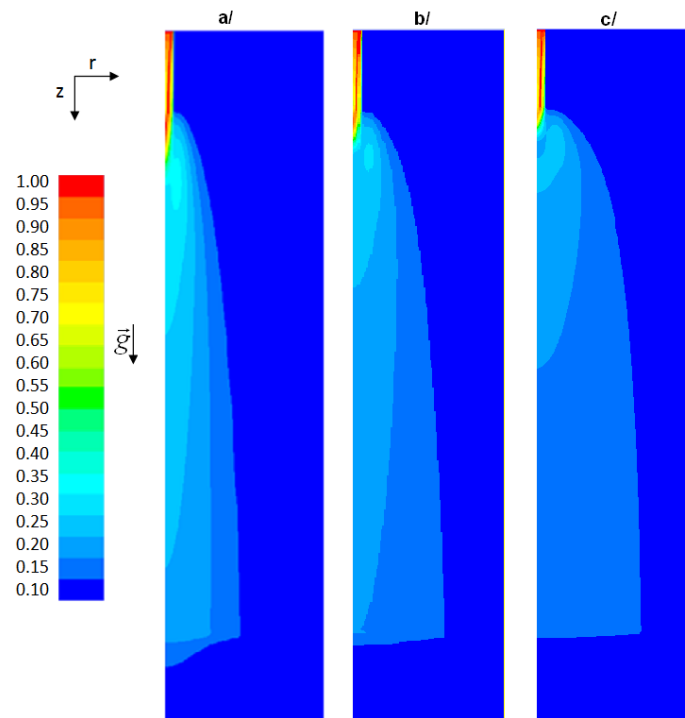


Figure 5.20 : Contours de saturation de liquide ; a/ Cas1 (D_r), b/ Cas4 ($2D_r$), c/ Cas3 ($4D_r$); échelle de couleur : 0 à 1

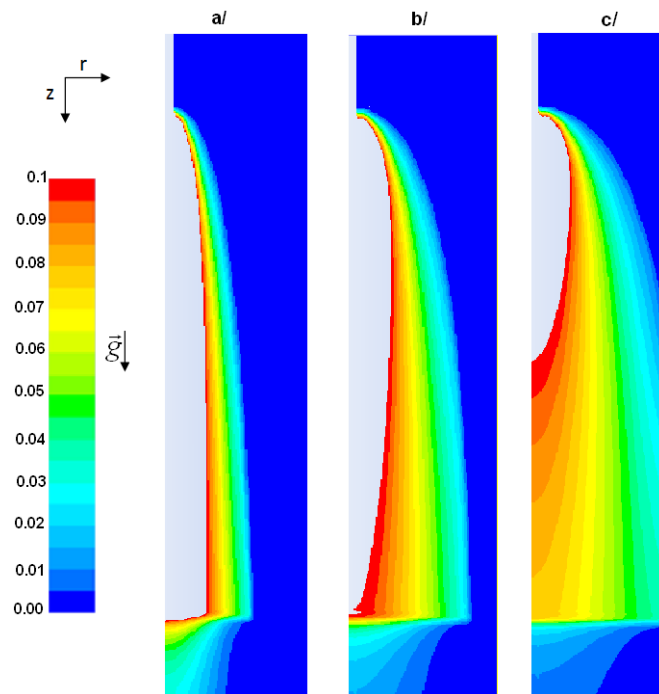


Figure 5.21 : Contours de saturation de liquide ; a/ Cas1 (D_r), b/ Cas4 ($2D_r$), c/ Cas3 ($4D_r$); échelle de couleur : 0 à 0.1

Les figures Figure 5.20 et Figure 5.21 montrent les contours de saturation de liquide pour les cas de simulation cas 1, cas 3 et cas 4 correspondant à une charge liquide et un facteur cinétique constants (respectivement $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, et $F_S=1.16 \text{ Pa}^{0.5}$) et différentes valeurs du coefficient de dispersion D_r . Les deux figures correspondent à deux échelles différentes de couleur : une échelle correspondant à une valeur maximale de 1, adaptée à ce qui se passe en entrée de lit, et une échelle correspondant à une valeur maximale de 0.1, plus adaptée à ce qui se passe en aval. La multiplication du coefficient de dispersion D_r par 4 (cas 3) et par 2 (cas 4) par rapport au cas de référence (cas 1) donne lieu à un étalement plus important du liquide dans la direction radiale visible sur les contours de saturation ci-dessus. Dans le cas 3, la force de dispersion entraîne le liquide jusqu'à la frontière du domaine de calcul (surface d'équation $R=0.2 \text{ m}$). La condition limite de symétrie appliquée à cette surface implique une annulation des gradients de fraction volumiques du liquide et du gaz et donc celle des forces de dispersion. Les composantes de vitesses radiales des phases sont également nulles, ce qui entraîne une accumulation de liquide en paroi. Toutefois, cette condition limite implique l'absence de cisaillement avec la paroi ce qui n'est pas réaliste. Afin d'avoir un étalement du jet de liquide qui soit plus réaliste dans le cas 3, il serait préférable d'effectuer des simulations en considérant des conditions spécifiques de « paroi » respectant les contraintes hydrodynamiques (frottement à l'interface) et la géométrie réelle (porosité locale = 1 impliquant une interaction liquide milieu poreux nulle).

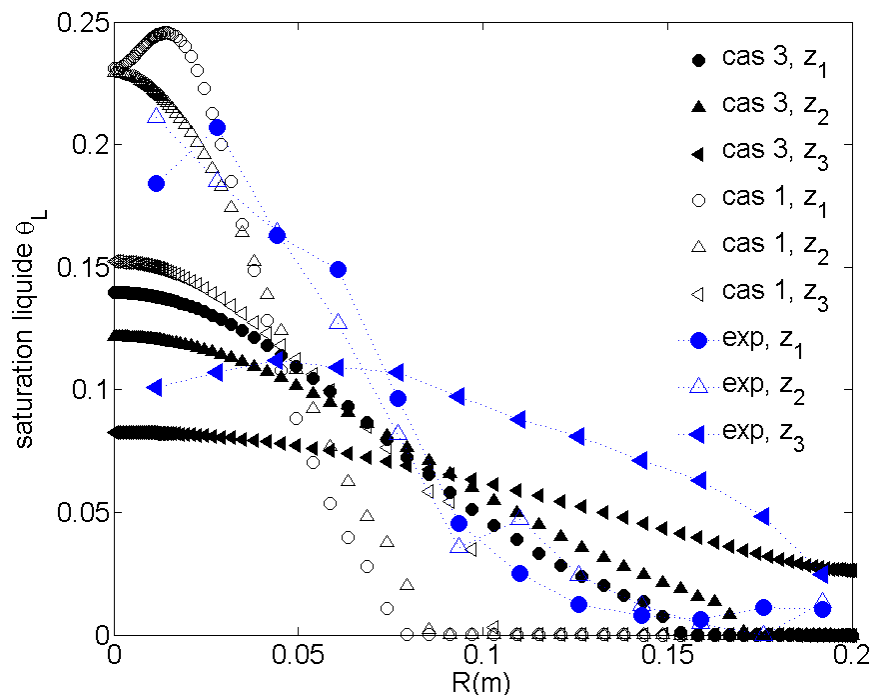


Figure 5.22 : Profils radiaux de saturation liquide, cas 1 vs cas 3, points expérimentaux à $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_S=40\%F_C$

Sur les figures Figure 5.22 et Figure 5.23, nous reportons les profils radiaux de saturation liquide et les superposons à ceux obtenus expérimentalement. Les résultats de simulations propres au cas 1 de référence y sont également représentés. L'augmentation du coefficient de dispersion donne lieu à des profils radiaux de saturation qui sont plus étalés dans la direction radiale et ce pour les trois positions axiales considérées : Z_1 , Z_2 et Z_3 . Cette sensibilité au coefficient D_r est mise en évidence également sur la Figure 5.24 où les deux cas correspondant à 2 et 4 fois le D_r obtenu expérimentalement (cas 4 et cas 3 respectivement) sont représentés. La comparaison entre les figures Figure 5.22 et Figure 5.23, montre, en outre, que le cas 4 relatif à un D_r égal à 2 fois le D_r obtenu expérimentalement est le cas qui s'approche le mieux des données expérimentales de rétention liquide.

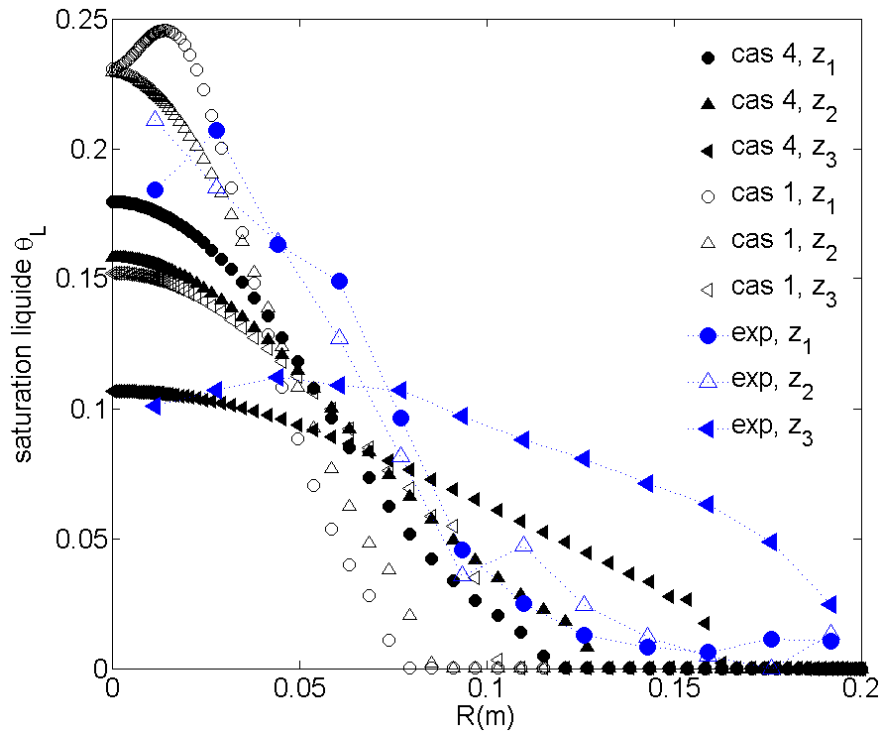


Figure 5.23 : Profils radiaux de saturation liquide, cas 1 vs cas 4, points expérimentaux à $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_S=40\%F_C$

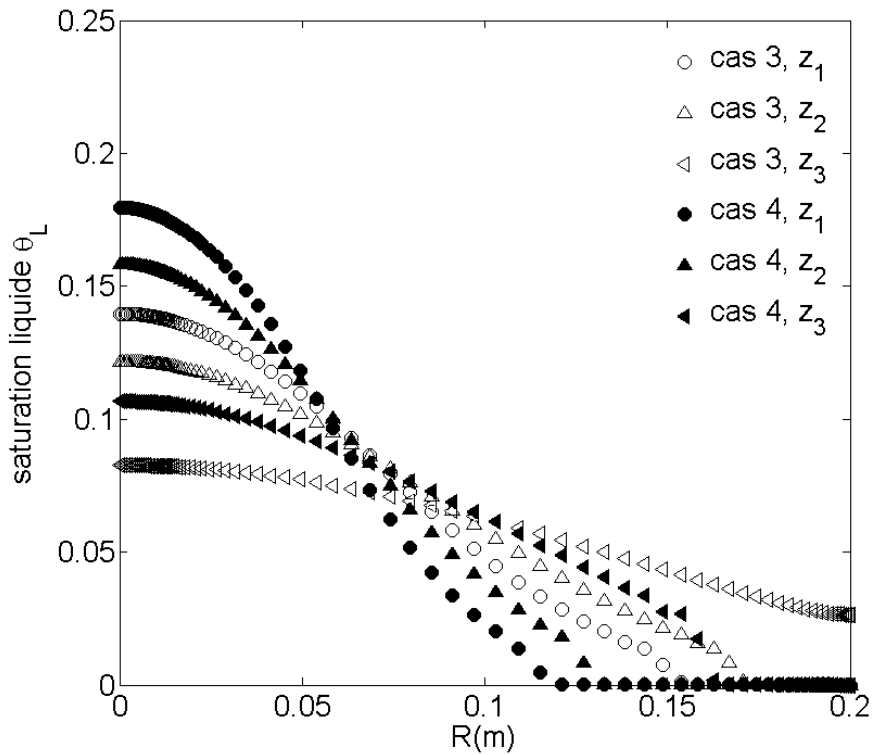


Figure 5.24 : Profils radiaux de saturation liquide, cas 3 vs cas 4

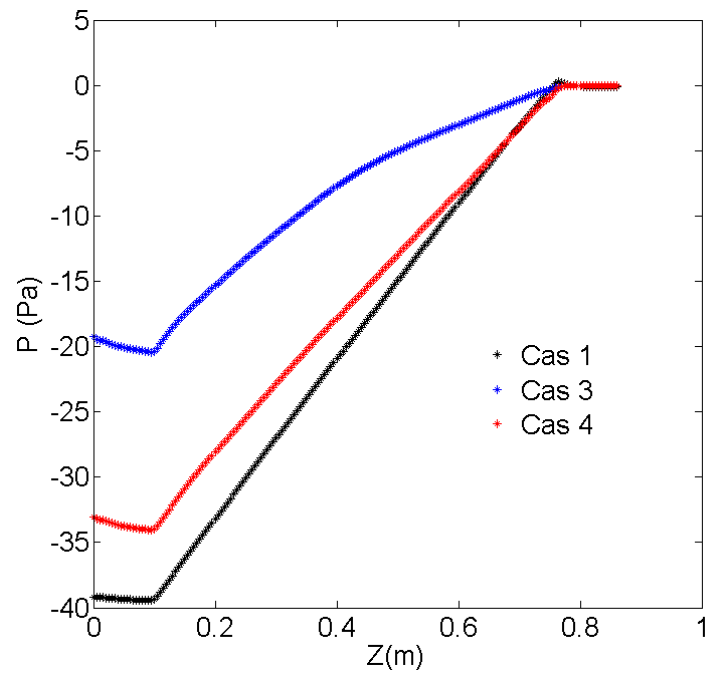


Figure 5.25 : Profils axiaux de pression statique dans le plan d'équation $r=0.1\text{m}$



Figure 5.26: Contours de pression statique (Pa) pour le cas 3

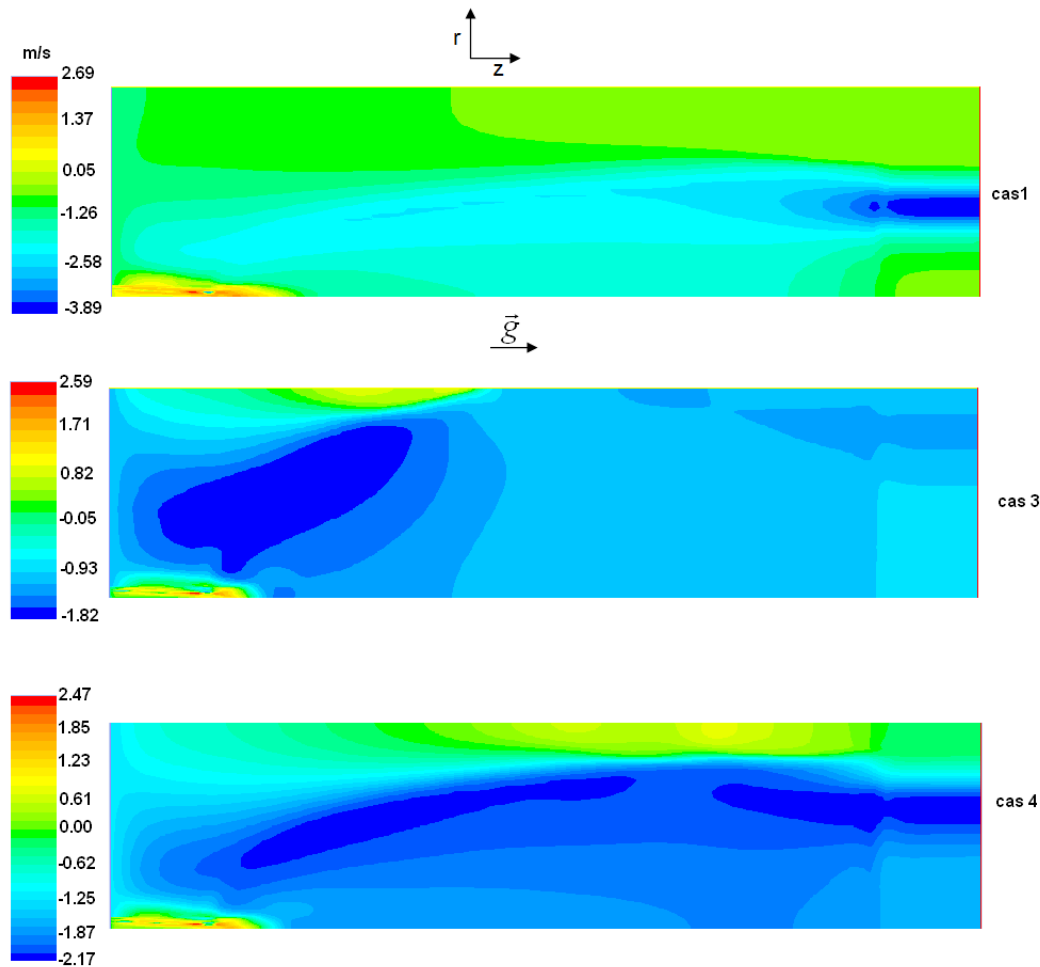


Figure 5.27 : contours de la vitesse axiale du gaz: effet du coefficient de dispersion D_r

L'effet de la variation du coefficient de dispersion D_r sur la perte de charge est également étudié. La Figure 5.25 montre l'évolution axiale de la pression statique dans trois cas de simulation : cas 1, cas 3 et cas 4. Une diminution significative de la perte de charge est obtenue en augmentant les forces de dispersion de phases. Nous calculons dans le cas 3 associé à $S=4D_r$ une perte de charge de 25 Pa/m et dans le cas 4 associé à $S=2D_r$ une valeur de 41.4 Pa/m. Force est de noter que ces pertes de charge sont calculées à r constant à une distance de 0.1m de l'axe de la colonne en faisant l'hypothèse d'un champ de pression homogène dans la direction radiale. Cette hypothèse est parfaitement vérifiée dans les cas 1 et 4 relatifs respectivement à $S=D_r$ et $S=2D_r$. Elle ne l'est cependant pas pour le cas où S est pris égal à 4 fois D_r (cas 3). Nous montrons les contours de pression statique de ce dernier cas sur la Figure 5.26 où les niveaux de pression ne sont pas parallèles dans certaines zones en haut de colonne. Dans ce dernier cas il serait opportun de considérer des moyennes de la pression statique dans la direction radiale avant d'entamer un calcul de perte de charge. Ce travail n'a pas été effectué à ce jour. Ceci dit nous ne pouvons conclure de manière définitive quant à l'effet de la dispersion sur la perte de charge rien qu'en utilisant les trois cas décrits plus haut (cas 1, cas 3 et cas 4). Il faudrait à minima effectuer des simulations à d'autres débits de gaz en considérant la même analyse de sensibilité au coefficient D_r .

La Figure 5.27 montre que l'écoulement de gaz se fait essentiellement dans la direction axiale même si des recirculations ainsi que des hétérogénéités auprès des conditions limites (condition de symétrie, entrée de gaz, entrée de liquide) sont observées.

Enfin, le résultat à mettre en avant à ce stade est que le cas associé à $S=2D_r$ est celui qui donne le meilleur ordre de grandeur du couple perte de charge/ profils de saturation par rapport à l'expérience.

Nous avons ainsi cherché à comprendre l'origine du facteur 2 entre S et D_r donnant les résultats de simulations les plus représentatifs de l'expérience. En effet, l'équation de transport que vérifie le débit de liquide $q_L = \theta_L U_{Lz}$ qui peut être déduite du modèle Eulérien est :

$$\frac{\partial q_L}{\partial z} = S \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r |U_{Lz}| \frac{\partial \theta_L}{\partial r} \right) = \underbrace{S \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial q_L}{\partial r} \right)}_{=A} - \underbrace{S \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \theta_L \frac{\partial |U_{Lz}|}{\partial r} \right)}_{=B} = A - B$$

L'équation d'advection -diffusion sur la base de laquelle nous déterminons le coefficient de dispersion D_r s'écrit, elle, simplement : $\frac{\partial q_L}{\partial z} = D_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial q_L}{\partial r} \right) = A$

Vu cette différence entre l'équation résolue numériquement et le modèle d'advection-diffusion, nous ne pouvons prédire l'écoulement en supposant une égalité entre S et D_r . Pour pousser plus loin ce raisonnement nous avons calculé l'écart entre les deux termes A et B dans l'ensemble du domaine de calcul. La Figure 5.28 montre un rapport A/B qui varie dans la direction radiale avec une moyenne de ~ 2 et ce à deux positions axiales : Z_2 et Z_3 . Ce rapport de 2 implique que pour se ramener à un modèle d'advection-diffusion de débit avec un coefficient de dispersion D_r , le coefficient S intervenant dans les expressions des forces de dispersion implémentées dans le modèle numérique doit être pris égal à $\sim 2D_r$. Ceci explique que le cas de simulation correspondant à $S=2D_r$ soit représentatif des profils de saturation expérimentaux. D'ailleurs lorsqu'on calcule le coefficient de dispersion à partir des résultats de la simulation (cas 4 correspondant à $S=2D_r$) on trouve une valeur $D_r=3.33$ mm. Cette valeur est proche de la valeur expérimentale de 3.7 mm ce qui montre que le facteur 2 entre S et D_r est pertinent.

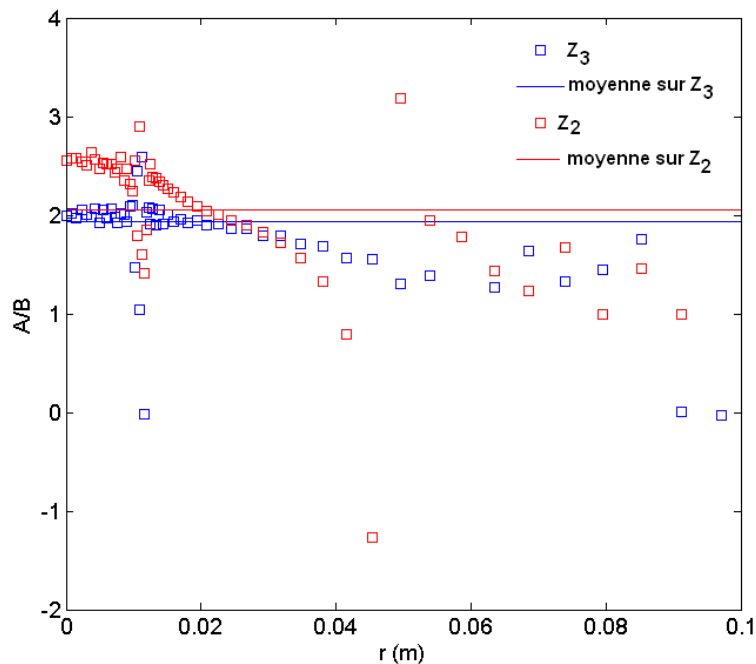


Figure 5.28 : Evolution dans la direction radiale du rapport A/B des termes de l'équation de continuité

5.3.4 EFFET DE LA FORCE DE DISPERSION DANS LA PHASE GAZ

Le cas de simulation 7 correspond à l'implémentation de la seule force de dispersion dans le liquide sous sa forme qui ne fait intervenir que le terme lié au frottement avec le solide soit : $\vec{F}_{disp,L} = \theta_L K_{LS} \vec{U}_{D,L}$. La Figure 5.29 montre que le terme relatif à la force de dispersion dans l'équation bilan de quantité de mouvement du gaz ne semble pas jouer sur la distribution finale de liquide dans le système. Le gaz, étant introduit de manière quasiment homogène dans le domaine, se propage essentiellement par convection en remplissant tout l'espace qui lui est disponible afin d'équilibrer les pertes de charges. Le terme lié à l'interaction gaz-liquide de la force de dispersion dans le liquide ne joue pas non plus sur la dispersion du liquide étant donné que son ordre de grandeur est largement inférieur à celui du terme dû au frottement avec le solide.

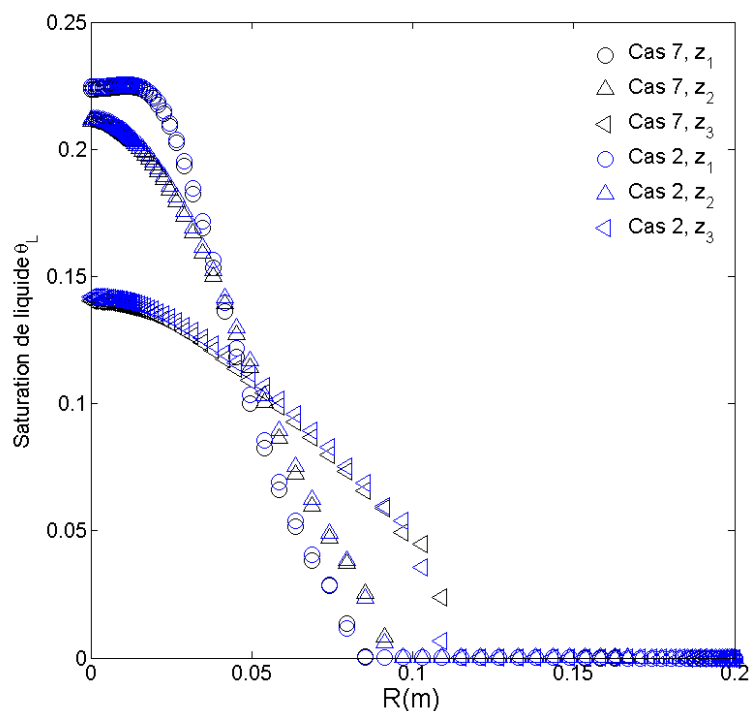


Figure 5.29 : Effet de la prise en compte ou pas de la force de dispersion dans le gaz sur les profils radiaux de saturation de liquide

5.3.5 EFFET DU TAUX DE MOUILLAGE

Dans cette partie, l'effet de l'implémentation d'un modèle de mouillage permettant de calculer la surface effective d'échange entre phases fluides est examiné. Le modèle de mouillage considéré est celui proposé par Brunazzi et Paglianti (1997) et est présenté dans le chapitre 2. La Figure 5.30 montre les profils radiaux de saturation liquide dans le cas de la prise en compte d'un modèle de mouillage partiel (cas 7) et celle où un mouillage total est considéré (cas 1 où $f_e=1$). Un écart qui s'atténue quand la distance au point injection de liquide augmente –quand Z croît– est observé sur les courbes de saturation. Cet écart est le plus marqué (12% d'écart relatif) en position Z_1 –la plus proche de l'injection de liquide– notamment à proximité de l'axe de la colonne où la saturation est la plus forte. Pour les autres positions axiales –positions Z_1 et Z_2 – l'écart entre les profils de saturation entre le cas 1 et le cas 7 n'est pas significatif. Cet écart

globalement très faible sur l'ensemble des positions axiales indique a fortiori un taux de mouillage qui reste important sur l'ensemble du domaine. Nous avons déjà fait ce constat dans le chapitre 4 dans le cas d'un écoulement homogène (Figure 4.12).

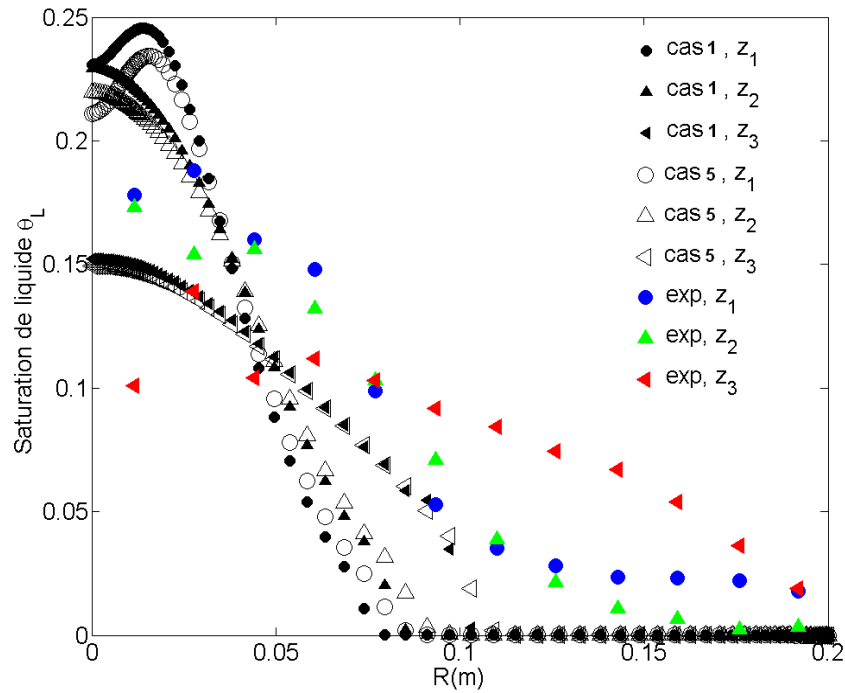


Figure 5.30 : profils radiaux de saturation de liquide, cas 1 vs cas 5, numérique vs cas expérimental à $q_L=16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_S=40\%F_C$

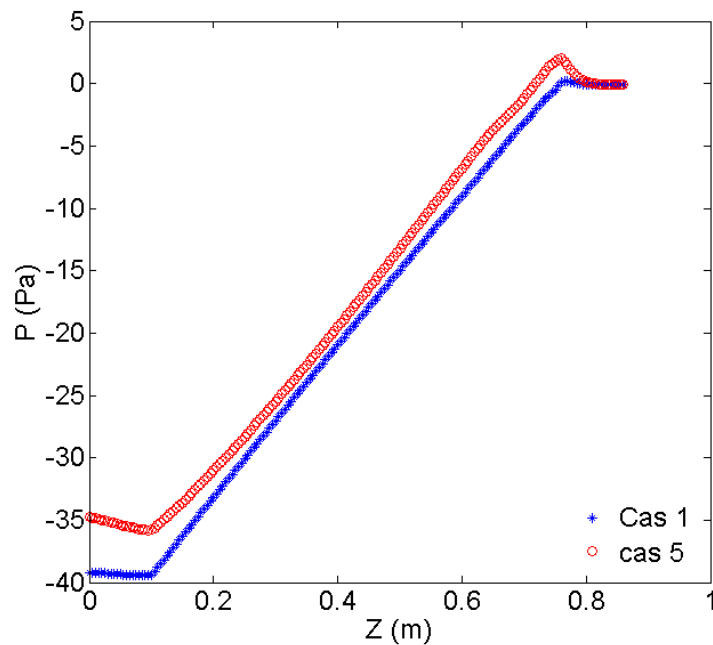


Figure 5.31 : Effet de la prise en compte du mouillage sur l'évolution axiale de la pression statique dans le plan d'équation $R=0.1 \text{ m}$

Une légère diminution de la perte de charge est obtenue dans le cas de la prise en compte d'un modèle de mouillage partiel (Figure 5.31). Cette diminution est cohérente avec des taux de mouillages légèrement inférieurs à 1 qui donnent lieu à une diminution du frottement gaz-liquide.

5.3.6 SENSIBILITÉ AU « CLIPPING »

Le cas 6 de simulation correspond aux mêmes lois de fermeture implémentées dans le cas de référence 1 mais avec une valeur seuil de saturation qui ne vaut plus 10^{-4} mais 10^{-6} . Les résultats obtenus dans le cas 6 sont les mêmes que ceux obtenus dans le cas 1 en termes de vitesses de phases, champ de pression et de fractions volumiques de phases. Le calcul ne semble donc pas sensible à la valeur de θ_{seuil} utilisée dans l'implémentation des lois de fermeture et présentée dans la section 5.1.1 du moins pour les valeurs considérées, a posteriori suffisamment faibles.

5.3.7 SENSIBILITÉ AU MAILLAGE

Afin de tester la convergence en maillage, nous avons raffiné le maillage 1 représenté par la Figure 5.1 dans la direction axiale. La taille des mailles dans cette direction est réduite de 5mm à 1mm. Dans la direction radiale, la même taille de mailles que dans le cas du maillage 1 est gardée. Le nombre de cellules est ainsi augmenté à 24 882. On dénote « maillage 2 » le maillage ainsi défini. Un cas de simulation qu'on dénote cas 8 a donc été conduit en utilisant ce maillage et en se plaçant dans les mêmes conditions de vitesses de phases que le cas 1 de référence. Ce cas est décrit dans le Tableau 5.3.

Tableau 5.3 : Description du cas 8

Cas	Conditions aux limites	description
Cas 8 (test de convergence en maillage)	<ul style="list-style-type: none"> • Maillage 2 et les conditions limites sont celles présentées sur la Figure 5.1. • Une condition de symétrie est spécifiée au niveau de la surface d'équation $r=0.2m$. • La vitesse d'entrée de l'eau $U_{Le}=1.19$ m/s (correspond à une charge liquide $q_L=16$ m³/m²h) • La vitesse d'entrée de l'air $U_{Ge}=-2$ m/s (correspond à un facteur cinétique $F_S=2.21$ Pa^{0.5} soit 60% de l'engorgement) 	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances poreuses sont codées en considérant un taux de mouillage f_e fixé à 1 (mouillage total) • Les forces de dispersion dans le gaz et le liquide sont codées en considérant une valeur de S égale à celle du coefficient de dispersion D_r calculé sur la base des données expérimentales du chapitre 3 : $S=D_r=3.7$mm. • La valeur de seuillage $\theta_{L\text{seuil}}$ est fixée à 10^{-4}.

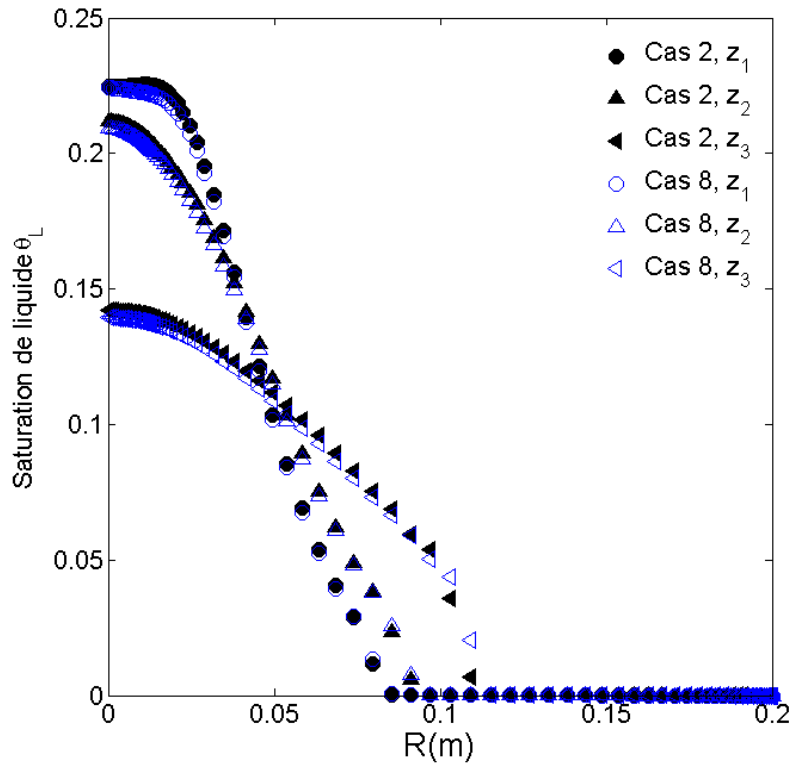


Figure 5.32 : profils radiaux de saturation de liquide

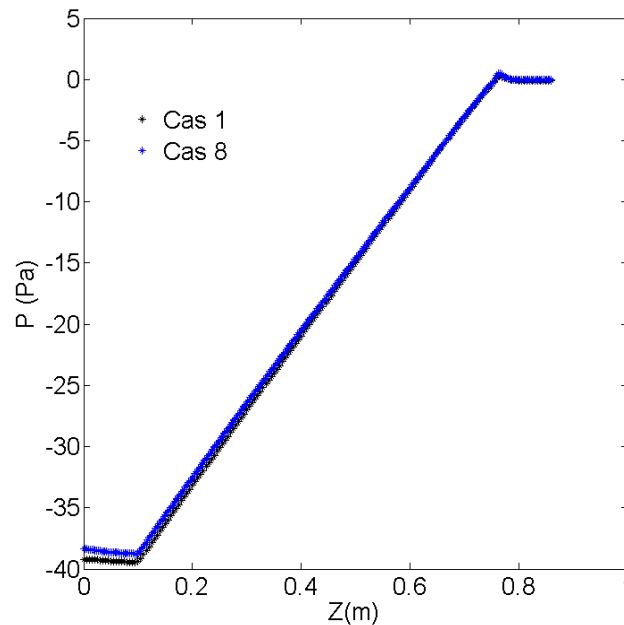


Figure 5.33 : profil axial de pression statique dans le plan d'équation $R=0.1$ m

Aucun écart significatif n'est observé sur les valeurs de saturation et de perte de charge tel que montré sur les figures Figure 5.32 et Figure 5.33. Ce résultat est également valable pour les champs de vitesses de phases. Une augmentation du nombre de cellules par un facteur 2 n'entraîne donc pas de variation de la solution. Dans un travail futur, nous envisageons de tester un maillage avec des mailles de taille plus importante que pour le maillage 1 considéré dans la plupart des cas présentés dans ce chapitre. En effet, nous avons discuté dans le chapitre 2

l'échelle de longueur macroscopique pour laquelle le modèle Eulerien à deux fluides peut être appliqué. Cette échelle correspond à celle de plusieurs pores si on assimile le garnissage à un milieu poreux. Ceci implique des mailles d'échelle centimétrique, au moins égale à celle d'un canal de garnissage. Etant donné la faible extension de la zone d'injection du liquide qui requiert des mailles resserrées, des maillages non quadrangulaires peuvent être envisagés.

5.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés à la mise en œuvre sous Fluent du modèle Euler-Euler associé à une approche « milieu poreux » décrit dans le chapitre 2 afin de simuler l'écoulement gaz-liquide à contre-courant dans un garnissage structuré de type Mellapak 250.X. Une géométrie 2D à symétrie de révolution (axisymétrique) a été retenue et l'extension longitudinale de la colonne expérimentale a été réduite de moitié (3 galettes de garnissages de longueurs 22cm chacune) afin de limiter le temps de calcul. Dans le but de reproduire les conditions d'injection de liquide de l'expérience, le liquide a été introduit dans le domaine à travers une section de rayon 13 mm située au centre de la colonne à laquelle est appliquée une condition limite de type « velocity inlet ». Le gaz sort lui par la section restante en haut de colonne via une condition limite de type « velocity inlet » sur laquelle une vitesse négative est spécifiée de manière à promouvoir un contact à contre-courant. Une condition de pression statique nulle est considérée en bas de colonne. Ce jeu de conditions aux limites s'avère être le plus adapté à ce type d'écoulement après une série des tests préliminaires. Au système d'équations du modèle Euler-Euler codé dans Fluent, nous avons associé les lois de fermeture exposées dans le chapitre 2. Ces lois incluent les résistances poreuses dues au frottement fluide-solide, la force de frottement entre fluides (ou trainée) ainsi que les forces de dispersion mécanique dans les deux phases. Nous les avons codées via des macros complémentaires dénommées « UDF » et implémentées dans le code Fluent.

Après avoir défini une géométrie permettant de simuler l'écoulement gaz-liquide à contre-courant et des codes relatifs aux lois de fermeture nous avons effectué des premières simulations de validation de l'approche « milieu poreux » considérée. Ces simulations correspondent à un écoulement monophasique de gaz à différentes vitesses de gaz en entrée. Le modèle considéré permet de prédire la bonne perte de charge dans la colonne. Un deuxième cas test nous a permis de mettre en évidence la nécessité d'implémenter les forces de dispersion mécanique afin de prédire l'étalement d'un jet de liquide dans le domaine, totalement sous-estimé dans l'état actuel du code sans terme de dispersion.

Nous avons ensuite effectué une série de simulations à différentes conditions de débits de phases en implémentant les forces de dispersion mécanique dans les bilans de quantité de mouvement des phases. Les champs de saturation de liquide montrent une dispersion dans la direction radiale du liquide dans la zone poreuse. Une comparaison des profils radiaux de saturation obtenus par simulation et expérimentalement montrent, cependant, que les forces de dispersion considérées en prenant une valeur du coefficient de dispersion égale à celle déterminée expérimentalement dans le chapitre 3, sous-estime la dispersion du liquide dans le garnissage. Des simulations menées avec différents coefficients D_r ont montré que la multiplication par 2 du coefficient de dispersion expérimental permet d'améliorer les résultats. Nous avons ainsi cherché à comprendre l'origine de ce facteur 2 en discutant la pertinence de la force de dispersion considérée. En effet, un examen attentif des bilans de quantité de mouvement et de masse montre que même si une vitesse de dérive représente bien le transport de liquide dans la direction radiale, le bilan de masse du liquide ne se résume pas complètement à une équation modèle de transport par advection et diffusion du débit q_L . La comparaison des

ordres de grandeurs des termes du modèle de transport de débit associé au modèle Eulérien et celui associé au modèle d'advection-diffusion a mis en évidence un rapport de 2. Ainsi, le coefficient S intervenant dans les expressions des forces de dispersion implémentées dans le modèle numérique doit être pris égal à $\sim 2D_r$ afin de pouvoir prédire l'écoulement de liquide. Une autre alternative consisterait à définir une nouvelle force de dispersion qui soit cohérente avec un modèle d'advection-diffusion de débit. Cette alternative n'est pas encore mise en œuvre à ce jour.

L'effet de la prise en compte d'un éventuel mouillage partiel via un modèle de mouillage ne semble pas impacter les résultats de saturation et de perte de charge de manière significative ce qui s'explique certainement par un taux de mouillage proche de 1 dans l'ensemble du domaine.

Enfin, nous avons testé la convergence en maillage et montré qu'un maillage 2 fois plus fin que celui que nous avons utilisé ne modifie pas les résultats de calcul.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Ce travail de thèse a été consacré à l'étude de la dispersion de films liquides dans des garnissages. Il s'inscrit dans une démarche plus globale de compréhension des écoulements gaz-liquide à contre-courant dans les colonnes garnies. Il s'agit ici de développement de modèles eulériens à deux fluides pour la prédiction de l'écoulement à la macro-échelle dans des colonnes à garnissages industrielles. Cet objectif, confronté à l'état de l'art de la littérature, a fixé une démarche de recherche particulière. Dans ces conditions, il s'est agi, dans un premier temps, de caractériser le comportement dispersif moyen du liquide à l'échelle d'un lit de garnissage, via des expérimentations physiques contrôlées. Cette partie constitue une part importante de ce travail. Il s'est agi ensuite de repérer, dans la littérature dédiée aux écoulements gaz-liquide dans des garnissages ou dans les lits poreux, les diverses propositions de lois de fermeture des modèles eulériens à deux fluides qui, bien que souvent empiriques, restituent une phénoménologie pertinente. Concernant les lois de fermeture sur la dispersion du liquide, peu de propositions sont avancées. Nous avons retenu en particulier celle donnée par Lappalainen *et al.* (2008) parce qu'elle a déjà démontré sa capacité à reproduire des effets dispersifs en lit fixe catalytique. La démarche de recherche s'est alors attachée à mettre en oeuvre une simulation numérique du modèle eulérien à deux fluides pour pouvoir confronter les résultats expérimentaux et les prédictions du modèle. Cette confrontation, et une discussion critique de la cohérence des données expérimentales et des propositions de lois de fermeture nous a permis de montrer comment les expériences peuvent alimenter avec succès des modèles *a priori* de dispersion du liquide. Même si les fondements théoriques de tels modèles restent à confirmer, ou si des modèles plus judicieux peuvent apparaître dans le futur, il n'en reste pas moins qu'à l'issue de ce travail nous avons pu montrer qu'un modèle de dispersion mécanique comme celui introduit par Lappalainen *et al.* (2008) permet une prédiction pertinente de la dispersion d'un liquide dans des garnissages structurés moyennant une certaine adaptation.

Au fil de cette étude plusieurs résultats importants et plusieurs idées saillantes sont apparus. Ils concernent tant l'analyse bibliographique, que les expérimentations physiques et les simulations numériques.

Une partie non négligeable de ce travail a d'abord consisté à analyser l'état de l'art portant sur l'hydrodynamique des écoulements dans les lits fixes et en particulier les colonnes à garnissage. C'est une vaste littérature relevant essentiellement du génie des procédés, s'intéressant à des garnissages structurés ou vrac, à des écoulements monophasiques ou diphasiques de type co-courant ou contre-courant, etc ... Elle touche aussi bien au dimensionnement global, qu'à la description à la micro-échelle. On y définit des procédures expérimentales de caractérisation des colonnes à garnissages utilisant des moyens variés (collecteurs ou tomographes, méthodes de traçage, méthode chimiques ...) et des schémas d'interprétation des mesures (comme l'équation d'advection-diffusion du liquide, ou les lois de type Ergun ou Darcy-Forsheimer) qui, bien que permettant de représenter la réalité, restent teintés d'empirisme. Cela rend donc difficile l'établissement d'une articulation claire avec les modèles à la macro-échelle. Un autre vaste pan de l'étude bibliographique menée a été consacré aux modèles eulériens à deux fluides. Ces modèles sont discutés aussi bien dans le champ du génie des procédés que dans celui des écoulements en milieux poreux. Il est aisé de constater que si les procédures de prise de moyenne volumique développées dans le champ des milieux poreux permettent d'identifier les termes pour lesquels des lois de fermeture doivent être développées, elles ne permettent, par contre, le passage théorique des informations de la petite échelle porale à la macro-échelle que dans des conditions hydrodynamiques très restreintes. Le caractère diphasique et inertiel des écoulements, la complexité géométrique des supports solides et les effets de mouillage rendent l'établissement théorique des lois de fermeture extrêmement complexe, voire inaccessible. C'est la raison pour laquelle nous avons inscrit notre démarche d'analyse des modèles dans une

démarche bibliographique multi-échelle soucieuse de mettre en cohérence et en relation des informations de natures diverses (empiriques, numériques ou théoriques) obtenues à différentes échelles. C'est aussi la raison pour laquelle nous avons recueilli avec beaucoup d'intérêt, et en même temps discuté de manière critique, les lois de fermeture empiriques ou semi-empiriques proposées dans la littérature, portant notamment sur les résistances poreuses, les transferts aux interfaces, le mouillage ou la dispersion de liquide.

Dans ce travail de thèse, nous avons également effectué des mesures originales de dispersion de liquide dans une colonne d'IFP Énergies nouvelles de grande taille dans laquelle nous avons testé deux garnissages, un structuré et un vrac de dernière génération (Mellapak 250.X et IMTP-40). Nous avons adapté la colonne pour réaliser une configuration d'écoulement avec une distribution en tête de colonne sous forme de jet central. Nous avons mis en œuvre une technique non intrusive de tomographie Gamma permettant de mesurer avec une très bonne résolution la rétention de liquide locale à plusieurs niveaux du lit de garnissage. Ces coupes de rétention nous ont servi de données de base pour la description de la dispersion de liquide dans le système. Ces mesures sont complétées par des mesures de perte de charge.

Les cas étudiés constituent une base de données importante et novatrice. En effet, pour les deux types de garnissage, dans le souci de couvrir une large gamme opératoire, nous avons effectué des mesures pour plusieurs débits de liquide et de gaz tant dans des régimes de faible interaction que de forte interaction entre fluides, les régimes de forte interaction, à débit de gaz important, étant peu étudiés dans la littérature. Par ailleurs nous avons travaillé avec deux systèmes gaz-liquide où la viscosité du liquide varie.

Les coupes tomographiques, qui donnent accès à la distribution de la rétention du liquide dans des sections droites de la colonne, nous ont permis dans un premier temps de caractériser de manière qualitative la dispersion de liquide dans les deux types de garnissages testés. Du point de vue qualitatif, les distributions de rétention de liquide dans les deux types de garnissages révèlent déjà des différences nettes. Au-delà de la vitesse d'étalement transversal du jet initial de liquide, qui est différente dans ces deux garnissages, mais qui reste difficile à percevoir dans ces cartes de rétention, il est clair que les propriétés d'hétérogénéité à grande et à petite échelle, et celles relatives à l'isotropie diffèrent. Des inhomogénéités à petite échelle existent pour les deux garnissages, mais leurs échelles de longueur et les niveaux de rétention du liquide associés sont différents. Ceci doit être mis en lien avec notamment la possibilité de formation de passages préférentiels, ou de ponts liquides, dans les garnissages vrac. A grande échelle, le garnissage structuré garantit une bonne homogénéité dans toute la gamme de débits explorés. Par contre de fortes hétérogénéités de grande taille ont été observées dans le garnissage vrac. Enfin, si, dans le cas du garnissage vrac, la distribution transverse de liquide paraît isotrope dès l'entrée dans le lit de garnissage, dans le cas du garnissage structuré nous avons, par contre, mis en évidence une anisotropie de la distribution du liquide dans la galette de garnissage située immédiatement en dessous de l'injection, anisotropie qui est liée à la disposition géométrique des plaques formant le garnissage. Cette anisotropie disparaît cependant rapidement après la traversée de quelques galettes.

Nous avons ensuite développé un traitement des données pour pouvoir d'abord comparer nos résultats à ceux de la littérature et pour donner ensuite une estimation quantifiée de la dispersion du liquide.

Nous avons procédé à des prises de moyenne de rétention de liquide à partir des cartes de rétention locales et ce de manière systématique pour l'ensemble des conditions opératoires et des garnissages testés. Par une moyenne selon la direction azimutale nous avons extrait des profils radiaux de rétention du liquide. Par une moyenne sur toute la section nous avons défini la rétention de liquide globale. Nous avons en particulier examiné la rétention globale du liquide en section basse de la colonne où la distribution de liquide est la plus homogène. Cela nous a permis

de comparer nos résultats à ceux de la littérature qui sont issus d'expériences en écoulement avec injection homogène des deux fluides. Les corrélations données pour les deux garnissages et reliant la rétention au débit de liquide et à la viscosité de ce dernier, sont en bon accord avec la littérature. De la même façon, la confrontation entre nos mesures de perte de charge et celles disponibles dans diverses études montre que celle-ci dépend peu de la manière dont le liquide est injecté dans la colonne de garnissage.

Cette analyse globale a permis de montrer que les écoulements que nous avons étudiés ne présentent pas de biais particulier par rapport à la connaissance générale dont on dispose les concernant.

Nous avons donc abordé avec confiance l'étude de la dispersion du liquide dans ces colonnes. Pour cela, nous avons adopté une technique d'analyse répandue dans le domaine d'étude. Cette technique consiste à estimer la distribution radiale de débit du liquide, et à comparer cette distribution à celle prédite si l'on suppose que le transport de débit de liquide dans un garnissage est assuré via un modèle d'advection-diffusion. Ce modèle fait intervenir un paramètre hydrodynamique représentatif du phénomène de dispersion qui est le "coefficient de dispersion" D_r . La comparaison entre les mesures et les prévisions du modèle permet de déterminer la valeur de D_r qui est représentative des expériences. Nous n'avons pas mesuré les débits locaux de liquide, mais les rétentions de liquide. Nous avons donc, tout d'abord, transformé nos mesures de rétention en mesures de débit en utilisant à l'échelle locale la relation entre rétention globale et débit global établie dans la section où l'écoulement est le plus homogène possible. Cette transformation a été validée par un examen de la condition de conservation du débit de liquide aux différentes sections.

Pour le garnissage structuré Mellapak 250.X, nous avons pu mettre en évidence la validité du modèle d'advection-diffusion pour représenter l'ensemble des essais réalisés. Sur cette base, un coefficient de dispersion unique a été mis en évidence, qui permet de reproduire les mesures pour chaque couple de débits de gaz et de liquide et chaque couple de fluides. C'est un résultat fort de cette étude que celui de savoir que le coefficient de dispersion du liquide ne dépend pas des conditions de débits des phases et des couples de fluides utilisés. Ceci indique que la dispersion mécanique dans Mellapak 250.X est contrôlée par la géométrie du garnissage. Ces résultats expérimentaux sur le garnissage Mellapak 250.X ont fait l'objet d'une publication parue en 2012 dans la revue *Chemical Engineering Science*.

Dans le cas du garnissage vrac IMTP-40, nous avons observé des profils de rétention moyenne de liquide assez complexes. Et il est d'ailleurs impossible de représenter l'évolution longitudinale de ces profils en utilisant un unique coefficient de dispersion dans le modèle d'advection-diffusion du débit. Nous avons cependant mis en évidence la possibilité de représenter la dispersion du liquide en introduisant deux coefficients de dispersion distincts associés à deux zones du lit de garnissage. Ces deux zones, la zone haute et la zone basse, sont essentiellement distinctes de par les valeurs des vitesses superficielles du liquide. En zone haute, le jet étant concentré, cette vitesse est plus élevée qu'en zone basse où ce jet s'évase. Le coefficient de dispersion en zone haute est aussi supérieur à celui en zone basse. Il nous reste à analyser le lien précis entre coefficient de dispersion et débit local de liquide pour tenter d'expliquer plus clairement cette évolution du coefficient de dispersion le long de l'axe de la colonne. Quelle que soit la zone utilisée pour sa mesure, le coefficient de dispersion augmente avec le débit de gaz et avec le débit de liquide ce qui indique des mécanismes de dispersion qui ne sont pas dus simplement à la géométrie du garnissage mais incluent en outre du transport lié à l'hydrodynamique diphasique. Ce comportement change radicalement par rapport au cas du Mellapak 250.X.

Le deuxième volet de cette étude est le développement et la mise en œuvre du modèle numérique sous Fluent. Dans le chapitre 2 de ce manuscrit, nous avons présenté le modèle Euler-Euler de l'écoulement gaz-liquide dans un garnissage associé à une description du garnissage par un milieu poreux équivalent. Cette méthode de modélisation à l'échelle macroscopique consiste à calculer des grandeurs moyennées dans des « volumes de contrôle » ayant à la fois une dimension supérieure à celle d'un pore et inférieure à celle d'un lit de garnissages. Nous nous sommes intéressés aux bases théoriques de cette méthode de manière à mettre en évidence les différents termes nécessitant une fermeture dans les bilans de quantité de mouvement des phases. Le processus d'homogénéisation des équations de Navier-Stokes à l'échelle d'un pore afin de remonter à un système d'équations macroscopiques permet de mettre en évidence, outre les forces de frottements à la surface du solide et aux interfaces, un terme de dispersion faisant intervenir des fluctuations spatiales de vitesse à la micro-échelle. La difficulté que pose la modélisation des écoulements gaz-liquide dans des garnissages réside essentiellement dans le choix des lois de fermeture. Si de bonnes bases sont disponibles dans la littérature pour la fermeture des termes de frottement, la dispersion reste très peu abordée et les modèles s'y rapportant restent heuristiques.

Nous avons ainsi passé en revue et discuté les principales lois de fermeture propres à la dispersion et avons retenu celle de Lappalainen *et al.* (2008), faisant appel à un coefficient de dispersion similaire à celui que nous avons calculé expérimentalement. Pour modéliser les frottements entre les fluides et le solide formant le garnissage ainsi que ceux entre le gaz et le liquide dans un garnissage structuré, nous avons fait le choix du modèle mécanistique de Iliuta *et al.* (2004) adaptant le formalisme de référence d'Ergun à des géométries structurées. Le chapitre 2 résume de ce fait les choix stratégiques de modélisation de l'écoulement pour le cas particulier du garnissage structuré M250.X.

Une fois, le formalisme de modélisation défini dans le chapitre 2, nous avons proposé une discussion des différentes lois de fermeture retenues afin d'en dégager le sens physique et les possibles extensions à une gamme plus large de régimes d'écoulement. Dans le cas des lois de frottement, nous avons proposé une correction du modèle tiré des travaux de Iliuta *et al.* (2004) au-delà d'une valeur de débit de gaz correspondant au point de charge. Cette correction est fondée sur l'idée d'une augmentation de l'interaction entre le gaz et le liquide au-delà du point de charge qui induit un surplus de perte de pression qui varie avec la vitesse relative des phases selon une loi puissance avec un exposant proche de 2. Une correction de la loi de frottement interfacial est donc proposée en se basant sur les mesures de perte de charge acquises dans le cas du Mellapak 250.X. Le modèle a été validé sur la base de mesures de référence tirées de la littérature pour le même garnissage. Le modèle défini permet bien de prédire l'augmentation de la perte de charge au-delà du point de charge. Il reste toutefois à valider sur une plus large gamme de données expérimentales de référence relatives à des garnissages structurés. Une analyse similaire pourrait être menée pour les garnissages vrac.

Dans un deuxième temps, la proposition de modélisation de la force de dispersion donnée par Lappalainen *et al.* (2008) est discutée. Il s'est agi de faire le lien entre d'une part les principes de la physique (bilans de masse et de quantité de mouvement) munis du modèle de force dispersive de Lappalainen *et al.* (2008) et d'autre part le modèle d'advection-diffusion du débit de liquide, pour examiner sous quelles conditions on peut identifier le paramètre intervenant dans la loi de fermeture de la force de dispersion et le coefficient de dispersion déterminé via les mesures par tomographie Gamma. La cohérence du modèle de dispersion et des données expérimentales est donc mise en évidence et discutée.

Le chapitre 4 se positionne ainsi dans une analyse critique qui vise à démontrer la cohérence des propositions de modélisation adoptées pour la simulation de l'écoulement.

Dans le chapitre 5, nous avons mis en œuvre le modèle Euler-Euler incluant les lois de fermeture retenues pour simuler l'écoulement gaz-liquide à contre-courant dans la colonne à garnissage munie de Mellapak 250.X et utilisée pour réaliser les essais de tomographie Gamma. Afin de simplifier le problème, nous avons considéré un domaine bidimensionnel axisymétrique de dimension longitudinale égale à la moitié de celle de la colonne réelle. Un important travail exploratoire a été mené afin de déterminer le jeu de conditions aux limites propre à assurer un écoulement à contre-courant qui soit le moins perturbé possible par les entrées et sorties de phases. La deuxième difficulté de mise en place du calcul se rapporte à l'implémentation des lois de fermeture via les macros spécifiques du code Fluent. Nous avons fourni en annexes un exemple générique des UDFs développées dans le but de faciliter les éventuelles reprises postérieures de ce travail dont certaines sont d'ores et déjà prévues à IFPEN. Cet effort d'implémentation du modèle a porté ses fruits et des simulations de l'écoulement gaz-liquide à différentes conditions de débits de phases ont été entreprises.

Nous avons pu confirmer par les simulations numériques, la nécessité d'un terme relatif à une force de dispersion afin de prédire l'étalement d'un jet de liquide dans un garnissage. Ce terme dispersif introduit un préfacteur S via la vitesse de dérive du liquide. Ce facteur S a été identifié dans la littérature au coefficient D_r du modèle de transport de débit utilisé pour décrire les données expérimentales. Cependant, nos simulations montrent que la définition d'une vitesse de dérive sur la base du coefficient de dispersion tiré des expériences D_r ne permet pas de prédire les évolutions radiale et axiale de la saturation de liquide dans le garnissage. Nous avons réussi à expliquer ce décalage entre le modèle de force dispersive et celui de transport du débit liquide. Il apparaît clairement que le modèle de force dispersive proposé ne peut être cohérent avec le modèle de transport de débit utilisé pour décrire les données expérimentales (basé sur une équation d'advection-diffusion) que si l'on prend un facteur S égal à D_r multiplié par un facteur proche de 2. Les résultats obtenus en effectuant cette correction permettent de prédire le bon ordre de grandeur de la perte de charge ainsi que les valeurs locales de la saturation dans la direction radiale. Cependant, le modèle sous-estime encore un peu l'étalement du liquide dans la direction radiale pour cette valeur de D_r . Ceci souligne la nécessité de pousser davantage la réflexion sur la loi de fermeture permettant de tenir compte de la force de dispersion : une première perspective consisterait à modéliser la force de dispersion sous une forme plus générique incluant les effets du gradient de la vitesse de liquide. Une autre alternative, qui nous paraît intéressante, consisterait à tester d'autres propositions de lois de fermeture disponibles dans la littérature dont celle de Liu et Long (2000) que nous avons identifiée comme potentiellement intéressante. Les simulations 2D sont également à étendre à des régimes de fortes interactions entre le gaz et le liquide via le recours au modèle à seuil développé dans le cadre de cette étude pour le transfert interfacial de quantité de mouvement.

A l'issue de ce travail, de nombreuses perspectives peuvent être proposées.

Dans la continuité de ce travail de modélisation à la macro-échelle, des simulations dans une géométrie 3D plus représentative de la colonne à garnissage devront être entreprises. Une telle étude permettrait de prendre en compte l'anisotropie du garnissage structuré Mellapak 250.X (via des tenseurs de résistance anisotropes) qui doit jouer un rôle au moins dans les premières galettes de garnissage. A ce titre les expériences menées sur une colonne alimentée en liquide sur la moitié de sa section supérieure (Annexe 10 du chapitre 3) pourraient constituer une base de référence. Une simulation 3D permettrait également d'évaluer l'influence de distributions de liquide et de gaz en entrées et en sorties de la colonne plus réalistes que celles retenues dans les cas 2D.

Il serait intéressant de tester le modèle eulérien à deux fluides en garnissage vrac. La dispersion du liquide étant sensible à l'hydrodynamique, puisque D_r dépend des débits des deux phases, on pourrait tout d'abord évaluer la loi d'échelle donnant un coefficient local D_r en fonction de la fraction volumique et des vitesses locales. On peut s'attendre à devoir simuler en garnissage

vrac une hydrodynamique plus complexe; cela devrait permettre de mieux évaluer la pertinence des modèles de force dispersive.

L'une des perspectives également très intéressante du travail de mise en œuvre du modèle Eulérien à deux fluides consiste en la possibilité d'étudier l'impact du changement de la gravité sur l'écoulement avec comme application les cas de marinisation des procédés de traitement de gaz sur barge flottante dont l'importance est croissante avec les applications GNL offshore.

REFERENCES

- Abu-Zahra M., Schneiders L.H.J., Niederer J.P.M., Feron P.H.M., Versteeg G.F., 2007. CO₂ capture from power plants Part I. A parametric study of the technical performance based on monoethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 1, pp. 37-46.
- ADEME : Le captage, transport, stockage géologique et la valorisation du CO₂, feuille de route stratégique, 2011. <http://www2.ademe.fr/>.
- Al-Dahhan M.H., Khadilkar M.R., Wu Y., Dudukovic M.P., 1998. Prediction of pressure drop and liquid hold-up in high pressure trickle-bed reactors. *Ind. Eng. Chem. Res*, vol. 37, pp. 793-798.
- Alix P., Raynal L., 2008. Liquid distribution and liquid hold-up in modern high capacity packings. *Chem. Eng. Res. and Design*, vol. 86, pp. 585-591.
- Alopaeus V., Hynynen K., Aittamaa, Manninen M., 2006. Modeling of gas-Liquid packed-bed reactors with momentum equations and local interaction closures. *Ind. Eng. Chem. Res*, vol. 45, pp. 8189-8198.
- Aroonwilas A., Chakma A., Tontiwachwuthikul P., Veawab A., 2003. Mathematical modelling of mass-transfer and hydrodynamics in CO₂ absorbers packed with structured packings. *Chem. Eng. Sci*, vol. 58, pp. 4037-4053.
- Ataki A., Bart H., 2006. Experimental and CFD simulation study of the wetting of a structured packing element with liquids. *Chem. Eng. Technol*, vol. 29, pp. 336-347.
- Atta A., Roy S., Nigam K.D.P., 2007. Investigation of liquid maldistribution in trickle-bed reactors using porous media concept in CFD. *Chem. Eng. Sci*, vol. 62, pp. 7033-7044.
- Attou A., Boyer C., 1999. Revue des aspects hydrodynamiques des réacteurs catalytiques gaz-liquide-solide à lit fixe arrosé. *Oil & Gas Science and Technology*, vol. 54, pp. 29-66.
- Attou A., Boyer C., Ferschneider G., 1999. Modelling of the hydrodynamics of the cocurrent gas-liquid trickle flow through a trickle-bed reactor. *Chem. Eng. Sci*, vol. 54, pp. 785-802.
- Attou A., Ferschneider G., 1999. A two-fluid hydrodynamic model for the transition between trickle and pulse flow in a cocurrent gas-liquid packed-bed reactor. *Chem. Eng. Sci*, vol. 55, pp. 491-511.
- Baussaron L., 2005. Etude du mouillage partiel et du transfert de matière liquide-solide en réacteur à lit fixe arrosé. Thèse INPT, Université de Toulouse.
- Bemer G.G., Zuiderweg F. J., 1978. Radial liquid spread and maldistribution in packed columns under different wetting conditions. *Chem. Eng. Sci*, vol. 33, pp. 1637-1643.
- Besnaci C., 2012. Mélange induit par un écoulement à travers un réseau aléatoire de sphères. *Thèse INPT, Université de Toulouse*.
- Billet R., 1995. Packed Towers, VCH Eds. Weinheim.
- Billet R., Schultes M., 1991. Modelling of pressure drop in packed columns. *Chem. Eng. Technol*, vol. 14, pp. 89-95.

- Bonometti T., Magnaudet J., 2007. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. Validation and application to bubble dynamics. *International Journal Of Multiphase Flow*, vol. 33, pp. 109-133.
- Boyer C., Koudil A., Chen P., Dudukovic, 2005. Study of liquid spreading from a point source in a trickle bed via gamma-ray tomography and CFD simulation. *Chem. Eng. Sci*, vol. 60, pp. 6279-6288.
- Boyer C., Fanget B., 2002. Measurement of liquid flow distribution in trickle bed reactor of large diameter with a new gamma-ray tomographic system. *Chem. Eng. Sci*, vol. 57, pp. 1079-1089.
- Brooks R.A., Di Chiro G., 1976. Principles of computed assisted tomography. *Phys. Med. Biol*, vol. 22, pp. 689-732.
- Brunazzi E., Paglianti A., 1997. Mechanistic Pressure Drop Model for Columns Containing Structured Packings. *AIChE journal*, vol. 43, pp. 317-327.
- Brunazzi E., Paglianti A., Spiegel L., Tolaini F., 2002. Hydrodynamics of gas-liquid columns equipped with Mellapak Plus packing. International conference on Distillation and Absorption.
- Charpentier J.C., Favier M., 1975. Some Liquid Holdup Experimental Data in Trickle-Bed Reactors for Foaming and Nonfoaming Hydrocarbons. *AIChE J.*, vol. 21, pp. 1213-1218.
- Charpentier J.C., 1975. Lavage des gaz par un solvant sélectif. *Conception des laveurs, Pollution Atmosphérique*, vol. 66, pp. 109-124.
- Charpentier J.C., 1981. Mass transfer rates in gas-liquid absorbers and reactors. *Advances in Chemical Engineering*, vol. 11.
- Charpentier J.C., Prost C., Le Goff P., 1968. Ecoulement ruisselant de liquide dans une colonne à garnissage : détermination ds vitesses et des débits relatifs des films, des filets et des gouttes. *Chimie Et Industrie*, vol. 100, N°5.
- Charpentier J.C., Prost C. et Le Goff P., 1969. Chute de pression pour des écoulements à courant dans les colonnes à garnissage arrosé: comparaison avec le garnissage noyé. *Chem. Eng. Sci*. vol. 24, pp. 1777- 1794.
- Chih-Hao H., Meng-Hui L., 1997. Densities of Aqueous Blended Amines. *J. Chem. Eng*, vol. 42, pp. 502-507.
- Cihla Z., Schmidt O., 1958. Studies of the behaviour of liquids when freely trickling over the packing of cylindrical tower. *Coll Czech Chem Commun*, vol. 23, pp. 569-577.
- Danckwerts P. V., 1970. *Gaz-Liquid Reaction*. McGraw-Hill New York.
- Documentation technique de Koch-Glitsch : IMTP High Performance Packing. <http://www.koch-glitsch.com/Document%20Library/KGIMTP.pdf>
- Du Plessis J.P., 1994. Analytical quantification of coefficients in the Ergun equation for fluid friction in a packed bed. *Transport in porous media*, vol. 16, pp. 189-207.
- Edwards D.P., Krishnamurthy K.R., Potthof R.W., 1999. Development of improved method to quantify maldistribution and its effect on structured packing column performance. *ICHEME*, vol. 77, Part A, pp. 656-662.
- Ergun S., 1952. Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, vol. 48, n°2, pp. 89-94.

- Fair J.R., Bravo J.L., 1990. Distillation columns containing structured packing. *Chemical Engineering Progress*, vol. 86(1), pp. 19-29.
- Fourati M., Roig V., Raynal L., 2012. Experimental study of liquid spreading in structured packings. *Chemical Engineering Science*, vol. 80, pp. 1-15.
- Gray W.G., 1975. A derivation of the equations for multiphase transport. *Chemical Engineering Science*, vol. 30, pp. 229-233.
- Grosser K., Carbonell R.G., Sundaresan S., 1988. Onset of pulsing in two-phase cocurrent downflow through a packed bed. *AIChE Journal*, vol. 34, n° 11, pp. 1850-1860.
- Grosser K., Carbonell R.G., Sundaresan S., 1988. Onset of pulsing in two-phase cocurrent downflow through a packed bed. *AIChE Journal*, vol. 34, n° 11, pp. 1850-1860.
- Gunjal P.R., Ranade V.V., Chaudhari R.V., 2003. Liquid distribution and RTD in trickle bed reactors: experiments and CFD simulations. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 81, pp. 821-830.
- Haroun Y., 2008. Etude du transfert de masse réactif gaz-liquide le long de plans corrugués par simulation numérique avec suivi d'interface. *Thèse INPT, Université de Toulouse*.
- Haroun Y., Legendre D., Raynal L., 2010. Direct numerical simulation of reactive absorption in gas-liquid flow on structured packing using interface capturing method. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 65, pp. 351-356.
- Harter I., Boyer C., Raynal L., Ferschneider G. and Gauthier T., 2001. Flow Distribution Studies applied to Deep Hydro-Desulfurization. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol.40, pp. 5262-5267.
- Henriques De Brito M., Von Stockar U., Bangerter AM., Bomio P., Laso M., 1994. Effective mass transfer area in a pilot plant column equipped with structured packing and with ceramic rings. *Ind.Eng. Chem. Res.*, vol. 33, pp. 647-656.
- Higbie R., 1935. The rate of absorption of a pure gaz into a still liquid during short periods of exposure. *Trans. A.I.Ch.E.*, vol. 35.
- Hirt C.W. and Nichols B. D., 1981. Volume of Fluid method for the dynamics of free boundaries. *J.Comp.Phys*, vol. 39, pp. 201-225.
- Hoek P.J., Wesselingh J.A., Zuiderweg F.J., 1986. Small scale and large scale liquid maldistribution in packed columns. *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 64, pp. 431-449.
- Holub R.A., Dudukovic M. P., Ramachandran P. A., 1992. A phenomenological model for pressure drop, liquid hold-up and flow regime transition in gas-liquid trickle flow. *Chemical Engineering Science*, vol. 47, pp. 2343-2348.
- Holub R.A., Dudukovic M.P., Ramachandran P.A., 1993. Pressure drop, Liquid holdup and flow regime transition in trickle flow, *AIChE Journal*, vol. 39, n° 2, pp. 302-321.
- Horgue P., 2012. Modélisation multi-échelle d'un écoulement gaz-liquide dans un lit fixe de particules. *Thèse INPT, Université de Toulouse*.
- Howes F.A., Whitaker S., 1985. The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering science*, vol. 40, pp. 1387-1392.
- Iliuta I. and Larachi F., 1999. The generalized slit model: pressure gradient, liquid holdup and wetting efficiency in gas-liquid trickle flow. *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 54, p. 5039.

- Iliuta I. and Larachi F., 2001. Mechanistic model for structured-packing containing columns: irrigated pressure drop, liquid hold-up and packing fractional wetted area. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 40.
- Iliuta I., Larachi F., Al-Dahhan M.H., 2000. Double-slit model for partially wetted trickle flow hydrodynamics, *AIChE Journal*, vol. 46, n° 3, pp. 597-609.
- Iliuta I., Petre C.F., Larachi F., 2004. Hydrodynamic continuum model for two-phase flow structured-packing-containing columns, *Chemical Engineering Science*, vol. 59, pp. 879 – 888.
- Iliuta I. and Larachi F., 2005. Modelling the Hydrodynamics of Gas-Liquid Packed Beds via Slit Models: A Review. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, vol. 3, Review 4.
- Jiang Y., Khadilkar M.R., Al-Dahhan M.H., Dudukovic M.P., 2002. CFD of Multiphase Flow in Packed- bed Reactors: I. *k*-Fluid Modeling Issues. *AIChE Journal*, vol. 48, n° 4, pp. 701-715.
- Knudsen J., Jensen J.N, Vilhelmsen P.J, Biede O., 2009. Experience with CO₂ capture from coal flue gas in pilot-scale: testing of different amine solvents. *Energy Procedia*, pp. 783-790.
- Lakota A., Levec J., Carbonell R.G., 2002. Hydrodynamics of trickling flow in packed beds: relative permeability concept. *AIChE journal*, vol. 48, pp. 731-738.
- Lappalainen K., Alopaeus V., Manninen M., Aittamaa J., 2008. Improved hydrodynamic model for wetting efficiency, pressure drop, and liquid hold-up in trickle bed reactors. *Ind. Eng. Chem. Res*, vol. 47, pp. 8436-8444.
- Lappalainen K., 2009. Modelling of gas-Liquid flow in trickle-bed reactors. *Ph.D. thesis, Helsinki University of Technology*.
- Lappalainen K., Manninen M., Alopaeus V., 2009. CFD modelling of radial spreading of flow in trickle-bed reactors due to mechanical and capillary dispersion. *Chem. Eng. Sci*, vol. 64, pp. 207-218.
- Laurent A., Charpentier J.C., 1974. Aires interfaciales et coefficients de transfert de matière dans les différents types d'absorbeur et de réacteurs gaz-liquide. *The Chem. Eng. J.*, vol. 8, pp. 85-101.
- Lecomte F., Broutin P., Lebas E., 2010. CO₂ capture, technologies to reduce greenhouse gas emissions. *Editions TECHNIP*.
- Lemoine B., 1995. Absorption de gaz acides par des solutions aqueuses de MDEA. *Thèse de l'École des Mines de Paris*.
- Lespinnasse B., 1962. Recherches sur le fonctionnement des colonnes à garnissage pour l'absorption gaz-liquide. Deuxième partie : Etude du cheminement du liquide à travers le garnissage d'une colonne d'absorption gaz-liquide. *Rev. Inst. Fr. Pet.*, vol. XVII, n°11, pp. 21-40.
- Lespinnasse B., Le Goff P., 1962 a. Recherches sur le fonctionnement des colonnes à garnissage pour absorption gaz-liquide. Première partie : Description de l'appareil et résultats concernant la perte de charge, la retenue de colonne et l'efficacité d'un garnissage d'anneaux Raschig. *Rev. Inst. Fr. Pet.*, XVII (10), pp.1-20.
- Lewis W.K. and Whitman G., 1924. Principles of gas absorption. *Ind. Eng. Chem.*, vol. 16, pp. 1215-1220.

- Linek V., Moucha T., Rejl F.J., 2001. Hydraulic and mass transfer characteristics of packings for absorption and distillation columns. RAUSCHERT-METALL-SATTEL-RINGS. *Trans IChemE*, Vol. 79, pp. 725-732.
- Liu S., 1999. A continuum approach to multiphase flows in porous media. *Journal of Porous Media*, vol. 2, pp. 295-308.
- Liu S., Long J., 2000. Gas-liquid countercurrent flows through packed towers. *Journal of Porous Media*, vol. 3, pp. 99-113.
- Liu S., 2001. A continuum model for gas-liquid flow in packed towers. *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp. 5945-5953.
- Lutran P.G., Ng K.M., Delikat E.P., 1991. Liquid distribution in trickle beds. An experimental study using computer-assisted tomography. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 30, pp.1270-1280.
- Ma'mum S., Svendsen H.F., Hoff K.A., Juliussen O., 2007. Selection of new absorbents for carbon dioxide capture. *Energy. Convers. Manage*, vol. 48, pp.251- 258.
- Macdonald I.F., El-Sayed M.S., Mow K., Dullien F.A.L., 1979. Flow through Porous Media: the Ergun Equation Revisited. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, Vol. 18, n° 3, pp. 199-208.
- Mahr B. and Mewes D., 2008. Two-phase flow in structured packings: modeling and calculation on a macroscopic scale. *AIChE journal*, vol. 54, pp. 614-626.
- Marchot P., Toye D., Crine M., Pelsser A.M., L'Homme G., 1999. Investigation of liquid maldistribution in packed columns by X-ray tomography. *Trans IChemE*, vol. 77, pp. 511-518.
- Marchot P., Toye D., Pelsser A-M., Crine M., L'Homme G., Olujic Z., 2001. Liquid Distribution Images on Structured Packing by X-Ray Computed Tomography. *AIChE journal*, vol. 47.
- Mewes D., Loser T., Millies M., 1999. Modelling of two-phase flow in packings and monoliths, *Chemical Engineering Science*, vol. 54, pp. 4729-4747.
- Mohamed Ali A., Janses P., Olujic Z., 2003. Experimental characterisation and CFD simulation of gas distribution performance of liquid redistributors and collectors in packed columns. *Chem. Eng. Res. Des*, vol. 81, pp. 108-115.
- Nusselt W., 1916. Die Oberflächenkondensation des Wasserdampfes. *Ver.Deut.Ingr.*, vol. 60, p. 549.
- Olujic Z., Kamerbeek A.B., De Graauw J., 1999. A corrugation geometry based model for efficiency of structured distillation packing. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 38, pp. 663-695.
- Olujic Z., Seibert A.F., Fair J.R., 2000. Influence of corrugation geometry on the performance of structured packings: an experimental study. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 39, pp. 335-342.
- Olujic Z., Van Baak R., Haaring J., 2006. Liquid distribution behaviour of conventional and high capacity structured packings. *IChemE*. (Symposium Series NO. 152).
- Onda K., Takeuchi H., Maeda Y., Takeuchi N., 1972. Liquid distribution in packed column. *Chem. Eng. Sci*, vol. 28, pp. 1677-1683.

- Petre C.F., Larachi F., Iliuta L., Gradjean B.P.A., 2003. Pressure drop through structured packings: Breakdown into the contributing mechanisms by CFD modeling. *Chemical Engineering Science*, vol. 58, pp. 163-177.
- Porter K.E., Jones M.C., 1963. A theoretical prediction of liquid distribution in a packed column with wall effects. *Trans. Inst. Chem. Eng*, vol. 41, pp. 240–247.
- Prieur Du Plessis J., 1994. Analytical quantification of coefficients in the Ergun equation for fluid friction in a packed bed. *Transport in porous media*, vol. 16, pp. 189-207.
- Raynal L., Boyer C., Ballaguet J.P., 2004. Liquid holdup and pressure drop determination in structured packing with CFD simulations. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 82, pp. 871–879.
- Raynal L. and Royon-Lebeaud A., 2007. A multi-scale approach for CFD calculations of gas–liquid flow within large size column equipped with structured packing. *Chem. Eng. Sci*, vol. 62, pp. 7196-7204.
- Raynal L., Bouillon P.A., Gomez, A., Broutin P., 2011. From MEA to demixing solvents and future steps, a roadmap for lowering the cost of post-combustion carbon capture. *Chemical Engineering Journal*, vol. 171, pp. 742-752.
- Raynal L., Gomez A., Caillat B., Haroun Y., 2012. CO₂ capture cost-reduction: use of a multiscale simulations strategy for a multiscale issue. *Accepted in Oil & Gas Science and Technology*.
- Reinecke N., Mewes D., 1997. Investigation of the Two-Phase Flow in Trickle-Bed Reactors Using Capacitance Tomography. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 52, pp. 2111-2127.
- Rhudy R., Black S., 2007. Chilled Ammonia Process – update, 10th meeting of the IEA International Post-Combustion CO₂ Capture Network, Lyon, France.
- Roustan M., 2003. Transferts Gaz-Liquide dans les Procédés de traitement des eaux et des effluents gazeux. Edition Tec&Doc.
- Sàez A.E., Carbonell R.G., 1985. Hydrodynamic parameters for gas–liquid cocurrent flow in packed beds. *A.I.Ch.E. Journal*, vol. 31, pp. 52–62.
- Saroha A.K. et Nigam K.D.P., 1996. Trickle Bed Reactors (Review). *Chem. Eng. Sci*, vol. 12, pp. 207-347.
- Shojaee S., Hosseini S.H., Rafati A., Goodarz A., 2011. Prediction of the effective area in structured packings by computational fluid dynamics. *Ind.Eng.Chem.Res.*, vol. 50, pp. 10833-10842.
- Sidi-Boumedine R. and Raynal L., 2005. Influence of the viscosity on the liquid hold-up in trickle-bed reactors with structured packings. *Catalysis Today*, vol. 105, pp. 673–679.
- Soulaine C., 2012. Modélisation des écoulements dans les garnissages structurés : de l'échelle du pore à l'échelle de la colonne. *Thèse INPT, Université de Toulouse*.
- Specchia V., Baldi G., 1977. Pressure drop and liquid holdup for two phase concurrent flow in packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 32, pp. 515-523.
- Spiegel L., Meier W., 1994. A generalized pressure drop model for structured packings. *ICHEME*, vol. 128, pp. 85–94.
- Stichlmair J., Bravo J.L., Fair J.R., 1988. General model for prediction of pressure drop and capacity of countercurrent gas/liquid packed columns. *Gas Separation and Purification*, vol. 3.

- Suess P., Spiegel L., 1991. Hold-up of Mellapak structured packings. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 13, pp. 119–124.
- Toye D., 1996. Etude de l'écoulement ruisselant dans les lits fixes par tomographie X. *Thèse de l'Université de Liège*.
- Toye D., Crine M., Marchot P., 2005. Imaging of liquid distribution in reactive distillation packings with a new high-energy x-ray tomography. *Meas. Sci. Technol*, Vol. 16, pp. 2213–2220.
- Toye D., Marchot P., Crine M., Pelsser A.M., L'Homme G., 1998. Local measurements of void fraction and liquid holdup in packed columns using X-ray computed tomography. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 37, pp. 511–520.
- Tsai R.E., Seibert A.F., Eldridge R.B., Rochelle G.T., 2011. A dimensionless model for predicting the mass-transfer area of structured packing. *AIChE Journal*, vol. 57, n° 5, pp. 1173-1184.
- Valdes-Parada F.J., Ochoa-Tapia J.A., Alvarez-Ramirez J., 2009. Validity of the permeability Carman-Kozeny equation: A volume averaging approach, *Physica A*, vol. 388, pp. 789-798.
- Whitaker S., 1973. The transport equations for multi-phase systems, *Chemical Engineering Science*, vol. 28, pp. 139-147.
- Whitaker S., 1986. Flows in porous media II: The governing equations for immiscible two-phase flow. *Transport in Porous Media*, vol. 1, pp. 105-125.
- Whitaker S., 1993. The closure problem for two-phase flow in homogeneous porous media. *Chemical Engineering Science*, vol. 49, pp. 765-780.
- Whitaker S., 1996. The Forchheimer equation: A theoretical development. *Transport in porous media*, vol. 25, pp. 27-61.
- Whitaker S., 1999. *The Method of Volume Averaging*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Yin F.H., Sun C.G., Afacan A., Nandakumar K., Chuang K.T., 2000. CFD modeling of mass-transfer processes in randomly packed distillation columns. *Ind. Eng. Chem. Res*, vol. 39, pp. 1369-1380.

Annexes du chapitre 3

Annexe 1 : Cartes de rétention locale : Garnissage M250.X, systèmes : Air/Eau et Air/MEA 30 wt.%

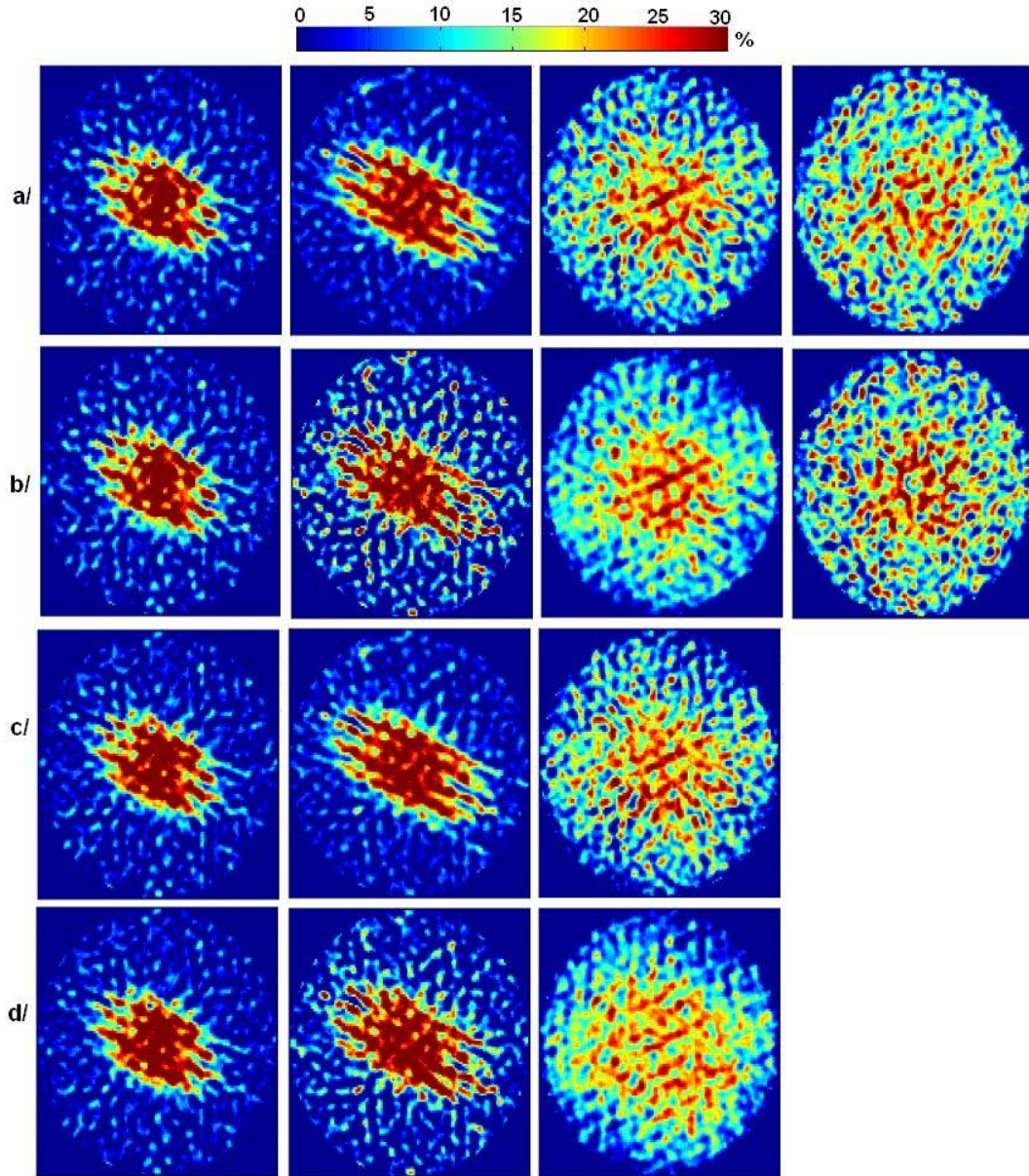


Figure 1 : Cartes de rétention locale, garnissage M250. Système Air/eau, $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$: a/ $F_S = 0.48 \text{ Pa}^{0.5}$, (20% F_C), b/ $F_S = 0.95 \text{ Pa}^{0.5}$, (40% F_C), c/ $F_S = 1.43 \text{ Pa}^{0.5}$, (60% F_C), d/ $F_S = 1.91 \text{ Pa}^{0.5}$, (80% F_C). Positions de gauche à droite: Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 .

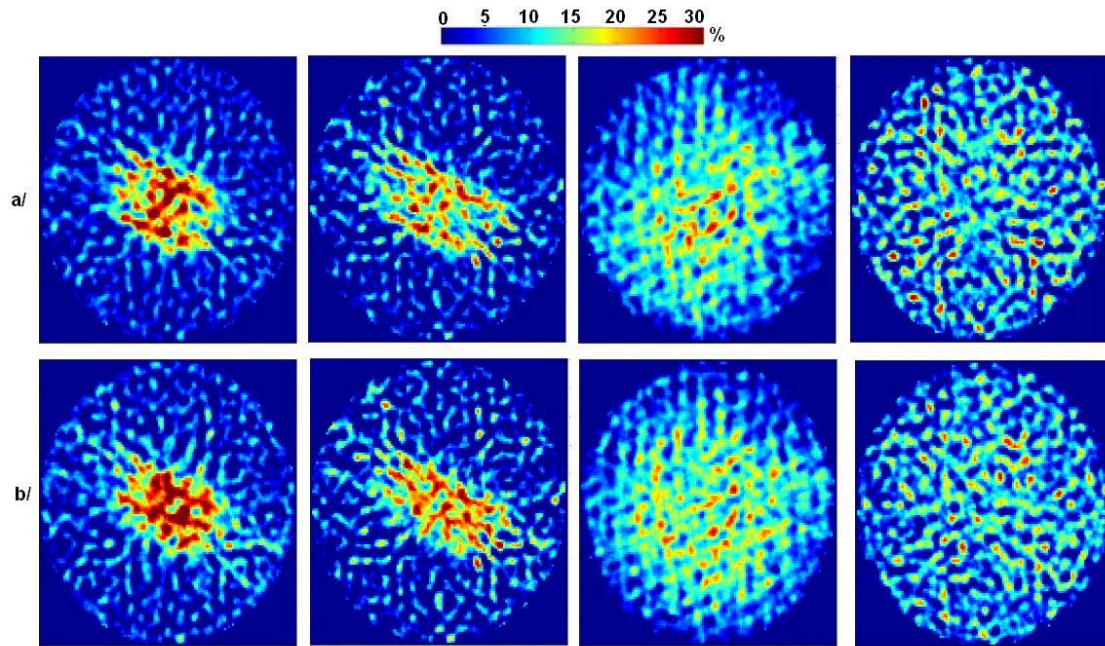


Figure 2 :Cartes de rétention locale, garnissage M250. Système Air/MEA 30 wt.%, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$:
 a/ $F_S = 0.71 \text{ Pa}^{0.5}$, (20% F_C), b / $F_S = 2.75 \text{ Pa}^{0.5}$, (80% F_C). Positions de gauche à droite: Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 .

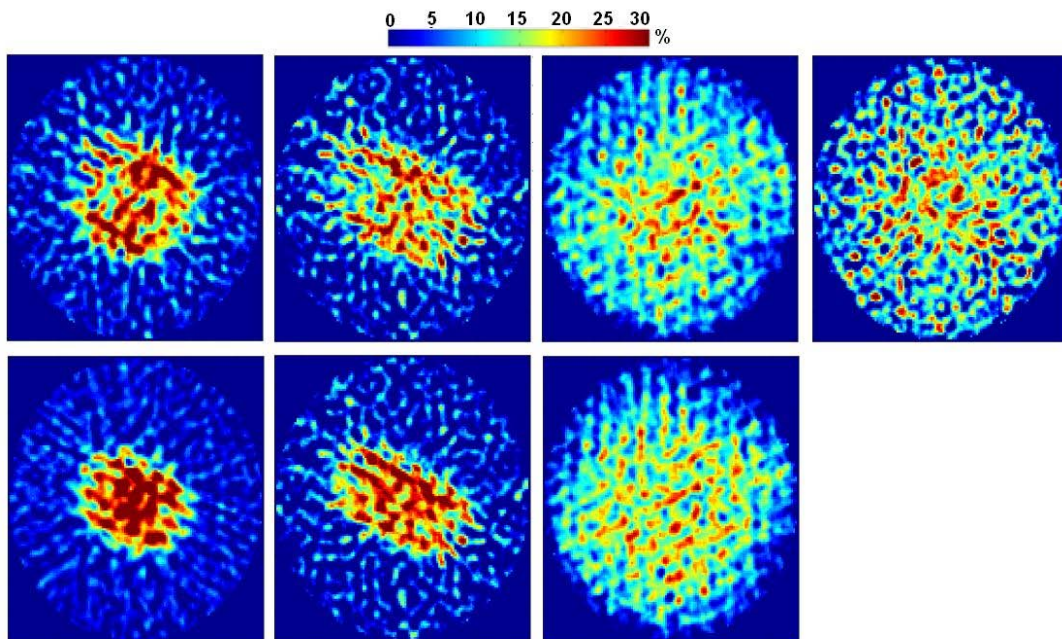


Figure 3 : Cartes de rétention locale, garnissage M250. Système Air/MEA 30 wt.%, $q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$:
 a/ $F_S = 0.64 \text{ Pa}^{0.5}$, (20% F_C), b / $F_S = 2.45 \text{ Pa}^{0.5}$, (80% F_C). Positions de gauche à droite: Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 .

Annexe 2 : Profils radiaux de rétention moyenne : Garnissage M250.X

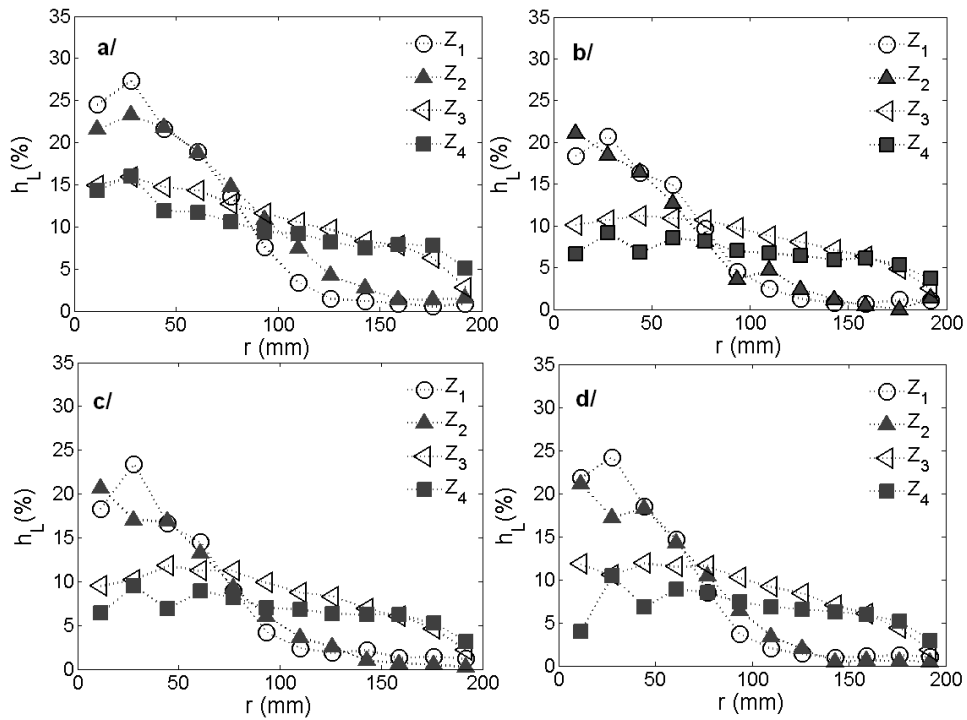


Figure 4 : Hold-up radial profiles for M250.X, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, a/ $F_S = 20\%F_C$ b/ $F_S = 40\%F_C$ c/ $F_S = 60\%F_C$ d/ $F_S = 80\%F_C$

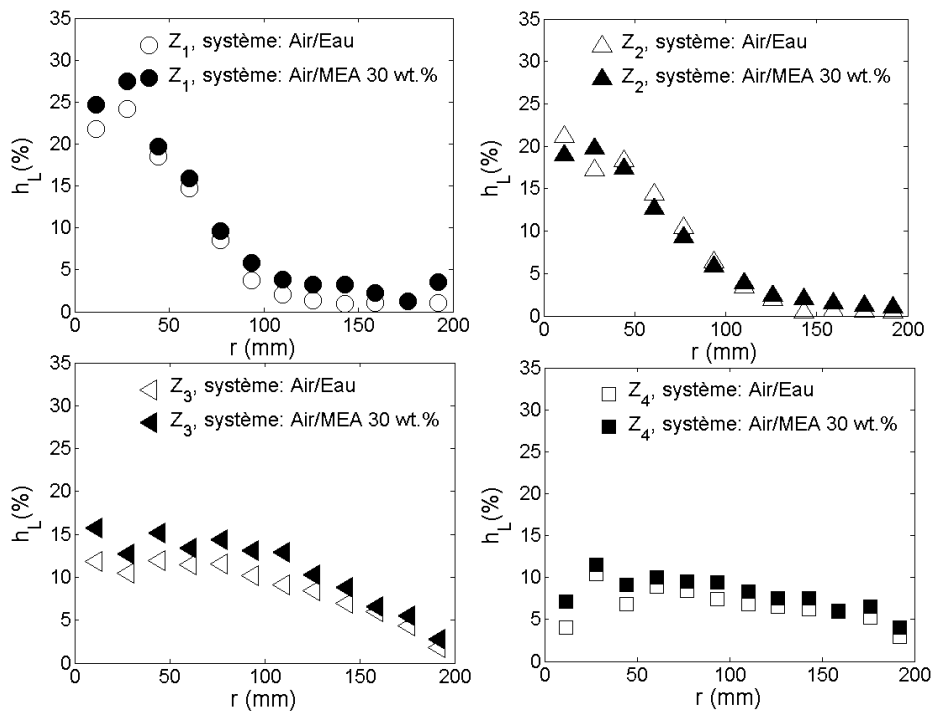


Figure 5 : Hold-up radial profiles for M250.X, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_S = 40\%F_C$, full symbols: Air/MEA 30 wt.% system, empty symbols : Air/Water system

Annexe 3 : Validité du modèle d'advection-diffusion pour différents débits de gaz et de liquide : Garnissage M250.X

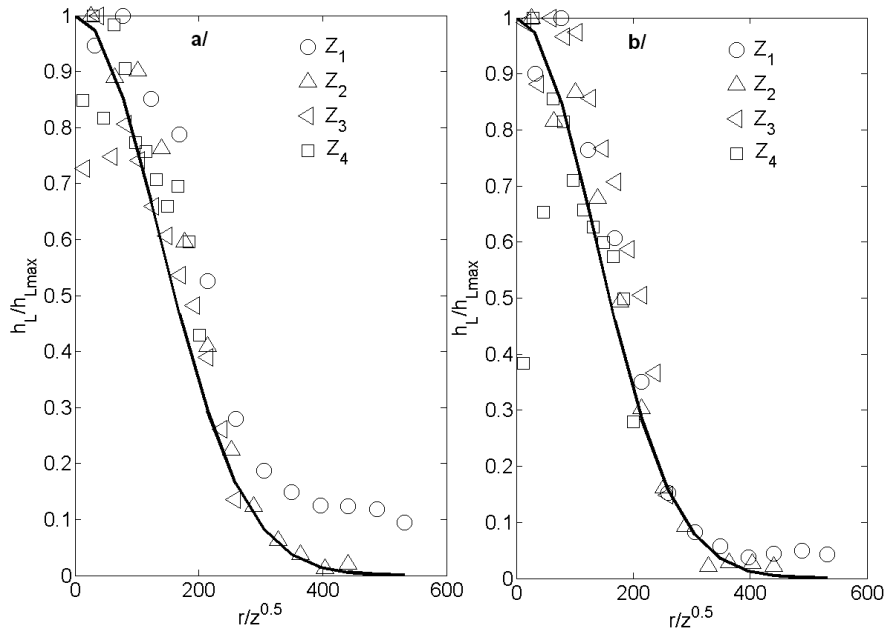


Figure 6 : $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, symboles vides : points expérimentaux, système Air/Eau, courbes : modèle d'advection-diffusion, a/ $F_S=20\%F_C$, b/ $F_S=80\%F_C$

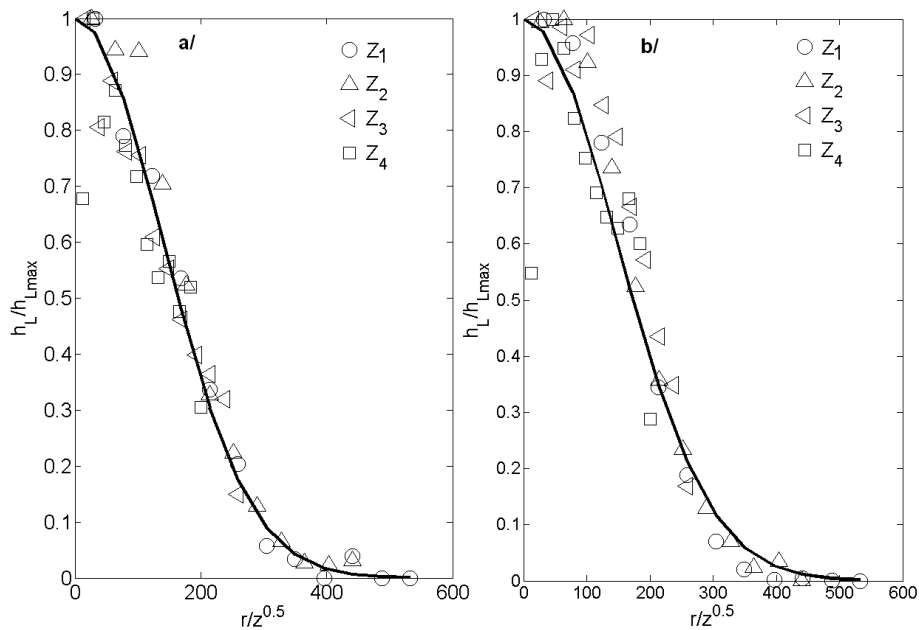
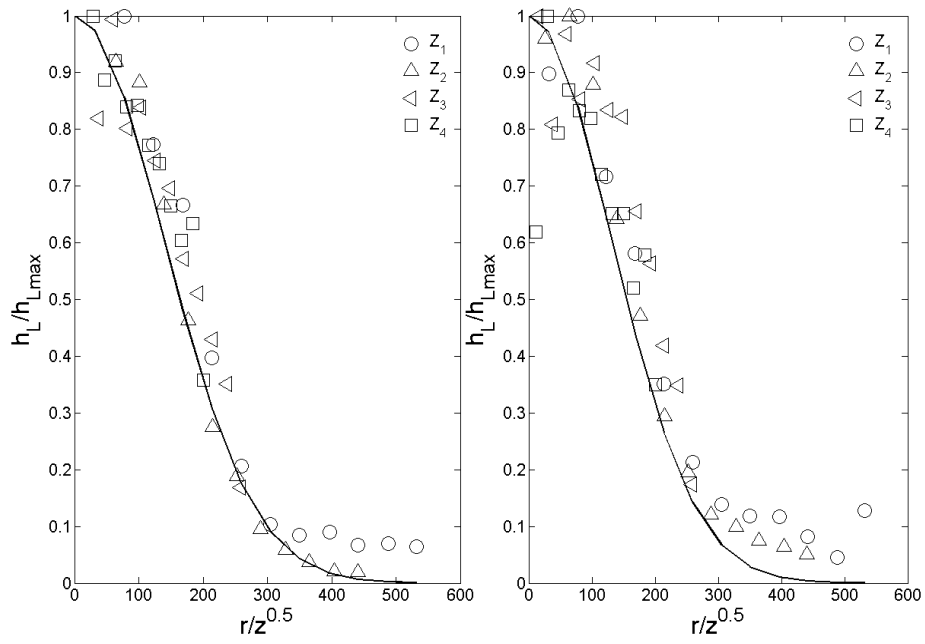


Figure 7 : $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, symboles vides : points expérimentaux, système Air/Eau, courbes : modèle d'advection-diffusion, a/ $F_S=20\%F_C$, b/ $F_S=80\%F_C$



**Figure 8 : $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, symboles vides : points expérimentaux, système Air/MEA 30 wt.%,
 courbes : modèle d'advection-diffusion, $a/F_5 = 0.71 \text{ Pa}^{0.5} = 20\% F_C$, $b/F_5 = 2.75 \text{ Pa}^{0.5} = 80\% F_C$**

**Annexe 4: Cartes de rétention locale : Garnissage IMTP-40,
système : Air/Eau**

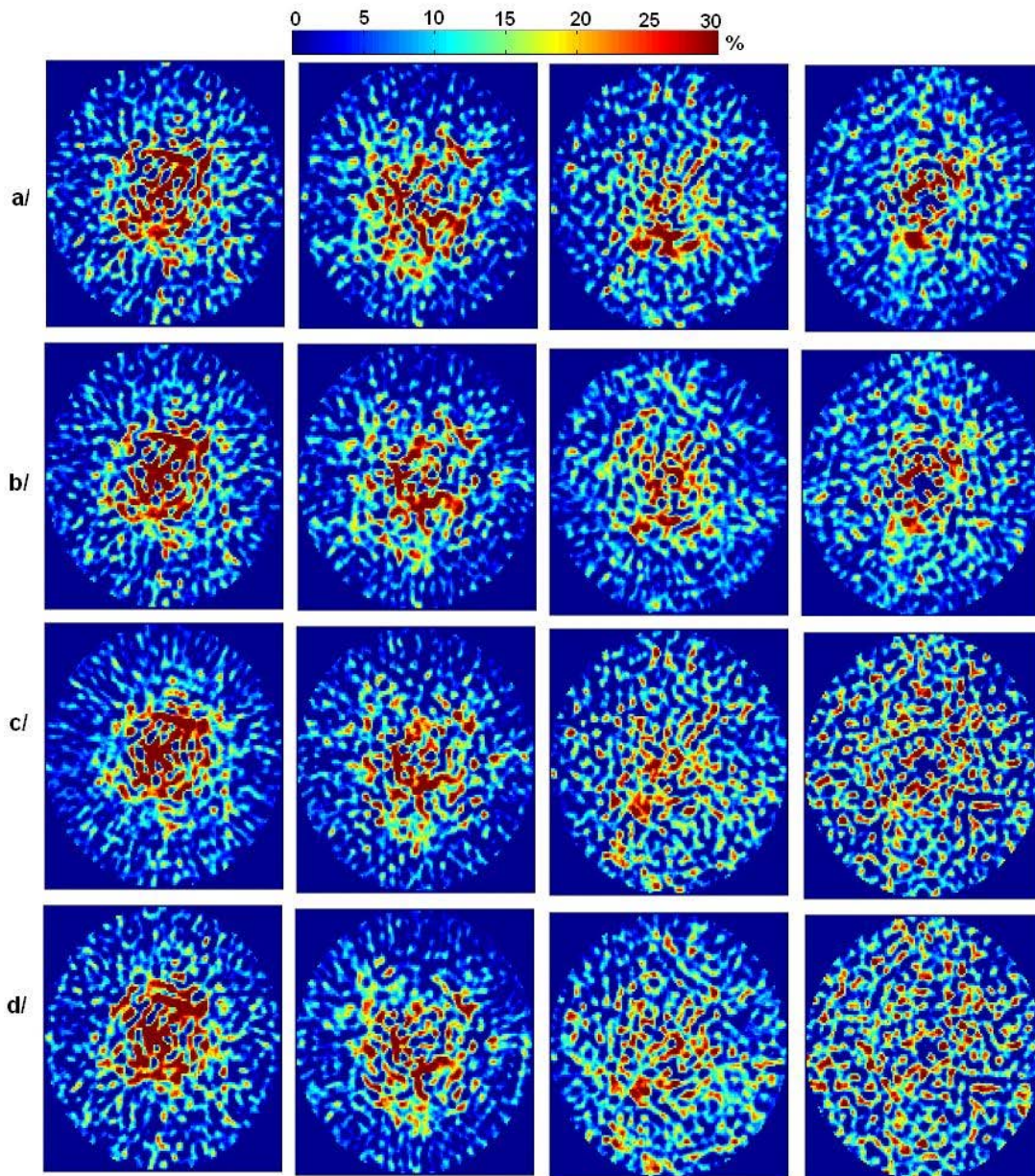


Figure 9 : $q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$: a/ $F_S = 20\% F_C$, b / $F_S = 40\% F_C$, c / $F_S = 60\% F_C$, d / $F_S = 80\% F_C$. Positions de gauche à droite: Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 .

Annexe 5: Profils radiaux de rétention, Système Air/Eau

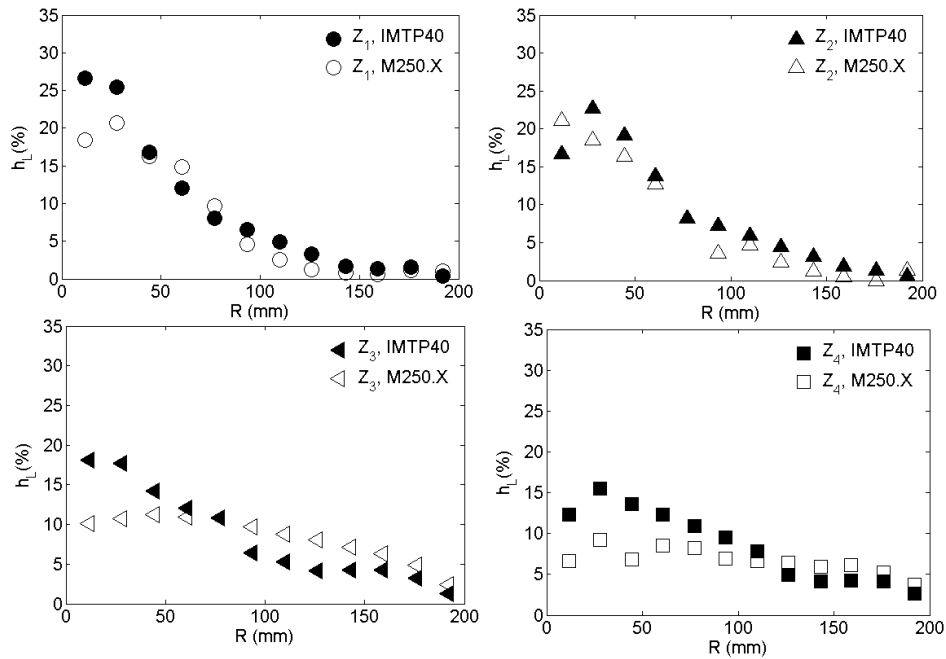


Figure 1 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP40, symboles vides : M250.X, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 40\%F_V$

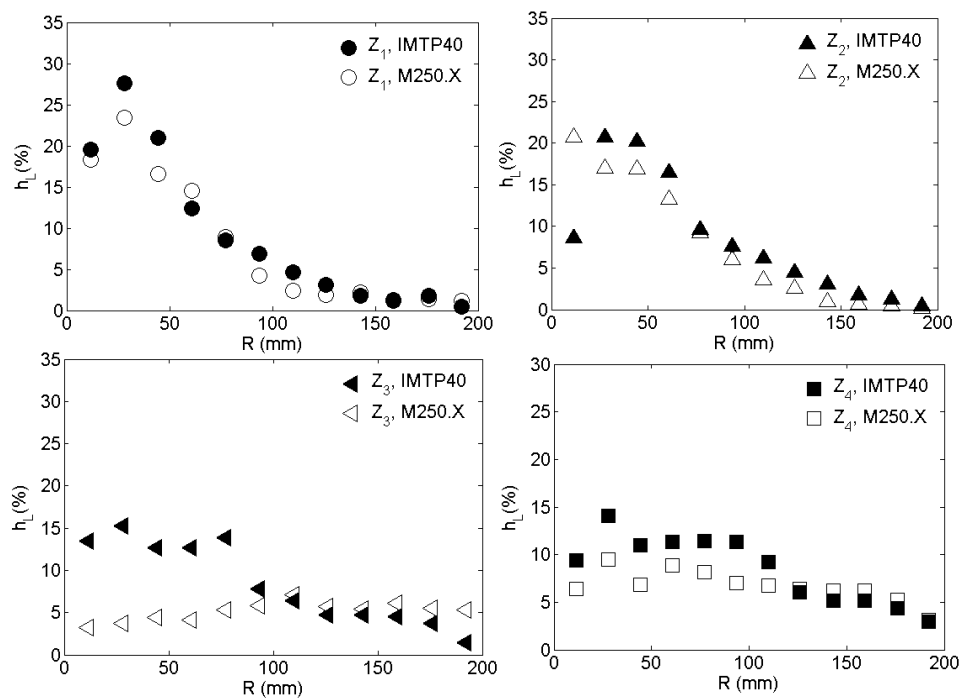


Figure 2 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP40, symboles vides : M250.X, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_c = 60\%F_V$

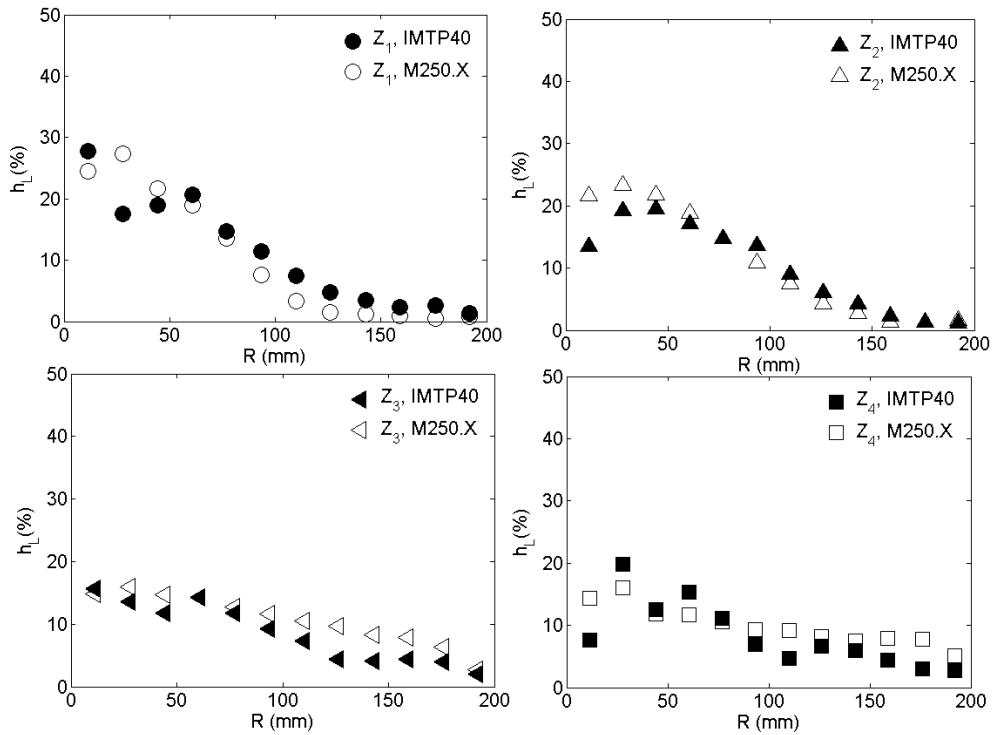


Figure 3 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP40, symboles vides : M250.X, $q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_C = 20\%F_V$

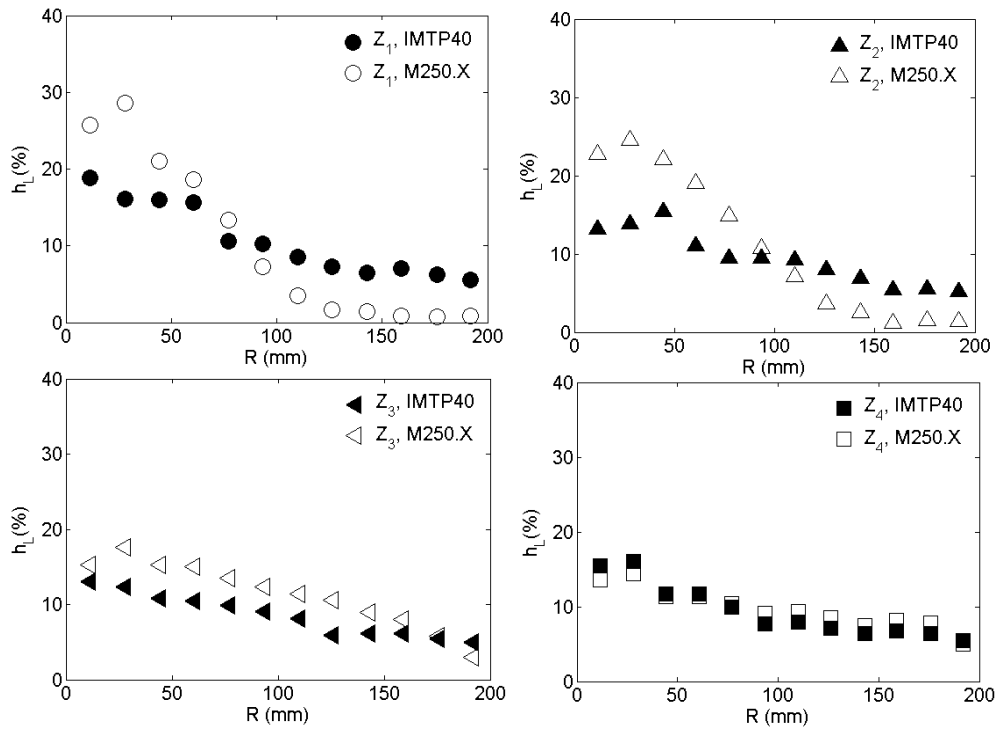


Figure 4 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP40, symboles vides : M250.X, $q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_C = 40\%F_V$

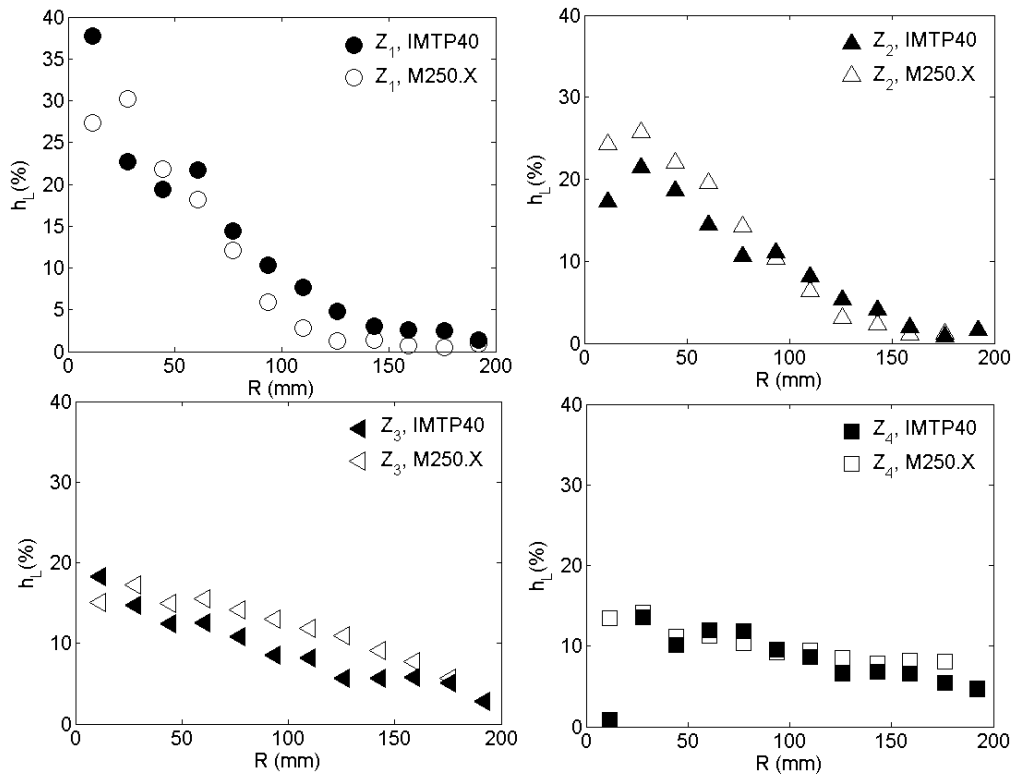


Figure 5 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP40, symboles vides : M250.X, $q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_C = 60\%F_V$

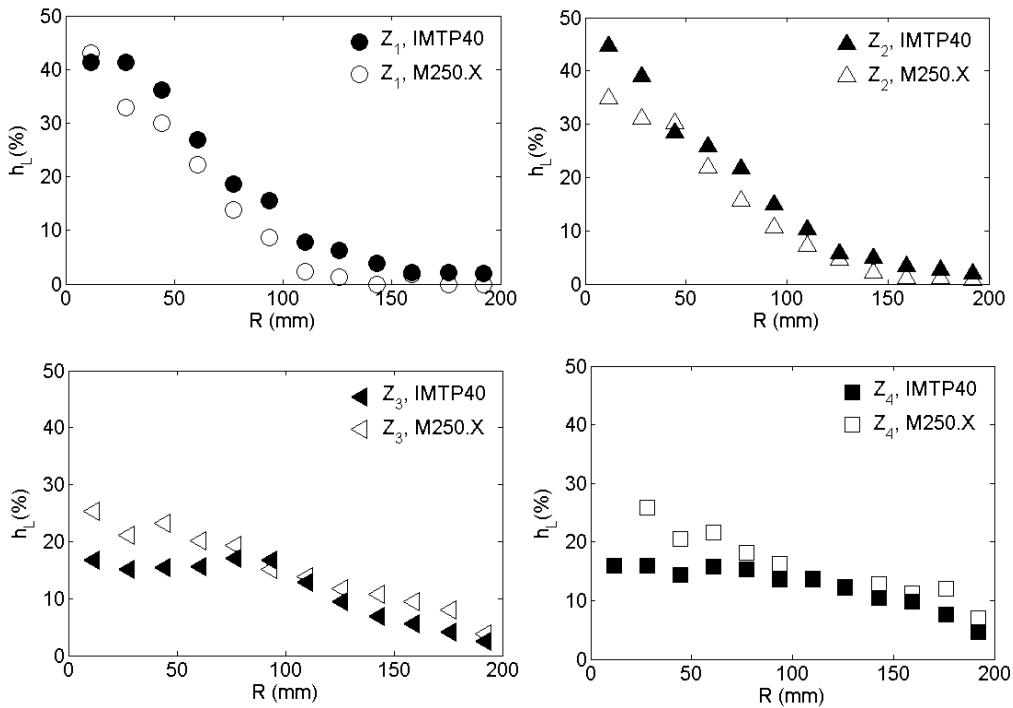


Figure 6 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP40, symboles vides : M250.X, $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_C = 40\%F_V$

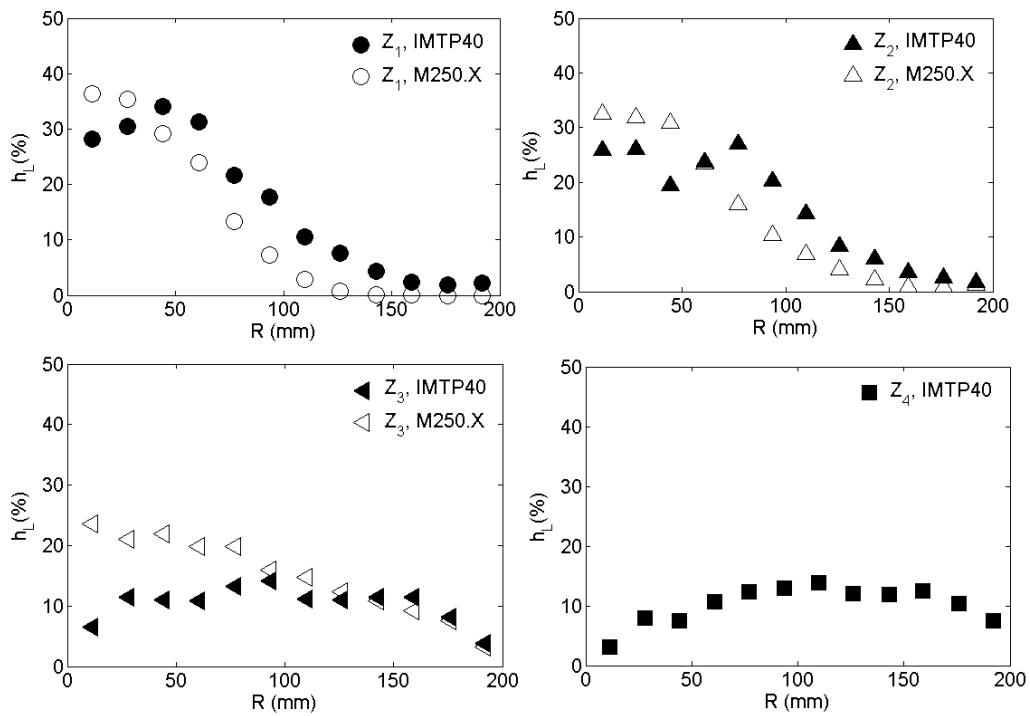


Figure 7 : Profils radiaux de rétention moyenne, symboles pleins : IMTP40, symboles vides : M250.X, $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_C = 60\%F_V$

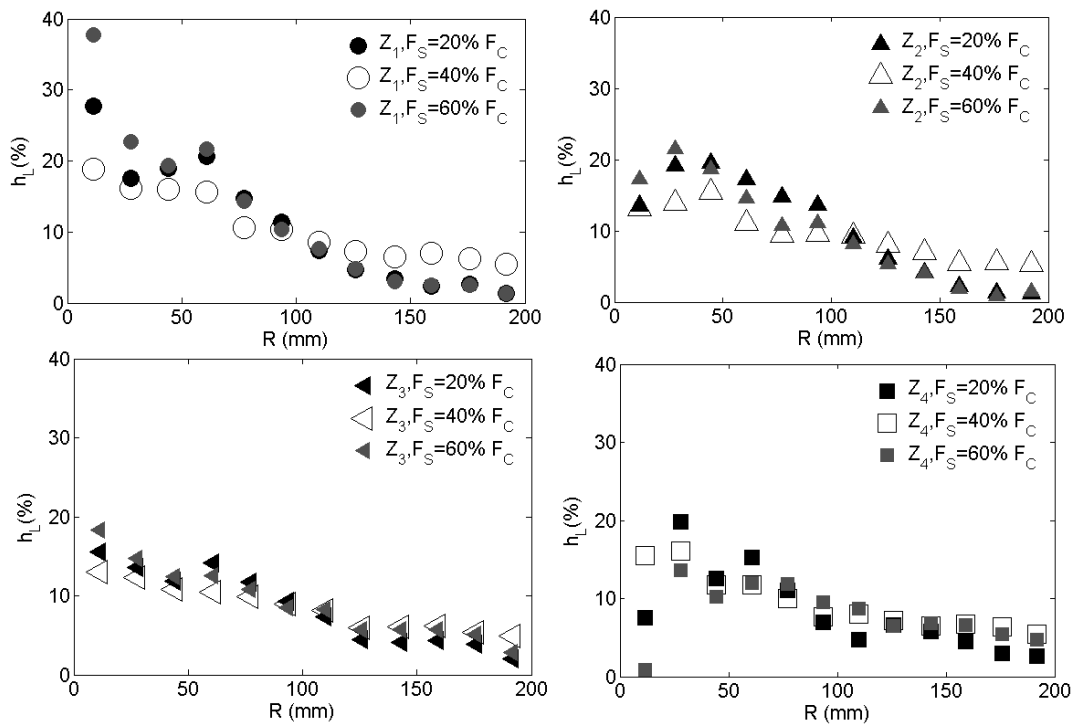


Figure 8 : Profils radiaux de rétention moyenne pour IMTP40, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et F_S variable

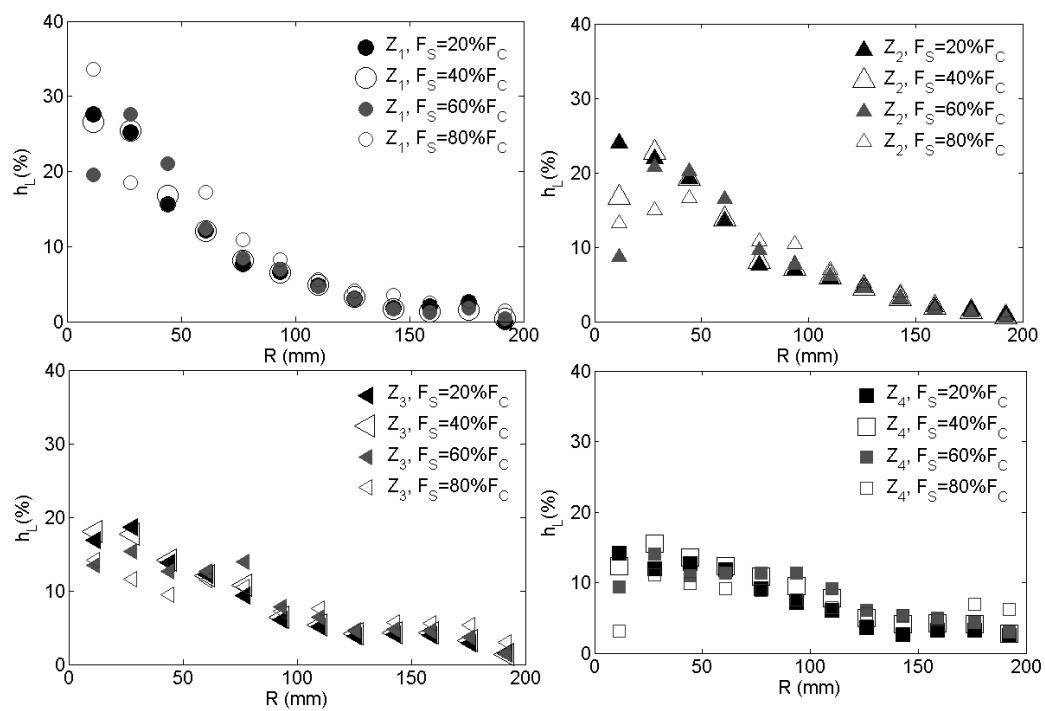


Figure 9 : Profils radiaux de rétention moyenne pour IMTP40, $q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et F_S variable

Annexe 6 : Profils radiaux de rétention moyenne normalisée, validité du modèle d'advection-diffusion

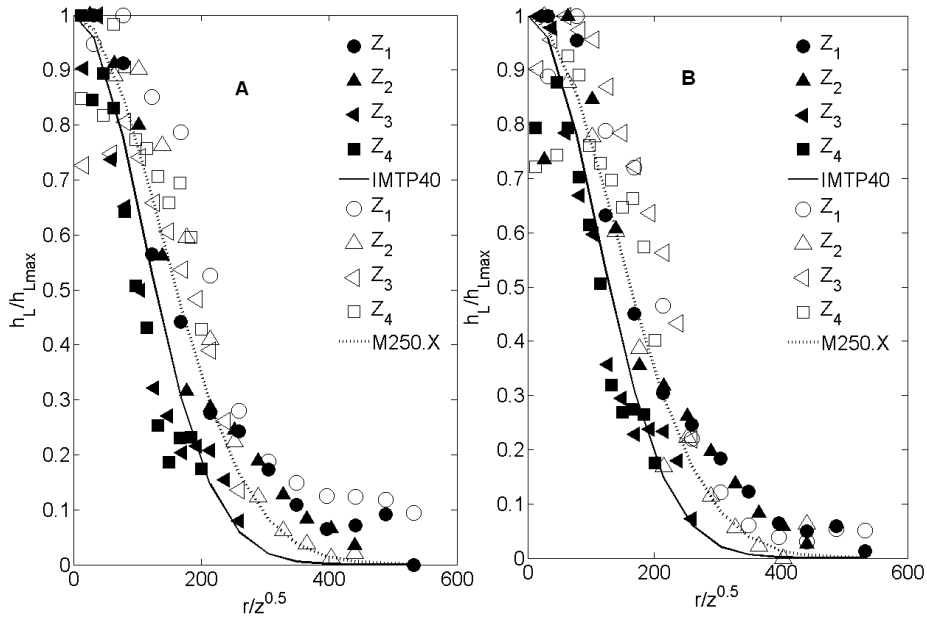


Figure 10 : $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, A: $F_S = 20\%F_C$, B: $F_S = 40\%F_C$, symboles pleins: points expérimentaux, IMTP-40, symboles vides points expérimentaux, M250.X, courbes : modèle d'advection-diffusion

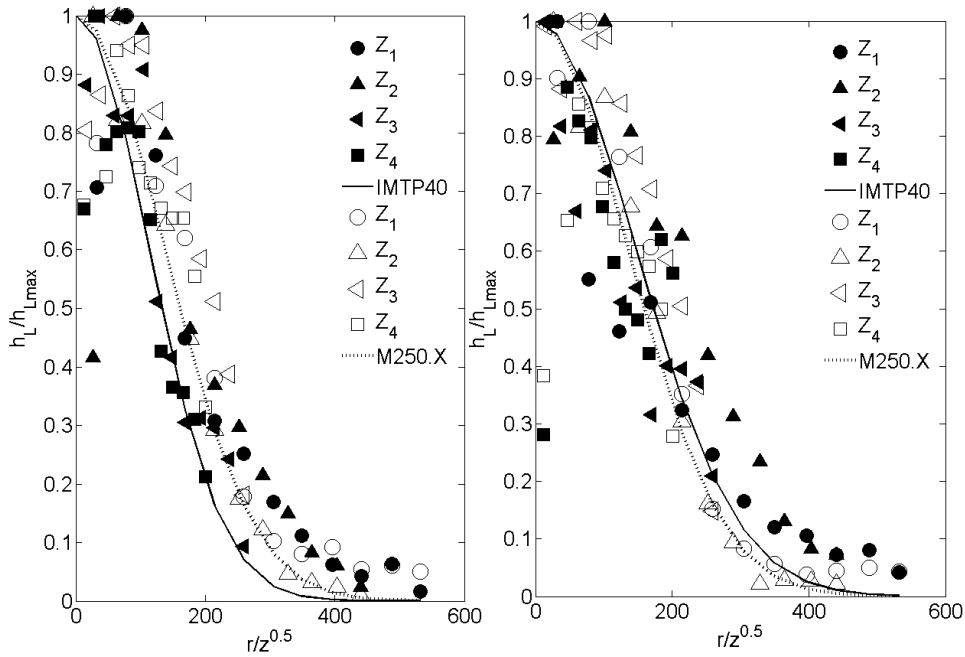


Figure 11 : $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, A: $F_S = 60\%F_C$, B: $F_S = 80\%F_C$, symboles pleins: points expérimentaux, IMTP-40, symboles vides points expérimentaux, M250.X, courbes : modèle d'advection-diffusion

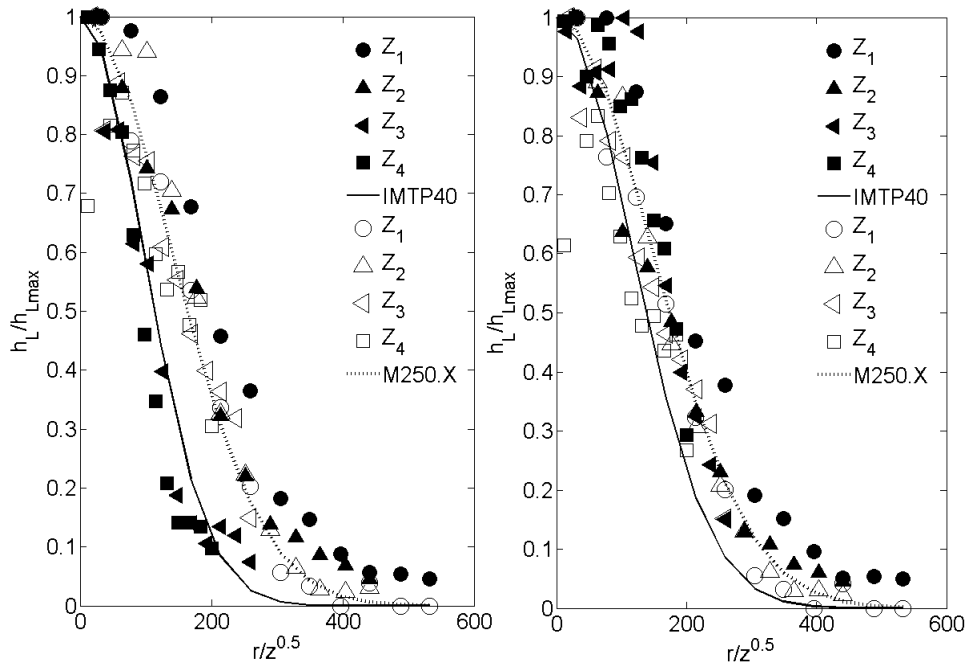


Figure 12 : $q_L = 56 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, A: $F_S = 20\%F_C$, B: $F_S = 40\%F_C$, symboles pleins: points expérimentaux, IMTP40, symboles vides points expérimentaux, M250.X, courbes : modèle d'advection-diffusion

Annexe 7 : Profils radiaux de rétention, garnissage IMTP-40, systèmes : Air/Eau et Air/ MEA 30 wt.%

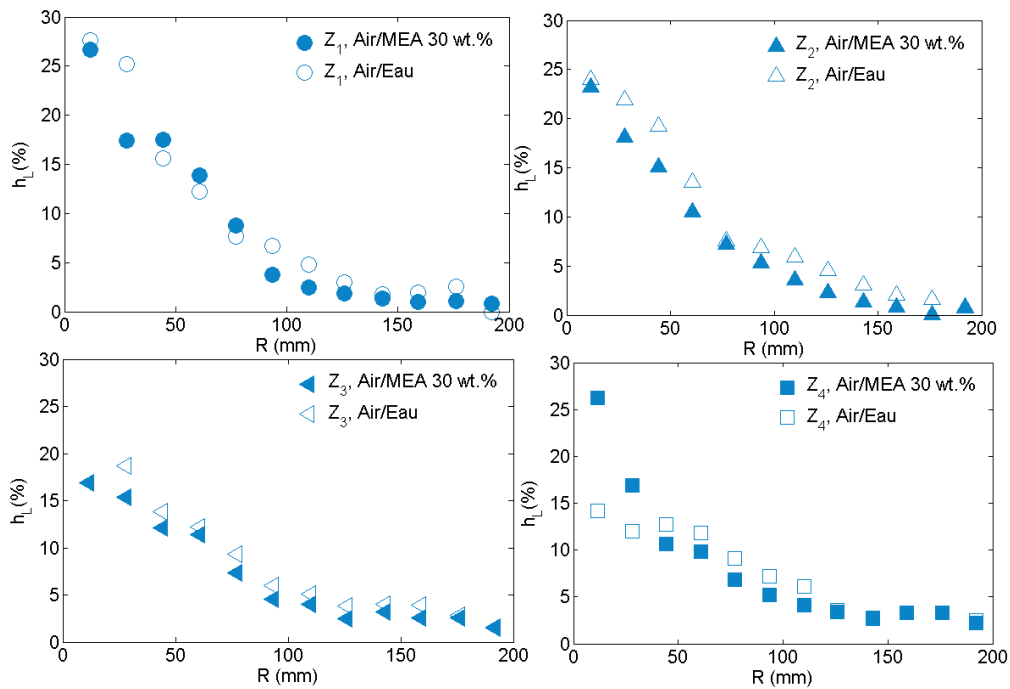


Figure 13 : Profils radiaux de rétention moyenne pour le garnissage IMTP-40, symboles pleins : Air/MEA 30 wt.%, symboles vides : Air/Eau, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_{CS} = 20\%F_C$

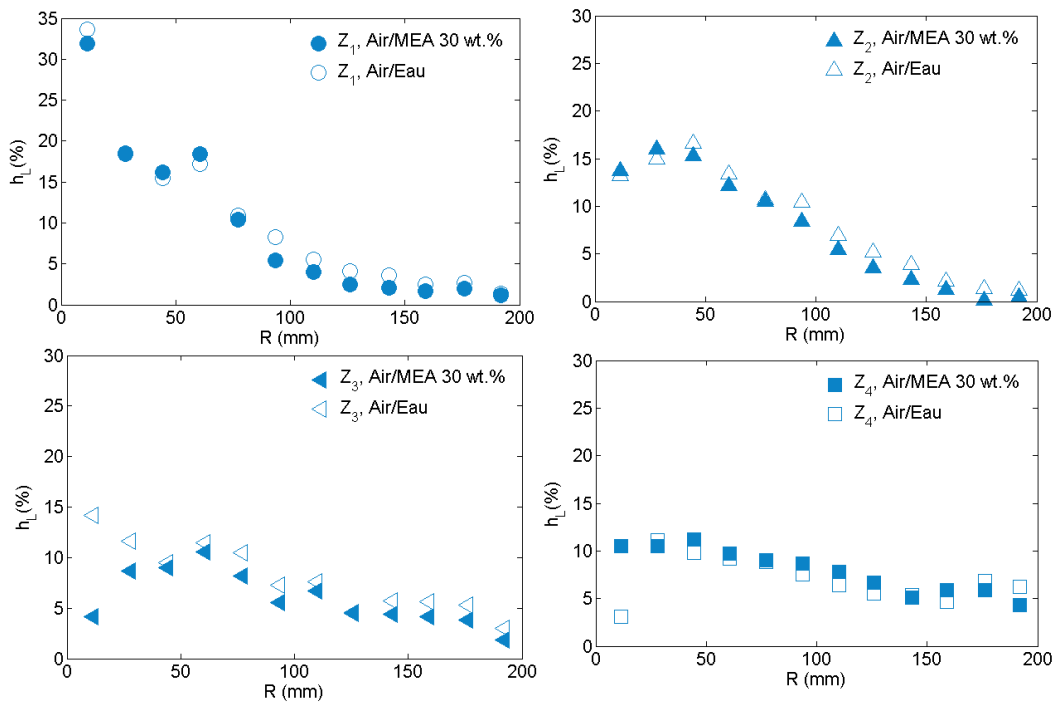


Figure 14 : Profils radiaux de rétention moyenne pour le garnissage IMTP40, symboles pleins : Air/MEA 30 wt.%, symboles vides : Air/Eau, $q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_S = 80\%F_C$

**Annexe 8 : Validité du modèle d'advection-diffusion, garnissage :
IMTP-40, système : air/MEA 30 wt.%**

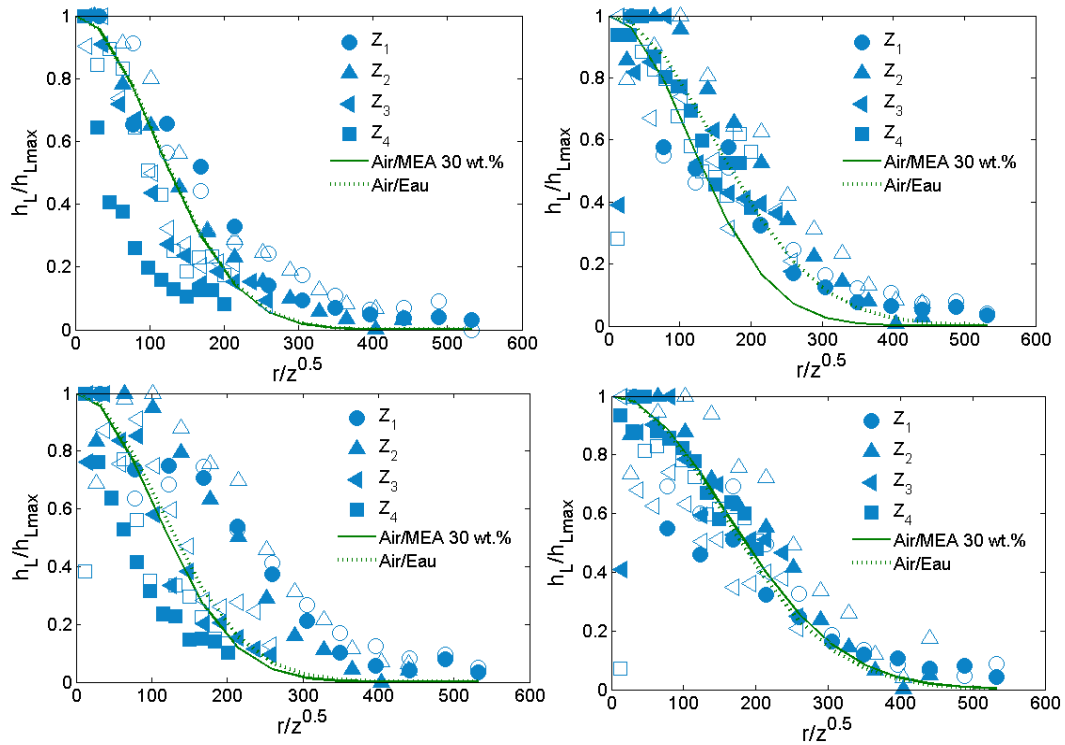
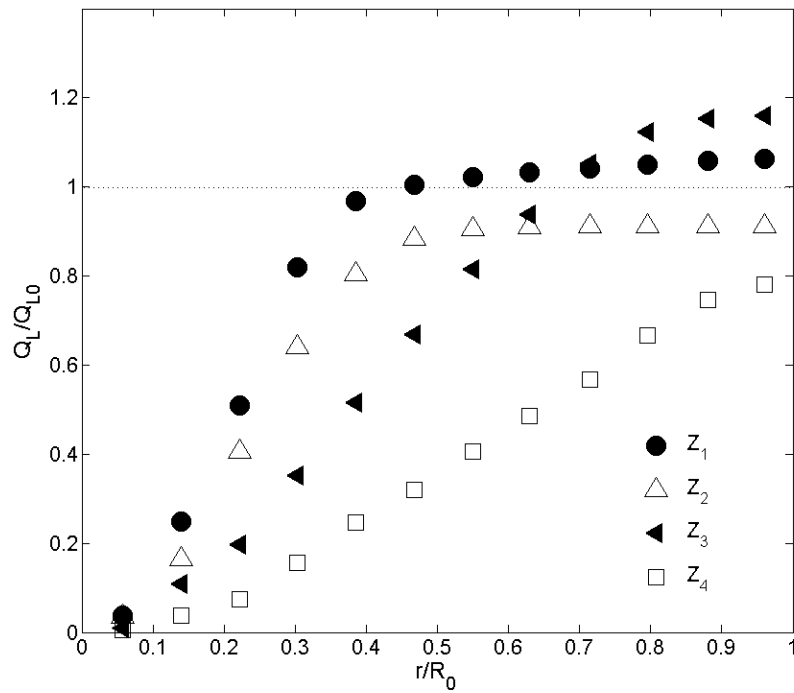


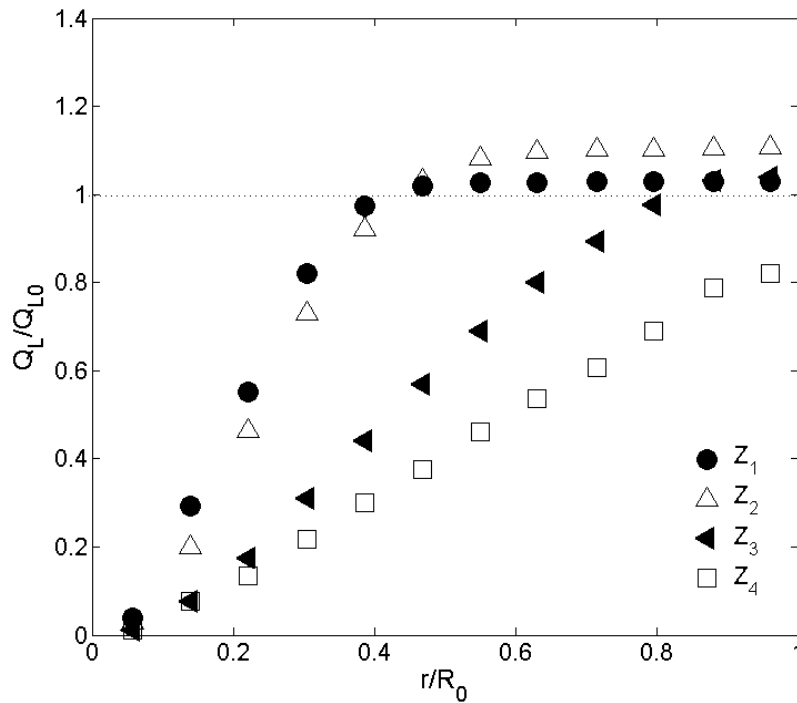
Figure 15 : Profils normalisés de rétention de liquide pour IMTP40, symboles pleins : système : Air/MEA 30 wt.%, symboles vides : système : Air/Eau , courbes continue et interrompue : modèle, $1/q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_S = 20\%F_C$, $2/q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_S = 80\%F_C$, $3/q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_S = 20\%F_C$, $3/q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ and $F_S = 80\%F_C$

Annexe 9 : Applicabilité de la corrélation $h_L=f(q_L)$ à la méso-échelle



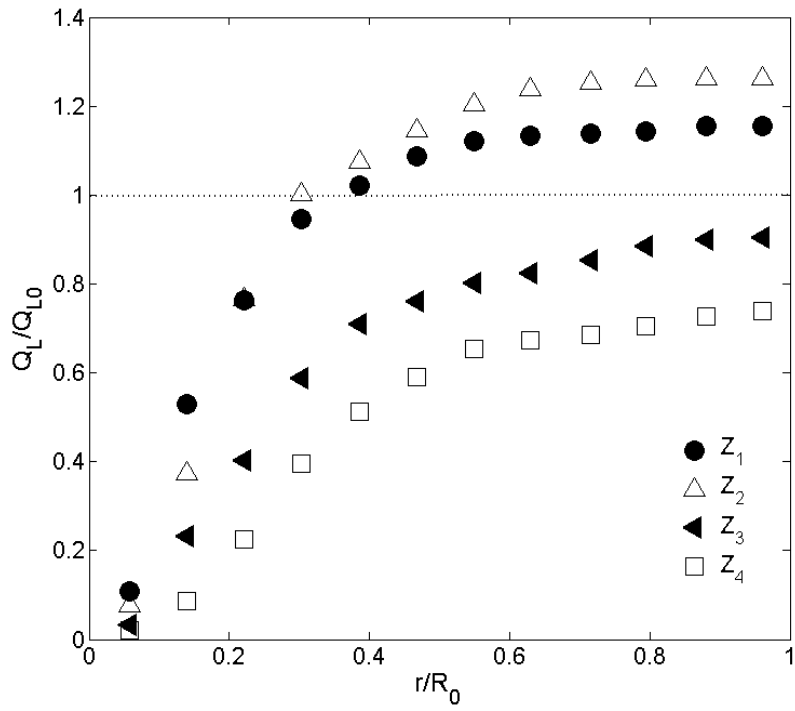
✓ Profils normalisés de débit de liquide cumulé pour M250.X, système : Air/Eau

$q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_s = 20\%F_c$



✓ Profils normalisés de débit de liquide cumulé pour M250.X, système : Air/Eau

$q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ et $F_s = 20\%F_c$



✓ Profils normalisés de débit de liquide cumulé pour IMTP-40, système : Air/Eau

$$q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h} \text{ et } F_s = 20\%F_c$$

Annexe 10 : Expériences complémentaires

Dans cette annexe, nous nous proposons de présenter les résultats d'une campagne d'essais que nous avons menée dans des conditions d'injection de liquide différentes sur le garnissage M250.X. Il s'agit d'essais réalisés en utilisant le distributeur N6 présenté sur la Figure 3.2 pour lequel on a obturé la moitié des trous de manière à injecter le liquide sur une moitié de disque en tête de colonne. On notera N5 le distributeur permettant l'injection du liquide sur une moitié de disque. Ces expériences ont été menées avec le souci d'introduire une perturbation non axisymétrique dans l'injection du liquide et de privilégier une direction pour le gradient de fraction volumique de liquide. Le système de fluides que nous avons utilisé est le système Air/Eau et nous avons, encore une fois, procédé à des mesures de rétention de liquide par tomographie gamma ainsi que de perte de charge globale. Nous commentons les résultats obtenus dans le but d'en tirer des enseignements qualitatifs sur la dispersion de liquide et l'hydrodynamique dans le garnissage M250.X.

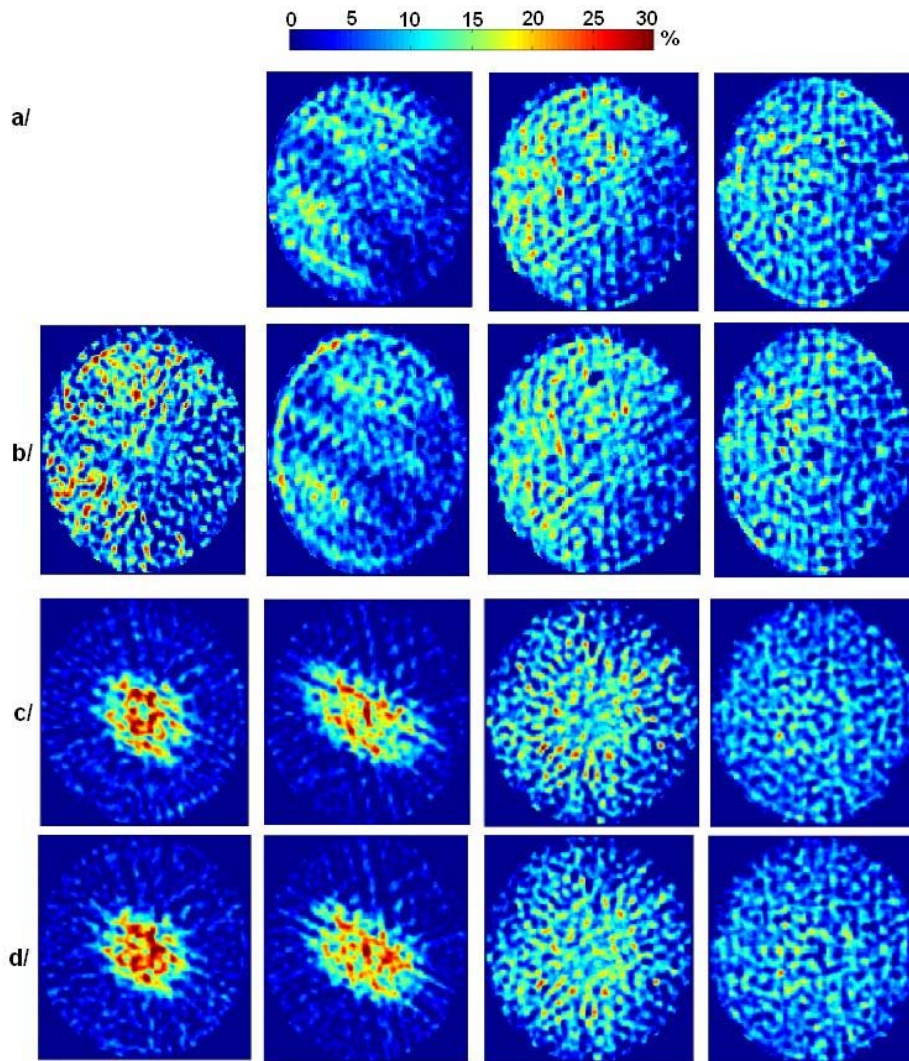


Figure 16 : Cartes de rétention de liquide pour M250.X, Système Air/Eau,

$q_L = 16 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. a/ $F_S = 2.21 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N5 (N3 avec la moitié des trous bouchés), b/ $F_S = 2.95 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N5 c/ $F_S = 2.21 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N6, c/ $F_S = 2.95 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N6. De gauche à droite, positions : Z_1, Z_2, Z_3, Z_4

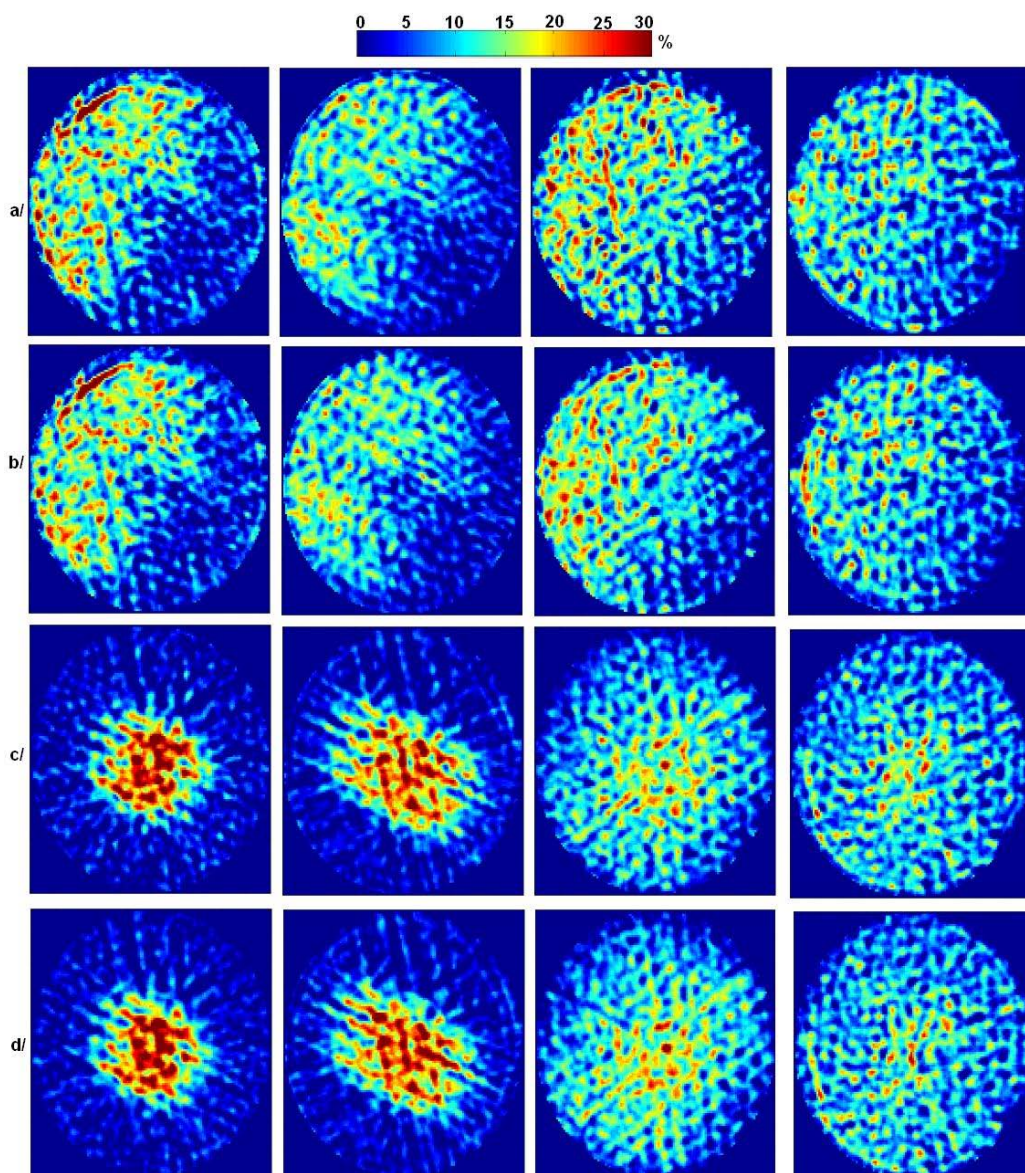


Figure 17 : Cartes de rétention de liquide pour M250.X, Système Air/Eau,

$q_L = 28 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. a/ $F_S = 0.6 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N5 (N3 avec la moitié des trous bouchés), b/ $F_S = 1.2 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N5, c/ $F_S = 0.6 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N6, d/ $F_S = 1.2 \text{ Pa}^{0.5}$, plateau N6. De gauche à droite, positions : Z_1, Z_2, Z_3, Z_4 .

Annexe 11 : Courbes de perte de charge pour M250.X

Effet de la distribution de liquide en tête de colonne

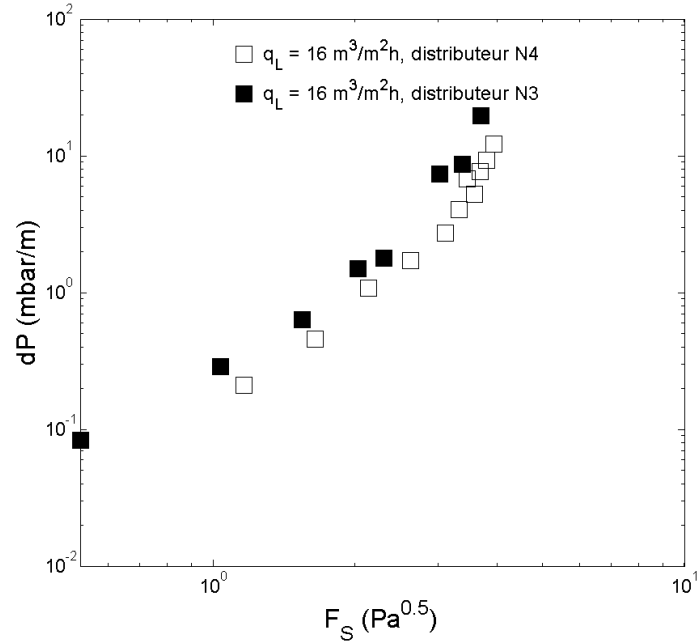


Figure 18 : Courbes de perte de charge dans le cas d'une distribution homogène de liquide (distributeur N3) et d'une distribution non homogène (distributeur N4), garnissage : M250.X, système : Air/Eau

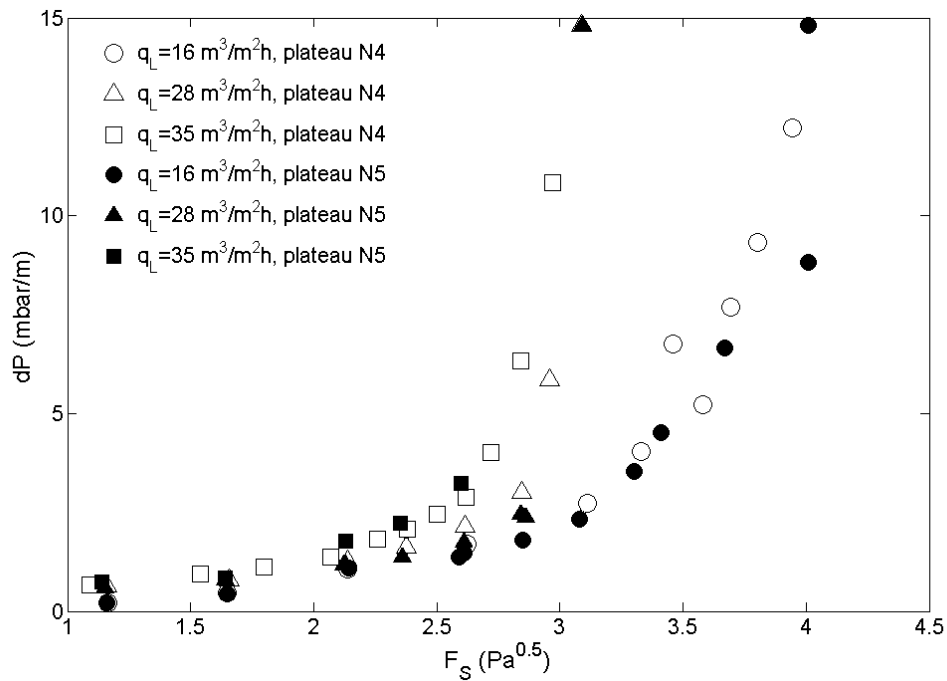


Figure 19 : courbes de perte de charge, M250.X, système : Air/Eau

Annexes du chapitre 4

Annexe N°1

Solution analytique d'un bicouche laminaire avec un taux de mouillage égal à $\frac{1}{2}$.

On s'intéresse à l'écoulement dans le plan (x, y) de deux phases fluides 1 et 2 dont les viscosités dynamiques sont μ_1 et μ_2 , les masses volumiques ρ_1 et ρ_2 . L'écoulement est supposé sans instabilité (laminaire), stationnaire et cinématiquement établi (c'est-à-dire sans effets d'accélération ou d'effets de bord). On cherche donc des vitesses qui sont simplement des fonctions de y et des champs de pression qui varient en x . Dans cette solution d'écoulement parallèle les gradients de pression dans les deux phases sont identiques.

La solution développée est valable aussi bien en écoulement co-courant que contre-courant. Les composantes de vitesse selon x sont notées U et celles selon y sont notées V .

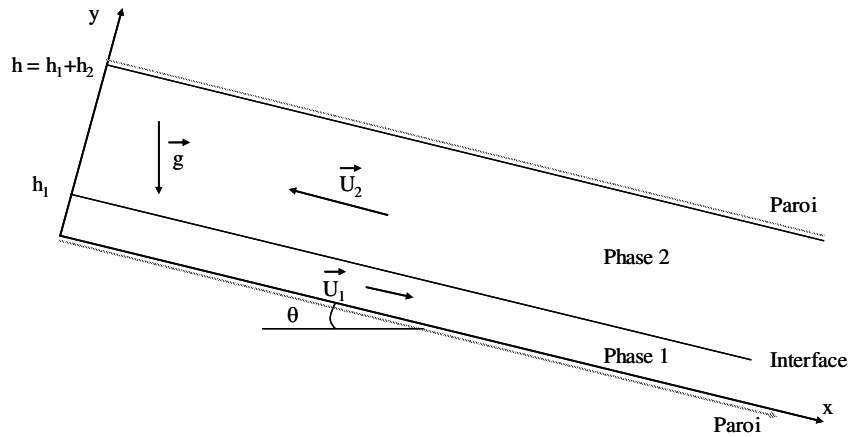


Figure 20 : Schéma d'un bicouche avec un mouillage de la phase 1 égal à $\frac{1}{2}$.

Écoulement dans le fluide 1 :

Conditions aux limites :

(CL1) $U_1 = 0$ et $V_1 = 0$ en $y=0$

(CL2) $U_1 = U_I$ et $V_1 = 0$ en $y=h_1$ où U_I est la vitesse à l'interface qui est une inconnue du problème.

Equation de continuité :

Elle permet d'écrire immédiatement que $V_1(y) = 0$

Bilan de quantité de mouvement :

Il s'écrit : $\mu_1 \frac{dU_1}{dy} = K_1$ où K_1 est une constante définie par :

$$\boxed{K_1 = \frac{dP_1}{dx} - \rho_1 g \sin(\theta)} \quad (1)$$

En prenant en compte les conditions aux limites on trouve :

$$U_1(y) = \frac{K_1}{2\mu_1} y(y - h_1) + U_I \frac{y}{h_1}.$$

En intégrant on peut exprimer la vitesse débitante de la phase 1 (définie par $\bar{U}_1 = 1/h_1 \int_0^{h_1} U_1(y) dy$) sous la forme :

$$\boxed{\bar{U}_1 = \frac{U_I}{2} - \frac{K_1 h_1^2}{12\mu_1}} \quad (2)$$

Le frottement exercé sur la phase 1 en $y=0$ (paroi) s'écrit :

$$\tau_{w1} = -\mu_1 \left. \frac{dU_1}{dy} \right|_{y=0} = -\mu_1 \left(\frac{U_I}{h_1} - \frac{K_1 h_1}{2\mu_1} \right) \text{ cad en utilisant (2) :}$$

$$\boxed{\tau_{w1} = -\frac{\mu_1}{h_1} (6\bar{U}_1 - 2U_I)} \quad (3)$$

De la même façon, le frottement exercé sur la phase 1 en $y=h_1$ (interface) s'écrit :

$$\tau_{I1} = \mu_1 \left. \frac{dU_1}{dy} \right|_{y=h_1} = \mu_1 \left(\frac{U_I}{h_1} + \frac{K_1 h_1}{2\mu_1} \right) \text{ cad en utilisant (2) :}$$

$$\boxed{\tau_{I1} = \frac{\mu_1}{h_1} (4U_I - 6\bar{U}_1)} \quad (4)$$

Écoulement dans le fluide 2 :

Conditions aux limites :

(CL3) $U_2 = 0$ et $V_2 = 0$ en $y=h_1+h_2$

(CL4) $U_2 = U_I$ et $V_2 = 0$ en $y=h_1$.

Equation de continuité :

Elle permet d'écrire immédiatement que $V_2(y) = 0$

Bilan de quantité de mouvement :

Il s'écrit : $\mu_2 \frac{dU_2}{dy} = K_2$ où K_2 est une constante définie par :

$$\boxed{K_2 = \frac{dP_2}{dx} - \rho_2 g \sin(\theta)} \quad (5)$$

En prenant en compte les conditions aux limites on trouve $U_2(y)$ et en intégrant on peut exprimer la vitesse débitante de la phase 2 (définie par $\bar{U}_2 = 1/h_2 \int_{h_1}^h U_2(y) dy$) sous la forme :

$$\boxed{\bar{U}_2 = \frac{U_1}{2} - \frac{K_2 h_2^2}{12\mu_2}} \quad (6)$$

Le frottement exercé sur la phase 2 en $y=h$ (paroi) s'écrit :

$$\boxed{\tau_{w2} = \frac{\mu_2}{h_2} (2U_1 - 6\bar{U}_2)} \quad (7)$$

De la même façon, le frottement exercé sur la phase 2 en $y=h_1$ (interface) s'écrit :

$$\boxed{\tau_{I2} = \frac{\mu_2}{h_2} (4U_1 - 6\bar{U}_2)} \quad (8)$$

Raccordement aux interfaces :

Il faut vérifier la dernière condition à la limite qui concerne le raccordement des contraintes tangentielles à l'interface. Cette condition s'écrit :

$$\tau_{I1} + \tau_{I2} = 0$$

Ce raccordement fixe la valeur de la vitesse à l'interface :

$$\boxed{U_I = \frac{3}{2} \left(\frac{\frac{\mu_1 \bar{U}_1 + \frac{\mu_2 \bar{U}_2}{h_2}}{\frac{\mu_1}{h_1} + \frac{\mu_2}{h_2}} \right)} \quad (9)$$

Annexes du chapitre 5

Annexe N°1 : User Defined Functions

-ag : aire géométrique spécifique du garnissage

-void_g (ou theta_g), void_l (ou theta_l) : fractions volumiques de phases gaz et liquide

-eps : porosité

UDF pour le calcul du terme de résistance visqueuse dans le gaz

```
#include "udf.h"
#include "sg_mphase.h"
DEFINE_PROFILE(viscous_resistance_gaz,t,i)
{
real a ,theta _g, eps, ag, E1;
cell_t c;
begin_c_loop(c,t)
{
theta_g= C_VOF(c,t);
E1=166.2;
ag=250.0;
eps=0.98;

if (theta_g > 0.9999)
a=E_1*pow(ag,2.)/36./pow(eps,3.);
else
a = 0.00001;
F_PROFILE(c,t,i) = a;
}
end_c_loop(c,t)
}
```

UDF pour le calcul du terme de résistance inertielle dans le gaz

```
#include "udf.h"
#include "sg_mphase.h"
DEFINE_PROFILE(inertia_resistance_gaz,t,i)
{
real theta_g,a, ag, eps,E2;
cell_t c;
begin_c_loop(c,t)
{
theta_g= C_VOF(c,t);
E2=0.16;
a_s=250.0;
eps=0.98;

if (theta_g>=0.9999)
a=E_2/6.*a_s/pow(eps,3.)*theta_g;
else
a = 0.00001;
F_PROFILE(c,t,i) = a;
}
}
```

```
end_c_loop(c,t)}
```

UDF pour le calcul du terme de résistance visqueuse dans le liquide

```
#include "udf.h"
```

```
#include "sg_mphase.h"
```

```
DEFINE_PROFILE(viscous_resistance_liq,t,i)
```

```
{
```

```
real a,theta_l, eps, ag, E1;
```

```
cell_t c;
```

```
begin_c_loop(c,t)
```

```
{
```

```
theta_l = C_VOF(c,t);
```

```
E1=166.2;
```

```
ag=250.0;
```

```
eps=0.98;
```

```
if (theta_l < 0.0001)
```

```
{theta_l=0.0001;
```

```
a = E_1/36.0*pow(ag,2.0)/pow(theta_l,2.0)/pow(eps,3.0);}
```

```
else
```

```
a = E_1/36.0*pow(ag,2.0)/pow(theta_l,2.0)/pow(eps,3.0);
```

```
F_PROFILE(c,t,i) = a;
```

```
}
```

```
end_c_loop(c,t)
```

```
}
```

UDF pour le calcul du terme de résistance inertielle dans le liquide

```
#include "udf.h"
```

```
#include "sg_mphase.h"
```

```
DEFINE_PROFILE(inertial_resistance_liq,t,i)
```

```
{
```

```
real theta_l,a, ag, eps,E2;
```

```
cell_t c;
```

```
begin_c_loop(c,t)
```

```
{
```

```
theta_l= C_VOF(c,t);
```

```
E2=0.16;
```

```
ag=250.0;
```

```
eps=0.98;
```

```
if (theta_l< 0.0001)
```

```
{theta_l=0.0001;
```

```
a = 2*E_2*ag/6/pow(theta_l,1.0)/pow(eps,3.0);}
```

```
else
```

```
a = 2*E_2*ag/6/pow(theta_l,1.0)/pow(eps,3.0);
```

```
F_PROFILE(c,t,i) = a;
```

```
}
```

```
end_c_loop(c,t)
```

```
}
```

UDF pour le calcul de la force de trainée

```
/* interphase exchange coefficient UDF in a Porous Zone */
#include "udf.h"
DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY(custom_drag,cell,t,g_col,l_col)
{
Thread *thread_g, *thread_l, *mix_thread;
real x_vel_g, x_vel_l, y_vel_g, y_vel_l, abs_v, slip_x, slip_y, eps, ag, void_g, E1, E2, rho_g, rho_l, mu_g,
mu_l, k_g_l;
/* find the threads for the gas (primary) */
/* and liquid (secondary phases) */
eps = 0.98;
a_s = 250.0,
E1 = 166.2;
E2 = 0.16;
mix_thread = t;
thread_g = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, g_col);
thread_l = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, l_col);

/* find phase velocities and properties */
void_g = C_VOF(cell, thread_g);
x_vel_g = C_U(cell, thread_g);
y_vel_g = C_V(cell, thread_g);
x_vel_l = C_U(cell, thread_l);
y_vel_l = C_V(cell, thread_l);
slip_x = x_vel_g - x_vel_l;
slip_y = y_vel_g - y_vel_l;
rho_g = C_R(cell, thread_g);
mu_g = C_MU_L(cell, thread_g);
mu_l = C_MU_L(cell, thread_l);
rho_l = C_R(cell, thread_l);

/* compute slip */
abs_v = sqrt(slip_x*slip_x + slip_y*slip_y);

/* compute k_g_l in porous medium */

if (THREAD_VAR(t).fluid.porous)

{if (void_g <= 0.0001)
{k_g_l = 14.;}
else
{k_g_l = E1/36.0/eps/eps*ag*ag*mu_g/(void_g)+E2/6.0*ag/eps*rho_g*abs_v;}}
else {k_g_l = 0.000001;}
return k_g_l;
}
```

UDF pour le stockage dynamique des valeurs du gradient de fraction volumique du gaz

```
#include "udf.h"
#define CON 1

DEFINE_ADJUST(store_gradient, domain)
{
  Thread *t;
  Thread **pt;
  cell_t c;
  int phase_domain_index = 0;
  Domain *pDomain = DOMAIN_SUB_DOMAIN(domain, phase_domain_index);
  {
    Alloc_Storage_Vars(pDomain, SV_VOF_RG, SV_VOF_G, SV_NULL);
    Scalar_Reconstruction(pDomain, SV_VOF, -1, SV_VOF_RG, NULL);
    Scalar_Derivatives(pDomain, SV_VOF, -1, SV_VOF_G, SV_VOF_RG,
    Vof_Deriv_Accumulate);
  }
  mp_thread_loop_c (t, domain, pt)
  if (FLUID_THREAD_P(t))
  {
    Thread *ppt = pt[phase_domain_index];

    begin_c_loop (c, t)
    {
      C_UDMI(c, t, 0) = C_VOF_G(c, ppt)[1];
    }
    end_c_loop (c, t)
  }
  Free_Storage_Vars(pDomain, SV_VOF_RG, SV_VOF_G, SV_NULL);
}
```

UDF pour le calcul de la force de dispersion dans le gaz

```
#include "udf.h"
DEFINE_SOURCE(dispersion_gaz,cell,thread,dS,eqn)
{real source, x_vel_l,eps, a_s, rho_l, mu_l,void_l, E_1, E_2,
grad_void_l,u_d_l,S,void_g,grad_void_g,kgl,x_vel_g,mu_g,rho_g,u_d_g,u_d_r,fe;
/* find phase velocities and properties*/
Thread *tm = THREAD_SUPER_THREAD(thread);
Thread **pt = THREAD_SUB_THREADS(tm);
S=3.7E-3;
fe=1.;
void_l=C_VOF(cell, pt[1]);
void_g=C_VOF(cell, pt[0]);
x_vel_l = C_U(cell, pt[1]);
x_vel_g=C_U(cell, pt[0]);
rho_l = C_R(cell, pt[1]);
mu_l = C_MU_L(cell, pt[1]);
rho_g = C_R(cell, pt[0]);
mu_g = C_MU_L(cell, pt[0]);

grad_void_g=C_UDMI(cell,tm,0);
grad_void_l=-1.*grad_void_g;
E1=166.2;
E2=0.16;
ag=250.;
eps=0.98;

/*compute source term*/
source=0.;
u_d_g=0.;
u_d_l=0.;
kgl=0.;
if (void_g >= 1E-4)
{kgl=E_1*pow(ag,2.)/36./eps/void_g*mu_g+E_2/6.*ag*fabs(x_vel_l-x_vel_g)*rho_g;
u_d_g=-S*fabs(x_vel_g)*grad_void_g/void_g;}
else
{void_g=1E-4;
kgl=E_1*pow(ag,2.)/36./eps/void_g*mu_g+E_2/6.*ag*fabs(x_vel_l-x_vel_g)*rho_g;
u_d_g=-S*fabs(x_vel_g)*grad_void_g/void_g;}
if (void_l >= 1E-4)
{u_d_l=-S*fabs(x_vel_l)*grad_void_l/void_l;}
else
{void_l=1E-4;
u_d_l=-S*fabs(x_vel_l)*grad_void_l/void_l;}
u_d_r=u_d_g-u_d_l;
source=fe*kgl*u_d_r;
dS[eqn]=0.0;
return source;}
```


UDF pour le calcul de la force de dispersion dans le liquide

```
#include "udf.h"
DEFINE_SOURCE(dispersion_liq,cell,thread,dS,eqn)
{real source, x_vel_l,eps, ag, rho_l, mu_l,void_l, E1, E2,
grad_void_l,u_d_l,S,kls,void_g,grad_void_g,kgl,x_vel_g,mu_g,rho_g,u_d_g,u_d_r,fe;

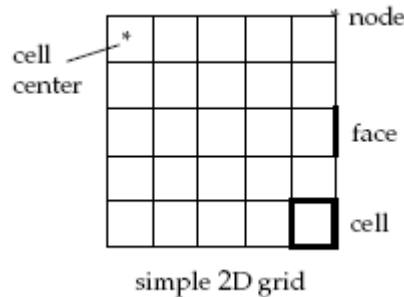
/* find phase velocities and properties*/
Thread *tm = THREAD_SUPER_THREAD(thread);
Thread **pt = THREAD_SUB_THREADS(tm);
S=3.7E-3;
fe=1.;
void_l=C_VOF(cell, pt[1]);
void_g=C_VOF(cell, pt[0]);
x_vel_l = C_U(cell, pt[1]);
x_vel_g=C_U(cell, pt[0]);
rho_l = C_R(cell, pt[1]);
mu_l = C_MU_L(cell, pt[1]);
rho_g = C_R(cell, pt[0]);
mu_g = C_MU_L(cell, pt[0]);

grad_void_g=C_UDMI(cell,tm,0);
grad_void_l=-1.*grad_void_g;
E1=166.2;
E2=0.16;
ag =250.;
eps=0.98;

source=0.0;
u_d_g=0.;
u_d_l=0.;
kls=0.;
kgl=0.;
if (void_l >= 1E-4)
{kls=(pow(fe,2.)*E_1*pow(ag,2.)/36./eps/void_l*mu_l+fe*E2*ag*rho_l/6.*fabs(x_vel_l));
u_d_l=-S*fabs(x_vel_l)*grad_void_l/void_l;}
else
{void_l=1E-4;
kls=(pow(fe,2.)*E_1*pow(ag,2.)/36./eps/void_l*mu_l+fe*E2*ag*rho_l/6.*fabs(x_vel_l));
u_d_l=-S*fabs(x_vel_l)*grad_void_l/void_l;}
if (void_g >= 1E-4)
{kgl=E1*pow(ag,2.)/36./eps/void_g*mu_g+E2/6.*ag*fabs(x_vel_l-x_vel_g)*rho_g;
u_d_g=-S*fabs(x_vel_g)*grad_void_g/void_g;}
else
{void_g=1E-4;
kgl=E_1*pow(ag,2.)/36./eps/void_g*mu_g+E2/6.*a_s*fabs(x_vel_l-x_vel_g)*rho_g;
u_d_g=-S*fabs(x_vel_g)*grad_void_g/void_g;}
u_d_r=u_d_g-u_d_l;
source=fe*kls*u_d_l-fe*kgl*u_d_r;
dS[eqn]=0.0;
return source;}
```

Annexe N°2

Implémentation des lois de fermeture : accès aux variables



Types de composantes d'un maillage 2D dans Fluent, UDF user guide de Fluent 13.0.0

Afin de coder les différentes forces volumiques présentées ci-dessus, l'accès aux différentes variables définies dans les codes source de Fluent est nécessaire : fraction volumique de phase, vitesse de phase etc... Le stockage des données relatives à ces variables obéit à la structure suivante :

- « Thread » : Une structure dans laquelle les données relatives à un ensemble de faces ou de cellules sont stockées. Un thread correspond concrètement à un pointeur vers un ensemble de données pouvant avoir différents types : entier, réel, tableau etc...
- « Domain » : Une structure regroupe un ensemble de Threads. Dans le cas d'un écoulement diphasique, on distingue trois domaines. Le premier domaine est celui regroupant les données relatives aux deux phases et est appelé « super-domain ». Les Threads relatifs à chacune des phases sont regroupés individuellement dans deux domaines appelés chacun « sub-domain ». Enfin, les « Threads » regroupant les données relatifs à l'échange entre phases forment un domaine appelé « Interaction-domain ». Dans ce formalisme, les « Threads » associés à un « super-domain » sont appelés « Super-thread » et ceux à un « sub-domain » sont des « Sub-threads ».

Les macros permettant d'accéder aux données des différentes variables utilisées dans la modélisation des lois de fermeture sont en partie fournies dans les tutoriaux du code. Nous listons ci-dessous les plus importantes pour le codage des UDFs :

Macro	description
<code>C_VOF(cell,thread)</code>	Permet de renvoyer la fraction volumique de la phase correspondant au pointeur « thread » dans une cellule « cell ».
<code>C_VOF_G(cell , thread)</code>	Permet de renvoyer un tableau contenant les deux composantes du gradient de fraction volumique de la phase correspondant au pointeur « thread » dans une cellule « cell »

C_U(cell, thread)	Permet de renvoyer la valeur de la composante axiale de la vitesse de la phase correspondant au pointeur « thread » dans une cellule « cell ».
C_V(cell, thread)	Permet de renvoyer la valeur de la composante radiale de la vitesse de la phase correspondant au pointeur « thread » dans une cellule « cell ».
C_R(cell, thread)	Permet de renvoyer la valeur de la densité de la phase correspondant au pointeur « thread » dans une cellule « cell ».
C_MU_L(cell, thread)	Permet de renvoyer la valeur de la viscosité dynamique de la phase correspondant au pointeur « thread » dans une cellule « cell ».