

# Simulation numérique directe du transfert de matière autour d'une goutte dans un liquide immiscible

A. Rachih, S. Charton, E. Climent

► **To cite this version:**

A. Rachih, S. Charton, E. Climent. Simulation numérique directe du transfert de matière autour d'une goutte dans un liquide immiscible. Journées Scientifiques de Marcoule 2018, Jun 2018, Bagnols-Sur-Cèze, France. cea-02338584

**HAL Id: cea-02338584**

**<https://hal-cea.archives-ouvertes.fr/cea-02338584>**

Submitted on 21 Feb 2020

**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.

# Simulation numérique directe du transfert de matière autour d'une goutte dans un liquide immiscible

Nom, Prénom : Rachih Azeddine  
Responsable CEA : Sophie Charton  
Directeur universitaire : Eric Climent  
Laboratoire d'accueil : DMRC/SA2I/LGCI  
Date de début de thèse : 15/12/2015

Contrat : CFR  
Organisme co-financeur :  
Université d'inscription : INP Toulouse  
Ecole doctorale : MeGeP  
Master : Énergie/Sciences Thermiques

---

## **I. Contexte**

L'étude du transfert de matière entre deux phases immiscibles, l'une étant dispersée dans l'autre, constitue une étape clé dans le développement des procédés d'extraction par solvant. En effet, elle permet de comprendre le rôle des phénomènes de transport (l'hydrodynamique) sur la cinétique apparente de transfert, cela permet d'optimiser et d'adapter les contacteurs liquide-liquide aux nouveaux systèmes d'extraction. Le caractère multiphasique et multi-échelles de ces procédés rend leur étude très complexe

Dans cette thèse on s'intéresse plus particulièrement à l'échelle d'une goutte. Cette étape élémentaire étant un préalable indispensable à la compréhension des phénomènes observés à des échelles plus grandes (essaim de gouttes, voire appareil). On s'intéresse donc aux couplages entre l'hydrodynamique et le transfert d'un soluté extractible, de la goutte vers la phase continue (et inversement) en considérant les phénomènes interne et externe. Le but est de corrélérer le nombre de Sherwood  $Sh = kd/D$ , un nombre adimensionnel décrivant le flux de transfert d'un soluté entre la goutte et la phase liquide porteuse où elle se trouve ( $k$  étant le coefficient de transfert utilisé dans les simulations de type « génie chimique »), aux paramètres de l'écoulement.

À partir du diagramme empirique de Clift [1] et des propriétés physico-chimiques du système d'extraction considéré dans l'étude, la forme de la goutte est supposée sphérique dans un premier temps. A partir de simulations numériques directes, l'effet de paramètres physiques clés (tels que le rapport de viscosité entre la goutte et la phase continue, le rapport de densité, le coefficient de distribution du soluté, etc.) et de la nature de l'écoulement sur la physique du problème est étudié et analysé.

Les simulations numériques sont réalisées avec le code de calcul JADIM développé par L'IMFT.

## **II. Modèle et validation**

### **1. Modèle numérique**

JADIM est un code de résolution des équations de Navier Stokes par la méthode des volumes finis, il présente la particularité de résoudre ces équations dans un maillage curvilinaire [2]. Après la formulation des conditions physiques à l'interface goutte / phase continue (continuité de vitesse et de la composante tangentielle du cisaillement, pour l'hydrodynamique, loi de Henry pour l'équilibre thermodynamique et continuité du flux massique, pour le transfert de matière), un modèle numérique a été implémenté dans JADIM pour prendre en compte le couplage entre les écoulements interne (à l'intérieur de la goutte) et externe (celui de la phase continue). Le maillage adopté ainsi que les conditions aux limites considérées sont représentés par la Figure 1.

## 2. Validations

La validation du modèle est une étape très importante dans l'étude numérique. Une étude bibliographique préalable [3] des phénomènes de transfert (de matière et de chaleur) nous a permis d'identifier des cas de référence, aussi bien analytiques que numériques, pour notre étude. L'évolution temporelle du nombre de Sherwood montre un accord très satisfaisant avec la bibliographie pour différentes valeur du nombre de Peclet (cf. Figure 2).

## III. Perspectives

Après l'étape de validation, plusieurs axes de recherche ont été fixés pour la suite de la thèse. Outre les cas d'une goutte dans un écoulement uniforme, étudiés jusqu'à présent [4], d'autres configurations d'une goutte dans un écoulement cisailé seront envisagées. Des corrélations seront élaborées pour décrire la variation du nombre de Sherwood en fonction de paramètres physiques clés. Certains paramètres ne seront pas considérés dans l'étude, compte tenu de leur influence négligeable sur le nombre de Sherwood (comme le rapport de densité [5]). L'effet de la forme de la goutte pourrait être envisagé par la suite en couvrant ainsi une bonne partie du diagramme de Clift (i.e. gouttes elliptiques).

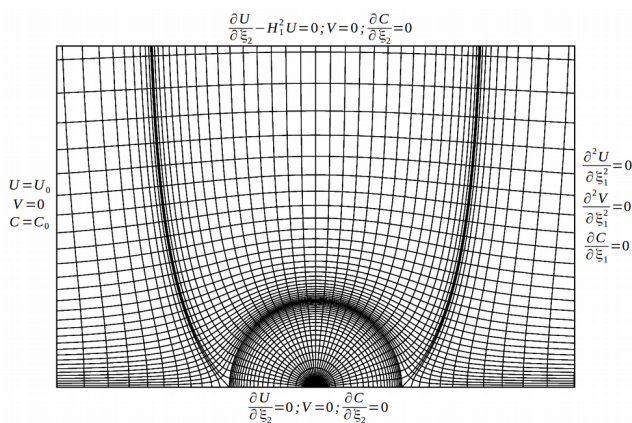


Figure 1 : Maillages et conditions aux limites

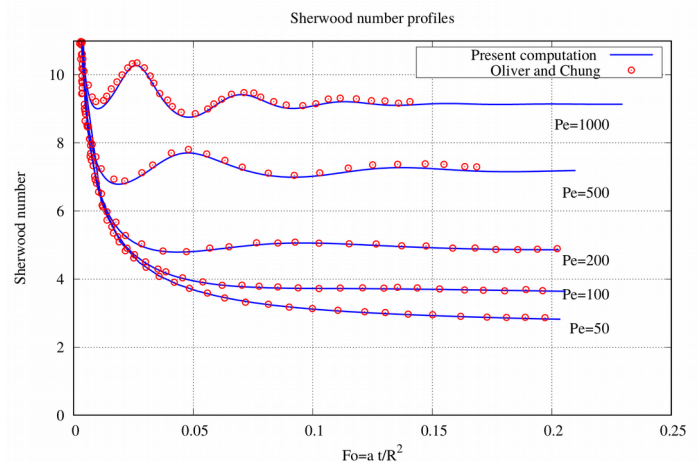


Figure 2 : Évolution temporelle du nombre de Sherwood

## Références:

- [1] Grace, J.R., T. Wairegi. and T. H. Nguyen (1967). Shapes And Velocities Of Single Drops And Bubbles Moving Freely Through Immiscible Liquids. Trans. Instn Chem. Engrs, 54.
- [2] Legendre, D. and Magnaudet, J., 1998. The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 368, pp.81-126.
- [3] Rachih, A., 2017. Simulation of mass transfer in multiphase flow: a literature review. NT DMRC/SA2I/DO 2.
- [4] Rachih, A., Charton S., Legendre D., Climent E., 2017. Hydrodynamics and Mass Transfer from a spherical droplet moving through a continuous phase. 3<sup>rd</sup> ICNMMF, Tokyo (oral presentation)
- [5] A.R. Paschedag, W.H. Piarah, M. Kraume(2005). Sensitivity Study For Mass Transfer at a Single Droplet. International Journal of Heat and Mass Transfer, 48.